

利用傅立叶变换筛选核函数的方法^{*}

原峰山, 朱思铭

(中山大学数学与计算科学学院, 广东 广州 510275)

摘 要: 分析了支持向量机理论中核函数与傅立叶变换的关系, 证明了基于傅立叶变换的核函数在一定条件下必定满足 Mercer 条件。在这些结论的基础上, 提出了利用傅立叶变换筛选核函数的方法, 并给出具体的实例。

关键词: 核函数; Mercer 条件; 傅立叶变换

中图分类号: TP391.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2004) 03-0010-05

1 支持向量机及核函数

1.1 支持向量机及特征空间

支持向量机 (SVM) 理论由 Vapnik 等^[1]提出后, 成为统计学习理论中最年轻也是最实用的部分, 它的非渐近收敛特性使得以 SVM 为基础的统计学习理论成为模式识别、回归分析和密度估计中非常有利的工具^[2], 也成为人工智能领域内非常活跃的研究课题。

Vapnik 等^[1]在 1992 年发现, 要想在特征空间 Z 中构造最优分类超平面, 并不需要详细地描述特征空间, 根据泛函理论, 只需定义一种核函数 $K(u, v)$, 当其满足 Mercer 条件, 它就对应某一变换空间的内积。因此, 对于非线性的模式识别问题, 可以比较容易地通过选用适当的内积函数 $K(u, v)$ 实现非线性变换后的线性分类。概括讲就是, 利用支持向量机, 通过用内积函数定义的非线性变换将输入向量定义的空间变换到一个高维空间, 在这个空间中求出最优分类面。

1.2 Mercer 条件及核函数

若输入空间的样本向量为 $u = \{u_1, u_2, u_3, \dots, u_n\}$, $u_i \in \mathbf{R}^N$, 当存在非线性映射 ϕ 映射到某一特征空间 H 得到 $\phi(u_1), \phi(u_2), \dots, \phi(u_j)$, 那么输入空间的点积形式在特征空间可用下式表示^[3]:

$$K(u, v) = (\phi(u), \phi(v)) \quad (1)$$

式中 $K(u, v)$ 一般定义为核函数, 根据 Hilbert-Schmidt 理论^[1], 只要满足 Mercer 条件, 在非线性的特征空间中, 找到一定的核函数, 就能够把输入空间中线性不可分问题映射到一个特征空间而成为线性可分的问题, 使非线性问题得到简化, 从

而可以有效地解决构造支持向量机的问题。

Mercer 条件的定义如下。

要保证 L_2 下的对称函数 $K(u, v)$ 能以正的系数 $a_k > 0$ 展开成:

$$K(u, v) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \Psi_k(u) \Psi_k(v) \quad (2)$$

即用 $K(u, v)$ 描述一个特征空间中的一个内积的充分必要条件是, 对使得

$$\int g^2(u) du < \infty \text{ 的所有 } g \neq 0,$$

条件

$$\iint K(u, v) g(u) g(v) du dv > 0 \quad (3)$$

成立^[1]。因此, 对于支持向量机的核心问题往往转化为确定核函数 $K(u, v)$ 的问题。

目前, 一般公认的几个核函数可见于文献 [2], 主要有: 多项式核函数、径向基函数、两层神经网络核函数。这 3 种类型定义的非线性决策面的学习机器在基于支持向量机理论的机器学习研究中都收到了较好的结果。然而, 也存在一些问题, 其一就是没有有效的方法筛选其它的满足 Mercer 条件的核函数, 另外就是满足 Mercer 条件的核函数太少, 使支持向量机研究受到了限制。

2 傅立叶变换与核函数的关系

2.1 变元可分离核函数可用傅立叶变换表达的证明

定理 1 设给定一个样本集 $K = \{(u_1, v_1), (u_2, v_2), \dots, (u_l, v_l)\}$, $u \in \mathbf{R}^N$, $v \in \mathbf{R}^N$, 若存在核函数 $K(u, v)$ 代替向量内积 (u, v) 实现非线性变换, 从而构造基于 SVM 非线性变分类器, 若核函数

* 收稿日期: 2003-07-23

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (10071097)

作者简介: 原峰山 (1957 年生) 男, 高级工程师; 通讯联系人: 朱思铭; E-mail: yuanfs@pub.guangzhou.gd.cn

$K(u, v)$ 是对称的, 当核函数 $K(u, v)$ 的二维傅立叶变换存在且大于 0, 那么 Mercer 条件必定满足。

证明 由前述 Mercer 条件, 设有函数 $g(u)$ 及 $g(v)$, 并且自变量取值在 $(-\infty, \infty)$ 。对于对称函数 $K(u, v)$, 令

$$g(u) = \exp(-j\omega_1 u) \tag{4}$$

$$g(v) = \exp(-j\omega_2 v) \tag{5}$$

求如下积分:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g^2(u) du = \int_{-\infty}^{\infty} [\exp(-j\omega_1 u)]^2 du = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-j_2 \omega_1 u) du$$

令 $2\omega_1 = \omega$, 根据傅立叶变换公式:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-j\omega u) du = 2\pi \delta(\omega)$$

有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-j_2 \omega_1 u) du = 2\pi \delta(2\omega_1) \tag{6}$$

式中的 $\delta(2\omega_1)$ 是 δ 函数, 即单位冲击函数, 满足:

$$\begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(2\omega_1) d(2\omega_1) = 1 \\ \delta(2\omega_1) = 0 \quad (t \neq 0) \end{cases} \tag{7}$$

由此可知积分

$$\int_{-\infty}^{\infty} g^2(u) du = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-j_2 \omega_1 u) du = 2\pi \delta(2\omega_1) < \infty$$

满足了 Mercer 条件中第 1 个积分条件。

求如下积分:

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(u, v) g(u) g(v) dudv = \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(u, v) \exp(-j\omega_1 u) \exp(-j\omega_2 v) dudv = \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(u, v) \exp[-j(\omega_1 u + \omega_2 v)] dudv = \\ &F[K(u, v)] \end{aligned} \tag{8}$$

即所求积分为 $K(u, v)$ 的二维连续时间傅立叶变换。这已经证明了对函数 $K(u, v)$, 若能求出二维傅立叶变换的结果 $F[K(u, v)] > 0$, 就能满足 Mercer 条件的双重积分条件 (第 2 个积分条件)。

定理 2 设给定一个样本集 $K = \{(u_1, v_1), (u_2, v_2), \dots, (u_l, v_l)\}$, $u \in \mathbf{R}^N, v \in \mathbf{R}^N$, 若存在核函数 $K(u, v)$ 代替向量内积 (u, v) 实现非线性变换, 从而构造基于 SVM 非线性变分类器, 当核函数 $K(u, v)$ 是对称的并且变元是可分离的, 即 $K(u, v) = K(u) \circ K(v)$, 那么确定的合适的核函数 $K(u, v)$ 的傅立叶变换可用 2 个一维傅立叶变换乘积表达, 且这 2 个一维傅立叶变换乘积大于 0, 必满足 Mercer 条件。

证明 由前述 Mercer 条件, 设有函数 $g(u)$ 及 $g(v)$, 并且自变量取值在 $(-\infty, \infty)$ 。当对称函数 $K(u, v)$ 满足

$$K(u, v) = K(u) \circ K(v) \tag{9}$$

令 $g(u) = \exp(-j\omega_1 u), g(v) = \exp(-j\omega_2 v)$,

(1) 证明积分 $\int_{-\infty}^{\infty} g^2(u) du < \infty$, 前面已经证明, 从略。

(2) 证明确定的合适的核函数 $K(u, v)$ 可用一维傅立叶变换表达。

定义

$$F_u[K(u, \cdot)] = \int_{-\infty}^{\infty} K(u, \cdot) \exp(-j\omega_1 u) du \tag{10}$$

$$F_v[K(\cdot, v)] = \int_{-\infty}^{\infty} K(\cdot, v) \exp(-j\omega_2 v) dv \tag{11}$$

上式分别表示沿 u 和 v 方向的一维傅立叶变换, 式中“ $\circ$ ”表示可以是任何一种变量^[4]。根据二维傅立叶变换的定义

$$\begin{aligned} F[K(u, v)] &= \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(u, v) \exp(-j\omega_1 u) \exp(-j\omega_2 v) dudv &= \\ F_v[F_u[K(u, v)]] \end{aligned} \tag{12}$$

又根据 (9) 式得

$$\begin{aligned} F[K(u, v)] &= \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(u) K(v) \exp[-j(\omega_1 u + \omega_2 v)] dudv &= \\ \int_{-\infty}^{\infty} K(u) \exp(-j\omega_1 u) du \int_{-\infty}^{\infty} K(v) \exp(-j\omega_2 v) dv &= \\ F_v[F_u[K(u, v)]] \end{aligned} \tag{13}$$

上式为 $K(u)$ 和 $K(v)$ 两个函数的傅立叶变换的乘积, 并且当 $F_u[K(u)] F_v[K(v)] > 0$ 时满足 Mercer 条件。证毕。

2.2 变元可分离核函数 $K(u, v)$ 对对称性要求的非必要性

2.2.1 变元可分离核函数 $K(u, v)$ 奇偶性与对称性的关系

(1) 若 $K(u), K(v)$ 同为偶函数, 则 $K(-u) = K(u), K(-v) = K(v)$ 即:

$$\begin{aligned} K(-u, -v) &= K(-u) \circ K(-v) = \\ K(u) \circ K(v) &= K(u, v) \end{aligned}$$

所以, $K(u, v)$ 必为对称函数。

(2) 若 $K(u), K(v)$ 同为奇函数, 则 $K(-u) = -K(u), K(-v) = -K(v)$ 即:

$$\begin{aligned} K(-u, -v) &= K(-u) \circ K(-v) = \\ [-K(u)] \circ [-K(v)] &= K(u, v) \end{aligned}$$

所以, $K(u, v)$ 必为对称函数。

(3) 若 $K(u), K(v)$ 同为偶函数, 根据傅立叶变

换的特性有

$F[K(-u, -v)] = F_v[F_u[K(-u, -v)]] = F_u(-\omega_1) \circ F_v(-\omega_2) = F_u(\omega_1) \circ F_v(\omega_2)$
即 $K(u, v)$ 的傅立叶变换也是偶函数, 同时也是偶对称的, 那么 $K(u, v)$ 的二维傅立叶变换必大于 0, 即 Mercer 条件双重积分的条件必然满足。

(4) 若 $K(u), K(v)$ 同为奇函数, 根据傅立叶变换的特性:

$$F[K(-u, -v)] = F_v[F_u[K(-u, -v)]] = F_u(-\omega_1) \circ F_v(-\omega_2) = [-F_u(\omega_1)] \circ [-F_v(\omega_2)] = F_u(\omega_1) \circ F_v(\omega_2)$$

即 $K(u, v)$ 的傅立叶变换也是偶函数, 同时也是偶对称的, 那么 $K(u, v)$ 的二维傅立叶变换必大于 0, 即 Mercer 条件双重积分的条件必然满足。

(3) 的结论证明如下。
当核函数 $K(u, v)$ 是变元可分离函数时, 由于 $K(u, v) = K(u) \circ K(v)$, 当 $K(u), K(v)$ 同时为偶函数, 则

$$K(u) = K(-u), K(v) = K(-v)$$

即

$$F_u[-\omega_1] = F_u[K(-u)] = \int_{-\infty}^{\infty} K(u) \exp(-j(-\omega_1)u) du = \int_{-\infty}^{\infty} K(-u) \exp(-j\omega_1(-u)) du = \int_{-\infty}^{\infty} K(s) \exp(-j\omega_1 s) ds = F_u[\omega_1] = F_u[K(u)]$$

同时

$$F_v[-\omega_2] = F_v[K(-v)] = \int_{-\infty}^{\infty} K(v) \exp(-j(-\omega_2)v) dv = \int_{-\infty}^{\infty} K(-v) \exp(-j\omega_2(-u)) dv = \int_{-\infty}^{\infty} K(s) \exp(-j\omega_2 s) ds = F_v[\omega_2] = F_v[K(v)]$$

所以

$$F_u[-\omega_1] \circ F_v[-\omega_2] = F_u[K(-u)] \circ F_v[K(-v)] = F_u[\omega_1] \circ F_v[\omega_2] = F_u[K(u)] \circ F_v[K(v)]$$

因此, (3) 的结论得证。
根据傅立叶变换的性质, 当 $K(u)$ 为偶函数时, 即 $K(-u) = K(u)$ 时, $K(u)$ 显然是对称的, $F_u[-\omega_1] = F_u[\omega_1]$, 对函数 $K(v)$ 也有同样的性质。因此可知, 若 $K(u)$ 和 $K(v)$ 都是偶函数, $K(u, v)$ 也必然是偶函数, 因而 $K(u, v)$ 必然是对称的, 它的二维傅立叶变换也是 2 个偶函数的乘积, 且必然

满足:
 $F_u[\omega_1] F_v(\omega_2)] > 0$, 这就满足 Mercer 条件。
同时, 当 $K(u)$ 和 $K(v)$ 都为奇函数时, $K(-u) = -K(u), K(-v) = -K(v)$ 因此:
 $K(-u) \circ K(-v) = K(u) \circ K(v)$
结论 (4) 的证明方法同 (3)。

2.2.2 变元可分离核函数 $K(u, v)$ 对对称性要求的非必要性
从上述的证明可以看到, 对变元可分离函数 $K(u, v)$, 经过分离后 $K(u)$ 和 $K(v)$ 只要同时为奇函数或同为偶函数, 且它的二维傅立叶变换存在, 则 $K(u, v)$ 必然满足 Mercer 条件。

2.2.3 几个结果
从以上讨论, 可以得出以下几个结果。

(1) 基于支持向量机理论的核函数 $K(u, v)$, 只要其二维傅立叶变换存在且大于 0, 则必满足 Mercer 条件。这样不仅为核函数的判别和分析提供了有利的依据和工具, 也为核函数的筛选和查找提供了一个好的方法。

(2) 当核函数是对称的且变元可分离的, 核函数 $K(u, v)$ 的傅立叶变换等于 2 个一维傅立叶变换的乘积, 并且当这 2 个一维傅立叶变换的乘积大于 0 时, 必定满足 Mercer 条件。

(3) 当核函数 $K(u, v)$ 是变元可分离的, 若 $K(u)$ 和 $K(v)$ 同为偶函数或奇函数, 则 $K(u, v)$ 必为对称函数。因而在这样的限定条件下, Mercer 条件对核函数的对称性要求是没有意义的。

(4) 当核函数 $K(u, v)$ 是变元可分离的, 若 $K(u)$ 和 $K(v)$ 同为偶函数或奇函数时, $K(u, v)$ 的二维傅立叶变换必然大于 0, 因而必然满足 Mercer 条件。

本文将核函数及 Mercer 条件等统计学习理论中的重要概念与傅立叶变换有机地结合起来, 利用傅立叶分析得到了一些基于支持向量机的机器学习中的有意义的结论, 同时也为核函数的筛选和分析提出了一个有力的工具。

3 利用傅立叶变换对核函数筛选的方法

3.1 利用傅立叶变换筛选核函数的方法

筛选满足 Mercer 条件的核函数是一个比较困难的问题, 迄今为止尚未完全解决 SVM 理论中求核函数的问题^[9]。而且到目前为止公认核函数就只有本文 1.2 中提到的几个, 还没有一个比较好的在众多的函数中筛选合适的核函数的方法。引入傅立叶分析方法后, 可以利用前面的结论筛选满足 Mercer 条件的核函数。

主要方法是: 以上 4 点结果是利用傅立叶变换

筛选核函数的主要依据。对于结果 (1)，由于直接求 $K(u, v)$ 二维傅立叶变换往往比较困难，因而实际上大多数情况下是采用将 $K(u, v)$ 分离变元解决问题的。

因为 $K(u, v) = K(u) \circ K(v)$ ，当 $K(u, v)$ 为对称时只要 $F_u[k(u)] \circ F_v[k(v)] > 0$ ，就会满足 Mercer 条件。而当 $K(u)$ 和 $K(v)$ 同为奇函数或同为偶函数时，并不要求 $K(u, v)$ 为对称函数。

3.2 筛选 $K(u, v)$ 的步骤

(1) 找到 2 个函数 $K(u)$ 和 $K(v)$ ，它们都应该是傅立叶变换存在的，应使其满足 $K(u, v) = K(u) \circ K(v)$ ，并且 $K(u, v)$ 是对称的。

(2) 根据已知的傅立叶变换表，查出满足条件 (1) 的两个傅立叶变换的结果，即 $K(u) \Leftrightarrow F_u[K(u)]$ ， $K(v) \Leftrightarrow F_v[K(v)]$ 。

(3) 将这 2 个结果在一定取值区间内相乘，使 $F_u[K(u)] \circ F_v[K(v)] > 0$ ，则满足 Mercer 条件。

(4) 求 $F_u[K(u)]$ 和 $F_v[K(v)]$ 的逆傅立叶变换，即： $F_u[F(u)] \Leftrightarrow K(u)$ ， $F_v[K(v)] \Leftrightarrow K(v)$ ，求出 $K(u)$ 和 $K(v)$ ，则 $K(u, v) = K(u) \circ K(v)$ 的核函数求出。

3.3 筛选 $K(u, v)$ 的实例

现在以一个钟形脉冲函数为例说明核函数的确定方法，步骤如下。

①取钟形脉冲函数

$$K(u) = \exp\left[-\left(\frac{u}{\sigma}\right)^2\right], K(v) = \exp\left[-\left(\frac{v}{\sigma}\right)^2\right]$$

令

$$K(u, v) = K(u) \circ K(v) = \exp\left[-\left(\frac{u}{\sigma}\right)^2\right] \circ \exp\left[-\left(\frac{v}{\sigma}\right)^2\right] = \exp\left[-\left(\frac{u^2 + v^2}{\sigma^2}\right)\right]$$

②查傅立叶变换表，得

$$F[K(u)] = F\left[\exp\left[-\left(\frac{u}{\sigma}\right)^2\right]\right] = \sqrt{\pi} \sigma \circ \exp\left[-\left(\frac{\sigma \omega_1}{2}\right)^2\right]$$

同理

$$F[K(v)] = F\left[\exp\left[-\left(\frac{v}{\sigma}\right)^2\right]\right] = \sqrt{\pi} \sigma \circ \exp\left[-\left(\frac{\sigma \omega_2}{2}\right)^2\right]$$

③取两个傅立叶变换结果相乘

$$F[K(u, v)] = F_u[K(u)] \circ F_v[K(v)] = \pi \sigma^2 \exp\left[-\frac{\sigma^2 \omega_1^2}{4}\right] \circ \exp\left[-\frac{\sigma^2 \omega_2^2}{4}\right] = \pi \sigma^2 \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}(\omega_1^2 + \omega_2^2)\right] > 0$$

满足 Mercer 条件。

④因为 $F_u[K(u)]$ 和 $F_v[K(v)]$ 的逆傅立叶变换为 $K(u)$ 和 $K(v)$ ，即结果为

$$K(u) = \exp\left[-\left(\frac{u}{\sigma}\right)^2\right], K(v) = \exp\left[-\left(\frac{v}{\sigma}\right)^2\right]$$

所以

$$K(u, v) = K(u) \circ K(v) = \exp\left[-\frac{u^2 + v^2}{\sigma^2}\right]$$

这样就求出了一个满足 Mercer 条件的核函数。其它的函数如

$$K(u, v) = K(u) \circ K(v) = \exp\left(-a \mid u \mid\right) \circ \exp\left(-b \mid v \mid\right) = \exp\left[-(a \mid u \mid + b \mid v \mid)\right] \quad (a > 0, b > 0),$$

以及 $K(u, v) = \mid u \mid \circ \mid v \mid = \mid u \circ v \mid$

都可利用这种方法确定为满足 Mercer 条件的核函数。当然，还可利用这种方法定出其它的核函数。

在这里应该说明的是，以上所有结论和方法都应该以 Mercer 条件是正确的为前提。

4 结 论

根据本文的探讨，可以认为：利用傅立叶变换的方法对核函数进行分析和筛选，是一个可行的方法，并且可以得出以下几个结论：

(1) 经过本文的证明和分析，提出了一个有效地在众多已知函数中筛选核函数的方法。

(2) 可以利用现有的傅立叶变换表或已知的傅立叶变换关系，找出满足以下 3 个条件的函数 $K(u)$ 和 $K(v)$ ，即

- ① $K(u)$ 和 $K(v)$ 使得 $K(u, v)$ 可分离；
- ② $K(u) \circ K(v) = K(u, v)$ 对称或 $K(u)$ 、 $K(v)$ 同为奇函数或偶函数；
- ③ $F_u[K(u)] \circ F_v[F(v)] > 0$

当上述条件满足时，那么找出的 $K(u, v)$ 必定满足 Mercer 条件，可以成为核函数。

(3) 由于傅立叶变换和傅立叶分析理论和应用的成熟性，为进一步利用这个工具研究支持向量机理论提供了一定的依据和探讨的空间。

本文尝试用一种新的方法研究支持向量机，会有一些不足。比如：目前只用于连续傅立叶变换，还没有在离散量分析上应用。另外核函数的确定只能受限于存在傅立叶变换的函数等，这些将在作者的后续工作中进一步完善。

(下转第 17 页)

perceptions // the SEM Annual Conference on The Interdependence Between Theoretical, Experimental and Computational Mechanics[C] . Cincinnati, USA. 1999.

[5] HAVENITH G, HEUS R, LOTENS W A. Resultant clothing insulation —— a function of body movement, posture, wind, clothing fit and ensemble thickness[J] . Ergonomics, 1990. 33(1) : 67— 84.

[6] HAVENITH G, HEUS R, LOTENS W A. Clothing ventilation, vapor resistance and permeability index-changes due to posture, movement and wind[J] . Ergonomics, 1990. 33(8) : 989— 1005.

[7] WANG Z, LI Y. An integrative adaptive model for simulating human dynamic thermal comfort in the body-clothing-environment system[J] . Psychophysiology, 2003, 59(5) : 187— 197.

Numerical manikins in 3D Functional Garments CAD

XU Qing zhen¹, LUO Xiao nan¹, ZENG Long¹, LI Yi², WANG Ruo mei²
(1. Institute of Computer Application, Sun Yat Sen University, Guangzhou 510275, China;
2. Institute of Textiles and Clothing, HongKong Polytechnic University, Hong Kong, China)

Abstract: The functional garments CAD technology is introduced. The hard technology and important part of the numerical simulation during the prediction process of the thermal and moisture analysis in a human body environment system are discussed. The heat and moisture transfer in a human body environment by a numerical simulation case is predicted, and the related dynamic distributions of temperature and moisture in the system are obtained.

Key words: functional garments CAD; numerical clothed manikin; dynamic heat and moisture exchange

(上接第 13 页)

参考文献:

[1] VAPNIK V N. The nature of statistical learning theory[M] . New York: Springer-Verlag Inc. 1995.

[2] 张学工. 关于统计学习理论与支持向量机[J] . 自动化学报, 2000, 26(1) : 32— 42.

[3] 张莉, 周伟达, 焦李成. 核聚类算法[J] . 计算机学报, 2002, 25(6) : 587— 590.

[4] 郑方, 徐明星. 信号处理原理[M] . 北京: 清华大学出版社, 2000.

[5] 张铃. 基于核函数的 SVM 机与三层前向神经网络的关系[J] . 计算机学报, 2002, 25 (7) : 696— 699.

Sifting out Kernel Functions Using Fourier Transform

YUAN Feng shan, ZHU Si ming
(School of Mathematics and Computing Science, Sun Yat sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: The relationships between kernel functions $K(u, v)$ based on support vector machines (SVM) theory and Fourier transform are analyzed. It is shown that Mercer condition is satisfied if kernel functions are based on Fourier transform under some conditions. On the basis of the above results, the method that sifts out kernel functions is proposed by Fourier transform, and one concrete example is shown.

Key words: kernel function; mercer condition; Fourier transform