

文章编号:1001-9081(2009)09-2473-04

多重核线性判别分析及其权值优化

刘笑璋^{1,2}, 冯国灿²

(1. 河源职业技术学院 电子与信息工程系, 广东 河源 517000; 2. 中山大学 数学与计算科学学院, 广州 510275)

(liuxiaozhang@gmail.com)

摘要:为了提高非线性分类精度, 借鉴在支持向量机(SVM)框架下发展起来的多重核学习方法, 针对基于核的线性判别分析(KLDA)构造多重核。进而, 使用拉格朗日乘子法优化最大边缘准则(MMC), 提出了多重核权值优化算法。在 FERET 和 CMU PIE 人脸图像库上的实验表明, 与基于单个核的 LDA 相比, 多重核线性判别分析能够达到更高的分类性能。

关键词:多重核; 核线性判别分析; 最大边缘准则; 权值优化; 拉格朗日乘子法

中图分类号: TP18 **文献标志码:** A

Multiple kernel discriminant analysis with optimized weight

LIU Xiao-zhang^{1,2}, FENG Guo-can²

(1. Department of Electronics and Information Engineering, Heyuan Polytechnic, Heyuan Guangdong 517000, China;

2. School of Mathematics and Computational Science, Sun Yat-sen University, Guangzhou Guangdong 510275, China)

Abstract: In order to enhance the accuracy of nonlinear classification, the multiple kernel learning method developed under the framework of Support Vector Machine (SVM) was referred to. The authors constructed a multi-kernel for kernel-based Linear Discriminant Analysis (LDA). Moreover, a weight optimization scheme for the multi-kernel was proposed by maximizing the Margin Maximization Criterion (MMC) based on the method of Lagrange multipliers. The experiments on the FERET and CMU PIE face database show that multiple kernel discriminant analysis can achieve higher classification performance, compared with single-kernel-based LDA.

Key words: multi-kernel; Kernel Linear Discriminant Analysis (KLDA); Margin Maximization Criterion (MMC); weight optimization; method of Lagrange multipliers

0 引言

随着核技巧在支持向量机 (Support Vector Machine, SVM) 方法中的成功运用, 涌现出很多基于核的子空间方法, 广泛应用于非线性模式分类问题, 其中最具代表性有: 核主成分分析 (Kernel Principal Component Analysis, KPCA)^[1]、核线性判别分析 (Kernel Linear Discriminant Analysis, KLDA)^[2]、广义判别分析 (Generalized Discriminant Analysis, GDA)^[3] 以及核直接线性判别分析 (Kernel Direct LDA, KDDA)^[4]^[117]。理论和实验均表明基于核的 LDA 方法对于人脸识别等非线性分类问题的有效性。然而, 基于核的 LDA 方法的性能对核函数及其参数的选择甚为敏感。现有的核参数选择方法主要是交叉验证 (cross validation)^[5] 和梯度下降法^[6], 计算颇为耗时, 而且仍然不能保证选出最优核参数。此外, 抽象地讲, 单个固定核只能表现出输入数据某一方面的几何结构, 对于涉及到多重、异质数据源的应用^[8], 就未必合适。

近来, 基于支持向量机的应用与开发显示^[9-10], 使用多重核 (一般是若干个“基核”的线性组合) 代替单个核, 可以提高分类性能, 由此产生了所谓的多重核学习 (Multiple Kernel Learning, MKL) 方法。MKL 基于这样的假设: 多个核的组合可以从多个角度刻画原始数据的几何结构, 多个角度的信息可以互补从而提高识别性能。已有证据显示 MKL 能够灵活

处理多重、异质数据源的情况^[7,11-12]。但是, MKL 是在 SVM 的框架下提出的, 迄今还很少见到关于多重核 LDA 方法的报告。本文提出了多重核线性判别分析 (Multiple Kernel LDA, MKDA), 着重解决两个问题: 1) 多重核构造的合法性, 即保证“基核”的线性组合仍然是 Mercer 核; 2) 多重核参数的优化, 即优化“基核”的权值, 使 MKDA 的分类性能最佳。

1 MKDA 的多重核构造

给定 M 个定义在 $\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d$ 上的 Mercer 核函数 $k^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $m = 1, 2, \dots, M$, 称为 M 个“基核”, 构造如下的多重核函数:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{m=1}^M \gamma_m^2 k^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (1)$$

$$\text{s. t. } \sum_{m=1}^M \gamma_m = 1$$

其中 γ_m^2 是基核 $k^{(m)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 的权。显然, 由于权值的非负性, $k(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 也是定义在 $\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d$ 上 Mercer 核。由于 KDDA^[4]^[117-126] 目前是基于核的线性判别分析方法中的主流方法, 本文将如式(1)构造的多重核应用于 KDDA, 并称之为 MKDA。为了使 MKDA 达到良好的非线性分类性能, 需要根据 KDDA 的实现方法, 为各个基核从数据中学习得到合适的权值, 即, 选择最佳的 $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_M)^T$, 而权值优化的方法与基核函数的内部结构无关。

收稿日期: 2009-03-09; 修回日期: 2009-04-24。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (60675007); 教育部重点基金资助项目 (104145)。

作者简介: 刘笑璋 (1978-), 男, 内蒙古集宁人, 讲师, 博士研究生, 主要研究方向: 模式识别、图像处理; 冯国灿 (1962-), 男, 湖北孝感人, 教授, 博士生导师, 主要研究方向: 图像处理、模式识别、计算机视觉。

2 MKDA 的权值优化

2.1 一些记号

设原始样本特征空间的维数为 d , 样本类别维数为 C 。假定第 i 类 X_i 有 N_i 个样本, $X_i = \{x_1^i, x_2^i, \dots, x_{N_i}^i\}$, $i = 1, 2, \dots, C$ 。设 N 为原始训练样本的总数, 从而 $N = \sum_{i=1}^C N_i$ 。定义非线性映射 $\Phi(x): x \in \mathbf{R}^d \rightarrow \Phi(x) \in F$, 其中 F 为映射特征空间, 维数记为 df , 则第 i 映射类为:

$$\Phi(X_i) = \{\Phi(x_1^i), \Phi(x_2^i), \dots, \Phi(x_{N_i}^i)\}$$

于是, 映射类 $\Phi(X_i)$ 的均值和所有映射样本的均值分别是:

$$m_i = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} \Phi(x_j^i)$$

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^C \sum_{j=1}^{N_i} \Phi(x_j^i)$$

特征空间 F 中的类内散布矩阵 S_w^Φ 和类间散布矩阵 S_b^Φ 分别定义为:

$$S_w^\Phi = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^C \sum_{x \in X_i} (\Phi(x) - m_i)(\Phi(x) - m_i)^T = \Phi_w \Phi_w^T \quad (2)$$

$$S_b^\Phi = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^C N_i (m_i - m)(m_i - m)^T = \Phi_b \Phi_b^T \quad (3)$$

其中:

$$\Phi_w = [\varphi_1^1, \dots, \varphi_{N_1}^1, \varphi_1^2, \dots, \varphi_{N_2}^2, \dots, \varphi_1^C, \dots, \varphi_{N_C}^C]_{df \times N};$$

$$\varphi_j^i = \frac{1}{\sqrt{N_i}} (\Phi(x_j^i) - m_i) \quad (4)$$

$$\Phi_b = [j_1, \dots, j_C]_{df \times C}; j_i = \sqrt{\frac{N_i}{N}} (m_i - m) \quad (5)$$

核 Fisher 准则定义为:

$$J^\Phi(W) = \frac{\text{tr}(W^T S_b^\Phi W)}{\text{tr}(W^T S_w^\Phi W)} \quad (6)$$

其中 $W = \{w_1, \dots, w_q\}$ 是 $df \times q$ ($df > q$) 投影矩阵。基于核的 LDA 就是在特征空间 F 中寻求最佳的投影矩阵 $W^*: \mathbf{R}^{df} \rightarrow \mathbf{R}^q$, 使得 $W^* = \arg \max_w J^\Phi(W)$ 。

对于本文提出的 MKDA, 记 $N \times N$ 基核矩阵为:

$$K^{(m)} = [k^{(m)}(x_j^i, x_h^l)]; m = 1, 2, \dots, M \quad (7)$$

其中: $i = 1, 2, \dots, C; j = 1, 2, \dots, N_i; l = 1, 2, \dots, C; h = 1, 2, \dots, N_l; k(x_j^i, x_h^l) = \Phi(x_j^i)^T \Phi(x_h^l)$ 。给定向量 $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_M)^T$ 满足 $\sum_{m=1}^M \gamma_m = 1, N \times N$ 多重核矩阵为:

$$K = \sum_{m=1}^M \gamma_m^2 K^{(m)} \quad (8)$$

2.2 KDDA 的同时对角化策略简介

MKDA 使用 KDDA 的同时对角化策略^{[4]118-120}来处理小样本问题, 即, 先将 S_b^Φ 对角化为 I , 再将 S_w^Φ 对角化为 A_w , 如下所述。

1) 对 S_b^Φ 进行特征分析。

设 λ_i 和 e_i ($i = 1, 2, \dots, C$) 分别是 $\Phi_b^T \Phi_b$ 的第 i 最大特征值和对应的特征向量, $\Phi_b^T \Phi_b$ 可用多重核矩阵 K 如下表示:

$$\Phi_b^T \Phi_b = \frac{1}{N} D \cdot (A_{NC}^T \cdot K \cdot A_{NC} - \frac{1}{N} A_{NC}^T \cdot K \cdot 1_{NC} - \frac{1}{N} 1_{NC}^T \cdot K \cdot A_{NC} + \frac{1}{N^2} 1_{NC}^T \cdot K \cdot 1_{NC}) \cdot D \quad (9)$$

其中 $D = \text{diag}(\sqrt{N_1}, \dots, \sqrt{N_C}), 1_{NC}$ 为 $N \times C$ 的全 1 矩阵, $A_{NC} = \text{diag}(a_{N_1}, \dots, a_{N_C})$ 为 $N \times C$ 分块对角矩阵, 且 a_{N_i} 为分量皆为 $\frac{1}{N_i}$ 的 $N_i \times 1$ 向量。

设 r ($\leq C-1$) 为 $S_b^\Phi (= \Phi_b^T \Phi_b)$ 的秩 (也是 $\Phi_b^T \Phi_b$ 的秩)。记 $E_r = [e_1, \dots, e_r]$, 且 $V = [v_1, \dots, v_r] = \Phi_b E_r$ 。不难看出 $V^T S_b^\Phi V = A_b, A_b = \text{diag}(\lambda_1^2, \dots, \lambda_r^2)$ 是一非奇异对角矩阵。设 $U = V A_b^{-1/2}$, 从而 $U^T S_b^\Phi U = I$ 。

2) 对 S_w^Φ 进行特征分析。

由 1) 中的分析, 易见 $U^T S_w^\Phi U = (E_r A_b^{-1/2})^T (\Phi_b^T S_w^\Phi \Phi_b) (E_r A_b^{-1/2})$, 其中 $\Phi_b^T S_w^\Phi \Phi_b$ 可用 K 表示, 详见文献[4]119。

设 z_i 是对应于 $U^T S_w^\Phi U$ 的第 i 最小特征值 λ_i' 的特征向量, $i = 1, 2, \dots, r$ 。记 $Z = [z_1, \dots, z_r]$, 定义 $Y = UZ$, 易知 $Y^T S_w^\Phi Y = A_w, A_w = \text{diag}(\lambda_1', \dots, \lambda_r')$ 。

基于以上 1) 和 2) 中的推导, 可得 MKDA 的最佳投影矩阵为:

$$W^* = Y A_w^{-1/2} = \Phi_b E_r A_b^{-1/2} Z A_w^{-1/2} \quad (10)$$

2.3 带约束的目标函数最大化

为了避免计算 S_w^Φ 的逆, 我们采用如下的最大边缘准则 (Maximum Margin Criterion, MMC)^[13] 作为目标函数:

$$F(W, \gamma) = \text{tr}(W^T S_b^\Phi W) - \text{tr}(W^T S_w^\Phi W) \quad (11)$$

其中 W 是投影矩阵, $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_M)^T$, 满足 $1^T \gamma = \sum_{m=1}^M \gamma_m = 1, \gamma_m^2$ 是第 m 个基核矩阵 $K^{(m)}$ 的权, 多重核矩阵 $K = \sum_{m=1}^M \gamma_m^2 K^{(m)}$ 。

由式(10), 最佳投影矩阵 $W^* = \Phi_b E_r A_b^{-1/2} Z A_w^{-1/2}$ 。记 $G = E_r A_b^{-1/2} Z A_w^{-1/2}$, 目标函数可重新表示为:

$$F(\gamma) = \text{tr}(W^{*T} S_b^\Phi W^* - W^{*T} S_w^\Phi W^*) = \text{tr}(G^T \Phi_b^T \Phi_b \Phi_b^T G - G^T \Phi_b^T \Phi_b \Phi_w^T \Phi_b G) = \text{tr}(G^T P P^T G - G^T Q Q^T G) \quad (12)$$

其中 $P = \Phi_b^T \Phi_b$ 且 $Q = \Phi_b^T \Phi_w$ 可用多重核矩阵 K 如下表示。

$$P = \frac{1}{N} D \cdot (A_{NC}^T \cdot K \cdot A_{NC} - \frac{1}{N} A_{NC}^T \cdot K \cdot 1_{NC} - \frac{1}{N} 1_{NC}^T \cdot K \cdot A_{NC} + \frac{1}{N^2} 1_{NC}^T \cdot K \cdot 1_{NC}) \cdot D = \sum_{m=1}^M \gamma_m^2 P^{(m)} \quad (13)$$

其中:

$$P^{(m)} = \frac{1}{N} D \cdot (A_{NC}^T \cdot K^{(m)} \cdot A_{NC} - \frac{1}{N} A_{NC}^T \cdot K^{(m)} \cdot 1_{NC} - \frac{1}{N} 1_{NC}^T \cdot K^{(m)} \cdot A_{NC} + \frac{1}{N^2} 1_{NC}^T \cdot K^{(m)} \cdot 1_{NC}) \cdot D; m = 1, 2, \dots, M$$

且 $D, A_{NC}, 1_{NC}$ 与式(9)中的定义相同;

$$Q = \frac{1}{N} D \cdot (A_{NC}^T \cdot K - A_{NC}^T \cdot K \cdot H_{NN} - \frac{1}{N} 1_{NC}^T \cdot K + \frac{1}{N} 1_{NC}^T \cdot K \cdot H_{NN}) = \sum_{m=1}^M \gamma_m^2 Q^{(m)} \quad (14)$$

其中:

$$Q^{(m)} = \frac{1}{N} D \cdot (A_{NC}^T \cdot K^{(m)} - A_{NC}^T \cdot K^{(m)} \cdot H_{NN} - \frac{1}{N} 1_{NC}^T \cdot K^{(m)} + \frac{1}{N} 1_{NC}^T \cdot K^{(m)} \cdot H_{NN}); m = 1, 2, \dots, M$$

其中: $H_{NN} = \text{diag}(h_{N_1}, \dots, h_{N_C})$ 为 $N \times N$ 分块对角矩阵, 且 h_{N_i} 为元素皆为 $\frac{1}{N_i}$ 的 $N_i \times N_i$ 矩阵。

于是,要寻求式(8)中多重核的最佳权值,需要解决如下带约束优化问题:

$$\begin{aligned} \max_{\gamma} F(\gamma) &= \text{tr}(G^T P P^T G - G^T Q Q^T G) \\ \text{s. t. } 1^T \gamma &= \sum_{m=1}^M \gamma_m = 1 \\ \text{引进拉格朗日函数:} \\ L(\gamma, \alpha) &= F(\gamma) + \alpha \left(\sum_{m=1}^M \gamma_m - 1 \right) \end{aligned} \quad (15)$$

其中 α 为拉格朗日乘子。由式(13)、(14)可得:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial \gamma_m} &= 2\gamma_m P^{(m)} \\ \frac{\partial Q}{\partial \gamma_m} &= 2\gamma_m Q^{(m)} \\ \text{进而} \\ \frac{\partial F(\gamma)}{\partial \gamma_m} &= \frac{\partial}{\partial \gamma_m} (\text{tr}(G^T P P^T G - G^T Q Q^T G)) = \\ &= \text{tr} \left(\frac{\partial}{\partial \gamma_m} (G^T P P^T G - G^T Q Q^T G) \right) = \\ &= \text{tr} \left((G^T \frac{\partial P}{\partial \gamma_m} P^T G + G^T P \frac{\partial P^T}{\partial \gamma_m} G) - (G^T \frac{\partial Q}{\partial \gamma_m} Q^T G + \right. \\ &\quad \left. G^T Q \frac{\partial Q^T}{\partial \gamma_m} G) \right) = 2\gamma_m \sum_{k=1}^M \gamma_k^2 tr_{m,k} \end{aligned} \quad (16)$$

其中:

$$\begin{aligned} tr_{m,k} &= \text{tr}((G^T P^{(m)} P^{(k)T} G + G^T P^{(k)} P^{(m)T} G) - \\ &\quad (G^T Q^{(m)} Q^{(k)T} G + G^T Q^{(k)} Q^{(m)T} G)); \\ m &= 1, 2, \dots, M; k = 1, 2, \dots, M \end{aligned}$$

将 $L(\gamma, \alpha)$ 关于 γ_m ($m = 1, 2, \dots, M$)和 α 求偏导:

$$\frac{\partial L(\gamma, \alpha)}{\partial \gamma_m} = 2\gamma_m \sum_{k=1}^M \gamma_k^2 tr_{m,k} + \alpha; m = 1, 2, \dots, M \quad (17)$$

$$\frac{\partial L(\gamma, \alpha)}{\partial \alpha} = \sum_{m=1}^M \gamma_m - 1 \quad (18)$$

令此 $M+1$ 个偏导数全部为零,得到方程组:

$$\begin{cases} 2\gamma_m \sum_{k=1}^M \gamma_k^2 tr_{m,k} + \alpha = 0, m = 1, \dots, M \\ \sum_{m=1}^M \gamma_m - 1 = 0 \end{cases} \quad (19)$$

为方便迭代求解,将方程组(19)改写为:

$$\begin{cases} 2\gamma_m^{(i+1)} \sum_{k=1}^M \gamma_k^{(i)2} tr_{m,k} + \alpha = 0, m = 1, 2, \dots, M \\ \sum_{m=1}^M \gamma_m^{(i+1)} - 1 = 0 \end{cases} \quad (20)$$

其中 $i = 0, 1, 2, \dots$ 。

因而,第 i 次迭代将 $\gamma^{(i)} = (\gamma_1^{(i)}, \dots, \gamma_M^{(i)})^T$ 如下更新为 $\gamma^{(i+1)} = (\gamma_1^{(i+1)}, \dots, \gamma_M^{(i+1)})^T$:

$$\gamma_m^{(i+1)} = \frac{1}{2 \sum_{k=1}^M \gamma_k^{(i)2} tr_{m,k} \cdot \sum_{m=1}^M \left(2 \sum_{k=1}^M \gamma_k^{(i)2} tr_{m,k} \right)^{-1}}; m = 1, 2, \dots, M \quad (21)$$

2.4 权值优化算法

基于以上分析, MKDA的权值优化算法描述如下。

输入: M 个基核矩阵 $K^{(m)} = [k^{(m)}(x_i, x_j)]_{N \times N}, m = 1, 2, \dots, M$ 。

输出: 向量 $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_M)^T$, γ_m^2 是基核 $K^{(m)}$ 的权。

步骤1 给定 $\varepsilon > 0$ 。置迭代计数器 $i = 0$, 初始化 $\gamma^{(0)} =$

$(\gamma_1^{(0)}, \dots, \gamma_M^{(0)})$, 使 $1^T \gamma^{(0)} = 1$ 。

步骤2 使用带约束的多重核 $K = \sum_{m=1}^M \gamma_m^{(0)2} K^{(m)}$ 及KDDA同时对角化策略, 寻求最佳投影矩阵:

$$W^* = \Phi_b G = \arg \max_w J^\Phi(W)$$

步骤3 构造带约束优化问题。

$$\max_{\gamma} F(\gamma) = \text{tr}(G^T P P^T G - G^T Q Q^T G)$$

$$\text{s. t. } 1^T \gamma = \sum_{m=1}^M \gamma_m = 1$$

计算矩阵 $(tr_{m,k})_{M \times M}$, 其中:

$$tr_{m,k} = \text{tr}((G^T P^{(m)} P^{(k)T} G + G^T P^{(k)} P^{(m)T} G) - (G^T Q^{(m)} Q^{(k)T} G + G^T Q^{(k)} Q^{(m)T} G));$$

这里, $m = 1, 2, \dots, M; k = 1, 2, \dots, M$ 。

步骤4 更新权值。使用式(21)由 $\gamma^{(i)}$ 计算 $\gamma^{(i+1)}$ 。若 $\|\gamma^{(i+1)} - \gamma^{(i)}\| > \varepsilon$, 则 $i = i + 1$, 转步骤2; 否则结束。

注 在第3章的实验中, γ 的初值设置为 $\gamma_1^{(0)} = \dots = \gamma_M^{(0)} = 1/M$, ε 设置为 $5e-3$ 。

3 实验及结果分析

本节使用 FERET^[14]和 CMU PIE^[15]人脸图像库数据评估 MKDA 及其权值优化算法的性能。

3.1 人脸图像数据库

从 FERET 数据库中, 选出 72 个人, 每人 6 幅正面人脸像。这 432 幅像含有光照、表情、年龄等变化。所有的图像按照双眼中心和嘴巴中心对齐, 然后将分辨率调整为 92×112 。每幅图像的像素值归一化到 0 与 1 之间。图 1 是其中一个人的图像。



图1 FERET 数据库中一个人的6幅图像

在 CMU PIE 人脸数据库中, 有 68 个人, 每人有 13 种姿势变化和 43 种光照条件。实验选取每人 56 幅图像, 分别为自然表情的 13 种姿势像和 43 种光照条件下的正面人脸像。对于所有的正面人脸像, 按照双眼中心和鼻子中点对齐, 对于姿势像则不做对齐处理。所有图像的分辨率均调整为 92×112 。图 2 是其中一个人的部分图像。



图2 CMU PIE 人脸数据库中一个人的部分图像

3.2 MKDA 和单个核 KDDA 的性能比较

实验选取三个基核 ($M = 3$): 线性核 $k_1(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$, 高斯核 $k_2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp(-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2\sigma^2})$, 其中 σ 设置为所有原始样本距离 ($\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|, i, j = 1, 2, \dots, N$) 的平均值, 以及多项式核 $k_3(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j + 1)^d$, 其中 $d = 0.5$ 。于是多重核即为:

$$\sum_{m=1}^3 \gamma_m^2 k_m(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

s. t. $\sum_{m=1}^3 \gamma_m = 1$

为了验证 MKDA 及其权优化算法的有效性, 将其与基于单个核的 KDDA 比较。

对于 FERET 数据库, 从每个人的 6 幅图像中随机选出 3 幅用于训练, 剩下 3 幅用于测试。对于 CMU PIE 数据库, 从每个人的 56 幅图像中随机选出 14 幅用于训练, 剩下 42 幅用于测试。在这两个数据库上分别进行 10 次随机实验, 平均识别率及标准差列于表 1。

表 1 MKDA 和单个核 KDDA 的性能比较

核的种类	统计量	FERET	CMU PIE
线性核	平均识别率/%	84.94	71.79
	标准差	0.015	0.014
RBF 核	平均识别率/%	73.84	69.03
	标准差	0.040	0.010
多项式核	平均识别率/%	84.80	76.50
	标准差	0.017	0.010
相同权值的多重核	平均识别率/%	80.84	71.81
	标准差	0.030	0.014
优化权值的多重核	平均识别率/%	86.34	78.74
	标准差	0.015	0.007

表 1 结果显示, 实验所用的多重核能够达到比任一基核都高的分类精度。然而, 多个核的简单相加并不能保证提高分类性能, 多重核的权值优化促使了分类性能的提升。

值得注意的是, 实验中 RBF 核和多项式核的参数并非是最优选择, 线性核甚至没有参数。这意味着, 在一定程度上, 使用多重核降低了对基核参数选择的要求。

4 结语

基于多重核可以从多个角度刻画原始数据几何结构这一假设, 本文提出了多重核线性判别分析方法 (MKDA), 并通过使用拉格朗日乘子法优化最大边缘准则, 给出了 MKDA 权值优化的迭代算法。权值优化后的 MKDA 在 FERET 和 CMU PIE 人脸图像库上的实验中显示了高于单个核 LDA 的分类性能。实验还表明, 使用多重核可以降低对核参数选择的要求。

需要指出, 虽然在本文中 MKDA 的权值优化算法是针对 KDDA 推导得出的, 但不难看出它是具有一般性的, 完全可以通过简单修改而应用于其他基于核的 LDA 算法。

参考文献:

[1] SCHÖLKOPF B, SMOLA A, MÜLLER K R. Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem [J]. *Neural Computation*, 1998, 10(5): 1299–1319.

[2] MIKA S, RÄTSCCH G, WESTON J, *et al.* Fisher discriminant analysis with kernels [C]// *Proceedings of IEEE International Workshop on Neural Networks for Signal Processing IX*. Madison, USA: IEEE Computer Society, 1999: 41–48.

[3] BAUDAT G, ANOUAR F. Generalized discriminant analysis using a kernel approach [J]. *Neural Computation*, 2000, 12(10): 2385–2404.

[4] LU J W, PLATANIOTIS K N, VENETSANOPOULOS A N. Face recognition using kernel direct discriminant analysis algorithms [J]. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 2003, 14(1): 117–126.

[5] CHAPELLE O, VAPNIK V, BOUSQUET O, *et al.* Choosing multiple parameters for support vector machines [J]. *Machine Learning*, 2002, 46(1): 131–159.

[6] HUANG J, YUEN P C, CHEN W S, *et al.* Choosing parameters of kernel subspace LDA for recognition of face images under pose and illumination variations [J]. *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics*, 2007, 37(4): 847–862.

[7] SONNENBURG S, RÄTSCCH G, SCHÄFER C. A general and efficient multiple kernel learning algorithm [C]// *NIPS'05: Advances in Neural Information Processing Systems*. Cambridge, MA: MIT Press, 2005: 1273–1280.

[8] WANG Z, CHEN S C, SUN T K. Multi K-MHKS: A novel multiple kernel learning algorithm [J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2008, 30(2): 348–353.

[9] BI J, ZHANG T, BENNETT K. Column-generation boosting methods for mixture of kernels [C]// *Proceedings of the 10th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. Seattle, WA: ACM Press, 2004: 521–526.

[10] LANCKRIET G, CRISTIANINI N, BARTLETT P, *et al.* Learning the kernel matrix with semidefinite programming [J]. *Journal of Machine Learning Research*, 2004, 5: 27–72.

[11] BACH F, LANCKRIET G, JORDAN M. Multiple kernel learning, conic duality, and the SMO algorithm [C]// *Proceedings of the 21st International Conference on Machine Learning*. New York: ACM press, 2004: 775–782.

[12] BENNETT K, MOMMA M, EMBRECHTS M. MARK: A boosting algorithm for heterogeneous kernel models [C]// *Proceedings of the 8th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. Edmonton, Canada: ACM press, 2002: 24–31.

[13] LI H, JIANG T, ZHANG K. Efficient and robust feature extraction by maximum margin criterion [C]// *Advances in Neural Information Processing Systems 16*. Cambridge, MA: MIT Press, 2004: 157–165.

[14] PHILLIPS P J, MOON H, RIZVI S A, *et al.* The FERET evaluation methodology for face-recognition algorithms [J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2000, 22(10): 1090–1104.

[15] SIM T, BAKER S, BSAT M. The CMU pose, illumination, and expression (PIE) database [C]// *Proceedings of the 5th IEEE International Conference on Automatic Face and Gesture Recognition*. Washington, DC, USA: IEEE Computer Society, 2002: 46–51.