基于核的慢特征分析算法

马奎俊 韩彦军 陶 卿 王 珏

(中国科学院自动化研究所 复杂系统与智能科学重点实验室 北京 100190)

摘 要 提出一种基于核的慢特征分析算法.通过引入核技巧 既充分扩充特征空间,又避免直接在高维空间中运算的困难.由于充分利用数据所隐含的非线性信息,所得到的解是稳定的.同时基于对慢特征分析算法目标函数的分析,给出一个对算法结果的评价准则,并用以指导核参数的选择.实验结果验证算法的有效性.

关键词 不变量学习 慢特征分析 核方法 盲源信号分离中图法分类号 TP 181

Kernel-Based Slow Feature Analysis

MA Kui-Jun , HAN Yan-Jun , TAO Qing , WANG Jue (Key Laboratory of Complex Systems and Intelligence Science , Institute of Automation , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100190)

ABSTRACT

A kernel-based algorithm is proposed to solve the nonlinear expansion problem of slow feature analysis (SFA). By using the kernel trick, the difficulties of computing directly in high dimensional space are avoided. Because of the full use of nonlinear information of the data, its output is steady. Meanwhile, based on the objective analysis of the proposed algorithm, a formula is put forward to estimate the output slowness of the signal and it is utilized as a guide line to select parameters of the kernel functions. Experimental results show the effectiveness of the proposed algorithm.

Key Words Invariance Learning , Slow Feature Analysis , Kernel Method , Blind Source Separation

1 引 言

不变量学习是模式识别的主要任务之一,不变量表征物体所固有的性质,因而对于分析数据和识别模式,都有至关重要的作用.对于随时间快速变化

的信号来说 不变量指的是它所蕴含的变化最缓慢的成分 ,是指由信号提取出来的高级表示 ,它表征信号发生源的某些固有属性. 因此 ,可将变化缓慢的信号看作是高频输入信号在高级表示水平上抽象出来的不变量信息. 对时序数据而言 ,不变量学习 ,意味

收稿日期: 2010 - 01 - 04; 修回日期: 2010 - 04 - 23

作者简介 马奎俊 ,女 ,1981 年生 ,博士研究生 ,主要研究方向为机器学习、生物信息学. E-mail: kuijun. ma@ ia. ac. cn. 韩彦军 , 男 ,1983 年生 ,博士研究生 ,主要研究方向为机器学习、关系学习. 陶卿 ,男 ,1965 年生 教授 ,博士生导师 ,主要研究方向为统计机器学习、模式识别. 王珏 ,男 ,1948 年生 ,博士生导师 ,研究员 ,主要研究方向为统计机器学习、粗糙集理论. E-mail: jue. wang @ ia. ac. cn.

着提取慢的特征.

慢特征分析(Slow Feature Analysis, SFA) [1] 是为完成此类任务而提出的一个算法,并已取得诸多成功应用. 例如模拟在生物视觉中大脑是如何通过得到的观感信号提炼出平移、旋转、缩放、光照等不变量的抽象表示[1] 模拟视觉皮层中复杂细胞的各种功能特性如何产生[2] 模拟啮齿类动物大脑在固定环境中如何获得定位、指向等信息[3]. SFA 在这些问题上的成功应用,为理解生物系统的工作机制提供启示. SFA 还可结合独立成分分析(ICA) 解决盲源信号分离(Blind Source Separation, BSS)问题[4]. 另外,它也被应用于以模式识别为目标的一系列相关问题[5-6]. SFA 算法的目标是提取输入时序数据

$$\mathbf{x}(t) = [x_1(t) \ x_2(t) \ \dots \ x_M(t)]^T$$

中所隐含的变化缓慢的成分,即除了无意义的常值信号以外,最具不变量性质的信息. 其算法主体是相关矩阵的特征值分解,其本质是在经过非线性扩展的特征空间中搜索满足目标函数最优解的线性组合. 它的非线性是通过增加输入变量的高阶多项式来引入的. 多项式的阶数体现特征空间的丰富程度. 算法的输出 y(t) 在多大程度上包含问题本身所固有的不变量信息,取决于其输入变量非线性扩展的程度. 为了在尽量丰富的特征空间中搜寻慢特征 应该用尽可能高阶的多项式扩展特征空间. 另一方面,在增加多项式阶数的同时,扩展空间的维数将指数增加,过高的维数导致算法不具有可行性.

本文提出一种基于核的慢特征分析算法 从而 在一定程度上解决这一问题. 核(Kernel)的概念来 源于泛函分析, Mercer 定理[7] 给出可将核函数 k(x,y) 重构为非线性映射 $\phi(x) \setminus \phi(y)$ 的内积的条 件. Vapnik [8] 最先将它引入机器学习领域 提出支持 向量机(SVM). Schölkopf 等[9]则将核方法应用于主 成分分析(PCA) 给出一种在高维非线性空间中提 取主成分的方法. 核方法的主要优势在于它能通过 隐式的非线性映射 ϕ 将输入空间 X 映射到高维甚至 无穷维特征空间 F 中 却不需要显式地在空间 F 中 进行计算,从而避免维数灾难所带来的尴尬. Schölkopf 等[10]则在分析输入空间与核特征空间关 系的基础上 给出通过输入空间的样本子集重构核 特征空间的方法 从而一定程度上解决样本个数过 大时核矩阵规模过大的问题. 因此将核方法应用于 SFA 能够在一定程度上解决特征空间受限所带来 的问题 从而改进算法性能. 本文通过实验在不同方 面验证算法的有效性.

2 慢特征分析及其问题所在

2.1 慢特征分析

慢特征分析(SFA)是 Wiskott^[1]提出的一种在快速变化的时序信号中抽取慢特征的批量学习算法. 与其它在线学习的方法不同, 它不仅能够保证得到全局最优解,而且能够同时得到变化速率从小到大排列的一系列特征.

考虑一个输入向量

$$\mathbf{x}(t) = [x_1(t) \ x_2(t) \ , \cdots \ x_M(t)]^T$$

目标是找到这样的某个非线性函数

$$f(x) = [f_1(x) f_2(x), \cdots f_L(x)]^{\mathrm{T}},$$

使输出 y(t) = f(x(t)) 的各分量变化尽可能慢. 一般采用关于时间的一阶导数的平方均值来衡量变化速率^[1]. 因此优化问题框架如下:

$$\min_{y_i} \Delta(y_i) := \langle (\dot{y}_i(t))^2 \rangle, \qquad (1)$$

且满足

$$\langle y_i(t) \rangle = 0 , \qquad (2)$$

$$\langle (\gamma_i(t))^2 \rangle = 1 , \qquad (3)$$

$$\langle y_i(t) y_i(t) \rangle = 0$$
 , $\forall j < i$, (4)

其中 $\hat{y_i}(t)$ 是 $y_i(t)$ 关于时间 t 的一阶导数 , $\langle \cdot \rangle$ 表示在时间上求均值. 约束条件(2)、(3) 排除平凡解 $y_i(t)$ = 常量 ,条件(4) 保证输出信号各个分量间是不相关的 ,从而使得它们各自承载不同方面的信息. 假设最优解是 $\mathbf{y}^*(t)$,则 $y_1^*(t)$ 是得到的变化最慢的特征 ,而 $y_2^*(t)$ 是除 $y_1^*(t)$ 外 和 $y_1^*(t)$ 不相关的所有特征中变化最慢的 $y_3^*(t)$ 则是下一个和 $y_1^*(t)$ 、 $y_2^*(t)$ 都不相关的变化最慢的特征 ,以此类推.

值得注意的是 $\mathbf{y}(t)$ 的各个分量是同时得到的 实际上 $y_i(t)$, $1 \le i \le L$ 都是 $\mathbf{x}(t)$ 的即时函数,因此 SFA 的结果是不可能通过低通滤波(Low-Pass Filtering) 得到的,它们有本质不同.

其求解可大致如下: 1) 确定解区域 ,即 y(t) 所在的空间 ,它应该是由 x(t) 的非线性映射所张成的空间; 2) 找到这个空间的 1 组正交基; 3) 将 y(t) 表示为这组基的线性组合. 下面是具体过程.

对 x 进行非线性映射 e(x) ,由此得到一组新的输入 z(t) = e(x(t)) ,比如令 $e(x) = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_M & x_1x_1 & x_1x_2 & \cdots & x_Mx_M \end{bmatrix}^T - e_0^T,$ 则此特征空间的维数为

$$L = M + \frac{M(M+1)}{2} ,$$

 e_0^{T} 使 e(x) 的均值为 0.

对 z(t) 作白化(Whitening) 处理 ,即得到 u(t) = Wz(t) ,W 是白化矩阵 ,这时的 $u_i(t)$ 是均值为 0、方差为 1、两两去相关的.

单位正交变换不改变向量的均值、方差和相关性,因此若对 $\mathbf{u}(t)$ 作正交变换,即 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{Q}\mathbf{u}(t)$ **Q** 为单位正交阵,则 $\mathbf{y}(t)$ 自动满足条件(2) ~ (4).

下面来确定矩阵 Q. 将目标函数(1) 变形为

$$\Delta(y_i) = \langle (\dot{y}_i(t))^2 \rangle$$

$$= \boldsymbol{q}_{i}^{\mathrm{T}} \langle \dot{\boldsymbol{u}}(t) \dot{\boldsymbol{u}}(t)^{\mathrm{T}} \rangle \boldsymbol{q}_{i} = \boldsymbol{q}_{i}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{U} \boldsymbol{q}_{i} ,$$

其中 $\mathbf{q}_i = [Q_{i1} \ Q_{i2} \ \cdots \ Q_{iL}]$ 是 \mathbf{Q} 的第i行 \mathbf{U} 是矩阵 $\langle \dot{\mathbf{u}}(t) \ \dot{\mathbf{u}}(t)^{\mathrm{T}} \rangle$. 则此优化问题

$$\min_{\boldsymbol{q}_i} \Delta(y_i) = \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{U} \boldsymbol{q}_i$$

存在唯一解 最优解 q_1 就是 U 的最小特征值所对应的归一化后的特征向量 q_2 是次小特征值所对应的归一化特征向量 以此类推. 得到矩阵 Q_1 而输出

$$y(t) = Qu(t) = QWz(t) = Qwe(x(t))$$
$$= f(x(t)), \qquad (5)$$

即为前述优化问题的解.

2.2 慢特征分析的主要缺陷

SFA 算法的主要问题 ,是其扩展特征空间的方式所存在的局限性.

2.2.1 特征空间的有限与无限

SFA 的理论研究^[3,11-12] 能更好地理解算法. 文 献 [12] 中给出 SFA 的一个数学框架 并指出如果对 f(x(t)) 所在空间除可积、可导以外没有任何复杂 度上的限制 即特征空间由一组完备的无穷维基所 张成 则它的解将不再依赖于输入 x(t) 所使用的坐 标 而且证明这时的优化问题等价于理论物理中偏 微分算子的特征值问题,从而可以借鉴物理学中的 概念和数学技巧对 SFA 进行理论分析,预测信号行 为. 换言之,无限维特征空间带来2点好处:1) 使输 出仅依赖于输入信号本身,而与它所使用的坐标无 关,从而保证解的可靠和一致;2) 便于进行理论分 析和理解实验结果. 通过文献[12]中的一个例子来 解释解的可靠和一致. 假设二维输入信号在坐标系 $(\mu \nu)$ 下是 $x = (x_1, x_2)$ 若限制特征空间为 x 的线 性函数所张成的空间,则输出y是 $x_1 \times x_2$ 的线性函 数. 如果改变坐标系 $(\mu' \nu') = (\mu^2 \nu)$ 同样限制特 征空间为x的线性函数所张成的空间 那么输出y就 是 $\sqrt{x_1}$ x_2 的线性函数. 可见如果输入信号所采用的 坐标系不同 SFA 得出的结果是不一致的. 另外,输 出y也必然随着对特征空间所作限制的不同而各 异. 在算法的实际应用中 并没有任何信息用于指导 对输入的坐标以及特征空间作如何的限制,但这一

环节却是 SFA 所不可避免的 ,这就导致 SFA 结果的不可靠性. 4. 1 节的实验说明了这一点. 不受限制的无穷维特征空间就不存在这些问题 ,因此单就保证可靠性和一致性来说是理想的选择. 当然 ,无穷维特征空间并不总是在各方面都好 ,比如它能够招致维数灾难问题 ,并且在原 SFA 的非线性扩展步骤中需要把无穷个基全部显式地刻画出来 ,这是不可能实现的. 为 SFA 引进核方法的主要目的 ,就是为算法寻找一种在丰富特征空间的同时 ,尽量避免维数灾难的可行性方法.

2.2.2 有限维空间

由上一小节得出结论,对特征空间的限制越小越好,即其维数越高越好.但是通过增加高阶项来扩展特征空间的维数时,就会有组合爆炸的问题.如实验 4.2 中的问题有 65 个变量 将它扩展到二次项有2 210 维,而扩展到三次项则将得到 143 715 维.对这么大的矩阵进行特征值分解,是完全不具有可行性的,而这时的输出y也不过只是输入变量x的三次方函数.但是实验中要得到有意义的输出结果,却至少需要对变量的多项式扩展高达 16 次方.4.2 节是一个对比实验,原来的方法是基于多层递进的方法来达到 16 次方的高阶扩展的,计算过程不仅繁琐而且存在各种问题.通过核方法来扩展特征空间,则可轻松解决这一问题,使得高维数据的高阶非线性扩展成为可能.详细说明见第 4 节实验部分.

3 基于核的慢特征分析算法

3.1 核方法

核方法是一种只需要在原空间中进行计算却能有效利用数据的高维非线性特征的数学技巧. 根据 Mercer 定理 [7] ,当核矩阵 k(x,y) 满足一定条件时,它可以重构为xy的某个非线性映射 ϕ 的象的内积

$$k(x y) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \phi_i(x) \phi_i(y).$$

假设非线性映射 $\phi: x \to \phi(x)$ 将原数据空间 X 映射为特征空间 Φ ,如果算法所需要计算的量值都可表示为内积的形式,那么要利用空间 Φ 所提供的信息,就不必显示地在 Φ 中进行计算,而只需在原空间 X 中计算核矩阵 $K_{ij} = k(x(i) x(j))$,其中 $x(i) = [x_1(i) x_2(i) : \cdots x_M(i)]^T$ 表示第 i 个样本, $1 \le i \le T_0$, T_0 是信号长度. 只要矩阵 T_0 为半正定矩阵,即满足 Mercer 条件. 这样就避开前面所讨论的和特征空间的维数有关的问题,而把抽取特征转化为对 $T_0 \times T_0$ 的核矩阵 T_0 的

前半部分 即从 x(t) 到 u(t) 的过程 其本质上是对数据进行一次非线性扩展后的 PCA,因此借鉴 Schölkopf 等^[9] 的核主成分分析 (Kernel PCA,KPCA) 算法来完成这一步处理. 但是 ,当面临的信号长度 T_0 特别大时 则需要在提取核特征时进行一些降维的处理 ,这将在 3. 3 节中加以讨论. 总之 ,核技巧是在 SFA 扩展特征空间的过程中引入的 ,在这样的特征空间中求解 SFA 的算法 ,称之为基于核的慢特征分析 (Kernel SFA , KSFA) .

3.2 基于核的慢特征分析算法

和 SFA 的式(5) 相对应地 KSFA 的计算过程可表示为

$$y(t) = Qv(t) = QG(x(t)) = f(x(t))$$
,
其中核特征 $v(t) = G(x(t))$ 是原始数据 $x(t)$ 映射
到新的核特征空间中的象. 由于在计算过程中包含
在核特征空间中寻找正交基的过程,因此得到的核
特征 $v(t)$ 是具有白化性质的. 算法流程如下.

输入 $\mathbf{x}(t) = [x_1(t) \ \alpha_2(t) \ \cdots \ \alpha_M(t)]^T$, $1 \le t \le T_0$ 其中 T_0 是信号长度.

输出
$$\mathbf{y}(t) = [y_1(t) \ y_2(t) \ \cdots \ y_d(t)]^{\mathrm{T}}$$
.

step 1 计算核特征空间中提取出的标准化信号:

$$v(t) = G(x(t)).$$

step 2 计算: $C = \dot{v}\dot{v}^{T}$.

step 3 解特征值问题:

$$W^{\mathrm{T}}CW = \Lambda ,$$

其中 Λ 的对角线为升序排列的非0特征值.

step 4 得到按快捷程序排序的输出信号;

$$y = \mathbf{W}^{\mathrm{T}} \mathbf{v}.$$

3.3 核特征的计算

上述算法中并未给出核特征 v(t) = G(x(t)) 的具体计算过程. 下面分 2 种情况加以说明.

一般情况下,当信号长度 T_0 不是很大时 KSFA 的 step 1 可直接采用 $KPCA^{[10]}$ 来处理. 计算核阵

$$K_{ij} \,=\, k(\,\textbf{\textit{x}}(\,i)\,\,\,\textbf{\textit{x}}(\,j)\,\,)\,\,\,\text{,}\, 1\,\,<\,i\,\,j\,\,<\,T_{\scriptscriptstyle 0}\,\,\text{,}$$
 并中心化

$$\widetilde{K} = K - \mathbf{1}_{T_0} K - K \mathbf{1}_{T_0} + \mathbf{1}_{T_0} K \mathbf{1}_{T_0}$$

其中 $(\mathbf{1}_{T_0})_{ij}=1/M$, $\forall 1 \leq i \ j \leq T_0$,解 \hat{K} 的特征值问题 $W_k^{\mathrm{T}} \hat{K} W_k = \Lambda_k$ 得到特征向量为 W_k 的列向量,对应的特征值为对角阵 Λ_k 的元素,则特征空间中的新信号为 $\mathbf{v}' = W_k^{\mathrm{T}} \hat{K}$,对之标准化即得 $\mathbf{v}(t)$. 4. 1 节、4. 2 节均采用这一过程提取核特征.

当信号长度 T_0 很大时,比如对盲原信号分离,每个信号往往具有几万甚至几十万个数据点,这时对 $T_0 \times T_0$ 大小的矩阵进行特征值分解是不可行的.

为减轻计算量 需要在使用核方法扩展特征空间的同时引入降维处理. 根据文献 [10] 中给出的一些核特征空间的降维技术 文献 [13] 着重考虑核方法在应用于盲原信号分离时的降维方法. 其主要思路是通过随机或聚类的方法选取较少样本点来重构核特征空间. 数据映射到新的核特征空间中的象为

$$\Psi_{x}(t) =$$

$$\begin{bmatrix} k(v_1, v_1) & , & k(v_1, v_2) & , & \cdots & k(v_1, v_d) \\ k(v_2, v_1) & , & k(v_2, v_2) & , & \cdots & k(v_2, v_d) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ k(v_d, v_1) & , & k(v_d, v_2) & , & \cdots & k(v_d, v_d) \end{bmatrix}^{-\frac{1}{2}} \times \begin{bmatrix} k(v_1, x(t)) \\ k(v_2, x(t)) \\ \vdots \\ k(v_d, x(t)) \end{bmatrix},$$

其中 $\{v_i\}$,1 < i < d 为原样本集 $\{x_i\}$, $1 < i < T_0$ 的子集. 在 4.3 节中采用聚类的方法来选择这一子集. 值得指出的是 采用聚类约简核阵 施加于 KPCA 的负担将会在一定程度上转移到聚类. 但是 聚类的时间复杂度是样本个数的线性函数 [14] ,而若直接对样本个数见方的核阵进行特征值分解 ,其时间复杂度将与样本个数三次方同级 ,因此通过聚类约简核阵还是能够在很大程度上减轻计算负担的. 此外 ,关于聚类中心数对算法结果的影响 ,文献 [13] 通过实验验证当聚类数大于一定数值以后 ,算法性能的改善随聚类数的增大将几近于无. 对给定规模的音频信号 ,本文通过实验观察到这一临界聚类中心数 ,并将其应用于 4.3 节的实验.

3.4 对算法输出的评价准则以及核参数的选取

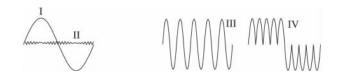
对于输出 $y_i(t)$ 的变化快慢程度 ,可以用 η 值来 衡量^[1]:

$$\eta(y_i) := \frac{T}{2\pi} \sqrt{\Delta(y_i)}$$
,

其中 $\Delta(y_i)$ 如式(1) 定义 $t \in [t_0, t_0 + T]$. η 值在一定程度上表征信号的波动情况. 但是这一指标只与信号的一阶导的平方有关,也就是只与一阶导的绝对值相关,而不包含其符号信息,当用若干离散时间点上的取值来代表信号,并且用相邻信号间的差值来近似时间的一阶导数时,就会产生问题. 图 1(a)中的 2 个信号,其中信号 I 为正弦信号 $y(t) := \sqrt{2}\sin(2\pi t/T)$,信号 II 的一阶导的绝对值与信号 I相同,因此它们的 η 值相同. 但是信号 II 的一阶导的符号为正负交替,因此呈现出细密的抖动形状. 显然这 2 个信号在快慢变化以及所能表征的物理意义

上 都有明显的区别. 这说明 η 值在表征信号快慢程度时的固有缺陷.

同时考察 SFA 以及 KSFA 的优化目标式(1),也是只与信号一阶导的平方相关的,但是约束条件(2)~(4)保证给定特征空间后解的唯一性. 然而这一准则仍然不足以判断所选用的特征空间是否合理. 如图 1(b),两个信号 \mathbb{II} 、 \mathbb{IV} 均满足约束(2)、(3) 即均值为 0 标准差为 1,但是通过数值近似计算得到的有很多骤变点的 \mathbb{IV} 却比平滑的 \mathbb{II} η 值更小. 原因是 η 值没有体现出信号的"变化的变化".



- (a) η 值相同 ξ 值不同的 (b) 均值为 0 方差为 1 的 2 个不同 2 个信号 波形信号
- (a) 2 signals with same η value and different ξ values
- (b) 2 signals with mean being 0 and variance being 1

图 1 4 个示例信号

Fig. 1 4 sample signals

基于上面的讨论 提出一个评价准则:

$$\xi(y_i) = \eta(y_i) + \frac{\lambda T}{2\pi} \sqrt{\langle \hat{y}_i^2 \rangle}, \qquad (6)$$

其中 \ddot{y}_i 为 $y_i(t)$ 关于 t 的二阶导数 ,第二项 $\sqrt{\langle \ddot{y}_i^2 \rangle}$ 衡量信号 $y_i(t)$ 的一阶导数 \dot{y}_i 的变化快慢 λ 为可调参数. 与 η 值相比 ξ 值以更加完备的方式体现信号的波动情况 不仅帮助对一般的慢信号和接近于常值的细密抖动信号加以区分 ,并且小的 ξ 值使人更倾向于选择具有更少骤变点、更平滑的信号. 在 4.2 节中即采用 ξ 值来作为选取核参数的评价准则 ,在确定核函数的形式以后 将选择使输出 $y_i(t)$ 的 ξ 值最小的核参数作为最终参数.

4 实验及结果分析

3 个实验分别从不同方面体现对 SFA 引入核技巧扩展特征空间的必要性及有效性. 第 1 个模拟数据实验在直观上验证 KSFA 是如何丰富特征空间的. 第 2 个对比实验展示 KSFA 在同一问题上比 SFA 的 2 个优越之处. 包括算法的简单易行. 以及结果所体现出的更少的信息损失. 第 3 个在真实音频数据上的实验验证 KSFA 解决实际问题时在扩展特征空间上所体现的优势.

4.1 模拟数据实验

该实验目的是通过简单的人工数据来直观理解 KSFA 的有效性.

数据: $x_1 = \sin(t) + \cos(11t)^4$ $x_2 = \cos(11t)$. 从表达式上即可判断慢特征是信号 $\sin(t)$. 一般地通过增加二次多项式扩展特征空间的 SFA 仅能恢复出带有频繁抖动的 $\sin(t)$ 信号(图2(b)), 它和采用次数为 2 的多项式核的 KSFA 效果是等价的(图2(c)). 当增加多项式核的次数时,所携带的抖动会变轻(图 2(d)),直到将多项式核增加到 4 次,KSFA 则恢复出完美的 $\sin(t)$ 曲线(图 2(e)). 实际上,采用高于或等于 4 次的核,都能得到这个结果. 使用 $\sigma=1$ 的高斯核也同样能提取出理想的 $\sin(t)$ 信号(图 2(f)).

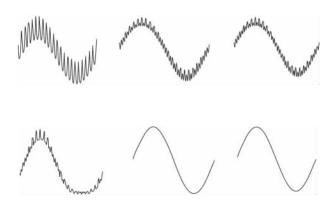


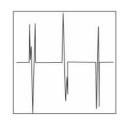
图 2 在模拟数据上的实验结果

Fig. 2 Experimental results on simulation data

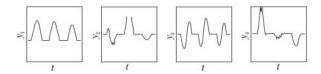
4.2 模拟视觉系统实验

这是一个对比实验. 引言中提出一个在视觉系 统中由快速变化的观感信号抽取大时间尺度上慢速 变化的不变量信息的问题 相应地 文献[1] 中设计 1个一维视网膜系统来模拟这一过程. 建模如下: 用 线性排列的65个传感器模拟一维视网膜,假设有3 个不同模式从左至右匀速经过此视场,目标是通过 传感器的输入信号 提取出不变量的高级表示. 这里 的模式是用3段不同频率和大小的低通滤波的白噪 声来表示的(图 3(a)). 算法中将 65 个传感器的信 号作为 SFA 的 65 维输入变量. 其输出即所谓的高级 表示 则是在大时间尺度上缓慢变化的特征信号 如 图 3(b) 其第1和第3个分量的3个波峰几乎完全 相同 只与3个模式在视场中出现的时间(这里即位 置) 相关,因此表征了模式的位置信息,即"在哪"; 而第2和第4个分量的3个波峰形状及正负各不相 同 表征模式本身所固有的信息 即"是什么". 由于

迭代地运用 4 层二阶多项式扩展的 SFA ,相当于最终得到的具有可解释意义的慢特征是在输入信号的 16 次方的特征空间中提取出来的. 前面讨论过 ,直接将 65 个变量扩展到三次项 ,特征空间将变成 143 715 维 ,而要直接得到和输入变量的 16 次方相关的慢特征 ,显然是不可能的. 文献 [1] 中采用分层分块低阶递进的方法来克服这一障碍 ,但是这样主要存在两个缺陷. 1) 算法计算过程复杂 ,针对不同的问题需要设计不同的网络拓扑结构 不便于移植算法.



(a)3 个模式信号 (a)3 pattern signals



(b) 输出结果的前 4 个最慢特征[1]

(b) 4 slowest feature gained by algorithm in reference [1]

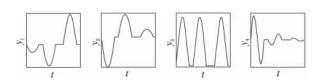
图 3 文献[1] 算法结果

Fig. 3 Results in reference [1]

2) 在逐层递进的过程中造成不容忽视的信息损失. 在每一层的输出作为下一层的输入时,对分量数目的截取以及对分量信号的截断,是信息损失的主要来源. 这些损失导致输出结果不够理想. 如图 3(b)中,第2和第4个分量,每个大的波峰上都具有小的频繁抖动,而真正具有高级表示意义的慢特征,应该是平滑的.

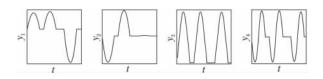
使用 KSFA 算法解决这一问题 ,则完全克服维数上的困难 ,同时避免以上2点缺陷. 对65 个长度为450 的变量直接通过其 16 次多项式核函数扩展特征空间 ,只需求解 450×450 大小的核矩阵的特征值问题 ,即得到和图 3(b) 相似的输出 ,同时波形具有更理想的光滑性(图 4(a)). 若采用高斯核 ,以 $\lambda=1$ 时的 ξ 值为准则在 [0,10] 的区间上以对数等距形式搜索参数 σ ,则使输出的 ξ 值最小的 σ 为最终核函数的参数. 在这个问题中 $\sigma=0.01$,对应的输出见图 4(b). 注意与图 3(b) 相比 ,这里输出各分量由于平

滑度的改变 其快慢程度排序稍有不同 相应的表征模式位置信息的原第 1 和第 3 个信号这里都排到后面 成为第 3 和第 4 个信号. 这是容易理解的 .直观上可解释为表征模式 "是什么" 比 "在哪" 的信号变化更缓慢 ,即对时间的依赖性更弱 ,更具不变性. KSFA 的拓扑结构简单明了 ,类似于 1 个仅有一层的神经网络 .算法应用于其它问题时不需要重新设计网络结构 ,而只需调整核参数 具有良好的可移植性.



(a) 用阶数为 16 的多项式核

(a) Using polynomial kernel with degree 16



(b) 用 $\sigma = 0.01$ 的高斯核

(b) Using Gaussian kernel with $\sigma=0.01$

图 4 KSFA 模拟一维视网膜系统的输出(前 4 个最慢特征)

Fig. 4 First four slowest features of KSFA's outputs in simulation of one dimensional retina system

4.3 盲源信号分离实验

盲源信号分离是指已知非线性混淆后的信号,还原源信号的过程.它主要应用于音频信号处理.其基本假设是源信号之间相互独立,因此其算法设计的基本目标是ICA. Blaschke等^[4] 将 SFA 与 ICA 的目标结合设计一个算法 ISFA 来处理这一问题 取得一定效果. 但是,它在扩展特征空间上存在与 SFA 同样的问题 因此当信号的非线性混叠无法用低阶多项式逼近时,ISFA 就无能为力.这里采用 KSFA 与ICA 结合的方式 通过核函数扩展特征空间,在算法性能上得到一定程度的提升.

源信号为2组采样率为 $11\,025/s$ 的音频信号 s_1 、 s_2 ,长度各为 20 000. 混叠信号为

$$x_1 = (s_2 + 3s_1 + 6) \cos(1.5\pi s_1)$$
,

$$x_2 = (s_2 + 3s_1 + 6) \cos(1.5\pi s_2)$$
.

这是 1 种极强的非线性混叠方式 混叠信号 $x_1 \times x_2$ 与源信号 $s_1 \times s_2$ 具有很低的相关度 甚至在第 2 组实验中只能基本还原出其中的 1 个. 混叠信号通过 5 次 9 项式扩展特征空间的 ISFA ,以及使用 $\sigma=1$ 的高斯

核函数在 20 个聚类点的核映射张成的特征空间中求解的 KSFA "所得到的输出信号与源信号的相关度 见表1. 结果显示KSFA在应用于实际问题时的潜力.

表 1 混叠信号、ISFA 输出及 KSFA 输出与源信号相关度
Table 1 Correlations between source signals and mixed signals, ISFA outputs, KSFA outputs respectively

分组	源信号	x_1	x_2	ISFA	KSFA
i	$s_1 \\ s_2$		0. 004 0. 024		0. 275 0 . 735
ii	$s_1 \\ s_2$	0. 021 0. 034	0. 824 0. 098	0. 910 0. 032	0. 923 0. 037

5 结束语

本文提出基于核的慢特征分析算法 KSFA,有效解决 SFA 特征空间的非线性扩展问题,并给出一个改进的对输出信号快慢程度的判别准则 ξ 值,用以指导对核函数参数的选择.通过 3 个实验在不同方面验证 KSFA 与 SFA 相比在算法性能上的提升.值得指出的是,已有前人致力于将核方法应用于慢特征分析^[15] 但是由于所基于的慢特征的目标函数不同,使得算法无法直接扩展到 SFA 的应用领域.本文致力于在与 SFA 相同的优化问题框架下,通过引入核方法,使算法可直接应用于 SFA 的应用领域,并得到算法性能上的提升.

核方法的引入也带来更多有意义的问题. 例如,已知使用不同的核函数及其参数扩展特征空间所得到的输出是不尽相同的,那么是否可以利用这一特性模拟生物学上不同生物个体视觉系统的敏感度差异,并将这种差异解释为不同个体大脑运算能力的差别所导致的特征空间不同造成的. 这将为进一步理解生物视觉机制,提供有意义的启示. 另外在对盲源信号分离的处理上,是否可设计出更加有效地结合核与 SFA 的方法,使算法不再依赖于 ICA 的目标,从而简化计算. 如何通过引入低秩逼近技术使算法得到进一步的改善. 进一步的工作将主要围绕这些问题.

参 考 文 献

- [1] Wiskott L, Sejnowski T. Slow Feature Analysis: Unsupervised Learning of Invariances. Neural Computation, 2002, 14 (4): 715-770
- [2] Berkes P, Wiskott L. Slow Feature Analysis Yields a Rich Repertoire of Complex Cell Properties. Journal of Vision, 2005, 5(6): 579-602
- [3] Franzius M , Sprekeler H , Wiskott L. Slowness and Sparseness Lead to Place , Head-Direction and Spatial-View Cells. PLoS Computational Biology , 2007 , 3(8): 1605-1622
- [4] Blaschke T, Zito T, Wiskott L. Independent Slow Feature Analysis and Nonlinear Blind Source Separation. Neural Computation, 2007, 19(4): 994 – 1021
- [5] Franzius M, Wilbert N, Wiskott L. Unsupervised Learning of Invariant 3D-Object Representations with Slow Feature Analysis // Proc of the 3rd Bernstein Symposium for Computational Neuroscience. Göttingen, Germany, 2007: 105 – 112
- [6] Franzius M, Wilbert N, Wiskott L. Invariant Object Recognition with Slow Feature Analysis // Proc of the 18th International Conference on Artificial Neural Networks. Prague, Czech Republic, 2008: 961 – 970
- [7] Courant R , Hilbert D. Methods of Mathematical Physics. New York , USA: Wiley-Interscience , 1989
- [8] Vapnik V N. The Nature of Statistical Learning Theory. New York , USA: Springer-Verlag , 1995
- [9] Schölkopf B, Smola A. Nonlinear Component Analysis as a Kernel Eigenvalue Problem. Neural Computation, 1998, 10(5): 1299 1319
- [10] Schölkopf B, Mika S, Burges C J C, et al. Input Space vs. Feature Space in Kernel-Based Methods. IEEE Trans on Neural Networks , 1999 , 10(5): 1000 1017
- [11] Wiskott L. Slow Feature Analysis: A Theoretical Analysis of Optimal Free Responses. Neural Computation, 2003, 15(9): 2147 –2177
- [12] Sprekeler H, Wiskott L. Understanding Slow Feature Analysis: A Mathematical Framework [EB/OL]. [2008–10–10]. http://cog-prints.org/6223/2/Sprekeler wiskotl08.pdf
- [13] Harmeling S , Ziehe A , Kawanabe M , et al. Kernel-Based Nonlinear Blind Source Separation. Neural Computation , 2003 , 15(5): 1089 – 1124
- [14] Duda R O , Hart P E , Stork D G. Pattern Classification. 2nd Edition. New York , USA: Wiley-Interscience , 2001
- [15] Bray A, Martinez D. Kernel-Based Extraction of Slow Features: Complex Cells Learn Disparity and Translation Invariance from Natural Images // Becker S, Thrun S, Obermayer K, eds. Advances in Neural Information Processing Systems. Cambridge, USA: MIT Press, 2002: 269 – 276