图像图谱多尺度分割的相似度因子研究 *

陈纳威[1a], 田 铮[1a,2], 徐海霞[1b]
(1. 西北工业大学 a. 理学院; b. 计算机学院, 西安 710129; 2. 遥感科学国家重点实验室, 北京 100101)

摘 要: 通过对相似性度量函数的研究,得到了参数 σ 的取值与聚类类数间的关系,并据此提出了一种自动确定参数 σ 的方法,设计了一种基于相似度因子的无监督聚类算法(unsupervised clustering algorithm based on similarity parameter, UCASP),在图像分割的实际应用中实现了无监督分割。

关键词: 图谱; 图谱聚类; 多尺度分割; 相似度因子
中图分类号: TP391 **文献标志码**: A **文章编号**: 1001-3695(2009)11-4342-03
doi:10.3969/j.issn.1001-3695.2009.11.099

Multiscale image segmentation based on parameter of similarity function

CHEN Na-wei[1a], TIAN Zheng[1a,2], XU Hai-xia[1b]
(1. *a. School of Science, b. School of Computer, Northwestern Polytechnical University, Xi' an* 710129, *China*; 2. *State Key Laboratory of Remote Sensing Science, Beijing* 100101, *China*)

Abstract: This paper found the affiliation between the parameter and the number of cluster on the basis of the research of similarity function. Meanwhile, achieved an approach to assigning parameter σ automatically. Finally, developed an unsupervised clustering algorithm, which achieved an really unsupervised segmentation on real-world data.

Key words: spectral graph; spectral clustering; multiscale segmentation; similarity parameter

图像分割是图像分析和理解的基础,在计算机视觉、自动目标识别、医疗诊断和遥感图像处理等方面有广泛而重要的应用。在以聚类技术为手段的分割方法中,源于图谱的聚类方法(简称为谱聚类)引起了研究者的广泛关注[1]。与传统的聚类算法,如 K 均值(K-means)[2]、模糊 C 均值(fuzzy C-means)[3]、自组织映射(self-organizing map)[4]相比,谱聚类算法具有执行简便、求解有效等优点。然而,谱聚类算法尚存在一定的缺陷。除聚类方法固有的类数难以确定的问题外,待聚类数据点的相似性度量函数(简称为相似度函数)的确定至今未有合理的方案,但是,它却直接关系到最终聚类、分割结果的优劣。

一般地,利用谱聚类方法执行图像分割,可等价地转换为相应图的分割,即以待聚类数据点为顶点,以两点间的相似性度量为边建立邻接图或加权图。然后利用图的邻接矩阵或权矩阵(统称为图矩阵)的特征值和特征向量执行图的分割,从而得到图像的分割。Donath 等人[5]最早在研究了利用图的邻接矩阵的特征值和特征向量执行图的分割问题。随后,Fielder[6]研究了由邻接矩阵衍生出的 Laplace 矩阵的特征值和特征向量,并建议可采用 Laplace 矩阵的第二最小特征值对应的特征向量执行图的分割。Shi 等人[7]证明了图的 normalized cut 实值连续最优解可以通过规范化的 Laplace 矩阵的第二最小特征值对应的特征向量得到,从而首次将图的谱分割应用到图像分割中。此后,大量的关于谱聚类在图像分割中的应用研究得以发展,主要集中在两方面:a)讨论如何有效地利用特征向量中的信息执行图像分割[8~10],并且所提出的不同方案在实际应用中也得到了预期的结果;b)针对聚类过程中,存在人工指定聚类类数的问题[11]。在自动确定聚类类数的研究中,对于不同的图矩阵分别得到了相应的理论结果[1,13]。其中,Tian zheng 等人[13]通过对图的权矩阵的特征值和特征向量的研究,得到权矩阵的特征值与聚类类数间的关系,理论上解决了加权图中自动确定聚类类数的问题,但是在具体的点集聚类中仍未能实现确定聚类类数。因为在确定待聚类数据点之间的相似度函数时,其参数 σ(称之为尺度因子)需要人工训练得到。虽然得到了较好的实验结果,但不利于计算机自动聚类和识别。

为实现自动确定尺度因子 σ 的取值,进而实现图像的无监督分割,本文对相似度函数的尺度因子 σ 进行了深入的研究,得到了尺度因子 σ 取值与聚类类数间的对应关系,并据此设计了一种基于相似度因子的无监督聚类算法。实验结果显示了理论分析的正确性和算法的有效性。

1 相关定义

定义如下聚类度量空间:

$\Omega_1 = (V,R)$: $V = \{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$ 是待聚类对象集。其中 v_i 为待聚类对象,R 为定义在 V 上的距离(称之为相似度函数)。

$\Omega_2 = (\Pi, D)$: $\Pi = \{\pi_1, \pi_2, \cdots, \pi_K\}$ 是聚类所得的集类。其

收稿日期: 2009-02-11; **修回日期**: 2009-03-11 **基金项目**: 国家自然科学基金资助项目(60375003); 国家航空基础项目(03I53059); 西北工业大学科技创新基金资助项目(2007KJ01033)

作者简介: 陈纳威(1983-),男,河南项城人,硕士研究生,主要研究方向为遥感信息处理、图像分割与理解等(chnw16@163.com); 田铮(1948-),女,辽宁法库人,教授,博导,主要研究方向为时间序列分析、计算机视觉与遥感图像处理等; 徐海霞(1980-),女,博士研究生,主要研究方向为图谱理论、方法及 SAR 图像信息处理等.

中：$\pi_1,\pi_2,\cdots,\pi_K$ 为集 V 的一个划分，$\pi_i\subset V$，$\bigcup_{i=1}^{K}\pi_i=V$，$\pi_i\cap\pi_{j,j\neq i}=\varnothing$；$K(1\leqslant K\leqslant n$ 为聚类类数）；$D=\{d_{\text{intra-}\pi},d_{\text{inter-}\Pi}\}$ 为定义在集类 Π 上的距离（见定义 3）。

谱聚类旨在将空间 Ω_1 中的元素——待聚类对象，映射到空间 Ω_2 中的元素——聚类集。为此，在空间 Ω_1 中，以 V 为顶点集构造赋权图 $G(V,E)$。其中 $E=V\times V$ 表示顶点之间的边集，边 (v_i,v_j) 简记为 e_{ij}，即 $e_{ij}=(v_i,v_j)$。边 (v_i,v_j) 上的权 $v_{ij}\in[0,1]$，表示点 v_i、v_j 之间的相似程度。v_j、v_j 之间越相似，即 v_i、v_j 越有可能属于同一类，w_{ij} 越大；反过来说 w_{ij} 越大，表明 v_i、v_j 越有可能属于同一类，特别有 $v_{ii}=1,i=1,2,\cdots,n$。

定义 1　相似度函数。定义二元函数 $R:V\times V\rightarrow[0,1]$，若 R 满足 $R(v_i,v_j)=w_{ij}(i,j=1,2,\cdots,n)$，则称 R 为 V 的相似度函数，称 $R(v_i,v_j)$ 为 v_i、v_j 之间的相似度。

定义 2　权矩阵。称矩阵 $\boldsymbol{W}=(w_{ij})_{n\times n}$ 为图 G 的权矩阵。

显然有 $\boldsymbol{W}=(w_{ij})_{n\times n}=(R(v_i,v_j))_{n\times n}$，简记为 $\boldsymbol{W}=R(V,V)$。

定义 3　距离。称 $d_{\text{intra-}\pi}=d(v_i,v_j)(v_i,v_j\in\pi;i,j=1,2,\cdots,n)$ 为类内距离，称 $d_{\text{inter-}\Pi}=d(v_i,v_j)(v_i\in\pi_i,v_j\in\pi_j;\pi_i,\pi_j\in\Pi;i\neq j;i,j=1,2,\cdots,n)$ 为类间距离。

$\boldsymbol{E}_n$ 表示元素全为 1 的 n 阶矩阵，$\boldsymbol{I}_n$ 表示 n 阶单位矩阵。

2　尺度因子 σ 与多尺度聚类

首先给出相似度函数的表达形式：

$$R(v_i,v_j)=\exp\left(-d^2(v_i,v_j)/\sigma^2\right);i,j=1,2,\cdots,n \tag{1}$$

其中：$d(v_i,v_j)$ 表示顶点 v_i、v_j 之间的欧氏距离；$\sigma(0<\sigma<\infty)$ 为尺度因子，用于控制待聚类对象之间的相似程度。

在谱聚类方法中，多尺度聚类问题可以借助相似度函数的尺度因子 σ 来研究。特别地，考虑如下情况：

a）当 $\sigma\rightarrow\infty$ 时，$R(v_i,v_j)\rightarrow1(i\neq j;i,j=1,2,\cdots,n)$，$\boldsymbol{W}=(w_{ij})_{n\times n}\rightarrow\boldsymbol{E}_n$。

b）当 $\sigma\rightarrow0$ 时，$R(v_i,v_j)\rightarrow0(i\neq j;i,j=1,2,\cdots,n)$，$\boldsymbol{W}=(w_{ij})_{n\times n}\rightarrow\boldsymbol{I}_n$。

根据文献[13]的结论：以待聚类对象间的相似度为元素构造权矩阵，同类对象间的相似度值为 1，反之为 0。聚类数 K 等于值不小于 1 的矩阵特征值的个数。即使权矩阵有较小的扰动，结论仍然成立。当 $\sigma\rightarrow\infty$ 时，权矩阵趋向于 $\boldsymbol{E}_n$，易知不小于 1 的特征值的个数为 1，故聚类类数 K 为 1，即待聚类对象同属一类；同理，当 $\sigma\rightarrow0$ 时，权矩阵趋向于 $\boldsymbol{I}_n$，不小于 1 的特征值的个数为 n，故聚类类数 K 为 n，即各对象自成一类。据此可见尺度因子 $\sigma(0<\sigma<\infty)$ 与聚类数 $K(1\leqslant K\leqslant n)$ 有某种对应关系。

一般地，同类数据对象间相似度并非严格等于 1，只是近似为 1；同样地，异类数据对象间相似度近似为 0。事实上，随尺度因子 σ 的取值不同，计算所得类内、类间相似度偏离 1 或 0 的大小程度不同，进而得到的聚类情况也不一样。这就为利用尺度因子 σ 执行多尺度聚类提供了依据。因此，尺度因子 σ 的合理选择便成为多尺度聚类的关键。为此设定一组扰动变量 $\{\delta_h,\delta_l\}$，分别用于控制类内离散程度和类间的混杂程度，即类内相似度接近于 1 和类间相似度接近于 0 的程度。

对于聚类对象集 $V=\{v_1,v_2,\cdots,v_n\}$，在扰动 $\Delta=\{\delta_h,\delta_l\}$ 控制下聚类为 $\Pi=\{\pi_1,\pi_2,\cdots,\pi_K\}$。那么，权矩阵 $\boldsymbol{W}=R(V,V)$ 中，类内相似度偏离 1 的范围应小于 δ_h，类间相似度偏离 0 的范围应小于 δ_l。进而可得

$$\begin{cases}\text{类内}\quad \exp\{-d^2_{\text{intra-}\pi_i}/\sigma^2\}\geqslant1-\delta_h\\ \text{类间}\quad \exp\{-d^2_{\text{inter-}\Pi}/\sigma^2\}\leqslant\delta_l\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}-d^2_{\text{intra-}\pi_i}/\ln(1-\delta_h)\leqslant\sigma^2\\ -d^2_{\text{inter-}\Pi}/\ln(\delta_l)\geqslant\sigma^2\end{cases}\Rightarrow$$

$$d_{\text{intra-}\pi_i}/\sqrt{-\ln(1-\delta_h)}\leqslant\sigma\leqslant d_{\text{inter-}\Pi}/\sqrt{-\ln\delta_l} \tag{2}$$

于是便有如下定理：

定理　对于聚类对象集 $V=\{v_1,v_2,\cdots,v_n\}$，在扰动 $\Delta=\{\delta_h,\delta_l\}$ 控制下聚类集为 $\Pi=\{\pi_1,\pi_2,\cdots,\pi_K\}$，则有 $d_{\text{intra-}\pi_i}/\sqrt{-\ln(1-\delta_h)}\leqslant\sigma\leqslant d_{\text{inter-}\Pi}/\sqrt{-\ln\delta_l}$ 成立。其中 $0<\delta_h,\delta_l<1$，$K(1\leqslant i\leqslant K)$ 为聚类数。

a）定理表明，在具体的扰动控制条件下，聚类情况 $\Pi=\{\pi_1,\pi_2,\cdots,\pi_K\}$ 与尺度因子 σ 的取值区间 $\left[d_{\text{intra-}\pi_i}/\sqrt{-\ln(1-\delta_h)},d_{\text{inter-}\Pi}/\sqrt{-\ln\delta_l}\right]$ 相对应，也即尺度因子 σ 在该区间取任意值都可将待聚类对象分割为 K 类。

b）在由“粗”到“细”的多尺度聚类思想中，对应的扰动控制 δ_h 逐步增大，δ_l 逐步减小，从而尺度因子 σ 的取值范围向 0 偏移，与实际相符。

至此，在聚类方案 $\Pi=\{\pi_1,\pi_2,\cdots,\pi_K\}$ 确定下，理论上解决了尺度因子 σ 如何选取的问题。

3　基于相似度因子的无监督聚类算法

尺度因子 σ 的取值直接决定了数据聚类、图像分割的结果。在真实的聚类、分割实践中，应用上述定理的结论时还应具体地给出尺度因子 σ 的取值区间。在此，本文给出了一种估计尺度因子 σ 的取值区间的方法。

考虑如下事实：若类内最大距离 $\max(d_{\text{intra-}\pi_i})$ 近似等于 1，则所有类内距离 $d_{\text{intra-}\pi_i}$ 都将近似为 1；类间最小距离 $\min(d_{\text{inter-}\Pi})$ 近似等于 0，则所有类间距离 d_{inter} 也将近似等于 0。又

$$\left[\max(d_{\text{intra-}\pi_i})/\sqrt{-\ln(1-\delta_h)},\min(d_{\text{inter-}\Pi})/\sqrt{-\ln\delta_l}\right]\subset\left[d_{\text{intra-}\pi_i}/\sqrt{-\ln(1-\delta_h)},d_{\text{inter-}\Pi}/\sqrt{-\ln\delta_l}\right]$$

所以可选取尺度因子 σ 的取值区间为

$$\left[\max(d_{\text{intra-}\pi_i})/\sqrt{-\ln(1-\delta_h)},\min(d_{\text{inter-}\Pi})/\sqrt{-\ln\delta_l}\right]$$

不妨取

$$\sigma=(1/2)\left[\max(d_{\text{intra-}\pi_i})/\sqrt{-\ln(1-\delta_h)}+\min(d_{\text{inter-}\Pi})/\sqrt{-\ln\delta_l}\right]$$

据此本文设计了一种聚类算法——基于相似度因子的无监督聚类算法（UCASP）：

a）初始化 $\{\delta_h,\delta_l\}$、$\max(d_{\text{intra-}\pi_i})$、$\min(d_{\text{inter-}\Pi})$、$K=0$，标准化 V。

b）计算 σ，构造权矩阵 $\boldsymbol{W}=R(V,V)$，计算当前聚类数 K'。

c）若 $K=K'$ 算法终止；否则，令 $K=K'$，聚类 V。

d）更新 $\max(d_{\text{intra-}\pi_i})$ 和 $\min(d_{\text{inter-}\Pi})$，转至步骤 b）。

步骤 a）中标准化 V，有利于扰动变量 $\{\delta_h,\delta_l\}$ 的统一设定；变量 $\max(d_{\text{intra-}\pi_i})$、$\min(d_{\text{inter-}\Pi})$ 的初始化方式较为自由，因为步骤 d）是对其逐步修正的过程，所以对聚类结果基本无影响；步骤 c）中具体执行聚类 V 时，可供选用的方案也较灵活，本文所采用的初始化和聚类方法详见下一小节；UCASP 算法只需逐次调整扰动控制变量 $\{\delta_h,\delta_l\}$，就可以推广至数据的多尺度聚类。

4　实验结果与分析

4.1　数据点集聚类

在此选用图 1（a）中的数据点集为聚类对象，检测算法的

聚类效果及多尺度推广情况。

待聚类的数据对象为图 1(a)中的 20 个数据点。UCASP 算法执行至第一步时,根据定理的注释,为得到相对粗略的聚类结果,初始的较小扰动设定为{0.1,0.1};对于变量 max($d_{\text{intra-}\pi_i}$)、min($d_{\text{inter-}\Pi}$)的初始化,采用随机地选取 V 中一点并计算该点与其余点的距离值,选取距离的最大、最小值作为其初始值。运行步骤 b)所得两值分别为 0.864 9、0.502 9。计算所得尺度因子 $\sigma=1.666\ 2$,类数 $K'=2$。步骤 c)中,$K\neq K'$,执行聚类 V 时,采用 Shi-Malik 标准谱方法聚类[1],即利用与当前类数相同的前 K' 个标准 Laplace 矩阵的特征向量聚类,聚类结果如图 1(b)所示。运行步骤 d)修正变量 max($d_{\text{intra-}\pi_i}$)、min($d_{\text{inter-}\Pi}$)值分别为 0.376 2、0.712 3。再次计算尺度因子 $\sigma=1.222\ 9$,尽管与前不同,但是在扰动{0.1,0.1}控制内同样对应类数为 2 的情况,算法终止。

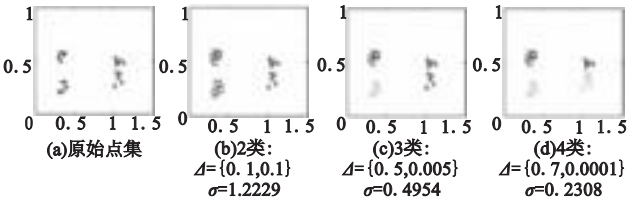

图1　UCASP算法应用于模拟点集的多尺度聚类结果

依据定理注解 b)分析,有规律地调整扰动控制的值就可得到数据的多尺度聚类结果。事实上,实验证明算法的收敛性也较好,即只需少数次迭代就可稳定聚类结果。图 1(b)~(d)分别显示了上述算法对待聚类数据点推广至多尺度聚类时执行的结果。另外,对于图 1(a)实际上也是在扰动极小情况下的类数为 1 的聚类结果。

4.2　图像分割

在此本文展现了 UCASP 算法在真实图像分割中执行的情况。为了客观地对 UCASP 算法作出评价,选用 Berkely 分割图像库[14]中的图像为实验对象,并随机地抽取一些图像进行分割实验,如图 2 所示。

图 2 显示了 UCASP 算法执行的图像分割与 Berkely 分割图像库中人工分割的对比效果图。图中按列由左至右依次为原始图像、人工分割结果和本文算法分割结果。由分割实验对比可见,本文算法在彩色和灰度图像上的分割结果与人的主观视觉感知都有较好的一致性。图 2 所示为算法执行至 7 类的分割效果。

图 3 给出了 UCASP 算法执行第四幅山脉图的多尺度分割过程,依次为原始图像和 2~6 类分割效果图。

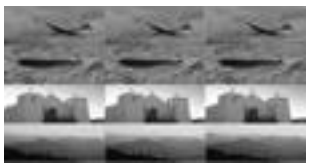

图2　与人工分割结果的对比

图3　多尺度分割

5　结束语

本文针对谱聚类中,从相似度函数的参数 σ 的取值难以自动确定的问题入手,深入研究,提出了一种基于相似度因子的无监督聚类算法。该算法具有如下特点:

a)借助扰动分析发现了相似度函数的参数 σ 与聚类情况的对应关系,从而自动确定出合理的相似度函数,为精确聚类和分割提供了依据。

b)通过赋予参数 σ 尺度因子的含义,使得聚类和分割能够从"粗"到"细"依次进行。由于尺度因子随扰动控制不同而变化,UCASP 算法具有多尺度性。

c)设定不同的扰动控制值可得到不同尺度的聚类和分割结果,体现了 UCASP 算法的灵活性。具体执行聚类时并不要求特定的聚类方案,体现了 UCASP 算法的兼容性。

参考文献:

[1] LUXBURG V U. A tutorial on spectral clustering, Technical Report TR-149[R]. [S. l.]: Max Planck Institute for Biological Cybernetics, 2006.

[2] KANUNGO T, MOUNT D M, NETANYAHU N S, *et al*. An efficient K-means clustering algorithm: analysis and implementation [J]. IEEE Trans on Pattern Anal Mach Intell, 2002, 24(7): 881-892.

[3] SHEN S, SANDHAM W, GRANAT M, *et al*. MRI fuzzy segmentation of brain tissue using neighborhood attraction with neural-network optimization[J]. IEEE T Inf Technol Biomed, 2005, 9(3): 459-467.

[4] YIN H, ALLINSON N M. Unsupervised segmentation of textured images using a hierarchical neural structure[J]. Electron Lett, 1994, 30(22): 1842-1843.

[5] DONATH W E, HOFFMAN J A. Lower bounds for partitioning of graphs[J]. IBM Journal of Research and Development, 1973, 17(5):420-425.

[6] FIEDLER M. Algebraic connectivity of graphs[J]. Czechoslovak Mathematical Journal, 1973, 23(2): 298-305.

[7] SHI J, MALIK J. Normalized cuts and image segmentation[C]//Proc of IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 1997:731-737.

[8] WEISS Y. Segmentation using eigenvectors: a unifying view[C]// Proc of IEEE International Conference on Computer Vision. 1999: 975-982.

[9] LANG K. Fixing two weaknesses of the spectral method[C]//Proc of Advances in Neural Information Processing Systems. 1998: 715-722.

[10] XIANG Tao, GONG Shao-gang. Spectral clustering with eigenvector selection[J]. Pattern Recognition, 2008, 41(3): 1012-1029.

[11] BIERNACKI C, GOVAERT G. Choosing models in model-based clustering and discriminant analysis, RR-23509[R]. Rhone-Alpes: INRIA, 1999.

[12] MOHAR B. Some applications of Laplace eigenvalues of graphs [C]//NATO ASI Series C, vol 497. [S. l.]: Kluwer Acadenice Press, 1997: 225-275.

[13] TIAN Zheng, LI Xiao-bin, JU Yan-wei. Spectral clustering based on matrix perturbation theory[J]. Science in China Series F Information Science, 2007, 50(1): 63-81.

[14] MARTIN D, FOWLKES C, TAL D, *et al*. A database of human segmented natural images and its application to evaluating segmentation algorithms and measuring ecological statistics[C]//Proc of International Conference on Computer Vision. 2001:416-423.