一种核 Fisher 判别分析的快速算法

赵 峰¹¹³ 张军英¹¹² 梁军利^④ ^①(西安电子科技大学计算机学院 西安 710071) ²(西安电子科技大学雷达信号处理国家重点实验室 西安 710071) ³(济南大学理学院 济南 250012) ^④(中国科学院声学研究所 北京 100080)

摘 要:针对训练样本多时核 Fisher 判别分析(KFDA)的计算代价大,特征提取速度慢问题,本文提出一种 KFDA 的快速算法。该算法首先基于线性相关性理论,设计出一种优化方法,快速寻找训练样本在特征空间所张成的子空 间的一组基; 然后用这组基线性表示最佳投影方向, 结合特征空间中的 Fisher 准则函数, 推导出求解最佳投影方 向的新公式,其求解过程只需对一个阶数等于基的个数的矩阵特征值分解,同时提取某样本特征时只需计算该样本 与这组基之间的核函数。基于多个数据集的实验验证了该算法的有效性。 关键词:核 Fisher 判别分析;最佳投影方向;核函数

中图分类号: TP391.4 文献标识码: A 文章编号: 1009-5896(2007)07-1731-04

A Fast Algorithm about Kernel Fisher Discriminant Analysis

Zhang Jun-ying⁰² Liang Jun-li⁴ Zhao Feng¹³

⁽¹⁾(School of Computer Science and Engineering, Xidian University, Xi'an 710071, China)

⁽²⁾(National Key Lab of Radar Signal Processing, Xidian University, Xi'an 710071, China)

⁽³⁾(School of Science, Jinan University, Jinan 250012, China)

⁽⁴⁾(Institute of Acoustics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract: The standard Kernel Fisher Discriminant Analysis(KFDA) may suffer from the large computation complexity and the slow speed of feature extraction for the case of large number of training samples. To tackle these problems, a fast algorithm of KFDA is presented. The algorithm firstly proposes an optimized algorithm based on the theory of linear correlation, which finds out a basis of the sub-space spanned by the training samples mapped onto the feature space and which avoids the operation of matrix inversion; Then using the linear combination of the basis to express the optimal projection vectors, and combining with Fisher criterion in the feature space, a novel criterion for the computation of the optimal projection vectors is presented, which only needs to calculate the eigenvalue of a matrix which size is the same as the number of the basis. In addition, the feature extraction for one sample only needs to calculate the kernel functions between the basis and the sample. The experimental results using different datasets demonstrate the validity of the presented algorithm.

Key words: Kernel Fisher Discriminant Analysis(KFDA); Optimal projection vector; Kernel function

1 引言

核Fisher判别分析(KFDA)的基本思想是经过非线性映 射将输入数据映射到一个高维特征空间,在特征空间中进行 Fisher线性判别分析,隐含地实现输入空间的非线性判别。由 于KFDA能有效提取非线性判别特征,因而成为模式识别与 机器学习等领域的研究热点^[1-5]。

在 KFDA 实现过程中, 需要求解 $K_m^{-1}K_b$ 的特征值(其中 K_w , K_b 表示核类内矩阵与核类间矩阵, 它们是 $m \times m$ 矩阵,

m 表示训练样本数),其计算复杂度是 O(m³);而且所有训 练样本都要参与最佳投影方向的表达。 m 大时, KFDA 面 临计算复杂度大以及特征提取速度慢问题。文献[6,7]从几何 的角度,选择少量"显著"训练样本近似表示w(w表示最 佳投影方向)的方法,解决上述问题。但其为近似算法,存在 理论意义上的不确定性,而且训练数据的筛选过程,计算代 价也比较大。

本文首先基于向量组的线性相关性的有关理论,推导出 一种自适应的优化算法,寻找训练样本在特征空间中所张成 的子空间的一组基,该算法避开了矩阵求逆运算,加速了子 空间基的选取。然后将 w 表达成这组基的线性组合,并结合

²⁰⁰⁶⁻⁰⁷⁻⁰⁴ 收到, 2006-12-06 改回 国家自然科学基金(60574039, 60371044)和国家部级基金资助课题

特征空间中的 Fisher 准则函数,推导出一个用来确定 w 的 新公式,使得 KFDA 求解中只需特征值分解一个阶数等于基 的个数的矩阵,计算复杂度是 O(r³)(其中 r 表示基的个数); 同时由于线性表示 w 的这组基的个数 r 大大少于训练样本 总数,所以对某样本提取判别特征时只需计算该样本与这组 基间核函数,节省特征提取时间。

2 KFDA 描述

设 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ 表示训练样本集,共有 m 个样本,其中 x_i ($i = 1, 2, \dots, m$) 是一个 n 维列向量,分别属于一个特定模式类,共有 c 类。第 j 类的样本子集记为 X_j ($j = 1, 2, \dots, c$),样本数记为 m_j 。KFDA 通过一个非线性变化 φ ,将输入空间的所有样本影射到一个高维特征空间 F 中,即 $\varphi: x \in X \subset R^n \to \varphi(x) \in F$,其中称 $\varphi(x)$ 为样本 x 所对应的核样本,在F上进行线性 Fisher 判别分析。此时 Fisher 准则函数的表达形式为

$$\boldsymbol{J}_{f}(\boldsymbol{w}) = \frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{S}_{b}^{\varphi} \boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{S}_{w}^{\varphi} \boldsymbol{w}}$$
(1)

其中 $w \in F$, $S_b^{\varphi}, S_w^{\varphi} \in F$ 中相应类间散布矩阵和类内散布 矩阵,即

$$\begin{aligned} \boldsymbol{S}_{b}^{\varphi} &= \frac{1}{c\left(c-1\right)} \sum_{i=1}^{c} \sum_{i=1}^{c} \left(\boldsymbol{u}_{i} - \boldsymbol{u}_{j}\right) \left(\boldsymbol{u}_{i} - \boldsymbol{u}_{j}\right)^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{S}_{w}^{\varphi} &= \frac{1}{c} \sum_{i=1}^{c} \frac{1}{m_{i}} \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_{i}} \left(\varphi(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{u}_{i}\right) \left(\varphi(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{u}_{i}\right)^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{u}_{i} &= \frac{1}{m_{i}} \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_{i}} \varphi(\boldsymbol{x}) \end{aligned}$$
(2)

根据再生核理论,最佳投影向量w可表示为

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \varphi(\boldsymbol{x}_i) \tag{3}$$

将式(3)代入式(1),并在运算中用核函数 $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 代替 **F** 空间 $\varphi(\mathbf{x}_i) \subseteq \varphi(\mathbf{x}_j)$ 的内积,即 $k_{i,j} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \langle \varphi(\mathbf{x}_i), \varphi(\mathbf{x}_j) \rangle$,则式(1)变为

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{K}_{b} \boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{K}_{w} \boldsymbol{\alpha}}$$
(4)

其中

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_{1}, \alpha_{2}, \cdots, \alpha_{m})^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{K}_{b} = \frac{1}{c(c-1)} \sum_{i=1}^{c} (\boldsymbol{M}_{i} - \boldsymbol{M}_{j}) (\boldsymbol{M}_{i} - \boldsymbol{M}_{j})^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{K}_{w} = \frac{1}{c} \sum_{i=1}^{c} \frac{1}{m_{i}} \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_{i}} (\boldsymbol{k}_{x} - \boldsymbol{M}_{i}) (\boldsymbol{k}_{x} - \boldsymbol{M}_{i})^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{M}_{i} = \frac{1}{m_{i}} \left(\sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_{i}} \boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}_{1}, \boldsymbol{x}), \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_{i}} \boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}_{2}, \boldsymbol{x}), \cdots, \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_{i}} \boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}_{m}, \boldsymbol{x}) \right)^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{k}_{x} = \left(\boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}_{1}, \boldsymbol{x}), \boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}_{2}, \boldsymbol{x}), \cdots, \boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}_{m}, \boldsymbol{x}) \right)^{\mathrm{T}}$$

$$(5)$$

本文称式(4)为核Fisher准则函数。由广义Rayleigh商的 性质^[8],式(4)的一组最优解可取 $K_w^{-1}K_b$ 的 d 个较大特征值所 对 应 的 特 征 向 量 $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_d$ (其 中 $\beta_i = (\beta_{i1}, \beta_{i2}, \dots, \beta_d)$ $(\beta_{im})^{\mathrm{T}}$),则一组最佳投影方向为 $\boldsymbol{w}_{i} = \sum_{j=1}^{m} \beta_{ij} \varphi(\boldsymbol{x}_{j}) (i = 1, j)$

2,…,*d*)。 核样本 *φ*(*x*) 在这些方向上作投影(见式(6)),投影 坐标便是 *x* 的判别特征。其物理意义是投影坐标所对应点的 总体类内距较小,类间距较大。

$$p_{w_i}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}_i^{\mathrm{T}} \varphi(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^m \beta_{ij} k(\boldsymbol{x}_j, \boldsymbol{x})$$
(6)

3 子空间基的确定

实际上,训练样本对应的核样本 $\varphi(\mathbf{x})$ 在**F**中所张成的 子空间 { $\varphi(\mathbf{x})$ }的维数等于核矩阵 $\mathbf{K} = (k_{ij})_{1 \le i,j \le m}$ 的秩r。一 般情况下有r << m。下面的问题是如何寻找子空间 { $\varphi(\mathbf{x})$ } 的一组基。文献[6,7]采用一种迭代算法选择少量样本,其对 应的核样本近似表达这组基。事实上,从线性代数的有关理 论考虑, { $\varphi(\mathbf{x})$ }的一组基是可以找到的,无须近似表达。下 面给出寻找子空间 { $\varphi(\mathbf{x})$ }基的理论推导。

定理 1 设 $\boldsymbol{x}_{b1}, \boldsymbol{x}_{b2}, \dots, \boldsymbol{x}_{bs} (1 \le s \le m)$ 表示 s 个训练样本, $\varphi(\boldsymbol{x}_{b1}), \varphi(\boldsymbol{x}_{b2}), \dots, \varphi(\boldsymbol{x}_{bs})$ 为其对应的特征样本, 对应的核矩阵记为 $\boldsymbol{K}_{ss} = (k(\boldsymbol{x}_{bi}, \boldsymbol{x}_{bj}))_{1 \le i, j \le s}$ 。则 $\varphi(\boldsymbol{x}_{b1}), \varphi(\boldsymbol{x}_{b2}), \dots, \varphi(\boldsymbol{x}_{bs})$ 线性无关 $\Leftrightarrow \det(\boldsymbol{K}_{ss}) \neq 0$ 。

证明 令 $B = [\varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \dots, \varphi(\mathbf{x}_{bs})]$,则 $\mathbf{K}_{ss} = \mathbf{B}^{\mathrm{T}} \mathbf{B}$, 故 rank(\mathbf{B}) = rank(\mathbf{K}_{ss})。又 $\varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \dots, \varphi(\mathbf{x}_{bs})$ 线性无 关 \Leftrightarrow rank(\mathbf{B}) = s,即 rank(\mathbf{K}_{ss}) = s,即 det(\mathbf{K}_{ss}) $\neq 0$ 。 证毕

定理 2 设 $\mathbf{x}_{b1}, \mathbf{x}_{b2}, \dots, \mathbf{x}_{bs}$ ($1 \le s \le m$) 表示 s 个训练样本, $\varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \dots, \varphi(\mathbf{x}_{bs})$ 为其对应的核样本且线性无关。 x 为任意一个训练样本,核样本为 $\varphi(\mathbf{x}) \circ \mathbb{U} \varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \dots, \varphi(\mathbf{x}_{bs}), \varphi(\mathbf{x})$ 线性无关 $\Leftrightarrow k_{xx} - \mathbf{K}_{sx}^{\mathrm{T}} \mathbf{K}_{sx}^{-1} \mathbf{K}_{sx} \neq 0 \circ \mathrm{Jrr} k_{xx} = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}), \mathbf{K}_{sx} = (k(\mathbf{x}_{b1}, \mathbf{x}), k(\mathbf{x}_{b2}, \mathbf{x}), \dots, k(\mathbf{x}_{bs}, \mathbf{x}))^{\mathrm{T}}, \mathbf{K}_{ss} = (k(\mathbf{x}_{bi}, \mathbf{x}), k(\mathbf{x}_{b2}, \mathbf{x}), \dots, k(\mathbf{x}_{bs}, \mathbf{x}))^{\mathrm{T}}, \mathbf{K}_{ss} = (k(\mathbf{x}_{bi}, \mathbf{x}), k(\mathbf{x}_{b2}, \mathbf{x}), \dots, k(\mathbf{x}_{bs}, \mathbf{x}))^{\mathrm{T}}$

由定理1以及行列式的性质易证定理2成立。根据上述 定理,采用一种自适应的迭代算法来寻求{ $\varphi(\mathbf{x})$ }的一组基。 基本思想是假设利用 $t(1 \le t \le m)$ 个样本{ \mathbf{x}_i } $_{i=1}^t$,完成了训 练,得到子空间{ $\varphi(\mathbf{x}_i)$ } $_{i=1}^t$ 的一组基 $\varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \cdots, \varphi(\mathbf{x}_{bs})$ 。对于新的样本**x**,依据定理2判定 $\varphi(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \cdots, \varphi(\mathbf{x}_{bs})$ 是否线性无关。如果无关,则令 $\varphi(\mathbf{x}_{b(s+1)}) = \varphi(\mathbf{x})$,构成一个新的线性无关组 $\varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \cdots, \varphi(\mathbf{x}_{bs}), \varphi(\mathbf{x}_{b(s+1)})$ 。当遍历所有训练样本时,所求的线性无关组 $\varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \cdots, \varphi(\mathbf{x}_{br})$ 即为子空间{ $\varphi(\mathbf{x})$ }的一组基。

利用定理 2 进行无关性判别时,存在对一个 ^s 阶矩阵 K_{ss} 的求逆运算。随着迭代算法的进行, ^s 可能逐渐增大, 求逆运算的计算量是相当大的。针对这个问题,本文提出一 种迭代算法,避免了求逆运算,降低了计算复杂度。

定理3 设线性无关组 $\varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \dots, \varphi(\mathbf{x}_{bs})$ 对应的核 矩 阵 为 \mathbf{K}_{ss} , $\varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \dots, \varphi(\mathbf{x}_{b(s-1)})$ 对应的核矩 阵 为 $\mathbf{K}_{s-1,s-1}$, 方 便 起 见, 令 $v = (k(\mathbf{x}_{b1}, \mathbf{x}_{bs}), k(\mathbf{x}_{b2}, \mathbf{x}_{bs}), \dots,$ $k(\pmb{x}_{b(s-1)}, \pmb{x}_{bs}))^{\mathrm{T}}$, $\Delta = k(\pmb{x}_{bs}, \pmb{x}_{bs})$, $D = \pmb{K}_{s-1,s-1}^{-1}$, M

$$\boldsymbol{K}_{ss}^{-1} = \frac{1}{\Delta - \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{D} \boldsymbol{v}} \begin{bmatrix} (\Delta - \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{D} \boldsymbol{v}) \boldsymbol{D} + \boldsymbol{D} \boldsymbol{v} \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{D} & -\boldsymbol{D} \boldsymbol{v} \\ -\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{D} & 1 \end{bmatrix}$$
(7)

由逆矩阵的定义易证定理 3 成立。由定理 3, 对s阶矩 阵 K_{ss} 的求逆运算转化为对s-1阶矩阵求逆,依次下去,求 逆运算变为乘法运算。结合定理 2,便可很方便地寻求子空 间 { $\varphi(\mathbf{x})$ }的一组基 $\varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \dots, \varphi(\mathbf{x}_{br})$ 。具体算法步骤如 下:

步骤 1 初始化: 在训练样本集 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ 任选 一样本 x,满足 $k(x, x) \neq 0 \Leftrightarrow S = \{x\}$, $H = \{x\}$, G = 1/(k(x, x)), t = 1。

步骤 2 如果 *t* = *m* ,则输出 *H* ,终止程序。否则,下 一步。

步骤3 在集合 $\overline{S} = X - S$ 中选择一个样本 x^* ,令 $S = S \cup \{x^*\}$, t = t+1;并验证式(8)成否成立

$$k_{tt} - \boldsymbol{K}_{st}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{K}_{st} = 0 \tag{8}$$

其中 $\overline{\boldsymbol{x}}_i \in \boldsymbol{H}$, $(\boldsymbol{K}_{st})_i = k(\overline{\boldsymbol{x}}_i, \boldsymbol{x}^*)$, $k_{tt} = k(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}^*)$ 。 步骤4 如果式(8)成立,返回步骤2; 否则令

 $\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H} \bigcup \{\boldsymbol{x}^*\},$

$$\boldsymbol{G} = \frac{1}{k_{tt} - \boldsymbol{K}_{st}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{K}_{st}} \begin{bmatrix} (k_{tt} - \boldsymbol{K}_{st}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{K}_{st}) \boldsymbol{G} + \boldsymbol{G} \boldsymbol{K}_{st} \boldsymbol{K}_{st}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G} & -\boldsymbol{G} \boldsymbol{K}_{st} \\ - \boldsymbol{K}_{st}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G} & 1 \end{bmatrix},$$

返回步骤2。

程序终止时,集合 H 中的向量所对应的核样本即为子 空间 { $\varphi(\mathbf{x})$ } 的一组基。

4 核 Fisher 判别分析的快速算法

假 定 通 过 上 述 算 法 获 得 一 组 基 $\varphi(\mathbf{x}_{b1}), \varphi(\mathbf{x}_{b2}), \cdots, \varphi(\mathbf{x}_{br})$, 则最佳投影向量可表达为

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{r} \alpha_{bi} \varphi(\boldsymbol{x}_{bi}) \tag{9}$$

将式(9)代入式(1)并整理得

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{\alpha}_{b}) = \frac{\boldsymbol{\alpha}_{b}^{\mathrm{T}} \overline{\boldsymbol{K}}_{b} \boldsymbol{\alpha}_{b}}{\boldsymbol{\alpha}_{b}^{\mathrm{T}} \overline{\boldsymbol{K}}_{w} \boldsymbol{\alpha}_{b}}$$
(10)

其中

$$\boldsymbol{\alpha}_{b} = (\alpha_{b1}, \alpha_{b2}, \cdots, \alpha_{br})^{\mathrm{T}}$$

$$\overline{\boldsymbol{K}}_{b} = \frac{1}{c(c-1)} \sum_{i=1}^{c} \sum_{j=1}^{c} (\overline{\boldsymbol{M}}_{i} - \overline{\boldsymbol{M}}_{j}) (\overline{\boldsymbol{M}}_{i} - \overline{\boldsymbol{M}}_{j})^{\mathrm{T}}$$

$$\overline{\boldsymbol{K}}_{w} = \frac{1}{c} \sum_{i=1}^{c} \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_{I}} (k_{x} - \overline{\boldsymbol{M}}_{i}) (k_{x} - \overline{\boldsymbol{M}}_{i})^{\mathrm{T}}$$

$$\overline{\boldsymbol{M}}_{i} = \frac{1}{m_{i}} \left(\sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_{i}} k(\boldsymbol{x}_{b1}, \boldsymbol{x}), \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_{i}} k(\boldsymbol{x}_{b2}, \boldsymbol{x}), \cdots, \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_{i}} k(\boldsymbol{x}_{br}, \boldsymbol{x}) \right)^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{k}_{x} = \left(k(\boldsymbol{x}_{b1}, \boldsymbol{x}), k(\boldsymbol{x}_{b2}, \boldsymbol{x}), \cdots, k(\boldsymbol{x}_{br}, \boldsymbol{x}) \right)^{\mathrm{T}}$$

$$(11)$$

由广义Rayleigh商的性质^[8],式(10)的最优解可取 $r \times r$ 矩阵 $\overline{K}_{w}^{-1}\overline{K}_{b}$ 的较大特征值对应的特征向量,其计算复杂度 仅为 $O(r^3)$ 。相比KFDA求解矩阵 $K_w^{-1}K_b$ 的特征值,计算量降低。特别m较大时,优势更加明显。设 $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_d$ 为式 (10)的一组最优解,其中 $\gamma_i = (\gamma_{i1}, \gamma_{i2}, \dots, \gamma_{ib})^{\mathrm{T}}$ 。根据式(10), 任意样本x所对应的核样本在 w_i 上的投影为

$$\overline{\boldsymbol{p}}_{\boldsymbol{w}_{i}}\left(\boldsymbol{x}\right) = \boldsymbol{w}_{i}^{\mathrm{T}}\varphi\left(\boldsymbol{x}\right) = \sum_{j=1}^{r} \gamma_{ij} k\left(\boldsymbol{x}_{bj}, \boldsymbol{x}\right)$$
(12)

其中 $\boldsymbol{w}_i = \sum_{j=1}^r \gamma_{ij} \varphi(\boldsymbol{x}_{bj})$ 。 样本 \boldsymbol{x} 的判别特征为 $\overline{\boldsymbol{p}}_{w_i}(\boldsymbol{x})$, ($i = 1, 2, \dots, d$)。称本节算法为核 Fisher 判别分析的快速算法 (Fast algorithm about Kernel Fisher Discriminant Analysis, FKFDA)。

5 实验分析

5.1 实验数据的描述

为了验证 FKFDA 的性能,本文从不同角度选取了 3 组 数据进行实验,并同 KFDA 进行比较。第一组数据是二维仿 真数据(记为 simulated data),第一类数据的产生方式为 $X = \{(x_{1i}, y_{1i})\},其中i = 1,2,...,400$, x_{1i}, y_{1i} 均服从方差 $\sigma = 0.5$ 均值 u = 0的正态分布; 第二类的产生方式为 $X = \{(x_{2i}, y_{2i})\},其中i = 1,2,...,400$, $x_{2i} = r_i \cos(\theta_i), y_{2i} =$ $r_i \sin(\theta_i)$ 。 r_i, θ_i 分别服从正态分布 $r_i - N(1.5, 0.2)$, $\theta_i - N(\pi$ /4,0.5)。其空间分布图见图 1(a)。第二组数据是分类实验 中常用的四维 Iris 数据。该数据是提取 3 种不同类别花瓣的 特征作为特征向量。共含 150 个样本,分三类, 每类 50 个 样本。每个样本 4 维。第三组数据采用 B-52,歼-6 和歼-7 三种飞机的缩比模型微波暗室转台数据(记为 Dark-room data)。目标的方位角变化范围为 0° - 155°,俯仰角恒为 5°, 平均方位角采样间隔为 0.43°。该数据是 101 维的,每类选 取 300 个数据用于实验。



5.2 实验结果分析

实验中,测试数据采用等间隔方式从全部实验数据中抽取,训练数据从剩余数据中等间隔选取。具体选取情况见表1,如表1的第3行,测试样本数为2×100,表示每类抽取100个用于测试,训练样本数为2×200,表示在测试样本抽取后的剩余样本中,每类选取200个用于训练,其他行的意义类似。实验中采用高斯核 $k(x,y) = \exp(-||x - y||^2 / \sigma^2)$ 作为核函数,参数 σ 是经验值。判别特征提取后,采用最小距离法进行识别。另外,在确定子空间的基时,考虑到计算误差的客观存在,我们把式(8)替换为 $k_t - K_{st}^{T}GK_{st} \leq \varepsilon$,本文

第29卷

| 表 1 FKFDA 与 KFDA 用于不同数据集的结果比较 | | | | | | | |
|-------------------------------|------------|------|----------------|----------------|-------|--------|------|
| 指标 | 9 | 基的个数 | 训练 | 测试 | | 只别率(%) | 识别 |
| 数据集 | σ^2 | | 样本数 | 样本数 | KFDA | FKFDA | 速度比 |
| Simulated data | 0.1 | 39 | 2×100 | 2×100 | 97.5 | 97 | 5.0 |
| | 0.1 | 49 | 2×200 | 2×100 | 98 | 98 | 9.34 |
| | 0.1 | 50 | 2×300 | 2×100 | 98 | 98.5 | 13.9 |
| Iris data | 0.2 | 35 | 3×20 | 3×20 | 95 | 95 | 1.55 |
| | 0.2 | 43 | 3×25 | 3×20 | 95 | 96.67 | 1.43 |
| | 0.2 | 46 | 3×30 | 3×20 | 96.67 | 96.67 | 1.79 |
| Darkroom data | 0.1 | 267 | 3×100 | 3×100 | 99.33 | 98 | 1.1 |
| | 0.1 | 338 | 3×150 | 3×100 | 99 | 98.67 | 1.25 |
| | 0.1 | 412 | 3×200 | 3×100 | 99 | 98.67 | 1.55 |

实验取 $\varepsilon = 0.1$ 。图1描绘的是当训练样本取400时,两种方 法对 simulated data 的分类曲线。表 1 列出了两种方法用于 不同数据集的各项指标比较。表1中识别速度比是指识别相 同的测试样本, KFDA 与 FKFDA 所花费的时间比。显然比 值越大,说明 FKFDA 相比于 KFDA,特征提取的速度越快。

从表1以及图1(b),1(c)可看出,FKFDA相比于KFDA, 它们的识别率几乎一致(小的差别主要是由于计算误差引起 的),说明 FKFDA 与 KFDA 提取的判别特征基本一样。从 基的个数,即训练样本在特征空间中所张成的子空间的维数 来看,数目远远小于训练样本数,原因在于特征空间中,核 样本间存在很强的相关关系。特别是随着训练样本的增多, 子空间的维数增加并不明显,说明这种相关关系更强。反映 到特征提取速度上,FKFDA 具有明显的优势,特别是训练 样本越多,优势越明显,这与训练样本在特征空间中所张成 的子空间的维数的变化趋势是一致的。

6 结束语

基于子空间 { $\varphi(\mathbf{x})$ } 的一组基,提出了一种 KFDA 的快 速算法—FKFDA。相比于 KFDA, 由于快速算法通过对训 练样本的筛选,找到训练样本对应的核样本 $\varphi(\mathbf{x})$ 在F中所 张成的子空间 { $\varphi(\mathbf{x})$ } 的一组基,将最佳投影方向 w 由这组基 线性表示,使得 KFDA 实现过程中需要进行特征值分解的矩 阵的阶数由 m (训练样本数)降低到 r (子空间 { $\varphi(\mathbf{x})$ } 的维 数),节省了存储空间,加快了特征提取的速度。同时,设计 出一种优化的迭代算法来寻求子空间 { $\varphi(\mathbf{x})$ } 的一组基,该 算法将求逆运算转化为乘法运算,计算量较小。

参考文献

Mika S, Ratsch G, and Jason G. Fisher discriminant analysis [1]

IEEE, Madison, WI, USA, 1999: 41-48.

Baudat G and Anouar F. Generalized discriminant analysis [2] using a kernel approach. Neural Computation, 2000, 12(10): 2385 - 2404

- [3] Tristrom C. Two variations on fisher's linear discriminant for patter recognition. IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2002, 24(2): 268-273.
- [4]Yang J, Frangi A F, and Yang J Y. A new kernel fisher discriminant algorithm with application to face recognition. Neural Computation, 2004, 56(4): 415-421.
- Liang Z Z H and Shi P F. An efficient and effective method to [5]solve kernel fisher discriminant analysis. Neural Computation, 2004, 61(1): 485-493.
- [6] Liu Q H and Lu H Q. Improving kernel Fisher discriminant analysis for face recognition. IEEE Trans. on Circuits and Systems for Video Technology, 2004, 14(1): 42-49.
- Baudat G and Anouar F. Kernel-based methods and function [7]approximation. Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks, Washington, DC, 2001: 1244 - 1249.
- [8] Bian Z H Q and Zhang X G. Matrix Theory. 2nd edition, Xi'an: Northwestern ploytechnical university Press, 2004: 262-288.
- 赵 峰. 男,1974年生,博士生,研究方向为雷达目标识别、智 能信息处理等.
- 张军英: 女,1961年生,博士,教授,博士生导师,目前主要从 事人工神经网络、智能信息处理、图像处理、分子成像、 计算生物信息学、模式识别、优化等方面的研究工作, 已发表学术论文 80 余篇.
- 梁军利: 男,1978年生,博士生,研究方向为阵列信号处理、自 适应滤波等.