technische universität
dortmund

fakultät für informatik

Master-Thesis

Convolutional Neural Networks auf Graphrepräsentationen von Bildern

Matthias Fey

12. Mai 2017

Gutachter:
Prof. Dr. Heinrich Müller
M.Sc. Jan Eric Lenssen

Lehrstuhl Informatik VII
Graphische Systeme
TU Dortmund

Inhaltsverzeichnis

Mathematische Notationen

$\|\cdot\|_2$

1 Einleitung

Homepage[1]
$\mathbb{N}$
„wdawd“

1.1 Problemstellung

1.2 Aufbau der Arbeit

[1] https://github.com/rusty1s/embedded_gcnn

2 Grundlagen

2.1 Mathematische Notationen

2.2 Graphentheorie

2.3 Convolutional Neural Networks

3 Graphrepräsentationen von Bildern

3.1 Gitter

3.2 Superpixel

3.2.1 Verfahren

SLIC [1]

Simple Linear Iterative Clustering (SLIC)

Quickshift [9]

Weitere Verfahren [4]

3.2.2 Adjazenzmatrixbestimmung

3.2.3 Merkmalsextraktion

4 Räumliches Lernen auf Graphen

4.1 Räumliche Graphentheorie

Färbung von Knoten awdawd

Isomorphie und kanonische Ordnung awdawd

4.2 Räumliche Faltung

Knotenauswahl awdawd

Nachbarschaftsgruppierung awdawd

Normalisierung awdawd

4.3 Erweiterung auf eingebettete Graphen

4.4 Netzarchitektur

5 Spektrales Lernen auf Graphen

5.1 Spektrale Graphentheorie

Es gibt 3 große Quellen hier:

- Spectral Graph Theory by Chung
- Discrete Laplace-Beltrami Operator
- An Introduction to Spectral Graph Theory

+ 4 zum Lernen:

- Semi Supervised Classification
- Fast Localized Spectral Filterung
- Wavelets on Graphs via Spectral Graph Theory
- The Emerging Field of Signal Processing on Graphs
- How powerful are Graph Convolutions? (Review)

5.1.1 Eigenwerte und Eigenvektoren reell symmetrischer Matrizen

intro

$\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N\times N}$. $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^N$, $\mathbf{u} \neq \mathbf{0}$. $\lambda \in \mathbb{R}$. *Eigenwertproblem* $\mathbf{Mu} = \lambda\mathbf{u}$. Zu einem *Eigenwert* λ gibt es unendlich viele (skalierte) *Eigenvektoren* $\mathbf{u}$. Wir definieren den Eigenvektor $\mathbf{u}$ eines Eigenwertes λ daher eindeutig über die Bedingung $\|\mathbf{u}\|_2 = 1$. Sei $\mathbf{M}$ weiterhin symmetrisch, d.h. $\mathbf{M} = \mathbf{M}^\top$. Dann gilt für zwei unterschiedliche Eigenvektoren $\mathbf{u}_1$ und $\mathbf{u}_2$, dass $\mathbf{u}_1 \perp \mathbf{u}_2$. Weiterhin hat $\mathbf{M}$ genau N reelle Eigenwerte mit $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$.
Wir definieren zu $\mathbf{M}$ die orthogonale *Eigenvektormatrix* $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n] \in \mathbb{R}^{N\times N}$, wobei $\mathbf{U}\mathbf{U}^\top = \mathbf{I}$, und dessen korrespondierende Eigenwertdiagonalmatrix $\mathbf{\Lambda} =$

$\operatorname{diag}([\lambda_1, \ldots, \lambda_N])$, d.h. $\mathbf{\Lambda}_{ii} = \lambda_i$. Dann gilt $\mathbf{MU} = \mathbf{U\Lambda}$ und insbesondere ist $\mathbf{M}$ diagonalisierbar über

$$\mathbf{M} = \mathbf{MUU}^\top = \mathbf{U\Lambda U}^\top. \tag{5.1}$$

Weiterhin gilt für die $k$te Potenz von $\mathbf{M}$, $k \in \mathbb{N}$,

$$\mathbf{M}^k = \left(\mathbf{U\Lambda U}^\top\right)^k = \mathbf{U\Lambda}^k\mathbf{U}^\top. \tag{5.2}$$

Dieser Zusammenhang lässt sich verdeutlichen, wenn man die Potenz ausschreibt:

$$\left(\mathbf{U\Lambda U}^\top\right)^k = \mathbf{U\Lambda U}^\top\mathbf{U\Lambda U}^\top \prod_{i=1}^{k-2} \mathbf{U\Lambda U}^\top = \mathbf{U\Lambda}^2\mathbf{U}^\top \prod_{i=1}^{k-2} \mathbf{U\Lambda U}^\top = \mathbf{U\Lambda}^k\mathbf{U}^\top.$$

Falls $\mathbf{M}$ weiterhin *schwach diagonaldominant* ist, d.h.

$$\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} |\mathbf{M}_{ij}| \leq |\mathbf{M}|_{ii}\,, \tag{5.3}$$

und $\mathbf{M}_{ii} \geq 0$ für alle $i \in \{1, \ldots, N\}$, ist $\mathbf{M}$ *positiv semidefinit*, d.h. $\mathbf{x}^\top\mathbf{Mx} \geq 0$ für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$. Eigenwerte symmetrischer positiv semidefiniter Matrizen $\lambda_i \in \mathbb{R}^+$ sind positiv reell und es lässt sich folglich auf diesen eine Ordnung definieren mit $0 \leq \lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_N$.

elle

5.1.2 Laplace-Matrix

Our eigenvalues relate well to other graph invariants for general graphs in a way that other definitions (such as the eigenvalues of adjacency matrices) often fail to do. The advantages of this definition are perhaps due to the fact that it is consistent with the eigenvalues in spectral geometry and in stochastic processes. Many results which were only known for regular graphs can be generalized to all graphs [2].

ro

Für einen schleifenlosen, ungerichteteten, gewichtet oder ungewichteten Graphen G und dessen Adjazenzmatrix $\mathbf{A}$ mit Gradmatrix $\mathbf{D}$ ist die *kombinatorische Laplace-Matrix* $\mathbf{L}$ definiert als $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}$ [2]. Die *normalisierte Laplace-Matrix* $\tilde{\mathbf{L}}$ ist definiert als $\tilde{\mathbf{L}} = \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{L}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}$ mit der Konvention, dass $\mathbf{D}_{ii}^{-\frac{1}{2}} = 0$ für isolierte Knoten $v_i \in \mathcal{V}$ in G, d.h. $\mathbf{D}_{ii} = 0$ [2]. Daraus ergibt sich die elementweise Definition

$$\tilde{\mathbf{L}}_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{wenn } i = j, \\ -\frac{w(v_i,v_j)}{\sqrt{d(v_i)d(v_j)}}, & \text{wenn } v_i \sim v_j, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für verbundene Graphen kann $\tilde{\mathbf{L}}$ vereinfacht werden zu $\tilde{\mathbf{L}} = \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}$ [2]. Jeder Eintrag auf der Diagonalen der normalisierten Laplace-Matrix ist folglich Eins. $\tilde{\mathbf{L}}$ ist damit normalisiert auf den (gewichteten) Grad zweier adjazenter Knoten v_i und v_j. Es ist anzumerken, dass $\mathbf{L}$ und insbesondere $\tilde{\mathbf{L}}$ symmetrisch sind [2], wohingegen eine Normalisierung der Form $\mathbf{D}^{-1}\mathbf{L}$ dies in der Regel nicht wäre [8].

$\mathbf{L}$ und $\tilde{\mathbf{L}}$ sind keine ähnlichen Matrizen. Insbesondere sind ihre Eigenvektoren unterschiedlich. Die Nutzung von $\mathbf{L}$ oder $\tilde{\mathbf{L}}$ ist damit abhängig von dem Problem, welches man betrachtet [5]. Wir schreiben $\mathcal{L}$ wenn die Wahl der Laplace-Matrix, ob $\mathbf{L}$ oder $\tilde{\mathbf{L}}$, für die weitere Berechnung zwar fest, aber irrelevant ist.

Visuelle Interpretation

ein fettes todo

Eigenschaften $\mathcal{L} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ist eine reell symmetrisch, positiv semidefinite Matrix [2]. Folglich besitzt $\mathcal{L}$ nach Kapitel 5.1.1 genau N positiv reelle Eigenwerte $\{\lambda_i\}_{i=1}^{N}$ mit Ordnung $0 \leq \lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_N$.

Es ist leicht zu sehen, dass die kombinatorische Laplace-Matrix $\mathbf{L}$ nach (5.3) schwach diagonaldominant ist. Es zeigt sich sogar, dass sich jede Reihen- und Spaltensumme von $\mathbf{L}$ zu Null aufsummiert, d.h. $\sum_{j=1}^{N} \mathbf{L}_{ij} = \sum_{j=1}^{N} \mathbf{L}_{ji} = 0$. Daraus folgt unmittelbar, dass $\lambda_1 = 0$, da $\mathbf{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{N}}[1, \ldots, 1]^\top \in \mathbb{R}^N$ Eigenvektor von $\mathbf{L}$ mit $\mathbf{L}\mathbf{u}_1 = \mathbf{0}$. $\tilde{\mathbf{L}}$ hingegen ist nicht unbedingt schwach diagonaldominant. Es lässt sich jedoch zeigen, dass auch $\tilde{\mathbf{L}}$ den ersten Eigenwert $\lambda_1 = 0$ besitzt [2].

Eine der interessantesten Eigenschaften eines Graphs ist dessen Konnektivität. Die Laplace-Matrix $\mathcal{L}$ bzw. dessen Eigenwerte stellen ein geeignetes Mittel zur Untersuchung dieser Eigenschaft dar. So gilt z.B. für einen verbundenen Graphen G, dass $\lambda_2 > 0$. Falls $\lambda_i = 0$ und $\lambda_{i+1} \neq 0$, dann besitzt G genau i verbundene Komponenten [2]. Damit ist die Anzahl der Eigenwerte gleich Null die Anzahl an Komponenten, die ein Graph besitzt. Für $\tilde{\mathbf{L}}$ lässt sich weiterhin zeigen, dass $\lambda_N \leq 2$ eine obere Schranke der Eigenwerte ist [2].

Für $\mathcal{L}^k$ mit $k \in \mathbb{N}$ gilt $\mathcal{L}^k_{ij} = 0$ genau dann, wenn $s\left(v_i, v_j\right) > k$ [5]. Damit beschreibt $\mathcal{L}^k_i$ bildlich gesprochen die Menge an Knoten, die maximal k Kanten von i entfernt liegen.

5.2 Spektraler Faltungsoperator

5.2.1 Graph-Fourier-Transformation

5.2.2 Polynomielle Approximation

Tschebyschow-Polynome

5.3 Graph Convolutional Networks

5.3.1 Faltungsoperator

Weisfeiler-Lehman Analogie

5.3.2 Erweiterung auf eingebettete Graphen

B-Spline-Kurven

Faltungsoperator

5.4 Pooling auf Graphen

5.4.1 Graphvergröberung

Clustering von Knoten

5.4.2 Erweiterung auf eingebettete Graphen

5.5 Netzarchitektur

6 Evaluation

6.1 Versuchsaufbau

6.1.1 Datensätze

MNIST [7]

Cifar-10 [6]

Pascal VOC [3]

6.1.2 Metriken

6.1.3 Parameterwahl

Vorstellung aller Parameter Superpixelalgorithmen Parameterwahl

6.2 Merkmalsselektion

6.3 Ergebnisse

Vergleich mit anderen Implementierungen

6.4 Laufzeitanalyse

Vergleich mit anderen Implementierungen

6.5 Diskussion

7 Ausblick

Weitere Anwendungsgebiete

Augmentierung von Graphen

Spatial-Pyramid-Pooling

Attention-Algorithmus

A Weitere Informationen

Abbildungsverzeichnis

Algorithmenverzeichnis

Literaturverzeichnis

[1] Achanta, Radhakrishna; Shaji, Appu; Smith, Kevin; Lucchi, Aurelien; Fua, Pascal; Susstrunk, Sabine: SLIC Superpixels Compared to State-of-the-Art Superpixel Methods. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* (2012), S. 2274–2282

[2] Chung, Fan .R.K.: *Spectral Graph Theory.* American Mathematical Society, 1997

[3] Everingham, Mark; Eslami, S.M. Ali; Van Gool, Luc; Williams, Christoper K. I.; Winn, John; Zisserman, Andrew: The Pascal Visual Object Classes Challenge: A Retrospective. In: *International Journal of Computer Vision* (2015), S. 98–136

[4] Felzenszwalb, Pedro F.; Huttenlocher, Daniel P.: Efficient Graph-Based Image Segmentation. In: *International Journal of Computer Vision* (2004), S. 167–181

[5] Hammond, David K.; Vandergheynst, Pierre; Gribonval, Réne: Wavelets on Graphs via Spectral Graph Theory.

[6] Krizhevsky, Alex: *Learning Multiple Layers of Features from Tiny Images*, Department of Computer Science, University of Toronto, Diplomarbeit, 2009

[7] LeCun, Yann; Cortes, Corinna; Burges, Christopher J.C.: The MNIST Database of Handwritten Digits. (2010)

[8] Reuter, Martin; Biasotti, Silvia; Giorgi, Daniela; Patanè, Guiseppe; Spagnuolo, Michela: Discrete Laplace-Beltrami Operators for Shape Analysis and Segmentation. In: *Computers & Graphics* (2009), S. 381–390

[9] Vedaldi, Andrea; Soatto, Stefano: Quick Shift and Kernel Methods for Mode Seeking. In: *European Conference on Computer Vision*, 2008, S. 705–718

Eidesstattliche Versicherung

________________________________ _____________________

Name, Vorname Matr.-Nr.

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit/Masterarbeit* mit dem Titel

____

____

____

selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

____________________________ _________________________

Ort, Datum Unterschrift

*Nichtzutreffendes bitte streichen

Belehrung:

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt, handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 € geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden. (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG -)

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird gfls. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software „turnitin“) zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen:

_______________________________ ___________________________

Ort, Datum Unterschrift