

最大散度差和大间距线性投影 与支持向量机¹⁾

宋枫溪^{1,2} 程科¹ 杨静宇¹ 刘树海¹

¹(南京理工大学计算机系 南京 210094)

²(炮兵学院一系 合肥 230031)

(E-mail: fx_song@sina.com)

摘要 首先对 Fisher 鉴别准则作了必要的修正，并基于新的鉴别准则设计了最大散度差分类器；然后探讨了当参数 C 趋向无穷大时，最大散度差分类器的极限情况，得到了大间距线性投影分类器；最后通过分析说明，大间距线性投影分类器实际上是在模式样本线性可分的条件下，线性支持向量机的一种特殊情况。在 ORL 和 NUST603 人脸库上的测试结果表明，最大散度差分类器和大间距线性投影分类器可以与线性支持向量机、不相关线性鉴别分析相媲美，优于 Foley-Sammon 鉴别分析方法。

关键词 最大散度差，大间距线性投影，支持向量机，Fisher 鉴别准则，线性鉴别分析，人脸识别

中图分类号 TP39

Maximum Scatter Difference, Large Margin Linear Projection and Support Vector Machines

SONG Feng-Xi^{1,2} CHENG Ke¹ YANG Jing-Yu¹ LIU Shu-Hai²

¹(Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094)

²(Artillery Academy, Hehei 230031)

(E-mail: fx_song@sina.com)

Abstract A modified Fisher discriminant is proposed at first. Then maximum scatter difference classifier (MSDs) which is based on the new discriminant is derived. It is showed that when parameter C in the MSDs is approaching infinity, a new kind of classifier called large margin linear projection classifier (LMLP) can be obtained. Theoretical analysis indicates that LMLP is a special case of linear support vector machines when the pattern samples are linearly separable. Experimental results conducted on the ORL and NUST603 datasets show that the MSDs and LMLP are better than traditional linear discriminant analysis methods such as Foley-Sammon linear discriminant analysis, and can compete with linear support vector machines and uncorrelated linear discriminant analysis.

Key words Maximum scatter difference, large margin linear projection, support vector machines, Fisher discriminant, linear discriminant analysis, face recognition

1) 国家自然科学基金(60072034)资助

Supported by National Natural Science Foundation of P.R China(60072034)

收稿日期 2003-07-28 收修改稿日期 2004-05-28

Received July 28, 2003; in revised form May 28, 2004

1 引言

运用统计方法解决模式识别问题时,一再碰到的问题之一是维数问题。在低维空间里解析上或计算上行得通的方法,在高维空间里往往行不通。因此,降低维数有时就成为处理实际问题的关键。

我们可以考虑将高维输入空间中的样本投影到一条直线上,形成一维特征空间。这在数学上总是容易办到的。关键是,我们希望能找到一个最优方向,使得在这个方向上不同类别样本的投影能被最大限度地分开。

Fisher 鉴别分析^[1]的基本思想是,选择使得 Fisher 准则函数—广义 Rayleigh 商达到最大值的向量(称为最优鉴别向量)作为最优投影方向,从而使得高维输入空间中的模式样本在该轴投影后,类间散度达到最大的同时类内散度达到最小。基于 Fisher 鉴别准则的特征抽取方法面临两个主要困难,一是类内散布矩阵常常为奇异矩阵,二是单个投影轴未能包含足够多的鉴别信息。为克服这两种困难,人们在 Fisher 鉴别准则基础上发展起来多种不同的线性鉴别分析方法。这些方法虽然在不同程度上减轻了这两个困难,但与 Fisher 最初的设想相比,已经有了很大的差异。差异主要体现在以下两个方面:1) 单个最优鉴别向量演变成满足这样或那样约束条件的多个最优鉴别向量;2) 直接根据投影结果进行分类演变成根据投影得到的特征向量用最近邻、最小距离等经典分类器进行分类。

能否提出一种新的线性鉴别准则,使得最优鉴别向量的确定不再受类内散布矩阵奇异性的制约?另外,线性支持向量机^[2]也是寻找一个最优投影方向,使得投影后的不同类别的样本能被最大程度地分开。那么,线性支持向量机与基于新的鉴别准则的线性分类器之间是否存在某种内在联系?本文试图从理论上对上述两个问题进行回答。首先对 Fisher 鉴别准则作了必要的修正,并基于新的鉴别准则设计了最大散度差分类器;然后探讨了当分类器参数 C 趋向无穷大时,最大散度差分类器的极限情况,得到了大间距线性投影分类器;最后通过分析说明,大间距线性投影分类器实际上是在模式样本线性可分的条件下,线性支持向量机的一种特殊情况。

在 ORL 人脸图像数据集和南京理工大学 NUST603 人脸库上的测试结果表明,最大散度差分类器和大间距线性投影分类器可以与线性支持向量机相媲美,明显优于 Foley-Sammon^[3] 鉴别分析方法,在 ORL 上明显优于不相关线性鉴别分析^[4]。

2 Fisher 鉴别准则^[5]

设 ω_1 和 ω_2 是两个模式类,模式 $x \in R^d$ 为 d 维实向量,第 i 类训练样本的个数为 N_i ;样本均值 m_i 、类间散布矩阵 S_b 、类内散布矩阵 S_i 和总类内散布矩阵 S_w 分别定义为

$$m_i = \frac{1}{N_i} \sum_{x \in \omega_i} x, \quad i = 1, 2, \quad S_b = (m_1 - m_2)(m_1 - m_2)^T \quad (1), (2)$$

$$S_i = \sum_{x \in \omega_i} (x - m_i)(x - m_i)^T, \quad i = 1, 2, \quad S_w = S_1 + S_2 \quad (3), (4)$$

将模式 x 投影到投影轴 $w \in R^d (\|w\|=1)$,得 $z = w^T x$ 。投影后的样本均值 \tilde{m}_i 、类间散度 \tilde{S}_b 、类内散度 \tilde{S}_i 和总类内散度 \tilde{S}_w 分别定义为

$$\tilde{m}_i = \frac{1}{N_i} \sum_{\mathbf{x} \in \omega_i} \mathbf{w}^T \mathbf{x}, \quad i = 1, 2, \quad \tilde{S}_b = (\tilde{m}_1 - \tilde{m}_2)^2 = \mathbf{w}^T S_b \mathbf{w} \quad (5), (6)$$

$$\tilde{S}_i = \sum_{\mathbf{x} \in \omega_i} (\mathbf{w}^T \mathbf{x} - \tilde{m}_i)^2, \quad i = 1, 2, \quad \tilde{S}_w = \tilde{S}_1 + \tilde{S}_2 = \mathbf{w}^T S_w \mathbf{w} \quad (7), (8)$$

Fisher 鉴别准则是，选择使得广义 Rayleigh 商

$$J_F(\mathbf{w}) = \frac{\tilde{S}_b}{\tilde{S}_w} = \frac{(\tilde{m}_1 - \tilde{m}_2)^2}{\tilde{S}_1 + \tilde{S}_2} = \frac{\mathbf{w}^T S_b \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T S_w \mathbf{w}} \quad (9)$$

达到最大值的向量作为投影方向.

求解广义 Rayleigh 商 $J_F(\mathbf{w})$ 的最大值问题可以转化为求解以下广义特征方程

$$S_b \mathbf{w} = \lambda_w \mathbf{w} \quad (10)$$

的最大特征值对应的特征向量问题.

当类内散布矩阵 S_w 为非奇异矩阵时，上述问题又可以转化为求解矩阵 $S_w^{-1} S_b$ 的最大特征值对应的特征向量问题. 此时，矩阵 $S_w^{-1} S_b$ 最大特征值对应的特征向量即为所求的最优投影方向.

当训练样本容量 $N(N = N_1 + N_2)$ 较小，而输入空间维数 d 较大时，类内散布矩阵 S_w 常常为奇异矩阵. 象人脸识别、语音识别等高维小样本模式识别问题，就普遍存在着这种情况. 为避免这一问题，我们需要对 Fisher 鉴别准则做出必要的修正.

3 修正的 Fisher 鉴别准则与最大散度差分类器

同线性鉴别分析着力于解决类内散布矩阵的奇异性问题不同，我们可以通过对 Fisher 鉴别准则进行如下修正，从而避免了高维小样本模式识别问题中普遍存在的类内散布矩阵的奇异性问题.

修正的 Fisher 鉴别准则是，选择使得类间散度与类内散度的差

$$J_M(\mathbf{w}) = \tilde{S}_b - C \times \tilde{S}_w = \mathbf{w}^T (S_b - C \times S_w) \mathbf{w} \quad (11)$$

达到最大值的向量作为最优投影方向，其中 C 是一个正常数，用来平衡最大化类间散度和最小化类内散度两个不同的目标， C 值越大意味着最小化类内散度越重要（相对于最大化类间散度而言）.

寻求使得式 (11) 达到最大值的投影方向等价于求解下述这样一个二次规划问题

$$\max_{\|\mathbf{w}\|=1} J_M(\mathbf{w}) \quad (12)$$

定理 1. 矩阵 $(S_b - C \times S_w)$ 最大特征值对应的特征向量即为基于修正的 Fisher 鉴别准则的最优投影方向.

证明. 引入 Lagrange 函数

$$L(\mathbf{w}, \lambda) = J_M(\mathbf{w}) - \lambda(\|\mathbf{w}\| - 1) = \mathbf{w}^T (S_b - C \times S_w) \mathbf{w} - \lambda(\mathbf{w}^T \mathbf{w} - 1) \quad (13)$$

令 $\frac{\partial L(\mathbf{w}, \lambda)}{\partial \mathbf{w}} = 0$, 得

$$(S_b - D \times S_w) \mathbf{w} = \lambda \times \mathbf{w} \quad (14)$$

将式(14)代入式(11), 有 $J_M(\mathbf{w}) = \lambda \mathbf{w}^T \mathbf{w} = \lambda$. 因而, 矩阵 $(S_b - C \times S_w)$ 最大特征值对应的特征向量即为所求的最优投影方向. 证毕.

记 \mathbf{w}^* 为式(12)确定的最优投影方向, b 和 b_1 分别为所有训练样本和第一类训练样本沿 \mathbf{w}^* 轴投影后的样本均值, 即

$$b = \frac{1}{N_1 + N_2} \sum_{\mathbf{x} \in \omega_1 \cup \omega_2} \mathbf{w}^{*\top} \mathbf{x}, \quad b_1 = \frac{1}{N_1} \sum_{\mathbf{x} \in \omega_1} \mathbf{w}^{*\top} \mathbf{x} \quad (15), (16)$$

则基于修正的 Fisher 鉴别准则的最大散度差分类器定义为

$$f(\mathbf{x}) = \text{sign}(\mathbf{w}^{*\top} \mathbf{x} - b) \text{sign}(b_1 - b) \quad (17)$$

其中 sign 为符号函数, $f(\mathbf{x}) = 1$ 表示 \mathbf{x} 属于 ω_1 , $f(\mathbf{x}) = -1$ 表示 \mathbf{x} 属于 ω_2 .

4 最大散度差分类器的极限情况

显然, 根据式(12)确定的最优投影方向 \mathbf{w}^* 与参数 C 的取值密切相关. 下面, 考察当参数 C 趋向无穷大时的最优投影方向.

定理 2. 若 S_w 为奇异矩阵, 则当参数 C 趋向无穷大时, 由(12)式确定的最优投影方向等价于由式(18)和(19)确定的最优投影方向

$$\max \mathbf{w}^T S_b \mathbf{w}, \quad \begin{cases} \mathbf{w}^T S_w = 0 \\ \|\mathbf{w}\| = 1 \end{cases} \quad (18), (19)$$

证明. 记 λ_b 和 λ_c 分别为矩阵 S_b 和 $(S_b - C \times S_w)$ 的最大特征值, \mathbf{w}_b 和 \mathbf{w}_c 为最大特征值对应的单位特征向量. 因为 S_w 是奇异矩阵, 故存在单位向量 \mathbf{w}_0 , 使得 $S_w \mathbf{w}_0 = 0$.

考虑到 S_b 为半正定矩阵, 因而有

$$\lambda_c = \max_{\|\mathbf{w}\|=1} \mathbf{w}^T (S_b - C \times S_w) \mathbf{w} \geq \mathbf{w}_0^T S_b \mathbf{w} - C \times \mathbf{w}_0^T S_w \mathbf{w}_0 = \mathbf{w}_0^T S_b \mathbf{w}_0 \geq 0 \quad (20)$$

对于任意的正实数 C , 由和的含义知,

$$(S_b - C \times S_w) \mathbf{w}_c = \lambda_c \mathbf{w}_c \quad (21)$$

由式(20)和 λ_b 的含义知,

$$\mathbf{w}_c^T S_w \mathbf{w}_c = \frac{1}{C} (\mathbf{w}_c^T S_b \mathbf{w}_c - \lambda_c) \leq \frac{1}{C} \mathbf{w}_c^T S_b \mathbf{w}_c \leq \frac{1}{C} \lambda_b \quad (22)$$

另外, 由于 S_w 为半正定矩阵, 因而有

$$\mathbf{w}_c^T S_w \mathbf{w} \geq 0 \quad (23)$$

综合式(22)和(23), 不难得出

$$\lim_{C \rightarrow \infty} \mathbf{w}_c^T S_w \mathbf{w}_c = 0 \quad (24)$$

故式(18)和(19)确定的最优投影轴即为式(12)确定的最优投影轴的极限情况. 证毕.

5 大间距线性投影分类器

下面，我们对二次规划模型(18)和(19)两式作进一步的分析。

由式(4)知， $\mathbf{w}^T S_w \mathbf{w} = 0$ 等价于

$$\mathbf{w}^T S_i \mathbf{w} = \sum_{z \in Z_i} (z - \tilde{m}_i)^2 = 0, \quad i = 1, 2 \quad (25)$$

即

$$\forall \mathbf{x} \in \omega_i, \mathbf{w}^T \mathbf{x} = \tilde{m}_i, \quad i = 1, 2 \quad (26)$$

由式(6)知， $\max \mathbf{w}^T S_b \mathbf{w}$ 实际上就是

$$\max(\tilde{m}_1 - \tilde{m}_2)^2 \quad (27)$$

不失一般性，令 $\tilde{m}_1 = -\tilde{m}_2 = \tilde{m}$ ，并用 \mathbf{w}/\tilde{m} 代替 \mathbf{w} ，则式(26)可转化为

$$\begin{cases} \mathbf{w}^T \mathbf{x} = 1, & \text{如果 } \mathbf{x} \in \omega_1 \\ \mathbf{w}^T = -1, & \text{如果 } \mathbf{x} \in \omega_2 \end{cases} \quad (28)$$

式(27)可用式(29)代替

$$\min \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \quad (29)$$

用 y_i 表示第 i 个训练样本的类别标号， $y_i = 1$ ，意味着 \mathbf{x}_i 属于类别 ω_1 ； $y_i = -1$ 意味着 \mathbf{x}_i 属于类别 ω_2 。则式(28)和(29)可进一步改写为

$$\min \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \quad (30)$$

满足约束

$$y_i \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i = 1, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (31)$$

注意到线性可分时的支持向量机模型为

$$\min \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \quad (32)$$

满足约束

$$y_i (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i - b) \geq 1, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (33)$$

因此，当参数 C 趋向无穷大时，最大散度差分类器的极限形式实际上是线性可分条件下，线性支持向量机的特殊情况。

记 \mathbf{w}^* 为式(30)和(31)确定的最优投影方向，则大间距线性投影分类器定义为

$$f(\mathbf{x}) = \text{sign}(\mathbf{w}^{*\top} \mathbf{x}) \quad (34)$$

其中 sign 为符号函数， $f(\mathbf{x}) = 1$ 表示 \mathbf{x} 属于 ω_1 ， $f(\mathbf{x}) = -1$ 表示 \mathbf{x} 属于 ω_2 。

6 实验结果与分析

实验采用 ORL 人脸图像数据库和南京理工大学 NUST603 人脸库，考察不同参数值下的最大散度差分类器、大间距线性投影分类器、线性支持向量机、Foley-Sammon 鉴别分析

以及不相关线性鉴别分析的分类效果。ORL 人脸图像数据库由 40 人、每人 10 幅 92×112 图像所组成。取每个人脸的前 5 幅图像作为训练样本，后 5 幅图像作为测试样本，因而训练样本和测试样本的个数均为 200。NUST603 人脸库由 96 人、每人 10 幅 32×32 图像所组成。取每个人脸的前 5 幅图像作为训练样本，后 5 幅图像作为测试样本，因而训练样本和测试样本的个数均为 480。

最大散度差分类器、大间距线性投影分类器与支持向量机本质上都是两类分类器，用于多类分类问题时需要将原问题分解为若干个两类分类问题。常见的分解方式有以下三种：一对一 (one-vs-one)、一对多 (one-vs-rest) 和有向树 (directed acyclic graph, 其缩写为 DAG)^[6]。实验中我们考察一对一和有向树两种分解方式。最大散度差分类器可以用 Matlab 中求稀疏矩阵的特征值及特征向量的函数 eigs 等来实现，大间距线性投影分类器可以用 Matlab 中的二次规划函数 quadprog 等来实现，而支持向量机则采用 Junshui Ma¹⁾ 等开发的基于 Matlab 的 SVM 工具箱中的 LinearSVC。

表 1 列出了线性支持向量机、大间距线性投影分类器、Foley-Sammon 鉴别分析、不相关线性鉴别分析以及不同参数值下的最大散度差分类器在 ORL 数据集上的正确识别率。其中 Foley-Sammon 鉴别分析和不相关线性鉴别分析的结果根据文献 [4] 中表 1 得到，括号外的数表示在最小距离分类器下的结果，括号内的数表示在最近邻分类器下的结果。其它识别结果，括号外的数表示在“一对—”分解方式下获得的识别结果，括号内的数表示在 DAG 分解方式下获得的识别结果。线性 SVM 参数 C 的取值为 1。

表 1 各个分类器在不同分辨率 ORL 图像下的识别率 (%)

Table 1 Recognition rates of various classifiers on ORL face images with different resolutions (%)

分辨率	112×92	56×46	28×23	14×12	7×6
线性 SVM($C = 1$)	95.5(95.0)	95.5(95.5)	95.5(95.5)	94.5(94.5)	82.5(82.5)
大间距线性投影	94.5(94.5)	94.5(94.5)	95.0(95.0)	95.5(95.5)	97.0(97.0)
Foley-Sammon	86.0(89.0)	85.5(90.0)	84.5(91.0)	82.0(92.0)	82.0(90.0)
不相关线性鉴别	85.0(87.5)	86.0(89.0)	87.0(90.0)	92.0(95.5)	94.0(96.0)
$C = 1$	92.5(92.5)	93.0(94.0)	94.5(94.5)	92.5(92.0)	92.5(92.0)
最大 散度 差分 类器	$C = 10$ 95.0(94.0)	94.5(94.0)	95.0(94.5)	94.0(94.0)	95.0(95.0)
$C = 100$	94.5(94.0)	94.5(94.0)	94.5(94.5)	95.0(95.0)	94.5(94.0)
$C = 1000$	94.5(94.0)	94.0(94.0)	94.5(94.5)	95.0(95.0)	94.5(95.0)
$C = 10000$	94.5(94.0)	94.0(94.0)	94.5(94.5)	95.0(95.0)	94.5(94.5)
$C = 100000$	94.5(94.0)	94.0(94.0)	94.5(94.5)	95.0(95.0)	94.5(94.5)

从表 1 不难看出，作为最大散度差分类器的极限形式，大间距线性投影分类器的识别结果优于参数 C 各种取值下的最大散度差分类器的识别结果，明显优于 Foley-Sammon 鉴别分析和不相关线性鉴别分析的识别结果。在较高分辨率图像上 ($112 \times 92, 56 \times 46, 28 \times 23$) 略逊于线性支持向量机，在 14×12 分辨率图像上略优于线性支持向量机，而在 7×6 的马赛克图像上的正确识别率高达 97%，远优于线性支持向量机的 82.5%。

表 2 列出了线性支持向量机、大间距线性投影分类器、Foley-Sammon 鉴别分析、不相关线性鉴别分析以及不同参数值下的最大散度差分类器在 NUST603 数据集上的正确识别率。其中 Foley-Sammon 鉴别分析和不相关线性鉴别分析的结果根据文献 [4] 中表 4 和表 5 得到，括号外的数表示在最小距离分类器下的结果，括号内的数表示在最近邻分类器下的

1)Ma Junshui, Zhao Yi, Stanley Ahalt. OSU SVM Classifier Matlab Toolbox (ver 3.00)

<http://cewww.eng.ohio-state.edu/~maj/osu.svm/>

结果。其它识别结果，括号外的数表示在“一对一”分解方式下获得的识别结果，括号内的数表示在 DAG 分解方式下获得的识别结果。线性 SVM 参数 C 的取值为 1。

表 2 各个分类器在不同分辨率 NUST603 图像下的识别率 (%)

Table 2 Recognition rates of various classifiers on NUST603 face images with different resolutions (%)

分辨率	32×32	16×16	8×8	4×4	
线性 SVM($C = 1$)	98.3(98.1)	98.5(98.3)	97.2(97.2)	90.6(90.2)	
大间距线性投影	97.5(97.5)	97.9(97.7)	96.7(97.1)	85.0(75.0)	
Foley-Sammon	93.3(95.0)	91.5(94.4)	86.9(90.4)	76.7(76.7)	
不相关线性鉴别	99.4(99.0)	99.4(99.2)	99.6(99.6)	99.6(99.4)	
$C = 1$	97.1(96.9)	96.7(96.0)	94.6(93.5)	86.0(83.8)	
最大散度	$C = 10$	98.1(98.1)	98.3(98.3)	97.5(97.7)	92.5(92.1)
差分类器	$C = 100$	98.8(98.5)	98.8(98.8)	97.9(97.5)	91.5(88.8)
$C = 1000$	98.5(98.5)	98.8(98.8)	98.1(97.5)	89.6(84.0)	
$C = 10000$	98.8(98.8)	98.8(98.8)	98.1(97.5)	90.0(83.3)	
$C = 100000$	98.8(98.8)	98.8(98.8)	97.9(97.5)	90.0(83.3)	

表 2 中的数据表明，当参数 C 较大时，最大散度差分类器的正确识别率一般高于线性支持向量机和大间距线性投影分类器，明显高于 Foley-Sammon 线性鉴别分析，但逊于不相关线性鉴别分析。

7 结束语

与传统线性鉴别分析方法相比，最大散度差分类器和大间距线性投影分类器在理论上显得更加简洁和直观。实验结果表明，这两种分类器相对于传统线性鉴别分析方法具有较明显的优势，与线性支持向量机、不相关线性鉴别分析相当。

References

- 1 Fisher R A. The use of multiple measurements in taxonomic problems. *Annals of Eugenics*, 1936, 7: 179~188
- 2 Vapnik V. *The Nature of Statistical Learning Theory*. New York: Springer-Verlag, 1995
- 3 Foley D H, Sammon J W. An optimal set of discriminant vectors. *IEEE Transactions on Computer*, 1975, 24(3): 281~289
- 4 Jin Z, Yang J Y, Hu Z S, Lou Z. Face Recognition based on uncorrelated discriminant transformation. *Pattern Recognition*, 2001, 34(7): 1405~1416
- 5 Bian Zhaoqi, Zhang Xuegong. *Pattern Recognition*. Beijing: Qinghua University Press, 2000 (in Chinese)
- 6 Hsu C, Lin C, A Comparison of Methods for Multiclass Support Vector Machines. *IEEE Transaction on Neural Networks*, 2002, 13(2): 415~425

宋枫溪 教授，博士生。主要研究方向为模式识别理论与应用。

(SONG Feng-Xi Professor in Artillery Academy and Ph.D candidate in Nanjing University of Science & Technology (NUST). His main research area is pattern recognition theory and its application.)

程科 博士生。主要研究方向为模糊形态学及其在人工智能中的应用。

(CHENG Ke Ph.D candidate in Nanjing University of Science and Technology. His main research area is fuzzy morphology and its application to artificial intelligence.)

杨静宇 教授，博士生导师。主要研究方向为模式识别与智能系统。

(YANG Jing-Yu Professor and Ph.D director in Nanjing University of Science and Technology. His main research area is pattern recognition and intelligent system.)

刘树海 教授，博士生导师。主要研究方向为战场数据融合系统。

(LIU Shu-Hai Professor and Ph.D director in Artillery Academy. His main research area is battle field data fusion system.)