

可保证分类性能的最小二乘支持向量机

徐金宝¹, 廖雷¹, 业巧林²

XU Jin-bao¹, LIAO Lei¹, YE Qiao-lin²

1.南京工程学院 计算机工程学院, 南京 211167

2.南京林业大学 信息技术学院, 南京 210037

1.School of Computer Science, Nanjing Institute of Technology, Nanjing 211167, China

2.School of Information Technology, Nanjing Forestry University, Nanjing 210037, China

XU Jin-bao, LIAO Lei, YE Qiao-lin. Least squares support vector machine classifiers with guaranteed classification performance. Computer Engineering and Applications, 2009, 45(21): 48-50.

Abstract: Support Vector Machine (SVM) is one of focuses of research and application in classification. A new least-squares-based algorithm that introduces a within-class scatter with guaranteed classification performance (VLSVM) in the design of least squares support vector machines (LS-SVM) is presented. This algorithm can obtain better correctness that reformulates primal LS-SVM problems with optimality criterion $\text{Min } \mathbf{w}'\mathbf{M}\mathbf{w}$ where \mathbf{w} is the weight vector corresponding the primal LS-SVM problems, \mathbf{M} is the within-class scatter matrix. This method only requires to solve a linear system instead of a quadratic programming problem. Experiments are included to compare SVM and Suykens' approach.

Key words: least squares support vector machines (LS-SVM); with-class scatter; better correctness; linear system

摘要:当前支持向量机是分类研究与应用的一个热点。提出了一个新的最小二乘支持向量机算法,该算法向最小二乘支持向量机(LS-SVM)优化模型中融入了类内散度(VLSVM)思想,即用优化准则 $\text{Min } \mathbf{w}'\mathbf{M}\mathbf{w}$ 对原 LS-SVM 进行重组, \mathbf{w} 为对应 LS-SVM 中的权向量, \mathbf{M} 是类内散度矩阵。提出的方法仅仅需要求解一个线性系统而不是凸规划问题,实验主要对 SVM 和 Suykens 等人的方法进行了比较,并验证了提出的算法的有效性。

关键词:最小二乘支持向量机;类内散度;更好精度;线性系统

DOI: 10.3778/j.issn.1002-8331.2009.21.012 **文章编号:** 1002-8331(2009)21-0048-03 **文献标识码:** A **中图分类号:** TP181

1 引言

支持向量机(Support Vector Machine-SVM)方法是建立在统计学习理论中的结构风险最小化和 VC 维基础上^[1-2]。在实际问题中,往往原空间中的样本是线性不可分的,解决这种线性不可分的问题,SVM 是通过核映射方法,将原空间中样本映射到高维空间,使得样本在此高维空间中线性分开^[3]。

SVM 以拥有较好的泛化能力而著称,其主要思想是寻找一个能使分类样本尽可能很好地分开的超平面。但是,标准 SVM 主要是通过一个二次规划问题求解的^[4],由于需要大量的迭代次数,从而带来了大量的时间代价,为了改进标准 SVM 的计算时间代价的问题,Mangasarian 等人已经提出了许多快速算法,如 PSVM^[5],LSVM^[6]和 SSVM^[7]。从分类精度角度出发,提出了一个可保证分类性能的 SVM 算法。提出的方法仅仅需要求解一个线性系统而不是凸规划问题,将类内散度的思想融入到最小二乘支持向量机(LS-SVM)中,即用优化准则 $\text{Min } \mathbf{w}'\mathbf{M}\mathbf{w}$ 对原 LS-SVM 进行重组, \mathbf{w} 为对应 LS-SVM 中的权向量, \mathbf{M} 是类内散度矩阵。在 UCI 数据库上的计算结果显示,与 SVM 和 Suykens 等人提出的方法相比,提出的方法有更好的分类性能。

2 支持向量机

SVM 的主要思想可以用下面的 QP 问题来表示:

$$\text{Min } \frac{1}{2} \mathbf{w}'\mathbf{w} \quad (1)$$

subject to $\mathbf{D}(\mathbf{A}\mathbf{w}-\mathbf{e}b) \geq \mathbf{e}$

$$\text{式(1)中的 } \mathbf{D} = \begin{bmatrix} y_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & y_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & y_n \end{bmatrix}_{m \times m}, y_i \text{ 是第 } i \text{ 个样本的类标,}$$

$\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m \times n}$ 。但是在大多情况下式(1)由于存在一些不能线性分开的样本点,所以仅仅用式(1)求解是不可行的,这样,可以向式(1)引入一个松弛因子 ξ ,得:

$$\text{subject to } \mathbf{D}(\mathbf{A}\mathbf{w}-\mathbf{e}b) + \xi \geq \mathbf{e} \quad (2)$$

$$\xi \geq 0$$

根据式(1)和式(2),可以得到一个最优化问题:

作者简介:徐金宝(1970-),男,讲师,研究方向:Java 新技术与 MIS 研制、数据挖掘;廖雷(1964-),男,副教授,主要研究方向:软件工具、软件自动化;业巧林(1983-),男,硕士,主要研究方向:机器学习、数据挖掘。

收稿日期: 2008-12-16 **修回日期:** 2009-05-21

$$\begin{aligned} \text{Min } & \frac{1}{2} \mathbf{w}' \mathbf{w} + C e' \xi \\ \text{subject to } & D(\mathbf{A}\mathbf{w} - e\mathbf{b}) + \xi \geq e \\ & \xi \geq 0 \end{aligned} \quad (3)$$

式(3)中的正常数 C 是惩罚因子。

3 VLSVM 算法

为了有效地说明提出的 VLSVM 算法, 首先讨论一下最小二乘 SVM (LS-SVM)^[8]:

$$\begin{aligned} \text{Min}_{(w,b,\xi)} & \frac{1}{2} (\mathbf{w}' \mathbf{w}) + \frac{C}{2} \sum_{i=1}^n \xi_i^2 \\ \text{s.t. } & y_i [\langle \mathbf{w}' \boldsymbol{\varphi}(x_i) \rangle + b] = 1 - \xi_i, i=1, \dots, n \end{aligned} \quad (4)$$

式(4)中 $\varphi(\cdot)$ 是非线性函数。现在, 重点讨论一下最优化问题(4)。为了达到较好的分类性能的目的, 对优化问题(式(4))作如下修正:

$$\begin{aligned} \text{Min}_{(w,b,\xi)} & \frac{1}{2} (\mathbf{w}' \mathbf{w}) + \frac{C}{2} \sum_{i=1}^n \xi_i^2 \\ & \sum_{i=1}^{n_1} \mathbf{w}' (\boldsymbol{\varphi}(x_i) - \mathbf{m}_1^{\circ}) (\boldsymbol{\varphi}(x_i) - \mathbf{m}_1^{\circ})' \mathbf{w} + \\ & \sum_{i=1}^{n_2} \mathbf{w}' (\boldsymbol{\varphi}(x_i) - \mathbf{m}_2^{\circ}) (\boldsymbol{\varphi}(x_i) - \mathbf{m}_2^{\circ})' \mathbf{w} \\ \text{s.t. } & y_i [\langle \mathbf{w}' \boldsymbol{\varphi}(x_i) \rangle + b] = 1 - \xi_i, i=1, \dots, n \end{aligned} \quad (5)$$

式(5)中 n_1, n_2 分别为+1 类样本和-1 类样本数目, $\mathbf{m}_1^{\circ} = \frac{1}{n_1} \sum_{i=1}^{n_1} \boldsymbol{\varphi}(x_i) =$

$\frac{1}{n_1} \boldsymbol{\varphi}(x_1) \mathbf{1}_{n_1}, \mathbf{m}_2^{\circ} = \frac{1}{n_2} \sum_{i=1}^{n_2} \boldsymbol{\varphi}(x_i) = \frac{1}{n_2} \boldsymbol{\varphi}(x_2) \mathbf{1}_{n_2}$ ($\mathbf{1}_{n_i}$ 由 n_i 个 1 组成的列向量, 这里 $i=1, 2, n=n_1+n_2$; 优化问题(式(5))可以保证尽可能得到较大间隔的同时, 保证了最小的类内散度^[9]。问题(式(5))不易求解, 因此做如下组合:

$$\begin{aligned} \text{Min}_{(w,b,\xi)} & \frac{1}{2} (\mathbf{w}' \mathbf{w}) + \frac{C}{2} \sum_{i=1}^n \xi_i^2 + \frac{1}{2} \mathbf{w}' \mathbf{M}^{\circ} \mathbf{w} \\ \text{s.t. } & y_i [\langle \mathbf{w}' \boldsymbol{\varphi}(x_i) \rangle + b] = 1 - \xi_i, i=1, \dots, n \end{aligned} \quad (6)$$

式(6)中 $\mathbf{M} = (\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2) = \sum_{i=1}^{n_1} (\boldsymbol{\varphi}(x_i) - \mathbf{m}_1^{\circ}) (\boldsymbol{\varphi}(x_i) - \mathbf{m}_1^{\circ})' + \sum_{i=1}^{n_2} (\boldsymbol{\varphi}(x_i) - \mathbf{m}_2^{\circ}) (\boldsymbol{\varphi}(x_i) - \mathbf{m}_2^{\circ})'$, 在文献[9]中, Mika 等人已经证明了特征空间中的权向量可有训练样本线映射表示:

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^n a_i \boldsymbol{\varphi}(x_i) = \boldsymbol{\varphi}(X) \mathbf{a} \quad (7)$$

式(7)中 $\mathbf{a} = [a_1, a_2, \dots, a_n]'$, 如同文献[3][10], 通过替换权向量 \mathbf{w} , 对式(6)进行同样修改, 如下:

$$\begin{aligned} \text{Min}_{(w,b,\xi)} & \frac{1}{2} (\mathbf{a}' \mathbf{a}) + \frac{C}{2} \xi^2 + \frac{1}{2} \mathbf{a}' \mathbf{S}^{\circ} \mathbf{a} \\ \text{s.t. } & D(\mathbf{K}\mathbf{a} + e\mathbf{b}) = e - \xi \end{aligned} \quad (8)$$

式(8)中 $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} y_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & y_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & y_n \end{bmatrix}_{m \times m}$, y_i 对应与第 i 个样本的类标, e

是由 n 个 1 组成的列向量, $\mathbf{S}^{\circ} = \mathbf{K}_{n \times n_1} [\mathbf{I}_1 - \frac{1}{n_1} \mathbf{1}_1 \mathbf{1}_1'] \mathbf{K}'_1 + \mathbf{K}_2 [\mathbf{I}_2 -$

$\frac{1}{n_2} \mathbf{1}_2 \mathbf{1}_2'] \mathbf{K}'_2, \mathbf{S}^{\circ}$ 由下面式子得到:

$$\begin{aligned} \mathbf{w}' \mathbf{M}^{\circ} \mathbf{w} &= \sum_{i=1}^2 \mathbf{a}' \boldsymbol{\varphi}(X)' \left(\sum_{j=1}^{n_i} (\boldsymbol{\varphi}(x_j^i) - \mathbf{e}_i^{\circ}) (\boldsymbol{\varphi}(x_j^i) - \mathbf{e}_i^{\circ})' \right) \boldsymbol{\varphi}(X) \mathbf{a} = \\ & \sum_{i=1}^2 \mathbf{a}' \boldsymbol{\varphi}(X)' (\boldsymbol{\varphi}(X_i) \boldsymbol{\varphi}(X_i)' - \mathbf{e}_i^{\circ} \mathbf{e}_i^{\circ}') \boldsymbol{\varphi}(X) \mathbf{a} = \\ & \frac{1}{n_i} \boldsymbol{\varphi}(X_i) \mathbf{1}_{n_i} \mathbf{1}_{n_i}' \boldsymbol{\varphi}(X_i)' \boldsymbol{\varphi}(X) \mathbf{a} = \\ & \sum_{i=1}^2 \mathbf{a}' \boldsymbol{\varphi}(X)' (\boldsymbol{\varphi}(X_i) [\mathbf{I}_{n_i} - \frac{1}{n_i} \mathbf{1}_{n_i} \mathbf{1}_{n_i}'] \boldsymbol{\varphi}(X_i)' - \mathbf{e}_i^{\circ} \mathbf{e}_i^{\circ}') \boldsymbol{\varphi}(X) \mathbf{a} = \\ & \mathbf{a}' (\mathbf{K}_{n \times n_1} [\mathbf{I}_1 - \frac{1}{n_1} \mathbf{1}_1 \mathbf{1}_1'] \mathbf{K}'_1 + \mathbf{K}_2 [\mathbf{I}_2 - \frac{1}{n_2} \mathbf{1}_2 \mathbf{1}_2'] \mathbf{K}'_{n \times n_2}) \mathbf{a} \quad (9) \end{aligned}$$

形成问题(式(8))对应的 Lagrangian 对偶问题:

$$L(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \xi, \lambda) = \frac{1}{2} \mathbf{a}' \mathbf{a} + \frac{C}{2} \xi + \frac{1}{2} \mathbf{a}' \mathbf{S}^{\circ} \mathbf{a} - \lambda (D(\mathbf{K}\mathbf{a} + e\mathbf{b}) - e + \xi) \quad (10)$$

式(10)中 λ 为 Lagrangian 乘子, 分别对上式中的变量 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \xi$ 求偏导, 并设为 0, 于是可以得到如下的 KKT 条件:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{a}} &= 0 \Rightarrow (\mathbf{I} + \mathbf{S}^{\circ}) \mathbf{a} = D\mathbf{K}\lambda \\ \frac{\partial L}{\partial \mathbf{b}} &= 0 \Rightarrow -e' D\lambda = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \xi} &= 0 \Rightarrow \lambda = C\xi \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda} &= 0 \Rightarrow D(\mathbf{K}\mathbf{a} + e\mathbf{b}) = e - \xi \end{aligned} \quad (11)$$

式(11)中 \mathbf{I} 是 $n \times n$ 维的单位矩阵, 矩阵 $(\mathbf{I} + \mathbf{S}^{\circ})$ 是正定的, 因为 \mathbf{S}° 是半正定的, 并且矩阵 \mathbf{I} 是正定的。对(11)中最后一个等式中的 \mathbf{a}, ξ 进行替换, 于是可以得到:

$$\begin{bmatrix} 0 & D\mathbf{e}' \\ e\mathbf{D} & \mathbf{H} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ e' \end{bmatrix} \quad (12)$$

式(12)中的 $\mathbf{H} = D\mathbf{K}(\mathbf{I} + \mathbf{S}^{\circ})^{-1} D\mathbf{K} + C^{-1}$ 。这个矩阵是对称正定的, 由于 $D\mathbf{K}(\mathbf{I} + \mathbf{S}^{\circ})^{-1} D\mathbf{K}$ 是对称半正定的, 而 C^{-1} 是正定的, 式(12)中的矩阵不是正定的, 因此, 问题(式(12))不易求解。为了较方便地求解式(12), 可以修正式(12), 得:

$$\begin{bmatrix} D\mathbf{e}' \mathbf{H}^{-1} e\mathbf{D} & 0 \\ 0 & \mathbf{H} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \lambda + \mathbf{H}^{-1} e\mathbf{D}\mathbf{b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D\mathbf{e}' \mathbf{H}^{-1} e' \\ e' \end{bmatrix} \quad (13)$$

对于问题(式(13))来说, 可以用文献[11-12]中提到的 CG 方法求解。但 CG 存在许多缺陷, 如分类性能的不稳定性, 由于不适合的终止因子而导致的过长的计算时间^[13-14], 为了避免 CG 的缺陷, 采用下面方法对 VLSVM 求解:

VLSVM 算法:

- (1) 求解 \mathbf{H} : 首先, 求解 $(\mathbf{I} + \mathbf{S}^{\circ}) \mathbf{x} = D\mathbf{K}$ 中的中间变量 \mathbf{x} , 可以得到 $\mathbf{x} = (\mathbf{I} + \mathbf{S}^{\circ}) \setminus D\mathbf{K}$ ^[5], 所以, $\mathbf{H} = D\mathbf{K}\mathbf{x} + C^{-1}$ 。
- (2) 从方程 $\mathbf{H}\delta = e\mathbf{D}$ 和 $\mathbf{H}\rho = e'$ 中分别求解 δ, ρ , 即: $\delta = \mathbf{H} \setminus (e\mathbf{D}), \rho = \mathbf{H}' \setminus e'$ 。
- (3) 计算 $D\mathbf{e}' \mathbf{H}^{-1} e\mathbf{D} = D\mathbf{e}' \delta, \mathbf{b} = \delta' e' / D\mathbf{e}' \mathbf{H}^{-1} e\mathbf{D}, \lambda = \rho - \delta\mathbf{b}$ 。
- (4) 计算 $\mathbf{a} = (\mathbf{I} + \mathbf{S}^{\circ}) \setminus D\mathbf{K}\lambda$ 。

4 实验结果与分析

为了说明 VLSVM 算法的有效性, 在 UCI 数据库^[15]上进行实验。Suykens 的方法中的终止因子设置为 0.001, 计算机是运行在装有 MATLAB 2008 的 Windows XP 系统上, 计算机内

存为512 MB。

表1中显示了高斯核(Gauss)SVM、VLSVM和Suykens方法的比较结果。在实验中,参数 C 与核参数 σ 分别是在 $\{10^i | i = -3, -2, \dots, 4\}$ 与 $\{10^i | i = -4, -3, -2, \dots, 4\}$ 范围内调节获得。表1中结果表明,提出的方法有较好的分类性能,且优于SVM和Suykens的方法。例如,在数据集PIDD上VLSVM得到了76.1的测试精度,而在SVM与Suykens提出的方法上的测试精度分别为68.0和67.8,可以看出VLSVM分类性能的有效性。

表1 在UCI数据库中的6个数据集上非线性SVM、Suykens方法和VLSVM的分类精度

数据集	分类精度(%)		
	SVM	Suykens' method ^[11]	VLSVM
Spect(267×45)	55.6	92.0	92.0
WBCD(699×10)	100	100	100
WDBC(569×32)	94.1	75.5	95.5
Yeast(1484×8)	70.6	69.0	70.1
PIDD(768×8)	68.0	67.8	76.1
BSWD(625×4)	96.3	63.4	91.6
ISD(2130×19)	98.9	99.6	99.6
Wine(1473×9)	83.8	70.0	92.3
Monk2(432×6)	82.0	57.6	82.0
Monk1(432×6)	86.8	52.0	86.8
Pidd(768×8)	68.0	67.9	70.8

注:黑体表示最好性能

5 结论

提出一个简单的分类算法VLSVM,与标准SVM相比,该方法能得到较好的分类性能,它主要通过求解线性方程组求解,而不是求解凸规划问题。将类内散度的思想融入最小二乘支持向量机(LS-SVM)中,使得在获得最大间隔的同时,保证类内散度最小化。实验结果也验证了VLSVM的有效性能。

参考文献:

- [1] Vapnik V N. The nature of statistical learning theory[M]. New York: Springer-Verlag, 1995.
- [2] Cherkassky V, Mulier F. Learning from data: Concept, theory and method[M]. NY: John Wiley & Sons, 1997.
- [3] Lee Yuh-Jye, Mangasarian O L. SSVM: A smooth support vector machine, Technical Report 99-03[R]. Data Mining Institute, Computer Sciences Department, University of Wisconsin, Madison, Wisconsin, September 1999.
- [4] 李国正, 王猛, 曾华军. 支持向量机导论[M]. 北京: 电子工业出版社, 2004: 96-100.
- [5] Fung G, Mangasarian O L. Proximal support vector machine classifiers[C]// Provost F, Srikant R. Proceedings KDD-2001: Knowledge discovery and data mining. San Francisco, CA, New York: Association for Computing Machinery, 2001: 77-86.
- [6] Mangasarian O L, Musicant D R. Lagrangian support vector machines, Technical Report 00-06[R]. Data Mining Institute, Computer Sciences Department, University of Wisconsin, Madison, Wisconsin, 2001: 161-177.
- [7] Shewchuk J R. An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain, technical report CS-94-125[R]. Carnegie Mellon University, Pittsburgh, 1994.
- [8] Suykens J A K, Van Gestel, Brabanter T, De, et al. Least Squares Support Vector Machines[M]. Singapore: World Scientific Publishing Co, 2002.
- [9] Mika S, Ratsch G, Weston J, et al. Fisher discriminant analysis with kernels[C]// Hu Y H, Larsen J, Wilson E. Neural Networks for Signal Processing IX, 1999: 41-48.
- [10] Mangasarian O L. Generalized support vector machines[C]// Smola A, Bartlett P, Scholkopf B. Advances in Large Margin Classifiers. Cambridge, MA: MIT Press, 2000.
- [11] Suykens J A K, Lukas L, Van Dooren P, et al. Least squares support vector machine classifiers: A large scale algorithm[J]. Neural Processing Letters, 1999, 9(3): 293-300.
- [12] Wei C, Chong J O, Keerthi S. An improved conjugate gradient scheme to the solution of least squares SVM[J]. IEEE Transactions on Neural Networks, 2004, 1(11).
- [13] Lee Yuh-Jye, Mangasarian O L. SSVM: A smooth support vector machine, Technical Report 99-03[R]. Data Mining Institute, Computer Sciences Department, University of Wisconsin, Madison, Wisconsin, 1999-09.
- [14] MATLAB. User's Guide[M/OL]. The MathWorks, Inc, 1994-2001. <http://www.mathworks.com>.
- [15] Newman D J, Hettich S, Blake C L. UCI repository of machine learning databases[DB/OL]. (1992). <http://www.ics.uci.edu/~mllearn/MLRepository.html>.
- [8] Papadimitriou S, Kitagawa H, Gibbons P B. LOCI: Fast outlier detection using the local correlation integral[C]// Proceedings of the 19th International Conference on Data Engineering, Bangalore. Los Alamitos: IEEE Computer Society, 2003: 315-326.
- [9] Sanjay C, Sun Pei. SLOM: A new measure for local spatial outliers[J]. Knowledge and Information Systems, 2006, 9(4): 412-429.
- [10] He Z, Xu X, Deng S. Discovering Cluster-based Local outliers[J]. Pattern Recognition Letters, 2003, 24(9-10): 1642-1650.
- [11] He Z, Xu X, Huuug J Z, et al. Mining Class outliers: Concepts, algorithms and applications in CRM[J]. Experts System with Applications, 2004, 27(4): 294-299.

(上接43页)