



基于单簇聚类的非对齐多视图异常检测算法

史小艳^{1,2}, 陈松灿^{1,2*}

1. 南京航空航天大学计算机学院/人工智能学院, 南京 210016

2. 工信部模式分析与机器智能重点实验室, 南京 210016

* 通信作者. E-mail: s.chen@nuaa.edu.cn

收稿日期: 2020-05-20; 修回日期: 2020-07-08; 接受日期: 2020-10-15; 网络出版日期: 2021-12-09

国家自然科学基金重点项目 (批准号: 61732006) 资助

摘要 多视图数据广泛存在于现实, 而异常也不可避免地伴随其中. 现有的多视图异常检测方法针对的都是对齐的多视图场景, 无法胜任更具挑战的非对齐多视图场景. 为此, 本文提出了 4 种基于单簇可能性 C -均值 (possibilistic C -means, PCM), 即 P1M (PCM, $C = 1$) 算法的非对齐多视图异常检测算法. 不同于对齐的多视图场景, 非对齐特性造成了样本在各视图间对应关系的缺失, 以致我们无法利用在对齐场景下示例级的局部关键信息. 为此, 我们设法通过各视图的全局信息进行学习. 本文的关键之处在于借助交替优化法为各视图分别学得一个变换矩阵, 用其将各视图投影到一个公共子空间, 进而在该公共子空间中用 P1M 学得所有训练数据对目标类的隶属度, 并设置隶属度阈值, 从而实现异常检测. 在多个 UCI 数据集上的实验结果表明, 本文方法能够有效应对非对齐多视图场景中的异常检测.

关键词 可能性 C -均值, 非对齐多视图, 异常检测, 公共子空间, 单簇

1 引言

异常检测, 也称作离群点检测或新颖性检测, 是一种用于辨识不符合预期正常模式的样本或示例的数据挖掘方法, 已被广泛地用于众多领域, 如入侵检测^[1]、诈骗检测^[2]、恶意软件检测^[3]等. 目前, 已有众多异常检测方法^[4]被提出, 例如, 基于聚类的方法^[5]、基于密度的方法^[6]、基于距离的方法^[7]、基于分布的方法^[8]. 这些方法主要关注的是单视图中的异常检测问题.

现实中, 人们接收的数据往往来自不同的传感器, 形成了所谓的多模态或多视图数据. 由此引发了对多视图数据的广泛研究^[9~12], 其中之一是针对多视图场景的异常检测^[13~18]. 不同于单视图数据的异常检测, 多视图的独特性使异常呈现出多种形态, 能归结为如下 3 类: (1) 属性异常^[13,14], (2) 类异常^[15,16]和 (3) 类-属性异常^[17,18]. 其中, 属性异常指在个体视图中具有异常行为的样本或

引用格式: 史小艳, 陈松灿. 基于单簇聚类的非对齐多视图异常检测算法. 中国科学: 信息科学, 2021, 51: 2037–2052, doi: 10.1360/SSI-2020-0141
Shi X Y, Chen S C. Non-aligned multi-view anomaly detection algorithms based on one-cluster clustering (in Chinese). Sci Sin Inform, 2021, 51: 2037–2052, doi: 10.1360/SSI-2020-0141

示例,也是传统单视图中所指称的异常.类异常指对象的各个属性在每个视图内单独或纵向看为正常,但在不同视图间横向看则表现出非一致性.类-属性异常是上述两类异常的混合,即在某些视图中表现出属性异常特性,同时在其他视图中表现出类异常特性.而对后两类异常的检测只能在视图对齐场景下才可行,现有的多视图异常检测方法针对的都是对齐的多视图场景.

另一方面,尽管现实中存在着对齐的多视图数据,但更多的是非对齐的多视图数据,这主要因为完全对齐的多视图数据通常很难获得或因人的粗心或传感器的失效所致.例如,在社交网络中,用户可能有多个账户,如 facebook, twitter 和 instagram.但由于隐私保护,我们无法得知哪些账户属于同一用户.于是,不同的账户信息就构成了非对齐多视图数据.对齐和非对齐两种场景最明显的区别在于:在对齐多视图中,我们能明确获知每个对象在各视图间对应的观察或视图示例,简称示例;而在非对齐多视图中,完全缺失了同一对象在各视图示例间的对应关系.由此导致无法利用对齐场景下各视图间示例级对齐的这一局部关键信息,仅能依靠各视图自身全局信息的对齐进行学习.尽管目前针对非对齐多视图学习问题已展开丰富的研究^[19~21],但据我们所知,迄今为止还没有工作对非对齐多视图异常检测开展研究,而这种新的场景使传统多视图异常检测算法不再适用.正如前面所述:各视图中关键的示例间对应关系缺失,导致无法利用对齐场景的一致性先验知识,进而无法进行横向的异常检测.因此我们只能关注属性异常的检测.

作为异常检测的重要方法之一,单类分类方法^[22]被归为无监督异常检测^[23].支持向量数据描述(support vector data description, SVDD)^[24,25]和单类支持向量机(one-class support vector machine, OCSVM)^[26,27]是两种典型的单类学习模型.SVDD旨在寻找一个将所有目标类训练数据全部包围的最小超球;OCSVM通过最大化超平面与原点(视为异常点)间的距离或间隔寻找一个由支持向量表示的超平面.而我们早期的工作^[28]则从聚类的视角针对单类数据提出了一种单簇聚类的数据描述(one-cluster clustering based data description, OCCDD)方法,它将可能性C-均值(possibilistic C-means, PCM)^[29]聚类限定至仅为单簇聚类实现,简记为P1M.相比OCSVM和SVDD,P1M不仅具有与之相当的性能,而且鲁棒,其获得的隶属度能作为置信度提供判别结果的可解释性.

受P1M实现原理的启发,并考虑到视图非对齐特性,本文提出了4种针对非对齐的多视图P1M异常检测算法.使单视图P1M适应新场景的关键在于如何克服视图的异构性和非对齐的双重挑战.为此,本文算法大体的实现思想是:在训练时,使用交替优化法为各视图分别学得一个对应的变换矩阵,用其将各视图投影到一个公共子空间,进而在该公共子空间中用一个公共的P1M学得所有训练数据对目标类的隶属度,同时设置适当的隶属度阈值用于训练集外示例的测试,即计算每个对象在不同视图间对目标类的隶属度,将其与该阈值作比较,以实现异常检测.

本文的其余部分组织如下:第2节简单回顾了P1M,第3节介绍了基于P1M的非对齐多视图异常检测算法,第4节报告了模型在UCI数据集上的实验结果及相关分析,最后在第5节总结了本文工作及未来展望.

2 相关工作

针对模糊C-均值聚类(fuzzy C-means, FCM)^[30]对野值的非鲁棒性,Krishnapuram等^[29]提出了PCM算法,放松了FCM中隶属度和为1的约束,使得隶属度能相对真实地代表样本隶属于某一类的可能性.文献^[28]针对单类数据提出了基于P1M聚类的单类学习算法OCCDD,证明了作为传统PCM算法的特例,P1M算法在继承其优点的同时,显示出了独特的不同于原有PCM所缺乏的全局最优特性.随后,多种基于单簇聚类的异常检测算法被提出,如Wang等^[31]提出了基于移相加权球

面单簇聚类的单分类器, 以应对传统单分类器无法解决的周期时间序列异常检测问题. Yang 等^[32]提出了一种基于核 P1M 的 SVDD 离群点检测算法, 以降低离群点对 SVDD 模型的影响. 下面简单回顾 P1M 算法.

给定单类数据集 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$, 其中 $x_i \in \mathbb{R}^d$ ($1 \leq i \leq N$). P1M 的目标函数为

$$\begin{aligned} \min_{U, c} J(U, c) &= \sum_{i=1}^N u_i^m \|x_i - c\|^2 + \eta \sum_{i=1}^N (1 - u_i)^m \\ \text{s.t. } &0 \leq u_i \leq 1, \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}, \end{aligned} \quad (1)$$

其中, $U = [u_1, u_2, \dots, u_N]^T$ 为隶属度向量, u_i 表示第 i ($1 \leq i \leq N$) 个示例属于目标类的隶属度, η 为正则化因子, c 表示目标类的聚类中心, $m \in (1, +\infty)$ 为模糊因子. 式 (1) 中右侧第 2 项为正则化项, 用以避免所有隶属度收敛于 0. 其中 η 的计算公式为

$$\eta = \frac{\sum_{i=1}^N u_i^m \|x_i - c\|^2}{\sum_{i=1}^N u_i^m}. \quad (2)$$

令 $J(U, c)$ 关于变量 c 和 u_i 的偏导数为零并求解, 可得

$$c = \frac{\sum_{i=1}^N u_i^m x_i}{\sum_{i=1}^N u_i^m}, \quad u_i = \frac{1}{1 + (\|x_i - c\|^2 / \eta)^{1/(m-1)}}. \quad (3)$$

通过交替迭代最终优化获得 P1M 的解. 具体做法总结为算法 1.

Algorithm 1 P1M

Input: dataset $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$, maximum number of iteration iter_Max, fuzzifier m , error ϵ .

1. Initialize: set iteration time $s = 0$, randomly initialize membership vector $U^{(s)}$;
2. Update $\eta^{(s+1)}$, $c^{(s+1)}$, $U^{(s+1)}$ using (2) and (3), respectively;
3. If $\|U^{(s+1)} - U^{(s)}\| \leq \epsilon$ or $s \geq \text{iter_Max}$, return U ; otherwise $s = s + 1$, and return to step 2.

Output: membership vector U .

3 基于单簇聚类的非对齐多视图异常检测算法

本节将详细介绍基于单簇聚类的非对齐多视图异常检测算法. 首先介绍所提出的线性多视图子空间 P1M (linear multi-view subspace P1M, LM-SP1M) 算法. 然后在此基础上分别介绍非线性多视图子空间 P1M (non-linear multi-view subspace P1M, NLM-SP1M) 算法, 线性多视图原空间-子空间 P1M (linear multi-view original-subspace P1M, LMO-SP1M) 算法, 以及非线性多视图原空间-子空间 P1M (non-linear multi-view original-subspace P1M, NLMO-SP1M) 算法.

文献 [21] 给出了非对齐多视图的定义: 给定具有 V 个视图的数据集 $X = \{X_1, X_2, \dots, X_V\}$, 其中 $X_v \in \mathbb{R}^{d_v \times N_v}$ ($1 \leq v \leq V$) 为第 v 个视图的特征矩阵, N_v 和 d_v 分别表示第 v 个视图的示例数和维数. 如果第 v 个视图中的第 i 个示例 x_{vi} 与第 m 个视图中的第 i 个示例 x_{mi} 表示不同的对象, 则这样的视图被称为非对齐多视图.

3.1 线性多视图子空间 P1M (LM-SP1M)

LM-SP1M 算法试图为每个视图找到一个变换矩阵 $W_v \in \mathbb{R}^{d \times d_v}$ ($1 \leq v \leq V$), 用其将相应视图投影到维度为 d 的公共子空间. 示例 x_{vi} 投影到公共子空间的表示 y_{vi} 为

$$y_{vi} = W_v x_{vi}, \quad \forall v \in \{1, \dots, V\}, \quad \forall i \in \{1, \dots, N_v\}. \quad (4)$$

然后, 在公共子空间上执行 P1M 算法, 其目标函数为

$$\begin{aligned} \min_{U,c,W} J(U,c,W) &= \sum_{v=1}^V \left(\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m \|W_v x_{vi} - c\|^2 + \eta \sum_{i=1}^{N_v} (1 - u_{vi})^m \right) \\ \text{s.t. } 0 &\leq u_{vi} \leq 1, \forall v \in \{1, \dots, V\}, \forall i \in \{1, \dots, N_v\}, \end{aligned} \quad (5)$$

其中, u_{vi} 为第 v 个视图中第 i 个示例在子空间的表示属于目标类的隶属度, c 为目标类在子空间的聚类中心, η 为正则化因子, 计算公式为

$$\eta = \frac{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m \|W_v x_{vi} - c\|^2}{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m}. \quad (6)$$

该算法的设计关键在于通过公共空间中簇中心 c 的共享使在非对齐视图下异常检测成为可能.

具体的优化, 本文采用了两步交替迭代法进行. 首先, 固定各视图的变换矩阵 W_v , 令 $J(U,c,W)$ 关于变量 c 和 u_{vi} 的偏导数为零:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial c} &= -2 \sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m (W_v x_{vi} - c) = 0, \\ \frac{\partial J}{\partial u_{vi}} &= m u_{vi}^{m-1} \|W_v x_{vi} - c\|^2 - m \eta (1 - u_{vi})^{m-1} = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

由此可得

$$c = \frac{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m W_v x_{vi}}{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m}, \quad u_{vi} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\|W_v x_{vi} - c\|^2}{\eta} \right)^{1/(m-1)}}. \quad (8)$$

接着, 固定 c 和 u_{vi} , 令 $J(U,c,W)$ 关于 W_v 的偏导数为零

$$\frac{\partial J}{\partial W_v} = 2 \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m (W_v x_{vi} x_{vi}^T - c x_{vi}^T) = 0. \quad (9)$$

由此可得

$$W_v = \left(\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m c x_{vi}^T \right) \left(\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m x_{vi} x_{vi}^T + \gamma I_v \right)^{-1}, \quad (10)$$

其中, $I_v \in \mathbb{R}^{d_v \times d_v}$ 为单位矩阵, γI_v 是为了防止 $\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m x_{vi} x_{vi}^T$ 为奇异矩阵.

通过两步迭代法最终优化获得 LM-SP1M 的解. 具体做法总结为算法 2. 其中, 在步骤 4 中求得 η 后, η 值将不再变化, 若 η 参与算法迭代计算会导致迭代过程不稳定^[33]. 以下算法对 η 的处理方式相同.

Algorithm 2 LM-SP1M

Input: dataset $X = \{X_1, X_2, \dots, X_V\}$, maximum number of iteration MAX.T, fuzzifier m , error ϵ .

1. Initialize: set iteration time $t = 0$, randomly initialize U , randomly initialize W_v ;
2. For each view X_v ($1 \leq v \leq V$), using (4) to get Y_v , and Y_v of all views forms Y ;
3. Perform P1M algorithm on Y to get η , $U^{(t)}$, $c^{(t)}$ using (6) and (8), respectively;
4. Fix $U^{(t)}$, $c^{(t)}$, using (10) to get W_v of each view;
5. Fix W_v , using (4) to get Y_v , and Y_v of all views forms Y ; perform P1M algorithm on Y to get $U^{(t+1)}$, $c^{(t+1)}$ using (8);
6. If $\|c^{(t+1)} - c^{(t)}\| \leq \epsilon$ or $t \geq \text{MAX.T}$, return U , c , η ; otherwise, $t = t + 1$, return to step 4.

Output: transformation matrices W_v ($1 \leq v \leq V$), U , c , η .

3.2 非线性多视图子空间 P1M (NLM-SP1M)

LM-SP1M 仅能处理线性问题, 本小节采用核技巧将其拓展到非线性版本. 首先, 本文使用一个隐变换 $\phi(\cdot)$ 将各原视图示例 x_{vi} 映射到核或特征空间 F , 然后将该示例从核空间映射到公共子空间 \mathbb{R}^d 上, 即

$$y_{vi} = Q_v \phi(x_{vi}), \forall v \in \{1, \dots, V\}, \forall i \in \{1, \dots, N_v\}. \quad (11)$$

接着, 借助表示定理^[34], 变换矩阵 Q_v 可由对应视图中的训练示例在核空间表示的线性组合表示, 即可表示为 $W_v \Phi_v^T$, 将其代入式 (11), 可得如下核化形式:

$$y_{vi} = W_v \Phi_v^T \phi(x_{vi}) = W_v k_{vi}, \forall v \in \{1, \dots, V\}, \forall i \in \{1, \dots, N_v\}, \quad (12)$$

其中, $W_v \in \mathbb{R}^{d \times N_v}$ 为 Φ_v 形成 Q_v 所需的变换矩阵. $\Phi_v \in \mathbb{R}^{|F| \times N_v}$ 为第 v 个视图的训练示例在核空间 F 中的表示所形成的特征矩阵, 即 $\Phi_v = [\phi(x_{v1}), \phi(x_{v2}), \dots, \phi(x_{vN_v})]$. $k_{vi} \in \mathbb{R}^{N_v}$ 为第 v 个视图的核 Gram 矩阵 K_v 的第 i 列, 其中 $K_v \in \mathbb{R}^{N_v \times N_v}$ ($1 \leq v \leq V$) 中的元素由 $K_{vij} = \phi(x_{vi})^T \cdot \phi(x_{vj})$ 组成. 在实验中, 我们使用高斯核函数, 即 $K_{vij} = \exp(-\|x_{vi} - x_{vj}\|_2^2 / 2\delta^2)$ (δ 表示核带宽). 此时目标函数为

$$\begin{aligned} \min_{U, c, W} J(U, c, W) &= \sum_{v=1}^V \left(\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m \|W_v k_{vi} - c\|^2 + \eta \sum_{i=1}^{N_v} (1 - u_{vi})^m \right) \\ \text{s.t. } &0 \leq u_{vi} \leq 1, \forall v \in \{1, \dots, V\}, \forall i \in \{1, \dots, N_v\}, \end{aligned} \quad (13)$$

其中 η 的计算公式为

$$\eta = \frac{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m \|W_v k_{vi} - c\|^2}{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m}. \quad (14)$$

类似 LM-SP1M 的优化, 这里亦使用两步交替迭代法进行优化. 首先, 固定各视图的变换矩阵 W_v , 令 $J(U, c, W)$ 关于变量 c 和 u_{vi} 的偏导数为零并求解, 可得

$$c = \frac{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m W_v k_{vi}}{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m}, \quad u_{vi} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\|W_v k_{vi} - c\|^2}{\eta} \right)^{1/(m-1)}}. \quad (15)$$

接着, 固定 c 和 u_{vi} , 令 $J(U, c, W)$ 关于 W_v 的偏导数为零:

$$\frac{\partial J}{\partial W_v} = 2 \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m (W_v k_{vi} k_{vi}^T - c k_{vi}^T) = 0. \quad (16)$$

由此可得

$$W_v = \left(\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m c k_{vi}^T \right) \left(\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m k_{vi} k_{vi}^T + \gamma I_v \right)^{-1}, \quad (17)$$

其中, $I_v \in \mathbb{R}^{N_v \times N_v}$ 为单位矩阵, γI_v 是为了防止 $\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m k_{vi} k_{vi}^T$ 为奇异矩阵.

通过两步迭代优化法最终获得 NLM-SP1M 的解. 具体做法总结为算法 3.

3.3 线性多视图原空间 – 子空间 P1M (LMO-SP1M)

LM-SP1M 仅使用公共子空间上的信息进行学习, LMO-SP1M 则在使用子空间信息的基础上增加了各视图原空间上的信息. 该算法的思路是: 在各视图原空间以及公共子空间上分别执行 P1M

Algorithm 3 NLM-SP1M

 Input: kernel Gram matrix K_v ($1 \leq v \leq V$), maximum number of iteration MAX_T, fuzzifier m , error ϵ .

1. Initialize: set iteration time $t = 0$, randomly initialize U , randomly initialize W_v ;
2. For each K_v ($1 \leq v \leq V$), using (12) to get Y_v , and Y_v of all views forms Y ;
3. Perform P1M algorithm on Y to get η , $U^{(t)}$, $c^{(t)}$ using (14) and (15), respectively;
4. Fix $U^{(t)}$, $c^{(t)}$, using (17) to get W_v of each view;
5. Fix W_v , using (12) to get Y_v , and Y_v of all views forms Y ; perform P1M algorithm on Y to get $U^{(t+1)}$, $c^{(t+1)}$ using (15);
6. If $\|c^{(t+1)} - c^{(t)}\| \leq \epsilon$ or $t \geq \text{MAX_T}$, return U , c , η ; otherwise, $t = t + 1$, return to step 4.

 Output: transformation matrices W_v ($1 \leq v \leq V$), U , c , η .

算法, 先求得各视图在原空间上的聚类中心 c_v , 接着利用所有训练示例的语义信息对齐, 对各视图原空间聚类中心 c_v 和公共子空间上的聚类中心 c 进行约束. 具体如下: 首先, 在各视图原空间上执行 P1M 算法, 其目标函数为

$$\begin{aligned} \min_{U_v, c_v} J(U_v, c_v) &= \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m \|x_{vi} - c_v\|^2 + \eta_v \sum_{i=1}^{N_v} (1 - u_{vi})^m \\ \text{s.t. } 0 &\leq u_{vi} \leq 1, \forall v \in \{1, \dots, V\}, \forall i \in \{1, \dots, N_v\}, \end{aligned} \quad (18)$$

其中, u_{vi} 为第 v 个视图中第 i 个示例在原视图空间中属于目标类的隶属度, c_v 为第 v 个视图在原视图空间中的聚类中心, η_v 为第 v 个视图在原视图空间的正则化因子, 计算公式如下:

$$\eta_v = \frac{\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m \|x_{vi} - c_v\|^2}{\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m}. \quad (19)$$

令 $J(U_v, c_v)$ 关于变量 c_v 和 u_{vi} 的偏导数为零:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_v}{\partial c_v} &= -2 \sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m (x_{vi} - c_v) = 0, \\ \frac{\partial J_v}{\partial u_{vi}} &= m u_{vi}^{m-1} \|x_{vi} - c_v\|^2 - m \eta_v (1 - u_{vi})^{m-1} = 0. \end{aligned} \quad (20)$$

由此可得

$$c_v = \frac{\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m x_{vi}}{\sum_{i=1}^{N_v} u_{vi}^m}, \quad u_{vi} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\|x_{vi} - c_v\|^2}{\eta_v} \right)^{1/(m-1)}}. \quad (21)$$

通过交替迭代优化法得到各视图原空间 P1M 的解.

然后, 在子空间执行 P1M 算法, 目标函数表达如下:

$$\begin{aligned} \min_{S, c, W} J_s(S, c, W) &= \sum_{v=1}^V \left(\sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m \|W_v x_{vi} - c\|^2 + \eta \sum_{i=1}^{N_v} (1 - s_{vi})^m + \|W_v c_v - c\|^2 \right) \\ \text{s.t. } 0 &\leq s_{vi} \leq 1, \forall v \in \{1, \dots, V\}, \forall i \in \{1, \dots, N_v\}, \end{aligned} \quad (22)$$

其中, s_{vi} 为第 v 个视图中第 i 个示例在子空间的表示属于目标类的隶属度, c 为目标类在子空间的聚类中心, η 为子空间的正则化因子. 式 (22) 中右侧第 3 项即为约束项, 使各视图原空间聚类中心 c_v 与子空间聚类中心 c 对齐. 其中, η 的计算公式如下:

$$\eta = \frac{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m \|W_v x_{vi} - c\|^2}{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m}. \quad (23)$$

接下来, 使用两步交替迭代法进行优化. 首先, 固定各视图的变换矩阵 W_v , 令 $J_s(S, c, W)$ 关于变量 c 和 s_{vi} 的偏导数为零:

$$\begin{aligned}\frac{\partial J_s}{\partial c} &= -2 \sum_{v=1}^V \left(\sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m (W_v x_{vi} - c) + (W_v c_v - c) \right) = 0, \\ \frac{\partial J}{\partial s_{vi}} &= m s_{vi}^{m-1} \|W_v x_{vi} - c\|^2 - m \eta (1 - s_{vi})^{m-1} = 0.\end{aligned}\quad (24)$$

由此可得

$$c = \frac{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m W_v x_{vi} + \sum_{v=1}^V W_v c_v}{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m + V}, \quad s_{vi} = \frac{1}{1 + (\|W_v x_{vi} - c\|^2 / \eta)^{1/(m-1)}}. \quad (25)$$

接着, 固定 c 和 s_{vi} , 令 $J_s(S, c, W)$ 关于 W_v 的偏导数为零:

$$\frac{\partial J_s}{\partial W_v} = 2 \sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m (W_v x_{vi} x_{vi}^T - c x_{vi}^T) + 2 (W_v c_v c_v^T - c c_v^T) = 0. \quad (26)$$

由此可得

$$W_v = \left(\sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m c x_{vi}^T + c c_v^T \right) \left(\sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m x_{vi} x_{vi}^T + c_v c_v^T + \gamma I_v \right)^{-1}, \quad (27)$$

其中, $I_v \in \mathbb{R}^{d_v \times d_v}$ 为单位矩阵, γI_v 是为了防止 $\sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m x_{vi} x_{vi}^T + c_v c_v^T$ 为奇异矩阵.

在公共子空间中使用两步迭代优化法最终获得 LMO-SP1M 的解. 具体做法总结为算法 4.

Algorithm 4 LMO-SP1M

Input: dataset $X = \{X_1, X_2, \dots, X_V\}$, maximum number of iteration MAX_T, fuzzifier m , error ϵ .

1. Initialize: set iteration time $t = 0$, randomly initialize S , randomly initialize W_v ;
2. Perform P1M on each view X_v , get η_v, U_v, c_v using (19) and (21), respectively;
3. For each view X_v ($1 \leq v \leq V$), using (4) to get Y_v , and Y_v of all views forms Y ;
4. Perform P1M algorithm on Y to get $\eta, S^{(t)}, c^{(t)}$ using (23) and (25), respectively;
5. Fix $S^{(t)}, c^{(t)}$, using (27) to get W_v of each view;
6. Fix W_v , using (4) to get Y_v , and Y_v of all views forms Y ; perform P1M algorithm on Y to get $S^{(t+1)}, c^{(t+1)}$ using (25);
7. If $\|c^{(t+1)} - c^{(t)}\| \leq \epsilon$ or $t \geq \text{MAX_T}$, return S, c, η ; otherwise, $t = t + 1$, return to step 5.

Output: transformation matrices W_v ($1 \leq v \leq V$), $U_v, c_v, \eta_v, S, c, \eta$.

3.4 非线性多视图原空间 – 子空间 P1M (NLMO-SP1M)

在 3.3 小节中本文设计了线性多视图原空间 – 子空间 P1M 算法, 本小节采用核技巧将其拓展到非线性版本.

首先, 本文在各视图原空间上执行 P1M 算法, 目标函数见式 (18), 正则化因子 η 计算公式见式 (19), 各视图原空间聚类中心 c_v 及属于目标类的隶属度 u_{vi} 计算公式见式 (21).

接着, 在子空间执行 P1M 算法. 利用式 (12) 将所有示例投影到公共子空间, 此时的目标函数为

$$\begin{aligned}\min_{S, c, W} J_s(S, c, W) &= \sum_{v=1}^V \left(\sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m \|W_v k_{vi} - c\|^2 + \eta \sum_{i=1}^{N_v} (1 - s_{vi})^m + \|W_v k_{vc} - c\|^2 \right) \\ \text{s.t. } &0 \leq s_{vi} \leq 1, \forall v \in \{1, \dots, V\}, \forall i \in \{1, \dots, N_v\},\end{aligned}\quad (28)$$

其中, k_{vc} 为视图原空间聚类中心 c_v 的核向量表示, 计算公式为

$$k_{vc} = \Phi_v^T \phi(c_v). \quad (29)$$

η 的计算公式为

$$\eta = \frac{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m \|W_v k_{vi} - c\|^2}{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m}. \quad (30)$$

这里使用两步交替迭代法进行优化. 首先, 固定各视图的变换矩阵, 令 $J_s(S, c, W)$ 关于变量 c 和 s_{vi} 的偏导数为零并求解, 可得

$$c = \frac{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m W_v k_{vi} + \sum_{v=1}^V W_v k_{vc}}{\sum_{v=1}^V \sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m + V}, \quad s_{vi} = \frac{1}{1 + (\|W_v k_{vi} - c\|^2 / \eta)^{1/(m-1)}}. \quad (31)$$

接着, 固定 c 和 s_{vi} , 令 $J_s(S, c, W)$ 关于 W_v 的偏导数为零:

$$\frac{\partial J_s}{\partial W_v} = 2 \sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m (W_v k_{vi} k_{vi}^T - c k_{vi}^T) + 2 (W_v k_{vc} k_{vc}^T - c k_{vc}^T) = 0. \quad (32)$$

由此可得

$$W_v = \left(\sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m c k_{vi}^T + c k_{vc}^T \right) \left(\sum_{i=1}^{N_v} s_{vi}^m k_{vi} k_{vi}^T + k_{vc} k_{vc}^T + \gamma I_v \right)^{-1}, \quad (33)$$

其中, $I_v \in \mathbb{R}^{N_v \times N_v}$ 为单位矩阵, γI_v 是为了防止求逆时出现奇异矩阵现象.

在公共子空间中使用两步迭代优化法最终获得 NLMO-SP1M 的解. 具体做法总结为算法 5.

Algorithm 5 NLMO-SP1M

Input: dataset $X = \{X_1, X_2, \dots, X_V\}$, kernel Gram matrix K_v ($1 \leq v \leq V$), maximum number of iteration MAX_T, fuzzifier m , error ϵ .

1. Initialize: set iteration time $t = 0$, randomly initialize S , randomly initialize W_v ;
2. Perform P1M on each view X_v , get η_v, U_v, c_v using (19) and (21), respectively;
3. For each K_v ($1 \leq v \leq V$), using (12) to get Y_v , and Y_v of all views forms Y ;
4. Perform P1M algorithm on Y to get $\eta, S^{(t)}, c^{(t)}$ using (30) and (31), respectively;
5. Fix $S^{(t)}, c^{(t)}$, using (33) to get W_v of each view;
6. Fix W_v , using (12) to get Y_v , and Y_v of all views forms Y ; perform P1M algorithm on Y to get $S^{(t+1)}, c^{(t+1)}$ using (31);
7. If $\|c^{(t+1)} - c^{(t)}\| \leq \epsilon$ or $t \geq \text{MAX_T}$, return S, c, η ; otherwise, $t = t + 1$, return to step 5.

Output: transformation matrices W_v ($1 \leq v \leq V$), $U_v, c_v, \eta_v, S, c, \eta$.

3.5 算法复杂度分析

本文所提算法中的交替迭代优化过程为主要的的时间消耗部分. 其涉及投影变换, 公共子空间 P1M 聚类 and 变换矩阵 W_v 优化. 由文献 [28] 可知, P1M 的算法复杂度为 $O(\sum_{v=1}^V N_v ds)$, 其中 N_v 为第 v 个视图的示例数, d 为子空间维数, s 为 P1M 聚类的迭代次数. 投影变换和变换矩阵 W_v 的优化都涉及到矩阵的相关计算, 其计算复杂度与模型是否核化紧密相关. LM-SP1M 和 LMO-SP1M 算法中, 投影变换的算法复杂度为 $O(\sum_{v=1}^V N_v d_v d)$, 变换矩阵 W_v 优化的算法复杂度为 $O(\sum_{v=1}^V N_v d_v^2)$. 而 NLM-SP1M 和 NLMO-SP1M 算法中, 投影变换的算法复杂度为 $O(\sum_{v=1}^V N_v^2 d)$, 变换矩阵 W_v 优化的算法复杂度为 $O(\sum_{v=1}^V N_v^3)$. 实验发现, P1M 聚类总是很快收敛, 故 P1M 聚类的迭代次数 s 值不大. 若 t 为交替迭代优化次数, 则 LM-SP1M 和 LMO-SP1M 算法的整体时间复杂度为 $O(\sum_{v=1}^V N_v d_v^2 t)$, NLM-SP1M 和 NLMO-SP1M 算法的整体时间复杂度为 $O(\sum_{v=1}^V N_v^3 t)$.

3.6 异常检测

为了保证分类的泛化能力及经验风险的平衡控制,算法中引入正常样本拒绝比 r 来调节隶属度阈值. 将训练样本的隶属度由小到大排序得到 u_r , 然后选择 u_r 中第 $n \times r + 1$ 个元素作为隶属度阈值 θ . 其中, 在公共子空间中的 $n = \sum_{v=1}^V N_v$, 在原视图空间中 $n=N_v$.

给定测试对象 $x_* = \{x_{1*}, \dots, x_{v*}, \dots, x_{V*}\}$, 其中, $x_{v*} \in \mathbb{R}^{d_v}$ 为第 v 个视图的特征向量. 对于线性情况, 使用式 (4) 将其投影到公共子空间. 对于非线性情况, 使用式 (29) 计算 x_{v*} 的核向量 k_{v*} , 然后使用式 (12) 将其投影到公共子空间, 其在子空间的表示记为 y_{v*} . 接着, 计算 y_{v*} 在子空间属于目标类的隶属度 u_{v*} , 将其与阈值 θ 作比较, 若小于阈值则判为异常, 否则被判为正常. 其判别函数为

$$f(u_{v*}) = \begin{cases} u_{v*} < \theta, \text{ then } y_{v*} \text{ is an anomaly;} \\ u_{v*} \geq \theta, \text{ then } y_{v*} \text{ is a target object.} \end{cases} \quad (34)$$

使用各变换矩阵将 x_{v*} 中的对应视图投影到子空间并对其进行分类, 得出各视图的异常情况. 为了决定对象的最终类别, 本文使用的策略是, 只要对象的一个视图被判为异常, 则该对象就被判为异常.

LM-SP1M 和 NLM-SP1M 仅在子空间执行 P1M 操作, 故在判断时只需在子空间上对对象各视图判别. 而 LMO-SP1M 和 NLMO-SP1M 增加了各视图原空间 P1M 操作, 故在判断时需将原空间各视图的判别信息与子空间的判别信息相结合.

3.7 收敛性分析

本小节以 LM-SP1M 为例分析算法的收敛性.

第 1 步, 固定各变换矩阵 W_v , 优化 c 和 U . 由文献 [28] 可知, $J(U, c)$ 关于隶属度 U 和聚类中心 c 的 Hessian 矩阵是正定的, 所以 $J(U, c)$ 关于 (U, c) 是一个联合凸函数. 故式 (8) 中各式的更新可求得子问题 $J(U, c)$ 的全局最优解, 即式 (8) 中各式的更新是单调下降且收敛到全局最优解;

第 2 步, 固定 c 和 U , 优化各变换矩阵 W_v . 此时, $J(W)$ 关于 W 是一个二次函数, 所以 $J(W)$ 是一个关于 W 的凸函数. 故式 (10) 的更新可求得子问题 $J(W)$ 的全局最优解, 即式 (10) 的更新是单调下降且收敛到全局最优解;

综上, 式 (8) 中各式及式 (10) 的更新即每一步迭代都是单调下降且收敛到子问题的全局最优解, 故 LM-SP1M 收敛.

4 实验

4.1 数据集和预处理

本文在 UCI 数据库中的 Seed, Wine, Letter, Zoo, SPECTF 和机器人执行故障数据集上进行性能评估. 值得注意的是, Letter 数据集共有包含 26 个字母的 20000 个样本. 根据文献 [18] 的策略, 本文从每个字母中随机选择 70 个样本用于实验. 表 1 展示了 Seed, Wine, Letter, Zoo 数据集的基本信息.

SPECTF 数据集包括与不同受试者静息和应激状态对应的两组观察图像特征, 其可被视为两个不同的视图, 维度均为 22. 该数据集给出了训练集和测试集, 训练集由 40 个健康样本和 40 个非健康样本组成, 测试集由 15 个健康样本和 172 个非健康样本组成. 机器人执行故障数据集包含故障检测后机器人的力和扭矩对应的两组特征, 维度均为 45, 其可被视为两个不同的视图. 该数据集被划分为 5 个学习任务, 具体信息见表 2.

表 1 数据集介绍

Table 1 The introduction of the datasets

Dataset	Feature	# Instance	Target class	# Target instance	# Anomaly instance
Seed	7	210	Class 1	70	140
	7	210	Class 2	70	140
	7	210	Class 3	70	140
Wine	13	178	Class 1	59	119
	13	178	Class 2	71	107
	13	178	Class 3	48	130
Letter	16	1820	Class 1	70	1750
	16	1820	Class 2	70	1750
	16	1820	Class 3	70	1750
	16	1820	Class 4	70	1750
	16	1820	Class 5	70	1750
	16	1820	Class 6	70	1750
Zoo	16	101	Class 1	41	60
	16	101	Class 2	20	81
	16	101	Class 4	13	88
	16	101	Class 7	10	91

表 2 机器人执行故障数据集

Table 2 Robot execution failure dataset

Learning problem	# Instance	Classes and distribution
LP1	88	24% normal
		19% collision
		18% front collision
		39% obstruction
LP2	47	43% normal
		13% front collision
		15% back collision
		11% collision to the right
LP3	47	19% collision to the left
		43% ok
		19% slightly moved
		32% moved
LP4	117	6% lost
		21% normal
		62% collision
		18% obstruction
LP5	164	27% normal
		16% bottom collision
		13% bottom obstruction
		29% collision in part
		16% collision in tool

为了生成多视图数据, 本文将特征向量划分为 V ($V \geq 2$) 个子集, 每个子集被视为一个数据视图. 例如, 文献 [15] 为了生成二视图数据, 将原来的 D 维对象, 选择前 $\lfloor \frac{D}{2} \rfloor$ 个维度作为第 1 个视图, 剩下的维度作为第 2 个视图. 因为 SPECTF 和机器人执行故障数据集本身为多视图数据, 故不对其进行

表 3 二视图数据集上的 AUC 值 (均值 \pm 标准差)^{a)}
 Table 3 The AUC values (mean \pm standard deviation) on two-view datasets^{a)}

Dataset	Target	Single-view methods (P1M)		Multi-view methods			
		View 1	View 2	LM-SP1M	NLM-SP1M	LMO-SP1M	NLMO-SP1M
Seed	Class 1	0.760 \pm 0.01	0.594 \pm 0.00	0.710 \pm 0.04	0.805 \pm 0.02	0.811 \pm 0.01	0.904\pm0.03
	Class 2	0.944 \pm 0.03	0.673 \pm 0.04	0.932 \pm 0.05	0.939 \pm 0.03	0.957\pm0.05	0.934 \pm 0.05
	Class 3	0.920\pm0.03	0.524 \pm 0.01	0.808 \pm 0.11	0.846 \pm 0.18	0.897 \pm 0.07	0.920\pm0.06
Wine	Class 1	0.613 \pm 0.08	0.533 \pm 0.04	0.850 \pm 0.06	0.887 \pm 0.04	0.899 \pm 0.09	0.910\pm0.05
	Class 2	0.494 \pm 0.02	0.737 \pm 0.06	0.779 \pm 0.07	0.714 \pm 0.00	0.785\pm0.04	0.737 \pm 0.03
	Class 3	0.542 \pm 0.00	0.748 \pm 0.06	0.958\pm0.03	0.700 \pm 0.09	0.954 \pm 0.05	0.779 \pm 0.04
Letter	Class 1	0.586 \pm 0.07	0.863\pm0.04	0.684 \pm 0.03	0.833 \pm 0.10	0.823 \pm 0.04	0.840 \pm 0.07
	Class 2	0.535 \pm 0.05	0.841 \pm 0.11	0.747 \pm 0.05	0.831 \pm 0.09	0.805 \pm 0.05	0.855\pm0.04
	Class 3	0.570 \pm 0.06	0.693 \pm 0.10	0.774 \pm 0.05	0.825\pm0.06	0.807 \pm 0.06	0.819 \pm 0.07
	Class 4	0.586 \pm 0.06	0.791 \pm 0.08	0.832 \pm 0.04	0.834 \pm 0.06	0.867\pm0.05	0.866 \pm 0.04
	Class 5	0.600 \pm 0.07	0.805 \pm 0.11	0.759 \pm 0.04	0.846 \pm 0.05	0.797 \pm 0.05	0.851\pm0.07
	Class 6	0.557 \pm 0.05	0.792 \pm 0.08	0.760 \pm 0.06	0.796 \pm 0.07	0.797 \pm 0.07	0.814\pm0.07
Zoo	Class 1	0.614 \pm 0.18	0.514 \pm 0.04	0.622 \pm 0.13	0.890 \pm 0.20	0.960 \pm 0.07	0.988\pm0.03
	Class 2	0.586 \pm 0.17	0.690 \pm 0.23	0.749 \pm 0.20	0.889 \pm 0.16	0.975\pm0.07	0.975\pm0.07
	Class 4	0.716 \pm 0.22	0.550 \pm 0.15	0.799 \pm 0.20	0.893 \pm 0.20	0.999\pm0.00	0.975 \pm 0.07
	Class 7	0.722 \pm 0.22	0.891 \pm 0.15	0.467 \pm 0.10	0.824 \pm 0.22	0.789 \pm 0.25	0.958\pm0.01

a) The best results are in bold.

划分操作.

4.2 实验设置

由于本文提出的非对齐多视图异常检测是新场景, 而文献 [13~18] 提出的算法针对的均为对齐多视图场景, 故无法与他们的实验对比. 根据本文采用的异常检测判断策略, 在对比实验设置中, 文中使用核 P1M 独自在各个视图上进行异常检测, 将其与本文提出的 4 种算法进行对比. 实验时, 对于 Seed, Wine, Letter, Zoo, 选取数据集其中一类为目标类, 剩下类别为异常类. 对于 SPECTF, 将健康样本视为目标类. 对于机器人执行故障数据集, 将该数据集中 5 个任务中所有的正常样本视为目标类. 为了得到非对齐多视图, 本文随机打乱各视图中示例的顺序.

实验中, 公平起见, 所有算法中公共子空间的维度 d 均设置为 2, 拒绝比 r 均设置为 0.02, 参数 ϵ 均设置为 0.001. 由于算法中引入了核带宽 δ , 故使用 5 折交叉验证对其进行选择, 其中核带宽 δ 的取值范围为 $\{10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 1, 10^1, 10^2, 10^3\}$. 文献 [28] 指出, 模糊因子 m 的取值对算法性能没有实质影响, 故固定为 3. 本文分别在二视图和三视图情况下进行实验, 每组实验重复进行 10 次, 使用 AUC 作为评价指标.

4.3 实验结果

表 3 和 4 分别为本文提出的 4 种算法与单视图异常检测算法核 P1M 在人工划分二视图和三视图数据上的对比实验结果, 表 5 为真实多视图数据集上的对比实验结果, 粗体字表示性能最优. 通过分析可以得到:

表 4 三视图数据集上的 AUC 值 (均值 \pm 标准差)^{a)}
 Table 4 The AUC values (mean \pm standard deviation) on three-view datasets^{a)}

Dataset	Target	Single-view methods (P1M)			Multi-view methods			
		View 1	View 2	View 3	LM-SP1M	NLM-SP1M	LMO-SP1M	NLMO-SP1M
Seed	Class 1	0.759 \pm 0.02	0.645 \pm 0.02	0.569 \pm 0.01	0.698 \pm 0.04	0.817\pm0.04	0.555 \pm 0.08	0.798 \pm 0.02
	Class 2	0.938 \pm 0.03	0.846 \pm 0.00	0.561 \pm 0.02	0.965\pm0.03	0.893 \pm 0.14	0.550 \pm 0.05	0.923 \pm 0.03
	Class 3	0.936\pm0.04	0.862 \pm 0.03	0.534 \pm 0.01	0.847 \pm 0.05	0.917 \pm 0.05	0.614 \pm 0.07	0.931 \pm 0.05
Wine	Class 1	0.665 \pm 0.08	0.841 \pm 0.08	0.786 \pm 0.10	0.878\pm0.06	0.877 \pm 0.04	0.617 \pm 0.04	0.786 \pm 0.06
	Class 2	0.525 \pm 0.04	0.657 \pm 0.07	0.525 \pm 0.03	0.702 \pm 0.02	0.722\pm0.06	0.518 \pm 0.04	0.696 \pm 0.03
	Class 3	0.656 \pm 0.09	0.810 \pm 0.09	0.737 \pm 0.09	0.825\pm0.07	0.795 \pm 0.11	0.531 \pm 0.05	0.765 \pm 0.08
Letter	Class 1	0.649 \pm 0.07	0.919 \pm 0.05	0.872 \pm 0.08	0.672 \pm 0.04	0.807 \pm 0.13	0.902 \pm 0.03	0.925\pm0.04
	Class 2	0.653 \pm 0.06	0.824 \pm 0.07	0.871\pm0.09	0.496 \pm 0.05	0.865 \pm 0.05	0.763 \pm 0.04	0.777 \pm 0.07
	Class 3	0.572 \pm 0.08	0.758 \pm 0.07	0.756 \pm 0.08	0.539 \pm 0.05	0.787\pm0.07	0.752 \pm 0.04	0.765 \pm 0.05
	Class 4	0.621 \pm 0.10	0.807 \pm 0.05	0.868 \pm 0.07	0.519 \pm 0.03	0.885\pm0.04	0.648 \pm 0.05	0.724 \pm 0.05
	Class 5	0.576 \pm 0.08	0.816 \pm 0.08	0.815 \pm 0.09	0.518 \pm 0.03	0.862\pm0.05	0.661 \pm 0.04	0.682 \pm 0.05
	Class 6	0.597 \pm 0.09	0.804 \pm 0.07	0.849\pm0.06	0.553 \pm 0.05	0.750 \pm 0.06	0.690 \pm 0.04	0.725 \pm 0.04
Zoo	Class 1	0.700 \pm 0.24	0.542 \pm 0.04	0.502 \pm 0.01	0.745 \pm 0.24	0.680 \pm 0.22	0.920 \pm 0.10	0.980\pm0.04
	Class 2	0.500 \pm 0.00	0.554 \pm 0.08	0.619 \pm 0.19	0.757 \pm 0.21	0.925 \pm 0.16	0.924 \pm 0.11	1.000\pm0.00
	Class 4	0.618 \pm 0.18	0.729 \pm 0.23	0.597 \pm 0.19	0.769 \pm 0.23	0.836 \pm 0.22	0.775 \pm 0.24	0.900\pm0.20
	Class 7	0.621 \pm 0.18	0.663 \pm 0.17	0.562 \pm 0.05	0.500 \pm 0.00	0.635 \pm 0.23	0.636 \pm 0.22	0.874\pm0.19

a) The best results are in bold.

表 5 SPECTF 数据集和机器人执行故障数据集上的 AUC 值 (均值 \pm 标准差)
 Table 5 AUC values (mean \pm standard deviation) on SPECTF dataset and robot execution failure dataset

Dataset	Single-view methods (P1M)		Multi-view methods			
	View 1	View 2	LM-SP1M	NLM-SP1M	LMO-SP1M	NLMO-SP1M
SPECTF	0.670 \pm 0.00	0.718 \pm 0.00	0.692 \pm 0.02	0.751 \pm 0.01	0.699 \pm 0.03	0.756\pm0.00
Robot execution failures	0.830 \pm 0.02	0.825 \pm 0.00	0.936 \pm 0.05	0.927 \pm 0.07	0.934 \pm 0.05	0.965\pm0.03

(1) 本文提出的方法优于单视图异常检测算法核 P1M, 这是由于多视图数据携带的信息更为丰富;
 (2) NLM-SP1M 和 NLMO-SP1M 算法均为在子空间使用核技巧将对应线性版本拓展到非线性版本, 分别提高了 LM-SP1M 和 LMO-SP1M 算法的性能. 这是因为在真实场景中, 样本往往线性不可分;
 (3) 二视图情况下, LMO-SP1M 在一定程度上提高了 LM-SP1M 的性能. 三视图情况下, 在特征数目较多的数据集上, Letter, Zoo, LMO-SP1M 性能优于 LM-SP1M; 而在特征数目较少的数据集上, Seed, Wine, LM-SP1M 性能明显优于 LMO-SP1M. 这主要是因为人工分割的多视图数据之间的信息是互补的, 这在特征数较少的样本中体现尤为明显. 由于处理的是非对齐多视图异常检测问题, 视图间的交互变得困难, 难以学习其互补关系, 因此将丢失重要信息. 而当样本特征数较少时, 在该样本特征被划分为三视图后, 各视图的维数也相对较少, 其携带的信息亦较少. 于是各视图内可能会出现数据聚类结构模糊. LMO-SP1M 算法在使用子空间信息的同时使用原视图空间信息, 利用各视图原空间的聚类中心来约束子空间的聚类中心. 且在判断异常策略中, 原视图空间和子空间各视图判别结果中被判为异常的视图占主导地位. 故当原视图空间出现数据聚类结构模糊时, 其产生的影响是两重的.

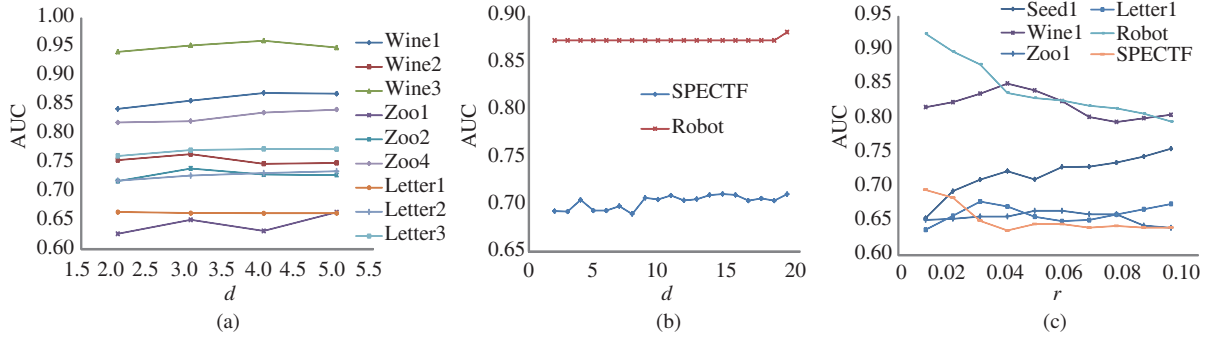


图 1 (网络版彩图) 参数分析

Figure 1 (Color online) Parametric analysis. (a) The AUC values with different values of d on the multi-view dataset splitted manually; (b) the AUC values with different values of d on the true multi-view dataset; (c) the AUC values with different values of r

一是公共子空间的聚类可能也将随之受到影响,二是在判断异常时产生数据聚类结构模糊的视图的判别结果可能会占据主导地位,从而导致 LMO-SP1M 的性能较差.

4.4 参数分析

本小节研究公共子空间维度 d 值和拒绝比 r 值对性能的影响.

图 1(a) 和 (b) 分别为不同 d 值下 LM-SP1M 算法在部分手工分割二视图数据集和真实数据集上的 AUC 值. 其中, Wine1 指由数据集 Wine 第 1 类为目标类, 其他类为非目标类所形成的数据集, 其他数据集命名方式与此相同. 由于本文所选数据集维数的限制, 故在手工分割数据集上实验时, d 的取值范围为 $\{2, 3, 4, 5\}$, 在真实数据集上实验时, d 的取值范围为 $2 \sim 20$ 之间的整数. 总体来看, 图 1(a) 和 (b) 中曲线变化较平稳, d 值对该算法性能影响不大.

图 1(c) 为不同 r 值下 LM-SP1M 算法在部分二视图数据集上的 AUC 值. 由图 1(c) 可看出, 不同数据集的 AUC 值随 r 值变化的曲线不尽相同. 就 Zoo1 而言, AUC 值随 r 值变化不大; 对于 SPECTF, 机器人执行故障数据集, AUC 值随 r 值的增大而减小; 就 Wine1, Letter1 而言, AUC 值随 r 值的增大先增大后减小再增大; 对于 Seed1, AUC 值随 r 值增大而增大. 实际应用中, 针对具体问题选择合适的拒绝比 r 有利于得到更好的性能.

4.5 可解释性分析

为了研究 P1M 的可解释性, 本文在 Seed2 数据集上进行实验. 将各视图投影到二维公共子空间, 如图 2 所示. 其中, 图 2(a) 和 (b) 分别为视图 1 和 2 在公共子空间的表示, 橙色表示目标类, 绿色表示异常, 蓝色圆点表示目标类聚类中心. 由图 2 可见, 目标类离聚类中心较近, 异常类离聚类中心较远. 而由隶属度 (能视为置信度) 计算公式 $u_{vi} = \frac{1}{1 + (\|v_{vi} - c\|^2 / \eta)^{1/(m-1)}}$ 可知, 离聚类中心近的点, 隶属度较高, 有极大的可能被视为目标类; 离聚类中心较远的点隶属度较低, 则很可能被视为异常. 表明 P1M 具有一定的可解释性.

5 总结与展望

现有的多视图异常检测方法针对的都是对齐多视图场景. 而现实中存在着众多非对齐的多视图, 其非对齐特性导致了现有多视图异常检测方法对其失效. 为此, 本文提出了 4 种基于单簇聚类的非

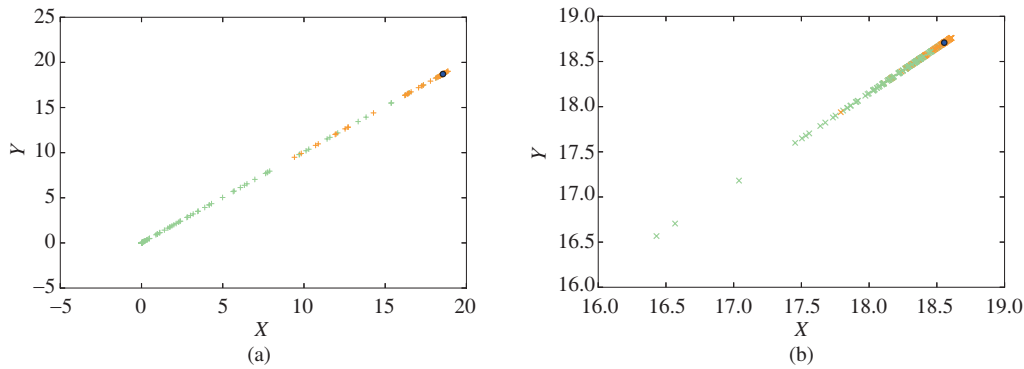


图 2 (网络版彩图) 可解释性分析

Figure 2 (Color online) Interpretability analysis. The representations of (a) view 1 and (b) view 2 in the common subspace

对齐多视图异常检测算法, 通过使用各视图的全局信息进行学习. 该算法分别为各视图学得一个变换矩阵, 用其将各视图投影到一个公共子空间, 然后在该公共子空间上进行单簇聚类, 进而实现异常检测. 本文首先提出了 LM-SP1M, 然后在其基础上分别提出了 NLM-SP1M 和 LMO-SP1M, 并在 LMO-SP1M 的基础上提出了 NLMO-SP1M. 接着, 本文对这 4 种方法与单视图异常检测算法核 P1M 进行了对比实验. 结果表明, 本文方法优于单视图异常检测算法核 P1M, NLM-SP1M 和 NLMO-SP1M 分别提高了 LM-SP1M 和 LMO-SP1M 的性能, 且本文提出的方法在非对齐多视图异常检测中有较好的性能. 接下来, 我们的工作将在以下两个方面展开, 一是将模型深度化, 二是对变换矩阵 W_v ($1 \leq v \leq V$) 进行结构约束以进一步提升可解释性.

参考文献

- 1 Li D, Chen D C, Goh J, et al. Anomaly detection with generative adversarial networks for multivariate time series. 2018. ArXiv:1809.04758
- 2 Samaneh S, Zojaji Z, Reza E, et al. A survey of credit card fraud detection techniques: data and technique oriented perspective. 2016. ArXiv:1611.06439
- 3 Ye Y F, Li T, Adjeroh D, et al. A survey on malware detection using data mining techniques. *ACM Comput Surv*, 2017, 50: 1–40
- 4 Chandola V, Banerjee A, Kumar V. Anomaly detection: a survey. *ACM Comput Surv*, 2009, 41: 1–58
- 5 He Z Y, Xu X F, Deng S C. *Discovering Cluster-Based Local Outliers*. Amsterdam: Elsevier Science Inc., 2003
- 6 Zou Y F, Zhang X, Song S Y, et al. Fast outlier detection algorithm based on local density. *J Comput Appl*, 2017, 37: 2932–2937
- 7 Nguyen H V, Gopalkrishnan V, Assent I. An unbiased distance-based outlier detection approach for high-dimensional data. In: *Proceedings of International Conference on Database Systems for Advanced Applications*, Berlin, 2011. 138–152
- 8 Coluccia A, D’Alconzo A, Ricciato F. Distribution-based anomaly detection via generalized likelihood ratio test: a general maximum entropy approach. *Comput Netw*, 2013, 57: 3446–3462
- 9 Park C, Moghadam P, Kim S, et al. Spatiotemporal camera-LiDAR calibration: a targetless and structureless approach. *IEEE Robot Autom Lett*, 2020, 5: 1556–1563
- 10 Zheng W L, Lu B L. A multimodal approach to estimating vigilance using EEG and forehead EOG. *J Neural Eng*, 2017, 14: 026017
- 11 Su R F, Wang L, Liu X Y. Multimodal learning using 3D audio-visual data for audio-visual speech recognition. In: *Proceedings of International Conference on Asian Language Processing (IALP)*, 2017. 40–43

- 12 Bai Y, Wang L C, Tao Z Q, et al. Multi-view time series classification via global-local correlative channel-aware fusion mechanism. 2019. ArXiv:1911.11561
- 13 Sohrab F, Raitoharju J, Iosifidis A, et al. Multimodal subspace support vector data description. 2019. ArXiv:1904.07698
- 14 Janeja V P, Palanisamy R. Multi-domain anomaly detection in spatial datasets. *Knowl Inf Syst*, 2013, 36: 749–788
- 15 Gao J, Fan W, Turaga D, et al. A spectral framework for detecting inconsistency across multi-source object relationships. In: *Proceedings of the 11th International Conference on Data Mining*, 2011. 1050–1055
- 16 Alvarez A M, Yamada M, Kimura A, et al. Clustering-based anomaly detection in multi-view data. In: *Proceedings of the 22nd ACM International Conference on Information & Knowledge Management*, 2013. 1545–1548
- 17 Ji Y X, He H P, Wang C D, et al. Multi-view outlier detection in deep intact space. In: *Proceedings of IEEE International Conference on Data Mining (ICDM)*, 2019. 1132–1137
- 18 Li K, Li S, Ding Z M, et al. Latent discriminant subspace representations for multi-view outlier detection. In: *Proceedings of the 32nd AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2018. 3522–3529
- 19 Houthuys L, Suykens J A K. Unpaired multi-view kernel spectral clustering. In: *Proceedings of IEEE Symposium Series on Computational Intelligence (SSCI)*, 2017
- 20 Gu J J, Chen S C, Sun T K. Localization with incompletely paired data in complex wireless sensor network. *IEEE Trans Wirel Commun*, 2011, 10: 2841–2849
- 21 Li X, Chen S C. A concise yet effective model for non-aligned incomplete multi-view and missing multi-label learning. 2020. ArXiv:2005.00976
- 22 Khan S S, Madden M G. One-class classification: taxonomy of study and review of techniques. *Knowl Eng Rev*, 2014, 29: 345–374
- 23 Thomas S, Philipp S, Sebastian M W, et al. Unsupervised anomaly detection with generative adversarial networks to guide marker discovery. In: *Proceedings of International Conference on Information Processing in Medical Imaging*, 2017. 146–157
- 24 Tax D M J, Duin R P W. Support vector data description. *Mach Learn*, 2004, 54: 45–66
- 25 Tax D M J, Duin R P W. Uniform object generation for optimizing one-class classifiers. *J Mach Learn Res*, 2001, 2: 155–173
- 26 Schölkopf B, Platt J C, Shawe-Taylor J, et al. Estimating the support of a high-dimensional distribution. *Neural Comput*, 2001, 13: 1443–1471
- 27 Schölkopf B, Williamson R C, Smola A, et al. SV estimation of a distribution's support. In: *Proceedings of Advances in Neural Information Processing Systems*, 2000. 582–588
- 28 Chen B, Feng A M, Chen S C, et al. One-cluster clustering based data description. *Chinese J Comput*, 2007, 30: 1325–1332 [陈斌, 冯爱民, 陈松灿, 等. 基于单簇聚类的数据描述. *计算机学报*, 2007, 30: 1325–1332]
- 29 Krishnapuram R, Keller J M. A possibilistic approach to clustering. *IEEE Trans Fuzzy Syst*, 1993, 1: 98–110
- 30 Bezdek J C. *Pattern Recognition with Fuzzy Objective Function Algorithms*. Berlin: Springer, 1981
- 31 Wang J, Zhong F L, Wang S T, et al. A novel discords detector for periodic time series based on weighted spherical single means with phase shift. *Acta Autom Sin*, 2011, 37: 984–992 [王骏, 钟富礼, 王士同, 等. 基于移相加权球面单簇聚类的周期时间序列异常检测. *自动化学报*, 2011, 37: 984–992]
- 32 Yang J H, Deng T Q. A one-cluster kernel PCM based SVDD method for outlier detection. *Acta Electron Sin*, 2017, 45: 813–819 [杨金鸿, 邓廷权. 一种基于单簇核 PCM 的 SVDD 离群点检测方法. *电子学报*, 2017, 45: 813–819]
- 33 Krishnapuram R, Keller J M. The possibilistic C-means algorithm: insights and recommendations. *IEEE Trans Fuzzy Syst*, 1996, 4: 385–393
- 34 Ma Z C, Chen S C. A convex formulation for multiple ordinal output classification. *Pattern Recogn*, 2019, 86: 73–84

Non-aligned multi-view anomaly detection algorithms based on one-cluster clustering

Xiaoyan SHI^{1,2} & Songcan CHEN^{1,2*}

1. *College of Computer Science and Technology/College of Artificial Intelligence, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China;*

2. *MIT Key Laboratory of Pattern Analysis and Machine Intelligence, Nanjing 210016, China*

* Corresponding author. E-mail: s.chen@nuaa.edu.cn

Abstract Multi-view data exists widely in reality, and anomalies inevitably accompany it. Existing multi-view anomaly detection methods aim at the aligned multi-view scenes, and they cannot be competent for non-aligned multi-view scenes for that they are more challenging. Therefore, in this paper, we propose four kinds of non-aligned multi-view anomaly detection algorithm based on one-cluster possibilistic C-means (PCM), namely P1M (PCM, where $C = 1$). Different from the aligned multi-view scenes, the non-alignment feature causes the lack of correspondence between the samples in each view, which makes it impossible for us to utilize the local key information at the sample level in the aligned scenes. Therefore, we try to learn from the global information of each view. The key point of this paper is that we try to learn a transformation matrix for each view by means of an alternating optimization method, and project each view into a common subspace. Then the P1M is used to learn the memberships to the target class of all training data in the common subspace, and a threshold of the memberships is set, so as to realize anomaly detection. The experimental results on several UCI datasets show that our proposed method can effectively deal with anomaly detection in the non-aligned multi-view scenes.

Keywords possibilistic C-means, non-aligned multi-view, anomaly detection, the common subspace, one-cluster



Xiaoyan SHI was born in 1994. She is currently pursuing the master degree at the College of Computer Science and Technology/College of Artificial Intelligence, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics. Her research interests include machine learning and pattern recognition.



Songcan CHEN was born in 1962. He is a full-time professor at the College of Computer Science and Technology/College of Artificial Intelligence, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics. And he is the Fellow of IAPR and CAAI. His main research interests include pattern recognition, machine learning, and neural computing.