软件学报 ISSN 1000-9825, CODEN RUXUEW
Journal of Software,2013,24(11):2656−2666 [doi: 10.3724/SP.J.1001.2013.04465]
©中国科学院软件研究所版权所有.
E-mail: jos@iscas.ac.cn
http://www.jos.org.cn
Tel/Fax: +86-10-62562563

等谱流形学习算法*

黄运娟, 李凡长

(苏州大学 计算机科学与技术学院,江苏 苏州 215006)

通讯作者: 黄运娟, E-mail: yjhuang@126.com, http://www.suda.edu.cn

摘 要: 基于谱方法的流形学习算法的目标是发现嵌入在高维数据空间中的低维表示.近年来,该算法已得到广泛的应用.等谱流形学习是谱方法中的主要内容之一.等谱流形学习源于这样的结论:只要两个流形的谱相同,其内部结构就是相同的.而谱计算难以解决的问题是近邻参数的选择以及如何构造合理邻接权.为此,提出了等谱流形学习算法(isospectral manifold learning algorithm,简称 IMLA).它通过直接修正稀疏重构权矩阵,将类内的判别监督信息和类间的判别监督信息同时融入邻接图,达到既能保持数据间稀疏重建关系,又能利用监督信息的目的,与 PCA 等算法相比具有明显的优势.该算法在 3 个常用人脸数据集(Yale,ORL,Extended Yale B)上得到了验证,这进一步说明了 IMLA 算法的有效性.

关键词: 谱方法;流形学习;等谱流形学习;稀疏表示

中图法分类号: TP181 **文献标识码**: A

中文引用格式: 黄运娟,李凡长.等谱流形学习算法.软件学报,2013,24(11):2656−2666. http://www.jos.org.cn/1000-9825/4465.htm

英文引用格式: Huang YJ, Li FZ. Isospectral manifold learning algorithm. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software, 2013,24(11): 2656−2666 (in Chinese). http://www.jos.org.cn/1000-9825/4465.htm

Isospectral Manifold Learning Algorithm

HUANG Yun-Juan, LI Fan-Zhang

(College of Computer Science and Technology, Soochow University, Suzhou 215006, China)

Corresponding author: HUANG Yun-Juan, E-mail: yjhuang@126.com, http://www.suda.edu.cn

Abstract: Manifold learning based on spectral method has been widely used recently for discovering a low-dimensional representation in the high-dimensional vector space. Isospectral manifold learning is one of the main contents of spectrum method. Isospectral manifold learning stems from the conclusions that if only the spectrums of manifold are the same, so are their internal structures. However, the difficult task about the calculation of the spectrum is how to select the optimal neighborhood size and construct reasonable neighboring weights. In this paper, a supervised technique called isospectral manifold learning algorithm (IMLA) is proposed. By modifying directly sparse reconstruction weight, IMLA takes into account the within-neighboring information and between-neighboring information. Thus, it not only preserves the sparse reconstructive relationship, but also sufficiently utilizes discriminant information. Compared with PCA and other algorithms, IMLA has obvious advantages. Experimental results on face databases (Yale, ORL and Extended Yale B) show the effectiveness of the IMLA method.

Key words: spectral method; manifold learning; isospectral manifold learning; sparse representation

随着信息化技术和互联网技术的飞速发展,人们收集信息的技术越来越强,信息资料中包含大量的高维数据.所以,如何从大量的高维数据中快速提取满足人们需求的低维数据,是人们关注的重要问题之一.目前,流形

* 基金项目: 国家自然科学基金(60970067, 61033013, 60775045); 东吴学者计划(14317360); 苏州大学国家预研基金(SDY2011 A25)

收稿时间: 2013-01-29; 修改时间: 2013-07-12, 2013-08-02; 定稿时间: 2013-08-27

© 中国科学院软件研究所 http://www.jos.org.cn

学习的谱方法是人们采用的主要方法.至于流形学习的谱方法的发展,则要追溯到 2000 年在《Science》上发表的 3 篇论文[1−3].经过几年的不断发展,流形学习的谱方法得到了迅猛的发展,涌现出大批流形学习的谱方法,典型的有等距映射算法(isometric mapping,简称 ISOMAP)[2]、局部线性嵌入(locally linear embedding,简称 LLE)[3]、拉普拉斯特征映射(Laplacian eigenmap,简称 LE)[4]、局部切空间算法(locality tangent space alignment,简称 LTSA)[5]等.它们都是通过求矩阵的最大(或最小)特征谱对应的特征向量捕获观测到的高维数据集的内在几何结构.这些算法虽然在某些数据集上能够取得很好的效果,但是却不能处理外样本问题[6],即当增加新的样本点时,不能快速提取新数据集的特征,必须重新计算.为了解决外样本问题,2003 年,He 等人提出了局部保持投影(locality preserving projection,简称 LPP)[7],其本质就是拉普拉斯特征映射 LE[4]的线性化;2005 年,He 等人又提出了邻域保持嵌入算法(neighborhood preserving embedding,简称 NPE)[8],其本质是局部线性嵌入 LLE[3]的线性化;2006 年,Fu 等人提出了局部嵌入分析(locally linear embedded eigenspace analysis,简称 LEA)[9],其本质也是对局部线性嵌入 LLE[3]的改进等.

等谱流形学习算法(isospectral manifold learning algorithm,简称 IMLA)主要来源于这样的结论[10]:只要两个流形的谱相同,它们的内部结构就是相同的.例如,同一个人在不同的年龄阶段、不同的光照、不同的面部表情等情况下,其谱值都是相等的.而谱计算最难解决的是如何构造合理邻接权以及近邻参数的选择.针对这个问题,有很多研究者提出了解决办法.例如:Zhang 等人在局部切空间排列算法 LTSA[5]的基础上提出了自适应流形学习(adaptive manifold learning)[11],首先给出一个标准,然后在这个标准之下,通过邻域收缩和邻域扩张的算法以自适应地得到邻域最优值;文献[12]提出了迭代的近邻算法,主要思想就是利用迭代的方法得到最优的近邻参数;文献[13]在单个目标函数中同时学习图与投影方向,并基于此设计了图优化的局部保持投影.这些算法大多通过迭代的算法求解最优的近邻参数,但会引发新的问题:迭代次数的选择,同时会使得算法的时间复杂度偏高.这些算法都需要大量的数据,文献[14]说明了如何利用外数据解决小样本问题.

稀疏保持投影(sparsity preserving projections,简称 SPP)[15]首次将稀疏表示[16]用到邻接图的构造的算法,它是基于稀疏表示建图,其近邻数通过稀疏约束自动产生,无须人为制订.与传统的 kNN 或εNN 构造图相比,稀疏表示构造图有如下优点:1) 无须人为制定近邻数.由于kNN 或εNN 使用一个预先给定的参数来决定所有样本的邻域,所以不能很好地表明流形结构;2) 对噪声有很好的鲁棒性.由于 kNN 或εNN 构造的图是基于欧式距离的,所以对数据噪声非常敏感,这就意味着当数据存在噪声的时候,图结构很容易被改变.然而文献[17]已经证明了稀疏表示对于噪声有很好的鲁棒性.简而言之,用稀疏表示构建的图具有自然的稀疏性和判别性、自动的局部性.虽然稀疏表示具有以上优点,但是稀疏表示本质上是一种完全无监督的算法,无法直接利用已知的样本标号信息,且文献[18]指出:具有最优分类效果的特征通常是由有监督学习算法得到的.所以,Gui 等人在 SPP 的基础上引入类内的判别监督信息,提出判别稀疏近邻保持嵌入(discriminant sparse neighborhood preserving embedding,简称 DSNPE)[19].该算法不仅保持了 SPP 的稀疏重构关系,而且充分利用了全局的判别结构,但是 DSNPE 只引入了类内的判别信息,并没有给出对类间判别信息的处理.本文提出的 IMLA 用稀疏表示构造邻接图并自动分配权值,这在一定程度上克服了传统局部算法近邻参数选择的困难.此外,类似于最大间距准则(maximum margin criterion,简称 MMC)[20],我们同时引入类内的判别监督信息和类间的判别监督信息,而且采用线性投影方法解决外样本问题.最后我们将对求解得到的特征值进行优化,这样就提高了算法的分类能力.

本文第 1 节介绍相关概念,包括谱方法、等谱及稀疏表示的概念.第 2 节基于类内和类间的判别信息提出等谱流形学习算法(IMLA).第 3 节通过实验说明 IMLA 的有效性.第 4 节是结论和展望.

1 相关概念

1.1 谱方法

在给出谱方法之前,我们首先给出谱的定义.

定义 1[21]. 如果对$\lambda\in R$,存在不恒为 0 的 $C^\infty s$ 形式ω,使得$\Delta\omega=\lambda\omega$,则称$\lambda$为对应于 s 形式的Δ的特征值,相应的ω称为对应于特征值λ的特征形式.特征值的全体(含重数)称为谱,记为 $spec(M,g)$.

© 中国科学院软件研究所 http://www.jos.org.cn

谱是一个趋于无穷的非负数的离散点集,其中每个数的重数是有限的,一般都是从小到大并按重数重复排列成有序点集.

谱方法[22]是数学领域里一种经典的数据分析方法,已广泛应用于高维数据的低维表示.已有的谱方法是建立在数据分析准则函数的基础上,通过搜索最佳分类使得准则函数达到最优,从而达到最优分类的目的.具体来说,谱方法首先将样本点看作是图中的顶点 V,用 kNN 或者 εNN 的方法构造邻接图;然后为顶点间的边 E 赋权值,常用的方法有热核(或高斯核)[4]、逆欧式距离[23]、局部线性重构系数[3],这样就建立一个与数据点一一对应的图 $G=(V,E)$;最后选择合适的特征向量进行映射,从而得到高维数据的低维嵌入.谱方法的计算步骤如图 1 所示,其中,k 为近邻数,d 为本质维数.

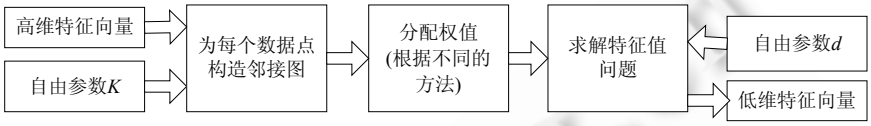


Fig.1 Calculate steps of spectral method

图 1 谱方法的计算步骤

1.2 等谱问题

在给出等谱的性质之前,我们先给出等谱的概念.

定义 2[21]. 设 M 是一个 n 维光滑流形,g 是 M 上一个光滑的二阶协变张量场,(M,g)是紧致连通的黎曼流形,M 上拉普拉斯算子Δ有离散谱:$spec(M,g)=\{0=\lambda_0\leqslant\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\ldots\}$.如果黎曼流形 $(\bar{M},\bar{g})$ 和(M,g)有相同的谱,即 $spec(\bar{M},\bar{g})=spec(M,g)$,则说 $(\bar{M},\bar{g})$ 和(M,g)是等谱的.

一般而言,流形的谱往往不能通过自身的特征值得到,反而是需要借助于求解其他流形的谱来获得.例如,要对一个人 40 岁时的人脸图像进行降维,采用谱方法求解其特征向量,往往可以间接求解其 30 岁时的人脸图像来获得.为了找到能够最好地保持数据局部特征的映射,我们定义其目标函数为

$$\arg\min_{\|f\|_{L^2(M)}=1}\int_M\|\nabla f(x)\|^2 \tag{1}$$

令 $Lf\overset{\text{def}}{=}-div\nabla(f)$ (L 为 Laplacian 矩阵),L 的全部特征值为$\lambda_1,\lambda_2,\ldots$,使得 $0=\lambda_0\leqslant\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\ldots$,并且令 f_i 为对应于特征值λ_i的特征函数.容易看到,f_0将流形映射为一个独立的点,我们要求嵌入映射f正交与f_0.λ_1称为第一特征值.许多数学家为估计λ_1做出了大量的努力,并得出λ_1是最优嵌入映射.

谱理论的一个基本问题是等谱的黎曼流形是否等距.我们知道,等距的流形必然等谱,反之则不然.1964 年,著名数学家 Milnor 曾构造出等谱而不是等距的 16 维平坦环面.目前,等谱问题主要是谱几何的反问题,即由谱值确定流形的几何性质,以及加上一定的条件以后,等谱可以导出等距.主要方法为利用热核的迹的渐近展开式.

利用微分几何的 Minakshisundarum-Pleijel-Gaffney 渐近展开定理[24],我们可以得到等谱流形的一些性质,也就由等谱给出了一些几何与拓扑性质.由此,我们得到下面的定理:

定理 1[21]. 设 $spec(M,g)=spec(\tilde{M},g)$,则 $\dim M=\dim\tilde{M}, vol\ M=vol\ \tilde{M}$.

证明:因为 $spec(M,g)=spec(\tilde{M},g)$,,故 $\lambda_i=\tilde{\lambda}_i, i=0,1,2,\ldots$

即 $(4\pi t)^{\frac{n}{2}}\sum_{i=0}^{+\infty}a_it^i\sim\sum_{i=0}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\lambda_it}=\sum_{i=0}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\tilde{\lambda}_it}\sim(4\pi t)^{\frac{\tilde{n}}{2}}\sum_{i=0}^{+\infty}\tilde{a}_it^i$.

由此可知:

$$\dim M=n=\tilde{n}=\dim\tilde{M},\ vol\ M=a_0=\tilde{a}_0=vol\ \tilde{M}.$$

换句话说,如果两个流形的谱相同,它们的内部几何结构就是相同的.因此,同一个人在不同的年龄阶段、不同的光照、不同的面部表情等情况下,其谱值都是相等的. □

© 中国科学院软件研究所 http://www.jos.org.cn

1.3 稀疏表示SR

稀疏表示[16]的基本思想是:在复杂的多维数据空间中,某个数据和现象可能只与大量潜在相关数据和现象中的很小一部分有密切的相关性.这就使得稀疏表示可能会大大简化多维问题的处理过程.因此,近年来,稀疏表示已经成为信号处理和模式识别邻域的研究热点.简单地说,稀疏表示就是将信号 $x\in R^M$ 分解为一系列基信号 $\{x_i\in R^M\}_{i=1}^n$ 的线性组合 $x\approx\sum_{i=1}^n s_i x_i$, 并希望尽可能多的系数 s_i 为 0.

设 $X=[x_1,x_2,\ldots,x_n]\in R^{M\times n}$ 为基信号矩阵,$s\in R^n$ 是重建稀疏向量,则稀疏表示严格的数学模型[25]如下:

$$\begin{cases}\min\limits_{s}\|s\|_0\\ \text{s.t.}\quad x=Xs\end{cases}\tag{2}$$

其中,$\|s\|_0$ 表示 s 的伪 L_0 范数,用于衡量 s 的稀疏性,等于 s 中非零元素的数目;s_{ij} 表示样本 x_j 对重构 x_i 的重构系数.然而,通常上式是非凸的,求解属于 NP 难问题.文献[17]表明:只要所求系数足够稀疏,最小化 L_0 范数的 NP 难题就可以转化为最小化 L_1 范数问题进行解决.所以在上式中,只需要将 L_0 范数替换成 L_1 范数:

$$\begin{cases}\min\limits_{s}\|s\|_1\\ \text{s.t.}\quad x=Xs\end{cases}\tag{3}$$

在实际问题中,样本可能受噪声污染,并且样本数通常不够充分,以至于约束 $x=Xs$ 不一定满足.此时,我们可以使用公式(3)的扩展形式:

$$\begin{cases}\min\limits_{s}\|s\|_1\\ \text{s.t.}\quad \|x-Xs\|<\varepsilon\end{cases}\tag{4}$$

这里,ε是误差范围.

2 等谱流形学习算法

在上一节中,我们得出这样的结论:只要两个流形的谱相同,它们的内部结构就是相同的.因此,在人脸识别中,只要我们计算的谱相同,我们就认为是同一个人.而谱计算最难解决的是如何构造合理邻接权以及近邻参数的选择.本节提出一种有效的谱流形学习算法——等谱流形学习算法(IMLA).该算法通过直接修正稀疏重构权矩阵,将类内的判别监督信息和类间的判别监督信息同时融入邻接图,达到既保持数据间稀疏重建关系,同时也能达到利用监督信息的目的.而且我们采用线性投影方法解决外样本问题,最后,我们将对求解得到的特征值进行优化,这样就提高了算法的分类能力.

2.1 等谱流形学习算法

假设数据集 $X=[x_1,x_2,\ldots,x_n]\in R^D$,样本 x_i 的类别标签为 $k\in\{1,2,\ldots,c\}$,第 k 类的样本的总数为 n_k.

等谱流形学习算法(IMLA)的目标是要找到最优的映射变换矩阵 W,将 R^D 空间的数据映射到一个相对低维的特征空间 $R^d(d<<D)$中.令映射函数为

$$y=W^Tx\tag{5}$$

一方面,为了刻画样本间的相似性,只用相同类别中的其他样本线性表示 x_i.

我们修改原始的稀疏表示模型[25]:

$$\begin{cases}\min\limits_{s_i^w}\|s_i^w\|_1\\ \text{s.t.}\quad x_i=X_k s_i^w\end{cases}\tag{6}$$

或者

$$\begin{cases}\min\limits_{s_i^w}\|s_i^w\|_1\\ \text{s.t.}\quad \|x-X_k s_i^w\|<\varepsilon\end{cases}\tag{7}$$

这里,X_k 是所有与 x_i 有相同标记的训练样本的集合; $s_i^w=[0,\ldots,0,s_{i,(n_1+\ldots+n_{k-1})+1}^w,\ldots,s_{i,i-1}^w,0,s_{i,i+1}^w,\ldots,s_{i,(n_1+\ldots+n_k)}^w,0,\ldots,0]^T$ 是

© 中国科学院软件研究所 http://www.jos.org.cn

样本 x_i 的类内稀疏重建系数.为了防止退化解,令 x_i 前的系数 $s_{i,i}^w$ 为 0.

另一方面,为了刻画样本间的差异性,只用不同类别中的样本线性表示 x_i.

我们修改原始的稀疏表示模型[25]:

$$\begin{cases}\min\limits_{s_i^b} \| s_i^b \|_1 \\ \text{s.t.} \quad x_i = X^k s_i^b\end{cases} \tag{8}$$

或者

$$\begin{cases}\min\limits_{s_i^b} \| s_i^b \|_1 \\ \text{s.t.} \quad \| x_i - X^k s_i^b \| < \varepsilon\end{cases} \tag{9}$$

这里, $X^k = [X_1,...,X_{k-1},X_{k+1},X_c] \in R^{n-n_k}$, 也就是不同于 x_i 类别的其他训练样本的集合; $s_i^b = [s_{i,1}^b,...,s_{i,(n_1+...+n_{k-1})}^b,0,...,0,s_{i,(n_1+...+n_k)+1}^b,...,s_{i,n}^b]$ 是样本 x_i 的类间稀疏重建系数.

为使相同类别的样本在投影后尽可能地靠近,不同类别的样本在投影之后尽可能地分离,我们定义为如下的多目标函数:

$$\begin{cases}\min\limits_{w} \sum\limits_i \| w^T x_i - w^T X s_i^w \|^2 \\ \max\limits_{w} \sum\limits_i \| w^T x_i - w^T X s_i^b \|^2\end{cases} \tag{10}$$

经过一系列的代数运算后[15],公式(10)可以转为如下的多目标函数:

$$\begin{cases}\min\limits_{w} tr(w^T X S_\alpha X^T w) \\ \max\limits_{w} tr(w^T X S_\beta X^T w)\end{cases} \tag{11}$$

其中,

$$S_\alpha = S_w + S_w^T - S_w^T S_w \tag{12}$$

$$S_\beta = S_b + S_b^T - S_b^T S_b \tag{13}$$

为了避免退化解,我们增加约束条件 $w^T XX^T w=I$,则公式(11)的多目标函数可以转化为如下形式:

$$\begin{cases}\min\limits_{w} tr(w^T (XS_\alpha X^T - \mu XS_\beta X^T) w) \\ \text{s.t.} \quad w^T XX^T w = I\end{cases} \tag{14}$$

其中,μ是一个非负常数的调和参数.问题(14)可通过广义特征值问题求解:

$$(XS_\alpha X^T - \mu XS_\beta X^T) w_i = \lambda_i XX^T w_i \tag{15}$$

于是,最优的映射变换矩阵 $W=[w_1,w_2,\ldots,w_d]$,其中,$w_i(i=1,\ldots,d)$为前 d 个最大特征值对应的特征向量.

由此概括等谱流形学习(IMLA)算法如下:

算法 1. 等谱流形学习算法(IMLA).

输入:数据集 $X=[x_1,x_2,\ldots,x_n]\in R^D$,样本 x_i 的类别标签为 $k\in\{1,2,\ldots,c\}$;特征维数 d.

输出:最优投影矩阵 W;嵌入矩阵 Y.

步骤 1. 将数据 X 投影到 PCA 的变换空间.不失一般性,仍然用 X 表示投影后的数据.

步骤 2. 基于公式(6)或公式(7)计算 S_w,并计算 $S_\alpha = S_w + S_w^T - S_w^T S_w$.

步骤 3. 基于公式(8)或公式(9)计算 S_b,计算 $S_\beta = S_b + S_b^T - S_b^T S_b$.

步骤 4. 求解广义特征值问题:$(XS_\alpha X^T - \mu XS_\beta X^T) w_i = \lambda_i XX^T w_i$.设$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_d$ 是$(XS_\alpha X^T - \mu XS_\beta X^T)$的前 d 个最大的特征值,$w_1,w_2,\ldots,w_d$ 是对应的特征向量.

步骤 5. 嵌入矩阵 $y=W^T X$,其中,最优投影矩阵 $W=[w_1,w_2,\ldots,w_d]$.

© 中国科学院软件研究所 http://www.jos.org.cn

2.2 时间复杂度分析

步骤 1 的时间复杂度也就是 PCA 的时间复杂度,故步骤 1 的时间复杂度也就是 $O(n^3)$.

步骤 2 的时间复杂度的分析如下:由文献[26]可知,稀疏问题的时间复杂度为

$$4kd^2/3+kdn+O(kn) \tag{16}$$

其中,k 为标准线性规划的迭代次数.

因此,步骤 2 的时间复杂度为

$$\sum_{i=1}^{n}(n_i(4kn^2/3+knn_i))+O(kn_c) \tag{17}$$

同理,步骤 3 的时间复杂度为

$$\sum_{i=1}^{c}(n_i(4kn^2/3+kn(n-n_i)))+O(k(n-n_c)) \tag{18}$$

假设在步骤 1 中保留的主成分个数为 q,则步骤 4 中的特征值分析的时间复杂度为 $O(q^3)$.

2.3 算法评价

本文得出的结论是:只要两个流形的谱相同,它们的内部结构就是相同的.而谱计算难以解决的问题是近邻参数的选择以及如何构造合理邻接权.由于用稀疏表示构建的图具有自然的稀疏性和判别性、自动的局部性[27],所以我们考虑采用稀疏表示构建邻接图.但是,稀疏表示是一种完全无监督的算法,即使在监督学习问题(如人脸识别)中,也无法有效利用标号数据提高的监督信息.所以,本文考虑通过直接修正稀疏重构权矩阵,并将类内的判别监督信息和类间的判别监督信息同时融入邻接图,这样就能保持数据间稀疏重建关系,同时也能达到利用监督信息的目的.

综上所述,等谱流形学习(IMLA)具有以下优点:

1) IMLA 是全局降维算法,但是相对于其他全局降维算法(如 PCA,ISOMAP),IMLA 能够通过稀疏约束隐含地自动捕捉数据的局部结构,这样就将全局算法的优点(简单、高效)和局部算法的优点(可以建模数据的分布结构)结合起来了.
2) IMLA 具有线性降维算法的优点,从而解决了流形学习算法带来的外样本问题.
3) IMLA 通过直接修正稀疏重构权矩阵,将类内的判别监督信息和类间的判别监督信息同时融入邻接图,既能保持数据间稀疏重建关系,又能达到利用监督信息的目的.这样就把稀疏表示的优越性和判别信息的优越性结合到一起了.

3 实验结果

为了验证 IMLA 的有效性,分别在 3 个常用的人脸数据集(Yale,ORL 和 Extended Yale B)上系统地与 PCA 算法[28]、LPP 算法[7]、NPE 算法[8]、SPP 算法[15]、DSNPE 算法[19]进行了对比实验.

3.1 数据集描述

用稀疏表示建图,其近邻数通过稀疏约束自动产生,无须人为制订,但是稀疏表示建图也存在缺点——对人脸 pose 变化敏感,故在实验部分,我们仅仅选择包含光照和表情变化的正面人脸图像 Yale,ORL,Extended YaleB 数据集.

① Yale:此数据集[29]包括 15 个人的 165 张人脸图像,每人 11 张.这 11 幅图像分别在不同的光照、面部表情等条件下获取.在我们的实验中,每张图像数字化为 32×32 的像素矩阵,其灰度被归一化至单位区间.

② ORL:此数据集[30]包括 40 个人的人脸图像,每人 10 幅图像.这 10 幅图像分别拍摄于不同时间和光照条件下,具有不同的表情和面部细节.在我们的实验中,每张图像数字化为 32×32 的像素矩阵,其灰度被归一化至单位区间.

③ Extended Yale B:此数据集[31]包括 38 个人的 2 414 幅正面人脸图像,其中每人大约 64 张.这些图像均在

© 中国科学院软件研究所 http://www.jos.org.cn

实验室控制光照的条件下拍摄.在我们的实验中,每张图像数字化为 32×32 的像素矩阵,其灰度被归一化至单位区间.

图 2 显示了上述 3 个数据集的部分人脸图像.

(a) Yale 数据集中某个人的 11 幅人脸图像

(b) ORL 数据集中某个人的 10 幅人脸图像

(c) Extended Yale B 数据集中某个人的部分人脸图像

Fig.2

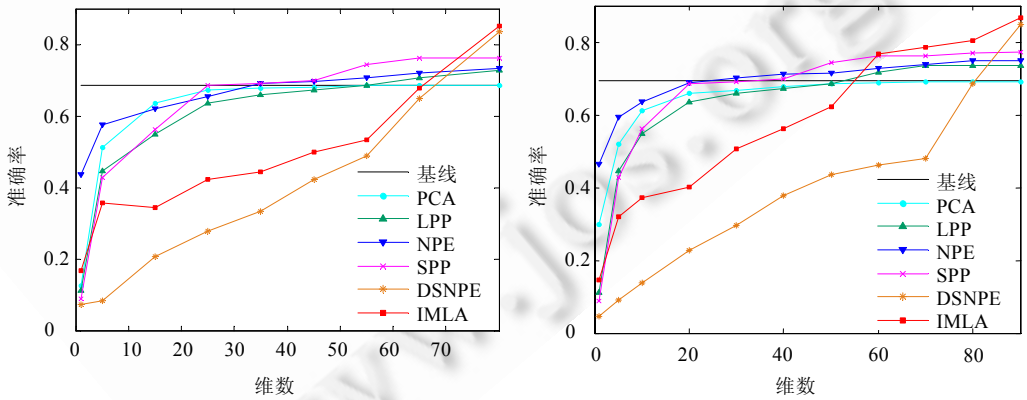
图 2

3.2 实验设置

在 Matlab 2010b 编程工具下实现了本文算法.实验的硬件环境为 Intel® Core™ i3 3.0GHz,3.0GB 内存.由于不同的训练样本个数对实验结果有一定的影响,因此本文实验对 Yale 和 ORL 数据集,每个人分别随机选取 5 幅、6 幅图像组成训练样本,剩下的作为测试样本;对 Extended Yale B 数据集,每个人分别随机选取 20 幅、30 幅图像组成训练样本,其余的作为测试样本.实验重复执行 10 轮,将平均精度作为最终的性能度量.

3.3 实验结果

所有实验结果均基于最近邻分类器.虽然最近邻分类器很难分清来自不同类的相近样本,且文献[32]针对该问题也做了改进,考虑到最近邻分类器的简单性,本文还是采用最近邻分类器.此外,为了加快算法运行,我们在 ORL 和 Extended Yale B 数据集上利用 PCA 保留训练样本集 98%的主成分.图 3~图 5 给出了在 Yale,ORL 和 Extended Yale B 数据集上,各种方法在不同子空间维数的识别率曲线.

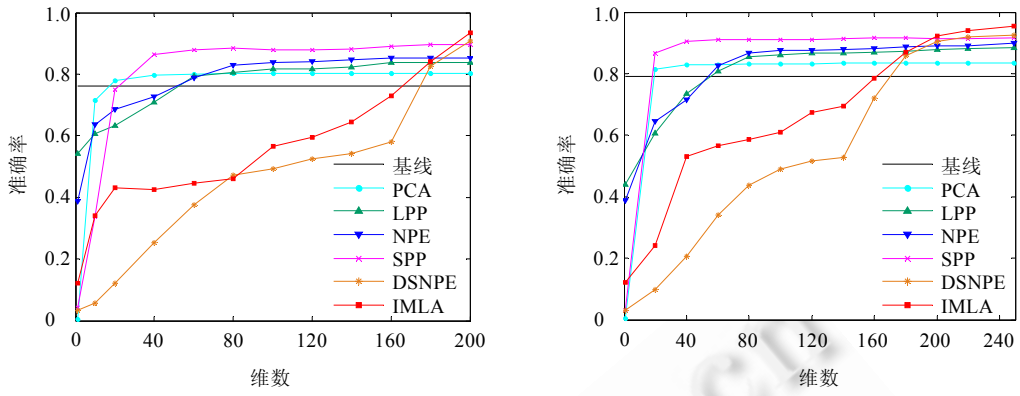


(a) 5 train (b) 6 train

Fig.3 Recognition rate vs. dimension based on different methods on Yale dataset

图 3 Yale 数据集上的不同方法在不同维数下的识别率

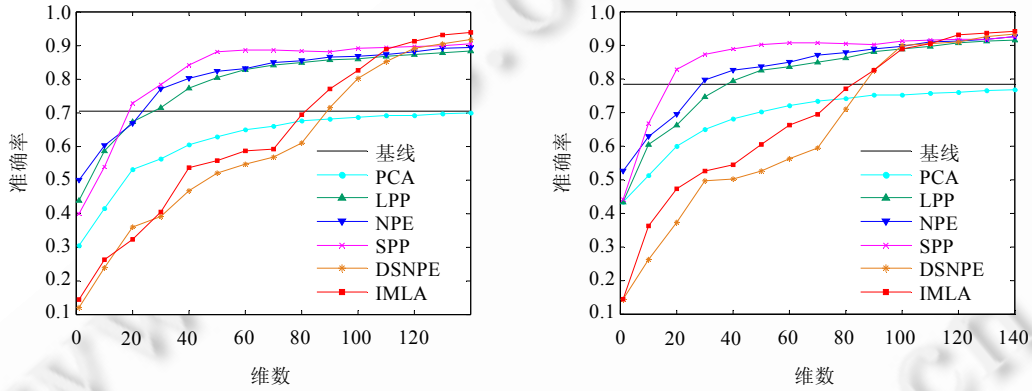
© 中国科学院软件研究所 http://www.jos.org.cn



(a) 5 train (b) 6 train

Fig.4 Recognition rate vs. dimension based on different methods on ORL dataset

图 4 ORL 数据集上的不同方法在不同维数下的识别率



(a) 20 train (b) 30 train

Fig.5 Recognition rate vs. dimension based on different methods on Extended Yale B dataset

图 5 Extended Yale B 数据集上的不同方法在不同维数下的识别率

表 1 给出了所有方法对应不同训练样本数所达到的最高识别率及所对应的子空间维数.

Table 1 Best recognition rates based on different methods on different datasets

表 1 不同数据集上的不同方法的最好识别率

方法	Yale				ORL				Extended Yale B			
	5 train		6 train		5 train		6 train		20 train		30 train	
	准确率	维数	准确率	维数	准确率	维数	准确率	维数	准确率	维数	准确率	维数
基线	0.684 4	1 024	0.693 3	1 024	0.761 0	1 024	0.790 6	1 024	0.703 8	1 024	0.781 7	1 024
PCA	0.684 4	69	0.693 3	69	0.803 3	137	0.835 6	199	0.699 3	137	0.767 9	137
LPP	0.726 7	71	0.736 7	72	0.838 0	158	0.883 5	222	0.881 6	131	0.915 7	138
NPE	0.732 9	71	0.749 2	78	0.853 0	182	0.898 7	228	0.893 2	131	0.924 2	132
SPP	0.762 7	74	0.772 0	89	0.895 5	179	0.915 9	239	0.904 1	139	0.924 7	137
DSNPE	0.835 3	74	0.850 0	89	0.908 0	199	0.926 9	239	0.917 3	139	0.931 7	137
IMLA	**0.851 7**	74	**0.866 7**	89	**0.935 5**	199	**0.946 2**	239	**0.937 0**	139	**0.942 0**	137

© 中国科学院软件研究所 http://www.jos.org.cn

3.4 实验分析

通过上述实验结果可以看出:

1) PCA 是所有算法中最简单的,但是相对于其他算法,它通常获得较差的识别率.
2) IMLA 的性能比 LPP 和 NPE 要好,而且没有任何自由参数需要调整.原因是,IMLA 使用稀疏表示构建邻接图,而用稀疏表示构建图具有自然的稀疏性和判别性、自动的局部性,不仅保存了数据的全局信息,而且兼顾了数据的几何结构.
3) 随着子空间维数的增加,IMLA 的平均识别率不断增加.当子空间维数超过某个阈值时,IMLA 的分类性能总是好于其他算法.原因是,IMLA 引入了线性思想和类别信息所具有的良好子空间判别能力,能够保证在投影之后的低维空间中,相同类别的样本尽可能地靠近、不同类别的样本之间能够分离,从而提高了分类性能.
4) 在子空间维数较低时,IMLA 的性能要低于其他 5 种算法.原因是,子空间维数越低,原始图像信息丢失得越多,从图像中提取的对分类有用的信息就越少;同时,子空间维数越小,用于构造相同类别样本点的信息和用于构造不同类别样本点的信息就越有可能会彼此交叠.但即使这样,最好结果对应的子空间维数 $d_{\max}<<D$,所以我们可以花费较低的内存空间来获得更好的识别率.
5) 训练样本数目越多,算法的识别性能越好.原因是训练样本数目越多,得到的映射空间越具有广泛性,因此,待识别的新样本被映射到该空间时就越容易被归类到正确的类别中去.

4 总结与展望

综上所述,本文的结论主要是:只要两个流形的谱相同,它们的内部结构就是相同的.因此,在人脸识别中,只要我们计算的谱相同,我们就认为是同一个人.而谱计算最难解决的是如何构造合理邻接权以及近邻参数的选择.本文提出的等谱流形学习算法通过直接修正稀疏重构权矩阵,将类内的判别监督信息和类间的判别监督信息同时融入邻接图,达到既能保持数据间稀疏重建关系,又能达到利用监督信息的目的;而且,我们采用线性投影方法解决外样本问题,最后,我们将对求解得到的特征值进行优化,这样就提高了算法的分类能力.这样,我们就从全局的观点得到了合理的近邻参数以及邻接权.最后,在 3 个常用人脸数据集(Yale,ORL,Extended Yale B)上的实验验证了本文提出的等谱流形学习算法(IMLA)要优于其他算法.

等谱学习问题是一个很复杂的问题,还有许多问题需要进一步研究,如等谱的映射学习问题、等谱的嵌入学习问题、等谱特征拓扑计算问题等.今后我们将进一步开展这些研究工作.

References:

[1] Seung HS, Lee DD. The manifold ways of perception. Science, 2000,290(5500):2268−2269. [doi: 10.1126/science.290.5500.2268]

[2] Tenenbaum J, Von De Silva, Langford J. A global geometric framework for nonlinear dimension reduction. Science, 2000, 290(5500):2319−2323. [doi: 10.1126/science.290.5500.2319]

[3] Roweis S, Saul L. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. Science, 2000,290(5500):2323−2326. [doi: 10.1126/science.290.5500.2323]

[4] Belkin M, Niyogi P. Laplacian eigenmaps for dimensionality reduction and data representation. Neural Computation, 2003,15(6): 1373−1396. [doi: 10.1162/089976603321780317]

[5] Zhang Z, Zha H. Principal manifolds and nonlinear dimensionality reduction via tangent space alignment. SIAM Journal of Scientific Computing, 2004,26(1):313−338. [doi: 10.1137/S1064827502419154]

[6] Bengio Y, Paiement JF, Vincent P, Delalleau O, Le Roux N, Ouimet M. Out-of-Sample extensions for LLE, isomap, MDS, eigenmaps, and spectral clustering. In: Proc. of the Advances in Neural Information Processing Systems16 (NIPS 2003). 2004. 177−184.

[7] He XF, Niyogi P. Locality preserving projections. In: Proc. of the Neural Information Processing Systems (NIPS). 2003.

© 中国科学院软件研究所 http://www.jos.org.cn

[8] He XF, Cai D, Yan SC, Zhang HJ. Neighborhood preserving embedding. In: Proc. of the IEEE Int'l Conf. on Computer Vision (ICCV). 2005. [doi: 10.1109/ICCV.2005.167]

[9] Fu Y, Huang TS. Graph embedded analysis for head pose estimation. In: Proc. of the IEEE Int'l Conf. on Automatic Face and Gesture Recognition. 2006. [doi: 10.1109/FGR.2006.60]

[10] Li FZ, Zhang L, Yang JW, Qian XP, Wang BJ, He SP. Lie Group Machine Learning. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2013 (in Chinese).

[11] Zhang ZY, Wang J, Zha HY. Adaptive manifold learning. IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2012,34(2): 253−265. [doi: 10.1109/TPAMI.2011.115]

[12] Timofte R, Van Gool L. Iterative nearest neighbors for classification and dimensionality reduction. In: Proc. of the IEEE Conf. on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). 2012. [doi: 10.1109/CVPR.2012.6247960]

[13] Zhang LM, Chen SC, Qiao LS. Graph optimization for dimensionality reduction with sparsity constraints. Pattern Recognition, 2012,45(3):1205−1210. [doi: 10.1016/j.patcog.2011.08.015]

[14] Zhu XF, Huang Z, Yang Y, Shen HT, Xu CS, Luo JB. Self-Taught dimensionality reduction on the high-dimensional small-sized data. Pattern Recognition, 2013,46:215−229. [doi: 10.1016/j.patcog.2012.07.018]

[15] Qiao LS, Chen SC, Tan XY. Sparsity preserving projections with applications to face recognition. Pattern Recognition, 2010,43(1): 331−341. [doi: 10.1016/j.patcog.2009.05.005]

[16] Chen SSB, Donoho DL, Saunders MA. Atomic decomposition by basis pursuit. Siam Review, 2001,43(1):129−159. [doi: 10.1137/S003614450037906X]

[17] Wright J, Yang A, Sastry S, Ma Y. Robust face recognition via sparse representation. IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2009,31(2):210−227. [doi: 10.1109/TPAMI.2008.79]

[18] Sergios T, Konstantinos K. Pattern Recognition. Beijing: Electronic Industrial Publishing House, 2006 (in Chinese).

[19] Gui J, Sun ZA, Jia W, Hu RX, Lei YK, Ji SW. Discriminant sparse neighborhood preserving embedding for face recognition. Pattern Recognition, 2012,45(8):2884−2893. [doi: 10.1016/j.patcog.2012.02.005]

[20] Li HF, Jiang T, Zhang KS. Efficient and robust feature extraction by maximum margin criterion. IEEE Trans. on Neural Networks, 2006,17(1):157−165. [doi: 10.1109/TNN.2005.860852]

[21] Xu SL, Xue CH, Hu ZS, Jin YD. Modern Differential Geometry—Spectral Theory and Isospectral Problem, Curvature and Topological Invariants. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2009 (in Chinese).

[22] Ng AY, Jordan MI, Weiss Y. On spectral clustering: Analysis and an akorithm. In: Proc. of the Advances in NIPs 14. Cambridge: MIT Press, 2001. 849−856.

[23] Cortes C, Mohri M. On transductive regression. In: Proc. of the Advances in Neural Information Processing Systems. 2007. 305−312.

[24] Berger M, Gauduchon P, Mazet E, Le spectre d'une variété riemannienne. Lecture Notes in Mathematics, 1971,194:204−216.

[25] Huang K, Aviyente S. Sparse representation for signal classification. In: Proc. of the Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS). 2006.

[26] Donoho DL, Tsaig Y. Fast solution of ℓ_1-norm minimization problems when the solution may be sparse. IEEE Trans. on Information Theory, 2008,54(11):4789−4812. [doi: 10.1109/TIT.2008.929958]

[27] Jebara T, Wang J, Chang S. Graph construction and *b*-matching for semisupervised learning. In: Proc. of the Int'l Conf. on Machine Learning (ICML). 2009.

[28] Mardia KV, Kent JT, Bibby JM. Multivariate Analysis. New York: Academic Press, 1979.

[29] Belhumeur PN, Hespanha JP, Kriegman DJ. Eigenfaces vs. fisherfaces: Recognition using class specific linear projection. IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 1997,19(7):711−720. [doi: 10.1109/34.598228]

[30] Samaria FS, Harter AC. Parameterisation of a stochastic model for human face identification. In: Proc. of the Workshop on Applications of Computer Vision. 1994.

[31] Dogandzic A, Qiu K. Automatic hard thresholding for sparse signal reconstruction from NDE measurement. Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation, 2010,29:806−813. [doi: 10.1063/1.3362486]

© 中国科学院软件研究所 http://www.jos.org.cn

[32] Liu ZG, Pan Q, Dezert J. A new belief-based *K*-nearest neighbor classification method. Pattern Recognition, 2013,46(3):834−844. [doi: 10.1016/j.patcog.2012.10.001]

附中文参考文献:

[10] 李凡长,张莉,杨季文,钱旭培,王邦军,何书萍.李群机器学习.合肥:中国科学技术大学出版社,2013.

[18] Sergios T, Konstantinos K.模式识别.北京:电子工业出版社,2006.

[21] 徐森林,薛春华,胡自胜,金亚东.近代微分几何——谱理论与等谱问题、曲率与拓扑不变量.合肥:中国科学技术大学出版社,2009.

黄运娟(1989－),女,江苏连云港人,硕士生,主要研究领域为机器学习.
E-mail: yjhuang@126.com

李凡长(1964－),男,教授,博士生导师,CCF高级会员,主要研究领域为人工智能,机器学习,认知软件.
E-mail: lfzh@suda.edu.cn

© 中国科学院软件研究所 http://www.jos.org.cn