

Reconstruction par noyaux polynomiaux

M. BERAR¹, M. DESVIGNES¹, B. ROMANIUK², G. BAILLY³, Y. PAYAN⁴

¹LIS, 961, rue de la Houille Blanche, 38402 St Martin d'Hères Cedex

²Laboratoire CReSTIC LERI, URCA, rue des Crayères BP 1035, 51687 Reims cedex 2, France

³Institut de la Communication Parlée (ICP), UMR CNRS 5009, INPG/U3, 46, av. Félix Viallet, 38031 Grenoble, France

⁴Techniques de l'Imagerie, de la Modélisation et de la Cognition (TIMC), Faculté de Médecine, 38706 La Tronche, France

berar@lis.inpg.fr

desvignes@lis.inpg.fr

barbara.romaniuk@leri.univ-reims.fr

Yohan.Payan@imag.fr

Résumé – Le problème traité est celui de la reconstruction de données partiellement connues. Nos données sont modélisées dans un espace caractéristique issu d'une fonction de projection non-linéaire et nous proposons une solution directe et un formalisme issus de l'astuce noyau. L'originalité de ce travail se situe dans la formalisation de cette reconstruction. La présence de données partiellement connues reformulant entièrement le problème connu de la recherche d'antécédents dans le cadre des méthodes à noyaux traditionnelles. Nous présentons un formalisme nouveau ainsi que son application aux noyaux polynomiaux, déduisant simultanément les paramètres de variabilité caractéristique non-linéaire et les données inconnues. Ce formalisme est ensuite appliqué à des données synthétiques et à l'estimation de points céphalométriques.

Abstract – In this paper, we deal with the problem of partially observed objects. These objects are defined by a set of points and their shape variations are represented by a statistical model. We present two models in this paper: a linear model based on PCA and a non-linear model based on KPCA. The present work attempts to localize of non visible parts of an object, from the visible part and from the model, using the variability represented by the models. Both are applied to synthesis data and to cephalometric data with good results

1. Introduction

Les modèles statistiques de variabilité de formes sont couramment utilisés en analyse ou synthèse d'image [1] à l'aide de modèles de formes et d'apparence [2]. Un ensemble d'apprentissage permet de construire un modèle compact par Analyse en Composantes Principales (ACP) qui est ensuite utilisé pour des applications de compression [3], débruitage [4] ou de segmentation par contour actif. Dans ce papier, nous nous plaçons dans le cadre où une partie des données ou de l'objet sont connues et où il s'agit de retrouver la partie inconnue à l'aide du modèle statistique.

Dans ce cadre, l'ACP permet de modéliser les relations linéaires entre les composantes de l'objet, à travers des paramètres de variabilité. Ces relations linéaires peuvent être assimilées à des relations spatiales. Quand certaines composantes sont manquantes ou occultées, nous montrons que ces relations permettent de reconstruire la forme.

Dans le cas d'une modélisation statistique non-linéaire obtenue par Analyse en Composantes Principales à Noyau, les paramètres de variabilité se situent alors dans un espace caractéristique différent de l'espace d'origine des données. Le passage de l'espace d'origine à l'espace caractéristique est rendu implicite par l'emploi de l'astuce noyau. La difficulté est ici de retrouver les composantes dans l'espace d'origine connaissant celles de l'espace caractéristique. Ce problème est celui de la pré-image. De même que dans le cas de l'ACP, nous montrons dans ce papier que cette formulation peut être étendue à notre problématique et nous la développons pour certains noyaux. Si une partie de la forme est occultée, la reconstruction de la forme peut être réalisée par une

minimisation utilisant les relations entre composantes. Nous avons appliqué cette méthode à des données de synthèse de caractère non-linéaire ainsi qu'à des données céphalométriques en utilisant des noyaux polynomiaux et obtenons de bons résultats.

1. Modèles linéaires

La reconstruction avec données manquantes dans le cadre d'un modèle linéaire coïncide avec la reconstruction. En effet, soit un modèle linéaire construit par ACP sur un jeu de $n+m$ coordonnées pour $l > n+m$ individus :

$$\begin{bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_n \\ X_1 \\ \vdots \\ X_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{C}_1 \\ \vdots \\ \bar{C}_n \\ \bar{C}_{n+1} \\ \vdots \\ \bar{C}_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Phi_{1,1} & \cdots & \Phi_{1,n+m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_{n+m,1} & \cdots & \Phi_{n+m,n+m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \\ b_{n+1} \\ \vdots \\ b_{n+m} \end{bmatrix} \quad (1)$$

où \bar{C} est la forme moyenne des individus, $\Phi = (\phi_1 | \dots | \phi_t)$ est une matrice $(n+m) \times t$ composée des t premiers vecteurs propres de la matrice de covariance des données centrées ($t \leq n+m$) et b un vecteur de dimension t tel que $b = \Phi^t (T_i - \bar{T})$. Le vecteur b est alors une bonne approximation du jeu de données originale et n'importe lequel des $n+m$ points peut être représenté ou retrouvé avec les valeurs du vecteur b .

Dans le cas où les m dernières coordonnées sont inconnues, ($z = (c_1, \dots, c_n, x_1, \dots, x_m)$) on a alors un système composé de $t+m$ inconnues pour $n+m$ équations. Pour $t > n$, le système est sous-déterminé et ne peut être résolu, pour $t = n$, il existe une solution exacte, et pour $t < n$ le système est surdéterminé et la solution est donnée par une minimisation au sens des moindres carrés. Par ailleurs, le système peut s'exprimer sous la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} c_1 - \bar{c}_1 \\ \vdots \\ c_n - \bar{c}_n \\ -\bar{c}_{n+1} \\ \vdots \\ -\bar{c}_{n+m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_{1,1} & \dots & \phi_{1,t} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{n,1} & \dots & \phi_{n,t} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \phi_{n+1,1} & \dots & \phi_{n+1,t} & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ \phi_{n+m,1} & \dots & \phi_{n+m,t} & 0 & \dots & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_t \\ X_1 \\ \vdots \\ X_n \end{bmatrix} \quad (2)$$

2. Modèles non linéaires

L'ACP à Noyaux peut être considérée comme une généralisation naturelle de l'ACP linéaire et est particulièrement appropriée pour extraire des caractéristiques non linéaires de données. Proches des méthodes appliquées dans le domaine des Machines à Support de Vecteurs, l'ACP à Noyaux projette tout d'abord les données de l'espace d'entrée \mathcal{X} dans un espace haute dimension \mathcal{F} via une fonction habituellement non-linéaire. Une ACP est ensuite appliquée sur ces données projetées (que l'on suppose centrées dans \mathcal{F}).

2.1 ACP à Noyaux

Soit l'ensemble d'apprentissage $\{x_i, i=1 \text{ à } L\}$ Soit $\varphi: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathcal{F}$ notre fonction de projection, un noyau de Mercer permet d'exprimer directement le produit scalaire de la fonction de projection $\varphi(x) \bullet \varphi(y) \equiv k(x, y)$. Parmi ces noyaux de Mercer, on peut citer les noyaux gaussiens $k(x, y) = \exp(-\|x - y\|^2 / c)$ (\mathcal{F} de dimension infinie avec φ inconnue) et les noyaux polynomiaux $k(x, y) = (1 + x \bullet y)^d$ (\mathcal{F} de dimension finie avec φ explicite). La matrice de noyaux K de taille $N \times N$ est définie par $K_{ij} \equiv \varphi(x_i) \bullet \varphi(x_j)$.

Le problème revient alors à déterminer les vecteurs propres de [5] :

$$N \lambda \alpha = K \alpha \quad (3)$$

La $k^{\text{ième}}$ composante non-linéaire de la φ -image d'un individu x est la paramètre de variabilité β_k :

$$\beta_k = (V^k \bullet \varphi(x)) = \sum_{i=1}^L \alpha_i^k k(x, x_i) \quad (4)$$

Si les observations ne sont pas centrées dans \mathcal{F} , on utilise la matrice de Gramm à la place de la matrice à noyau:

$$\tilde{K}_{ij} = K_{ij} - \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N K_{ip} - \frac{1}{N} \sum_{q=1}^N K_{jq} + \frac{1}{N^2} \sum_{p,q=1}^N K_{pq} \quad (5)$$

2.2 Reconstruction

La reconstruction sur les premières composantes pose le problème de l'antécédent f d'un point de \mathcal{F} , parfois inexistant. Le problème est souvent abordé [6] en minimisant la distance entre $\varphi(f)$, et la projection de notre forme réduite à ses premières composantes

$$\begin{aligned} \min_{f \in \mathbb{R}^n} \|\varphi(f) - P_N \varphi(z)\|^2 \\ = \min_{f \in \mathbb{R}^n} \left(k(f, f) - 2 \sum_{k=1}^N \beta_k \left(\sum_{i=1}^L \alpha_i^k k(f, x_i) \right) + \Omega \right) \end{aligned} \quad (6)$$

Cette minimisation dépend de la forme du noyau choisi. On peut remarquer que le dernier terme de la quantité à minimiser est constant et que les paramètres de variabilité sont connus a priori.

2.3 Reconstruction des données manquantes

Soit la forme $z = (c_1, \dots, c_n, x_1, \dots, x_m)$ dont on connaît les n premières coordonnées (c_1, \dots, c_n) et appartenant au modèle. Trouver la partie inconnue de z (x_1, \dots, x_m) , c'est déterminer conjointement les N premiers paramètres de variabilité β et la partie inconnue de z , c'est-à-dire minimiser la fonction suivante :

$$\begin{aligned} \rho(z = (c_1, \dots, c_n, x_1, \dots, x_m)) &= \|\varphi(z) - P_N \varphi(z)\|_2^2 \\ &= k(z, z) - \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=1}^L \alpha_i^k k(z, x_i) \right)^2 \end{aligned} \quad (7)$$

avec $\beta_k = \sum_{i=1}^L \alpha_i^k k(z, x_i)$

Nous développons la suite de l'article dans le cadre des noyaux polynomiaux. La fonction à minimiser prend alors la forme :

$$\rho(z)_{\min} = (1 + x_c \bullet x_c + z_x \bullet z_x)^d - \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=1}^L \alpha_i^k (1 + x_c \bullet x_{ci} + z_x \bullet x_{xi}) \right)^2 \quad (8)$$

2.3.1 Polynôme de degré un

Pour des observations centrées, on a $k(x, y) = (x \bullet y)$, φ correspond à l'identité. Minimiser ρ en annulant le gradient de ρ mène à la solution :

$$x = \frac{\sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=1}^L \alpha_i^k (c \bullet x_{ci}) \right) \left(\sum_{i=1}^L \alpha_i^k x_{xi} \right)}{1 - \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=1}^L \alpha_i^k x_{xi} \right)^2} \quad (9)$$

2.3.2 Polynôme de degré 2

La fonction de projection est $\varphi(x) = (x_1, \dots, x_n, x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, \dots, \sqrt{2}x_1x_n, x_2^2, \sqrt{2}x_2x_3, \dots, x_n^2)$. L'équation (3) devient le polynôme de degré 4 suivant :

$$\rho(z)_{\min} = C_{00} + \|\tilde{\varphi}_c(z)\|^2 - \sum_{k=1}^N (C_{0k} + C_{1k} \bullet \tilde{\varphi}_x(z))$$

$$C_{0k} = \sum_{i=1}^L \alpha_i^k (\tilde{\varphi}_c(z) \bullet \tilde{\varphi}_c(x_i)),$$

$$C_{1k} = \sum_{i=1}^L \alpha_i^k \tilde{\varphi}_x(x_i)$$

Les solutions (x_1, \dots, x_m) , partie inconnue de z , sont obtenues par une minimisation par descente de gradient.

$$\nabla_x \rho(z) = 2(\tilde{\varphi}_x(z) \bullet \dot{\tilde{\varphi}}_x(z)) - 2 \left(\sum_{k=1}^N (C_{0k} C_{1k} \bullet \dot{\tilde{\varphi}}_x(z) + (C_{1k} \bullet \dot{\tilde{\varphi}}_x(z))(C_{1k} \bullet \tilde{\varphi}_x(z))) \right) \quad (11)$$

En effet, le gradient est un polynôme de degré 3 et il n'y a pas de solution analytique directe. L'initialisation de la minimisation par descente de gradient est donnée par la forme moyenne du modèle $X = (\bar{c}_{n+1}, \dots, \bar{c}_{n+m})$ pour la partie inconnue.

3. Résultats

3.1 Données synthétiques

La reconstruction des données manquantes a été appliquée à des jeux de données synthétiques présentant un caractère non-linéaire (fig.1).

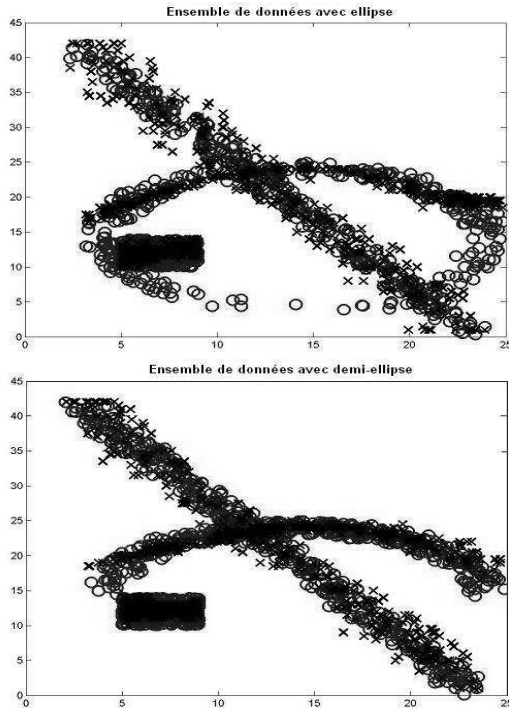


FIG. 1 : Jeux de données synthétiques. 3 points avec des relations linéaires et non-linéaires. Les cercles correspondent aux données initiales, les croix aux données reconstruites quand 3 valeurs sont manquantes.

Dans ce premier test, un ensemble de données composées de trios points (c.-a.-d.. six valeurs) est généré (fig 1). Trois paramètres sont nécessaires à la description de ces données, le nombre optimal de paramètres de variabilité est donc de 3 pour l'ACP et l'ACP à noyaux.

- 1 Parmi les données synthétiques, un point est une constante. Ce point devrait être prédit facilement de par sa valeur moyenne.
- 2 Les variations d'un autre point sont linéaires. L'ACP linéaire comme l'ACP à noyaux devrait le prédire avec une bonne précision.
- 3 Les variations du dernier point sont non-linéaires. Ce point décrit une ellipse. Un premier ensemble de données décrit une ellipse complète avec donc une indétermination sur l'axe y quand x est connu. Un deuxième ensemble de données décrit une demi-ellipse où il n'y a plus d'indétermination.

Un bruit indépendant uniforme est ajouté à chacun des points. Les modèles ACP et ACP à noyaux sont appris sur une base de données de 50 exemples et testés sur des ensembles de 300 exemples. Dans ce test de reconstruction, la seconde coordonnée de chaque point est supprimée et les données manquantes sont estimées par le modèle.

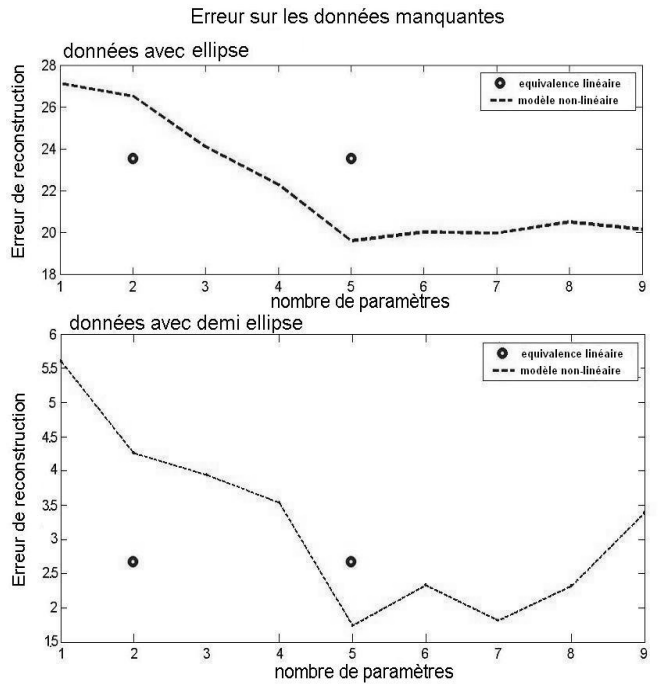


FIG. 2 : Erreur de reconstruction pour 3 points manquants

Tout d'abord, l'expression à minimiser a bien un minimum et la largeur de ce minimum correspond à la largeur du bruit ajouté. L'erreur sur les inconnues estimées est résumée dans la figure 2. Les résultats obtenus montrent l'avantage de la méthode non linéaire. Le caractère non-linéaire des données est pris en compte dans le modèle polynomial et permet un gain de 4 mm sur l'erreur de reconstruction du jeu avec l'ellipse complète. Un gain est aussi observé pour le jeu de données avec la demi ellipse.

Par contre en termes computationnels, il faut étendre le nombre de paramètre pour obtenir ce résultat. En effet, de par la projection dans le noyau polynomial, une seule donnée manquante affecte toutes les composantes qui en sont tirées (x , x^2 , x_1x ...). Ainsi il ne reste que 9 neufs paramètres de variabilités libres pour 3 valeurs manquantes (5 pour 4 valeurs manquantes et 2 pour 5 valeurs manquantes). Pour le modèle linéaire équivalent, il existe 3 paramètres de variabilité pour 3 données manquantes (2 paramètres pour 4 valeurs et 1 paramètres pour 5 valeurs).

3.2 Données réelles

L'un des objets d'étude de la céphalométrie est la croissance du crane des jeunes enfants afin d'améliorer la thérapie en orthodontie [2,8]. La céphalométrie est basée sur le placement d'amers, les points céphalométriques, sur des téléradiographies, images deux dimensions aux rayons X de la vue sagittale du crâne (FIG.3). Ces points sont utilisés pour le calcul de traits, tels que la longueur d'un segment ou l'angle entre deux lignes. L'interprétation de ces traits est utilisée pour diagnostiquer la déviation de la forme du patient de la forme idéale. Cette interprétation est aussi utilisée lors de l'évaluation d'un traitement orthodontique. Les points céphalométriques sont liés à la forme du contour crânien. Dans ce contexte le contour crânien est échantillonné et les amers sont apprises avec le contour crânien [9].



FIG. 3 : Céphalogramme, contour crânien, points réels (blancs) et estimé (noirs).

Placer les amers d'un nouveau céphalogramme, connaissant le contour revient à déterminer la partie inconnue (les amers céphalométriques) d'une détermination du modèle à l'aide du modèle statistique et de la partie connue (le contour crânien).

La base d'apprentissage est constituée de 70 individus pour seulement 8 exemples de test. Sur ces données réelles, l'erreur de prédiction des sur les points céphalométriques est 3,88 mm pour l'ACP linéaire et de 2.25 mm pour l'ACP à Noyau polynomial de degré 2. De plus, Sur certains points, l'erreur de reconstruction est équivalente à la variabilité inter-expert de 1 mm.

4. Conclusion

Dans cet article, un modèle de forme basé sur un noyau polynomial est présenté. Ce modèle non-linéaire est utilisé pour résoudre un problème de données manquantes dans une image.

L'équation de minimisation trouvée peut être résolue numériquement dans le cas générale. Les paramètres de forme et les données manquantes sont alors estimés conjointement. Dans le cadre des noyaux polynomiaux, il s'agit de trouver les racines d'une équation polynomiale et les solutions les plus robustes.

Ce modèle basé sur des noyaux polynomiaux a été comparé à un modèle ACP linéaire classique sur des données synthétiques et réelles. Quand des relations non-linéaires sont présentes entre les données, celles-ci sont représentées avec une meilleur précision par le modèle à noyau que par le modèle linéaire, au prix d'un coût computationnel plus grand.

Références

- [1] T.F.Coates, G.J. Edwards, C.J.Taylor. *Active Appearance Models*, IEEE PAMI, Vol. 23 (6), pp. 681-685, 2001.
- [2] T.J. Hutton, S. Cunningham, P. Hammond. *An Evaluation of Active Shape Models for the Automatic Identification of Cephalometric Landmarks*. European Journal of Orthodontics, Vol. 22(5), pp. 499-508, 2000.
- [3] S. Mika, B. Schölkopf, A.J. Smola, K.-R. Müller, M. Scholz, and G. Rätsch. *Kernel PCA and de-noising in feature spaces*. In M.S. Kearns, S.A. Solla, and D.A. Cohn, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 11*, pages 536-542. MIT Press, 1999.
- [4] B. Schölkopf, A. Smola et K. Müller. *Non linear component Analysis as a Kernel Eigenvalue Problem*. Neural Computation, 10(5): 1299-1319, 1998.
- [5] J. T. Kwok et Ivor W. Tsang. *The Pre-Image Problem in Kernel Methods*. Proceedings of ICML 2003 : pp.408-415, 2003.
- [6] Bakir, G.H., J. Weston and B. Schölkopf: *Learning to Find Pre-Images*. Advances in Neural Information Processing Systems, 16, 449-456. (Eds.) Thrun, S., L. Saul and B. Schölkopf, MIT Press, Cambridge, MA, USA (2004)
- [7] S. Sclaroff, AP.Pentland, *Modal Matching for Correspondence and Recognition*. IEEE Transactions on Pattern Recognition and Machine Intelligence, 17(6):545-561, 1995.
- [8] B. Romaniuk, M. Desvignes, M. Revenu, M.J. Deshayes *Linear and Non-Linear Model for Statistical Localization of Landmarks*, ICPR, Vol. 4, pp. 393-396, 2002
- [9] B. Romaniuk, M. Desvignes, *Contour Tracking by Minimal Cost Path Approach. Application to Cephalometry*. International Conference on Image Processing ICIP, Singapore, October 2004