

④ 215-220

子波神经网络在光谱数据压缩 与分类中的应用*

0434.313
TP18

1) 郁可 2) 张永胜 1) 姜德生

(¹⁾武汉工业大学光纤中心, 湖北, 武汉, 430070;
(²⁾武汉工业大学计算机科学系, 湖北, 武汉, 430070)

摘要 利用子波神经网络并适当选取网络结构和子波基, 实现了对化学物质红外光谱数据的压缩表达和分类, 取得了令人满意的效果, 说明子波神经网络在光谱处理方面有着较好的应用前景和优越性。

关键词 子波神经网络, 红外光谱, 数据压缩, 分类。

引言

红外光谱是进行化合物微观结构、相互作用定性及定量分析的重要依据, 准确反映所测化合物的结构特征, 通常需要庞大的光谱数据量, 因而在保证红外光谱主要特征基本不变的前提下, 如何对红外光谱数据进行压缩, 较大地减少数据, 进而改善红外光谱的存储、检索及分类处理等方式, 是一项很有意义的研究工作。子波神经网络^[1,2]简称子波网络, 是基于子波分析^[3,4]所构造的一种新的神经网络模型, 由于子波变换在处理信号时有较好的高频域时间精度和低频域频率精度的优点, 故它在压缩数据、模式识别、信噪分离等有着广泛应用。本文以子波函数构造的神经网络用于红外光谱的数据压缩表达和分类上, 结果表明, 通过调节子波基参数和权值, 网络在大量压缩数据的同时能够很好的恢复原有红外光谱, 达到压缩信号与原始信号的最佳匹配, 在分类方面子波网络比其它网络具有更高的分辨率及较少的训练次数。

1 基本原理

1.1 数据表示网络

子波变换实质上是一种不同参数空间之间通过子波基进行的积分变换^[4], 子波网络是基于子波分析而构造的神经网络模型, 即用非线性子波基取代了通常的非线性 Sigmoid 函数, 其信号表述是通过将所选取的子波基进行线性叠加来实现的, 信号 $s(t)$ 可用子波基进行如下拟合:

$$\hat{s}(t) = \sum_{k=1}^K w_k h\left(\frac{t-b_k}{a_k}\right) \quad (1)$$

* 国家自然科学基金(编号 5943206)资助项目
稿件收到日期 1997-11-19, 修改稿收到日期 1998-03-10

式中 $\hat{s}(t)$ 为拟合信号, w_k, b_k 和 a_k 分别为权值、子波基的平移因子和伸缩因子, k 为子波基的个数, 图 1 展示了仅含有一个输入和一个输出节点的单层网络结构.

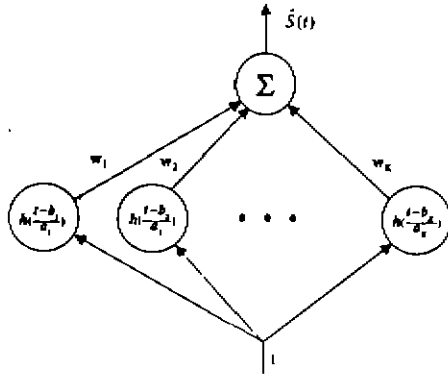


图 1 压缩表示子波神经网络
Fig. 1 Wavelet neural network for compression representation

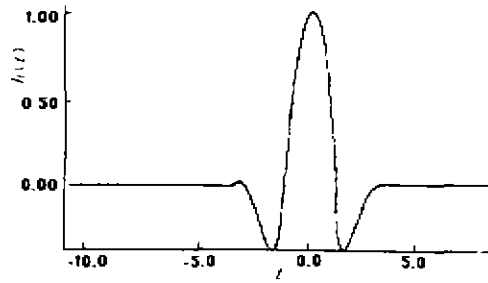


图 2 Morlet 母子波
Fig. 2 The Morlet mother wavelet

网络参数 w_k, b_k 和 a_k 可以通过下述最小均方误差能量函数进行优化:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^m [s(t_m) - \hat{s}(t_m)]^2, \tag{2}$$

其中 M 为数据采样点总数, 在式(1)中采用 Morlet 母子波如图 2, 该子波是余弦调制的高斯波, 时频域和时分分辨率高, 有很好的局域性, 并且对于不同的伸缩和平移因子 a, b 而生成的族子波函数, 可以近似认为相互独立, 即

$$h(t) = \cos(1.75t) \exp(-t^2/2). \tag{3}$$

若令 $t' = (t - b_k) / a_k$, 则 E 对 w_k 的梯度为

$$g(w_k) = \frac{\partial E}{\partial w_k} = - \sum_{m=1}^m [s(t_m) - \hat{s}(t_m)] \cos(1.75t_m) \exp(-t_m'^2/2). \tag{4}$$

同理可计算 $g(b_k), g(a_k)$.

采用共轭梯度法优化网络 w_k, b_k 和 a_k , 分别令向量 $\vec{w} = (w_1, w_2, \dots, w_k, \dots, w_k), \vec{g}(\vec{w}) = (g(w_1), g(w_2), \dots, g(w_k), \dots, g(w_k)), \vec{s}(\vec{w})$, 为 \vec{w} 第 i 次循环搜索方向, 则有

$$\vec{s}(\vec{w})_i = \begin{cases} -\vec{g}(\vec{w})_i, & (i = 1) \\ -\vec{g}(\vec{w})_i + \frac{\vec{g}(\vec{w})_i [\vec{g}(\vec{w})_i]^T}{\vec{g}(\vec{w})_{i-1} [\vec{g}(\vec{w})_{i-1}]^T} \vec{s}(\vec{w})_{i-1}, & (i \neq 1) \end{cases} \tag{5}$$

其中 T 代表转置, 同理定义 $\vec{s}(\vec{b}), \vec{s}(\vec{a})$. \vec{w} 按下式进行调节:

$$\vec{w}_{i+1} = \vec{w}_i + \alpha_{ws} \vec{s}(\vec{w})_i. \tag{6}$$

同理按类似公式调节 \vec{b} 和 \vec{a} . 本文采用了一维搜索变步长法^[5], 计算最佳步长 $\alpha_{ws}, \alpha_{bs}, \alpha_{as}$, 每次循环时, 按上式分别调节网络参数向量 \vec{w}, \vec{b} 和 \vec{a} 直到 E 小于某一设定误差或循环结束为

止. 为了合理及方便表示, 网络每次循环后的输出误差 E' 用下式表达:

$$E' = \sum_{m=1}^m [s(t_m) - \hat{s}(t_m)]^2 / \sum_{m=1}^m [s(t_m)]^2. \quad (7)$$

1.2 数据分类网络

改变子波网络结构可以对输入信号进行综合分类. 设输入训练样本总数为 P , 网络有 N 个输出节点, 对第 p 个样本, 第 n 个节点的输出用下式表示:

$$\hat{f}_n^p = \sigma(u_n) = \sigma \left[\sum_{j=1}^m w_{nj} \sum_{m=1}^m s^p(t_m) h \left(\frac{t_m - b_k}{a_k} \right) \right]. \quad (8)$$

其中 $\sigma(x) = 1/[1 + \exp(-x)]$ 为一个 Sigmoid 函数, 图 3 给出了式(8)的分类子波网络结构示意图.

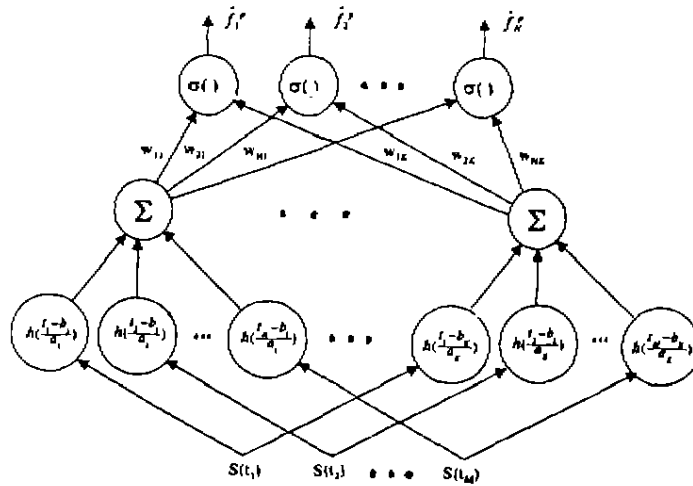


图 3 分类子波神经网络

Fig. 3 Wavelet neural network for classification

网络参数 w_{nk} , b_k 和 a_k 可通过下述能量函数 E 优化:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^P \sum_{n=1}^N (f_n^p - \hat{f}_n^p)^2. \quad (9)$$

其中 f_n^p 为第 p 个样本, 第 n 个节点的理想分类输出. 利用式(3)和 1.1 节所述的共轭梯度法优化网络参数 w_{nk} , b_k 和 a_k , 直到 E 小于某一设定误差.

2 结果与讨论

2.1 光谱压缩

根据前述方法, 我们对一个 $\alpha, \alpha' \dots$ 二氧代烯酮环二硫代缩酮的化合物的特征红外光谱(波数从 $4000 \sim 452 \text{cm}^{-1}$, 波数间隔为 4cm^{-1} , 共 888 个数据点)进行了压缩研究, 将其红外光谱的全部数据点作为训练集, 波数作为输入, 透光率作为目标输出, 共采用了 30 个子波基进行训练, 将 w_k, a_k 初始值定为随机数(范围均从 $-100 \sim +100$), 为了加快网络收敛速度

并避免误差局部最小,以波峰和波谷等所对应的波数作为 b_k 的初始值,训练次数为 200 次,开始步长分别为 $\alpha_w = 10^{-2}$, $\alpha_2 = \alpha_b = 10^{-7}$,训练结束后输出误差 E' 为 0.000275,将其全部波数作为输入对谱图进行了恢复,输出误差 E' 也为 0.000275.图 1 给出该化合物的原始和恢复后的红外光谱.可以看出恢复后的光谱能很好地保持原有光谱的特性,特别是能够较准确地反映吸收峰的位置和强度.这样红外光谱的原始透光率数据可以用 30 组 w_k 、 b_k 和 a_k 共 90 个参数表示出来,从而实现其光谱压缩,压缩比约为 1:10,压缩效果是令人满意的.表 1 给出了实际谱峰值与恢复后的谱峰值.

2.2 光谱分类

由于一些物质的衍生物或某些类不同化合物之间存在着光谱结构的相似性(即峰位、峰强、峰形、峰宽、峰数目等的相似),可以在各种谱与物质结构间建立

某种确定的对应关系,并对不同的物质进行分类.这里我们对 OH、NH、CO、芳香族环烃 4 类物质进行初步分类,选择了这 4 类中的 125 种物质的特征红外光谱作为分类训练集,用另外 44 种物质的红外光谱作为检测集,其中输出层由 2 个节点组成,用 4 个二进制代码表示分类结果.开始对采样数据进行了预处理,为了方便和突出子波基概念,这里用了固定步长法,我们先经验的采用 10 个固定子波基(即 b_k 和 a_k , $k=1,2,\dots,10$,取某些固定值),初始权值为一随机数,通过只调节权值来优化网络,并给定 α_w 取值.经过 160 次训练,用未经训练的红外光谱检验后表明,对这 4 类物质的识别可达 89% 的准确率.我们再采用对权值 w_k 、子波基的平移因子 b_k 和伸缩因子 a_k 实行全调节优化网络,并给定 $\alpha_w, \alpha_2, \alpha_b$ 取值,经过 150 次训练后,分类准确率达到 93%.这表明选用合适的子波基可以提高网络分类率.

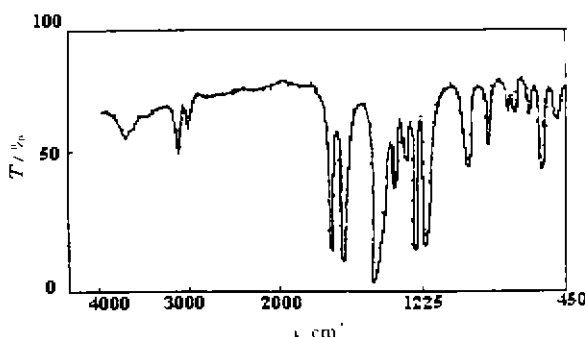


图 4 α, α' -二氧代烯酮环-硫代缩酮红外光谱图
(——原始光谱,恢复后光谱)

Fig. 4 α, α' -dioxoketene cyclic dithioacetals infrared spectra (——original spectrum,recovery spectrum)

表 1 实际峰值与恢复后的谱峰值

Table 1 Actual spectral peak and recovery spectral peak

序 号	实际谱峰值		恢复后的谱峰值	
	波数/ cm^{-1}	透光率/%	波数/ cm^{-1}	透光率/%
1	3243	56.2	3243	56.218130
2	1299	18.5	1298	18.215226
3	1287	15.3	1288	16.033068
4	1268	10.1	1268	8.238141
5	1242	18.0	1241	19.981833
6	1222	17.8	1222	16.210110
7	628	48.9	626	46.037789
8	597	55.5	597	54.403103
9	581	44.6	581	44.159781

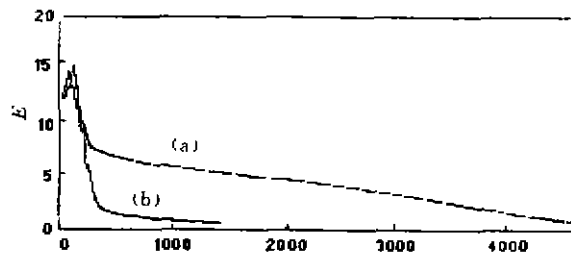


图 5 两种神经网络收敛误差曲线图

(a) BP 网络, (b) 子波网络

Fig. 5 The converging error curves of two kinds of neural network

(a) BP network, (b) wavelet network

子波网络用于对原始数据分类有以下几方面的优点: (1) 用较少的训练样本即可达到良好的训练效果, 从而加快训练速度, 增加网络的识别分辨率; (2) 子波基可以对尺度、变换等的不变性进行合并, 减少训练样本数; (3) 具有很好的特征提取和屏蔽随机噪声能力, 特别适于非平稳, 非线性信号的分类。

我们对 BP 网络和子波网络采用同样步长的初始权值, 经过 5000 次迭代训练来比较网络收敛速度, 图 5 显示了两种网络学习的收敛曲线, 其中横坐标为学习次数 i , 纵坐标为学习过程的误差值 E 。可见子波网络收敛速度明显优于 BP 网络。

3 结语

从上述讨论可知, 子波网络对红外光谱数据压缩和分类具有一定的应用价值, 展示了它在光谱方面的应用前景, 但对整个红外波段, 随着子波基个数的增加, 计算量将迅速增大, 这样对硬件的要求也要提高, 算法的改进及并行计算机的应用有望解决这一问题, 需要指出的是, 子波基的数量和网络参数的初始值对网络训练有很大的影响, 此外, 采用不同的母子波和误差能量函数, 有可能减小训练误差, 并加快网络收敛速度。

REFERENCES

- 1 Zhang Q, Benvenise A. *Proc. IEEE Trans. on Neural Network*, 1992, 3(6): 889~898
- 2 Harold H S, Brain T, Shubha K. *Optical Engineering*, 1992, 31(9): 1907~1916
- 3 Bos M, Hoogendam E. *Analytica Chimica Acta*, 1992, 267: 73~80
- 4 Qin Q Q, Yang Z K. *Practical Wavelet Analysis*. Xi'an: Xi'an University of Electron Science and Technology Press (秦前清, 杨宗凯. 实用小波分析, 西安: 西安电子科技大学出版社), 1995: 1~16
- 5 Hu S R, Shen Q, Hu D W, et al. *Application Technology of Neural Network*, Changsha: National Defense University of Science and Techology Press (胡守仁, 沈清, 胡德文, 等. 神经网络应用技术, 长沙: 国防科技大学出版社), 1993. 42~69

THE APPLICATION OF WAVELET NEURAL NETWORK IN SPECTRAL DATA COMPRESSION AND CLASSIFICATION*

¹⁾YU Ke ²⁾ZHANG Yong-Sheng ¹⁾JIANG De-Sheng

(¹⁾Optical Fiber Sensing Research Center, Wuhan University of Technology, Wuhan, Hubei 430070, China;

(²⁾Department of Computer Science, Wuhan University of Technology, Wuhan, Hubei 430070, China)

Abstract A new model of neural network-wavelet neural network was introduced. The chemical substance infrared spectral compression representation and classification were realized with adaptive network structure and daughter wavelet, and the satisfactory results were gained. This demonstrates that the wavelet network has bright application prospects and advantages in spectra processing.

Key words wavelet neural network, infrared spectra, data compression, classification.

* The project supported by the National Natural Science Foundation of China
Received 1997-11-19, revised 1998-03-10