几何微分算子的应用及离散化

李兴娥

摘要

几何微分算子是计算几何的基础, 它们在几何偏微分方程的研究、曲面处理和图像处理等领域有重要的应用. 本论文旨在研究几何微分算子的特征值问题和离散化方法, 并将其应用于生物分子形状匹配、点云曲面分割、曲面分割中, 具体研究内容分为以下四个部分:

第一项工作是研究基于 Laplace-Beltrami 算子的体特征函数的生物分子形状匹配方法. 首先, 假设生物分子是一族水平集曲面的集合, 其中, 水平集函数是生物分子的高斯密度函数, 在此区域上用基于 B 样条基函数的有限元方法求解 Laplace-Beltrami 算子的体特征函数. 然后, 利用多尺度的三维图像配准算法, 对给定的两个生物分子的向量值体特征函数建立映射关系, 使得在映射变换的作用下生物分子的特征得以匹配. 该方法具有如下优点: 第一, 基于 Laplace-Beltrami 算子的特征函数的等距形变不变性, 通过对齐体特征函数实现对生物分子的匹配. 第二, 采用了双映射的三维图像配准模型, 使能量泛函关于两个生物分子的向量值体特征函数是对称的. 第三, 多尺度下的特征配准使得生物分子的特征由粗到细进行匹配, 从而避免陷入局部极小. 第四, 为了使向量值体特征函数间的映射变换尽可能光滑, 我们引入了两个几何规整项来约束映射变换. 实验结果表明, 我们的配准方法是准确的、稳健的.

第二项工作是研究点云曲面的分割问题. 我们将点云曲面建模成一族水平集曲面的并集, 利用有限元方法求解 Laplace-Beltrami 算子的体特征函数, 通过分割体特征函数实现对点云曲面的分割. 本项工作的创新之处在于: 第一, 直接对点云数据进行分割, 而不需要将曲面网格化. 第二, 将 Laplace-Beltrami 算子的体特征函数作为点云曲面的特征信息, 突破了三维点云数据只包含位置信息的局限性. 第三, 基于经典的 Mumford-Shah 模型, 我们采用分片常函数来近似体特征函数, 提出了一个新的向量值体特征函数分割模型, 并对该模型提出了快速求解算法. 实验结果表明, 我们的点云曲面分割算法在准确性和计算速度方面都取得了令人满意的结果.

第三项工作是研究基于 Secondary Laplace 算子的特征函数的曲面分割方法. 基于曲面的第二基本形式, 我们提出了一类新的几何微分算子 Secondary Laplace 算子, 并用有限元方法求解其特征值问题, 将特征函数用于曲面分割. 该方法的创新之处有两点: 第一, 根据不同曲面的曲率特征, 如凹折痕和凸脊, 构造合理的 Secondary Laplace 算子. 第二, 对于四边形网格曲面, 采用基于 Catmull-Clark 细分基函数的有限元方法求解 Secondary Laplace 算子的特征值问题. 实验结果表明, 我们的曲面分割算法能够探测到曲面的与曲率相关的特征, 并沿这些特征线将曲面分割成有意义的几部分.

第四项工作是关于 Laplace-Beltrami 算子离散化的研究. 我们借助曲面上热传导方程的解析解构造了 Laplace-Beltrami 的有效的离散格式, 并证明了该离散算子的一致收敛性. 该方法具有如下特点: 第一, 对曲面上的热核进行离散化, 而已有的离散化方法 mesh Laplacian 是对平面上的热核进行离散化, 从而可以用于网格稀疏的陡峭曲面处理. 第二, 算法是局部的、自适应的、一致收敛的, 且对网格质量要求不高. 实验结果表明, 我们的离散化方法是稳健、有效的, 近似误差明显小于广泛采用的 cotangent 格式、mesh Laplacian 和 PCD Laplacian, 而且对陡峭曲面的情形, 当其他方法不能达到一致收敛时, 我们的方法依然一致收敛.

关键词: 几何微分算子, 特征值问题, 生物分子形状匹配, 点云曲面分割, 曲面分割, 离散化.