SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE

STAVEBNÁ FAKULTA

Evidenčné číslo: SvF-5342-7430

ANALÝZA TVARU 3D OBJEKTU POMOCOU SPEKTRA LAPLACE-BELTRAMIHO OPERÁTORA

BAKALÁRSKA PRÁCA

Študijný program:	Matematicko-počítačové modelovanie
Číslo študijného odboru:	1114
Názov študijného odboru:	9.1.9 aplikovaná matematika
Školiace pracovisko:	Katedra matematiky a deskriptívnej geometrie
Vedúci záverečnej práce:	Mgr. Mariana Remešíková, PhD.

Bratislava 2013 **Patrik Daniel**

Čestné prehlásenie

Vyhlasujem, že bakalársku prácu Analýza tvaru 3D objektu pomocou spektra Laplace-Beltramiho operátora som vypracoval samostatne na základe použitej literatúry a s odbornou pomocou vedúcej práce.

Vlastnoručný podpis

Pod'akovanie

Touto cestou by som chcel pod'akovat' Mgr. Mariane Remešíkovej, PhD. za cenné pripomienky a odborné konzultácie počas vypracovania tejto práce.

Abstrakt

V tejto práci skúmame problematiku spektra Laplace-Beltramiho operátora. Súčasť'ou práce je návrh numerickej metódy na riešenie Helmholtzovej diferenciálnej rovnice za účelom nájdenia aproximácie spektra tohto operátora. Kl'účovú úlohu zohráva diskretizácia Laplace-Beltramiho operátora, ktorú sme otestovali pri riešení rovnice pre vývoj povrchu podl'a strednej krivosti. Skúmame rôzne možnosti využitia spektra tohto operátora pri analýze tvaru 3D objektov, najmä pri vyhl'adávaní tvarových podobností medzi objektami. Práca obsahuje aj ukážku aplikácie na reálne biologické dáta, ktorými sú výsledky segmentácie buniek z mikroskopových snímok embrya rybky *danio rerio*.

Kl'účové slová: spektrum Laplace-Beltramiho operátora, Helmholtzova diferenciálna rovnica, analýza tvaru, hl'adanie podobností

Abstract

In this work we study the Laplace-Beltrami operator. Within this work we propose a numerical method for solving Helmholtz differential equation in order to extract the spectrum of this operator. The key part is the discretization of the Laplace-Beltrami operator which we checked by solving the mean curvature flow equation on surfaces. We study various possibilities of application of the spectra for shape analysis of 3D objects, especially finding the shape similarities. This work also contains an application to real data which are the results of cell segmentation from microscope images of the embryo of the zebrafish (*danio rerio*).

Keywords: Laplace-Beltrami spectra, Helmholtz differential equation, shape analysis, finding similarities

Obsah

1 Úvod

Počítačová grafika prešla za posledných 20 rokov takmer neuveriteľným vývojom. Avšak niektoré základné problémy týkajúce sa analýzy tvaru 3D objektov stále nie sú úplne vyriešené. Nájsť optimálny spôsob pre rýchlu identifikáciu, porovnávanie a rozpoznávanie tvarovo podobných objektov v realistických 3D scénach či vyhľadávanie podobností v obrovských databázach je stále otvoreným problémom. V posledných rokoch boli vyvinuté rôzne metódy pre porovnávanie tvarov, no väčšina z nich je založená na lokalizácii a registrácii objektov, čo môže byť náročné z hľadiska realizácie.

V tejto práci skúmame možnosti využitia spektra (množiny vlastných čísel) Laplace-Beltramiho operátora na riemannovských povrchoch pri porovnávaní a vyhľadávaní podobných tvarov. Toto spektrum teoreticky spĺňa všetky predpoklady k tomu, aby sa používalo ako akási charakteristická vlastnosť tvarov. Vlastné čísla sú invariantné voči izometrii, nezávisia na umiestnení v priestore, a ak je to požadované, ani od veľkosti objektu (je možné normovanie spektra). Aproximácia spektra je tiež robustná vzhľadom na aproximáciu (reprezentáciu) objektu. Dalo by sa povedať, že spektrum je v istom zmysle akýmsi *DNA* tvaru objektu [1]. Rovnako ako v reálnom živote aj toto *DNA* sa môže použiť na identifikáciu objektu a môže byť použité aj na vyhľadávanie podobností medzi objektami.

2 Teoretický základ

V tejto kapitole uvádzame základné pojmy diferenciálnej geometrie, ktoré sú potrebné k pochopeniu problematiky Laplace-Beltramiho operátora.

V našej práci sa zaoberáme riemannovskými povrchmi vloženými do priestoru $\mathbb{R}^3$. Pod vložením povrchu S rozumieme také zobrazenie $F\colon S \to \mathbb{R}^3$, ktoré každému bodu povrchu S priradí práve jednu trojicu súradníc $(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$.

Dôležitou vlastnosťou riemannovských povrchov je existencia metrického tenzora, ktorý umožňuje meranie dĺžok, uhlov a plôch na danom povrchu S. Metrický tenzor g je vlastne skalárny súčin v dotykovom priestore povrchu a dá sa reprezentovať pomocou matice

$$\begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix}.$$

Komponenty metrického tenzora v konkrétnom bode povrchu predstavujú skalárne súčiny dvojíc bázových vektorov v_1, v_2 dotykového priestoru povrchu v danom bode (predpísané hodnoty metrického tenzora pre dvojice bázových vektorov)

$$\begin{aligned} g_{11} &= g\left(v_1, v_1\right) = \|v_1\|_g^2, \\ g_{12} &= g_{21} = g\left(v_1, v_2\right), \\ g_{22} &= g\left(v_2, v_2\right) = \|v_2\|_g^2, \end{aligned}$$

pričom $\|\cdot\|_g$ je norma indukovaná metrickým tenzorom. Za pomoci metrického tenzora následne už jednoducho vieme vyrátať dĺžky kriviek, uhly a obsahy plôch na povrchoch [2].

Okrem týchto geometrických pojmov nám metrický tenzor umožňuje definovať na riemannovských povrchoch aj diferenciálne operátory. Je teda možné zadefinovať *gradient* funkcie u a *divergenciu* vektorového poľa $\mathbf{v}$ na povrchu S. Pre danú funkciu u a metrický tenzor g je gradient ∇_g v ľubovoľnom bode $x \in S$ daný vzťahom

$$g\left(\nabla_g u, \mathbf{v}\right) = \frac{\partial u}{\partial \mathbf{v}}, \quad \forall \mathbf{v} \in T_x S, \tag{1}$$

pričom $\frac{\partial u}{\partial \mathbf{v}}$ predstavuje deriváciu funkcie u v smere vektora $\mathbf{v}$ a $T_x S$ je dotykový priestor povrchu S v bode x.

Divergencia vektorového poľa $\mathbf{v}$ na povrchu S s metrickým tenzorom g je daná vzťahom

$$\mathrm{div}_g \mathbf{v} = \frac{1}{\sqrt{\det g}} \sum_{i=1}^{2} \frac{\partial \left(\sqrt{\det g}\, v_i\right)}{\partial x_i}, \tag{2}$$

kde x_i sú bázové vektory dotykového priestoru.

Pomocou gradientu a divergencie môžeme konštruovať aj ďalšie, zložitejšie diferenciálne operátory, medzi ktoré patrí aj Laplace-Beltramiho operátor Δ , ktorý je definovaný pomocou (1) a (2) ako

$$\Delta u = \mathrm{div}_g(\nabla_g u),$$

$$\Delta u = \frac{1}{\sqrt{\det g}} \sum_{i,j=1}^{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(g^{-1} \det g \, \frac{\partial}{\partial x_j} u \right). \tag{3}$$

Definícia Laplace-Beltramiho operátora (3) je teda úzko spätá s metrickým tenzorom g, ktorý súvisí s metrikou na riemannovských povrchoch. Ak uvažujeme, že metrický tenzor je indukovaný vložením povrchu do $\mathbb{R}^3$, Laplace-Beltramiho operátor má priamu súvislosť s tvarom povrchu S.

Známy Laplaceov operátor môžeme chápať ako špeciálny prípad Laplace-Beltramiho operátora s euklidovskou metrikou.

V tejto práci sa zaoberáme problematikou spektra Laplace-Beltramiho operátora. Pod spektrom chápeme množinu vlastných čísel $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_n, \ldots\}$, ku ktorým existujú príslušné vlastné funkcie $\{u_1, \ldots, u_n, \ldots\}$, pričom je splnená rovnica

$$\Delta u = -\lambda u\,. \tag{4}$$

Rovnica (4) je známa ako Helmholtzova diferenciálna rovnica.

3 Diskretizácia Laplace-Beltramiho operátora

Kľúčovou úlohou pri numerickom riešení problému vlastných čísel pre Laplace-Beltramiho operátor je jeho diskretizácia. Na overenie správnosti nami použitej diskretizačnej schémy sme pred samotným hľadaním spektra Laplace-Beltramiho operátora riešili diferenciálnu rovnicu pre vývoj povrchu podľa strednej krivosti, v ktorej vystupuje Laplace-Beltramiho operátor

$$\partial_t S = \Delta S. \tag{5}$$

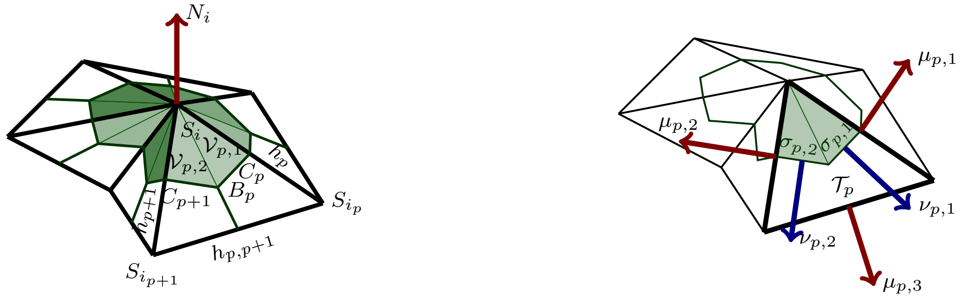
Na riešenie diferenciálnej rovnice (5) sme použili schému *flowing control volume method* [3], ktorú sme prispôsobili na našu situáciu. Táto metóda patrí do skupiny metód konečných objemov. Tieto metódy sú založené na reprezentácii povrchu pomocou konečného počtu trojuholníkov, pomocou ktorých sa zostrojí systém konečných objemov. Predpokladajme, že vrcholy trojuholníkov S_i^n sú bodmi povrchu $S(\cdot, \cdot, t^n)$. Tieto vrcholy sa pohybujú spolu s vyvíjajúcim sa povrchom, čo znamená, že celá diskretizačná sieť sa vyvíja, alebo pláva (ang. *flow*) – z toho je odvodený samotný názov metódy.

Za účelom sprehľadnenia textu v niektorých častiach textu vynecháme časový index n a zahrnieme ho len vtedy, keď je to nevyhnutné. Takéto zjednodušenie si môžeme dovoliť, pretože topologická konfigurácia vrcholov nie je závislá od času. Od času závisí len pozícia vrcholov siete. Pri vysvetľovaní konštrukcie siete konečných objemov používame len lokálne indexovanie, pretože je postačujúce na pochopenie hlavnej myšlienky.

Teraz popíšeme proces, ako vytvárame sieť konečných objemov. Máme danú sieť vrcholov S_i, $i = 1, \ldots, N$ a príslušné trojuholníky $\mathcal{T}_{i,m}$, $m = 1, \ldots, m_i$. Celý postup podrobne popíšeme pre jeden konkrétny vrchol siete S_i. Predpokladajme, že tento vrchol je spoločným vrcholom m trojuholníkov $\mathcal{T}_1, \ldots, \mathcal{T}_m$. Potom je tento vrchol spoločným vrcholom aj pre m hrán $h_1, \ldots, h_m$, pričom h_p spája S_i s vrcholom S_{i_p}. Ďalej nech B_p je ťažiskom trojuholníka $\mathcal{T}_p$ a C_p je stredom hrany h_p, $p = 1 \ldots m$. Konečný objem V_i prislúchajúci vrcholu S_i zadefinujeme ako mnohouholník, ktorý vznikne zjednotením trojuholníkov $\mathcal{V}_{p,1} = S_i C_p B_p$ a $\mathcal{V}_{p,2} = S_i B_p C_{p+1}$ pre $p = 1 \ldots m$, kde nastavíme $C_{m+1} = C_1$. Samotný vrchol S_i je teda považovaný za stred novovzniknutého konečného objemu a jeho hranice tvoria spojnice stredov hrán a ťažísk všetkých trojuholníkov $\mathcal{T}_1, \ldots, \mathcal{T}_m$.

Systém konečných objemov, ktorý vytvoríme takýmto spôsobom, pokryje celý (triangulovaný) povrch a jedinými prienikmi medzi takto skonštruovanými konečnými objemami V_i sú ich hranice. Naša aproximácia bude ďalej potrebovať vonkajšie jednotkové normály

$\mu_{p,1}$, $\mu_{p,2}$, $\mu_{p,3}$ k stranám trojuholníka $\mathcal{T}_p$ v rovine tohto trojuholníka a vonkajšie jednotkové normály $\nu_{p,1}$, $\nu_{p,2}$ ku hranám konečného objemu $\sigma_{p,1} = C_pB_p$, $\sigma_{p,2} = B_pC_{p+1}$, rovnako v rovine trojuholníka $\mathcal{T}_p$.



Obr. 1: Konečný objem V_i prislúchajúci vrcholu S_i.

Pre časovú diskretizáciu rovnice (5) použijeme semi-implicitnú schému. Základnou myšlienkou takejto diskretizácie parciálnych dieferenciálnych rovníc je, že lineárne členy rovnice berieme z nového časového kroku a nelineárne z predošlého. Tento typ časovej diskretizácie je kombináciou podmienene stabilnej explicitnej a bezpodmienečne stabilnej, ale výpočtovo náročnejšej, implicitnej metódy. Na aproximáciu derivácie podľa času na ľavej strane rovnice (5) použijeme spätnú diferenciu.

$$\frac{S^n - S^{n-1}}{\tau} = \Delta_{n-1} S^n, \tag{6}$$

kde τ je krok časovej diskretizácie a $n > 0$ označuje prislúchajúcu časovú vrstvu. V našom prípade je použitie semi-implicitnej schémy pekne vidieť na diskretizácii pravej strany rovnice, kde nelineárny člen Δ_{n-1} je Laplace-Beltramiho operátor odpovedajúci povrchu S^{n-1} z predošlého časového kroku.

Integrovaním rovnice (6) cez konečný objem V_i dostávame

$$\int_{V_i^{n-1}} \frac{S^n - S^{n-1}}{\tau} \mathrm{d}x = \int_{V_i^{n-1}} \Delta_{n-1} S^n \mathrm{d}x \tag{7}$$

Použitím Greenovej vety sa člen na pravej strane dá prepísať nasledujúcim spôsobom

$$\int_{V_i} \Delta S \mathrm{d}x = \int_{\partial V_i} \nabla S \cdot \nu_i \mathrm{d}y = \sum_{p=1}^{m} \left(\int_{\sigma_{p,1}} \nabla S \cdot \nu_{p,1} \mathrm{d}y + \int_{\sigma_{p,2}} \nabla S \cdot \nu_{p,2} \mathrm{d}y \right), \tag{8}$$

kde ∇ predstavuje povrchový gradient (gradient vzhľadom k metrickému tenzoru povrchu S^{n-1}). Za predpokladu, že $S(\cdot,\cdot,t)$ je lineárne na $\mathcal{T}_p^n$, môžeme písať [4]

$$D_p := (\nabla S)\,|_{\mathcal{T}_p} = \frac{1}{|\mathcal{T}_p|} \int_{\mathcal{T}_p} \nabla S \mathrm{d}x = \frac{1}{|\mathcal{T}_p|} \int_{\partial \mathcal{T}_p} S \otimes \mu_p \mathrm{d}y\,, \tag{9}$$

Ďalej, keď vezmeme do úvahy časovú diskretizáciu, dostávame

$$D_p^n = \frac{1}{|\mathcal{T}_p^{n-1}|}\left(|h_p^{n-1}|M_{i,1}^n + |h_{p+1}^{n-1}|M_{i,2}^n + |h_{p,p+1}^{n-1}|M_{i,3}^n\right), \tag{10}$$

kde

$$\begin{aligned} M_{i,1}^n &= \frac{S_i^n + S_{i_p}^n}{2} \otimes \mu_{p,1}^{n-1}, \\ M_{i,2}^n &= \frac{S_i^n + S_{i_{p+1}}^n}{2} \otimes \mu_{p,2}^{n-1}, \\ M_{i,3}^n &= \frac{S_{i_p}^n + S_{i_{p+1}}^n}{2} \otimes \mu_{p,3}^{n-1}, \end{aligned}$$

Nakoniec môžeme písať plne diskretizovaný model pre vrchol S_i

$$S_i^n - \frac{\tau}{V_i^{n-1}}\sum_{p=1}^{m_i}\left(|\sigma_{i,p,1}^{n-1}|D_{i,p}^n \cdot \nu_{i,p,1}^{n-1} + |\sigma_{i,p,2}^{n-1}|D_{i,p}^n \cdot \nu_{i,p,2}^{n-1}\right) = S_i^{n-1}. \tag{11}$$

Rovnica (11) reprezentuje lineárny systém pre súradnice x,y,z vrcholu S_i. Vzhľadm na tvar $D_{i,p}^n$ ako neznáme v rovnici vystupujú hodnoty S_i^n a $S_{i_p}^n$ pre $p = 1 \dots m_i$, okrem i-teho vrchola S_i teda aj všetky jeho susedné vrcholy. V rovnici pre každý vrchol triangulácie S_i, $i = 1 \dots n$ máme spolu $m_i + 1$ neznámych. Z rovnice (11) si vyjmeme členy, ktoré stoja pri jednotlivých neznámych a uložíme ich do matice $\mathbf{A}$ rozmeru $n \times n$, do príslušných stĺpcov, ktoré odpovedajú globálnemu číslovaniu vrcholov S_i. Vektor pravej strany $\mathbf{b}$ je vždy daný vektorom riešenia S_i^{n-1}, z predošlého časového kroku. V každom časovom kroku $n, n = 1, \dots, T$ riešime tri lineárne systémy

$$\begin{aligned} \mathbf{A}x^n &= x^{n-1} \\ \mathbf{A}y^n &= y^{n-1} \\ \mathbf{A}z^n &= z^{n-1} \end{aligned}$$

Pričom súradnice bodov $S_i^0 = (x_i^0, y_i^0, z_i^0)$ predstavujú počiatočnú podmienku. Jednotlivé systémy riešime v každej časovej iterácii pomocou SOR algoritmu.

3.1 Numerické experimenty

V tejto časti overíme správnosť numerického riešenia diferenciálnej rovnice pre vývoj povrchu podľa strednej krivosti. Numerické výsledky budeme porovnávať so známym analytickým riešením, podľa ktorého pre polomer vyvíjajúcej sa sféry, ktorá má v čase 0 polomer $r(0) = 1$, platí

$$r(t) = \sqrt{1 - 4t}\,. \tag{12}$$

Zo vzt'ahu (12) vyplýva, že v čase $t = 0.25$ bude polomer jednotkovej sféry rovný 0. Pre odhad chyby err používame L_2 normu danú vzt'ahom

$$err_N^T = \sqrt{\sum_{n=1}^{T}\sum_{i=1}^{N} \|r(n\tau) - |S_i^t|\|^2 |V_i| \tau}\,, \tag{13}$$

kde T je počet časových krokov a N počet bodov triangulácie povrchu. Chyby err_N^T sme merali v časovom intervale $[0, T]$, $T = 0.2$ pri vol'be časového kroku $\tau \sim h^2$, pričom h charakterizuje dĺžku hrany trojuholníka. Experimentálny rád konvergencie metódy (EOC) určíme podl'a vzt'ahu

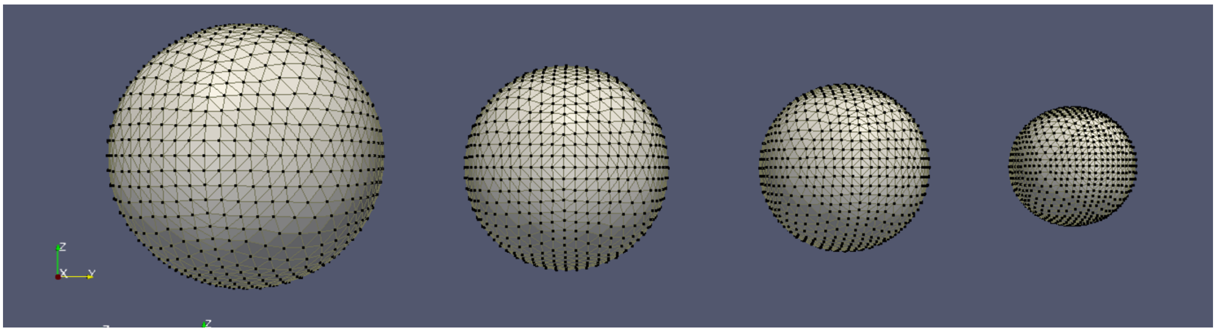
$$EOC = \log_2 \frac{err_h^T}{err_{h/2}^{4T}}, \tag{14}$$

kde $err_{h/2}^{4T}$ je chyba pri dvakrát jemnejšej priestorovej a štyrikrát jemnejšej časovej diskretizácii, čo odpovedá vzt'ahu $\tau \sim h^2$.

Tabul'ka 1: Tabul'ka nameraných chýb err_h^T.

Počet vrcholov siete	Časový krok τ	Chyba err	EOC
18	0.04	0.061792070	
66	0.01	0.017444615	1.82464
258	0.0025	0.004520356	1.94827
1026	0.000625	0.001142950	1.98367
4096	0.00015625	0.000287463	1.99132

Z tabul'ky 1. vyplýva, že metóda je druhého rádu. Zvolená diskretizačná schéma pre Laplace-Belramiho operátor funguje správne.



Obr. 2: Numerické výsledky vývoja podl'a strednej krivosti pre trianguláciu sféry pomocou 1026 bodov s časovým krokom $\tau = 0.000625$ v časoch $t = 0, 0.1, 0.15$ a 0.2.

4 Riešenie Helmholtzovej diferenciálnej rovnice

Pri numerickom riešení Helmholtzovej rovnice budeme vychádzať z diskretizácie Laplace-Beltramiho operátora, ktorú sme využili pri riešení rovnice (5). Za účelom nájdenia spektra Laplace-Beltramiho operátora nemusíme riešiť úplný problém vlastných čísel Laplace-Beltramiho operátora (nájdenie vlastných čísel aj vlastných vektorov). Stačí nám vypočítať len vlastné čísla. Pre výpočet vlastných čísel λ diskretizujeme Helmholtzovu diferenciálnu rovnicu

$$\Delta u = -\lambda u\,. \tag{15}$$

Na diskretizáciu Laplace-Beltramiho operátora na ľavej strane rovnice (15) použijeme rovnaký postup ako v časti 3 tejto práce. Takto vzniknutá aproximácia má tvar

$$\frac{1}{|V_i|}\sum_{p=1}^{m_i}\left(|\sigma_{i,p,1}|D_{i,p}\cdot\nu_{i,p,1}+|\sigma_{i,p,2}|D_{i,p}\cdot\nu_{i,p,2}\right). \tag{16}$$

Za aproximáciu spektra Laplace-Beltramiho operátora považujeme množinu vlastných čísel matice **A**, ktorá reprezentuje lineárny systém rovníc popísaný diskretizačnou schémou (16). Maticu **A** získame opäť tak, že si vyjmeme členy, ktoré stoja pri jednotlivých neznámych a uložíme ich do príslušných stĺpcov matice, ktoré odpovedajú globálnemu číslovaniu vrcholov S_i.

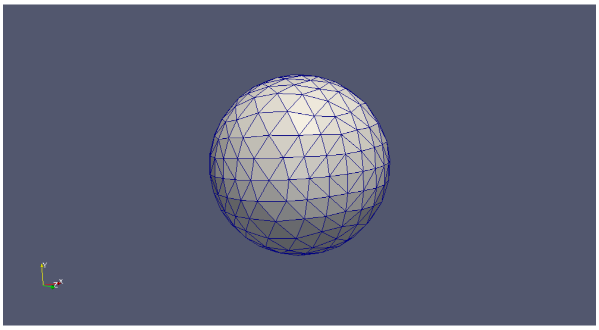
Na výpočet vlastných čísel matice sme implementovali v jazyku C metódu QR transformácie, ktorá je založená na QR rozklade matice [5]. Táto iteračná metóda sa však neskôr ukázala ako nie veľmi vhodná a pre matice s väčšími rozmermi (viac ako 258×258) bola príliš pomalá. Preto sme na výpočet vlastných čísel využili voľne dostupnú numerickú knižnicu pre jazyk C – *The GNU Scientific Library (GSL)* [6]. Táto knižnica poskytuje širokú škálu rôznych matematických rutín, medzi ktoré patrí aj výpočet vlastných čísel matice. Funkcie, ktoré používame, využívajú na hľadanie vlastných čísel metódu *the double-shift Francis method*.

4.1 Ukážky výsledkov

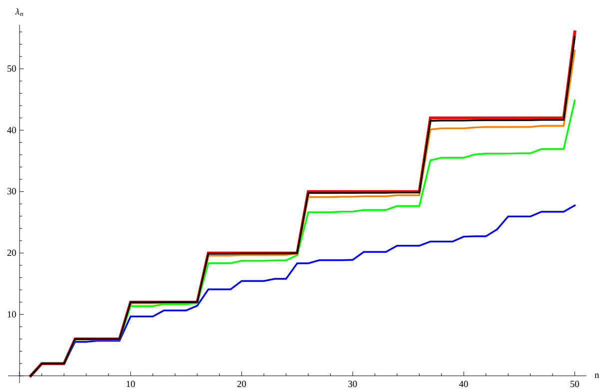
Analytické riešenie pre spektrum Laplace-Beltramiho operátora je známe len pre malý počet tvarov. Spektrum jednotkovej sféry má tvar

$$\lambda_i = i\,(i+1)\,, i \in \mathbb{N}_0, \text{ s násobnosťou } 2i+1. \tag{17}$$

Správnosť schémy (16) teda overíme porovnaním numerických výsledkov so známym analytickým riešením pre jednotkovú sféru. Spektrum sme počítali pre aproximácie sféry s rôznym počtom uzlových bodov. Získané výsledky sme vizualizovali pomocou softvéru Mathematica™. Pred výpočtom chyby err_h najskôr vyberieme z vypočítaných spektier prvých n (postačujúcich je 10 až 100) vlastných čísel, z ktorých následne počítame vzájomné Euklidovské vzdialenosti n-rozmerných vektorov vlastných čísel.



(a) Triangulácia sféry pomocou 258 uzlových bodov.



(b) Presné riešenie (červená) a numericky vypočítané riešenie pre triangulácie pomocou 66 (modrá), 258 (zelená), 1026 (oranžová) a 4098 (čierna) uzlových bodov.

Obr. 3: Porovnanie presného a numericky vypočítaného spektra pre rôzne triangulácie sféry

Nech $\Lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$ a $\Psi = (\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n)$ sú dva n-rozmerné vektory vlastných čísel, potom p-norma vzdialeností týchto dvoch vektorov je definovaná

$$dist_p^n\,(\Lambda, \Psi) = \|\Lambda - \Psi\|_p^n = \left(\sum_{i=1}^{n} (\lambda_i - \psi_i)^p\right)^{\frac{1}{p}}. \tag{18}$$

Euklidovská vzdialenosť je potom jednoducho $dist_2^n$. Chybu err_h, ktorú používame na overenie presnosti metódy, definujeme

$$err_h = dist_2^{50}(\Lambda, \Psi), \tag{19}$$

kde Ψ je známy vektor presného riešenia pre jednotkovú sféru a Λ je numericky vypočítané spektrum zodpovedajúce triangulácii sféry pomocou N vrcholov. Treba si však uvedomiť, že všetky triangulácie sféry sú len aproximáciami skutočného povrchu sféry, a preto sa musí numerické riešenie od presného vždy mierne líšiť.

Experimentálny rád konvergencie metódy (EOC) určíme podľa vzťahu

$$EOC = \log_2 \frac{err_h}{err_{h/2}}, \tag{20}$$

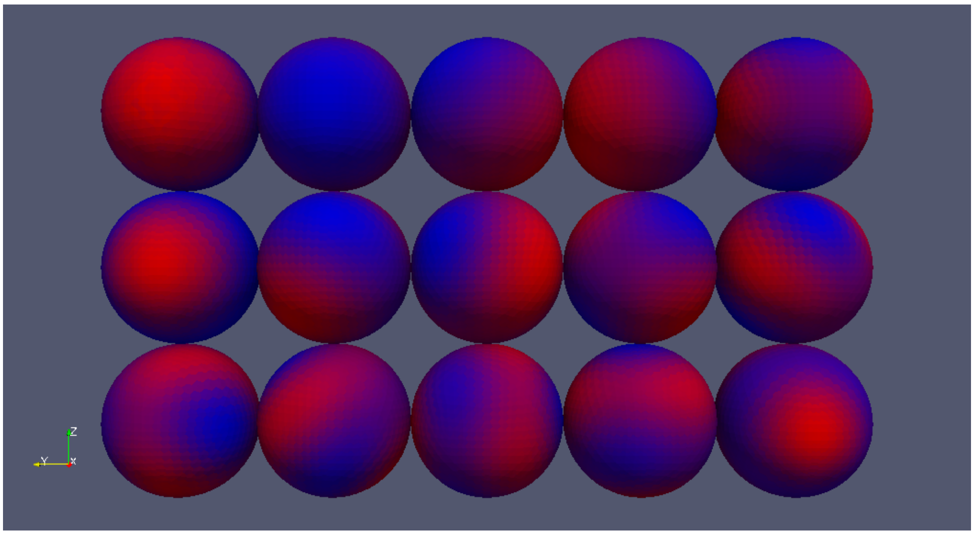
kde $err_{h/2}$ je chyba pri dvojnásobnom zjemnení siete. Z výsledkov v tabuľke 2 vyplýva, že nami použitá numerická metóda na výpočet spektra Laplace-Beltramiho operátora je druhého rádu.

Tabuľka 2: Tabuľka nameraných chýb err_h.

Počet vrcholov siete	Chyba err	EOC
66	79.4839	
258	26.3491	1.59291
1026	6.88075	1.93711
4098	1.73895	1.98435

Na analýzu tvarov 3D objektov v tejto práci používame iba vlastné čísla Laplace-Beltramiho operátora, ale vďaka využitiu knižnice *The GNU Scientific Library (GSL)* [6] sa nám podarilo numericky vypočítať aj vlastné funkcie tohto operátora. Analyzovanie vlastných funkcií [7] je však oveľa náročnejšie ako analýza vlastných čísel.

Numerické výsledky sme vizualizovali pomocou súborov vo formáte *vtk*. Keďže poznáme len diskrétne hodnoty, ktoré vlastná funkcia nadobúda na jednotlivých konečných objemoch, pri vizualizácií výsledkov vždy zafarbíme adekvátnou farbou zo zvolenej farebnej škály tú časť povrchu objektu, ktorá zodpovedá príslušnému konečnému objemu.
V nami zvolenej farebnej škále modrá farba zodpovedá minimálnej hodnote, ktorú nadobúda vlastná funkcia na povrchu a červená farba zodpovedá maximálnej hodnote. Farby, ktoré zodpovedajú zvyšným hodnotám, sme dopočítali pomocou lineárnej interpolácie. Na obrázku 4 je zobrazených prvých 15 vlastných funkcií Laplace-Beltramiho operátora na jednotkovej sfére, ktoré sa nám podarilo vizualizovať vyššie popísaným spôsobom.

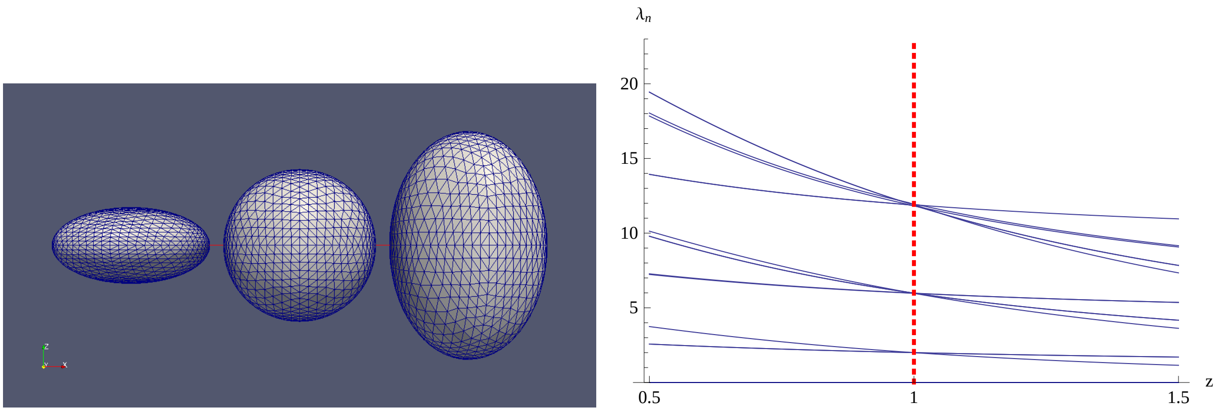


Obr. 4: Prvých 15 vlastných funkcií Laplace-Beltramiho operátora na jednotkovej sfére.

4.2 Závislosť spektra od tvaru objektu

Analyticky sa dá jednoducho dokázať [1], že škálovaním riemannovského povrchu koeficientom a dospejeme ku vlastným číslam, ktoré sú preškálované koeficientom $\frac{1}{a^2}$.

Experimentálne sa nám podarilo potvrdiť aj spojitú závislosť spektra od tvaru objektu v prípade neizotropného škálovania. V nasledujúcom experimente sme do grafu vykreslili prvé vlastné čísla pre rôzne deformácie elipsoidu. Deformácie začínajú elipsoidom s polomerom 1 v x-ovom a y-ovom smere a $0,5$ v z-ovom smere. Potom polomer v z-ovom smere postupne v 100 krokoch zväčšujeme až na $1,5$. Obrázok 5 pekne ukazuje, že vlastné čísla sa spojito menia v závislosti od tvaru objektu. V prípade, keď je z-ový polomer rovný 1, deformácia elipsoidu zodpovedá jednotkovej sfére a viaceré vlastné čísla sa zhodujú, čo presne zodpovedá známemu presnému riešeniu (12).



Obr. 5: Spektrum deformácií elipsoidu závisí spojito od tvaru.

5 Extrakcia geometrických údajov

Spektrum Laplace-Beltramiho operátora v sebe obsahuje okrem informácií o tvare objektov aj niektoré geometrické vlastnosti objektov ako napr. plošný obsah, dĺžka hranice, Eulerova charakteristika atď. V článkoch [1], [8] a [9] bola navrhnutá metóda na extrakciu geometrických údajov objektov zo spektra Laplace-Beltramiho operátora. V tejto časti našej práce sa pokúsime objasniť niektoré pojmy, ktoré zohrávajú kľúčovú úlohu v tejto metóde.

Nech S je riemannovský povrch. Rovnica vedenia tepla na S je daná nasledovným spôsobom:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \Delta u = 0, \quad u\colon [0,\infty) \times S \to \mathbb{R}\,, \tag{21}$$

kde $u(t,x)$ je teplota v bode $x \in S$ v čase t a Δ je Laplace-Beltramiho operátor viažúci sa k priestorovej premennej x. Pri danej začiatočnej podmienke $u(0,x) = f(x)$ a Dirichletovej okrajovej podmienke $u(t,x) \equiv 0$ pre x na hranici povrchu S existuje funkcia $K\colon (0,\infty) \times S \times S \to S$, ktorú nazývame fundamentálne riešenie (*heat kernel*) rovnice vedenia tepla na povrchu S . Riešenie rovnice vedenia tepla sa dá následne získať za pomoci fundamentálneho riešenia ako

$$u(t,x) = \int_S K(t,x,y)f(y)\mathrm{d}V(y). \tag{22}$$

Ďalej nech λ_n $(n \geq 1)$ sú vlastné čísla a ξ_n sú zodpovedajúce ortonormálne vlastné funkcie Laplace-Beltramiho operátora na riemannovskom povrchu S. Potom existuje jediné fundamentálne riešenie rovnice vedenia tepla na S a dá sa vyjadriť ako

$$K(t,x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\lambda_n t}\xi_n(x)\xi_n(y). \tag{23}$$

Tepelná stopa $Z(t)$ (*heat trace*), za pomoci ktorej v článkoch [1], [8] a [9] získavajú geometrické údaje o objektoch zo spektra Laplace-Beltramiho operátora, je definovaná

$$Z(t) = \int_S K(t,x,x)\mathrm{d}V(x) \tag{24}$$

a dá sa vyjadriť v tvare

$$Z(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\lambda_n t} \int_S \left(\xi_i(x)^2\right) \mathrm{d}V(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\lambda_n t}. \tag{25}$$

Tepelná stopa $Z(t)$ má nasledujúci asymptotický rozvoj, keď $t \to 0^+$ [11]

$$Z(t) = (4\pi t)^{\frac{-\dim(S)}{2}} \left(\sum_{i=0}^{n} c_i t^{\frac{i}{2}} + \mathbf{o}\left(t^{\frac{n+1}{2}}\right) \right), \tag{26}$$

kde $\dim(S)$ je v prípade riemannovských povrchov rovné 2 a symbol $\mathbf{o}$ chápeme nasledujúcim spôsobom

$$f(t) = \mathbf{o}(g(t)) \iff \exists k \in \mathbb{R}\colon \left|\frac{f(t)}{g(t)}\right| < k \quad \text{keď } t \to 0\,.$$

Z takéhoto rozvoja tepelnej stopy sa následne dajú získať geometrické informácie [10] o danom objekte. Pre 2-rozmerný riemannovský povrch S s hranicou B môžeme geometrické informácie získať z prvých troch konštánt c_0, c_1, c_2:

$$c_0 = A(S), \quad c_1 = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} L(B), \quad c_2 = \frac{2\pi}{3} E\,,$$

kde $A(S)$ je plocha povrchu S, $L(B)$ je dĺžka hranice povrchu S (pre uzavreté povrchy $L(B) = 0$) a E je Eulerova charakteristika.

Nech $R_{n_0}(t) = Z(t) - Z_{n_0}(t)$ označuje zvyškový člen z čiastkovej sumy

$$Z_{n_0}(t) = \sum_{n=1}^{n_0} \mathrm{e}^{-\lambda_n t}, \tag{27}$$

ktorá aproximuje tepelnú stopu $Z(t)$. V prípade 2-rozmerných riemannovských povrchov je zvyškový člen R_{n_0} ohraničený zhora

$$R_{n_0} < \frac{\mathrm{e}^{-(n_0+1)k_0 t}}{1 - \mathrm{e}^{-k_0 t}} = R_0(t), \tag{28}$$

kde $k_0 = \frac{\lambda_{n_0}}{n_0}$ je konštanta závislá od tvaru objektu a počtu vlastných čísel použitých pri aproximácii tepelnej stopy (27). Pri numerickej extrakcii geometrických informácií z tepelnej stopy (25) zavedieme novú funkciu

$$X(t) = (4\pi t)^{\frac{\dim(S)}{2}} Z(t) = \sum_{i=0}^{n} c_i t^{\frac{i}{2}} + \mathbf{o}(t^{\frac{n+1}{2}})\,. \tag{29}$$

Zavedením substitúcie $x = \sqrt{t}$ a $d = \dim(S)$ dostaneme

$$X(x) = (4\pi)^{\frac{d}{2}} \sum_{i=1}^{\infty} x^d \mathrm{e}^{-\lambda_i x^2} = \sum_{i=0}^{n} c_i x^i + \mathbf{o}(x^{n+1}) \tag{30}$$

a pre $x \to 0^+$ sa prvý koeficient c_0 dá vypočítať

$$\lim_{x\to 0} X(x) = \lim_{x\to 0} \left(\sum_{i=0}^{n} c_i x^i + \mathbf{o}(x^{n+1}) \right) = c_0\,. \tag{31}$$

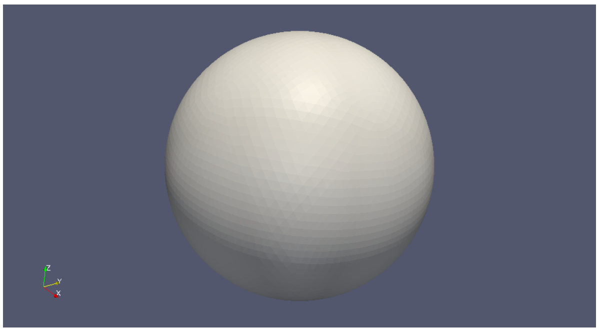
Koeficienty c_1 a c_2 sa dajú vypočítať ako limity derivácií funkcie $X(x)$

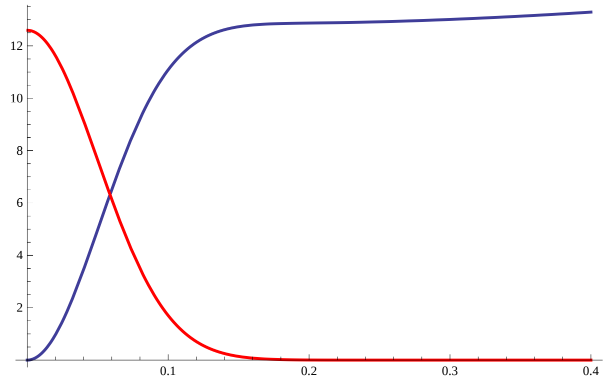
$$\begin{aligned} c_1 &= \lim_{x\to 0} X'(x) = \lim_{x\to 0} (4\pi)^{\frac{d}{2}} \sum_{i=1}^{\infty} x^{d-1}(d - 2\lambda_i x^2)\mathrm{e}^{-\lambda_i x^2} \\ c_2 &= \frac{1}{2} \lim_{x\to 0} X''(x) \end{aligned} \tag{32}$$

Pri numerickom výpočte používame aproximáciu funkcie X(x)

$$X_n(x) = (4\pi)^{\frac{d}{2}} \sum_{i=1}^{n} x^d \mathrm{e}^{-\lambda_i x^2}. \tag{33}$$

Pri použití aproximácie samozrejme dochádza k chybe, ktorú však vyjadruje zvyškový člen R_n (28). Preto za hodnoty funkcie $X(x)$ pokladáme súčet hodnôt funkcií $X_n(x)$ a $R_n(x)$. Na aproximáciu derivácií funkcie $X(x)$ používame konečné diferencie. Numerický výpočet konštanty c_0 je znázornený na obrázku (6) a hodnota numericky vypočítanej konštanty c_1 konvergovala k 0, čo zodpovedá skutočnosti, že dĺžka hranice uzavretých povrchov, s ktorými pracujeme v tejto práci, sa rovná 0. Výpočet konštanty c_2 pomocou aproximácie derivácie konečnou diferenciou sa však už ukázal ako numericky nestabilný a neviedol k uspokojivým výsledkom.





Obr. 6: Funkcie X_{200} (modrá) a R_{200} (červená) zodpovedajúce triangulácii sféry pomocou 4098 bodov. Hodnota súčtu $\lim_{x\to 0} X_{200}(x) + R_{200}(x) = 12.5764$, čo približne zodpovedá skutočnému povrchu jednotkovej sféry 12.5663.

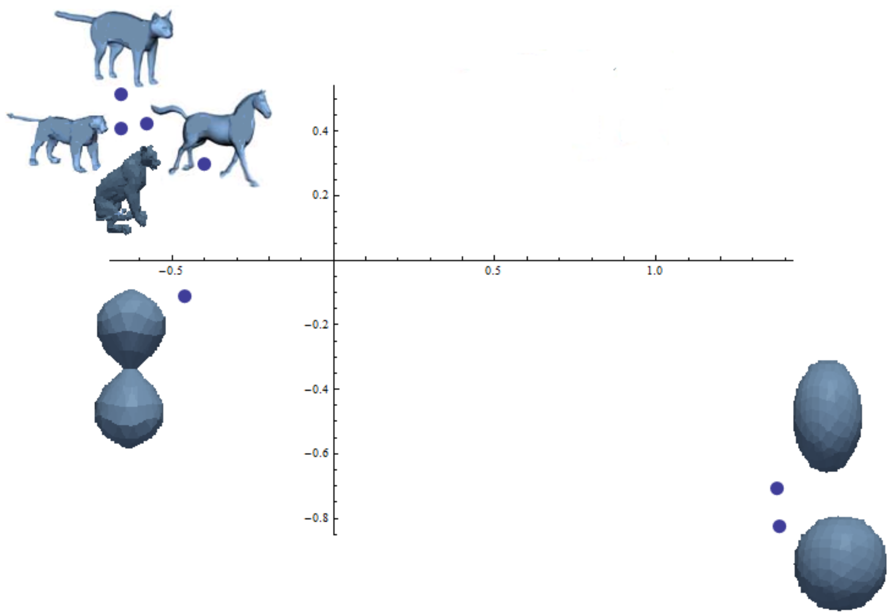
6 Možnosti využitia spektra Laplace-Beltramiho operátora

Z vypočítaného spektra Laplace-Beltramiho operátora pre konkrétny objekt vždy najskôr vyberieme prvých n vlastných čísel. Tie môžu byť následne spracované rôznymi spôsobmi v závislosti od toho, ako chceme využiť informácie, ktoré spektrum v sebe obsahuje. Vektory vlastných čísel môžu byť porovnávané za účelom rozpoznávania alebo vyhľadávania podobných tvarov. Podobné objekty s podobným spektrom môžeme rýchlo identifikovať iba pomocou porovnávania spektier, čo umožňuje rýchle vyhľadávanie v databázach. Spektrum by mohlo byť použité aj pri rozpoznávaní objektov za účelom ochrany autorských práv. Analýza tvarov našla svoje využitie napr. aj v modernej medicíne pri vyhľadávaní rôznych biologických anomálií [12].

Vplyv rôznych veľkostí a škálovania objektov môžeme odstrániť pomocou normovania spektra. To môžeme dosiahnuť preškálovaním vektora vlastných čísel vhodným škálovacím koeficientom. Jednou z účinných normovacích metód je predelenie spektra prvým nenulovým vlastným číslom. Na určenie vzdialenosti spektier dvoch rôznych objektov následne môže byť požitá euklidovská vzdialenosť $dist_2^n$ tak, ako sme ju definovali v časti 4.1 tejto práce.

Na demonštrovanie použitia spektra pre porovnávanie a rozpoznávanie podobných tvarov sme vypočítali spektrum pre viac ako 80 rôznych tvarov. V tejto práci prezentujeme niektoré vybrané výsledky. Spektrá všetkých objektov boli normované pomocou prvého nenulového vlastného čísla a na samotné porovnávanie tvarov bolo využitých prvých 50 vlastných čísel.

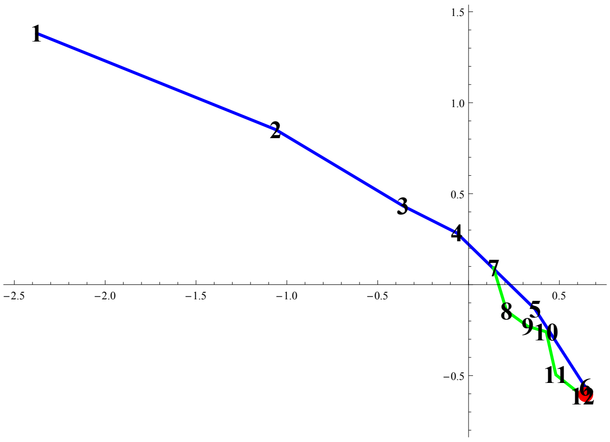
Na vizualizáciu vzdialeností medzi jednotlivými spektrami, rovnako ako v práci [1], vektory vlastných čísel reprezentujeme bodmi v rovine za pomoci viacrozmerného škálovania (MDS). Viacrozmerné škálovanie je termín používaný na pomenovanie skupiny štatistických metód využívaných na vyhľadávanie a vizualizovanie podobností v dátach. V princípe ide o vnorenie z n-rozmerného priestoru do $\mathbb{R}^2$ (n je počet vlastných čísel, ktoré berieme do úvahy), ktoré sa snaží čo najlepšie zachovať vzdialenosti objektov, o ktoré sa zaujímame. Výsledkom týchto metód je bodový MDS-graf. V takomto grafe veľmi dobre vidno ako sú totožné objekty zobrazené do jedného bodu a podobné objekty vytvárajú zhluky.



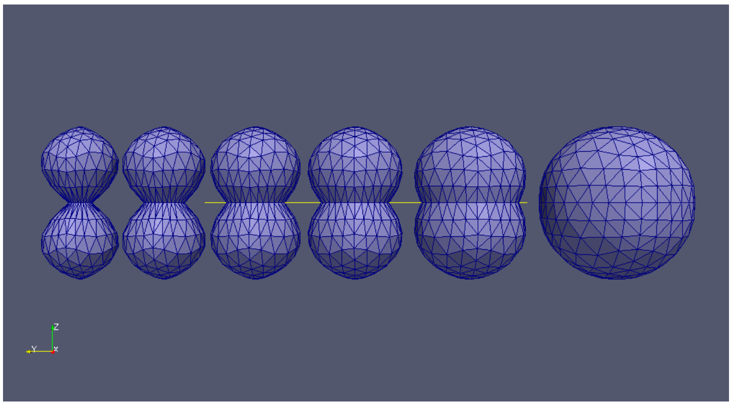
Obr. 7: Ukážka použitia MDS grafov pri porovnávaní tvarov

Na obrázku 7 je MDS-graf, v ktorom porovnávame 7 rôznych objektov. Porovnávame sféru, elipsoid, deformáciu sféry, ktorá vznikla stiahnutím sféry v jej strede a zvyšné testovacie objekty tvoria zvieratá(mačka, dva levy a kôň). V grafe je zjavné zhlukovanie objektov reprezentujúcich zvieratá, najbližšie pri sebe podľa spektra sú tvary zodpovedajúce levom a mačke. Všetko sú to objekty, ktoré sa zhodujú v počte nôh, hláv a majú aj chvost. Od tejto trojice sa trochu odčlenil tvar zodpovedajúci koňovi, ktorý má síce rovnaký počet nôh aj chvost, ale vyznačuje sa špecifickejším tvarom hlavy. Pomerne blízko sa v tomto grafe nachádzajú sféra s elipsoidom, čo je taktiež logické, keďže elipsoid je len relatívne malou deformáciou sféry. Posledný objekt, ktorý reprezentuje stiahnutú sféru, sme do grafu zaradili kvôli tomu, že takáto deformácia sféry, ako sa pri našich experimentoch ukázalo, má veľký vplyv na tvar spektra Laplace-Beltramiho operátora. To sa prejavilo aj na veľkej vzdialenosti medzi bodmi, ktoré v grafe reprezentujú sféru a tento objekt.

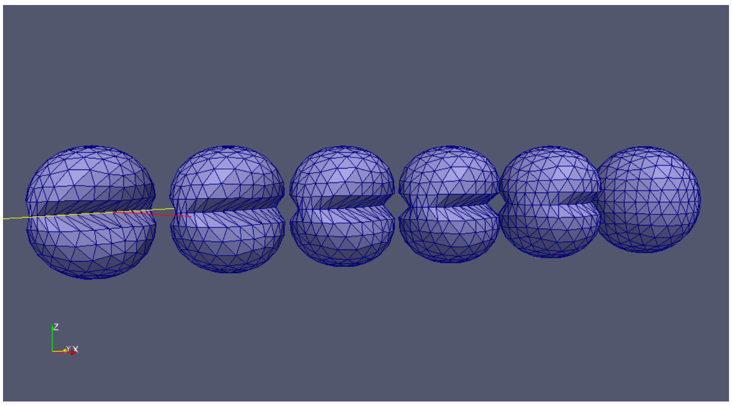
V ďalšom grafe (obr. 8) sme znázornili, ako majú rôzne deformácie rôzny vplyv na spektrum Laplace-Beltramiho operátora. V grafe sú spracované dve rôzne deformácie sféry, pričom obe postupne konvergujú k sférickému tvaru. Na obr. 8 spektrum sféry reprezentuje červený bod. Jednotlivé deformácie sféry sú znázornené na obrázkoch 9 a 10. Každá z deformácií mala na spektrum iný vplyv. Dospeli sme k záveru, že spektrum, resp. MDS graf, nemusí odlíšiť od seba tvary, ktoré vznikli rôznymi deformáciami. Väčší zmysel má použitie spektra na porovnávanie tavrov, ktoré vznikli nejakým konkrétnym typom deformácie, neizotropným škálovaním a podobne.



Obr. 8: Rôzne deformácie jednotkovej sféry majú rôzny vplyv na spektrum Laplace-Beltramiho operátora



Obr. 9: Objekty, ktoré sú v MDS grafe na obrázku 8 reprezentované bodmi 1 až 6.

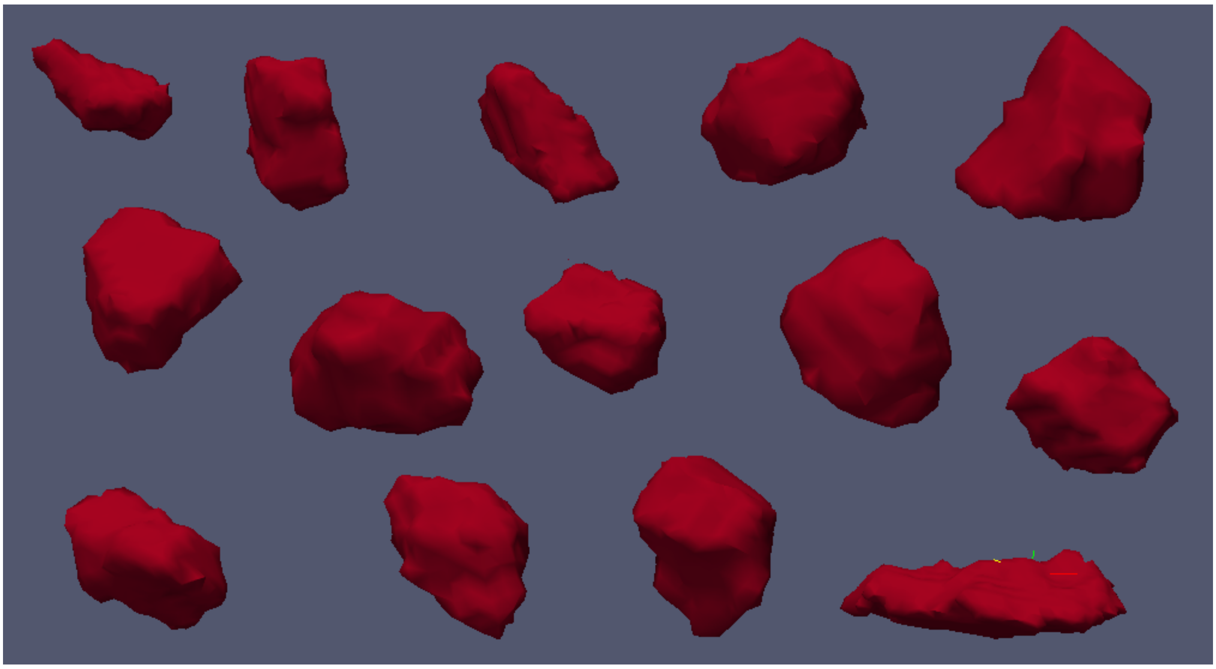


Obr. 10: Objekty, ktoré sú v MDS grafe na obrázku 8 reprezentované bodmi 7 až 12.

6.1 Aplikácia na bunkové dáta

Po experimentoch na testovacích objektoch sme sa rozhodli otestovať možnosti využitia spektra Laplace-Beltramiho operátora aj na reálnych biologických dátach.

Našimi dátami boli výsledky segmentácie buniek z mikroskopových snímok embrya rybky *danio rerio* (danio pruhované). Po niekoľkých hodinách embryogenézy sa bunky postupne začínajú diferencovať, nemajú už všetky rovnaký tvar ako v skorých štádiách vývoja a v rôznych častiach embrya môžeme nájsť rôzne tvarované bunky, pričom tvary sú charakteristické pre jednotlivé časti. Analýza tvaru buniek by mohla umožniť detekciu alebo segmentáciu jednotlivých špecializovaných častí organizmu.

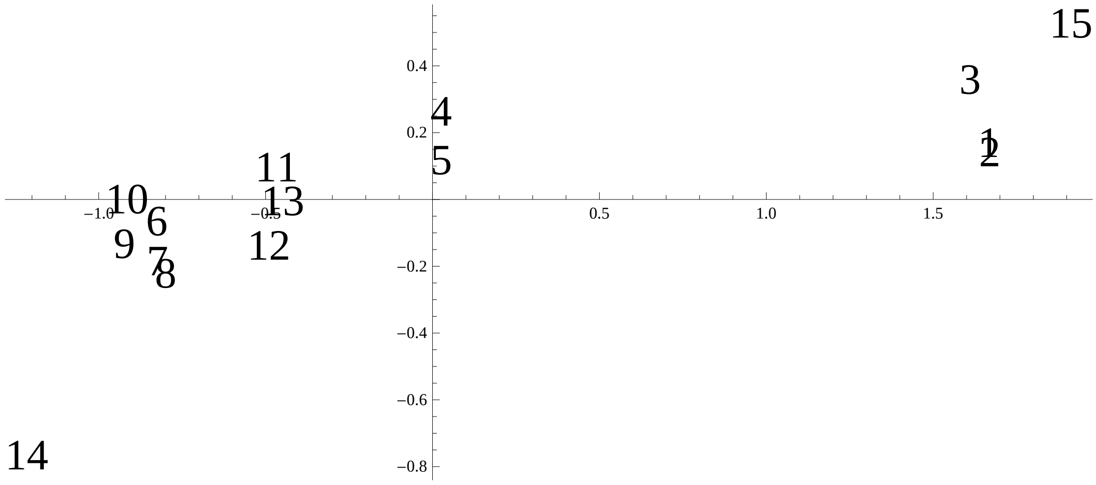


Obr. 11: Vzorka bunkových dát

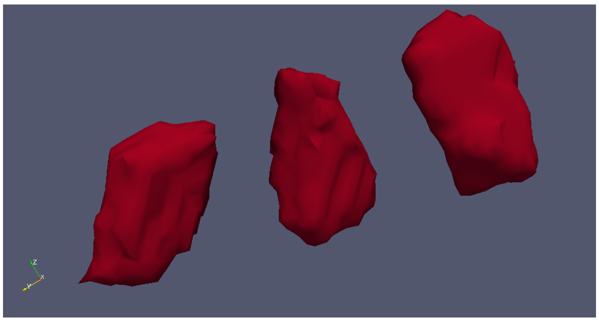
Numericky, za pomoci nami implementovaných programov, sme vypočítali 50-zložkové aproximácie spektra pre viac ako 30 rôznych buniek. Následne sme pre lepšiu ilustráciu výsledkov vybrali reprezentatívnu vzorku 14 buniek, ktorých spektrá sme pomocou viacrozmerného škálovania zobrazili ako body v MDS-grafe. Do tohto grafu sme navyše zobrazili aj bod zodpovedajúci presnému riešeniu pre spektrum jednotkovej sféry.

Tento graf ilustruje, ako sa podobné tvary zhlukujú do skupín a objekty s odlišnými tvarmi sú znázornené ďaleko od seba. Na obrázku 12 vidno, že v takto skonštruovanom grafe sa vytvorili štyri zhluky, ktoré zodpovedajú skupinám buniek s podobným tvarom.

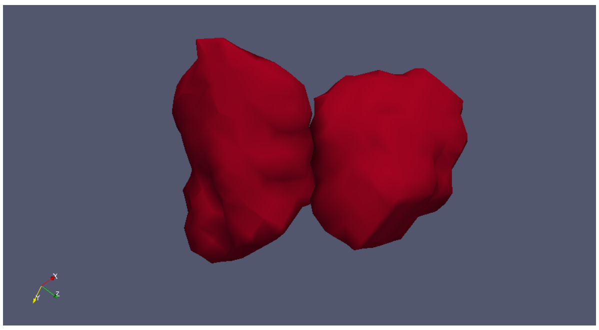
Pre lepšiu predstavu o tvaroch, ktoré boli na základe spektra Laplace-Beltramiho operátora vyhodnotené ako podobné, pripájame vyobrazenie jednotlivých zhlukov buniek na obrázku 13. Chýba bunka č. 15, ktorá bola odlišná od ostatných a je to bunka v pravom dolnom rohu na obrázku 11.



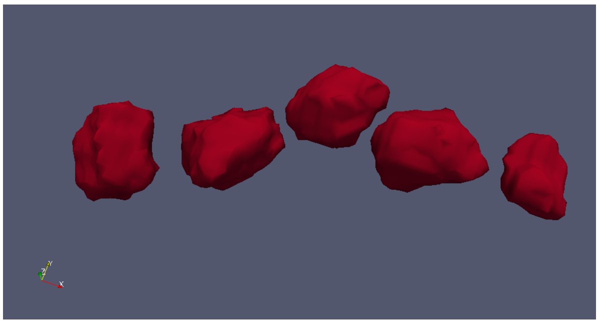
Obr. 12: MDS graf vytvorený pre reprezentatívnu vzorku 14 bunkových dát a presného riešenia pre jednotkovú sféru (14)



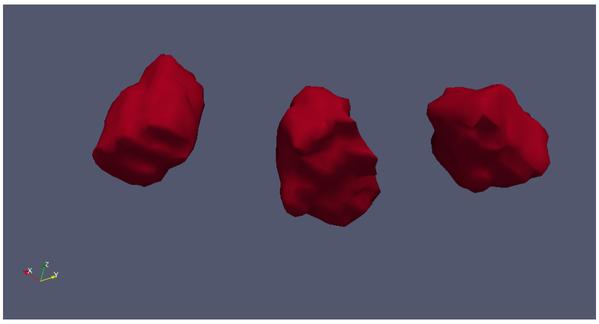
(a) Tvary buniek zodpovedajúce číslam $1, 2, 3$



(b) Tvary buniek zodpovedajúce číslam 4 a 5



(c) Tvary buniek zodpovedajúce číslam $6, 7, 8, 9$ a 10



(d) Tvary buniek zodpovedajúce číslam $11, 12, 13$

Obr. 13: Skupiny buniek, ktoré boli na základe spektra Laplace-Beltramiho operátora vyhodnotené ako podobné

7 Záver

Podarilo sa nám preskúmať možnosti využita spektra Laplace-Beltramiho operátora pri analýze tvaru 3D objektov a navrhli sme numerickú metódu na riešenie Helmholtzovej diferenciálnej rovnice. V rámci práce sme implementovali tri programy v jazyku C:

- program na výrobu triangulovaných aproximácií sféry a jej rôznych deformácií vo formáte *vtk*, ktoré slúžia ako vstupy do ďalších programov
- program na výpočet vývoja triangulovaných povrchov podľa strednej krivosti, ktorého vstupom je *vtk* súbor s trianguláciou povrchu a výstupom sú *vtk* súbory zobrazujúce vyvíjajúci sa povrch v jednotlivých časových krokoch
- program na výpočet spektra Laplace-Beltramiho operátora, ktorého vstupom je *vtk* súbor s trianguláciou objektu a výstupom je textový súbor, v ktorom je uložená aproximácia spektra pre tento objekt.Je možné uložiť aj vizualizácie prvých n vlastných funkcií vo forme *vtk* súborov.

Výsledky prezentované v tejto práci ukazujú, že spektrum naozaj môže byť použité na vyhľadávanie podobností medzi 3D objektami. Pre uspokojivejšie výsledky, najmä pri medicínskych dátach a vyhľadávaní tvarových anomálií, by bolo vhodné použiť pokročilejšie štatistické metódy než tie, ktoré sme použili v tejto práci. Pre ešte lepšie výsledky má význam ďalej analyzovať nielen samotné vlastné čísla, ale aj príslušné vlastné funkcie Laplace-Beltramiho operátora.

Literatúra

[1] M. Reuter, F.-E. Wolter, N. Peinecke: *Laplace–Beltrami spectra as "shape-dna" of surfaces and solids.* Computer-Aided Design 2006; 38(4):342–366.

[2] A. Pressley, *Elementary Differential Geometry*, Springer Undergraduate Mathematics Series: Springer, 2010. 474 s. ISBN 978-1-84882-891-9.

[3] M. Húska, M. Medľa, K. Mikula, P. Novysedlák, M. Remešíková: *A new form-finding method based on mean curvature flow of surfaces.*
Proceedings of ALGORITMY 2012, pp.120-131.

[4] G. Dziuk, *An algorithm for evolutionary surfaces,* Numerische Mathematik 58(1) (1991), pp. 603-611.

[5] G. Okša, *Úvod do numerických metód lineárnej algebry*, STU v Bratislave, 2009.

[6] The GNU Scientific Library (GSL)
`http://www.gnu.org/software/gsl/`

[7] B. Lévy: *Laplace-Beltrami Eigenfunctions Towards an Algorithm That Ünderstands"Geometry.* Proceedings of the IEEE International Conference on Shape Modeling and Applications 2006, pp.13–.

[8] M. Berger, *Riemannian geometry during the second half of the 20th century.* Providence, RI: American Mathematical Society; 2000

[9] M. Craioveanu, M. Puta, T. Rassias, *Old and new aspects in spectral geometry.* Dordrecht: Kluwer; 2001

[10] H. McKean, I. Singer, *Curvature and the eigenvalues of the Laplacian.* J Differ Geom 1967;1:43-69.

[11] S. Minakshisundaram, *Eigenfunctions on Riemannian manifolds.* J Indian Math Soc 1953; 17:159-65.

[12] M. Niethammer, M. Reuter, F.-E. Wolter, S. Bouix, M.-S. Koo, M. Shenton: *Global medical shape analysis using the Laplace-Beltrami spectrum.* Proc. MICCAI. 2007; 1:850–857.

[13] Wikipedia, Multidimensional scaling (MDS).
http://en.wikipedia.org/wiki/Multidimensional_scaling/