

## ■ fakultät für informatik

## Master-Thesis

Convolutional Neural Networks auf Graphrepräsentationen von Bildern

> Matthias Fey 15. Mai 2017

#### **Gutachter:**

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

Lehrstuhl Informatik VII Graphische Systeme TU Dortmund

# Inhaltsverzeichnis

1	Einl	eitung	3
	1.1	Problemstellung	
	1.2	Aufbau der Arbeit	
2	Gru	ndlagen	5
	2.1	Mathematische Notationen	E.
	2.2	Graphentheorie	E.
	2.3	Convolutional Neural Networks	5
3	Gra	phrepräsentationen 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	Räu	ımliches Lernen auf Graphen	g
	4.1	Räumliche Graphentheorie	Ć
	4.2	Räumliche Faltung	Ć
	4.3	Erweiterung auf ebene Graphen	Ć
	4.4	Netzarchitektur	Ć
5	Spe	ktrales Lernen auf Graphen 1	L <b>1</b>
	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	15
		5.2.1 Graph-Fourier-Transformation	15
		5.2.2 Spektrale Filterung	16
		5.2.3 Polynomielle Approximation	17

	5.3	Graph Convolutional Networks	18
		5.3.1 Faltungsoperator	18
		5.3.2 Erweiterung auf ebene Graphen	18
	5.4	Pooling auf Graphen	18
		5.4.1 Graphvergröberung	18
		5.4.2 Erweiterung auf ebene Graphen	18
	5.5	Netzarchitektur	18
6	Eval	nation 1	9
	6.1	Versuchsaufbau	19
		6.1.1 Datensätze	19
		6.1.2 Metriken	19
		6.1.3 Parameterwahl	19
	6.2	Merkmalsselektion	19
	6.3	Ergebnisse	19
	6.4	Laufzeitanalyse	19
	6.5	Diskussion	19
7	Ausl	lick 2	21
Α	Wei	ere Informationen 2	23
Αŀ	bildu	ngsverzeichnis 2	25
ΑI	gorith	menverzeichnis 2	27
Lit	eratı	rverzeichnis 3	80

# Mathematische Notationen

 $\|\cdot\|_2$ 

# 1 Einleitung

 ${\rm Homepage^1}$  Convolutional Neural Networks (CNNs) CNN  $\mathbb N$  "wdawd"

## 1.1 Problemstellung

## 1.2 Aufbau der Arbeit

<sup>1</sup>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 [13]

Weitere Verfahren [5]

- 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

 $\textbf{Nachbarschaftsgruppierung} \quad \mathrm{awdawd} \quad$ 

Normalisierung awdawd

## 4.3 Erweiterung auf ebene Graphen

#### 4.4 Netzarchitektur

## 5 Spektrales Lernen auf Graphen

### 5.1 Spektrale Graphentheorie

Es gibt 2 große Quellen hier:

- Spectral Graph Theory by Chung
- Discrete Laplace-Beltrami Operator

#### + 5 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  $\mathbf{M}\mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}$ . Zu einem Eigenwert  $\lambda$  gibt es unendlich viele (skalierte) Eigenvektoren  $\mathbf{u}$ . Wir definieren den Eigenvektor  $\mathbf{u}$  eines Eigenwertes  $\lambda$  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  $\mathbf{\Lambda} :=$ 

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

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}\mathbf{U}\mathbf{U}^{\mathsf{T}} = \mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{U}^{\mathsf{T}}.$$

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

$$\mathbf{M}^k = \left(\mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{U}^{\top}\right)^k = \mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}^k\mathbf{U}^{\top}.\tag{5.1}$$

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

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

Falls M weiterhin schwach diagonaldominant ist, d.h.

$$\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{N} |\mathbf{M}_{ij}| \le |\mathbf{M}|_{ii},\tag{5.2}$$

und weiterhin  $\mathbf{M}_{ii} \geq 0$  für alle  $i \in \{1, ..., N\}$ , dann ist  $\mathbf{M}$  positiv semidefinit, d.h.  $\mathbf{x}^{\top} \mathbf{M} \mathbf{x} \geq 0$  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  $0 \leq \lambda_{1} \leq \cdots \leq \lambda_{N} \coloneqq \lambda_{\max}$ .

#### 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].

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

elle

ro

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

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

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, wohingegen eine Normalisierung der Form  $\mathbf{D}^{-1}\mathbf{L}$  dies in der Regel nicht wäre [11].

 $\mathbf{L}$  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 [6]. 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.

#### Interpretation

kurz laplac beltrami

Sei  $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^N$  eine Funktion bzw. ein Signal auf den Knoten eines Graphen G. Dann kann für die kombinatorische Laplace-Matrix  $\mathbf{L}$  verifiziert werden, dass  $\mathbf{L}$  die Gleichung

$$(\mathbf{Lf})_i = \sum_{i \sim j} w(v_i, v_j)(\mathbf{f}_i - \mathbf{f}_j)$$

erfüllt [6]. Sei G nun ein Graph, der aus einem (unendlichen) zweidimensionalen regulärem Gitter entstanden ist, d.h. jeder Knoten  $v_i$  besitzt genau 4 Nachbarn mit gleichen Kantengewichten  $\frac{1}{\delta^2}$ , wobei  $\delta \in \mathbb{R}$  beliebige Konstante. Zur einfacheren Veranschaulichung benutzen wir dabei für die Signalstärke  $\mathbf{f}_i$  eines Knoten  $v_i$  an Position (x, y) die Indexnotation  $\mathbf{f}_{x,y}$ . Dann beschreibt

$$(\mathbf{Lf})_{x,y} = \frac{4\mathbf{f}_{x,y} - \mathbf{f}_{x+1,y} - \mathbf{f}_{x-1,y} - \mathbf{f}_{x,y+1} - \mathbf{f}_{x,y-1}}{h^2}$$

die 5-Punkte-Stern Approximation  $-\nabla^2 f$  (bei umgekehrtem Vorzeichen) definiert auf den Punkten  $\{(x,y),(x+\delta,y),(x-\delta,y),(x,\delta+h),(x,y-\delta)\}$  [6]. Ähnlich zu einem regulären Gitter lässt sich ein Graph G auch über beliebig viele Abtastpunkte einer differenzierbaren Mannigfaltigkeit konstruieren. Es zeigt sich, dass mit steigender Abtastdichte und geeigneter Wahl der Kantengewichte die normalisierte Laplace-

grafik

Matrix  $\tilde{\mathbf{L}}$  zu dem kontinuierlichem Laplace-Beltrami Operator konvergiert [6]. Damit kann  $\tilde{\mathbf{L}}$  als die diskrete Analogie des  $\nabla^2$  Operators auf Graphen verstanden werden. Der Laplace-Beltrami Operator misst dabei, in wie weit sich eine Funktion f an einem Punkt x von dem Durchschnitt aller Funktionspunkte um einen kleinen Bereich um x unterscheidet. Die Laplace-Matrix operiert dabei völlig analog, in dem sie misst, wie sehr sich eine (diskrete) Funktion um einen Knoten im Vergleich zu seinen Nachbarknoten unterscheidet.

Eigenwerte und Eigenvektoren von  $\mathcal{L}$  helfen uns dabei, die lineare Transformation einer Funktion  $\mathbf{f}$  (mehrfach) angewendet auf  $\mathcal{L}$  besser zu verstehen. Wir können dafür  $\mathbf{f}$  als Linearkombination der Eigenbasis  $\sum_i c_i \mathbf{u}_i$  schreiben und erhalten

$$\mathcal{L}^k \mathbf{f} = \sum_i c_i \mathcal{L}^k \mathbf{u}_i = \sum_i c_i \lambda_i^k \mathbf{u}_i.$$

Somit können Eigenschaften von  $\mathcal{L}$  und damit des Graphen selber durch dessen Eigenwerte und Eigenvektoren beschrieben werden.

**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  $0 \le \lambda_1 \le \cdots \le \lambda_N$  und N korrespondierende orthogonale Eigenvektoren  $\{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^N$ .

Die kombinatorische Laplace-Matrix  $\mathbf{L}$  ist nach (5.2) weiterhin schwach diagonaldominant. Insbesondere summiert sich jede Reihen- und Spaltensumme von  $\mathbf{L}$  zu
Null auf, 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  $\mathbf{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} [1, \dots, 1]^{\mathsf{T}} \in \mathbb{R}^N$  Eigenvektor von  $\mathbf{L}$  mit  $\mathbf{L}\mathbf{u}_1 = \mathbf{0}$ .  $\tilde{\mathbf{L}}$  hingegen ist nicht
zwingend schwach diagonaldominant. Es lässt sich jedoch zeigen, dass auch für  $\tilde{\mathbf{L}}$ gilt, dass  $\lambda_1 = 0$  [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 Null-Eigenwerte äquivalent zu der Anzahl an Komponenten, die ein Graph besitzt. Für  $\tilde{\mathbf{L}}$  lässt sich weiterhin zeigen, dass  $\lambda_{\max} \leq 2$  eine obere Schranke ihrer Eigenwerte ist [2].

Aus der Laplace-Matrix können ebenso Rückschlüsse über die kürzeste Pfaddistanz zweier Knoten gewonnen werden. So gilt für  $\mathcal{L}^k$  mit  $k \in \mathbb{N}$ , dass  $\mathcal{L}^k_{ij} = 0$  genau dann, wenn  $s(v_i, v_j) > k$  [6]. Damit beschreibt  $\mathcal{L}^k_i$  bildlich gesprochen die Menge an Knoten, die maximal k Kanten von i entfernt liegen.

#### 5.2 Spektraler Faltungsoperator

Sei  $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^N$  ein Signal auf den Knoten eines Graphen G, welches abhängig von der Struktur des Graphen weiter verarbeitet werden soll. Es ist jedoch nicht selbstverständlich, wie recht einfache, dennoch fundamentale Signalverarbeitungsprozesse wie Translation oder Filterung und die daraus entstehende Faltung in der Domäne des Graphen definiert werden können [12]. So kann z.B. ein analoges Signal f(t) mittels f(t-3) um 3 nach rechts verschoben werden. Es ist hingegen völlig unklar was es bedeutet, ein Graphsignal auf den Knoten um 3 nach rechts zu bewegen (vgl. [12]). Die spektrale Graphentheorie bietet uns dafür einen Ausweg, in dem Eingabesignale in das Spektrum des Graphen zerlegt bzw. abgebildet, modifiziert und wieder retransformiert werden können.

#### 5.2.1 Graph-Fourier-Transformation

Das Spektrum eines Graphen G bilden die Eigenwerte  $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$  der Laplace-Matrix  $\mathcal{L}$  von G. Diese werden deshalb auch oft als die Frequenzen von G betitelt. In der spektralen Domäne können wir ein Eingabeignal  $\mathbf{f}$  über G dann analog wie ein zeitdiskretes Abtastsignal in der Fourier-Domäne behandeln.

Klassische Fourier-Transformation Die Fourier-Transformation  $\hat{f}$  einer Funktion f(t) ist definiert als [12]

$$\hat{f}(\omega) := \langle f, e^{2\pi i \omega t} \rangle = \int_{\mathbb{R}} f(t) e^{-2\pi i \omega t} dt.$$

Die komplexen Exponentiale  $e^{2\pi i\omega t}$  beschreiben dabei die Eigenfunktionen des eindimensionalen Laplace-Beltrami Operators [12]

$$-\nabla^2 e^{2\pi i\omega t} = -\frac{\partial^2}{\partial t^2} e^{2\pi i\omega t} = (2\pi\omega)^2 e^{2\pi i\omega t}.$$
 (5.3)

 $\hat{f}$  kann damit als die Ausdehnung von f in Bezug auf die Eigenfunktionen des Laplace-Beltrami Operators  $\nabla^2$  verstanden werden [6].

Analog lässt sich die *Graph-Fourier-Transformation* einer Funktion  $f: \mathcal{V} \to \mathbb{R}$  bzw.  $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^N$  auf den Knoten eines Graphen G als Ausdehnung von f in Bezug auf die Eigenvektoren  $\{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^N$  der Laplace-Matrix  $\mathcal{L}$  definieren [12]:

$$\hat{f}(\lambda_i) := \langle \mathbf{f}, \mathbf{u}_i \rangle \text{ bzw. } \hat{\mathbf{f}} := \mathbf{U}^\top \mathbf{f}.$$
 (5.4)

Die inverse Graph-Fourier-Transformation ergibt sich dann als [12]

$$f(v_i) = \sum_{j=1}^{N} \hat{f}(\lambda_j) (\mathbf{u}_j)_i \text{ bzw. } \mathbf{f} = \mathbf{U}\mathbf{\hat{f}}.$$
 (5.5)

In der klassischen Fourier-Analyse sind für die Eigenwerte  $\{(2\pi\omega)^2\}_{\omega\in\mathbb{R}}$  in (5.3) nahe bei Null die korrespondieren Eigenfunktionen kleine, weich schwingende Funktionen, wohingegen für größere Eigenwerte bzw. Frequenzen die Eigenfunktionen sehr schnell und zügig anfangen zu oszillieren. Bei der Graph-Fourier-Transformation ist dies ähnlich. So ist für  $\mathbf{L}$  der erste Eigenvektor  $\mathbf{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{N}}[1,\ldots,1]^{\mathsf{T}}$  zum Eigenwert  $\lambda_1 = 0$  konstant und an jedem Knoten gleich. Generell zeigt sich, dass die Eigenvektoren geringer Frequenzen nur geringfügig im Graph variieren, wohingegen Eigenvektoren größerer Eigenwerte immer unähnlicher werden (vgl. [12]).

Die Graph-Fourier-Transformation (5.4) und ihre Inverse (5.5) bieten uns eine Möglichkeit ein Signal in zwei unterschiedlichen Domänen zu repräsentieren, nämlich der Knotendomäne, d.h. das unveränderte Signal auf der Knotenmenge  $f(v_i)$ , und der spektralen Domäne, d.h. das transformierte Signal in das Spektrum des Graphen  $\hat{f}(\lambda_i)$ . Diese Transformation erlaubt uns die Formulierung fundamentaler Signalverarbeitungsoperationen.

### 5.2.2 Spektrale Filterung

In der Signalverarbeitung versteht man unter der Frequenzfilterung die Transformation eines Eingabesignals in die Fourier-Domäne und der verstärkenden oder dämpfenden Veränderung der Amplituden der Frequenzkomponenten. Formal betrachtet ergibt dies

$$\hat{f}_{\text{out}}(\omega) := \hat{f}_{\text{in}}(\omega)\hat{g}(\omega) \tag{5.6}$$

mit dem Filter  $\hat{g} \colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ . Shuman u. a. zeigen, dass die Filterung in der Fourier-Domäne äquivalent zu einer Faltung in der Zeitdomäne ist, d.h.

$$(f_{\rm in} \star g)(t) := \int_{\mathbb{R}} f_{\rm in}(\tau) g(t - \tau) \, d\tau = f_{\rm out}(t)$$
 (5.7)

Wir können die Filterung der Frequenzen in der Fourier-Domäne analog zu (5.6) für die spektrale Domäne auf Graphen über

$$\hat{f}_{\mathrm{out}}(\lambda_i) \coloneqq \hat{f}_{\mathrm{in}}(\lambda_i)\hat{g}(\lambda_i) \,\mathrm{bzw.}\,\,\mathbf{\hat{f}}_{\mathrm{out}} \coloneqq \mathbf{\hat{f}}_{\mathrm{in}} \odot \mathbf{\hat{g}}$$

beschreiben, wobei  $\odot$  das elementweise Hadamard-Produkt [12].  $\hat{\mathbf{g}} \in \mathbb{R}^N$  ist damit ein nicht-parametrischer Filter, d.h. ein Filter, dessen Werte für alle Frequenzen  $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$  frei wählbar sind [3]. Daraus ergibt sich analog zu (5.7) der spektrale Faltungsoperator auf Graphen in der Knotendomäne mit Hilfe der Graph-Fourier-Transformation (5.4) und ihrer Inversen (5.5) als [3, 12]

$$\mathbf{f}_{\text{in}} \star \hat{\mathbf{g}} := \mathbf{U} (\mathbf{U}^{\mathsf{T}} \mathbf{f}_{\text{in}} \odot \hat{\mathbf{g}}) = \mathbf{f}_{\text{out}}.$$
 (5.8)

#### 5.2.3 Polynomielle Approximation

Es zeigt sich, dass die Benutzung des spektralen Faltungsoperators in (5.8) im Kontext eines CNNs auf Graphen mehrere Schwächen aufweist. Es ist z.B. leicht ersichtlich, dass die Auswertung von  $\mathbf{f}_{\text{in}} \star \hat{\mathbf{g}}$  extrem berechnungsintensiv ist. So liegt die Laufzeit der Multiplikation mit der dichtbesetzten Eigenvektormatrix  $\mathbf{U}$  in  $\mathcal{O}(N^2)$ , zudem muss  $\mathbf{U}$  zuerst bestimmt werden — ein kostspieliger Aufwand für Graphen mit möglicherweise weit mehr als hundert Knoten [8]. Desweiteren führt ein Filter  $\hat{\mathbf{g}} \in \mathbb{R}^N$  der Größe N zu einem Lernaufwand in  $\mathcal{O}(N)$ , d.h. der Dimensionalität der Eingabedaten [3]. Ebenso kann  $\hat{\mathbf{g}}$  so nicht für das Lernen auf unterschiedlich großen Graphen verwendet werden.

Um die oben genannten Schwächen zu umgehen kann  $\hat{g}(\lambda_i)$  über ein Polynom

$$\hat{g}(\lambda_i) \approx \sum_{k=0}^{K} c_k \lambda_i^k =: \hat{g}'(\lambda)$$
 (5.9)

vom Grad K mit Koeffizienten  $c_0, \ldots, c_K \in \mathbb{R}$  approximiert werden [3, 6]. Die Filtergröße von  $\hat{g}'$  sinkt somit auf einen konstanten Faktor K mit Lernaufwand  $\mathcal{O}(K)$ , d.h. dem gleichen Aufwand klassischer zweidimensionaler CNNs [3].  $\mathbf{f}_{in} \star \hat{\mathbf{g}}$  ergibt sich dann mittels (5.1), (5.8) und (5.9) approximiert durch [3]

$$\mathbf{f}_{\text{in}} \star \hat{\mathbf{g}} \approx \sum_{k=0}^{K} c_k \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}^k \mathbf{U}^{\top} \mathbf{f}_{\text{in}} = \sum_{k=0}^{K} c_k \mathcal{L}^k \mathbf{f}_{\text{in}}.$$
 (5.10)

Insbesondere ist die spektrale Faltung damit nicht mehr abhängig von der Berechnung der Eigenwerte bzw. Eigenvektoren von  $\mathcal{L}$ . Mittels Kapitel 5.1.2 kann  $\mathbf{f}_{\text{in}} \star \hat{\mathbf{g}}$  in der Knotendomäne nun als eine lokaliserte lineare Transformation interpretiert werden. So sammelt ein Summand des spektraler Filters  $\mathcal{L}^k \mathbf{f}_{\text{in}}$  an einem Knoten v genau die Signale von Knoten auf, die maximal k Kanten von v entfernt liegen [6].

#### **Tschebyschow-Polynome**

#### **Tensorimplementierung**

## 5.3 Graph Convolutional Networks

[8]

#### 5.3.1 Faltungsoperator

Weisfeiler-Lehman Analogie

#### 5.3.2 Erweiterung auf ebene Graphen

Warum ist der Algorithmus nicht so gut [7]?

**B-Spline-Kurven** 

**Faltungsoperator** 

## 5.4 Pooling auf Graphen

#### 5.4.1 Graphvergröberung

Clustering von Knoten

### 5.4.2 Erweiterung auf ebene Graphen

#### 5.5 Netzarchitektur

## 6 Evaluation

#### 6.1 Versuchsaufbau

#### 6.1.1 Datensätze

 $\mathbf{MNIST} \quad [10]$ 

**Cifar-10** [9]

Pascal VOC [4]

#### 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] Defferrard, Michaël; Bresson, Xavier; Vandergheynst, Pierre: Convolutional Neural Networks on Graphs with Fast Localized Spectral Filtering. In: Advances in Neural Information Processing Systems 29. Curran Associates, Inc., 2016, S. 3844–3852
- [4] 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
- [5] FELZENSZWALB, Pedro F.; HUTTENLOCHER, Daniel P.: Efficient Graph-Based Image Segmentation. In: International Journal of Computer Vision (2004), S. 167–181
- [6] HAMMOND, David K.; VANDERGHEYNST, Pierre; GRIBONVAL, Réne: Wavelets on Graphs via Spectral Graph Theory. In: Applied and Computational Harmonic Analysis (2011), S. 129–150
- [7] HUSZÁR, Ferenc: How Powerful are Graph Convolutions? http://www.inference.vc/how-powerful-are-graph-convolutions-review-of-kipf-welling-2016-2/. 2016
- [8] Kipf, Thomas N.; Welling, Max: Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks. In: Computing Research Repository (2016)

30 Literaturverzeichnis

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

- [10] LECUN, Yann; CORTES, Corinna; BURGES, Christopher J.C.: The MNIST Database of Handwritten Digits. (2010)
- [11] REUTER, Martin; BIASOTTI, Silvia; GIORGI, Daniela; PATANÈ, Guiseppe; SPA-GNUOLO, Michela: Discrete Laplace-Beltrami Operators for Shape Analysis and Segmentation. In: *Computers & Graphics* (2009), S. 381–390
- [12] Shuman, David I.; Narang, Sunil. K.; Frossard, Pascal; Ortega, Antonio; Vandergheynst, Pierre: The Emerging Field of Signal Processing on Graphs: Extending High-Dimensional Data Analysis to Networks and Other Irregular Domains. In: *IEEE Signal Processing Magazine* (2013), S. 83–98
- [13] VEDALDI, Andrea; SOATTO, Stefano: Quick Shift and Kernel Methods for Mode Seeking. In: European Conference on Computer Vision, 2008, S. 705–718

## **Eidesstattliche Versicherung**

	<del></del>			
Name, Vorname	MatrNr.			
Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit/Masterarbeit* mit dem Titel				
	Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die zt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich nlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde			
Ort, Datum	Unterschrift			
	*Nichtzutreffendes bitte streichen			
Belehrung:				
Hochschulprüfungsordnung verstößt, hande einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 € gea die Verfolgung und Ahndung von Ordnungs	über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer elt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit hndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für widrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden dem exmatrikuliert werden. (§ 63 Abs. 5			
Die Abgabe einer falschen Versicherung an oder mit Geldstrafe bestraft.	Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren			
	gfls. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die dnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.			
Die oben stehende Belehrung habe ich zur	Kenntnis genommen:			
Ort, Datum	Unterschrift			