Geometrická a klasická morfometria

Interdisciplinárny prístup

Stanislav Katina

[1]Ústav matematiky a statistiky
Přírodovědecká fakulta
Masarykova Univerzita v Brne

Tento učební text vznikl za přispění Evropského sociálního fondu a státního rozpočtu ČR prostřednictvím Operačního programu Vzdělávání pro konkurenceschopnost v rámci projektu Univerzitní výuka matematiky v měnícím se světě (CZ.1.07/2.2.00/15.0203).

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Obsah

GM vs KM

Prečo KM na opis nestačí?

- **geometrická morfometria** (GM) a **klasická morfometria** (KM) umožňujú pochopiť tvarovú rozmanitosť objektov na základe matematického opisu a modelovania ich tvaru
- opis tvaru pomocou *absolútnych rozmerov* (lineárnych – dĺžky, výšky, šírky, tetivy, kolmice; oblúkových a obvodových mier, obsahov a objemov) a
- *relatívnych rozmerov* (indexov)
- tradičnými morfometrickými metódami nie je možné jednoducho graficky znázorniť tvar objektu, pretože medzi jednotlivými prvkami nie je zachovaný geometrický vzťah, a rozmery alebo uhly bez súradníc nestačia k zachyteniu geometrického tvaru objektu ako takého

GM vs KM

Prečo KM na opis nestačí?

- **v dvojdimenzionálnom priestore** (2D) dve na seba kolmé dĺžkové miery, ktoré môžu byť súčasťou objektu:
  1. kruhu, trojuholníka, štvorca, kosoštvorca, lichobežníka alebo deltoidu
  2. elipsy, trojuholníka, obdĺžnika, kosodĺžnika, lichobežníka alebo deltoidu
- **v trojdimenzionálnom priestore** (3D) sú to tri na seba kolmé dĺžkové miery, ktoré môžu byť súčasťou objektu
  1. kocky, rovnobežnostenu a kvapky vody
- dochádza tak k strate informácií o tvare ako celku

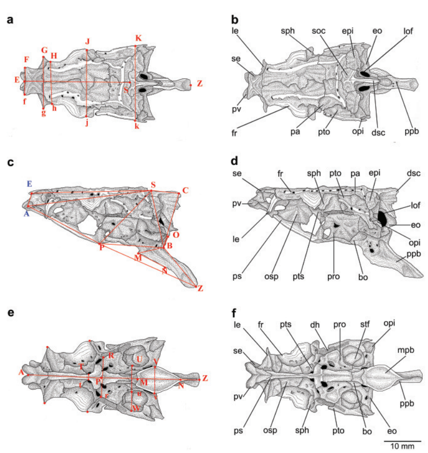
GM vs KM
Prečo KM na opis nestačí?

- **rekonštrukcia tvaru** by bola možná len vtedy, keby boli merané dĺžkové miery na objekte komplexne triangulované, triangulácia dopredu navrhnutá, *takže objekt by bolo možné takto z jednotlivých strán trojuholníkov spätne poskladať*
- takáto situácia je však prakticky nerealizovateľná pri takom komplexnom objekte ako je ľudská lebka
- za zjednodušenej situácie to však možné je

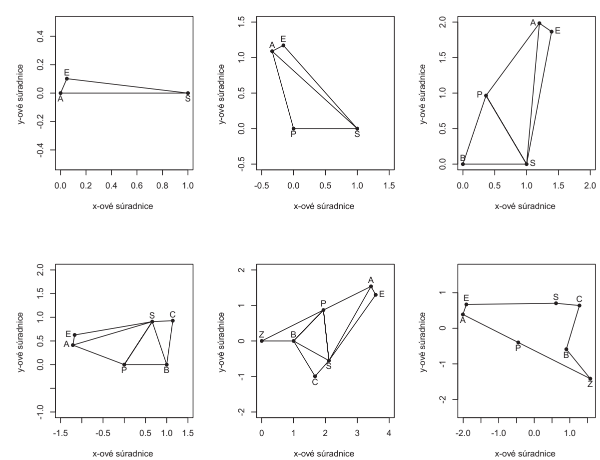
GM vs KM
GM neurokránia rýb z rodu *belica*

- neurocrania–**roaches** *Rutilus rutilus* and *Rutilus virgo* (*Actinopterygii: Cyprinidae*)
- *R. rutilus* ($n_{rr} = 30$) and *R. pigus* neurocrania ($n_{rp} = 50$), 27 measurements

GM vs KM
GM neurokránia rýb z rodu *belica*



GM vs KM
GM neurokránia rýb z rodu *belica*



GM vs KM
Prečo KM na opis nestačí?

- GM má teda oproti KM výhodu v tom, že poskytuje dobrú predstavu nielen o veľkosti objektu, ale najmä o jeho tvare
- ***tvar*** je pritom možné zobraziť ***nezávisle na polohe, orientácii a veľkosti skúmaného objektu***
- v KM ***nie je možné tvarovú zložku úplne oddeliť od veľkostnej***, skúmať ich oddelene, resp. dať ich do vzájomnej súvislosti, *lebo tradičné tvarové premenné sú vždy viac-menej závislé na inej premennej, ktorá určuje veľkosť daného objektu*
- v minulosti sa pri štandardizácii dĺžkových rozmerov (štandardizácii na veľkosť) používali mnohé z týchto mier

GM vs KM
Prečo KM na opis nestačí?

- v KM každá dĺžková miera, na ktorú sa štandardizuje, dáva iné výsledky a konsenzus vzhľadom na to nebol možný
- v GM sa za tento konsenzus považuje ***centroidová veľkosť*** (Bookstein 1997)
- predstavuje aproximáciu obsahu (2D) alebo objemu (3D) opisovaného objektu
- vypočíta sa ako suma euklidovských vzdialeností od súradníc (semi)landmarkov k súradniciam ich centroidu (aritmetickému priemeru súradníc)

GM vs KM
Prečo KM na opis nestačí?

- ďalšia nevýhoda KM súvisí so ***závislosťou meraných rozmerov***, lebo mnohé rozmery sa začínajú v rovnakom bode alebo sa čiastočne prekrývajú, preto sú silne závislé (korelované)
- navyše ***dĺžkové miery*** merané ako euklidovská vzdialenosť ich koncových bodov v podobe (semi)landmarkov ***nemusia byť biologicky a/alebo geometricky homologické***, keďže ani niektoré (semi)landmarky nie sú biologicky a/alebo geometricky homologické
- KM má tiež ***problém rozpoznať podstatu skutočnej variability***, najmä ak je k dispozícii len hodnota vzdialenosti medzi dvoma krajnými bodmi zisťovaného rozmeru

GM vs KM
Prečo KM na opis nestačí?

- GM naopak umožňuje získať ***podstatne väčší počet premenných*** na sledovanom objekte, a to aj v prípade, keď je tvar daného objektu komplikovaný a KM sa lineárne rozmery nedajú získať
- lineárne rozmery je však možné vypočítať zo súradníc (semi)landmarkov
- z dĺžkových mier súradnice (semi)landmarkov získať možné nie je (s výnimkou komplexnej triangulácie objektu)

GM vs KM
Smery pokračujúcej diskusie

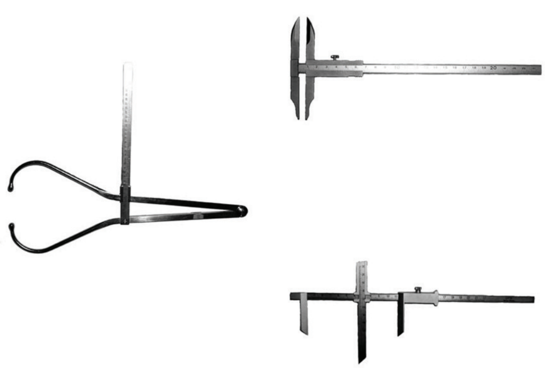
1. **klasifikovať chyby** súvisiace s meraním v geometrickej morfometrii
2. matematicky zadefinovať **Frankfurtskú horizontálu** a **mediánnu rovinu**
3. teoreticky diskutovať **reliabilitu** a **homológiu 3D merania súradníc** (semi)landmarkov na ľudskej lebke vo vzťahu k 2D a 3D klasifikácii (semi)landmarkov a vo vzťahu k lineárnym mieram na lebke, ktorých koncové body sú (semi)landmarky
4. klasifikovať **vybrané anatomické krivky a plochy** na ľudskej lebke,
5. sumarizovať **poloautomatizované a automatizované možnosti merania** rozmerov na ľudskej lebke
6. zjednotiť antropologickú, štatistickú a geometrickú terminológiu.

GM vs KM
Spôsoby merania a typy chýb

V KM sa na meranie používajú

1. *pomocné prístroje* – **kraniofor** (na nastavenie a držanie lebky orientovanej vo Frankfurtskej horizontále), **kovové ihlice** (na nastavenie príslušných priamok na lebke)
2. *meracie prístroje* – **dotykové meradlo** (**cefalometer**, na meranie lineárnych rozmerov, napr. M1 – dĺžka lebky), **posuvné meradlo** (na meranie lineárnych rozmerov, napr. M52 – výška očnice), **koordinátové (hĺbkové) meradlo** (na meranie projekčných mier a hĺbok na lebke, napr. M20 – nadušná bregmatická výška), **uhlomer** (na meranie uhlov, napr. M73 – uhol profilu nosa), **mandibulometer** (na meranie rozmerov sánky, napr. M68 – dĺžka sánky), **pásové meradlo** (na meranie oblúkových a obvodových mier, napr. M27 – mediánny parietálny oblúk alebo M23 – horizontálny obvod lebky cez glabellu)

GM vs KM
Meracie prístroje



GM vs KM
Systematické chyby súvisiace s meraním

A. **chyby spôsobené externými/environmentálnymi faktormi** – denná doba, intenzita svetla, vlhkosť prostredia a oblečenie
B. **chyby prístroja** – presnosť merania prístroja
C. **chyby merania** – chyby z odlišnej aplikácie techniky merania (rôzne pochopenie definície meranej miery), intraindividuálna a interindividuálna chyba (iné držanie prístroja, iný tlak aplikovaný pri meraní, iná orientácia lebky pri meraní a pod.)
D. **chyby registrácie** – chyby z odčítania hodnôt z meracieho prístroja, chyby zo zápisu hodnôt do protokolu, chyby z prenosu hodnôt z protokolu do PC
E. **chyby kalibrácie meracieho prístroja** (často sa používa aj anglický pojem „zero error”), napr. MicroScribe® G2.

GM vs KM

Faktory spôsobujúce chyby súvisiace s meraním

- pri systematických chybách v GM rozlišujeme skupiny (A) až (E), ale chyby registrácie sú minimalizované (registrácia nameraných hodnôt prebieha automaticky priamo z meracieho prístroja **MicroScribe® G2** do tabuľky v PC)
- v prípade merania v 3D geometrickom softvéri (napr. **Landmark**, **Amira**, **Edgewarp**, **EVAN Toolbox** a pod.) z (D) skupiny prichádza v GM do úvahy len jedna možnosť, a to iné poradie (semi)landmarkov pri rôznych lebkách, ktorú je možné tiež kontrolou odstrániť
- zmiešaním chýb (A) až (E) vzniká tzv. ***kombinovaná systematická chyba***, ktorú nie je možné objektívne hodnotiť

GM vs KM

Faktory spôsobujúce chyby súvisiace s meraním

- problematické tiež je, keď sa ***kombinujú miery*** (na výpočet indexov ako aj v štatistických výpočtoch) **merané inými meracími prístrojmi s rôznou presnosťou merania** (zvyčajne od zlomku milimetra do 3 milimetrov)
- základným predpokladom zovšeobecnenej Procrustovskej analýzy (semi)landmarkov je ***rovnaká chyba merania v smere všetkých troch osí (x, y a z)*** v 3D
- **chyby registrácie** je možné minimalizovať manuálnou (vizuálnou) kontrolou zápisov alebo automatickou kontrolou v PC

GM vs KM

Faktory spôsobujúce chyby súvisiace s meraním

- pri meraniach všeobecne môžeme hovoriť aj o ***náhodnej chybe***, ktorá je dôsledkom nesprávneho náhodného výberu, avšak pri antropologických meraniach na historických populáciách ide o špecifický problém, nakoľko pri pohrebiskách sa merajú všetky nájdené lebky
- keďže tento výber nie je možné ovplyvniť, ***nemôžeme hovoriť o náhodnom výbere*** v pravom slova zmysle
- výber je potom ovplyvnený len ***dostatočnou zachovanosťou lebiek*** a ***veľkosťou kostrovej série***

GM vs KM

Biologická a geometrická homológia

Theorem (definícia; biologický kontext)

*Dve morfologické štruktúry sú **biologicky homologické**, ak reprezentujú biologicky korešpondujúce časti organizmu vytvorené podľa rovnakého telesného plánu, boli vyvinuté z podobných embryonálnych substancií, a teda majú podobné základné štrukturálne a vývinové zákonitosti reflektujúce spoločný genetický fond a evolučné vzťahy.*

GM vs KM

Biologická a geometrická homológia

Theorem (definícia; biometrický kontext)

Homológia *je chápaná ako funkcia, ktorá dáva do vzťahu skôr bod s bodom radšej ako časť ku časti organizmu. Potom hovoríme o* ***biologicky homologických polohách bodov****, kde body sú súčasti určitej časti organizmu korešpondujúce medzi organizmami. Tieto body sa nazývajú* ***význačné body (landmarky)*** *a je možné ich biologicky zmysluplne opísať pomocou matematickej deformácie bodu do iného bodu prostredníctvom nejakej funkcie (zvyčajne ide o Thin-Plate Splajn, TPS, metódu tenkých ohybných plátkov).*

GM vs KM

Biologická a geometrická homológia

Theorem (definícia; biometrický kontext)

Landmarky sú ***geometricky homologické****, ak reprezentujú geometricky a matematicky korešpondujúce body.*

Landmarky teda spájajú

1. geometriu meraných častí organizmu
2. matematickú deformáciu
3. biologickú interpretáciu

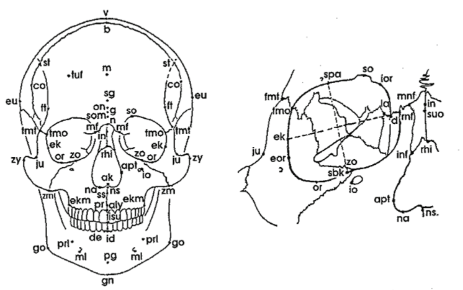
Rudolf Martin's classification

- classic system – nearly a century ago
- mainly list of endpoints for conventional distance or angle measurements
- planes and lines
- standardized views (frontalis, lateralis, verticalis, basilaris, occipitalis, sagittalis)
- lengths, widths, heights
- circumferences and surface arc length
- angles
- volumes and weights
- radii (distances of points to curves)
- indices (ratios)

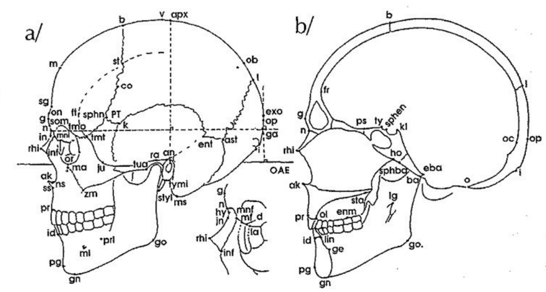
Rudolf Martin's classification

- a great diversity of points (landmarks) in one or more of those standardized views
- total number of different points – 68 [Figs 286–292]
- nowadays – 158 (including some synonyms)

GM vs KM
Norma frontalis



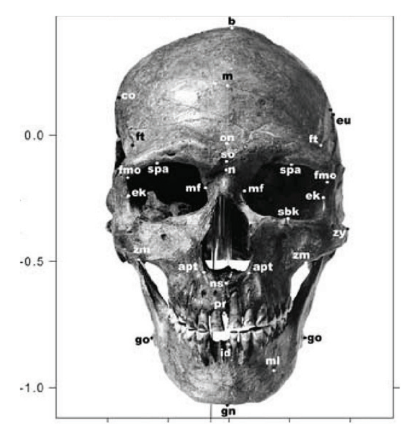
GM vs KM
Norma lateralis



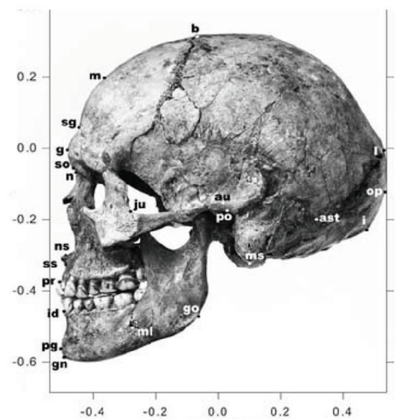
Skulls
Předmostí skulls

- **professionally digitised glass plate negatives of fossil skulls** (Předmostí 1 – P1, Předmostí 3 – P3, Předmostí 4 – P4, Předmostí 9 – P9, Předmostí 10 – P10)
- in the accessible norms: frontal, lateral sin., occipital, basal, and vertical views
- the skulls in question are those determined by Matiegka to have been females (P1, P4, P10) and males (P3, P9)
- **Katina, S.**, Šefčáková, A., Velemínská, J., Bružek, J., Velemínský, P., 2004: A Geometric approach to cranial sexual dimorphism in the upper palaeolithic skulls from Předmostí (Upper Palaeolithic, Czech Republic). *Journal of the National Museum, Natural History Series* 173, 1–4:133–144

Skulls
Norma frontalis



Skulls
Norma lateralis



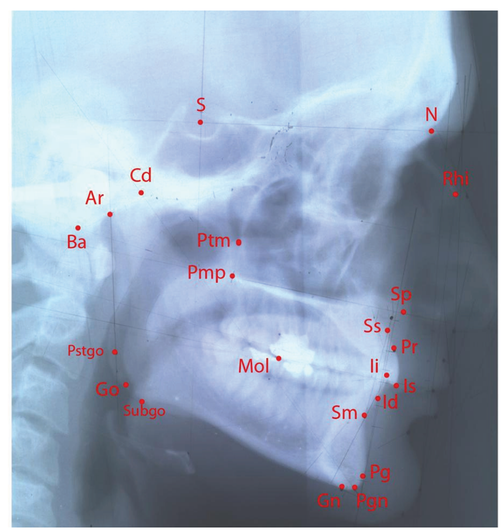
UCLP
Lateral x-rays of the UCLP patients heads

- lateral x-rays of the patients heads–**complete unilateral cleft of lip and palate** (UCLP)
- Velemínská J., **Katina, S.**, Šmahel, Z., Sedláčková, M., 2006: Analysis of facial skeleton shape in patients with complete unilateral cleft lip and palate: Geometric morphometrics. *Acta Chirurgiae Plasticae*, **48,1**: 26–32
- Velemínská J., Šmahel, Z., **Katina, S.**, 2006: Development prediction of sagittal intermaxillary relations in patients with complete unilateral cleft lip and palate during puberty. *Acta Chirurgiae Plasticae*, **49,2**: 41–46

UCLP

- 48 boys, complete unilateral cleft of lip and palate (UCLP), without symptoms of other associated malformations, Clinic of Plastic Surgery in Prague
- homogenously operated by the same team of surgeons (cheiloplasty according to Tennison, periosteoplasty without the nasal septum repositioning
- patients monitored during puberty, at the ages of 10 and 15 (born between 1972 and 1978)
- 22 landmarks (x-rays of the patients' heads, under standard conditions, SigmaScan Pro 5 software)

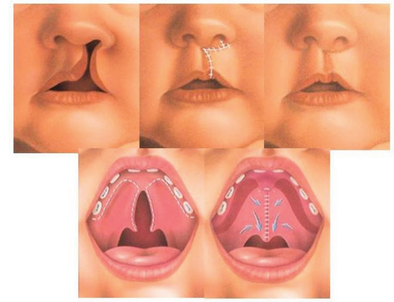
UCLP
Norma lateralis



UCLP
Examples

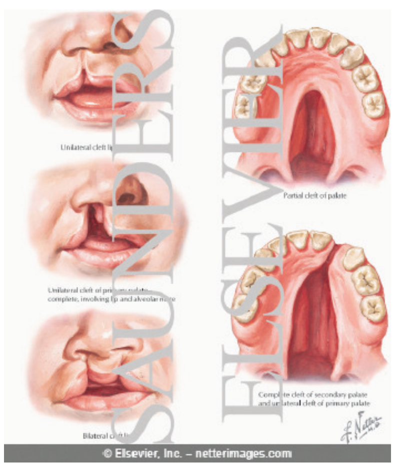
Obrázok: www.craniofacial.net

UCLP
Examples



Obrázok: http://www.plasticsurgery.org

UCLP
Examples



Obrázok: UCLP example

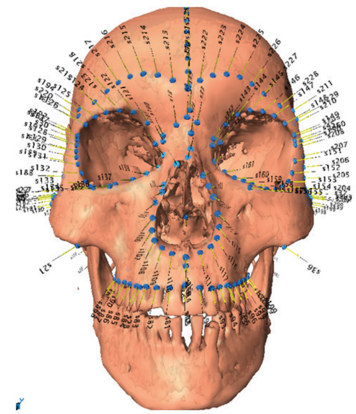
Skulls

- example re-uses *part of a Vienna data set of* 372 *skulls from various collections*
- 106 human crania (38 adult females, 54 males, 3 juvenile females, 11 juvenile males, 14 unknown sex; from newborns to adults)
- Dept. of Archaeological Biology and Anthropology, Natural History Museum, Vienna, Austria
- Dept. of Anthropology, University of Vienna, Vienna, Austria
- *Weisbach collection* - acquired and exhumed skeletons of soldiers of the Austro-Hungarian monarchy, sex and age of these crania are known from military records
- *Hallstatt collection* from ossuary in Hallstatt, sex and age are known from the church-books

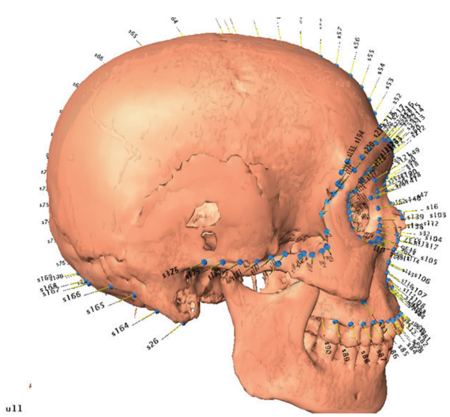
Skulls

- data – 347 landmarks and semilandmarks – 32 landmark points, 7 ridge curves totalling 161 semilandmarks and 154 surface semilandmarks [5 – base, 184 – face, 158 – neurocranium]
- landmark points on **both sides** of every cranium and semilandmarks (on curves and surface) **on the left side** of every cranium were digitalized using a MicroScribe 3*DX* (Mitteroecker et al, 2004, Gunz, 2005)
- **Katina, S.**, Bookstein, FL., Gunz, P., Schaefer, K., 2007: Was it worth digitizing all those curves? A worked example from craniofacial primatology. *American Journal of Physical Anthropology* Suppl. **44**: 140.

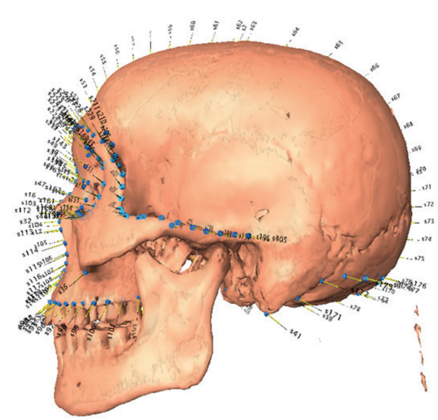
Skulls
Norma frontalis



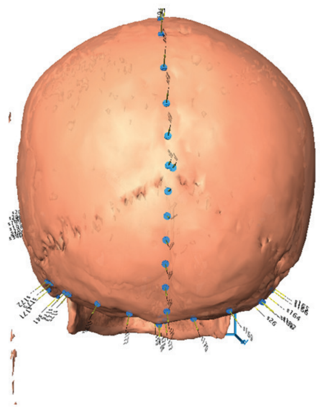
Skulls
Norma lateralis dex.



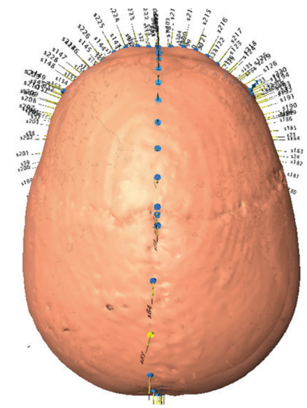
Skulls
Norma lateralis sin.



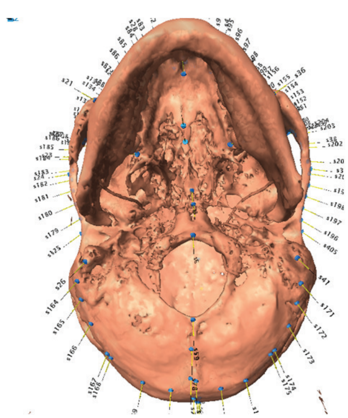
Skulls
Norma occipitalis



Skulls
Norma verticalis



Skulls
Norma basilaris



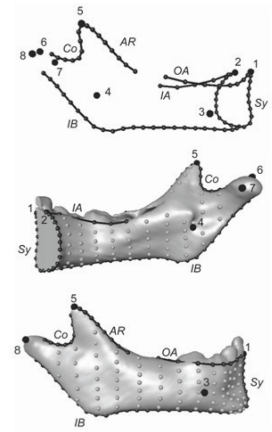
Growth of modern human mandible–3D, CTs

- CTs of 151 modern humans (78 females and 73 males) of mixed ethnicity, living in France, from birth to adulthood [Pellegrin Hospital (Bordeaux), Necker Hospital (Paris) and Clinique Pasteur (Toulouse)]
- each mandibular surface was reconstructed from the CT-scans via the software package **Amira** (Mercury Computer Systems, Chelmsford, MA)
- open-source software **Edgewarp3D** (Bookstein & Green 2002), a 3D-template of 415 landmarks and semilandmarks was created to measure the mandibular surface and was warped onto each mandible

Growth of modern human mandible–3D, CTs

- Coquerelle, M., Bayle, P., Bookstein, F.L. Braga, J., Halazonetis, D.J., **Katina, S.**, Weber, G.W., 2010: Covariation between dental development and mandibular form changes: a study combining additive conjoint measurement and geometric morphometrics. *Journal of Anthropological Sciences* **88**: 129-150

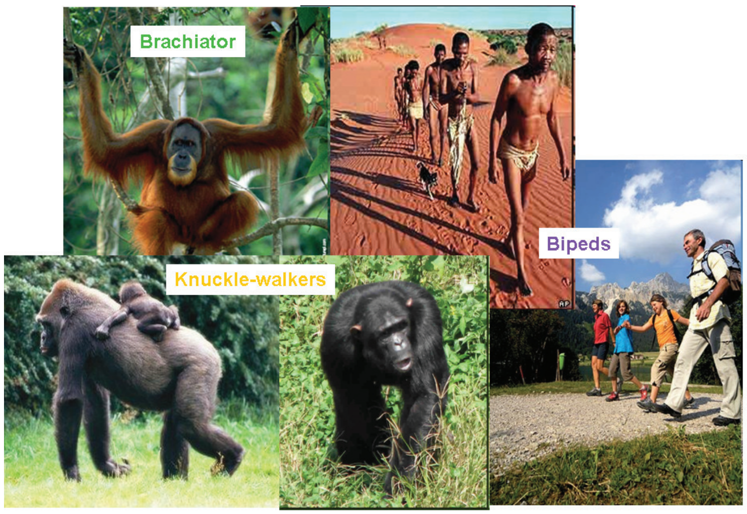
Growth of modern human mandible–3D, CTs



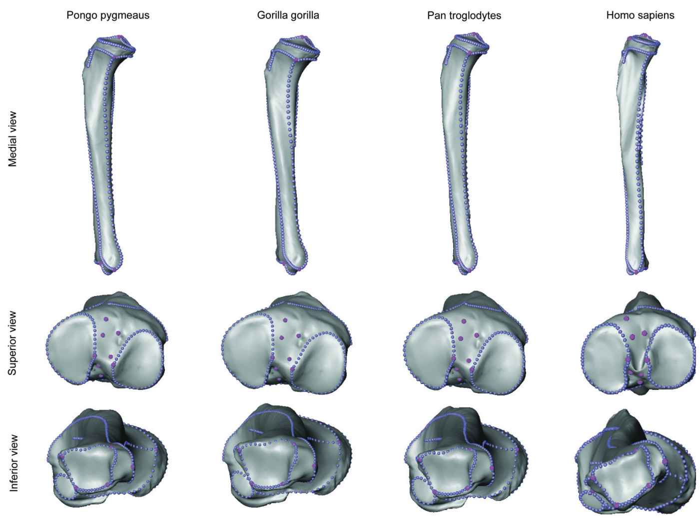
Tibial shape analysis–3D, CTs

- 77 tibiae of four extant primate species: *Homo sapiens*, *Gorilla gorilla*, *Pan troglodytes*, *Pongo pygmaeus*
- each tibial surface was reconstructed from the CT-scans via the software package **Rapidform 2006**
- 15 landmarks and 500 semilandmarks
- Frelat, M., **Katina, S.**, Weber, G.W., Bookstein, F.L., 2010: An affine-adjusted analysis of tibial shape in hominoids. *Journal of Anatomy* (accepted)

Tibial shape analysis–3D, CTs



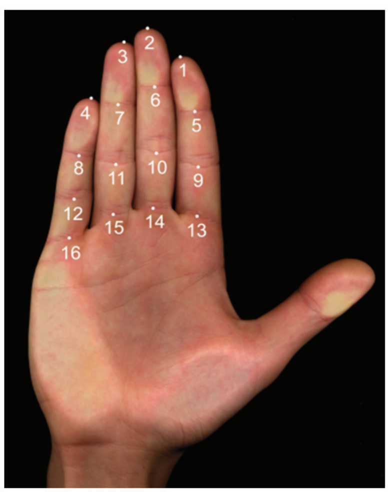
Tibial shape analysis–3D, CTs



Morphology of human hand

- two-dimensional morphology of **human hand in palmar view**
- hands recorded as **digital images** (TIFF format, 24 colours, 150dpi, 100
- subjects—**100 females and 75 males**—recruited predominantly from population of college students of cities Brno and Ostrava (Czech Republic)
- **16 landmarks**
- Králik, M., **Katina, S.**, 2011: Distal Part of the Human Hand: Study of Form Variations and Sexual Dimorphism using Geometric Morphometrics. *Journal of Anatomy* (draft before sumbission)

Morphology of human hand



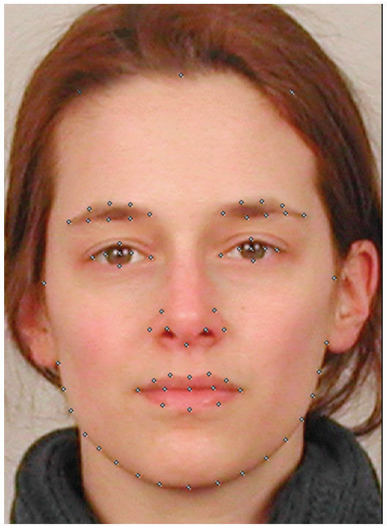
Human faces in 2D

- Oberzaucher, E., **Katina, S.**, Holzleitner, I.J., Schmehl, S.F., Mehu-Blantar, I., Grammer, K., 2011: The myth of hidden ovulation: Shape and texture changes in the face during the menstrual cycle. *PNAS* (submitted)
- Pflüger, L.S., Oberzaucher, E., **Katina, S.**, Holzleitner, I.J., Mehu-Blantar The Signal of Fertility. Evidence from a Rural Sample. *Evolution and Human Behaviour* (accepted)

Human faces in 2D

- 20 young women (aged between 19 and 31) who reported to have a regular menstrual cycle and did not take any hormonal contraceptives
- standardized facial photographs–one taken in the **ovulatory** and one in the **luteal phase**
- in a **forced choice task**, 50 male and 50 female subjects were presented with these photographs of each participant–to pick out the **more attractive, healthy, sexy, and likeable**, of the two
- skin patches sized 150 $\times$ 150 pixels from the **cheek** and subjected them to the same forced choice task with slightly modified adjectives

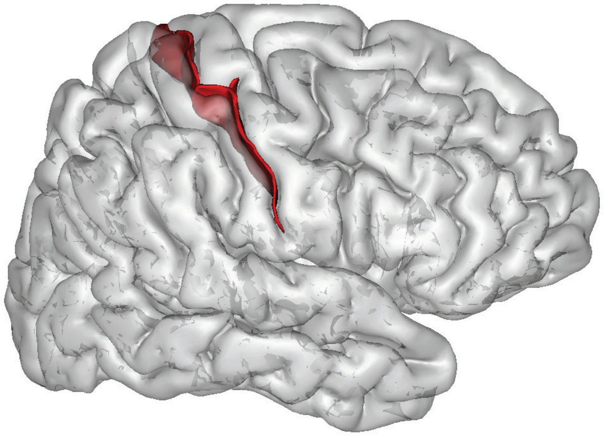
’Hidden’ ovulation signals–2D, facial photographs



Folding of human cortex

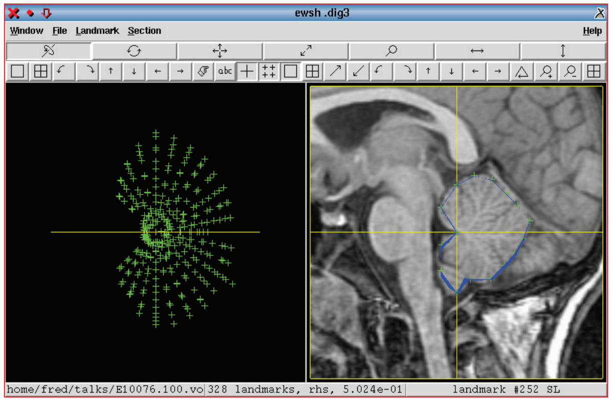
- **MRI** and **BrainVisa** software
- human brain folding patterns – cortical folds of **central sulcus**
- 62 left and right curves following the bottom of central sulcus
- from 35 to 149 semilandmarks on the curves

Folding of human cortex



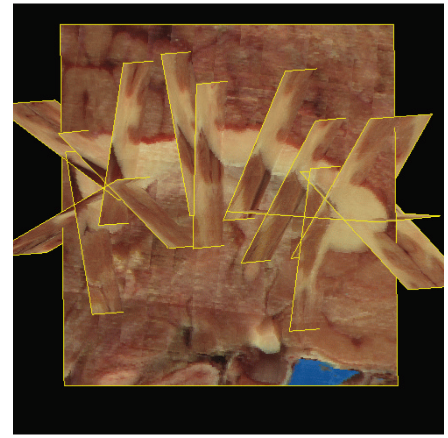
Powered by VTK - Anatomist

Human brain again



Úvod
Klasifikácia (semi)landmarkov
Meranie súradníc (semi)landmarkov v 2D a v 3D
Úvodné definície a vymädzenie pojmov
Príklady z antropológie a zoológie

Human brain again



Stanislav Katina
Geometrická a klasická morfometria

Úvod
Klasifikácia (semi)landmarkov
Meranie súradníc (semi)landmarkov v 2D a v 3D
Úvodné definície a vymädzenie pojmov
Príklady z antropológie a zoológie

3D facial laser-scans – velocardiofacial syndrome

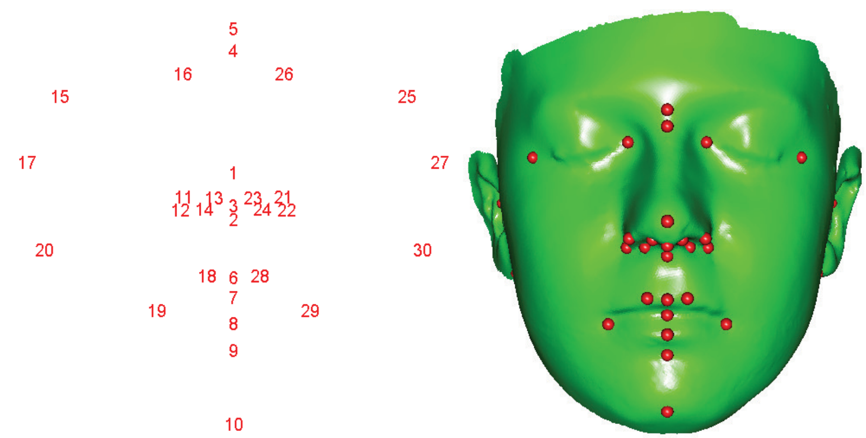
- 72 laser-scans of human faces
- 45 velo-cardio-facial syndrome (**VCFS**; chromosome 22 deletion syndrome associated with very high risk of schizophrenia–like psychosis; 25 females and 20 males)
- 27 controls (14 females and 13 males; siblings or closed relatives of similar age)
- from these, after coupling, it remains 42 **pairs** (also after exclusion of several laser-scans with low quality)
- 23 **biologically homologous anatomical landmarks** and 1664 **geometrically homologous semilandmarks on curves and surface patches**
- **mesh** of 59242 points triangulated by 117386 **faces (triangulated mesh)**

Stanislav Katina
Geometrická a klasická morfometria

Úvod
Klasifikácia (semi)landmarkov
Meranie súradníc (semi)landmarkov v 2D a v 3D
Úvodné definície a vymädzenie pojmov
Príklady z antropológie a zoológie

3D facial laser-scans

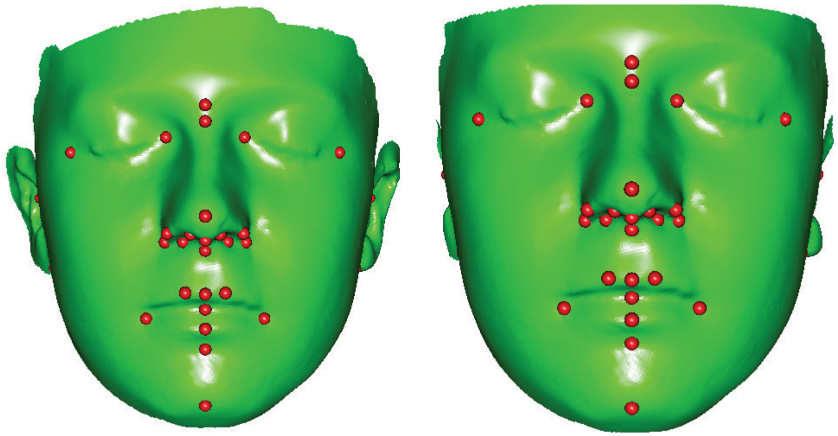
VCFS - -Royal College of Surgeons, Dublin, Ireland



Stanislav Katina
Geometrická a klasická morfometria

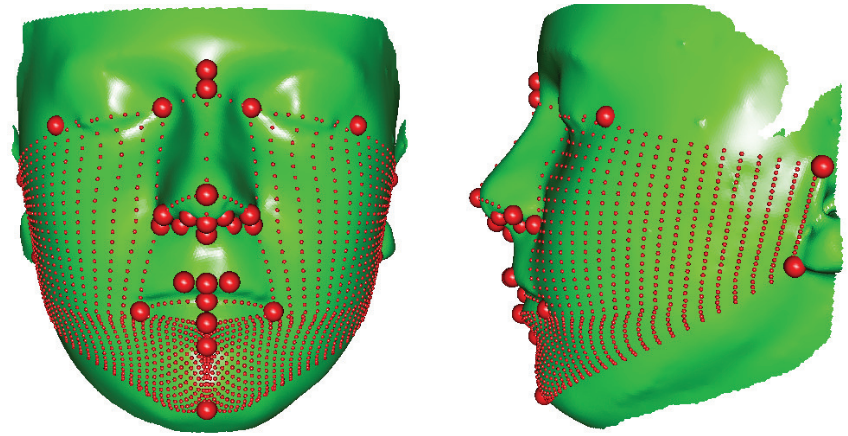
3D facial laser-scans

VCFS - -Royal College of Surgeons, Dublin, Ireland



3D facial laser-scans

VCFS - -Royal College of Surgeons, Dublin, Ireland



3D face – stereo-camera campture

Control data – Dental clinic, The University of Glasgow, UK

Eco-morpology of fishes

- Tomeček, J., Kováč, V., **Katina, S.**, 2005: Ontogenetic variability in external morphology of native (Canadian. and nonnative (Slovak. populations of pumpkinseed (Lepomis gibbosus, Linnaeus 1758. *Journal of Applied Ichthyology* **21**: 335 – 344
- Zahorská, E., Kováč, V, Falka, I., Beyer, K., **Katina, S.**, Copp, G.H., Gozlan, R., 2009: Morphological variability of the Asiatic cyprinid, topmouth gudgeon Pseudorasbora parva, in its introduced European range. *Journal of Fish Biology* **74**: 167 – 185
- Čápová, M., Zlatnická, I., Kováč, V., **Katina, S.**, 2008. Ontogenetic variability in external morphology of monkey goby, Neogobius fluviatilis (Pallas, 1814) and its relevance to invasion potential. *Hydrobiologia* 607: 17-26
- Novomeská, A., **Katina, S.**, Copp, G.H., Pedicillo, G., Lorenzoni, M., Pompei, L., Cucherousset, J., Ková?, V., 2011: Morphological variability of black bullhead Ameiurus melas (Rafinesque, 1820) in its non-native European populations. *Journal of Fish Biology* (submitted)

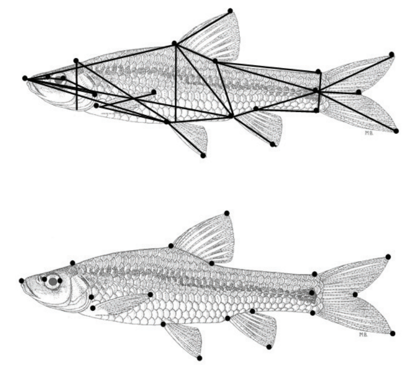
Eco-morpology of fishes

Definície vybraných landmarkov – lateralny pohľad

1. total length (1–2)
2. standard length (1–3)
3. head length (1–4)
4. preorbital distance (1–5)
5. eye diameter (5–6)
6. postorbital distance (6–4)
7. head depth (7–8)
8. predorsal distance (1–9)
9. preventral distance (1–10)
10. preanal distance (1–11)
11. postdorsal distance (12–3)
12. V–A distance (10–11)
13. D–A distance (9–11)
14. D–adip distance (9–13)
15. adipA distance (13–11)
16. adip – post. A distance (13-14)
17. post. adip – C fin base (15–3)
18. C peduncle length (14–3)
19. C peduncle depth (14–16)
20. minimum body depth (17–18)
21. body depth (9–19)
22. D-fin depth (9–20)
23. V-fin depth (10–21)
24. A-fin depth (22–23)
25. C-fin depth (24–25)
26. D-fin length (9–12)
27. adip length (13–15)
28. A-fin length (11–14)
29. C-fin length (2–3)
30. P-fin length (26–27)
31. interorbital distance(28–29)
32. head width (30–31)

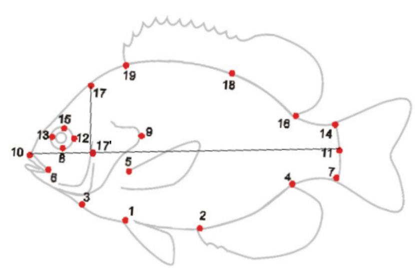
Eco-morpology of fishes

Topmouth gudgeon (*Pseudorasbora parva*) – hrúzovec sieťovaný



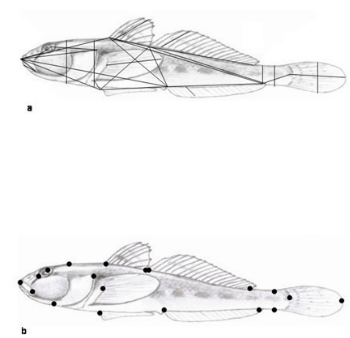
Eco-morpology of fishes

Pumpkinseed (*Lepomis gibosus*) – slnečnica pestrá



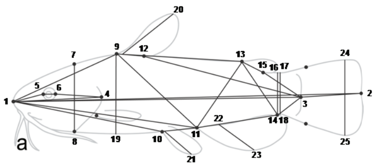
Eco-morpology of fishes

Monkey goby (*Neogobius fluviatilis*) – býček hlavatý



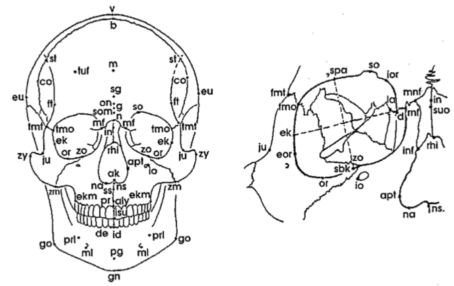
Eco-morpology of fishes

Black bullhead (*Ameiurus melas*) – sumček čierny



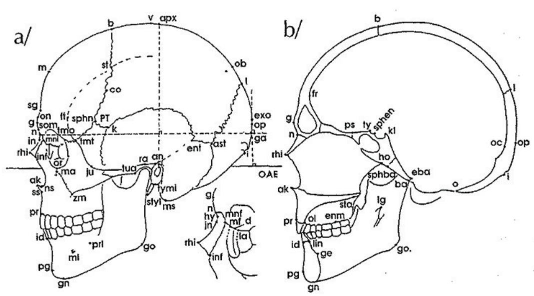
GM vs KM

Norma frontalis



GM vs KM

Norma lateralis



GM vs KM

Definície vybraných landmarkov v mediánnej rovine (1)

1. ***pr*** – *prosthion* (1,3a) – bod na alveolárnom výbežku čeľuste, ktorý vystupuje najviac dopredu medzi strednými rezákmi v mediánnej rovine.
2. ***ss*** – *subspinale* (1,2) – bod v mieste, kde predná dolná hrana *spina nasalis anterior* prechádza na prednú stenu *processus alveolaris* čeľuste;
3. ***ns*** – *nasospinale* (1,6) – najhlbší bod spodného okraja *apertura piriformis* premietnutý do mediánnej roviny;
4. ***rhi*** – *rhinion* (1,1) – bod ležiaci na spodnom konci sutura internasalis;
5. ***n*** – *nasion* (1,3b) – priesecník *sutura nasofrontalis* s mediánnou rovinou;
6. ***g*** – *glabella* (3,6) – vpred vystupujúce miesto na okraji čelovej kosti, ktoré leží nad koreňom nosa (*sutura frontonasalis*) medzi *arcus superciliares*;
7. ***m*** – *metopion* (3,6) – bod na priesečníku spojnice najvystúpenejších bodov čelových hrbolov s mediánnou rovinou;
8. ***b*** – *bregma* (1,1) – bod, v ktorom sa stretáva *sutura sagittalis* so *sutura coronalis*.

GM vs KM

Definície vybraných landmarkov v mediánnej rovine (2)

9. ***l*** – *lambda* (1,1) – bod, v ktorom sa stretávajú obe ramená *sutura lambdoidea* so *sutura sagittalis*;
10. ***i*** – *inion* (1,3b) – bod ležiaci v mieste, v ktorom sa obe *lineae nuchae superiores* spájajú;
11. ***op*** – *opisthocranion* (3,4) – najposteriórnejší bod na záhlavnej kosti ležiaci v mediánnej rovine;
12. ***o*** – *opishtion* (2,3a) – bod na zadnom okraji *foramen magnum* v mieste, kde ním prechádza mediánna rovina;
13. ***ba*** – *basion* (2,3a) – bod na prednom okraji *foramen magnum* v mieste, kde ním prechádza mediánna rovina;
14. ***sphba*** – *sphenobasion* (1,3b) – priesečník *synchondrosis sphenooccipitalis* s mediánnou rovinou;
15. ***ho*** – *hormion* (1,6) – priesečník miesta, kde nasadá zadný okraj *vomeru* na telo klinovej kosti s mediánnou rovinou medzi *ala vomeris*;
16. ***sta*** – *staphylion* (1,6) – bod v zadnej časti tvrdého podnebia, v ktorom sa kríži priamka spájajúca v najužšom mieste zadné okraje obidvoch podnebných kostí s mediánnou rovinou;

GM vs KM

Definície vybraných landmarkov v mediánnej rovine (3)

17. ***sr*** – *saurian (palate)* (1,1) – bod na priesečníku *sutura palatina mediana* a *sutura palatina transversa*;
18. ***fi*** – *foramen incisivum* (1,3a) – priesečník *sutura palatina mediana* a zadného okraja *foramen incisivum*;
19. ***ol*** – *orale* (3,3b) – bod ležiaci na prednom okraji tvrdého podnebia, v ktorom sa kríži priamka spájajúca zadné okraje alveol oboch horných stredných rezákov s mediánnou rovinou;
20. ***id*** – *infradentale* (1,3b) – bod medzi strednými rezákmi sánky, v ktorom sa kríži predná hrana alveolárneho výbežku s mediánnou rovinou;
21. ***gn*** – *gnathion* (3,4) – najinferiornejší bod na dolnom okraji sánky v mediánnej rovinen
22. ***pg*** – *pogonion* (3,4) – najvystúpenejší (najanteriórnejší) bod *protuberantia mentalis* v mediánnej rovine;
23. ***me*** – *menton* (3,3b) – najposterio-inferiornejší bod na symfýze sánky v mieste dotyku línie vychádzajúcej z bodu *go*.

GM vs KM

Definície vybraných bilaterálnych landmarkov (1)

1. ***psa*** – *pseudoalare* (1,3c) – bod, kde sa stretáva *sutura nasomaxillaris* s *apertura piriformis*;
2. ***mnf*** – *maxillonasofrontale* (1,1) – bod ležiaci v miestach, kde sa stretávajú švy – *sutura frontonasalis*, *sutura frontomaxillaris* a *sutura nasomaxillaris*;
3. ***mf*** – *maxillofrontale* (1,3c) – bod na vnútornom okraji očnice (*crista lacrimalis anterior* – jej predlženie), ktorým prechádza *sutura frontomaxillaris*;
4. ***d*** – *dakryon* (1,1) – bod na vnútornom okraji očnice, v ktorom sa spája čelová kost s čelovým výbežkom hornej čeluste a slznej kosti;
5. ***fmo*** – *frontomalare orbitale* (1,3c) – bod na laterálnom okraji očnice, v ktorom ho pretína *sutura frontozygomatica*;
6. ***fmt*** – *frontomalare temporale* (1,3c) – najlaterálnejší bod *sutura frontozygomatica*, v mieste, kde bočná plocha *processus zygomaticus* čelovej kosti prechádza do zadnej plochy;
7. ***zo*** – *zygoorbitale* (1,3c) – priesečník dolného okraja očnice so *sutura zygomaticomaxillaris*;

GM vs KM

Definície vybraných bilaterálnych landmarkov (2)

8. ***or*** – *orbitale* (3,4) – najnižší bod spodného okraja očnice;
9. ***ek*** – *ektokonchion* (3,4) – bod na laterálnom okraji očnice v mieste, kde ho pretína priamka vychádzajúca z bodu *mf* a rovnobežná s horným okrajom očnice;
10. ***zm*** – *zygomaxillare* (1,3c) – najnižšie položený bod *sutura zygomaticomaxillaris*;
11. ***ju*** – *jugale* (2,4) – bod v uhle, ktorý zviera *processus frontalis* a *processus temporalis* jarmovej kosti;
12. ***zy*** – *zygion* (3,5) – najlaterálnejšie položený bod na jarmovom oblúku;
13. ***sz*** – *superior zygomaticum* (1,3c) – najsuperiórnejší bod ležiaci na *sutura zygomaticotemporalis*;
14. ***ft*** – *frontotemporale* (3,4) – bod nad *processus zygomaticus* čelovej kosti v najhlbšom mieste konkávneho prehnutia *linea temporalis* (*superior*);
15. ***st*** – *stephanion* (1,3c) – bod, v ktorom *sutura coronalis* kríži *linea temporalis*;

GM vs KM
Definície vybraných bilaterálnych landmarkov (3)

16. ***au*** – *auriculare* (3,4) – najlaterálnejší bod ležiaci na koreni jarmového oblúka, kolmo nad stredom *porus acusticus externus*;
17. ***po*** – *porion* (1,6) – bod v strede *porus acusticus externus*;
18. ***eu*** – *euryon* (3,5) – najlaterálnejší bod mozgovne;
19. ***ast*** – *asterion* (1,1) – bod v mieste dotyku švov *sutura lambdoidea*, *sutura occipitomastoidea* a *sutura parietomastoidea*;
20. ***ms*** – *mastoideale* (2,2) – bod ležiaci najnižšie na vonkajšej strane hrotu *processus mastoideus*;
21. ***pa*** – *postalveolare* (3,4) – bod ležiaci na najposteriórnejšom konci alveolárneho hrebena;
22. ***cb*** – *canine base* (3,4) – bod ležiaci v strede alveol.okraja očného zuba;
23. ***ekm*** – *ektomolare* (3,5) – najlaterálnejší bod na vonkajšej ploche alveolárneho hrebeňa čeľuste;
24. ***ml*** – *mentale* (3,4) – najnižší bod na obvode *foramen mentale*;
25. ***go*** – *gonion* (3,4) – bod na uhle sánky, v ktorom sa spája spodný okraj tela a zadný okraj ramena sánky, orientovaný najviac inferiórne, posteriórne a laterálne.

GM vs KM
Klasifikácia landmarkov v 2D (1)

Typ 1 – ***diskrétna juxtapozícia štruktúr*** – význačné body, kde sa tri štruktúry stretávajú; body rozvetvenia stromovitých (konárovitých) štruktúr; centrá alebo centroidy „dostatočne malých” inklúzií (pokiaľ možno konvexné); priesečníky predĺžení kriviek s rovinami symetrie, landmarky typu 1 môžu byť aj hybridy s typom 3

Typ 2 – ***maximá krivosti alebo iné lokálne morfometrické štruktúry*** – hroty výbežkov a pod., landmarky typu 1 môžu byť aj hybridy s typom 2 ako špička rezáka a pod.

Typ 3 – ***extrémne body*** – koncové body dĺžkových mier, centroidy, prieniky medzilandmarkových segmentov, body najvzdialenejšie od týchto segmentov, konštrukcie zahŕňajúce kolmé projekcie a rovnako vzdialené radiálne úseky, landmarky na obryse môžu byť hybridy typu 2 a typu 3

GM vs KM
Klasifikácia landmarkov v 2D (2)

Typ 1 – ***diskrétna juxtapozícia štruktúr*** – *prosthion*, *subspinale*, *nasospinale*, *rhinion*, *nasion*, *bregma*, *lambda*, *inion*, *sphenobasion*, *hormion*, *staphylion*, *saurian (palate)*, *foramen incisivum*, *pseudoalare*, *maxillonasofrontale*, *maxillofrontale*, *dakryon*, *frontomalare orbitale*, *frontomalare temporale*, *zygoorbitale*, *zygomaxillare*, *superior zygomaticum*, *stephanion*, *porion*, *asterion a infradentale*

Typ 2 – ***maximá krivosti alebo iné lokálne morfometrické štruktúry*** – *opisthion*, *basion*, *jugale a mastoideale*

Typ 3 – ***extrémne body*** – *gnathion*, *pogonion*, *menton*, *glabella*, *metopion*, *opisthocranion*, *orale*, *orbitale*, *ektokonchion*, *frontotemporale*, *zygion*, *euryon*, *auriculare*, *orale*, *postalveolare*, *canine base*, *ektomolare*, *mentale a gonion*

GM vs KM
Klasifikácia (semi)landmarkov v 3D (1)

Theorem (definícia)

Landmarky ako súčasť anatomických kriviek a plôch sú nazývané ***semilandmarky****, t.j. landmarky medzi landmarkami (pojem (semi)landmark zahŕňa v sebe landmark aj semilandmark).*

GM vs KM
Klasifikácia (semi)landmarkov v 3D (2)

Typ 1 – ***diskrétna juxtapozícia štruktúr***;

Typ 2 – ***extrémy krivosti charakterizujúce jednoduché štruktúry***;

Typ 3 – ***landmarky charakterizované lokálne ako priesečníky dvoch alebo viacerých anatomických kriviek a plôch a symetriou*** –

- *Typ 3a* – ***priesečníky chrbtovej (hrebeňovej) krivky a mediánnej roviny na tej istej ploche***;
- *Typ 3b* – ***priesečníky nejakej pozorovanej krivky (alebo priamky) a mediánnej roviny***;
- *Typ 3c* – ***priesečníky chrbtovej (hrebeňovej) krivky a nejakej pozorovanej krivky na tej istej ploche***;

Typ 4 – ***(semi)landmarky chrbtovej (hrebeňovej) krivky a symetrickej krivky (v mediánnej rovine)***;

Typ 5 – ***(semi)landmarky na plochách***;

Typ 6 – ***skonštruované (semi)landmarky*** .

GM vs KM
Klasifikácia (semi)landmarkov v 3D (3)

Typ 1 – ***diskrétna juxtapozícia štruktúr*** – *rhinion*, *bregma*, *lambda*, *saurian (palate)*, *maxillonasofrontale*, *dakryon* a *asterion*;

Typ 2 – ***extrémy krivosti charakterizujúce jednoduché štruktúry*** – *subspinale* a *mastoideale*;

Typ 3 – ***landmarky charakterizované lokálne ako priesečníky dvoch alebo viacerých anatomických kriviek a plôch a symetriou*** –

- *Typ 3a* – ***priesečníky chrbtovej (hrebeňovej) krivky a mediánnej roviny na tej istej ploche*** – *prosthion*, *opisthion*, *basion* a *foramen incisivum*;
- *Typ 3b* – ***priesečníky nejakej pozorovanej krivky (alebo priamky) a mediánnej roviny*** – *nasion*, *inion*, *sphenobasion*, *orale*, *infradentale* a *menton*;
- *Typ 3c* – ***priesečníky chrbtovej (hrebeňovej) krivky a nejakej pozorovanej krivky na tej istej ploche*** – *pseudoalare*, *maxillofrontale*, *frontomalare orbitale*, *frontomalare temporale*, *zygoorbitale*, *zygomaxillare*, *stephanion* a *superior zygomaticum*;

GM vs KM
Klasifikácia (semi)landmarkov v 3D (4)

Typ 4 – ***(semi)landmarky chrbtovej (hrebeňovej) krivky a symetrickej krivky (v mediánnej rovine)*** – *opisthocranion* (hybrid, typ 6), *orbitale*, *ektokonchion* (hybrid, typ 6), *jugale* (hybrid, typ 2), *frontotemporale*, *auriculare* (hybrid, typ 6), *postalveolare*, *canine base*, *gnathion* (hybrid, typ 5), *pogonion* (hybrid, typ 5), *mentale* a *gonion* (hybrid, typ 2);

Typ 5 – ***(semi)landmarky na plochách*** – *zygion*, *euryon* a *ektomolare*;

Typ 6 – ***skonštruované (semi)landmarky*** – *nasospinale* (hybrid, typ 3a), *glabella*, *metopion*, *hormion*, *staphylion* a *porion* (hybrid, typ 1).

GM vs KM
Klasifikácia anatomických kriviek v 3D (1)

Theorem (definícia)

Pozorovaná krivka *je krivka, ktorá vzniká ako prienik dvoch hladkých anatomických plôch alebo ako prienik hladkej anatomickej plochy s rovinou (napr. s rovinou symetrie).*

Theorem (definícia)

Chrbtová (hrebeňová) krivka *je krivkou, ktorej zakrivenie kolmé na jej smer je maximálne v tomto smere.*

Theorem (definícia)

Symetrická krivka *je krivka, ktorej odhad pomocou metódy najmenších štvorcov (MNŠ) patrí do mediánnej roviny.*

GM vs KM

Klasifikácia anatomických kriviek v 3D (2)

- ***pozorované krivky*** – lebečné švy, symfýza sánky a obrys lebky v 2D projekcii;
- ***chrbtová (hrebeňové) krivky*** – hrana *arcus superciliaris*, hrana *apertura piriformis*, hrana orbity, alveolárny hrebeň, hrana sánky;
- ***symetrické krivky*** – symfýza sánky a *sutura sagittalis*

GM vs KM

Klasifikácia anatomických kriviek v 3D (3)

- ***alveolárna krivka*** (sin./dex.) – krivka pozdĺž vonkajšieho okraja alveolárneho oblúka, začínajúca sa v bode *prosthion*, pokračujúca cez *canine base* do *postalveolare*;
- ***krivka hruškovitého otvoru***, sin./dex.) – krivka pozdĺž okraja/hrany *apertura piriformis*, začínajúca sa v bode *rhinion* a končiaca sa v bode *nasospinale*;
- ***očnicová krivka*** (sin./dex.) – krivka pozdĺž hrany očnice, začínajúca sa v *maxillofrontale*, pokračujúca cez *frontomalare orbitale*, *zygoorbitale* a končiaca sa opäť v *maxillofrontale*;
- ***krivka arcus superciliaris*** (***krivka obočného oblúka***, sin./dex.) – krivka začínajúca v bode *glabella*, pokračujúca pozdĺž *torus superciliaris* do *frontomalare temporale*;

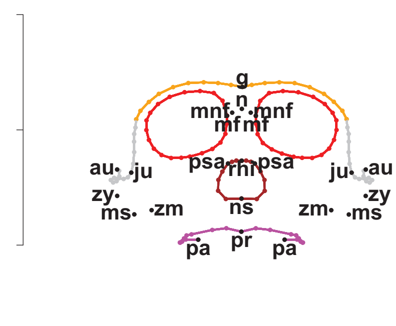
GM vs KM

Klasifikácia anatomických kriviek v 3D (4)

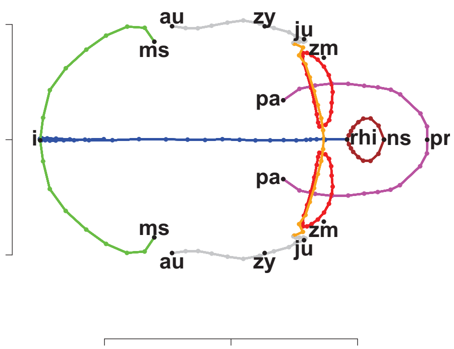
- ***zygomatická krivka*** (***krivka jarmového oblúka***, sin./dex.) – krivka z bodu *auriculare*, pokračujúca po hornej hrane *arcus zygomaticus* a cez *jugale* do koncového bodu *frontomalare temporale*;
- ***nuchálna krivka*** (sin./dex.) – krivka začínajúca sa v bode *mastoideale*, pokračujúca po *lineae nuchae superiores* a končiaca v bode *inion*;
- ***mediánna krivka*** – krivka prieniku mediánnej roviny s plochou lebky začínajúca sa v bode *rhinion*, potom prechádzajúca cez body *nasion*, *glabella*, *metopion*, *bregma* a *inion*, končiaca sa v bode *opisthion*.

GM vs KM

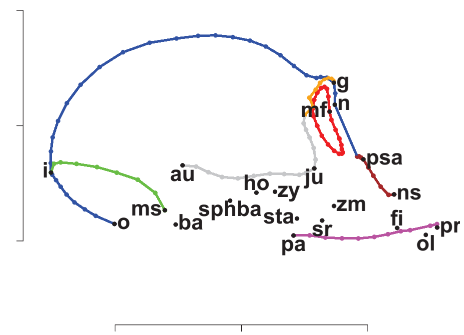
Norma frontalis



GM vs KM
Norma verticalis



GM vs KM
Norma lateralis dex.



GM vs KM
Klasifikácia anatomických kriviek v 3D (5)

- očnicová krivka patrí medzi ***uzavreté krivky***
- ostatné sú ***otvorené krivky***, kde sú koncové body buď *fixované* alebo *otvorené* v závislosti od toho, či je optimalizácia (relaxácia) polohy koncových bodov povolená alebo nie
- mediánna krivka je typom ***nepárovej krivky***
- všetky ostatné sú ***párové krivky***

GM vs KM
Klasifikácia anatomických plôch v 3D (1)

Theorem (definícia)

Anatomická plocha *je plocha na objekte (lebky) definovaná dostatočným množstvom geometricky homologických semilandmarkov.*

GM vs KM
Klasifikácia anatomických plôch v 3D (2)

Theorem (definícia)

Hranice uzavretej (úplne ohraničenej) anatomickej plochy *tvoria výhradne (semi)landmarky, anatomické krivky alebo prienik plochy s rovinou symetrie.*

Theorem (definícia)

Hranice čiastočne otvorenej (čiastočne ohraničenej) anatomickej plochy *musia obsahovať aspoň jednu časť definovanú len semilandmarkami na ploche, kde nie je hranicou ani krivka a ani rovina symetrie.*

GM vs KM
Klasifikácia anatomických plôch v 3D (3)

- *Klasická plocha* (softvér Landmark), je plocha, kde je možné súradnice bodov na ploche pomocou deviatich kontrolných bodov merať a navyše určiť množstvo rovnomerne rozdelených bodov medzi kontrolnými bodmi.
- *Flexibilná plocha* je plocha, kde je možno hranice plochy modifikovať pomocou ďalších kontrolných bodov medzi deviatimi bodmi z klasickej plochy.

GM vs KM
Klasifikácia anatomických plôch v 3D (4)

- ***čelová plocha*** – ohraničená *torus superciliaris* krivkou, *linea temporalis* a *sutura coronalis*
- ***nosová plocha*** (plocha nosových kostí) (sin./dex.) – ohraničená *sutura internasalis*, *sutura frontonasalis* a *suturae nasomaxillares*
- ***maxilárna plocha*** (sin./dex.) – ohraničená krivkou hrany *apertura piriformis*, *sutura frontomaxillare*, očnicovou krivkou, *sutura zygomaticomaxillaris*, alveolárnou krivkou a prienikom plochy *os maxillare* s mediánnou rovinou
- ***zygomatická plocha*** (sin./dex.) – ohraničená *sutura zygomaticomaxillaris*, očnicovou krivkou, *sutura frontozygomatica*, zygomatickou krivkou a *sutura zygomaticotemporalis*

GM vs KM
Klasifikácia anatomických plôch v 3D (5)

- ***parietálna plocha*** (sin./dex.) – ohraničená *linea temporalis*, *sutura coronalis*, prienikom plochy neurokránia s mediánnou rovinou, nuchálnou krivkou
- ***temporálna plocha*** (sin./dex.) – plocha *os temporale*
- ***okcipitálna plocha*** (sin./dex.) – plocha *os occipitale*
- ***plocha podnebnej kosti*** (sin./dex.) – plocha *os palatinum*
- ***plocha sánky*** – plocha mandibuly

GM vs KM
Klasifikácia anatomických plôch v 3D (6)

- plocha čelovej kosti a sánky sú ***nepárovými plochami***, ale dajú sa rozdeliť mediánnou rovinou na dve párové časti, v prípade sánky symfýzou)
- ďalšie plochy sú ***plochy párové***
- čelová, nosová, maxilárna, zygomatická, parietálna plocha, plocha podnebia a plocha sánky sú ***plochy uzavreté***
- okcipitálna a temporálna sú ***plochy čiastočne otvorené***
- plochy môžeme získať použitím **MicroScribe® G2** ako oblak alebo sieť bodov, ktorý je potrebné následne matematicky spracovať
- alebo z **CT**, kde je nutné na segmentáciu kosti použiť špecifický „threshold” alebo kosť manuálne segmentovať napr. v programe **Amira**; výstupom je potom napr. súbor „*obj*“, ktorý obsahuje plochu lebky v podobe súradníc bodov, popisuje trianguláciu tejto plochy, príp. normály v bodoch a pod.

GM vs KM
Poloautomatické a automatické meranie (1)

Je možné merania poloautomatizovať alebo úplne automatizovať?

- ***poloautomatizované meranie súradníc*** je meranie vykonávané v PC v nejakom 3D softvéri (napr. *Landmark*, *Amira*, *Edgewarp* a *EVAN Toolbox*)
- toto meranie môže byť spresnené
  - pohľadom na viaceré 2D normy súčasne (*Edgewarp* a *EVAN Toolbox*)
  - rotáciou 3D objektu v rovine rovnobežnej s pohľadom (*Landmark*),
  - zobrazovaním normál meraných bodov (*Landmark*) alebo
  - možnosťou pridania jednej dimenzie v podobe napr. farebne rozlíšeného znamienka krivosti (*Landmark*)
- možnosť práce s *krivkami* (*Landmark*), kde je možné súradnice bodov na krivke pomocou troch kontrolných bodov merať, ako aj určiť množstvo ekvidištantných bodov na krivke, resp. v prípade potreby časti kriviek spájať do jednej krivky

GM vs KM
Poloautomatické a automatické meranie (2)

- ***Automatizované meranie súradníc*** je meranie vykonávané v PC len pomocou nejakého matematického algoritmu, kde automatizácia striktne závisí od toho, či je matematický algoritmus presnejší a či je ho možné vôbec použiť.
- použiteľnosť – závisí aj od toho, nakoľko je 3D rekonštrukcia (použitím MicroScribe® G2, laser-skenera, stereogrametrického kamerového systému alebo CT a pod.) vierohodná, teda ako sa podobá originálu lebky
- dôležitým kritériom je, či sa dá výpočtom docieliť ***geometrickú homológiu (semi)landmarkov*** na anatomických krivkách a plochách v celom náhodnom výbere – ***zovšeobecnenie geometrickej homológie landmarkov na krivky a plochy*** definované pomocou (semi)landmarkov

GM vs KM
Poloautomatické a automatické meranie (3)

Theorem (definícia)

Geometrická homológia *(semi)landmarkov na krivke – v zmysle minimalizácie nejakého matematického kritéria (ohybovej energie TPS alebo Procrustovskej vzdialenosti), kde sa bod posúva po krivke dovtedy, pokiaľ jeho poloha (ako argument minimalizácie) nebude v zmysle kritéria optimálna. Preto hovoríme aj o optimalizácii polohy bodu na krivke.*

- ekvidištantne vzdialené body na krivke nie sú geometricky homologické
- aj napriek tomu však krivky ako celky môžu byť ***biologicky homologické*** (napr. lebečné švy)

GM vs KM

Poloautomatické a automatické meranie (4)

Optimalizácia polohy bodov na krivke na nejakom objekte sa deje vždy ***vo vzťahu k nejakej referenčnej krivke*** a ide o ***iteračný proces***:

1. ***zovšeobecnená Procrustovská superimpozícia*** (ZPS; Genralized Procrustes Analysis, GPA)
2. nájdu sa optimálne polohy bodov všetkých kriviek vo vzťahu k ***prvému odhadu Procrustovského priemeru***
3. ďalšia ZPS atď. až dovtedy, pokiaľ rozdiel predposledného a posledného kroku je menší (v zmysle poklesu matematického kritéria) ako nejaké dostatočne malé číslo (prah, threshold)

Podobný algoritmus sa aplikuje aj na ***body na ploche***

GM vs KM

Porovnanie pozitív a negatív merania v 2D a 3D prístupe (1)

Metodika merania súradníc (semi)landmarkov a výpočtu ich reliability na 2D fotografiách ako projekciách šiestich pohľadov (frontálny, laterálny sin. a dex., bazálny, vertikálny, sagitálny a okcipitálny) je problematická z viacerých uhlov pohľadu

- rotácia lebky o uhol $\pm 5^\circ$ od jednej z vyššie spomenutých šiestich rovín kolmých na rovinu pohľadu vedie k umelým optickým deformáciám, ktoré skutočnú variabilitu merania značne skresľujú
- z toho dôvodu nie je možné hovoriť o kolmých (ortogonálnych) projekciách lebky do rovín kolmých na rovinu pohľadu
- je možné tieto roviny približne odhadnúť len z 3D rekonštrukcie lebky pomocou (semi)landmarkov, teda ***striktne matematicky***, ako roviny najbližšie k množine vybraných (semi)landmarkov v zmysle metódy najmenších štvorcov (MNŠ)

GM vs KM

Porovnanie pozitív a negatív merania v 2D a 3D prístupe (2)

Theorem (definícia)

Frankfurtská horizontála – *MNŠ rovina štatisticky odhadnutá zo súradníc štytoch bodov porion sin. a dex. a bodov orbitale sin. a dex.*

Theorem (definícia)

Mediánna rovina – *MNŠ rovina štatisticky odhadnutá zo súradníc všetkých nepárových (semi)landmarkov .*

GM vs KM

Porovnanie pozitív a negatív merania v 2D a 3D prístupe (3)

Nepresnosť manuálneho stanovenia ***Frankfurtskej horizontály*** vyplýva z porušenia teoretického predpokladu geometrie štyroch bodov v rovine, kde úsečky *porion* sin. – *orbitale* sin. a *porion* dex. – *orbitale* dex. nemusia ležať v jednej rovine (a spravidla neležia, čo sa dá preveriť jedine matematicky, nakoľko nie je možné nastaviť lebku kranioforom presne do Frankfurtskej horizontály a ani asymetriu lebky presne ohodnotiť vizuálne), čo vedie k nepresnosti merania mnohých mier.

Podobne manuálne stanovenie ***mediánnej roviny*** vedie k ďalším nepresnostiam, ktoré sú skomplikované hlavne veľkým počtom nepárových (semi)landmarkov.

Chyby stanovenia mediánnej roviny sú potom v praxi kombinované s nepresným stanovením Frankfurtskej horizontály.

GM vs KM

Porovnanie pozitív a negatív merania v 2D a 3D prístupe (4)

- nenzávisle na tom, či je lebka v normách nasnímaná správne alebo nesprávne, ***lineárne rozmery projektované do roviny (normy) budú kratšie, ak ich koncové body neležia v jednej rovine rovnobežnej s normou***
- rotácia lebky o nejaký uhol od normy túto chybu ešte zväčší
- ak máme nejakú ***nepriamu lineárnu mieru***, teda mieru dopočítanú z dvoch priamo zmeraných lineárnych mier, táto nepriama miera bude akceptovateľná len vtedy, ak všetky koncové body ležia v jednej rovine

Príklad: neplatí, keď zoberieme sumu vzdialeností *nasion* a *prosthion* plus výšku prvého horného rezáka M91 (ekvivalentná približne vzdialenosti *nasion* a *stomion* u živého človeka, teda ekvivalentná M48c) plus výšku mandibuly (výška prvého dolného rezáka M81(2)) plus výšku brady *infradentale* – *gnathion* M69), ktorá nie je rovná výške tváre M47

GM vs KM

Porovnanie pozitív a negatív merania v 2D a 3D prístupe (5)

- vlastné snímanie lebky v jednotlivých normách by malo byť vykonané tak, aby ***os objektívu fotoaparátu bola kolmá na rovinu stanovenú príslušnou normu a navyše bola na kolmici vychádzajúcej z centroidu lebky*** (tento je možné odhadnúť len približne)
- pri manuálnom 3D meraní je nutné, aby bol ***uhol pohľadu merajúceho človeka na malú oblasť lebky, v ktorej sa landmark nachádza, kolmý***
- tento pohľad je dobré ***kombinovať s pohľadom z iných uhlov***, čo je možné ***len sekvenčne*** za sebou
- v 2D takýto postup nahrádza kolmý pohľad na malú oblasť fotografie lebky okolo landmarku
- pri poloautomatickom 3D meraní je možné nahliadnuť na oblasť okolo landmarku ***z troch rôznych rovín pohľadu simultánne***, ako aj priamo v 3D
- 3D obraz je možné rotovať podľa potreby, čo je veľkou výhodou oproti 2D meraniu a manuálnemu 3D meraniu

GM vs KM

Porovnanie pozitív a negatív merania v 2D a 3D prístupe (6)

Meranie alebo vypočítanie hodnoty skutočného alebo ***antropometrického rozmeru*** (tu lineárneho) je možné len v 3D, keď jej výpočtovo zodpovedá ***euklidovská vzdialenosť dvoch bodov*** – tri podzložky mier, ktoré predstavujú dekompozíciu antropometrickej miery na komponenty x, y a z za predpokladu, že lebka je orientovaná do Frankfurtskej horizontály a mediánnej roviny súčasne

1. ***kompoment mediánno-laterálny*** (x-komponent), rovný absolútnej hodnote rozdielu x-ových súradníc dvoch bodov;
2. ***kompoment inferio-superiórny*** (y-komponent), rovný absolútnej hodnote rozdielu y-ových súradníc dvoch bodov;
3. ***kompoment posterio-anteriórny*** (z-komponent), rovný absolútnej hodnote rozdielu z-ových súradníc dvoch bodov.

GM vs KM

Porovnanie pozitív a negatív merania v 2D a 3D prístupe (7)

- zoznam je modifikovaný podľa Farkasa (1994), ktorý uvádza komponenty y a z opačne a nehovorí o komponentoch, ale o pozíciách v zmysle relatívnej polohy bodov z pohľadu ***anatomického súradnicového systému***
- náš systém vychádza z konvencie používanej v ***počítačovej grafike***, kde
  1. x-os je horizontálna (orientovaná zľava – doprava, s pozitívnou poloosou vpravo od nuly)
  2. y-os vertikálna (orientovaná zdola – hore, s pozitívnou poloosou nad nulou)
  3. z-os je orientovaná v smere kolmom na xy-rovinu (rovinu obrazovky, s pozitívnou poloosou pred obrazovkou)
- na rozdiel od Farkasa (1994) je logickejšie hovoriť *inferio-superiórny* a nie *superio-inferiórny* (podobne *posterio-anteriórny* a nie *anterio-posteriórny*) v zmysle jednotnej orientácie jednotlivých komponent (smeru od negatívnej k pozitívnej poloosi).

GM vs KM
Reliabilta merania, biologická a geometrická homológia (1)

- landmarky typu 1 sú vždy biologicky a geometricky homologické
- landmarky ostatných typov nie sú skoro nikdy biologicky homologické, ale vždy sú geometricky homologické
- landmarky digitalizované v 2D z jednotlivých noriem obsahujú najmenej dve tretiny informácie obsiahnutej v 3D
- z tohto dôvodu je presnejšie digitalizovať (semi)landmarky priamo v 3D alebo v zrekonštruovanom 3D z niekoľkých projekcií (noriem)
- z tohto hľadiska je 2D možné používať len vtedy, keď 3D nie je k dispozícii
- definície mnohých landmarkov sú vytvorené za predpokladu orientácie lebky vo *Frankfurtskej horizontále* a obsahujú v sebe orientácie – anteriórnu, posteriórnu, inferiórnu, superiórnu, mediálnu a/alebo laterálnu
- mnohé landmarky sú definované ako prienik nejakej krivky (príp. štruktúry) s *mediánnou rovinou*

GM vs KM
Reliabilta merania, biologická a geometrická homológia (2)

- obe tieto roviny však nie je možné v praxi objektívne pred meraním určiť, len subjektívne odhadnúť ich polohu
- preto landmarky, ktorých ***definície sú závislé od orientácie alebo prieniku s mediánnou rovinou, môžu mať teoreticky horšiu reliabilitu ako landmarky s definíciou od týchto rovín nezávislou*** (napr. *glabella*, *orbitale*, *zygion*, *gnathion* a *menton*)
- je možné predpokladať, že (semi)landmarky na krivkách môžu mať ***reliabilitu horšiu v smere krivky ako v smere na ňu kolmom*** [všetky (semi)landmarky okrajov očníc, napr. *orbitale* a *ektokonchion*]
- ***torzia krivky*** by na reliabilitu vplyv mať nemala
- reliabilita (semi)landmarkov na ploche je závislá na jej krivosti, kde ***menej zakrivená plocha môže prinášať horšie možnosti na určenie súradníc (semi)landmarkov ako plocha viac zakrivená*** (napr. *gnathion*, *euryon*)

GM vs KM
Reliabilta merania, biologická a geometrická homológia (3)

- ***zachovanosť štruktúr*** na ploche lebky, ako napr. šev (*sutura lambdoidea*, *s. occipitomastoidea* a *s. parietomastoidea*) alebo pozorovaných a chrbtových (hrebeňových) kriviek (*lineae temporales* a ich možné rozdelenie a následná nutná modifikácia definície polohy bodov) hrá tiež dôležitú úlohu pri meraní súradníc (napr. *asterion* a *frontotemporale*)
- ***neprítomnosť štruktúr*** (napr. odlomený dolný okraj nosových kostí) takisto znemožňuje spoľahlivo zmerať súradnice niektorých (semi)landmarkov (napr. *nasospinale* a *rhinion*)
- reliabilitu merania môže tiež negatívne ovplyvniť ***„manuálna“ konštrukcia*** (napr. *opisthocranion*, *staphylion*, *ektokonchion* a *auriculare*)
- do kategórie ***„manuálnych” („vizuálnych“) výpočtov patrí aj meranie súradníc (semi)landmarkov ako extrémov zakrivenia*** (porovnaj napr. *subspinale*, *mastoideale*, *gnathion* a *gonion*)

GM vs KM
Reliabilta merania, biologická a geometrická homológia (4)

- ***matematickým výpočtom v PC je možné „manuálne” merania spresniť alebo nahradiť***
  1. priesečníky s mediánnou rovinou (napr. *pogonion*, *glabella*, *opisthion* a *basion*)
  2. (semi)landmarky závislé na orientácii (napr. *gnathion*, *menton*, *glabella*, *orbitale* a *zygion*)
  3. skonštruované (semi)landmarky (napr. *staphylion*, *ektokonchion* a *auriculare*)
  4. (semi)landmarky ako lokálne extrémy zakrivenia (napr. *mastoideale*, *gonion*, *gnathion* a *subspinale*)
  5. koncové body dĺžkových mier (napr. *opisthocranion*, *zygion* a *euryon*)

GM vs KM
Definície vybraných mier a indexov (1)

- M1 – ***najväčšia dĺžka mozgovne*** – euklidovská vzdialenosť *glabella – opisthocranion*;
- M5 – ***dĺžka bázy lebky*** – euklidovská vzdialenosť *nasion – basion*;
- M8 – ***najväčšia šírka mozgovne*** – euklidovská šírka mozgovne kolmá na mediánnu rovinu, vzdialenosť *euryon sin. – euryon dex.*;
- M9 – ***najmenšia šírka čela*** – euklidovská vzdialenosť *frontotemporale sin. – frontotemporale dex.*;
- M11 – ***biaurikulárna šírka*** – euklidovská vzdialenosť *auriculare sin. – auriculare dex.*;
- M17 – ***basion-bregmatická výška lebky*** – euklidovská vzdialenosť *basion – bregma*;
- M40 – ***dĺžka tváre*** – euklidovská vzdialenosť *basion – prosthion*;
- M45 – ***bizygomatická šírka tváre*** – euklidovská vzdialenosť *zygion sin. – zygion dex.*;
- M47 – ***výška tváre*** – euklidovská vzdialenosť *nasion – gnathion*;
- M48 – ***výška hornej časti tváre*** – euklidovská vzdialenosť *nasion – prosthion*;

GM vs KM
Definície vybraných mier a indexov (2)

- M51 – ***šírka očnice*** – euklidovská vzdialenosť *maxillofrontale – ektokonchion*;
- M52 – ***výška očnice*** – euklidovská vzdialenosť horného a dolného okraja očnice kolmo na M51;
- M54 – ***šírka nosa*** – najväčšia šírka *apertura piriformis*;
- M55 – ***výška nosa*** – euklidovská vzdialenosť *nasion – nasospinale*;
- M61 – ***maxilloalveolárna šírka*** – euklidovská vzdialenosť *ektomolare sin. – ektomolare dex.*;
- I1 – ***dĺžko-šírkový index*** – M8/M1;
- I2 – ***dĺžko-výškový index*** – M17/M1;
- I3 – ***šírko-výškový index*** – M17/M8;
- I13 – ***transverzálny frontoparietálny index*** – M9/M8;
- I38 – ***index tváre*** – M47/M45;
- I39 – ***index hornej časti tváre*** – M48/M45;

GM vs KM
Definície vybraných mier a indexov (3)

- I42 – ***index očnice*** – M52/M51;
- I42(1) – ***index orbitofacialis transversalis*** – M51/M45;
- I42(2) – ***index orbitofacialis verticalis*** – M52/M48;
- I48 – ***index nosa*** – M54/M55;
- I55 – ***index platofacialis transversalis*** – M61/M45;
- I60 – ***celustný index*** – M40/M5;
- I69 – ***dĺžkový kraniofaciálny index*** – M40/M1;
- I71 – ***transverzálny kraniofaciálny index*** – M45/M8;
- I73(a) – ***jugofrontálny index*** – M9/M45.

GM vs KM
Miery a indexy a ich geometrická homológia

V KM je známych približne 120 mier a 80 indexov na lebke, dĺžkové miery sú definované pomocou (semi)landmarkov

1. ***biologickú homológiu*** mnohých vyššie spomenutých lineárnych mier a indexov je náročné zabezpečiť, nakoľko ***miery nie sú definované pomocou biologicky homologických landmarkov*** (napr. M1, M8, M9, M11, M45, M47, M51, M52, M54 a M61; potom aj I1, I2, I3, I13, I38, I39, I42, I48, I55, I69, I71 a I73(a))
2. ***geometrickú homológiu*** však zabezpečiť možné je, avšak len matematicky

GM vs KM
Výpočet reliability (1)

- ***intraindividuálne*** a ***interindividuálne chyby*** možno objektívne matematicky hodnotiť buď zvlášť pre x- a y-súradnice
  1. ako ***výberový rozptyl*** x- a y-súradníc) alebo
  2. simultánne ako ***celkový rozptyl*** (stopa kovariančnej matice príslušného landmarku)
- ***lineárny zmiešaný regresný model***
  1. so strednou hodnotou x- a y-súradníc ako *fixnými efektmi*
  2. identifikačné číslo osoby, ktorá meria, a poradia opakovania ako *náhodnými efektmi*

GM vs KM
Výpočet reliability (2)

- ***chyby*** sú počítané v
  1. ***absolútnej škále*** v milimetroch
  2. ***relatívnej škále*** škálované výberovým rozptylom x- a y-súradníc každého landmarku, resp. *celkovým výberovým rozptylom*
- ***miery reliability*** – rozsah výberu pre výpočet reliability rovný minimálne $10 = 1 \times 5 \times 2$ (optimálne $125 = 5 \times 5 \times 5$)
  1. merania na minimálne jednej lebke (optimálne piatich)
  2. je potrebné opakovať aspoň päťkrát
  3. pri účasti aspoň dvoch (optimálne päť) osôb merajúcich pri štandardizovaných podmienkach
  4. opakované snímanie toho istého objektu (lebky) aspoň dvakrát laser-skenerom, stereogrametrickým kamerovým systémom alebo CT (podľa použitého prístroja)

GM vs KM
Závery

1. použitie 2D fotografií (napr. sklených negatívov) na meranie je možné z hľadiska reliability použiť len v prípadoch, keď nie je originálna lebka v 3D k dispozícii
2. ak máme k dispozícii lebku alebo jej časti v 3D, použitie medzilandmarkových vzdialeností na analýzu nepostačuje
3. na opis tak komplexného objektu, ako je ľudská lebka alebo nejaká jej časť, nestačí len použitie landmarkov, ale je nutné použiť okrem landmarkov aj anatomické krivky
4. optimálne je doplniť ich aj o anatomické plochy

GM vs KM
Závery

1. tam, kde sa končí práca ***antropológa***, začína sa práca z oblasti ***počítačovej geometrie*** a ***fyziky*** s cieľom získať počítačovú rekonštrukciu objektu, po ktorej nasleduje práca ***numerického matematika*** alebo ***štatistika***; tú môže potom doplniť štúdia z oblasti ***diferenciálnej geometrie*** a pod.
2. je zrejmé, že **GM je *interdisciplinárna veda*** na pomedzí niekoľkých prírodovedných odborov, ktoré by mali v záujme objektívnych vedeckých poznatkov spolupracovať

Conclusions

- *2D* $\longmapsto$ *3D* (fundamental for understanding of 'cranium complexity', 'landmark spatial relationships', 'integration', 'modularity')
- combination of distances/indices and GMM (statistical quantification of association of 'spatial effects of cranium variability' and internal/external measurement(s))
- extension of landmark shape information by semilandmarks on curves and surfaces increases the relative weights of shape within the form space (crucial increase of biological information)
- remarkable semilandmark 'visualization effect' in contrary to landmarks or indexes application only
- **CT-scans**, **laser-scans**, **stereo-camera image campture**, **MicroScribe**
- **Edgewarp**, **AMIRA** and/or **Landmark**; **R-software** (cran.r-project.org)

Štatistická analýza tvaru a obrazu

Interdisciplinárny prístup
postavený na matematických a štatistických základoch

Stanislav Katina

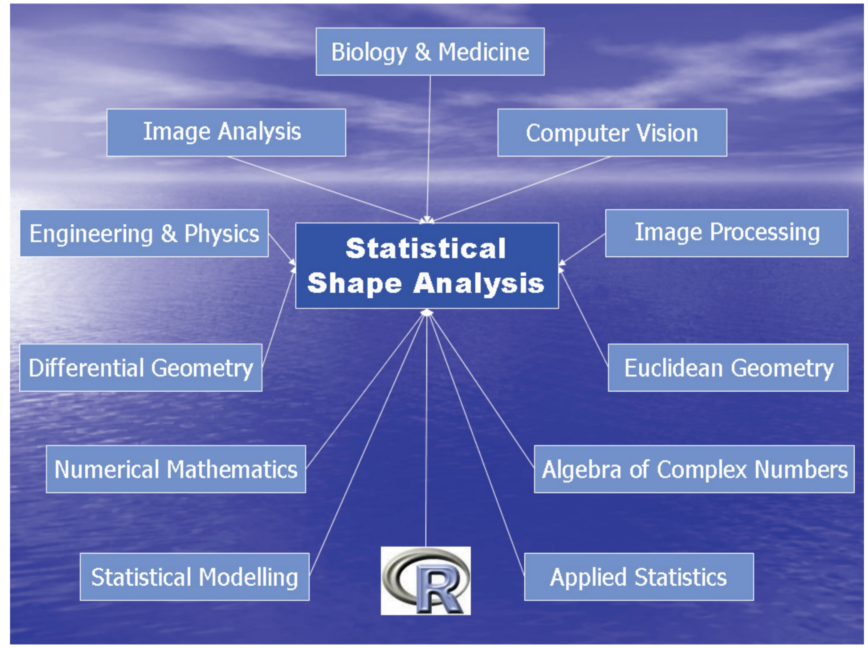
[1]Ústav matematiky a statistiky
Přírodovědecká fakulta
Masarykova Univerzita v Brne

Tento učební text vznikl za přispění Evropského sociálního fondu a státního rozpočtu ČR prostřednictvím Operačního programu Vzdělávání pro konkurenceschopnost v rámci projektu Univerzitní výuka matematiky v měnícím se světě (CZ.1.07/2.2.00/15.0203).

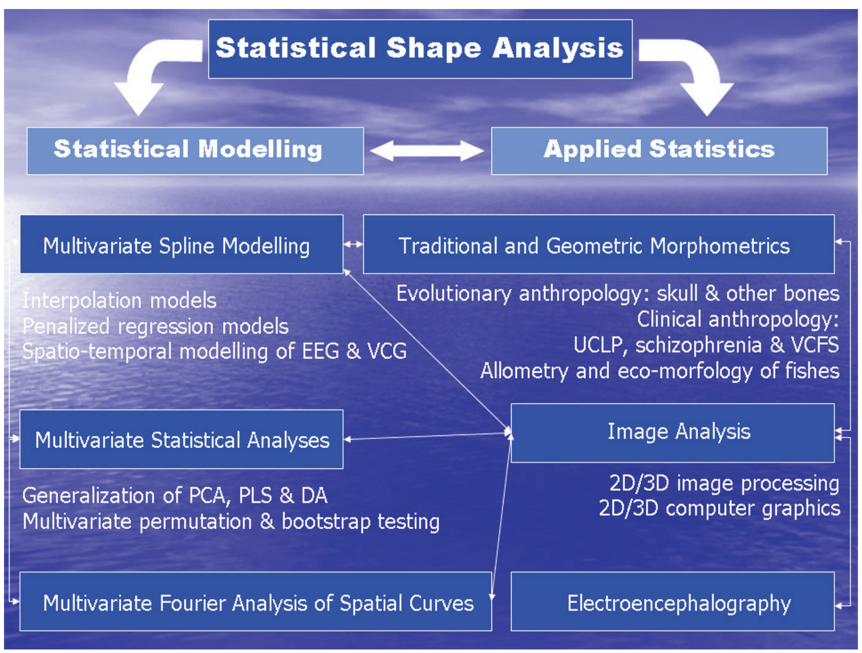
evropský sociální fond v ČR EVROPSKÁ UNIE MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Shape Analysis—Interdisciplinary View



Shape Analysis Vision $\approx$ My Partial Research Tree



Transformácie

Otočenie

Definition (Otočenie a optimálne otočenie medzi dvoma objektami)

Rotačná matica rotácie v smere a proti smeru hodinových ručičiek má v 2D nasledovný tvar

$$\boldsymbol{\Gamma} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\Gamma} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

a $\mathbf{X}_{(k+1)\times 2} = (\mathbf{x}_1, \dots \mathbf{x}_k, \mathbf{1}_2)^T$. Potom dostaneme transformáciu v tvare $\mathbf{X}_r = \mathbf{X}\boldsymbol{\Gamma}$.

Optimálna rotácia medzi dvoma objektami. Nech $\mathbf{X}_1$ a $\mathbf{X}_2$ sú $k \times d$ konfiguračné matice. Nech $\boldsymbol{\Gamma}$ je rotačná matica, ktorá minimalizuje $\|\mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_2\boldsymbol{\Gamma}\|^2$ alebo maximalizuje $tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_2\boldsymbol{\Gamma}\right)$. *Optimálne znamienkovaná SVD* matice $\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_2$ je definovaná ako $\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_2 = \mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{V}^T$, kde $\mathbf{U}$ a $\mathbf{V}$ sú rotačné matice a elementy matice $\boldsymbol{\Lambda} = diag(\lambda)$, $\lambda = (\lambda_1, \dots\lambda_d)^T$ sú optimálne znamienkované. Ďalej $tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_2\boldsymbol{\Gamma}\right) = tr\left(\boldsymbol{\Lambda}\left(\mathbf{V}^T\boldsymbol{\Gamma}\mathbf{U}\right)\right)$ je jednoznačne maximalizovaná cez všetky rotačné matice $\boldsymbol{\Gamma}$, kde $\mathbf{V}^T\boldsymbol{\Gamma}\mathbf{U} = \mathbf{I}$ a $\boldsymbol{\Gamma} = \mathbf{V}\mathbf{U}^T$, z čoho vyplýva, že $tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_2\boldsymbol{\Gamma}\right) = \sum_{j=1}^{d} \lambda_j = \alpha, \alpha > 0$.

Transformácie
Posunutie a škálovanie

Definition (Posunutie)

Nech $t_{x(1)}$ je translačný koeficient translácie v smere osi $x^{(1)}$ a $t_{x(2)}$ translačný koeficient translácie v smere osi $x^{(2)}$, potom má **translačná matica** $\mathbf{T}_t$ v 2D tvar

$$\mathbf{T}_t = \begin{pmatrix} 1 & 0 & t_{x(1)} \\ 0 & 1 & t_{x(2)} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Transformáciu **posunutie** píšeme v tvare $\mathbf{X}_t = \mathbf{X}\mathbf{T}_t$.

Definition (Škálovanie)

Nech $s_{x(1)}$ je škálovací koeficient škálovania v smere osi $x^{(1)}$ a $s_{x(2)}$ je škálovací koeficient škálovania v smere osi $x^{(2)}$, potom má **škálovacia matica** $\mathbf{T}_{sc}$ v 2D tvar

$$\mathbf{T}_{sc} = \begin{pmatrix} s_{x(1)} & 0 & 0 \\ 0 & s_{x(2)} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Transformáciu **škálovanie** píšeme v tvare $\mathbf{X}_{sc} = \mathbf{X}\mathbf{T}_{sc}$.

Transformácie
Procrustova súperimpozícia—Procrustova k-bodová registrácia

Definition (Procrustove tvarové súradnice)

Procrustove tvarové súradnice sú definované ako $\mathbf{x}_{P,ij} = c_i\mathbf{\Gamma}_i(\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{t}_i)$, kde c_i je *škálovací koeficient*, $\mathbf{\Gamma}_i$ je *rotačná matica* a $\mathbf{t}_i$ *translačný koeficient*, $\mathbf{x}_{P,ij}$ sú riadky matíc $\mathbf{X}_{P,i}$, $i = 1, ...n$. Potom hovoríme, že $\mathbf{X}_i, i = 1, 2, ...n$ sú v ***optimálnej Procrustovej pozícii*** v zmysle 'tvaru' ak

$$\arg\inf \sum_{1\le i\le j\le n} \| \mathbf{X}_{P,i} - \mathbf{X}_{P,j} \|^2 =$$

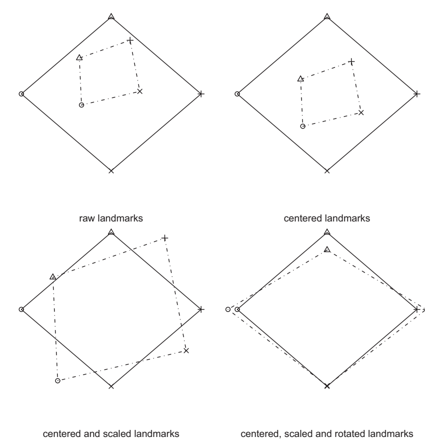
$$\underbrace{\arg\inf}_{\substack{\mathbf{\Gamma}_1,\dots\mathbf{\Gamma}_n \in SO(2) \\ \mathbf{t}_1,\dots\mathbf{t}_n\in\mathbb{R}^d, c_1,c_2,\dots c_n\in\mathbb{R}^+}} \left\{ \sum_{1\le i\le j\le n} \left\| c_i\mathbf{\Gamma}_i\left(\mathbf{X}_i - \mathbf{1}_k\mathbf{t}_i^T\right)^T - c_j\mathbf{\Gamma}_j\left(\mathbf{X}_j - \mathbf{1}_k\mathbf{t}_j^T\right)^T \right\|^2 \right\}$$

Transformácie
Procrustova súperimpozícia—Procrustova k-bodová registrácia

Iteračný algoritmus Procrustovej superimpozície:

1. najprv vypočítame **centroidy** $\overline{\mathbf{x}}_{c,i}$ každej konfiguračnej matice $\mathbf{X}_i$; konfiguračné matice potom **centrujeme**, kde $\mathbf{X}_{c,i} = \mathbf{X}_i - \mathbf{1}_k\overline{\mathbf{x}}_{c,i}^T$ (t.j. centroidy $\overline{\mathbf{x}}_{c,i}$ sú superponované),
2. potom vypočítame **centroidovú veľkosť** každej matice $\mathbf{X}_i$ (odmocnina sumy euklidovských vzdialeností centroidu od súradníc landmarkov), t.j. $CS_i = \sqrt{(\sum_{j=1}^k \|\mathbf{x}_{ij} - \overline{\mathbf{x}}_{c,i}\|_2^2)} = \|\mathbf{X}_{c,i}\| = tr(\mathbf{X}_{c,i}\mathbf{X}_{c,i}^T)$
3. **centrované konfiguračné matice** $\mathbf{X}_{c,i}$ sú **preškálované** tak, aby $CS_i = 1$, kde dostaneme **centrované normované konfiguračné matice** $\mathbf{X}_{cn,i} = \mathbf{X}_{c,i}/\|\mathbf{X}_{c,i}\|$
4. každá $\mathbf{X}_{cn,i}, i = 2, 3, ...n$, je optimálne rotovaná k $\mathbf{X}_{cn,1}$ rotačnou maticou $\mathbf{\Gamma}_i$, ktorá minimalizuje $\|\mathbf{X}_{cn,1} - \mathbf{X}_{cn,i}\mathbf{\Gamma}_i\|^2$ alebo maximalizuje $tr\left(\mathbf{X}_{cn,1}^T\mathbf{X}_{cn,i}\mathbf{\Gamma}_i\right)$, kde sme použili *optimálne znamienkovanú SVD* $\mathbf{X}_{cn,1}^T\mathbf{X}_{cn,i} = \mathbf{U}_i\mathbf{\Lambda}_i\mathbf{V}_i^T$, $\mathbf{U}_i$ a $\mathbf{V}_i$ sú rotačné matice a elementy $\mathbf{\Lambda}_i = diag(\lambda_i)$, $\lambda_i = (\lambda_{i1}, ...\lambda_{i,dk})^T$ sú optimálne znamienkované, $tr\left(\mathbf{X}_{cn,1}^T\mathbf{X}_{cn,i}\mathbf{\Gamma}_i\right) = tr\left(\mathbf{\Lambda}_i\left(\mathbf{V}_i^T\mathbf{\Gamma}_i\mathbf{U}_i\right)\right)$ sú jednoznačne maximalizované rotačnými maticami $\mathbf{\Gamma}_i$, kde $\mathbf{V}_i^T\mathbf{\Gamma}_i\mathbf{U}_i = \mathbf{I}$, $\mathbf{\Gamma}_i = \mathbf{V}_i\mathbf{U}_i^T$, $tr\left(\mathbf{X}_{cn,1}^T\mathbf{X}_{cn,i}\mathbf{\Gamma}_i\right) = \sum_{j=1}^d \lambda_{ij} = \alpha_i, \alpha_i > 0$; výsledkom sú matice $\mathbf{X}'_{P,i}$,
5. vypočítaj priemernú konfiguračnú maticu $\overline{\mathbf{X}}'_P$ matíc $\mathbf{X}'_{P,i}, i = 1, 2, ...n$
6. zopakuj (4) a (5) pokiaľ rozdiel medzi krokom $i-1$ a i nebude dostatočne malý

Transformácie
Procrustova súperimpozícia—Procrustova k-bodová registrácia



Obrázok: Procrustova geometria

Transformácie
Skosenie

Definition (Skosenie)

Nech $\alpha_{x^{(1)}}$ je koeficient skosenia pozdĺž osi $x^{(1)}$a $\alpha_{x^{(2)}}$ koeficient skosenia pozdĺž osi $x^{(2)}$, potom **matica skosenia** $\mathbf{T}_{sh}$ pozdĺž osi $x^{(1)}$ a pozdĺž osi $x^{(2)}$ má tvar

$$\mathbf{T}_{sh} = \begin{pmatrix} 1 & \tan\alpha_{x^{(1)}} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{T}_{sh} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \tan\alpha_{x^{(2)}} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{T}_{sh} = \begin{pmatrix} 1 & \tan\alpha_{x^{(1)}} & 0 \\ \tan\alpha_{x^{(2)}} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Transformáciu **skosenie** píšeme v tvare $\mathbf{X}_{sh} = \mathbf{X}\mathbf{T}_{sh}$.

Transformácie
Zrkadlenie

Definition (Zrkadlenie)

Nech **matica zrkadlenia** $\mathbf{T}_r$ osovej súmernosti okolo osi $x^{(1)}$ a $x^{(2)}$ má tvar

$$\mathbf{T}_r = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{T}_r = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Transformáciu **zrkadlenie** píšeme v tvare $\mathbf{X}_r = \mathbf{X}\mathbf{T}_r$.

Definition (Preznačené a zrkadlovo súmerné Prokrustove súradnice)

Nech $\mathbf{Q}$ je ***permutačná matica***, ktorá preznačí každý každý pár súradníc párových landmarkov (vymení kódovanie ľavý za pravý landmark a naopak), nech $\mathbf{A}$ je ortogonálna matica s determinantom rovným -1. Potom $\mathbf{X}_{P,i}^{(R)} = \mathbf{Q}\mathbf{A}_i\mathbf{X}_{P,i}$ sú matice ***preznačených a zrkadlovo súmerných*** (relabeled and reflected) ***Procrustových tvarových súradníc***. V prípade, že MNŠ priamka, na ktorej ležia všetky nepárové landmarky je zároveň aj osou y (hovoríme, že tvar charakterizovaný landmarkami je vhodne orientovaný), potom $\mathbf{A} = \mathbf{T}_r$.

Transformácie
Affínna a neafínna transformácia

Definition (Affínna a neafínna transformácia)

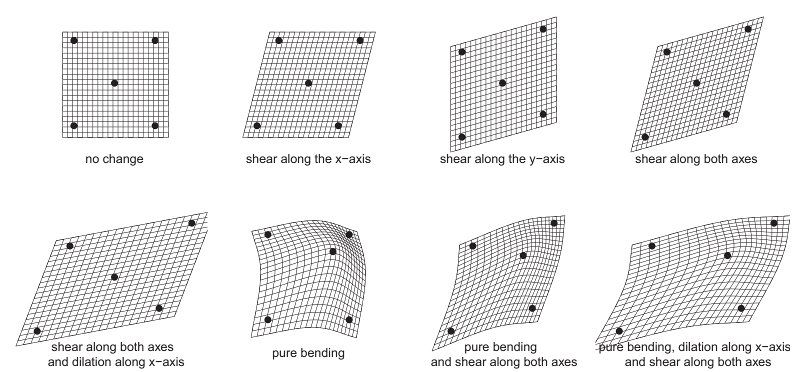
Majme mnohorozmerný lineárny regresný model (*MMLRM*, ***Multivariate Multiple Linear Regression Model***) $k \times d$ matíc $\mathbf{X}_{P,i}$ ($d = 2, 3$) na $\overline{\mathbf{X}}_P$ definovaný ako

$$\mathbf{X}_{P,i} = \overline{\mathbf{X}}_P\beta_i + \epsilon_i; \widehat{\beta}_i = \left(\overline{\mathbf{X}}_P^T\overline{\mathbf{X}}_P\right)^{-1}\overline{\mathbf{X}}_P^T\mathbf{X}_{P,i}, i = 1, 2, ...n.$$

Nech $\widehat{\beta}_i = \left(\widehat{\beta}_{i1} \vdots \widehat{\beta}_{i2}\right)$ pre 2D a $\widehat{\beta}_i = \left(\widehat{\beta}_{i1} \vdots \widehat{\beta}_{i2} \vdots \widehat{\beta}_{i3}\right)$ pre 3D, potom

1. **afínne procrustove súradnice**: $\mathbf{X}_{A,i} = \mathbf{X}_{P,i}\widehat{\beta}_i$
2. **neafínne procrustove súradnice** (reziduály *MMLRM*): $\mathbf{X}_{NA,i} = \overline{\mathbf{X}}_P + (\mathbf{X}_{P,i} - \mathbf{X}_{A,i})$

Transformácie
Affínne a neafínne transformácie



Obrázok: Affínne a neafínne transformácie – affínne transformácie (prvý riadok a prvý obrázok druhého riadka), neafínna transfomácia (druhý obrázok druhého riadka) a zložené transformácie (tretí a štvrý obrázok druhého riadka)

Example 1
Interpolačný a vyhladzovací regresný splajn

Example (DÚ 1)

Majme interpolačný model [IM1] ($f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{X}\beta, \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{1}_k & \mathbf{x} \\ \mathbf{1}_k^T & 0 & 0 \\ \mathbf{x}^T & 0 & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{w} \\ c \\ a \end{pmatrix}$$

kde $\mathbf{x}_{k\times 1} = (x_1, ..., x_k)^T$, $\mathbf{y}_{k\times 1} = (y_1, y_2, ..., y_k)^T$, $(\mathbf{S})_{ij} = \phi(x_i, x_j) = \frac{1}{12}|x_i - x_j|^3$.

1.1) Je vyššie uvedený model identický s modelom [IM2]

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{X}^*\beta^*, \mathbf{X}^* = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_k & \mathbf{x} & \mathbf{S} \\ 0 & 0 & \mathbf{x}^T \\ 0 & 0 & \mathbf{1}_k^T \end{pmatrix}, \beta^* = \begin{pmatrix} c \\ a \\ \mathbf{w} \end{pmatrix}?$$

1.2) Prečo musí byť matica plánu v podobe $\mathbf{X}$ v modeli IM1 alebo $\mathbf{X}^*$ v modeli IM2?

1.3) Ako vypočítame odhady $\widehat{\beta}$ a $\widehat{\beta}^*$? [napísať vzorec] Akú funkciu v R na to použijeme?

1.4) V akom vzťahu je odhad $\widehat{\mathbf{y}}$ k realizáciám $\mathbf{y}$?

Example 2
Interpolačný a vyhladzovací regresný splajn

Example (DÚ 2)

Majme model $y_i = \sin(2\pi x^3)^3$, kde $x_i \in \langle 0, 1\rangle$, $\epsilon \sim 0.1 \times N(0,1)$, $n = 101$. V R zapíšeme tento model v podobe

```
sinusovka <- function(x)
x <- seq(0,1,by=0.01)
y <- sinusovka(x) + 0.1*rnorm(101)
```

Majme penalizovaný regresný model [PRM1]

$$\mathbf{y}_P = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0}_{k+2} \end{pmatrix} = \mathbf{X}_P\beta + \epsilon, \mathbf{X}_P = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{\text{dm}} \\ \sqrt{\lambda}\mathbf{R} \end{pmatrix}, \mathbf{S}_P = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{2\times 2} & \mathbf{0}_{2\times k} \\ \mathbf{0}_{k\times 2} & \mathbf{S} \end{pmatrix},$$

kde $\mathbf{X}_{\text{dm}} = (\mathbf{1}_k \vdots \mathbf{x} \vdots \mathbf{S})$ je **penalizovaná časť matice plánu**, $(\mathbf{S})_{ij} = \phi(x_i, x_j) = \frac{1}{12}|x_i - x_j|^3$, $\mathbf{S}_P = \mathbf{R}^T\mathbf{R}$ a $\sqrt{\lambda}\mathbf{R}$ je **penalizovaná časť matice plánu**. Potom penalizovanú sumu štvorcov budeme písať v tvare $SS_{\text{pen}} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}_{\text{dm}}\beta)^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}_{\text{dm}}\beta) + \lambda\beta^T\mathbf{S}_P\beta = \mathbf{y}^T\mathbf{y} - 2\beta^T\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{y} + \beta^T(\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)\beta$.

Example 2
Interpolačný a vyhladzovací regresný splajn

Pozn.: Po derivovaní SS_{pen} podľa β a položení tejto prvej derivácie rovné nule, dostaneme $(\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)\widehat{\beta} = \mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{y}$, kde $\widehat{\beta} = (\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)^{-1}\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{y}$, "hat" (projekčná) matica $\mathbf{A} = \mathbf{X}_{\text{dm}}(\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)^{-1}\mathbf{X}_{\text{dm}}^T$ a potom $\widehat{\mathbf{y}} = \mathbf{A}\mathbf{y}$. Efektívnejšie je použiť funkciu `lm(yp~xp-1)` použitím vektora $\mathbf{y}_P$ a matice $\mathbf{X}_P$ z modelu PRM1 (funkcia `lm()` používa na výpočet QR rozklad a nie maticu $\mathbf{A}$—pozri prednášky z numerickej matematiky).

2.1) Použitím IM1 naprogramujte v R funkciu na výpočet intepolačného splajnu pre dáta $\mathbf{y}$ a odhadnite $\widehat{\mathbf{y}}$. Výsledky skontrolujte použitím funkcie `spline(x,y,method = "natural")`. Nakreslite rozptylový graf (x_j, y_j) spolu s krivkou $(x_j, \widehat{y}_j)$. Použite funkcie `plot(x,y)`, `lines(x,y)`.

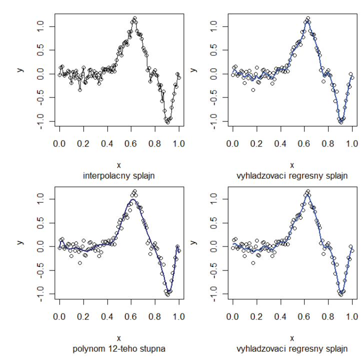
2.2) Použitím PRM1 naprogramujte v R funkciu na výpočet penalizovaného regresného splajnu pre dáta $\mathbf{y}$ a odhadnite $\widehat{\mathbf{y}}$ pre $\lambda = 4.774251 \times 10^{-06}$. Výsledky skontrolujte použitím funkcie `smooth.spline(x,y,all.knots = TRUE)` a porovnajte s polynomickým regresným modelom 12-teho stupňa (použite funkciu `lm(y~poly(x,12))`). Nakreslite rozptylový graf (x_j, y_j) spolu s krivkou $(x_j, \widehat{y}_j)$. Použite funkcie `plot(x,y)`, `lines(x,y)`.

Pomôcka: odmocninu matice $\mathbf{S}_P$ vypočítame pomocou SVD `eigen(Sp,symmetric=TRUE)`

2.3) Popíšte rozdiel medzi odhadmi IM1 a PRM1.

Example 2
Interpolačný a vyhladzovací regresný splajn

Graf bude vyzerať podobne ako nasledujúci.



Obrázok: Model $y_i = \sin(2\pi x_i^3)^3 + \epsilon$, kde $\epsilon \sim 0.1 \times N(0.1)$, $n = 101$; interpolačný splajn (vľavo hore), polynomický regresný model 12-teho stupňa (vľavo dole), vyhladzovací regresný splajn ($\lambda = 4.774251 \times 10^{-06}$, vpravo hore a dole)

Example 3
Interpolačný splajn

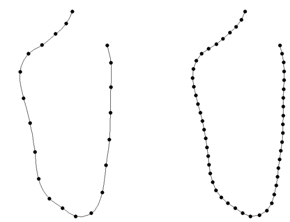
Example (DÚ 3)

Majme interpolačný model [IM1] a krivku **X** definovanú bodmi $(x_j^{(1)}, x_j^{(2)})$, kde $j = 1, 2, \ldots k$ a **X** je matica rozmerov $k \times 2$. Nech $\mathbf{d}_{ch}$ je vektor k **chordálnych (uhlových) vzdialeností**, kde $d_{ch}^{(j)}$ zodpovedá vzdialenosti bodov $(x_{j-1}^{(1)}, x_{j-1}^{(2)})$ a $(x_j^{(1)}, x_j^{(2)})$ krivky **X**, $j = 2, 3, \ldots k$; $d_{ch}^{(1)} = 0$. IM1 je počítaný pre $(d_{ch}^{(j)}, x_j^{(1)})$ a $(d_{ch}^{(j)}, x_j^{(2)})$; $j = 1, 2, \ldots k$ osobitne; vizualizujeme krivku $\widehat{\mathbf{X}}$ s k odhadnutými bodmi, kde j-ty bod je rovný $(\widehat{x}_j^{(1)}, \widehat{x}_j^{(2)})$, $j = 1, 2, \ldots k_l \geq k$. **X** sa nazýva **resamplovaná interpolovaná krivka X.**

3.1) Použitím IM1 interpolujte symphyseálnu krivku ($k = 21$; dáta `symphysis`) a resamplujte jej odhadnuté body pre $k_l = 50$. Použite pritom funkcie `"cumchord" <- function(X) cumsum(sqrt(apply((X-rbind(X[1,],X[-(nrow(X)),]))^2,1,sum)));` `CH <- cumchord(X); spline(CHD,...,method="natural"); approx();` `plot(...,asp=1,axes=FALSE); lines(); points()`. (Načítanie dát: `read.table("symphysis.txt",header=TRUE)`).

Example 3
Interpolačný a vyhladzovací regresný splajn

Graf bude vyzerať podobne ako nasledujúci.



Obrázok: Interpolovaná ($k = 21$; vľavo) a resamplovaná ($k_l = 50$; vpravo) symphyseálna krivka

Example 4
Interpolačný splajn

Example (DÚ 4)

Majme interpolačný model [IM3; thin-plate splajn, TPS] ($f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{1}_k & \mathbf{X} \\ \mathbf{1}_k^T & 0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{X}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{W} \\ \mathbf{c}^T \\ \mathbf{A} \end{pmatrix},$$

kde $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \ldots \mathbf{x}_k)^T$ a $\mathbf{Y} = (\mathbf{y}_1, \ldots \mathbf{y}_k)^T$, $(\mathbf{S})_{ij} = \phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$, $\phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2^2 \log\left(\|\mathbf{x}\|_2^2\right)$, $\forall \|\mathbf{x}\|_2 > 0$, ak $\|\mathbf{x}\|_2 = 0$, potom $\phi(\mathbf{x}) = 0$. Potom extrapolácia IM3 bude definovaná ako $\mathbf{Y}_l \longmapsto \mathbf{X} + l \times (\mathbf{X} - \mathbf{Y})$, kde $l \in \mathbb{R}$.

4.1) Použite IM3 (pre $l = 0$) a jeho l-násobnú extrapoláciu (l zvoľte ľubovoľne) na deformáciu kosoštvorca na deltoid (ich súradnice zvoľte ľubovoľne). Použite poznámku a programy uvedené na nasledujúcich troch slajdoch. Naprogramujte v R.

4.2) Tranformujte štvorec. Použite skosenie pozdĺž osi x (A) a pozdĺž osi y (B), skosenie pozdĺž oboch osí (C), skosenie pozdĺž oboch osí kombinované so škálovaním pozdĺž osi x (D) a pozdĺž osi y (E). Zapíšte použité transformačné matice. Naprogramujte v R. (teória viď. slajdy o transfomáciách)

Example 4
Interpolačný splajn IM3

Pozn. 1: *TPS* používame aj ako zobrazovaciu metódu, kedy hovoríme o **(ne)deformovanej štvorcovej TPS sieti** – kde ide o (nedeformovanú) štvorcovú sieť pre model $f : \mathbf{X} \longmapsto \mathbf{X}$ a deformovanú štvorcovú sieť pre model $f : \mathbf{X} \longmapsto \mathbf{Y}_l$. Ide v podstate o IM3 definovaný pre všetky uzly siete, kde $\mathbf{y}_j = \mathbf{f}(\mathbf{x}_j)$, $j = 1, \ldots n_{cp}$; n_{cp} (*cp* znamená "crossing points") je počet uzlov siete (je jednoduché model predefinovať na (ne)deformovanú obdĺžnikovú TPS sieť). V TPS $f : \mathbf{X} \longmapsto \mathbf{Y}_l$ sa použijú odhadnuté koeficienty **W**, **c** a **A** na interpolovanie uzlov siete. Jednotlivé uzly sú potom pospájané (v smere oboch osí pre rovnaké j) *lokálne lineárne* (úsečkami) alebo *interpolovanou krivkou* (použitím IM1 ako v DÚ 3).

Pozn. 2: Treba si uvedomiť, že kosoštvorcec a deltoid musia mať rovnakú **centroidovú veľkosť (CS)** a musia byť optimálne rotované jeden na druhý použitím **optimálne znamienkovanej SVD** (viď. slajdy o transfomáciách).

R-funkcie na výpočet TPS siete sú zobrazené na nasledujúcich dvoch slajdoch. Okrem nich použite aj funkcie `plot(...,asp=1,axes=FALSE); lines(); points(); arrows(..., length=0.1,lwd=2)`

Example 4
Interpolačný splajn IM3

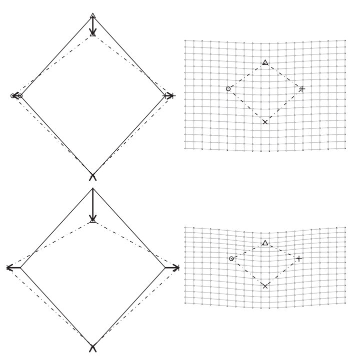
```
"tps2d" <- function(M, X, Y){
## M = uzly siete (pocet uzlov = n)
## X (vzor)
## Y (obraz)
k <- dim(X)[1]; n <- dim(M)[1]
P <- matrix(NA, k, k)
for (i in 1:k) {
for (j in 1:k) {
r2 <- sum((X[i,] - X[j,])^2)
P[i,j] <- r2*log(r2) } }
P[which(is.na(P))] <- 0
Q <- cbind(1, X)
L <- rbind(cbind(P,Q), cbind(t(Q),matrix(0,3,3)))
Y2 <- rbind(Y, matrix(0, 3, 2))
coefx <- solve(L) %*% Y2[,1]
coefy <- solve(L) %*% Y2[,2]
"fx"  <- function(X, M, coef) {
Xn <- numeric(n)
for (i in 1:n){
W <- apply((X-matrix(M[i,],k,2,byrow=TRUE))^2,1,sum)
Xn[i] <- coef[k+1]+coef[k+2]*M[i,1]+coef[k+3]*M[i,2]+sum(coef[1:k]*(W*log(W))) }
Xn }
Ytps <- matrix(NA, n, 2)
Ytps[,1]<-fx(X, M, coefx)
Ytps[,2]<-fx(X, M, coefy)
return(Ytps) }
```


Example 4
Interpolačný splajn IM3

```
"tps.siet" <- function(X, Y, n){
## X (vzor)
## Y (obraz)
## pocet uzlov siete = n
xm <- min(Y[,1])
ym <- min(Y[,2])
xM <- max(Y[,1])
yM <- max(Y[,2])
rX <- xM - xm; rY <- yM - ym
a <- seq(xm - 1/5 * rX, xM + 1/5 * rX, length=n)
b <- seq(ym - 1/5 * rX, yM + 1/5 * rX, by = (xM - xm) * 7/(5 * (n-1)))
m <- round(0.5 + (n-1) * (2/5 * rX + yM - ym)/(2/5 * rX + xM - xm))
M <- as.matrix(expand.grid(a,b))
ngrid <- tps2d(M,X,Y)
plot(ngrid, cex=0.2, asp=1, axes=FALSE, xlab="", ylab="")
for (i in 1:m) lines(ngrid[(1:n) + (i-1)*n,])
for (i in 1:n) lines(ngrid[(1:m) * n-i+1,])
}
```


Example 4
Interpolačný splajn

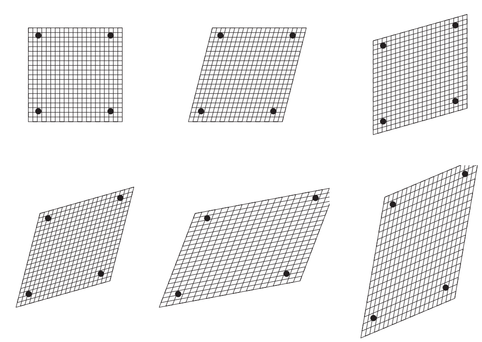
Graf bude vyzerať podobne ako nasledujúci.



Obrázok: Interpolácia kosoštvorca na deltoid pre $l = 0$ (hore) a $l = 1$ (dole); zobrazenie pomocou vektorového poľa (vľavo) a deformovanej obdĺžnikovej TPS siete (vpravo)

Example 4
Interpolačný splajn

Grafy budú vyzerať podobne ako nasledujúce.



Obrázok: Transformácie

Example 5
Transformácie v praxi

Example (DÚ 5)

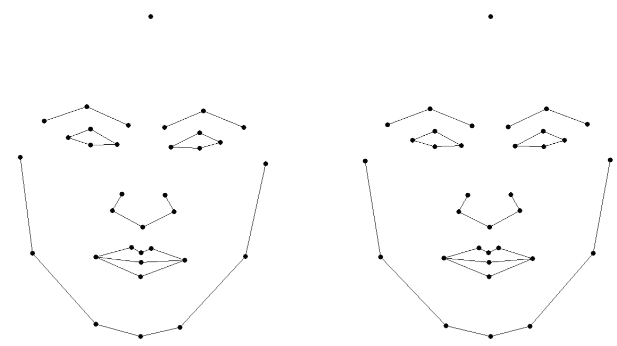
Vieme, že uhol α (v radiánoch) medzi dvoma vektormi $\mathbf{v}_1$ a $\mathbf{v}_2$ vypočítame ako $\cos^{-1}\left(\frac{\mathbf{v}_1 \bullet \mathbf{v}_2}{\|\mathbf{v}_1\|\|\mathbf{v}_2\|}\right)$. Majme tvár s $k = 34$ (semi)landmarkami (dáta `face`), kde $d = 2$, ktorých súradnice sú zapísané v matici $\mathbf{X}$. Landmarky trichion $\mathbf{l}_1$ a gnathion $\mathbf{l}_{31}$ tvoria úsečku $(\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_{31})$, ktorá nie je rovnobežná s osou y.

5.1) Identifikujte uhol úsečky $(\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_{31})$ a osi y a rotujte tvár $\mathbf{X}$ tak, aby bola $(\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_{31})$ orientovaná rovnobežne s touto osou, rotovanú tvár ozn. $\mathbf{X}_{\text{opt}}$. Zobrazte obe tváre.

Pozn.: Naprogramujte v `R`. Najprv funkciu na výpočet uhla ľubovoľnej úsečky a osi y. Potom použite rotačnú maticu (definovanú na slajdoch o transfomáciách) na rotáciu tváre do požadovanej polohy. Vizualizácia (semi)landmarkov môže byť vylepšená pomocou úsečiek, ktoré spájajú vybrané landmarky tak, aby sa zviditeľnili vybrané anatomické časti tváre ako pery, nos, oči, obočie a brada. Takáto množina úsečiek je definovaná v súbore `wireframe.txt`, ktorý použite na vizualizáciu. Koncové body úsečiek sú tu definované pomocou 30tich ID riadkov z dátového rámca `face.txt`. Použite aj funkcie `plot(...,asp=1,axes= FALSE); lines(); points()`. (Načítanie dát: `read.table("face.txt",header=TRUE)`).

Example 5
Transformácie v praxi

Obrázky budú vyzerať ako nasledujúce.

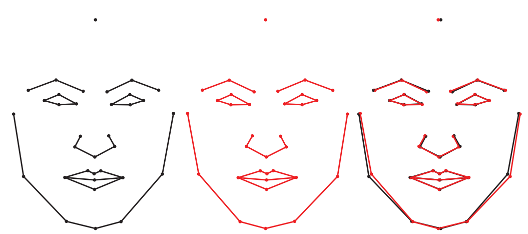


Obrázok: Tvár pred (vľavo) a po rotácii (vpravo)

Example 5
Transformácie v praxi

Example (pokrač.)

Majme tvár s $k = 34$ (semi)landmarkami (dáta `face`), kde $d = 2$, ktorých súradnice sú zapísané v matici $\mathbf{X}$ (príklad 5). Použite vhodne orientovanú (optimálne rotovanú) konfiguračnú maticu $\mathbf{X}$ na preznačenie ľavých párových landmarkov na pravé a naopak pomocou permutačnej matice $\mathbf{Q}$, potom aplikujte transformáciu zrkadlenie okolo osi y ($x^{(2)}$) s maticou zrkadlenia $\mathbf{T}_r$, tak, aby ste dostali **matice preznačených a zrkadlovo súmerných súradníc $\mathbf{X}^{(R)} = \mathbf{Q}\mathbf{T}_r\mathbf{X}$.**



Obrázok: Originálna tvár (vľavo), preznačená a zrkadlovo súmerná tvár (v strede) a obe tváre superponované (vpravo)

Example 6
Transformácie v praxi

Example (DÚ 6)

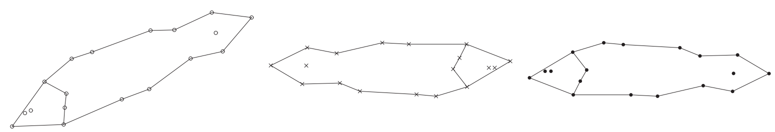
Majme súradnice $k = 18$ landmarkov ryby sumček čierny (*Ameiurus melas*) zapísané v matici $\mathbf{X}$ (dáta `ryba`). Rotácia ryby nie je správna. Ako optimálna sa javí rotácia do smeru najväčšej variability, ktorý nájdeme pomocou SVD rozkladu kovariančnej matice $Var(\mathbf{X})$, kde matica vlastných vektorov predstavuje rotačnú maticu (viď. slajdy o transfomáciách). Problémom však je, ak je *os prvého hlavného komponentu otočená o π rad (do opačného smeru)*, t.j. ryba ($\mathbf{X}_{\text{opt}}$) je otočená ventrálnou stranou nahor. V tomto prípade je potebné $\mathbf{X}_{\text{opt}}$ otočiť o $-\pi$ rad do správneho smeru. Ako prostriedok slúži znamienko determinantu $\det(\mathbf{X}_\triangle)$, kde riadky matice $\mathbf{X}_\triangle$ predstavujú tzv. *rozšírené súradnice* vrcholov $\triangle(\mathbf{l}_7, \mathbf{l}_{12}, \mathbf{l}_{17})$ s doplnenou treťou súradnicou rovnou 1, kde prvé dva body (tu apex $\mathbf{l}_7$ a bod zárezu chvostovej plutvy $\mathbf{l}_{12}$) sú body hlavnej osi tela a tretí bod je ľubovoľný bod v hornej polovici tela (tu $\mathbf{l}_{17}$). Ak je toto znamienko záporné, je nutné $\mathbf{X}_{\text{opt}}$ otočiť o uhol $-\pi$ rad.

Example 5
Transformácie v praxi

6.1) Otočte $\mathbf{X}$ do $\mathbf{X}_{\text{opt}}$ a v prípade potreby skorigujte smer orientácie (pomocou `if` v `R` programe). Naprogramujte v `R`.
Pospájajte landmarky na obryse ryby a v zadnej časti hlavy úsečkami kvôli vylepšeniu zobrazenia. Použite funkcie `eigen(var(X))`,`sign(...)` a `det(...)`. Použite aj funkcie `plot(...,asp=1,axes= FALSE)`;`lines()`;`points()`. (Načítanie dát: `read.table("ryba.txt",header=TRUE)`).

6.2) Prečo závisí smer orientácie matice $\mathbf{X}_{\text{opt}}$ od znamienka $\det(\mathbf{X}_\triangle)$? Ide o dôsledok dôkazu výpočtu obsahu trojuholníka pomocou determinantu, kde zoradenie vrcholov proti smeru hodinových ručičiek dáva znamienko *kladné* a zoradenie vrcholov v smere hodinových ručičiek dáva znamienko *záporné*. Dokážte.

Obrázky budú vyzerať ako nasledujúce.



Obrázok: Ryba pred rotáciou (vľavo), rotovaná do smeru najväčšej variability v opačnom smere (v strede) a v správnom smere (vpravo)

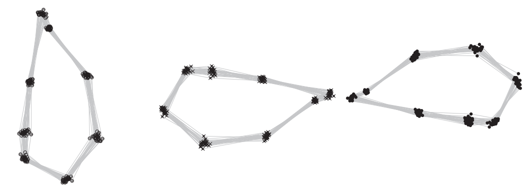
Example 7
Transformácie v praxi

Example (DÚ 7)

Majme dáta `gorf.dat`, ktoré sú v knižnici `shapes` a predstavujú súradnice $k = 8$ landmarkov na lebkách $n = 30$ samíc goríl (*Gorilla gorilla*). Vrcholy $\mathbf{X}_\triangle$ sú landmarky $\mathbf{l}_1$, $\mathbf{l}_2$ a $\mathbf{l}_8$. Detaily o GPA nájdete na slajdoch o transfomáciách.

7.1) Registrujte súradnice landmarkov `gorf.dat` do tvarového priestoru pomocou zovšeobecnenej procrustovskej analýzy (GPA) a aplikujte algoritmus výpočtu rotácie do smeru najväčšej variability z DÚ6. Použite funkciu `procGPA(...)$rotated` (GPA, kde výstupom je pole rozmeru $8 \times 2 \times 30$ **procrustovských tvarových súradníc**).

Obrázky budú vyzerať ako nasledujúce.



Obrázok: Lebka gorily pred rotáciou (vľavo), rotovaná do smeru najväčšej variability v opačnom smere (v strede) a v správnom smere (vpravo)

Example 8
Vyhladzovací regresný splajn

Example (DÚ8)

Majme tvár (dáta `face`) z DÚ 5 optimálne rotovanú a doplnenú o jeden landmark so súradnicami $\mathbf{l}_{35}^x = (1.933765, -41.093985)$ a nazvyme ho *pronasale*, maticu označme ako $\mathbf{X}$. Ozn. $\mathbf{Y}$ maticu identickú s maticou $\mathbf{X}$ až na súradnice bodu *pronasale*, $\mathbf{l}_{35}^y = (1.933765, 50.000000)$. Majme penalizovaný regresný model [PRM3]

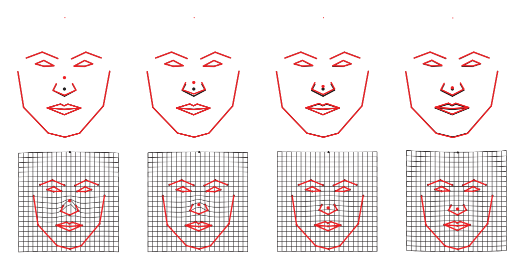
$$\mathbf{Y}_P = \begin{pmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{0}_{k+3} \end{pmatrix} = \mathbf{X}_P\beta + \epsilon, \mathbf{X}_P = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{\text{dm}} \\ \sqrt{\lambda}\mathbf{R} \end{pmatrix}, \mathbf{S}_P = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{3\times 3} & \mathbf{0}_{3\times k} \\ \mathbf{0}_{k\times 3} & \mathbf{S} \end{pmatrix},$$

kde $\mathbf{X}_{\text{dm}} = (\mathbf{1}_k \vdots \mathbf{X} \vdots \mathbf{S})$ je **penalizovaná časť matice plánu**, $(\mathbf{S})_{ij} = \phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$, $\phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2^2 \log\left(\|\mathbf{x}\|_2^2\right)$, $\forall \|\mathbf{x}\|_2 > 0$, ak $\|\mathbf{x}\|_2 = 0$, potom $\phi(\mathbf{x}) = 0$; $\mathbf{S}_P = \mathbf{R}^T\mathbf{R}$ a $\sqrt{\lambda}\mathbf{R}$ je **penalizovaná časť matice plánu**. Potom penalizovanú sumu štvorcov budeme písať v tvare
$SS_{\text{pen}} = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}_{\text{dm}}\beta)^T(\mathbf{Y} - \mathbf{X}_{\text{dm}}\beta) + \lambda\beta^T\mathbf{S}_P\beta = \mathbf{Y}^T\mathbf{Y} - 2\beta^T\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{Y} + \beta^T(\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)\beta$.

Example 8
Vyhladzovací regresný splajn

Pozn.: Po derivovaní SS_{pen} podľa β a položení tejto prvej derivácie rovné nule, dostaneme $(\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)\widehat{\beta} = \mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{Y}$, odkiaľ $\widehat{\beta} = (\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)^{-1}\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{Y}$, "hat" (projekčná) matica $\mathbf{A} = \mathbf{X}_{\text{dm}}(\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)^{-1}\mathbf{X}_{\text{dm}}^T$ a potom $\widehat{\mathbf{Y}} = \mathbf{A}\mathbf{Y}$. Efektívnejšie je použiť funkciu `lm(Yp~Xp-1)` použitím matíc $\mathbf{Y}_P$ a $\mathbf{X}_P$ z modelu PRM3.

8.1) Použitím PRM3 naprogramujte v `R` funkciu na výpočet penalizovaného regresného splajnu pre dáta $\mathbf{Y}$ a odhadnite $\widehat{\mathbf{Y}}$ pre $\lambda = \{10^3, 10^4, 10^5, 10^6\}$. Zobrazte tvár $\mathbf{X}$ čiernou farbou a tváre $\widehat{\mathbf{Y}}_\lambda$ červenou. Okomentujte rozdiely medzi jednotlivými $\widehat{\mathbf{Y}}_\lambda$.
Pomôcka: mierne modifikujte program z DÚ2
Obrázky budú vyzerať ako nasledujúce.



Obrázok: Sekvencia tvárí pre $\lambda = \{10^3, 10^4, 10^5, 10^6\}$

Example 9
Analýza tvaru EEG – definícia UI 10-10, 10-20 a 10-5 systému elektród

Definition (10-20 systém)

10-20 systém je vytvorený na základe vzťahu medzi polohou elektród a oblasťou mozgovej kôry ležiacou pod nimi. Každý bod má prislúchajúce písmeno na identifikáciu laloka mozgu, ku ktorému patrí a číslo alebo iné písmeno na identifikáciu ľavej alebo pravej hemisféry. Písmená F, T, C, P a O znamenajú po rade **frontálny**, **temporálny**, **centrálny**, **parietálny** a **okcipitálny**. Treba si uvedomiť, že centrálny lalok neexistuje, ale tento pojem tu súvisí s identifikáciou polohy. **Nepárne čísla** (1,3,5 a 7) prislúchajú ***ľavej hemisfére*** a **párne čísla** (2,4,6 a 8) ***pravej hemisfére***. Písmeno "z" prislúcha elektróde umiestnenej v prostriedku krivky. Menšie číslo identifikuje elektódu bližšie ku mediánnej rovine. Čísla 10 a 20 hovoria o 10% alebo 20% vzdialenosti medzi jednotlivými elektródami z celkovej *uhlovej (chordálnej) vzdialenosti* medzi použitými referenčnými landmarkami *nasion – inion* na mediánnej referenčnej krivke a *ľavý preauriculare – pravý preauriculare* na centrálnej koronálnej referenčnej krivke. Ide o systém **ACNS** (American Clinical Neurophysiology Society) a je vysoko kompatibilný so systémom navrhnutým **IFCN** (International Federation of Clinical Neurophysiology)

Example 9
Analýza tvaru EEG – definícia UI 10-10, 10-20 a 10-5 systému elektród

Definition (Referenčné landmarky)

1. ***nasion na pokožke*** (Nz): kolmá projekcia bodu *nasion* na povrch pokožky, kde nasion je definovaný ako priesečník *sutura nasofrontalis* s mediánnou rovinou
2. ***inion na pokožke*** (Iz): kolmá projekcia bodu *inion* na povrch pokožky, kde *inion* je definovaný ako bod ležiaci na *protuberantia occipitalis externa* v mieste, v ktorom sa spájajú obe *lineae nuchae superiores*
3. ***tragion*** (***preauriculare***) vľavo/vpravo (LPA/RPA) bod na hornom okraji *tragusu*; ide o projekciu bodu *auriculare* na pokožku, kde bod *auriculare* je najlaterálnejší bod ležiaci na koreni jarmového oblúka, kolmo nad stredom *porus acusticus externus*; v UI 10-10 systéme sú LPA a RPA body označené ako T9 a T10

Example 9
Analýza tvaru EEG – definícia UI 10-10, 10-20 a 10-5 systému elektród

Definition (Referenčné landmarky—nesprávne definície bodu *tragion*)

1. depresia koreňa jarmového oblúka anteriórne od tragusu v preaurikulárnej oblasti
2. kolmá projekcia centoidu špičky tragusu na jeho anteriórny koreň
3. centroid oblasti hrany tragusu v okolí jeho špičky
4. horný okraj *porus acusticus externus* kolmo nad jeho stredom, čo je v podstate definícia bodu *porion*

Tabuľka: Reliabilta bodov *nasion*, *inion* a *auriculare* v mm (cf. Katina a kol., 2012); reliabilita vysoká – celková chyba pod 2 mm, reliabilita stredná – celková chyba [2,5) mm, reliabilita nízka – celková chyba nad 5 mm vrátane

landmark	**os *x***	**os *y***	**os *z***	**celkovo**	**reliabilita**	**chyba**
nasion	0.57	0.58	0.69	1.84	vysoká	nízka
inion	1.29	**9.91**	**5.69**	***16.89***	***nízka***	***veľká***
ľavý *auriculare*	**3.29**	**9.56**	**4.64**	***17.49***	***nízka***	***veľká***
pravý *auriculare*	**2.85**	**10.4**	**3.68**	***16.89***	***nízka***	***veľká***

Example 9
Analýza tvaru EEG – definícia UI 10-10, 10-20 a 10-5 systému elektród

- dôvodom vysokej reliability bodu *nasion* je jeho zaradednie do ***Typu 3b***, kde ide o priesečník nejakej pozorovanej krivky a mediánnej roviny s vysokou viditeľnosťou *sutura nasofrontalis*
- s bodom *nasion* je však spojený *sexuálny dimorfizmus* a tento bod je na kosti ale aj na lebke ťažie rozpoznateľný u žien kvôli menšiemu zarezaniu koreňa nosa; preto reliabilia bodu *nasion* na pokožke môže byť horšia prevažne v smere osi *y*
- na rozdiel od bodu *nasion* má *inion* nízku reliabilitu (aj napriek zaradenia do ***Typu 3b***) kvôli nízkej viditeľnosti (zachovalosti) oboch *lineae nuchae superiores*; problém môže nastať u žien a u mužov, ktorí nemajú dobre vyvinutú *protuberantia occipitalis externa*; Ak sú vyššie spomenuté anatomické štruktúry cez pokožku málo zreteľné, je potrebné ich polohu odhadnúť pomocou okolitých anatomických štruktúr ako napr. úponov *musculus trapesius*
- bod *auriculare* je hybridom ***Typu 4*** a ***Typu 6*** (Typ 4: (semi)landmarky chrbtovej (hrebeňovej) krivky a symetrickej krivky (v mediánnej rovine)); Typ 6: skonštruované (semi)landmarky)

Example 9
Analýza tvaru EEG – definícia UI 10-10, 10-20 a 10-5 systému elektród

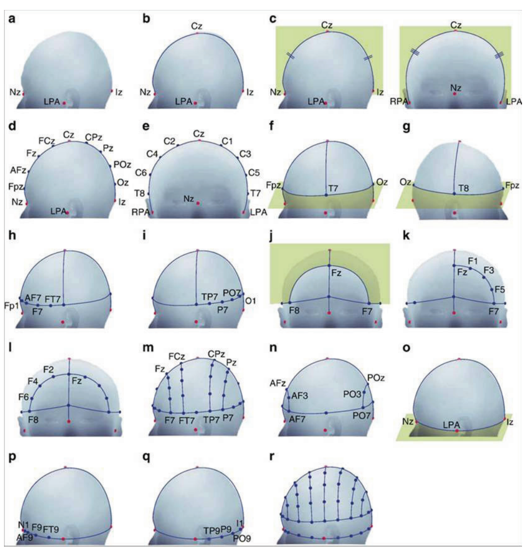
- naviac reliabilita bodov *inion* a *auriculare* je skomplikovaná ich projekciou na pokožku, čo ich viditeľnosť výrazne znižuje v závislosti od hrúbky pokožky
- bod *auriculare* sa preto nahrádza bodom *preauriculare* (*tragion*)
- problémy nastávajú v prípade nesprávneho pochopenia definície alebo použitia inej nesprávnej definície, kedy ide o ***systematickú chybu merania***, t.j. chybu z odlišnej aplikácie techniky merania (rôzne pochopenie definície meranej miery), intraindividuálnu a interindividuálnu chybu (iné držanie prístroja, iný tlak aplikovaný pri meraní, iná orientácia hlavy pri meraní a pod.)
- na základe vyššie spomenutého **je nutné konštatovať, že je potrebné striktne dodržiavať zaužívané antropologické definície anatomických landmarkov** podľa Farkasa (1994); Fettera (1967); Bräuera (1988); Martina, Sallera (1957); Kuželku (1999) a Drozdovej (2004)

Example 9
Analýza tvaru EEG – definícia UI 10-10, 10-20 a 10-5 systému elektród

Definition (Sekvenčný postup odhadu polohy elektód EEG)

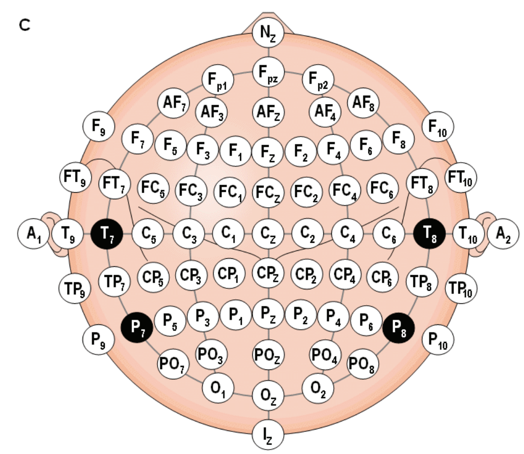
1. Stanoveniu ***referenčných (hlavných, centrálnych) kriviek***, kde ide o krivky definované ako prienik povrchu pokožky hlavy s rovinou určenou troma ***uzlovými bodmi*** (***uzlovými landmarkami***)
2. krivky sú následne delené na ***ekvidištantné úseky*** ďalšími bodmi, ktoré nazývame ***semilandmarky*** (ide o Typ 4: (semi)landmarky chrbtovej (hrebeňovej) krivky a symetrickej krivky (v mediánnej rovine), kde je ale potrebné dodefinovať túto skupinu o ***(semi)landmarky pozorovanej krivky***)
3. Systém odhadovania kriviek je **sekvenčný**, t.j. najprv sa odhadne 1) **mediánna referenčná krivka**, potom 2) **centrálna koronálna referenčná krivka**, ďalej 3) **10% axiálna referenčná krivka** a nakoniec šesť koronálnych referenčných kriviek – 4) **frontálna koronálna krivka**, 5) **fronto-centrálna/temporálna koronálna krivka**, 6) **temporo/centro-parietálna koronálna krivka**, 7) **parietálna koronálna krivka**, 8) **anterio-frontálna koronálna krivka**, 9) **parieto-okcipitálna koronálna krivka** a 10) **0% axiálna referenčná krivka**

Example 9
Analýza tvaru EEG – definícia UI 10-10, 10-20 a 10-5 systému elektród

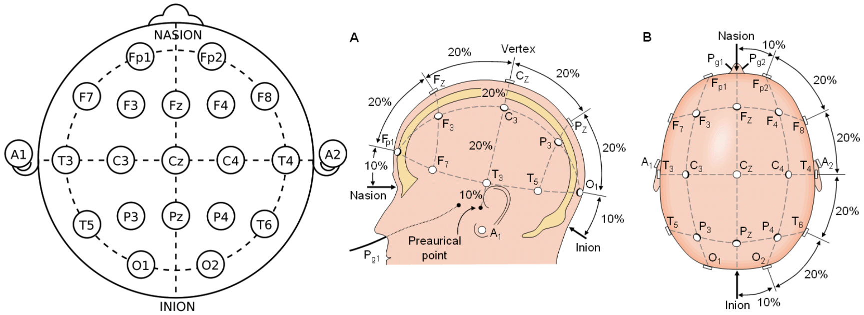


Obrázok: Sekvencia výpočtu súradníc (semi)landmarkov

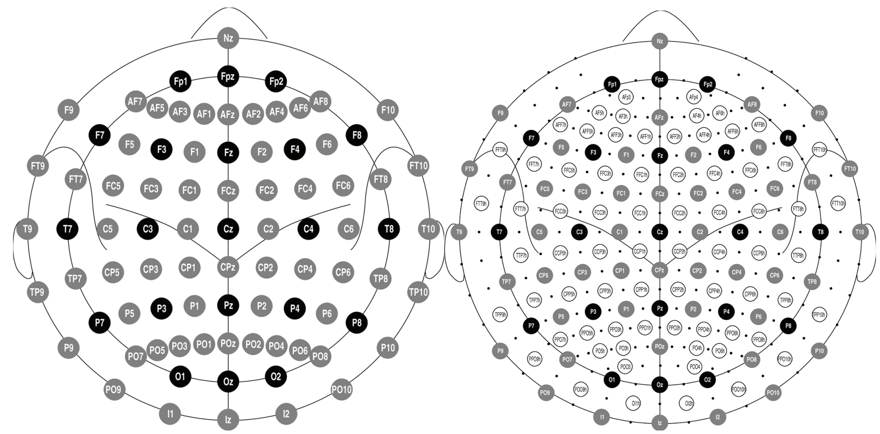
Example 9
Analýza tvaru EEG – definícia UI 10-10, 10-20 a 10-5 systému elektród



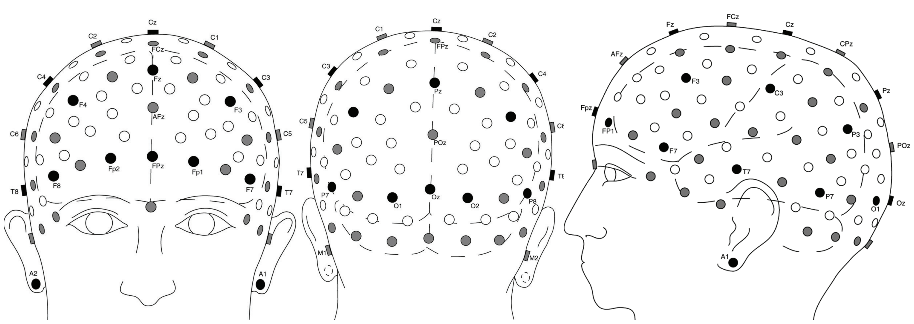
Obrázok: UI 10-20 systém pozícií elektród EEGs $k = 81$ elektródami



Obrázok: UI 10-20 systém pozícií elektród EEG s $k = 19$ elektródami



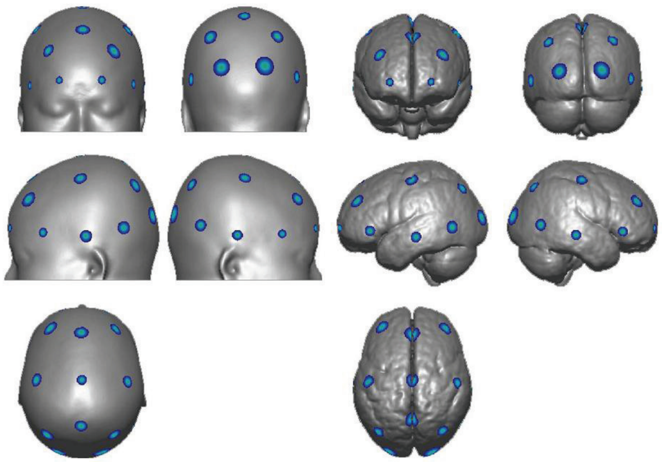
Obrázok: UI 10-5 systém pozícií elektród EEG s $k = 329$ elektródami [čierna farba—pozície v $10-20$ systéme (vľavo), pozície v $10-10$ systéme (vpravo)]



Obrázok: UI 10-5 systém pozícií elektród EEG s $k = 329$ elektródami [čierna farba—pozície v $10-10$ systéme]

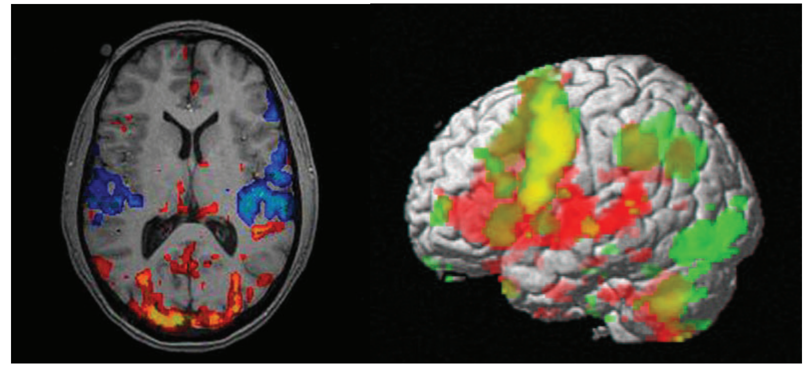
- ak zaznamenávame detailnejšie EEG s viacerými elektródami ďalšie elektródy sú pridávané do priestoru medzi už existujúcimi elektródami 10-20 systému
- tento modifikovaný systém je komplikovanejší a dal vznik **MCN** (Modified Combinatorial Nomenclature)
- UI 10-20 systém je prostriedkom na **registráciu** (Okamoto a kol., 2004; Okamoto, Dan, 2005) landmarkov na povrchu pokožky hlavy do **štandardizovaného stereotaktického súradnicového systému mozgu** ako je **MNI** (Montreal Neurological Institute; Brett a kol., 2002; Friston a kol., 1995) alebo **Talairach systém** (Talairach a kol., 1988) bez použitia MR (magnetic resonance) obrazu sledovaného človeka
- tento system je akousi **konvenciou tomografických zobrazovacích techník mozgu** ako napr. **fMRI** (functional Magnetic Resonance Imaging) a **PET** (Positron Emission Tomography) a je základom registrácie **fNIRS** (near-infrared spectroscopy) a **TMS** (transcranial magnetic stimulation) dát do tvarového priestoru, v ktorom sa nachádza **vzor mozgu** (brain template), a tým sa stáva jednotným základom pre všetky zobrazovacie techniky mozgu v neurologickej komunite vedcov

Example 9
Analýza tvaru EEG – definícia UI 10-10, 10-20 a 10-5 systému elektród



Obrázok: Štandardizovaný vzor (template) MNI152 (ICBMI152; International Consortium for Brain Mapping)

Example 9
fMRI



Obrázok: fMRI

Example 9
Interpolačný a vyhladzovací regresný splajn

Example

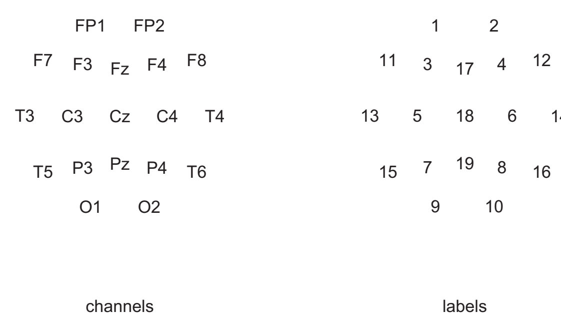
Nech $\mathbf{X}$ je projekcia súradníc $k = 19$ pozícií elektród v UI 10-20 systéme do kruhu v rovine, ktorého hranice tvoria landmarky *inion*, ľavý *preauriculare*, *nasion* a pravý *preauriculare* (viď. obrázok). Nech $\mathbf{y}$ je elektrický signál meraný na týchto $k = 19$ elektródach. Majme penalizovaný regresný model [PRM2]

$$\mathbf{y}_P = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0}_{k+3} \end{pmatrix} = \mathbf{X}_P\beta + \epsilon, \mathbf{X}_P = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_{\text{dm}} \\ \sqrt{\lambda}\mathbf{R} \end{pmatrix}, \mathbf{S}_P = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{3\times 3} & \mathbf{0}_{3\times k} \\ \mathbf{0}_{k\times 3} & \mathbf{S} \end{pmatrix},$$

kde $\mathbf{X}_{\text{dm}} = (\mathbf{1}_k \vdots \mathbf{X} \vdots \mathbf{S})$ je **penalizovaná časť matice plánu**, $(\mathbf{S})_{ij} = \phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$, $\phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2^2 \log\left(\|\mathbf{x}\|_2^2\right)$, $\forall \|\mathbf{x}\|_2 > 0$, ak $\|\mathbf{x}\|_2 = 0$, potom $\phi(\mathbf{x}) = 0$; $\mathbf{S}_P = \mathbf{R}^T\mathbf{R}$ a $\sqrt{\lambda}\mathbf{R}$ je **penalizovaná časť matice plánu**. Potom penalizovanú sumu štvorcov budeme písať v tvare
$SS_{\text{pen}} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}_{\text{dm}}\beta)^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}_{\text{dm}}\beta) + \lambda\beta^T\mathbf{S}_P\beta = \mathbf{y}^T\mathbf{y} - 2\beta^T\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{y} + \beta^T(\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)\beta$.

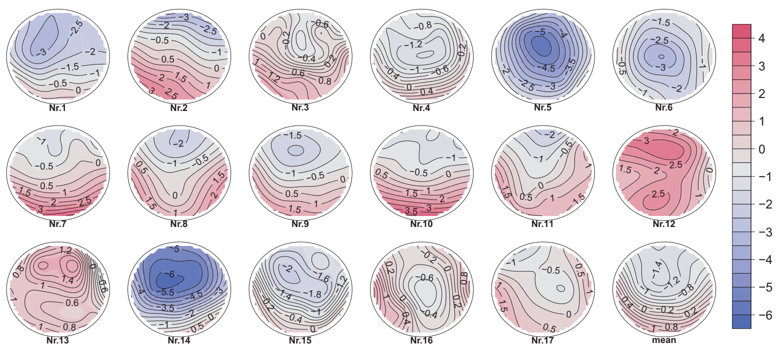
Example 9
Analýza tvaru EEG – 10-20 systému elektród

Pozn.: Po derivovaní SS_{pen} podľa β a položení tejto prvej derivácie rovné nule, dostaneme $(\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)\widehat{\beta} = \mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{y}$, odkiaľ $\widehat{\beta} = (\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)^{-1}\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{y}$, "hat" (projekčná) matica $\mathbf{A} = \mathbf{X}_{\text{dm}}(\mathbf{X}_{\text{dm}}^T\mathbf{X}_{\text{dm}} + \lambda\mathbf{S}_P)^{-1}\mathbf{X}_{\text{dm}}^T$ a potom $\widehat{\mathbf{y}} = \mathbf{A}\mathbf{y}$. Efektívnejšie je použiť funkciu `lm(yp~Xp-1)` použitím vektora $\mathbf{y}_P$ a matice $\mathbf{X}_P$ z modelu PRM3.



Obrázok: UI 10-20 systém pozícií elektród EEG s $k = 19$ elektródami

Example 9
Analýza tvaru EEG – 10-20 systému elektród



Obrázok: TPS sieť farebných štvoruholníkov s farbami korešpondujúcimi vyhladeným hodnotám plochy superponovanými kontúrami (použitím optimálnej λ vypočítanej pomocou GCV)

Example 9
Analýza tvaru EEG – 10-20 systému elektród

Example

Majme interpolačný model [IM2; thin-plate splajn, TPS] ($f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{1}_k & \mathbf{X} \\ \mathbf{1}_k^T & 0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{X}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{w} \\ c \\ \mathbf{a} \end{pmatrix},$$

kde $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \ldots \mathbf{x}_k)^T$ a $\mathbf{y} = (y_1, \ldots y_k)^T$, $(\mathbf{S})_{ij} = \phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$, $\phi(\mathbf{x})$ = $\|\mathbf{x}\|_2^2 \log\left(\|\mathbf{x}\|_2^2\right)$, $\forall \|\mathbf{x}\|_2 > 0$, ak $\|\mathbf{x}\|_2 = 0$, potom $\phi(\mathbf{x}) = 0$. Tento model by bolo možné aplikovať na dáta z Príkladu 9, avšak v praxi sa predpokladá výskyt odľahlých pozorovaní kvôli napr. možným nedoľahnutým elektródam k pokožke hlavy. Preto je lepšie použiť PRM2.

Problém: Sú jednotlivé pozície elektród systému UI 10-20 nejakého subjektu biologicky a geometricky homologické ku štandardizovanému vzoru MNI152? [Neberieme do úvahy štyri landmarky.]

NIE !!!

Štatistická analýza tvaru a obrazu

Interdisciplinárny prístup
postavený na matematických a štatistických základoch

Stanislav Katina

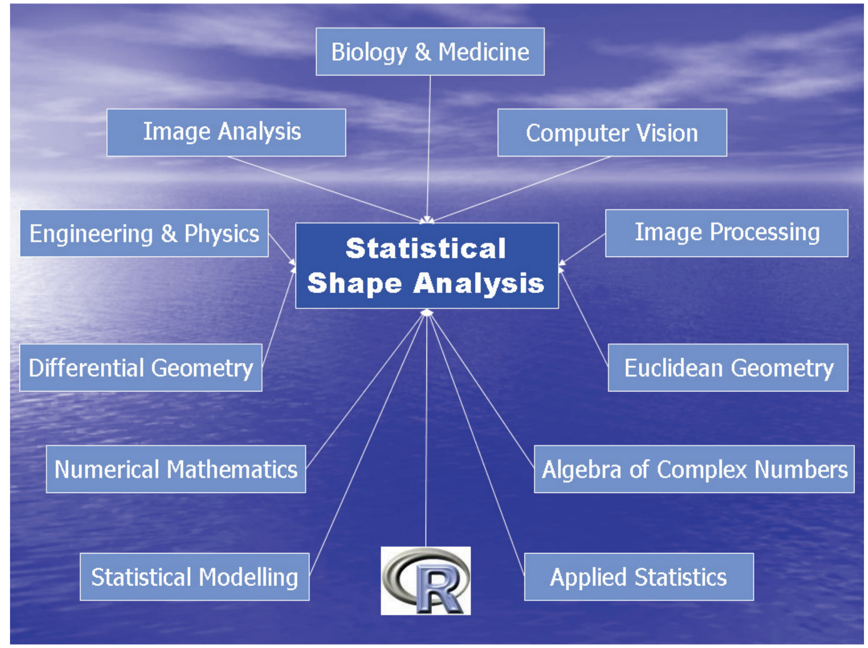
[1]Ústav matematiky a statistiky
Přírodovědecká fakulta
Masarykova Univerzita v Brne

Tento učební text vznikl za přispění Evropského sociálního fondu a státního rozpočtu ČR prostřednictvím Operačního programu Vzdělávání pro konkurenceschopnost v rámci projektu Univerzitní výuka matematiky v měnícím se světě (CZ.1.07/2.2.00/15.0203).

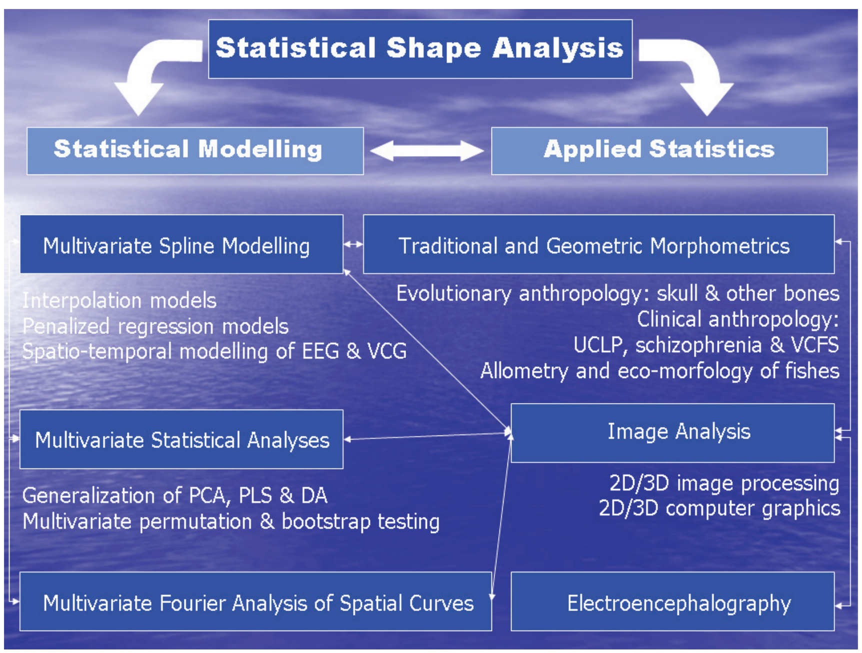
evropský sociální fond v ČR EVROPSKÁ UNIE MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Shape Analysis—Interdisciplinary View



Shape Analysis Vision ≈ My Partial Research Tree



Analýza obrazu
Digitálny obraz

Definition (Digitálny obraz – definícia)

Digitálny obraz I je dvoj-dimenzionálna funkcia prirodzených čísel vrátane nuly $\mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0$ do možných hodnôt intenzity z množiny $\mathbb{P}$, teda

$$I : \mathbb{N}_0^2 \to \mathbb{P};\ \text{kde } u, v \in \mathbb{N}_0 \text{ a } I(u, v) \in \mathbb{P}.$$

Veľkosť obrazu je charakterizovaná jeho **šírkou** M (počet stĺpcov) a **výškou** N (počet riadkov) **obrazovej matice I**, kde $u_{\max} = M - 1, v_{\max} = N - 1$ a rozmery obrazu sú $M \times N$ **pixelov** (obrazových elementov). Čísla M, N sú zvyčajne rovné 2^k, kde k sa nazýva **bitová hĺbka**. Obrazový súradnicový systém sa riadi nasledovnými zásadami

1. y-ové súradnice idú zhora dole,
2. stred súradnicovaj sústavy je bod $(u = 0, v = 0)$ ležiaci v ľavom hornom rohu.

Potom transformácia z obrazovej do karteziánskej súradnicovej sústavy bude nasledovná $I(u, v) \longrightarrow I(N - 1 - v, u)$.

Definition (Typy digitálneho obrazu)

1. **Obraz v odtienoch sivej** – obraz pozostávajúci z jedného komponentu reprezentovaného intenzitou (nazývanou aj jas alebo hustota), ktorej hodnoty patria množine $\{0, 1, \ldots 2^k - 1\}$, zvyčajne $2^k - 1 = 255$; $(k = 8)$ bitov (1 byte); 0 reprezentuje minimálny jas (**čierna farba**) a 255 the maximálny jas (**biela farba**).
2. **Binárny obraz** – obraz, ktorý je špeciálnym typom obrazu v odtieni sivej, kde intenzita môže nadobúdať dve hodnoty nula a jedna (na pixel) a kóduje **farby čierna a biela**.
3. **RGB farebný obraz** – obraz zložený z troch komponentov nazývaných aj primárne farby—**červená, zelená a modrá (RGB)**; typicky zaberajúce $k = 8$ bitov pre každý farebný komponent.

Definition (RGB farebný obraz)

RGB je **aditívny systém farieb**, čo znamená, že všetky farby sú vytvárané pridávaním primárnych farieb k základnej čiernej farbe. RGB môžeme vizualizovať ako troj-dimenzionálnu jednotkovú kocku (**RGB kocka**), kde osi tohoto systému nazývame osi primárnych farbieb. Rozsah RGB hodnôt je $[0, C_{\max}]$. Každá možná farba korešponduje bodu $\mathbf{C}_i$ v RGB kocke

$$\mathbf{C}_i = (R_i, G_i, B_i), \text{ kde } 0 \leq R_i, G_i, B_i \leq C_{\max}.$$

Rovinné usporiadanie farieb v skutočnom farebnom RGB obraze – jednotlivé farebné komponenty ležia v separátnych maticiach rovnakých rozmerov a funkcia intenzity má tvar $I = (I_R, I_G, I_B)$. Potom RGB farebný obraz $\mathbf{I}$ je pole $M \times N \times 3$ typu $\mathbf{I} = (\mathbf{I}_R \vdots \mathbf{I}_G \vdots \mathbf{I}_B)$, kde $\mathbf{I}_R, \mathbf{I}_G$, a $\mathbf{I}_B$ sú $M \times N$ matice. Element (u, v, c) pola je definovaný ako $I_c(u, v)$, kde $c = R, G$ a B komponent. RGB metrika (vzdialenosť) nezodpovedá našmu zrakovému vnímaniu, t.j. RGB metrika a zrakové vnímanie sú neproporcionálne.

Definition (Transformácia RGB farieb do sivej škály)

Výsledkom transformácie RGB farieb do sivej škály je **iluminácia (jas) v sivej škále** definovaná ako

$$Y_g = \mathrm{Avg}(R, G, B) = \frac{R + G + B}{3}.$$

Keďže *červená a zelená sú vnímané ako oveľa jasnejšie ako modrá, výsledný obraz sa nám bude zdať tmavý v červených a zelených oblastiach a príliž svetlý v modrých*. Preto je potrebné zaviesť **váženú ilumináciu (jas) v sivej škále**

$$Y_g = \mathrm{Lum}(R, G, B) = w_R R + w_G G + w_B B,$$

kde $w_R = 0.2125$, $w_G = 0.7154$, and $w_B = 0.0720$ sú odporúčané váhy. **Bezfarebný (sivý) obraz** definujeme ako obraz, kde každý RGB komponent má rovnakú hodnotu, t.j.

$$I_g(u, v) = \begin{pmatrix} R_{u,v}^{(g)} \\ G_{u,v}^{(g)} \\ B_{u,v}^{(g)} \end{pmatrix} \longleftarrow \begin{pmatrix} Y_g \\ Y_g \\ Y_g \end{pmatrix}, \text{ kde } Y_g = \mathrm{Lum}(R, G, B).$$

Definition (Obrazový histogram)

Obrazový histogram je histogram popisujúci početnosti hodnôt intenzity (jasu) obrazu. Histogram h obrazu v odtieňoch sivej I s hodnotami intenzity $I(u, v) \in [0, K - 1]$ obsahuje K hodnôt, kde pre typický 8 bitový obraz $K = 2^8 = 256$. Jednotlivé zložky histogramu sú definované ako

$$\mathrm{h}(i) = \text{ počet pixelov v } I \text{ s intenzitou } i, \text{ pre všetky } i \in [0, K - 1],$$

$$\mathrm{h}(i) = \mathrm{card}\left\{(u, v) | I(u, v) = i, \in \mathbb{P}\right\}.$$

Interpretácia:

1. **expozícia** – *pod- a preexponovaný* obraz, *dobre exponovaný* obraz,
2. **kontrast** – rozsah hodnôt intenzity použitý v danom obraze; *plnokontrastový obraz*—efektívne používa celkový možný rozsah hodnôt intenzity $a \in [a_{\min}, a_{\max}]$ alebo $\{0, 1, \ldots K - 1\}$ (čierna–biela)
3. **dynamický rozsah** – počet rozdielnych hodnôt intenzity v obraze (ideálne všetkých K hodnôt); pokiaľ máme $a \in [a_{\min} < a_{\mathrm{low}}, a_{\mathrm{high}} < a_{\max}]$ *maximálne možný dynamicky rozsah* je možné dosiahnuť použitím všetkých možných hodnôt intenzity

Definition (Chyby alebo artefakty obrazu)

1. **chyby saturácie** – ideálne by mal *byť rozsah kontrastu senzora väčší ako rozsah intenzity svetla snímanej scény, potom by bol histogram hladký na oboch koncoch*; realita – často lesklé alebo tmave plochy; histogram je ***saturovaný*** na koncoch; signifikantné hroty na koncoch pri pod- a preexponovaných obrazoch
2. **chyby transformácie** – ideálne je *rozdelenie intenzity hladké globálne ako aj lokálne*; realita – zriedka v originálnom obraze, ale často v transformovanom obraze; ***zvyšovanie kontrastu*** vedie ku separácii hodnôt intenzity (diskretizácii; tvorbe dier); ***znižovanie kontrastu*** vedie ku zlučovaniu hodnôt intenzity, ktoré boli predtým rozdielne (diskretizácia; tvorba hrotov)
3. **chyby kompresie** – napr. počas kompresie do GIF je dynamický rozsah redukovaný na niekoľko hodnôt intenzity (***kvantovanie farieb***), tzv. ***líniová štruktúra histogramu***
4. **chyby individuálnych komponent** – v iluminačnom histograme (hist. intenzity sivej farby) neviditeľné chyby, ktoré sa objavia v histogramoch jednotlivých komponent (***presaturovanie modrého komponentu***)

Definition (Bodové operácie)

Homogénna bodová operácia (**globálna**) – modifikácia intenzity bez zmeny veľkosti, geometrie alebo lokálnych štruktúr obrazu. Hodnoty intenzity a sú transformované na nové hodnoty a' použitím funkcie $f(a)$,

$$a' \leftarrow f(a) \text{ alebo } I'(u,v) \leftarrow f(I(u,v)), \text{ pre } \forall\,(u,v),$$

kde $f(\cdot)$ je **nezávislá na súradniciach** (u,v), t.j. je všade rovnaká, napr.

1. globálna transformácia intenzity (jasu), kontrastu alebo farby
2. globálne kvantovanie obrazu a thresholding

Avšak funkcia $g(\cdot)$ ako **nehomogénna bodová operácia** (**lokálna**) berie do úvahy aj súradnice (u,v), ale netransformuje ich na iné; t.j.

$$a' \leftarrow g(a,u,v) \text{ alebo } I'(u,v) \leftarrow g(I(u,v),u,v).$$

Napr.

1. lokálna transformácia intenzity (jasu), kontrastu alebo farby
2. lokálne kvantovanie obrazu a thresholding

Definition (Lineárne bodové operácie)

Lineárnu bodovú operáciu definujeme ako

$$f_{\text{lio}}(a) = k \cdot a + l,$$

kde k je nejaká **škálovacia konštanta intenzity** and l je **aditívna vyrovnávacia konštanta intenzity** obrazu.

Saturačné (urezávacie, winsorizačné) podmienky definujeme nasledovne

1. ak $f_{\text{lio}}(a) < 0$, potom $f_{\text{lio}}(a) = 0$ (`if (a < 0) a <- 0`)
2. ak $f_{\text{lio}}(a) > K-1$ potom $f_{\text{lio}}(a) = K-1$ (`if (a > K-1) a <- K-1`)

Definition (Aditívne vyrovnávanie obrazu)

Aditívne vyrovnávanie obrazu: nech $k=1$, $l \in \mathbb{Z}$, $|l| \le K-1$

$$f_{\text{lio}}(a) = a + l,$$

kde

1. $l \in \mathbb{Z}$, pretože chceme, aby intenzita bola kvantovaná z $\{0,1,\dots K-1\}$
2. $|l| \le K-1$, pretože inak by bola intenzita mimo povoleného rozsahu
3. ak $l > 0$, potom transformovaný obraz bude **svetlejší** ako pôvodný
4. ak $l < 0$, potom transformovaný obraz bude **tmavší** ako pôvodný
5. l predstavuje ***posun histogramu doľava alebo doprava***

Definition (Škálovanie obrazu)

Škálovanie obrazu: nech $l = 0$ a $k > 0$, potom

$$f_{\text{lio}}(a) = k \cdot a,$$

kde

1. $k > 0$, pretože $f_{\text{lio}}(a)$ musí byť kladné
2. nie je nutné, aby $k \in \mathbb{Z}$, pretože by sme mali len veľmi málo použiteľných možností
3. praktické zaokrúhlovanie (v prípade potreby) $f_{\text{lio}}(a) = \lfloor k \cdot a + 0.5 \rfloor$
4. ak $k > 1$, potom intenzita $f_{\text{lio}}(a)$ pokryje **širší interval hodnôt** ako a
5. ak $k < 1$, potom intenzita $f_{\text{lio}}(a)$ pokryje **užší interval hodnôt** ako a
6. ***škálovanie naťahuje alebo stláča histogram v smere osi x***

Definition (Negatív obrazu)

Negatív obrazu: nech $k = -1$ a $l = K - 1$, potom

$$f_{\text{lio}}(a) = -a + (K - 1),$$

kde

1. škálovanie použitím $k = -1$ spôsobí ***reverziu (flip) histogramu v smere osi x***
2. additívna konštanta $l = K - 1$ spôsobuje, že ***všetky transformované hodnoty sú kladné a patria do povoleného rozsahu***

Definition (Autokontrast)

Autokontrast:

$$f_{\text{lio}}(a) = k \cdot (a - c) + l, \text{ kde } l = a_{\text{min}}, c = a_{\text{low}}, k = \frac{a_{\text{max}} - a_{\text{min}}}{a_{\text{high}} - a_{\text{low}}}, a_{\text{low}} \neq a_{\text{high}},$$

a ***intenzita je modifikovaná tak, aby jej hodnoty pokryli celý možný rozsah povolených hodnôt.***

Definition (Thresholding)

Thresholding je špeciálnym typom kvantovania obrazu, ktoré separuje intenzitu do dvoch tried v závislosti na **prahovej konštante** a_{th}. **Prahová funkcia** $f_{\text{threshold}}(a)$ kategorizuje pixely do dvoch skupín, ktorým zodpovedajú hodnoty intenzity a_0 a a_1, nasledovne

$$f_{\text{threshold}}(a) = \begin{cases} a_0 & \text{pre } a < a_{\text{th}} \\ a_1 & \text{pre } a \geq a_{\text{th}} \end{cases}, \text{ kde } 0 < a_{\text{th}} \leq a_{\text{max}}$$

Typickými aplikáciami sú

1. ***binarizácia intenzity obrazu*** s hodnotami $a_0 = 0$ a $a_1 = 1$, ktorá v R bude vyzerať nasledovne
   `a[which(a < a.th)] <- 0; a[which(a >= a.th)] <- 1.`
2. thresholding je najefektívnejší pri ***bimodálnom histograme*** – charakterizuje objekt a pozadie majúce rôznu priemernú intenzitu – tmavý objekt a svetlé pozadie alebo svetlý objekt a tmavé pozadie
3. cieľ – ***separovať objekt od pozadia*** alebo nájsť ***obrys objektu***

Example (R logo)

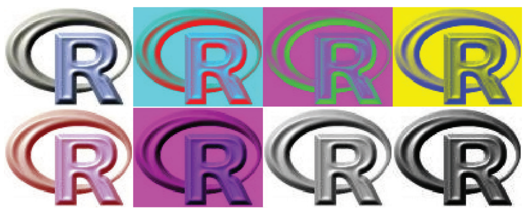
Majme R logo (rozmery 77×101 pixelov)—uložené ako **PPM** (***Portable Pixel Map***, ***portable pixmaps***). Aj napriek tomu, že ide o neefektívny formát rastrovaného obrazu, je veľmi jednoduchý z hľadiska spracovania obrazu, a preto sa často používa.

1. Načítajte a zobrazte toto logo `M` v R.
2. Inveretujte R (červený) komponent obrazu `M`.
3. Inveretujte G (zelený) komponent obrazu `M`.
4. Inveretujte B (modrý) komponent obrazu `M`.
5. Zvýraznite R komponent obrazu `M`.
6. Odstráňte zelený komponent obrazu `M`.
7. Transformujte `M` do sivej škály.
8. Zvýraznite kontrast `M` v sivej škále pomocou funkcie $f(a) = a^k, k = 2$.

Example 10
Digitálny obraz

Riešenia:

1. knižnica `library(pixmap)`, príkaz
```
M <- read.pnm(system.file("pictures/logo.ppm",
package="pixmap")[1])
```
2. `M1 <- M; M1@red <- 1-M@red; plot(M1)`
3. `M1 <- M; M1@green <- 1-M@green; plot(M1)`
4. `M1 <- M; M1@blue <- 1-M@blue; plot(M1)`
5. `M1 <- M; M1@red <- 0.5 + M@red/2; plot(M1)`
6. `M1 <- M; M1@green <- matrix(0,77,101); plot(M1)`
7. `M1 <- as(M,"pixmapGrey"); M2 <- M1; plot(M2)`
8. `M2 <- M1; M2@grey <- (M2@grey)^2; plot(M2)`



Obrázok: Bodové operácie s obrazom R loga

Example 11
Digitálny obraz

Example (Binarizácia lastúry)

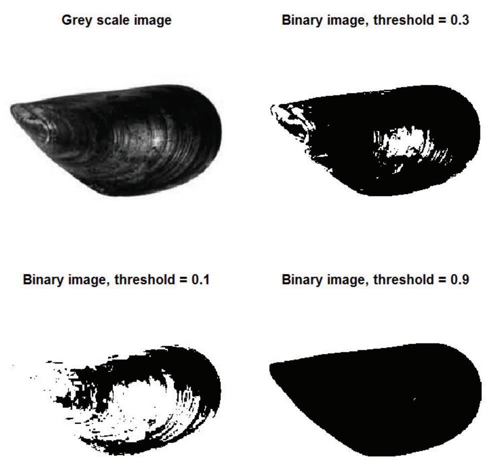
Majme lastúru (*Mitilus* sp.) uloženú ako **PPM**.

1. Načítajte obraz lastúry `M` v `R`.
2. Transformujte `M` do sivej škály a zobrazte použitím funkcie `plot()`.
3. Binarizujte obraz `M` pri thresholde 0.1 a vypočítajte počet pixelov lastúry.
4. Binarizujte obraz `M` pri thresholde 0.3 a vypočítajte počet pixelov lastúry.
5. Binarizujte obraz `M` pri thresholde 0.9 a vypočítajte počet pixelov lastúry.

Riešenia:

1. `library(pixmap); M <- read.pnm("mytilus.ppm")`
2. `M <- as(M,"pixmapGrey"); M1 <- M@grey plot(M,main="Grey scale image")`
3.
```
M1 <- M@grey; M@grey[which(M1 >= 0.1)] <- 1; a.th <- .1
M@grey[which(M1 < a.th)] <- 0
plot(M,main="Binary image, threshold = 0.1")
length(M@grey[which(M1 < a.th)])
```


Example 11
Digitálny obraz



Obrázok: Lastúra *Mytilus sp.* v sivej škále (vľavo hore) a binarizovaná pri rôznych hodnotách konštanty $a_{\text{th}} = 0.1, 0.3, 0.9$

Example 12
Digitálny obraz

Example (Binarizácia lastúry, pokrač.)

Majme lastúru (*Mitilus* sp.) uloženú ako **JPEG**.

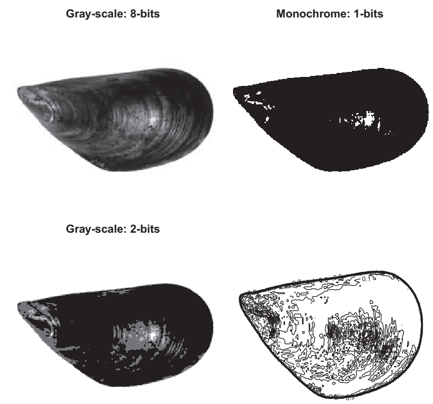
1. Transformujte obraz z formátu JPEG do formátu PPM.
2. Načítajte obraz lastúry `M` v `R`.
3. Transformujte `M` do sivej škály a zobrazte použitím funkcie `image()`. Pozn.: Treba si uvedomiť, že **Pixel Aspect Ratio** (**PAR**), kde PAR je rovné pomeru šírky a výšky pixela, nemusí byť rovné jednej, ale napr. $2/3$, $3/4$ alebo $9/16$, čo sa dá ľahko ošetriť pomocou argumentu `asp=PAR` vo funkcii `image()`. Funkcia `plot()` priamo načítava PAR zo súboru PPM, a preto táto korekcia nebola potrebná. PAR je pre lastúru rovný $9/16$. Na zobrazenie `M` použite všetky možné odtiene sivej (8-**bitová škála sivej**).
4. Na zobrazenie `M` použite len tri odtiene sivej (2-**bitová škála sivej**).
5. Na zobrazenie `M` použite len dva odtiene sivej (1-**bitová škála sivej**, **monochromatický obraz**).
6. Zobrazte `M` použitím funkcie `contour()` bez korekcie PAR.

Example 12
Digitálny obraz

Riešenia:

1.
```
library(pixmap); library(rimage)
shell("convert mytilus.jpg mytilus.ppm")
```
2.
```
M <- read.pnm("mytilus.ppm")
```
3.
```
M <- as(M,"pixmapGrey")
image(t(M@grey[dim(M@grey)[1]:1,]),col=grey(0:255/255),
      asp=9/16,axes=FALSE, main="Gray-scale:  8-bits")
```
4.
```
image(t(M@grey[dim(M@grey)[1]:1,]),col=grey(0:3/3),
      asp=9/16,axes=FALSE, main="Gray-scale:  2-bits")
```
5.
```
image(t(M@grey[dim(M@grey)[1]:1,]),col=grey(0:1/1),
      asp=9/16,axes=FALSE, main="Monochrome:  1-bits")
```
6.
```
contour(t(M@grey[dim(M@grey)[1]:1,]),axes=FALSE)
title(main="Contour plot")
```


Example 12
Digitálny obraz



Obrázok: Lastúra *Mytilus sp.* v 8-bitovej sivej škále (vľavo hore), v 2-bitovej sivej škále (vľavo dole), v 1-bitovej sivej škále (vpravo hore) a kontúrový obraz použitím nesprávneho PAR

Example 13
Digitálny obraz

Example (Hmyzie krídlo, histogram intenzity a extrakcia súradníc landmarkov)

Majme hmyzie krídlo uložené ako **JPEG**.

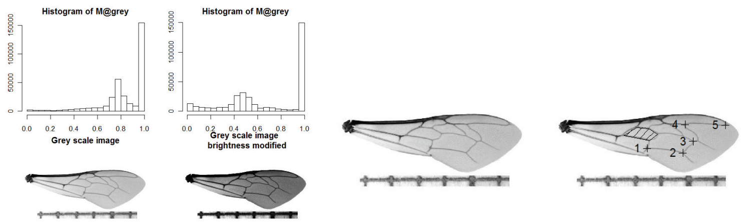
1. Načítajte obraz krídla `M` v `R`.
2. Transformujte obraz z formátu JPEG do formátu PPM.
3. Transformujte `M` do sivej škály, zobrazte histogram intenzity `M` a zobrazte `M` použitím funkcie `plot()`.
4. Zvýraznite kontrast `M` v sivej škále pomocou funkcie $f(a) = a^k, k = 3$, zobrazte histogram intenzity `M` a zobrazte použitím funkcie `plot()`.
5. Použitím funkcie `locator()` lokalizujte 5 landmarkov (viď. obrázok), označte ich ako $+$ a extrahujte ich súradnice. Do obrázku dopíšte čísla landmarkov $1-5$.
6. Lokalizujte hranice časti krídla (viď. obrázok) ako landmarky $6-10$ použitím funkcie `locator()` a vykreslite polygón vnútri konvexného obalu týchto landmarkov pomocou funkcie `polygon()`.
7. Čo sme pri extrakcii landmarkov zanedbali?

Example 13
Digitálny obraz

Riešenia:

1.
```
library(pixmap); library(rimage)
M <- read.jpeg("wing.jpg")
```
2.
```
shell("convert wing.jpg wing.ppm")
M <- read.pnm("wing.ppm")
```
3.
```
M1 <- M; M1 <- as(M1,"pixmapGrey")
hist(M1@grey)
plot(M1,main="Grey scale image")
```
4.
```
M1@grey <- (M1@grey)^3
hist(M@grey)
plot(M,main="Grey scale image brightness modified")
```
5.
```
plot(M)
lok <- locator(5,type="p",pch=3)
text(lok,pos=2,labels=1:5)
```
6.
```
lok <- locator(5,type="l")
polygon(lok,density=12)
```

Example 13
Digitálny obraz



Obrázok: Histogramy (prvý riadok vľavo) a obrazy v sivej škále, modifikovanej sivej škále (druhý riadok vľavo) obrazu hmyzie krídlo a obraz hmyzie krídlo v sivej škále s lokalizovanými landmarkami (vpravo)

Example 14
Digitálny obraz

Example (Sánka, negatív obrazu a extrakcia súradníc landmarkov)

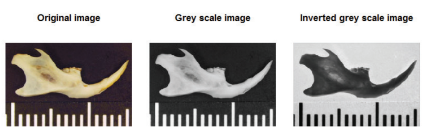
Majme sánku uloženú ako **JPEG**.

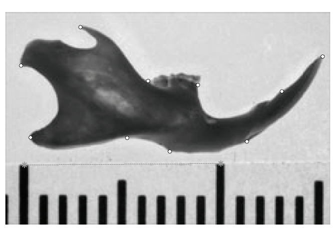
1. Načítajte obraz sánky `M` v `R`.
2. Transformujte `M` do sivej škály a zobrazte `M` použitím funkcie `plot()`.
3. Invertujte obraz `M` v sivej škále (vytvorte negatív obrazu) a zobrazte použitím funkcie `plot()`.
4. Použitím funkcie `locator()` odmerajte vzdialenosť 1cm.
5. Použitím funkcie `locator()` lokalizujte 10 landmarkov (viď. obrázok), označte ich ako `o`. Preškálujte extrahované súradnice na správnu mierku.

Riešenia: `library(rimage)`

1. `M <- read.jpeg("jawd.jpg")`
2. `M <- rgb2grey(M); plot(M)`
3. `M <- 1- M; plot(M)`
4. ```
   lok <-
   locator(2,type="o",pch=8,lwd=2,col="grey60",lty="11")
   scale.one <- sqrt(sum(diff(lok$x)^2+diff(lok$y)^2))
   ```
5. ```
   b <- locator(10,type="p")
   conf.mat <- rbind(b$x,b$y)/scale.one
   ```


Example 14
Digitálny obraz





Obrázok: Obrázok sánky v RGB škále (prvý riadok vľavo), v sivej škále (prvý riadok v strede), negatív obrazu v sivej škále (prvý riadok vpravo) a negatív s lokalizovanými landmarkami (druhý riadok)

Analýza obrazu
Uzavreté obrysy

Definition (Automatická extrakcia uzavretých obrysov a reťazové kódovanie)

Objekt v rovine je reprezentovaný jeho **vnútrom** a **obrysom**. Obrys môžeme automaticky extahovať pomocou **reťazového (sekvenčného, Freemanovho) kódovania** definovaného pomocou sekvencie smerových zmien na diskrétnom rastrovanom obraze.

1. definujeme **štartovací bod** $\mathbf{x}_S$ vnútri objektu $\mathcal{R}$ v rovine
2. uzavretý obrys je definovaný pomocou sekvencie bodov $\mathbf{c}_{\mathcal{R}} = [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \ldots \mathbf{x}_{C-1}]$, kde $\mathbf{x}_i = (u_i, v_i)$
3. jednotlivé elementy sekvencie $\mathbf{c}'_{\mathcal{R}} = [c'_0, c'_1, \ldots c'_{C-1}]$ definujeme ako $c'_i = \mathrm{Code}(\Delta u_i, \Delta v_i)$, kde

$$(\Delta u_i, \Delta v_i) = \begin{cases} (u_{i+1} - u_i, v_{i+1} - v_i) & \text{pre } 0 \le i < C-1 \\ (u_0 - u_i, v_0 - v_i) & \text{pre } i = C-1 \end{cases}$$

a $\mathrm{Code}(\Delta u_i, \Delta v_i)$ definujeme pomocou 8-**pixelového susedstva**

Δu	1	1	0	−1	−1	−1	0	0	**3**	**2**	**1**
Δv	0	1	1	1	0	−1	−1	−1	**4**	**pixel**	**0**
$\mathrm{Code}(\Delta u_i, \Delta v_i)$	0	1	2	3	4	5	6	7	**5**	**6**	**7**

Analýza obrazu

Uzavreté obrysy – algoritmus `kontura`

Algoritmus:

1. I: binarizovaný obraz; $I(u, v) = 0$ (objekt), $I(u, v) = 1$ (pozadie)
2. lokalizuj súradnice štartovacieho pixela, $\mathbf{x}_S = (x_S, y_S)$, vnútri objektu tak, aby bolo jeho 4-pixelové susedstvo v objekte; potom transformuj obrazové súradnice od karteziánskych, kde $\mathbf{x}_S = (\dim(\mathbf{I})_{(1)} - y_S, x_S)$ (pozri slajd "Digitálny obraz – definícia")
3. fixuj $a = 1$ (štartovací bod pre pohyb z jedného pixela do druhého, kde index pixela korešponduje a, ktoré sa zvýši o jednotku, keď je nájdený ďalší pixel proti smeru hodinových ručičiek), $S = 6$ (štartovací bod; pixel č.6) a $SS =$`NA` (reťazec); $\mathbf{x} = 0$; $\mathbf{y} = 0$ (štartovacie body; x- a y-ové súradnice); nech matica Δ má riadky Δu a Δv, potom $\mathbf{D} = (\Delta_{(\cdot,8)} \vdots \Delta \vdots \Delta_{(\cdot,1)})$, kde $\Delta_{(\cdot,i)}$ je i-ty stĺpec matice Δ
4. `while` $(\mathbf{x}_{(a)}, \mathbf{x}_{(a)}) \neq \mathbf{x}_S$ (pokiaľ sa dosiahne opäť štartovací bod) `or` dĺžka vektora $\mathbf{x}$ je menšia ako 3 (vyhneme sa nekonečnej slučke) choď na (5) – (6)
5. `if` $\left|(I(x_S + \mathbf{D}_{(1,S+1)}, y_S + \mathbf{D}_{(2,S+1)}) - I(x_S, y_S))\right| <$ `threshold`, potom
   $a = a + 1$
   $\mathbf{x}_{(a)} = x_S$; $\mathbf{y}_{(a)} = y_S$
   $\mathbf{x}_S = \mathbf{x}_S + \mathbf{D}_{(\cdot,S+1)}$
   $SS_{(a)} = S + 1$; $S = (S + 7) \mod 8$ (skontroluj pixel 5 a choď na pixel 5)

Analýza obrazu

Uzavreté obrysy – algoritmus `kontura`

Algoritmus (pokrač.):

6. `if else` $\left|(I(x_S + \mathbf{D}_{(1,S+2)}, y_S + \mathbf{D}_{(2,S+2)}) - I(x_S, y_S))\right| <$ `threshold`, potom
   $a = a + 1$
   $\mathbf{x}_{(a)} = x_S$; $\mathbf{y}_{(a)} = y_S$
   $\mathbf{x}_S = \mathbf{x}_S + \mathbf{D}_{(\cdot,S+2)}$
   $SS_{(a)} = S + 2$; $S = (S + 7) \mod 8$ (skontroluj pixel 6 a choď na pixel 6)
7. `if else` $\left|(I(x_S + \mathbf{D}_{(1,S+3)}, y_S + \mathbf{D}_{(2,S+3)}) - I(x_S, y_S))\right| <$ `threshold`, potom
   $a = a + 1$
   $\mathbf{x}_{(a)} = x_S$; $\mathbf{y}_{(a)} = y_S$
   $\mathbf{x}_S = \mathbf{x}_S + \mathbf{D}_{(\cdot,S+3)}$
   $SS_{(a)} = S + 3$; $S = (S + 7) \mod 8$ (skontroluj pixel 7 a choď na pixel 7)
8. `else` choď na obrys obrazu (smer – napr.diagonálne dole vpravo, $S = (S + 1) \mod 8$; pokiaľ nenájdeš pixel s intenzitou menšou ako `threshold`; t.j. prvý pixel pozadia)
9. `return` $\mathbf{x} = \mathbf{y}_{(-1)}$ a $\mathbf{y} = \left(\dim(\mathbf{I})_{(1)} - \mathbf{x})\right)_{(-1)}$ (vymaž prvý element, ktorý je rovný poslednému – štartovací bod; pozri slajd "Digitálny obraz – definícia")

Example 15

Uzavreté obrysy

Example (pokrač. príkladu 11 a 12)

Majme lastúru (*Mitilus* sp.) uloženú ako **PPM**. Použite binarizovaný obraz `M` pri thresholde 0.9 z príkladu 11. Extrahujte súradnice obrysu lastúry.

1. Zobrazte binarizovaný obraz `M` (pri thresholde 0.9).
2. Pomocou funkcie `locator()` označte štartovací bod $\mathbf{x}_S$ vnútri lastúry.
3. Na identifikáciu obrysu použite algoritmus `kontura`.
4. Resamplujte súradnice bodov obrysu na $k = 32$, kde body budú **ekvidištantne vzdialené – *s rovnakou uhlovou vzdialenosťou medzi nimi***, kde je potrebné vybrať $k = 32$ ekvidištantných bodov z 629 identifikovaných bodov s použitím funkcie `seq(1,629,length=32)`.
5. Resamplujte súradnice bodov obrysu na $k = 32$, kde body budú **ekvidištantne vzdialené – *s rovnakou radiálnou vzdialenosťou medzi nimi***, kde najprv vypočítate centroid lastúry (aritmetický priemer súradníc obrysu získaných v bode (4)), potom pomocou znalostí z analýzy komplexných čísel vyberiete tie z 629 súradníc identifikovaných algoritmom `kontura`, ktoré patria prieniku kontúry a ramien uhlov $\frac{2 \times i \times \pi}{k}$, $i = 0, 1 \ldots k$, s vrcholom v bode $(0, 0)$.

Example 15

Uzavreté obrysy

Riešenia:

1.
```
plot(M,main="Binary image, threshold = 0.9")
```
2.
```
x.start <- locator(1)
x.start <- round(c(x.start$x,x.start$y))
```
3.
```
myt.contour <- kontura(x.start, M@grey, start.threshold =
    0.1, threshold = 0.1) lines(myt.contour$X,myt.contour$Y,lwd=3)
```
4.
```
k.r=32; k <- length(myt.contour$X)
myt.contour.x <- (myt.contour$X[seq(1,k,length=k.r)])
myt.contour.y <- (mytilus.contour$Y[seq(1,k,length=k.r)])
plot(myt.contour.x,myt.contour.y,type="l",lwd=1.1,
    asp=1,axes=FALSE, main="Equidistantly spaced
    coordinates")
points(myt.contour.x,myt.contour.y,pch=16,cex=0.7)
```
5.
```
plot(myt.contour.x,myt.contour.y,type="l",lwd=1.1, asp=1,axes=FALSE,
    main="Radially spaced coordinates")
mean.x <- mean(mytillus.contour$X)
mean.y <- mean(mytillus.contour$Y)
points(mean.x,mean.y,pch=16)
r.coords <- radial.coords(mytillus.contour$X,mytillus.contour$Y, 32)
points(mean.x + r.coords$coords[,1],mean.y +
    r.coords$coords[,2],pch=16,cex=0.7)
for (i in 1:k.r) {
    segments(mean.x,mean.y,
            mean.x + r.coords$coords[,1],
            mean.y + r.coords$coords[,2])
}
```

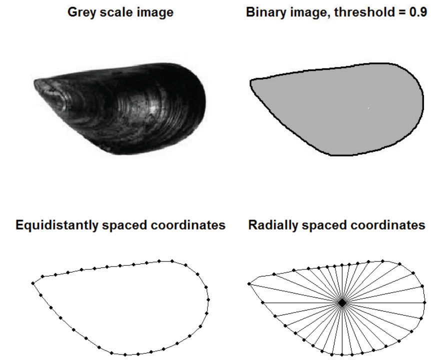
Example 15
Uzavreté obrysy

Riešenia (pokrač.):

```
"radial.coords" <- function(Rx, Ry, k1) {
k <- length(Rx)
M <- matrix(c(Rx, Ry), k, 2)
M1 <- matrix(c(Rx-mean(Rx), Ry-mean(Ry)), k, 2)
V1 <- complex(real = M1[,1], imaginary = M1[,2])
M2 <- matrix(c(Arg(V1), Mod(V1)), k, 2)
V2 <- NA
for (i in 0:(k1-1)) V2[i+1] <- which.max((cos(M2[,1] - 2*i*pi/k1)))
V2 <- sort(V2)
RES <- list("IDs" = V2,"radii" = M2[V2,2],"coords" = M1[V2,])
return(RES)

}
```


Example 15
Uzavreté obrysy



Obrázok: Obrázok lastúry *Mytilus sp.* v sivej škále (prvý riadok vľavo), binarizovaný s extrahovaným obrysom (prvý riadok vpravo), ekvidištantné body obrysu s identickou uhlovou vzialenosťou (druhý riadok vľavo) a s identickou radiálnou vzialenosťou (druhý riadok vpravo)

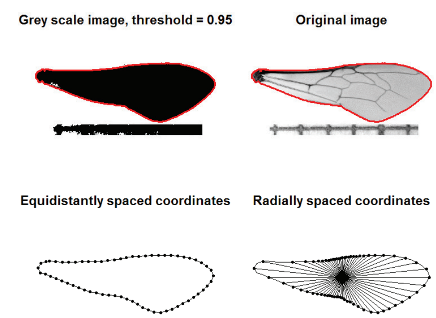
Example 16
Uzavreté obrysy

Example (pokrač. príkladu 13)

Majme hmyzie krídlo uložené ako **JPEG**. Extrahujte súradnice obrysu krídla.

1. Binarizujte obraz `M` (pri thresholde 0.95).
2. Pomocou funkcie `locator()` označte štartovací bod $\mathbf{x}_S$ vnútri krídla.
3. Na identifikáciu obrysu použite algoritmus `kontura`.
4. Resamplujte súradnice bodov obrysu na $k = 64$, kde body budú **ekvidištantne vzdialené – *s rovnakou uhlovou vzdialenosťou medzi nimi***.
5. Resamplujte súradnice bodov obrysu na $k = 64$, kde body budú **ekvidištantne vzdialené – *s rovnakou radiálnou vzdialenosťou medzi nimi***.

Example 16
Uzavreté obrysy



Obrázok: Obrázok hmyzieho krídla binarizovaný s extrahovaným obrysom (prvý riadok vľavo), v sivej škále s extrahovaným obrysom (prvý riadok vpravo), ekvidištantné body obrysu s identickou uhlovou vzialenosťou (druhý riadok vľavo) a s identickou radiálnou vzialenosťou (druhý riadok vpravo)

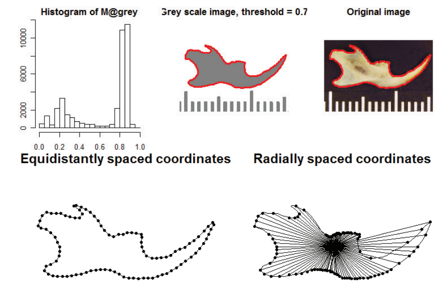
Example 17
Uzavreté obrysy

Example (pokrač. príkladu 14)

Majme sánku uloženú ako **JPEG**. Extrahujte súradnice obrysu sánky.

1. Binarizujte obraz `M` (pri thresholde 0.7).
2. Pomocou funkcie `locator()` označte štartovací bod $\mathbf{x}_S$ vnútri sánky.
3. Na identifikáciu obrysu použite algoritmus `kontura`.
4. Resamplujte súradnice bodov obrysu na $k = 100$, kde body budú **ekvidištantne vzdialené – *s rovnakou uhlovou vzdialenosťou medzi nimi***.
5. Resamplujte súradnice bodov obrysu na $k = 100$, kde body budú **ekvidištantne vzdialené – *s rovnakou radiálnou vzdialenosťou medzi nimi***.
6. Je možné použiť súradnice bodov ekvidištantne vzdialených (s identickou radiálnou vzialenosťou)? Ak nie prečo?

Example 17
Uzavreté obrysy

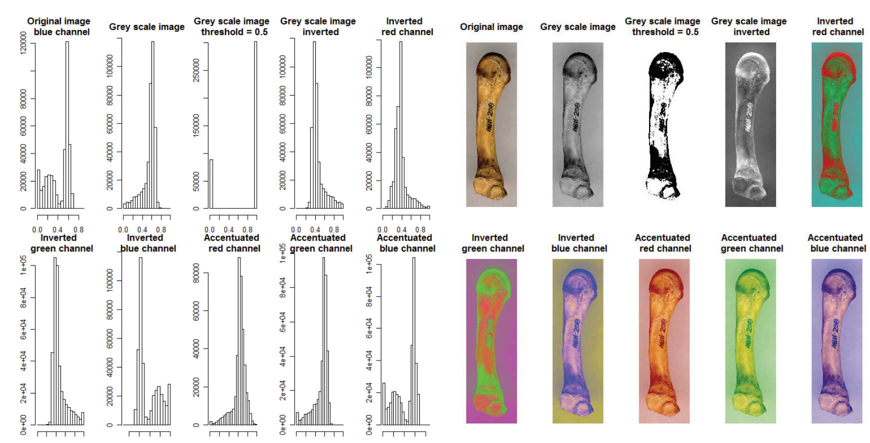


Obrázok: Histogram intenzity sivej (prvý riadok vľavo), obrázok sánky binarizovaný s extrahovaným obrysom (prvý riadok v strede), v RGB škále s extrahovaným obrysom (prvý riadok vpravo), ekvidištantné body obrysu s identickou uhlovou vzialenosťou (druhý riadok vľavo) a s identickou radiálnou vzialenosťou (druhý riadok vpravo)

Example 18
Uzavreté obrysy – zložitejšia situácia na metakarpe ľudskej ruky 1

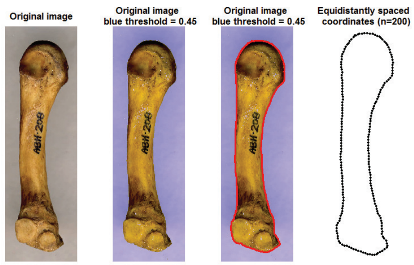
Obrázok: Originálny obraz metakarpu ľudskej ruky

Example 18
Uzavreté obrysy – zložitejšia situácia na metakarpe ľudskej ruky 2



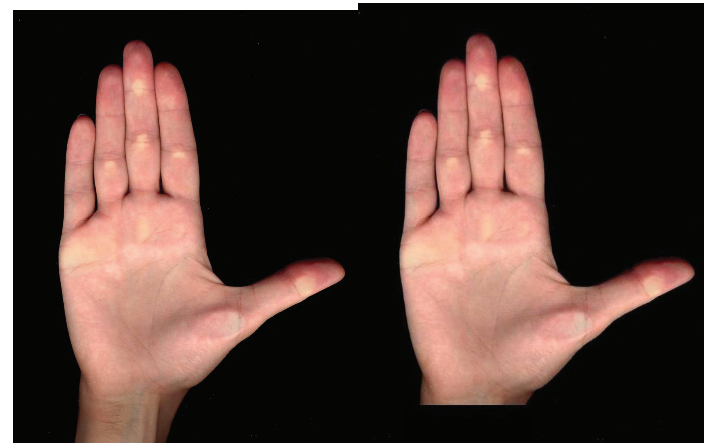
Obrázok: Histogramy rôznych transformícií farebných komponentov obrazu a nim zodpovedajúce obrazy metakarpu ľudskej ruky

Example 18
Uzavreté obrysy – zložitejšia situácia na metakarpe ľudskej ruky 3



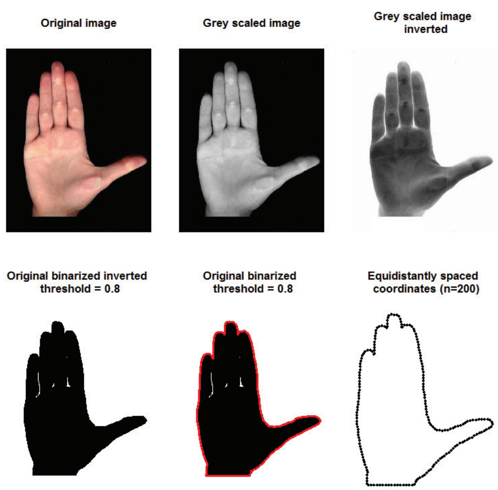
Obrázok: Extrahovaný obrys metakarpu ľudskej ruky

Example 19
Uzavreté obrysy – zložitejšia situácia ľudskej ruky 1



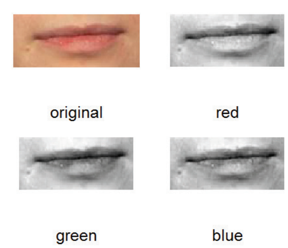
Obrázok: Obraz ľudskej ruky

Example 19
Uzavreté obrysy – zložitejšia situácia ľudskej ruky 2



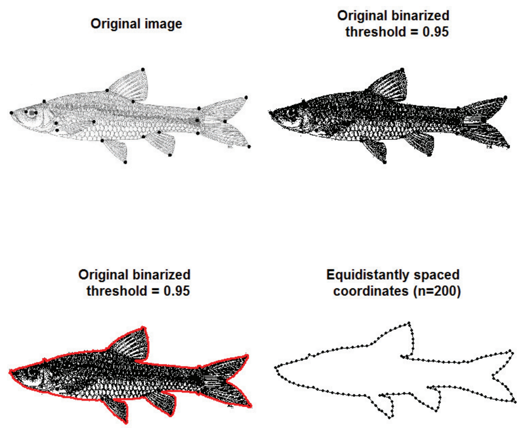
Obrázok: Extrakcia obrysu ľudskej ruky

Example 20 A – otvorený problém
Uzavreté obrysy – (pravdepodobne) neriešiteľná situácia ľudskej tváre a pier



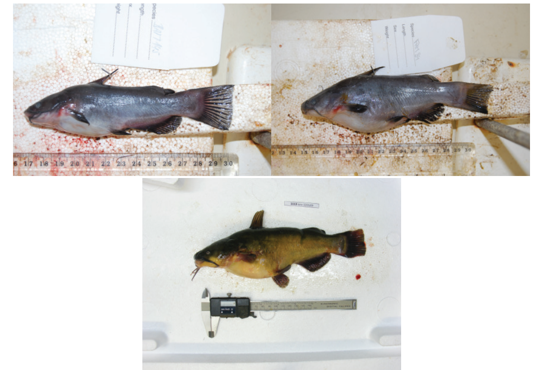
Obrázok: Obrazy rôznych transformácií komponentov obrazu ľudskej tváre a pier, extrahované hrany (vpravo hore)

Example 20 B – otvorený problém
Uzavreté obrysy – stačí len extrakcie obrysu?



Obrázok: Extrakcia obrysu hrúzovca sieťovaného (*Pseudorasbora parva*)

Example 20 B – otvorený problém
Uzavreté obrysy a ich vnútro – potrebná extrakcie objektu ako celku



Obrázok: Extrakcia sumčeka čierneho (*Ameiurus melas*) z pozadia

Analýza obrazu
Geometrické operácie

Definition (Geometrické operácie)

Geometrické operácie transformujú obraz I do nového obrazu I' transformáciou súradníc jednotlivých pixelov,

$$I(u,v) \rightarrow I'(u',v'),$$

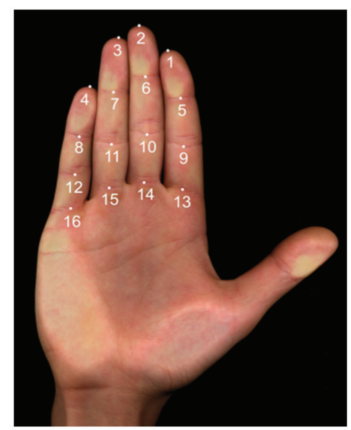
kde hodnoty intenzity obrazu I pôvodne v bode (u,v) sú transformované do bodu (u',v') v novom obraze I'. Transformačná funkcia má potom tvar

$$T : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$$

a je definovaná pre každý bod *vzorového obrazu* $\mathbf{x} = (u,v)$ a korešpondujúci bod *transformovaného obrazu* $\mathbf{x}' = (u',v')$, kde $\mathbf{x}' = T(\mathbf{x})$.
Príklady geometrických operácií:

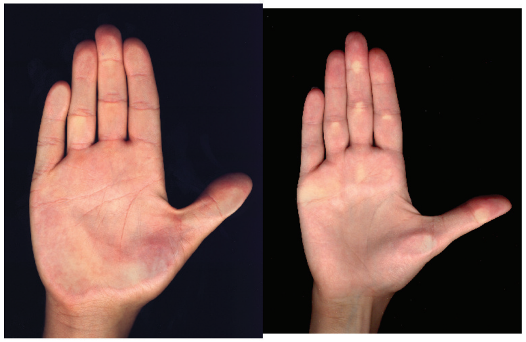
1. **afínne transformácie** – **otočenie**, **posunutie**, **škálovanie**, **skosenie** a **zrkadlenie**
2. **TPS modely** – **interpolačný thin-plate splajn (TPS) model** [IM1, IM3] a **penalizovaný TPS regresný model** [PRM1, PRM3]

Example 21
Geometrické operácie – **warping** ludskej ruky 1 (pozor nie **morfing**)



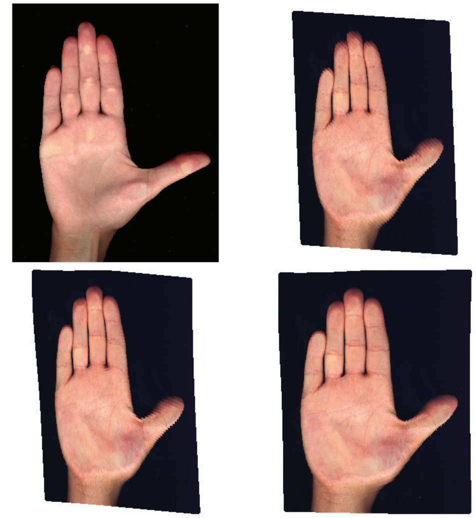
Obrázok: Ľudská ruka a 16 landmarkov

Example 21
Geometrické operácie – **warping** ludskej ruky 2 (pozor nie **morfing**)



Obrázok: Dve ľudské ruky – chceme transformovať ľavú na pravú

Example 21
Geometrické operácie – **warping** ludskej ruky 3 (pozor nie **morfing**)



Obrázok: Ľudské ruky – vzorová ruka, odhadnutá ruka, affínna a neafínna komponenta transformácie (po stĺpcoch) [approx. 1.6mil premenných]

Example 22
Geometrické operácie – **warping** Fredovej tváre (pozor, nie **morfing**)

Obrázok: **Prof. Fred Bookstein** – originálna (vľavo) a transformovaná fotografia (vpravo) [s láskavým dovolením zakladateľa odboru Analýza tvaru]

Analýza tvaru
Analýza obrysov

Definition (Obrys)

Obrys je ***uzavretá krivka*** definovaná súradnicami k bodov (semilandmarkov) patriacich tomuto obrysu, kde body sú

1. **ekvidištantne vzdialené *s rovnakou <u>radiálnou</u> vzdialenosťou medzi nimi*.**
2. **ekvidištantne vzdialené *s rovnakou <u>uhlovou</u> vzdialenosťou medzi nimi*.**

Definition (Analýza obrysov)

Štatistická analýza obrysu závisí od toho, o aký typ obrysu ide.

1. Ak ide o obrys typu (1), používa sa **radiálna Fourierova analýza**.
2. Ak ide o obrys typu (2), používa sa **tangenciálna Fourierova analýza** alebo **eliptická Fourierova analýza**.

2D/3D Fourierova analýza je zovšeobecnením klasickej Fourierovej analýzy používanej v časových radoch na analýzu periodického signálu v dátach, kde sa aplikuje rozklad Fourierovho radu použitím diskrétnych Fourierových transformácií. Slúži ja na ***výraznú redukciu dimenzii***.

Analýza tvaru
Analýza obrysov

Definition (Klasická Fourierova analýza)

Fourierov rozklad periodickej funkcie $f(t)$, kde $t \in \mathbb{R}^+$ s periódou $T_\lambda = \frac{\pi}{\lambda}$ v nejakých časových jednotkách, bude mať tvar

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{i=1}^{p} \left(a_i \cos(\lambda_i t) + b_i \sin(\lambda_i t)\right), \text{ kde } \lambda_i = \frac{i}{T} 2\pi$$

je i**-ta frekvencia** funkcie $f(t)$ v radiánoch $\lambda \in \langle 0, 2\pi \rangle$,

$$a_i = \frac{2}{T} \int_{t_1}^{t_2} f(t) \cos(\lambda_i t) dt; \, b_i = \frac{2}{T} \int_{t_1}^{t_2} f(t) \sin(\lambda_i t) dt$$

sú **párne a nepárne Fourierove koeficienty** a T je potrebné zvoliť. Aplikácia $f(t)$ predstavuje prepis do podoby **nelineárneho regresného modelu** tvaru

$$f(t) = a_{01} + a_{02} t + \sum_{i=1}^{p} \left(a_i \cos(\lambda_i t) + b_i \sin(\lambda_i t)\right) + \epsilon_t, \text{ kde } \lambda_i = i \frac{\pi}{T},$$

kde je potrebné odhadnúť $3p + 3$ parametrov a model linearizovať.

Analýza tvaru
RFA 1

Definition (Radiálna Fourierova analýza, RFA)

Majme obrys centrovaný do bodu $(0,0)$. **Lúče (ramená)** $r_j, j = 1, 2, \ldots k$, **uhlov** θ_j s vrcholom v bode $(0,0)$ je možné popísať **periodickou funkciou** $r(\theta)$ nejakého uhla θ nasledovne

$$r(\theta) = \frac{a_0}{2} + \sum_{i=1}^{p} \left(a_i \cos(\lambda_i \theta) + b_i \sin(\lambda_i \theta)\right), \text{ kde } \lambda_i = i.$$

Potom j**-ta harmonická zložka** je rovná $r(\theta_j)$, $a_0 = 2\sqrt{\sum_{j=1}^{k} r_j / k}$,

$$a_i = \frac{2}{k} \sum_{j=1}^{k} r_j \cos(i\theta_j); \, b_i = \frac{2}{k} \sum_{j=1}^{k} r_j \sin(i\theta_j)$$

sú **párne a nepárne Fourierove koeficienty**, k je **počet lúčov** a zároveň semilandmarkov obrysu a p je **počet frekvencií**. Musí byť splnená podmienka $p < \frac{k}{2}$, lebo máme dva parametre na jednu harmonickú zložku, ktorá je funkciou nejakého jedného uhla θ. Označenia: obrys $\mathbf{M}$ a $\mathbf{M}_{RFA}^{(p)}$.

Analýza tvaru
RFA 2

Metodologické poznámky:

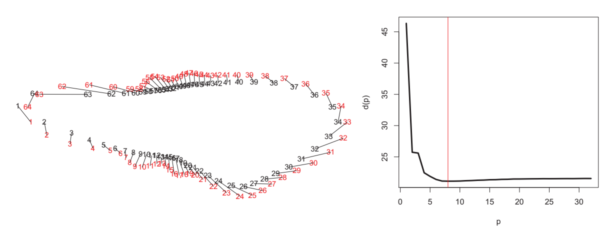
1. všetky obrysy z náhodného výberu ***musia byť automaticky extrahované pomocou reťazového kódu rovnakým smerom***
2. treba mať na zreteli, že ***smer výpočtu lúčov v RFA je proti smeru hodinových ručičiek a odhadovanie je sekvenčné***
3. ***štartovací bod a smer zoradenia bodov na obryse musia byť kompatibilné so štartovacím bodom a smerom odhadovania lúčov RFA***, teda proti smeru hodinových ručičiek; ak nie je, je potrebné zoradenie v smere hodinových ručičiek zmeniť na proti smeru hodinových ručičiek
4. ***uhol a orientácia prvého ramena musí byť rovnaká*** pri všetkých obrysoch z náhodného výberu – všetky obrysy je potrebné rotovať do tejto polohy, t.j. nulté rameno je na osi x-ovej, smeruje k jej kladnej polovici s vrcholom v bode $(0,0)$, čo docielime centrovaním obrysu do jeho centroidu (aritmetický priemer súradníc bodov obrysu) a otočením nultého ramena do osi x
5. ak chceme porovnávať ***obrysy párového typu*** (ľavá a pravá strana), je potrebné extrahovať jednu stranu proti smeru hodinových ručičiek a druhú v smere hodinových ručičiek s opačne orientovaným nultým uhlom a potom napr. ľavú stranu transformovať pomocou osovej súmernosti (s osou v osi y)
6. ***minimálny počet harmonických koeficientov*** p sa odhadne ako $d_p = \arg\min_{\forall p} \left\| \mathbf{M} - \mathbf{M}_{RFA}^{(p)} \right\|^2$
7. RFA ***nemôže byť použitá v prípadoch, keď aspoň jedno rameno (lúč) pretne obrys viac ako jedenkrát***

Example 23
RFA 3

Example (pokrač. príkladu 16)

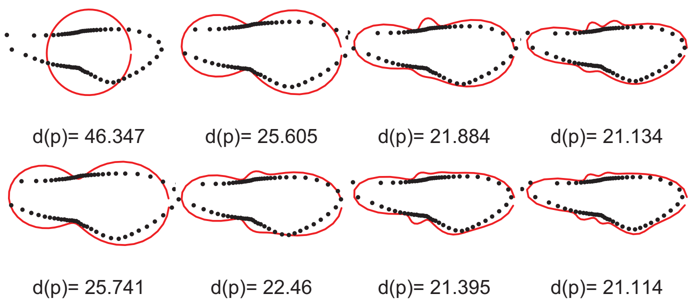
Majme hmyzie krídlo uložené ako **JPEG** a resamplované súradnice semilandmarkov obrysu pomocou radiálnych vzdialeností vypočítané v príklade 16.

1. Odhadnite obrys krídla pomocou RFA pri optimálnom p.



Obrázok: Obrys $\mathbf{M}$ superponovaný s obrysom $\mathbf{M}_{RFA}^{(8)}$ so segmentami spájajúcimi korešpondujúce body, rozptylový graf počtu harmonických koeficientov voči d_p (suboptimálne $p = 8$)

Example 23
RFA 4



Obrázok: Obrys **M** superponovaný s obrysmi $\mathbf{M}_{RFA}^{(p)}, p = 1, 2, \ldots 8$

Pozn.: Súradnice sú vypočítané v tvare **komplexných čísel**, kde modulus$= r(\theta_j)$, argument$= \theta_j$.

Analýza tvaru
EFA 1

Definition (Eliptická Fourierova analýza, EFA)

Majme obrys centrovaný do bodu $(0,0)$. Nech T je ***obvod obrysu***, $\lambda = 2\pi/T$ je **frekvencia** a nech $t \in \langle 0, T\rangle$ je **chordálna (uhlová) vzdialenosť**. Potom je možné pomocou t vyjadriť súradnice semilandmarkov obrysu ako $x(t)$ a $y(t)$ nasledovne

$$x(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{i=1}^{\infty} \left(a_i \cos(i\lambda t) + b_i \sin(i\lambda t)\right), \text{ kde}$$

$$a_i = \frac{2}{T}\int_0^T x(t)\cos(i\lambda t)dt;\, b_i = \frac{2}{T}\int_0^T x(t)\sin(i\lambda t)dt,$$

$$y(t) = \frac{c_0}{2} + \sum_{i=1}^{\infty} \left(c_i \cos(i\lambda t) + d_i \sin(i\lambda t)\right), \text{ kde}$$

$$c_i = \frac{2}{T}\int_0^T y(t)\cos(i\lambda t)dt;\, d_i = \frac{2}{T}\int_0^T y(t)\sin(i\lambda t)dt.$$

Analýza tvaru
EFA 2

Definition (EFA, pokrač.)

Ak je obrys definovaný pomocou k semilandmarkov, potom môžeme **Fourierove koeficienty** odhadnúť nasledovne

$$a_i = \frac{T}{2\pi^2 n^2}\sum_{j=1}^{k}\frac{\Delta x_j}{\Delta t_j}\left(\cos\left(i\frac{2\pi t_j}{T}\right) - \cos\left(i\frac{2\pi t_{j-1}}{T}\right)\right), \Delta x_1 = x_1 - x_k,$$

$$b_i = \frac{T}{2\pi^2 n^2}\sum_{j=1}^{k}\frac{\Delta x_j}{\Delta t_j}\left(\sin\left(i\frac{2\pi t_j}{T}\right) - \sin\left(i\frac{2\pi t_{j-1}}{T}\right)\right), a_0 = \frac{2}{T}\sum_{j=1}^{p} x_j,$$

$$c_i = \frac{T}{2\pi^2 n^2}\sum_{j=1}^{k}\frac{\Delta y_j}{\Delta t_j}\left(\cos\left(i\frac{2\pi t_j}{T}\right) - \cos\left(i\frac{2\pi t_{j-1}}{T}\right)\right), \Delta y_1 = y_1 - y_k,$$

$$d_i = \frac{T}{2\pi^2 n^2}\sum_{j=1}^{k}\frac{\Delta y_j}{\Delta t_j}\left(\sin\left(i\frac{2\pi t_j}{T}\right) - \sin\left(i\frac{2\pi t_{j-1}}{T}\right)\right), c_0 = \frac{2}{T}\sum_{j=1}^{p} y_j.$$

Vypočítané koeficienty a_0, a_i, b_i, c_0, c_i a d_i použijeme na odhad $x(t_j)$ a $y(t_j)$ dosadením do rovníc z predchádzajúceho slajdu, kde ∞ nahradíme p.

Analýza tvaru
EFA 3

Metodologické poznámky:

1. všetky obrysy z náhodného výberu ***musia byť automaticky extrahované pomocou reťazového kódu rovnakým smerom***
2. treba mať na zreteli, že ***smer výpočtu EFA je identický so smerom zoradenia bodov obrysu, odhadovanie je sekvenčné*** **a obe metódy majú rovnaký štartovací bod**
3. ak chceme porovnávať ***obrysy párového typu*** (ľavá a pravá strana), je potrebné extrahovať jednu stranu proti smeru hodinových ručičiek a druhú v smere hodinových ručičiek s opačne orientovanou hlavnou osou a potom napr. ľavú stranu transformovať pomocou osovej súmernosti (s osou v osi y)
4. ***minimálny počet eliptických koeficientov*** p sa odhadne ako $d_p = \arg\min_{\forall p} \left\|\mathbf{M} - \mathbf{M}_{RFA}^{(p)}\right\|^2$
5. parametrická forma EFA umožňuje ***jednoduché rozšírenie do 3D*** pridaním $z(t)$
6. ***väčšie eliptické koeficienty korešpondujú s väčšími elipsami, kde obrys vzniká kombináciou superponovaných elíps***
7. počet eliptických koeficientov môžeme odhadnúť pomocou **Furierovej sily** definovanej ako Power$_i = (a_i^2 + b_i^2 + c_i^2 + d_i^2)/2$, ktorá je proporcionálna amplitúde koeficientov a **kumulatívnej Furierovej sily** cumsum(Power$_i$)
8. najviac informácií o tvare obrysu je obsiahnutých v prvej elipse, pretože ide o najlepšiu aproximáciu obrysu

Analýza tvaru
EFA 4

Definition (NEFA – normalizácia (štandardizácia) obrysu)

Normalizovaná eliptická Fourierova analýza (NEFA) je EFA invariantná na veľkosť a rotáciu ***prvej elipsy*** a štartovací bod, kde sú koeficienty a_i, b_i, c_i, d_i transformované na a_i', b_i', c_i', d_i' použitím nasledovného algoritmu

$$\begin{pmatrix} a_i' & b_i' \\ c_i' & d_i' \end{pmatrix} = \frac{1}{s_e}\begin{pmatrix} \cos\psi & \sin\psi \\ -\sin\psi & \cos\psi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_i & b_i \\ c_i & d_i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos i\theta & -\sin i\theta \\ \sin i\theta & \cos i\theta \end{pmatrix},$$

kde s_e je **dĺžka hlavnej poloosi prvej elipsy**, ψ súvisí s **orientáciou elipsy** a θ s **rotáciou štartovacieho bodu** na koniec elipsy. Potom

$$\psi = 0.5 \arctan \frac{2(a_1 b_1 - c_1 d_1)}{a_1^2 + c_1^2 - b_1^2 - d_1^2}, s_e = \sqrt{a_*^2 + c_*^2}, \theta = \arctan \frac{c_*}{a_*},$$

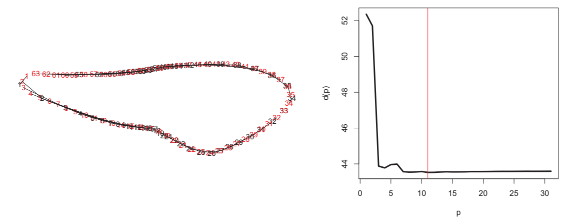
kde $a_* = a_1 \cos\psi + b_1 \sin\psi$ a $c_* = c_1 \cos\psi + d_1 \sin\psi$. Koeficienty prvej eliptickej zložky $a_1' = 1, b_1' = c_1' = 0$. Zostávajúci koeficient d_i' súvisí s **eliptickou excentricitou**, t.j. šírko-dĺžkovým pomerom obrysu.
Ak máme k dispozícii aj **súradnice landmarkov** na obryse, môžeme použiť na normalizáciu **GPA**.

Example 24
EFA 5

Example (pokrač. príkladu 16 a 23)

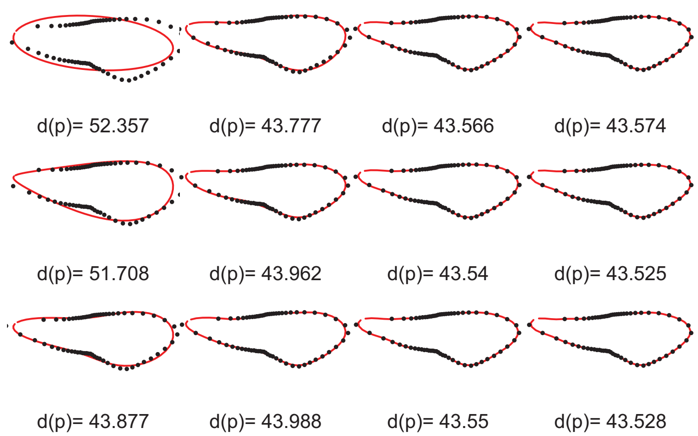
Majme hmyzie krídlo uložené ako **JPEG** a resamplované súradnice semilandmarkov obrysu pomocou uhlových vzdialeností vypočítané v príklade 16.

1. Odhadnite obrys krídla pomocou EFA pri optimálnom p.



Obrázok: Obrys **M** superponovaný s obrysom $\mathbf{M}_{EFA}^{(11)}$ so segmentami spájajúcimi korešpondujúce body, rozptylový graf počtu harmonických koeficientov voči d_p (suboptimálne $p = 11$)

Example 24
EFA 6



Obrázok: Obrys **M** superponovaný s obrysmi $\mathbf{M}_{EFA}^{(p)}, p = 1, 2, \ldots 12$

Analýza tvaru
TFA 1

Definition (Tangenciálna Fourierova analýza, TFA)

Majme obrys centrovaný do bodu $(0, 0)$. Semilandmarky obrysu sú ekvidištantne vzdialené s rovnakou uhlovou vzdialenosťou medzi nimi. Nech T je ***obvod obrysu***, ktorý je pre jednoduchosť potrebné škálovať na 2π. Potom je možné popísať ***kumulatívnu zmenu uhla dotykového vektora*** $\phi(t)$ v jednotlivých bodoch obrysu ako funkciu (kumulatívnej) chordálnej (uhlovej) vzdialenosti t ako $\phi(t) = \theta(t) - \theta(0) - t$, kde $\theta(t)$ je ***uhol dotykového vektora*** vo vzdialenosti t, $\theta(0)$ je uhol dotykového vektora štartovacieho bodu a jeho odpočítanie slúži na štandardizáciu. Potom platí

$$\phi(\theta) = \frac{a_0}{2} + \sum_{i=1}^{p} (a_i \cos(i\theta) + b_i \sin(i\theta)), \text{ kde}$$

$$a_i = \frac{2}{k}\sum_{j=1}^{k} \phi(t)\cos(i\theta_j); b_i = \frac{2}{k}\sum_{j=1}^{k} \phi(t)\sin(i\theta_j); a_0 = 2\sum_{j=1}^{k} \phi(t)/k.$$

Pozn.: Tak ako aj pri RFA – používame na výpočet **komplexné čísla**, v tomto prípade dostaneme **Z**, kde modulus$= 2\pi/k$, argument$= \theta(t) = \phi(t) + \theta(0) + t$, výsledné súradnice obrysu sú cumsum(**Z**), kt. musíme centrovať do $(0, 0)$.

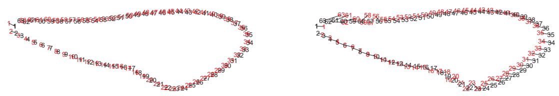
Example 25
TFA 2

Example (pokrač. príkladu 16, 23 a 24)

Majme hmyzie krídlo uložené ako **JPEG** a resamplované súradnice semilandmarkov obrysu pomocou uhlových vzdialeností vypočítané v príklade 16.

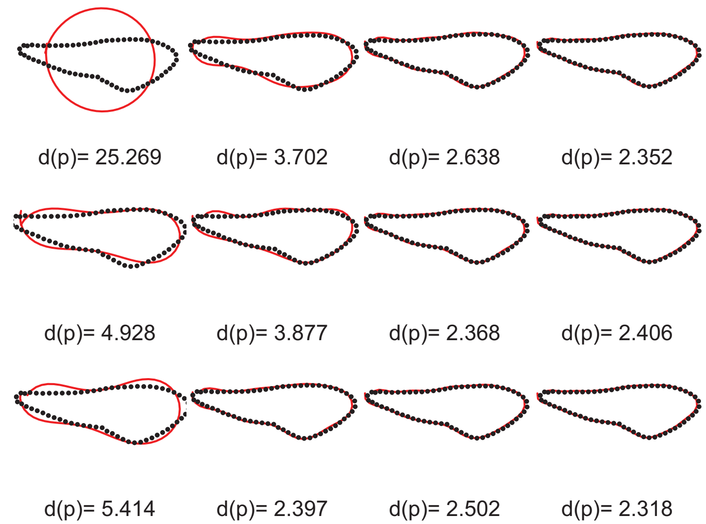
1. Odhadnite obrys krídla pomocou TFA pri optimálnom p.

Pozn.: Najjednoduchší spôsob aproximácie uhla dotykového vektora je pomocou rozdielu dvoch susediacich bodov obrysu. Treba si uvedomiť, že vplyv uhla $\theta(0)$ môže mať výrazný efekt na odhad obrysu.



Obrázok: Obrys **M** superponovaný s obrysom $\mathbf{M}_{TFA}^{(20)}$ so segmentami spájajúcimi korešpondujúce body (bez a s odpočítaním $\theta(0)$)

Example 25
TFA 3



Obrázok: Obrys **M** superponovaný s obrysmi $\mathbf{M}_{TFA}^{(p)}, p = 1, 2, \dots 12$

Analýza tvaru
Analýza kriviek (sliding on curves) – geometrická homológia

Definition (Matica ohybovej energie a ohybová energia)

Majme **TPS** model [IM3] definovaný ako

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{1}_k & \mathbf{X} \\ \mathbf{1}_k^T & 0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{X}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{W} \\ \mathbf{c}^T \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}, \mathbf{L} = \begin{pmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{1}_k & \mathbf{X} \\ \mathbf{1}_k^T & 0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{X}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix},$$

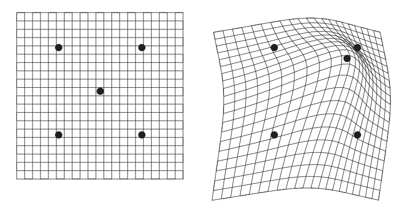
Nech je inverzia matice **L** rovná

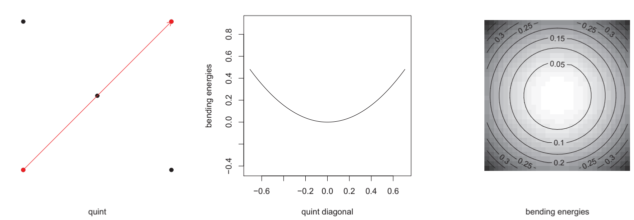
$$\mathbf{L}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{L}_{k\times k}^{11} & \mathbf{L}_{k\times 3}^{12} \\ \mathbf{L}_{3\times k}^{21} & \mathbf{L}_{3\times 3}^{22} \end{pmatrix},$$

potom

1. **matica ohybovej energie**: $\mathbf{B}_e = \mathbf{L}_{k\times k}^{11}$
2. **ohybová energia** alebo **penalta**:
   $J(\mathbf{f}) = \sum_{m=1}^{2} \int\int_{\mathbb{R}^2} \left[\sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 f_m}{\partial x^{(i)} \partial x^{(j)}} \right)^2 \right] dx^{(1)} dx^{(2)}$, s riešením modelu IM3
   $J(\mathbf{f}) = tr\left(\mathbf{W}^T \mathbf{S} \mathbf{W}\right) = tr(\mathbf{Y}^T \mathbf{B}_e \mathbf{Y})$

Analýza tvaru
Analýza kriviek (sliding on curves) – geometrická homológia





Obrázok: ***Cirkularita ohybovej energie*** vo vzťahu ku polohe piateho landmarku v prostriedku štvorca

Definition (Analýza kriviek – posúvanie semilandmarkov po krivke)

Nech $\mathbf{X}_{k\times 2} = (\mathbf{x}_1, ...\mathbf{x}_k)^T = (\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)})$ a $\mathbf{Y}_{k\times 2} = (\mathbf{y}_1, ...\mathbf{y}_k)^T = (\mathbf{y}^{(1)}, \mathbf{y}^{(2)})$ sú konfiguračné matice s riadkami $\mathbf{x}_j = (x_j^{(1)}, x_j^{(2)})^T$ a $\mathbf{y}_j = (y_j^{(1)}, y_j^{(2)})^T$, kde $\mathbf{x}^{(m)} = \left(x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, ...x_k^{(m)}\right)^T, \mathbf{y}^{(m)} = \left(y_1^{(m)}, y_2^{(m)}, ...y_k^{(m)}\right)^T, j = 1, 2, ...k$ a $m = 1, 2$. Nech body sublistu $\mathbf{y}_{j_i}$ ***posúvame mimo ich pôvodnej polohy*** $\mathbf{x}_{j_i}, i = 1, 2, ...q \leq k$, ***pozdĺž tangenciálneho smeru*** $\mathbf{u}_i = \left(u_i^{(1)}, u_i^{(2)}\right)^T$, kde $\|\mathbf{u}\|_2 = 1$. Potom nová poloha $\mathbf{x}_{j_i}$ je definovaná ako

$$\mathbf{y}_{j_i} = \mathbf{x}_{j_i} + t_i\mathbf{u}_i, i = 1, 2, ...q \leq k, \text{kde } \mathbf{u}_i = \frac{\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_{i-1}}{\|\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_{i-1}\|_2} \text{ a } \mathbf{t} = (t_1, ...t_q)^T.$$

Je potrebné ***minimalizovať kvadratickú formu***

$$\mathbf{y}^T\mathbf{B}\mathbf{y} = (\mathbf{x} + \mathbf{U}\mathbf{t})^T\mathbf{B}(\mathbf{x} + \mathbf{U}\mathbf{t}),$$

kde $\mathbf{x} = Vec(\mathbf{X})$ a $\mathbf{y} = Vec(\mathbf{Y})$, $\mathbf{B} = diag(\mathbf{B}_e, \mathbf{B}_e)$, $\mathbf{B}_e$ je závislá iba na nejakej (referenčnej) konfiguračnej matici $\mathbf{X}^*$.

Definition (Analýza kriviek – posúvanie semilandmarkov po krivke; pokrač.)

Kvadratickú formu $\mathbf{y}^T\mathbf{B}\mathbf{y}$ minimalizujeme cez ***hyperrovinu***

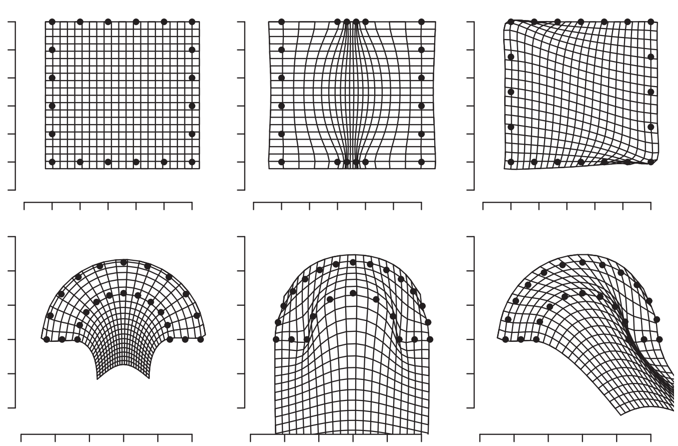
$$\mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{U}\mathbf{t},$$

kde $\mathbf{X}$ je matica landmarkov vzoru (pôvodná poloha) a $\mathbf{Y}$ je matica landmarkov obrazu (nová poloha), $\mathbf{U}$ je matica riadkov dĺžky $2k$ a stĺpcov dĺžky q, kde (j_i, i)-ty element označujeme $u_i^{(1)}$ a $(k + j_i, i)$-ty element $u_i^{(2)}$, na iných miestach sú umiestnené nuly. Vektor $\mathbf{t}$ je riešením nasledujúcej rovnosti

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \mathbf{t}}(\mathbf{x} + \mathbf{U}\mathbf{t})^T\mathbf{B}(\mathbf{x} + \mathbf{U}\mathbf{t}) &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{t}}(\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{x}^T\mathbf{B}(\mathbf{U}\mathbf{t}) + (\mathbf{U}\mathbf{t})^T\mathbf{B}\mathbf{x} + (\mathbf{U}\mathbf{t})^T\mathbf{B}(\mathbf{U}\mathbf{t})) \\
&= \mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{U} + \mathbf{U}^T\mathbf{B}\mathbf{x} + 2\mathbf{U}^T\mathbf{B}(\mathbf{U}\mathbf{t}) \\
&= 2(\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{U} + \mathbf{U}^{\mathbf{T}}\mathbf{B}(\mathbf{U}\mathbf{t})) = 0
\end{aligned}$$

Riešenie (podobné zovšeobecnenej MNŠ) má tvar

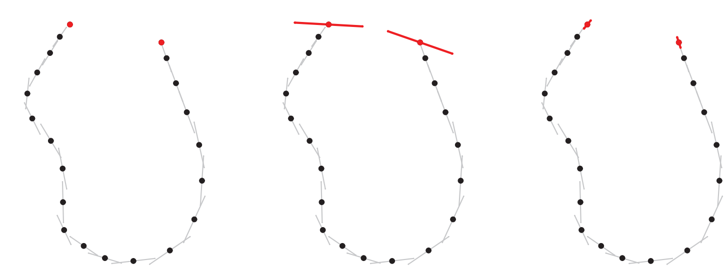
$$\mathbf{t} = -\left(\mathbf{U}^T\mathbf{B}\mathbf{U}\right)^{-1}\mathbf{U}^T\mathbf{B}\mathbf{x}.$$



Obrázok: Posúvanie bodov na krivke pri troch situáciách a dvoch tvaroch

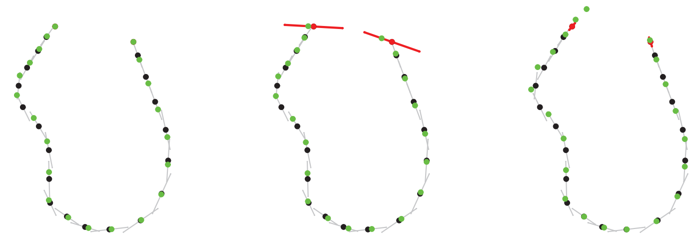
Example (Symphyseálna krivka, pokrač.)

Majme symphyseálnu krivku z príkladu 3, kde $k = 21$, dáta (`symphysis`). Na ***optimalizáciu polohy semilandmarkov na krivke v zmysle ohybovej energie (geometrická homológia)*** použijeme konfiguračnú maticu $\mathbf{X}$ a referenčnú (napr. priemernú) krivku $\mathbf{X}_R$ (voči ktorej prebieha optimalizácia).



Obrázok: Posúvanie bodov na krivke pri troch situáciách – rôzne chápanie krivky (uzavretá vs otvorená), koncové body fixované vs voľné na posúvanie [dotyčnice v smere $\mathbf{u}_i, i = 1, 2, ...k$; ozn. • pôvodné pozície $\mathbf{x}_i$]

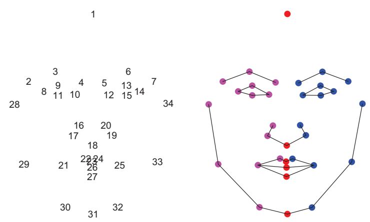
Analýza tvaru
Analýza kriviek (sliding on curves) – geometrická homológia



Obrázok: Posúvanie bodov na krivke pri troch situáciách – rôzne chápanie krivky (uzavretá vs otvorená), koncové body fixované vs voľné na posúvanie [dotyčnice v smere $\mathbf{u}_i$ s riešeniami $\mathbf{y}_i = \mathbf{x}_i + t_i \mathbf{u}_i, i = 1, 2, \ldots q$, ozn. ● pôvodné pozície $\mathbf{x}_i$, ● odhadnuté pozície $\mathbf{y}_i$]

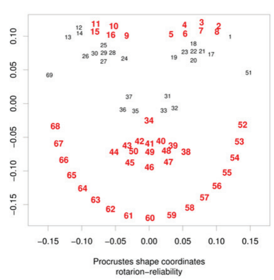
2D tvár – snímok z klasického fotoaparátu
Dpt. of Anthropology, University of Vienna, Vienna, Austria

20 dievčat, $19 - 31$ročných, $46 + 26$ (semi)landmarkov



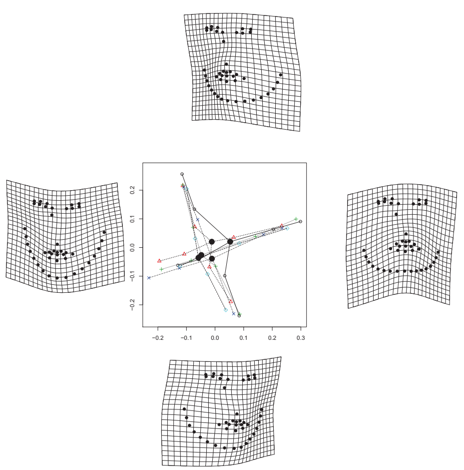
Obrázok: (Semi)landmarky na ľudskej tvári a ***pravo-ľavá (ne)kompatibilita kódovania semilandmarkov na krivkách*** [podmnožina (semi)landmarkov]

2D tvár – snímok z klasického fotoaparátu
Dpt. of Anthropology, University of Vienna, Vienna, Austria



Obrázok: Reliabilita náklonu hlavy pri snímaní v rôznych uhloch [podmnožina (semi)landmarkov] a jej PCA

2D tvár – snímok z klasického fotoaparátu
Dpt. of Anthropology, University of Vienna, Vienna, Austria



Obrázok: PCA reliability náklonu hlavy pri snímaní v rôznych uhloch [podmnožina (semi)landmarkov]

2D tvár
Získavanie dát a ich úprava v PC

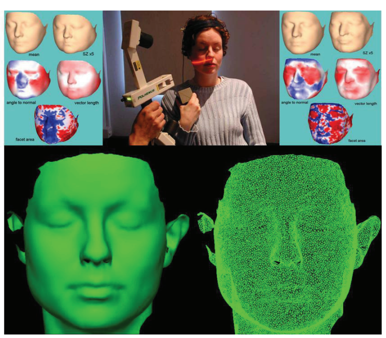
Získavanie dát a ich úprava v PC:

1. **nasnímanie dát klasickým fotoaparátom** – protokol snímania (dotazník, kalibrácia snímacieho systému, participanti a časový harmonogram)
2. **extrakcia 2D súradníc a RGB farieb** – z `.jpeg` a `.tiff` súborov a pod. do `.dmp` súborov čitateľných v R
3. **validačná štúdia (štúdia reliabilita)** – vhodná/optimálna orientácia tváre v anatomickom súradnicovom systéme, opakovateľnosť presnosti snímania/merania (Technical Measurement Error, TEM), lineárny regresný model so zmiešanými efektami
4. **(polo)automatické meranie/extrakcia súradníc (semi)landmarkov, kriviek** $[(46+26)\times 2$ (semi)landmarkov$]$
5. iteratívny výpočet **súradníc geometricky homologických semilandmarkov na krivkách** použitím ***TPS warpingu*** $[(46+26)\times 2$ (semi)landmarkov a viac ako 2mil pixelov$]$
6. **výpočet symetrizovaného priemerného tvaru (template)** (semi)landmarky na referenčnej tvári a preznačenej a zrkadlovo súmernej tvári musia byť spriemerované

3D tvár – snímok zo stereo-kamerového systému
Dental clinic, The University of Glasgow, UK; Face 3D data

3D tvár – snímok z laserového skaneru
Royal College of Surgeons in Ireland, Dublin; Face 3D data

42 párov naskenovaných tvárí, 23 landmarkov, 1664 geometricky homologických semilandamrkov na krivkách a ploche, 59242 bodov plochy trinagulovaných použitím 117386 trojuholníkov



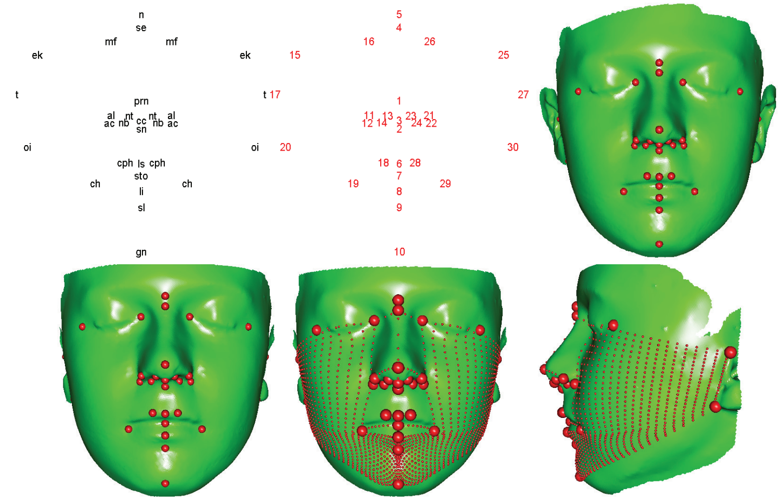
Obrázok: VCFS tvár, laserový skaner a (ne)triangulované semilandmarky na ploche

3D tvár
Získavanie dát a ich úprava v PC

Získavanie dát a ich úprava v PC:

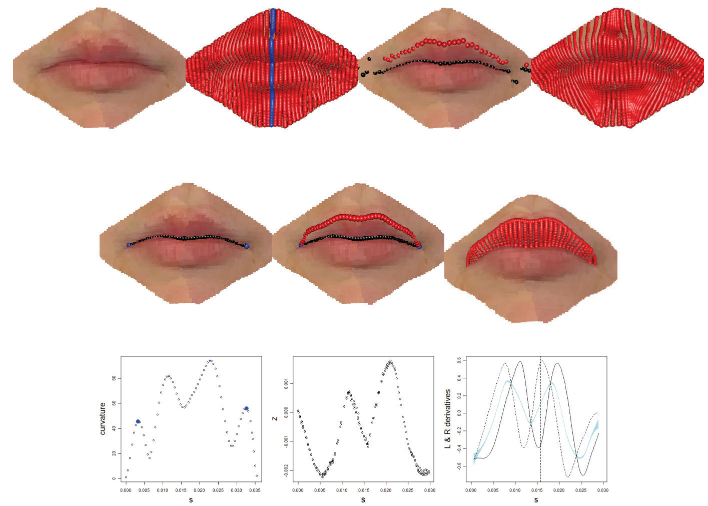
1. **nasnímanie dát stereo-kamerovým systémom alebo laserovým skanerom** – protokol snímania (dotazník, kalibrácia snímacieho systému, participanti a časový harmonogram)
2. **extrakcia 3D súradníc, normál bodov na ploche, trinagulácie a RGB farieb** – z `.obj`, `.wrl` a `.jpeg` súborov do `.dmp` súborov čitateľných v R
3. **validačná štúdia (štúdia reliabilita)** – vhodná/optimálna orientácia tváre v anatomickom súradnicovom systéme, opakovateľnosť presnosti snímania/merania (Technical Measurement Error, TEM), lineárny regresný model so zmiešanými efektami
4. **(polo)automatické meranie/extrakcia súradníc (semi)landmarkov, kriviek a plôch** $[1664\times 3=4992,\ 4992\times 42=209664$ bodov$]$
5. iteratívny výpočet **súradníc geometricky homologických semilandmarkov na krivkách/plochách a bodov na ploche** použitím ***TPS warpingu*** $[59242\times 3=177726;\ 177726\times 42=7464492]$
6. **výpočet symetrizovaného priemerného tvaru (template)** (semi)landmarky na referenčnej tvári a preznačenej a zrkadlovo súmernej tvári musia byť spriemerované; plocha tiež symetrizovaná

3D tvár – snímok z laserového skaneru
Royal College of Surgeons in Ireland, Dublin; Face 3D data



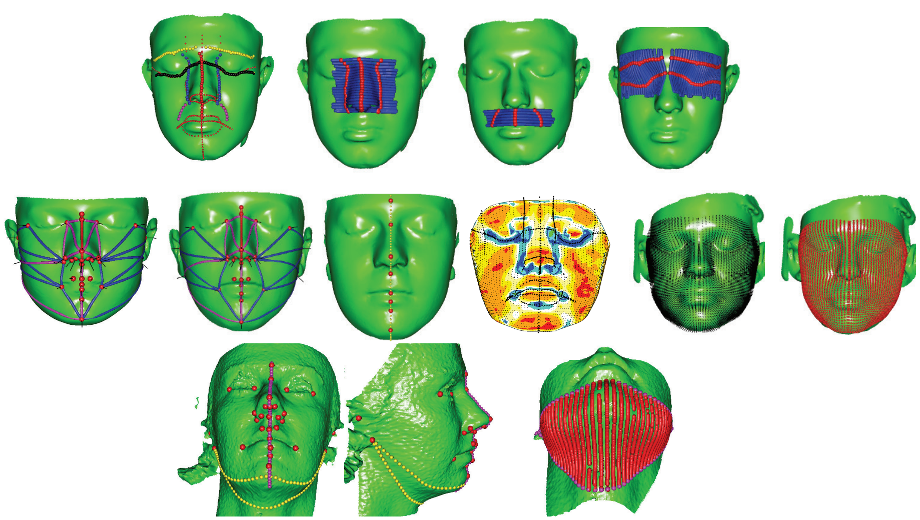
Obrázok: ***Symetrizovaná vzorová tvár (template)*** a (semi)landmarky

Budúcnosť analýzy tvaru
Automatická extrakcia diferenciálno-geometrických štruktúr z biologických objektov



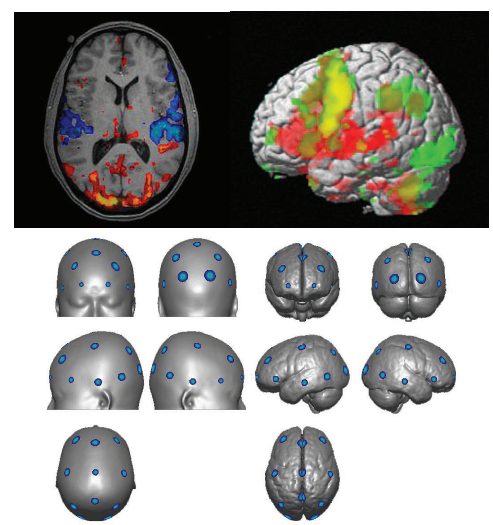
Obrázok: Sekcencia automatickej extrakcie ľudských pier

Budúcnosť analýzy tvaru
Automatická extrakcia diferenciálno-geometrických štruktúr z biologických objektov



Obrázok: Automatická extrakcia landmarkov, kriviek a anatomických plôch

Budúcnosť analýzy tvaru
Analýza tvaru EEG – časo-priestorové modelovanie



Obrázok: Fúzia analýzy tvaru, EEG a zobrazovacích techník mozgu

Štatistická analýza tvaru a obraz

Mnohorozmerné štatistické metódy

Stanislav Katina

[1]Ústav matematiky a statistiky
Přírodovědecká fakulta
Masarykova Univerzita v Brne

Tento učební text vznikl za přispění Evropského sociálního fondu a státního rozpočtu ČR prostřednictvím Operačního programu Vzdělávání pro konkurenceschopnost v rámci projektu Univerzitní výuka matematiky v měnícím se světě (CZ.1.07/2.2.00/15.0203).

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Distance-based PCA

Classical PCA

Definition (Distance-based PCA)

The ***Principal Component Analysis*** (PCA) finds a set of standardized linear combinations, called ***principal components*** (PCs), which are orthogonal and taken together explain all the variance of the random vector

$$\mathbf{X}_{k\times 1} = (X_1, ..., X_k)^T \text{ with } E(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} \text{ and } Var(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}},$$

where $\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}$ is k-vector and $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}$ is $k \times k$ matrix. Let $\mathbf{X}_i^T, i = 1, 2, ...n$ be a random sample of k-vectors (the rows of $\mathbf{X}_{n\times k}$), where $k \leq n-1$. Then the ***principal component transformation*** is defined as

$$\mathbf{X}_{n\times k} \to \mathbf{Y}_{n\times k} = \left(\mathbf{X}_{n\times k} - \mathbf{1}_n \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}^T\right) \boldsymbol{\Gamma}_{k\times k},$$

where $\boldsymbol{\Gamma}$ is orthogonal, $\boldsymbol{\Gamma}^T \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\Gamma} = \boldsymbol{\Lambda} = diag(\lambda_1, ...\lambda_k)$, $\lambda_1 \geq ... \geq \lambda_k \geq 0$, $\lambda_j, j = 1, 2, ...k$ are ***eigenvalues*** of $\boldsymbol{\Gamma}$ and γ_j (jth column of $\boldsymbol{\Gamma}$) are ***eigenvectors*** of $\boldsymbol{\Gamma}$. The jth PC of $\mathbf{X}_{n\times k}$ is defined as jth column of $\mathbf{Y}_{n\times k}$ by equation $\mathbf{Y}_j = \left(\mathbf{X}_{n\times k} - \mathbf{1}_n \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}^T\right) \gamma_j$, where γ_j is the jth column of $\boldsymbol{\Gamma}$ and is called jth vector of ***PC loadings***, and $R_{ij} = Y_{ij}, i = 1, 2, ...n$ are ***PC scores*** of ith individual ($R_{ij} = Y_{ij}$ is ith element of n-vector $\mathbf{Y}_j$).

Distance-based PCA

Classical PCA

Definition (Distance-based PCA; cont.)

SVD of ***covariance matrix*** $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}$ is defined as follows

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}} = \boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\Gamma}^T = \sum_{j=1}^k \lambda_j \gamma_j \gamma_j^T.$$

Let $\mathbf{H} = \mathbf{I} - \left(\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^T\right)$ be ***centring matrix***, then SVD of $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{Y}}$ can be written as

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{Y}} = \frac{1}{n}\mathbf{Y}^T\mathbf{H}\mathbf{Y} = \frac{1}{n}\boldsymbol{\Gamma}^T \left(\mathbf{X} - \mathbf{1}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}^T\right) \mathbf{H} \left(\mathbf{X} - \mathbf{1}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}^T\right) \boldsymbol{\Gamma} = \frac{1}{n}\boldsymbol{\Gamma}^T\mathbf{X}^T\mathbf{H}\mathbf{X}\boldsymbol{\Gamma} = \boldsymbol{\Gamma}^T\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\Gamma}.$$

If $\mathbf{X} = (X_1, ..., X_k)^T \sim N_k(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}})$, then

1. $E(Y_j) = 0$ and $Var(Y_j) = \gamma_j^T \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}} \gamma_j = \lambda_j$
2. ***covariance of transformed variables*** is equal to $Cov(Y_i, Y_j) = \gamma_i^T \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}} \gamma_j = \lambda_j \gamma_i^T \gamma_j = 0, i \neq j$, $Var(Y_1) \geq Var(Y_2) \geq ... \geq Var(Y_k)$, $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}} \gamma_j = \lambda_j \gamma_j$
3. ***covariance of original and transformed variables*** $Cov(X_i, Y_j) = \gamma_{ij}\lambda_j$
4. ***correlation coefficient*** $\rho(X_i, Y_j) = \left(\gamma_{ij}\sqrt{\lambda_j / (\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}})_{ii}}\right); i, j = 1, 2, ...k$

Distance-based PCA

Classical PCA

Definition (Distance-based PCA; cont.)

Total variance is equal to

$$tr(\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}) = tr\left(\boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\Gamma}^T\right) = tr(\boldsymbol{\Lambda}) = \sum_{j=1}^k \lambda_j,$$

and ***generalized variance***

$$\det(\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}) = \prod_{j=1}^k \lambda_j.$$

Distance-based PCA
Classical PCA

Definition (Distance-based PCA; cont.)

If $\widehat{\mu}_{\mathbf{X}} = \overline{\mathbf{x}}$, $\widehat{\mathbf{\Sigma}}_{\mathbf{X}} = \mathbf{S}_{\mathbf{X}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\mathbf{x}_i - \overline{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \overline{\mathbf{x}})^T = \frac{1}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{H}\mathbf{X}$, then ***sample PCs*** are defined as follows

$$\widehat{\mathbf{Y}}_{n\times p} = \left(\mathbf{X}_{n\times p} - \mathbf{1}_n\overline{\mathbf{x}}^T\right)\widehat{\mathbf{\Gamma}},$$

$\mathbf{S}_{\mathbf{X}} = \widehat{\mathbf{\Gamma}}\widehat{\mathbf{\Lambda}}\widehat{\mathbf{\Gamma}}^T = \sum_{j=1}^{p}\widehat{\lambda}_j\widehat{\gamma}_j\widehat{\gamma}_j^T$, $\widehat{\mathbf{\Sigma}}_{\mathbf{Y}} = \widehat{\mathbf{\Gamma}}^T\mathbf{S}_{\mathbf{X}}\widehat{\mathbf{\Gamma}}$. If $\mathbf{X} = (X_1, ..., X_k)^T \sim N_k(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}, \mathbf{\Sigma}_{\mathbf{X}})$, then

1. $\overline{\mathbf{y}}_j = 0$ and $\widehat{Var}(\widehat{\mathbf{y}}_j) = \widehat{\gamma}_j^T\mathbf{S}_{\mathbf{X}}\widehat{\gamma}_j = \widehat{\lambda}_j$
2. ***sample covariance of transformed variables*** is equal to
   $\widehat{Cov}(\widehat{\mathbf{y}}_i, \widehat{\mathbf{y}}_j) = \widehat{\gamma}_i^T\mathbf{S}_{\mathbf{X}}\widehat{\gamma}_j = \lambda_j\widehat{\gamma}_i^T\widehat{\gamma}_j = 0, i \neq j,$
   $\widehat{Var}(\widehat{\mathbf{y}}_1) \geq \widehat{Var}(\widehat{\mathbf{y}}_2) \geq ... \geq \widehat{Var}(\widehat{\mathbf{y}}_k)$, $\mathbf{S}_{\mathbf{X}}\widehat{\gamma}_j = \widehat{\lambda}_j\widehat{\gamma}_j$
3. ***sample covariance of original and transformed variables***
   $\widehat{Cov}(\mathbf{x}_i, \widehat{\mathbf{y}}_j) = \widehat{\gamma}_{ij}\widehat{\lambda}_j$
4. ***sample correlation coefficient***
   $\widehat{\rho}(\mathbf{x}_i, \widehat{\mathbf{y}}_j) = r(\mathbf{x}_i, \widehat{\mathbf{y}}_j) = \left(\widehat{\gamma}_{ij}\sqrt{\widehat{\lambda}_j / (\mathbf{S}_{\mathbf{X}})_{ii}}\right); i, j = 1, 2, ...k$

Spatial PCA
PCA for EEG data (Katina 2011)

Definition (Spatial PCA)

- let $\mathbf{y}_i$ represent a k-vector of ***EEG responses*** for individual $i, i = 1, 2, ...n$, measured in k ***sensor locations*** on the human head in $\mathbb{R}^3$ (projected to $\mathbb{R}^2$, in our case)
- in general, these sensor locations might be different for each individual—but here, we consider their $x^{(1)}$- and $x^{(2)}$-coordinates be the same and form a $k \times 2$ matrix $\mathbf{X}$
- with respect to $\mathbf{X}$, $\mathbf{y}_i$ are y-coordinates of the surface $(x_{ij}^{(1)}, x_{ij}^{(2)}, y_{ij})$, $j = 1, 2, ...k$. Let $\overline{\mathbf{y}}$ be ***mean response***
- ***spatial PCA*** is generalized PCA, where PCs are calculated with respect to the bending energy matrix $\mathbf{B}_e$ or its inverse
- consider a random sample of n surface values (here EEG/ERP values) $\mathbf{y}_i = (y_{i1}, y_{i2}, \ldots y_{ik})^T$, $i = 1, 2, ...n$
- the ***bending energy matrix*** $\mathbf{B}_e$ is calculated for the mean position of the electrodes $\overline{\mathbf{X}}$ (here fixed position $\mathbf{X}$ of the electrodes on the head
- let $\widehat{\mathbf{\Sigma}} = \frac{1}{n}\mathbf{Y}_c^T\mathbf{Y}_c$ be $k \times k$ ***sample covariance matrix***, where ith row of $\mathbf{Y}_c$ is equal to $\mathbf{y}_{ic} = \mathbf{y}_i - \overline{\mathbf{y}}$

Spatial PCA
PCA for EEG data

Definition (Spatial PCA, cont.)

- let
  $$\widehat{\mathbf{\Sigma}}_B = \left(\mathbf{B}_e^-\right)^{\alpha/2}\widehat{\mathbf{\Sigma}}\left(\mathbf{B}_e^-\right)^{\alpha/2}$$
  be the sample covariance matrix of $\left(\mathbf{B}_e^-\right)^{\alpha/2}\mathbf{y}_{ic}$, i.e. ***generalized sample covariance matrix*** of $\mathbf{y}_{ic}$
- the non-zero ***eigenvalues*** of $\widehat{\mathbf{\Sigma}}_B$ are $\widehat{l}_j$ with corresponding ***eigenvectors*** $\widehat{\mathbf{g}}_j$ (***PC loadings***)
- ***Moore-Penrose generalized inverse*** of $\mathbf{B}_e^{\alpha/2}$, $\left(\mathbf{B}_e^-\right)^{\alpha/2} = \sum_j\widehat{\lambda}_j^{-\alpha/2}\widehat{\gamma}_j^T\widehat{\gamma}_j$
- the ***PC scores*** are
  $$r_{ij} = \widehat{\mathbf{g}}_j^T\left(\mathbf{B}_e^-\right)^{\alpha/2}\mathbf{y}_{ic}; i = 1, 2, ...n; j = 1, 2, ...k$$

Spatial PCA
PCA for EEG data

Definition (Spatial PCA, cont.)

- PCs and PC scores are useful tools for describing the non-affine surface variation in particular, ***the effect of the*** j***th PC*** can be viewed by plotting
  $$\mathbf{y}(c_j, j, \alpha) = \overline{\mathbf{y}} \pm c_j\mathbf{B}_e^{\alpha/2}\widehat{\mathbf{g}}_j\widehat{l}_j^{1/2}, r_j = c_j\widehat{l}_j^{1/2}$$
  for various values of $r_j \in \langle 0, \max(|r_{ij}|)\rangle$ (or reasonable magnification of $\max(|r_{ij}|)$; alternatively, fixing $c_j = 1$, magnification of $\widehat{l}_j^{1/2}$, standard deviation of PC$_j$ scores), where $\mathbf{B}_e^{\alpha/2} = \sum_j\widehat{\lambda}_j^{\alpha/2}\widehat{\gamma}_j\widehat{\gamma}_j^T$
- to emphasize ***large scale variability*** (***global bending***), $\alpha = 1$
- for ***small scale variability*** (***local bending***), $\alpha = -1$, and
- if $\alpha = 0$, then we take $\mathbf{B}_e^0 = \mathbf{I}$ as the $k \times k$ identity matrix and the procedure is exactly the same as classical PCA
- ***visualization the effect of each PC***—grid of gray-scale rectangles with colors corresponding to the surface values with superimposed contours built up based on TPS, where the fixed positions of the electrodes were re-sampled in the convex hull data-space

Definition (Spatial PCA, cont.)

- a ***PC summary of the surface data***

$$\mathbf{y}_i = \overline{\mathbf{y}} + \mathbf{B}_e^{\alpha/2} \sum_{j=1}^{k} r_{ij} \widehat{\mathbf{g}}_j = \overline{\mathbf{y}} + \sum_{j=1}^{k} \widehat{\mathbf{g}}_j \widehat{\mathbf{g}}_j^T \mathbf{y}_{ic}, i = 1, \dots n$$

- ***PC summary for any*** q***-subset of PCs*** $\{PC_{j_1}, \dots PC_{j_q}\}$, $q \geq 1$, can be written as

$$\mathbf{y}_i(PC_{(j_1,\dots j_q)}) = \overline{\mathbf{y}} + \mathbf{B}_e^{\alpha/2} \sum_{j_1,\dots j_q} r_{ij} \widehat{\mathbf{g}}_j, i = 1, \dots n$$

and then $\mathbf{Y}_{PC(j_1,\dots j_q)}$ is the matrix of $\mathbf{y}_i(PC_{(j_1,\dots j_q)})$

Definition (Spatial PCA, cont.)

- ***affine contributions to the variability***—an ***affine subspace PCA*** on the $n \times k$ matrix $\mathbf{Y}_A$ with the rows $\mathbf{y}_{A,i}$, $i = 1, 2, \dots n$
- ***non-affine contribution to the variability*** —a ***non-affine subspace PCA*** on the $n \times k$ matrix $\mathbf{Y}_{NA}$ with the rows $\mathbf{y}_{NA,i}$, $i = 1, 2, \dots n$
- ***in affine subspace***,$\widehat{\mathbf{\Sigma}}_A$ stands for ***sample covariance matrix*** of $\widehat{\mathbf{y}}_i$ and spatial PCA is calculated with respect to bending energy matrix $\mathbf{B}_e^0 = \mathbf{I}$;
- ***in non-affine subspace***, we have $(\mathbf{B}_e^-)^{\alpha/2} \widehat{\mathbf{\Sigma}}_{NA} (\mathbf{B}_e^-)^{\alpha/2}$, because pure bending is independent of affine component
- to find the affine component we use ***linear regression model (LRM)*** $\mathbf{y}_i = \overline{\mathbf{y}}\beta_i + \epsilon_i$, where $\widehat{\beta}_i = (\overline{\mathbf{y}}^T\overline{\mathbf{y}})^{-1}\overline{\mathbf{y}}^T\mathbf{y}_i$, $\mathbf{y}_i$, $i = 1, 2, \dots n$, are the rows of $n \times k$ matrix $\mathbf{Y}$; then $\mathbf{y}_{A,i} = \overline{\mathbf{y}}\widehat{\beta}_i$ is the ***affine component***; finally, we get ***non-affine component (residuals of LRM)***, $\mathbf{y}_{NA,i} = \mathbf{y}_i - \mathbf{y}_{A,i}$

Definition (Spatial PCA, cont.)

Consider the ***null model***

$$\mathbf{y} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\epsilon},$$

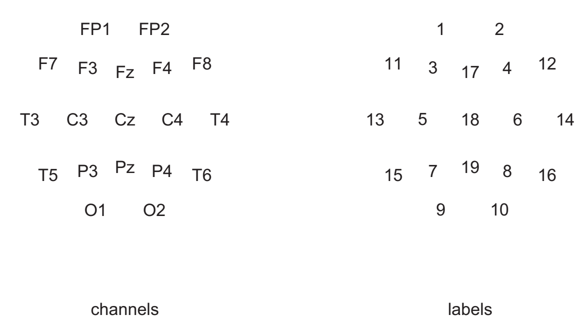
where $\mathbf{y} = (y_1, y_i, \dots y_k)^T$, $\boldsymbol{\epsilon} \sim N_k(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma}_B)$ Special case of this model can be written as

$$\mathbf{y} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{B}_e^{\alpha/2} \sum_{j=1}^{q} c_j \mathbf{g}_j l_j^{1/2} + \boldsymbol{\epsilon},$$

where $c_j \sim N(0, 1)$, $\boldsymbol{\epsilon} \sim N_k(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_{k\times k})$ independently, $\boldsymbol{\mu}\mathbf{g}_j = 0, \mathbf{g}_j^T\mathbf{g}_j = 1$ and $\mathbf{g}_i^T\mathbf{g}_j = 0$ $(i \neq j)$. Then

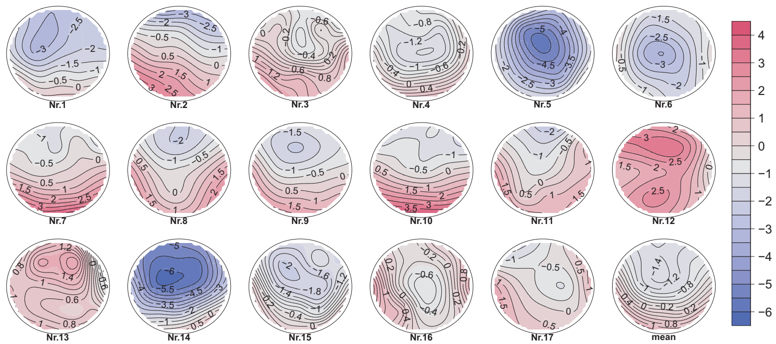
$$\widehat{\mathbf{\Sigma}}_B = \sum_{i=1}^{q} l_j \mathbf{g}_j \mathbf{g}_j^T + \sigma^2 \mathbf{I}_{k\times k}.$$

Finally, $\mathbf{\Sigma}_B$ can be estimated by $\widehat{\mathbf{\Sigma}}_B$ and $\widehat{\sigma}^2 = \frac{1}{k-q}\sum_{j=q+1}^{k} l_j$



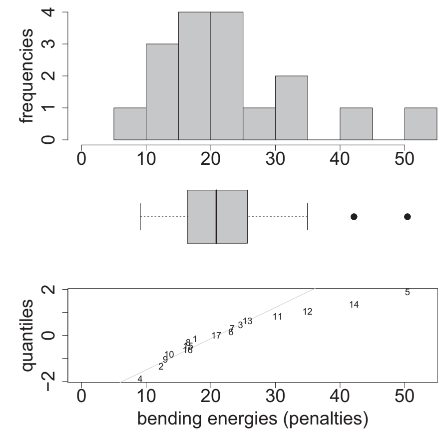
Obrázok: Ul 10-20 systém pozícií elektród EEG s $k = 19$ elektródami

Spatial PCA
PCA for EEG data



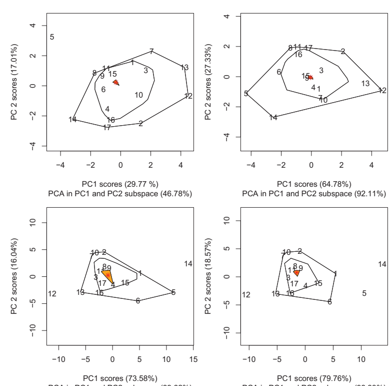
Obrázok: TPS sieť farebných štvoruholníkov s farbami korešpondujúcimi vyhladeným hodnotám plochy superponovanými kontúrami (použitím optimálnej λ vypočítanej pomocou GCV)

Spatial PCA
PCA for EEG data



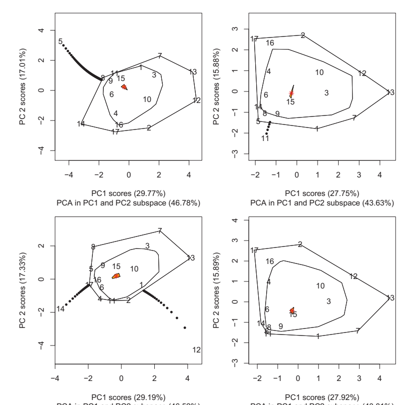
Obrázok: Histogram, boxplot, and quantile plot of penalties (bending energies; outliers—Nr.14 and 5)

Spatial PCA
PCA for EEG data



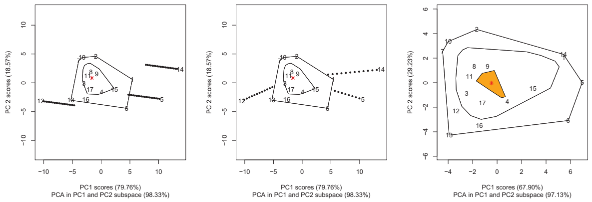
Obrázok: Spatial PCA—***PCA of local bending patterns*** (outlier Nr.5; upper left), ***classical PCA*** (outliers Nr.12 and 14; bottom left), ***global bending patterns*** (upper right), and ***PCA in the affine subspace*** (outlier Nr.5, 12, and 14; bottom right)

Spatial PCA
PCA for EEG data



Obrázok: Iterative process of outlier detection and relaxation in the subspace of first two PCs of local bending patterns with '*curves décolletage*'—first PCA (outlier Nr.5; upper left), second PCA (outlier Nr.12 and 14; upper right), third PCA (outlier Nr.11; bottom left), final PCA (without outliers; bottom right)

Spatial PCA
PCA for EEG data



Obrázok: Iterative process of outlier detection and relaxation in the subspace of first two affine PCs with '*curves décolletage*'—initial PCA with incorrect relaxation direction (outlier Nr.5, 12, and 14; upper left), initial PCA with correct relaxation direction (outlier Nr.5, 12, and 14; upper right), final PCA (without outliers; bottom)

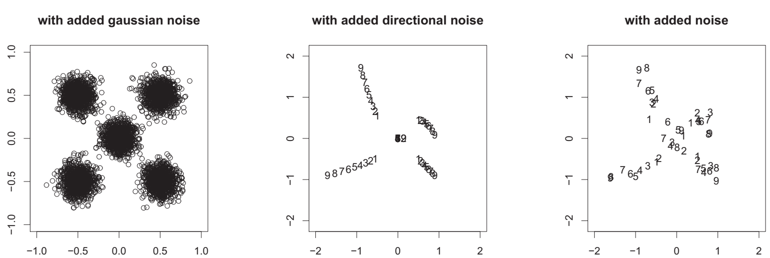
Spatial PCA
PCA for EEG data

Euler angles ψ, θ, and ϕ in degrees (clockwise around $x^{(1)}$-, $x^{(2)}$- and y-axis) of original and ***affine-relaxed surfaces*** (***OLS planes***) were calculated from a 3D rotation matrix. Additionally, ***translation in absolute and relative scale*** (in the range of $\mathbf{y}$ values including whole sample) was calculated as a difference of original and affine-relaxed surface centres.

Tabuľka: ***Affine outliers*****—angles of rotation about particular axes** (clockwise, in degrees)—ψ about $x^{(1)}$-axis, θ about $x^{(2)}$-axis, ϕ about y-axis; ***translation of surface centers*** in absolute (t.abs) and relative (t.relat; in % of the range of $\mathbf{y}$ of the whole sample) scale

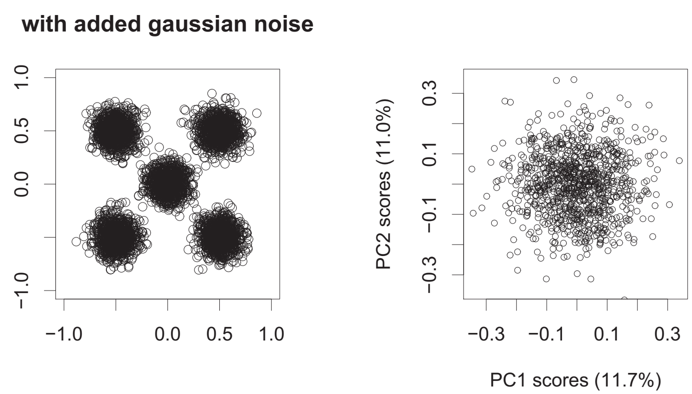
outliers	ψ	θ	ϕ	t.abs	t.relat
Nr. 5	-0.65	0.15	-0.07	1.00	13%
Nr. 12	-12.22	-3.24	4.72	-1.37	-17%
Nr. 14	2.00	1.26	-1.38	1.81	23%

GMM
Simulations—quint examples

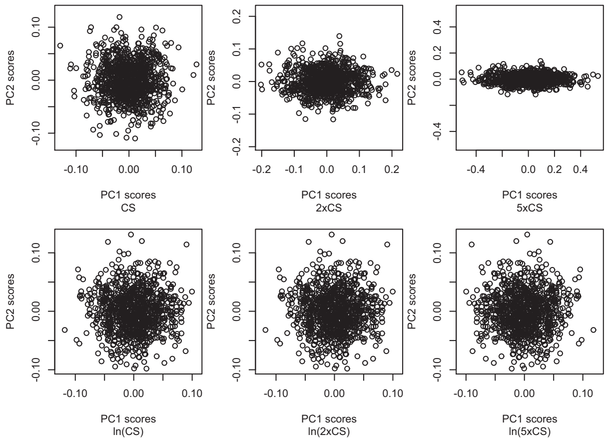


Obrázok: 250 quints generated from a normally distributed sequence of 1000 random numbers—$\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4)$, $\mathbf{X}_i \sim N_8\left(\mu_{\mathbf{X}}, \sigma^2 \mathbf{I}_{8\times 8}\right)$, $\mu_1 = (-1, 0)$, $\mu_2 = (0, 1)$, $\mu_3 = (1, 0)$, $\mu_4 = (0, -1)$, and $\mu_5 = (0, 0)$, $\sigma^2 = 0.001$ (left); 9 quints with different random noise (middle, right)

GMM
Simulations—quint examples

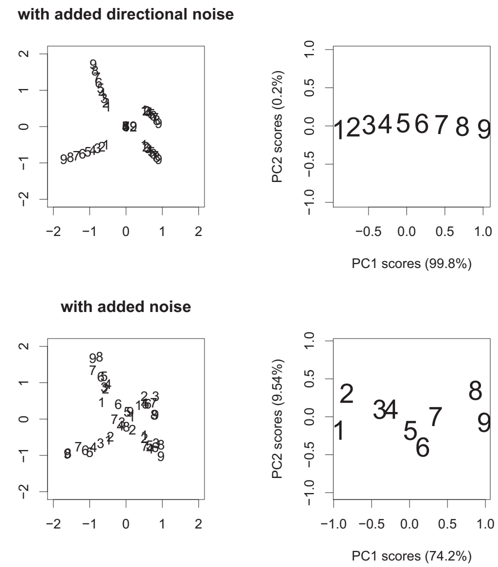


GMM
Simulations—quint examples

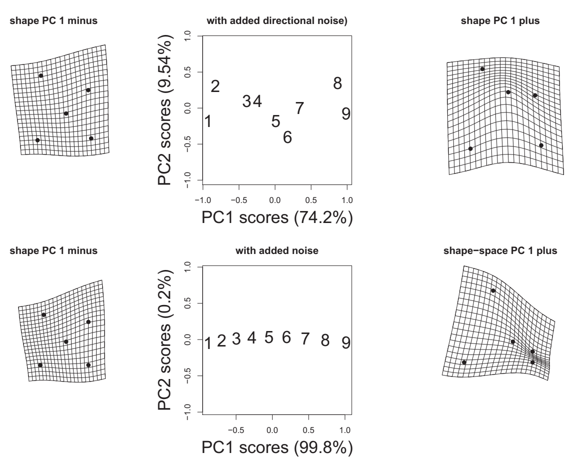


Obrázok: Procrustes form space with $k \times CS$ (first row) and $\ln(k \times CS)$ (second row), $k = 1, 2, 5$

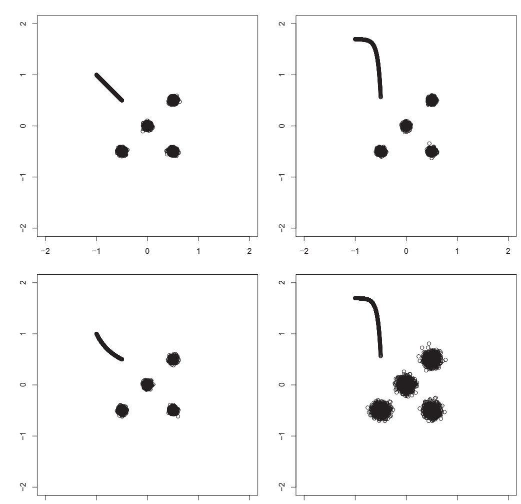
GMM
Simulations—quint examples



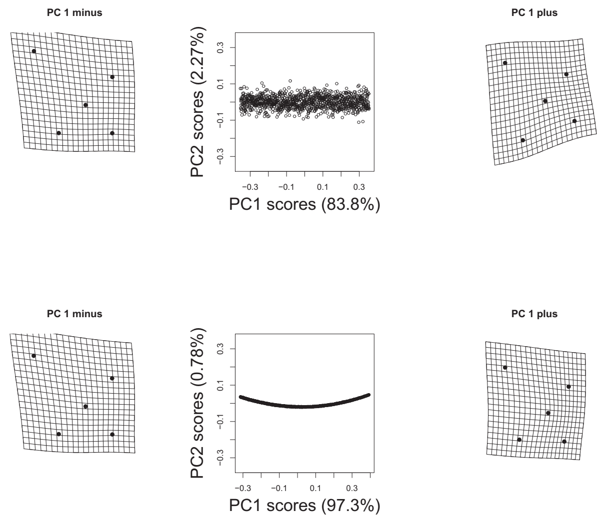
GMM
Simulations—quint examples



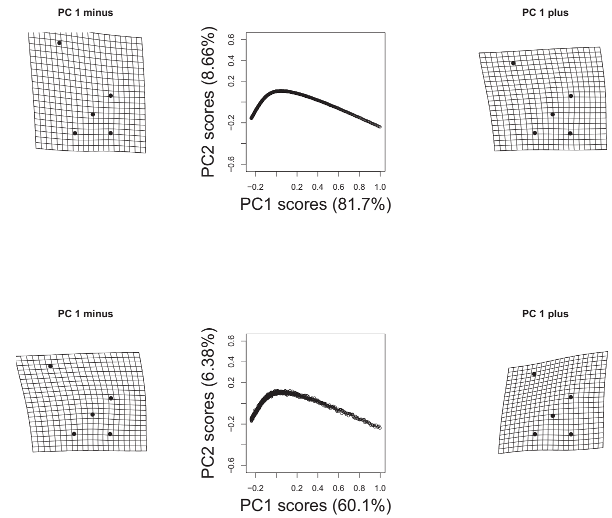
GMM
Simulations—quint examples



GMM
Simulations—quint examples



GMM
Simulations— quint example



GMM
Key knowledge

1. **form**—information about object geometry that remains after translation and rotation effects are removed
2. **shape**—information about object geometry that remains after translation, rotation, and size effects are removed
3. **object geometry**—2D/3D Cartesian coordinates in $k \times d$ configuration matrix $\mathbf{X}$
4. **shape components**—***affine*** (uniform) $\mathbf{X}_A$, ***non-affine*** (nonuniform) $\mathbf{X}_{NA}$ [***local benging*** and ***global bending***]
5. **biological homology**—biologically correspondent parts of an organism but point locations with respect to deformation TPS model—**landmarks**
6. **geometrical homology**—with respect to some minimization criteria (***bending energy of TPS model***) between source and target configuration— **semilandmarks on curves and surfaces**
7. **vectorization**—Vectorized $\mathbf{X} = (\mathbf{x}^{(1)} \vdots \mathbf{x}^{(2)} \vdots \ldots \vdots \mathbf{x}^{(d)})$ is defined as $Vec(\mathbf{X}) = \mathbf{x} = (\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(d)})$, then $\mathbf{X}_S$ is $n \times dk$ matrix of **vectorized Procrustes shape coordinates** $Vec(\mathbf{X}_{P,i}) = \mathbf{x}_{P,i}$ as its rows and its covariance matrix is written as $\mathbf{S}$

Geometric Morphometrics
Generalized Procrustes Analysis—Procrustes k-point registration

Definition (Generalized Procrustes Analysis, GPA)

Procrustes form coordinates $\mathbf{x}_{f,ij} = \boldsymbol{\Gamma}_i(\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{t}_i)$, where $\boldsymbol{\Gamma}_i$ is *rotation matrix* and $\mathbf{t}_i$ is *translation*, $\mathbf{x}_{f,ij}$ are rows of $\mathbf{X}_{f,i}$, $i = 1, \ldots n$. Then we say that $\mathbf{X}_i, i = 1, 2, \ldots n$ are in *optimal position* or have ***the best Procrustes fit*** in the sense of 'form' if

$$\arg\inf \sum_{1 \le i \le j \le n} \| \mathbf{X}_{f,i} - \mathbf{X}_{f,j} \|^2 =$$

$$\underbrace{\arg\inf}_{\substack{\boldsymbol{\Gamma}_1, \ldots \boldsymbol{\Gamma}_n \in SO(2) \\ \mathbf{t}_1, \ldots \mathbf{t}_n \in \mathbb{R}^d}} \left\{ \sum_{1 \le i \le j \le n} \left\| \boldsymbol{\Gamma}_i \left(\mathbf{X}_i - \mathbf{1}_k \mathbf{t}_i^T \right)^T - \boldsymbol{\Gamma}_j \left(\mathbf{X}_j - \mathbf{1}_k \mathbf{t}_j^T \right)^T \right\|^2 \right\}$$

Geometric Morphometrics

Generalized Procrustes Analysis—Procrustes k-point registration

Definition (Generalized Procrustes Analysis, GPA)

Procrustes shape coordinates $\mathbf{x}_{P,ij} = c_i \mathbf{\Gamma}_i (\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{t}_i)$, where c_i is *scale*, $\mathbf{\Gamma}_i$ is *rotation matrix* and $\mathbf{t}_i$ is *translation*, $\mathbf{x}_{P,ij}$ are rows of $\mathbf{X}_{P,i}$, $i = 1, ..., n$. Then we say that $\mathbf{X}_i, i = 1, 2, ..., n$ are in *optimal position* or have ***the best Procrustes fit*** in the sense of 'shape' if

$$\arg\inf \sum_{1 \leq i < j \leq n} \| \mathbf{X}_{P,i} - \mathbf{X}_{P,j} \|^2 =$$

$$\underbrace{\arg\inf}_{\substack{\mathbf{\Gamma}_1, \ldots \mathbf{\Gamma}_n \in SO(2) \\ \mathbf{t}_1, \ldots \mathbf{t}_n \in \mathbb{R}^d, c_1, c_2, \ldots c_n \in \mathbb{R}^+}} \left\{ \sum_{1 \leq i < j \leq n} \left\| c_i \mathbf{\Gamma}_i \left(\mathbf{X}_i - \mathbf{1}_k \mathbf{t}_i^T \right)^T - c_j \mathbf{\Gamma}_j \left(\mathbf{X}_j - \mathbf{1}_k \mathbf{t}_j^T \right)^T \right\|^2 \right\}$$

Interpolation TPS Model

Definition (Thin-Plate Spline (TPS))

Consider a **TPS** given by $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \ldots f_d(\mathbf{x}))$, where
$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{c} + \mathbf{A}^T\mathbf{x} + \mathbf{W}^T\mathbf{s}(\mathbf{x})$, $f_m(\mathbf{x}) = c_m + \mathbf{a}_m^T\mathbf{x} + \sum_{j=1}^{k} w_{jm}\phi_j(\mathbf{x})$, where
$m = 1, 2, ...d$, $\mathbf{c} = (c_1, c_2, ...c_d)^T$, $\mathbf{A} = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, ...\mathbf{a}_d)$,
$\mathbf{w}_m = (w_{1m}, w_{2m}, \ldots w_{km})^T$, $\mathbf{W} = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, ...\mathbf{w}_d)$,
$\mathbf{s}(\mathbf{x})_{k \times 1} = [\phi_1(\mathbf{x}), \ldots \phi_k(\mathbf{x})]^T$, continuous **radial (nodal) basis function**

$$\phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} \|\mathbf{x}\|_2^2 \log\left(\|\mathbf{x}\|_2^2\right), \forall \|\mathbf{x}\|_2 > 0 & \text{if } d = 2 \\ 0, \forall \|\mathbf{x}\|_2 = 0 & \text{if } d = 2 \\ \|\mathbf{x}\|_2, & \text{if } d = 3 \end{cases}$$

TPS interpolation to the data $(\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_j)$ is defined as

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{1}_k & \mathbf{X} \\ \mathbf{1}_k^T & 0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{X}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{W} \\ \mathbf{c}^T \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}, \mathbf{L} = \begin{pmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{1}_k & \mathbf{X} \\ \mathbf{1}_k^T & 0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{X}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix},$$

where $\mathbf{Y}_{k \times d} = (\mathbf{y}_1, \ldots \mathbf{y}_k)^T$ and $\mathbf{X}_{k \times d} = (\mathbf{x}_1, \ldots \mathbf{x}_k)^T$,
$(\mathbf{S})_{ij} = \phi_j(\mathbf{x}_i) = \phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$, $i, j = 1, 2, ...k$.

Interpolation TPS model

Definition (Thin-Plate Spline (TPS), cont.)

Inverse of $\mathbf{L}$ is equal to

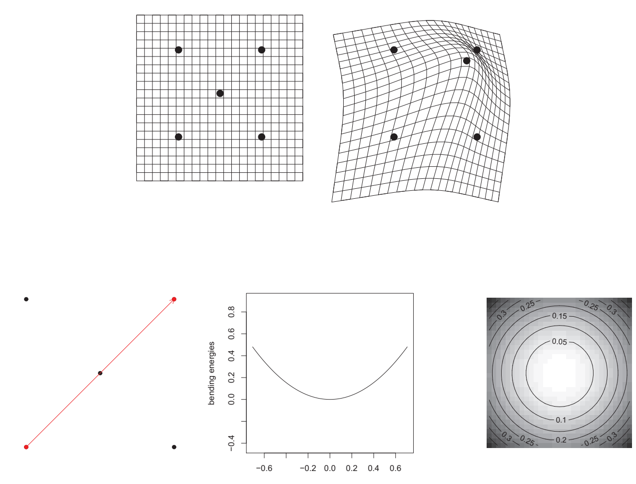
$$\mathbf{L}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{L}_{k \times k}^{11} & \mathbf{L}_{k \times 3}^{12} \\ \mathbf{L}_{3 \times k}^{21} & \mathbf{L}_{3 \times 3}^{22} \end{pmatrix},$$

where

1. **bending energy matrix** equals to $\mathbf{B}_e = \mathbf{L}_{k \times k}^{11}$
2. **bending energy** or **penalty** equals to
$J(\mathbf{f}) = \sum_{m=1}^{d} \int \int_{\mathbb{R}^d} \left[\sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 f_m}{\partial x^{(i)} \partial x^{(j)}} \right)^2 \right] dx^{(1)} dx^{(2)} ... dx^{(d)}$,
with TPS model solution as
$J(\mathbf{f}) = tr\left(\mathbf{W}^T\mathbf{S}\mathbf{W}\right) = tr(\mathbf{Y}^T\mathbf{B}_e\mathbf{Y})$

Geometric Morphometrics

Bending Energy



Obrázok: **TPS deformation grid**, **bending**, and **bending energy** $J(\mathbf{f})$

Definition (Affine and non-affine coordinates)

Regressing each $k \times d$ matrix $\mathbf{X}_{P,i}$ ($d = 2, 3$) onto the $\overline{\mathbf{X}}_P$ can be defined by the *MMLRM* (***Multivariate Multiple Linear Regression Model***)

$$\mathbf{X}_{P,i} = \overline{\mathbf{X}}_P \beta_i + \epsilon_i; \widehat{\beta}_i = \left(\overline{\mathbf{X}}_P^T \overline{\mathbf{X}}_P\right)^{-1} \overline{\mathbf{X}}_P^T \mathbf{X}_{P,i}, i = 1, 2, ...n.$$

Let $\widehat{\beta}_i = \left(\widehat{\beta}_{i1} \vdots \widehat{\beta}_{i2}\right)$ for 2D and $\widehat{\beta}_i = \left(\widehat{\beta}_{i1} \vdots \widehat{\beta}_{i2} \vdots \widehat{\beta}_{i3}\right)$ for 3D, then

1. **affine Procrustes coordinates**: $\mathbf{X}_{A,i} = \mathbf{X}_{P,i} \widehat{\beta}_i$
2. **non-affine Procrustes coordinates** (residuals of *MMLRM*): $\mathbf{X}_{NA,i} = \overline{\mathbf{X}}_P + (\mathbf{X}_{P,i} - \mathbf{X}_{A,i})$

Definition (Relative Warp Analysis (RWA))

If bending energy matrix $\mathbf{B}_e$ is calculated for the mean shape $\overline{\mathbf{X}}_P$, then $dk \times dk$ matrix $\mathbf{B} = \mathbf{I}_{d \times d} \otimes \mathbf{B}_e$. Let ***Generalized covariance matrix with respect to bending energy*** is equal to

$$\mathbf{S}_B^{(\alpha)} = \left(\mathbf{B}^-\right)^{\alpha/2} \mathbf{S} \left(\mathbf{B}^-\right)^{\alpha/2},$$

where $\left(\mathbf{B}^-\right)^{\alpha/2} = \sum_j \widehat{\lambda}_j^{-\alpha/2} \widehat{\gamma}_j^T \widehat{\gamma}_j$ is *Moore-Penrose generalized inverse* of $\mathbf{B}^{\alpha/2}$.The non-zero eigenvalues of $\mathbf{S}_B^{(\alpha)}$ calculated by SVD are $\widehat{l}_j$ and corresponding eigenvectors $\widehat{\mathbf{g}}_j$ (***relative warps, RW***). Then ***RW scores***

$$r_{ij} = \widehat{\mathbf{g}}_j^T \left(\mathbf{B}^-\right)^{\alpha/2} Vec\left(\mathbf{X}_{S,i}\right), i = 1, 2, ...n; j = 1, 2, ...J_d,$$

where J_d is the number of non-zero eigenvalues ($d = 2, 3$).

Definition (Relative Warp Analysis (RWA), cont.)

The effect of the jth *RW* can be viewed by plotting

$$Vec\left(\mathbf{X}_P(c, j, \alpha)\right) = Vec(\overline{\mathbf{X}}_P) \pm c_j \mathbf{B}^{\alpha/2} \widehat{\mathbf{g}}_j \widehat{l}_j^{1/2}, r_j = c_j \widehat{l}_j^{1/2}$$

for various values of $r_j \in \langle 0, \max(|r_{ij}|)\rangle$ (or reasonable magnification of $\max(|r_{ij}|)$; alternativelly, either $c_j \sim N(0, 1)$ or fixing $c_j = 1$, magnification of $\widehat{l}_j^{1/2}$, standard deviation of RW$_j$ scores), where $\mathbf{B}_e^{\alpha/2} = \sum_j \widehat{\lambda}_j^{\alpha/2} \widehat{\gamma}_j \widehat{\gamma}_j^T$. To emphasize

1. *large scale variability (global bending)*, $\alpha = 1$,
2. *small scale variability (local bending)*, $\alpha = -1$,
3. $\alpha = 0$, then we take $\mathbf{B}^0 = \mathbf{I}$ as the $dk \times dk$ identity matrix and the procedure is equivalent to *PCA* of Procrustes shape coordinates

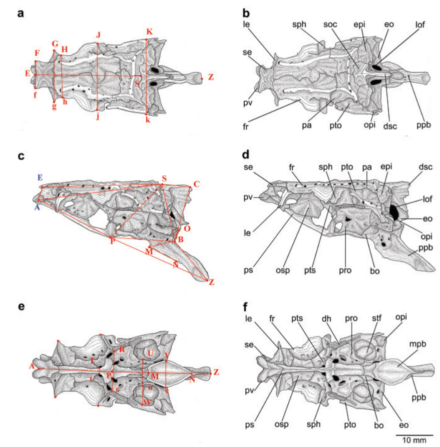
Definition (Relative Warp Analysis (RWA), cont.)

1. ***Affine contribution*** to the variability by performing affine subspace *PCA* on the covariance matrix $\mathbf{S}_A$ of $n \times dk$ matrix $\mathbf{X}_A$ with the rows $Vec\left(\mathbf{X}_{A,i}\right)$, $i = 1, 2, ...n$ (which is equivalent to the *RWA* with $\alpha = 0$)
2. ***Non-affine contribution*** to the variability by performing non-affine subspace *PCA* on the covariance matrix $\mathbf{S}_{NA}$ of $n \times dk$ matrix $\mathbf{X}_{NA}$ with the rows $Vec\left(\mathbf{X}_{NA,i}\right)$, $i = 1, 2, ...n$
3. ***Contribution of (a)symmetry*** by augmenting relabeled and reflected Procrustes configurations to vectorized matrix of Procrustes shape coordinates and performing SVD of $\mathbf{S}_{AS}$
4. ***Size contribution*** by augmenting vectorized matrix of Procrustes shape coordinates by column of **centroid sizes** $\mathbf{x}_{size} = (\ln(CS_1), ..., \ln(CS_n))^T$, where $CS_i = \sqrt{(\sum_{j=1}^k \|\mathbf{x}_{ij} - \overline{\mathbf{x}}_i\|_2^2)} = \|\mathbf{X}_i\| = tr(\mathbf{X}_i \mathbf{X}_i^T)$, then $n \times (dk + 1)$ matrix of **vectorized form coordinates** $\mathbf{X}_F = (\mathbf{X}_S \vdots \mathbf{x}_{size})$, and finally performing SVD of $\mathbf{S}_F$

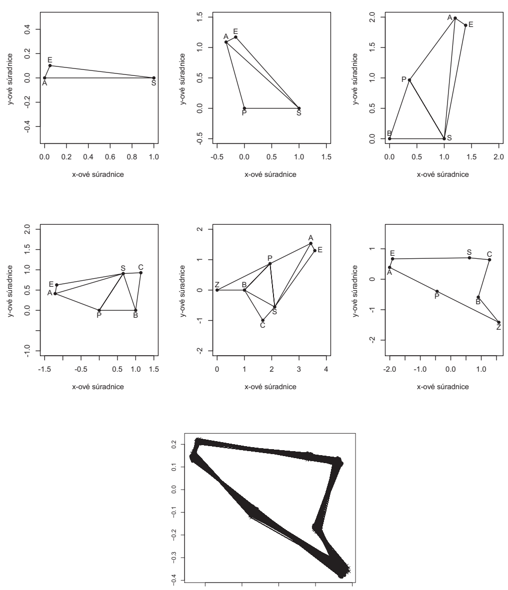
GM vs KM
GM neurokránia rýb z rodu *belica*

- neurocrania–**roaches** *Rutilus rutilus* and *Rutilus virgo* (*Actinopterygii: Cyprinidae*)
- *R. rutilus* ($n_{rr} = 30$) and *R. pigus* neurocrania ($n_{rp} = 50$), 27 measurements

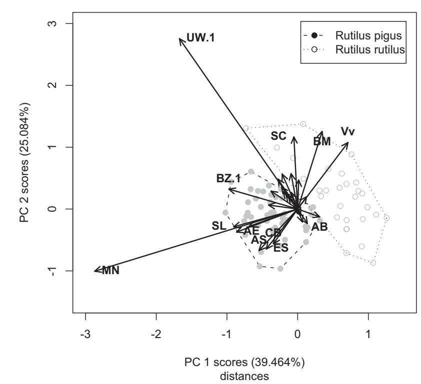
GM vs KM
GM neurokránia rýb z rodu *belica*



GM vs KM
GM neurokránia rýb z rodu *belica*



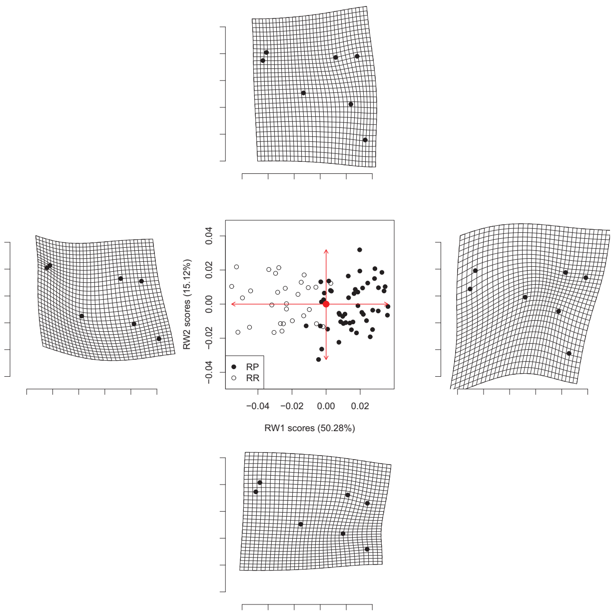
Traditional vs Geometric Morphometrics
Fish Neurocrania—*Rutilus rutilus* and *R.pigus* (Cyprinidae)



Obrázok: PCA of inter-landmark distances

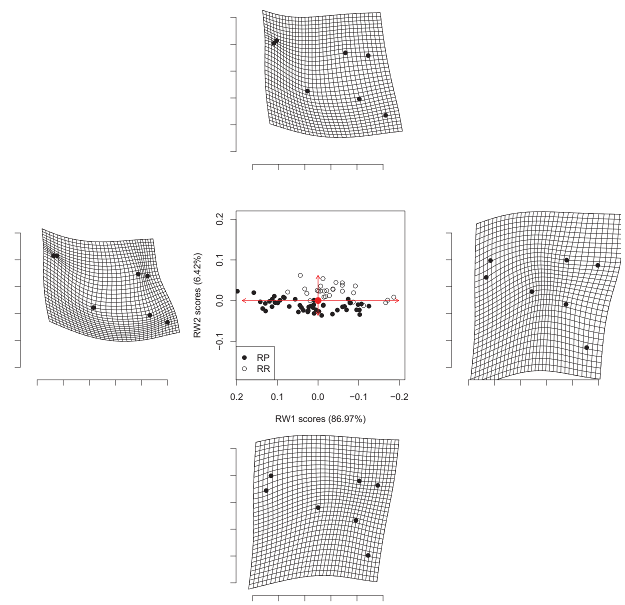
Traditional vs Geometric Morphometrics

Fish Neurocrania—*Rutilus rutilus* and *R.pigus* (Cyprinidae)—Shape Space PCA



Traditional vs Geometric Morphometrics

Fish Neurocrania—*Rutilus rutilus* and *R.pigus* (Cyprinidae)—Form Space PCA



Relative Warp Analysis

Generalized PCA—Generelazed PCA for paired data

Definition (RWA for paired data)

1. Let $\mathbf{x}_{P,i} = Vec\left(\mathbf{X}_{P,i}\right), i = 1, 2, ..., n; n = 48$ be a $2k$-vector of ***Procrustes shape coordinates***, where $\mathbf{X}_{P,i} = (\mathbf{x}_{P,i}^{(1)} \vdots \mathbf{x}_{P,i}^{(2)})$, $\mathbf{x}_{P,i}^{(d)} = \left(x_{i1}^{(d)}, x_{i2}^{(d)}, ..., x_{ik}^{(d)}\right), d = 1, 2$
2. Let $\mathbf{x}_{D,i}$ be $2k$-vectors $(k = 22)$ of ***matched-pair differences of vectorized Procrustes shape coordinates***, $\mathbf{x}_{D,i} = \mathbf{x}_{P,15,i} - \mathbf{x}_{P,10,i}$, $\mathbf{x}_{P,15,i} = Vec(\mathbf{X}_{P,15,i})$ and $\mathbf{x}_{P,10,i} = Vec(\mathbf{X}_{P,10,i})$
3. $\mathbf{S}_D$ be the ***covariance matrix*** of the data $\mathbf{x}_{D,i}$,
4. $\overline{\mathbf{X}}_{P,10} = (\overline{\mathbf{x}}_{P,10}^{(1)} \vdots \overline{\mathbf{x}}_{P,10}^{(2)}) = (\overline{\mathbf{x}}_1, ..., \overline{\mathbf{x}}_k)^T$ be $k \times 2$ matrix of mean Procrustes shape coordinates $\overline{\mathbf{x}}_j$ of 10-year group, $j = 1, 2, ..., k$, then
5. $$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{1}_k & \overline{\mathbf{X}}_{P,10} \\ \mathbf{1}_k^T & 0 & \mathbf{0} \\ \overline{\mathbf{X}}_{P,10}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \mathbf{L}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{L}_{k\times k}^{11} & \mathbf{L}_{k\times 3}^{12} \\ \mathbf{L}_{3\times k}^{21} & \mathbf{L}_{3\times 3}^{22} \end{pmatrix},$$

Relative Warp Analysis

Generalized PCA—Generelazed PCA for paired data

Definition (RWA for paired data, cont.)

- where $\mathbf{L}$ is symmetric positive definite,
- the inverse of $\mathbf{S}$ exists as long as the landmarks are at least four in number, not all on one straight line, and also not in the same place (coincident); then inverse of $\mathbf{L}$ exists and is equal to $\mathbf{L}^{-1}$
- $\mathbf{S}_{js} = \phi\left(\overline{\mathbf{x}}_j - \overline{\mathbf{x}}_s\right); j, s = 1, 2, ..., k$, $\phi\left(\mathbf{x}\right) = \|\mathbf{x}\|_2^2 \log\left(\|\mathbf{x}\|_2^2\right)$, $\forall \|\mathbf{x}\|_2 > 0$, if $\|\mathbf{x}\|_2 = 0$, $\phi\left(\mathbf{x}\right) = 0$
- $k \times k$ matrix $\mathbf{B}_e = \mathbf{L}^{11}$ is called *bending energy matrix* of $\overline{\mathbf{X}}_{P,10}$, $2k \times 2k$ matrix $\mathbf{B} = \mathbf{I}_{2\times 2} \otimes \mathbf{B}_e$, and $\mathbf{1}_k^T \mathbf{B}_e = \mathbf{0}$, $\mathbf{X}^T \mathbf{B}_e = \mathbf{0}$, so the rank of the bending energy matrix is $k - 3$
- then $\left(\mathbf{B}^-\right)^{\alpha/2} \mathbf{S}_D \left(\mathbf{B}^-\right)^{\alpha/2}$ is ***generalized covariance matrix of matched-pair differences of vectorized Procrustes shape coordinates***, $\mathbf{x}_{D,i}$
- non-zero ***eigenvalues*** are $\widehat{l}_j$ with corresponding ***eigenvectors*** $\widehat{\mathbf{g}}_j$ (***PC loadings***, RWs)

Definition (RWA for paired data, cont.)

- ***RW scores*** are defined as $r_{ij} = \widehat{\mathbf{g}}_j^T \left(\mathbf{B}^-\right)^{\alpha/2} \mathbf{x}_{D,i}$
- ***the effect of the jth RW*** can be viewed by plotting

$$Vec\left(\mathbf{X}_P\left(c_j, j, \alpha\right)\right) = Vec(\overline{\mathbf{X}}_{P,10}) \pm c_j \mathbf{B}^{\alpha/2}\widehat{\mathbf{g}}_j \widehat{l}_j^{1/2}, r_{ij} = c_j \widehat{l}_j^{1/2}, c_j \in \mathbb{R}^+$$

  for various values of $r_{ij} \in \langle 0, \max(|r_{ij}|)\rangle$ (or some magnification of $\max(|r_{ij}|)$; alternativelly, fixing $c_j = 1$, magnification of $\widehat{l}_j^{1/2}$ as standard deviation of PC_j scores)
- ***the effect of the linear combination of RW_1 and RW_2*** can be viewed by plotting

$$Vec\left(\mathbf{X}_P\left(c_1, c_2, \alpha\right)\right) = Vec(\overline{\mathbf{X}}_{P,10}) \pm c_1 \mathbf{B}^{\alpha/2}\widehat{\mathbf{g}}_1 \widehat{l}_1^{1/2} \pm c_2 \mathbf{B}^{\alpha/2}\widehat{\mathbf{g}}_2 \widehat{l}_2^{1/2}$$

- a ***PC summary*** of the shape data

$$Vec\left(\mathbf{X}_{P,15,i}\left(\alpha\right)\right) = Vec(\overline{\mathbf{X}}_{P,10}) \pm \mathbf{B}_e^{\alpha/2} \sum_{j=1}^{2} r_{ij}\widehat{\mathbf{g}}_j = Vec(\overline{\mathbf{X}}_{P,10}) + \sum_{j=1}^{2} \widehat{\mathbf{g}}_j \widehat{\mathbf{g}}_j^T \mathbf{x}_{D,i}$$

Definition (RWA for paired data, cont.)

- to find the ***affine component*** we use ***linear regression model***

$$\overline{\mathbf{x}}_{P,10}^{(d)} + \mathbf{x}_{D,i}^{(d)} = \overline{\mathbf{x}}_{P,10}^{(d)}\beta_i^{(d)} + \epsilon_i^{(d)}, d = 1, 2; i = 1, 2, ..., n,$$

- then $\mathbf{x}_{A,i}^{(d)} = \overline{\mathbf{x}}_{P,10}^{(d)}\widehat{\beta}_i^{(d)}$ and $\mathbf{X}_{A,i} = (\mathbf{x}_{A,i}^{(1)} \vdots \mathbf{x}_{A,i}^{(2)})$ is the affine component of $\mathbf{X}_{P,i}$
- in ***affine subspace***, $\mathbf{S}_{DA}$ stands for sample covariance matrix of $\mathbf{x}_{DA,i} = Vec(\mathbf{X}_{A,i}) - Vec(\overline{\mathbf{X}}_{P,10})$; then PCA of $\mathbf{S}_{DA}$ is called ***affine-subspace PCA***
- let $\mathbf{X}_{DF} = (\mathbf{X}_D \vdots \mathbf{x}_{size})$, be an $n \times (2k+1)$ matrix with the rows equal to $\mathbf{x}_{DF,i} = \left(\mathbf{x}_{D,i}^T, \ln(CS_i)\right)^T, i = 1, 2, ..., n$, and $\mathbf{x}_{size}^T = (\ln(CS_1), ..., \ln(CS_n))$. Let $\mathbf{S}_{DF}$ be the covariance matrix of the data $\mathbf{x}_{DF,i}$; then PCA of $\mathbf{S}_{DF}$ is called ***form-space PCA***
- the first PC represents ***allometry***—shape change during growth

Definition (RWA for paired data, cont.)

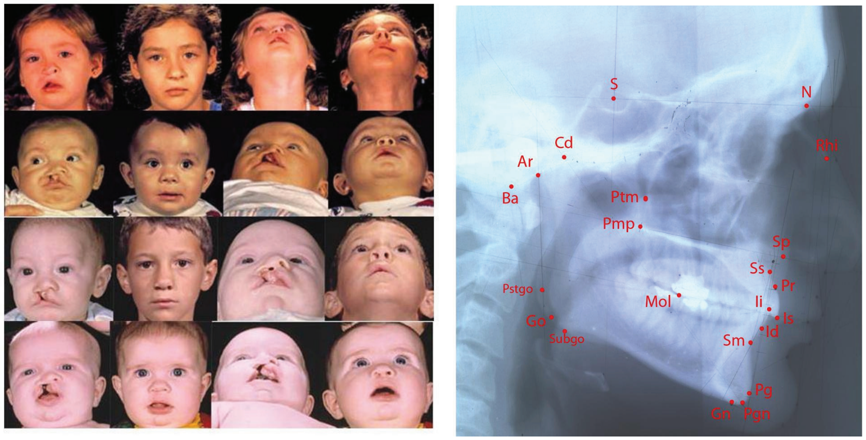
Visualization of interpolated shape changes can be done

- via ***thin-plate spline (TPS) deformation grids***,
- ***field of vectors*** (within the convex hull of reference shape $\overline{\mathbf{X}}_{P,10}$, where longer vectors show stronger deformation in the specific direction of the shape change) ***superimposed with the grid of gray-scale rectangles with colors corresponding to the Procrustes distances*** (regions showing milder deformation are lighter, regions with stronger deformation are darker; the surface does not show the direction—but only the size—of some shape change)

- Velemínská J., **Katina, S.**, Šmahel, Z., Sedláčková, M., 2006: Analysis of facial skeleton shape in patients with complete unilateral cleft lip and palate: Geometric morphometrics. *Acta Chirurgiae Plasticae*, **48,1**: 26–32
- Velemínská J., Šmahel, Z., **Katina, S.**, 2006: Development prediction of sagittal intermaxillary relations in patients with complete unilateral cleft lip and palate during puberty. *Acta Chirurgiae Plasticae*, **49,2**: 41–46
- **Katina, S.**,2008: Detection of shape outliers with an application to complete unilateral cleft lip and palat in humans. In S. Barber, P.D. Baxter, A. Gusnanto & K.V.Mardia (eds), The Art & Science of Statistical Bioinformatics, pp. 33-37. Leeds, Leeds University Press
- **Katina, S.**,2011: Detection of shape outliers for matched-pair shape data. *Tatra Mountains Mathematical Publication* (accepted)
- 48 boys, complete unilateral cleft of lip and palate (UCLP), without symptoms of other associated malformations, Clinic of Plastic Surgery in Prague
- homogenously operated by the same team of surgeons (cheiloplasty according to Tennison, periosteoplasty without the nasal septum repositioning
- patients monitored during puberty, at the ages of 10 and 15 (born between 1972 and 1978)
- 22 landmarks (x-rays of the patients' heads, under standard conditions, SigmaScan Pro 5 software)

Geometric Morphometrics
2D lateral X-rays—growth after surgery (paired data)

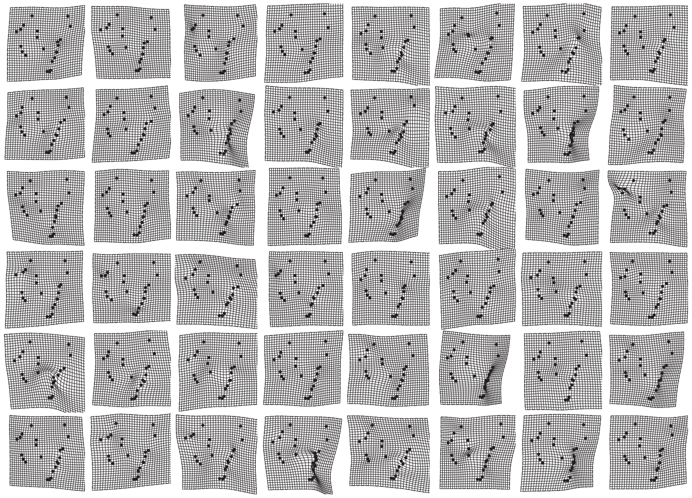
48 boys, 10 – 15yrs old, 22 landmarks



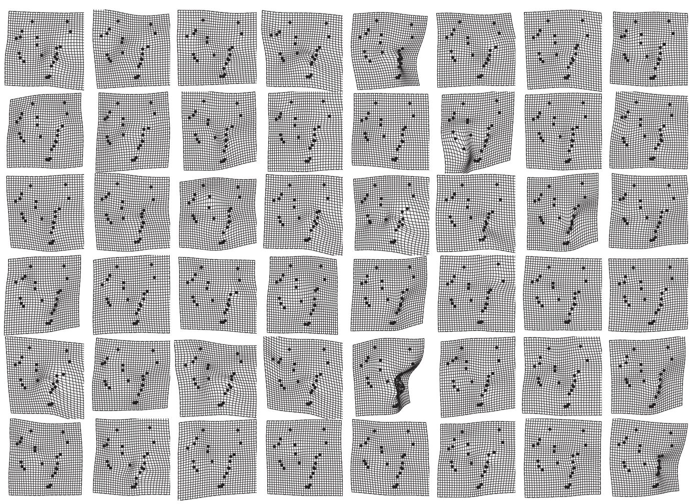
Obrázok: Cleft patients and Design of lateral X-ray (semi)landmarks

[Dpt. of Anthropology, Charles University, Prague, Czech Republic]

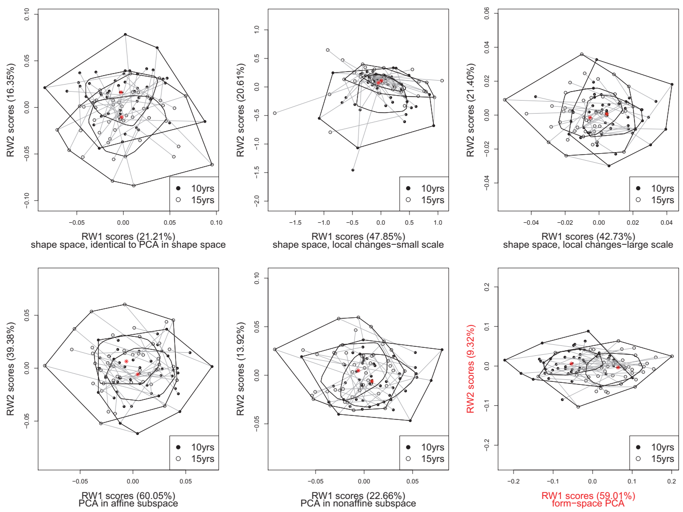
Data—10yrs old boys before operation
2D lateral X-rays—growth after surgery (paired data)



Data—15yrs old boys after operation
2D lateral X-rays—growth after surgery (paired data)

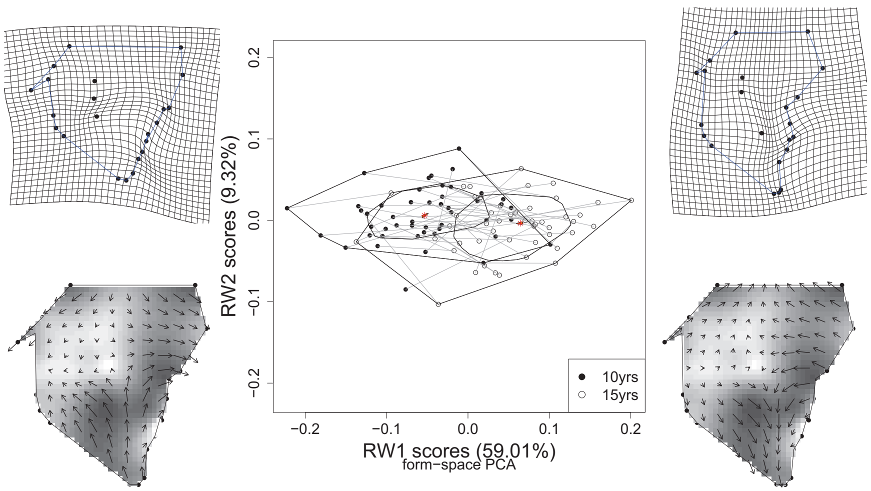


Geometric Morphometrics
2D lateral X-rays—searching biological signal in the data

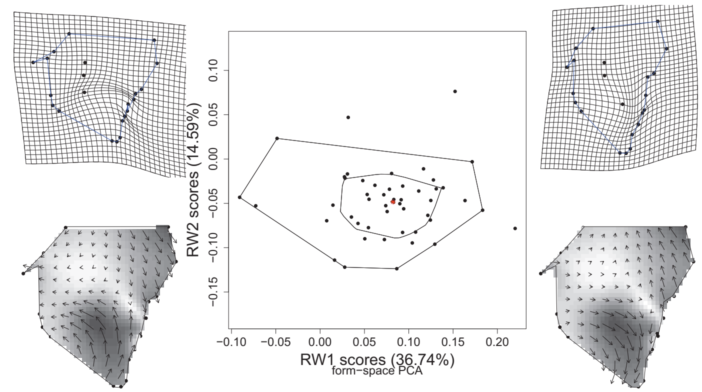


Obrázok: All PCA/RWA models—RW_1,RW_2 subspace

Results of RWA—form space

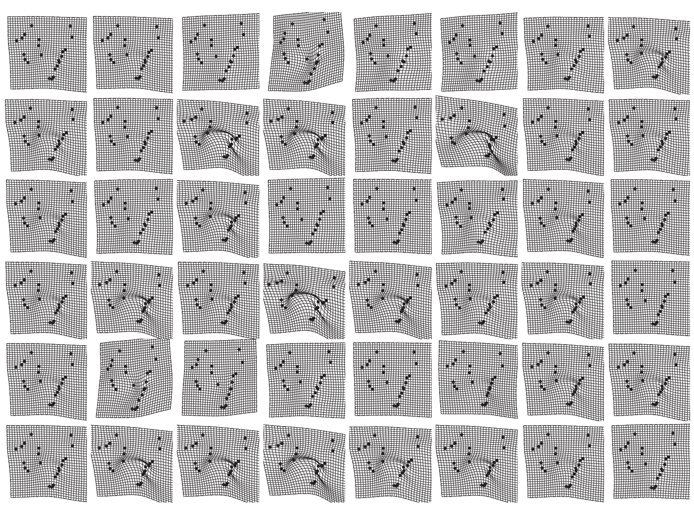


Results of RWA—form space

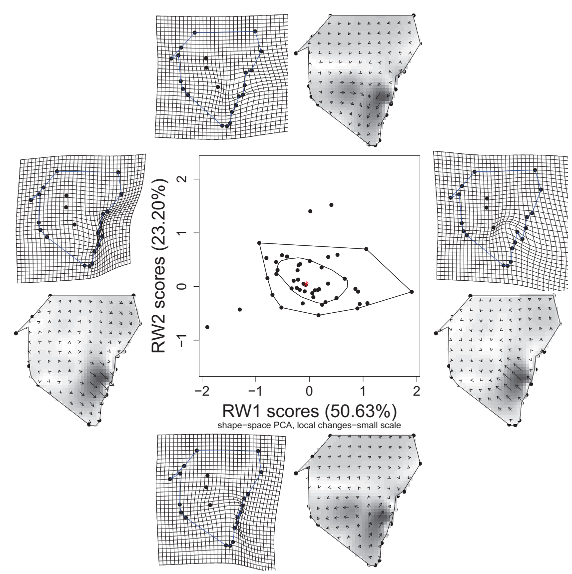


Obrázok: ***Form-space*** space PCA—RWA of $\mathbf{S}_F$ (RW_1,RW_2 subspace)

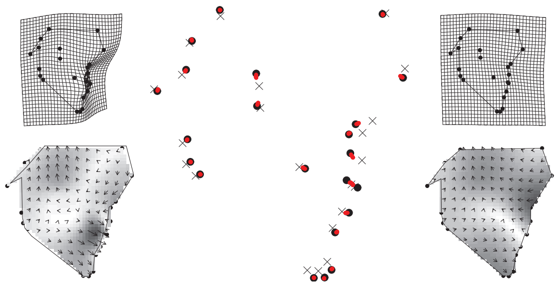
Results of RWA—form space



Results of RWA—bending patterns in small scale



Outlier relaxation using PRM3



Obrázok: *Relaxation in Procrustes shape coordinates*; *TPS deformation grids* and *field of vectors superimposed with the surface of Procrustes distances* of mean shape $\overline{\mathbf{X}}_{P,10}$ to the shape $\mathbf{X}_{P,10,29}$ (left) and to the final relaxed shape $\mathbf{X}_{P,10,29}$ (right); *'curve décolletage'* of the shape $\mathbf{X}_{P,10,29}$ ($\times$–mean shape $\overline{\mathbf{X}}_{P,10}$, big $\bullet$–shape $\mathbf{X}_{P,10,29}$, small $\bullet$–relaxed shapes $\mathbf{X}_{P,10,29}$; middle)

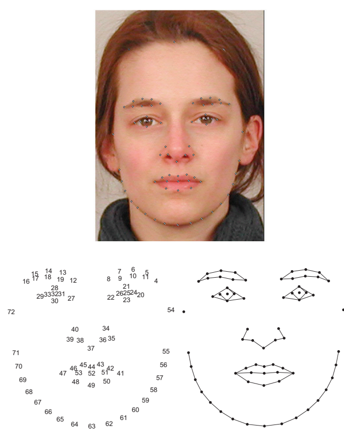
Data—human faces in 2D

- Oberzaucher, E., **Katina, S.**, Holzleitner, I.J., Schmehl, S.F., Mehu-Blantar, I., Grammer, K., 2011: The myth of hidden ovulation: Shape and texture changes in the face during the menstrual cycle. *PNAS* (submitted)
- Pflüger, L.S., Oberzaucher, E., **Katina, S.**, Holzleitner, I.J., Mehu-Blantar The Signal of Fertility. Evidence from a Rural Sample. *Evolution and Human Behaviour* (accepted)
- 20 young women (aged between 19 and 31) who reported to have a regular menstrual cycle and did not take any hormonal contraceptives
- standardized facial photographs–one taken in the **ovulatory** and one in the **luteal phase**
- in a **forced choice task**, 50 male and 50 female subjects were presented with these photographs of each participant–to pick out the **more attractive, healthy, sexy, and likeable**, of the two
- skin patches sized 150 $\times$ 150 pixels from the **cheek** and subjected them to the same forced choice task with slightly modified adjectives
- 46 **landmarks** and 26 **semilandmarks**

Data—human faces in 2D

2D Facial Analysis—two group differences

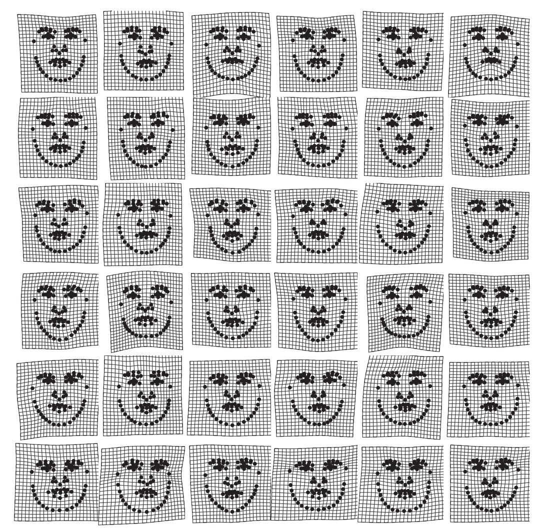
20 young women, $19-31$yrs old, $46+26$ (semi)landmarks

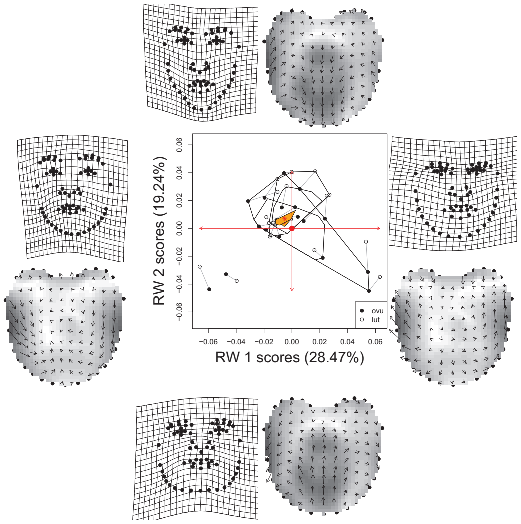


Obrázok: Design of facial (semi)landmarks

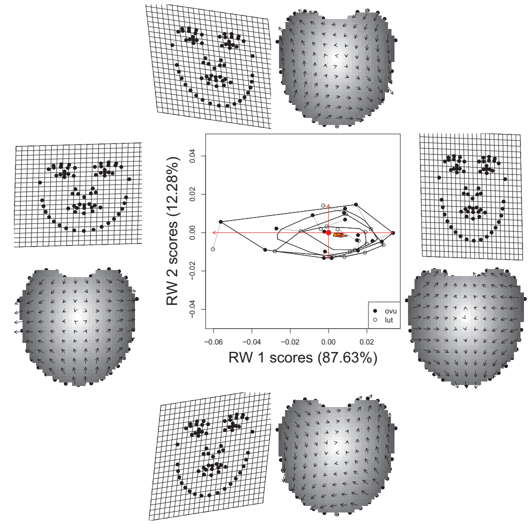
[Dpt. of Anthropology, University of Vienna, Vienna, Austria]

Data—human faces in 2D

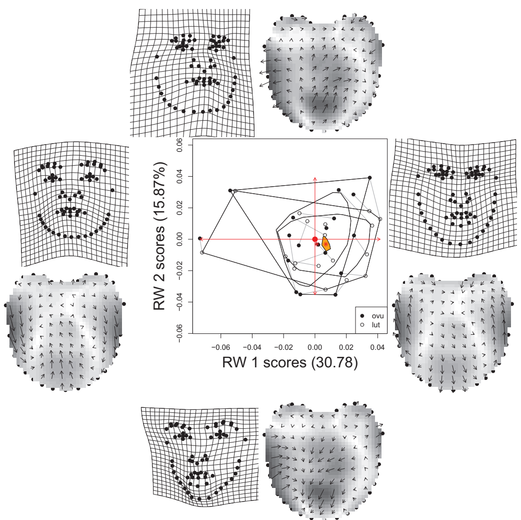




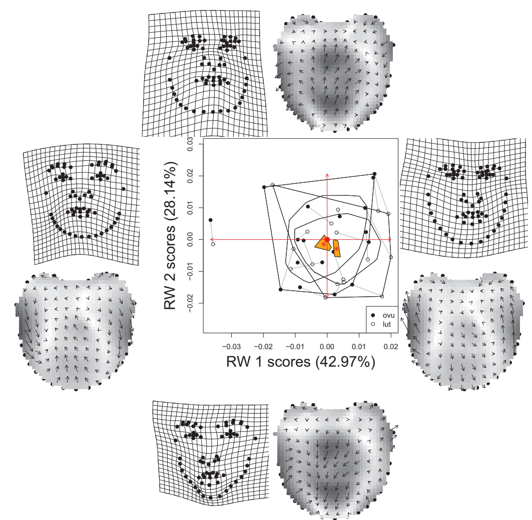
Obrázok: ***Shape*** space PCA—RWA of $\mathbf{S}$ (RW_1,RW_2 subspace)



Obrázok: ***Affine*** subspace PCA—RWA of $\mathbf{S}_A$ (RW_1,RW_2 subspace)



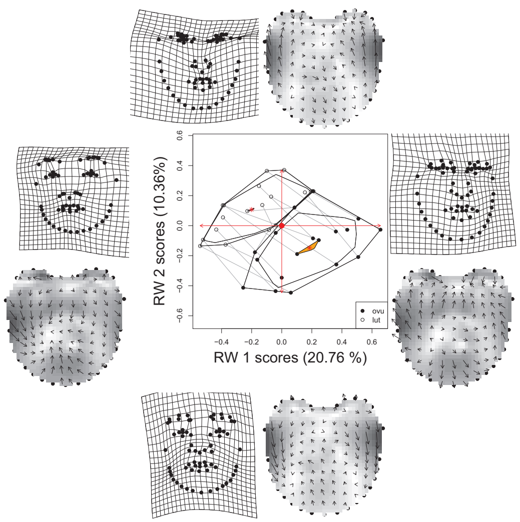
Obrázok: ***Nonaffine*** space PCA—RWA of $\mathbf{S}_{AN}$ (RW_1,RW_2 subspace)



Obrázok: ***Nonaffine*** space PCA—RWA of $\mathbf{S}_B^{(1)}$ (RW_1,RW_2 subspace)

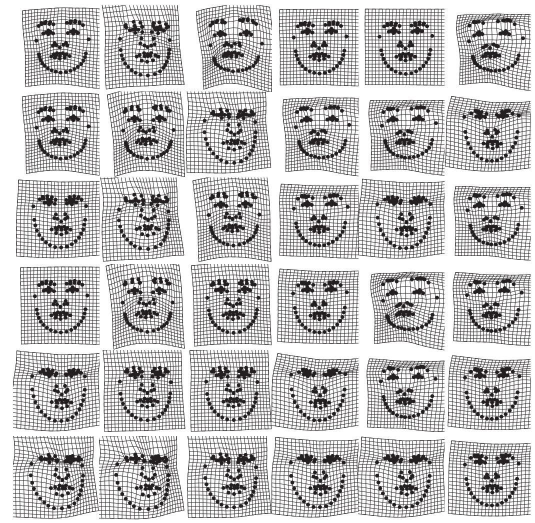
Geometric Morphometrics

2D Facial Analysis—searching biological signal in the data

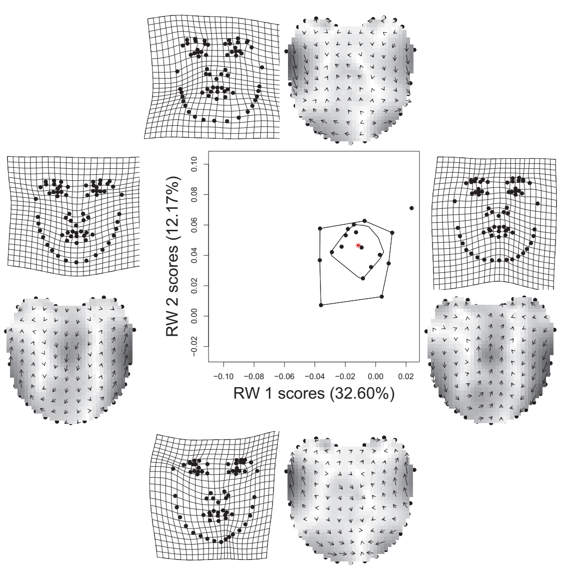


Obrázok: ***Nonaffine*** space PCA—RWA of $\mathbf{S}_B^{(-1)}$ (RW$_1$,RW$_2$ subspace)

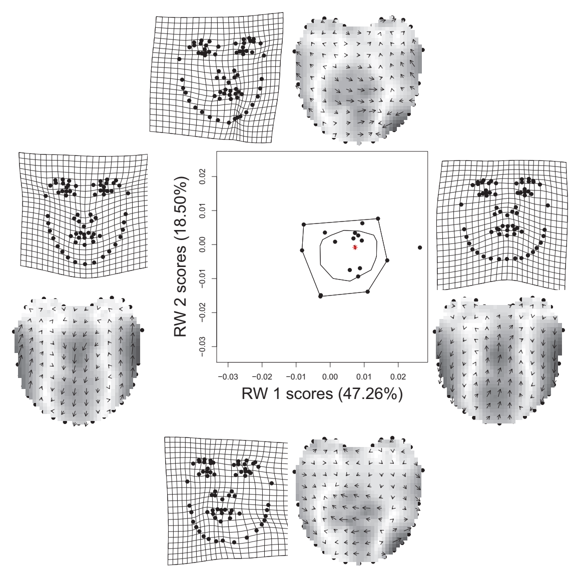
Results of RWA—estimated shapes, RW1 and RW2



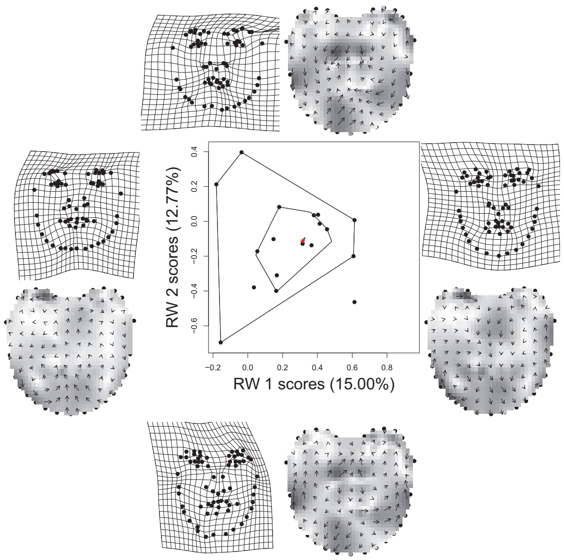
Results of RWA—shape space



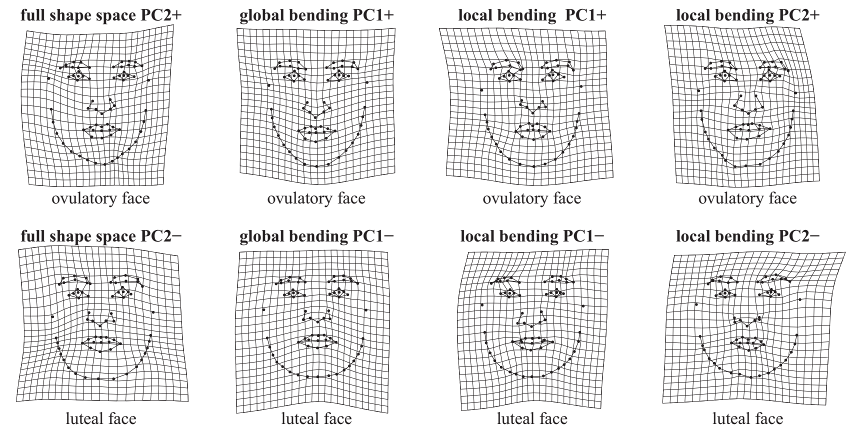
Results of RWA—bending patterns with large scale



Results of RWA—bending patterns with small scale



Geometric Morphometrics
2D Facial Analysis—searching biological signal in the data

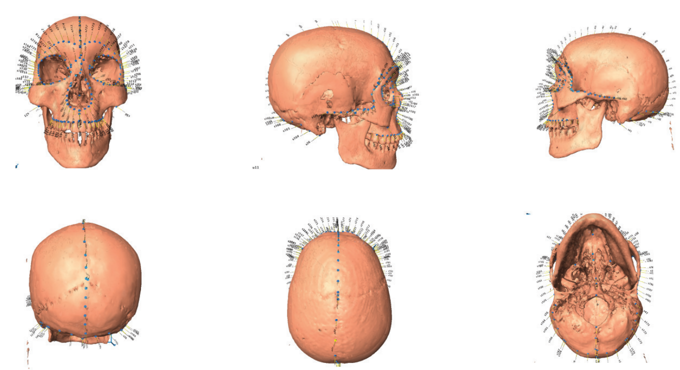


Obrázok: Summary of RWA/PCA analyses in all subspaces of ***paired shape differences*** [statistically significant RWs/PCs]

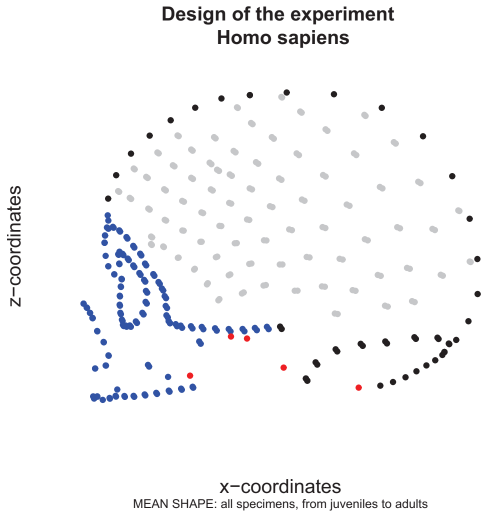
Data—human skulls
3D (semi)landmarks

- example re-uses *part of a Vienna data set of* 372 *skulls from various collections*
- 106 human crania (38 adult females, 54 males, 3 juvenile females, 11 juvenile males, 14 unknown sex; from newborns to adults)
- Dept. of Archaeological Biology and Anthropology, Natural History Museum, Vienna, Austria
- Dept. of Anthropology, University of Vienna, Vienna, Austria
- *Weisbach collection* - acquired and exhumed skeletons of soldiers of the Austro-Hungarian monarchy, sex and age of these crania are known from military records
- *Hallstatt collection* from ossuary in Hallstatt, sex and age are known from the church-books
- data – 347 landmarks and semilandmarks – 32 landmark points, 7 ridge curves totalling 161 semilandmarks and 154 surface semilandmarks [5 – base, 184 – face, 158 – neurocranium]
- landmark points on **both sides** of every cranium and semilandmarks (on curves and surface) **on the left side** of every cranium were digitalized using a MicroScribe 3*DX* (Mitteroecker et al, 2004, Gunz, 2005)
- **Katina, S.**, Bookstein, FL., Gunz, P., Schaefer, K., 2007: Was it worth digitizing all those curves? A worked example from craniofacial primatology. *American Journal of Physical Anthropology* Suppl. **44**: 140.

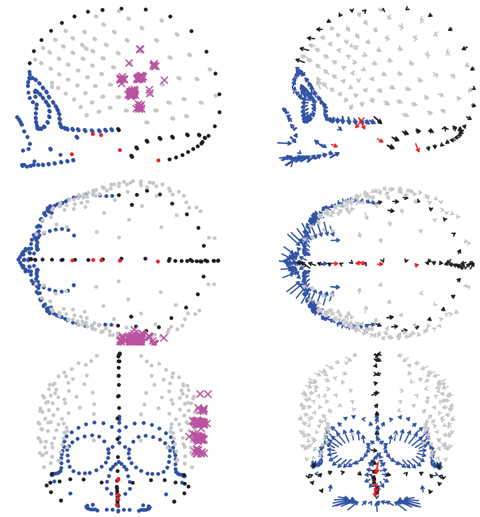
Data—human skulls
6 norms: norma frontalis, lateralis dex. a sin., occipitalis, verticalis, basilaris



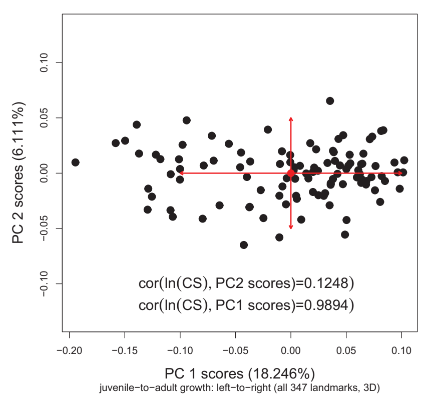
Data—human skulls
(Semi)landmarks of three skull regions



Data—human skulls
(Semi)landmarks of three skull regions and *euryon* variability

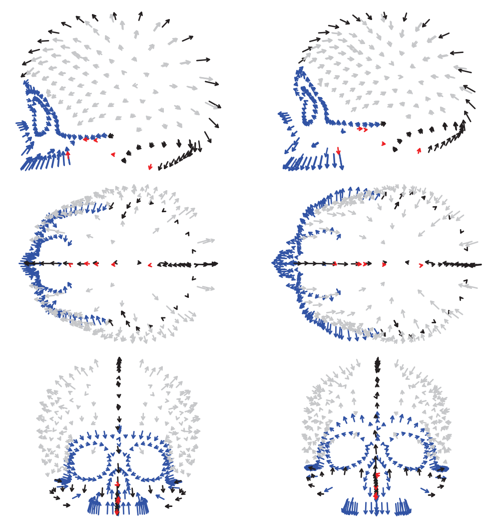


3D Form Space PCA



Obrázok: PC1 and PC2 scores

3D Form Space PCA

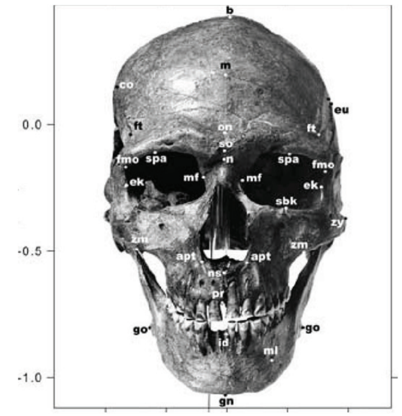


Obrázok: PC1 and PC2

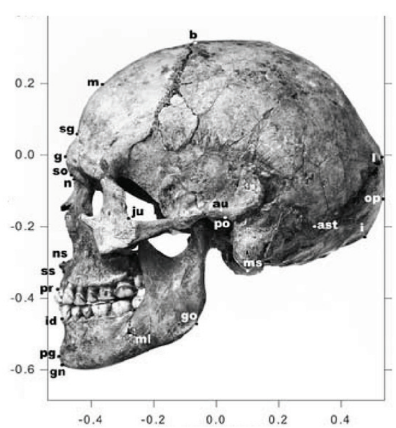
2D Skulls
Předmostí skulls

- **professionally digitised glass plate negatives of fossil skulls** (Předmostí 1 – P1, Předmostí 3 – P3, Předmostí 4 – P4, Předmostí 9 – P9, Předmostí 10 – P10)
- in the accessible norms: frontal, lateral sin., occipital, basal, and vertical views
- the skulls in question are those determined by Matiegka to have been females (P1, P4, P10) and males (P3, P9)
- 17 **landmarks in the right lateral view**
- the recent population collection — ***103 skulls of known sex (51 males and 52 females) and age from the first third of the 20th century***
- **Katina, S.**, Šefčáková, A., Velemínská, J., Bružek, J., Velemínský, P., 2004: A Geometric approach to cranial sexual dimorphism in the upper palaeolithic skulls from Předmostí (Upper Palaeolithic, Czech Republic). *Journal of the National Museum, Natural History Series* 173, 1–4:133–144
- Šefčáková, A., **Katina, S.**, 2008: Geometrical analysis of adult skulls from Předmostí, In: Veleminská, J, Bružek, J, (eds), Fossil hominids from Předmostí nr. Přerov : Old documentation and new reading. Academia, Praha, 87 – 101

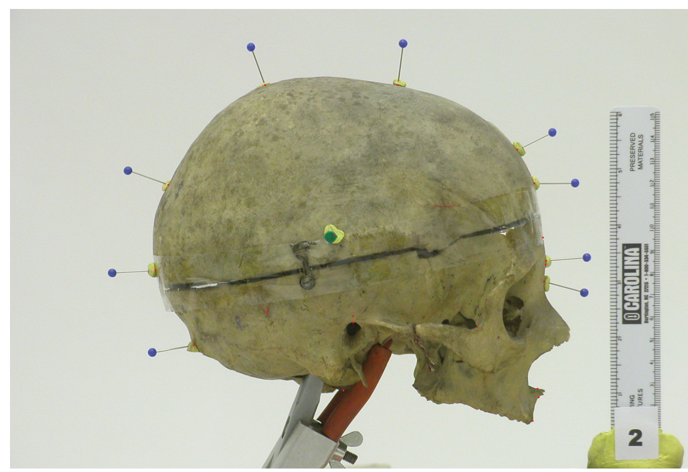
2D Skulls
Norma frontalis



Skulls
Norma lateralis



2D Skulls
Example of skull from Pachner reference sample



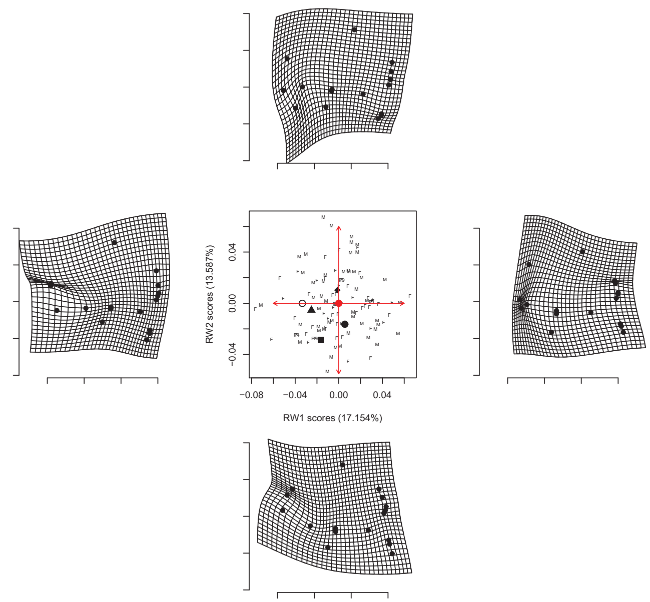
[Pachner collection at the Department of Anthropology and Human Genetics of Charles University in Prague (Czech Republic)]

2D Skulls
PCA Summary

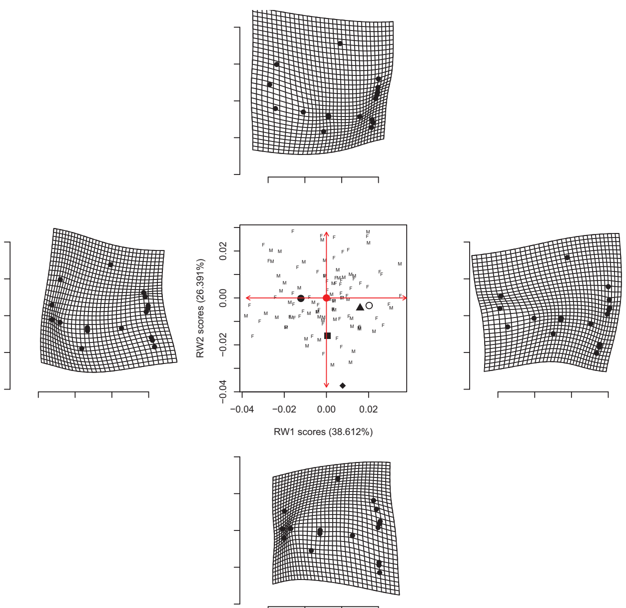
Legenda:
F–Pachner females (n=52), M–Pachner males (n=51),
Předmostí crania–P1 ○, P3 ■, P4 •, P9 ▲, P10 ♦

1. TPS deformation grids and *RW* scores (*RW*1 and *RW*2) – in ***shape space*** (identical to *PCA* in shape space)
2. TPS deformation grids and *RW* scores (*RW*1 and *RW*2) – in ***shape space for local changes with large scale*** ($\alpha = 1$)
3. TPS deformation grids and PC scores (PC1 and PC2) – in ***form space***
4. TPS deformation grids and PC scores (PC1 and PC2) – in ***form space with*** 95% ***tolerance ellipses for males and females***
5. TPS deformation grids and *RW* scores (*RW*1 and *RW*2) – in ***shape space for local changes with small scale*** ($\alpha = -1$)

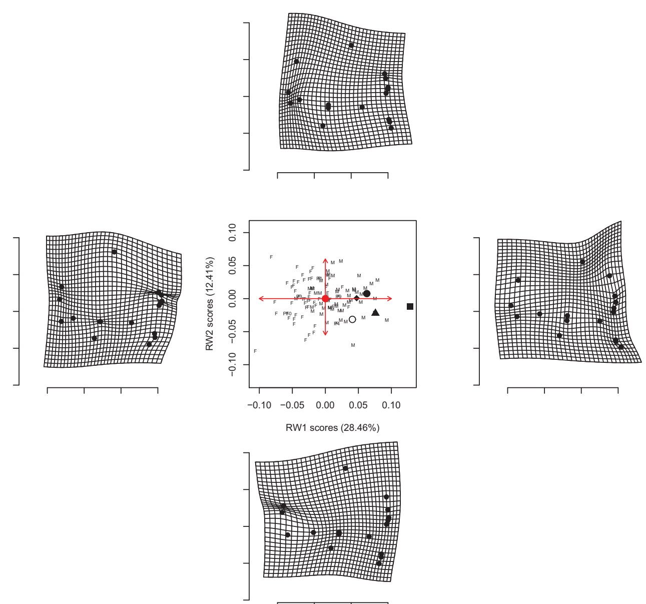
RWA in Paleoanthropology—Shape Space



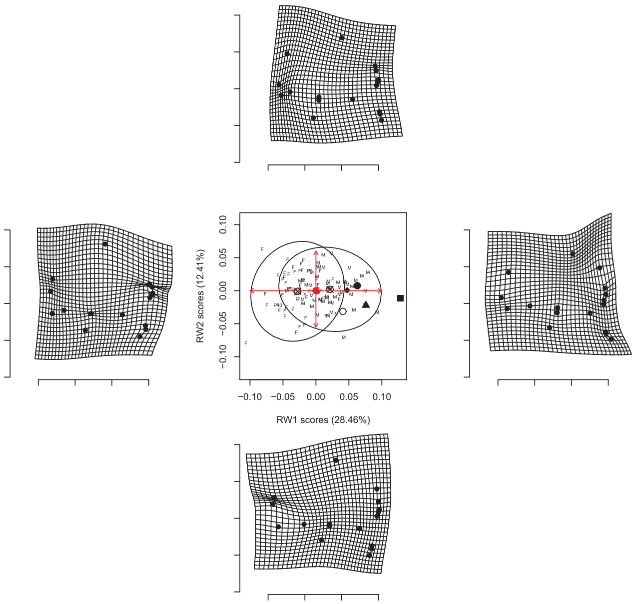
RWA in Paleoanthropology–Global Bending Patterns



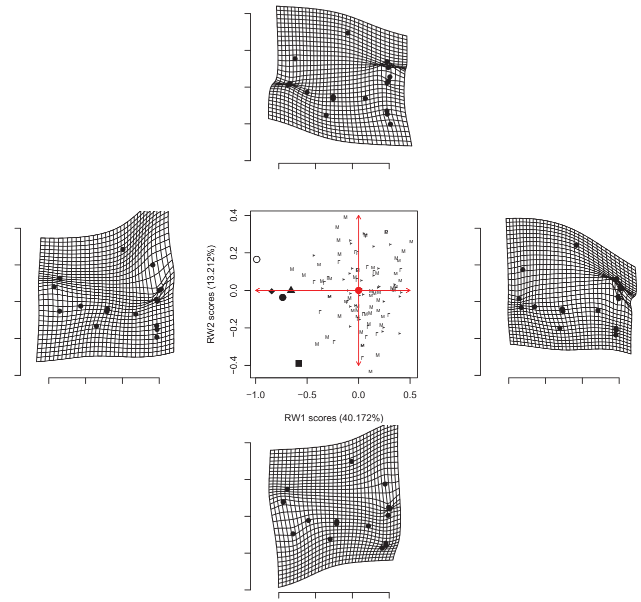
RWA in Paleoanthropology—Form Space



RWA in Paleoanthropology—Form Space



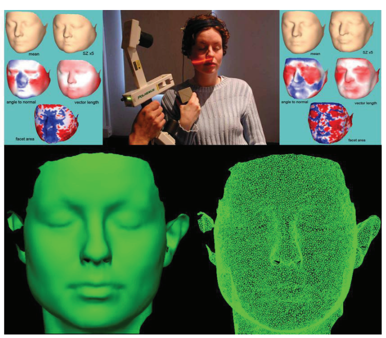
RWA in Paleoanthropology–Local Bending Patterns



3D laser-scan capture

3D facial shape—VCFS data, differences between cases and controls (paired data)

42 pairs of laser-scanned faces, 23 landmarks, 1664 geometrically homologous semilandmarks on curves and surfaces, 59242 mesh-points triangulated with 117386 faces

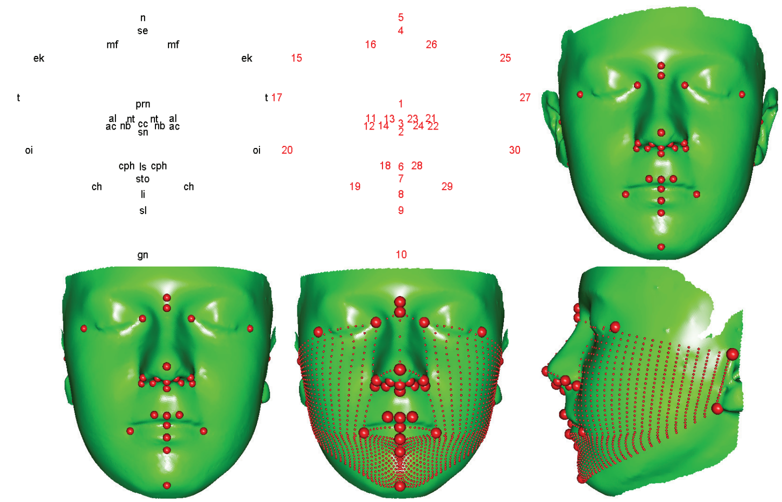


Obrázok: VCFS face, laser-scan, and surface meshes

[Royal College of Surgeons in Ireland, Dublin; Face 3D data]

Geometric Morphometrics

3D facial shape—VCFS data, differences between cases and controls (paired data)



Obrázok: Design of facial (semi)landmarks—***symmetrized mean shape***

3D face—first steps of the analysis
Data analysis 1

Data analysis:

- with respect to the analysis of *object asymmetry* (in our case, facial shape asymmetry), the original coordinates were relabelled and reflected (RR) with respect to *midsagital plane* (MP)
- MP was estimated as an ordinary least square plane of unpaired midsagital landmarks and rotated into (x, y)-plane
- for paired (semi)landmarks, the sign and labels were reversed across the left-hand and right-hand side of the head shape
- the original PSC together with their RR counterparts were jointly submitted to GPA to register both into the same shape space
- both configurations were centered with respect to original and RR Procrustes mean shape, respectively, resulting in original and RR centered PSC
- *fluctuating asymmetry* (FA) expresses how the difference between the original and RR shapes fluctuate in the sample; it is calculated as the sum of squares of individual *asymmetry scores*, i.e. Procrustes distances between original and RR centered PSC of each shape

3D face—first steps of the analysis
Data analysis 2

Data analysis:

- *the asymmetry of the means* (AM) is calculated as the sum of squares of the Procrustes distances between the original and RR Procrustes mean shape; AM multiplied by sample size is called *directional asymmetry* (DA)
- the PSC were adjusted for age and sex by **linear regression model** of the form

  centered $\text{PSC}_{ij} = \text{sex} + \text{age} + \text{sex} : \text{age} + \epsilon_{ij}, i = 1, 2, \ldots 1664; j = 1, 2, 3;$

  for further analysis, residuals of this model were used
- the **direction of case-control difference** was found based on the *projection of "null shape"* to particular PC subspaces; if this fails to negative side of the PC axes cases are on the negative part of the axis as well; if this fails to positive side of the PC axes cases are on the positive part of the axis as well

3D face—first steps of the analysis
Standardized views

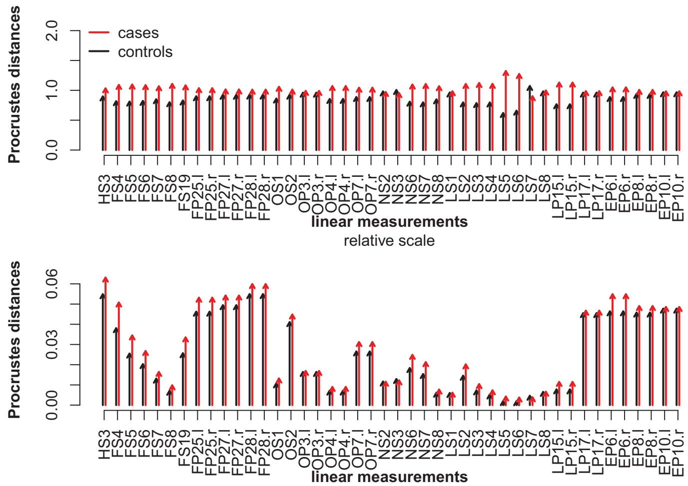
3D face—first steps of the analysis
Data analysis 3

PCA for reversible 3D images:

- 21 RR centered case-control (semi)landmark differences at the same time
- PC scores for original and RR data are equal in absolute values
- in this setting, symmetric and asymmetric PCs are separated which simplifies the interpretation
- the *symmetric PCs* are these where ***PC scores of original and RR data do not have the same sign (they are equal only in absolute value)***
- the *asymmetric PCs* are these where ***PC scores of original and RR data have the same sign (they are equal)***

Geometric Morphometrics

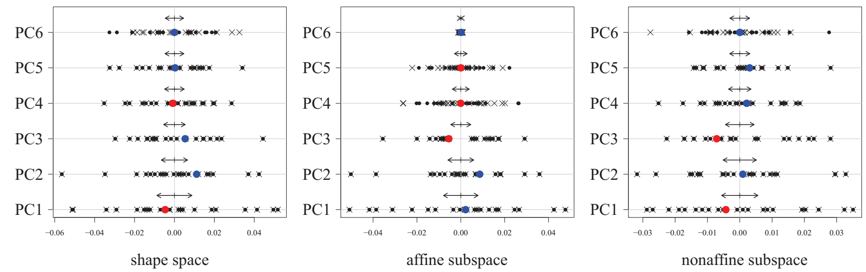
3D facial shape—VCFS data, differences between cases and controls (paired data)



Obrázok: Procrustes shape distances

Geometric Morphometrics

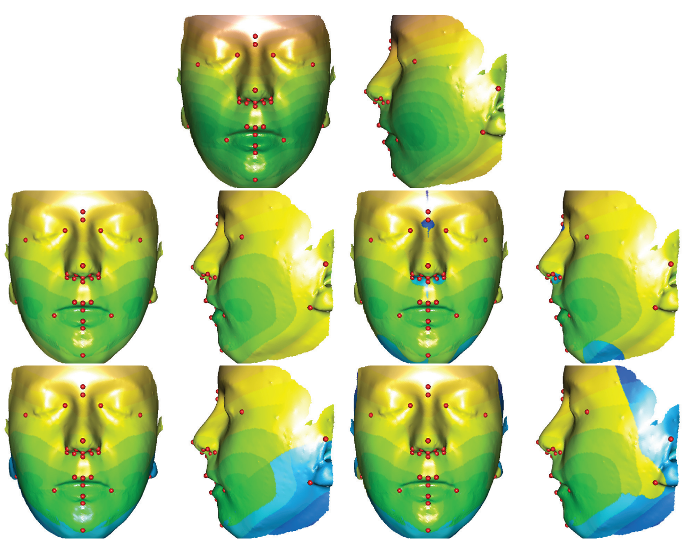
3D facial shape—VCFS data, differences between cases and controls (paired data)



Obrázok: ***PCA of reversible images*** (original, and relabeled and reflected faces) with projection of shape of zero difference—***testing case-control mean difference in particular PC subspace***

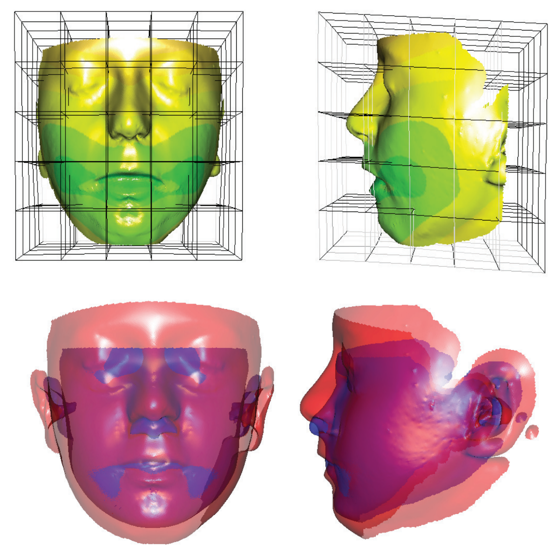
TPS deformations in topo-colors

PCA estimates—control-to-case 3D Euclidean distance, signed distance; *x*-, *y*-, and *z*-axis direction (shape space)



TPS deformations in topo-colors and wireframes

PCA estimates—control-to-case 3D signed Euclidean distance, wireframes, and transparent visualization (shape space)



2-block PLS

- **asymmetric 2-block PLS**—traditional focus of the PLS methods—find the directions in $\mathbf{X}_1$ that best describe $\mathbf{X}_2$ in some way—prediction of dependent variables $\mathbf{X}_2$ from independent variables $\mathbf{X}_1$ (Martens & Naes 1989, Joreskog & Wolf 1982)
- **symmetric 2-block PLS**—low-dimensional linear relationship between two high-dimensional measurement blocks by adapting one single *SVD* (Sampson et al. 1989, Bookstein 1994, McIntosh et al. 1996)

2-block PLS

- Let $\mathbf{S_x} = \frac{1}{n}\mathbf{X}_S^T\mathbf{X}_S$ be the sample covariance matrix and then

$$\mathbf{S_x} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix},$$

where $k_1 + k_2 = k$ ($k_1 < k_2$) is number of landmarks, k_1 is number of landmarks in the first block and k_2 in the second block, $\mathbf{S}_{bb}$ is $dk_b \times dk_b$ sample covariance matrix of the bth block, $\mathbf{S}_{12} = \mathbf{S}_{21}^T$ is $dk_1 \times dk_2$ **sample cross-block covariance matrix** and is equal to

$$\mathbf{S}_{12} = \frac{1}{n}\mathbf{X}_{S,1}^T\mathbf{X}_{S,2}$$

2-block PLS

- adapting the *SVD* to $\mathbf{S}_{12}$ we get

$$\mathbf{S}_{12} = \widehat{\mathbf{U}}\widehat{\mathbf{\Lambda}}\widehat{\mathbf{V}}^T,$$

where $\widehat{\mathbf{U}}$ is the estimate of $dk_1 \times dk_1$ orthogonal matrix of **left singular vectors** with the columns $\widehat{\gamma}_{1j}$ ($j = 1, 2, \ldots dk_1$) and $\widehat{\mathbf{V}}$ is the estimate of $dk_2 \times dk_2$ orthogonal matrix of **right singular vectors** with the columns $\widehat{\gamma}_{2j}$ ($j = 1, 2, \ldots dk_2$) and $\widehat{\mathbf{\Lambda}}$ is the estimate of $dk_1 \times dk_2$ matrix of **singular values** $\widehat{\lambda}_j$ on the diagonal ($j = 1, 2, \ldots dk_1$).
- *latent variables* (*scores*) are defined as

$$\mathbf{L}_1 = \mathbf{X}_{S,1}\widehat{\mathbf{U}}, \mathbf{L}_2 = \mathbf{X}_{S,2}\widehat{\mathbf{V}}$$

2-block PLS

- covariance between jth column $\mathbf{l}_{1j}$ of $\mathbf{L}_1$ and jth column $\mathbf{l}_{2j}$ of $\mathbf{L}_2$ is

$$Cov\left(\mathbf{l}_{1j}, \mathbf{l}_{2j}\right) = \widehat{\lambda}_j,$$

the maximum for any pair of such linear combination
- each column of $\widehat{\mathbf{U}}$ is proportional to the covariances of the block of $\mathbf{X}_{S,1}$ with the corresponding column of the matrix $\mathbf{L}_2$
- each column of $\widehat{\mathbf{V}}$ is proportional to the covariances of the block of $\mathbf{X}_{S,2}$ with the corresponding column of the matrix $\mathbf{L}_1$

2-block PLS

The additional graphical structure becomes available beyond $\widehat{\mathbf{U}}_{\cdot j}$ and $\widehat{\mathbf{V}}_{\cdot j}$ vectors—**scatter-plots of the latent variable scores** or **TPS grids** (2D), or the **arrows** and **TPS morphs** (3D) of the form, where we visualise

$$Vec(\overline{\mathbf{X}}_{P,1}) \pm c_{1j}\widehat{\mathbf{U}}_{\cdot j}, Vec(\overline{\mathbf{X}}_{P,2}) \pm c_{2j}\widehat{\mathbf{V}}_{\cdot j}$$

for the various values of $c_{1j}, c_{2j} \in \mathbb{R}^+$ (in the range of the particular *SW* scores or reasonable magnification of this range)

2-block PLS

A *SW* summary of the data (from each block separately) in the shape space

$$Vec\left(\mathbf{X}_{P,1,i}\right) = Vec\left(\overline{\mathbf{X}}_{P,1}\right) + \sum_{j=1}^{dk_1} l_{1,ij}\widehat{\mathbf{U}}_{\cdot j},$$

$$Vec\left(\mathbf{X}_{P,2,i}\right) = Vec\left(\overline{\mathbf{X}}_{P,2}\right) + \sum_{j=1}^{dk_2} l_{2,ij}\widehat{\mathbf{V}}_{\cdot j},$$

where $(\mathbf{L}_b)_{ij} = l_{b,ij}$ $(b = 1, 2)$

2-block PLS

SW summary for any q-subset of *SW*s $\{SW_{j_1}, \ldots SW_{j_q}\}, q \geq 1$ can be written as

$$Vec\left(\mathbf{X}_{P,1,i}\right)_{SW(j_1,\ldots j_q)} = Vec\left(\overline{\mathbf{X}}_{P,1}\right) + \sum_{j_1,\ldots j_q} l_{1,ij}\widehat{\mathbf{U}}_{\cdot j},$$

$$Vec\left(\mathbf{X}_{P,2,i}\right)_{SW(j_1,\ldots j_q)} = Vec\left(\overline{\mathbf{X}}_{P,2}\right) + \sum_{j_1,\ldots j_q} l_{2,ij}\widehat{\mathbf{V}}_{\cdot j}, i = 1, \ldots n,$$

and then $\mathbf{X}_{P,b}^{SW(j_1,\ldots j_q)}$ are the matrices of all $Vec\left(\mathbf{X}_{P,b,i}\right)_{SW(j_1,\ldots j_q)}$

2-block PLS

- to visualize a **composite shape** (both blocks together) we have to *scale* the singular vectors properly (Mitteroecker & Bookstein 2007)
- **block-wise matrix of common factor scores** $\mathbf{l}_j = \left(\mathbf{l}_{1j} \vdots \mathbf{l}_{2j}\right)$
- necessary scaling factor—eigenvectors from *SVD* of the matrix $\mathbf{l}_j^T\mathbf{l}_j$ are $\widehat{\varphi}_j = \left(\widehat{\varphi}_{1j1}, \widehat{\varphi}_{2j1}\right)^T$
- **composite singular vectors**

$$\mathbf{f}_j = \begin{pmatrix} \widehat{\varphi}_{1j1}\widehat{\mathbf{U}}_{\cdot j} \\ \widehat{\varphi}_{2j1}\widehat{\mathbf{V}}_{\cdot j} \end{pmatrix}$$

2-block PLS

- **composite shape** $Vec(\overline{\mathbf{X}}_P) \pm c_j \mathbf{f}_j^{(sr)}$ for the various values of $c_j \in \mathbb{R}^+$ (in the range of the particular SW scores or reasonable magnification of this range)
- let matrix of **composite latent variables** (**composite scores**) be $\mathbf{L}^{(sr)} = \mathbf{X}_S \mathbf{F}^{(sr)}$, $(\mathbf{L}^{(sr)})_{ij} = l_{ij}$, the columns of $\mathbf{F}^{(sr)}$ be $\mathbf{f}_j^{(sr)}$ (Katina 2008)
- SW summary of the data in the shape space
  $Vec\left(\mathbf{X}_{P,i}\right) = Vec\left(\overline{\mathbf{X}}_P\right) + \sum_{j=1}^{dk_1} l_{ij} \mathbf{f}_j^{(sr)}$
  and SW summary for any q-subset of SWs $\{SW_{j_1}, ...SW_{j_q}\}, q \geq 1$ can be written as
  $Vec\left(\mathbf{X}_{P,i}\right)_{SW(j_1,...j_q)} = Vec\left(\overline{\mathbf{X}}_P\right) + \sum_{j_1,...j_q} l_{ij} \mathbf{f}_j^{(sr)}, i = 1, ...n,$
  and then $\mathbf{X}_P^{SW(j_1,...j_q)}$ is the matrix of all $Vec\left(\mathbf{X}_{P,i}\right)_{SW(j_1,...j_q)}$

2-block GPLS

- let $\mathbf{B}_e$ be bending energy matrix of $\overline{\mathbf{X}}_P$

$$\mathbf{B}_e = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{11} & \mathbf{B}_{12} \\ \mathbf{B}_{21} & \mathbf{B}_{22} \end{pmatrix},$$

  where $k_1 + k_2 = k$ $(k_1 < k_2)$ is number of landmarks, k_1 is number of landmarks in the first block and k_2 in the second block, $\mathbf{B}_{bb} = \mathbf{0}$ is the $k_b \times k_b$ bending energy matrix of the bth block, $\mathbf{B}_{12} = \mathbf{B}_{21}^T$ is the $k_1 \times k_2$ **cross-block bending energy matrix**
- $dk \times dk$ matrix $\mathbf{B} = \mathbf{I}_{d \times d} \otimes \mathbf{B}_e, d = 2, 3$

2-block GPLS

- let $\mathbf{S}_B = (\mathbf{B}^-)^{\alpha/2} \,\widehat{\Sigma}_S^{(12)} (\mathbf{B}^-)^{\alpha/2}$
- then

$$\mathbf{S}_B = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(B)} & \mathbf{S}_{12}^{(B)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(B)} & \mathbf{S}_{22}^{(B)} \end{pmatrix},$$

- let $\mathbf{S}_{12}^{(B)}$ be **weighted cross-block covariance matrix**, $(\mathbf{B}_e^-)^{\alpha/2} = \sum_j \widehat{\lambda}_j^{-\alpha/2} \widehat{\gamma}_j^T \widehat{\gamma}_j$ (Moore-Penrose generalized inverse of $\mathbf{B}_e^{\alpha/2}$)

2-block GPLS

- **large scale variability**, $\alpha = 1$,
- **small scale variability**, $\alpha = -1$,
- $\alpha = 0$, then $\mathbf{B}_e^0 = \mathbf{I}$, the $k \times k$ identity matrix
- then SVD of

$$\mathbf{S}_{12}^{(B)} = \widehat{\mathbf{U}} \widehat{\mathbf{\Lambda}} \widehat{\mathbf{V}}^T,$$

- let $\mathbf{L}_B^{(sr)} = \mathbf{X}_S^{(B)} \mathbf{F}_B^{(sr)}$ be the matrix of **weighted composite latent variables (composite scores)**, $(\mathbf{L}_B^{(sr)})_{ij} = l_{B,ij}$, let the columns of $\mathbf{F}_B^{(sr)}$ be $\mathbf{f}_{B,j}^{(sr)}$

2-block GPLS

Then a SW summary of the data in the shape space is

$$Vec\left(\mathbf{X}_{P,i}\right) = Vec\left(\overline{\mathbf{X}}_P\right) + \mathbf{B}^{\alpha/2}\sum_{j=1}^{dk_1} l_{B,ij}\mathbf{f}_{B,j}^{(sr)}$$

and SW summary for any q-subset of SWs $\{SW_{j_1}, \ldots SW_{j_q}\}, q \geq 1$ can be written as

$$Vec\left(\mathbf{X}_{P,i}\right)_{SW(j_1,\ldots j_q)} = Vec\left(\overline{\mathbf{X}}_P\right) + \mathbf{B}^{\alpha/2}\sum_{j_1,\ldots j_q} l_{B,ij}\mathbf{f}_{B,j}^{(sr)}, i = 1, \ldots n,$$

and then $\mathbf{X}_P^{SW(j_1,\ldots j_q)}$ is the matrix of all $Vec\left(\mathbf{X}_{P,i}\right)_{SW(j_1,\ldots j_q)}$

Two shape subspaces and two different 2-block GPLS

Following Katina (2008)

- **affine** contribution to the variability—**affine subspace PLS** on $n \times k_b$ matrices $\mathbf{X}_{A,b}$ with the rows $\mathbf{x}_{A,bi}$, $i = 1, 2, \ldots n; b = 1, 2$
- **non-affine** contribution to the variability—**non-affine subspace PLS** on $n \times k_b$ matrices $\mathbf{X}_{NA,b}$ with the rows $\mathbf{x}_{NA,bi}$, $i = 1, 2, \ldots n$

Two different 2-block GPLS

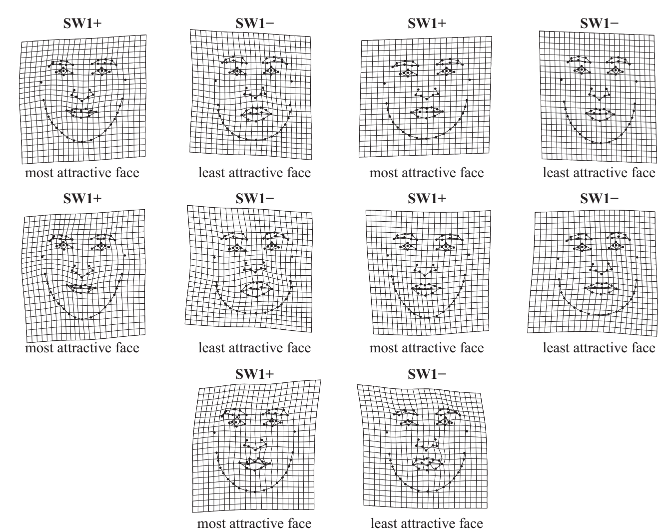
- if we have **two shape blocks**—Procrustes shape coordinates are pre-multiplied with $\left(\mathbf{B}_e^{-}\right)^{\alpha/2}$ of $\overline{\mathbf{X}}_P$ (Procrustes mean of the composite shape)
- if we have **one shape block and one block of external variables**—Procrustes shape coordinates of the shape block are pre-multiplied with $\left(\mathbf{B}_e^{-}\right)^{\alpha/2}$ of $\overline{\mathbf{X}}_{P_1}$ (Procrustes mean shape)

Symmetric GPLS summary

- **two shape blocks**
- **one shape block** and **one block of external variables**
- **shape space**
- **affine subspace**
- **non-affine subspace**
- **non-afine subspace with global and local bending**
- **one or more external variables**

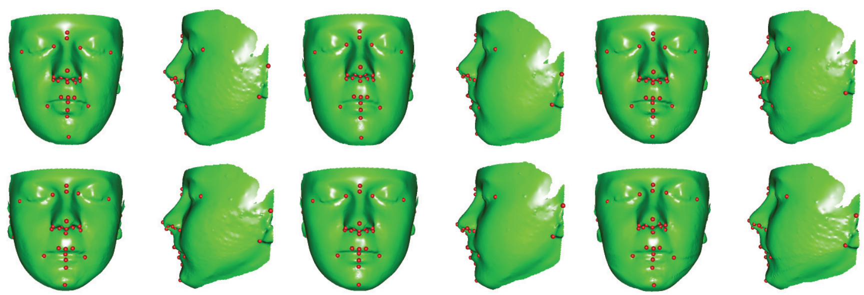
Results of GPLS

TPS grids of shape block vs "attractiveness" block in all shape subspaces



Results of GPLS

3D warps of shape block vs SOFA scores in three different shape subspaces



Statistical inference in shape analysis

Outline

For one-, two-sample, and paired hypotheses about shapes, there are the following tests

1. ***one-sample Hotelling T^2 test***, ***one-sample Goodall F test***
2. ***two-independent sample Hotelling T^2 test***, ***modification of Nel-Van der Merwe test for the multivariate Behrens-Fisher problem***, and ***two independent sample Goodall F test***,
3. ***paired Hotelling T^2 test*** and ***paired Goodall F test***
4. ***Mardia test of object symmetry***

Moore-Penrose generalized inverse of symmetric square matrix $\mathbf{A}$, let say $\mathbf{A}^-$, is inverse, where following equation holds $\mathbf{A}^-\mathbf{A}\mathbf{A}^- = \mathbf{A}$, so

$$\mathbf{A}^- = \sum_{j=1}^{s} \lambda_j^{-1} \gamma_j \gamma_j^T,$$

where γ_j are ***eigenvectors*** of matrix $\mathbf{A}$ corresponding to ***eigenvalues*** $\lambda_j > 0$, where $j = 1, 2 ... s \leq kd$.

Statistical inference in shape analysis

One-sample Multivariate Inference

Definition (One-sample tests)

Let $Vec(\mathbf{X}_{P,i}), i = 1, 2, ...n$, be the random sample from population with vectorized ***Procrustes mean shape*** $Vec(\boldsymbol{\mu}_P)$ estimated by $\overline{\mathbf{x}}_P$ and ***covariance matrix*** $\boldsymbol{\Sigma}_P$ estimated by $\mathbf{S}_{\mathbf{X}}$. Let

$$Vec(\mathbf{X}_{P,i}) \sim N_{dk}\left(Vec(\boldsymbol{\mu}_P), \boldsymbol{\Sigma}_P\right), i = 1, ...n.$$

The null hypothesis is defined as: the Procrustes mean shape $\boldsymbol{\mu}_P$ is equal to the Procrustes mean shape $\boldsymbol{\mu}_0$, so $H_0 : \boldsymbol{\mu}_P = \boldsymbol{\mu}_0, H_1 : \boldsymbol{\mu}_P \neq \boldsymbol{\mu}_0$. If H_0 holds, ***Hotelling T^2 test statistic*** is equal to

$$F_H = \frac{n-s}{s} T_H^2 \sim F_{s,n-s},$$

where $s = min(dk, n-1)$, and

$$T_H^2 = \left(\overline{\mathbf{x}}_P - Vec(\boldsymbol{\mu}_0)\right)^T \mathbf{S}_{\mathbf{X}}^- \left(\overline{\mathbf{x}}_P - Vec(\boldsymbol{\mu}_0)\right) = \sum_{j=1}^{s} \frac{\widehat{r}_{j0}^2}{\widehat{\lambda}_j}$$

is square of ***Mahalanobis distance*** between $\overline{\mathbf{x}}_P$ and $Vec(\boldsymbol{\mu}_0)$, where $\mathbf{S}_{\mathbf{X}}^-$ is Moore-Penrose generalized inverse of $\mathbf{S}_{\mathbf{X}}$;

Statistical inference in shape analysis

One-sample Multivariate Inference

Definition (One-sample tests; cont.)

$\widehat{r}_{j0} = \widehat{\gamma}_j^T \left(\overline{\mathbf{x}}_P - Vec(\boldsymbol{\mu}_0)\right)$ is the jth PC score for the difference $\left(\overline{\mathbf{x}}_P - Vec(\boldsymbol{\mu}_0)\right), j = 1, 2, ..., s$. High values of $\widehat{r}_{j0}^2 / \widehat{\lambda}_j$ indicates the direction of high shape variability associated with $\overline{\mathbf{x}}_P$ in jth PC. The test statistic T_H^2 can be modified with respect to any subset of PCs as

$$T_H^2 = \left(\overline{\mathbf{x}}_P - Vec(\boldsymbol{\mu}_0)\right)^T \left(\mathbf{S}_{\mathbf{X}}^{PC(j_1,\ldots j_q)}\right)^- \left(\overline{\mathbf{x}}_P - Vec(\boldsymbol{\mu}_0)\right) = \sum_{j_1,\ldots j_q} \frac{\widehat{r}_{j0}^2}{\widehat{\lambda}_j}$$

where $\mathbf{S}_{\mathbf{X}}^{PC(j_1,\ldots j_q)} = \sum_{PC(j_1,\ldots j_q)} \widehat{\lambda}_j \widehat{\gamma}_j \widehat{\gamma}_j^T$ is the covariance matrix estimated by any q-subset of PCs $\left\{PC_{j_1}, PC_{j_2}, ..., PC_{j_q}\right\}; q \geq 1$.
If covariance matrix $\boldsymbol{\Sigma}_P = \sigma^2 \mathbf{I}$ and if H_0 holds, ***Goodall test statistic***

$$F_G = n(n-1) \frac{d_F^2\left(\overline{\mathbf{X}}_P, \boldsymbol{\mu}_0\right)}{\sum_{i=1}^{n} d_F^2\left(\mathbf{X}_{P,i}, \overline{\mathbf{X}}_P\right)} \sim F_{s,n-s},$$

which is the special case of Hotelling T^2 under the isotropy.

Definition (Two-sample tests)

Let $Vec(\mathbf{X}_{P,ji}), i = 1, 2, ...n_j$,be the random sample from population $j, j = 1, 2$, with vectorized ***Procrustes mean shape*** $Vec\left(\boldsymbol{\mu}_{P,j}\right)$ estimated by $\overline{\mathbf{x}}_{P,j}$ and ***covariance matrix*** $\boldsymbol{\Sigma}_P$ estimated by ***common covariance matrix*** $\mathbf{S}_U = \left(n_1\mathbf{S}_{\mathbf{X},1} + n_2\mathbf{S}_{\mathbf{X},2}\right) / \left(n_1 + n_2 - 2\right)$, where ***sample covariance matrices*** $\mathbf{S}_{\mathbf{X},j} = \frac{1}{n}\mathbf{X}_{P,j}^T\mathbf{H}\mathbf{X}_{P,j}$, $\mathbf{X}_{P,j}$ is $n_j \times (dk)$ matrix of $Vec(\mathbf{X}_{P,ji})$ as the rows. Let

$$Vec(\mathbf{X}_{P,ji}) \sim N_{dk}\left(Vec\left(\boldsymbol{\mu}_{P,j}\right), \boldsymbol{\Sigma}_P\right); j = 1, 2; i = 1, ...n.$$

The null hypothesis is defined as: the Procrustes mean shape $\boldsymbol{\mu}_{P,1}$ is equal to the Procrustes mean shape $\boldsymbol{\mu}_{P,2}$, so $H_0 : \boldsymbol{\mu}_{P,1} = \boldsymbol{\mu}_{P,2}, H_1 : \boldsymbol{\mu}_{P,1} \neq \boldsymbol{\mu}_{P,2}$. If H_0 holds, ***Hotelling T^2 test statistic*** is equal to

$$F_H = \frac{n_1n_2\left(n_1 + n_2 - s - 1\right)}{\left(n_1 + n_2\right)\left(n_1 + n_2 - 2\right)s} T_H^2 \sim F_{s,n_1+n_2-s-1},$$

where $s = min(dk, n_1 + n_2 - 2)$, and

$$T_H^2 = \left(\overline{\mathbf{x}}_{P,1} - \overline{\mathbf{x}}_{P,2}\right)^T \mathbf{S}_U^- \left(\overline{\mathbf{x}}_{P,1} - \overline{\mathbf{x}}_{P,2}\right) = \sum_{j=1}^{s} \frac{\widehat{r}_{j0}^2}{\widehat{\lambda}_j},$$

Definition (Two-sample tests; cont.)

$\widehat{r}_{j0} = \widehat{\boldsymbol{\gamma}}_j^T\left(\overline{\mathbf{x}}_{P,1} - \overline{\mathbf{x}}_{P,2}\right)$ is the jth PC score for the difference $\left(\overline{\mathbf{x}}_P - \overline{\mathbf{x}}_{P,2}\right)$, $j = 1, 2, ..., s$. High values of $\widehat{r}_{j0}^2/\widehat{\lambda}_j$ indicates the direction of high shape variability associated with observed group difference $\overline{\mathbf{x}}_{P,1} - \overline{\mathbf{x}}_{P,2}$ in jth PC. The test statistic T_H^2 can be modified with respect to any subset of PCs as

$$T_H^2 = \left(\overline{\mathbf{x}}_{P,1} - \overline{\mathbf{x}}_{P,2}\right)^T \left(\mathbf{S}_U^{PC(j_1,\dots j_q)}\right)^- \left(\overline{\mathbf{x}}_{P,1} - \overline{\mathbf{x}}_{P,2}\right) = \sum_{j_1,\dots j_q} \frac{\widehat{r}_{j0}^2}{\widehat{\lambda}_j}$$

where $\mathbf{S}_U^{PC(j_1,\dots j_q)} = \sum_{PC(j_1,\dots j_q)} \widehat{\lambda}_j\widehat{\boldsymbol{\gamma}}_j\widehat{\boldsymbol{\gamma}}_j^T$ is the covariance matrix estimated by any q-subset of PCs $\left\{PC_{j_1}, PC_{j_2}, ..., PC_{j_q}\right\}; q \geq 1$.
If covariance matrix $\boldsymbol{\Sigma}_{P,j} = \sigma^2\mathbf{I}$ and if H_0 holds, ***Goodall test statistic***

$$F_G = \frac{n_1+n_2-2}{n_1^{-1}+n_2^{-1}} \frac{d_F^2\left(\overline{\mathbf{x}}_{P,1}, \overline{\mathbf{x}}_{P,2}\right)}{\sum_{i=1}^{n_1} d_F^2\left(\mathbf{x}_{P,1i}, \overline{\mathbf{x}}_{P,1}\right) + \sum_{i=1}^{n_2} d_F^2\left(\mathbf{x}_{P,2i}, \overline{\mathbf{x}}_{P,2}\right)} \sim F_{s,(n_1+n_2-2)s},$$

which is the special case of Hotelling T^2 under the isotropy.

Definition (Paired tests)

Let $Vec(\mathbf{X}_{P,ji}), j = 1, 2, i = 1, 2, ...n$, be the random sample from population with vectorized ***Procrustes mean shapes*** $Vec\left(\boldsymbol{\mu}_{P,j}\right)$ estimated by $\overline{\mathbf{x}}_{P,j}$ and ***covariance matrices*** $\boldsymbol{\Sigma}_{P,j}$ estimated by $\mathbf{S}_{\mathbf{X},j}$. Let

$$Vec(\mathbf{X}_{P,ji}) \sim N_{dk}\left(Vec\left(\boldsymbol{\mu}_{P,j}\right), \boldsymbol{\Sigma}_{P,j}\right), j = 1, 2, i = 1, ...n.$$

Let $Vec(\mathbf{X}_{D,i}) = Vec(\mathbf{X}_{P,1i} - \mathbf{X}_{P,2i})$, $i = 1, 2, ..., n$, be a random sample of the coordinate differences of one object with coordinates measured two times and then $Vec(\mathbf{X}_{D,i}) \sim N_{dk}\left(Vec\left(\boldsymbol{\mu}_D\right), \boldsymbol{\Sigma}_D\right)$. The estimates of parameters are $\overline{\mathbf{x}}_D$ and $\mathbf{S}_D$.
The null hypothesis is defined as: the Procrustes mean shape $\boldsymbol{\mu}_D$ is equal to the Procrustes mean shape $\boldsymbol{\mu}_0$, so $H_0 : \boldsymbol{\mu}_D = \boldsymbol{\mu}_0, H_1 : \boldsymbol{\mu}_D \neq \boldsymbol{\mu}_0$. If H_0 holds, ***Hotelling T^2 test statistic*** is equal to

$$F_H = \frac{n - s}{s} T_H^2 \sim F_{s,n-s},$$

where $s = min(dk, n - 1)$, and

Definition (Paired tests; cont.)

$$T_H^2 = \left(\overline{\mathbf{x}}_D - Vec\left(\boldsymbol{\mu}_0\right)\right)^T \mathbf{S}_D^- \left(\overline{\mathbf{x}}_D - Vec\left(\boldsymbol{\mu}_0\right)\right) = \sum_{j=1}^{s} \frac{\widehat{r}_{j0}^2}{\widehat{\lambda}_j};$$

$\widehat{r}_{j0} = \widehat{\boldsymbol{\gamma}}_j^T\left(\overline{\mathbf{x}}_D - Vec\left(\boldsymbol{\mu}_0\right)\right)$ is the jth PC score for the difference $\left(\overline{\mathbf{x}}_D - Vec\left(\boldsymbol{\mu}_0\right)\right)$, $j = 1, 2, ..., s$. High values of $\widehat{r}_{j0}^2/\widehat{\lambda}_j$ indicates the direction of high shape variability associated with $\overline{\mathbf{x}}_D$ in jth PC. The test statistic T_H^2 can be modified with respect to any subset of PCs as
$T_H^2 = \left(\overline{\mathbf{x}}_D - Vec\left(\boldsymbol{\mu}_0\right)\right)^T \left(\mathbf{S}_D^{PC(j_1,\dots j_q)}\right)^- \left(\overline{\mathbf{x}}_D - Vec\left(\boldsymbol{\mu}_0\right)\right) = \sum_{j_1,\dots j_q} \frac{\widehat{r}_{j0}^2}{\widehat{\lambda}_j}$, where $\mathbf{S}_D^{PC(j_1,\dots j_q)} = \sum_{PC(j_1,\dots j_q)} \widehat{\lambda}_j\widehat{\boldsymbol{\gamma}}_j\widehat{\boldsymbol{\gamma}}_j^T$ is the covariance matrix estimated by any q-subset of PCs $\left\{PC_{j_1}, PC_{j_2}, ..., PC_{j_q}\right\}; q \geq 1$.
If covariance matrix $\boldsymbol{\Sigma}_D = \sigma^2\mathbf{I}$ and if H_0 holds, ***Goodall test statistic***

$$F_G = n\left(n - 1\right) \frac{d_F^2\left(\overline{\mathbf{X}}_D, \boldsymbol{\mu}_0\right)}{\sum_{i=1}^{n} d_F^2\left(\mathbf{X}_{D,i}, \overline{\mathbf{X}}_P\right)} \sim F_{s,n-s},$$

which is the special case of Hotelling T^2 under the isotropy.

Statistical inference in shape analysis
Confidence and Tolerance Ellipsoids

Definition (Confidence and Tolerance Ellipsoids)

If $k > 1$, then the generalization of $(1-\alpha)100\%$ ***confidence interval (CI)*** for $\boldsymbol{\mu}$ is $(1-\alpha)100\%$ ***confidence set (CS)*** for $\boldsymbol{\mu}$

$$CS = \left\{ \boldsymbol{\mu}_0 : \left(\overline{\mathbf{X}} - \boldsymbol{\mu}_0\right)^T \mathbf{S}^{-1} \left(\overline{\mathbf{X}} - \boldsymbol{\mu}_0\right) \leq \frac{(n-1)\,k}{(n-k)n} F_{k,n-k}(\alpha) \right\}.$$

Then $\Pr[CS \cap \{\boldsymbol{\mu}\} \neq \emptyset] = 1 - \alpha$. We can calculate ***realization of*** $(1-\alpha)\,\%$ CS. It is ***confidence ellipsoid (CE)*** centered in $\overline{\mathbf{x}}$. The direction of ellipsoid-axes is parallel to eigenvectors $\widehat{\gamma}_j$ of $\mathbf{S}$ ($\widehat{\lambda}_j$ are particular eigenvalues). The length of ellipsoid-axes visualized from the center $\overline{\mathbf{x}}$ is equal to

$$\pm\sqrt{\widehat{\lambda}_j \frac{(n-1)\,k}{(n-k)\,n} F_{k,n-k}(1-\alpha)}, j = 1, 2, \ldots k.$$

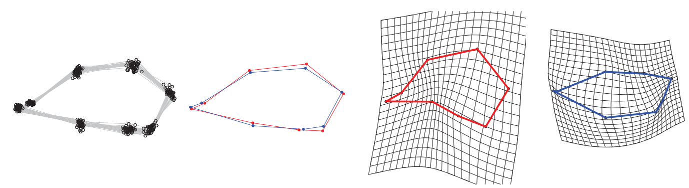
These CEs (in one-, two-sample, and paired case) can be applied to: ***(semi)landmark coordinates*** and ***PC scores***. Multiplying $F_{k,n-k}(\alpha)$ by n we get ***tolerance ellipsoid (TE)***.

Example 27
PCA a testovanie hypotéz

Example (DÚ 9)

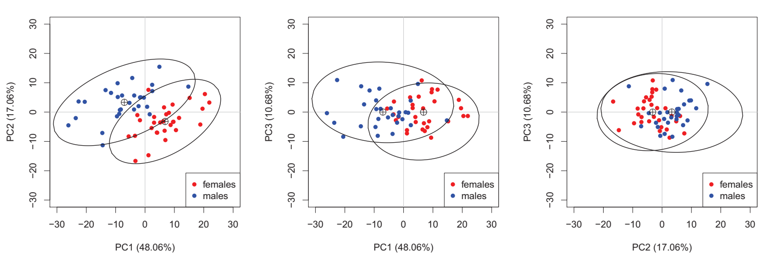
Majme dáta `gorf.dat` a `gorm.dat`, ktoré sú v knižnici `shapes` a predstavujú súradnice $k = 8$ landmarkov na lebkách $n = 30$ samíc a $n = 29$ samcov gorríl (*Gorilla gorilla*). Pokrač. príkladu 7.

9.1) Registrujte súradnice landmarkov `gorf.dat` a `gorm.dat` do spoločného tvarového priestoru pomocou GPA a aplikujte algoritmus výpočtu rotácie do smeru najväčšej variability z DÚ7. Použite funkciu `procGPA(...)$rotated` (GPA, kde výstupom je pole rozmeru $8 \times 2 \times 59$ **procrustovských tvarových súradníc**). Vypočítajte priemerné procrustovské súradnice pre samice a samcov, deformujte súradnice samíc na samcov a naopak, extrapolujte $3\times$.

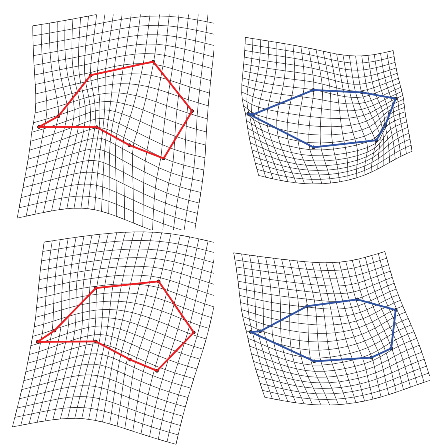


Example 27
PCA a testovanie hypotéz

9.2) Vypočítajte ***vlastné čísla*** a ***vlastné vektory*** kovariančnej matice $\mathbf{S_X}$ centrovaných procrustovských tvarových súradníc. Použite funkciu `eigen()`. Skontrolujte, či majú všetky vlastné vektory jednotkovú dĺžku. Škálujte vlastné čísla ich sumou, vynásobte 100 (zaokrúhlite na dve desatinné miesta) a kumulatívne ich zosumujte. Použite fukncie `sum()` a `cumsum()`. Zobrazte skóre PC$_i$ vs PC$_j$, $j = 1, 2, 3; i < j$ v rozptylových grafoch (rozsahy všetkých grafov škálujte rovnako) spolu s 95% ***tolerančnými elipsoidmi***. Vypočítajte priemerné procrustovské súradnice pre samice a samcov v podpriestore PC1 (***spätnou projekciou skóre do tvarového priestoru*** – viď. slajdy o klasickej alebo zovšeobecnenej PCA), extrapolujte $3\times$. Porovnajte obrázky s (9.1) a interpretujte použitím matematicko-štatistického pojmového aparátu.



Example 27
PCA a testovanie hypotéz



Obrázok: TPS deformácie samcov na samice a naopak samíc na samcov; priemerné procrustovské tvary (horný riadok), odhadnuté priemerné procrustovské tvary v podpriestore PC1 (dolný riadok); extrapolované $3\times$