孪生支持向量机综述

安悦瑄1 丁世飞1,2 胡继普1

(中国矿业大学计算机科学与技术学院 江苏 徐州 221116)¹ (中国科学院计算技术研究所智能信息处理重点实验室 北京 100190)²

摘 要 孪生支持向量机(Twin Support Vector Machine, TWSVM)是在支持向量机(Support Vector Machine, SVM)的基础上发展而来的一种新的机器学习方法。作为一种二分类的分类器,其基本思想为寻找两个超平面,使得每一个分类面靠近本类样本点而远离另一类样本点。作为一种新兴的机器学习方法,孪生支持向量机自提出以来便引起了国内外学者的广泛关注,已经成为机器学习领域的研究热点。对孪生支持向量机的最新研究进展进行综述,首先介绍了孪生支持向量机的基本概念与基本模型;然后对近几年来新型的孪生支持向量机模型与研究进展进行了总结,并对其代表算法进行了优缺点分析和实验比较;最后对将来的研究工作进行了展望。

关键词 支持向量机,孪生支持向量机,优化问题,最小二乘孪生支持向量机,多分类

中图法分类号 TP181

chine, Multi-class classification

文献标识码 A

DOI 10, 11896/j. issn. 1002-137X, 2018, 11, 003

Twin Support Vector Machine: A Review

AN Yue-xuan¹ DING Shi-fei^{1,2} HU Ji-pu¹

(School of Computer Science and Technology, China University of Mining and Technology, Xuzhou, Jiangsu 221116, China)¹
(Key Laboratory of Intelligent Information Processing, Institute of Computing Technology, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)²

Abstract Twin support vector machine (TWSVM) is a useful extension of the traditional support vector machine (SVM). For the binary classification problem, the basic idea of TWSVM is to seek two nonparallel hyperplanes such that each hyperplane is closer to one and is at least one distance from the other. As an emerging machine learning method, TWSVM has attracted the attention of scholars and become a hotspot in machine learning. This paper reviewed the development of TWSVM. At first, this paper analyzed the basic concept of the twin support vector machine, summarized the models and research process of novel algorithms of TWSVM in the last several years. Then, it analyzed the advantages and disadvantages of them and performed experiments on them. At last, it prospected the research work of TWSVM.

Keywords Support vector machine, Twin support vector machine, Optimization, Least squares twin support vector machine.

1 引言

支持向量机[1]是一种基于统计学习理论和最优化理论的机器学习方法[2],由 Vapnik 等最先提出。SVM 在解决小样本、非线性及高维模式识别问题时表现出了许多特有的优势。它的学习策略是使分离超平面的几何间隔最大化,实际上就是求解一个凸二次规划问题(Quadratic Programming Problem,QPP)。通过引入核函数,可以将非线性分类问题转化成某个高维空间中的线性分类问题。通过在高维空间中学习线性支持向量机,在一定程度上克服了"维数灾难"[3]的问题。

支持向量机被提出后,其因优越的性能而受到广泛的关注。Mangasarian 等提出一种用于求解两个非平行平面的二

次规划问题的基于广泛特征值的近似支持向量机(Generalized Eigenvalue Proximal Support Vector Machine, GEPS-VM)^[4],其具有计算速度快、推广能力强的特点,并被广泛用于研究领域中。

受此启发, Jayadeva 等提出了孪生支持向量机 (Twin Support Vector Machines, TWSVM) [5]。 TWSVM 的目的是为每一类样本构造一个超平面,使得每个超平面离本类的样本点尽可能近而离另一类的样本点尽可能远。 TWSVM 与经典的支持向量机在形式上相类似,但它把一个大的分类问题转换成求解两个小规模的分类问题使得每个二次规划问题的约束条件数目变为原来的 1/2, 从而使训练时间缩减到SVM 的 1/4 [6]。该算法提高了 SVM 的计算性能和泛化能

到稿日期: 2017-12-29 返修日期: 2018-03-18 本文受国家自然科学基金(61672522, 61379101), 国家重点基础研究发展计划 (2013CB329502)资助。

安悦瑄(1993一),女,硕士生,主要研究方向为支持向量机和机器学习;**丁世飞**(1963一),男,教授,博士生导师,CCF 杰出会员,主要研究方向为智能信息处理、人工智能与模式识别、机器学习与数据挖掘、粗糙集与软计算、粒度计算等,E-mail:dingsf@cumt.edu.cn(通信作者);胡继普(1964一),男,高级工程师,主要研究方向为机器学习、数据挖掘等。

力,迅速成为机器学习领域的研究热点,并被广泛应用于数据挖掘中。

目前,TWSVM的研究已经取得了比较丰富的成果。但是,针对TWSVM的相关综述性研究不多,已有的综述性工作没有给出全面的总结和分析,并且时间久远。Tomar等「针对2007-2014年的研究内容进行综述,但是缺乏时效性,未能包含最近的研究内容(如结合群智能算法的TWSVM等)。Tian等「以对理论方法进行综述,但是因为类别过多,缺乏完整的体系,并且未对各种改进算法进行对比。对TWSVM综述性研究增加最新的内容并赋予其新的活力,是研究者的使命,也是本文研究的主要内容。文中包含TWSVM的最新研究进展与工作,并对孪生支持向量机的改进算法进行分类,对各个典型算法进行比较,以期为后续TWSVM的研究工作给予支持。

本文第 2 节介绍孪生支持向量机的基本概念;第 3 节对孪生支持向量机的优化算法进行剖析;第 4 节选择几种有代表性的算法进行对比实验;最后对孪生支持向量机的不足之处进行分析,并对其研究进行展望。

2 TWSVM 的基本理论

本节介绍 TWSVM 的数学模型。给定的特征空间 R^n 中有 m 个训练数据样本,其中每个样本有 n 个属性,训练数据集可以分为两类,分别叫做正类和负类。其中,正类有 m_1 个样本,负类有 m_2 个样本,分别用矩阵 $A(m_1 \times n)$ 和矩阵 $B(m_2 \times n)$ 来表示。

2.1 线性孪生支持向量机

如图 1 所示,利用线性孪生支持向量机构造两个二次规划问题。

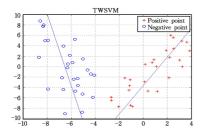


图 1 线性孪生支持向量机的示例 Fig. 1 Sample of linear TWSVM

TWSVM 的目标就是求解以下两个非平行的超平面:

$$f_1(x): \mathbf{w}_1^{\mathsf{T}} x + b_1 = 0, f_2(x): \mathbf{w}_2^{\mathsf{T}} x + b_2 = 0$$
 (1)

线性 TWSVM 的原始问题可以通过求解以下一对二次规划问题来得到:

(TWSVM1)
$$\min_{w_1,b_1,\xi} \frac{1}{2} \| Aw_1 + e_1b_1 \|^2 + c_1e_2^{\mathsf{T}}\xi$$

s. t. $-(Bw_1 + e_2b_1) + \xi \geqslant e_2, \xi \geqslant 0$

(TWSVM2)
$$\min_{w_2, b_2, \eta} \frac{1}{2} \| Bw_2 + e_2 b_2 \|^2 + c_2 e_1^{\mathsf{T}} \eta$$
 (3)

s. t.
$$(Aw_2 + e_1b_2) + \eta \geqslant e_1, \eta \geqslant 0$$

其中, c_1 , c_2 >0 是两个惩罚参数, e_1 和 e_2 是合适维度的单位列向量, ξ 和 η 是松弛向量。

分别为式(2)、式(3)构建拉格朗日函数,以 TWSVM1 为

例,引入拉格朗日因子 $\alpha \ge 0$, $\beta \ge 0$, 定义拉格朗日函数为:

$$L(w_1, b_1, \xi, \alpha, \beta) = \frac{1}{2} \|Aw_1 + e_1b_1\|^2 + c_1e_2^{\mathsf{T}}\xi + \alpha^{\mathsf{T}}((Bw_1 + e_2b_1) - \xi + e_2) - \beta^{\mathsf{T}}\xi$$
(4)

利用 KKT 条件得到原始最优化问题的解,继而求得分离超平面。同理可以求得 TWSVM2。由此,每一类都对应一个超平面,而样本点 x 所在的类则由式(5)来决定:

$$\begin{aligned} & \textit{Class } i = \min | x^{\mathsf{T}} w_i + b_i | \\ & \texttt{其中,} | \bullet | \texttt{是点} \ x \ \texttt{到超平面} \ f_i(x) : w_i^{\mathsf{T}} x + b_i = 0 \ \texttt{的垂直距离,} \end{aligned}$$

其中 i = +1, -1。

2.2 非线性孪生支持向量机

在非线性的情况下,也可以使用孪生支持向量机对数据进行分类。通过引入核函数,可以把数据样本从低维空间映射到高维的特征空间。式(6)和式(7)给出了非线性孪生支持向量机的原始问题。

(TWSVM1)
$$\min_{w_1, \delta_1, \xi} \frac{1}{2} \| K(A, C^T) w_1 + e_1 b_1 \|^2 + c_1 e_2^T \xi$$

s. t. $-(K(B, C^T) w_1 + e_2 b_1) + \xi \geqslant e_2, \xi \geqslant 0$ (6)

(TWSVM2)
$$\min_{w_2, b_2, \eta} \frac{1}{2} \| K(B, C^T) w_2 + e_2 b_2 \|^2 + c_2 e_1^T \eta$$

s. t.
$$(K(A, C^T)w_2 + e_1b_2) + \eta \geqslant e_1, \eta \geqslant 0$$
 (7)

其中, $C = [A \ B]^{\mathsf{T}}$,核函数被表示为 K。由此,输入空间的非线性问题通过核函数转化成了高维空间的线性问题。两个超平面表示为:

$$f_1(x): K(x^T, C^T)w_1 + b_1 = 0$$
 (8)

$$f_2(x): K(x^T, C^T)w_2 + b_2 = 0$$
 (9)

以 TWSVM1 为例,式(6)对应的拉格朗日函数为:

$$L(w_{1}, b_{1}, \xi, \alpha, \beta) = \frac{1}{2} \| K(A, C^{T}) w_{1} + e_{1} b_{1} \|^{2} + c_{1} e_{2}^{T} \xi + \alpha^{T} ((K(B, C^{T}) w_{1} + e_{2} b_{1}) - \xi + e_{2}) - \beta^{T} \xi$$
(10)

用与线性孪生支持向量机相同的计算策略可以求解非线性孪生支持向量机的分离超平面,其分类决策函数为:

$$Class\ i = \min |K(x^{\mathsf{T}}, C^{\mathsf{T}})w_i + b_i|$$
其中, $i = +1, -1$ 。
$$(11)$$

3 TWSVM 的研究进展

TWSVM 把原始数据划分为两个较小的数据集进行训练,相比于传统的支持向量机,具有训练速度快、分类能力强等优点。为进一步提高其性能,学者们在经典 TWSVM 的基础上提出了许多优化算法。

3.1 最小二乘法孪生支持向量机

2009年,Kumar等提出了最小二乘孪生支持向量机 (Least Squares Twin Support Vector Machine,LSTSVM) [9]。最小二乘孪生支持向量机把近似支持向量机 (Proximal SVM,PSVM) [10]的理念引入到孪生支持向量机的原始问题上,只需要求解两个线性等式即可得到结果,而不用求解两个带约束的二次规划问题,因此提高了求解速度。对于非线性分类情况,LSTSVM充分利用核函数,把原始空间的非线性问题转化为高维空间的线性问题。相比于原始 TWSVM,LSTSVM有着更快的训练速度;相比于 PSVM,LSTSVM不

需要外部优化,并且具有更好的泛化性能。

LSTSVM 的基本数学模型为: 在给定的特征空间中有 m个训练数据样本,其中每个样本有 n 个属性,训练数据集可以分为两类,分别叫做正类和负类。其中,正类有 m_1 个样本,负类有 m_2 个样本,分别用矩阵 $A(m_1 \times n)$ 和矩阵 $B(m_2 \times n)$ 来表示。

LSTSVM 的原始问题为:

(LSTSVM1)
$$\min_{w_1,b_1,\xi} \frac{1}{2} \| Aw_1 + e_1b_1 \|^2 + \frac{c_1}{2} \xi^T \xi$$
 (12)

s. t.
$$-(Bw_1+e_2b_1)+\xi=e_2$$

(LSTSVM2)
$$\min_{w_2, b_2, \eta} \frac{1}{2} \| Bw_2 + e_2 b_2 \|^2 + \frac{c_2}{2} \eta^{\mathsf{T}} \eta$$
 (13)

s. t.
$$(Aw_2 + e_1b_2) + \eta = e_1$$

其中, c_1 , c_2 >0 是两个惩罚参数, e_1 和 e_2 是合适维度的单位列向量, ξ 和 η 是松弛向量。

其分类决策函数为:

针对原始 LSTSVM,许多专家学者提出了不同的改进方法。为了解决固定的惩罚量对于不同的数据不具有适应性的问题,Zhang 等于 2014 年提出了具有自适应范数的稀疏最小二乘孪生支持向量机 (lp norm Least Square Twin Support Vector Machine,lpLSTSVM) [11]。该算法用 lp-范数表示一个自适应的学习过程,其中 p(0 被视为一个可以调节的参数,可以被数据自动进行选择。通过调整参数 <math>p,lpLSTSVM 不仅可以选择相对应的特征,而且可以提高分类精度。

为了解决 LSTSVM 中只满足经验风险最小化以及矩阵在公式中经常是半正定的问题, Mohammad 等提出了一种鲁棒的基于能量模型的孪生支持向量机(Robust Energy-based Least Squares Twin Support Vector Machine, RELS-TSVM)算法^[12]。RELS-TSVM利用能量模型来解决样本数据不平衡的问题,并利用正定矩阵最大化分类间隔,克服了异常值和噪声的影响。

Xu 等把数据的先验结构信息应用到 LSTSVM 中,构造了结构最小二乘支持向量机(Structural Least Square Twin Support Vector Machine, S-LSTSVM)。由于模型中包含了数据分布的信息,S-LSTSVM 有着很好的泛化性能,并具有LSTSVM 的时间消耗短的优势^[13]。

3.2 加权孪生支持向量机

为了缓解 TWSVM 不能利用同一类中任意两个数据点之间的相似信息的问题,Ye 等提出了基于局部信息的加权孪生支持向量机 [14] (Weighted Twin Support Vector Machines with Local Information,WLTSVM)。 WLTSVM 受谱图思想的启发,为每个超平面建造两个谱图。一个是获取类内信息的近邻图 G_d 。对于正类的超平面来说, G_s 的权值矩阵可以表达为:

$$W_{s,ij} = \begin{cases} 1, & \text{if } x_i \text{ is } k\text{-nearest neighbors of } x_j \\ & \text{or } x_j \text{ is } k\text{-nearest neighbors of } x_i \end{cases}$$
 (15)

其中, x_i 和 x_j 为给定的任意 2 个样本,正类内任意样本 x_i 在 类内近邻图生成的权重为 $d_i = \sum_{j=1}^{m_i} W_{s,ij}$ 。显然, d_i 反映了样本 x_i 属于第 1 类样本的程度,即 d_i 值越大, x_i 越属于此类。

类间信息的 G_d 的权值矩阵可以表达为:

$$W_{d,i} = \begin{cases} 1, & \text{if } x_t \text{ is } k\text{-nearest neighbors of } x_i \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$
 (16)

其中, x_i 为任意负类样本, x_i 为任意正类样本。为负类中的每一个样本定义权重:

$$f_{l} = \begin{cases} 1, & \exists i, W_{d,il} \neq 0 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$
 (17)

由此发现,负类中 f_i =1 的样本是离正类样本比较近的边界点。

WLTSVM 正类的超平面优化函数为:

(WLTSVM1)
$$\min \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m_1} d_i (w_1^{\mathsf{T}} x_i^1 + b_1)^2 + c_1 \sum_{l=1}^{m_2} \xi_l$$

s. t. $-f_l (w_1^{\mathsf{T}} x_i^2 + b_1) + \xi_l \geqslant f_l, \xi_l \geqslant 0$ (18)

其中,
$$d_i$$
是依据类内近邻图生成的第 i 个样本的权重, $c_1>0$

其中, d_i 是依据类内近邻图生成的第 i 个样本的权重, c_1 > 0 是惩罚参数, e_1 和 ξ 是松弛向量。

其分类决策函数为:

2015 年,Rezvani-Khorashadizadeh 等提出了加权结构化孪生支持向量机(Weighted Structural Twin Support Vector Machine,WS-TWSVM)^[15]。该算法使用结构化信息的加权总和来充分获得类的分布信息,从而降低数据结构中噪声的影响。为了提高分类器的计算效率,并将分类器引入到多分类中,Yi 等提出了基于 K 近邻的加权多分类孪生支持向量机(K-nearnest Neighbor-based Weighted Multi-class Twin Support Vector Machine,KWMTWSVM)^[16],把权值矩阵 W 引入目标函数中来探索类内局部信息。同时,引入两个权值向量到约束条件中来寻求类间信息,并利用此信息去除冗余。

3.3 投影孪生支持向量机

2011年,Chen等提出了投影孪生支持向量机(Projection Twin Support Vector Machine,PTSVM)^[17],其思想是寻找两个投影方向,其中每一个类对应一个投影方向,通过这种方式,使得一个类的投影样本与另一个类的投影样本在各自的子空间中能够很好地分离。同时,为了进一步提高性能,该算法应用递归的方式为每一类产生多个投影轴,并且通过主成分分析将原空间的数据转到低维空间中,克服了奇异性的问题。PTSVM超平面的优化函数为:

(PTSVM1)
$$\min_{w_1, \xi} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m_1} (w_1^T x_i + w_1^T \frac{1}{m_1} \sum_{p=1}^{m_1} x_p)^2 + c_1 \sum_{j=1}^{m_2} \xi_j$$

s. t.
$$w_1^T x_j - w_1^T \frac{1}{m_1} \sum_{p=1}^{m_1} x_p + \xi_j \geqslant 1, \xi_j \geqslant 0$$
 (20)

(PTSVM2)
$$\min_{w_1, \xi} \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{m_2} (w_2^{\mathsf{T}} x_j + w_2^{\mathsf{T}} \frac{1}{m_2} \sum_{q=1}^{m_2} x_q)^2 + c_2 \sum_{i=1}^{m_1} \xi_i$$

s. t.
$$w_2^T x_i - w_2^T \frac{1}{m_1} \sum_{r=1}^{m_2} x_q + \xi_i \geqslant 1, \xi_i \geqslant 0$$
 (21)

其中 $,c_1,c_2>0$ 是两个惩罚参数 $,\xi_i$ 和 ξ_i 是非负松弛变量。

通过对偶方法可以求解投影方向 $w_1, w_2,$ 其分类决策函数为:

Class
$$i = \min |w_i^T x + w_i^T \frac{1}{m_i} \sum_{k=1}^{m_i} x_k|$$
 (22)

其中,i=+1,-1。

2012年,Shao 等在原始 PTSVM 的基础上通过把正则化 参数加入到 PTSVM,并利用逐次超松弛技术求解优化问题, 用遗传算法进行参数选择,提出了结合正则化项的投影孪生 支持向量机 (Projection Twin Support Vector Machine with Regularization Term, RPTSVM)[18],该算法避免了奇异性的 问题,提高了泛化性能。2014年,Ding 等将递归方法用于 LSPTSVM,运用非线性核提出了用于求解非线性问题的递 归最小二乘法投影孪生支持向量机(Recursive Least Squares Projection Twin Support Vector Machines for Nonlinear Classification, NLSPTSVM)[19]。为了提升 TWSVM 的泛化性 能,解决 TWSVM 在建立目标函数时忽略类别之间差异的问 题,Xie等[20]于 2017年提出了一种新型的投影孪生支持向量 机(Improved Projection Twin SVM, IPTSVM)。IPTSVM通 过求解一个单独的二次规划问题来得到投影方向,并用递归 算法为每个类寻找多个投影方向;同时,采用有效的裁剪对偶 坐标下降模型解决了对偶问题。Yan 等把投影孪生支持向量 机应用于特征选择方法中,提出了基于投影孪生支持向量机 的特征选择方法(Feature Selection Based on Projection Twin Support Vector Machine, FPTSVM)[21]。Gu 等[22]用 L1 范数 来修正损失函数,并把正则化项加入投影孪生支持向量机中, 从而提高算法的鲁棒性。

3.4 多分类孪生支持向量机

最初,人们利用 TWSVM 来解决两类分类问题。后来, 它被有效地推广到多分类问题中。对于多分类问题,"一对 多"(One-Versus-All,OVA)孪生支持向量机是最早把二分类 孪生支持向量机应用于多分类的方法,该方法为每个类构造 一个超平面,每个超平面都对应一个二次规划问题[23]。对于 每一个二次规划问题,该方法把其中一类当成正类而把剩下 的类当作负类来进行求解,但容易导致数据的不平衡问题。 针对这个问题,Tomar等[24]通过在损失函数中采用适当的权 重设置,提出了加权多分类最小二乘孪生支持向量机[25] (Weighted Multi-class Least Squares Twin Support Vector Machine, WMLSTSVM)。此算法在样本数据少的类别中添 加较大的权值,而在样本数据多的类别中赋予较小的权值,这 在一定程度上减少了类与类之间数据不平衡造成的性能损 失。同时,Chen等把多乘支持向量机和最小二乘孪生支持向 量机相结合,提出了多生最小二乘孪生支持向量机(Multiple Birth Least Squares Support Vector Machine, MBLSSVM). Khemchandani 等[26] 结合拉普拉斯孪生支持向量机和决策树 孪生支持向量机,提出了基于树结构的多分类拉普拉斯孪生 支持向量机,从而获取了用于半监督多分类的分类器,并把此 方法用于文本图像检索中。"一对一"(One-Versus-One, OVO)策略分类方法最早是由 Knerr 为实现多分类 SVM 而

提出的。该算法是在任意两类样本间构建一个二分类的孪生 支持向量机子分类器,因此每个子分类器只需要用到训练样 本中的两类数据,训练样本相对平衡,所需的训练时间更少。 随后,Tomar等使用等式约束来代替不等式约束,提出了"一 对一"多分类最小二乘孪生支持向量机(One Versus One Multi Class Least Squares Twin Support Vector Machine, OVO MLSTSVM)。为了进一步提高训练速度,Ding等[27]受 粒度计算的启发,将数据分为多个粒子,并建立起一套混合粒 度的子分类器,提出了基于信息粒的加权线性损失多生支持 向量机(Weighted Linear loss Multiple birth Support Vector Machine based on information granulation, WLMSVM). Gu 等提出的 DAG TWSVM^[28]把图论中的有向无环图的思想融 入到多分类 TWSVM 中,与 OVO TWSVM 相比,其分类所需 要调用的子分类器的个数明显减少,从而提高了分类的速度。 然而,DAG TWSVM 存在"误差累积"的现象,即如果有一处 结点发生误判,此错误就会从上向下传递并放大。针对这一 缺点,Chen等[29]提出了一种类内类间平均距离度量和非重 复序列数重排的方法——最优有向无环图孪生支持向量机 (Optimal Directed Acyclic Graph Multiclass Twin Support Vector Machine, ODAG TWSVM), 以减少 DAG 结构引起的 累积误差。Zhang 等[30] 将马氏距离测度作为类的可分性准 则来构造最优 DAG 结构,并用一种改进的蛙跳模型选择算 法进行参数选择,提出了基于优化有向无环图和蛙跳算法的 多分类最小二乘马氏距离孪生支持向量机(multi-class LST-MSVM based on optimal Directed Acyclic Graph and shuffled frog leaping algorithm, DAG-LSTMSVM)。为了解决 OVO TWSVM中当前样本不属于分类器对应的两个分类样本中 的任意一类而造成分类器无意义的情况,Xu等[31]利用"一对 一对多余"的思想,即将样本分为正类、负类和既不属于正类 又不属于负类的其余类,提出了一种新型的多分类孪生支持 向量回归机(Twin KSVC)。

3.5 基于智能算法的孪生支持向量机

TWSVM 虽然分类高效,但需要进行参数调整,而调整参数到最佳值这一过程非常困难。智能优化算法一般是解决最优化问题,近几年受到许多专家学者的关注,并被广泛用于寻找最优解、调节参数的问题中^[32]。2016年,Javad等把模拟退火算法应用到 LSTSVM,提出了模拟退火最小二乘孪生支持向量机(Simulated Annealing Least Squares Twin Support Vector Machine,SA-LSTSVM)^[33]。2016年,Ding等提出了基于果蝇优化算法的孪生支持向量机(Twin Support Vector Machines based on Fruit fly Optimization Algorithm,FOATWSVM)^[34]。Zhang等针对多分类算法中没有考虑样本隐含的统计信息的问题,提出了基于马氏距离的孪生多分类算法「^{35]},使得算法的泛化能力得到提升。

2017 年,Ding 等提出了基于萤火虫群优化算法的小波孪生支持向量机(Wavelet Twin Support Vector Machine based on Glowworm Swarm Optimization, GSO-WTWSVM)^[36]。GSO-WTWSVM在训练过程之前自动确定参数,不仅使人们摆脱了设置参数的麻烦,而且还能够保证算法的性能。

3.6 其他孪生支持向量机的改进算法

2015 年,Xie 等^[37]把多视图学习引入 TWSVM 中,提出了多视图孪生支持向量机(Multi-view Twin Support Vector Machines,MvTSVM)。MvTSVM 通过从多个不同的特征集合中学习,利用不同的视图来提高泛化性能。实验结果表明,在真实数据集上,MvTSVM 的性能优于单一视图的 TWS-VM 的性能。

2016 年,Chen 等[38] 把 TWSVM 应用于多标记学习中,提出了多标记孪生支持向量机(Multi-Label Twin Spport Vector Machine,MLTSVM)。MLTSVM 通过构造多个非平行超平面来获取嵌入在数据中的信息,从而有力地促进了TWSVM 在多标记分类中的应用。此外,为了加快训练过程,MLTSVM 使用一个高效的逐次超松弛(SOR)算法来解决在求解过程中涉及的二次规划问题。Chen 等[39] 通过修改TWSVM的公式,把非平行超平面公式改为 $w_1^Tx+b_1=1$, $w_2^Tx+b_2=-1$,并通过最小化目标函数 $\|Aw_1+e_1b_1-e_1\|_2^2$ 和 $\|Bw_2+e_2b_2-e_2\|_2^2$ 来使两个超平面尽可能地远。其通过引入正则化项来克服过拟合和奇异性的问题,并利用 SOR 技术来加快训练过程。

2017年,学者们进一步提出了许多改进算法^[40-51]。Xu 等^[52]为进一步提高 TWSVM 的性能,提出了基于 Pinball 损失函数的孪生支持向量机 (TWSVM with the Pinball loss, Pin-TWSVM)。相比于 Hinge 损失函数,Pinball 损失函数通过对正确分类的数据添加一个很小的惩罚项来降低对噪声的敏感性,从而提高了算法的稳定性。Cao 等^[53]通过重采样技术,采用过采样和下采样来平衡训练数据,从而使得 TWSVM能够处理不平衡数据的分类问题。Wang 等^[54]提出了改进的粗糙间隔的 v 边界孪生支持向量机 (Improved rough margin based v-Twin Bounded Support Vector Machine,I rough v-TBSVM)。I rough v-TBSVM 可以根据样本所处的不同位置,分别给予不同的惩罚项,并通过引入正则化项来实现结构风险最小化,避免了矩阵的求逆运算,从而降低了计算复杂度,节省了运行时间。

4 多种 TWSVM 的比较与分析

本节对几种典型的 TWSVM 改进算法的优势与不足进行分析,并针对不同改进算法进行实验比较。

4.1 算法优缺点的分析

(1)原始 TWSVM 的优缺点分析

原始的 TWSVM 通过把一个大的二次规划问题转化为两个小规模的二次规划问题来进行求解,相较于传统 SVM,极大地提高了训练速度。它具有实现简单、便于理解的优点。但是,算法的运行效率和精确度仍有待进一步提高。

(2)LSTSVM 的优缺点分析

LSTSVM 通过修改 TWSVM 中的约束条件,把不等式的约束条件转化成等式约束条件,极大地加快了求解速度。但是,在存在噪声,尤其是噪声存在于边界区域的情况下,分类的准确度会受到影响。

(3)WLTSVM 的优缺点分析

WLSTVM 运用类内及类间近邻图的方法和类内样本之间的信息与类间样本的信息获取样本的权重,从而可以获取样本的局部几何结构,一定程度上提高了准确率。在对本类样本点对应的超平面进行优化时,约束条件只与离本类样本比较近的另一类边界点有关,即只用一小部分的另一类样本点进行约束,因此能够降低二次规划求解时的复杂度。但是,此种方式也有不利之处,如果存在噪声在边界点的情况,这些噪声就会影响计算的准确度,使得鲁棒性变低。

(4)PTSVM 的优缺点分析

PTSVM 根据选出的最佳投影轴进行投影,并且在优化目标函数中考虑样本集的类内散度与样本的全局信息。但是,考虑到样本多并且在训练之前需要计算矩阵的逆矩阵,当矩阵规模增大时,计算量会增加,并且有时会出现奇异矩阵的情况,此时往往会利用近似矩阵代替,从而导致解变得不稳定。

4.2 实验验证

本节选取各类孪生支持向量机中具有代表性的算法进行比较实验,并选用 UCI 机器学习数据库中几个常用的数据集¹¹来测试这些改进算法。为了保证实验的可靠性,本文选用十字交叉验证法,将数据随机分为 10 份,每次选取一份当作测试数据,其他 9 份当作训练数据。每个数据集都要进行10 次训练和测试。实验基于 Matlab 进行实现和运行,硬件配置为 2 GB 内存,CORE i3 处理器和 2.2 GHz 主频。表 1 给出了实验数据的详细信息。表 2 比较了不同 TWSVM 改进算法的分类正确率。表 3 比较了不同 TWSVM 训练所需的时间。其中,ACC表示对应算法的平均分类准确率,TWSVM为传统的孪生支持向量机,LSTVM 为最小二乘孪生支持向量机,WLTSVM 为加权损失孪生支持向量机,PTSVM 为投影孪生支持向量机。

表 1 数据集的详细信息

Table 1 Detailed description of UCI data sets

数据集	样本个数	样本维数
Australia	690	14
Sonar	208	60
Pima-Indian	768	8
Ionosphere	351	34
BUPA Liver	345	7
WPBC	198	34
Hepatitis	155	19
Heart-c	303	13

表 2 不同 TWSVM 改进算法的分类正确率比较

Table 2 Accuracy comparison of different TWSVMs

数据集 -	ACC/%			
	TWSVM	LSTSVM	WLTSVM	PTSVM
Australian	87.60	86.81	87.63	87.71
Sonar	78.15	77.12	80.09	79.03
Pima-Indian	77.60	76.23	77.28	76.92
BUPA Liver	69.15	68.69	67.91	68.25
WPBC	83.39	80.46	79.13	80.13
Hepatitis	80.59	78.56	81.68	79.20
Heart-c	83.46	84.11	84.82	83.87

¹⁾ http://archive.ics.uci.edu/ml/

表 3 不同 TWSVM 改进算法的训练时间比较 Table 3 Training time of different TWSVMs

数据集 -	Time/s			
	TWSVM	LSTSVM	WLTSVM	PTSVM
Australian	0.782	0.007	0.021	1.119
Sonar	0.075	0.001	0.005	0.317
Pima-Indian	0.382	0.004	0.009	0.666
BUPA Liver	0.077	0.003	0.009	0.160
WPBC	0.074	0.005	0.013	0.126
Hepatitis	0.097	0.006	0.011	0.146
Heart-c	0.095	0.003	0.007	0.142

实验结果表明,采用 Hinge 损失函数的 TWSVM 具有分类准确率高、泛化性能好的优点,但在训练过程中是通过求解两个二次规划问题实现的,效率并不高。在训练速度上进行了改进的算法在整体上优于传统的 TWSVM。其中,LSTS-VM 的训练速度最快,这是因为 LSTSVM 的解是通过求解线性方程组求得的;WLTSVM 运用类内类间近邻图的方法,能够考虑样本间的局部几何信息,其分类精确度整体优于传统的 TWSVM,但训练速度不如 LSTSVM;PTSVM 对于相对复杂的异或(XOR)问题具有更好的分类能力,但所需的训练时间较长。

结束语 本文针对孪支持向量机进行全面的剖析,对近几年来孪生支持向量机的研究进展进行了介绍和总结。孪生支持向量机相较于传统的支持向量机有着更快的计算速度。最小二乘孪生支持向量机将两个凸二次规划问题变为求解两个线性等式的问题,提高了算法的运行效率,并增加了算法的泛化性能。近年来,人们针对参数选择、结构风险最小化和多分类的情况提出了许多优化算法,但是其在现实中的应用仍然比较有限,将孪生向量机改进并应用到现实中仍需要广大学者的共同努力。孪生支持向量机仍需要在以下方面进行改进:

- (1)TWSVM在计算效率和鲁棒性上很难达到平衡,如 LSTSVM计算速度快,但是对噪声比较敏感,从而导致准确 率受到影响。这就启发我们根据实际情况选择模型。而怎样 消除噪声、减少噪声的影响,也需要人们进一步的研究。
- (2)在算法使用上,也可以探讨更好的方法,可以通过修改损失函数使得算法具有更好的性能。
- (3)孪生向量机在小数据集中表现出色,但在大数据集中的应用仍然面临许多挑战。
- (4)孪生向量机虽然已被广泛运用于多分类问题中,但仍存在着精度不足的缺点,多分类孪生向量机还有待完善和改进。
- (5)支持向量机在人脸识别、指纹识别、自然语言处理中有着广泛的应用,已经日趋成熟。然而孪生支持向量机的应用却很少,把孪生支持向量机推广到实际应用中,使之具有更大的使用价值,需要广大学者的共同努力。

参考文献

- [1] CORTES C, VAPNIK V. Support-vector networks[J]. Machine Learning, 1995, 20(3): 273-297.
- [2] VAPNIK V N. 统计学习理论的本质[M]. 张学工,译. 北京:清 华大学出版社,2000.

- [3] DING S F, QI B J, TAN H Y. An overview on theory and algorithm of support vector machines [J]. Journal of University of Electronic Science and Technology of China, 2011, 40(1): 2-10.
- [4] MANGASARIAN O L, WILD E W. Multisurface proximal support vector machine classification via generalized eigenvalues
 [J]. IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell., 2006, 28(1):
 69-74.
- [5] JAYADEVA, KHEMCHANDNI R, SURESH C. Twin support vector machines for pattern classification [J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2007, 29(5):905-910.
- [6] DING S F, HUA X P, YU J Z. An overview on nonparallel hyperplane support vector machine algorithms[J]. Neural Computing and Applications, 2014, 25(5): 975-982.
- [7] TOMAR D, AGARWAL S. Twin Support Vector Machine: A review from 2007 to 2014 [J]. Egyptian Informatics Journal, 2015,16(1):55-69.
- [8] TIAN Y, QI Z. Review on: Twin Support Vector Machines[J].
 Annals of Data Science, 2014, 1(2): 253-277.
- [9] KUMAR M A, GOPAL M. Least squares twin support vector machines for pattern classification[J]. Expert Systems with Applications, 2009, 36(4):7535-7543.
- [10] FUNG G, MANGASARIAN O L. Proximal support vector machine classifiers [C] // Proceedings of Seventh International Conference on Knowledge and Data Discovery, 2001:77-86.
- [11] ZHANG Z, ZHEN L, DENG N, et al. Sparse least square twin support vector machine with adaptive norm[J]. Applied Intelligence, 2014, 41(4):1097-1107.
- [12] TANVEER M,KHAN M A,HO S S.Robust energy-based least squares twin support vector machines[J]. Applied Intelligence, 2016, 45(1):174-186.
- [13] XU Y,PAN X,ZHOU Z,et al. Structural least square twin support vector machine for classification[J]. Applied Intelligence, 2015,42(3):527-536.
- [14] YE Q, ZHAO C, GAO S, et al. Weighted twin support vector machines with local information and its application [J]. Neural Networks the Official Journal of the International Neural Network Society, 2012, 35(11); 31-39.
- [15] REZVANI-KHORASHADIZADEH R,REZA M. WS-TWS-VM: Weighted Structural Twin Support Vector Machine by local and global information [C] // International Conference on Computer and Knowledge Engineering. 2015:170-175.
- [16] XU Y. K-nearest neighbor-based weighted multi-class twin support vector machine [M]. Elsevier Science Publishers B. V. 2016.
- [17] CHEN X, YANG J, YE Q, et al. Recursive projection twin support vector machine via within-class variance minimization [J]. Pattern Recognition, 2011, 44(10): 2643-2655.
- [18] SHAO Y H, WANG Z, CHEN W J, et al. A regularization for the projection twin support vector machine [J]. Knowledge-Based Systems, 2013, 37(2):203-210.
- [19] DING S F, HUA X P. Recursive least squares projection twin support vector machines for nonlinear classification[J]. Neurocomputing .2014.130(3):3-9.

- [20] XIE X. Improvement on projection twin support vector machine [J]. Neural Computing & Applications, 2017(5):1-17.
- [21] YAN A R, YE B Q, ZHANG C L, et al. A Feature Selection Method for Projection Twin Support Vector Machine[J]. Neural Processing Letters, 2017(3):1-18.
- [22] GU Z,ZHANG Z,SUN J. Robust Image Recognition by L1-norm Twin-Projection Support Vector Machine[J]. Neurocomputing, 2017, 223:1-11.
- [23] DING SF, ZHANG J, ZHANG X K, et al. Survey on Multi class Twin Support Vector Machines[J]. Journal of Software, 2018, 29(1):89-108. (in Chinese) 丁世飞,张健,张谢锴,等. 多分类孪生支持向量机研究进展[J]. 软件学报, 2018, 29(1):89-108.
- [24] TOMAR D, AGARWAL S. An effective Weighted Multi class Least Squares Twin Support Vector Machine for Imbalanced data classification[J]. International Journal of Computational Intelligence Systems, 2015, 8(4):761-778.
- [25] CHEN S G, WU X J. Multiple birth least squares support vector machine for multi-class classification[J]. International Journal of Machine Learning & Cybernetics, 2017, 8(6):1731-1742.
- [26] KHEMCHANDANI R,PAL A. Tree based multi-category Laplacian TWSVM for content based image retrieval[J]. International Journal of Machine Learning & Cybernetics, 2017, 8 (4):1197-1210.
- [27] DING S F,ZHANG X K,AN Y X,et al. Weighted Linear Loss Multiple Birth Support Vector Machine based on Information Granulation for Multi-class Classification[J]. Pattern Recognition, 2017, 67:32-46.
- [28] GU H B, NIU B, GAO Z X. A directed acyclic graph algorithm for multi-class classification based on twin support vector machine [J]. Journal of Information & Computational Science, 2014,11(18):6529-6536.
- [29] CHEN J.JI G R. Multi class LSTSVM classifier based on optimal directed acyclic graph [C] // International Conference on Computer and Automation Engineering, IEEE, 2010:100-104.
- [30] ZHANG X, DING S, SUN T. Multi-class LSTMSVM based on optimal directed acyclic graph and shuffled frog leaping algorithm[J]. International Journal of Machine Learning & Cybernetics, 2016, 7(2); 241-251.
- [31] XU Y T, GUO R, WANG L S. A twin multi class classification support vector machine[J]. Cognitive Computation, 2013, 5(4): 580-588.
- [32] PARASTALOOI N, AMIRI A, ALIHEYDARI P. Modified Twin Support Vector Regression [J]. Neurocomputing, 2016, 211(C):84-97.
- [33] SARTAKHTI J S, AFRABANDPEY H, SARAEE M. Simulated annealing least squares twin support vector machine (SALSTSVM) for pattern classification[J]. Soft Computing, 2017, 21(15):4361-4373.
- [34] DING SF, ZHANG XK, YUJZ. Twin support vector machines based on fruit fly optimization algorithm[J]. International Journal of Machine Learning and Cybernetics, 2016, 7(2):1-11.
- [35] ZHANG X K, DING S F. Mahalanobis Distance-based Twin

- Multi-class Classification Support Vector Machine[J]. Computer Science, 2016, 43(3): 49-53. (in Chinese)
- 张谢锴,丁世飞.基于马氏距离的孪生多分类支持向量机[J]. 计算机科学,2016,43(3),49-53.
- [36] DING S F, AN Y X, ZHANG X K, et al. Wavelet twin support vector machines based on glowworm swarm optimization [J]. Neurocomputing, 2017, 225(15):157-163.
- [37] XIE X, SUN S. Multi-view twin support vector machines[J]. Intelligent Data Analysis, 2015, 19(4):701-712.
- [38] CHEN W J.SHAO Y H, LI C N, et al. MLTSVM: A novel twin support vector machine to multi-label learning [J]. Pattern Recognition, 2016, 52:61-74.
- [39] CHEN S, WU X, ZHANG R. A Novel Twin Support Vector Machine for Binary Classification Problems [J]. Neural Processing Letters, 2016, 44(3):1-17.
- [40] HAO P Y. Pair-v-SVR: A Novel and Efficient Pairing nu-Support Vector Regression Algorithm[J]. IEEE Transactions on Neural Networks & Learning Systems, 2017, 28 (11): 2503-2510.
- [41] PENG X J, SHEN J D. A twin hyperspheres support vector machine with automatic variable weights for data classification[J]. Information Science, 2017, 417:216-235.
- [42] GUPTA D. Training primal K-nearest neighbor based weighted twin support vector regression via unconstrained convex minimization[J]. Applied Intelligence, 2017, 47(3):962-991.
- [43] GAO X,SUN Q,XU H. Multiple Instance Learning via Semisupervised Laplacian TSVM[J]. Neural Processing Letters, 2017,46(1):219-232.
- [44] TANVEER M. SHUBHAM K. A regularization on Lagrangian twin support vector regression[J]. International Journal of Machine Learning & Cybernetics, 2017, 8(3):807-821.
- [45] XU Y T. Maximum Margin of Twin Spheres Support Vector Machine for Imbalanced Data Classification[J]. IEEE Transactions on Cybernetics, 2017, 47(6):1540-1550.
- [46] SAIGAL P, KHANNA V. Divide and conquer approach for semi-supervised multi-category classification through localized kernel spectral clustering[J]. Neurocomputing, 2017, 238: 296-306.
- [47] LI J, CAO Y, WANG Y, et al. Online Learning Algorithms for Double-Weighted Least Squares Twin Bounded Support Vector Machines[J]. Neural Processing Letters, 2017, 45(1):319-339.
- [48] PENG X, KONG L, CHEN D. A structural information-based twin-hypersphere support vector machine classifier[J]. International Journal of Machine Learning & Cybernetics, 2017, 8(1): 295-308.
- [49] BALASUNDARAM S, GUPTA D, PRASAD S C. A new approach for training Lagrangian twin support vector machine via unconstrained convex minimization [J]. Applied Intelligence, 2017,46(1):124-134.
- [50] PAN X, YANG Z, XU Y, et al. Safe Screening Rules for Accelerating Twin Support Vector Machine Classification [J]. IEEE Transactions on Neural Networks & Learning Systems, 2018, 29(5):1876-1887.

- [51] HAN R J, CAO Q L. Fuzzy chance constrained least squares twin support vector machine for uncertain classification [J].

 Journal of Inteligent & Fuzzy Systems, 2017, 33(5):3041-3049.
- [52] XU Y T, YANG Z J, et al. A Novel Twin Support Vector Machine with Pinball Loss[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2017, 28(2): 359-370.

(上接第28页)

- [43] ZHOU R F,KAI H W. PowerTrust: a robust and scalable reputation system for trusted peer-to-peer computing [J]. IEEE Transaction on Parallel and Distributed Systems, 2007, 18(4): 460-473.
- [44] XIONG L.LIU L. PeerTrust; supporting reputation-based trust for peer-to-peer electronic communities [J]. IEEE Transactions on Knowledge Data Engineering, 2004, 16(7):843-857.
- [45] WANG Y, VASSILEVA J. Bayesian network trust model in peer-to-peer networks [C] // Moro G, ed. Proc. of the 2nd Int'l workshop on Agents and Peer-to-Peer Computing. Berlin: Springer Verlag, 2004; 23-34.
- [46] BETH T, BORCHERDING M, KLEIN B. Valuation of trust in open network[C]// European Symposium on Research in Security (ESORICS). Springer Verlag, 1994:3-18.
- [47] TIAN C Q, ZOU S H, TIAN H R, et al. A new trust model based on reputation and risk evaluation for P2P networks[J]. Journal of Electronics & Information Technology, 2007, 29(7): 1628-1632. (in Chinese) 田春岐,邹仕洪,田慧蓉,等.一种基于信誉和风险评价的分布式 P2P 信任模型[J]. 电子与信息学报, 2007, 29(7): 1628-1632.
- [48] MA X,GAN Z B,LU H W, et al. A method of predicting potential trust relationships in e-commerce [J]. Computer Science, 2014,12(41):138-142. (in Chinese)
 马霄,甘早斌,鲁宏伟,等. 电子商务中的一种潜在信任关系预测方法[J]. 计算机科学,2014,12(41):138-142.
- [49] YU B, SINGH M P. An evidential model of distributed reputation management [C] // Proceedings of the First International Joint Conference on Autonomous Agents and Multi-Agent Systems; Part 1. ACM, 2002; 294-301.
- [50] ZHANG S B, XU C X. Study on the trust evaluation approach based on cloud model[J]. Chinese Journal of Computers, 2013, 36(2):422-431.
- [51] GAN Z B, DING Q, LI K, et al. Reputation-based multi-dimensional trust algorithm [J]. Journal of Software, 2011, 22(10): 2401-2411. (in Chinese) 甘早斌, 丁倩, 李开, 等. 基于声誉的多维度信任计算算法[J]. 软件学报, 2011, 22(10): 2401-2411.
- [52] MA Y. Research on trust network discovery and trust fusion in online social networks [D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2014. (in Chinese)

 马尧. 在线社会网络的信任网络发现与信任融合研究[D]. 武汉:华中科技大学, 2014.

- [53] CAO L, SHEN H. Imbalanced data classification based on hybrid resampling and twin support vector machine[J]. Computer Science & Information Systems, 2017, 14(3):579-595.
- [54] WANG H, ZHOU Z. An improved rough margin-based twin bounded support vector machine [M]. Elsevier Science Publishers B. V., 2017;125-138.
- [53] AL-OUFI S, KIM H N, SADDIK A E. A group trust metric for identifying people of trust in online social networks[J]. Expert Systems with Applications, 2012, 39(18):13173-13181.
- [54] WANG G,GUI X L. Selection of trading nodes in social networks and calculation of trust relationship [J]. Journal of Computer, 2013, 36(2): 368-383. (in Chinese) 王刚,桂小林. 社会网络中交易节点的选取及其信任关系计算方法[J]. 计算机学报, 2013, 36(2): 368-383.
- [55] QIAO X Q, YANG C, LI X F, et al. A Method for Computing Trust Based on User Context in Social Networks [J]. Journal of Software, 2011, 34(12):2403-2412. (in Chinese) 乔秀全,杨春,李晓峰,等. 社交网络中一种基于用户上下文的信任度计算方法[J]. 软件学报, 2011, 34(12):2403-2412.
- [56] TIAN J F, WU L J. Multinomial subjective logic based extended trust propagation model [J]. Journal on Communications, 2013, 34(5):12-19.
- [57] LIU G, YANG Q, WANG H, et al. Assessment of multi-hop interpersonal trust in social networks by three-valued subjective logic[C]// Proceedings of the International Conference on Computer Communications, IEEE, 2014;1698-1706.
- [58] CERUTTI F, TONIOLO A, OREN N, et al. Subjective logic operators in trust assessment; an empirical study [J]. Information Systems Frontiers, 2015, 17(4):743-762.
- [59] XU J,ZHONG Y S,ZHU W Q. A Multidimensional Trust Transfer Model Based on Intuitionistic Fuzzy Theory[J]. Journal of Chinese Computer Systems, 2015, 36(12): 2714-2718. (in Chinese)
 - 徐军,钟元生,朱文强.一种基于直觉模糊理论的多维信任传递模型[J].小型微型计算机系统,2015,36(12):2714-2718.
- [60] ZHANG B,ZHANG H,LI M Z,et al. Trust Traversal: A trust link detection scheme in social network [J]. Computer Networks,2017,120:105-125.
- [61] CHEN T, ZHU Q, ZHOU M, et al. Trust-Based recommendation algorithm in social network[J]. Journal of Software, 2017, 28(3):721-731. (in Chinese) 陈婷,朱青,周梦,等. 社交网络环境下基于信任的推荐算法[J].

软件学报,2017,28(3):721-731.

- [62] WANG R Q, JIANG Y L, LI Y X, et al. A Collaborative Filtering Recommendation Algorithm Based on Multiple Social Trusts [J]. Journal of Computer Research and Development, 2016,53(6):1389-1399. (in Chinese) 王瑞琴,蒋云良,李一啸,等.一种基于多元社交信任的协同过滤
 - 王瑞琴,蒋云良,李一啸,等.一种基于多元社交信任的协同过证推荐算法[J].计算机研究与发展,2016,53(6):1389-1399.