模式识别

特征归一化
Fisher线性判别分析
应用：人脸识别

吴建鑫
南京大学计算机系，2017

目标

- ✓ 掌握并能应用常见的特征归一化方法
- ✓ 能应用FLD，并能掌握其推导过程
- ✓ 能将PCA和FLD应用到人脸识别当中去

- ✓ 提高目标
  - 进一步能将本章方法应用到实际研究问题中去（研究生、部分本科生）
  - 对线性判别在不同条件下的变化，有兴趣的可以进一步阅读

特征归一化

Feature normalization

1. 每维度归一

- per-dimension normalization
  - 虚拟的例子（判别性别）
    - 假设用两个特征：身高和体重
    - 如果1. 身高单位毫米，体重单位吨，那么？
    - 如果2. 身高单位公里，体重单位克，那么？
  - 很多时候，不同的维度需要统一到同样的取值范围！
- 训练集：$\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n$，　　$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{id})$
  - 对每一维j，其数据为$x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{nj}$
  - 取其最小值 $x_{min,j}$和最大值$x_{max,j}$
  - 对这一维的任何数据　$x_{ij} \leftarrow \frac{x_{ij} - x_{min,j}}{x_{max,j} - x_{min,j}}$

稀疏数据

- ✓ 新数据的范围是？各维度统一了吗？
  - [0 1]
  - 若某一维$x_{max,j} = x_{min,j}$？
  - 也可以统一到[−1 1]

$$x_{ij} \leftarrow 2 \times \left(\frac{x_{ij} - x_{min,j}}{x_{max,j} - x_{min,j}} - 0.5\right)$$

- ✓ 稀疏数据sparse data：数据中很多维度值为0
  - 如果所有数据≥ 0，在两种归一化中，原来是0的会变成什么？

2. ℓ_2或ℓ_1归一化

- ✓ 若各维度取值范围的不同是有意义的，但是不同数据点之间的大小（如向量长度norm）应保持一致
  - 对每个数据$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{id})$

$$x_{ij} \leftarrow \frac{x_{ij}}{\|\boldsymbol{x}_i\|_{\ell_2}} \qquad \|\boldsymbol{x}_i\|_{\ell_2} = \sqrt{\boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{x}_i}$$

- ✓ ℓ_1归一化
  - 适用于非负的特征，即$x_{ij} \geq 0$总成立
  - 若数据$\boldsymbol{x}_i$是直方图(histogram)时，经常是最佳的

$$x_{ij} \leftarrow \frac{x_{ij}}{\|\boldsymbol{x}_i\|_{\ell_1}} \qquad \|\boldsymbol{x}_i\|_{\ell_1} = \sum_{j=1}^{d} |x_{ij}|$$

3. zero-norm, unit variance

- ✓ 有时候有理由相信每一个维度是服从高斯分布的
  - 希望每一个维度归一化到$N(0,1)$
- ✓ 对每一维j，其数据为$x_{1j}, x_{2j}, \ldots, x_{nj}$
  - 计算其均值$\hat{\mu}_j$和方差$\hat{\sigma}_j^2$
  - 对每一个特征值

$$x_{ij} \leftarrow \frac{x_{ij} - \hat{\mu}_j}{\hat{\sigma}_j}$$

归一化测试数据

- 怎样归一化测试数据？
  - 从测试集寻找最大值、最小值、均值？
- 除了在测试的时候，永远不要使用测试数据！
  - 测试集和训练集应该使用相同的归一化方法
    - 还记得吗？训练和测试集应该从相同的$p(\boldsymbol{x})$取样
    - 同样的归一化会保持这个限定！
  - 这个原则同样适用于交叉验证！
- 那么，怎样做？
  - 保存从训练集上取得的归一化参数(parameter)
  - 使用同样的公式和保存的参数来归一化测试集

小结

- ✓ 归一化的方法应该是根据数据的特点来选择的
  - 在做任何机器学习之前，先搞清你的数据的特点
    - 稀疏？
    - 每一维有没有含义？
    - 每一维里面值的分布情况？Gauss？
    - 看你的数据·！Do visualization!
- ✓ 归一化可能对准确度有极大的影响！
  - 在有些例子里，正确的归一化能大幅度提高accuracy
- ✓ 不同的归一化方法可以混合使用

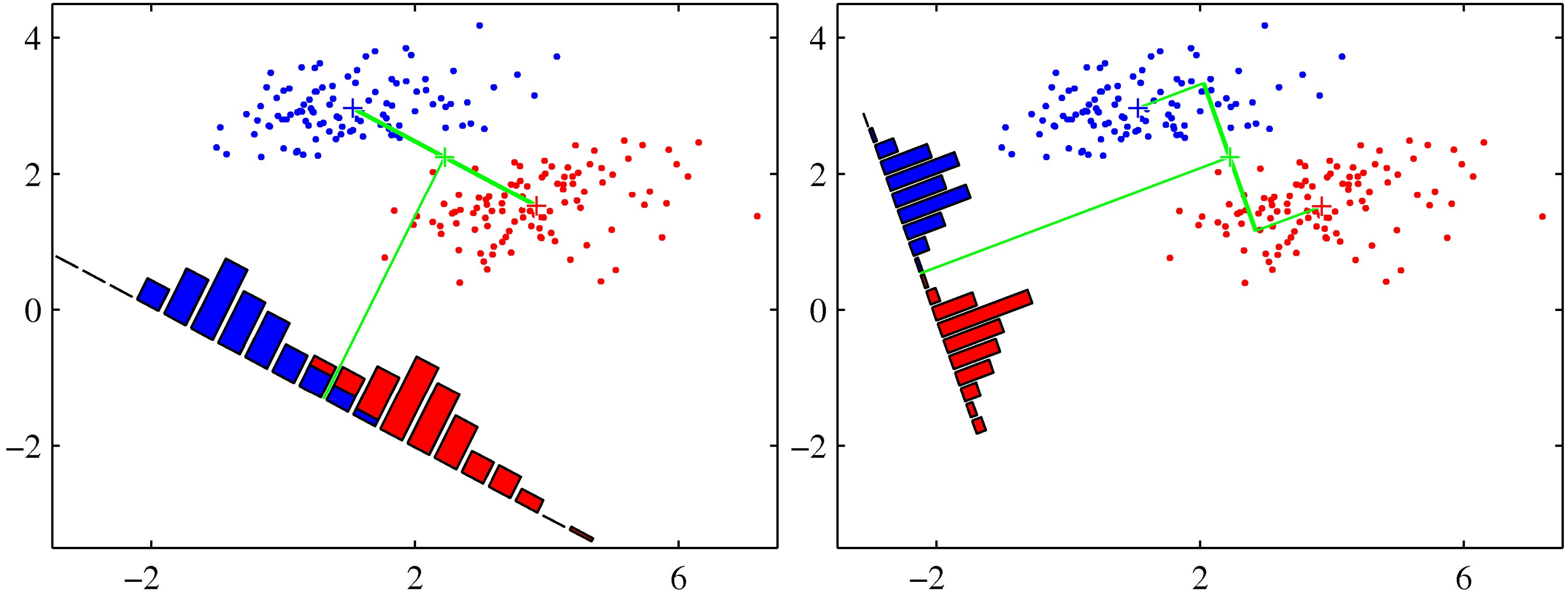
Fisher线性判别分析

Fisher’s Linear Discriminant analysis (FLD, 或有时候LDA)

为什么需要FLD？

- 理论上可以证明，PCA在数据是单个高斯分布是最佳
  - PCA有利于表示数据，但和分类无关
- 分类问题中，不同类别的分布$p(\boldsymbol{x}|y=i)$不能相同
- 如何提取特征(extract feature)，最有利于分类?
  - FLD是某些限制条件下最佳的线性特征提取方法 optimal linear feature extraction method under certain assumptions

Idea: FLD的动机 (motivation)



Bad linear feature (projection)　　Good linear feature (projection)

Image courtesy of Christopher M. Bishop, author of PRML
http://research.microsoft.com/en-us/um/people/cmbishop/prml/webfigs.htm

用数学形式表示formalize

- ✓ 两个类别$y_i \in \{1,2\}$，数据$\boldsymbol{x}_i$，两类各有N_1, N_2个点
- ✓ 希望寻找一个投影方向projection direction，$u = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$，使得两个类别的数据在投影以后容易被分开separate

- ✓ 两个类各自的均值为
  - $\boldsymbol{\mu}_1 = \frac{1}{N_1}\sum_{y_i=1}\boldsymbol{x}_i$，
    $\boldsymbol{\mu}_2 = \frac{1}{N_2}\sum_{y_i=2}\boldsymbol{x}_i$
  - 投影以后的均值为$m_1 = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\mu}_1$， $m_2 = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\mu}_2$

Objective: Fisher’s Criterion

- ✓ 怎样描述“分开”的程度(separation)?
- ✓ Maximize $(m_2 - m_1)^2$? 问题?
  - 这个值可以无限大。怎么解决?
  - 加限制条件$\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w} = 1$
  - 看前面的图，这个值不是越大越好。怎么解决?
- ✓ Fisher准则
  - 在要求$|m_2 - m_1|$尽量大的同时，要求两类在投影以后尽量集中，或者不分散。怎么度量分散程度?

$$J(\boldsymbol{w}) = \frac{(m_2 - m_1)^2}{s_1^2 + s_2^2}$$

分散程度的度量

- ✓ 对一维数据，自然的度量是方差或散度（$k = 1,2$）

$$s_k^2 = \sum_{y_i=k} (u_i - m_k)^2$$

  - 称为类内散度within class scatter
- ✓ $s_1^2 + s_2^2$：总的类内散度
  - total within-class scatter
- ✓ $s_k^2 = \sum_{y_i=k} (u_i - m_k)^2 = \sum_{y_i=k} (\boldsymbol{w}^T(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k))^2 = \boldsymbol{w}^T \sum_{y_i=k} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)^T \boldsymbol{w}$
- ✓ $(m_2 - m_1)^2 = \boldsymbol{w}^T (\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)^T \boldsymbol{w}$

散布矩阵

- ✓ $S_k = \sum_{y_i=k}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)^T$ 是什么？
- ✓ 类内散布矩阵within-class scatter matrix

$$S_W = S_1 + S_2$$

- ✓ 类间散布矩阵between-class scatter matrix

$$S_B = (\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)^T$$

- ✓ Fisher准则的矩阵形式(为什么要有矩阵形式？)
  - $\max J(\boldsymbol{w}) = \frac{\boldsymbol{w}^T S_B \boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^T S_W \boldsymbol{w}}$， $s.t. \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w} = 1$
  - 这种形式称为广义瑞利商generalized Rayleigh quotient

Optimization: 如何求解？

- ✓ (Simplification/transformation) 练习：用拉格朗日乘子法，证明（记得查表）最优时必须满足

$$S_B \boldsymbol{w} = \lambda S_W \boldsymbol{w}$$

- ✓ 该问题称为广义特征值generalized eigenvalue问题
  - 得到“S_B 和S_W”的广义特征值和广义特征向量
  - Generalized eigenvalue (eigenvector) of S_B and S_W
- ✓ 但是我们不用去解这个问题
  - $S_B \boldsymbol{w} = (\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)^T \boldsymbol{w} \propto (\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)$
  - $(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1) = \lambda S_W \boldsymbol{w}$!

FLD的步骤

1. 计算$\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\mu}_1$
2. 计算S_W
3. 计算$\boldsymbol{w} = S_W^{-1}(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)$
4. 归一化：

$$\boldsymbol{w} \leftarrow \frac{\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|}$$

如果不可逆怎么办？

- 如果数据很少或者维度很高， S_W很可能不可逆
  - 广义逆矩阵generalized inverse matrix
- S_W是实对称的，而且至少是半正定的
  - $S_W = E\Lambda E^{\mathrm{T}}, \quad \lambda_{ii} \geq 0$
- Moore - Penrose伪逆pseudoinverse
  - 若$\lambda_{ii} > 0$，定义$\lambda_{ii}^{+} = 1/\lambda_{ii}$，否则定义$\lambda_{ii}^{+} = 0$
  - Λ的M-P伪逆为：$\Lambda^{+} = \mathrm{diag}(\lambda_{11}^{+}, \lambda_{22}^{+}, \ldots, \lambda_{dd}^{+})$
  - S_W的伪逆为

$$S_W^{+} = E\Lambda^{+}E^{T}$$

如果大于2类怎么办？

- ✓ C类问题
  - $\boldsymbol{\mu}_i, N_i, m_i, S_i$和2类问题中一样定义
  - $S_W = \sum_{i=1}^{C} S_i$，很容易从2类问题推广
  - 定义$N = \sum_{i=1}^{C} N_i$
  - 定义总均值$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{C} N_i\boldsymbol{\mu}_i = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{x}$
- ✓ S_B没有定义，无法直接从2类问题推广
  - 总散布矩阵total scatter matrix，$S_T = \sum_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^T$
  - $S_T = S_W + \sum_{i=1}^{C} N_i\,(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})\,(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})^T = S_W + S_B$
  - 定义多类的 $S_B = \sum_{i=1}^{C} N_i\,(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})\,(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})^T$
  - 练习：证明，当$C = 2$时， 有$S_T = S_W + S_B$

更多的投影方向

$$\max J(\boldsymbol{w}) = \frac{\boldsymbol{w}^T S_B \boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^T S_W \boldsymbol{w}}$$

- ✓ 求解广义特征值问题

$$S_B \boldsymbol{w}_i = \lambda_i S_W \boldsymbol{w}_i$$

- ✓ 最多能得到$C-1$个有效的投影方向
  - 为什么？
- ✓ 利用Matlab来获得解

应用：人脸识别

Application: face recognition

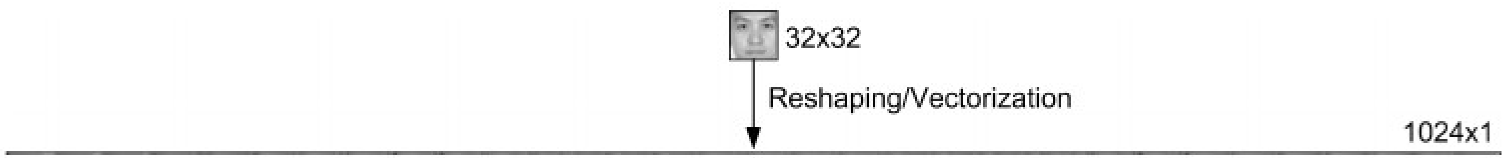
人脸

- ✓ 为什么人脸数据特别适合PCA和FLD？
- ✓ 用什么分类器？

- ✓ ORL人脸数据集：
  http://www.cl.cam.ac.uk/research/dtg/attarchive/facedatabase.html
- ✓ OpenCV人脸识别tutorial
  http://docs.opencv.org/modules/contrib/doc/facerec/facerec_tutorial.html
- ✓ 准备作业：首先需要在windows/linux/mac下安装OpenCV

张量Tensor:深度学习的基石

- ✓ 标量(scalar，纯量)：$x \in \mathbb{R}$
- ✓ 向量(vector)： $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$
- ✓ 矩阵(matrix)：$X \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$
- ✓ 进一步推广？
  - 如果$\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$
  - 称为张量tensor，上例是3阶张量
  - 标量、向量、矩阵分别是0、1、2阶张量
- ✓ 张量的操作，最基本的是向量化vectorize
  - 将矩阵的各行堆积stack起来



人脸识别有哪些可以做的简单实验？

- ✓ ??

进一步的阅读

- ✓ 不同条件或要求下的线性特征抽取
  - 如http://cs.nju.edu.cn/wujx/paper/icml2005.pdf
- ✓ 张量和多线性特征抽取
  - Multilinear Subspace Learning: Dimensionality Reduction of Multidimensional Data http://www.crcpress.com/product/isbn/9781439857243
  - 人脸图像向量化的图来自该书
- ✓ 关于特征值和特征向量
  - Golub & van Loan, Matrix Computation, 3rd ed. http://www.cs.cornell.edu/courses/cs621/Books/GVL/index.htm