

三元组描述符的特征匹配算法

沈学利¹ 陈鑫彤²

¹(辽宁工程技术大学电子与信息工程学院 辽宁 葫芦岛 125105)

²(辽宁工程技术大学研究生院 辽宁 葫芦岛 125105)

摘要 针对“风”(KAZE)/加速“风”(Accelerated KAZE)算法鲁棒性差、速度慢等问题,提出三元组描述符(Learned Arrangements of Three Patch Codes)与KAZE/AKAZE算法结合的方法,称作KAZE/AKAZE-LATCH算法。利用AOS算法或者FED算法解非线性方程搭建金字塔;利用海森矩阵在非线性金字塔上寻找特征点;以特征点为圆心按照尺度大小选择相应的采样窗口以建立描述符;利用三元组算法建立二进制描述符。将该算法与KAZE算法和AKAZE算法在公开数据集上对具有模糊变换、光照变换、视角变换和JPEG变换的图像进行匹配时间和匹配正确率的对比实验。经实验表明:该算法的匹配正确率得到巨大提升,匹配速度增加。与现有算法相比,该算法的鲁棒性和实时性更好,可用于对匹配速度和精度要求较高的场景。

关键词 AKAZE/KAZE算法 三元组二进制描述符 非线性金字塔 双线性差值算法

中图分类号 TP3 文献标识码 A DOI:10.3969/j.issn.1000-386x.2019.02.037

FEATURE MATCHING ALGORITHM FOR LEARNED ARRANGEMENTS OF THREE PATCH CODES

Shen Xueli¹ Chen Xintong²

¹(School of Electronic and Information Engineering, Liaoning Technical University, Huludao 125105, Liaoning, China)

²(Graduate School, Liaoning Technical University, Huludao 125105, Liaoning, China)

Abstract Aiming at the problems of poor robustness and slow speed of KAZE/Accelerated KAZE algorithm, a method of combining learned arrangements of three patch codes with KAZE/AKAZE algorithm was proposed, which was called KAZE/AKAZE-LATCH algorithm. We used AOS algorithm or FED algorithm to solve nonlinear equations to build pyramid. The Hessian matrix was used to find the feature points on the nonlinear pyramid, and the corresponding sampling window was selected according to the size of the feature points as the center of the circle to establish the descriptor. A binary descriptor was created by using the three tuple algorithm. The proposed algorithm was compared with KAZE algorithm and AKAZE algorithm in the open dataset for matching time and matching accuracy of images with fuzzy transformation, illumination transformation, view transformation and JPEG transformation. Experiments show that the matching accuracy of the proposed algorithm is greatly improved and the matching speed is increased. Compared with existing algorithms, the proposed algorithm has better robustness and real-time performance, and can be used in scenarios with higher matching speed and accuracy requirements.

Keywords AKAZE/KAZE algorithm Learned arrangements of three patch codes Nonlinear pyramid Bilinearity interpolation algorithm

0 引言

基于局部特征的图像匹配是图像拼接、水印嵌入、

SLAM系统、三维重建等的主要步骤,是计算机视觉的一个热门研究方向。常见的匹配方法按照描述符的类型不同可分为两大类:二进制描述符、非二进制描述符。

非二进制描述符主要有:尺度不变 SIFT(Scale Invariant Feature Transform)^[1]的特征点检测和匹配算法,其匹配效果较好,但匹配速度较慢,算法复杂度高。加速鲁棒性算法 SURF(Speeded UpRobust Feature)^[2]的特征点提取与匹配,其复杂度比 SIFT 算法低、鲁棒性好,但相较于二进制描述符匹配速度太慢。文献[3]在 SIFT 算法上进行改进的 ASIFT 算法,仅考虑了仿射空间中图像特征点提取和匹配,对具有大视差的匹配图像具有很强的鲁棒性,但并不适合对实时性要求较高的情景。文献[4]提出的“风”(AKZE)算法,率先提出搭建非线性金字塔以更好地保护图像边缘信息,使得构建的描述符的鲁棒性增加,但搭建的非二进制描述符维度过高匹配速度较慢,匹配的鲁棒性太差,不适用对实时性和鲁棒性要求较高的场景。

二进制描述符主要有:文献[5]建立了更高维度特征点的二进制描述符的 BRISK(Binary Robust Invariant Scalable Keypoints)算法,此算法对模糊图像匹配有很好的性能,但对具有视差、光照变换图像鲁棒性较差。文献[6]使用 Oriented Fast 算法选取特征点 Rotated BRIEF(Binary Robust Independent Elementary Features)建立描述符,此算法匹配速度快,但鲁棒性不及 SIFT、KAZE 等算法。文献[7]模拟人眼识别物体进行匹配,虽速度快但精度相比上述算法较低。文献[8]提出加速“风”(Accelerated KAZE, AKAZE)算法,使用 FED 算法(Fast Explicit Diffusion)^[9]解非线性函数,建立 LDB(Modified-Local Difference Binary)二进制描述符^[14],相较于 KAZE 算法匹配速度更快、算法鲁棒性增加,但 LDB 算法不仅需要计算灰度信息还需要计算一阶梯度信息,减缓了匹配算法的速度。

针对 KAZE 算法和 AKAZE 算法搭建描述符匹配速度较慢、鲁棒性较差等问题,本文提出三元组^[10]描述符与 KAZE/AKAZE 算法相结合的算法,可命名为 KAZE/AKAZE-LATCH 算法。经实验表明:KAZE-LATCH 算法的鲁棒性和匹配速度都远优于 KAZE 算法,AKAZE-LATCH 算法的整体性能相较 AKZE 算法有大幅度提高,AKAZE-LATCH 算法鲁棒性和速度都优于 KAZE-LATCH 算法。

1 KAZE/AKAZE 算法

1.1 非线性金字塔搭建

非线性尺度空间的构建主要基于非线性扩散滤波原理。依据非线性扩散滤波原理,KAZE/AKAZE 算法与物理学中二维热扩散过程描述相似,将图像亮度视

为能量,亮度随尺度变化模拟热传导流动,通过热流扩散过程函数描述图像亮度扩散。公式如下:

$$\frac{\partial L}{\partial t} = \text{div}(c(x, y, t) \nabla L) \quad (1)$$

式中: div 和 ∇L 分别表示散度和梯度,函数 $c(x, y, t)$ 表示扩散的传导函数,该函数的引入使得扩散能够适应图像局部特征,其中参数 t 为尺度参数, t 越大,图像表示形式越简单。传导函数主要由梯度幅值控制,可变传导函数如下:

$$c(x, y, t) = g(|\nabla L_\sigma(x, y, t)|)c(x, y, t) = g(|\nabla L_\sigma(x, y, t)|) \quad (2)$$

式中: ∇L_σ 为图像经高斯平滑之后的梯度, g 是扩散函数,本文中为保留较大宽度区域,选取 g 为:

$$g = \frac{1}{1 + |\nabla L_\sigma|^2/k^2} \quad (3)$$

式中:参数 k 表示控制扩散对比度因子,边缘信息保留量与参数 k 成反比,比值越大,同一点位置相对扩散越小。式(1)为非线性扩散偏微分方程,在 KAZE 算法中通过 AOS(Additive Operator Splitting)算法^[12]求解,采用隐式差分格式,对式(1)进行离散变换,可得:

$$\frac{L^{i+1} - L^i}{\tau} = \sum_{l=1}^m A_l(L^i) L^{i+1} \quad (4)$$

式中: A_l 是 i 尺度上图像亮度 L^i 在维度 l 上的传导矩阵, τ 为步长, m 为 L 的行列乘积, i 为图像序列。 A_l 由式(4)可求解出 L^{i+1} 为:

$$L^{i+1} = (I - \tau \sum A_l(L^i))^{-1} L^i \quad (5)$$

式中: I 为单位矩阵,此方法对任意时间步长 τ 都绝对稳定。

在 AKAZE 算法中,式(1)利用 FED 算法解非线性扩散偏微分方程,FED 算法比 AOS 算法速度更快、精度更高。FED 算法可表示为:

$$L^{i+1,j+1} = (I + \tau_j A(L^i))^{j+1} \quad j=0, 1, \dots, n-1 \quad (6)$$

式中: I 表示单位矩阵; $A(L^i)$ 为图像 L^i 的传导矩阵; n 表示显性扩散步数; τ_j 表示对应步长,可表示为:

$$\tau_j = \frac{\tau_{\max}}{2 \cos^2\left(\pi \frac{2j+1}{4n+2}\right)} \quad (7)$$

KAZE/AKAZE 算法构建非线性尺度空间过程,是通过指数步长的系列组合生成(O 个组, S 个层)来离散化尺度空间,利用组索引值 O 和层索引值 S 分别识别不同的组和层,组、层与尺度参数 δ 的关系如下:

$$\begin{aligned} \delta_i &= \delta_0 \times 2^{o+\frac{s}{S}} \quad o \in [0, 1, \dots, O-1], \\ s &\in [0, 1, \dots, S-1], i \in [0, 1, \dots, N] \end{aligned} \quad (8)$$

式中: δ_0 代表基本尺度, O 表示组序号, S 表示层序号。

因为非线性扩散滤波模型构建的尺度空间以时间

为单位,所以将以图像像素为单位的尺度参数转化成以进化时间为单位的尺度参数。在高斯空间中,使用标准差为 δ 的高斯卷积,相当于图像进行时间 $t = \delta_i/2$ 的滤波。由此可知尺度参数 δ_i 与进化时间 t 之间的映射关系为:

$$t_i = \frac{1}{2}\delta_i^2 \quad i = \{0, 1, \dots, N\} \quad (9)$$

KAZE/AKAZE 算法构建尺度空间的流程是:首先通过高斯卷积平滑处理图像,减小噪声和形变等干扰;然后计算图像梯度直方图,以获取对比度因子参数 k ,确定保留边缘信息量;最后用进化时间序列构造非线性尺度空间,并且通过 AOS 算法或者 FED 算法及简单迭代求解,获取到非线性尺度空间图像序列:

$$L^{i+1} = (I - (t_{i+1} - t_i) \sum_{l=1}^m A_l(L^i))^{-1} L^i \quad (10)$$

1.2 KAZE/AKAZE 特征点定位

AKAZE/KAZE 算法使用 Hessian 矩阵在非线性金字塔上寻找极大值从而确定特征点,如下式:

$$L_{\text{Hessian}}^i = \sigma_i^2 (L_{xx}^i L_{yy}^i - L_{xy}^i L_{xy}^i) \quad (11)$$

式中: σ_i 为尺度因子初始值, L_{xx} 、 L_{yy} 和 L_{xy} 分别表示 x 方向, y 方向和 xy 方向的 2 阶导数。对于每一个经过 hessian 矩阵归一化的像素点,将其与金字塔相邻尺度中 $\sigma_i \times \sigma_i$ 区域以及本身所在尺度 $\sigma_i \times \sigma_i$ 区域的像素点进行比较,求取区域特征点。

定位特征点的位置,以特征点为中心,画出半径为 σ_i 的圆分为 6 个扇形,如图 1 所示。计算每个扇形内所有像素点在水平和垂直方向的一阶导数的高斯加权值,高斯加权值最大方向即为特征点的主方向。

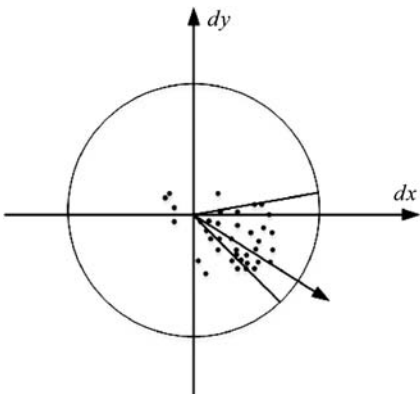


图 1 特征点方向

2 KAZE/AKAZE-LATCH 描述符建立

前面对 KAZE/AKZE 算法非线性金字塔搭建、特征点定位、特征点的方向,进行了详细的叙述,在本节中需要对描述符的建立进行详细的阐述。传统的二

进制描述符如:BRIFE、BRISK 等都是根据两像素之间的关系建立描述符,这种描述符的鲁棒性较差,易受光照、尺度、噪声等的干扰,导致匹配效果较差。故在本文中提出 AKAZE/KAZE-LATCH 算法,利用 LATCH 算法建立三像素之间的关系建立描述符。

如图 2 所示,假设以特征点为中心的采样窗口内有 p_1 、 p_2 、 p_3 三个像素块,每个像素块中包含 $m \times m$ 个像素,比较两个像素块与对应位置像素块的平方和,可表示为:

$$g(W, \hat{s}_t) = \begin{cases} 1 & \|p_{t,a} - p_{t,1}\|_F^2 > \|p_{t,a} - p_{t,2}\|_F^2 \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (12)$$

则 LATCH 描述符可表示为:

$$b_w = \sum_{1 \leq t \leq T} 2^t g(W, \hat{s}_t) \quad (13)$$



图 2 三元组描述符

选择 $24\sigma_i \times 24\sigma_i$ 采样区域建立描述符,原 LATCH 描述符选择确定的 $m \times m$ 像素块建立关系,为了使 LATCH 描述符具有更强的尺度不变性,本文提出根据尺度关系建立像素块,像素块尺寸为 $3\sigma_i \times 3\sigma_i$ 。若像素块尺寸为非整数,则使用双线性差值算法计算像素块的像素值,如图 3 所示,可表示为:

$$X_1 = \frac{(x_2 - x)(y_2 - y)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} X_{11} + \frac{(x_2 - x)(y - y_1)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} X_{12} + \frac{(x - x_1)(y - y_1)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} X_{13} + \frac{(x - x_1)(y_2 - y)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} X_{14} \quad (14)$$

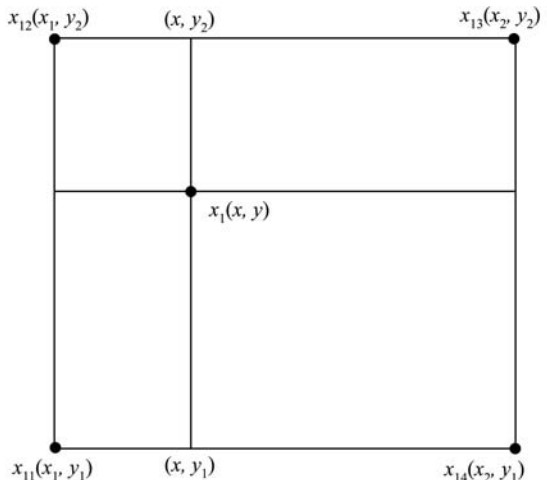


图 3 双线性差值算法

3 实验

3.1 实验过程

为了验证所提算法的优越性,选择 SIFT 算法、ORB 算法、AKAZE 算法、KAZE 算法等四种具有代表性的基于局部特征的匹配算法,在 INRIA 数据^[13]中具有模糊变换、光照变换、视角变换和 JPEG 变换的图像进行对比实验。

其中 SIFT 算法的描述符为非二进制,并且为最经典的匹配算法;ORB 算法描述符是二进制描述符,在众多二进制匹配算法中效果最佳;本文算法是在 KAZE 算法和 AKAZE 算法的基础上进行改进。故选择了上述四种算法进行对比实验。

本文实验平台为个人笔记本,匹配 AMD-A84-500,4 GB 内存,基于 Opencv 3.10 在 Visual Studio 2013 上进行实验。

3.2 实验结果

在本文实验中 SIFT 算法为 128 维描述符;ORB 算法的二进制描述符为 256 bit;KAZE 算法的描述符为 64 维;AKAZE 的描述符为 256 bit;本文所提算法描述符为 256 bit。

图 4 为基于局部特征图像匹配的评价图像,每一组 6 张图像,第一张为基准图像,剩余的五张为待匹配图像,随着同组图像编号的增加图像变化程度增加。如图 4 所示,(a)和(b)为图像模糊变换,(c)和(d)为图像 JPG 压缩,(e)和(f)为具有视角差的 wall 图像,(g)和(h)图像为光照发生变换。



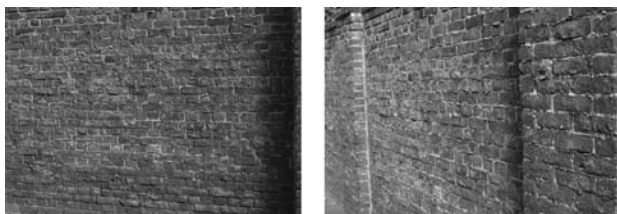
(a) Bike 图像(1/6)

(b) Bike 图像(6/6)



(c) BUC 图像(1/6)

(d) UBC 图像(6/6)



(e) wall 图像(1/6)

(f) wall 图像(6/6)



(g) Leuven 图像(1/6)

(h) Leuven 图像(6/6)

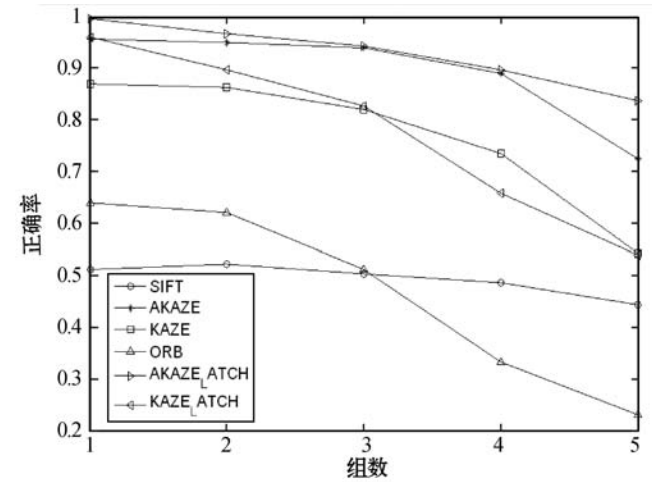
图 4 图实验图像

3.3 实验分析

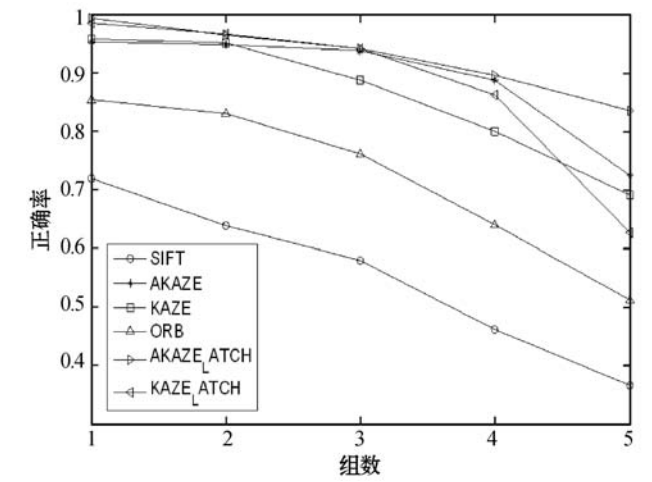
KAZE 算法率先提出了使用非线性金字塔有效地保护了图像边缘信息,利用加速鲁棒性算法 SURF (Speeded Up Robust Feature)的思想建立描述符,使得 KAZE 算法的鲁棒性进一步增加,故匹配正确率优于 SIFT 算法。AKAZE 算法使用精度更高、速度更快的 FED 算法解非线性函数,LDB 二进制描述符不仅计算了像素块之间的强度关系还表达了梯度关系,使得描述符的鲁棒性大大增加,故相对于 KAZE 算法正确率得到极大提升。SIFT 算法为最为经典的匹配算法,采用 128 维梯度描述符,搭建的高斯差分金字塔使得描述符的鲁棒性不及 KAZE 算法,但仍然优于二进制描述符 ORB 算法。ORB 算法描述符为二进制描述符,通过比较特征区域中像素值大小建立描述符,故 ORB 算法的鲁棒性最差。本文所提的 KAZE-LATCH 算法,使用非线性金字塔一方面增加描述符的鲁棒性,另一方面计算三个像素块之间的信息建立描述符,使得二进制三元组描述符的鲁棒性进一步增加,故匹配正确率相较于 KAZE/AKAZE 算法有巨大提升。AKAZE-LATCH 算法的利用 FED 算法搭建的非线性金字塔精度更高,LATCH 描述符的鲁棒性相较于 LDB 算法的鲁棒性更强,故 AKAZE-LATCH 算法匹配正确率要优于 AKAZE 算法和 KAZE-LATCH 算法。

图 5 为 SIFT 算法、ORB 算法、KAZE 算法、AKAZE 算法、KAZE-LATCH 算法和 AKAZE-LATCH 算法对具有模糊变换、光照变换、视角变换和 JPEG 变换的图像进行匹配时,匹配正确率的统计。由图 5(a)折线图分析可得,在模糊变换情境中,匹配正确率由大到小排序为:AKAZE-LATCH 算法、AKAZE 算法、KAZE-LATCH 算法、KAZE 算法、SIFT 算法、ORB 算法对于具有模糊图像致使描述符的鲁棒性下降,二进制描述符的稳定性虽不及非二进制描述符,但 AKAZE-LATCH 算法本身具有很大的优势,故匹配正确率最高。由图 5(b)可得,在具有 JPEG 变换图像中,匹配正确率顺序排列为:AKAZE-LATCH 算法、AKAZE 算法、KAZE-LATCH 算法、KAZE 算法、ORB 算法、SIFT 算法。JPEG 压缩致使图像的信息丢失,利用局部梯度建立的描述符的鲁

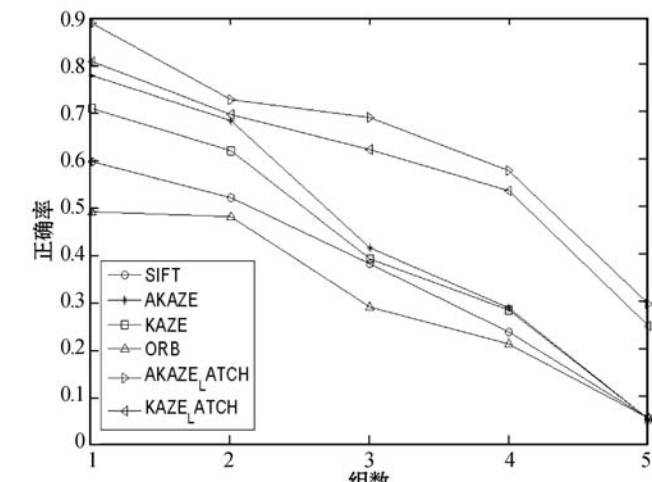
棒性会严重下降,故 SIFT 算法的匹配正确率最低。由图 5(c)可得,在具有视角差图像中,匹配正确率顺序排列为:AKAZE-LATCH 算法、KAZE-LATCH 算法、AKAZE 算法、KAZE 算法、SIFT 算法、ORB 算法。由图 5(d)可得,在具有亮度变换图像中,匹配正确率顺序排列为:KAZE 算法、AKAZE-LATCH 算法、KAZE-LATCH 算法、AKAZE 算法、SIFT 算法、ORB 算法。



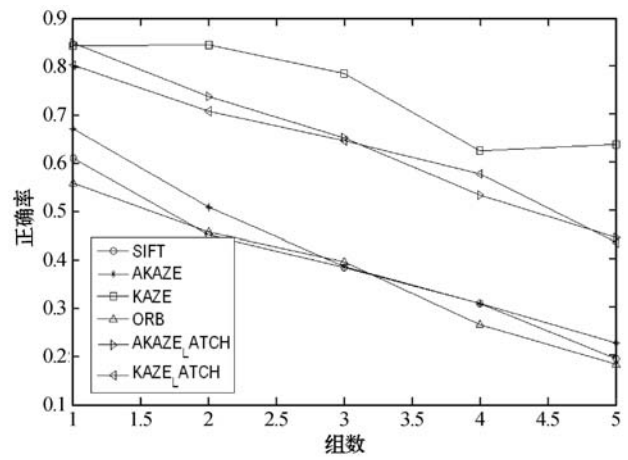
(a)



(b)



(c)



(d)

图 5 匹配正确率

由表 1 可以得到匹配速度顺序排列为:KAZE-LATCH 算法、AKAZE 算法、ORB 算法、KAZE-LATCH 算法、KAZE 算法、SIFT 算法。由于二进制描述符使用汉明距离计算相似度,比非二进制描述符匹配速度快,故 SIFT 算法和 KAZE 算法匹配速度较慢。AKAZE 算法的非线性方程由速度更快的 FED 算法计算,故匹配速度远超过 KAZE 算法。而 LATCH 描述符根据三个像素的关系确定描述符,相对于 LDB 描述符需要计算梯度,速度上进一步提升,故 AKAZE-LATCH 算法速度快于 AKAZE 算法。KAZE-LATCH 算法与 AKAZE-LATCH 算法相比,虽描述符种类相同,但 FED 算法计算速度要优于 AOS 算法,故 KAZE-LATCH 算法匹配速度不及 AKAZE-LATCH 算法。ORB 算法只需要搭建高斯金字塔,特征点检测速度也较快,描述符又为二进制,故匹配速度最快。

表 1 匹配时间

算法	Bike	BUC	wall	Leuven	平均时间/s
SIFT	9.99	30.36	32.77	9.52	20.66
ORB	5.42	4.55	3.94	4.81	4.40
KAZE	10.84	12.44	17.72	8.10	12.28
AKAZE	4.18	5.45	9.19	3.68	5.63
KAZE-LATCH	8.73	8.83	11.55	7.32	9.12
AKAZE-LATCH	3.62	5.23	8.77	3.23	5.24

4 结 语

针对 KAZE/AKAZE 算法匹配鲁棒性较差、匹配速度较慢等问题,本文提出一种三元组描述符与 KAZE/AKAZE 结合的算法。首先利用 AOS 算法或者 FED 算法解非线性方程搭建金字塔;然后借用海森矩阵确定特征点的位置;最后根据特征点所在尺度选择相应的采样域建立三元组描述符,若是像素块非整数借助双

线性插值计算。实验结果表明:AKAZE-LATCH 算法比原 AKAZE 算法匹配正确率提升 10%,运行速度提升 7%;KAZE-LATCH 算法比原 KAZE 算法匹配正确率提高 15%,匹配速度仅为 KAZE 算法的 75%,可广泛应用于对匹配速度和精度要求较高的场景。

参 考 文 献

- [1] Lowe D G. Distinctive image features from scale-invariant keypoints [J]. *International Journal of Computer Vision*, 2004, 60(2): 91-110.
- [2] Bay H, Ess A, Tuytelaars T, et al. SURF: speeded up robust features [J]. *Computer Vision and Image Understanding*, 2008, 110(3): 346-359.
- [3] Morel J M, Yu G. ASIFT: A New Framework for Fully Affine Invariant Image Comparison [J]. *Siam Journal on Imaging Sciences*, 2010, 2(2): 438-469.
- [4] Codruta O A, Cosmin A, Philippe B. Decolorizing images for robust matching [J]. *International Conference on Image Processing*, 2010, 9(2): 26-29.
- [5] Leutenegger S, Chli M, Siegwart R. BRISK: binary robust invariant scalable keypoints [C]//*Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*. Barcelona, Spain: IEEE, 2011: 2548-2555.
- [6] Rublr E, Rabaud V, Konolige K, et al. ORB: an efficient alternative to SIFT or SURF [C]//*Proceeding of International Conference on Computer Vision (ICCV)*, Barcelona, Spain: IEEE 2011: 2564-2571.
- [7] Alahi A, Ortiz R, Vanderghenst P. FREAK: Fast retina keypoint [C]//*Computer Vision and Pattern Recognition*. Providence USA: IEEE, 2011: 510-517.
- [8] Alcantarilla P F, Nuevo J, Bartoli A. Fast explicit diffusion for accelerated features in nonlinear scale spaces [C]//*Proceedings of British Machine Vision Conference*. Berlin, Germany: Springer, 2013: 131-142.
- [9] Grewenig S, Weickert J, Bruhn A. From box filtering to fast explicit diffusion [C]//*Proceedings of the 32nd DAGM conference on Pattern recognition*. Springer-Verlag, 2010: 533-542.
- [10] Levi G, Hassner T. LATCH: Learned arrangements of three patch codes [C]//*IEEE Winter Conference on Applications of Computer Vision*. IEEE Computer Society, 2016: 1-9.
- [11] Ouyang P, Yin S, Liu L, et al. A fast extreme illumination robust feature in affine space [C]//*Proceedings of the 2014 22nd International Conference on Pattern Recognition*. IEEE, 2014: 2365-2370.
- [12] Weickert J, Romeny B M T H, Viergever M A. Efficient and reliable schemes for nonlinear diffusion filtering [J]. *IEEE Trans Image Process*, 1998, 7(3): 398-410.
- [13] Lenc K, Gulshan V, Vedaldi A. VLBenchmarks [OL]. 2018. <http://www.vlfeat.org/benchmarks/>.
- [14] Yang X, Cheng K T. LDB: An ultra-fast feature for scalable Augmented Reality on mobile devices [C]//*2012 IEEE International Symposium on Mixed and Augmented Reality (ISMAR)*. IEEE Computer Society, 2012.
- [15] Yang X, Cheng K T. Local difference binary for ultrafast and distinctive feature description [J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2014, 36(1): 188-194.
- [16] Calonder M, Lepetit V, Strecha C, et al. BRIEF: computing a local binary descriptor very fast [J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2012, 34(7): 1281-1298.
- [17] Revaud J, Weinzaepfel P, Harchaoui Z, et al. EpicFlow: edge-preserving interpolation of correspondences for optical flow [C]//*2015 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. IEEE, 2015: 1164-1172.

(上接第 193 页)

- [3] Michielan L, Terfloth L, Gasteiger J, et al. Comparison of multilabel and single-label classification applied to the prediction of the isoform specificity of cytochrome P450 substrates [J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2009, 49(11): 2588-2605.
- [4] Byvatov E, Baringhaus K, Schneider G, et al. A virtual screening filter for identification of cytochrome P450 2C9 (CYP2C9) inhibitors [J]. *QSAR & Combinatorial Science*, 2007, 26(5): 618-628.
- [5] Cheng F, Yu Y, Shen J, et al. Classification of cytochrome P450 inhibitors and noninhibitors using combined classifiers [J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2011, 51(5): 996-1011.
- [6] 李兰婷, 李燕, 王永华, 等. 基于分子参数的 CYP2C9 抑制剂的预测模型 [J]. *计算机与应用化学*, 2007, 24(7): 939-943.
- [7] Novotarskyi S, Sushko I, Körner R, et al. A comparison of different QSAR approaches to modeling CYP450 1A2 inhibition [J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2011, 51(6): 1271-1280.
- [8] 闵建亮. 基于 2D 分子指纹和非平衡数据集的药物与受体交互作用预测研究 [D]. 景德镇: 景德镇陶瓷大学, 2014.
- [9] Yap C W. PaDEL-descriptor: an open source software to calculate molecular descriptors and fingerprints [J]. *Journal of Computational Chemistry*, 2011, 32(7): 1466-1474.
- [10] 晁丽. 细胞色素 P450 抑制剂虚拟筛选与分子对接 [D]. 重庆: 重庆大学, 2014.
- [11] Hinton G E, Salakhutdinov R R. Reducing the dimensionality of data with neural networks [J]. *Science*, 2006, 313(5786): 504-507.
- [12] Hinton G E, Sejnowski T J. Learning and relearning in Boltzmann machines [C]//*Parallel Distributed Processing: Explorations in the microstructure of Cognition*. MIT Press, 1986: 282-317.