文章编号：1007-791X（2008）05-0416-05

基于非线性变换的图表示优化

张　涛[1]，洪文学[1]，宋佳霖[1]，常凤香[1]

（1. 燕山大学 电气工程学院，河北 秦皇岛 066004）

摘　要：优化是模式识别系统中必不可少的组成部分，优化的效果在一定程度上决定最终的识别结果。本文针对图表示的模式识别系统，提出了基于非线性函数的优化方法，使图表示模式识别更符合可视化与交互式原则。

关键词：图表示；优化；非线性变换；散点图

中图分类号：TP391　　文献标识码：A

0　引言

在模式识别问题中，优化是连接表示与泛化的中间过程。其主要任务是将表示阶段得到的学习方法或问题描述进行调整或扩展，使其更适合泛化。在传统模式识别中，由于该过程与表示联系紧密而被忽略[1]。但优化与表示不同，表示的主要任务是将单个客观数据或现象利用数值或者编码方式描述，从而使其在一定的数学含义框架下彼此相关的过程。表示的结果符合数据本身的描述，但并不一定适合于识别。因此根据后续的识别过程，需要利用优化来对表示进行简化或对表示中的部分分量进行增强。因此优化也是模式识别系统中不可缺少的一部分，是模式识别的核心步骤之一。其担负着针对泛化而优化表示结果的任务，优化的效果也将直接影响模式识别的结果。

在众多的优化方法中，非线性优化是应用最为广泛的一类。其显著的作用就是通过非线性变换，将线性不可分的数据变为可分数据。而优化作为表示与泛化的中间过程，必然与表示和泛化相关。在众多的数据表示方法中，多元图表示作为一种重要的可视化数据表示方法在产品评价、医疗、教育等领域获得了广泛的应用[2-4]。在目前的多元图研究中，主要的研究领域集中在多元图特征的提取和基于多元图的分类器设计[5]，本文针对图表示模式识别的优化问题，提出基于非线性函数的优化方法，其目的是提高图表示在模式识别中的作用。

1　非线性变换的作用与原则

在人类认知世界的过程中，对大多数的信息的采集与处理是一个非线性过程。比如对于图像的识别，人类总是有意无意的关注图像中的某一部分，从而对图像形成焦点，而对其它细节可能“视而不见”。因此在图像分析中，感兴趣区域的提取成为重要的研究课题。另外，在收听音乐的过程中，人们会更为关注自己感兴趣的乐器发出的声音，这也是一个非线性的过程。这些例子都说明，人类在处理模式识别问题的时候，非线性处理是一个常见的过程，这一处理过程可以使人类对所接收的信息处理更具有指向性，使得后期对信息的判断简单。因此在模式识别的数据表示阶段，尤其是在交互性很强的多元图表示的数据表示阶段之后，引入非线性优化改变数据在空间的分布，从而更有利于发现最佳的分类位置。对于分类器而言，优化阶段采用非线性变换，可以降低分类器的非线性程度，从而简化分类器的设计。

在对数据进行非线性描述时，非线性函数 $f(x)$ 选择的基本标准为：

条件 1：$f(x)\in[x_{\min}, x_{\max}]$，当 $x\in[x_{\min}, x_{\max}]$；

条件 2：在 $x_1\in[x_{\min}, x_{\max}]$ 且 $x_2\in[x_{\min}, x_{\max}]$ 范围

收稿日期：2008-07-03　　基金项目：国家自然科学基金资助项目（60474065；60605006）；河北省自然科学基金资助项目（A1217）
作者简介：张　涛（1979-），男，河北唐山人。博士研究生，讲师。主要研究方向为图像处理、模式识别。

内，当$x_1 \geq x_2$时，有$f(x_1) \geq f(x_2)$。

条件 1 对非线性变换的值域做出了限制，即要求$f(x)$与x的取值范围相同。该条件的目的是保证非线性变换前后数据的分布范围相同，避免出现由于数据范围不同而引起的对分类器等后续过程参数的重新调整。条件 2 要求$f(x)$是一个单调非减函数，即仅改变原始数据在空间中的距离大小，而不能改变数据的排序，避免引起可分数据区域混乱，破坏表示的紧致性。

2　多元图表示的非线性优化

满足上文中两个条件的函数均可用于多元图的数据优化，理论上讲，通过对函数的截取与缩放平移，任何函数均可用于非线性优化，但优化结果各不相同。本文仅以简单的初等函数指数函数、多项式函数和与复合函数中的分段函数为例，说明如何根据条件调整原型函数。

2.1　指数函数

指数函数定义为

$$f(x)=a^x，a\text{是常数且}a>0,\ a\neq 1 \tag{1}$$

其定义域区间为$(-\infty,\ +\infty)$，其函数曲线如图 1 所示。因为对于任何实数总有$a^x>0$，又$a^0=1$，所以指数函数的图形，总在轴上方，且通过点$(0,\ 1)$。

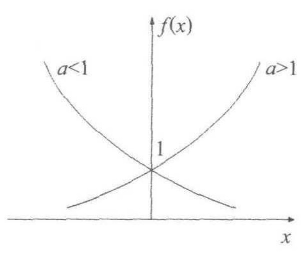


图 1　指数函数曲线图

Fig. 1　Diagram for exponential function

若$a>1$，指数函数a^x是单调增加的；若$0<a<1$，指数函数a^x是单调减少的。因此只要满足条件$a>1$，指数函数就可以满足条件 2，通过简单的缩放与平移即可以满足条件 1。因此约束后的指数函数为

$$f(x)=\frac{a^x-a^x_{\min}}{a^x_{\max}-a^x_{\min}},\ a>1 \tag{2}$$

为了表示简单，设$x\in[0,\ 1]$，即对x为归一化数据，则式（2）简化为

$$f(x)=\frac{a^x-1}{a-1},\ a>1 \tag{3}$$

其函数图如图 2 所示。

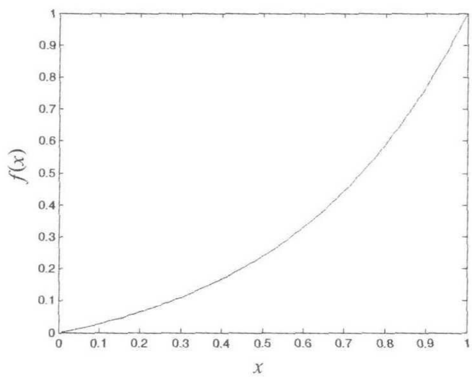


图 2　式（3）对应函数图

Fig. 2　Diagram for equation (3)

式（3）的二阶导数为

$$f''(x)=\frac{\ln^2 a}{a-1}a^x \tag{4}$$

因为$a>1$，所以$f''(x)>0$。这说明利用指数函数对多元图优化后，数值较小的原始数据间距变小，而数值较大的原始数据间距变大。优化效果可参考试验部分。

2.2　多项式函数

对于指数函数多元图表示优化，由于$f''(x)>0$，因此效果单一。显然，对$f''(x)$符号可调，则优化效果要好于指数函数。多项式函数$f(x)=\sum_{i=0}^{n}a_i x^i$为平滑的连续函数，其二阶导数符号不唯一，经过限定后可以用于多元图的优化。具体做法为：取多项式曲线中单调部分，并对其进行缩放与平移。其中最为简单的多项式为

$$f(x)=x^a,\ a>0 \tag{5}$$

当$x\in[0,\ 1]$时，其函数图如图 3 所示，当$a<1$时，$f''(x)<0$，数据向大数值端会聚；当$a>1$时，$f''(x)>0$，数据向小数据端汇聚，其作用与指数函数相当；当$a=1$时，即为$y=x$，$f''(x)=0$，线性函数，数据分布不变。因此，可将数据的原始分布视为多项式优化的一种特例。

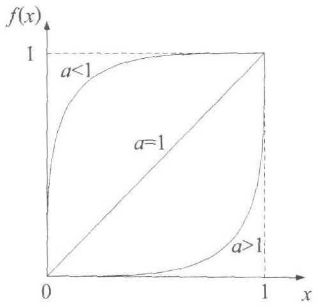


图 3 多项式函数曲线图

Fig. 3 The diagram for polynomial function

2.3 分段函数

对于某些多元图，可根据其分布的特性采用分段函数处理。

$$f(x)=\begin{cases} f_1(x) & x\in[x_{\min},\ x_1] \\ f_2(x) & x\in[x_1,\ x_2] \\ \vdots & \vdots \\ f_n(x) & x\in[x_{n-1},\ x_{\max}] \end{cases} \tag{6}$$

其中，要求各子函数$f_i(x)$均满足前文条件。

在分段函数中，“放大镜”函数具有良好的局部放大作用，其表达式为

$$f(x)=\begin{cases} ax+b & x\in[x_1,\ x_2]\in[x_{\min},\ x_{\max}] \\ 0 & x\notin[x_1,\ x_2] \end{cases} \tag{7}$$

其中

$$\begin{cases} a=\dfrac{x_{\max}-x_{\min}}{x_2-x_1} \\ b=\dfrac{x_{\min}x_2-x_{\max}x_1}{x_2-x_1} \end{cases}$$

因为$[x_1,\ x_2]\in[x_{\min},\ x_{\max}]$，所以$x_{\min}\le x_1\in x_2\le x_{\max}$，因此有$a\ge1$，对于$[x_1,\ x_2]$范围的数据具有线性方法作用。对于$x\in[0,\ 1]$，其函数图如图 4 所示。

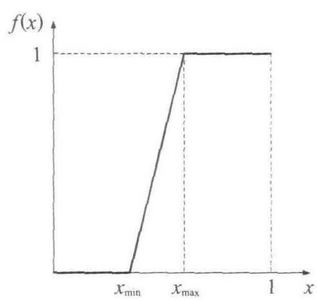


图 4 分段函数曲线图

Fig. 4 The diagram for subsection function

3 试验与分析

为了说明以上非线性函数在图表示中的作用，本文以散点图为例进行说明。选用的数据集为 IRIS 数据集的 sepal length 与 sepal width 特征，为了后续处理简便，对其作归一化处理， 处理方法为极差正规化（归一化）变换，如式 (8) 所示

$$x_{ij}^*=\frac{x_{ij}-\min\limits_{1\le i\le n}x_{ij}}{R_j} \tag{8}$$

其中，$R_j=\max\limits_{i=1,2,\cdots,n}x_{ij}-\min\limits_{i=1,2,\cdots,n}x_{ij}$表示极差，样品数为$n$，每个样品测得$m$项指标（变量），得观测数据$x_{ij}$，$i=1,\ 2,\ \cdots,\ n$; $j=1,\ 2,\ \cdots,\ m$。归一化后的散点图如图 5 所示。

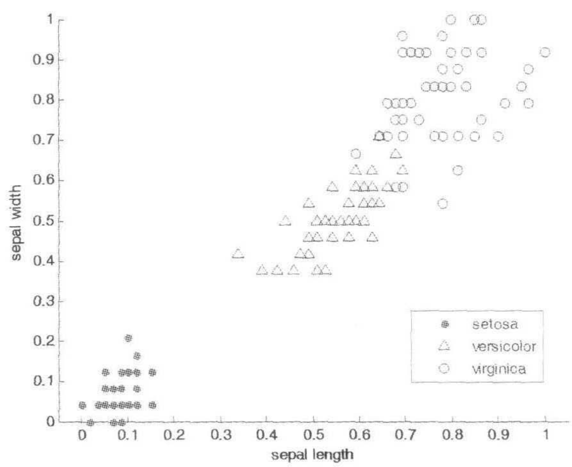


图 5 原始散点图表示

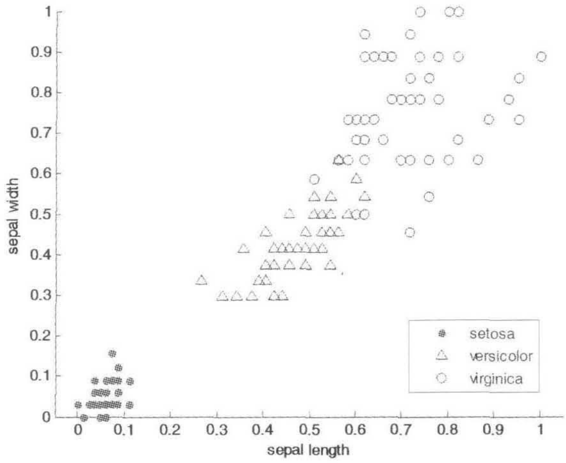
Fig. 5 The scatter for original data

对图 5 进行指数函数优化，其优化结果如图 6 所示。可见，参数a取值不同，其分布也发生变化。随着a的取值增加，高数值数据的分布逐渐稀疏，而小数值数据逐渐紧密，因此该变换适用于对高数值数据的观察。

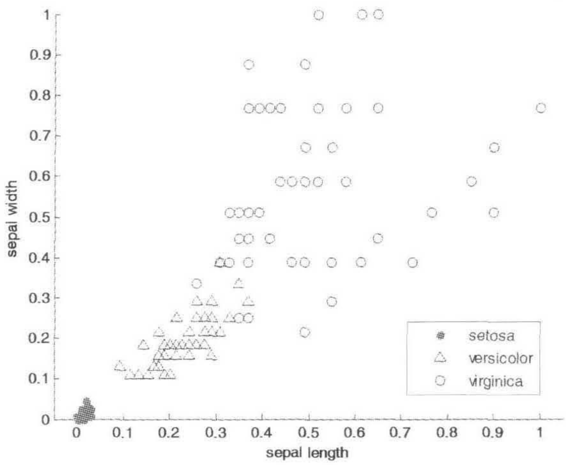
图 7 为不同参数下利用多项式优化的结果。可见利用多项式优化不但可以放大观察高数值数据，也可以对低数值数据进行观察。

指数函数与多项式函数都是通过非线性变换的方法非线性放大图表示的某一个区域，从而达到细致观察的目的。而式 (7) 所描述的分段函数则是对区间内的数据作线性放大获得，对于局部信息保留的更完整，但其缺点是丢失了整体分布信息。

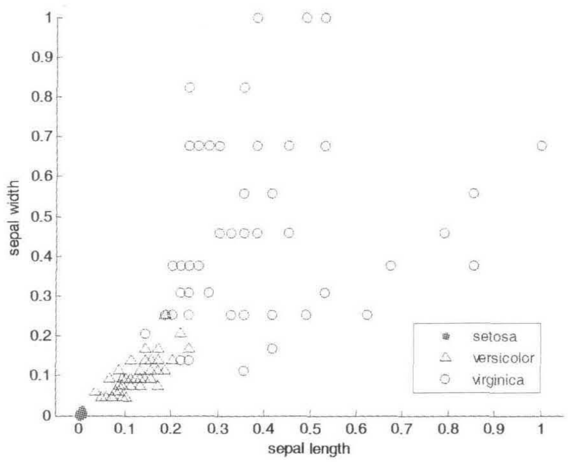
另外，对于小于$x_{\min}$和大于$x_{\max}$的数据，将集中于$x_{\min}$与$x_{\max}$处表示。图 8 为不同区间下的分段函数图表示。由此看出，分段函数具有放大与平移的作用。



(a) a=2



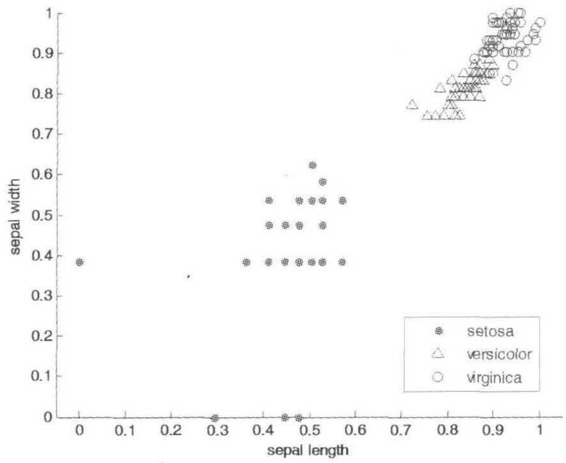
(b) a=20



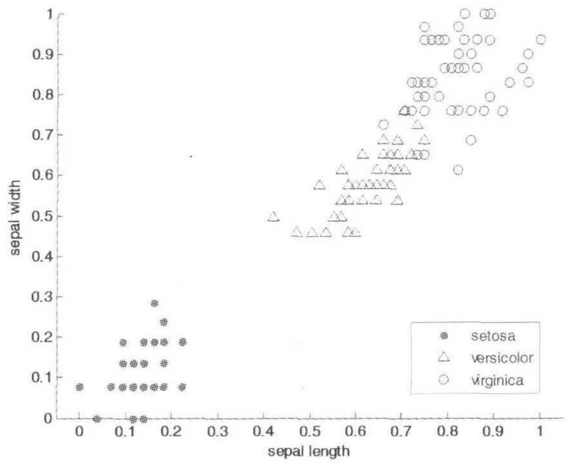
(c) a=100

图 6　不同参数下指数函数优化后的散点图

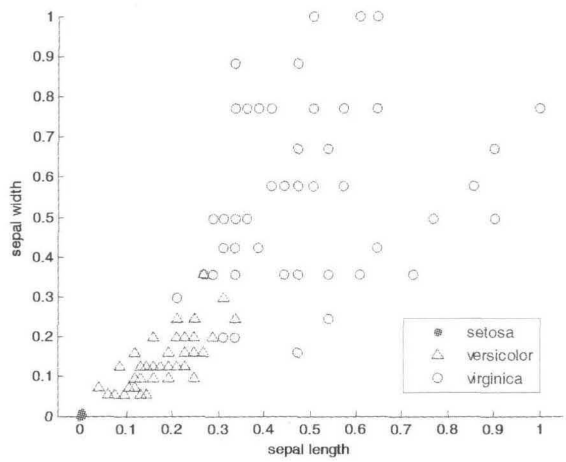
Fig. 6　The adapted scatter based on exponential function in different parameters



(a) a=0.3



(b) a=0.8

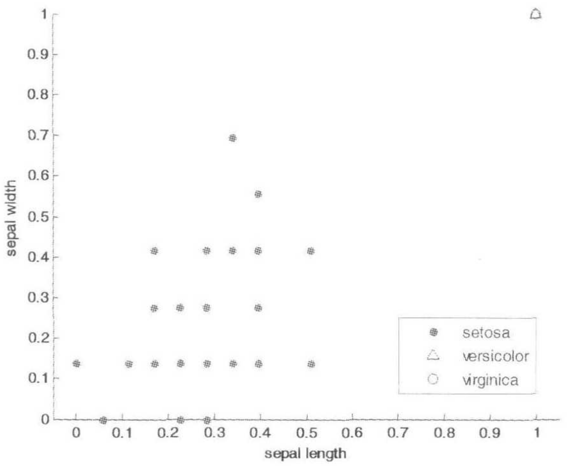


(c) a=3

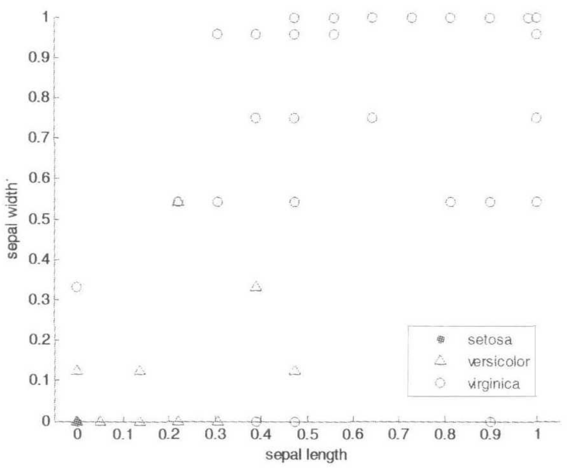
图 7　不同参数下多项式函数优化后的散点图

Fig. 7　The adapted scatter based on polynomial function in different parameters

由实验可以看出，不同的优化函数与参数对应于不同优化效果。针对不同的应用场合和泛化过程，应选择不同的优化函数。



(a) $x_{min}=0$，$x_{max}=0.3$



(b) $x_{min}=0.6$，$x_{max}=0.8$

图 8 不同参数下分段函数优化后的散点图

Fig. 8 The adapted scatter based on subsection function in different parameters

4 结论

针对多元图表示在模式识别领域中的优化问题，提出利用非线性函数的方法进行优化。首先对非线性函数的选择标准进行了分析，进而针对常用的指数函数、多项式函数等根据优化条件进行了修改，并分析了不同优化函数与参数下的优化结果。实验表明经过非线性函数的优化，图表示的不同部分得以加强，达到了优化的效果。但如何设计更好的符合多元图表示的优化函数，值得进一步研究。

参考文献

[1] Robert P W Duin, Elzbieta Pekalska. The science of pattern recognition. Achievements and perspectives［M］//Challenges for computational intelligence. Berlin/Heidelberg: Springer, 2007: 221-259.

[2] Xu Yonghong, Hong Wenxue, Li Xin, et al. Visual pattern recognition method based on optimized parallel coordinates［C］//IEEE International Conference on Integration Technology, Shenzhen, 2007: 127-132.

[3] Xu Yonghong, Hong Wenxue, Li Xin, et al. Parallel dual visualization of multidimensional multivariate data［C］//IEEE International Conference on Integration Technology. Shenzhen, 2007: 263-268.

[4] 孟辉, 洪文学. 基于多维数据雷达图表示原理与模糊推理规则的分类器研究［C］//第 6 届全球智能控制与自动化大会（IEEE WCICA'06）. 大连, 2006: 9921-9925.

[5] 洪文学, 李昕, 徐永红, 等. 基于多元统计图表示原理的信息融合和模式识别技术［M］. 北京: 国防工业出版社, 2008.

Adaptation for graphical representation based on nonlinear transformation

ZHANG Tao[1], HONG Wen-xue[1], SONG Jia-lin[1], CHANG Feng-xiang[1]

(1. College of Electrical Engineering, Yanshan University, Qinhuangdao, Hebei 066004, China)

Abstract: The adaptation is an essential issue in pattern recognition, the effect of adaptation influences the final recognition. In this paper, nonlinear transformation for adapting graphical representation is introduced to patten recognition system, which improves the performance of visulization and interaction for the system.

Key words: graphical representation; adaptation; nonlinear transformation; scatter