طبقه‌بند تک‌کلاسه گرانش‌گرای مبتنی بر ماشین بردار پشتیبان

سیدحسین غفاریان، هادی صدوقی یزدی و یونس الله‌یاری

چکیده: در این مقاله یک طبقه‌بند تک‌کلاسه مبتنی بر مرز با الهام از طبقه‌بند توصیف‌گر داده مبتنی بر بردار پشتیبان (SVDD)[1] ارائه شده است. در طبقه‌بند SVDD حتی زمانی که نمونه‌های پرت به بیرون از مرز رانده می‌شوند، باز هم این نمونه‌ها بر مرز طبقه‌بند اثر می‌گذارند و این مسئله باعث افزایش خطای طبقه‌بند می‌شود. در طبقه‌بند پیشنهادی به گرانش نمونه‌های آموزش اهمیت داده می‌شود و همچنین همه نمونه‌ها در تعیین مرز طبقه‌بند دخالت دارند. بر این مبنا دو طبقه‌بند که در یکی دانش در مورد نمونه‌های پرت نیز در نظر گرفته می‌شود، پیشنهاد شده است. مسئله بهینه‌سازی مطرح در طبقه‌بند پیشنهادی علاوه بر این که تحدب را حفظ می کند، در حوزه کرنل نیز به سهولت قابل استفاده است. پس از معرفی طبقه‌بند پیشنهادی و حل مسئله بهینه‌سازی آن، چگونگی تغییرات مرز طبقه‌بند پیشنهادی در مقابل تغییرات پارامترهای مدل بررسی می‌شود. نتایج آزمایش‌ها در مقایسه با دو طبقه‌بند SVDD و Density Induced SVDD نشان می‌دهد که روش پیشنهادی در کاهش اثر نمونه‌های پرت موفق بوده است.

***کلید واژه:* طبقه‌بند تک‌کلاسه، نمونه‌های پرت، طبقه‌بند تک‌کلاسه گرانش‌گرا، طبقه‌بند مبتنی بر چگالی.**

۱- مقدمه

توصیف داده‌ها در یک دامنه خاص یا همان طبقه‌بند تک‌کلاسه به‌عنوان یکی از مباحث مهم در یادگیری ماشین و داده‌کاوی مورد توجه پژوهش‌گران قرار گرفته است. هدف از مطرح‌شدن طبقه‌بند تک‌کلاسه، به‌دست آوردن مدلی برای توصیف داده‌های یک کلاس است به‌گونه‌ای که این مدل پذیرنده نمونه‌های مشابه آن کلاس بوده و از پذیرفتن نمونه‌های سایر کلاس‌ها خودداری کند. چالش مطرح در دسته‌بندهای دوکلاسه این است که نمونه‌های ناشناخته و فاقد هر گونه تشابه به داده‌های دو کلاس، در یکی از دو کلاس طبقه‌بندی می‌گردد. لذا عملکرد طبقه‌بند دوکلاسه در مقابل این گونه نمونه‌ها مناسب نیست. برای مواجهه با این چالش، یکی از کاربردهای طبقه‌بند تک‌کلاسه تحت عنوان توصیف داده‌ها در یک دامنه مطرح می‌شود. در چنین حالاتی، منطقی است قبل از هر اقدامی برای طبقه‌بندی نمونه جدید در یکی از دو کلاس، تشابه یا عدم تشابه این نمونه را با مجموعه نمونه‌های یادگیری بررسی کرد.

به‌عنوان مثالی از کاربرد طبقه‌بند تک‌کلاسه می‌توان تشخیص رفتارهای غیر طبیعی در یک سیستم را نام برد. اگرچه شناخت رفتارهای طبیعی امکان‌پذیر است زیرا داده‌های زیادی در مورد آن وجود دارد، اما رفتار غیر طبیعی به دلیل ماهیت آن، این ویژگی را ندارد. در نتیجه می‌توان برای رفتارهای معمول یک طبقه‌بند تک‌کلاسه ساخت و رفتارهای نرمال را بر اساس آن شناسایی کرد.

۱-۱ روند توسعه طبقه‌بندهای تک‌کلاسه مبتنی بر ماشین بردار پشتیبان

اولین طبقه‌بند تک‌کلاسه مبتنی بر بردار پشتیبان بنام ν-SVC در سال ۱۹۹۹ معرفی شد [۱]. مرز این طبقه‌بند ابرصفحه‌ای با حداکثر حاشیه است که نمونه‌های کلاس هدف را از مبدأ مختصات جدا می‌کند. در همین سال یک طبقه‌بند مبتنی بر مرز ارائه شد که در حالت خاص مشابه ν - SVC رفتار می‌کند. این طبقه‌بند توصیف‌گر داده مبتنی بر بردار پشتیبان (SVDD) نام دارد و توسط تکس پیشنهاد شد [۲].

علی‌رغم ویژگی‌های مناسب SVDD و کاربرد گسترده آن، مشکلاتی با خود به همراه دارد. این روش به دنبال پوشش‌دادن نمونه‌های یادگیری توسط ابرکره‌ای با کمترین شعاع ممکن در فضای ویژگی است که تنها با نمونه‌های یادگیری بیرونی توصیف می‌شود [۳]. چگالی نمونه‌های یادگیری تأثیری در فرایند تعیین مرزها ندارد و به همین دلیل چنان که خواهیم دید، گاهی اوقات مرز طبقه‌بند چندان مناسب نیست.

علاوه بر این اگر در رابطه با نمونه‌های پرت نیز اطلاعاتی در دست داشته باشیم، SVDD از آنها استفاده‌ای نمی‌کند. این نمونه‌ها را که گاهی نمونه‌های منفی نامیده می‌شوند، می‌توان در فرایند یادگیری دخالت داد [۴]. به این منظور سعی بر آن است که کره‌ای با مرکز a و حداقل شعاع R یافت شود به‌گونه‌ای که نمونه‌های مثبت را در داخل خود قرار داده و از پذیرش نمونه‌های منفی خودداری کند. این روش طبقه‌بند بردار پشتیبان با نمونه های منفی SVDD with Negative Samples و یا به اختصار NSVDD نامیده می‌شود.

پس از معرفی طبقه‌بندهای SVDD و NSVDD روش‌های متنوعی برای بهبود عملکرد آن معرفی شدند. دسته‌ای از این روش‌ها با استفاده از پیش‌پردازش یا پس‌پردازش سعی در بهبود عملکرد در رابطه با نویز دارند. به‌عنوان مثال می‌توان به استفاده از فیلترینگ متعامد و ترکیب آن با روش SVDD اشاره نمود [۵]. در تحقیقی دیگر Guo و همکارانش با ارائه یک روش پس‌پردازشی سعی در افزایش قدرت SVDD داشتند [۶]. در الگوریتم پیشنهادی آنها از روش نزدیک‌ترین همسایه برای اصلاح مرزهای به‌دست آمده توسط SVDD استفاده شده است.

یکی دیگر از مشکلات SVDD وابستگی آن به نمونه‌های نویزی و در نظر نگرفتن ناحیه‌های چگال است. برای حل این مشکل به هر نمونه یادگیری یک چگالی محلی نسبت داده می‌شود. سپس قیود مسأله بهینه‌سازی مرتبط با SVDD به‌گونه‌ای تغییر داده می‌شوند که مرکز ابرکره به سمت نمونه‌های چگال‌تر رانده شود. به این مدل (DSVDD)[2]

این مقاله در تاریخ ۱ اردیبهشت ماه ۱۳۹۱ دریافت و در تاریخ ۲۲ مهر ماه ۱۳۹۱ بازنگری شد.

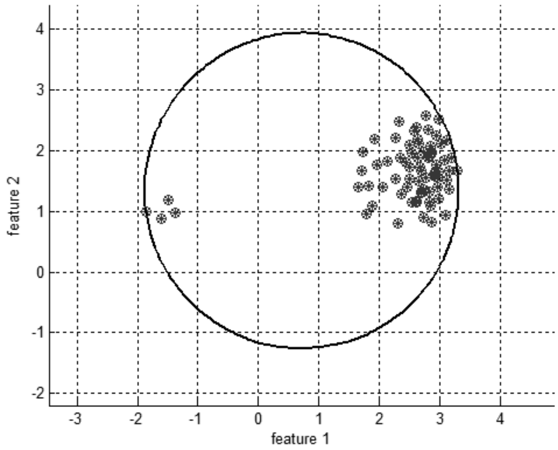
سیدحسین غفاریان، گروه مهندسی کامپیوتر، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، (email: s.h.ghafarian@gmail.com).

هادی صدوقی یزدی، گروه کامپیوتر و قطب علمی رایانش نرم و پردازش هوشمند اطلاعات، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، (email: h-sadoghi@um.ac.ir).

یونس الله‌یاری، گروه مهندسی کامپیوتر، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، (email: yns_alh@yahoo.com).

1. Support Vector Data Description

2. Density Induced SVDD



شکل ۱: ابرکره‌ای با حداقل شعاع که پوشش‌دهنده نمونه‌های یادگیری است.

گفته می‌شود. روشی که با رویکرد DSVDD نمونه‌های منفی را نیز در نظر می‌گیرد، DSVDD with Negative Samples یا NSVDD نامیده می‌شود.

از نقاط قوت SVDD و NSVDD سهولت حل مسأله بهینه‌سازی محدب درجه دوم آنها با استفاده از روش ضرایب لاگرانژ است. امتیاز دیگر این روش تعداد کم پارامترهای آزاد آن در مقایسه با مدل‌های توسعه‌یافته آن است.

۱-۲ روش پیشنهادی برای حل مشکلات طبقه‌بند تک‌کلاسه

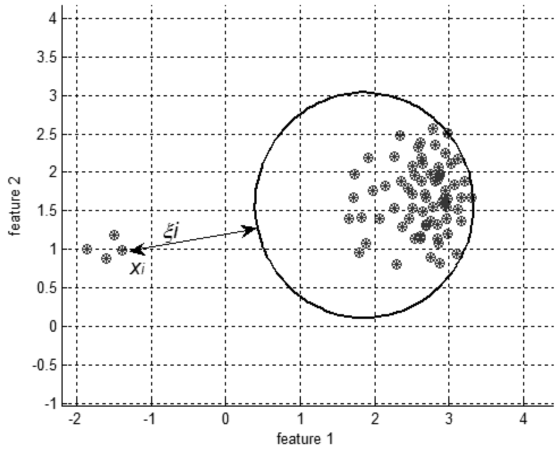
چنان که مطرح شد، طبقه‌بند SVDD دو عیب اساسی دارد. نقطه ضعف اول آن تمایز قایل نشدن بین نمونه‌های چگال و غیر چگال است که می‌تواند باعث شود نمونه به اشتباه جزء نمونه‌های پرت تلقی شود. به این خطا، خطای منفی- اشتباه[1] گفته می‌شود. مشکل دوم این روش تأثیرپذیری مرز طبقه‌بند از نمونه‌های یادگیری پرت در تعیین سطح تصمیم است که می‌تواند به خطای منفی- اشتباه منجر شود.

اگرچه در روش‌های مبتنی بر چگالی DSVDD و NDSVDD هدف اصلی غلبه بر مشکل اول SVDD و NSVDD بود، اما این روش‌ها در مقایسه با روش‌های قبلی باعث افزایش تعداد پارامترها و به تبع آن طولانی‌شدن زمان لازم برای پیداکردن پارامترهای بهینه می‌شوند. مشکل دیگر آنها در مقایسه با روش‌های SVDD و NSVDD چگونگی حل‌کردن مسایل بهینه‌سازی می‌باشد. تابع هدف این مسأله، یک مسأله کسری است و پیچیدگی زمانی آن در مقایسه با مسأله بهینه‌سازی درجه دوم مرتبط با SVDD بسیار بیشتر است.

برای حل این مشکلات در این مقاله طبقه‌بند تک‌کلاسه گرانش‌گرای مبتنی بر ماشین بردار پشتیبان پیشنهاد شده است. در این طبقه‌بند ضمن تلاش برای کاهش شعاع ابرکره به کمینه‌کردن فاصله مرکز ابرکره از مرکز گرانش اهمیت داده می‌شود. علت این امر دو دلیل زیر است:

- اهمیت قایل شدن برای مرکز گرانش باعث نزدیک‌شدن مرکز ابرکره به نمونه‌های چگال و در نتیجه فاصله‌گرفتن مرز ابرکره از نمونه‌های چگال می‌شود.
- به‌علاوه باعث مشارکت تمام نمونه‌ها در تعیین مرکز ابرکره و به تبع آن کاهش اثر نمونه‌های نویزی یا پرت در محاسبه مرز طبقه‌بند می‌شود.

1. False Negative



شکل ۲: چنانچه نمونه‌های نویزی یا پرت با نمونه‌های یادگیری ترکیب شده باشد می‌توان در قبال صرف نظر کردن از نمونه‌های نویزی یا پرت، به کره‌ای با شعاع کوچک‌تر رسید و توصیف مناسب‌تری را برای داده‌های کلاس هدف پیدا کرد.

علاوه بر نکات فوق، مسئله بهینه‌سازی در طبقه‌بند پیشنهادی به‌نحوی مطرح شده است که باعث تحدب آن و همچنین سهولت استفاده از آن در حوزه کرنل می‌شود.

در ادامه ابتدا به معرفی طبقه‌بند تک‌کلاسه SVDD می‌پردازیم و نقاط ضعف این طبقه‌بند را مطرح می‌کنیم. سپس در بخش بعد روش پیشنهادی در مواجهه با این نقاط ضعف را بررسی کرده و بر اساس آن طبقه‌بند جدید- طبقه‌بند تک‌کلاسه گرانش‌گرا (GSVDD) را معرفی می‌نماییم. پس از آن نتایج آزمایش‌ها بر روی این طبقه‌بند در مقایسه با طبقه‌بند SVDD تحلیل شده و در نهایت نتیجه‌گیری از طبقه‌بند مذکور ارائه می‌شود.

۲- طبقه‌بندی تک‌کلاسه مبتنی بر SVDD

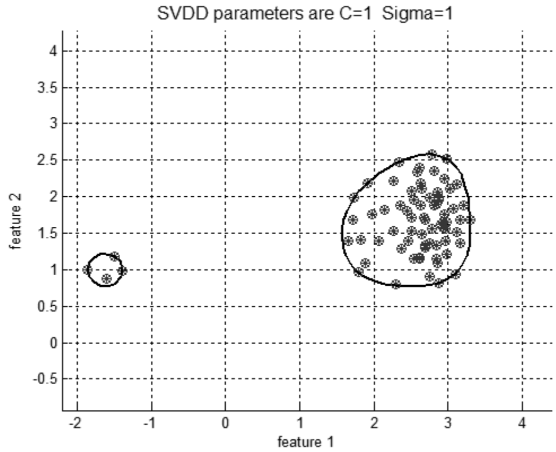
۱-۲ معرفی SVDD

طبقه‌بند SVDD یک طبقه‌بند تک‌کلاسه مبتنی بر بردار پشتیبان با یادگیری نظارت‌نشده است [۷]. فرض در نظر گرفته شده برای مرز این طبقه‌بند، ابرکره‌ای با مرکز a و شعاع R است، به‌طوری که دارای کمترین شعاع ممکن بوده و نمونه‌های یادگیری کلاس هدف را پوشش دهد. به‌عنوان مثال در شکل ۱ ابرکره محیط‌شده بر داده‌ها، بیانگر مرز طبقه‌بند SVDD است.

برای محاسبه مرکز و شعاع این ابرکره، مسئله بهینه‌سازی زیر مطرح می‌شود. در این مسئله متغیرهای a و R (مرکز و شعاع ابرکره) جواب‌های مسأله بهینه‌سازی زیر هستند. در این مسأله n بیانگر تعداد نمونه‌های یادگیری است

$$\begin{aligned}&\text{Minimize } R^{2}\\&\text{subject to } \|x_i - a\|^{2} \le R^{2}\ ,\ i = 1,\dots,n\end{aligned} \qquad (1)$$

مشکل این روش آن است که نمونه‌های پرت اگر اشتباهاً به‌عنوان نمونه‌های کلاس هدف برچسب‌گذاری شده باشند، به‌طور ناخواسته بر مرز طبقه‌بند اثر می‌گذارند. به منظور حل این مشکل، قیود نامساوی (۱) انعطاف‌پذیر می‌شود. این روش امکان می‌دهد که نمونه‌های نویزی یا پرت از داخل ابرکره بیرون رانده شوند. شکل ۲ بیانگر ایده پیشنهادی است. مدل ریاضی ایده پیشنهادی به‌صورت مسأله بهینه‌سازی (۲) است



شکل ۳: استفاده از نگاشت‌های غیر خطی و توابع کرنل، به مرزهای مناسب‌تری منجر می‌شود.

$$\text{Minimize } R^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i$$
$$\text{subject to } \|x_i - a\|^2 \le R^2 + \xi_i \ ,\ \xi_i \ge 0 \ ,\ i = 1,\dots,n \qquad (۲)$$

که عبارت $C\sum_{i=1}^{n}\xi_i$ بیانگر میزان خطای یادگیری است و پارامتر C وظیفه برقراری تعادل بین شعاع ابرکره و خطای یادگیری را بر عهده دارد. برای حل این مسأله بهینه‌سازی باید تابع لاگرانژ آن مطابق (۳) تشکیل شود که در آن α_i و γ_i ضرایب لاگرانژ هستند

$$L = R^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i + \sum_{i=1}^{n}\alpha_i\left(\|x_i - a\|^2 - R^2 - \xi_i\right) - \sum_{i=1}^{n}\gamma_i\xi_i \qquad (۳)$$

برای اعمال شرط لازم KKT، مطابق (۴) تا (۶) نسبت به متغیرهای a، R و ξ_i عمل مشتق‌گیری انجام شده و برابر صفر قرار داده می‌شود

$$\frac{\partial L}{\partial R} = 2R\left(1 - \sum_{i=1}^{n}\alpha_i\right) = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{n}\alpha_i = 1 \qquad (۴)$$

$$\frac{\partial L}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(x_i - a) = 0 \Rightarrow a = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i x_i \qquad (۵)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_i} = 0 \Rightarrow \alpha_i + \gamma_i = C \qquad (۶)$$

بعد از جایگزینی این فرمول‌ها در تابع لاگرانژ (۳) دوگان مسأله بهینه‌سازی (۲) به‌صورت (۷) ظاهر می‌شود

$$\text{Maximize } \sum_{i=1}^{n}\alpha_i x_i.x_i - \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j x_i.x_j$$
$$\text{subject to } \begin{cases} 0 \le \alpha_i \le C \ ,\ i = 1,\dots,n \\ \sum_{i=1}^{n}\alpha_i = 1 \end{cases} \qquad (۷)$$

مسأله بهینه‌سازی درجه دوم محدب (۷)، دارای یک جواب بهینه سراسری است. با حل این مسأله بهینه‌سازی، ضرایب لاگرانژ بهینه به‌دست خواهند آمد. با بررسی شرایط مکمل زائد، رابطه بین ضریب لاگرانژ و وضعیت نمونه یادگیری نسبت به ابرکره طبق یکی از بندهای (۸) توصیف می‌شود. طبق این رابطه، نمونه‌هایی که داخل ابرکره قرار می‌گیرند دارای ضریب لاگرانژ صفر و نمونه‌های روی ابرکره، ضریب لاگرانژ بین ۰ و C دارند. به‌علاوه ضریب لاگرانژ مربوط به نمونه‌هایی که در اثر پذیرش خطای یادگیری، بیرون از ابرکره واقع شده‌اند برابر C است.

$$\begin{aligned} \|x_i - a\|^2 < R^2 &\Leftrightarrow \alpha_i = 0 \qquad , \xi_i = 0 \\ \|x_i - a\|^2 = R^2 &\Leftrightarrow 0 < \alpha_i < C \ , \xi_i = 0 \\ \|x_i - a\|^2 > R^2 &\Leftrightarrow \alpha_i = C \qquad , \xi_i > 0 \end{aligned} \qquad (۸)$$

به‌منظور محاسبه R^2 کافی است فاصله یک نمونه دلخواه روی کره را از مرکز ابرکره مطابق (۹) محاسبه کرد

$$R^2 = \|x - a\|^2 = x.x - 2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(x.x_i) + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j(x_i.x_j) \qquad (۹)$$

همچنین برای بررسی تعلق نمونه تست z به کلاس هدف کافی است با استفاده از (۱۰) فاصله این نمونه را نسبت به مرکز به‌دست آورده و نتیجه را با R^2 مقایسه کرد

$$D(z) = z.z - 2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(z.x_i) + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j(x_i.x_j) \qquad (۱۰)$$

$$f(z) = \begin{cases} 1 & D(z) \le R^2 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \qquad (۱۱)$$

با توجه به (۱۰) و (۱۱) روشن است که تنها نمونه‌هایی با ضریب لاگرانژ مخالف صفر در تعیین مرز طبقه‌بند دخالت دارند. بنابراین این روش در دسته ماشین‌های بردار پشتیبان قرار می‌گیرد.

چنانچه مطابق شکل ۳ توزیع داده‌های یادگیری کلاس هدف غیر کروی باشد، ابرکره به‌دست آمده توصیف‌کننده خوبی برای کلاس هدف نیست. برای غلبه بر این مشکل می‌توان از نگاشت‌های غیر خطی استفاده کرد. با استفاده از این نگاشت‌ها، نمونه‌ها به فضایی با ابعاد بالاتر نگاشت می‌شوند. پس از محاسبه مرز طبقه‌بند در فضای ویژگی، مرزهای انعطاف‌پذیر و مناسبی در فضای ورودی با استفاده از توابع کرنل به‌دست خواهند آمد.

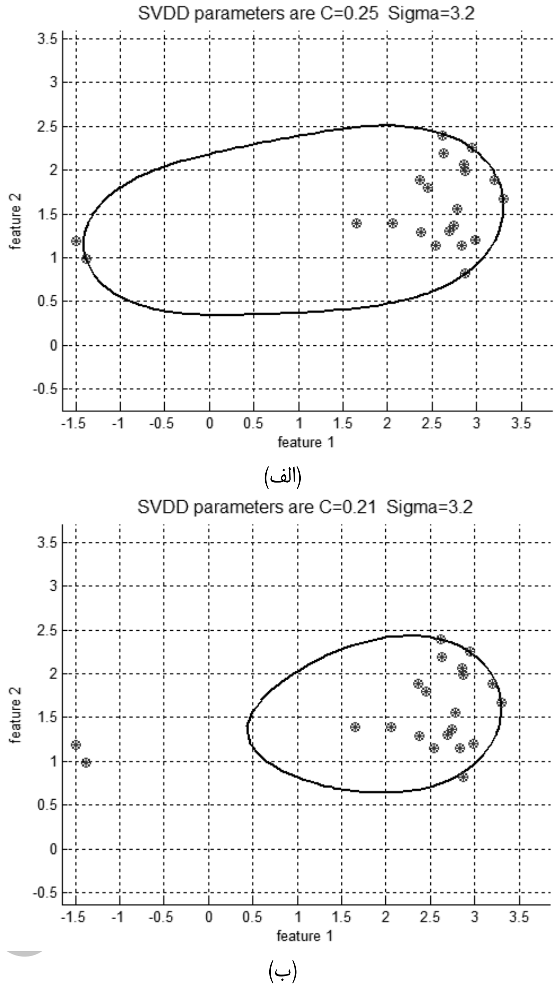
رایج‌ترین توابع کرنل که به‌طور گسترده‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرند، توابع RBF و Polynomial هستند. ضابطه این توابع به‌صورت (۱۲) و (۱۳) است

$$K(x,y) = e^{-\frac{\|x-y\|^2}{\sigma^2}} \qquad (۱۲)$$

$$K(x,y) = (1 + x.y)^p \qquad (۱۳)$$

پارامترهای مدل در محاسبه مرز طبقه‌بند تک‌کلاسه SVDD مؤثر هستند. چنانچه نمونه‌های یادگیری شکل ۱ با استفاده از کرنل RBF و پارامتر $\sigma = 1$ به فضای ویژگی نگاشت شوند و پارامتر C برابر ۱ در نظر گرفته شود، مرز طبقه‌بند مطابق شکل ۳ به‌دست می‌آید که در مقایسه با مرز شکل ۱ انعطاف‌پذیرتر است و نواحی نامطلوب و غیرچگال را به‌طور مناسبی از قلمروی کلاس هدف خارج کرده است.

همچنان که قبلاً اشاره شد، در طبقه‌بند SVDD برای خنثی‌کردن اثر نامطلوب نمونه‌های نویزی یا پرت، امکان پذیرش خطای یادگیری پیش‌بینی شده است. وظیفه تنظیم خطای یادگیری بر عهده پارامتر C است. در صورتی که این پارامتر به‌گونه‌ای تنظیم شود که این نمونه‌ها از داخل ابرکره خارج شوند، طبقه‌بند سوم از (۸) و (۵) این نمونه‌ها بر مرکز ابرکره اثرگذار هستند و مرز طبقه‌بند را به سمت خودشان متمایل می‌کنند. به‌عنوان مثال در شکل ۴ می‌توان دو نمونه را که در سمت چپ و فاصله دوری از بقیه قرار دارند، نویزی یا پرت تلقی کرد. برای غلبه بر تأثیر نامطلوب این نمونه‌ها اقدام به کاهش پارامتر C می‌شود. در اولین کاهش که در شکل ۴- الف مشاهده می‌شود، تنها یک نمونه یادگیری از قلمروی



شکل ۴: (الف) $C=0/25$ و (ب) $C=0/21$. برای پیاده‌سازی SVDD از کرنل RBF با پارامتر $\sigma=1$ استفاده شده است. برای غلبه بر نمونه‌های پرت پارامتر C تدریجاً کاهش می‌یابد. در شکل ۴- ب وجود خروج نمونه‌های یادگیری نویزی از داخل مرزها، همچنان مرزها به سمت این نمونه‌های یادگیری کشیدگی دارند.

کلاس خارج شده و مطابق شکل ۴- ب، بعد از دومین کاهش این نمونه‌ها از کره بیرون افتاده‌اند. لیکن هنوز مرز طبقه‌بند به سمت این نمونه‌ها تمایل و کشیدگی دارد که علت آن را می‌توان در (۵) ملاحظه کرد. در این فرمول روشن است که همه نمونه‌ها بر مرکز و مرز تأثیر می‌گذارند. این مرز با شکل توزیع نمونه‌های یادگیری همخوانی ندارد و ممکن است به خطای منفی- اشتباه منجر شود.

۲-۲ طبقه‌بند ماشین بردار پشتیبان مبتنی بر چگالی DSVDD

این طبقه‌بند در سال‌های ۲۰۰۵ تا ۲۰۰۷ پیشنهاد شد و ارتقا یافت [۳] و [۸]. در مدل پیشنهادشده با هدف دورکردن مرز طبقه‌بند از ناحیه‌های چگال، ابتدا به هر نمونه یادگیری یک چگالی محلی نسبت داده می‌شود. سپس قیود مسأله بهینه‌سازی مرتبط با SVDD به‌گونه‌ای تغییر داده می‌شوند تا مرکز ابرکره به سمت نمونه‌های چگال‌تر رانده شود.

فرمول پیشنهادشده جهت محاسبه چگالی محلی به‌صورت (۱۴) است

$$\rho_i = \exp\left(\omega \times \frac{MEAN^K}{d(x_i, x_i^K)}\right),\ i=1,\dots,n,\ 0 \le \omega \le 1 \qquad (۱۴)$$

که در آن n تعداد نمونه‌های یادگیری است، ω فاکتور وزن‌دهی نام دارد و $d(x_i, x_i^K)$ برابر فاصله نمونه iام از Kامین نزدیک‌ترین نمونه بوده و $MEAN^K$ برابر میانگین $d(x_i, x_i^K)$ها است. متغیرهای a و R به ترتیب مرکز و شعاع ابرکره هستند. مقادیر مناسب این متغیرها جواب‌های مسأله بهینه‌سازی زیر هستند

$$\begin{aligned} &\text{Minimize } R^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i \\ &\text{subject to } \rho_i \|x_i - a\|^2 \le R^2 + \xi_i\ ,\ \xi_i \ge 0\ ,\ i=1,\dots,n \end{aligned} \qquad (۱۵)$$

در این مسأله پارامتر C وظیفه تنظیم خطای یادگیری را بر عهده دارد و ρ_i بیانگر چگالی محلی تخصیص داده شده به هر نمونه یادگیری است. مطابق قیدهای این مسأله، بهینه‌سازی چنانچه برای نمونه یادگیری x_i رابطه $\rho_i (x_i - a)^T (x_i - a) \le R^2$ برقرار باشد، فاصله نمونه x_i از مرکز ابرکره از کسر R^2/ρ_i کمتر خواهد بود. بنابراین هر چه قدر که مقدار ρ_i بزرگ‌تر باشد، تأکید بیشتری برای حضور این نمونه در نزدیکی مرکز ابرکره وجود دارد. در نتیجه نمونه‌های چگال نسبت به نمونه‌های غیر چگال فاصله کمتری از مرکز کره خواهند داشت.

۲-۳ طبقه‌بند ماشین بردار پشتیبان مبتنی بر چگالی با نمونه‌های منفی NDSVDD

در طبقه‌بند NDSVDD نمونه‌های منفی در فرایند یادگیری دخالت دارند [۹]. مطابق این مدل ضمن جستجوی ابرکره‌ای با حداقل شعاع که پوشش‌دهنده نمونه‌های یادگیری مثبت بوده و از پذیرش نمونه‌های یادگیری منفی خودداری کند، به چگالی محلی نمونه‌های یادگیری مثبت و منفی اهمیت داده شده است. در رابطه زیر، متغیرهای a و R به ترتیب مرکز و شعاع ابرکره مورد نظر هستند. مقادیر مناسب این متغیرها جواب‌های مسأله بهینه‌سازی زیر است

$$\begin{aligned} &\text{Minimize } R^2 + C_1\sum_{i=1}^{n}\xi_i^+ + C_2\sum_{l=1}^{m}\xi_l^- \\ &\text{subject to } \begin{cases} \rho_i \|x_i - a\|^2 \le R^2 + \xi_i^+ \\ \quad ,\ \xi_i^+ \ge 0\ ,\ i=1,\dots,n \\ \rho_l \|x_l - a\|^2 \ge R^2 - \xi_l^- \\ \quad ,\ \xi_l^- \ge 0\ ,\ l=1,\dots,m \end{cases} \end{aligned} \qquad (۱۶)$$

در این مسأله پارامترهای C_1 و C_2 وظیفه تنظیم خطای یادگیری را بر عهده دارند و ضریب ρ_i متناظر با چگالی نمونه‌های یادگیری مثبت و ضریب ρ_l متناظر با چگالی نمونه‌های یادگیری منفی است.

مشکل این روش کسری‌بودن تابع هدف مسأله بهینه‌سازی دوگان آن است. حل‌کردن این مسأله بهینه‌سازی در مقایسه با مسأله بهینه‌سازی دوگان SVDD به زمان بیشتری نیاز دارد و یک نقطه ضعف این روش است. نقطه ضعف دیگر این روش فاصله‌گرفتن مرز ابرکره از ناحیه‌های غیر چگال است. اهمیت این ضعف از آنجا روشن می‌شود که توجه کنیم که انتظار می‌رفت مرز طبقه‌بند فقط از ناحیه‌های چگال فاصله بگیرد.

در سال ۲۰۱۱ طبقه‌بندی به نام TC-SVDD با الهام از SVDD پیشنهاد شد. مطابق مدل پیشنهادشده فرض بر این است که داده‌های دو کلاس هدف در دسترس هستند ولی از نمونه‌های سایر کلاس‌ها اطلاع چندانی در دسترس نیست. با در نظر گرفتن این فرض و استفاده از طبقه‌بند NSVDD، طبقه‌بند دوکلاسه‌ای طراحی شد که ضمن جداسازی نمونه‌های دو کلاس از یکدیگر توان شناسایی نمونه‌های پرت را دارد.

در مقاله حاضر برای غلبه بر مشکل تأثیر نمونه‌های پرت بر مرز ابرکره، طبقه‌بند تک‌کلاسه گرانش‌گرای مبتنی بر SVDD معرفی می‌شود. در بخش بعد به بررسی روش پیشنهادی می‌پردازیم.

۳- روش پیشنهادی: طبقه‌بند تک‌کلاسه گرانش‌گرای مبتنی بر ماشین بردار پشتیبان

در این بخش دو مدل توسعه‌یافته از SVDD مطرح می‌شود تا نقاط ضعف آن را مرتفع نماید. ابتدا به معرفی روش GSVDD پرداخته و سپس به معرفی روش NGSVDD می‌پردازیم.

۳-۱ طبقه‌بند تک‌کلاسه مبتنی بر گرانش

در مدل پیشنهادی ضمن تلاش برای کاهش شعاع ابرکره، کمینه‌کردن فاصله مرکز ابرکره از مرکز گرانش اهمیت دارد. اهمیت قایل شدن برای مرکز گرانش باعث می‌شود مرکز ابرکره به نمونه‌های چگال نزدیک شده و در نتیجه مرز ابرکره از نمونه‌های چگال دور شود. علاوه بر این باعث مشارکت تمام نمونه‌ها در تعیین مرکز ابرکره و به تبع آن کاهش اثر نمونه‌های نویزی یا پرت در محاسبه مرز طبقه‌بند می‌شود.

مطابق ایده پیشنهادشده متغیرهای a و R به ترتیب مرکز و شعاع ابرکره هستند و از طریق حل مسأله بهینه‌سازی (۱۷) به‌دست می‌آیند

$$\begin{aligned}&\text{Minimize } R^2 + B\|\bar{x}-a\|^2\\&\text{subject to}\begin{cases}(x_i-a)^T(x_i-a)\le R^2\\ \xi_i\ge 0\ ,\ i=1,\dots,n\end{cases}\end{aligned} \quad (۱۷)$$

در این مسأله $\bar{x}$ مرکز گرانش نمونه‌های یادگیری است و B پارامتری است که درجه اهمیت مرکز گرانش نمونه‌های یادگیری را تعیین می‌کند. هر چه قدر این پارامتر بزرگ‌تر باشد، مرکز گرانش نقش بیشتری در تعیین مرکز ابرکره خواهد داشت. اگر مقدار پارامتر B برابر صفر باشد، طبقه‌بند پیشنهادشده به SVDD تبدیل می‌شود. بنابراین با معرفی روشی جدید که از لحاظ تعداد پارامترها نسبت به SVDD یک درجه آزادی بیشتر دارد، می‌توان به پیداکردن جواب‌هایی بهتر امیدوار شد.

فاصله مرکز ابرکره از مرکز گرانش را می‌توان به‌صورت (۱۸) بازنویسی کرد

$$\begin{aligned}\|\bar{x}-a\|^2 &= \left\|\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i}{n}-a\right\|^2=\frac{1}{n^2}\left\|\sum_{i=1}^{n}x_i-\sum_{i=1}^{n}a\right\|^2\\&=\frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(x_i-a).(x_j-a)\end{aligned} \quad (۱۸)$$

چنانچه کاهش اندازه ابرکره در قبال خطای یادگیری پذیرفتنی باشد، می‌توان با در نظر گرفتن (۱۸) و (۱۷)، مسأله بهینه‌سازی زیر را برای مدل‌کردن طبقه‌بند ارائه داد

$$\begin{aligned}&\text{Minimize } R^2+\frac{B}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(x_i-a).(x_j-a)+C\sum_{i=1}^{n}\xi_i\\&\text{subject to}\begin{cases}\|x_i-a\|^2\le R^2+\xi_i\\ \xi_i\ge 0\ ,\ i=1,\dots,n\end{cases}\end{aligned} \quad (۱۹)$$

ξ_iها متغیرهای کمبود هستند و پارامتر C وظیفه تنظیم خطای یادگیری را بر عهده دارد. برای حل (۱۹) تابع لاگرانژ به‌صورت زیر تشکیل می‌شود

$$\begin{aligned}L&=R^2+\frac{B}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(x_i-a).(x_j-a)+C\sum_{i=1}^{n}\xi_i\\&+\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(\|x_i-a\|^2-R^2-\xi_i)-\sum_{i=1}^{n}\gamma_i\xi_i\end{aligned} \quad (۲۰)$$

برای احراز شرط لازم KKT مطابق (۲۱) تا (۲۳)، از تابع لاگرانژ (۲۰) نسبت به متغیرهای (۱۹) مشتق گرفته شده و برابر صفر قرار داده می‌شود

$$\frac{\partial L}{\partial R}=0\Rightarrow 2R-2R\sum_{i=1}^{n}\alpha_i=0\Rightarrow\sum_{i=1}^{n}\alpha_i=1 \quad (۲۱)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_i}=0\Rightarrow \alpha_i+\gamma_i=C\Rightarrow 0\le\alpha_i\le C \quad (۲۲)$$

$$\begin{aligned}&\frac{\partial L}{\partial a}=0\Rightarrow\frac{B}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(-(x_i-a)-(x_j-a))\\&+\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(-2(x_i-a))=0\Rightarrow a=\frac{\sum_{i=1}^{n}(\alpha_i+\frac{B}{n})x_i}{1+B}\end{aligned} \quad (۲۳)$$

بعد از جایگذاری مقادیر به‌دست آمده بالا در (۲۰)، دوگان (۱۹) به‌صورت زیر به‌دست می‌آید

$$\begin{aligned}&\text{Maximize}\frac{1}{1+B}(-2\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i x_i.x_j-\frac{B^2}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}x_i.x_j\\&-\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j x_i.x_j)+\sum_{i=1}^{n}\alpha_i x_i.x_i+\frac{B}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}x_i.x_j\\&\text{subject to}\begin{cases}\sum_{i=1}^{n}\alpha_i=1\\ 0\le\alpha_i\le C\ ,\ i=1,\dots,n\end{cases}\end{aligned} \quad (۲۴)$$

پس از حل مسأله بهینه‌سازی بالا، اغلب ضرایب α_i برابر صفر خواهند شد و تنها تعداد محدودی از آنها مقدار غیر صفر اختیار می‌کنند. روابط بین ضرایب لاگرانژ و موقعیت نمونه‌های یادگیری نسبت به ابرکره، در یکی از شرط‌های زیر صدق می‌کنند

$$\begin{aligned}&\|x_i-a\|^2<R^2\Leftrightarrow\alpha_i=0\qquad ,\ \xi_i=0\\&\|x_i-a\|^2=R^2\Leftrightarrow 0<\alpha_i<C\ ,\ \xi_i=0\\&\|x_i-a\|^2>R^2\Leftrightarrow\alpha_i=C\qquad ,\ \xi_i>0\end{aligned} \quad (۲۵)$$

با در اختیار داشتن ضرایب α_i، فاصله هر نمونه z از مرکز کره، توسط (۲۶) محاسبه می‌شود

$$\begin{aligned}\|z-a\|^2&=z.z-\frac{2}{B+1}(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i x_i.z+\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i.z)\\&+\frac{1}{(B+1)^2}[\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j x_i.x_j+\frac{B^2}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}x_i.x_j\\&+2\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i x_i.x_j]\end{aligned} \quad (۲۶)$$

همچنان که مشاهده می‌شود برای محاسبه فاصله نمونه z تا مرکز ابرکره لازم است که عبارت $(B/n)\sum_{i=1}^{n}x_i z$ محاسبه شود. بنابراین اگر B مخالف صفر باشد، تمام نمونه‌های یادگیری در محاسبات مربوط به طبقه‌بندی دخالت دارند و نمی‌توان این روش را در دسته ماشین‌های بردار پشتیبان طبقه‌بندی کرد.

برای محاسبه R^2 کافی است یکی از نمونه‌هایی را که مطابق بند دوم (۲۲) بر روی مرز ابرکره واقع شده، انتخاب و در (۲۳) جایگزین کرد. برای بررسی تعلق یک نمونه تست به کلاس هدف کافی است که فاصله‌اش تا مرکز محاسبه شده و با R^2 مقایسه گردد. چنانچه فاصله نمونه از مرکز a کمتر از R^2 باشد، نمونه تست به‌عنوان نمونه‌ای از آن کلاس پذیرفته می‌شود. همچنین با در نظر گرفتن مسأله بهینه‌سازی (۲۴) و مشاهده عبارت‌های ضرب نقطه‌ای بین نمونه‌های یادگیری، می‌توان نتیجه گرفت که GSVDD مانند SVDD قابلیت استفاده از توابع کرنل را دارا می‌باشد

و به واسطه این خصوصیت می‌توان مرز انعطاف‌پذیر و مناسبی را برای کلاس هدف محاسبه کرد. برای تحقق این هدف کافی است در مسأله بهینه‌سازی (۲۴) به‌جای هر عبارت $x.y$ تابع $K(x,y)$ جایگزین گردد.

۳-۲ طبقه‌بند تک‌کلاسه مبتنی بر گرانش با نمونه‌های منفی

چنانچه تعدادی از نمونه‌های یادگیری پرت در دسترس باشند، می‌توان GSVDD را به‌گونه‌ای توسعه داد که نمونه‌های پرت در فرایند یادگیری دخالت داشته باشند. مدل پیشنهادی به‌صورت مسأله بهینه‌سازی زیر ارائه می‌شود

$$\text{Minimize } R^2 + C_1\sum_{i=1}^{n}\xi_i^+ + C_2\sum_{l=1}^{m}\xi_l^- + \frac{B}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(x_i-a).(x_j-a) \quad (۲۷)$$

$$\text{subject to}\begin{cases}\|x_i-a\|^2 \le R^2+\xi_i^+ \\ ,\ \xi_i^+ \ge 0\ ,\ i=1,\dots,n \\ \|x_l-a\|^2 \ge R^2-\xi_l^- \\ ,\ \xi_l^- \ge 0\ ,\ l=1,\dots,m\end{cases}$$

مطابق این مسأله بهینه‌سازی، ضمن جستجوی ابرکره‌ای با حداقل شعاع که پوشش‌دهنده نمونه‌های یادگیری مثبت باشد و از پذیرش نمونه‌های یادگیری منفی خوداری کند، به مرکز گرانش نمونه‌های یادگیری مثبت نیز اهمیت داده می‌شود. در روش پیشنهادشده با استفاده از متغیرهای کمبود ξ_i^+ و ξ_l^- اجازه وقوع خطای یادگیری صادر شده است تا امکان غلبه بر نمونه‌های نویزی و پرت وجود داشته باشد. در این مسأله پارامترهای C_1 و C_2 وظیفه تنظیم خطای یادگیری را بر عهده دارند. برای حل این مسأله کافی است که تابع لاگرانژ مسأله (۲۴) به‌صورت (۲۸) تشکیل شود

$$\begin{aligned}L = {} & R^2 + C_1\sum_{i=1}^{n}\xi_i^+ + C_2\sum_{l=1}^{m}\xi_l^- \\ & + \sum_{i=1}^{n}\alpha_i(\|x_i-a\|^2 - R^2 - \xi_i^+) - \sum_{i=1}^{n}\gamma_i\xi_i^+ \\ & + \sum_{l=1}^{m}\beta_l(-\|x_l-a\|^2 + R^2 - \xi_l^-) - \sum_{l=1}^{m}\eta_l\xi_l^- \\ & + \frac{B}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(x_i-a).(x_j-a)\end{aligned} \quad (۲۸)$$

برای تحقق شرط لازم KKT، مطابق (۲۹) تا (۳۲) از تابع لاگرانژ فوق نسبت به متغیرهای (۲۷) مشتق‌گیری شده و برابر صفر قرار داده می‌شود

$$\frac{\partial L}{\partial R} = 2R(1-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i + \sum_{l=1}^{m}\beta_l) = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{n}\alpha_i - \sum_{l=1}^{m}\beta_l = 1 \quad (۲۹)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial a} = {} & 2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i(x_i-a) - 2\sum_{l=1}^{m}\beta_l(x_l-a) \\ & + \frac{B}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(-(x_i-a)-(x_j-a)) = 0\end{aligned} \quad (۳۰)$$

$$\Rightarrow a = \frac{\sum_{i=1}^{n}\alpha_i x_i - \sum_{l=1}^{m}\beta_l x_l + \frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i}{1+B}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_i^+} = 0 \Rightarrow \alpha_i + \gamma_i = C_1 \quad (۳۱)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_l^-} = 0 \Rightarrow \beta_l + \eta_l = C_2 \quad (۳۲)$$

بعد از جایگذاری روابط به‌دست آمده بالا در تابع لاگرانژ (۲۵)، دوگان مسأله بهینه‌سازی (۲۴) به‌صورت زیر ظاهر می‌شود

$$\begin{aligned}\text{Maximize} - \frac{1}{1+B}\{ & 2\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i x_i.x_j \\ & - 2\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{m}\beta_l x_i.x_l - 2\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{m}\alpha_i\beta_l x_i.x_l \\ & + \frac{B^2}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}x_i.x_j + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j x_i.x_j \\ & + \sum_{l=1}^{m}\sum_{p=1}^{m}\beta_l\beta_p x_l.x_p\} \\ & + \sum_{i=1}^{n}\alpha_i x_i.x_i - \sum_{l=1}^{m}\beta_l x_l.x_l \\ & + \frac{B}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}x_i.x_j\end{aligned}$$

$$\text{subject to}\begin{cases}\sum_{i=1}^{n}\alpha_i - \sum_{l=1}^{m}\beta_l = 1 \\ 0 \le \alpha_i \le C_1\ ,\ i=1,\dots,n \\ 0 \le \beta_l \le C_2\ ,\ l=1,\dots,m\end{cases} \quad (۳۳)$$

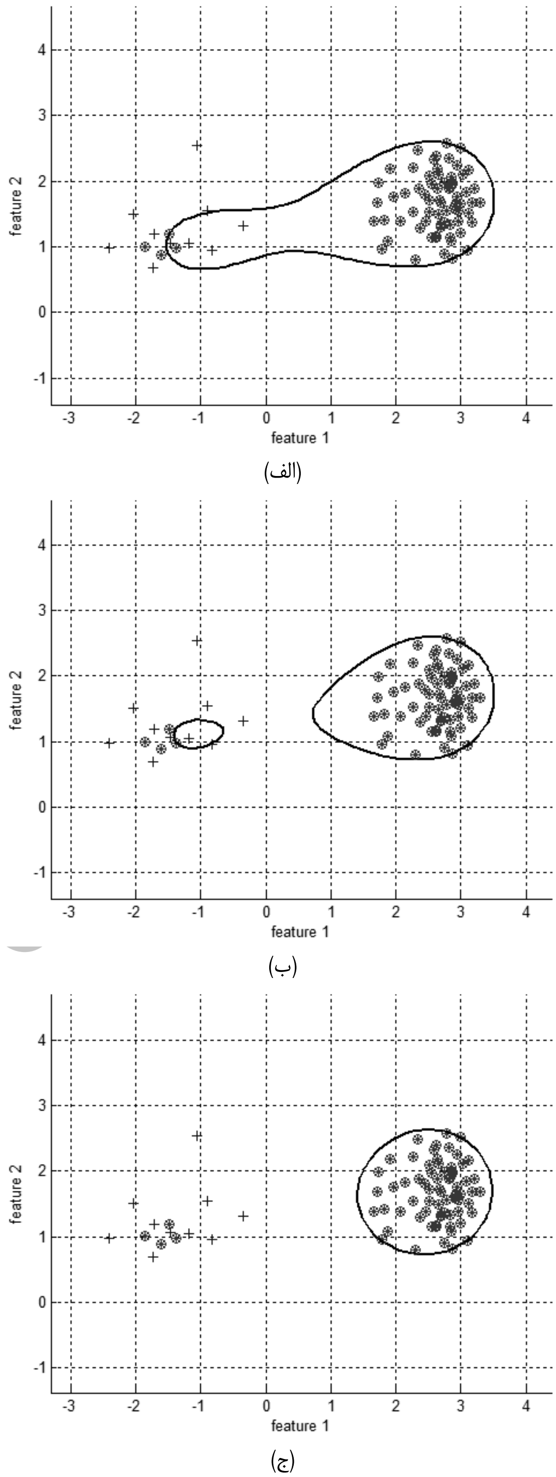
برای سادگی و سهولت کارکردن با فرمول مسأله، می‌توان آن را به‌صورت زیر بازنویسی کرد

$$\begin{aligned}\text{Maximize} - \frac{1}{1+B}\{ & +2\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i x_i.x_j \\ & + \sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n+m}\alpha_i\alpha_j x_i.x_j + \frac{B^2}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}x_i.x_j\} \\ & + \sum_{i=1}^{n+m}\alpha_i x_i.x_i + \frac{B}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}x_i.x_j\end{aligned} \quad (۳۴)$$

$$\text{subject to}\begin{cases}\sum_{i=1}^{n+m}\alpha_i = 1 \\ 0 \le \alpha_i \le C_1\ ,\ i=1,\dots,n \\ 0 \le -\alpha_i \le C_2\ ,\ i=n+1,\dots,m\end{cases}$$

در این مسأله نمونه‌های با اندیس بین ۱ تا n، نمونه‌های مثبت و نمونه‌های با اندیس بین $n+1$ تا $n+m$، نمونه‌های منفی هستند.

در شکل ۶ توانایی NGSVDD در مقایسه با NSVDD و SVDD به تصویر کشیده شده است. در این شکل نمونه‌های مثبت و منفی به ترتیب با علامت‌های دایره و + مشخص شده‌اند و فرض شده که چهار عدد نمونه دایره که در سمت چپ قرار دارند، نمونه‌های پرت هستند که اشتباهاً به‌عنوان نمونه مثبت برچسب‌گذاری شده‌اند. در شکل ۵- الف مرز طبقه‌بند SVDD برای توصیف کلاس هدف رسم شده است. مطابق این شکل به‌دلیل حضور نمونه‌های پرت در بین نمونه‌های مثبت، مرز به‌دست آمده چندان مناسب نیست. برای غلبه بر این مشکل از طبقه‌بند NSVDD استفاده شده و مرز آن در شکل ۵- ب به تصویر کشیده شده است. در این شکل مرز محاسبه‌شده نسبت به مرز SVDD مناسب‌تر است ولی هنوز تحت تأثیر نمونه‌های پرت قرار دارد. در نهایت از روش NGSVDD برای محاسبه مرز شکل ۵-ج استفاده شده است. همان طور



شکل ۵: (الف) SVDD، $\sigma=۳$ و $C=۰/۲۱$، (ب) NSVDD، $\sigma=۳$، $C_۲=۰/۲$ و $C_۱=۰/۲۱$ و (ج) NGSVDD، $\sigma=۳$، $C_۲=۰/۲$، $C_۱=۰/۲۱$ و $B=۴$.

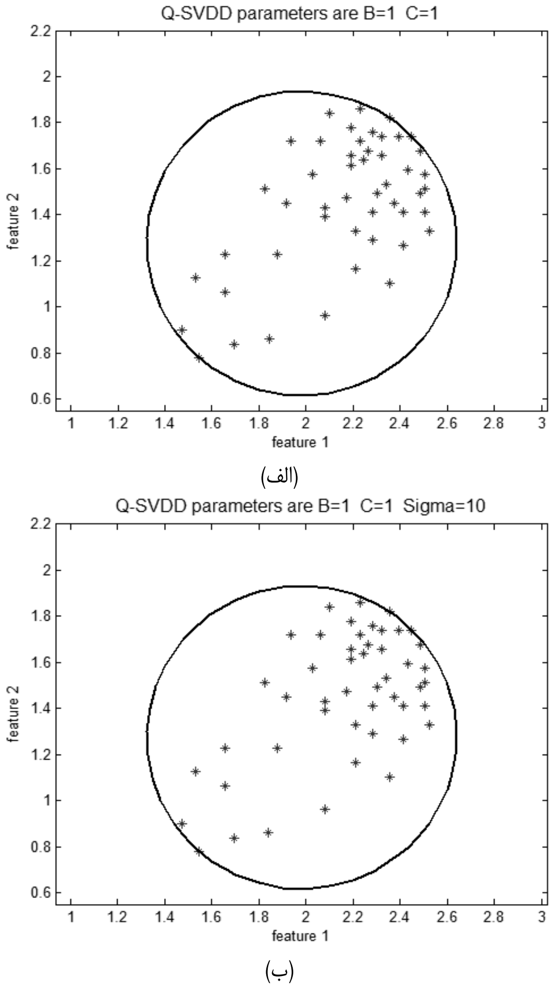
که مشاهده می‌شود، مرز محاسبه‌شده در مقایسه با مرزهای حاصل از NSVDD وSVDD مناسب‌تر و بهتر است.

۳-۳ تأثیر تغییرات پارامترها بر رفتار طبقه‌بند NGSVDD

به منظور بررسی تأثیر تغییرات پارامترها بر رفتار کرنل ابتدا به سراغ رابطه پارامتر σ کرنل RBF و طبقه‌بند NGSVDD رفته و رفتار طبقه‌بند با تغییر این پارامترها بررسی می‌شود.

۳-۳-۱ رابطه پارامتر σ کرنل RBF و طبقه‌بند NGSVDD

بسط تیلور کرنل RBF را به‌صورت رابطه زیر داریم



شکل ۶: (الف) مرز طبقه‌بند به‌طور مستقیم در فضای ورودی محاسبه شده است و (ب) مرز طبقه‌بند با استفاده از کرنل RBF و پارامتر $\sigma=۱۰$ محاسبه شده است.

$$K(x_i,x_j)=\exp\left(-\frac{\|x_i-x_j\|^۲}{\sigma^۲}\right) = ۱-\frac{\|x_i\|^۲}{\sigma^۲}-\frac{\|x_j\|^۲}{\sigma^۲}+۲\frac{x_i.x_j}{\sigma^۲}+\ldots \qquad (۳۵)$$

چنانچه نمونه‌های یادگیری با استفاده از کرنل RBF به فضای ویژگی نگاشت شوند، می‌توان تابع هدف مسأله بهینه‌سازی (۳۴) را پس از تعویض عبارت‌های ضرب نقطه‌ای با سمت راست (۳۵) به‌صورت تابع (۳۶) بازنویسی کرد

$$\begin{aligned} L=&-\frac{۱}{۱+B}???\\ &\{۲\frac{B}{n}\sum_{i=۱}^{n+m}\sum_{j=۱}^{n}\alpha_i(۱-\frac{\|x_i\|^۲}{\sigma^۲}-\frac{\|x_j\|^۲}{\sigma^۲}+۲\frac{x_i.x_j}{\sigma^۲}+\ldots)\\ &+\sum_{i=۱}^{n+m}\sum_{j=۱}^{n+m}\alpha_i\alpha_j(۱-\frac{\|x_i\|^۲}{\sigma^۲}-\frac{\|x_j\|^۲}{\sigma^۲}+۲\frac{x_i.x_j}{\sigma^۲}+\ldots)\\ &+\frac{B^۲}{n^۲}\sum_{i=۱}^{n}\sum_{j=۱}^{n}(۱-\frac{\|x_i\|^۲}{\sigma^۲}-\frac{\|x_j\|^۲}{\sigma^۲}+۲\frac{x_i.x_j}{\sigma^۲}+\ldots)\}\\ &+\sum_{i=۱}^{n+m}\alpha_i+\frac{B}{n^۲}\sum_{i=۱}^{n}\sum_{j=۱}^{n}(۱-\frac{\|x_i\|^۲}{\sigma^۲}-\frac{\|x_j\|^۲}{\sigma^۲}+۲\frac{x_i.x_j}{\sigma^۲}+\ldots) \end{aligned} \qquad (۳۶)$$

تابع (۳۶) باید نسبت به ضرایب لاگرانژ ماکزیمم شود، پس می‌توان تمام یا بعضی از عبارات مستقل از این ضرایب را حذف کرد. بعد از حذف عبارات مستقل از ضرایب لاگرانژ به‌جز $2(B^2/n^2)\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} x_i.x_j/\sigma^2$، (۳۷) به‌دست می‌آید

$$\begin{aligned} L = -\frac{1}{1+B}\{&4\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\frac{x_i.x_j}{\sigma^2} \\ &+2\frac{B^2}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{x_i.x_j}{\sigma^2}+2\sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n+m}\alpha_i\alpha_j\frac{x_i.x_j}{\sigma^2}\} \\ &+\frac{1}{1+B}\{+2\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\left(\frac{\|x_i\|^2}{\sigma^2}+\frac{\|x_j\|^2}{\sigma^2}\right) \\ &+\sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n+m}\alpha_i\alpha_j\left(\frac{\|x_i\|^2}{\sigma^2}+\frac{\|x_j\|^2}{\sigma^2}\right)\}+\ldots \end{aligned} \qquad (۳۷)$$

پس از انجام ساده‌سازی‌های متوالی و حذف مجدد عبارات مستقل از ضرایب لاگرانژ، طبق (۳۸) تا (۴۰) خواهیم داشت

$$\begin{aligned} L = -\frac{1}{1+B}\{&4\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\frac{x_i.x_j}{\sigma^2} \\ &+2\frac{B^2}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{x_i.x_j}{\sigma^2}+2\sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n+m}\alpha_i\alpha_j\frac{x_i.x_j}{\sigma^2}\} \\ &+2\frac{B}{B+1}\sum_{i=1}^{n+m}\alpha_i\frac{\|x_i\|^2}{\sigma^2}+2\frac{1}{B+1}\sum_{i=1}^{n+m}\alpha_i\frac{\|x_i\|^2}{\sigma^2}+\ldots \end{aligned} \qquad (۳۸)$$

$$\begin{aligned} L = -\frac{1}{1+B}\{&4\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i\frac{x_i.x_j}{\sigma^2} \\ &+2\frac{B^2}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{x_i.x_j}{\sigma^2}+2\sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n+m}\alpha_i\alpha_j\frac{x_i.x_j}{\sigma^2}\} \\ &+2\sum_{i=1}^{n+m}\alpha_i\frac{\|x_i\|^2}{\sigma^2}+\ldots \end{aligned} \qquad (۳۹)$$

پس از ضرب عبارت بالا در $\sigma^2/2$ عبارت زیر حاصل می‌شود

$$\begin{aligned} L = -\frac{1}{1+B}\{&2\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n}\alpha_i x_i.x_j \\ &+\frac{B^2}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}x_i.x_j+\sum_{i=1}^{n+m}\sum_{j=1}^{n+m}\alpha_i\alpha_j x_i.x_j\} \\ &+\sum_{i=1}^{n+m}\alpha_i x_i.x_i+\ldots \end{aligned} \qquad (۴۰)$$

چنانچه مقدار پارامتر σ به اندازه کافی بزرگ باشد، در (۴۰) جملات مرتبه بالا به سمت صفر میل می‌کنند و می‌توان از آنها صرف نظر کرد. در این صورت (۴۰) (پس از الحاق عبارت مستقل از ضریب لاگرانژ $(B/n^2)\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} x_i.x_j$) هم‌ارز تابع هدف (۳۴) می‌شود. به‌عبارت دیگر در صورت استفاده از کرنل RBF با مقادیر بزرگ σ، مسأله بهینه‌سازی در فضای ویژگی به مسأله بهینه‌سازی در فضای ورودی تبدیل شده و مرز محاسبه‌شده یک ابرکره خواهد بود.

به‌عنوان مثال در شکل ۶- الف مرز طبقه‌بند در فضای ورودی محاسبه و ترسیم شده و مرز شکل ۶- ب با استفاده از کرنل RBF به‌ازای مقادیر بزرگ σ به تصویر کشیده شده است. همچنان که مشاهده می‌شود برای مقادیر بزرگ σ مرز محاسبه‌شده مانند مرزی است که در فضای ورودی محاسبه گردیده است. بنابراین می‌توان این گونه نتیجه گرفت که مرز این طبقه‌بند به‌ازای مقادیر بزرگ σ بسیار ساده بوده و پدیده سادگی مرز را به‌وجود می‌آورد.

حال چنانچه پارامتر σ به سمت صفر میل داده شود، رابطه زیر درباره کرنل RBF برقرار است

$$\lim_{\sigma\to 0} K(x_i,x_j)=\exp\left(-\frac{\|x_i-x_j\|^2}{\sigma^2}\right)=0\ ,\ \forall i\neq j \qquad (۴۱)$$

بنابراین در صورت استفاده از کرنل RBF با مقادیر کوچک σ و جایگزینی آن با عبارت‌های ضرب نقطه‌ای، مسأله بهینه‌سازی (۳۴) به مسأله زیر تبدیل می‌شود

$$\begin{aligned} &\text{Maximize} -\frac{1}{1+B}\left(+2\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n}\alpha_i+\sum_{i=1}^{n+m}\alpha_i^2\right) \\ &\text{subject to}\begin{cases}\sum_{i=1}^{n+m}\alpha_i=1 \\ 0\le\alpha_i\le C_1\ ,\ i=1,\ldots,n \\ 0\le-\alpha_i\le C_2\ ,\ i=n+1,\ldots,m\end{cases} \end{aligned} \qquad (۴۲)$$

این یک مسأله بهینه‌سازی محدب است و جواب بهینه منحصر به فرد دارد. از طرفی ساختار این مسأله به‌گونه‌ای است که به‌طور جداگانه نسبت به ضرایب لاگرانژ نمونه‌های مثبت و منفی متقارن است. لذا ضرایب لاگرانژ نمونه‌های مثبت با هم برابر هستند و با نماد α نشان داده می‌شوند. با استدلالی مشابه ضرایب لاگرانژ نمونه‌های منفی با نماد β نمایش داده می‌شوند و لذا مسأله بهینه‌سازی (۴۲) به مسأله بهینه‌سازی زیر تبدیل می‌شود

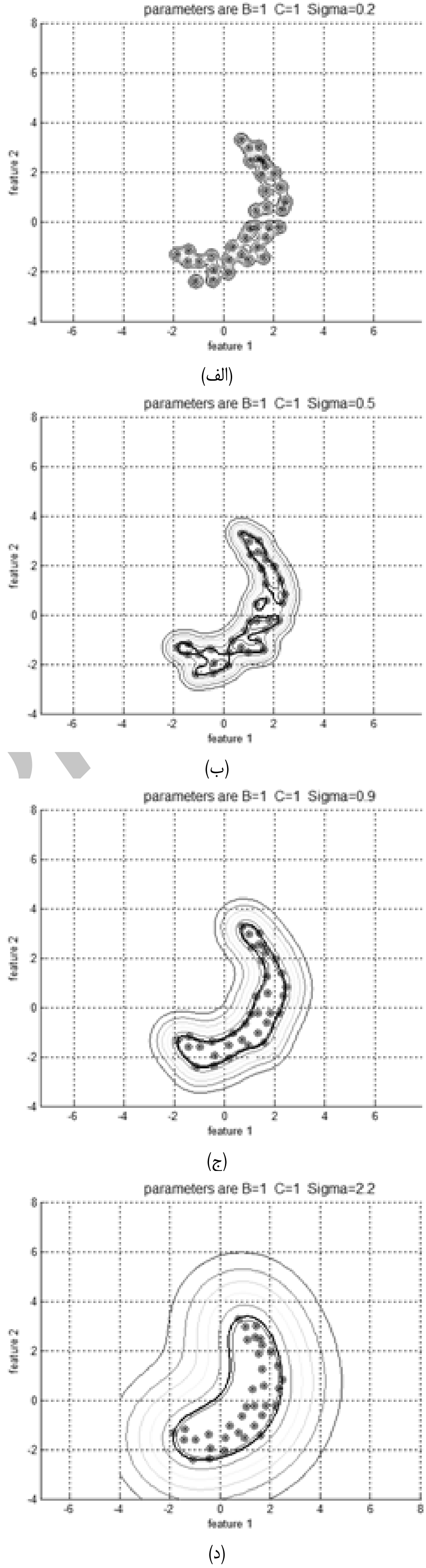
$$\begin{aligned} &\text{Maximize} -\frac{1}{1+B}\left(+2B\alpha+n\alpha^2+m\beta^2\right) \\ &\text{subject to}\begin{cases}n\alpha+m\beta=1 \\ 0\le\alpha\le C_1 \\ 0\le\beta\le C_2\end{cases} \end{aligned} \qquad (۴۳)$$

جواب بهینه (۴۳) در صورت وجود به‌صورت $\alpha_i=1/n\ ,\ i=1,\ldots,n$ و $\alpha_i=0\ ,\ i=n+1,\ldots,m$ خواهد بود. بنابراین هنگامی که پارامتر σ به سمت صفر میل می‌کند، نمونه‌های مثبت به‌صورت مساوی در تعیین مرکز ابرکره دخالت دارند و نمونه‌های منفی بی‌اثر هستند. با توجه به این که در این حالت ضرایب لاگرانژ نمونه‌های مثبت مقداری غیر صفر است، مرز طبقه‌بند از روی تمام نمونه‌های یادگیری عبور می‌کند و به نوعی وضعیت پیچیدگی مرز را به‌وجود می‌آورد.

همچنین ثابت می‌شود که برای مقادیر میانی σ عملکرد GSVDD مشابه تخمین‌گر پارزن می‌شود. برای اثبات این ادعا کافی است که فاصله نمونه دلخواه z از مرکز ابرکره مطابق فرمول زیر محاسبه شود

$$\begin{aligned} \|z-a\|^2 &= \left\|z-\frac{\sum_{i=1}^{n}\alpha_i x_i+\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i}{1+B}\right\|^2 = z.z \\ &-2\times\frac{\sum_{i=1}^{n}\alpha_i z.x_i+\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n}z.x_i}{1+B}+\left\|\frac{\sum_{i=1}^{n}\alpha_i x_i+\frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i}{1+B}\right\|^2 \end{aligned} \qquad (۴۴)$$

در صورت استفاده از کرنل RBF و ثابت در نظر گرفتن جملات مستقل از z خواهیم داشت



شکل ۷: تغییرات مرز طبقه‌بند GSVDD در مقابل تغییرات پارامتر σ، (الف) $\sigma=۰/۲$، (ب) $\sigma=۰/۵$، (ج) $\sigma=۰/۹$ و (د) $\sigma=۲/۲$.

$$\|z-a\|^{۲} = \text{constant} - \frac{۲}{۱+B}\times\left(\sum_{i=۱}^{n}\alpha_i e^{-\frac{\|z-x_i\|^{۲}}{\sigma^{۲}}} + \frac{B}{n}\sum_{i=۱}^{n} ???^{-\frac{\|z-x_i\|^{۲}}{\sigma^{۲}}}\right) \quad (۴۵)$$

چنانچه مقدار محاسبه‌شده توسط (۴۵) کمتر از شعاع $R^{۲}$ باشد، نمونه z در داخل ابرکره قرار دارد و بنابراین می‌توان مسأله تعلق یک نمونه به کلاس هدف را به‌صورت ضابطه تصمیم (۴۶) در نظر گرفت

$$\text{if } \sum_{i=۱}^{n}(\alpha_i+\frac{B}{n})e^{-\frac{\|z-x_i\|^{۲}}{\sigma^{۲}}} > (\text{constant}-R^{۲})\times\frac{B+۱}{۲} \quad (۴۶)$$
$$\text{then } z \text{ belongs to target class}$$

در این ضابطه عبارت $\sum_{i=۱}^{n}(\alpha_i+B/n)\exp(-\|z-x_i\|^{۲}/\sigma^{۲})$ تابع تخمین‌گر پارزن را در ذهن تداعی می‌کند. لکن همان طور که در قسمت‌های بعدی توضیح داده خواهد شد، پارامتر B می‌تواند مقادیر منفی بزرگ‌تر از ۱- را اختیار کند. لذا ضابطه تصمیم (۴۶) حالتی فراگیرتر نسبت به پارزن دارد و ضرایب متناظر نمونه‌های داخلی می‌توانند مقادیر منفی هم اختیار کنند در حالی که در مورد پارزن این ویژگی مصداق ندارد.

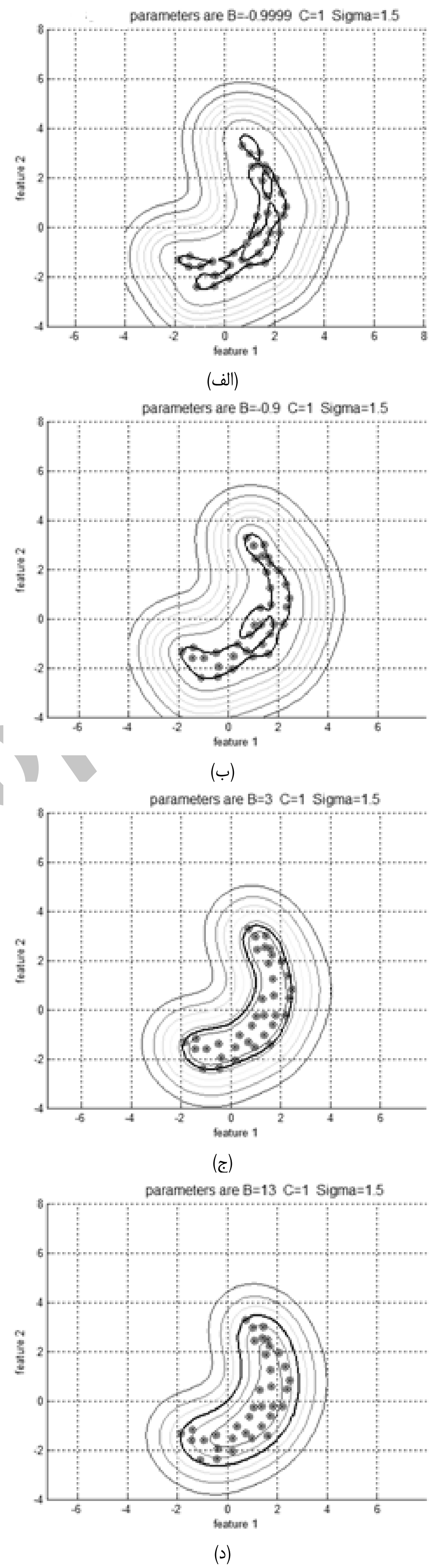
در این قسمت تغییرات مرز طبقه‌بند GSVDD در مقابل تغییرات پارامتر σ به تصویر کشیده می‌شود. در مجموعه شکل‌های ۷ مقدار پارامتر σ تدریجاً افزایش می‌یابد. برای مقادیر بسیار کوچک σ پدیده پیچیدگی مرز رخ داده است و با افزایش σ به تدریج پیچیدگی مرز کمتر می‌شود. برای مقادیر میانی این پارامتر می‌توان تعمیم مناسبی را برای طبقه‌بند متصور شد و به‌ازای مقادیر بزرگ‌تر σ شکل مرزها به سمت سادگی میل می‌کند.

۳-۳-۲ بررسی رابطه پارامتر B و تأثیر تغییرات آن بر مرز طبقه‌بند NGSVDD

پارامتر B بیانگر وزن و اهمیت مرکز گرانش نمونه‌های یادگیری است. از مسأله بهینه‌سازی (۳۴) دیده می‌شود که این مسأله به‌ازای مقادیر B بزرگ‌تر از ۱-، به یک مسأله بهینه‌سازی محدب تبدیل می‌شود. چنانچه پارامتر $B=۰$ باشد، مدل پیشنهادی NGSVDD به مدل NSVDD تبدیل می‌شود. اگر $B>۰$ باشد، به این معنی است که کاهش فاصله بین مرکز کره و مرکز گرانش دارای اهمیت است و اگر $-۱<B<۰$ برقرار باشد به این معنی است که دورشدن از مرکز گرانش ترجیح داده می‌شود. به‌عبارتی دیگر چنانچه پارامتر B مقادیر منفی اختیار شود، امکان گریز از مرکز گرانش فراهم شده است. پارامتر B همانند پارامتر σ کرنل RBF وظیفه برقراری تعمیم را بر عهده دارد. به عبارتی دیگر با پیداکردن مقدار مناسب پارامتر B می‌توان عملکرد NGSVDD را بر روی داده‌های دیده‌نشده بهبود داد. چنانچه پارامتر B به اندازه کافی بزرگ باشد، مسأله بهینه‌سازی (۳۴) به مسأله بهینه‌سازی خطی زیر تبدیل می‌شود

$$\text{Maximize} -\frac{۲}{n}\sum_{i=۱}^{n+m}\sum_{j=۱}^{n}\alpha_i x_i.x_j + \sum_{i=۱}^{n+m}\alpha_i x_i.x_i$$
$$\text{subject to} \begin{cases} \sum_{i=۱}^{n+m}\alpha_i = ۱ \\ ۰ \le \alpha_i \le C_۱ \ , \ i=۱,\dots,n \\ ۰ \le -\alpha_i \le C_۲ \ , \ i=n+۱,\dots,m \end{cases} \quad (۴۷)$$

تحت این شرایط مطابق (۴۸) مرکز ابرکره بر مرکز گرانش منطبق می‌شود و ضرایب لاگرانژ، نقشی در تعیین مرکز ابرکره نخواهند داشت



شکل ۸: تغییرات مرز طبقه‌بند GSVDD در مقابل تغییرات پارامتر B، (الف) $B=-0.9999$، (ب) $B=-0.9$، (ج) $B=3$ و (د) $B=13$.

$$\lim_{B\to\infty} a = \lim_{B\to\infty} \frac{\sum_{i=1}^{n}\alpha_i x_i - \sum_{l=1}^{m}\beta_l x_l + \frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i}{1+B} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i = \bar{x} \qquad (۴۸)$$

همچنین اگر از کرنل RBF برای نگاشت غیر خطی نمونه‌ها استفاده شود، مسأله بهینه‌سازی (۳۴) را می‌توان به‌صورت مسأله بهینه‌سازی زیر بازنویسی کرد. این یک مسأله بهینه‌سازی محدب است که دارای جواب بهینه سراسری است

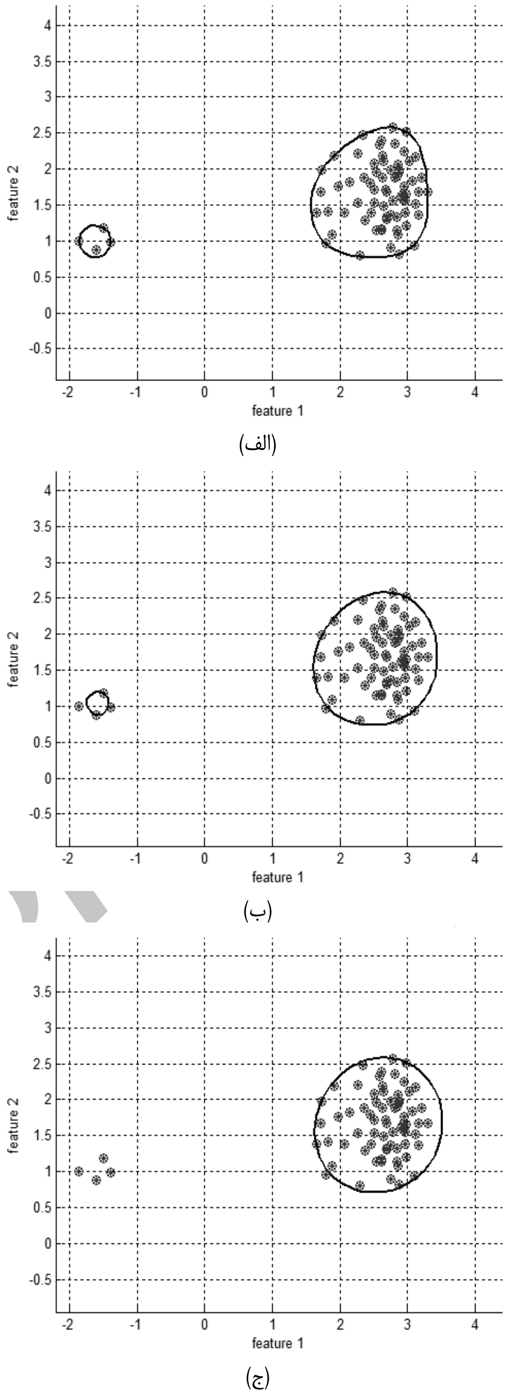
$$\text{Maximize} - \frac{1}{1+B}\left\|\sum_{i=1}^{n+m}\alpha_i\phi(x_i) + \frac{B}{n}\sum_{i=1}^{n}\phi(x_i)\right\|^2$$
$$\text{subject to} \begin{cases} \sum_{i=1}^{n+m}\alpha_i = 1 \\ 0 \le \alpha_i \le C_1 \ , \ i = 1,\ldots,n \\ 0 \le -\alpha_i \le C_2 \ , \ i = n+1,\ldots,n+m \end{cases} \qquad (۴۹)$$

تحت این شرایط اگر $B \to -1^+$، مقدار بهینه تابع هدف مسأله (۴۹) به سمت صفر میل می‌کند و جواب‌های بهینه آن در رابطه‌های $\alpha_i = 1/n\,, i = 1,\ldots,n$ و $\alpha_i = 0\,, i = n+1,\ldots,n+m$ صدق خواهند کرد. با در نظر گرفتن موارد بالا، چنانچه پارامتر C_1 مقداری بزرگ‌تر از $1/n$ داشته باشد، ضریب لاگرانژ تمام نمونه‌های یادگیری مثبت در شرط $0 < \alpha_i < C_1$ صدق می‌کنند. لذا با در نظر گرفتن بند دوم (۲۵) مرز ابرکره به سمت تمام نمونه‌های یادگیری مثبت میل می‌کند. بنابراین به‌ازای مقادیر مناسب σ می‌توان منحنی(هایی) برای درون‌یابی نمونه‌های یادگیری در فضای ورودی محاسبه کرد. علت تأکید بر واژه "مقادیر مناسب σ" در جمله قبل این است که اگر مقدار σ بسیار کوچک در نظر گرفته شود، وضعیت پیچیدگی مرز رخ خواهد داد و منحنی درون‌یاب در فضای ورودی، شکل به شدت گسسته‌ای خواهد داشت.

در شکل ۸ تغییرات مرز طبقه‌بند GSVDD در مقابل تغییرات پارامتر B ترسیم شده است. قبلاً نیز عنوان شد که حوزه تغییرات پارامتر B بازه $(-1,+\infty)$ است. در این شکل مقدار پارامتر B از مقادیر نزدیک به -1 شروع شده و تدریجاً به سمت مقادیر بزرگ گرایش پیدا می‌کند. همچنان که مشهود است، به‌ازای مقادیر منفی مرز محاسبه‌شده به‌گونه‌ای است که وضعیت پیچیدگی مرز را در ذهن تداعی می‌کند. به‌علاوه مشاهده می‌شود که برای مقادیر منفی و به اندازه کافی کوچک B مرز محاسبه‌شده از روی نمونه‌های یادگیری عبور می‌کند و به نوعی عمل درون‌یابی را انجام می‌دهد.

هرچه پارامتر B بیشتر شود، به این معنی است که گرایش به مرکز گرانش نمونه‌های یادگیری بیشتر است. مطابق این شکل‌ها، افزایش پارامتر B و اهمیت قایل شدن برای مرکز گرانش نمونه‌های یادگیری باعث شده که مرز محاسبه‌شده در شکل ۸- د از نمونه‌های یادگیری سمت راست داده‌ها فاصله بگیرد، در حالی که این اتفاق برای مرز طبقه‌بند SVDD رخ نداده است (به شکل‌های ۲ و ۳ مراجعه شود). فاصله‌گرفتن مرز از این نمونه‌ها می‌تواند باعث کاهش خطای منفی- اشتباه و برقراری تعمیم‌پذیری مناسب گردد.

با توجه به این که روش پیشنهادی مبتنی بر گرانش است، این مسئله به ذهن می‌رسد که تأثیر افزایش تعداد نمونه‌ها بر عملکرد و رفتار طبقه‌بند چگونه خواهد بود. از آنجا که در واقع در این روش صرفاً مرکز گرانش



شکل ۹: (الف) SVDD، $\sigma = ۱$ و $C = ۰٫۱۸۲۵$، (ب) SVDD، $B = ۱$، $\sigma = ۱$ و $C = ۰٫۱۸۲۵$ و (ج) SVDD، $B = ۲$، $\sigma = ۱$ و $C = ۰٫۱۸۲۵$.

اهمیت دارد، بنابراین افزایش تعداد نمونه‌ها تأثیر مستقیمی بر مرز ندارد زیرا در روابط بهینه‌سازی مربوط به GSVDD اگرچه تعداد نمونه‌ها وجود دارد اما این مقدار صرفاً برای محاسبه مرکز گرانش استفاده شده است. این مسأله در (۱۷) کاملاً روشن است و تا هنگامی که مرکز گرانش با افزایش تعداد نمونه‌ها جابه‌جا نشود، مرز تغییری نخواهد کرد.

۴- نتایج آزمایش‌ها

قبل از انجام آزمایش روی مجموعه داده‌های واقعی، آزمایش‌ها را بر روی داده‌های سنتزشده با استفاده از کرنل RBF انجام می‌دهیم. در شکل ۹ مرزهای تعیین‌شده توسط SVDD و GSVDD با پارامترهای $B = ۱$ و $B = ۲$ نمایش داده شده‌اند. همچنان که در شکل دیده می‌شود، اثر داده‌های پرت در GSVDD کاهش یافته است.

افراز داده‌ها به زوج مجموعه‌های یادگیری/ارزیابی با استفاده از روش ۱۰-Fold-Cross Validation به‌منظور انجام آزمایش روی داده‌های واقعی انجام شد. برای مقایسه نتایج از روش‌های تخمین بازه‌ای ۱۰-Fold-Cross Validated paired t Test، برآورد نقطه‌ای و تحلیل مقاومت استفاده شده است.

همچنین برای مقایسه طبقه‌بندهای مختلف باید آنها را در بهترین پیکره‌بندی ممکن، مورد آزمایش قرار داد. روش‌های مختلفی برای محاسبه بهترین پیکره‌بندی (پارامترهای بهینه) پیشنهاد شده است که عبارت هستند از:

- بهترین حدس Best guess
- یک فاکتور در هر بار One factor at a time
- جستجوی کامل Factorial design (Grid search)

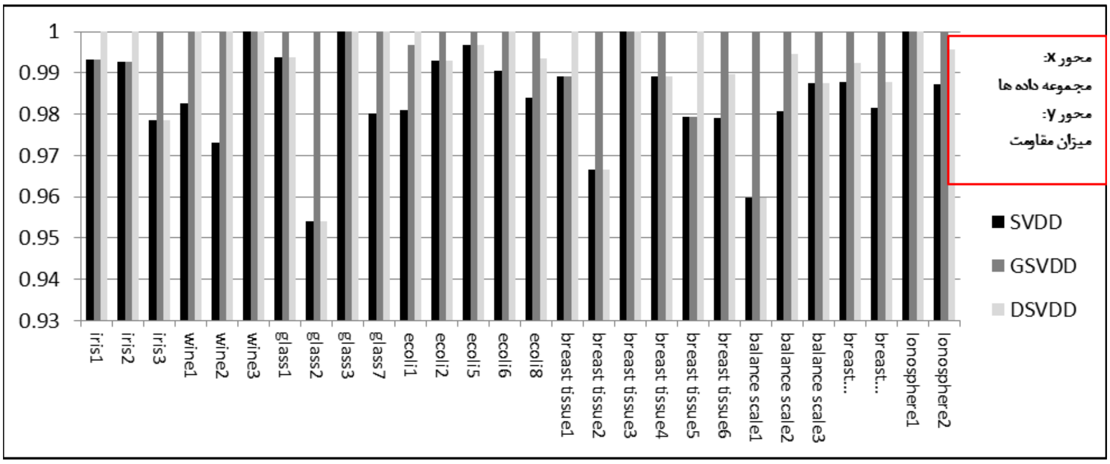
روش استفاده‌شده در این مقاله روش Best guess است و برای پیاده‌سازی آن از روش بهینه‌سازی PSO استفاده شده است.

در این قسمت عملکرد روش‌های GSVDD، DSVDD و SVDD مقایسه می‌شود. جدول ۱ بیانگر نتایج حاصل از اعمال روش‌های فوق بر روی مجموعه داده‌های انتخاب‌شده در حضور داده‌های نرمال است. در این جدول ستون اول بیانگر مجموعه داده و کلاس هدف انتخاب‌شده می‌باشد. ستون دوم بیانگر دقت روش SVDD است. ستون سوم بیانگر دقت GSVDD بوده و ستون چهارم بیانگر مقدار بهینه پارامتر B طبقه‌بند GSVDD است. در ستون پنجم دقت طبقه‌بند DSVDD درج شده و در ستون ششم درجه اطمینان حاصل از تخمین بازه‌ای One tailed t test برای مقایسه روش‌های GSVDD و DSVDD به ثبت رسیده است. در این جدول هر ردیف بیانگر آزمایش‌های انجام‌شده بر روی مجموعه داده و کلاس هدف انتخاب‌شده می‌باشد. خانه‌های هاشور افقی، خاکستری کم‌رنگ و خانه‌های هاشور عمودی به‌ترتیب نشانه اولین، دومین و سومین روش از لحاظ کارایی هستند. اختلاف هاشورگذاری مشاهده‌شده در هر سطر ناشی از مقایسه نتایج از دیدگاه برآورد نقطه‌ای است. چنانچه دو روش، کارایی مشابهی بر روی یک کلاس از یک مجموعه داده داشته باشند با یک هاشور مشابه نمایش داده می‌شوند.

مطابق این جدول چنانچه یکی از روش‌های GSVDD و DSVDD نسبت به دیگری از دیدگاه برآورد نقطه‌ای برتری داشته باشد، عدد درج‌شده در ستون ششم بیانگر احتمال یا درجه اعتماد برتری می‌باشد. مثلاً در ستون ششم ردیف آخر جدول فوق عدد ۰٫۸۲۹۴ درج شده است. این عدد بیانگر این موضوع است که روش GSVDD (روشی که در برآورد نقطه‌ای به‌عنوان روش بهتر شناخته شده است) با احتمال ۸۲٫۹۴٪ نسبت به روش DSVDD برتری دارد.

به‌طور مشابه در جدول ۲ نتایج حاصل از روش‌های SVDD، GSVDD و DSVDD در حضور داده‌های آمیخته با نمونه‌های پرت به نمایش درآمده است. این داده‌های پرت از بین نمونه‌های مربوط به سایر کلاس‌های همان مجموعه داده به‌صورت تصادفی انتخاب شده‌اند.

روش دیگری به نام تحلیل مقاومت برای تحلیل و مقایسه الگوریتم‌ها وجود دارد. در این روش، تحلیل مقاومت بر اساس میانگین دقت طبقه‌بند تقسیم بر بزرگ‌ترین میانگین طبقه‌بندهای مورد مقایسه صورت می‌گیرد [۱۰]. در عبارت زیر هرچه مقدار حاصل بیشتر باشد، کارایی روش در مقایسه با بهترین روش بر روی پایگاه داده بهتر است. مجموع این مقادیر بر روی همه پایگاه‌های داده معیار خوبی برای روش مورد نظر است



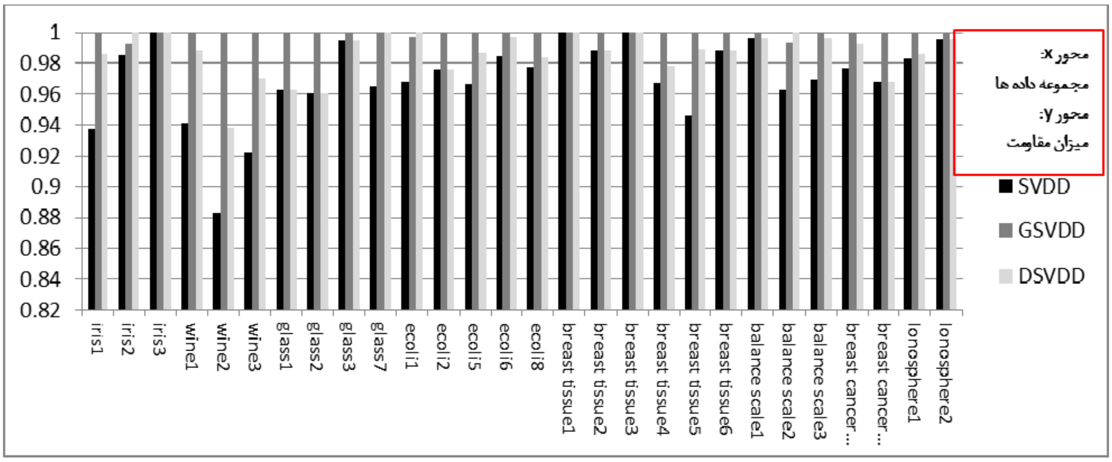
شکل ۱۰: تحلیل مقاومت انجام‌شده متناظر با سطرهای جدول ۱.

جدول ۱: مقایسه روش‌های SVDD، GSVDD و DSVDD.

Dataset/target	SVDD Accuracy	GSVDD Accuracy	B	DSVDD Accuracy	Confidence degree of one tailed t-test
iris۱	۰/۹۸۶۳	۰/۹۸۶۳	۰	۰/۹۹۳۱	۰/۸۳
iris۲	۰/۹۳۱۹	۰/۹۳۱۹	۰	۰/۹۳۸۷	۰/۶۹۷۲
iris۳	۰/۹۲۵۱	۰/۹۴۵۵	−۰/۹	۰/۹۲۵۱	۰/۹۰۶
wine۱	۰/۹۷۱۴	۰/۹۸۸۵	۱۰	۰/۹۸۸۵	
wine۲	۰/۸۲۸۵	۰/۸۵۱۴	۲۰	۰/۸۵۱۴	
wine۳	۰/۹۶۵۷	۰/۹۶۵۷	۳/۳۰۸	۰/۹۶۵۷	
glass۱	۰/۷۶۴۴	۰/۷۶۹۲	۲/۱۰۷۵	۰/۷۶۴۴	۰/۷۹۱۳
glass۲	۰/۶۹۷۱	۰/۷۳۰۷	۶/۰۵۶	۰/۶۹۷۱	۰/۹۵۸۵
glass۳	۰/۹۲۷۸	۰/۹۲۷۸	۰	۰/۹۲۷۸	
glass۷	۰/۹۴۷۱	۰/۹۶۶۳	۷/۳۷۳	۰/۹۶۶۳	
ecoli۱	۰/۹۴۲	۰/۹۵۷۳	۱۰/۳۰۸۱۱	۰/۹۶۰۳	۰/۸۲۹
ecoli۲	۰/۸۶۸۹	۰/۸۷۵	۸/۶۵۹	۰/۸۶۸۹	۰/۶۹۸۸۵
ecoli۵	۰/۹۲۳۷	۰/۹۲۶۸	۲۸/۶۲۵۱۹	۰/۹۲۳۷	۰/۷۱۶۷۵
ecoli۶	۰/۹۶۶۴	۰/۹۷۵۶۱	۲۱/۱۲۸	۰/۹۷۵۶۱	
ecoli۸	۰/۹۴۲	۰/۹۵۷۳	۵/۸۶۹۹	۰/۹۵۱۲	۰/۹۱۶۷
breast tissue۱	۰/۹۱	۰/۹۱	۰	۰/۹۲	۰/۶۹۲۱۵
breast tissue۲	۰/۸۷	۰/۹	۳۰	۰/۸۷	۰/۸۵
breast tissue۳	۰/۸۳	۰/۸۳	۱۶/۴۸۴۹	۰/۸۳	
breast tissue۴	۰/۹۱	۰/۹۲	۱۵/۴۰۱۱	۰/۹۱	۰/۷۲۹
breast tissue۵	۰/۹۵	۰/۹۵	۰	۰/۹۷	۰/۸۳۶۱۵
breast tissue۶	۰/۹۴	۰/۹۶	−۰/۶۵۶۷	۰/۹۵	۰/۸۲۹۴
balance scale۱	۰/۹۲۲۸۳	۰/۹۶۱۴۱۵	−۰/۹	۰/۹۲۲۸۳	۰/۹۹۹۹
balance scale۲	۰/۸۹۳۸۹	۰/۹۱۱۵۷۶	۸/۷۲۲۵۸۴	۰/۹۰۶۷۵۲	۰/۷۸۲۰۵
balance scale۳	۰/۸۹۲۲۸	۰/۹۰۳۵۳۷	−۰/۹	۰/۸۹۲۲۸۳	۰/۷۸۷۲
breast cancer wisconsin۲	۰/۹۵۳۰۱	۰/۹۶۴۷	۲۵/۰۵	۰/۹۵۷۴	۰/۷۶۳۷۵
breast cancer wisconsin۴	۰/۹۳۶۸	۰/۹۵۴۴	۲۴/۱۴	۰/۹۴۲۷	۰/۸۹۸۰۵
Ionosphere۱	۰/۹۱۱۱	۰/۹۱۱۱	۰	۰/۹۱۱۱	
Ionosphere۲	۰/۶۵۹	۰/۶۶۷۶	۳۷/۷۳۵۳	۰/۶۶۴۷	۰/۸۲۹۴

$$b_m = \frac{p_m}{\max\limits_k p_k} \qquad (۵۰)$$

این روش بر خلاف آزمون t که برای مقایسه دو الگوریتم به کار می‌رود، توان مقایسه چند الگوریتم را دارد. همان طور که در فرمول بالا دیده می‌شود، در این روش نتایج درج‌شده در ستون‌های دوم، سوم و ششم جدول‌های ۱ و ۲ بر بزرگ‌ترین نتیجه هر سطر تقسیم می‌شود. جواب به‌دست آمده برای هر طبقه‌بند بیانگر میزان مقاومت آن روش برای مجموعه داده مربوطه است. جمع جواب‌های متناظر هر ستون بیانگر مقاومت هر یک از طبقه‌بندهای SVDD، GSVDD و DSVDD است. شکل‌های ۱۰ و ۱۱ بیانگر تحلیل مقاومت روش‌های مختلف بر روی



شکل ۱۱: تحلیل مقاومت انجام‌شده متناظر با سطرهای جدول ۲.

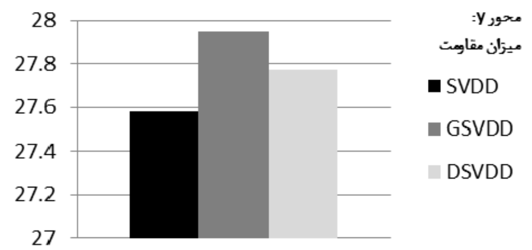
جدول ۲: مقایسه روش‌های SVDD، GSVDD و DSVDD در حضور داده‌های پرت.

Dataset/target	SVDD	GSVDD	B	DSVDD	Confidence degree of one tailed t-test
iris۱	۰/۹۱۱۵	۰/۹۷۲۷	۹۹/۴۵	۰/۹۵۹۱	۰/۷۸۴۶۵
iris۲	۰/۹۰۴۷	۰/۹۱۱۵	۶۱/۶۱۶۷	۰/۹۱۸۳	۰/۷۱۳۵۵
iris۳	۰/۸۷۰۷	۰/۸۷۰۷	۰	۰/۸۷۰۷	
wine۱	۰/۹۱۴۲۸	۰/۹۷۱۴	۵۱/۶۳	۰/۹۶	۰/۹۱۶۷
wine۲	۰/۷۳۱۴	۰/۸۲۸۵	۳۵/۸۶	۰/۷۷۷۱	۰/۹۷۹۵۵
wine۳	۰/۸۸	۰/۹۵۴۲	۲۰/۴۹۲۱	۰/۹۲۵۷	۰/۹۹۲۴۵
glass۱	۰/۷۴۵۱	۰/۷۷۴	۵۱/۰۲	۰/۷۴۵۱	۰/۷۵۰۶۵
glass۲	۰/۷۰۱۹	۰/۷۳۰۷	۲۸/۰۴	۰/۷۰۱۹	۰/۹۴۸۵۵
glass۳	۰/۹۲۳	۰/۹۲۷۸	۰/۰۶۳۵	۰/۹۲۳	۰/۸۲۹۴
glass۷	۰/۹۳۲۶	۰/۹۶۶۳	۵۸/۶۴	۰/۹۶۶۳	
ecoli۱	۰/۹۲۶۸	۰/۹۵۴۲	۱۰/۰۱	۰/۹۵۷۳	۰/۷۰۸۶۵
ecoli۲	۰/۸۵۶۷	۰/۸۷۸	۵/۱۶۶۳	۰/۸۵۶۷	۰/۹۵۵۴
ecoli۵	۰/۸۸۷۲	۰/۹۱۷۷	۴/۳۶۹	۰/۹۰۵۵	۰/۸۶۱۰۵
ecoli۶	۰/۹۵۷۳	۰/۹۷۲۵	۳/۴۵۸۷	۰/۹۶۹۵	۰/۷۰۲۱۵
ecoli۸	۰/۹۲۶۸	۰/۹۴۸۱	۶/۴۵۸	۰/۹۳۲۹	۰/۸۹۷۳
breast tissue۱	۰/۸۹	۰/۸۹	۰	۰/۸۹	
breast tissue۲	۰/۸۶	۰/۸۷	۸/۵۱۲	۰/۸۶	۰/۷۵۰۶۵
breast tissue۳	۰/۸۳	۰/۸۳	۲/۷۴۸	۰/۸۳	
breast tissue۴	۰/۹	۰/۹۳	۸/۷۶۹	۰/۹۱	۰/۸۶۴۹
breast tissue۵	۰/۸۷	۰/۹۲	۸/۴۲۷۲	۰/۹۱	۰/۸۲۹۴
breast tissue۶	۰/۸۸	۰/۸۹	۹/۹۷۷۷	۰/۸۸	۰/۸۲۹۴
balance scale۱	۰/۸۹۰۶۷۵	۰/۸۹۳۸۹۱	۱۰	۰/۸۹۰۶۷۵	۰/۹۱۶۰۵
balance scale۲	۰/۸۷۴۵۹۸	۰/۹۰۱۹۲۹	۸/۵۰۶۶۹۴	۰/۹۰۸۴	۰/۷۷۷
balance scale۳	۰/۸۵۸۵۲۱	۰/۸۸۵۸۵۲	۷/۹۰۸۴۹	۰/۸۸۲۶۳۷	۰/۶۴۰۷۵
breast cancer wisconsin۲	۰/۹۱۹۲	۰/۹۴۱۲	۸/۱۴۷۲	۰/۹۳۳۹۲۱	۰/۸۹۴۲
breast cancer wisconsin۴	۰/۸۴۵۸	۰/۸۷۳۷	۵/۴۱۶۱۹۴	۰/۸۴۵۸	۰/۹۲۷۴
Ionosphere۱	۰/۸۳۶۶	۰/۸۵۱	۷/۸۲۲	۰/۸۳۹۵	۰/۸۱۸۹
Ionosphere۲	۰/۵۸۷۳	۰/۵۹۰۲	۷/۵	۰/۵۸۷۳	۰/۶۵۲۵

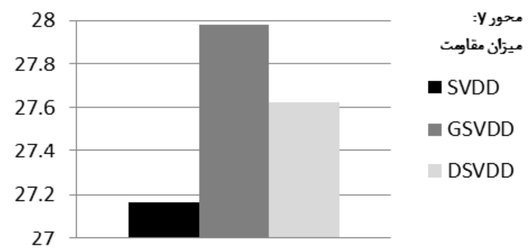
مجموعه داده‌های مختلف هستند. همچنان که در این نمودارها مشخص است، روش GSVDD در اغلب موارد نسبت به روش‌های دیگر برتری دارد. شکل‌های ۱۲ و ۱۳ بیانگر تحلیل مقاومت روش‌های مختلف بر روی تمام مجموعه داده‌ها هستند. مطابق نتیجه به‌دست آمده از این نمودارها روش GSVDD از لحاظ کارایی در مقام اول قرار دارد و روش‌های DSVDD و SVDD در رتبه‌های بعدی قرار دارند.

مطابق نتایج جدول‌های ۱ و ۲ و شکل‌های ۱۰ تا ۱۳ می‌توان این گونه نتیجه گرفت که:

– GSVDD در اغلب موارد نسبت به DSVDD برتری دارد.
– GSVDD و DSVDD در بدترین شرایط مساوی و هم‌ارز SVDD هستند.
– GSVDD با مشارکت‌دادن تمام نمونه‌های یادگیری تعمیم



شکل ۱۲: تحلیل مقاومت نهایی نتایج جدول ۱.



شکل ۱۳: تحلیل مقاومت نهایی نتایج جدول ۲.

بهتری دارد.

– GSVDD در مقابل نویز یا داده‌های پرت مقاوم‌تر است.

هنگام استفاده از GSVDD، پارامتر بهینه B گاهی اوقات مقدار منفی اختیار کرده است (به اعدادی که با رنگ خاکستری در ستون چهارم جدول ۱ علامت‌گذاری شده‌اند، توجه شود). در این گونه موارد می‌توان این گونه استدلال کرد که دورکردن مرکز ابرکره از مرکز گرانش می‌تواند به بهبود عملکرد و افزایش کارایی منجر گردد. به‌عبارت دیگر می‌توان نتیجه گرفت که اهمیت‌دادن به مرکز گرانش باعث هم‌پوشانی طبقه‌بند با داده‌های پرت خواهد شد و دورشدن مرکز ابرکره از مرکز گرانش ترجیح داده می‌شود. این ویژگی منحصر به روش GSVDD است و در مدل‌های مرتبط با روش‌های SVDD و DSVDD اثری از این خصوصیت دیده نمی‌شود.

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله به‌منظور رفع نقاط ضعف طبقه‌بند SVDD، طبقه‌بندی به نام GSVDD مطرح شد. اولین نقطه ضعف SVDD، تفاوت قایل نشدن بین نمونه‌های چگال و غیر چگال است و نقطه ضعف دیگرش تأثیرپذیری مرزهای طبقه‌بند از نمونه‌های نویزی یا پرت می‌باشد. این مشکلات باعث می‌شود که تعمیم‌پذیری طبقه‌بند SVDD کاهش پیدا کند.

به‌منظور مرتفع‌نمودن این مشکلات و ارتقای عملکرد این طبقه‌بند، طبقه‌بند دیگری به نام GSVDD پیشنهاد شد. در طراحی طبقه‌بند GSVDD تلاش شد ضمن ارث‌بردن ویژگی‌های مثبت طبقه‌بندهای SVDD و DSVDD، بر نقاط ضعف آنها غلبه شود. در روش پیشنهادی علاوه بر حداقل‌کردن شعاع ابرکره، کاهش فاصله بین مرکز گرانش و مرکز ابرکره نیز مد نظر قرار داده شد. آزمایش‌ها نشان دادند که این روش در مقایسه با روش‌های دیگر کارایی بیشتری بر روی اغلب مجموعه داده‌های انتخابی دارد. با بررسی و مقایسه این طبقه‌بند با طبقه‌بندهای SVDD و DSVDD نشان داده شد که طبقه‌بند پیشنهادی همیشه از این دو طبقه‌بند دقت بهتری دارد و به‌علاوه این طبقه‌بند با مشارکت‌دادن همه نمونه‌ها تعمیم‌پذیری بالاتری دارد. همچنین ثابت شد GSVDD در مقایسه با SVDD حالت فراگیرتری داشته و توانایی آن در شناسایی نمونه‌های پرت در مقایسه با SVDD بیشتر است.

مراجع

[1] B. Scholkopf, R. C. Williamson, A. J Smola, J. Shawe-Taylor, "SV estimation of a distribution's support," in *Proc. Neural Information Processing Systems*, 1999.

[2] D. M. J. Tax and R. P. W. Duin, "Support vector domain description," *Pattern Recognition Letters*, vol. 20, no. 11-13, pp. 1191-1199, Dec. 1999.

[3] K. Y. Lee, *et al.*, "Improving support vector data description using local density degree," *Pattern Recognition*, vol. 38, no. 10, pp. 1768-1771, Oct. 2005.

[4] D. M. J. Tax and R. P. W. Duin, "Support vector data description," *Machine Learning*, vol. 54, no. 1, pp. 45-66, 2004.

[5] H. W. Cho, "Data description and noise filtering based detection with its application and performance comparison," *Expert Systems with Applications*, vol. 36, no. 1, pp. 434-441, Jan. 2009.

[6] S. M. Guo *et al.*, "A boundary method for outlier detection based on support vector domain description," *Pattern Recognition*, vol. 42, no. 1, pp. 77-83, Jan. 2009.

[7] J. A. Zachman, "A framework for information systems architecture," *IBM Systems J.*, vol. 26, no. 3, pp. 276-292, 1987.

[8] K. Y. Lee *et al.*, "Density - induced support vector data description," *IEEE Trans. on Neural Networks*, vol. 18, no. 1, pp. 284-289, Jun. 2007.

[9] K. Y. Lee *et al.*, "PLPD: reliable protein localization prediction from imbalanced and overlapped dataset," *Nucleic Acids Research*, vol. 34, no. 17, pp 4655-4666, 2006.

[10] X. Geng *et al.*, "Supervised nonlinear dimensionality reduction for visualization and classification," *IEEE Trans. Sys. Man Cybernet*, vol. 35, no. 6, pp. 1098-1107, 2005.

هادی صدوقی یزدی لیسانس الکترونیک خود را از دانشگاه فردوسی در سال ۱۳۷۳ و کارشناسی ارشد الکترونیک را در ۱۳۷۵ در دانشگاه تربیت مدرس اخذ کرد. دکتری مهندسی برق را در زمینه پردازش تصاویر ویدیویی در دانشگاه تربیت مدرس در سال ۱۳۸۴ به اتمام رساند. هم اکنون دانشیار گروه کامپیوتر دانشگاه فردوسی مشهد است. علاقه‌مندی او در زمینه‌های شناسایی الگو و پردازش سیگنال می‌باشد.

سیدحسین غفاریان کارشناسی کامپیوتر سخت افزار از دانشگاه صنعتی اصفهان در سال ۱۳۷۵ و در سال ۱۳۷۸ کارشناسی ارشد مهندسی نرم افزار از دانشگاه فردوسی دریافت نمود. وی هم‌اکنون عضو هیأت علمی دانشگاه فناوری‌های نوین قوچان و همچنین دانشجوی دکتری مهندسی کامپیوتر است. در دوره دکتری وی زیر نظر آقای دکتر هادی صدوقی یزدی در زمینه‌های شناسایی الگو و یادگیری ماشین مشغول به تحقیق می‌باشد.

یونس الله‌یاری در سال ۱۳۷۵ از دانشگاه فردوسی مشهد در رشته مهندسی نرم- افزار فارغ التحصیل شد. درسال ۱۳۸۷ در مقطع کارشناسی ارشد کامپیوتر گرایش هوش مصنوعی در دانشگاه فردوسی مشهد پذیرفته شده و در سال ۱۳۹۰ فارغ التحصیل گردید. زمینه کار ایشان در حوزه شناسایی الگو و طبقه‌بندی مبتنی بر جاذبه و نیز طبقه‌بندی تک-کلاسه بوده است.