

VW-SAE: 一种改进的光谱数据特征表示方法

胡晓勇, 王海荣, 刘午杨

(北方民族大学 计算机科学与工程学院 宁夏 银川 750021)

摘要: 针对高光谱图像维度高、目标特征提取不准确的问题,提出了一种可变加权堆叠式自编码器(variable-wise weighted stacked autoencoder, VW-SAE)的光谱数据特征表示方法。VW-SAE 方法在堆叠式自编码器(SAE)的基础上,从每个 AE 的输入层中识别出重要的变量,通过对输出变量的相关性分析,将输出信息映射在 AE 目标函数的不同变量,引入不同的权值进行训练,逐层提取获得与输出相关的特征,并将其堆叠形成深网络。通过对每层网络权重的调控,在降低光谱数据维度的过程中,更好地提取光谱数据中的特征信息,进而提高了预测模型的精度。为验证方法的有效性,使用已采集的 10 248 张水稻图像,在堆叠式自编码器结合全连接神经网络(SAE-FNN)的基础上,搭建了 VW-SAE-FNN 模型对水稻氮元素进行检测,实验结果表明该方法与 SAE 方法相比准确率明显提升。

关键词: 高光谱图像; 可变加权; 堆叠式自编码器; 权重; 氮元素

中图分类号: TP751.1

文献标志码: A

文章编号: 1671-6841(2021)02-0034-07

DOI: 10.13705/j.issn.1671-6841.2020278

0 引言

高光谱遥感具有光谱分辨率高、波段连续性强、光谱信息量大等特点^[1]。高光谱图像与普通图像相比,其维度更高、包含的特征信息更多,而传统的图像处理技术无法充分挖掘其中的光谱信息^[2-3]。因此如何有效地对光谱图像降维、提取特征信息是该研究领域的主要难题之一。近年来,深度学习技术在图像特征提取方面的强大优势被证实,利用深度学习解决上述问题成为可能,其中自编码器被广泛应用于无监督特征学习中^[4]。堆叠自动编码器(stacked autoencoder, SAE)是一种常用的深度学习模型^[5]。SAE 由多层自动编码器组成,已有的一些研究成果表明 SAE 在提取高阶特征方面具有较好的有效性。文献[6]利用堆叠降噪自编码器进行遥感图像特征提取和描述,在油库目标检测应用中取得较好效果。文献[7]使用堆叠式降噪自动编码器(SDA)从补丁中提取深层特征表示,然后对这些特征表示执行无监督和分层 K 均值聚类,并构建一个索引树结构,从而提高了图像分类的结果。文献[8]最早提出利用自编码器实现高维数据的降维处理,并利用神经网络对降维后的数据进行回归训练。文献[9]利用自编码器对光谱数据进行了降维分析,实验结果发现自编码器有效地重构了原始数据的特征,更好地进行分类。文献[10]通过自编码器无监督训练,实现了光谱图像的无监督分类,与传统方法相比,大大提升了分类精度。文献[11]针对软传感器引入了深度堆叠的自动编码器,并用于逐层输出相关的特征表示,通过与输出变量的相关分析可知,重要变量是从每个自动编码器的输入层中的其他变量中识别出来的。与传统的多层 NN 和 SAE 相比,提出的 VW-SAE 可以提供更好的预测性能。文献[12]结合自编码器和深度学习的方法,实现了菠菜叶片的氮素预测。

综上所述,自编码器在高光谱数据的特征提取及表示方面具有优势。因此,本文基于自编码器与全连接神经网络组成的模糊神经网络,提出一种将可变加权的堆叠式自编码器与全连接神经网络相结合的方法,通过对高维数据降维、重构,逐层提取与输出相关的特征,从而获取高光谱数据中的深光谱特征,解决了传统神经网络在光谱数据训练过程中特征提取不准确,损失率高的问题。最后利用模糊神经网络 FNN 来预测目标浓度,从而为农业生产者提供生长状况信息,实现精准施肥。

收稿日期:2020-08-26

基金项目:自治区重点研发计划(引才专项)项目(2018BEB04002);国家级创新创业项目(2019-11407-032);北方民族大学校级重点科研项目(2019KJ26)。

作者简介:胡晓勇(1995—),男,硕士研究生,主要从事图形图像与智能信息处理研究,E-mail:1031279395@qq.com;通信作者:王海荣(1977—),女,副教授,主要从事大数据知识工程研究,E-mail:bmdwhr@163.com。

1 自编码器相关理论

堆叠自动编码器是一种经典的深度学习算法,是深度学习领域常用的一个深度学习模型,由多个自动编码器串联堆叠构成。自动编码器(autoencoder, AE)是一种前馈无返回的神经网络,如图 1 所示是 AE 模型的基本结构,其包含一个输入层,一个隐含层,一个输出层^[13]。堆叠多层自动编码器的目的是逐层提取输入数据的高阶特征,在此过程中逐层降低输入数据的维度,将一个复杂的输入数据转化为一个简单的高阶特征,然后再把这些高阶特征输入到一个分类器或者聚类器中进行分类或聚类。

假设 AE 的输入是 $\mathbf{X}=[X_1, X_2, \dots, X_{d_x}]^T \in \mathbf{R}^{d_x}$,其中 d_x 是输入的维数。编码器 \mathbf{X} 将从输入层投影到隐含层, $\mathbf{h}=[h_1, h_2, \dots, h_{d_h}]^T \in \mathbf{R}^{d_h}$ 通过映射函数 f 实现, $\mathbf{h}=f(\mathbf{x})=S_f(\mathbf{W}\mathbf{x}+\mathbf{b})$, 其中: d 表示隐含层变量的维度; \mathbf{W} 是 $d_h * d_x$ 的权值矩阵, \mathbf{b} 是偏置向量。

在解码层, \mathbf{h} 表示从隐含层映射到输出层的 \mathbf{X} , 通过激活函数 \bar{f} 来映射。 $\bar{\mathbf{x}}=\bar{f}(\mathbf{h})=S_{\bar{f}}(\bar{\mathbf{w}}\mathbf{h}+\bar{\mathbf{b}})$ 其中: $\bar{\mathbf{w}}$ 是输出层的权值矩阵; $\bar{\mathbf{b}}$ 是它的偏差; 激活函数可以是 sigmoid 或者其他。因此 AE 层的参数集合为 $\theta = \{\mathbf{W}, \bar{\mathbf{w}}, \mathbf{b}, \bar{\mathbf{b}}\}$, AE 通过函数 $\mathbf{g}(\theta) = \bar{f}(f(\mathbf{x})) \approx \mathbf{x}$ 完成重构, 并且通过限制隐含层单元数量防止重构输出 $\bar{\mathbf{x}}$ 与输入 \mathbf{X} 相似。在输入层将训练样本数据表示为 $\mathbf{X}=\{X_1, X_2, \dots, X_N\}$, 每个输入样本 X_i 先被投影到隐含层, 将其表示为 h_i , 然后隐射到输出层进行重构得到输出 $\bar{\mathbf{x}}$ 。通过计算重构误差的均方值, 使重构损失函数最小化, 得到模型参数。其损失函数定义为 $J(\mathbf{W}, \mathbf{b}, \bar{\mathbf{w}}, \bar{\mathbf{b}}) = \sum_{i=1}^N \|\bar{x}_i - X_i\|^2 / 2N = \sum_{i=1}^N \|g_o(x_i) - x_i\|^2 / 2N$ 。

最后利用梯度下降法对 AE 的参数进行更新。在每层的训练结束后, 保存 AE 的训练权重和偏差。堆叠式自编码器就是将多个 AE 进行堆叠组成一个深层次的神经网络结构。如图 2 所示为 SAE 模型结构。

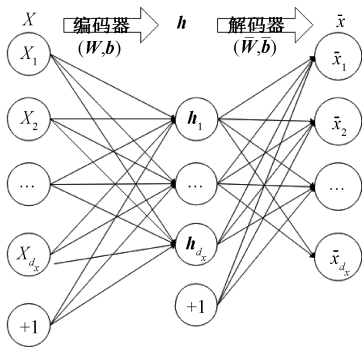


图 1 AE 的模型结构

Figure 1 Model structure of AE

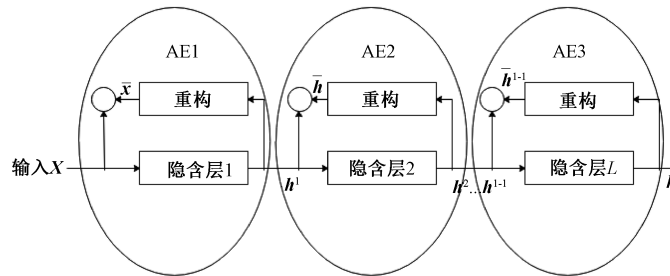


图 2 SAE 结构模型

Figure 2 SAE structure model

对 SAE 模型的训练分为两步: 第一步逐层无监督预训练, AE 通过最小化重构误差将原始输入数据映射到第一个隐含层; 第二步在 AE 进行训练后, 将第一个隐含层的输出作为第二个 AE 的输入, 然后对第二个 AE 进行训练, 得到训练参数 $\{\mathbf{W}_2, \mathbf{b}_2\}$ 。然后进行多层迭代训练得到最后的 AE。在无监督的预训练之后, 将 AE 的输出层添加到 SAE 的顶部, 进行权重和偏差的微调。预训练的权值 $\{\mathbf{W}_k, \mathbf{b}_k\}_{k=1,2,\dots,K}$ 为各隐层权值的初始化, 输出层的参数 $\{\mathbf{W}_0, \mathbf{b}_0\}$ 可以随机初始化, 然后整个网络由反向传播调整获得改进的权重 $\{\mathbf{W}'_k, \mathbf{b}'_k\}_{k=1,2,\dots,K}$ 。最小化目标变量的预测误差函数为

$$J_o = \sum_{j=1}^{N_t} \|y_j - \hat{y}_j\|^2 / 2N_t, \tag{1}$$

式(1)中的 y_i 和 \hat{y}_i 分别是标记和预测值 j 的输出数据样本。其训练过程如图 3 所示。

在对 SAE 模型的训练过程中, 分别选取 10、20、30、40、50、60、70、80、90 作为初始输入维度, 对模型进行训练, 训练包含 138 560 个参数, 模型预测准确率达 95%, 但是损失率为 0.28。因此为了降低模型的损失率, 进一步提高预测准确率, 对模型进行了改进。

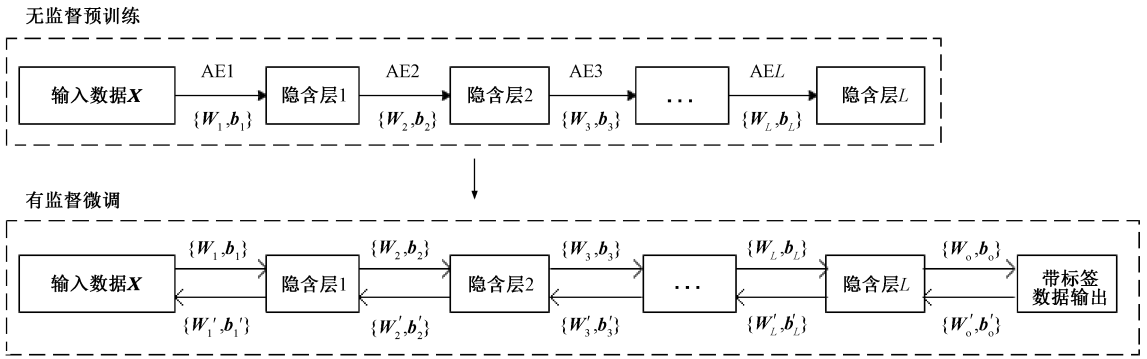


图 3 SAE 的训练过程

Figure 3 SAE training process

2 可变加权的堆叠式自编码器

针对高光谱数据无监督训练方法存在大量与目标输出无关的信息, VW-SAE 模型分层的预训练可以帮助深度学习从低级特征中提取高级特征, 通过逐层提取相关特征, 使模型能够在更高的层次结构中学习复杂和抽象的特征。在 VW-SAE 模型中可变权值都是通过标记数据进行额外计算, 然后利用加权损失函数对 AE 进行训练, 使隐藏特征与目标变量更加相关。其结构如图 4 所示。

图 4 所示的分层预训练为 SAE 提供良好的初始权重, 通过最小化训练样本在整个输入空间上的重构误差来实现。在原始 AE 中, 目标是重建输出层的输入数据, 构建 \bar{x} 需要原始 x 尽可能多。因此, 应该

重建误差函数 $\|x - \bar{x}\|^2 = \sum_{d=1}^{d_x} (X_d - \bar{X}_d)^2$ 。

尽管变量的某些维度可能与输出变量关系不大, 但它们在 AE 重构中仍与其他维变量发挥着同样的作用。因此, 这个变量的维数也应该被准确地重构。因此, 需要对重构对象中不同维度的变量赋予不同的权值。在此基础上, 计算 AE 基本模型的变权值。为了训练 VW-AE, 首先应该使用带标签的数据来获得可变权重。假设标记的训练数据为 $\{X_l, Y_l\} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_j, y_j), \dots, (x_{N_l}, y_{N_l})\}$, 其中, N_l 为标记样本的数量。变量的重要性由它们与目标变量的相关性决定。因此, 第 d 个变量的相关系数计算公式为

$$\rho_{(d)} = \text{cov}(X_{1(d)}, Y_1) / (\sqrt{\text{var}(X_{1(d)})} \sqrt{\text{var}(Y_1)}),$$

协方差和方差项计算为

$$\text{cov}(X_{1(d)}, Y_l) = \left(\sum_{j=1}^{N_l} (x_{j(d)} - \bar{x}_{(d)}) (y_j - \bar{y}) \right) / N_l - 1,$$

$$\text{var}(X_{1(d)}) = \left(\sum_{j=1}^{N_l} (x_{j(d)} - \bar{x}_{(d)})^2 \right) / N_l - 1, \text{var}(Y_l) = \left(\sum_{j=1}^{N_l} (y_j - \bar{y})^2 \right) / N_l - 1,$$

第 d 个输入变量的权值应为与其相关系数绝对值的单调递增函数。其变权公式为 $\lambda_d = |\rho_d| / \sum_{i=1}^{d_x} |\rho_{(i)}|$, 最小化标记数据的变权重构误差函数为

$$J_\lambda = (W, \bar{W}, b, \bar{b}) = \left(\sum_{n=1}^{N_l} \sum_{d=1}^{d_x} \lambda_{(d)} \|x_{n(d)} - \bar{x}_{n(d)}\|^2 \right) / 2N_l = \left(\sum_{n=1}^{N_l} (x_n - \bar{x}_n)^T \Delta (x_n - \bar{x}_n) \right) / 2N_l,$$

式中 Δ 是 $d_x \times d_x$ 的对角矩阵。

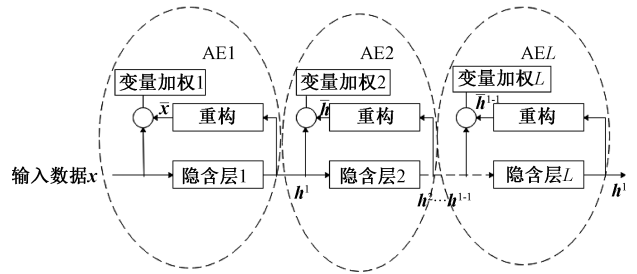


图 4 VW-SAE 结构模型

Figure 4 VW-SAE structure model

本文的核心算法如下。

```
Data: ramdonpixel_train.pkl, ramdonpixel_val.pkl
Process: # Load data.
1: x_train=train_set1[0], y_train=train_set1; x_valid=train_set2[0], y_valid=train_set2
2: while SAE model do
3:   save pre-train SAE model weights1
4: end while
5: load data
6: while rebuild SAE model do
7:   if weights1  $\neq$   $\emptyset$  then
8:     load weights1 as rebuild SAE model input
9:     loss=new loss
10:    new loss( $X_n, X_{n_1}$ )
11:    a= $X_n - X_{n_1}$ 
12:    N=k.int_shape(a)
13:    b=k.dot(a, k.eye(N))
14:    a=k.transpose(a)
15:    result=k.dot(a, b)
16:    result=result/(2*N)
17:    result=k.sum(result)
18:    return result
19: save model.compile(optimizer='Adam', loss=SAE_loss, metrics=['accuracy'])
20: save weight2
21: load rebuild SAE
22: while rebuild SAE model do
23: load weight2
24: save VW-SAE model
25: end
```

利用 VW-SAE 算法,可以更好地初始化深度神经网络的权值。对于每一层,根据其目标输出变量的相关性,赋予不同的权值,然后利用权重设计新的加权损失函数,使得不相关信息被 VW-AE 约束。由于整个网络是逐层预训练的,因此信息将进一步从低级特征加强到高级特征。同时,不相关信息从低层次逐渐被抑制甚至消除。

基于 VW-SAE 算法,本文搭建了可变加权堆叠式自编码器结合全连接神经网络(VW-SAE-FNN)模型,用来预测水稻叶片氮元素含量,模型框架如图 5 所示。利用有标签数据以半监督的方式对 VW-SAE 进行训练,提取标记和未标记输入数据的深层输出相关特征,利用与输出相关的深层特征和标记的输出数据,建立它们之间的回归模型。

3 VW-SAE-FNN 模型验证

为了验证本文提出的改进算法,使用从高光谱图像中提取的 50 000 多条平均光谱值对 VW-SAE-FNN 算法进行验证,用 190 多份样本进行微调,采用 Pycharm、Python 等语言工具搭建基于 Windows 环境下的可视化验证系统,同时使用决定系数(R^2)、均方根误差(RMSE)和剩余预测偏差(RPD)来评估模型的性能。两种评价指标公式为

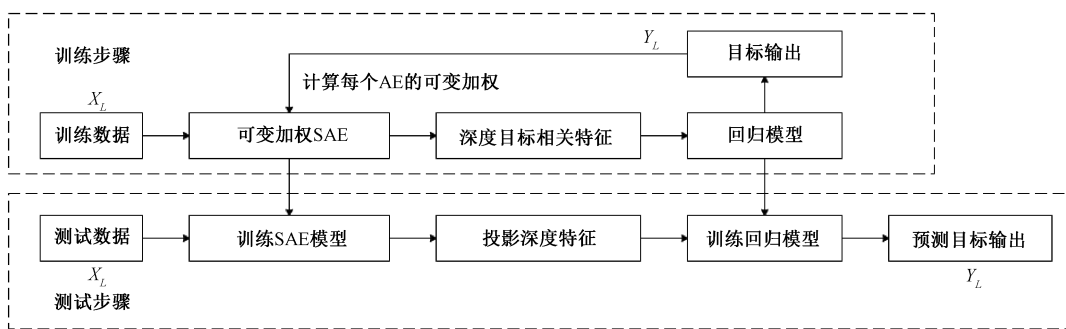


图 5 VW-SAE-FNN 模型框架

Figure 5 VW-SAE-FNN model framework

$$R^2 = 1 - \left(\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \right) / \left(\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2 \right), \quad RMSE = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2},$$

其中:拟合决定系数(R^2)表示实测值与预测值之间密切程度;均方根误差($RMSE$)表示实测值与预测值之间离散程度。 R^2 越大, $RMSE$ 越小,说明估测效果越精确。

建立模型首先是确定模型的设置,模型的一些超参数,如隐含层的数量和每个隐含层中神经元的数量,可能会对模型的性能产生巨大影响。经过反复实验,最终确定本实验的回归模型由3个自编码器堆叠而成,总共训练276462个参数,将初始数据输入模型,经过第一次的训练,将其训练的权重保存,作为第二层变权自编码器的输入,最后再进行一次训练,通过多次堆叠最终形成可变加权的自编码器。一旦自编码器逐层预训练完成,FNN将连接到自编码器的顶层输出对网络进行微调,选定网络结构为(512,100),SAE的顶层是输出相关特征的最高层次,是回归网络的输入层。因此,在训练步骤中使用训练数据训练一个VW-SAE模型和一个回归模型。对于测试步骤,首先将测试样本的输入数据应用到训练好的VW-SAE模型中,得到深度特征。然后将深度特征代入训练后的回归模型中,对测试样本的输出进行预测。这里,回归模型是一个FNN神经网络,最后生成VW-SAE-FNN模型。在本文的实验中,对VW-SAEs进行了批量值为100、历元值为100的预训练,并对VW-SAE-FNN模型进行了微调,批量值为100,历元值为11000。并且使用不同深度光谱特征对VW-SAE-FNN回归模型进行调优(表示为VW-SAE-FNN10、VW-SAE-FNN20、VW-SAE-FNN30、VW-SAE-FNN40、VW-SAE-FNN50、VW-SAE-FNN60、VW-SAE-FNN70、VW-SAE-FNN80、VW-SAE-FNN90),通过实验发现在光谱特征维度为30时,模型预测结果最好,因此选择将光谱特征维度30为最终模型的光谱参数。SAE-FNN和VW-SAE-FNN两种模型的预测结果如表1所示。

表 1 预测结果

Table 1 Prediction results

模型	校正			预测		
	R^2	$RMSE$	RPD	R^2	$RMSE$	RPD
SAE-FNN	0.952	0.225	4.596	0.903	0.331	3.238
VW-SAE-FNN	0.964	0.180	4.633	0.913	0.307	2.730

从表1可以看出,通过变量加权技术,利用逐层提取输入数据的高级抽象特征,在SAE的最顶层之后添加一层FNN以微调权重,最后在全连接的网络中使用预先训练好的权重和偏置值,提高决定系数的同时,降低了模型的均方根误差值,模型预测准确率有了很大的提升。如图6、7所示,VW-SAE-FNN和SAE-FNN模型的实测值与预测值的高相关系数也证实了VW-SAE-FNN方法的优越性。

通过分析,图6、图7的回归系数分别为0.975、0.934,可以看出变量加权技术提高了预测值与实测值的相关系数,使回归曲线更加紧致,提高了回归和泛化的性能,氮元素预测结果更加准确。

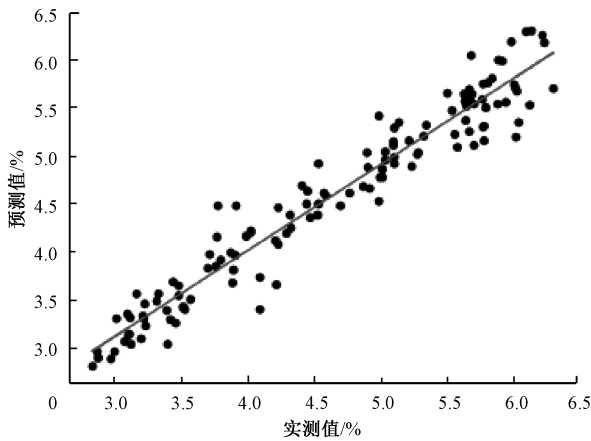


图6 VW-SAE-FNN 预测值与实测值

Figure 6 Predicted value and measured value of VW-SAE-FNN

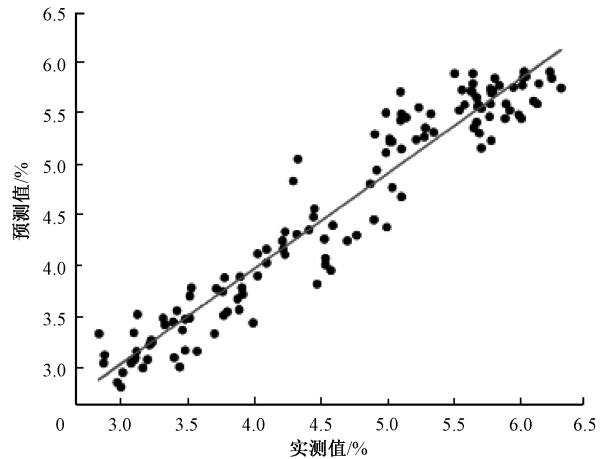


图7 SAE-FNN 预测值与实测值

Figure 7 Predicted value and measured value of SAE-FNN

4 结论

本文结合农业领域需求,研究了深度学习与高光谱技术相结合的方法,分析了目前深度学习在对高光谱信息挖掘过程中存在的不足,通过改进损失函数,挖掘更多的高光谱特征,提出了将变量加权技术与深度学习相结合的改进算法 VW-SAE-FNN,该算法可以更好地初始化深度神经网络的权值。为了验证该算法的有效性,本文面向水稻领域,搭建实验环境,对预处理的 50 000 多条真实应用场景下的高能光谱数据进行了训练,并对比分析了算法的性能。通过实验结果可以看出,本文方法的预测结果准确性更高。

参考文献:

- [1] 方红亮,田庆久. 高光谱遥感在植被监测中的研究综述[J]. 遥感技术与应用, 1998, 13(1): 3-5.
FANG H L, TIAN Q J. A review of hyperspectral remote sensing in vegetation monitoring[J]. Remote sensing technology and application, 1998, 13(1): 3-5.
- [2] 张号遼,李映,姜晔楠. 深度学习在高光谱图像分类领域的研究现状与展望[J]. 自动化学报, 2018, 44(6): 961-977.
ZHANG H K, LI Y, JIANG Y N. Deep learning for hyperspectral imagery classification: the state of the art and prospects[J]. Acta automatica sinica, 2018, 44(6): 961-977.
- [3] 赵小敏,孙小香,王芳东,等. 水稻高光谱遥感监测研究综述[J]. 江西农业大学学报, 2019, 41(1): 1-12.
ZHAO X M, SUN X X, WANG F D, et al. A summary of the researches on hyperspectral remote sensing monitoring of rice [J]. Acta agriculturae universitatis jiangxiensis, 2019, 41(1): 1-12.
- [4] 马建红,杨浩,姚爽. 基于自动编码器的句子语义特征提取及相似度计算[J]. 郑州大学学报(理学版), 2018, 50(2): 86-91.
MA J H, YANG H, YAO S. Semantic feature extraction and similarity computation of sentences based on auto-encoder[J]. Journal of Zhengzhou university (natural science edition), 2018, 50(2): 86-91.
- [5] VINCENT P, LAROCHELLE H, LAJOIE I, et al. Stacked denoising autoencoders: learning useful representations in a deep network with a local denoising criterion[J]. Journal of machine learning research, 2010, 11: 3371-3408.
- [6] FORTUNA L, GIANNONE P, GRAZIANI S, et al. Virtual instruments based on stacked neural networks to improve product quality monitoring in a refinery[J]. IEEE transactions on instrumentation and measurement, 2007, 56(1): 95-101.
- [7] YU J, HUANG D, WEI Z L. Unsupervised image segmentation via Stacked Denoising Auto-encoder and hierarchical patch indexing[J]. Signal processing, 2018, 143: 346-353.
- [8] GENT C R, SHEPPARD C P. Special Feature. Predicting time series by a fully connected neural network trained by back propagation[J]. Computing & control engineering journal, 1992, 3(3): 109.
- [9] ZABALZA J, REN J, ZHENG J, et al. Novel segmented stacked autoencoder for effective dimensionality reduction and feature extraction in hyperspectral imaging[J]. Neurocomputing, 2016, 185: 1-10.

- [10] TAO C, PAN H B, LI Y S, et al. Unsupervised spectral-spatial feature learning with stacked sparse autoencoder for hyperspectral imagery classification[J]. IEEE geoscience and remote sensing letters, 2015, 12(12): 2438-2442.
- [11] YUAN X F, HUANG B, WANG Y L, et al. Deep learning-based feature representation and its application for soft sensor modeling with variable-wise weighted SAE[J]. IEEE transactions on industrial informatics, 2018, 14(7): 3235-3243.
- [12] YU X J, TANG L, WU X F, et al. Nondestructive freshness discriminating of shrimp using visible/near-infrared hyperspectral imaging technique and deep learning algorithm[J]. Food analytical methods, 2018, 11(3): 768-780.
- [13] 刘欢, 徐健, 李寿山. 基于变分自编码器的情感回归半监督领域适应方法[J]. 郑州大学学报(理学版), 2019, 51(2): 47-51.
- LIU H, XU J, LI S S. A semi-supervised domain adaptation method of sentiment regression on variational autoencoder[J]. Journal of Zhengzhou university (natural science edition), 2019, 51(2): 47-51.

VW-SAE: an Improved Method of Spectral Data Representation

HU Xiaoyong, WANG Hairong, LIU Wuyang

(School of Computer Science and Engineering North Minzu University, Yinchuan 750021, China)

Abstract: Aiming at the problems of the high dimensionality of hyperspectral images and inaccurate target feature extraction, a variable-Wise Weighted Stacked Autoencoder (VW-SAE) spectral data feature representation method was proposed. Based on the stacked autoencoder (SAE), the VW-SAE method identified important variables from the input layer of each AE, and mapped the output information in the AE objective function through the correlation analysis of the output variables. Different variables introduced different weights for training, extracted the features related to the output layer by layer, and stacked them to form a deep network. By adjusting the weight of each layer of the network, in the process of reducing the dimensionality of the spectral data, the feature information in the spectral data was better extracted at the same time, thereby improving the accuracy of the prediction model. To verify the effectiveness of the method, using more than 10 248 rice images that had been collected was used. A VW-SAE-FNN model was built based on the stacked autoencoder combined with the fully connected gods network (SAE-FNN). The test results showed that the accuracy of this method was significantly improved compared to the SAE method.

Key words: hyperspectral image; variable weighting; stacked autoencoder; weight; nitrogen element

(责任编辑:方惠敏 孔 薇)