

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

1	Einleitung	3
1.1	Problemstellung	3
1.2	Aufbau der Arbeit	3
2	Grundlagen	5
2.1	Mathematische Notationen	5
2.2	Graphentheorie	5
2.3	Convolutional Neural Networks	5
3	Graphrepräsentationen von Bildern	7
3.1	Gitter	7
3.2	Superpixel	7
3.2.1	Verfahren	7
3.2.2	Adjazenzmatrixbestimmung	7
3.2.3	Merkmalsextraktion	7
4	Räumliches Lernen auf Graphen	9
4.1	Räumliche Graphentheorie	9
4.2	Räumliche Faltung	9
4.3	Erweiterung auf eingebettete Graphen	9
4.4	Netzarchitektur	9
5	Spektrales Lernen auf Graphen	11
5.1	Spektrale Graphentheorie	11
5.1.1	Eigenwerte und Eigenvektoren reell symmetrischer Matrizen	11
5.1.2	Laplace-Matrix	12
5.2	Spektraler Faltungsoperator	13
5.2.1	Graph-Fourier-Transformation	13
5.2.2	Polynomielle Approximation	13
5.3	Graph Convolutional Networks	13
5.3.1	Faltungsoperator	13

5.3.2	Erweiterung auf eingebettete Graphen	14
5.4	Pooling auf Graphen	14
5.4.1	Graphvergrößerung	14
5.4.2	Erweiterung auf eingebettete Graphen	14
5.5	Netzarchitektur	14
6	Evaluation	15
6.1	Versuchsaufbau	15
6.1.1	Datensätze	15
6.1.2	Metriken	15
6.1.3	Parameterwahl	15
6.2	Merkmalsselektion	15
6.3	Ergebnisse	15
6.4	Laufzeitanalyse	15
6.5	Diskussion	15
7	Ausblick	17
A	Weitere Informationen	19
	Abbildungsverzeichnis	21
	Algorithmenverzeichnis	23
	Literaturverzeichnis	25

Mathematische Notationen

$$\|\cdot\|_2$$

1 Einleitung

Homepage¹

N

„wdawd“

1.1 Problemstellung

1.2 Aufbau der Arbeit

¹https://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
- Spectral Graph Theory by Spielman

+ 4 zum Lernen:

- Semi Supervised Classification
- Fast Localized Spectral Filtering
- 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

$\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N \times N}$. $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^N$, $\mathbf{u} \neq \mathbf{0}$. $\lambda \in \mathbb{R}$. *Eigenwertproblem* $\mathbf{M}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$. 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 reell 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 $\mathbf{\Lambda} =$

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

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}\mathbf{U}\mathbf{U}^\top = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}^\top. \quad (5.1)$$

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

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

Dieser Zusammenhang lässt sich leicht zeigen, wenn man die Potenz ausschreibt:

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

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

$$\sum_{j=1}^N |\mathbf{M}_{ij}| \leq |\mathbf{M}|_{ii} \text{ für alle } i \in \{1, \dots, N\}, \quad (5.3)$$

sind ihre Eigenwerte $\lambda_i \in \mathbb{R}^+$ positiv reell und es lässt sich auf diesen eine Ordnung definieren mit $0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_N$. Insbesondere ist \mathbf{M} damit *positiv-semidefinit*, d.h. $\mathbf{x}^\top \mathbf{M} \mathbf{x} \geq 0$ für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$.

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, ungerichteten, 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 1. $\tilde{\mathbf{L}}$ ist damit normalisiert auf den (gewichteten) Grad zweier adjazenter Knoten v_i und v_j . Es ist anzumerken, dass \mathbf{L} und insbesondere $\tilde{\mathbf{L}}$ reell symmetrisch sind [2], wohingegen eine Normalisierung der Form $\mathbf{D}^{-1} \mathbf{L}$ dies in der Regel nicht ist [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, \mathbf{L} oder $\tilde{\mathbf{L}}$, für die weitere Berechnung zwar fest, aber irrelevant ist.

Visuelle Interpretation

ein festes
todo

Eigenschaften laplace matrix ist reell symmetrisch und schwach diagonaldominant

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 Graphvergrößerung

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, Christopher 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