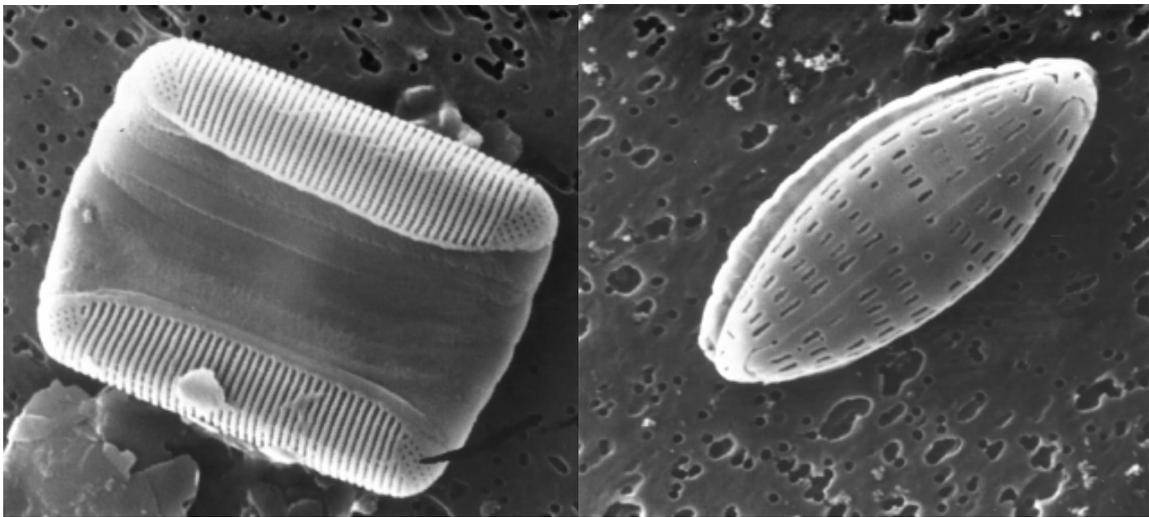


Identifikation von Diatomeen durch Gittergraph-Matching



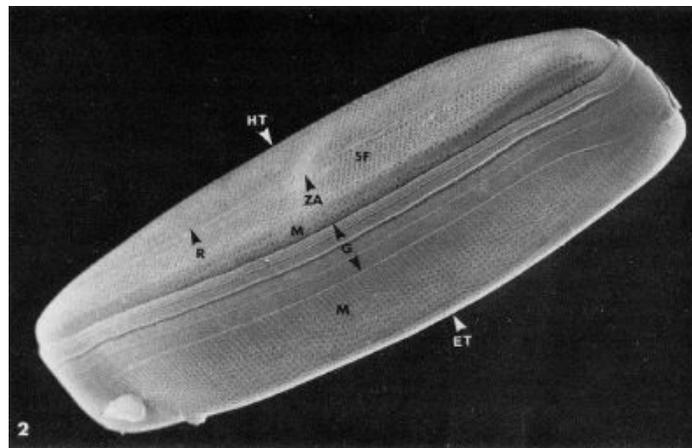
David Rudolph

Diatomeen

- **Was sind Diatomeen?**

Diatomeen sind einzellige Kieselalgen, die überall dort zu finden sind, wo es Feuchtigkeit und genügend Licht für die Photosynthese gibt. Vorsichtige Schätzungen beziffern die Anzahl der verschiedenen Spezies auf 15000 bis 20000. Die Spezies unterscheiden sich zum Teil erheblich durch ihr Erscheinungsbild.

Allen Diatomeenspezies gemein ist jedoch der charakteristische Aufbau aus zwei Schalen aus Siliziumdioxid. Die Schalen sind wie auf dem unten stehenden Bild zu erkennen ineinander gesteckt, wie etwa bei einer Spanschachtel.



Die Schalen sind sehr widerstandsfähig und überstehen sogar chemische Reinigungen. Das macht die Diatomeen sehr interessant für diverse Wissenschaftszweige.

- **Warum sollen Diatomeen automatisch identifiziert werden?**

Das automatische Identifizieren der Diatomeen ist sehr sinnvoll, da es meist nicht darum geht ein einziges Exemplar einer bestimmten Untergattung von Diatomeen zuzuordnen, sondern die Quantität verschiedener Untergattungen zu ermitteln, da dies viele Informationen über das untersuchte Gewässer enthält.

So kann zum Beispiel die mehrfache Untersuchung der Diatomeen eines Gewässers in bestimmten Zeitintervallen Aussagen über die Veränderung der Wasserqualität bereitstellen, was sehr interessant für Umweltmonitoring und die Klimaforschung ist.

Ein weiteres Anwendungsfeld findet man in der Forensik. So kann die Untersuchung der Diatomeen in der Lunge einer Leiche dabei helfen herauszufinden, in welchem Gewässer die Person ertrunken ist.

Das Ziel der automatischen Identifizierung von Diatomeen ist also in jedem Fall eine Vielzahl von untersuchten Exemplaren in Klassen einzuordnen. Dabei ist zu beachten, dass der Begriff der Klasse kein korrekter Begriff aus der Biologie ist sondern vielmehr eine

zunächst willkürliche Einteilung ist. Die Definition dieser Klassen kann dann je nach Anwendung angepasst werden und z.B. die Spezies definieren.

- **Wie?**

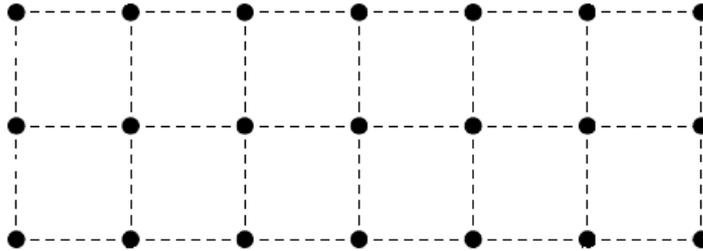
Um ein Exemplar in eine definierte Klasse von Diatomeen, wird die morphologische Struktur der Schalen mit Referenzdiatomeen aller Klassen verglichen. Zu jeder Klasse werden also einige Exemplare vor der Untersuchung in einer Datenbank erfasst.

Dabei wird nur die morphologische Struktur der Exemplare in der Datenbank hinterlegt. Die Informationen über die morphologische Struktur werden in einem Grid-Graph, auch als Gittergraph bekannt, gespeichert.

Grid Graphen und Matching

Grid Graph

Ein Grid Graph ist ein Graph, bei dem die Knoten in einem Raster angeordnet sind. Alle Knoten haben zu ihren horizontalen und vertikalen Nachbarknoten Kanten.



Grid Graph Matching

Die Hauptanwendung des Grid Graph Matching ist die Gesichtserkennung. Dabei werden zwei Ansätze verfolgt. Zum einen werden zwei Gesichter anhand von geometrischen Informationen verglichen. Das bedeutet, dass zum Beispiel das Verhältnis des Abstands der Augen zum Abstand der Nasenspitze zur Kinnschneise verglichen wird.

Zum anderen werden die Grauwerte miteinander verglichen. Eine Kombination aus beiden Ansätzen kann mit Hilfe von Gaborfiltern erreicht werden.

Trainingsphase

In der Trainingsphase werden über eine Reihe von Gesichtern Raster gelegt und die gewonnenen Informationen an den Rasterpunkten in einer Datenbank abgelegt.

Recallphase

In der Recallphase wird der Graph des Referenzbildes mit den Graphen der Datenbank verglichen. Dabei wird das Referenzbild verformt bis die Kostenfunktion minimal wird.

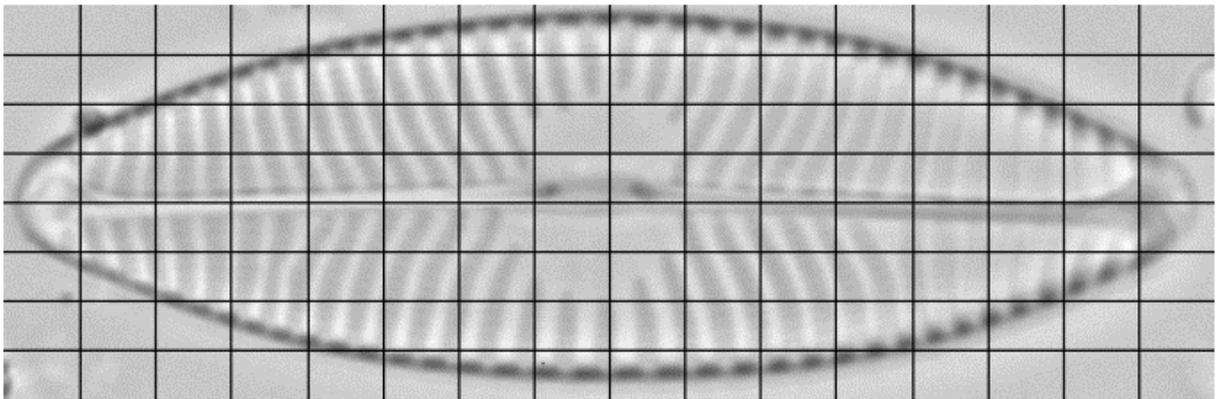
Kostenfunktion

Die Kostenfunktion gibt Auskunft über den Grad der Ungleichheit zwischen dem Referenzgraph und einem Graph aus der Datenbank.

Diatomeen → Grid Graphen

Es stellt sich nun die Frage wie die Informationen eines Diatoms in einen Gittergraphen übertragen werden und welche Informationen von Interesse sind oder besonders charakteristisch sind.

Die Schalen der Diatomeen bestehen aus Bereichen mit relativ homogener Struktur. Aus diesem Grund eignen sich Gittergraphen um die räumlichen Beziehungen zwischen diesen Bereichen zu beschreiben.



In jedem durch die Rasterung definierten Bereich werden Eigenschaften der Textur ermittelt und im entsprechenden Knoten des Graphen abgelegt. Diese Informationen werden dafür in einem Eigenschaftensvektor abgelegt der dem Knoten zugeordnet wird.

Bei den Eigenschaften handelt es sich um 13 Eigenschaften die mit co-occurrence Matrizen berechnet werden. Zusätzlich dazu werden noch vier weitere Eigenschaften aus den Standardabweichungen verschiedener Gabor-Filter berechnet.

Wie bereits oben erwähnt sollen die einzelnen Diatomeenexemplare vorher definierten Klassen zugeordnet werden. Dazu werden in der Trainingsphase die Informationen der bekannten Exemplare erfasst und den definierten Klassen entsprechend gruppiert in der Datenbank abgelegt. Beim Matching wird dann untersucht in welcher Gruppe sich die Exemplare mit der höchsten Ähnlichkeit befinden.

Bei dieser Version des Mappings der Diatomeen auf den Graph ist eine Rotationsinvarianz nicht vorgesehen. Das bedeutet, dass die Bilder der vor dem Mapping Diatomeen von Hand bearbeitet werden müssen.

Matching

Beim Matching geht es nun darum den zum Inputgraphen am besten passenden Graphen aus der Datenbank zu finden. Dazu wird zwischen dem Inputgraphen und allen Graphen der Datenbank die Distanzfunktion berechnet.

Distanzfunktion (Graphen)

$$\delta(G_1, G_2) = \frac{1}{|M(V_1, V_2)|} \sum_{(v_i, v_j) \in M(V_1, V_2)} d(v_i, v_j)$$

ist die Distanz zwischen zwei Graphen G_1 und G_2 , wobei:

- $d(v_i, v_j)$ Distanz der Eigenschaftsvektoren zweier Knoten
- $M(V_1, V_2)$ Menge aller Knotenpaare v_i aus V_1 und v_j aus V_2 , die eine vergleichbare Position haben. D.h. $|p_i - p_j| < \varepsilon$, wenn p_i die Position von v_i ist.
- Beim Standard-Matching werden nur Knoten mit identischer Position miteinander verglichen. Darum, $\varepsilon = 0$
- Um beim Matching eine Größeninvarianz zu erreichen, wird um das Diatom eine Bounding-Box gelegt.

Standard-Matching

Distanzfunktion (Knoten)

$$d(v_i, v_j) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N |f_{i,n} - f_{j,n}|$$

ist die Distanz zweier Knoten, wobei:

- N ist die Anzahl der Eigenschaften die den Knoten zugeordnet werden.
- $f_{i,n}$ ist die n -te Eigenschaft des Knoten v_i .

Die Distanzfunktion für Knoten des Standard-Matchings berechnet also den Mittelwert der Differenzen der vergleichbaren Eigenschaften zweier Knoten. Das macht aber nur Sinn wenn die Werte der Eigenschaften entsprechend normalisiert sind.

Normalisierung

Die verschiedenen Eigenschaften haben keinen einheitlichen Wertebereich. Damit sind sie schlecht miteinander zu vergleichen, da es bei der Mittelwertberechnung bei der Distanzfunktion zu einer impliziten Gewichtung der Eigenschaften kommt. Deshalb werden die Werte der Eigenschaften normalisiert.

Der normalisierten Werte sind alle im Intervall $[0,1]$. Für jeden Wert f wird der normalisierte Wert f' wie folgt berechnet.

$$f' = \frac{f - f_{min}}{f_{max} - f_{min}}$$

wobei:

- f_{min} ist der kleinste ermittelte Wert der Eigenschaft in der Trainingsphase
- f_{max} ist der größte ermittelte Wert der Eigenschaft in der Trainingsphase
- Wenn ein Wert f normalisiert werden soll, der kleiner ist als der kleinste ermittelte Wert aus der Trainingsmenge, so wird f' automatisch auf 0 gesetzt. Bei einem Wert größer als der größte der Trainingsmenge auf 1.

Flexibles Matching

In der allgemeinen Distanzfunktion δ für Graphen ist auch das Vergleichen von Knoten vorgesehen, die nicht dieselbe Position haben. Das macht sich das flexible Matching zu nutze. Beim flexiblen Matching darf die Position jedes Punktes auf dem Inputbild geringfügig variiert werden. Dabei werden aber zusätzliche Kosten t berechnet.

$$t(v_i, v_j) = t(v_j) = \begin{cases} c & \text{if } v_j \text{ has been translated} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

wobei v_i zu einem Graph aus der Datenbank und v_j zum Input-Graphen gehört.

Hierbei handelt es sich um ein ziemlich primitives Kostenberechnungsmodell, da der Betrag der Translation nicht in den Kosten widerspiegelt. Es zählt nur die Tatsache, ob eine Translation auf den Punkt angewendet wurde oder nicht. Dennoch genügt das Modell um zu einem guten Matchingergebnis zu gelangen.

Distanzfunktion (Knoten)

Die Distanzfunktion d' zweier Knoten unter Berücksichtigung der zusätzlichen Kosten für eventuelle Punkttranslationen für das Flexible Matching ist wie folgt definiert:

$$d'(v_i, v_j) = \min_T \left[\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (|f_{i,n} - f_{j,n}|) + t(v_i, v_j) \right]$$

ist die Distanz zweier Knoten, wobei:

- N ist die Anzahl der Eigenschaften die einem Knoten zugeordnet werden.
- $F_{i,n}$ ist die n -te Eigenschaft des Knoten v_i .
- T ist die Menge aller möglichen Translationen die für einen Punkt zugelassen sind.

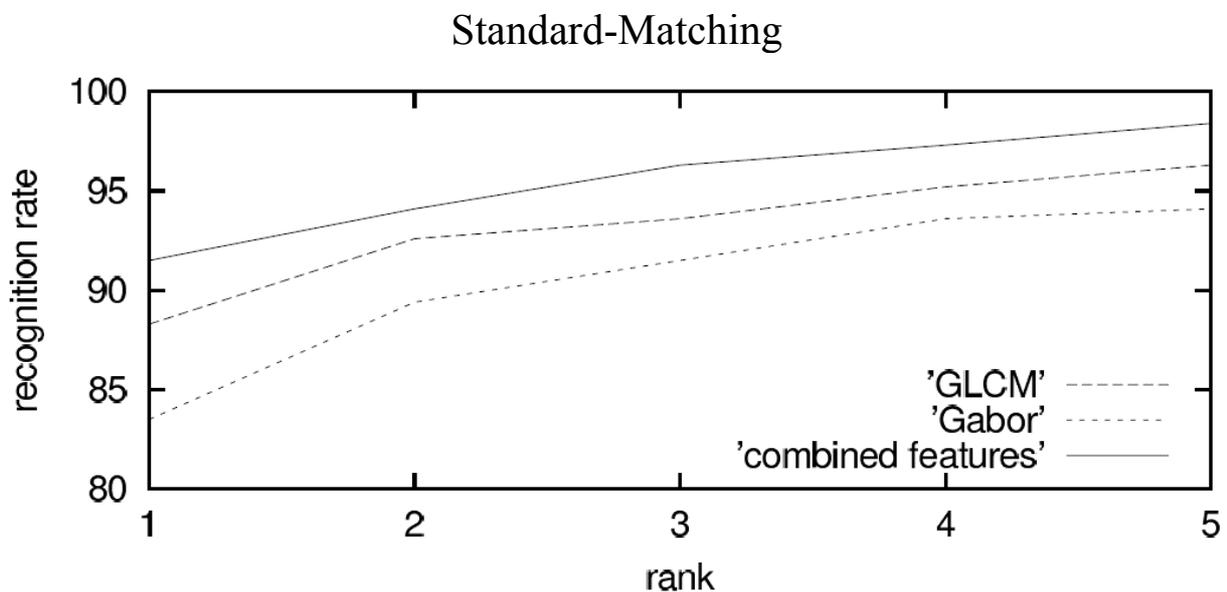
Für die Berechnung der Distanz zweier Knoten werden also alle möglichen Translationen ausprobiert und die kleinste Distanz gewählt.

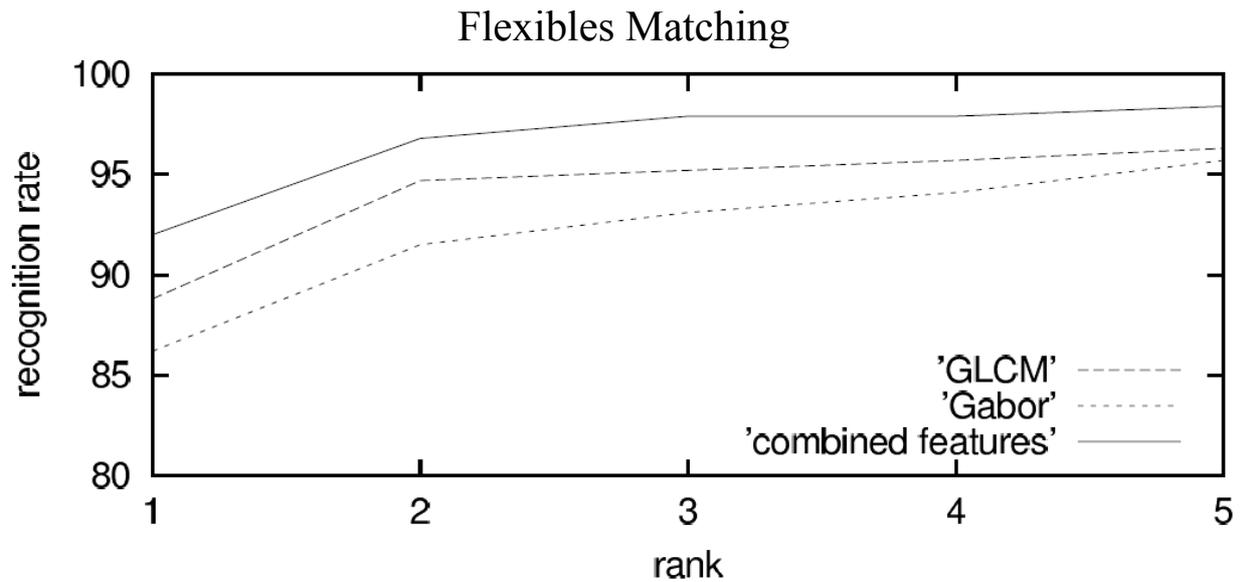
Resultate

Um die beiden erläuterten Matchingverfahren zu testen, wurde eine Versuchsdatenbank aufgebaut. Diese besteht aus 188 gespeicherten Bildern, wobei jedes ein Diatomexemplar repräsentiert. Die Bilder sind jeweils in Form eines Gittergraphen gespeichert. Die 188 Exemplare sind je einer, von 38 definierten Klassen von Diatomeen, zugeordnet. Jede Klasse wird durch 3-9 Bilder repräsentiert.

Das verwendete Testverfahren mit dem die Zuverlässigkeit der Matchingverfahren getestet wird, bezeichnet man als „leave-on-out“. Dabei wird nacheinander jedes Objekt einmal aus der Datenbank entfernt und die zugehörige Klasse als unbekannt angenommen. Danach wird für dieses Objekt das ähnlichste der noch 187 Objekte in der Datenbank gesucht, und dessen Klasse dem extrahierten Objekt zugeordnet.

In den beiden unten stehenden Diagrammen sind die Wiedererkennungsraten der Matchingverfahren dargestellt. Im ersten Diagramm wird das Standard-Matching und im zweiten das flexible Matching dargestellt. In den Diagrammen selbst wird noch einmal zwischen unterschiedlichen Versionen des Matchings unterschieden. Dabei liegt der Unterschied bei den für die Distanzbestimmung verwendeten Eigenschaften der Punkte. Zum einen werden nur Graulevel-Eigenschaften (GLCM) oder durch Gaborfilter erzeugte Eigenschaften (Gabor) und zum anderen die Kombination beider Eigenschaftentypen dargestellt.





Auf der X-Achse wird der ‚Rang‘ der Wiedererkennung dargestellt. Der Rang ist die akkumulierte Wiedererkennungsrate. Zum Beispiel bedeutet Rang 2 die Wahrscheinlichkeit, dass das zu klassifizierende Objekt zur Klasse des für am ähnlichsten oder zweitähnlichsten befundenen Objekts der Datenbank gehört.

Aus den Diagrammen geht hervor, dass das Flexible Matching dem Standardmatching, was die Wiedererkennungsrate betrifft, überlegen ist. Weiterhin erkennt man, dass die Verwendung der kombinierten Eigenschaftentypen zu einer höheren Erkennungsrate führt als das Verwenden einzelner Eigenschaftentypen. Beim Verwenden nur eines Eigenschaftentyps erkennt man die Überlegenheit der Grauwerteigenschaften gegenüber den Gabor-Eigenschaften.

Zusammenfassung

Offenbar scheint sich das Grid Graph Matching mit einer experimentellen Wiedererkennungsrates von über 90% gut für die Klassifizierung von Diatomeen zu eignen. Das liegt wahrscheinlich daran, dass die Morphologie für die Diatomeen sehr aussagekräftig ist, und das Grid Graph Matching gut für Morphologievergleiche geeignet ist.

Im speziellen hat sich das Flexible Grid Graph Matching bewährt. Vielleicht kann die Wiedererkennungsrates noch gesteigert werden, wenn die Kostenfunktion für die Punkttranslation so überarbeitet wird, dass Kosten proportional abhängig von der Entfernung zum Ursprungspunkt sind.

Dennoch sei erwähnt, dass es sich bei der experimentellen Ermittlung der Wiedererkennungsrates um eine verhältnismäßig kleine Datenbank mit wenigen Klassen handelt. Zwar steigt vermutlich die Wiedererkennungsrates wenn die Menge der Repräsentanten pro Klasse ansteigt, aber eine Vergrößerung der Datenbank bringt auch zusätzliche Klassen mit sich. Das würde die Wiedererkennungsrates wiederum stark verringern.

Damit sei zusammenfassend zur Wiedererkennungsrates gesagt, dass die experimentellen Ergebnisse, im speziellen die konkreten Werte, nicht auf die Allgemeinheit der Anwendungen übertragbar sind. Aber für die Bewertung und den Vergleich der Algorithmen untereinander kann man die experimentellen Ergebnisse schon verwenden.

Das Ziel wird in Zukunft sein, den beschriebenen Algorithmus mit anderen Erkennungsmechanismen zu kombinieren um die Wiedererkennungsrates zu steigern.

Quellen

Stefan Fischer / Kaspar Gilomen / Horst Bunke: Identification of diatoms by grid graph matching. LNCS 2396 (2002), S. 94-103.

Bilder

<http://nat-meer.ifm-geomar.de/OzeanOnline/diatom/diatom.htm>

letzter Zugriff: 1.2.2007

<http://www.mikroskopie-muenchen.de/diatomeen.html>

letzter Zugriff: 1.2.2007