

Bildererkennung und Muster aus der Cahn-Hilliard Gleichung

Jeremias Lauterbach

20.08.2007

Computational Homology in der Bilderkennung

In vielen Bereichen in Technik, Medizin und Wissenschaft werden bildgebende Verfahren eingesetzt um experimentell gewonnene Daten in eine Form zu bringen, die zu neuen Erkenntnissen führt. Während einige betrachtete Objekte zweidimensional sind und als solche mit dem Computer gut dargestellt werden können, sind meist dreidimensionale Objekte von größerem Interesse. Wir betrachten, um den Nutzen berechnender Homologie in der Bilderkennung zu erklären, eine MRT-Aufnahme des menschlichen Gehirns.

Abbildung 1 zeigt einen Schnitt einer MRT-Aufnahme des menschlichen Ge-



Abbildung 1: Eine MRT-Aufnahme des menschlichen Gehirns

Quelle: <http://www.wikipedia.de>: Magnetic Resonance Imaging scan of a head. Released under the GFDL by en:User:TheBrain on 20 May 2003

hirns, die Gesamtdaten bestehen aus $256 \times 256 \times 124$ Voxeln (Voxel = “dreidimensionale Pixel”). Da es sich um ein dreidimensionales Bild handelt will man natürlich nicht nur die einzelnen Schnitte betrachten, sondern hätte gerne eine dreidimensionale Darstellung. Mit modernern Grafikpaketen ist dies heutzutage kein Problem mehr und so erhält man eine Darstellung der Gehirnoberfläche. Will man aber gleichzeitig Informationen über die Gewebestruktur im Inneren des Gehirns erhalten, so bekommt man Probleme mit der Visualisierung. Genau an dieser Stelle wird klar welchen Vorteil die berechnende Homologie mit sich bringt; ohne dass eine Visualisierung nötig ist, können wir aus den vorhandenen Daten die Homologie des Gehirns berechnen. Der einzige nötige Zwischenschritt ist es mit Schwellenwertverfahren ein binäres Bild zu erzeugen, so dass z.B. die zu untersuchende Gewebeart schwarz, der Rest des Bildes weiß ist.

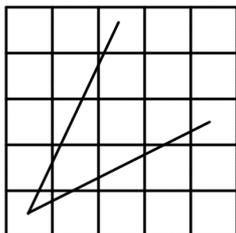
Bevor wir genauer erläutern wie die Homologie eines Objekts gemessen wird, bzw. was sie misst, betrachten wir ein weiteres Beispiel.

Wir betrachten zwei Geradenabschnitte $V \subset \mathbb{R}^2$ wie in Abbildung 2. Wir stellen uns nun vor, wir hätten ein Digitalfoto von V in einer schlechten (5×5 Pixel) Auflösung, d.h. jedes Pixel, das V schneidet, ist schwarz, die anderen weiß. Wenn wir mit Γ die Menge der schwarzen Pixel, mit Λ die Menge der weißen Pi-

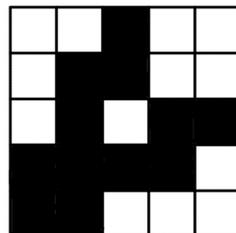
xel und mit Ω die Menge aller 25 Pixel bezeichnen, so erhalten wir drei kubische Mengen G , L und O durch

$$G = |\Gamma| = \bigcup \Gamma, \quad L = |\Lambda| = \bigcup \Lambda \quad O = |\Omega| = \bigcup \Omega$$

Während Γ und Λ disjunkte Mengen sind, haben G und L gemeinsame Ecken und Kanten. Dies lässt sich nicht vermeiden, da die Information über ein- und nulldimensionale Seiten nicht in den Pixeln enthalten sind.



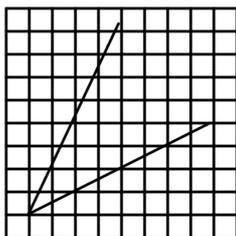
(a) Die Geradenabschnitte V



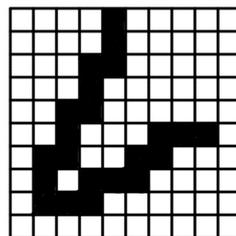
(b) Die kubische Approximation

Abbildung 2: V in einer Auflösung von 5×5 Pixeln

Wir wollen nun die Homologie von V bestimmen. Da V keine kubische Menge ist, können wir diese nicht direkt berechnen, jedoch ist V homotop zu einem Punkt, hat also die gleiche Homologie. Betrachten wir jedoch G , eine kubische Approximation von V , so sehen wir, dass G ein Loch aufweist, sich also nicht zu einem Punkt zusammenziehen lässt. Auch der Übergang zu einer höheren Auflösung ändert die Homologie von G nicht, wie Abbildung 3 zeigt.



(a) Die Geradenabschnitte V



(b) Die kubische Approximation

Abbildung 3: V in einer Auflösung von 10×10 Pixeln

Dieses beiden Beispiele zeigen uns, dass die Berechnung der Homologie dreidimensionaler Objekte in Anwendungen geometrische Fragen mit sehr wenig

Aufwand beantworten kann, andererseits darf nicht vergessen werden, dass die betrachteten Objekte stetig sind und die berechnete Homologie die einer kubischen Approximation ist, durch welche sowohl zusätzliche Erzeuger der Homologiegruppen entstehen können (wie in obigem Beispiel), als auch Erzeuger vernichtet werden können (z.B. durch zu geringe Gitterabstände der verwendeten Würfel).

Da wir die berechnende Homologie in der Bilderkennung nutzen wollen, beschäftigen wir uns, wie bereits gesagt, fast nur mit höchstens dreidimensionalen Objekten und können deshalb erwarten, dass wir bereits im Voraus Aussagen darüber machen können, welchen Homologiegruppen auftreten und wie diese aussehen. Es stellen sich folgende Fragen:

1. Wie sehen die Homologiegruppen der kubischen Homologie im dreidimensionalen aus?
2. Welche geometrischen Eigenschaften messen sie?

Die erste Frage lässt sich mit einem Blick auf die Definition der Homologiegruppen beantworten, die zweite benötigt Wissen über die Randabbildung, über die die Homologiegruppen definiert sind. Wir geben auf die zweite Frage nur die Antwort, eine genauere Erklärung findet man in [4].

1. Unsere zur Approximation verwendeten kubischen Mengen sind Würfel. Das bedeutet, wir betrachten ausschließlich k -Ketten mit $k \leq 3$. Wegen $H_k(X) = \ker \partial_k^X / \text{Bild } \partial_{k+1}^X$ gilt $H_k(X) = 0$ für $k \leq 3$, da $\ker \partial_k^X \subset C_k(X)$. Das heißt die einzigen Homologiegruppen die auftreten sind H_0 , H_1 und H_2 bzw. bei zweidimensionalen Objekten nur H_0 und H_1 . Des weiteren wissen wir, dass die hier auftretenden Homologiegruppen endlich erzeugte freie abelsche Gruppen sind, d.h. es gilt $H_k \cong \mathbb{Z}^{\beta_k}$, $\beta_k \in \mathbb{Z}$. Die Zahl β_k heißt die k -te Bettizahl.
2. Wie wir in 1) gesehen haben, sind die Homologiegruppen durch die Betti-zahlen β_0 , β_1 und β_2 charakterisiert. Geometrisch misst β_0 die Anzahl der Zusammenhangskomponenten des betrachteten kubischen Komplexes, β_1 die Anzahl der Tunnel (im zweidimensionalen werden daraus Löcher) und β_2 die Anzahl der eingeschlossenen Löcher.

Muster aus der Cahn-Hilliard Differentialgleichung

Wir betrachten nun ein Problem aus den Materialwissenschaften. Kühlt sich ein nahezu homogenes Gemische aus Eisenatomen und Chromatomen ab, so setzt ein Prozess der Phasentrennung ein, das Material bildet Regionen, die fast ausschließlich aus Eisen- bzw. Chromatomen bestehen. Diese Regionen sind dreidimensionale Strukturen, deren Aussehen von t abhängt. Es ist möglich das Gemisch auf atomaren Level zu vermessen, d.h. das Aussehen der Regionen kann experimentell bestimmt werden, wobei aber bei jedem Experiment andere Anfangsbedingungen, also Anfangsverteilungen der Chrom- und Eisenatome auftreten, von denen der Verlauf der Phasentrennung abhängt.

Das einfachste Modell zur Beschreibung der Phasentrennung stammt von Cahn und Hilliard. Es basiert auf der Idee der Einführung eines Energiefunktionals, das die freie Enthalpie und die Oberflächenenergien der einzelnen Regionen in Abhängigkeit der relativen Konzentration $u(x, y, z, t)$ beschreibt. Die Dynamik des Systems ist dann durch die Minimierung des Energiefunktionals bestimmt. Daraus erhält man die Cahn-Hilliard Gleichung

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= -\Delta(\epsilon^2 \Delta u + u - u^3), & x \in \Omega \\ n \cdot \nabla u &= n \cdot \nabla \Delta u = 0, & x \in \partial\Omega \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

wobei n der nach außen gerichtete Normalenvektor an $\partial\Omega$ ist. Für kleine $\epsilon > 0$ entstehen interessante Muster, diese Fälle werden wir näher betrachten.

Wir beschreiben zunächst das Vorgehen im dreidimensionalen, betrachten danach die entstehenden Muster aus offensichtlichen Gründen im zweidimensionalen.

(1) ist eine nichtlineare parabolische partielle Differentialgleichung vierter Ordnung, auf analytischem Weg eine Lösung zu erhalten ist also hoffnungslos. Trotzdem ist es möglich mit einem finite Elemente Verfahren eine Approximation der Lösung zu erhalten. Mit einer kleinen zufälligen Anfangsbedingung $u_0(x, y, z)$, die

$$\int \int \int_{\Omega} u_0(x, y, z) dx dy dz = 0$$

erfüllt, kann man die Gleichung numerisch lösen. Dies wurde in [4] für $\Omega = (0, 1)^3$ und $\epsilon = 0.1$ gemacht, wir geben die Ergebnisse aus [4] wieder. Für festes τ wurde $u(x, y, z, \tau)$ auf einem Gitter aus $128 \times 128 \times 128$ Punkten gerechnet. Die vorhandene Datenmenge besteht aus Zahlen $\{u(i, j, k, \tau) \mid 1 \leq i, j, k \leq 128\}$, die $u(x, y, z, \tau)$ approximieren.

Da u in unserem Modell die relative Konzentration beschreibt, stehen positive Werte von u für Bereiche, in denen die Konzentration des einen Elements überwiegt, negative Werte für Bereiche in denen die Konzentration des anderen Elements höher ist. Da wir uns für Regionen interessieren in denen die Phasentrennung fast komplett stattgefunden hat, betrachten wir für ein kleines $\delta > 0$ $R_1(t) = \{x \in \Omega \mid u(x, t) > 1 - \delta\}$ bzw. $R_2(t) = \{x \in \Omega \mid u(x, t) < -1 + \delta\}$. Wie oben bereits erwähnt können die Bereiche in denen fast ausschließlich Eisenatome bzw. Chromatome auftreten experimentell bestimmt werden. Wir bezeichnen

diese Bereiche mit $F(t)$ bzw. $C(t)$. Der nächste Schritt ist es nun $F(t)$ mit $R_1(t)$ und $C(t)$ mit $R_2(t)$ zu vergleichen.

Der Nutzen der Homologie ist sofort ersichtlich; die Gleichung (1) wird beginnend mit einer zufälligen Anfangsbedingung $u(x, 0)$ numerisch bis zu einem Zeitpunkt t_0 gerechnet. Da die entstehenden Muster von $u(x, 0)$ abhängen, gibt es keinen Grund, dass $F(t_0)$ und $R_1(t_0)$ bzw. $C(t_0)$ und $R_2(t_0)$ in einem metrischen Sinn ähnlich sind. Jedoch stellt sich die Frage, ob eine Ähnlichkeit der Topologie der Bereiche vorhanden ist, denn genau das erwarten wir von dem Modell. Wir wollen $H_k(F(t))$ mit $H_k(R_1(t))$ und $H_k(C(t))$ mit $H_k(R_2(t))$, $k = 0, 1, 2$, miteinander vergleichen.

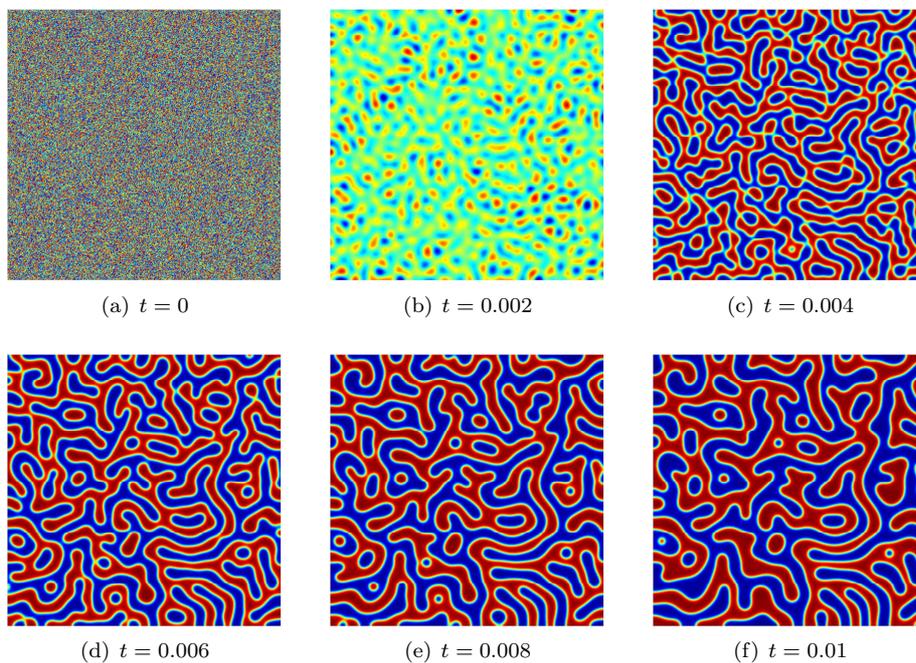


Abbildung 4: Cahn-Hilliard: Niveaulinien von $u(x_1, x_2, t)$

Wir gehen nun über zu dem zweidimensionalen Fall und betrachten $\Omega = (0, 1)^2$. Die Bilder aus Abbildung 4 wurden mit Matlab (siehe [2]) für $\epsilon = 0.005$ auf einem 512×512 Gitter und einer Zufallsanfangsbedingung $u(x_1, x_2, 0)$, die

$$\int_0^1 \int_0^1 u(x_1, x_2, 0) dx_1 dx_2 = 0$$

erfüllt, berechnet.

Wir definieren $U^+(t) = \{(x_1, x_2) \in \Omega \mid u(x_1, x_2) > 0\}$ und

$U^-(t) = \{(x_1, x_2) \in \Omega \mid u(x_1, x_2) < 0\}$. Wir wollen die Homologie von $U^+(t)$ und $U^-(t)$ berechnen, dazu benötigen wir kubische Mengen. Da wir sowieso nur die Daten $\{u(i, j, t) \mid 1 \leq i, j \leq 512\}$ zur Verfügung haben ist die Zuordnung klar, $u(i, j, t)$ gehört zu $K_2(U^+(t))$ wenn $u(i, j, t) > 0$ und zu $K_2(U^-(t))$ wenn $u(i, j, t) < 0$. Abbildung 5 zeigt die kubischen Mengen.

Wir haben mit Hilfe von CHomP (siehe [1]) die Homologiegruppen $H_k(U^\pm(t))$, $k = 0, 1$, für einige Zeitpunkte t berechnet. Im ersten Teil haben wir bereits darauf hingewiesen, dass diese durch ihre Bettizahlen bestimmt sind, die Entwicklung der Bettizahlen ist in Abbildung 6 dargestellt.

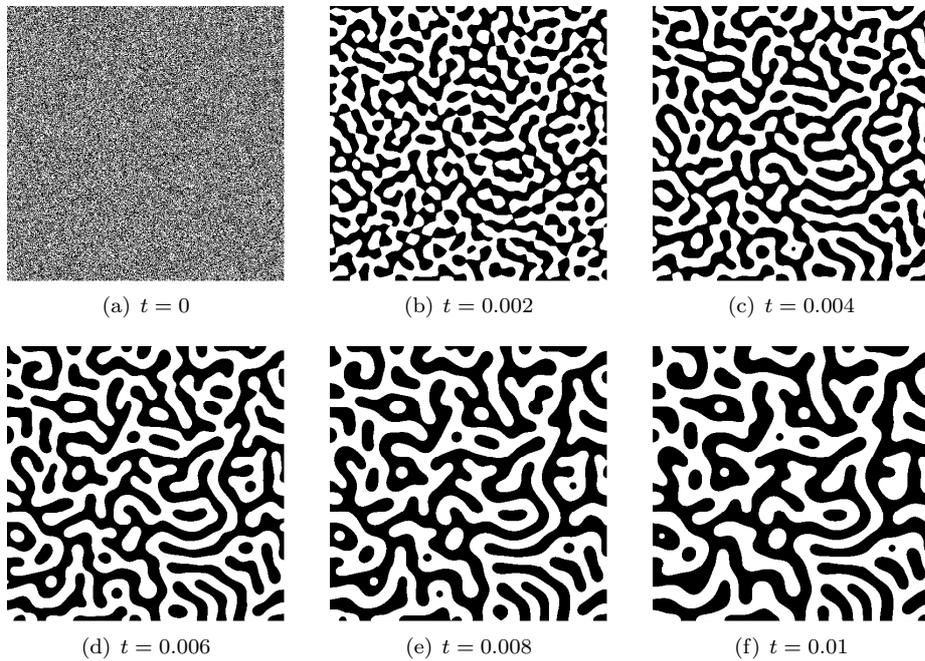
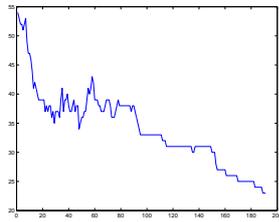
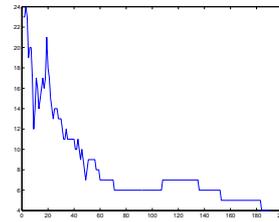


Abbildung 5: Cahn-Hilliard: Die Mengen $K_2(U^+(t))$ und $K_2(U^-(t))$

Zunächst versuchen wir die folgende Beobachtung zu erklären: Im gesamten Verlauf der Graphen treten kleine Schwankungen der Bettizahlen auf. Um zu klären, ob diese tatsächlich auf das topologische Verhalten der Phasentrennung zurückzuführen ist oder aber auf Grund numerischer Fehler bzw. Fehler in der kubischen Approximation auftreten untersuchen wir nicht mehr nur eine zufällige Anfangsbedingung, sondern mitteln die Bettizahlen über 25 verschiedene Simulationen mit jeweilig anderen Anfangsbedingungen. Die nächsten Bilder zeigen $\frac{1}{25} \sum_{m=1}^{25} \dim H_k(U_m^\pm(t))$, wobei $U_m^\pm(t)$ die beiden Regionen der m -ten Simulation sind.

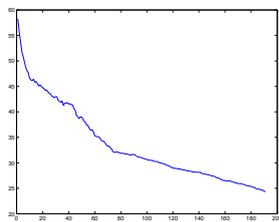


(a) Die Bettizahlen β_0

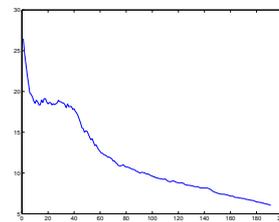


(b) Die Bettizahlen β_1

Abbildung 6: Die Bettizahlen der Muster zur Zeit $0.0005 < t \leq 0.01$



(a) Die Bettizahlen β_0



(b) Die Bettizahlen β_1

Abbildung 7: Die gemittelten Bettizahlen der Muster zur Zeit $0.0005 < t \leq 0.01$

Wir machen nun folgende Beobachtungen und Bemerkungen:

1. Der Wert von $\dim H_k(U^\pm(t))$ ist für kleine Zeiten t sehr groß, da die Anfangsbedingung zufällig ist und zahlreiche Vorzeichenwechsel auftreten, und deswegen nicht in den Bildern enthalten.
2. Die Anzahl der Zusammenhangskomponenten und Löcher nimmt innerhalb der ersten Zeitschritte rapide ab.
3. Nachdem alle kleinen topologischen Strukturen verschwunden sind, beginnt eine Phase, in der die Komplexität der Topologie annähernd gleich bleibt.
4. Nach 50 Zeitschritten nimmt die topologische Komplexität sehr schnell ab.
5. Die Geschwindigkeit der Abnahme der topologische Komplexität wird danach sehr schnell kleiner.

Wir werden an dieser Stelle die Untersuchung des Modells beenden, denn um die gemachten Beobachtungen weiter zu diskutieren müssten wir entweder mehr Wissen über Metallurgie oder aber über Geometrie partieller Differentialgleichungen haben. Trotzdem ist klar geworden, dass die Quantisierung der topologischen Komplexität von Bildern von uns mit Hilfe berechnender Homologie

mit sehr wenig Aufwand betrieben werden konnte.

Zum Ende dieser Arbeit wenden wir uns noch einer weiteren Herangehensweise zu, diese stammt aus [3]. Bisher haben wir uns ausschließlich mit den Bettzahlen β_0 und β_1 beschäftigt, jetzt versuchen wir zusätzliche Information durch den Vergleich von $U^+(t)$ mit $U^-(t)$ zu erhalten. Dazu betrachten wir noch einmal Abbildung 5 (f) und bemerken, dass von den 36 Zusammenhangskomponenten 23 durch Randeffekte zustande kommen und nur 13 Zusammenhangskomponenten komplett im Inneren liegen. Die Bettinummer β_0 von $U^+(t)$ unterscheidet nicht zwischen diesen beiden Typen von Zusammenhangskomponenten. Allerdings sind die inneren Komponenten diejenigen, die Löcher in $U^-(t)$ verursachen. Bezeichnen wir mit $\beta_{int,0}(U^+(t))$ die Anzahl der inneren und mit $\beta_{rand,0}(U^+(t))$ die Anzahl der Randkomponenten von $U^+(t)$, so erhalten wir die Beziehungen

$$\begin{aligned}\beta_{int,0}(U^+(t)) &= \beta_1(U^-(t)) \quad \text{und} \\ \beta_{rand,0}(U^+(t)) &= \beta_0(U^+(t)) - \beta_1(U^-(t)).\end{aligned}$$

Analog zu dem Vorgehen von oben stellt sich die Frage stellen, wie sich diese beiden Zahlen sich in Abhängigkeit von t verhalten. Es zeigt sich, dass während die Anzahl der inneren Komponenten ein ähnliches Verhalten wie β_0 zeigt, die Anzahl der Randkomponenten im beobachteten Zeitraum nahezu konstant bleibt.

Dies wirft nun die Frage auf, welchen Einfluss die Größe des betrachteten Systems auf das Verhältnis der inneren und Randkomponenten hat. Um das zu klären betrachten wir verschiedene Systemgrößen $\Omega = (0, l)^2$. Räumliche und zeitliche Reskalierung $x \mapsto x/l$ und $t \mapsto t/l^2$ führen dann die neue Gleichung zurück auf eine Gleichung auf $\Omega = (0, 1)^2$

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= -\Delta\left(\frac{\epsilon^2}{l^2}\Delta u + u - u^3\right), \quad x \in \Omega \\ n \cdot \nabla u &= n \cdot \nabla \Delta u = 0, \quad x \in \partial\Omega\end{aligned}$$

mit neuem Parameter $\epsilon_l = \epsilon/l$. Das bedeutet wir müssen um die Abhängigkeit von der Systemgröße zu untersuchen verschiedene Parameterwerte ϵ_l untersuchen.

Es zeigt sich, dass $\beta_{int,0}$ proportional zu l^2/ϵ^2 ist, d.h. proportional zur Fläche des betrachteten Systems, während $\beta_{rand,0}$ proportional zu l/ϵ ist, d.h. zur Seitenlänge.

Wieder wollen wir hier nicht tiefer in das Modell einsteigen. Trotzdem wollen wir an dieser Stelle die Vorteile der berechnenden Homologie gegenüber anderen Verfahren hervorheben. Im Gegensatz zu der Kenntniss anderer (u.U. leichter berechenbarer) topologischer Invarianten, wie z.B. der Euler-Charakteristik, ermöglicht die Kenntniss der Bettzahlen für $U^\pm(t)$ zusätzlich zu der Untersuchung der Zusammenhangskomponenten und der Löcher sogar die Untersuchung von auftretenden Randeffekten in endlichen Systemen.

Wir beenden diesen Abschnitt mit dem Hinweis darauf, dass wir hier nur das einfachste Modell für das Anfangsverhalten der Phasentrennung von Metallgemischen betrachtet haben, für das nächst bessere sog. stochastische Cahn-Hilliard

Modell wurden die gleichen Untersuchungen durchgeführt, näheres findet man in [3].

Literatur

- [1] CHomP. Computational Homology Project. <http://chomp.rutgers.edu>.
- [2] David Eyre. Code for solving the Cahn-Hilliard PDE. <http://www.math.utah.edu/~eyre/computing/matlab-intro/ch.txt>.
- [3] Marcio Gameiro, Konstantin Mischaikow, Thomas Wanner. Evolution of pattern complexity in the Cahn-Hilliard theory of phase separation. 2004.
- [4] Tomasz Kaczynski, Konstantin Mischaikow, Marian Mrozek. *Computational Homology*. Springer, first edition, 2003.