

# 基于支持向量的单类分类方法综述

吴定海<sup>1</sup>, 张培林<sup>1</sup>, 任国全<sup>1</sup>, 陈 非<sup>2</sup>

(1. 军械工程学院火炮工程系, 石家庄 050003; 2. 武汉士官学校基础部, 武汉 430075)

**摘 要:** 研究基于支持向量机理论和单类分类思想的 2 种支持向量域数据描述模型, 即单分类支持向量机和支持向量描述模型, 分析 2 类模型之间的区别和联系以及参数的优化设置, 总结支持向量域单类分类方法存在的缺点以及目前对这 2 类支持向量描述模型研究的改进方向。

**关键词:** 单类分类; 支持向量; 数据描述; 模式识别

## Review of One-class Classification Method Based on Support Vector

WU Ding-hai<sup>1</sup>, ZHANG Pei-lin<sup>1</sup>, REN Guo-quan<sup>1</sup>, CHEN Fei<sup>2</sup>

(1. Department of Artillery Engineering, Ordnance Engineering College, Shijiazhuang 050003, China;

2. Foundation Department, Wuhan Ordnance Non-commission Officer School, Wuhan 430075, China)

**【Abstract】** Two one-class classification models, one-class support vector machine and support vector data description, which are based on support vector machine and one-class classification are introduced. The internal relationship and parameters optimization of the two models are also analysed, and the exists of disadvantages and improvements of the two one-class classifiers are summarized.

**【Key words】** one-class classification; support vector; data description; pattern recognition

DOI: 10.3969/j.issn.1000-3428.2011.05.063

### 1 概述

机器学习是数据处理、模式识别的一个重要内容,也是人工智能领域的研究热点。单类分类是模式识别的一个重要分支,是一类特殊的两类分类器,其训练样本可以只有一个类别的数据信息,根据所获得的目标数据估计其边界,做出正确的分类。实现单分类的方法之一是通过参数化或非参数化的方法估计目标数据的概率密度,然后通过设置阈值判别异常数据。常用的方法有基于 Parzen 窗的概率密度估计、各种聚类算法等。缺点是要求目标数据被很好地采样,具有足够的采样数据以及分布具有代表性。如果现实中目标数据仅有有限的采样点使得概率密度和分类阈值难以确定,数据反应得更为直接的是所处的区域而非密度信息。

基于支持向量机的理论和单分类的思想,具有训练、决策速度快、分类错误率低等优点,适合处理高维、有噪和有限样本的单类问题,成为单类分类器研究的热点。本文详细介绍了 2 种超球支持向量机分类器模型,分析了 2 类模型之间的联系,并总结了目前对这 2 类支持向量描述的研究及其工程应用的最新进展。

### 2 2 类超球支持向量分类器的算法及分析

#### 2.1 OC-SVM 模型

单类支持向量机(One-Class Support Vector Machine, OC-SVM)最先由文献[1]提出并构造,模型描述如下:设有数据样本  $\{x_i, i=1, 2, \dots, N\}$ , 通过核函数  $\phi$  映射到高维特征空间,使其具有更好的聚集性,在特征空间中求解一个最优超平面实现目标数据与坐标原点的最大分离,如图 1 所示。坐标原点被假设为唯一的一个异常样本,最优超平面与坐标原点最大距离为  $\rho/\|\omega\|$ , 并允许少部分样本在坐标原点与分界面之间,与分类超平面的距离为  $\xi_i/\|\omega\|$ 。其决策函数与两类支持向量机类似,为:

$$f(x) = \text{sign}((\omega \cdot \Phi(x)) - \rho) \quad (1)$$

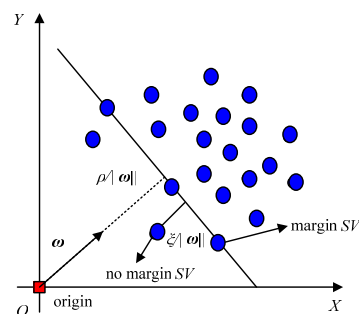


图 1 OC-SVM 分类器

支持向量的权重  $\omega$  和阈值  $\rho$ , 通过求解以下二次规划问题获得:

$$\begin{aligned} \min & \frac{1}{2} \|\omega\|^2 + \frac{1}{vN} \sum_{i=1}^N \xi_i - \rho \\ \text{s.t.} & (\omega \cdot \Phi(x_i)) \geq \rho - \xi_i \quad \xi_i \geq 0 \end{aligned} \quad (2)$$

需要特别指出的是在这里  $v \in (0, 1)$  用来控制支持向量在训练样本中所占的比重, 引入核函数, 将上述问题转化为对偶问题:

$$\begin{aligned} \min_{\alpha} & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \alpha_j k(x_i, x_j) \\ \text{s.t.} & 0 \leq \alpha_i \leq \frac{1}{vN} \quad \sum_{i=1}^N \alpha_i = 1 \end{aligned} \quad (3)$$

在 OC-SVM 中,  $\rho = \sum_{i=1}^N \alpha_i K(x_i, x_j)$  为确定的阈值, 与核

**基金项目:** 河北省自然科学基金资助项目(E20007001048)

**作者简介:** 吴定海(1981—), 男, 博士研究生, 主研方向: 模式识别, 人工智能; 张培林, 教授、博士、博士生导师; 任国全, 副教授、博士; 陈 非, 讲师

**收稿日期:** 2010-08-28 **E-mail:** wudh81@163.com

重向量  $\omega$  决定分离超平面。

## 2.2 SVDD 模型

文献[2]提出了支持向量数据描述方法,其基本思想是通过在映射到高维的特征空间中找出一个包围目标样本点的超球体,并通过最小化该超球体所包围的体积让目标样本点尽可能地包围在超球体中,而非目标样本点尽可能地排除在超球体中,从而达到两类之间划分的目的。

如图2所示,模型描述为:对于正常数据样本  $\{x | x_i \in R^d, i=1,2,\dots,N\}$ ,在映射的高维空间内,求出能够包含该数据样本的最小超球体的中心  $a$  和半径  $R$ ,问题转化为求以下优化问题:

$$\min_{R, \xi} R^2 + C \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (4)$$

$$\text{s.t. } \|\phi(x_i) - a\|^2 \leq R^2 + \xi_i$$

在模型中,  $\xi_i$  为松弛因子,当  $\xi_i > 0$  对应位于超球体外部的非目标类数据点。求得该超球体后,得判别函数:

$$f(x) = \text{sgn}(R^2 - \|\phi(x) - a\|^2) \quad (5)$$

通过解凸二次优化可得球心  $a$  和半径  $R$ ,求解所得大部分拉格朗日乘子的系数为零,而对应  $\alpha_i > 0$  的向量则为支持向量,超球体的半径为任何一边界支持向量到球心的距离。

$$\begin{cases} a = \sum_{i=1}^{N_m} \alpha_i K(x_i, x_i) \\ R^2 = K(x_m, x_m) - 2 \sum_{i=1}^{N_m} \alpha_i K(x_i, x_m) + \sum_{i=1}^{N_m} \sum_{j=1}^{N_m} \alpha_i \alpha_j K(x_i, x_j) \end{cases} \quad (6)$$

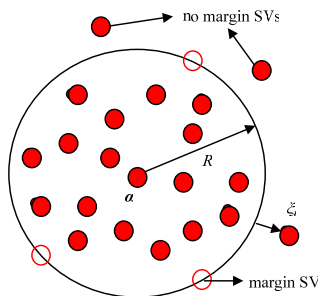


图2 SVDD 分类器

## 2.3 2种单类分类器的区别与联系

在 OC-SVM 模型中,式(2)优化问题等价于:

$$\max_{\omega, \rho, \xi} \rho - \frac{1}{\nu N} \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (7)$$

$$\text{s.t. } \omega \cdot x_i \geq \rho - \xi_i \quad \xi_i \geq 0 \quad \|\omega\| = 1$$

为了方便对比,在这里将 SVDD 描述转换成统一的标准,式(4)优化问题可表示为:

$$\max -R^2 - C \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (8)$$

$$\text{s.t. } 2(a' \cdot x_i') \geq 2 - R^2 - \xi_i$$

对比式(7)和式(8),只需令  $\omega = 2a'$ ,  $\rho = 2 - R^2$ ,  $\frac{1}{\nu N} = C'$ ,  $\xi_i = \xi_i'$ ,则可得以下优化问题:

$$\max -2 + \rho - \frac{1}{\nu N} \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (9)$$

$$\text{s.t. } (\omega \cdot x_i) \geq \rho - \xi_i \quad \xi_i \geq 0 \quad \|\omega\| = 2$$

通过以上的分析,建立了2种模型之间存在的联系,可见不同之处在于对  $\omega$  的标准化约束和误差函数,当对数据进行标准化处理后,2种模型能够取得一样的效果。文献[2]通过分析特别指出当采用高斯核函数时,2种模型对数据的描述效果相当,以图3进行分析。

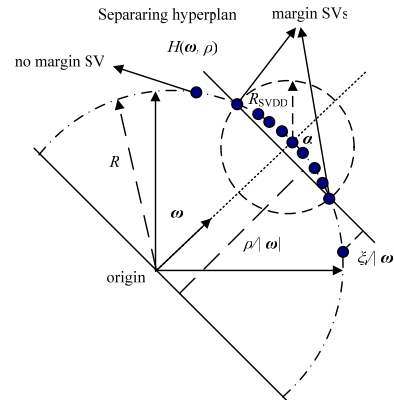


图3 基于高斯核函数的 OCSVM 和 SVDD

图3为采用高斯核函数时,SVDD与OCSVM在数据描述方式的联系<sup>[3]</sup>。对于高斯核函数:

$$K(x_i, x_j) = \exp(-\|x_i - x_j\|^2 / \sigma^2) \quad (10)$$

有  $\langle \phi(x_i), \phi(x_j) \rangle = K(x_i, x_j) = 1$ ,说明了训练样本映射到特征空间后分布在以坐标原点为圆心,半径为  $R=1$  的圆上。使用高斯核函数时,可以避免目标数据标准化的影响,SVDD的数据描述方式与OCSVM具有同等的效果<sup>[2]</sup>。

## 3 参数设置与优化分析

2类模型的应用均需要进行核函数选择和核函数参数优化。由于采用 gauss 核的支持向量机可以获得非常平滑的估计,且其核值的范围为(0,1),这可以使得计算过程变得简单,因此得到广泛的应用,数据描述一般采用高斯核函数。

参数的设置对超球分类面具有重要影响,高斯核宽度  $\sigma$  影响了超球分界面的复杂性,较小的  $\sigma$  使得映射分界面投影较为复杂,需要较多的支持向量进行描述,描述精度高,但泛化能力差,随着  $\sigma$  增大,描述精度降低,泛化能力增强。

OC-SVM 的控制错分比例参数  $\nu$  和 SVDD 的惩罚参数  $C$  均用于平衡超球体体积和描述误差,且  $\nu = \frac{1}{NC}$ ,显然  $\nu$  应用起来更为直观和易于理解。较小的  $\nu$  意味着较大的超球体,且大部分的训练样本都被包含在超球体内,随着  $\nu$  的增大,超球体的体积减小,将较为松散且离聚类中心较远的样本点排除在超球体外,并列入支持向量,提高描述精度。

## 4 对支持向量单类分类的研究进展

### 4.1 改进支持向量描述模型的训练速度

支持向量的数据描述是在2类分类的支持向量机的基础上发展起来的,当面对大量的训练样本时,模型训练速度明显制约了其应用。

从训练样本的角度来看,为提高训练速度,最为直接的一个方法就是预先对模型的训练样本进行约简,用少量有效的训练样本来表征样本空间的特征。采用一定的原则对原有样本和新增训练样本进行适当的选取,可以在一定程度上保持分类精度,大大缩短模型的训练时间<sup>[4]</sup>。另外文献[5]认为训练样本的规模是决定运算复杂度的关键因素,并通过建立了求取支持向量的计算量与样本分割子集数量的数学模型,给出样本分割子集数量的最优选取方法,降低了SVDD算法的计算时间。

从核函数的角度来看,支持向量的数据描述也是一种基于核的学习机制,因此,核函数起到至关重要的作用。核函数不仅与训练的速度有关系,而且对支持向量的数量也起到一定的决定作用,从而决定测试的速率。对支持向量核函数

的改进也是一个重要的方向。文献[6]针对2类分类SVM提出直接构造稀疏核的概念,在原始凸二次优化问题上增加一个约束,用优化搜索支持向量(限定个数)代替模型的支持向量,实质上是对核函数进行重新的构造。该方法在保持分类精度的同时可以提高训练速度,减少支持向量的数量。

#### 4.2 模型参数优化与多类分类

支持向量数据描述核空间超球面的描述是柔性的,为了进行参数优化获得对目标数据的准确描述,需要估计目标数据和异常数据的检测误差。

目前,交叉验证、留一法是常用的核参数优化方法,缺点是耗时严重,属于经验上的最优值,且优化标准在不同应用目的中也不尽相同。而网格搜索<sup>[7]</sup>虽然能够找到模型的最优参数,但是计算量大的问题始终存在。针对支持向量描述的特殊性,文献[8]假设超球分解面外的异常样本服从均匀分布,通过人工产生异常样,然后综合考虑2类错误定义了误差来估计超球的边界,解决参数优化的问题。

支持向量描述从原始空间到特征空间的映射属于隐式形式,无法直接估计特征空间的分布情况,目前还没有非常有效的办法通过了解核空间的分布信息来指导SVDD的核优化问题。文献[9]通过分析映射数据在特征空间结构以及描述数据分布趋近超球形区域的程度来指导核参数的选择。

单类分类器只使用一类训练样本的信息,在理论上比SVM节省一半左右的运算时间,可以推广运用于2类或多类分类问题,即组合多个SVDD分类器,最为经典的是基于距离测度的SVDD分类方法,即根据测试样本到球心距离的大小来判别类别属性。但是在实际应用中,常常会遇到这样的情况,支持向量域分离超球面存在空间重叠的情况,无法给出正确的分类。针对空间域支持向量描述2球相对位置:相交、相切、相离3种,文献[10]在两球相邻边界中间点建立了支持向量域分离超平面,结合了SVDD的分类超球面和SVM的分类超平面,提高了分类的精度。文献[11]提出了基于SVDD参数的推广能力测度和多层SVDD的模式识别算法。

#### 4.3 与其他方法的结合

结合聚类、概率密度估计、模糊理论、KPCA等方法改进支持向量描述的不足也是最近研究的热点之一。

聚类的方法可以有效获取簇信息,将支持向量的数据描述方法运用于数据的聚类<sup>[12]</sup>,改变了聚类的方式,比传统的聚类算法取得较好的效果,结合聚类方法可以获得原始数据的主要特征,缩减训练样本,提高模型的速度。

由于单一的分类器往往难以获取数据样本的所有特征,因此通过一定的方式组合多个分类器可以大大提高分类的效果,结合概率估计和Bayes理论,通过平均各个分类器的后验概率估计便可以获得更为准确的组合分类器分类结果<sup>[13]</sup>。

结合模糊信息处理技术,构造样本空间的重叠区域样本点模糊隶属度,可以解决多目标识别和提高样本的识别率。结合模糊隶属度函数描述训练样本点隶属于聚类集的程度,表征了边缘点对聚类中心的贡献权重,可以有效抑制聚类中心的偏移,提高支持向量聚类效果。

核主元分析先将原始特征非线性地映射到高维特征空间再进行主成分分析。将核主元分析和支持向量描述相结合,用核主元分析对数据进行预处理,能够改善核特征空间的数据分布,使支持向量描述的目标数据和异常数据具有更好的可区分性。

## 5 结束语

支持向量机分类器在解决非均匀分布样本的分类问题上具有独特优势,具有更快的训练速度和处理效率更适合机械设备的在线监测与诊断,在工程上具有很好的应用效果,然而对于仅由一类训练样本的信息,如何权衡好模型的数据描述精度和泛化推广能力来确定超球的边界是个难以确定的问题。因此,支持向量描述的方法还存在许多值得研究和优化的空间。

## 参考文献

- [1] Scholkopf B. Estimating the Support of a High-dimensional Distribution[J]. Neural Computation, 2001, 13(7): 1443-1471.
- [2] Tax D M J, Duin R P W. Support Vector Data Description[J]. Machine Learning Research, 2004, 54(1): 45-56.
- [3] Cohen G, Hilario M. One-class Support Vector Machines with a Conformal Kernel——A Case Study in Handling Class Imbalance[C]// Proc. of SSPR & SPR'2004. [S. l.]: Springer, 2004: 850-858.
- [4] 花小鹏, 皋 军, 田 明. 改进的SVDD增量学习算法[J]. 计算机工程, 2009, 35(22): 210-212.
- [5] 湛德荣, 宫久路, 陈 乾. 基于样本分割的快速高光谱图像异常检测支持向量数据描述方法[J]. 兵工学报, 2008, 29(9): 1049-1053.
- [6] Wu Mingrui, Scholkopf B, Bakir G. A Direct Method for Building Sparse Kernel Learning Algorithms[J]. Machine Learning Research, 2006, 7: 603-624.
- [7] Zhuang Ling, Dai Honghua. Parameter Optimization of Kernel-based One-class Classifier on Imbalance Learning[J]. Journal of Computers, 2006, 1(7): 32-40.
- [8] Tax D M J, Duin R P W. Uniform Object Generation for Optimizing One-class Classifiers[J]. Machine Learning Research, 2001, 2: 155-173.
- [9] 赵 峰, 张军英, 刘 敬. 一种改善支撑向量域描述性能的核优化算法[J]. 自动化学报, 2008, 34(9): 1122-1127.
- [10] 刘万里, 刘三阳, 薛贞霞. 基于支持向量域的分离超平面[J]. 系统工程与电子技术, 2008, 30(4): 748-751.
- [11] 朱孝开, 杨德贵. 基于推广能力测度的多类SVDD模式识别方法[J]. 电子学报, 2009, 37(3): 464-469.
- [12] Hur A B, Horn D. Support Vector Clustering[J]. Journal of Machine Learning Research, 2001, 2: 125-137.
- [13] Tax D M J, Duin R P W. Combining One-class Classifiers[C]// Proc. of the 2nd International Workshop on Multiple Classifier Systems. London, UK: Springer-Verlag, 2001: 299-308.

编辑 顾逸斐