

基于最小有向包围盒的神经网络信号开集识别方法

阮中波, 陈泽, 周良臣, 孙秀斌
(成都信息工程大学电子工程学院, 四川 成都 610225)

摘要:神经网络存在固有缺陷,即在神经网络训练完成后,将训练集中没有的未知分类数据输入已经训练完成的神经网络时,会强行对未知分类数据进行已知分类而不是将其划分为未知分类。与传统的基于样本均值的算法不同,结合多维数据聚类算法提出一种基于核密度估计和最小有向包围盒算法的神经网络开集识别算法。算法能更好地表示神经网络输出特征量空间的密度分布,并在此基础上压缩特征量空间表示范围,提高分类未训练样本的准确率。实验证明,新算法在样本覆盖率 100% 的原始空间中的分类准确率达到 98%, 优于传统算法。

关键词:神经网络;开集识别;核密度估计;最小有向包围盒

中图分类号:TP183

文献标志码:A

doi:10.16836/j.cnki.jcuit.2025.03.009

0 引言

神经网络是一种强大的机器学习算法,其目的在于模拟人脑神经系统。自 20 世纪 50-60 年代以来,神经网络得到了广泛应用和发展,现如今已被广泛应用于图像识别、自然语言处理、AI 等领域。

然而,神经网络也有缺陷和局限性。其中之一就是当训练集中仅包含有限类别时,分类模型无法处理测试集中出现的不属于任何已知类别的数据。这种情况的原因在于当前神经网络分类模型通常采用全连接层、softmax 激活函数和交叉熵损失函数,导致输出为表示输入样本属于每个类别的置信度概率分布。即使面对未知分类数据,该模型仍会给出一个概率分布而非“不确定”或“不认识”的判断。

针对这个问题,目前有以下几种对应的解决方法:

(1)添加一个其他类别,将未知分类数据归入该类别进行训练和测试。这种方法的优点是简单有效,缺点是需要额外的数据标注和数据增广,而且可能无法覆盖所有的未知分类数据。Zhu 等^[1]介绍了一些半监督学习模式,同时融合数据挖掘技术,指出两种技术融合的意义。同时,Chapelle 等^[2]在半监督支持向量机的方法上,利用集群假设的基础,通过优化低密度区域的决策边界,利用无标签数据提高数据的泛化能力和数据集的分类准确率。

(2)使用二元交叉熵损失函数,将多分类问题转化为多个二分类问题。这种方法的优点是可以让模型对每个类别单独做出判断,而不是给出一个概率分布。缺点是可能会降低模型的准确度和效率。

(3)使用距离度量方法,将每个样本转换为一个高维特征向量,并通过特定的损失函数来优化样本间的距离或相似度。这种方法的优点是可以利用样本之间的相似性来识别未知分类数据,而不是依赖于固定的类别标签。缺点是额外的样本挖掘、模型结构设计。张昊^[3]采用欧氏距离与夹角余弦来的度量方法来计算未知特征量的距离。

为解决无人机信号识别的实现场景中,由于硬件更新限制和无人机种类更新快之间的矛盾,在神经网络中增加一个“未知分类”的中间态(图1)。当未知分类积累较多时,则训练下一个神经网络,形成网络级联的形式,避免重新整体训练神经网络的结构变化与部署,方便实现时搭建工业算法。因此,本文在卷积神经网络框架下,采用核密度估计算法,结合距离度量方法和多维数据聚类算法的思想提出一种基于核密度估计的神经网络未知标签分类算法。

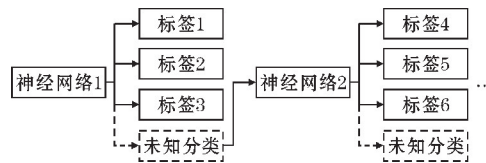


图1 神经网络级联

1 数据和原理

1.1 数据准备

本文使用无人机信号实采数据集,信号采样率为 40 MHz,每一段信号采集时间为 24.576 ms,983040 个数据点,将每一段信号进行 512 点的短时傅里叶变换

得到与之对应的时频图像,再对时频图像进行抽取,得到最终图像尺寸为 128×240 的时频图,因此训练集一共包含 4 种类型的信号共 23736 张时频信号图像和标签,图 2 为 4 种通信信号中部分信号时频图。测试集一共包含 4 种已训练的通信信号 6868 张和 4 种未训练的通信信号的时频图各 300 张,共 1200 张。其中,图像为 $128 \times 240 \times 1$ 的灰度图像,像素值归一化在 $-1 \sim 1$ 。

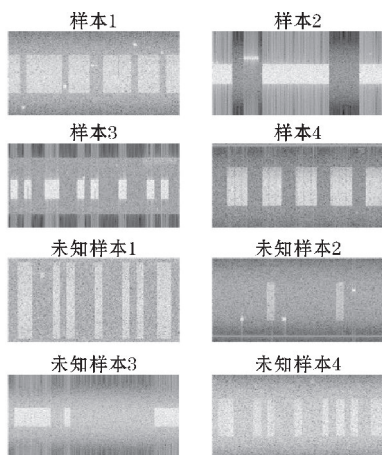


图2 4种通信信号和4种未知信号中部分信号时频图

本文基于 MATLAB 提供的神经网络函数进行卷积神经网络的框架搭建和优化调参,之后对卷积神经网络处理后的特征量进行后续处理分类。

1.2 主成分分析法(PCA)

PCA(principal component analysis)是一种常见的数据分析方式,常用于高维数据的降维。PCA 的目标是找到一组新的正交基 $\{u_1, u_2, \dots, u_k\}$ (从 n 维下降到 k 维),使得数据点在该正交基构成的平面上投影后,数据间的距离最大,即数据间的方差最大。

设有 m 条 n 维数据,将原始数据按列组成 n 行 m 列矩阵 X ,同时设正交基 u_j ,数据点 x_i 在该基底上的投影距离为 $x_i^T \cdot u_j$,则所有数据在该基底上投影的方差 J_j 为

$$J_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i^T u_j - x_{\text{center}}^T u_j)^2 \quad (1)$$

其中, m 为样本数量,在数据运算之前对数据 x 进行 0 均值初始化,即 $x_{\text{center}} = 0$,从而:

$$\begin{aligned} J_j &= \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i^T u_j)^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (u_j^T x_i \cdot x_i^T u_j) \\ &= u_j^T \cdot \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i x_i^T) \cdot u_j \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} J_j &= u_j^T \cdot \frac{1}{m} (x_1 x_1^T + x_2 x_2^T + \dots + x_m x_m^T) \cdot u_j \\ &= u_j^T \cdot \frac{1}{m} \left([x_1, x_2, \dots, x_m] \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} \right) \cdot u_j \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{m} u_j^T X X^T u_j$$

其中, $1/m \cdot X X^T$ 为矩阵 X 的协方差矩阵,求出协方差矩阵的特征值及对应的特征向量,将特征向量按对应特征值大小从上到下按行排列成矩阵,取前 k 行组成矩阵 P 。因此降维到 k 维后的数据为

$$P = X_{\text{new} \times m} = \begin{bmatrix} u_1^T \\ \vdots \\ u_k^T \end{bmatrix}_{k \times n} \cdot X_{n \times m}$$

1.3 核密度估计

核密度估计是一种非参数统计方法,用于估计随机变量的概率密度函数。核密度估计的原理是将每个观测值看作一个概率分布的中心,并通过选定一个核函数对这些概率分布进行加权平均,得到整个样本的概率密度函数估计。核函数通常选择高斯函数或矩形函数等。

核密度估计的公式为

$$f_h(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n k_h(x - x_i)$$

其中, $f_h(x)$ 是在给定数据集 $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 上估计的概率密度函数, $k_h(x)$ 是核函数, $h > 0$ 是带宽参数,用于控制估计的平滑程度。

高斯核函数是一种常用的核函数,其公式为

$$k_h(x) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} h^d} e^{-\frac{\|x\|^2}{2h^2}}$$

其中, d 是数据集中样本的维度, $\|\cdot\|$ 表示欧几里得范数。将高斯核函数代入到密度函数公式中,就可以得到以高斯核函数为基础的核密度估计公式:

$$f_h(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{(2\pi)^{d/2} h^d} e^{-\frac{\|x - x_i\|^2}{2h^2}}$$

1.4 最小有向包围盒(OBB)

包围盒在碰撞检测中有很重要的应用,评价最小有向包围盒估计算法有两个非常重要的指标:效率和紧密度,即要在尽可能短的时间内,创建出尽可能紧密的拟合点集的包围盒。有很多方式计算最小有向包围盒, O'Rourke^[4] 在 1985 年提出一种复杂度是 $O(n^3)$ 的精确算法。Barequet 等^[5] 在 2001 年提出两种估计算法:一种实现难度较大,复杂度是 $O(n + 1/\epsilon^{4.5})$ ($0 < \epsilon \leq 1$) 的算法;另一种相对较容易实现,复杂度是 $O(n \lg n + n/\epsilon^{4.5})$ 的算法。而 Gottschalk 等^[6-7] 则提出一种线性的估计算法,尽管它不是最优拟合,但是紧密度上也表现得很好。

而对于三维最小有向包围盒的寻找,首先给定一个三维凸包,设有 n 个三角形,记为 $\Delta p^k q^k r^k$, $0 \leq k \leq n$, 其中 p^k, q^k, r^k 分别是三角形的 3 个顶点。此时,任意

一个三角形面积设为 A^k , 则整个包围盒面积为

$$A^M = \sum_{k=0}^{n-1} A^k$$

此时, 根据三角形质心公式可以得到 $m^k = (p^k + q^k + r^k)/3$, 也就是3个顶点的平均值, 整个凸多面体的质心的加权平均值记为

$$M^M = \frac{1}{A^M} \sum_{k=0}^{n-1} A^k m^k$$

其中, k 表示第 k 个三角形, 上角标 M 表示整个凸多面体, 而三角形可以用参数方程表示:

$$X^k(s, t) = p^k + s \cdot u^k + t \cdot v^k$$

其中, $s \in [0, 1], y \in [0, 1-s], u^k = q^k - p^k, v^k = r^k - p^k$ 。协方差矩阵表示为

$$C_{i,j} = E[x_i x_j] - E[x_i] E[x_j] \quad (1)$$

其中, i, j 分别表示第 i 和第 j 个分量。在三维下 $i=0, 1, 2; j=0, 1, 2$ 。

由期望的定义, 有:

$$E[x_i] = \frac{\int_M x_i dA}{\int_M dA} \quad (2)$$

$$E[x_i x_j] = \frac{\int_M x_i x_j dA}{\int_M dA} \quad (3)$$

对于凸多面体的积分, 可以看成是每个三角形积分的和, 则:

$$\int_M dA = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{\Delta^k} dA = A^M \quad (4)$$

所以, 式(1)等价于

$$\begin{aligned} E[x_i] &= \frac{1}{A^M} \int_M x_i dA = \frac{1}{A^M} \sum_{k=0}^{n-1} \int_{\Delta^k} x_i dA \\ &= \frac{1}{A^M} \sum_{k=0}^{n-1} \|u^k \times v^k\| \int_0^1 \int_0^{1-s} X_i^k(s, t) dt ds \\ &= \frac{1}{A^M} \sum_{k=0}^{n-1} A^k m^k = m_i^M \end{aligned} \quad (5)$$

同理, 式(2)等价于

$$\begin{aligned} E[x_i x_j] &= \frac{1}{A^M} \int_M x_i x_j dA \\ &= \frac{1}{A^M} \sum_{k=0}^{n-1} \|u^k \times v^k\| \int_0^1 \int_0^{1-s} X_i^k(s, t) \cdot X_j^k(s, t) dt ds \\ &= \frac{1}{A^M} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{A^k}{12} (9m_i^k m_j^k + p_i^k p_j^k + q_i^k q_j^k + r_i^k r_j^k) \end{aligned} \quad (6)$$

把式(5)、(6)代入式(1)中, 得到等式:

$$\begin{aligned} C_{i,j} &= E[x_i x_j] - E[x_i] E[x_j] \\ &= \frac{1}{A^M} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{A^k}{12} (9m_i^k m_j^k + p_i^k p_j^k + q_i^k q_j^k + r_i^k r_j^k) - m_i^M m_j^M \end{aligned} \quad (7)$$

利用式(7), 就可以计算出一个 3×3 的协方差矩阵, 表示点集在三维空间的分布关系, 可以使用矩阵的

特征向量来表征这个矩阵, 它的特征向量也就是所求有向包围盒3个轴的方向向量, 计算出它的特征向量并将其归一化, 这些向量就是包围盒的方向向量 v^0, v^1, v^2 。

之后就是找到包围盒的中心和半长, 可以将凸包上的点投影到方向向量上, 然后找到每个方向上的最大值和最小值 $l_{\max}^k, l_{\min}^k, 0 \leq k \leq 2$, 因此包围盒中心的计算为

$$C = \frac{l_{\min}^0 + l_{\max}^0}{2} v^0 + \frac{l_{\min}^1 + l_{\max}^1}{2} v^1 + \frac{l_{\min}^2 + l_{\max}^2}{2} v^2$$

包围盒的半长为

$$l_{\text{half}}^k = \frac{l_{\min}^k + l_{\max}^k}{2}$$

2 仿真和结果

2.1 仿真流程

本文仿真流程主要分为两部分。第一部分预分类处理模块, 首先通过训练集训练神经网络, 同时提取神经网络的训练集特征量, 之后经过 PCA 对特征高维数据进行降维, 再对低维特征量进行核密度估计, 然后计算低维特征量的最小包围盒, 最后根据密度中心划分对应的包围盒顶点和面。第二部分是未知分类模块, 首先输入未知分类数据进入已训练完成的神经网络中获得预分类标签, 同时提取高维数据特征量, 使用预分类样本的 PCA 降维所对应的特征值和特征向量计算未知数据的降维后的特征量坐标, 之后与预分类样本的包围盒相比较, 最后根据是否在包围盒内判断是否是未知分类。具体流程见图3。

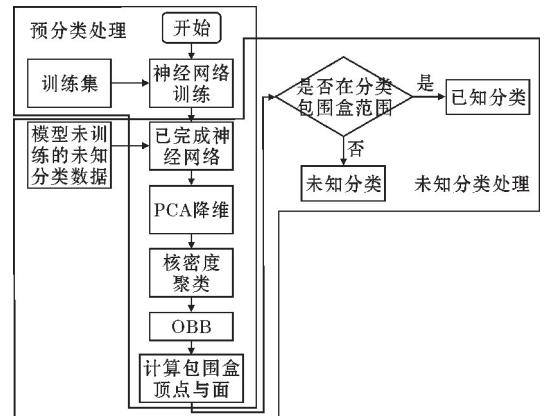


图3 仿真流程图

2.2 结果分析

图4是卷积神经网络输出的高维特征量进行降

维、核密度估计和 OBB 之后的三维可视化图像。从图 4 可以看出,高维特征向量经过密度估计之后能够有效找到训练集的密度中心,同时 OBB 算法能够有效减少冗余体积。样本 1、2、3、4 的特征空间压缩率分别达

到93.9%、77.6%、96.9%、94.1%,比常规包围球(以欧氏距离为半径)更加有效准确地划分出各个训练集的特征空间海,从而增加了未知识别准确率。

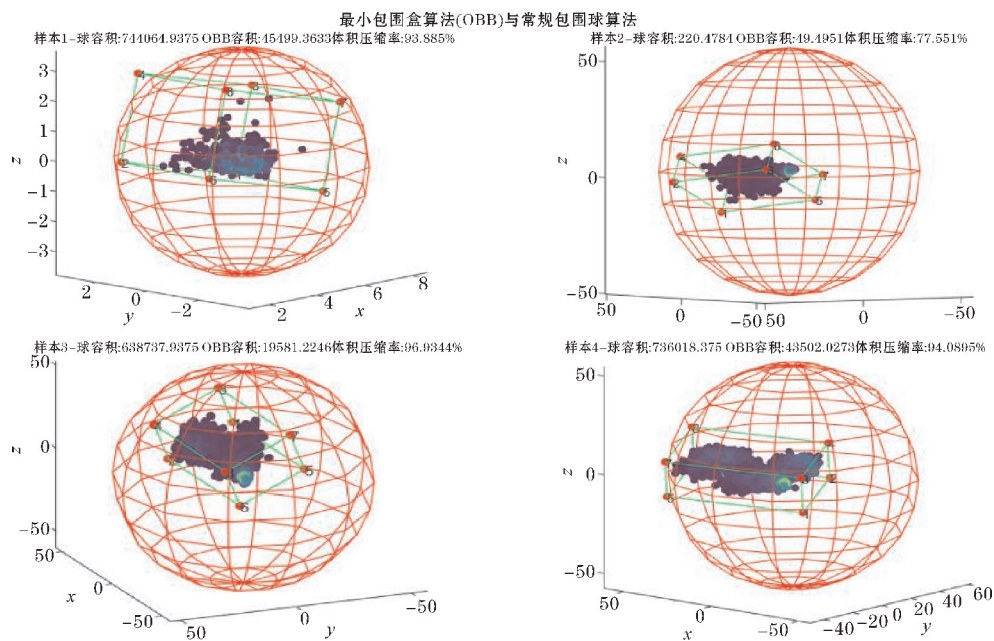


图4 三维可视化图

样本覆盖率指的是在划分的特征空间中,包含的样本点数占训练集总样本点数的比例。在核密度估计之后,计算密度中心与包围盒的最远距离面作为收缩对象,导入未知分类数据,在不同样本覆盖率下测试本文方案的性能效果。从图 5 可以看到,样本覆盖率在 100%~95% 使用未知数据进行测试时,单独使用的核密度估计算法除了在最开始的 100% 样本覆盖率时略低于传统的均值加欧几里得以及均值加余弦度量的方法,其他情况下效果都稍好一些,但是 3 种方法的整体效果都不是很好,特别是在样本覆盖率 100% 时 3 种方法的准确率都很低。但当核密度和 OBB 算法结合时,由于 OBB 压缩了特征空间,可以显著提高未知分类的划分准确率,在样本覆盖率 100% 时,准确率也能达到 98% 左右。

根据图 5,选取样本覆盖率为 100% 时的阈值范围作为标准,导入测试集和未知分类集,验证仿真分类结果。从图 6 样本混淆矩阵可以看出,在样本覆盖率为 100% 的时候,图 5 显示的未知分类准确率是在 98% 左右,而投入测试集的未训练样本分为未知样本的准确率是在 97.8%,和图 5 的准确率基本一致。

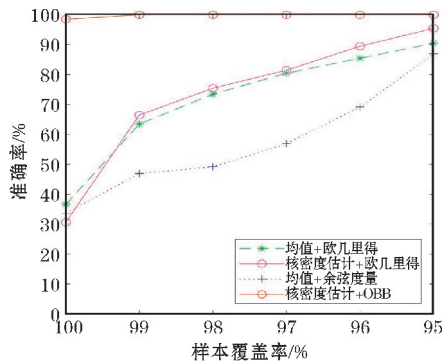


图5 未知信号识别准确率与样本覆盖率的关系

		混淆矩阵						
真实的类	未知样本	1174	13	27	63	45	88.8%	11.2%
	样本1		788	43		3	94.5%	5.5%
	样本2	11	7	1948	1		99.0%	1.0%
	样本3	5			1956		99.7%	0.3%
	样本4	10		2		1972	99.4%	0.6%
		97.8%	97.5%	96.4%	96.8%	97.6%		
	2.2%	2.5%	3.6%	3.2%	2.4%			
		未知样本	样本1	样本2	样本3	样本4	预测类	

图6 样本混淆矩阵

3 结束语

本文根据神经网络训练完成后,将未经训练的未知分类数据输入已经训练完成的神经网络时,该网络会强行对未知分类数据进行分类而不是将其划分为未知分类的问题,采用密度估计和包围盒算法的思想,将神经网络分类后的各高维特征数据进行降维,最后结合最小有向包围盒的方法,寻找包围盒的顶点与边界

作为基准,划分各分类的特征空间海,对未知分类数据进行划分。同时本文还与传统分类方法进行对比,实验结果表明:基于核密度估计和 OBB 算法的神经网络未知分类方法中,对未知样本进行分类时,分类效果和准确率优于传统的均值和余弦分类方法,在样本覆盖率 100% 的原始特征空间中的分类准确率达到 98%。但本文仅是对用于实验的数据集进行仿真实验,由于神经网络对于数据的依赖性,对于在更加复杂或者情况不同的数据集上的表现尚未可知。因此,后续会继续在多场合、更复杂的情况下进行研究。

参考文献:

- [1] Zhu X, Goldberg A B. Introduction to Semi-Supervised Learning[J]. Synthesis Lectures on Artificial Intelligence and Machine Learning, 2009, 3(1): 1-130.
- [2] Chapelle O, Zien A. Semi-supervised classification by low density separation [C]. Tenth International Workshop on Artificial Intelligence and Statistics, 2005: 57-64.
- [3] 张昊. 基于深度学习的通信信号识别关键技术研究[D]. 成都: 电子科技大学, 2020.
- [4] Joseph O' Rourke. Finding minimal enclosing boxes[J]. International journal of computer & information sciences, 1985, 14(3): 183-199.
- [5] Gill Barequet, Sarel Har-Peled. Efficiently approximating the minimum-volume bounding box of a point set in three dimensions[J]. Journal of Algorithms, 2001, 38(1): 91-109.
- [6] Stefan Gottschalk. Collision queries using oriented bounding boxes[C]. Diss. The University of North Carolina, 2000.
- [7] Stefan Gottschalk, Ming C. Lin, Dinesh Manocha. OBBTree: A hierarchical structure for rapid interference detection[C]. SIGGRAPH '96 Proceedings of the 23rd annual conference on Computer graphics and interactive techniques. ACM, 1996.
- [8] ShengLi, YunFu. Robust multi-label semi-supervised classification[C]. Big Data (Big Data), 2017 IEEE International Conference on, 2017, 11-14.
- [9] 张劲. 基于深度学习的未知调制类型的信号识别[D]. 西安: 西安电子科技大学, 2018.
- [10] Scheirer, Walter. Toward Open Set Recognition [J]. IEEE TRANSACTIONS ON PATTERN ANALYSIS AND MACHINE INTELLIGENCE, 2013, 35(7): 1757-1772.
- [11] 周龙梅. 基于深度学习的通信信号识别技术研究[D]. 成都: 电子科技大学, 2018: 3-4.
- [12] L F Maimó, A H Celdrán, M G Pérez, et al. Dynamic management of a deep learning-based anomaly detection system for 5g networks [J]. Journal of Ambient Intelligence and Humanized-Computing, 2019, 10(8): 3083-3097.
- [13] 吴莹. 吴莹雷达辐射源指纹特征提取和识别技术研究[D]. 西安: 西安电子科技大学, 2018: 6
- [14] J Han, T Zhang, D Ren, et al. Mechanism analysis and feature extraction algorithm of communication emitter fingerprint [J]. AEU-International Journal of Electronics and Communications, 2019, 106: 89-95.
- [15] 贾永强. 通信辐射源个体识别技术研究[D]. 成都: 电子科技大学, 2017: 7-8.

A Neural Network Open Set Recognition Method

RUAN Zhongbo, CHEN Ze, ZHOU Liangchen, SUN Xiubin

(College of Electronic Engineering, Chengdu University of Information Technology, Chengdu 610225, China)

Abstract: This paper is based on the inherent defect of neural networks: after the training of neural networks was completed, when the unknown classification data that is not available in the training set is input into the trained neural network, the network will force the unknown classification data to be known instead of dividing it into unknown classification. Different from the traditional algorithm based on sample mean, this paper proposes an unknown label classification algorithm based on kernel density estimation and minimum directed bounding box algorithm (OBB). This algorithm can better represent the density distribution of the output feature quantity space of the neural network, and on this basis, compress the representation range of the feature quantity space, and improve the accuracy of classifying untrained samples. Experiments show that the classification accuracy of the new algorithm reaches 98% in the original space with 100% sample coverage, which is better than the traditional algorithm.

Keywords: neural network; open set recognition; kernel density estimation; minimum directed bounding box (OBB)