

# 一种新的基于 MMC 和 LSE 的监督流形学习算法

袁 睿<sup>1</sup> 程 雷<sup>2</sup> 朱然刚<sup>3</sup> 雷迎科<sup>3</sup>

**摘 要** 针对局部样条嵌入算法 (Local spline embedding, LSE) 存在样本外点学习和无监督模式学习问题, 本文提出了一种新颖的正交局部样条判别投影算法 (O-LSDP). 该算法通过引入明确的线性映射关系, 构建平移缩放模型, 以及正交化特征子空间, 从而使该算法能够应用于模式分类问题并显著改善了算法的分类识别能力. 在标准人脸数据库和植物叶片数据库上的实验结果验证了该算法的有效性与可行性.

**关键词** 局部样条嵌入, 最大边缘准则, 特征提取, 流形学习

**引用格式** 袁睿, 程雷, 朱然刚, 雷迎科. 一种新的基于 MMC 和 LSE 的监督流形学习算法. 自动化学报, 2013, 39(12): 2077–2089

**DOI** 10.3724/SP.J.1004.2013.02077

## A New Supervised Manifold Learning Algorithm Based on MMC and LSE

YUAN Min<sup>1</sup> CHENG Lei<sup>2</sup> ZHU Ran-Gang<sup>3</sup> LEI Ying-Ke<sup>3</sup>

**Abstract** In order to circumvent the two major shortcomings of the original local spline embedding (LSE) algorithm, i.e., out-of-sample and unsupervised learning, we proposed a novel feature extraction algorithm called orthogonal local spline discriminant projection (O-LSDP). By introducing an explicit linear mapping, constructing different translation and resealing models for different classes as well as orthogonality feature subspace, the O-LSDP not only inherits the advantages of LSE which uses local tangent space as a representation of the local geometry so as to preserve the local structure, but also makes full use of class information and orthogonal subspace to significantly improve the discriminant power. Experimental results on standard face databases and plant leaf data set demonstrate the feasibility and effectiveness of the proposed algorithm.

**Key words** Local spline embedding (LSE), maximum margin criterion, feature extraction, manifold learning

**Citation** Yuan Min, Cheng Lei, Zhu Ran-Gang, Lei Ying-Ke. A new supervised manifold learning algorithm based on MMC and LSE. *Acta Automatica Sinica*, 2013, 39(12): 2077–2089

流形学习方法假定输入数据是嵌入在高维观测空间的低维流形上, 其目标是寻找高维观测数据中所隐藏的低维流形结构, 代表性的流形学习方法包括等距特征映射算法 (Isometric feature mapping, ISOMAP)<sup>[1]</sup>、局部线性嵌入算法 (Locally linear embedding, LLE)<sup>[2]</sup>、Hessian 特征映射算法 (Hessian-based locally linear embedding, HLLE)<sup>[3]</sup>、Laplacian 特征映射算法 (Laplacian

cian eigenmaps, LE)<sup>[4]</sup>、最大差异展开算法 (Maximum variance unfolding, MVU)<sup>[5]</sup>、局部切空间排列算法 (Local tangent space alignment, LTSA)<sup>[6]</sup>、黎曼流形学习算法 (Riemannian manifold learning, RML)<sup>[7]</sup>、局部样条嵌入算法 (Local spline embedding, LSE)<sup>[8]</sup>、弹性嵌入算法 (Elastic embedding, EE)<sup>[9]</sup> 和柯西图嵌入算法 (Cauchy graph embedding, CGE)<sup>[10]</sup> 等. 尽管流形学习方法在模式识别、机器学习、数据挖掘和图像处理等研究领域受到了广泛的关注, 并得到了一些成功的应用<sup>[11–14]</sup>, 但是, 当它们面临模式识别与分类任务时, 不可避免地会暴露其自身的局限性: 1) 样本外点学习. 原始的流形学习算法对数据进行维数约简或特征提取都是建立在训练样本集的基础上, 即仅仅产生一个隐含的非线性映射将训练样本集从高维观测空间映射到低维流形空间, 而并不能产生一个显式的映射函数关系. 因此, 对于新的测试样本, 无法获得其在低维空间的投影. 为了让流形学习方法更好地应用于模式识别任务, 研究人员通过线性化、核化和张量化来提高流形学习的样本外点学习能力<sup>[15]</sup>. He 等对 Lapl-

收稿日期 2012-01-09 录用日期 2013-03-27

Manuscript received January 9, 2012; accepted March 27, 2013  
国家自然科学基金 (61272333, 61273302, 61005010), 安徽省自然科学基金 (1208085MF94, 1208085MF98, 1308085MF84) 资助

Supported by National Natural Science Foundation of China (61272333, 61273302, 61005010), Natural Science Foundation of Anhui Province (1208085MF94, 1208085MF98, 1308085MF84)

本文责任编辑 于海斌

Recommended by Associate Editor YU Hai-Bin

1. 合肥学院网络与智能信息处理重点实验室 合肥 230601 2. 总参陆航部驻北京地区军事代表室 北京 100101 3. 电子工程学院 合肥 230037

1. Key Laboratory of Network and Intelligent Information Processing, Hefei University, Hefei 230601 2. (PLA) General Staff Department Pursuit Group of the Military Representative Bureau, Beijing 100101 3. Electronic Engineering Institute, Hefei 230037

acian 特征映射算法 (LE) 进行线性化处理, 提出了局部保持投影算法 (Locality preserving projection, LPP)<sup>[16]</sup>, 其实质是通过对数据流形上的 Laplacian-Beltrami 算子的特征函数进行线性近似, 从而获得高维输入空间到低维流形的显式映射关系. Kokiopoulou 等在局部线性嵌入算法 (LLE) 中引入明确的线性映射关系, 提出了正交近邻保持投影 (Orthogonal neighborhood preserving projections, ONPP)<sup>[17]</sup>; Choi 等结合 ISOMAP 和核方法提出了 KISOMAP 流形学习算法<sup>[18]</sup>. 孟德宇等以 ISOMAP 方法的内在运行机理为出发点, 推导出高维流形空间与低维表示空间之间双向的显式映射函数关系<sup>[19]</sup>. 很显然, 流形学习的线性化扩展相对于核化和张量化扩展而言, 具有实现简单和计算代价小等特点, 因而获得了更广泛的应用. 2) 无监督模式学习. 因为原始的流形学习算法是无监督模式学习, 因而在实际应用中不能有效地利用样本的先验知识来提高算法的分类识别能力. 如何运用已知的诸如样本的类别等先验信息, 更好地处理模式识别与分类问题, 是流形学习的一个重要研究方向. 近年来, 许多监督流形学习算法相继被提出来. Pan 和 Ridder 等分别使用带有样本类别信息指导的欧氏距离和凸轮加权距离来改善 LLE 算法的判别能力, 从而提出了加权局部线性嵌入算法 (Weighted LLE, WLLE)<sup>[20]</sup> 和监督局部线性嵌入算法 (Supervised LLE, SLLE)<sup>[21]</sup>; Geng 等设计了一种融入样本类别信息的不相似性度量来构造 ISOMAP 的近邻图, 提出了监督等距特征映射算法 (Supervised ISOMAP, SISOMAP)<sup>[22]</sup>. 这些监督流形学习算法的基本思想是利用样本的先验知识来指导构建有监督的近邻图, 然后利用流形学习方法进行低维嵌入. 这些方法能够获得较好的分类识别性能, 但是这种监督性构图往往会将近邻图分割成多个互不相连的子图, 从而给原始流形学习算法的最终应用带来了很大的不便.

受局部样条嵌入算法 (LSE)<sup>[8]</sup> 和最大边缘准则 (Maximum margin criterion, MMC)<sup>[23]</sup> 的启发, 我们提出了一种新的正交局部样条判别投影 (Orthogonal local spline discriminant projection, O-LSDP) 算法用于监督流形学习. O-LSDP 首先通过局部主分量分析计算每个样本点局部邻域在切空间上的投影以获得该邻域所有样本的局部坐标, 从而保持低维流形的局部几何结构信息; 然后构造明确的线性映射关系去近似 Sobolev 空间上的一组样条函数, 把每个样本点的局部坐标映射成全局唯一的低维坐标, 从而实现从高维观测空间到低维特征空间的线性映射. 作为一种监督流形学习算法, O-LSDP 算法从两个方面来提高原始 LSE 算法的分类识别能力: 一是寻求一种线性映射关系, 使其在

保持数据流形局部几何结构的同时满足 MMC 准则的最大化类间平均边缘; 二是通过寻找低维嵌入空间的正交基向量来进一步改进算法的判别能力. 与原始的 LSE 算法相比, O-LSDP 算法有以下几点不同:

1) O-LSDP 算法寻求一个显式的从输入观测空间到低维特征空间的线性映射关系, 而 LSE 算法不能产生一个明确的映射关系, 因此, 对于新的测试样本, LSE 算法无法获得其在低维嵌入空间的投影.

2) O-LSDP 算法尝试在保持流形局部几何结构的同时, 有效利用样本的类别信息以提高原始 LSE 算法的分类识别能力.

3) O-LSDP 算法通过求解正交化的特征子空间来提取最优的分类特征.

## 1 相关研究工作

### 1.1 最大边缘准则 (MMC)

MMC 算法<sup>[23]</sup> 基于最大化类间平均边缘来寻找最优的线性子空间. 令  $S_w$  和  $S_b$  分别表示样本的类内散度矩阵和类间散度矩阵:

$$S_w = \sum_{i=1}^c \sum_{j=1}^{n_i} (x_j^i - m_i)(x_j^i - m_i)^T \quad (1)$$

$$S_b = \sum_{i=1}^c n_i (m_i - m)(m_i - m)^T \quad (2)$$

其中,  $c$  是样本类别数,  $m$  是总的样本均值向量,  $m_i$  是第  $i$  类样本的均值向量,  $n_i$  表示第  $i$  类样本数,  $x_j^i$  表示第  $i$  类的第  $j$  个样本. MMC 算法在投影矩阵  $W$  下的目标函数可以表示为

$$J(W) = \text{tr}\{W^T(S_b - S_w)W\} \quad (3)$$

在  $W$  列向量为单位向量的约束条件下, MMC 算法所对应的最优  $W$  可通过求解下面的特征方程获得:

$$(S_b - S_w)w = \lambda w \quad (4)$$

与线性判别分析 (Linear discriminant analysis, LDA) 算法相比, MMC 算法不需要对类内散度矩阵求逆, 因此在提高算法计算效率的同时, 有效避免了小样本问题.

### 1.2 局部样条嵌入算法 (LSE)

对于嵌入在高维输入空间的低维流形, 局部样条嵌入算法 (LSE) 首先通过主分量分析计算每个样本点局部邻域在切空间上的投影以获得该邻域所有样本的局部坐标, 从而保持流形的局部几何结构; 然后从所有这些有交叠的局部坐标系统出发, 采用 Sobolev 空间的一组样条函数把每个样本点的局部

坐标映射成全局唯一的低维坐标. LSE 算法包含以下三个步骤:

1) 选取邻域

对于每个样本点  $x_i$ , 采用  $k$ -NN 准则确定其邻域:  $X_i = [x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_k}] \in \mathbf{R}^{D \times k}$ .

2) 局部切空间投影

LSE 算法在每个样本点  $x_i$  处由其  $k$  近邻  $X_i$  来构造局部切空间, 即对中心化的局部邻域  $X_i$  执行奇异值分解:

$$X_i H_k = U_i \begin{bmatrix} \Sigma_i \\ 0_{(D-k) \times k} \end{bmatrix} V_i^T, \quad i = 1, \dots, n \quad (5)$$

其中,  $H_k = I - e_k e_k^T / k$  是中心化算子,  $I$  是  $k \times k$  的单位矩阵,  $e_k$  是元素全为 1 的  $k$  维列向量,  $e_k = [1, 1, \dots, 1]^T \in \mathbf{R}^k$ .  $\Sigma_i = \text{diag}\{\sigma_1, \dots, \sigma_k\}$  是对角化矩阵, 包含中心化局部邻域矩阵  $X_i H_k$  的  $k$  个按降序排列的奇异值.  $U_i \in \mathbf{R}^{D \times D}$  和  $V_i \in \mathbf{R}^{k \times k}$  分别为  $X_i$  的左右奇异向量矩阵. 因此邻域  $X_i$  的局部切空间投影  $\Theta_i = [\theta_1^{(i)}, \theta_2^{(i)}, \dots, \theta_k^{(i)}]$ ,  $i = 1, \dots, n$  可表示为

$$\Theta_i = (\tilde{U}_i)^T X_i H_k = \tilde{\Sigma}_i (\tilde{V}_i)^T = [\theta_1^{(i)}, \theta_2^{(i)}, \dots, \theta_k^{(i)}] \quad (6)$$

其中,  $\theta_j^{(i)}$  是样本点  $x_i$  第  $j$  个近邻的局部切空间坐标,  $\tilde{U}_i \in \mathbf{R}^{D \times d}$  和  $\tilde{V}_i \in \mathbf{R}^{k \times d}$  由  $U_i$  和  $V_i$  的前  $d$  个列向量组成,  $\tilde{\Sigma}_i = \text{diag}\{\sigma_1, \dots, \sigma_d\}$  包含矩阵  $X_i H_k$  的  $d$  个最大奇异值. 注意, 式 (5) 和式 (6) 中隐含着  $D \geq k \geq d$ .

3) 排列全局坐标

对于第  $i$  个局部切空间投影  $\Theta_i$ , 假设  $Y_i = [y_{i_1}, y_{i_2}, \dots, y_{i_k}] \in \mathbf{R}^{d \times k}$  包括  $\Theta_i$  中  $k$  个样本点的全局低维坐标, 而且  $[y_{i_1}^{(r)}, y_{i_2}^{(r)}, \dots, y_{i_k}^{(r)}]$  表示  $Y_i$  的第  $r$  行坐标分量, 我们构建  $d$  个样条函数  $g_i^{(r)}: \mathbf{R}^d \mapsto \mathbf{R}$ ,  $r = 1, 2, \dots, d$ , 使得:

$$y_{i_j}^{(r)} = g_i^{(r)}(\theta_j^{(i)}), \quad j = 1, 2, \dots, k \quad (7)$$

在式 (7) 中, 我们知道  $y_{i_j}^{(r)}$  和  $g_i^{(r)}$  均是未知的, 因此求解  $g_i^{(r)}$  的问题是一个不适定问题, 为使式 (7) 有解, 所求的样条函数不仅要满足式 (7) 的要求, 而且重构误差能够明确地由  $Y_i$  表示. Xiang 等<sup>[8]</sup> 发现在 Sobolev 空间的样条函数能够满足我们的需求. 现在我们的目标是构造  $d$  个样条函数  $g_i^{(1)}, \dots, g_i^{(d)}$ , 使下面正则化重构误差达到极小:

$$E(Y_i) = \sum_{r=1}^d \sum_{j=1}^k (y_{i_j}^{(r)} - g_i^{(r)}(\theta_j^{(i)}))^2 + \lambda \sum_{r=1}^d J_s^d(g_i^{(r)}) \quad (8)$$

其中,  $\lambda > 0$  是正则化参数,  $J_s^d(g_i^{(r)})$  控制样条函数  $g_i^{(r)}$  在  $d$  维空间的光滑程度, 具体定义见文献 [8, 24]. Duchon 等<sup>[24]</sup> 证明在一定的约束条件下, Sobolev 空间中具有如下形式的样条函数  $g(t)$  能够使式 (8) 的正则化重构误差达到极小:

$$g(t) = \sum_{i=1}^l \beta_i p_i(t) + \sum_{j=1}^k \alpha_j \varphi_j(t), \quad r = 1, 2, \dots, d \quad (9)$$

其中,  $l = (d + s - 1)! / (d!(s - 1)!)$ ,  $\{p_i(t)\}_{i=1}^l$  是  $\mathbf{R}^d$  空间的多项式集合,  $\phi_j(t)$  是格林函数<sup>[24]</sup>.

$$\phi_j(t) = \begin{cases} (\|t - t_j\|)^{2s-d} \times \log(\|t - t_j\|), & d \text{ 是偶数} \\ (\|t - t_j\|)^{2s-d}, & d \text{ 是奇数} \end{cases} \quad (10)$$

为了使式 (8) 的解具有唯一性, 我们给出如下边界约束:

$$\sum_{j=1}^k \alpha_j p_i(\theta_j) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, l \quad (11)$$

现在, 根据式 (10) 和式 (11), Sobolev 空间中的  $d$  个样条函数  $g_i^{(1)}, \dots, g_i^{(d)}$  的系数向量  $\alpha^r = [\alpha_1^r, \alpha_2^r, \dots, \alpha_l^r]^T \in \mathbf{R}^l$  和  $\beta^r = [\beta_1^r, \beta_2^r, \dots, \beta_k^r]^T \in \mathbf{R}^k$ ,  $r = 1, 2, \dots, d$  能够通过下面的线性方程组来求解:

$$A_i \times \begin{pmatrix} \alpha^1, \dots, \alpha^d \\ \beta^1, \dots, \beta^d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y_i^T \\ 0 \end{pmatrix} \quad (12)$$

其中

$$A_i = \begin{pmatrix} K & P \\ P^T & 0 \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{(k+l) \times (k+l)} \quad (13)$$

$K$  是元素为  $K_{st} = \phi(\|\theta_s^{(i)} - \theta_t^{(i)}\|)$  的  $k \times k$  对称阵,  $P$  是元素为  $P_{ts} = p_s(\theta_t^{(i)})$  的  $k \times l$  矩阵.

为了使重构误差  $E(Y_i)$  能够明确地由  $Y_i$  表示, 对式 (8) 作如下近似:

$$E(Y_i) \approx \sum_{r=1}^d \sum_{j=1}^k (y_{i_j}^{(r)} - g_i^{(r)}(\theta_j^{(i)}))^2 + \lambda \sum_{r=1}^d (\alpha^r)^T K \alpha^r \quad (14)$$

如果  $\lambda$  足够小, 可以忽略式 (14) 右边的第一项, 因此有:

$$E(Y_i) \propto \sum_{r=1}^d (\alpha^r)^T K \alpha^r = \text{tr}(Y_i B_i Y_i^T) \quad (15)$$

其中,  $B_i$  是由  $A_i^{-1}$  的左上角  $k \times k$  元素组成的子矩阵. 计算所有样本的重构误差, 即:

$$E(Y) = \sum_{i=1}^n \text{tr}(Y_i B_i Y_i^T) \quad (16)$$

设  $S_i \in \mathbf{R}^{n \times k}$  是满足  $Y S_i = Y_i$  的 0-1 选择矩阵, 则式 (16) 可以转化为

$$E(Y) = \text{tr}(Y S B S^T Y^T) = \text{tr}(Y M Y^T) \quad (17)$$

其中,  $S = [S_1, \dots, S_n]$ ,  $B = \text{diag}\{B_1, \dots, B_n\}$ ,  $M = S B S^T$ .

为了防止出现退化解, 我们通过对  $Y$  加上标准化约束  $Y Y^T = I$ , 那么全局最优的低维嵌入  $Y$  由  $M$  的第 2 至第  $d+1$  个最小特征值所对应的特征向量组成.

## 2 正交局部样条判别投影 (O-LSDP)

针对原始的 LSE 算法存在样本外点学习问题和分类性能差的缺点, 本节提出了一种有监督的 LSE 算法 - 正交局部样条判别投影算法 (O-LSDP). 该方法在 LSE 算法的基础上, 通过引入类别信息和正交化投影子空间来提高 LSE 算法的分类性能.

### 2.1 O-LSDP 算法动机

LSE 算法作为一种无监督的流形学习方法, 能够有效挖掘嵌入在高维观测空间的低维流形结构. 它是一种有效的数据可视化方法, 但显然不是一种最优的面向分类的特征提取方法. 下面通过一个例子来说明这一点. 图 1 是应用 LSE 算法对一个植物叶片图像数据集进行 2 维嵌入的结果. 该数据集是由瑞典植物叶片数据库 (Swedish leaf database)<sup>[25]</sup> 的第 1 类和第 3 类共 150 幅叶片图像 (每类 75 幅) 构成, 对每幅图像进行预处理并归一化为 32 像素  $\times$  32 像素大小的灰度图. 在图 1 中, 左右两边分别列举了每类 9 张代表性的叶片图像. 从可视化的角度来看, 这两类数据的 2 维嵌入结果具有良好的流形分布; 从分类的角度来看, 我们不难发现 2 维嵌入结果被粗略地划分为两大部分, 其中星形表示一类, 圆形表示另一类, 但是这两类当中有部分数据相互混叠在一起. 这表明 LSE 算法在保持流形局部几何结构时强调数据自然的聚类, 但所提取的特征并不是叶片分类最优的投影方向.

为了改进原始 LSE 算法的分类识别能力, 提出 O-LSDP 监督流形学习算法. 一方面在保持流形局部几何结构的同时, O-LSDP 算法利用样本的类别信息, 指导不同的类构建不同的平移和缩放因子, 从而使同类样本拉得更近而不同类样本分得更开. 下面继续使用图 1 的例子来说明这一点. 图 2 显示了

经过平移和缩放变换后 LSE 的 2 维嵌入结果, 从图 2 中我们发现经过平移和缩放变换后, 同类数据之间拉得更近而不同类数据之间分得更远, 从而明显提高了数据的可分性.

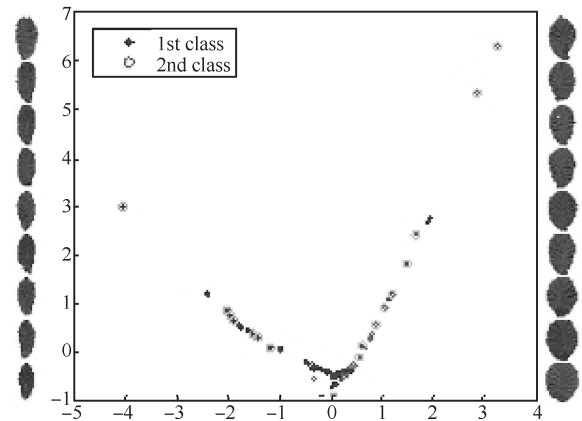


图 1 基于 LSE 的植物叶片数据集的 2 维嵌入结果

Fig. 1 Two-dimensional embedding of plant leaf images by LSE

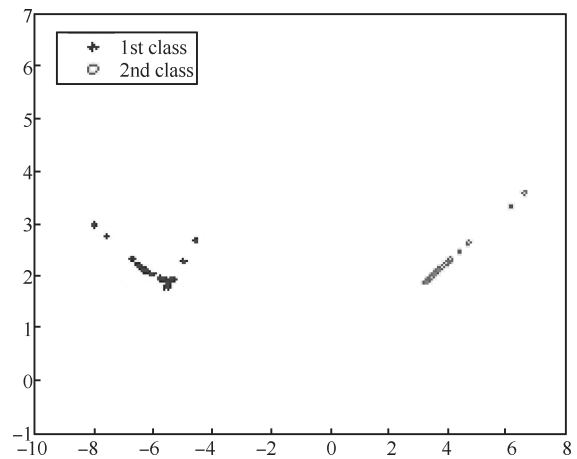


图 2 经过平移和缩放变换后 LSE 的 2 维嵌入结果

Fig. 2 Two-dimensional embedding of plant leaf images after translation and rescaling

通过上面的分析发现, 构建合适的平移和缩放模型能够显著改进算法的分类识别能力. 然而在实际应用中如何对每类样本选择不同的平移和缩放因子是一个公开的问题. 为了解决这个问题, 本文拟采用最大边缘准则 (MMC) 为每类样本寻找最优的平移和缩放模型. 图 3 为基于 MMC 准则寻找最优的平移和缩放模型后 LSE 的 2 维嵌入结果. 从图中可以看出, 基于 MMC 准则的 LSE 算法能够完全正确地区分两类植物叶片图像.

另一方面, 我们发现基于 MMC 准则的 LSE 算法求解的低维特征子空间并不是正交的, Ye 等证明了正交化投影子空间可以改善算法的分类能力<sup>[26]</sup>.

因此拟通过正交化低维特征子空间来消除数据的噪声影响, 以进一步提高算法的分类性能 (图 4).

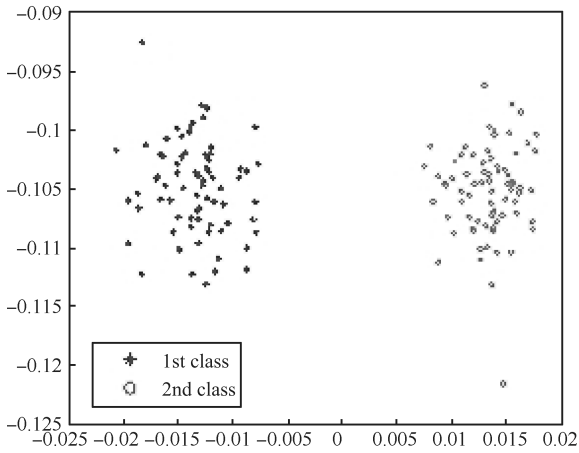


图 3 基于 MMC 准则寻找平移和缩放模型后 LSE 的 2 维嵌入结果

Fig. 3 Two-dimensional embedding of plant leaf images after translation and rescaling based on MMC

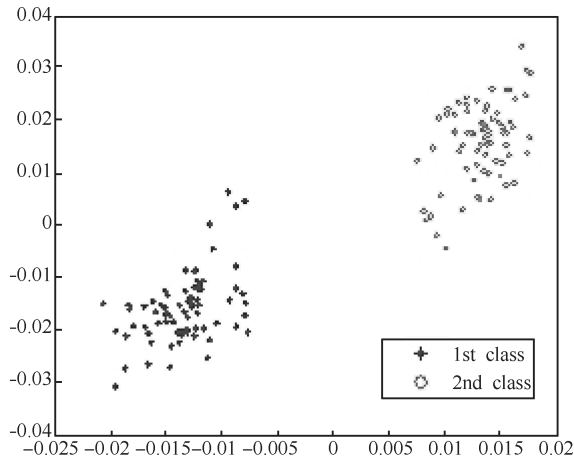


图 4 正交化特征子空间后的 2 维嵌入结果

Fig. 4 Two-dimensional embedding of plant leaf images after orthogonalizing the feature subspace

## 2.2 O-LSDP 算法推导

### 2.2.1 线性化 LSE 算法

为了解决 LSE 算法的样本外点学习问题, 构造显式的从输入高维观测样本  $X$  到输出低维嵌入  $Y$  的线性映射关系, 即  $Y = V^T X$ . 因此, 原始的 LSE 算法目标函数式 (17) 转变为下面的形式:

$$J_1(Y) = \min \text{tr}(YMY^T) = \min \text{tr}(V^T XMX^T V) \quad (18)$$

一旦线性变换矩阵  $V$  确定, 新的样本点在低维特征空间的投影问题就迎刃而解. 我们称该算法为

线性化 LSE 算法 (Linearized LSE, LLSE). 考虑一个新的测试样本  $x_i$ , 其在低维特征空间的投影可表示为

$$y_t = V^T x_t$$

### 2.2.2 最优的线性判别投影

基于上面的分析知道, 线性化 LSE 算法 (LLSE) 目标是尽可能地保持近邻所确定的局部几何结构. 为了获得更好的分类性能, 引入 MMC 准则来构建最优的平移和缩放模型, 使得 LLSE 算法在单位化约束条件下, 保持 LSE 局部几何结构的同时, 能够拥有 MMC 准则提供的判别能力, 即:

$$\begin{cases} \min \text{tr}\{V^T XMX^T V\} \\ \max \text{tr}\{V^T (S_b - S_w)V\} \end{cases} \quad (19)$$

s.t.  $V^T X X^T V = I$

式 (19) 的约束多目标优化问题旨在寻找一个既能使 LSE 的重构误差最小, 又能同时最大化类间平均边缘的线性变换, 对式 (19) 进行线性化操作:

$$\begin{aligned} & \min \text{tr}\{V^T (XMX^T - \beta(S_b - S_w))V\} \\ & \text{s.t. } V^T X X^T V = I \end{aligned} \quad (20)$$

其中,  $\beta \in [0, 1]$  是尺度因子. 使用 Lagrangian 乘子法, 得:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial V} \text{tr} \{V^T (XMX^T - \beta(S_b - S_w))V - \\ & \lambda (V^T X X^T V - I)\} = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

式 (21) 可转化为求解下面的广义特征值问题:

$$(XMX^T - \beta(S_b - S_w))v = \lambda X X^T v \quad (22)$$

其中,  $\lambda$  是广义特征方程式 (22) 的特征值,  $v$  是其特征向量.

假设  $v_1, v_2, \dots, v_d$  是广义特征对  $(XMX^T - \beta(S_b - S_w), X X^T)$  的前  $d$  个最小特征值所对应的特征向量, 那么使目标函数式 (20) 达到极小化的线性变换矩阵可表示为

$$V = [v_1, v_2, \dots, v_d] \quad (23)$$

我们称这种新的线性子空间方法为局部样条判别投影算法 (Local spline discriminant projection, LSDP). 注意在实际应用中, 经常会碰到小样本 (Small sample size, SSS) 问题, 因此导致  $X X^T$  是奇异的, 为了避免出现该问题, 我们需要对数据进行主成分分析 (Principal component analysis, PCA) 预处理, 将数据投影到 PCA 子空间并选取合适的投影维度, 使得  $X X^T$  非奇异.

### 2.2.3 正交化特征向量

由式 (22) 所求解的广义特征向量是非正交的, 采用一种新的方法来正交化低维特征子空间以消除噪声影响, 从而进一步提高算法的分类识别能力. 我们把该算法称之为正交局部样条判别投影 (Orthogonal local spline discriminant projection, O-LSDP). 注意这里所给出的推导过程受到 Duchene 等工作的启发<sup>[27]</sup>.

令  $L = XM X^T - \beta(S_b - S_w)$ , O-LSDP 算法目标是通过求解下面的优化问题来找到一组正交基向量  $v_1, v_2, \dots, v_d$ :

$$\begin{aligned} & \min \operatorname{tr}\{V^T L V\} \\ & \text{s.t. } v_1^T v_2 = v_1^T v_3 = \dots = v_{d-1}^T v_d = 0 \\ & v_1^T X X^T v_1 = v_2^T X X^T v_2 = \dots = \\ & v_d^T X X^T v_d = 1 \end{aligned} \quad (24)$$

容易验证,  $v_1$  是广义特征值方程  $Lv = \lambda X X^T v$  的最小特征值所对应的特征向量. 为了获得第  $k$  个正交基向量  $v_k$ , 需要极小化下面的目标函数:

$$\begin{aligned} & \min\{v_k^T L v_k\} \\ & \text{s.t. } v_1^T v_k = v_2^T v_k = \dots = v_{k-1}^T v_k = 0 \\ & v_k^T X X^T v_k = 1 \end{aligned} \quad (25)$$

使用 Lagrangian 乘子法来求解上面的优化问题, 即:

$$\begin{aligned} J_k = & v_k^T L v_k - \lambda(v_k^T X X^T v_k - 1) - \\ & \mu_1 v_1^T v_k - \dots - \mu_{k-1} v_{k-1}^T v_k \end{aligned}$$

令  $\frac{\partial J_k}{\partial v_k} = 0$ , 我们有:

$$2L v_k - 2\lambda X X^T v_k - \mu_1 v_1 - \dots - \mu_{k-1} v_{k-1} = 0 \quad (26)$$

将式 (26) 左边乘以  $v_k^T$ , 得到:

$$2v_k^T L v_k - 2\lambda v_k^T X X^T v_k = 0 \quad (27)$$

然后将式 (26) 左边分别乘以  $v_1^T (X X^T)^{-1}, \dots, v_{k-1}^T (X X^T)^{-1}$ , 得到如下  $k-1$  个方程:

$$\begin{aligned} \mu_1 v_1^T (X X^T)^{-1} v_1 + \dots + \mu_{k-1} v_{k-1}^T (X X^T)^{-1} v_{k-1} &= \\ 2v_1^T (X X^T)^{-1} L v_k & \\ \mu_1 v_2^T (X X^T)^{-1} v_2 + \dots + \mu_{k-1} v_{k-1}^T (X X^T)^{-1} v_{k-1} &= \\ 2v_2^T (X X^T)^{-1} L v_k & \\ \dots & \\ \mu_1 v_{k-1}^T (X X^T)^{-1} v_1 + \dots + & \\ \mu_{k-1} v_{k-1}^T (X X^T)^{-1} v_{k-1} = 2v_{k-1}^T (X X^T)^{-1} L v_k & \end{aligned} \quad (28)$$

定义  $w_{k-1} = [\mu_1, \dots, \mu_{k-1}]^T$ ,  $V_{k-1} = [v_1, \dots, v_{k-1}]$ , 以及  $Q_{k-1} = V_{k-1}^T (X X^T)^{-1} V_{k-1}$ , 则式 (28) 可表示成矩阵形式:

$$Q_{k-1} w_{k-1} = 2V_{k-1}^T (X X^T)^{-1} L v_k$$

那么

$$w_{k-1} = 2Q_{k-1}^{-1} V_{k-1}^T (X X^T)^{-1} L v_k \quad (29)$$

现在将式 (26) 左边乘以  $(X X^T)^{-1}$ , 得到:

$$\begin{aligned} 2(X X^T)^{-1} L v_k - 2\lambda v_k - \mu_1 (X X^T)^{-1} v_1 - \dots - \\ \mu_{k-1} (X X^T)^{-1} v_{k-1} = 0 \end{aligned} \quad (30)$$

上式用矩阵形式表示为

$$2(X X^T)^{-1} L v_k - 2\lambda v_k - (X X^T)^{-1} V_{k-1} w_{k-1} = 0 \quad (31)$$

结合式 (29), 上式可表示为

$$\begin{aligned} \{I - (X X^T)^{-1} V_{k-1} Q_{k-1}^{-1} V_{k-1}^T\} \times \\ (X X^T)^{-1} L v_k = \lambda v_k \end{aligned} \quad (32)$$

由式 (27) 可知,  $\lambda = \frac{v_k^T L v_k}{v_k^T X X^T v_k}$  正是所要优化的目标函数值, 极小化式 (25) 等价于使式 (32) 的特征值  $\lambda$  取最小值. 令:

$$R_k = \{I - (X X^T)^{-1} V_{k-1} Q_{k-1}^{-1} V_{k-1}^T\} (X X^T)^{-1} L \quad (33)$$

因此, 所要求的第  $k$  个正交基向量  $v_k$  即是  $R_k$  的最小特征值所对应的特征向量.

### 2.3 O-LSDP 算法步骤

根据上面的分析, 本文提出的 O-LSDP 算法主要步骤归纳如下:

**步骤 1.** 对每个样本点  $x_i$ , 通过 KNN 标准确定其  $k$  个近邻点  $X_i = [x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_k}]$ .

**步骤 2.** 计算中心化邻域  $X_i H_k$  的  $d$  个左奇异向量矩阵  $U_i$ , 并按式 (6) 计算邻域  $X_i$  的局部切空间坐标  $\Theta_i$ .

**步骤 3.** 根据式 (13) 计算矩阵  $A_i$ .

**步骤 4.** 按照如下局部求和的方式计算样条排列矩阵  $M$ :

$$M(I_i, I_i) \leftarrow M(I_i, I_i) + B_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

其中,  $M$  初始化为零矩阵,  $I_i = \{i_1, \dots, i_k\}$  表示样本  $x_i$  的  $k$  个近邻对应的下标索引集合,  $B_i$  是  $A_i^{-1}$  左上角  $k \times k$  的子矩阵.

**步骤 5.** 将数据集  $X$  投影到 PCA 子空间  $X_{\text{PCA}} = V_{\text{PCA}}^T X$ .

**步骤 6.** 计算矩阵  $X_{\text{PCA}} M X_{\text{PCA}}^T$ .

**步骤 7.** 计算样本集  $X_{\text{PCA}}$  的类间散度矩阵  $S_b$ 、类内散度矩阵  $S_w$  以及它们的差值  $S_b - S_w$ .

**步骤 8.** 根据式 (32) 计算特征子空间的  $d$  个正交基向量  $V = [v_1, v_2, \dots, v_d]$ , 并获得样本集  $X$  在  $d$  维正交特征子空间的投影  $Y = V^T X_{\text{PCA}}$ .

### 2.3.1 O-LSDP 算法计算复杂度

O-LSDP 算法的计算复杂度主要与样本个数  $n$ 、输入空间维数  $D$ 、近邻数  $k$  和本征维数  $d$  等参数有关, 在表 1 中,  $l$  表示样条函数中多项式个数. 近邻图构造、排列矩阵操作和求解特征子空间的正交基向量这三部分是 O-LSDP 算法的主要时间开销. 表 1 列举了 O-LSDP 算法主要操作的计算复杂度.

表 1 O-LSDP 算法的计算复杂度

Table 1 The computational complexity of O-LSDP

计算过程	计算复杂度
构造近邻图	$O(Dn \log n)$
计算矩阵 $XM X^T$	$O(n(k+l)^3) + O(Dn^2 + D^2n)$
求解 $d$ 个正交基向量 $V = [v_1, v_2, \dots, v_d]$	$O(dn^3)$

## 3 实验结果

为了评估正交局部样条判别投影算法 (O-LSDP) 的有效性和分类能力, 本文在 2 个不同的人脸数据库: Yale database<sup>1</sup>、Olivetti research laboratory (ORL) database<sup>2</sup> 和 1 个植物叶片数据库: ICL-PlantLeaf database<sup>3</sup> 上进行了大量实验. 为了更好地分析实验结果, 在人脸数据库上将提出的 O-LSDP 算法与传统子空间降维方法: 最大边缘准则 (MMC)<sup>[23]</sup>、线性判别分析 (LDA)<sup>[28]</sup> 以及基于流形学习的算法: 监督局部保持投影 (Supervised locality preserving projection, SLPP)<sup>[29]</sup>、监督线性局部切空间排列算法 (Supervised LLTSA, SLLTSA)<sup>[30]</sup>、边缘 Fisher 分析 (Marginal Fisher analysis, MFA)<sup>[15]</sup>、线性化局部样条嵌入算法 (LLSE)、局部样条判别投影算法 (LSDP) 进行了仿真实验和比较. 在植物叶片数据库上将提出的 O-LSDP 算法与 MMC、LDA、SLPP 和 LSDP 算法进行了比较分析. 除了将所有人脸图像和植物叶片图像裁剪成 32 像素  $\times$  32 像素的灰度图以外, 没有进行其他的预处理.

五种基于流形学习的算法 SLPP、SLLTSA、LLSE、LSDP 和 O-LSDP 在构建近邻图时, 考虑到同类样本应当位于同一个局部几何结构中, 因此最近邻参数  $k$  选择为  $l-1$  ( $l$  表示每类的训练样本数). 在 LSDP 和 O-LSDP 算法中, 尺度因子  $\beta = 1$ ; 在

MFA 算法中, 类内最近邻数  $k_1$  和类间最近邻样本对数  $k_2$  分别取  $[1, l-1]$  和  $[l, 8c]$  之间的最佳值. 为了更好地比较这些特征提取方法的性能, 分类器均采用最简单的最近邻分类器.

### 3.1 Yale 人脸库上的实验结果

Yale 人脸库包含有 15 个人的 165 幅灰度图像 (每个人有 11 幅图像). 每一个人的图像都是在不同的光照和表情条件下采集的, 其中包括从人脸左-中-右光照变化的图像 3 幅; 人脸面部表情变化图像 6 幅, 即正常、高兴、悲哀、困倦、惊讶和眨眼表情; 戴眼镜和没有戴眼镜的图像. 图 5 是 Yale 人脸数据库中 1 个人的样本图像.



图 5 Yale 人脸库的样本图像

Fig. 5 Sample images from one person in the Yale database

首先测试特征空间维数的变化对识别率的影响. 对于 LDA 算法, 由于其至多有  $c-1$  个非零的广义特征值, 所以特征空间维数上界为  $c-1$ . 对于每个人, 随机选择 3、5 和 7 幅图像作为训练样本集, 其余的作为测试集, 不同特征提取方法的识别率随特征子空间维数变化曲线如图 6 所示.

从图 6 中可以看出, 开始阶段识别率是随着特征维数的增加而增加. 但这一趋势并不是一直保持, 当特征维数达到某一阈值后, 识别率将会呈下降趋势或出现波动现象.

其次, 测试 8 种特征提取方法的识别效果. 对于每个人, 随机选择 7 幅图像作为训练样本, 剩余图像作为测试样本. 图显示了重复 20 次实验的最大平均识别率. 从图 7 中可以看出, MMC、LDA、SLPP、SLLTSA、MFA、LLSE、LSDP 和 O-LSDP 算法的最大平均识别率分别为 77.83 ( $\pm 5.02$ )%, 82.25 ( $\pm 4.72$ )%, 82.92 ( $\pm 4.71$ )%, 82.25 ( $\pm 5.52$ )%, 83.42 ( $\pm 4.03$ )%, 78.42 ( $\pm 4.24$ )%, 82.33 ( $\pm 4.73$ )% 和 85.50 ( $\pm 3.29$ )%. 可以看出在这 8 种方法中, O-LSDP 获得了最高的平均识别率.

最后检验训练样本数目对识别性能的影响. 对于每种方法, 分别随机选取 3、4、5、6 和 7 幅图像作为训练样本集, 其余的作为测试样本集. 每个实验独立重复 20 次, 表 2 为在不同训练样本条件下最大的平均识别率、标准差以及获得最大识别率时的特征空间维数. 从表 2 可以看出, O-LSDP 算法在各

<sup>1</sup><http://cvc.yale.edu/projects/yalefaces/yalefaces.html>

<sup>2</sup><http://www.cam-orl.co.uk/facedatabase.html>

<sup>3</sup><http://www.intelengine.cn/dataset/index.html>

种情况下都获得了最佳的分类识别性能.

### 3.2 ORL 人脸库上的实验结果

英国剑桥大学的 ORL 人脸库包括 40 个人的 400 幅人脸图像, 每人 10 幅图像, 分别在不同时间、不同光照、不同姿态、不同人脸表情 (睁眼和闭眼、微笑和不微笑) 和不同的人脸细节变化 (有无眼镜) 条件下采集得到. ORL 人脸库中原始图像为  $92 \times 112 = 10384$  维灰度图像, 灰度值介于 0 到 1. 图 8 是一个人的 10 幅图像.

实验设计与上一节相同. 每个人的训练样本分别选择 3、5 和 7 幅图像, 其余的图像作为测试样本, 每个实验独立重复 20 次. 图 9 显示了 MMC、LDA、SLPP、SLLTSA、MFA、LLSE、LSDP 和 O-LSDP 在不同训练样本数目条件下识别率随特征子空间维数变化的曲线. 从图中可以看出, 随着特征子空间维数的增加, 这些方法的识别率也随之增加. 当特征子空间维数高于某个阈值时, 识别率基本保持平稳.

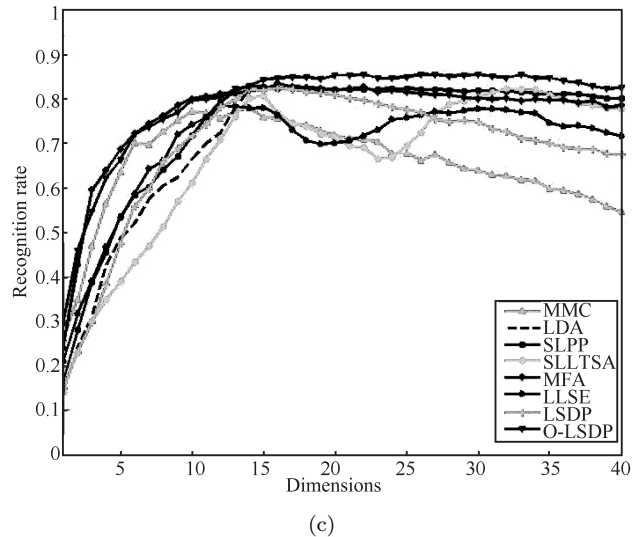
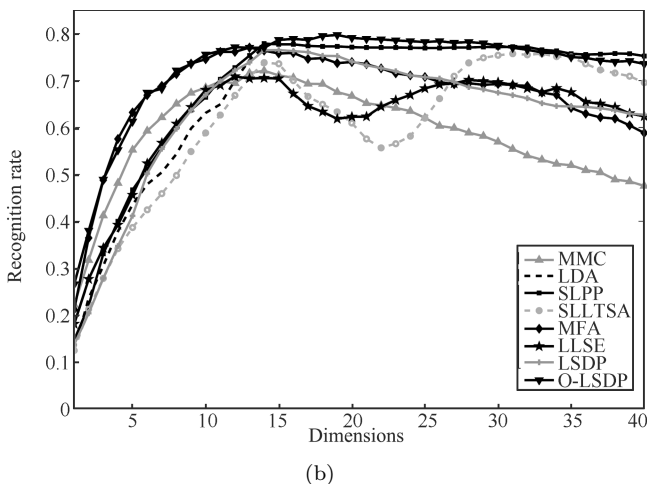
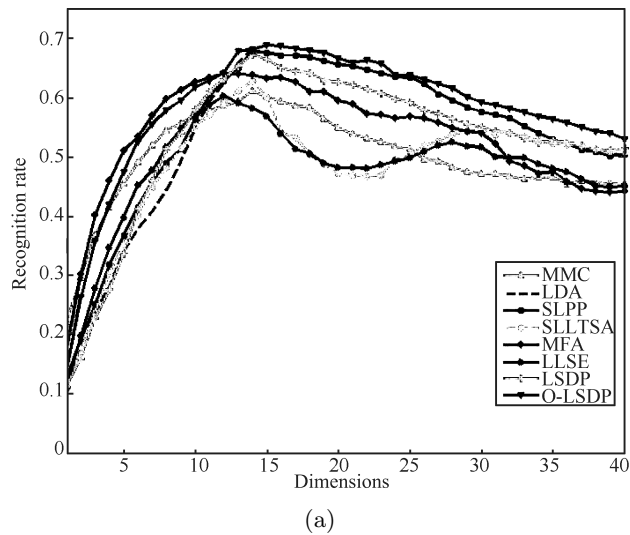


图 6 MMC、LDA、SLPP、SLLTSA、MFA、LLSE、LSDP 和 O-LSDP 在 Yale 人脸库上的识别率随特征空间维数变化曲线 ((a) 3 个训练样本; (b) 5 个训练样本; (c) 7 个训练样本)

Fig. 6 The recognition rates of MMC, LDA, SLPP, SLLTSA, MFA, LLSE, LSDP, and O-LSDP versus the dimensions on the Yale database ((a) Three samples for training; (b) Five samples for training; (c) Seven samples for training)

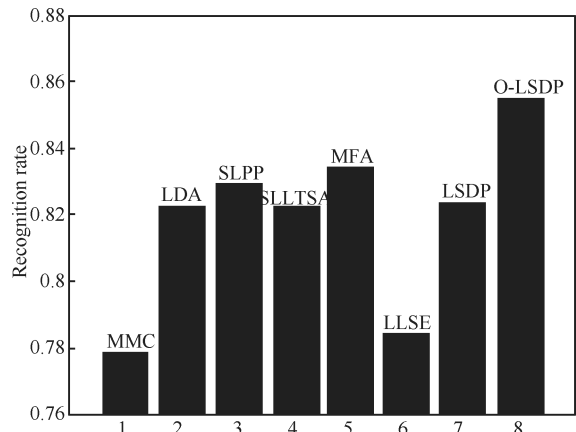


图 7 MMC、LDA、SLPP、SLLTSA、MFA、LLSE、LSDP 和 O-LSDP 在 Yale 人脸库上进行 20 次实验的最大平均识别率

Fig. 7 Performance comparison of best mean recognition rates using MMC, LDA, SLPP, SLLTSA, MFA, LLSE, LSDP, and O-LSDP on the Yale database



图 8 ORL 人脸库的样本图像  
Fig. 8 Sample images from one person in the ORL database



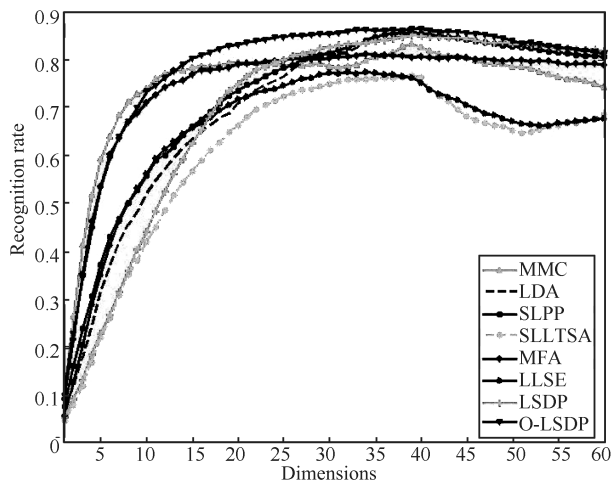
表 2 MMC、LDA、SLPP、SLLTSA、MFA、LLSE、LSDP 和 O-LSDP 在 Yale 人脸库上取不同训练样本数时的最大平均识别率、标准差及相应的特征空间维数

Table 2 The maximal average recognition rates and the corresponding standard deviations (%) with the reduced dimensions for MMC, LDA, SLPP, SLLTSA, MFA, LLSE, LSDP, and O-LSDP on the Yale database

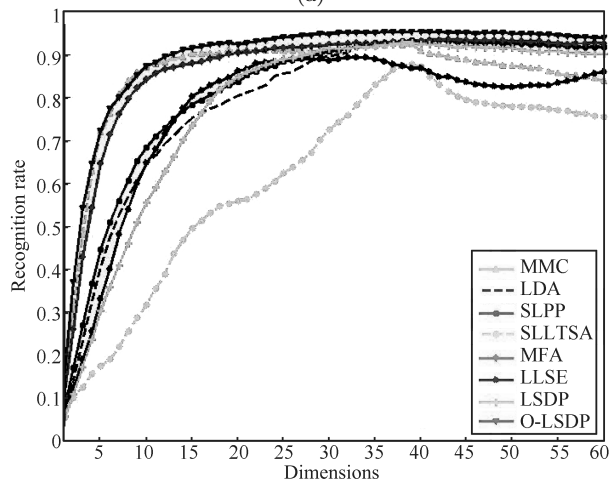
Method	3 Train	4 Train	5 Train	6 Train	7 Train
MMC	61.08±4.84 (14)	67.43±5.20 (13)	72.11±3.42 (14)	75.40±4.29 (14)	77.83±5.02 (14)
LDA	68.25±4.21 (14)	74.86±5.51 (14)	77.22±3.50 (14)	81.73±5.05 (14)	82.25±4.72 (14)
SLPP	67.92±4.25 (14)	75.14±5.46 (16)	77.22±3.50 (14)	81.60±4.94 (14)	82.92±4.71 (14)
SLLTSA	62.75±4.30 (14)	69.71±5.24 (15)	75.72±4.62 (33)	80.27±4.69 (32)	82.25±5.52 (32)
MFA	64.04±5.63 (12, 2, 117)	71.48±5.82 (12, 3, 115)	77.06±4.19 (13, 4, 77)	80.80±4.82 (17, 5, 99)	83.42±4.03 (16, 4, 109)
LLSE	60.25±4.54 (12)	65.14±5.15 (13)	70.89±5.77 (12)	76.00±3.82 (13)	78.42±4.24 (12)
LSDP	67.17±5.05 (14)	73.67±5.82 (14)	76.50±3.52 (15)	80.93±4.70 (15)	82.33±4.73 (16)
O-LSDP	68.75±4.76 (15)	76.48±4.43 (16)	79.72±3.69 (19)	84.27±3.95 (22)	85.50±3.29 (26)

注: 对于 MFA 算法, 括号中第 1 个数表示特征空间维数, 第 2 个数和第 3 个数分别表示参数类内最近邻数  $k_1$  和类间最近邻样本对数  $k_2$ .

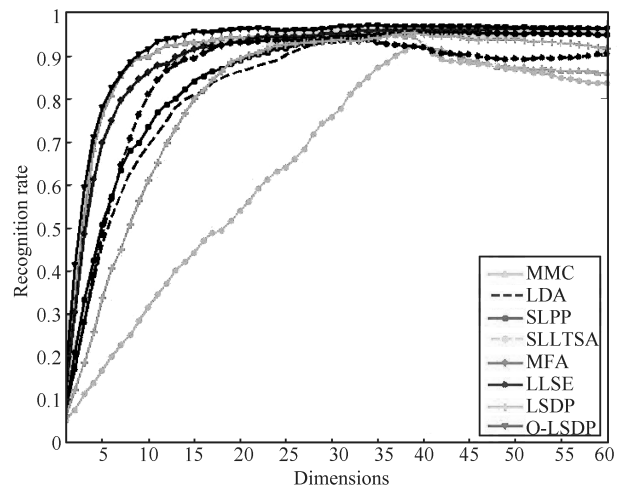
图 10 显示了每个人随机选择 7 幅图像作为训练样本时重复实验 20 次的最大平均识别率。从图 10 可以看出, MMC、LDA、SLPP、SLLTSA、MFA、LLSE、LSDP 和 O-LSDP 在特征子空间维数分别为 36, 39, 39, 111, 51, 30, 39 和 34 时达到



(a)



(b)



(c)

图 9 MMC、LDA、SLPP、SLLTSA、MFA、LLSE、LSDP 和 O-LSDP 在 ORL 人脸库上的识别率随特征空间维数变化曲线 ((a) 3 个训练样本; (b) 5 个训练样本; (c) 7 个训练样本)

Fig. 9 The recognition rates of MMC, LDA, SLPP, SLLTSA, MFA, LLSE, LSDP, and O-LSDP versus the dimensions on the Yale database

((a) Three samples for training; (b) Five samples for training; (c) Seven samples for training)

最大平均识别率 94.92%, 95.71%, 95.79%, 94.21%, 96.46%, 94.04%, 95.42% 和 97.08%。标准差分别为 1.77%, 1.86%, 1.90%, 1.92%, 1.97%, 2.50%, 2.00% 和 2.12%。不难发现, O-LSDP 算法的识别率明显超过其他 7 种方法, 其中 SLLTSA 性能最差, 而 LDA 和 SLPP 算法几乎获得同样的识别率。

最后, 检验了训练样本数目对识别率的影响。从每个人的 10 幅图像中分别随机选择 3, 4, 5, 6 和 7 幅图像作为训练样本集, 其余的图像作为测试样本集。我们独立重复 20 次实验并计算平均识别率。表

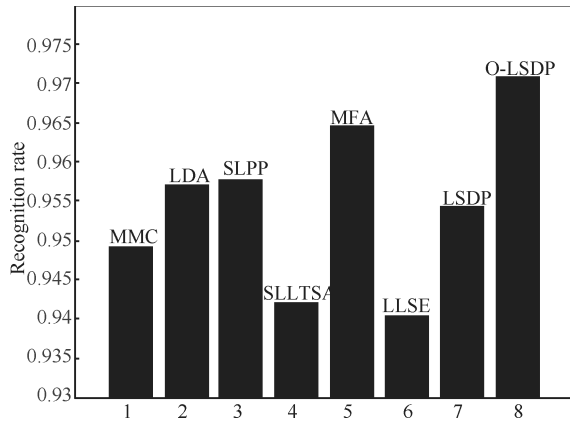


图 10 MMC、LDA、SLPP、SLLTSA、MFA、LLSE、LSDP 和 O-LSDP 在 ORL 人脸库上进行 20 次实验的最大平均识别率

Fig. 10 Performance comparison of best mean recognition rates using MMC, LDA, SLPP, SLLTSA, MFA, LLSE, LSDP, and O-LSDP on the ORL database

3 为选择不同训练样本数目条件下的最大平均识别率和标准差, 以及获得最大识别率时的特征子空间维数. 正如表 3 所示, 在 8 种方法中, 我们提出的 O-LSDP 算法在选择 5 种不同的训练样本数目时都实现了最好的分类性能, 而 LLSE 算法产生了最低的识别率, MMC 的识别率超过了 SLLTSA, 并且随

着训练样本数目的增加, MMC 实现了与 LDA 相当的识别率; 除此, 随着训练样本数目的增加, MFA 与 O-LSDP 的识别率接近.

### 3.3 ICL-PlantLeaf 植物叶片库上的实验结果

中国科学院智能机械研究所的 ICL-PlantLeaf 植物叶片数据库包括超过 20 000 幅的叶片图像, 来自 221 种不同的植物物种, 分别在不同时间、不同光照和不同位置条件下采集得到. 该实验中, 我们选用了 16 种不同植物物种的 480 幅叶片图像 (每种植物 30 幅图像). 图 11 显示了 16 种不同植物物种的叶片图像, 其中某个物种的 30 幅图像见图 12. 对于每个植物物种, 我们随机选择 4、8 和 12 幅图像作为训练样本集, 其余的图像作为测试样本集. 独立重复实验 10 次并计算其平均识别率. 图 13 显示了在 ICL-PlantLeaf 植物叶片数据集上 MMC、LDA、SLPP、LSDP 和 O-LSDP 在训练样本数目分别为 4、8 和 12 时识别率随特征子空间维数变化的曲线. 每种方法的最大平均识别率和标准差, 以及获得最大识别率时的特征子空间维数如表 4 所示. 从表 4 中我们能够看出在这些方法中 O-LSDP 实现了最佳的识别率, MMC 和 LDA 方法性能相近. 而且从表 2~4 中, 我们都能看出正交化特征子空间有助于提高算法的分类性能.

表 3 MMC、LDA、SLPP、SLLTSA、MFA、LLSE、LSDP 和 O-LSDP 在 ORL 人脸库上取不同训练样本数时的最大平均识别率、标准差及相应的特征空间维数

Table 3 The maximal average recognition rates and the corresponding standard deviations (%) with the reduced dimensions for MMC, LDA, SLPP, SLLTSA, MFA, LLSE, LSDP, and O-LSDP on the ORL database

Method	3 Train	4 Train	5 Train	6 Train	7 Train
MMC	83.45±1.90 (39)	88.83±2.15 (38)	92.47±2.13 (37)	93.88±2.34 (34)	94.92±1.77 (36)
LDA	85.86±1.68 (38)	90.33±1.66 (39)	93.23±1.91 (39)	94.62±1.96 (39)	95.71±1.86 (39)
SLPP	85.84±1.62 (39)	90.25±1.63 (39)	93.28±1.92 (39)	94.66±1.91 (39)	95.79±1.90 (39)
SLLTSA	81.00±2.13 (81)	86.02±2.06 (83)	90.30±1.64 (95)	92.34±2.6 (99)	94.21±1.92 (111)
MFA	81.38±2.79 (34,2,305)	89.85±2.26 (42,3,319)	93.47±2.35 (43,4,215)	95.44±1.69 (44,5,246)	96.46±1.97 (51,6,242)
LLSE	77.54±3.25 (32)	84.92±2.93 (32)	89.43±2.22 (33)	92.44±2.23 (27)	94.04±2.50 (30)
LSDP	85.29±1.55 (39)	89.88±1.70 (39)	92.80±1.79 (38)	94.50±1.94 (39)	95.42±2.00 (39)
O-LSDP	86.73±1.55 (40)	93.15±1.72 (43)	95.40±1.37 (37)	96.22±1.51 (35)	97.08±2.12 (34)

注: 对于 MFA 算法, 括号中第 1 个数表示特征空间维数, 第 2 个数和第 3 个数分别表示参数类内最近邻数  $k_1$  和类间最近邻样本对数  $k_2$ .



图 11 16 种不同树种的叶片图像

Fig. 11 Sample images from 16 kinds of trees in the ICL-PlantLeaf database



图 12 某物种的 30 幅叶片图像

Fig. 12 Sample images from one tree in the ICL-PlantLeaf database

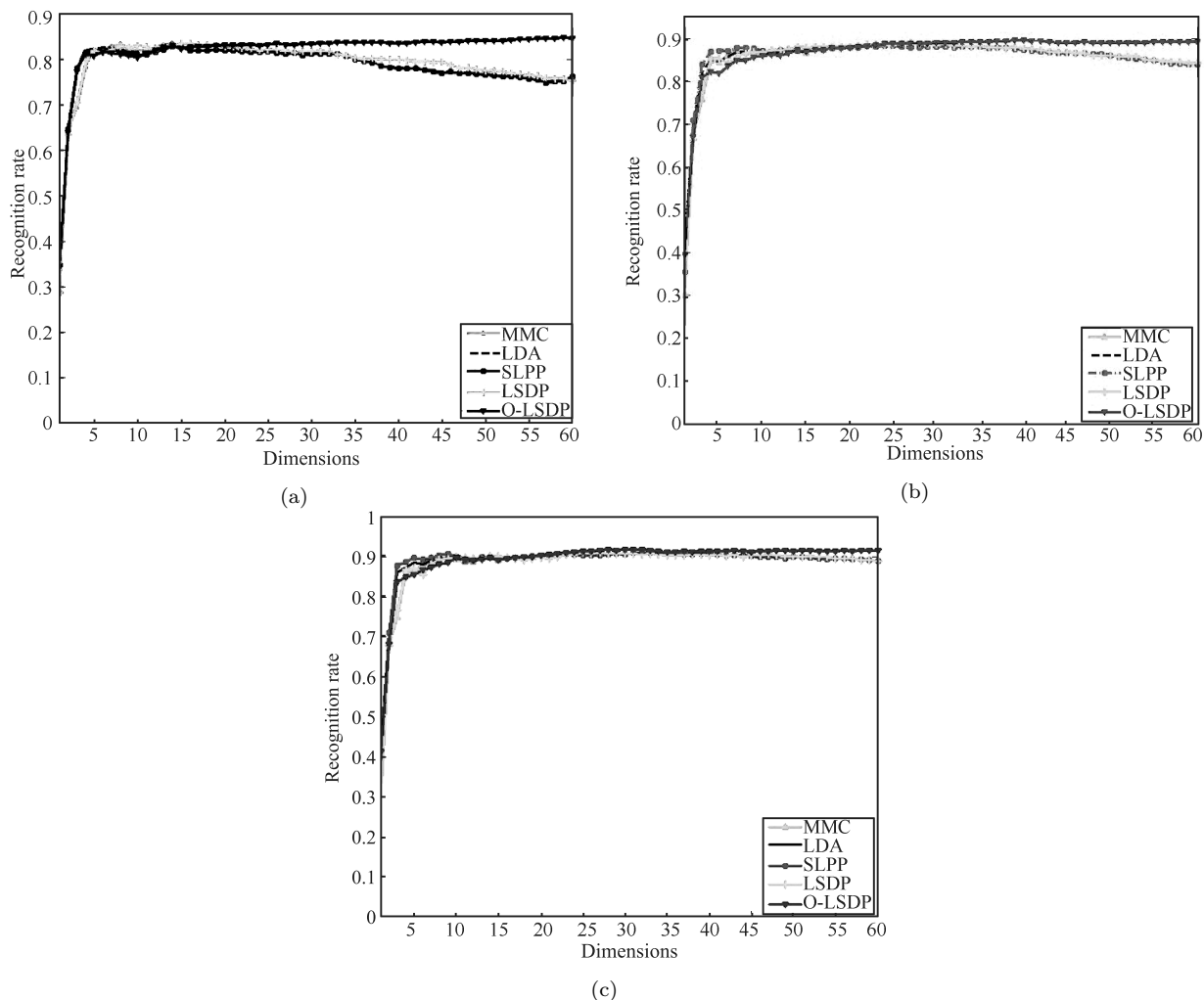


图 13 MMC、LDA、SLPP、LSDP 和 O-LSDP 在 ICL-PlantLeaf 植物叶片库上的识别率随特征空间维数变化曲线 ((a) 4 个训练样本; (b) 8 个训练样本; (c) 12 个训练样本)

Fig. 13 The recognition rates of MMC, LDA, SLPP, LSDP, and O-LSDP versus the dimensions on the ICL-PlantLeaf database ((a) Four samples for training; (b) Eight samples for training; (c) Twelve samples for training)

#### 4 讨论

在 Yale、ORL 人脸数据库和 ICL-PlantLeaf 植物叶片数据库上的实验结果表明:

1) O-LSDP 算法在所有的实验条件下实现了最好的分类性能. 这主要源于以下几个方面的原因: 一是基于流形学习的线性特征提取方法, 能够有效探测非线性流形结构. 传统的线性特征提取方法如 PCA、MMC 和 LDA 仅仅能发现平坦的欧氏结构, 并不能捕捉到非线性的流形结构. 而对于基于流形学习的方法如 SLPP、SLLTSA 和 O-LSDP 算法, 尽管它们也是线性特征提取方法, 但是我们认为从非线性流形学习的观点看待它们更合适. 因为原始的流形学习方法仅仅将训练样本集从高维输入空间嵌入到低维空间, 并不能产生一个显式的映射函数关系, 流形学习线性化主要目的就是通过线性近似

去获得一个明确的映射关系. 也就是说, 本质上这些基于流形学习的线性方法并不等价于传统的线性特征提取方法. 众所周知, PCA 主要目标是保持数据的全局几何结构, LDA 旨在保持数据的判别信息, 而这些基于流形学习的线性方法通过构建近邻图明确地考虑了数据的非线性流形结构, 因此, 它们能够发现服从流形分布的内在非线性结构. 在实验中所采用的 Yale 和 ORL 人脸库的图像随姿态、光照和表情等因素变化而变化, 而这些因素已经被研究者们证明是流形的本征特征<sup>[1-3]</sup>, 所以应用基于流形学习的特征提取方法能够有效地探测到这些本征特征. 从这个意义来说, 基于流形学习的特征提取方法明显优于其他传统的线性特征提取方法. 二是有效利用样本类别信息指导构建平移和缩放模型. O-LSDP 算法在保持数据流形局部几何结构的同时, 有效利用样本的类别信息为不同类数据构建最

优的平移和缩放因子,从而提高算法的分类识别能力.当然 O-LSDP 算法并不像 LDA 和 MMC 算法那样一味地去追求“最小化类内离散度和最大化类间离散度”,而是在保持流形局部几何结构与判别信息之间寻找最佳的结合点.在许多实际的分类问题中,保持流形的局部几何结构比保持全局欧氏结构更为重要<sup>[16]</sup>.因此我们认为在面向服从流形分布的高维数据分类任务时,最优的特征提取方法应当既要充分利用样本的先验信息指导分类又要同时尊重数据的局部几何结构,只有这样才能提取最优的分类特征.三是正交化特征子空间有助于消除冗余噪声,进一步提高算法的分类能力.

表 4 MMC、LDA、SLPP、LSDP 和 O-LSDP 在 ICL-PlantLeaf 植物叶片库上取不同训练样本数时的最大平均识别率、标准差及相应的特征空间维数

Table 4 The maximal average recognition rates and the corresponding standard deviations (%) with the reduced dimensions for MMC, LDA, SLPP, LSDP, and O-LSDP on the ICL-PlantLeaf database

Method	4 Train	8 Train	12 Train
MMC	83.61±1.83 (14)	87.53±0.59 (13)	90.03±1.69 (9)
LDA	83.29±2.17 (14)	87.24±0.91 (14)	90.52±1.23 (10)
SLPP	83.03±1.96 (14)	88.32±1.47 (22)	91.11±1.14 (34)
LSDP	83.61±2.27 (15)	89.06±2.23 (27)	91.08±1.61 (25)
O-LSDP	85.39±2.41 (45)	89.32±1.61 (24)	91.91±0.77 (26)

2) O-LDSP 算法在 Yale 和 ORL 人脸数据库上的分类识别性能明显优于 SLLTSA 算法.一方面尽管 O-LDSP 和 SLLTSA 算法都通过逼近每个样本点邻域的局部切空间来保持低维流形的局部几何特性,但是它们对局部坐标的全局排列方法有着本质的不同. SLLTSA 算法通过使用仿射变换来排列局部坐标而 O-LDSP 算法通过构建 Sobolev 空间的光滑样条函数来排列局部坐标.与仿射变换相比,光滑样条函数能够实现更小的重构误差,从而更好地保持流形的局部几何.另一方面,正交化特征子空间有助于改善 O-LDSP 算法的分类能力.

3) 在 Yale 和 ORL 人脸库上,随着训练样本数目的增加, MFA 算法的识别率接近 O-LSDP 算法的识别率.这主要是因为 MFA 算法可以通过设置合适的  $k_1$  和  $k_2$  参数有效地捕获数据的局部几何信息与判别信息,然而前提是 MFA 算法必须要遍历  $k_1$  和  $k_2$  可能的取值来进行模型选择.因此,随着训练样本数目的增加, MFA 算法的计算复杂度会显著提高.

## 5 结束语

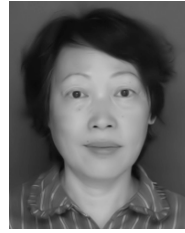
原始的流形学习算法在面临模式分类任务时存

在泛化能力差和无监督学习的缺点,导致它们无法直接应用于模式识别问题.本文首先详细介绍了最大边缘准则 (MMC) 和局部样条嵌入算法 (LSE),然后针对 LSE 算法在数据分类中的不足,提出了一种新的监督流形学习算法—正交局部样条判别投影 (O-LSDP). O-LSDP 算法通过线性化手段解决样本外点学习问题,并通过构建平移缩放模型以及正交化特征子空间来提高算法的分类识别能力.最后,在 Yale、ORL 人脸数据库和 ICL-PlantLeaf 植物叶片数据库上进行实验比较分析,验证了该算法的可行性与有效性.

## References

- 1 Tenenbaum J B, de Silva V, Langford J C. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction. *Science*, 2000, **290**(5500): 2319–2323
- 2 Roweis S T, Saul L K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. *Science*, 2000, **290**(5500): 2323–2326
- 3 Donoho D L, Grimes C. Hessian eigenmaps: locally linear embedding techniques for high-dimensional data. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2003, **100**(10): 5591–5596
- 4 Belkin M, Niyogi P. Laplacian eigenmaps for dimensionality reduction and data representation. *Neural Computation*, 2003, **15**(6): 1373–1396
- 5 Weinberger K Q, Saul L K. Unsupervised learning of image manifolds by semidefinite programming. In: *Proceedings of the 2004 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR-04)*. Washington D. C., USA: IEEE, 2004. 988–995
- 6 Zhang Z Y, Zha H Y. Principal manifolds and nonlinear dimensionality reduction via tangent space alignment. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 2005, **26**(1): 313–338
- 7 Lin T, Zha H B. Riemannian manifold learning. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2008, **30**(5): 796–809
- 8 Xiang S M, Nie F P, Zhang C S, Zhang C X. Nonlinear dimensionality reduction with local spline embedding. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2009, **21**(9): 1285–1298
- 9 Carreira-Perpiñán M A. The elastic embedding algorithm for dimensionality reduction. In: *Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning*. Haifa, Israel: IMLS, 2010. 167–174.
- 10 Luo D J, Ding C, Nie F P, Huang H. Cauchy graph embedding. In: *Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning*. Haifa, Israel: IMLS, 2011. 553–560
- 11 Zhang S W, Lei Y K, Wu Y H. Semi-supervised locally discriminant projection for classification and recognition. *Knowledge-Based Systems*, 2011, **24**(2): 341–346
- 12 Zhang S W, Lei Y K, Wu Y H, Yang J A. Modified orthogonal discriminant projection for classification. *Neurocomputing*, 2011, **74**(17): 3690–3694
- 13 Zhan P, Qiao H, Zhang B. An improved local tangent space alignment method for manifold learning. *Pattern Recognition Letters*, 2011, **32**(2): 181–189
- 14 Lei Y K, You Z H, Dong T B, Jiang Y X, Yang J A. Increasing reliability of protein interactome by fast manifold embedding. *Pattern Recognition Letters*, 2013, **34**(4): 372–379

- 15 Yan S C, Xu D, Zhang B Y, Zhang H J, Yang Q, Lin S. Graph embedding and extensions: a general framework for dimensionality reduction. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2007, **29**(1): 40–51
- 16 He X F, Yan S C, Hu Y X, Niyogi P, Zhang H J. Face recognition using laplacianfaces. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2005, **27**(3): 328–340
- 17 Kokiopoulou E, Saad Y. Orthogonal neighborhood preserving projections: a projection-based dimensionality reduction technique. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2007, **29**(12): 2143–2156
- 18 Choi H, Choi S. Robust kernel Isomap. *Pattern Recognition*, 2007, **40**(3): 853–8620
- 19 Meng De-Yu, Xu Chen, Xu Zong-Ben. A new manifold reconstruction method based on Isomap. *Chinese Journal of Computers*, 2010, **33**(3): 545–555  
(孟德宇, 徐晨, 徐宗本. 基于 Isomap 的流形结构重建方法. 计算机学报, 2010, **33**(3): 545–555)
- 20 Pan Y Z, Ge S S, Al Mamun A. Weighted locally linear embedding for dimension reduction. *Pattern Recognition*, 2009, **42**(5): 798–811
- 21 De Ridder D, Kouropteva O, Okun O, Pietikäinen M, Duin R P W. Supervised locally linear embedding. In: Proceedings of the 2003 Joint International Conference on Artificial Neural Networks and Neural Information Processing. Istanbul, Turkey: Springer-Verlag, 2003. 333–341
- 22 Geng X, Zhan D C, Zhou Z H. Supervised nonlinear dimensionality reduction for visualization and classification. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B: Cybernetics*, 2005, **35**(6): 1098–1107
- 23 Li X R, Jiang T, Zhang K S. Efficient and robust feature extraction by maximum margin criterion. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 2006, **17**(1): 157–165
- 24 Duchon J. *Constructive Theory of Functions of Several Variables*. Berlin, Heidelberg: Springer, 1977. 85–100
- 25 Söderkvist O. Computer Vision Classification of Leaves from Swedish Trees [Master dissertation], Linköping University, Linköping, 2001
- 26 Ye J P. Characterization of a family of algorithms for generalized discriminant analysis on undersampled problems. *Journal of Machine Learning Research*, 2006, **6**: 483–502
- 27 Duchene J, Leclercq S. An optimal transformation for discriminant and principal component analysis. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 1988, **10**(6): 978–983
- 28 Belhumeur P N, Hespanha J P, Kriegman D J. Eigenfaces vs. fisherfaces: recognition using class specific linear projection. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 1997, **19**(7): 711–720
- 29 Cai D, He X, Han J. Using Graph Model for Face Analysis. University of Illinois Urbana-Champaign, Urbana, IL, Department of Computer Science, Technical Report, 2005
- 30 Zhang T H, Yang J, Zhao D L, Ge X L. Linear local tangent space alignment and application to face recognition. *Neurocomputing*, 2007, **70**(7–9): 1547–1553



**袁 警** 合肥学院计算机科学与技术系副教授. 主要研究方向为计算机图形图像处理. 本文通信作者.

E-mail: hfyuanmin@163.com

(**YUAN Min** Associate professor in the Department of Computer Science and Technology, Hefei University. Her main research interest is computer

graphics and image processing. Corresponding author of this paper.)



**程 雷** 助理工程师. 主要研究方向为机器学习. E-mail: cl197817@163.com

(**CHENG Lei** Assistant engineer. His main research interest is machine learning.)



**朱然刚** 博士, 电子工程学院讲师. 主要研究方向为图像处理.

E-mail: eezrg@163.com

(**ZHU Ran-Gang** Ph.D., lecturer at Electronic Engineering Institute. His main research interest is image processing.)



**雷迎科** 博士, 电子工程学院讲师. 主要研究方向为机器学习, 模式识别与信号处理. E-mail: leiyingke@163.com

(**LEI Ying-Ke** Ph.D., lecturer at Electronic Engineering Institute. His research interest covers machine learning, pattern recognition, and signal processing.)