

基于决策图的三维模型无监督聚类算法

徐欣¹, 舒振宇², 陈双敏^{1*}, 辛士庆³, 屠长河³

(1. 宁波大学 信息科学与工程学院, 浙江 宁波 315211; 2. 浙江大学宁波理工学院 信息科学与工程学院, 浙江 宁波 315100; 3. 山东大学 计算机科学与技术学院, 山东 济南 250101)

摘要: 针对三维模型的无监督聚类问题, 目前广泛采用基于词袋的方法具有两大缺陷, 既无法准确知道聚类的数目, 也不能适用于结构复杂(比如呈流形结构)的形状空间. 为此, 本文采用两大方法加以改进, 其一利用有流形聚类功能的决策图方法取代 K-means, 其二使用核函数更加有效地衡量三维形状之间的差异. 在 SHREC2010 库和 SHREC2011 库上的大量实验结果表明, 两种技巧的有机结合使聚类的精确度和效率得到了显著的提升.

关键词: 核函数; 无监督聚类; 三维模型; 决策图; 多特征融合

中图分类号: TP301.6

文献标志码: A

文章编号: 1001-5132 (2018) 04-0046-06

随着三维模型的数量日渐增多, 对庞大的三维模型数据集进行准确聚类也显得愈渐重要^[1-2].

三维模型的聚类算法按照对象分布特点可分成两大类: (1) 对于点集线性可分情况, 此类方法简单地将三维模型表示成对应的特征向量, 并利用经典聚类方法作用在三维物体上完成其聚类. 如 Ip 等^[1]提出的 SVM 方法, 石源等^[3]提出的粒子群聚类等. (2) 针对复杂点集的聚类方法, 对于不满足线性可分的点集, 要想保证准确的聚类结果, 需将其映射到合适的度量空间中去. 如 McWherter 等^[4]提出基于三维模型属性邻接图的聚类方法, 首先提取模型的属性邻接图, 然后利用图谱变换得到特征向量, 通过降维将形状空间映射到低维度空间中, 获取最终特征向量, 从而完成聚类. 如张媛媛等^[5]提出了一种基于非参数贝叶斯模型的框架的聚类算法. 除此之外, 流形聚类也被广泛使用. 如 Li 等^[6]通过流形学习提取出 3D 模型的主要特征, 再利用分类器学习得到最终结果. 在本文算法中, 我们将形状空间通过定义新的流形测度, 并通过核函数映射到合适的度量空间中, 以便更好地刻画模型之间的形状差异, 使得不同的流形结构中

的模型间差异变大, 而同个流形结构中的差异变小, 以此来扩大类间差距, 缩短类内差距, 使近者更近, 远者更远.

本文算法主要流程如下: 给定一组三维模型, 首先计算每个三维模型的多种形状特征, 然后利用核函数将模型对应的特征向量在流形结构下的度量映射到合适的形状空间中, 得到相似度矩阵, 最后在目标度量空间中, 利用决策图进行三维模型的无监督聚类.

在公开模型库上的大量实验数据表明, 本文提出的基于决策图的三维模型库无监督聚类算法不但比传统算法的性能有了较大改进, 而且还具有直观和收敛速度快等优点.

1 基于核函数的相似性度量定义

1.1 基于流形距离的测度

聚类的根本依据是样本之间的相似性, 为了使聚类分析过程能在精准的量化意义下完成, 必须对样本点之间的相似性进行适当的定义^[7].

为更好地处理呈流形分布的复杂样本, 首先定义流形结构中任意 2 个数据点 x_i 与 x_j 之间的线

收稿日期: 2017-10-17.

宁波大学学报(理工版) 网址: <http://journalg.nbu.edu.cn/>

基金项目: 国家自然科学基金(61772016, 61332015); 浙江省自然科学基金(LY17F020018); 宁波市自然科学基金(2017A610115); 浙江大学国家重点实验室开放基金(A1702).

第一作者: 徐欣(1995-), 女, 安徽合肥人, 在读硕士研究生, 主要研究方向: 人工智能下的三维模型. E-mail: 765641612@qq.com

*通信作者: 陈双敏(1982-), 女, 浙江宁海人, 讲师, 主要研究方向: 计算机图形学、机器学习. E-mail: chenshuangmin@nbu.edu.cn

段距离 $L(x_i, x_j)$ 如下:

$$L(x_i, x_j) = e^{\lambda d(x_i, x_j)} - 1,$$

其中, $d(x_i, x_j)$ 即点 x_i 与 x_j 间的欧氏距离; $\lambda > 1$ 为缩放系数, 通过调整缩放系数的大小可以对点间的线段距离进行放缩.

基于上述定义, 我们将样本点视为顶点, 每一对点对间流形结构中的线段距离作为边集合 $E = \{W_{ij}\}$, 并以此构成无向图 $G = (V, E)$. 令 $\pi = \{p_1, p_2, \dots, p_t\} \in V^t$ 表示图 G 中一条从点 p_1 到点 p_t 的路径, 进一步定义新的距离测度 D_{ij} 如下:

$$D_{ij} = \min_{\pi \in \Pi_{i,j}} \sum_{k=1}^{t-1} L(p_k, p_{k+1}), \quad (1)$$

其中, 边 $(p_k, p_{k+1}) \in E$, $1 \leq k < t-1$, $t = |\pi|$, $\Pi_{i,j}$ 表示数据点 x_i 与 x_j 间所有路径的集合.

测度 D_{ij} 通过衡量流形结构中任意两点间的最短距离, 能够更深入地挖掘出数据集上各点内在相互关系. 如图1中两类三维模型特征向量的数据点所示, 假设连接点 $b \rightarrow c$ 的路径只穿过数据点 d , 图上括号内上方数字为两点间的欧式距离, 下方数字为缩放系数取值为2时的流形测度 D_{ij} . 由图1中两种距离相比可以看出, 欧氏距离下 $b \rightarrow a$ 间距离小于 $b \rightarrow c$ 间距离, 通过我们新流形测度的定义后, 同一流形中点 $b \rightarrow c$ 的距离为点 $b \rightarrow d$ 与点 $d \rightarrow c$ 间距离的加和, 其值小于不同流形中点 $b \rightarrow a$ 间的距离. 此结果与我们预期效果相吻合, 放大了不同类别中特征向量间的距离, 缩小同一类中特征向量间距离, 为优化三维模型的聚类效果奠定了基础.

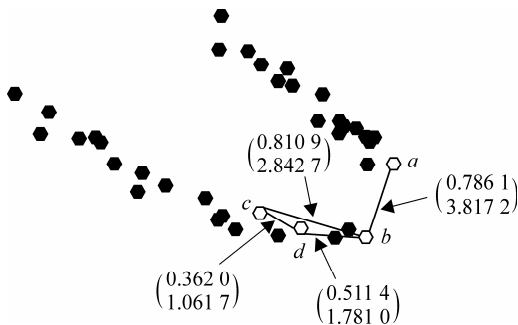


图1 两类三维模型对应数据点的两种距离测度

1.2 基于核函数的相似性度量

在新流形测度 D_{ij} 基础上, 我们采用高斯核函数将特征向量映射到目标度量空间中去, 在目标度量空间中定义任意2个特征向量间的相似度 A_{ij} :

$$A_{ij} = k(x_i, x_j) = \exp(-D_{ij}^2 / (2\sigma^2)). \quad (2)$$

通过上述相似度 A_{ij} 的定义式分析可知, 距离越远的样本点对间的相似性越低, 也就是说2个三维模型被聚类为一类的概率越小.

本文利用核技巧映射, 隐式地将三维模型特征向量从原样本空间嵌入到高维度空间中, 并基于三维模型的原始特征, 经过核函数映射, 改善了样本在高维空间中的分布情况, 一定程度地放大了对象间的差异性, 使得在新的度量空间中, 样本可分的概率变大, 最后在目标度量空间中进行聚类, 从而得到较好的聚类效果.

通过高斯核可以计算获得任意样本点对间的相似度, 得到所有三维模型间的相似性矩阵, 并以此作为后续算法的输入.

2 三维模型高维特征空间中的决策图聚类算法

2.1 算法概述

对于聚类问题, 一方面, 我们总希望聚类中心处在稠密的地方, 因此我们为度量空间中的每个点定义一个密度信息 ρ , 即:

$$\rho_i = \sum_j \chi(A_{ij} - A_c), \quad (3)$$

其中, 阈值 A_c 是将所有三维模型的相似度 A_{ij} 由大到小排列, 取总数2%位置的相似度数值得到,

$$\chi(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

以欧式距离下局部密度的定义为例, 图2(a)所示为在二维空间分布的12个数据点, 图中 $\rho_{i=5}$ 的含义是以点5为圆心, dc 为半径圆盘中心点的个数, 而图中 $\rho_{i=5} = 4$.

另一方面, 我们需要考虑目标度量空间中每个点 p 的归属. 结合层次聚类特点, 合理的做法是将 p 归于比 p 更有资格成为聚类中心且离 p 最近的那个点. 因此, 定义参数 δ_i 如下:

$$\delta_i = \max_{j: \rho_j > \rho_i} (A_{ij}), \quad (4)$$

δ_i 越大, 表示三维模型 x_i 与高密度三维模型的相似性越小, 则三维模型所对应的特征向量 x_i 成为聚类中心的概率越高. 其中, 若 x_i 的密度为全局最高(即 ρ_i 值全局最大时), 则令 δ_i 值为:

$$\delta_i | (\rho_i = \max_j \rho_j) = \min_j A_{ij}.$$

归一化后, 以 ρ_i 为横轴, δ_i 为纵轴可以做出

决策图^[8]. 图 2(a)的决策图如图 2(b)所示.

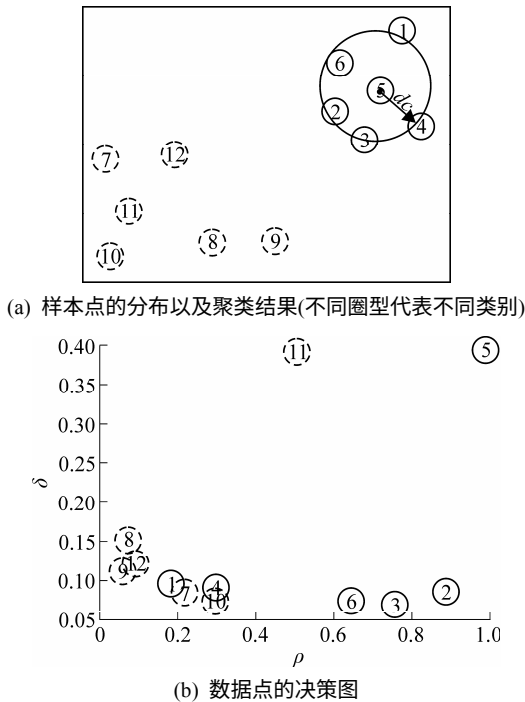


图 2 二维空间上数据点聚类过程说明

本文算法令 $\psi_i = \rho_i \times \delta_i$, 计算 ψ_i 值后, 再进行降序排列, 选择前若干个相应的三维模型作为最终的聚类中心. 之后, 再完成剩余三维模型的指派(即分类), 指派规则如下: 将剩余所有非聚类中心的特征向量 x_i 按 ψ_i 值递减顺序, 依次归类到大于该点局部密度 ρ_i 的特征向量集合, 以及 x_i 的相似度 A_{ij} 最高的所属类别中去.

2.2 算法具体实现

针对基于内容的三维模型的无监督聚类问题, 本文提出基于决策图的聚类算法, 通过对三维模型形状描述符提取的特征向量的无监督聚类, 即可完成对三维模型的自动聚类. 首先计算 3D 模型中几种特征描述符所对应的特征向量, 然后将其作为输入样本对象, 利用一种新的流形测度定义以及核函数, 得到任意 2 个三维模型间的相似度, 使得同一类中相似度变小, 而不同类中的相似度变大, 帮助分类器在目标度量空间中找到特征向量间的相互关系, 最后计算特征向量在目标分布空间的密度信息, 画出决策图, 确定模型聚类中心, 完成聚类.

本文算法步骤如下:

Step 1 选择特征描述符, 提取特征向量.

本文算法适用于任意个不同特征描述符, 结合经验分析以及实际实验效果对比, 选择形状直径函数(Shape Diameter Function, SDF)^[9]、高斯曲率(Gaussian Curvature, GC)^[10]、尺度无关的热核特征(Scale Invariant Heat Kernel Signature, SIHKS)^[11]和波核特征(Wave Kernel Signature, WKS)^[12]作为特征描述符.

首先利用这 4 种形状描述符计算出三维模型 i ($i = 1, 2, \dots, n$) 每个顶点上的特征值, 并对于三维模型表面的标量场特征进行描述, SDF、GC 通过构造直方图统计; 对于向量场特征描述符 SIHKS、WKS, 则可通过 Bag-of-Features 方法, 在每个模型上得到 4 个特征向量, 然后将对应的 4 种特征向量拼接起来, 形成一个维数更高、刻画模型几何属性更全面的融合特征向量 x_i ($i = 1, 2, \dots, n$), 其表征的是相应每个三维模型整体的几何信息.

Step 2 计算任意 2 个特征向量间新的流形测度 D_{ij} .

对已经得到的任意 2 个三维模型特征向量 x_i 和 x_j , 可通过式(1)计算得到 2 个特征向量对之间的流形测度 D_{ij} .

Step 3 计算相似度矩阵 A_{ij} .

通过高斯核函数, 取 σ 值为 1, 将流形测度 D_{ij} 代入式(2)中得到所有特征向量的相似度矩阵 A_{ij} .

Step 4 计算局部密度信息 ρ_i 及最短距离 δ_i .

将步骤 3 中任意 2 个特征向量之间的相似度 A_{ij} ($i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, n$) 代入式(3)和式(4), 计算每个特征向量 x_j 的局部密度 ρ_i , 及高于该局部密度的所有特征向量集合上与 x_j 间的最大相似度 δ_i .

Step 5 确定聚类中心.

由 ρ_i 和 δ_i 作出所有三维模型的决策图, 并根据 $\psi_i = \rho_i \times \delta_i$ 计算 ψ_i 的大小, 两者结合确定 C 个特征向量为聚类中心.

Step 6 指派剩余特征向量, 完成分类.

先将所有剩余点(即非聚类中心的特征向量)按照各自 ψ_i 从大到小递减排序, 然后依次遍历这些特征向量. 对于每个特征向量 x_j 遵循以下指派原则: 找到所有密度比该特征向量大的特征向量中距离其最近的那个特征向量 x'_i , 并将 x'_i 的类别赋值给 x_j 的所属类别, 遍历所有特征向量后完成三维模型的聚类.

3 实验结果及分析

3.1 本文算法实验结果

为了验证基于核函数和决策图的三维模型无监督聚类算法的有效性和真实性, 我们将在2个公开数据集 SHREC2010 和 SHREC2011 上进行实验. SHREC2010 公开库与 SHREC2011 公开库分别有 200 和 600 个不同的三维模型, 平均划分成 10 和 30 类.

本文实验中, 将每个 3D 模型的特征向量维度设定为 $L=80$. 针对每个模型库三维模型的聚类, 为了更加直观地展示聚类效果, 本文首先从数据库中随机选取 $C=7$ 类共 140 个三维模型, 利用本

文提出的基于核函数和决策图的三维模型聚类算法对其进行聚类, 结果如图 3(b)和图 4(b)所示, 通过多维标度分析, 将三维模型的高维特征向量降到二维空间中来表达. 从图 3(a)与图 4(a)中可以看出, 三维模型一共被分为 7 类, 与 $C=7$ 相一致. 最终聚类结果为图 3(b)和图 4(b), 图中不同形状代表了不同所属类簇, 通过模型分类效果以及结果统计, 所有三维模型被分成 7 类, 且每类都包含了 20 个, 算法效果合理, 结果准确, 与预期一致.

图 3(c)和 4(c)展示了本文算法在 2 个模型库上各类三维模型分类结果的平均准确率. 可以看出在聚类准确性上, 本文算法基本在每个类别上都有较高的性能. 在整个 SHREC2010 和 SHREC2011

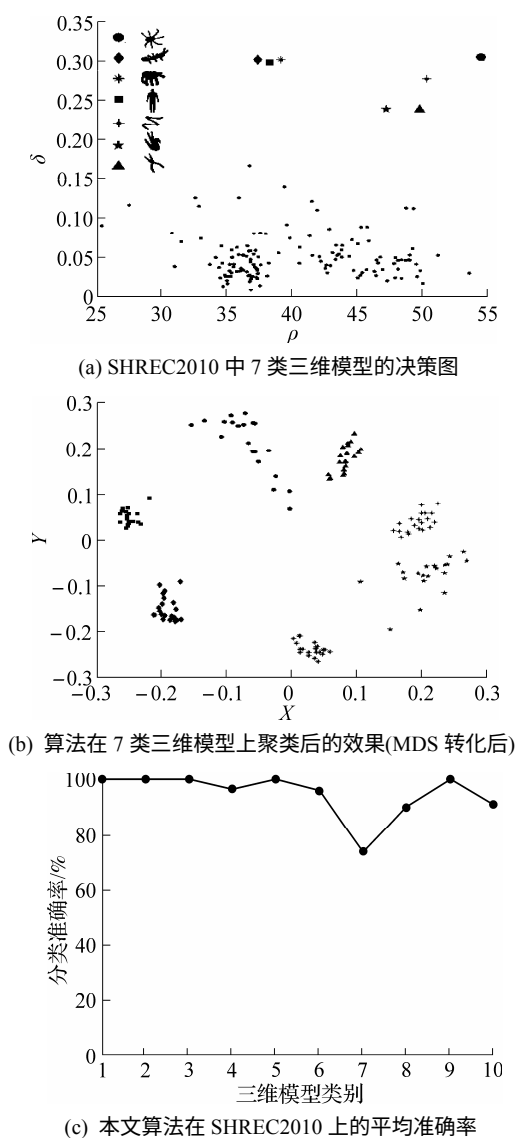


图3 SHREC2010 模型库上的聚类效果展示

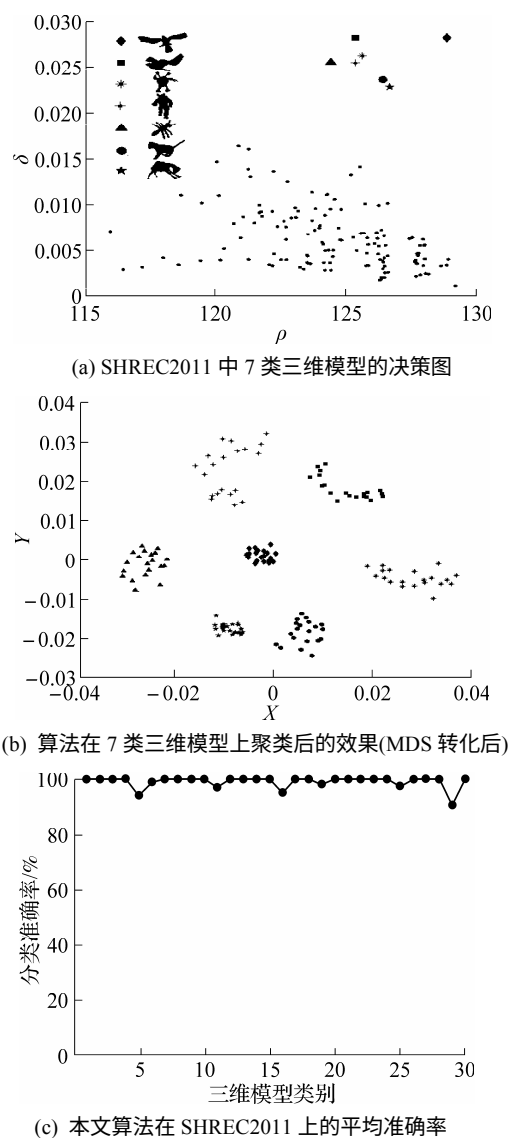


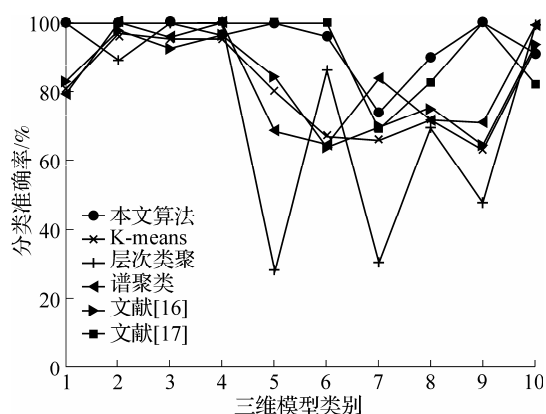
图4 SHREC2011 模型库上的聚类效果展示

库上的平均聚类精度可以达到 94.72%和 97.13%。

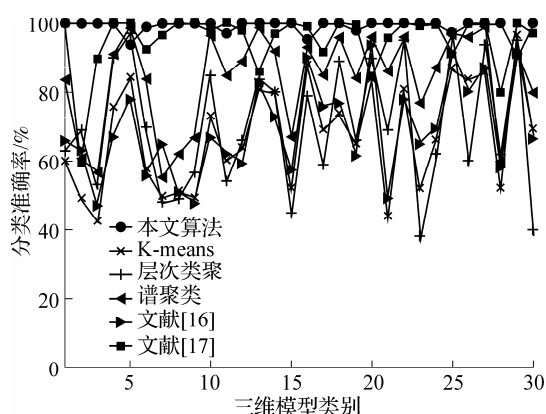
3.2 与其他三维模型聚类算法比较

经典的聚类算法包括 K-means 算法^[13]、层次聚类(hierarchical clustering)^[14]以及谱聚类(spectral clustering)^[15]等。通常,通过经典的聚类算法可以完成对三维模型的聚类。

在公开数据集 SHREC2010 和 SHREC2011 上分别进行实验,将提出的基于核函数和决策图的三维模型聚类算法与包括以上 3 种经典算法以及文献[16]提出的算法,文献[17]提出的算法等在内的 6 种算法进行了比较。统计实验结果如图 5 和表 1 所示,从结果可以看到,基于核函数和决策图三维模型聚类算法在大部分类别及整个模型库中的聚类精度都明显优于其他几类算法。



(a) 不同方法在 SHREC2010 上的分类准确率



(b) 不同方法在 SHREC2011 上的分类准确率

图 5 2 个数据集上的实验结果

4 结语

本文针对三维模型库上的聚类问题,基于决策图聚类的基础,通过核函数定义了一种新的相

表 1 2 个模型库上 6 种算法平均准确率比较 %

算法	本文算法	K-means	层次聚类
SHREC2010	94.72	80.78	75.06
SHREC2011	97.13	67.48	70.10
算法	谱聚类	文献[16]	文献[17]
SHREC2010	83.38	81.97	93.40
SHREC2011	83.69	69.33	91.46

似性度量,提出了一种新的三维模型聚类算法。与传统方法相比,不仅可以清晰直观地从决策图中确定聚类的类别数,突破了传统算法在这方面的束缚,并且通过新的流形测度定义和核函数的映射放大了不同类中数据的差距,缩小同一类的差异。因此聚类效果更加合理,准确率更高。除此以外,算法还具有普适性和鲁棒性强的优点,具有简单、准确、直观、训练速度快等良好性质。

与此同时,三维模型的聚类算法还有继续深入优化的空间。第一,核函数的选择还有继续探索的余地,根据具体数据自适应地选取核函数似乎更为可取;第二,在三维模型的形状描述方面,仍有继续改进的空间。可以想见,更好地描述将导致更精准的分类结果,这也是未来我们将要解决的问题。

参考文献:

- [1] Ip C Y, Regli W C. A 3D object classifier for discriminating manufacturing processes[J]. Computers & Graphics, 2006, 30(6):903-916.
- [2] 王小凤,周蓬勃,耿国华,等. 三维模型自动语义标注技术研究[EB/OL]. [2017-05-12]. http://xueshu.baidu.com/s?wd=paperuri%3A%28bb377e34a54d58de96476d51eb4396af%29&filter=sc_long_sign&tn=SE_xueshusource_2kduw22v&sc_vurl=http%3A%2F%2Fwww.paper.edu.cn%2Fhtml%2Freleasepaper%2F2012%2F02%2F653%2F&ie=utf-8&sc_us=16709243031499231572 2012.
- [3] 石源,莫蓉,常智勇,等. 基于聚类的模型数据集可视化与检索[J]. 计算机辅助设计与图形学学报, 2010, 22(11):1918-1924.
- [4] McWherter D, Peabody M, Shokoufandeh A C, et al. Database techniques for archival of solid models[C]. Symposium on Solid Modeling and Applications, 2001:78-87.
- [5] 张媛媛. 一种基于非参数贝叶斯模型的聚类算法[J]. 宁波大学学报(理工版), 2013, 26(4):24-28.

- [6] Li Z M, Wang D Q, Li B, et al. 3D model classification using salient features for content representation[C]. International Conference on Natural Computation, 2010:3541-3545.
- [7] Heyer L J, Kruglyak S. Exploring expression data: Identification and analysis of coexpressed genes[J]. Genome Research, 1999, 9(11):1106-1115.
- [8] Alex R, Alessandro L. Machine learning. Clustering by fast search and find of density peaks[J]. Science, 2014, 344(6191):1492-1496.
- [9] Shapira L, Shamir A, Cohen O D. Consistent mesh partitioning and skeletonisation using the shape diameter function[J]. The Visual Computer, 2008, 24(4):249-259
- [10] Gal R, Cohen O D. Salient geometric features for partial shape matching and similarity[J]. ACM Transactions on Graphics, 2006, 25(1):130-150.
- [11] Bronstein M M, Kokkinos I. Scale-invariant heat kernel signatures for non-rigid shape recognition[C]. Computer Vision and Pattern Recognition, 2010:1704-1711.
- [12] Aubry M, Schlickewei U, Cremers D. The wave kernel signature: A quantum mechanical approach to shape analysis[C]. IEEE International Conference on Computer Vision Workshops, 2012:1626-1633.
- [13] 易雁飞. 基于 K-Means 聚类的数据分析[J]. 现代制造技术与装备, 2017(4):8-9.
- [14] 缪元武. 基于层次聚类的数据分析[D]. 合肥: 安徽大学, 2013.
- [15] 刘紫涵, 吴鹏海, 吴艳兰. 三种谱聚类算法及其应用研究[J]. 计算机应用研究, 2017, 34(4):1026-1031.
- [16] Jayanti S, Kalyanaraman Y, Ramani K. Shape-based clustering for 3D CAD objects: A comparative study of effectiveness[J]. Computer-Aided Design, 2009, 41(12): 999-1007.
- [17] 舒振宇, 祁成武, 辛士庆, 等. 基于密度峰值的三维模型无监督分类算法[J]. 计算机辅助设计与图形学学报, 2016, 28(12):2142-2150.

Unsupervised clustering algorithm on 3D model library via decision graph

XU Xin¹, SHU Zhen-yu², CHEN Shuang-min^{1*}, XIN Shi-qing³, TU Chang-he³

(1.Faculty of Electrical Engineering and Computer Science, Ningbo University, Ningbo 315211, China;

2.School of Computer and Data Engineering, Ningbo Institute of Technology, Zhejiang University, Ningbo 315100, China;

3.College of Computer Science and Technology, Shandong University, Jinan 250101, China)

Abstract: In the unsupervised clustering problem of 3D models, the Bag-of-Word based approach has been identified with two major drawbacks: being unable to predict exactly the number of clusters, and unable to apply to a complicated shape space (e.g., with a manifold structure). Therefore, we propose two improvement techniques in this paper. Firstly, the decision graph technique, with a super ability in manifold clustering, is used as a substitute for K-means. Secondly, the difference between shapes is calculated using a combined kernel function, rather than measured in the original signature space. Extensive experimental results on SHREC2010 and SHREC2011 show that the coherent combination of the couple of techniques greatly improves clustering accuracy and efficiency.

Key words: kernel function; unsupervised clustering; 3D models; decision graph; fusing multiple features

(责任编辑 章践立)