

# 基于支持向量回归的光谱反射率重建方法

张伟峰

(华南农业大学应用数学系 广州 510642)

**摘要** 提出了一种基于支持向量回归和小框架核的光谱反射率重建方法。光谱反射率重建是光学研究的一个重要问题,其目的是通过各种成像设备所获取的与设备相关的 RGB 三色值重建出物体本身固有的与设备和光照都无关的光谱反射率。回归方法已经在这一领域取得了广泛应用,如基于多项式模型的正则化最小二乘方法、基于核的正则化最小二乘方法等。提出了一种新的光谱反射率重建方法,这种方法采用了一种可以减弱样本不规则噪音影响的小框架核函数,并将其用于支持向量回归来重建光谱反射率函数。实验表明,新方法可以提高光谱反射率重建的精度和稳定性。

**关键词** 支持向量回归,光谱反射率重建,小框架核

## Spectral Reflectance Estimation by Support Vector Regression

ZHANG Wei-feng

(Department of Applied Mathematics, South China Agricultural University, Guangzhou 510642, China)

**Abstract** A spectral reflectance estimation method using support vector regression and framelet kernel was proposed. Spectral reflectance estimation is an important subject in optical research. The aim is to convert device-dependent RGB values to device-and illuminant-independent reflectance spectra. Regression methods are widely used to estimate spectral reflectance of surface colors given their camera responses, such as regularized least squares method with polynomial models, kernel based regularized least squares method, etc. In this paper, we introduced a novel estimating approach based on the support vector regression method. The proposed approach utilizes a framelet based kernel, which has the ability to approximate functions with multiscale structure and can reduce the influence of noise in data. Experimental results show that the technique can improve the recovery accuracy and stability.

**Keywords** Support vector regression, Spectral reflectance estimation, Framelet kernel

## 1 引言

光谱反射率重建是光学研究的一个重要方向,其目的是通过各种成像设备所获取的与设备相关的 RGB 三色值重建出物体本身固有的与设备和光照都无关的光谱反射率。如果知道了光谱反射率,即物体对不同波长的光反射的光通量与入射的光通量之比,就能准确预测物体在各种照明条件下的颜色,这对出版印刷业、电影电视业、艺术品扫描存档等具有重要现实意义。

光谱反射率重建本质上可以看作是从样本中发现未知函数的回归问题,它的核心思想是建立 RGB 响应值与光谱反射率向量之间的回归函数。J. Y. Hardeberg<sup>[1,2]</sup>使用线性回归方法求解以上的回归函数,D. Connah 等<sup>[3]</sup>证明非线性回归方法比线性回归方法的精度更高,他们使用多项式正则化回归模型求解以上的回归函数。V. Heikkinen 等<sup>[4]</sup>将多项式模型推广到更高维也更灵活的再生核 Hilbert 空间,使用正则化神经网络来求解以上回归函数。文献[4]中的实验结果显示,当训练样本个数较多时,基于核函数的回归方法比多项式模型的效果更好。然而,以上模型的缺点是需要很多训练样本来保证回归函数的精确性和稳定性。如果样本点过少,那么回

归函数的泛化性能就会很差。针对这一问题,本文提出了一种基于支持向量回归和小框架核的光谱反射率重建算法,这种方法可以充分利用样本信息,减少噪音和不规则采样的影响,提高样本点较少时的重建精度和稳定性。

## 2 问题描述

通用的颜色信息获取设备(如照相机、摄像机、扫描仪)的三色 CCD 响应值可以用下面的积分表示

$$P_i = \int_{\lambda} R(\lambda)E(\lambda)Q_i(\lambda)d\lambda + e_i \quad (1)$$

式中, $P_i$  是 RGB 三色响应值中的第  $i$  个, $R(\lambda)$  是被测物体的光谱反射率曲线, $E(\lambda)$  是照射光源的光谱能量分布, $Q_i(\lambda)$  是第  $i$  个 CCD 的光谱敏感度, $e_i$  表示第  $i$  个 CCD 的系统噪音。为了计算方便,光谱反射率函数  $R(\lambda)$  通常表示为波长 400nm~700nm 之间的  $n$  个等距采样点上的反射率向量。式(1)因此可以表示为向量和矩阵形式

$$x = SLy + e \quad (2)$$

式中, $y = (R(\lambda_1), \dots, R(\lambda_n))^T$  是  $n \times 1$  的光谱反射率向量, $S$  代表传感器光谱敏感度的  $3 \times n$  矩阵, $L$  是  $n \times n$  对角矩阵,其对角线上的元素是光照在这  $n$  个采样点上的光谱能量, $x$  表

示  $3 \times 1$  的 RGB 响应值向量,  $e$  是  $3 \times 1$  的系统噪音向量。

假设拥有一组训练样本集  $S = \{(x_i, y_i), x_i \in R^3, y_i \in R^n, i=1, \dots, m\}$ , 光谱反射率重建的目的是从中学学习输入输出变量之间的关系, 从而可以利用 RGB 响应值  $x$  来预测光谱反射率向量  $y$ 。在每个波长采样点  $\lambda_j$  分别构造一个回归函数

$$y_j = f_j(x) + \varepsilon_j, j=1, \dots, n \quad (3)$$

式中,  $\varepsilon_j$  表示测量误差,  $y_j$  表示在  $\lambda_j$  处的反射率。当有新的 RGB 响应值  $x$  输入时, 对应的光谱反射率向量  $y$  可以用  $(f_1(x), \dots, f_n(x))^T$  预测。

### 3 本文方法

传统的光谱反射率重建方法, 如线性最小二乘回归、多项式最小二乘回归以及正则化神经网络等的缺点都是需要很多训练样本来保证每个回归函数的精确性和稳定性。如果样本点过少或包含的噪音很大, 那么回归函数  $f_j(R, G, B)$  的泛化性能就会很差。为了补偿由于样本太少和样本噪音所带来的影响, 本文提出了一种新的光谱反射率重建方法: 利用支持向量回归求解光谱反射率函数, 并且使用小框架核来减弱样本噪音对解的影响。

#### 3.1 支持向量回归模型

支持向量回归(Support Vector Regression, SVR)是一种基于核策略的机器学习算法, 主要研究如何从有限观测样本出发找出未知函数。它最早由 V. N. Vapnik 及其合作者提出<sup>[5,6]</sup>, 并以统计学习理论为基础。其主要特点是利用结构风险最小化准则来解决回归中常见的“过拟合”问题, 根据有限的样本所提供的信息在模型复杂度和样本拟合度之间寻求最佳平衡, 以获得健壮(Robust)并有较好泛化能力的解。支持向量回归的另一个显著特点是它的解具有稀疏性, 这种特性可以减少例外点对解健壮性的影响。

对于光谱反射率重建问题, 支持向量回归模型通过最小化下面的二次泛函

$$\min_{f \in H_K} \sum_{i=1}^m |v_i - f(x_i)|_\varepsilon + \gamma \|f\|_K^2 \quad (4)$$

得到式(3)中的每一个回归函数, 这里  $\{v_i\}_{i=1}^m$  表示所有样本在特定波长采样点的光谱反射率,  $\|f\|_K^2$  是再生核 Hilbert 空间  $H_K$  中的范数,  $K(x, z)$  是  $H_K$  的再生核。式(4)的第一项

$$|x|_\varepsilon = \begin{cases} 0, & \text{if } |x| < \varepsilon \\ |x| - \varepsilon, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5)$$

称为  $\varepsilon$ -不敏感损失函数, 由 V. N. Vapnik 最早引入使用。式(4)右边第二项  $\gamma \|f\|_K^2$  称为正则化项, 正则化参数  $\gamma$  起到平衡经验风险大小和模型复杂度的作用,  $\gamma$  越大, 模型越简单, 经验风险越大, 可能会造成拟合不足(Under-fitting); 反之  $\gamma$  越小, 模型越复杂, 经验风险越小, 但可能会造成过拟合(Over-fitting)。

通过二次优化求解, 式(4)的解可以表示为如下形式

$$f(x) = \sum_{i=1}^m c_i K(x_i, x) \quad (6)$$

核函数  $K(x, z)$  和相应的再生核 Hilbert 空间  $H_K$  对解的效果影响很大, 光谱反射率实验数据往往具有采样不均匀以及噪声大的特点, 使得观测样本具有多尺度不规则分布和异方差噪音的特征, 基于传统高斯核的核回归方法不能有效解决这种问题。为了减弱样本数据的影响, 本文采用一种最新提出的小框架核。

#### 3.2 小框架核

核函数的选择或构造是支持向量回归研究的重要内容。众多研究表明, 不存在对所有领域的问题都具有最优泛化能力的核函数, 因而有必要选择或构造与给定问题相适合的核函数。近年来小波和框架理论与支持向量回归相结合的研究越来越受到人们的关注<sup>[7-10]</sup>。小波核可以继承小波多尺度表示的特性, 能够逼近不规则函数, 而框架核拥有框架冗余表示的特点, 具有较强的抗噪性。小波核与框架核为核函数的选择提供了一种比较灵活的方式, 显示了较好的应用前景。但是, 已有的小波核以及框架核构造方法都存在各自的不足之处, 还有待进一步完善。比如小波核要么不具有真正的多尺度特性, 要么对噪音比较敏感<sup>[7,8]</sup>; 已有的框架核构造方法都要计算对偶框架, 而对偶框架一般较难计算, 因此不利于实际应用<sup>[9,10]</sup>。

小框架是基于多分辨分析构造的紧框架。它集合了小波和框架二者的优良特性, 既具有小波的多尺度结构, 能够逼近不规则函数, 又具有框架的冗余性, 具有较强的抗噪性。文献[11,12]给出了一种基于小框架理论的支持向量回归核函数的构造方法, 其目的是结合小框架表示与支持向量回归二者的优点。实验证明, 当从有较大噪音的样本中估计不规则函数时, 小框架核优于目前常见的一些核函数。小框架核的定义如下

$$K(x, z) = \sum_{i=1}^{j_{\max}} \sum_{\min k \in Z^d} a_j \psi_{i,j,k}(x) \psi_{i,j,k}(z) \quad (7)$$

式中,  $\psi_{i,j,k}(x)$  是一组小框架基函数,  $a_j$  为一组正实数, 用来达到突出某些尺度逼近效果的作用。在本文的实验里, 采用文献[11,12]中验证过的最佳小框架核函数:  $a_j = 2^{-2j}$ ,  $\psi_{i,j,k}(x)$  取逼近阶为 4 的 3 次 B-样条小框架系统。

### 4 实验测试

使用蒙赛尔半光泽颜色谱数据集(Munsell Matte Color Spectra Dataset)进行测试, 它包含 1269 种蒙赛尔半光泽颜色的光谱反射率向量。用一个模拟的相机成像系统通过式(2)来获得 RGB 响应值, 其中 RGB 芯片的光谱敏感度采用图 1 给出的数据, 照射光源的光谱能量分布假设在各地都是相等的。波长统一在 400nm~700nm 之间并以 10nm 为间隔采样, 所以波长采样点个数  $n=31$ 。

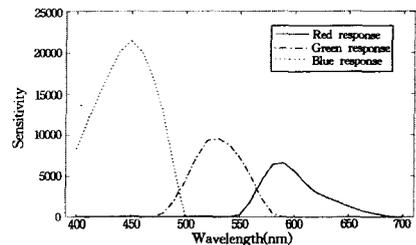


图 1

#### 4.1 实验细节

为了验证新方法在不同大小和不同噪音水平的训练样本集上的效果, 比较了新方法(SVR)与传统的正则化多项式模型(RPM)以及基于高斯核的正则化神经网络模型(RNN)。样本集分成 3 个独立的集合: 训练集、测试集和检验集。训练集用来构造特定参数的回归函数, 算法的最优参数由测试集上取得的最小误差来确定, 而最终模型的效果由检验集上的

(下转第 269 页)

[3] Naylor W. Non-Linear Optimization System and Method for Wire Length and Delay Optimization for an Automatic Electric Circuit Placer[P]. US Patent 6301693. 2001

[4] Cong J, Xie M. A robust detailed placement for mixed-size IC designs[C]//Proc. Asia South Pacific Design Automation Conf. Pacifico Yokohama, 2006; 188-194

[5] Hill D. Method and System for High Speed Detailed Placement of Cells within an Integrated Circuit Design [P]. US Patent 6370673. April 2002

[6] Brenner U, Pauli A, Vygen J. Almost Optimum Placement Legalization by Minimum Cost Flow and Dynamic Programming [C]//Proc. Int'l Symp. on Phys. Design. Phoenix, 2004; 2-8

[7] Adya S N, Markov I L. ISPD02 IBM-MS Mixed-size Placement

[8] Chan T F, Cong J, Romesis M, et al. mPL6: A Robust Multilevel Mixed-Size Placement Engine[C]// Proc. ACM/IEEE International Symposium on Physical Design. 2005; 227-229

[9] Chan T F, Cong J, Shinnerl J R, et al. mPL6: Enhanced Multilevel Mixed-Size Placement[C]// Proc. ACM/IEEE International Symposium on Physical Design. 2006; 212-214

[10] Viswanathan N, Pan M, Chu C. Fastplace 3.0: A fast multilevel quadratic placement algorithm with placement congestion control[C]//Proc. ASP-DAC. Pacifico Yokohama, 2007; 135-140

[11] Nam G-J. ISPD 2006 placement contest: Benchmark suite and results[C]// Proceedings of the International Symposium on Physical Design. San Jose, 2006; 167-167

(上接第 242 页)

误差决定。随机生成大小分别为 100, 200, 300 和 600 的训练集, 每个集合都生成 30 组。然后在剩余集合中生成测试集和检验集, 大小都为 300。比较了 3 种信噪比下的重构效果:  $\infty$ , 40 和 30。

#### 4.2 实验结果分析

为了保证实验结果的统计一致性, 所有的结果都是经过 30 次重复实验总结出来的。表 1 到表 4 分别给出了训练样本数量分别为 100, 200, 300 和 600 时的验证集根均方误差 (Root-mean-square-error, RMSE)。可以明显看出, 增加训练样本的数量总是可以提高回归算法的精度。并且 SNR 越低, 实验结果越差。RNN 总是比 RPM 产生更低的 RMSE。只有在训练样本为 100 时, RNN 才比 RPM 略差。与传统的回归方法相比, 本文的 SVR 方法在训练集样本较少 (100, 200 或 300) 时可以在验证集上产生更低的 RMSE。由表 1 到表 4 可见, SVR 方法的抗噪性比较好, 特别是在 SNR 比较低的时候, SVR 方法的优势最明显。随着训练样本的增多, SVR 的表现开始不那么突出。通过不同大小训练样本集以及不同噪音水平的组合实验, 可以证明新方法可以提高光谱反射率重建的精度以及稳定性。新方法的泛化能力在样本数量较少且噪音较大的情况下超越了已有的回归方法。

表 1 训练集为 100 时的验证误差

SNR	RPM	RNN	SVR
$\infty$	0.0118	0.0122	0.0095
40	0.0121	0.0133	0.0107
30	0.0147	0.0157	0.0122

表 2 训练集为 200 时的验证误差

SNR	RPM	RNN	SVR
$\infty$	0.0117	0.0108	0.0093
40	0.0119	0.0114	0.0106
30	0.0143	0.0136	0.0119

表 3 训练集为 300 时的验证误差

SNR	RPM	RNN	SVR
$\infty$	0.0116	0.0104	0.0103
40	0.0119	0.0118	0.0110
30	0.0140	0.0132	0.0128

表 4 训练集为 600 时的验证误差

SNR	RPM	RNN	SVR
$\infty$	0.0116	0.0103	0.0104
40	0.0117	0.0113	0.0110
30	0.0135	0.0128	0.0127

**结束语** 本文提出了一种基于支持向量回归和小框架核的光谱反射率重建算法, 并通过实验证明了新方法在训练样本较小和噪音较大时优于传统的回归方法。新方法的优异表现一方面是因为小框架核具有较强的多尺度逼近能力和抗噪性, 另一方面是因为支持向量回归自身具有优良的泛化能力。

#### 参考文献

[1] Hardeberg J Y. Acquisition and Reproduction of Color Images-Colorimetric and Multispectral Approaches [J]. Dissertation. com, 2001

[2] Hardeberg J Y. Filter selection for multispectral color image acquisition[J]. J Imaging Sci Technol. , 2004, 48: 105-110

[3] Connah D, Hardeberg J Y. Spectral recovery using polynomial models[J]. Proc SPIE, 2005, 5667: 65-75

[4] Heikkinen V, Jetsu T, Parkkinen J, et al. Regularized learning framework in the estimation of reflectance spectra from camera responses[J]. Journal of the Optical Society of America A, 2007, 24: 2673-2683

[5] Vapnik V N. The Nature of Statistical Learning Theory [M]. New York: Springer-Verlag, 1995

[6] Vapnik V N. Statistical Learning Theory [M]. New York: Wiley, 1998

[7] Zhang L, Zhou W D, Jiao L C. Wavelet support vector machine [J]. IEEE Transactions on System, Man and Cybernetics-Part B: Cybernetics, 2004, 34(1): 34-39

[8] Gao J B, Harris C J, Gunn S R. On a class of support vector kernels based on frames in function hilbert spaces[J]. Neural Computation, 2001, 13(9): 1975-1994

[9] Amato U, Antoniadis A, Pensky M. Wavelet kernel penalized estimation for nonequispaced design regression[J]. Statistics and Computing, 2006, 16(1): 37-55

[10] Rakotomamonjy A, Canu S. Frames, reproducing kernels, regularization and learning [J]. Journal of Machine Learning Research, 2005, 6: 1485-1515

[11] Zhang Wei-feng, Dai Dao-qing, Yan Hong. On a new class of framelet kernels for support vector regression and regularization networks[C]//11th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD'07). Nanjing, Lecture Notes in Artificial Intelligence, Vol. 4426, 2007; 355-366

[12] Zhang Wei-feng, Dai Dao-qing, Yan Hong. Framelet kernels with applications to support vector regression and regularization networks[J]. IEEE Transactions on System, Man and Cybernetics, Part B, 2009