

Vortrag zur Diplomarbeit

***Algorithmen zur lageinvarianten
Merkmalsgewinnung für Draht-
gittermodelle***

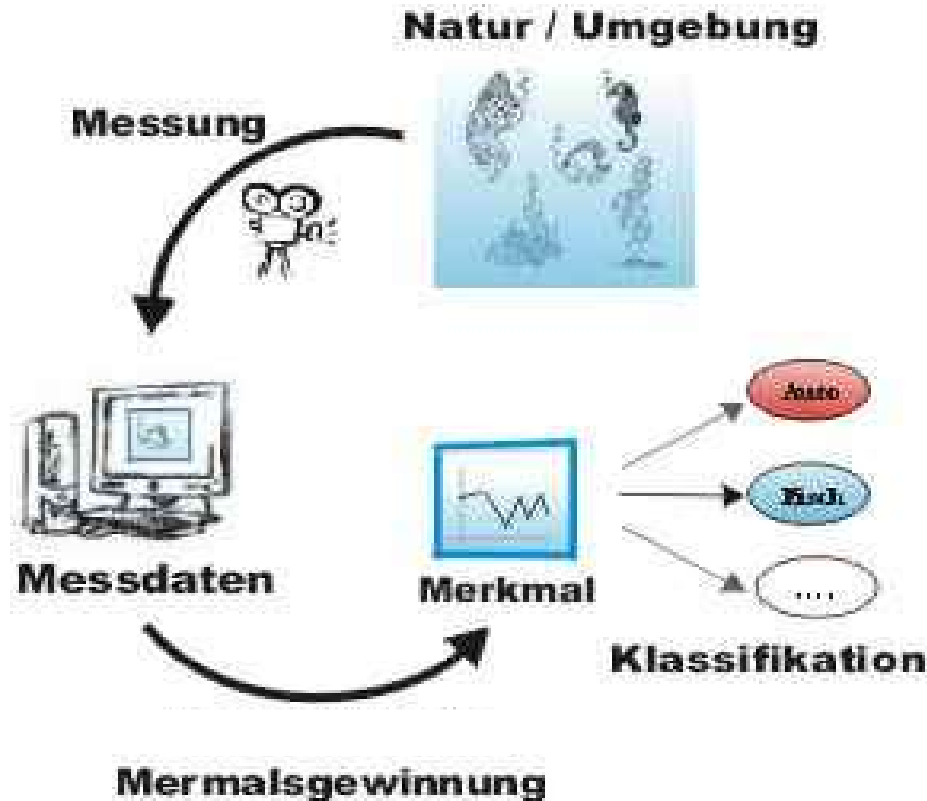
Lehrstuhl für Mustererkennung und Bildverarbeitung
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Marco Reisert

Übersicht

- ◆ Einführung
 - ◆ invariante Merkmale und Mustererkennung
 - ◆ Aufgabenstellung
 - ◆ bestehende Ansätze
- ◆ Die Methode
 - ◆ Die Merkmalsgewinnung
 - ◆ Vollständigkeitsbetrachtungen
 - ◆ Beispiele für einfache Kodierungen
- ◆ Experimente
 - ◆ Polygonzüge in der Ebene
 - ◆ beliebige 3D-Drahtgittermodelle
- ◆ Ausblick

Kontext



Muster

- 2D Bilder -Pixel
- 3D Bilder – Voxel

- Konturen im 2D
- triangulierte Oberflächen
- Punktwolken
- Drahtgittermodelle

Der Mustererkennungsprozess

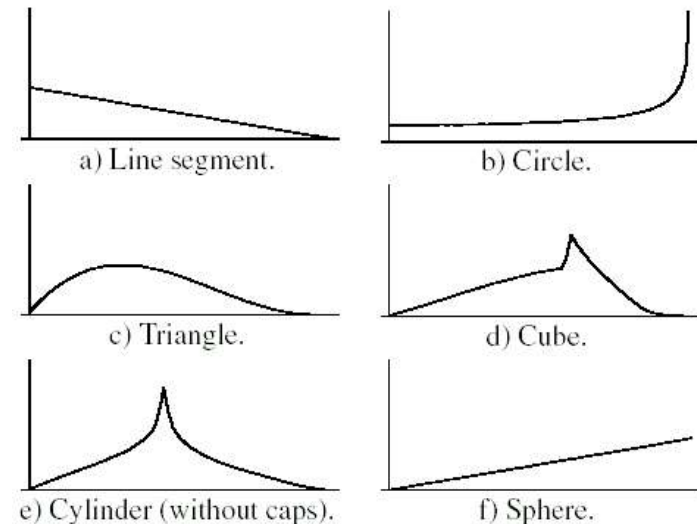
Aufgaben

- ◆ Entwicklung von lageinvarianten Merkmalen für Drahtgittermodelle
- ◆ theoretische Betrachtungen in Bezug auf Vollständigkeit
- ◆ praktische Untersuchungen auf Störanfälligkeit, Vergleich mit *ShapeDistributions*
- ◆ Entwicklung von geeigneten Analysewerkzeugen und Schnittstellen für die praktischen Untersuchungen.

Bestehende Ansätze

- ◆ Fourier Deskriptoren
- ◆ Kugelfunktionen
- ◆ ShapeDistributions
- ◆ CT-Transformation
- ◆ Gruppenmittelung
- ◆ Momente
- ◆

„Die Verteilungsfunktion des Abstandes zweier zufällig gewählter Punkte auf der Oberfläche des Objekts“

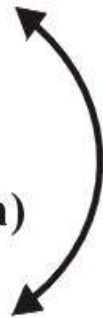


Die Idee

Drahtgittermodell m

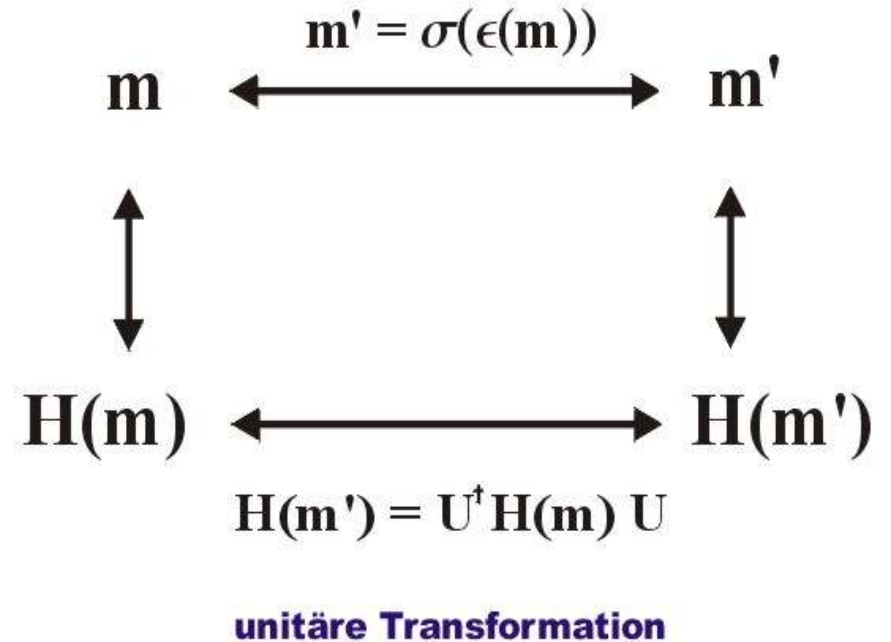


Matrix $H(m)$



**umkehrbare
Abbildung
"Kodierung"**

**Permutation der Knoten
Euklidische Bewegung**



Die Merkmalsgewinnung

Für ein invariantes Merkmal muss gelten:

$$I(\mathbf{H}') = I(\mathbf{U}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{U}) \quad \text{wobei } \mathbf{U}, \text{ die durch Permutation und eukl. Bewegung induzierte, unitäre Trans.}$$

zur Konstruktion bieten sich an:

Skalarprodukte

$$I_k(\mathbf{H}) = \mathbf{v}_0^\dagger \mathbf{H}^k \mathbf{v}_0 \quad \text{mit } \mathbf{U} \mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_0$$

Histogramme

$$I_{k\lambda}(\mathbf{H}) = \mathbf{v}_0^\dagger \delta(\mathbf{H}^k \mathbf{v}_0 - \lambda)$$

Spektrum

$$I_\lambda(\mathbf{H}) = \det(\mathbf{H} - \lambda)$$

Die Merkmalsgewinnung 2

Berechne die Vektoren:

$$\mathbf{v}_k = \mathbf{H}^k \mathbf{v}_0 \quad \text{wobei } \mathbf{U}\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_0 \text{ gelten muss.}$$

Berechnung kann iterativ erfolgen: $\mathbf{v}_k := \mathbf{H}\mathbf{v}_{k-1}$

Bestimmung der Merkmalsmatrix:

$$c_{ij} = \mathbf{v}_i^\dagger \mathbf{v}_j \quad \text{oder} \quad \mathbf{C} = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{B}$$

Die Invarianz ergibt sich sofort aus $\mathbf{v}'_k = \mathbf{U}\mathbf{v}_k$

$$\mathbf{v}'_i{}^\dagger \mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_i^\dagger \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} \mathbf{v}_j = \mathbf{v}_i^\dagger \mathbf{v}_j$$

Die Merkmalsgewinnung 3

Für (anti-)hermitesche und unitäre Kodierungen reduziert sich die Merkmalsmatrix zu einem $(2n-1)$ -Vektor:

z.B. hermitesch:
$$c_{ij} = \mathbf{v}_0^\dagger \mathbf{H}^{i+j} \mathbf{v}_0 = I_{i+j}$$

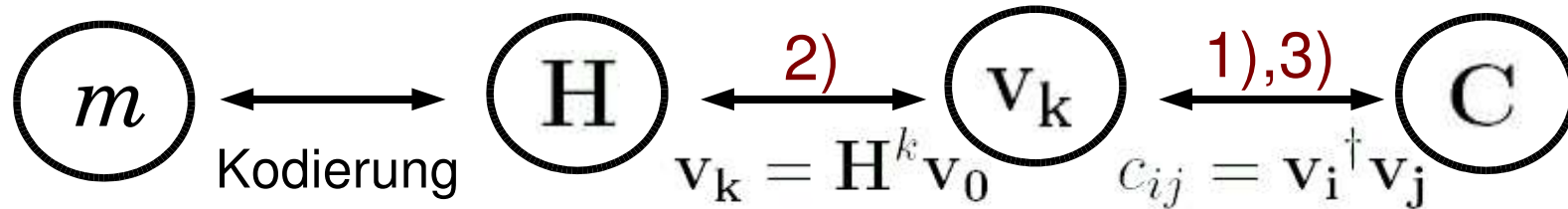
Für eine numerisch stabile Berechnung der Merkmale bietet sich eine Normierung an:

$$\mathbf{v}_k' := \frac{1}{w_k} \mathbf{H} \mathbf{v}_{k-1}'$$

$$w_k := \|\mathbf{H} \mathbf{v}_{k-1}'\|$$

Die \mathbf{v}_k', w_k beinhalten die gleiche Information wie die \mathbf{v}_k .

Vollständigkeit



- 1) Die Vektoren \mathbf{v}_k müssen linear unabhängig sein, damit sich die Matrix \mathbf{C} eindeutig faktorisieren läßt.
- 2) Aus den Vektoren \mathbf{v}_k muss \mathbf{H} zurückgewinnbar sein.
- 3) Die Kodierung muss bzgl. der durch die Äquivalenztransformationen induzierten Transformationen eindeutig sein, das heißt, falls ein unitäre Transformation \mathbf{U} existiert mit

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{H}(m) \mathbf{U} = \mathbf{H}(m')$$

dann müssen die Gitter m' und m äquivalent sein.

Einfache Beispiele

permutationsinvariante Repräsentation eines Vektors:

$$\mathbf{H} = \mathbf{Diag}(\mathbf{x}) \quad I_k = \mathbf{1}^\dagger \mathbf{H}^k \mathbf{1} = \sum_{i=0}^{n-1} x_i^k \quad k \in \{1, \dots, 2n-1\}$$

nimmt man an, die x_i seien alle paarweise verschieden, dann ergeben sich vollständige Merkmale.

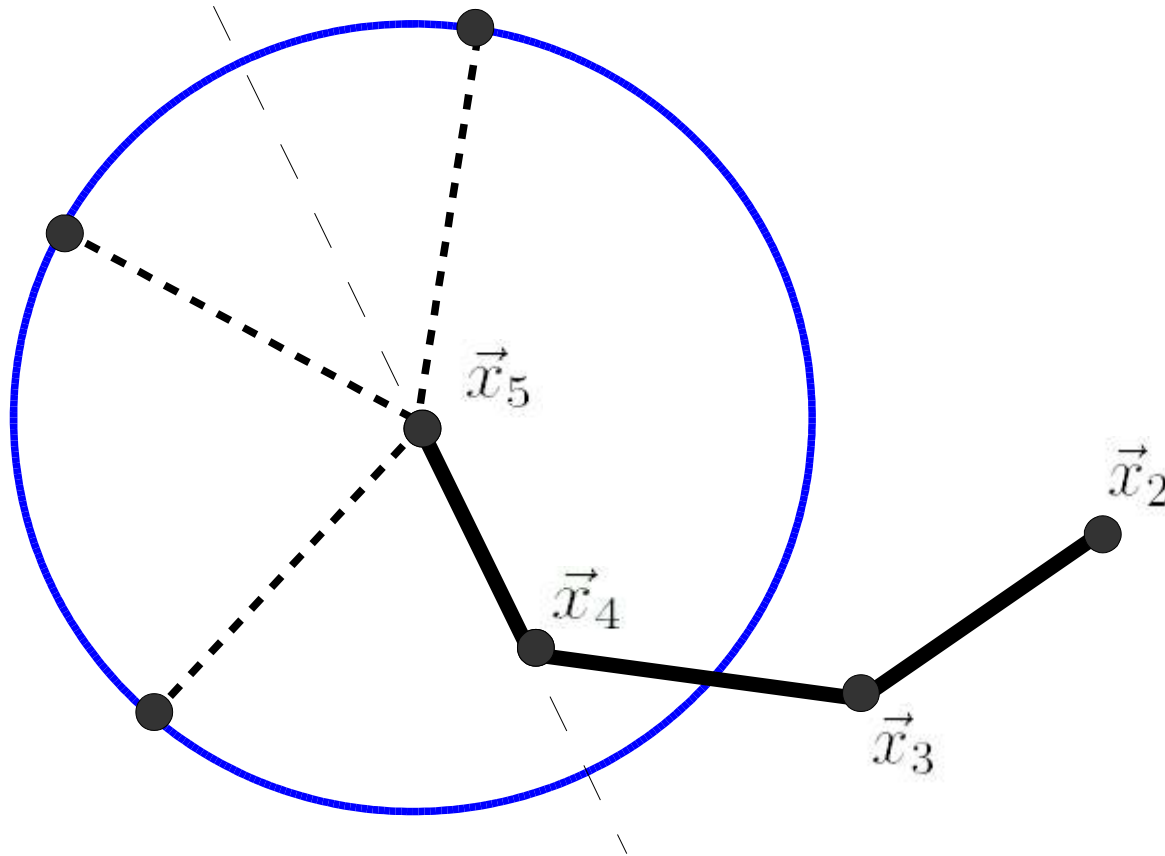
für beliebige Drahtgitter:

$$h_{ij} = \begin{cases} f(\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|) & \text{falls } (i, j) \in E \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Kettenkodierung für Polygonzüge:

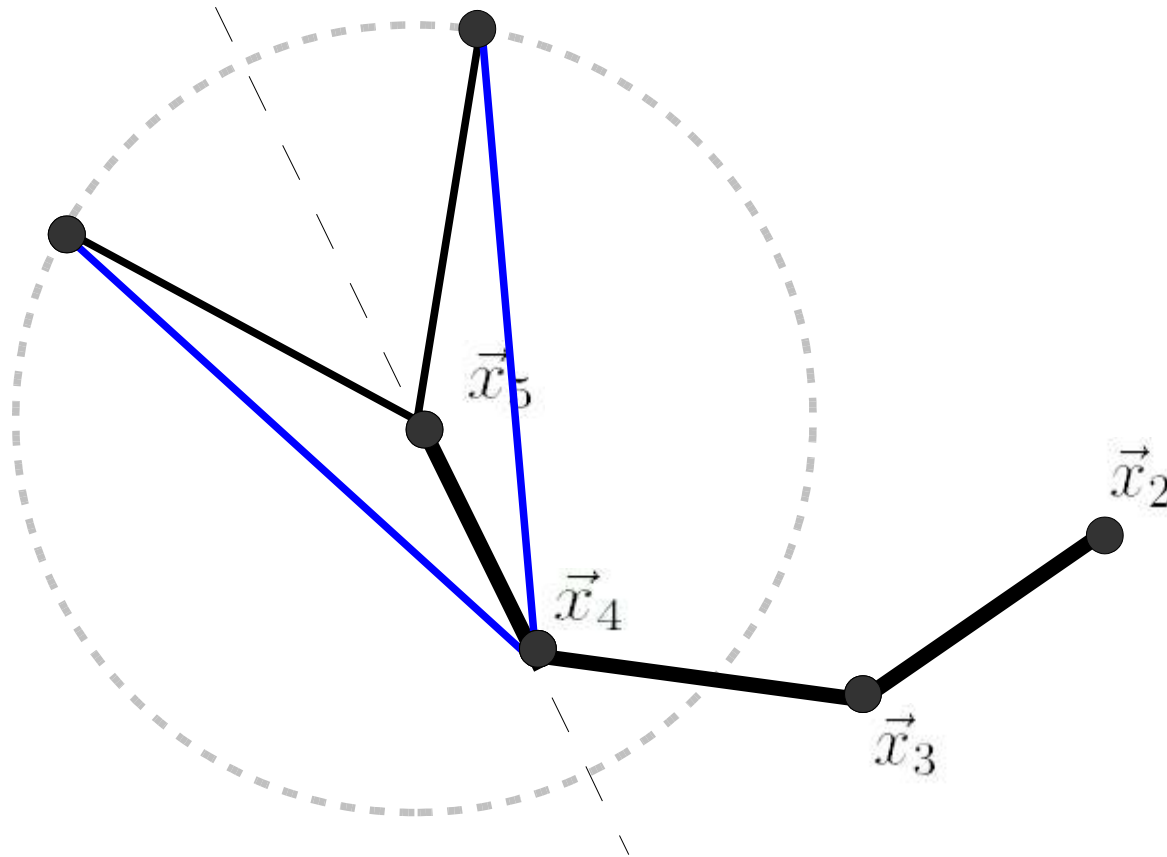
$$\mathbf{H} = \mathbf{T} \mathbf{Diag}(\mathbf{z}) - \mathbf{Diag}(\mathbf{z}^*) \mathbf{T} \quad z_i = d_{i(i+1)} e^{i\Delta\phi_i}$$

Polygonzüge in der Ebene



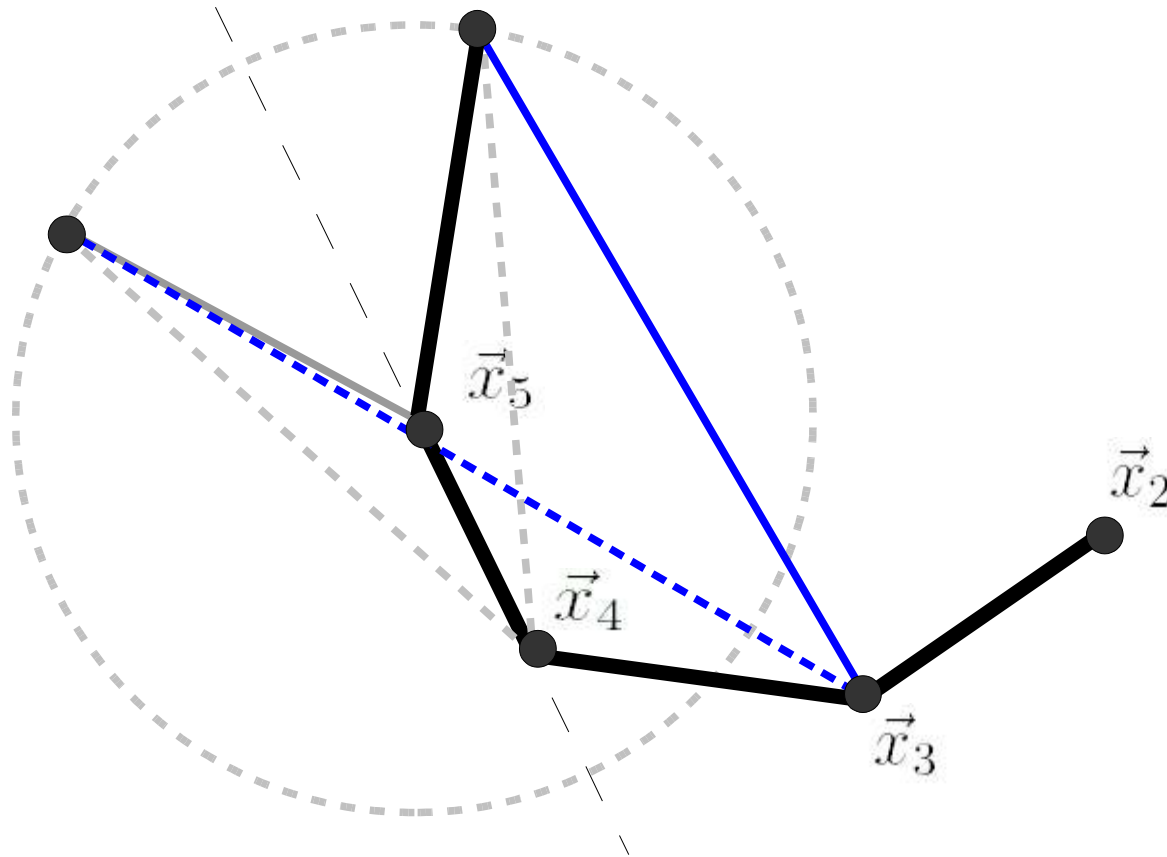
Mit nur einem Abstand kann der nächste Punkt auf einem Kreis liegen.

Polygonzüge in der Ebene



Mit zwei Abständen gibt es nur noch zwei Möglichkeiten.

Polygonzüge in der Ebene



Ein Polygonzug ist durch die Angabe von drei Abständen pro Knoten vollständig bestimmt.

Polygonzüge: Kodierung

Sei $D_i = \text{Diag}(\|\vec{x}_k - \vec{x}_{k+i}\|)$ und $W = \text{Diag}(s_k)$
und T eine zykl. Translation

Die 3-Distanz Kodierung:

$$H = iD_1 + (D_2T - T^{-1}D_2) + (D_3T^2 - T^{-2}D_3)$$

anti-
hermitesch

Die 2-Distanz Kodierung:

$$H = iWD_1 + (D_2T + T^{-1}D_2)$$

unstetig und
unsymmetrisch

Der Startvektor:

$$\mathbf{v}_0 = (1, 1, \dots, 1)^T$$

Polygonzüge: Kodierung

antisymmetrische
3-Distanz

$$\begin{pmatrix} \mathbf{id}_{12} & d_{13} & d_{14} & 0 & -d_{52} & -d_{62} \\ -d_{13} & \mathbf{id}_{23} & d_{24} & d_{25} & 0 & -d_{63} \\ -d_{14} & -d_{24} & \mathbf{id}_{34} & d_{35} & d_{36} & 0 \\ 0 & -d_{25} & -d_{35} & \mathbf{id}_{45} & d_{46} & d_{41} \\ d_{52} & 0 & -d_{36} & -d_{46} & \mathbf{id}_{56} & d_{51} \\ d_{62} & d_{63} & 0 & -d_{41} & -d_{51} & \mathbf{id}_{61} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{is}_1 d_{12} & d_{13} & 0 & 0 & 0 & d_{62} \\ d_{13} & \mathbf{is}_2 d_{23} & d_{24} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_{24} & \mathbf{is}_2 d_{34} & d_{35} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_{35} & \mathbf{is}_3 d_{45} & d_{46} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{46} & \mathbf{is}_4 d_{56} & d_{51} \\ d_{62} & 0 & 0 & 0 & d_{51} & \mathbf{is}_5 d_{61} \end{pmatrix}$$

asymmetrische
2-Distanz

Polygonzüge

Vollständigkeitsbetrachtungen zu 2-Distanz Kodierung:

Die Matrix \mathbf{H} ist aus den Vektoren $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ rekonstruierbar,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\mathbf{v}_0 &= \mathbf{v}_1 && \text{eindeutig} \\ \mathbf{H}\mathbf{v}_1 &= \mathbf{v}_2 && \text{lösbar} \end{aligned}$$

und zudem folgt aus der Asymmetrie der Kodierung:

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{H}(m) \mathbf{U} = \mathbf{H}(m') \Rightarrow m \simeq m'$$

Praktische Experimente mit 3-Distanz Kodierung:

2 Typen von Merkmalen wurden betrachtet:

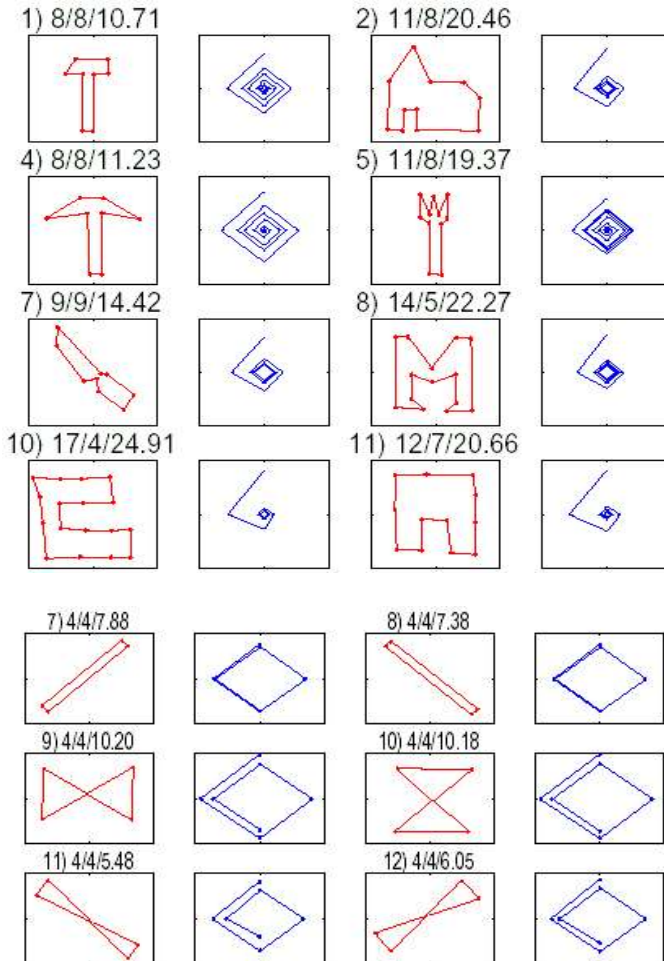
$$I_k = \frac{\mathbf{v}_0^\dagger \mathbf{H}^k \mathbf{v}_0}{\|\mathbf{H}^k \mathbf{v}_0\|}$$

reine 3-Distanz

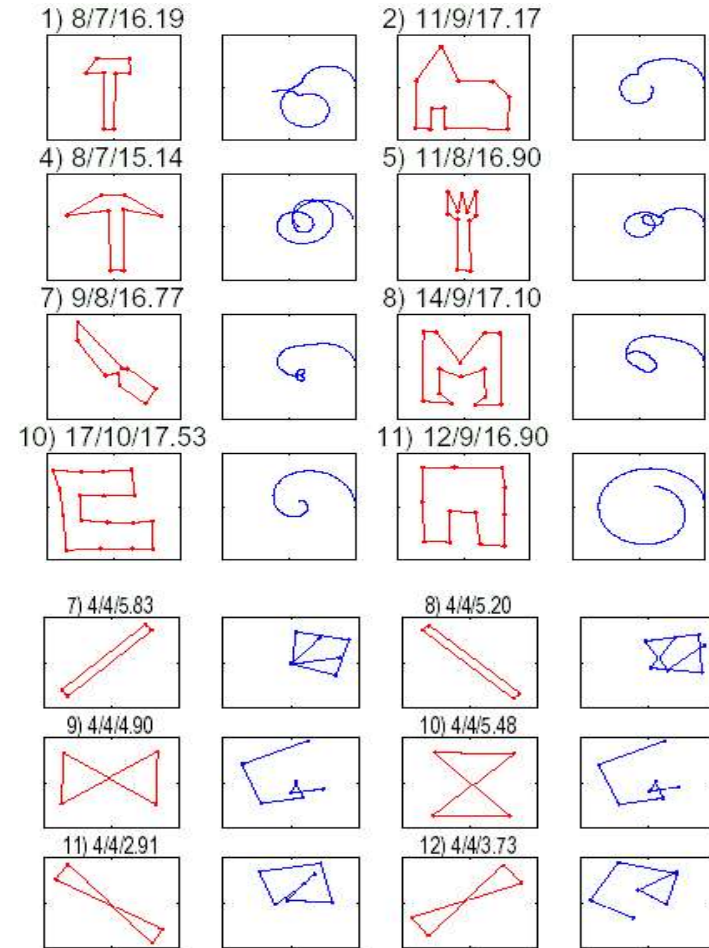
$$I_k = \mathbf{v}_0^\dagger e^{\mathbf{H}\sigma_n k} \mathbf{v}_0$$

unitäre 3-Distanz

Polygonzüge: Experimente

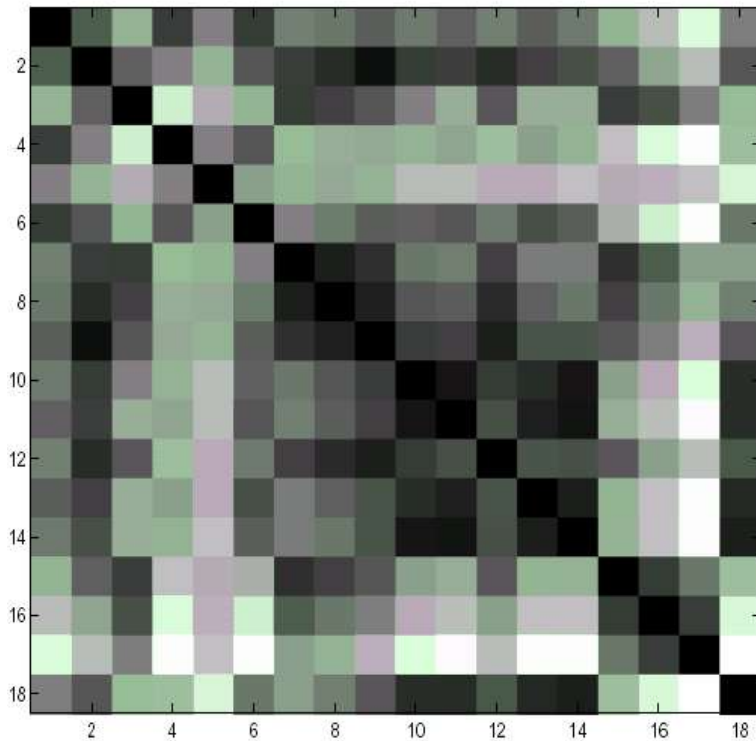


reine 3-Distanz

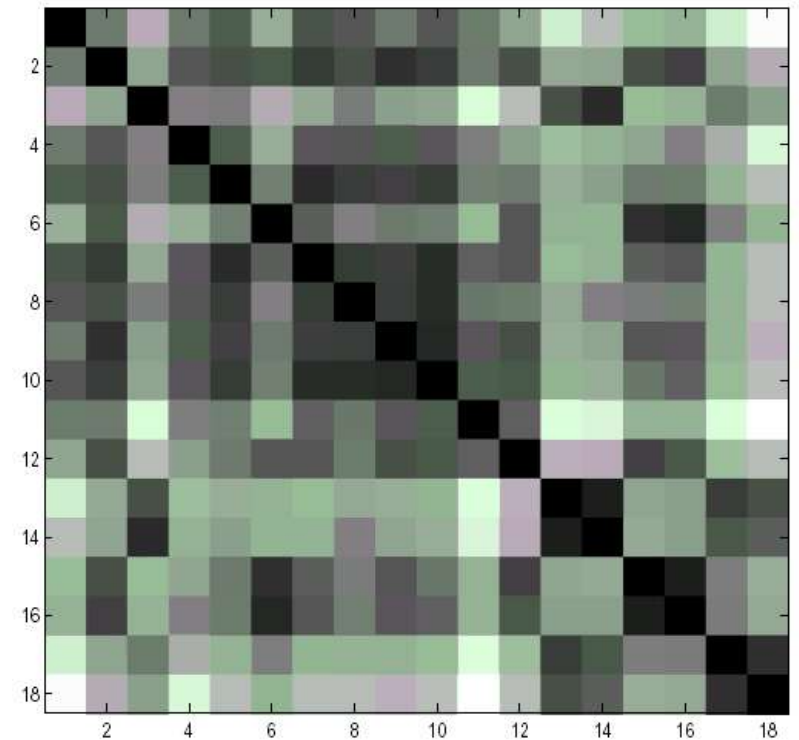


unitäre 3-Distanz

Polygonzüge: Experimente



reine 3-Distanz



unitäre 3-Distanz

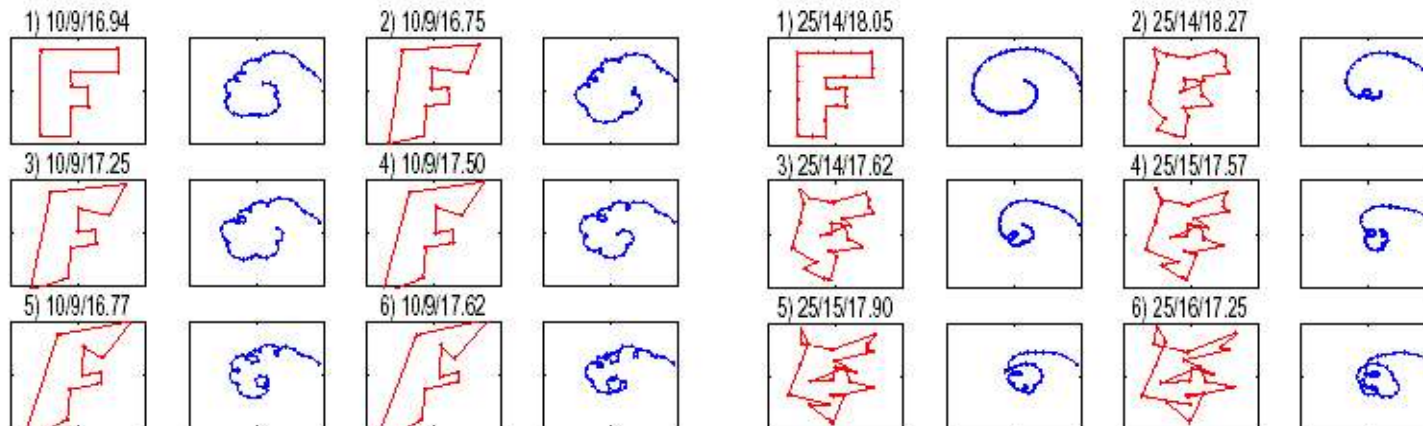
Polygonzüge: NN-LOO Fehler

reine 3Distanz

ϵ	4er	poly1	poly2
0.01	0%	2%	3%
0.04	1%	14%	10%
0.08	11%	40%	38%
0.12	30%	50%	60%

unitäre 3Distanz

ϵ	4er	poly1	poly2
0.01	1%	2%	2%
0.04	1%	30%	10%
0.08	6%	65%	40%
0.12	25%	79%	70%



3D-Drahtgittermodelle

Entwicklung einer Kodierung
motiviert aus der Physik

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^3 \alpha_i P_i - m\beta$$

Entwicklung von Analysewerkzeugen
mit Schnittstellen zu (.3ds), (.poly), (.pdb) - Formaten.

Praktische Experimente

mit Molekülen und triangulierten Oberflächen
und Vergleich mit *ShapeDistributions*

3D-Drahtgitter: Kodierung

Die 4x4-Geometriematrizen:

$$\alpha_{ij} := \begin{pmatrix} [\vec{x}_i - \vec{x}_j]_{\times} & 0 \\ 0^T & 0 \end{pmatrix} \quad \beta_{ij} := \begin{pmatrix} 0 & (\vec{x}_i - \vec{x}_j) \\ (\vec{x}_j - \vec{x}_i)^T & 0 \end{pmatrix}$$

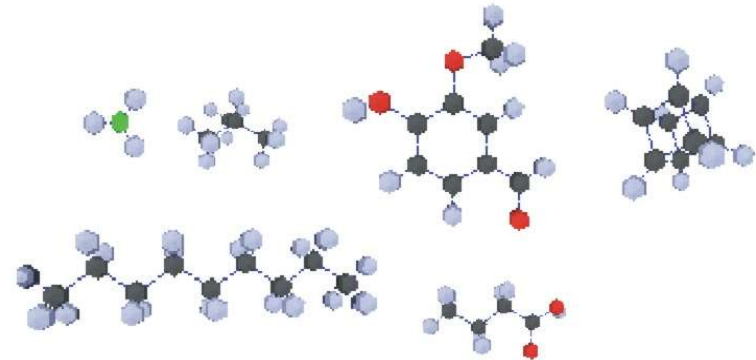
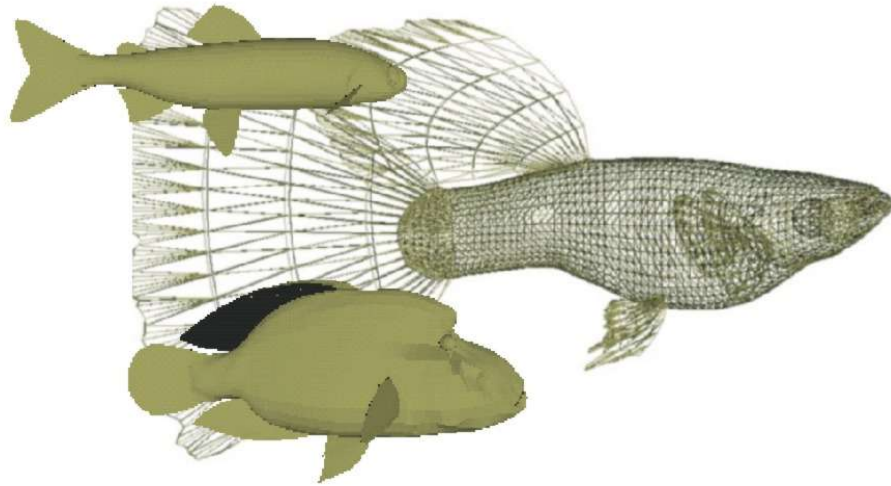
Die (4n)x(4n)-Kodierung:

$$h_{ij} := \begin{cases} -\sum_{(i,j) \in E} (\alpha_{ij} - m\beta_{ij}) + V & \text{falls } i = j \\ \alpha_{ij} & \text{falls } (i, j) \in E \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Der Startvektor:

$$(\vec{\mathbf{v}}_0)_i = (0, 0, 0, 1)^T$$

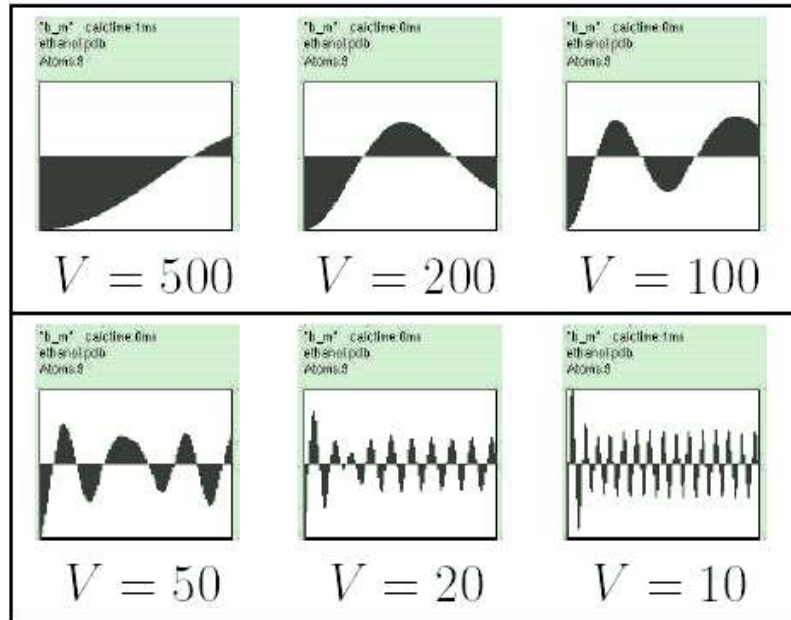
3D-Drahtgitter: Experimente



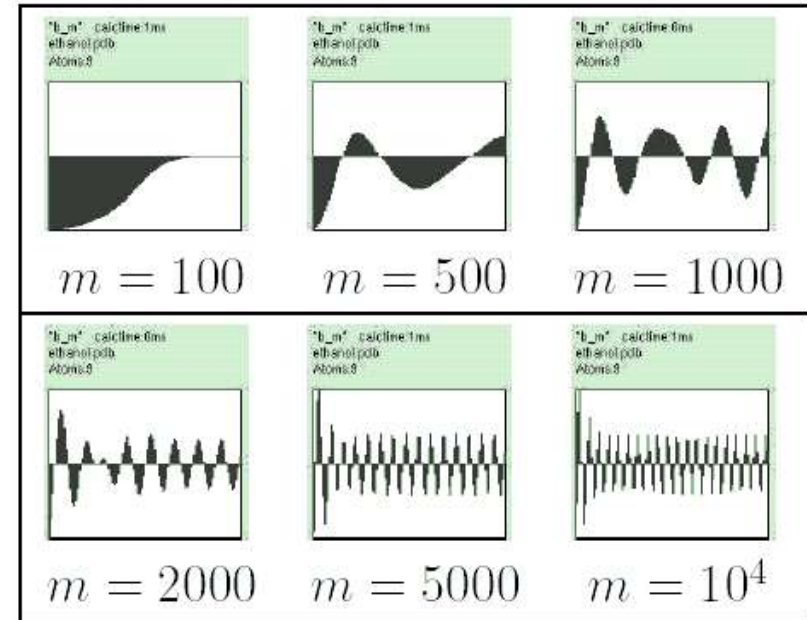
Name	Objekt	Mittelung	Histogramm	GridDistrib.
ethane (C_2H_6)		"l_m" calcTime:8 ethane.pdb Atoms:8 	"Histo" calcTime:1es ethane.pdb Atoms:8 	"Grid Distribution" calcTime:137s ethane.pdb Atoms:8
benzene (C_6H_6)		"l_m" calcTime:2es Benzene.pdb Atoms:12 	"Histo" calcTime:2es Benzene.pdb Atoms:12 	"Grid Distribution" calcTime:172s Benzene.pdb Atoms:12
toluene		"l_m" calcTime:0ms Toluene.pdb Atoms:15 	"Histo" calcTime:1es Toluene.pdb Atoms:15 	"Grid Distribution" calcTime:181s Toluene.pdb Atoms:15

3D-Drahtgitter: Parameter

Feste Masse $m = 1000$



Festes Potential $V = 50$



Störungen: NN-LOO Fehler

Moleküle

ϵ	10 ³ /50	10 ³ /200	200/100	100/50	Grid 10 ⁵	Grid 10 ⁶
0	0%	0%	0%	0%	2%	0%
0.01	5%	3%	3%	2%	8%	1%
0.04	20%	11%	9%	10%	10%	1%
0.08	40%	20%	10%	12%	12%	1%
0.12	86%	72%	70%	47%	25%	12%
Zeit	0.01s	0.01s	0.01s	0.01s	0.2s	2s

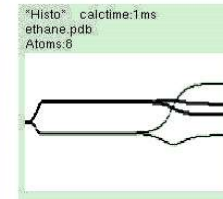
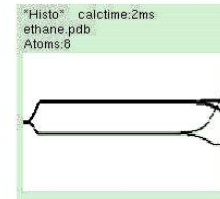
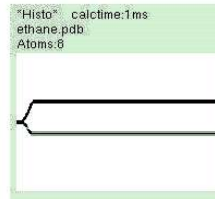
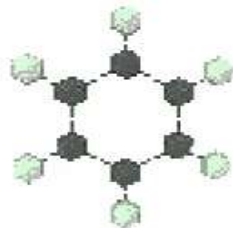
Fische

ϵ	10 ³ /1500	500/10 ³	10 ² /10 ³	Shape 10 ⁴	Shape 10 ⁵	Shape 10 ⁶
0	0%	0%	0%	30%	0%	0%
0.01	0%	0%	0%	40%	1%	0%
0.05	13%	4%	0%	40%	1%	1%
0.1	40%	30%	3%	40%	2%	1%
0.5	72%	61%	56%	70%	18%	12%
Zeit	0.2s	0.2s	0.2s	0.05s	0.5s	4s

Beobachtungen

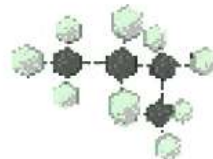
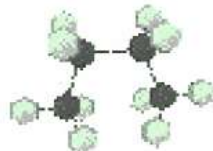
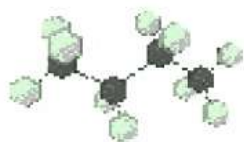
Die Symmetrie spiegelt sich in den Merkmalen wieder

Bei symmetrischen Objekten kann die „Symmetrie“ der Merkmale durch numerische Ungenauigkeiten gebrochen werden.



Unvollständigkeit

Drei verschiedene Typen von Butan ergeben identische Merkmale



Zusammenfassung

- Neuer Rahmen zur Gewinnung für Invarianten von Drahtgittermodellen. Vollständigkeitsanalyse mit Mitteln der der Linearen Algebra möglich.
- Anwendung auf Polygonzüge und beliebige Drahtgittermodelle. Theoretische Untersuchung bei Polygonzügen.
- Entwicklung von Analysewerkzeuge in C++,QT. Recherche nach geeigneten Testobjekten.

Zusammenfassung

Probleme

- Die Merkmalsvektoren sind in der Praxis nicht l.u., wegen der schnellen Konvergenz der Vektoren.
- Störempfindlich, da hohe Potenzen einfließen.
- Punkt 3) in den Vollst.bed. nur für unsymmetrische Kodierungen leicht einzusehen.

Lösungen und Ausblick

- Parametrisierte Kodierungen, andere Geometriematrizen
- Nicht-lineare Kodierungen
- Einfache Erweiterung auf attributierte Gitter
- Kettenkodierung bei Polygonzügen

Klassendiagramm

