文章编号:0253-9721(2007)03-0076-03

KFDA 在领口质量评价系统中的应用

李晓久,刘皓
(天津工业大学 纺织学院,天津 300160)

摘 要 织物领口性能评价是织物性能评价中的一个重要部分,为实现评价系统分类的自动化,提出了采用核 Fisher 判别分析(KFDA)方法来识别新样本的类别,将已分类的样本分为训练样本和测试样本。应用核函数将输入空间映射到特征空间,并在特征空间中求取训练样本投影矢量和构建判别函数组,然后用测试样本来验证判别函数组的识别效果。最后对 KFDA、BP 神经网络(BPNN)和径向基神经网络(RBFNN) 3 种方法的识别效果进行了对比,结果显示 KFDA 方法对于新样本具有较高的识别率。

关键词 核 Fisher 判别分析;特征提取;分类;领口
中图分类号:TS941.79;TP274.3　　文献标识码:A

Application of KFDA in evaluation system of neckline performance

LI Xiaojiu, LIU Hao
(*School of Textiles, Tianjin Polytechnic University, Tianjin 300160, China*)

Abstract Neckline performance evaluation is an important part for knitted sweater. In order to implement classification automation of testing system, kernel Fisher discriminant analysis (KFDA) is proposed for identifying the grade of new testing samples. Classified samples are divided into two parts: training samples and testing samples. Input space is mapped into feature space by kernel function, projection vector is acquired and discriminant functions is constructed in feature space, subsequently, identification effect is verified by testing samples. Finally, identification effects of KFDA, back promulgation neural network (BPNN) and radial basis function neural network (RBFNN) are compared. Experiment results show that KFDA method is more effective for identification of new samples.

Key words kernel Fisher discriminant analysis; feature extraction; classification; neckline

弹性织物领口质量的自动分类和自动评价是领口质量评价系统中的一个重要组成部分,评价系统能够获取领口性能的多个指标,系统的建立可分为 2 个部分,首先是应用无监督的聚类方法,将分类情况未知的样本进行聚类并得到各样本的类别信息,然后利用类别信息已知的样本建立判别函数用于新样本的识别。文献[1]采用 Fisher 线性判别分析建立判别函数组,该方法对于线性可分的输入样本集具有较高的识别率,但是对于不可分的样本集却有较高的误差。文献[2-3]提出 KFDA 算法,即应用核函数将低维的输入空间映射到高维的特征空间,使得输入空间线性不可分在特征空间中可分的概率大大提高。文献[4]提出了 KFDA 算法的本质为 KPCA 和 LDA 算法的组合。文献[5-6]改进了 KFDA 算法,提高了该算法的效率。在上述文献的基础上,本文应用 KFDA 算法对领口质量性能进行评价,以模糊聚类分析的分类结果作为训练样本,应用 KFDA 算法建立了用于新样本识别的判别函数,将无监督的模糊聚类分析和 KFDA 构成了一个完整的领口质量评价系统。

1 KFDA 的分类方法

1.1 核 Fisher 判别准则

设有一个训练样本集 $X=\{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$,每个

收稿日期:2006-05-04　　修回日期:2006-09-25
作者简介:李晓久(1956—),男,教授。主要研究领域为数字化服装技术。E-mail: lixiaojiu@tjpu.edu.cn。

样本有 p 个指标, m 为样本的分类数, $l_i(i=1,2,\cdots,m)$ 为第 i 类中的训练样本个数。对训练样本集 X 应用 $x_i=(x_i^0-\bar{x}^0)/\delta$ 进行标准化处理,其中 x_i^0、$\bar{x}^0$ 和 δ 分别为第 i 类样本的原始数据、平均值和标准方差。输入数据空间 R^p 能够通过非线性映射函数映射到特征空间 F:

$$\phi: R^p \rightarrow F, x \mid \rightarrow \phi(x) \tag{1}$$

核函数的选择决定了输入空间到特征空间的映射过程,特征空间是一个高维空间,其维数甚至可能是无限维的。在特征空间的 Fisher 准则函数可以被定义为

$$J(v)=\frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_t\boldsymbol{v}} \tag{2}$$

式(2)中的 S_b 和 S_t 分别是特征空间中的类间离散矩阵和总的类内离散矩阵,可表述为

$$\boldsymbol{S}_b=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{m} l_i(\bar{\phi}_i-\bar{\phi}_0)(\bar{\phi}-\bar{\phi}_0)_i^{\mathrm{T}} \tag{3}$$

$$\boldsymbol{S}_t=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\phi(x_i)-\bar{\phi}_0)(\phi(x_i)-\bar{\phi}_0)^{\mathrm{T}} \tag{4}$$

其中: $\bar{\phi}_i$ 为第 i 类样本的均值, $\bar{\phi}_0$ 为样本集 X 的均值。

1.2　最优投影方向矢量集的求取

选择合适的核函数将输入空间的数据映射到特征空间 F 中,在特征空间中求取核矩阵 $\boldsymbol{K}'$, 其中 $k'_{ij}(x_i,x_j)=\phi^{\mathrm{T}}(x_i)\phi(x_j)$,对其作中心化处理得到中心化核矩阵 $\boldsymbol{K}$,可表述为

$$\boldsymbol{K}=\boldsymbol{K}'-\boldsymbol{B}\boldsymbol{K}'-\boldsymbol{K}'\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{K}'\boldsymbol{B} \tag{5}$$

其中 $\boldsymbol{B}$ 为 $(1/n)_{n\times n}$ 矩阵。

要使式(2)最大化等价于求式(6)的特征解。

$$\lambda \boldsymbol{S}_b\boldsymbol{v}=\boldsymbol{S}_t\boldsymbol{v} \tag{6}$$

因为特征矢量 $\boldsymbol{v}$ 是特征空间 F 中各元素的线性组合,因此总会存在一个系数 $\alpha_i(i=1,2,\cdots,n)$ 使得

$$\boldsymbol{v}=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\phi(x_i) \tag{7}$$

设 $W=\mathrm{diag}(W_1,W_2,\cdots,W_c)$,其中 $(W_i)_{l_i\times l_i}$ 是一个元素为 $1/l_i$ 的方阵,根据块矩阵 W 和求得的中心化核矩阵 $\boldsymbol{K}$ 可以将式(2)转化为式(8),使得在最大化准则函数时并不需要直接求出高维特征空间中的元素,而是通过对核函数的运算实现输入空间到特征空间的转换,并找出最好的投影矢量。

$$J(\alpha)=\frac{\alpha^{\mathrm{T}}\boldsymbol{KWK}\alpha}{\alpha^{\mathrm{T}}\boldsymbol{KK}\alpha} \tag{8}$$

为使计算进一步简化和明了,对核矩阵 $\boldsymbol{K}$ 进行分解,设 Λ 是 $\boldsymbol{K}$ 的非零特征值的对角矩阵,其对角元素是按降序排列的,因此 Λ^{-1} 是存在的。$\boldsymbol{P}$ 是与 Λ 对应的特征矢量,且有 $\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$,其中 $\boldsymbol{I}$ 为单位矩阵,那么 $\boldsymbol{K}$ 可表示为 $\boldsymbol{K}=\boldsymbol{P}\Lambda\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$,将 $\boldsymbol{K}$ 代入式(8),能够得到

$$J(\alpha)=\frac{(\Lambda\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\alpha)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{WP}(\Lambda\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\alpha)}{(\Lambda\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\alpha)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}(\Lambda\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\alpha)}$$

令

$$\beta=\Lambda\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\alpha \tag{9}$$

并将其代入上式则有:

$$J(\beta)=\frac{\beta^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{WP}\beta}{\beta^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\beta} \tag{10}$$

由于 $\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$,使式(10)最大化的问题又可归结为求式(11)的特征值。

$$\lambda\beta=\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{WP}\beta \tag{11}$$

求矩阵 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{WP}$ 的特征矢量 β。由式(9)可知,对于一个给定的 β 至少存在一个 α 符合 $\alpha=\boldsymbol{P}\Lambda^{-1}\beta$。由式(7)就可得到关于式(1)的最优投影方向矢量集 $\boldsymbol{V}$。

$$v_i=\alpha_i/\sqrt{\alpha_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}\alpha_i}\quad(i=1,2,\cdots,r) \tag{12}$$

其中 $r=\min(\mathrm{rank}(\boldsymbol{K}),m-1)$, $\mathrm{rank}(\boldsymbol{K})$ 为矩阵 $\boldsymbol{K}$ 的秩。

1.3　核 Fisher 判别函数的建立

1.3.1　求取训练样本集在投影方向上的投影矢量

对于选定的核函数,应用式(13)可求取训练样本集的核矩阵 $\boldsymbol{K}''$。

$$k''_{ij}(x_i,x_j)=\phi^{\mathrm{T}}(x_i)\phi(x_j)-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}k''_{ij}$$
$$(i=1,2,\cdots,n;\ j=1,2,\cdots,n) \tag{13}$$

应用式(14)获得训练样本的投影矢量 $\boldsymbol{P}$。

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{K}''V \tag{14}$$

1.3.2　获取训练样本集各类的中心投影矢量

$\boldsymbol{P}$ 是一个 $n\times r$ 维的矩阵,可表示为 $\boldsymbol{P}=(p_1,p_2,\cdots,p_m)$,其中 $p_i(p_{i1},p_{i2},\cdots,p_{il_i})$。训练样本的分类情况可以应用模糊聚类分析、概率神经网络或者是自组织神经网络得到,训练样本在投影矢量的类中心矢量 $\boldsymbol{C}=(c_1,c_2,\cdots,c_m)$ 可由式(15)求得。

$$c_i=\frac{1}{l_i}\sum_{j=1}^{l_i}p_{ij} \tag{15}$$

1.3.3　求取测试样本的投影矢量

设有测试样本集 $T=(t_1,t_2,\cdots,t_q)$,以训练样本的均值 $\bar{x}^0$ 和标准方差 δ 对测试样本作标准化处理,依据选定的核函数求取训练样本集 X 和测试样本集 T 的核矩阵 $k''_{ij}(t_i,x_j)=\phi^{\mathrm{T}}(t_i)\phi(x_j)-$

$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}k_{ij}''$，其中 $i=1,2,\cdots,q$；$j=1,2,\cdots,n$。然后应用式(14)求取 T 的投影矢量集 $P'=(p_1',p_2',\cdots,p_q')$，对于测试样本 t_j 类别的判别函数组为

$$d_i = \| p_j' - c_i \| \quad (i=1,2,\cdots,m; j=1,2,\cdots,q) \tag{16}$$

依据最近距离原则，对于测试样本 t_j 如果有 $d_k = \min(d_i)$ $(k=1,2,\cdots,m)$，则其类别应为第 k 类。

2　实验应用

在领口性能评价系统中，带权重的模糊聚类分析方法能够对未分类的样本进行分类，并应用 Mixed-F 统计量和类间模糊划分熵验证分类的合理性和聚类的有效性，从而对已有的训练样本选择一个合适的分类数。以 VC 6.0 为开发工具实现了 KFDA 方法对测试新样本的领口性能进行分类评价。

将测试的 60 个样本的指标集分为 2 类，第 1 类为舒适性指标集(包括第一次拉伸的初始长度、拉伸功、恢复功和最大拉力)，第 2 类为耐用性指标集(包括初始长度差，拉伸功差、回复功差、最大拉力差和拉伸回复性能)，采用带权重的模糊聚类分析方法对测试样本在每一类指标上进行分类，并以混合 F 统计量和模糊划分熵对分类的合理性和聚类的有效性进行评价，在舒适性和耐用性指标集上，其样本分别分为 5 类和 2 类时其 Mixed-F 统计量最大并且模糊划分熵最小[7]。

实验前先以 BPNN(BP 神经网络)、RBFNN(径向基神经网络)和 KFDA(核 Fisher 判别分析)对 Iris 数据进行分析。BPNN 的结构为 3 层神经网络，中间层神经元的个数依据 $n_1=\sqrt{i+o}+a$(其中 n_1，i，o 分别为隐含层、输入层和输出层的节点数，a 取 1～10 间的整数)选择，中间层的传递函数为“tansig”，输出层的传递函数为“purelin”，训练算法采用基于数值优化的 Levenberg-Marquardt 算法，输出容差为 0.05，训练误差为 0.001，2 种神经网络的监督信号均为“0-1”型信号，RBFNN 的传播系数为 1.0。在 KFDA 中映射的核函数为：$k(x,y)=\exp(-\|x-y\|^2/\sigma)$，其中 σ 参数取 0.7。以 Iris 数据每类的前 3/4 的样本为训练样本，每类的后 1/4 作为测试样本，并以对新样本的识别率来评价上述 3 种方法的识别效果。实验结果显示 BP 神经网络、RBF 神经网络和 KFDA 3 种方法对 Iris 数据的识别率分别为 93.33%，86.67%和 96.67%。

将样本数据集中每类的前 3/4 样本作为训练样本，每类的后 1/4 样本作为测试样本，应用上述 3 种方法在舒适性指标集和耐用性指标集的各自的训练样本上分别求取其判别函数组，并且应用判别函数组对测试样本的识别效果由识别率来表示。实验数据分析显示，BPNN，RBFNN 和 KFDA 3 种方法在舒适性指标集上的识别率分别为 86.67%，73.33%和 93.33%，而在耐用性指标集上的识别率分别为 93.33%，86.67%和 93.33%。

通过应用 BPNN，RBFNN 和 KFDA 3 种方法对 Isir 数据和实验实测数据的分析可以看出：KFDA 方法对于样本的识别具有最好的识别效率；KFDA 方法通过核映射方法有效解决了在高维特征空间计算可能产生的维数灾难，并且克服了 Fisher 判别分析无法构建输入空间线性不可分数据集的判别函数组的不足。评价系统中选用该方法构建新样本分类的判别函数是非常成功的。

3　结束语

本文将 KFDA 方法应用于领口性能质量评价系统中，并取得了较好的效果。无监督的模糊聚类分析和 KFDA 构成了一个完整领口质量评价系统，使得评价更客观和准确，并有效提高了多指标数据分析处理的效率，降低了数据处理的难度。　FZXB

参考文献：

[1] 李晓久，刘皓．基于数据分析的羊毛衫领口性能评价方法的确定[J]．东华大学学报，2005，31(5)：59－63．

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

[3] Mika S，Rätsch G，Weston J，et al．Fisher discriminant analysis with kernel[J]．IEEE International Workshop on Neural Networks for Signal Processing IX，1999：41－48．

[4] Yang Jian，Jin Zhong，Yang Jingyu，et al．Essence of kernel Fisher discriminant：KPCA plus LDA[J]．Pattern Recognition，2004，37：2097－2100．

[5] Abdallah F，Richard C．An improved training algorithm for nonlinear kernel discriminants[J]．IEEE Transactions on Signal Processing，2004，52(10)：2798－2806．

[6] Liang Zhizheng，Shi Pengfei．An efficient and effective method to solve kernel Fisher discriminant analysis[J]．Neural Computation，2004，61：485－496．

[7] 孙才志．观测数据聚类的有效性评价、检验方法研究[J]．系统工程，2000，18(3)，61－64．