Flow Complexes
Structure, Algorithms and Applications

Author(s):
John, Matthias

Publication Date:
2003

Permanent Link:
https://doi.org/10.3929/ethz-a-004624735

DISS. ETH No. 15184, 2003

Flow complexes

Structure, Algorithms and Applications

A dissertation submitted to the
Swiss Federal Institute of Technology, ETH Zürich
for the degree of Doctor of Technical Sciences

presented by
Matthias John
Diplom-Informatiker
born 5.6.1973
citizen of Germany

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. Emo Welzl, ETH Zürich, examiner
Prof. Dr. Nina Amenta, UC Davis, co-examiner
Dr. Joachim Giesen, ETH Zürich, co-examiner

Abstract

In this thesis we introduce two new cell complexes, the *stable flow complex* and the *unstable flow complex*, that structure a set of weighted points in the Euclidean space.

Both complexes are based on a flow derived from a distance function that is defined by a finite set of weighted points. The distance function is closely related to Voronoi and Delaunay diagrams. The flow complexes can be computed efficiently in two and three dimensions. They have applications in surface reconstruction and bio-geometric modeling.

The main results of this thesis are:

We characterize the flow in direction of steepest ascent of a distance function derived from a finite set of weighted points. Based on this flow we define two cell complexes, the *stable flow complex* and the *unstable flow complex*. We show how the flow complexes cover the Euclidean space.

In two dimensions we provide algorithms to compute the stable and the unstable flow complex of a set of weighted points. The algorithms are based on the computation of the Delaunay and Voronoi diagrams. Their worst-case running time of $O(n^2)$ is optimal. We show that the combinatorial complexity of both complexes in two dimensions is $\Theta(n^2)$. We introduce a condition under which a symmetry known from Voronoi and Delaunay diagrams can be partially adapted to stable and unstable flow complexes in two dimensions. Under this condition the stable flow complex can be constructed by a discrete flow on Delaunay triangles.

In three dimensions we provide an algorithm to compute the stable flow complex of a set of weighted points. We simplify the algorithm for the case of unweighted points and derive an algorithm to approximate the stable flow complex by Delaunay simplices.

Finally, we use the stable flow complex for two applications. First we show how to reconstruct the boundary surface of a solid object from a finite set of sample points by a piecewise linear manifold. Our algorithm is fast and guarantees, that the output is a 2-manifold, even for noisy samples. For the second application we model macromolecules by the positions and radii of their atoms. We use the stable flow complex to decompose a macromolecule into its constituents and to model special cavities, called pockets.

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit untersuchen wir zwei neue Zellkomplexe, den *Stable-Flow-Komplex* und den *Unstable-Flow-Komplex*, die eine Menge von gewichteten Punkten im Euklidischen Raum strukturieren.

Beide Zellkomplexe basieren auf einem Fluss, der von einer Distanzfunktion abgeleitet ist. Die Distanzfunktion ist definiert durch eine endliche Menge von gewichteten Punkten und steht in enger Beziehung zu Voronoi- und Delaunay-Diagrammen. Die Zellkomplexe können im zwei- und dreidimensionalen Raum effizient berechnet werden. Sie haben Anwendungen in der Flächenrekonstruktion und der bio-geometrischen Modellierung.

Die zentralen Ergebnisse dieser Arbeit sind:

Wir charakterisieren den Fluss in Richtung des steilsten Anstiegs einer Distanzfunktion, die von einer endlichen Menge von gewichteten Punkten abgeleitet ist. Basierend auf diesem Fluss werden zwei Zellkomplexe definiert: der *Stable-Flow-Komplex* und der *Unstable-Flow-Komplex*. Wir zeigen, wie diese Zellkomplexe den Euklidischen Raum überdecken.

Für den zweidimensionalen Raum geben wir Algorithmen zur Berechung beider Zellkomplexe für gewichtete Punkte an. Die Algorithmen basieren auf der Berechnung von Delaunay- und Voronoi-Diagrammen. Ihre Laufzeit von $O(n^2)$ im schlechtesten Fall ist optimal. Wir zeigen, dass beide Zellkomplexe im zweidimensionalen Raum eine kombinatorische Komplexität von $\Theta(n^2)$ haben. Wir geben eine Bedingung an, unter der eine von Voronoi- und Delaunay-Diagrammen bekannte Symmetrie sich teilweise auf die Zellkomplexe im zweidimensionalen Raum überträgt. Unter dieser Bedingung kann der Stable-Flow-Komplex durch einen diskreten Fluss auf Delaunay-Dreiecken berechnet werden.

Im dreidimensionalen Raum geben wir einen Algorithmus zur Berechung des Stable-Flow-Komplexes einer Menge von gewichteten Punkten an. Wir vereinfachen den Algorithmus für ungewichtete Punkte und leiten daraus eine Approximation durch Delaunay-Simplizes ab.

Am Ende der Arbeit beschreiben wir zwei Anwendungen des Stable-Flow-Komplexes. Als erstes zeigen wir, wie die Oberfläche eines dreidimensionalen Objektes aus einer endlichen Menge von Samplepunkten rekonstruiert werden kann. Dieser Algorithmus ist schnell und gewährleistet, dass das Ergebnis eine 2-Mannigfaltigkeit ist, selbst für verrauschte Punktemengen. Für die zweite Anwendung modellieren wir Makromoleküle durch die Position und den Radius ihrer Atome. Mit Hilfe des Stable-Flow-Komplexes

zerlegen wir die Makromoleküle in ihre Hauptbestandteile und modellieren spezielle Kavitäten, sogenannte Pockets.