

文章编号:1000-582X(2007)07-0148-04

基于偏最小二乘的 BP 网络模型及其应用

刘琼荪,张艳粉

(重庆大学 数理学院,重庆 400030)

摘要:基于 BP 网络模型具有拟合非线性数据的特性,提出一种基于非线性迭代偏最小二乘算法(NIPALS)的 BP 网络的构造策略,构造了新的 PLS-BP 网络模型,使 BP 网络减少迭代步数,提高学习效率。采用非线性迭代偏最小二乘算法预处理数据,将得到主成分数、自变量和因变量的主成分数的权重以及主成分间的关系矩阵 B,以此用来确定 BP 网络的隐节点数和输入层、输出层的初始权值以及隐节点的关联系数。最后,进行仿真实验,并将它与 PLS 模型、标准的 BP 网络模型进行了比较,仿真结果表明,拟合和预测效果较好。

关键词:偏最小二乘(PLS); NIPALS 算法;初始权值; BP 网络

中图分类号: O213

文献标志码: A

BP 网络是人工神经网络的重要模型之一,它在模式识别、时间序列预测及故障诊断等领域得到广泛的应用。然而如何提高 BP 神经网络的学习效率和数据拟合效果是一个值得研究的问题。标准的 BP 网络算法通常的做法是选取一组随机数作为网络的初始权值,而初始权值的选取是算法一个很重要的环节,选取得不好容易导致网络陷入局部极小。另外, BP 网络还有一些其它缺陷,如网络训练速度比较缓慢, BP 网络的隐节点数和隐层数较难以确定等问题。目前,针对 BP 网络的初始权值初始化的问题, Oja^[1] 和 Sanger^[2] 提出用主成分法确定初始权值,并且解释了初始权值表达的具体含义。该方法仅仅用自变量中方差较大成分的权重作为初始权值,它没有充分利用因变量的信息。

笔者采用偏最小二乘法确定 BP 网络的初始权值,基于 BP 网络算法具有拟合非线性数据的特性,提出一种基于非线性迭代偏最小二乘算法(NIPALS)的 BP 网络的构造策略,以克服常规的 BP 神经网络的构造策略的不足,它能很好的确定初始权值、隐层数以及隐节点数,跳出局部极小,减少迭代步数,提高学习效率,使网络精度达到最优。

1 原理与方法

1.1 偏最小二乘的基本思想

PLS 回归是基于主成分回归思想,首先寻求原始

自变量 x_1, \dots, x_p 的线性函数,考虑到它们与因变量 y_1, \dots, y_m 之间的相关性,选择既与因变量相关性强又方便计算 x_1, \dots, x_p 的线性函数。将新的自变量与因变量进行回归,它的算法基础是最小二乘法,但由于它只偏爱与因变量有关的变量,而并非考虑全部的 x_1, \dots, x_p 的线性函数,所以称其为偏最小二乘回归。

1.2 NIPALS 算法

首先,需要对数据进行预处理,即将数据进行中心化 and 标准化的处理,以消除数据量纲引起的数据之间的波动^[3-4]。

PLS 模型可以看作是由外部关系(即独立的 X 块和 Y 块)和内部关系(即两块间的联系)构成。

X 块和 Y 块的外部关系分别为

$$X = TP + E = \sum t_k p_k + E, \quad (1)$$

$$Y = UQ + F = \sum u_k q_k + F. \quad (2)$$

其中, T, U 分别是 X, Y 的核心矩阵, t_k, u_k 是相应的核心向量。 P, Q 分别是 X, Y 的载荷矩阵, p_k, q_k 是相应的载荷向量。 E, F 是残差矩阵,分别是 X, Y 中无法用 k 个潜在变量 T, U 反映的部分。

X, Y 之间的内部关系,对每个成分有

$$\left. \begin{aligned} \hat{u}_k &= b_k t_k \\ b_k &= \frac{u_k^T t_k}{t_k^T t_k} \end{aligned} \right\}$$

收稿日期:2007-03-30

作者简介:刘琼荪(1956-),女,重庆大学教授,主要研究方向为智能计算、应用统计,(E-mail)liuqionsun@163.com。

这里的 b_k 是多元线性回归或主成分回归中的回归系数。

笔者采用了元素缺损的偏最小二乘法,没有采用常规的交互证实方法进行建模,而是采用自变量矩阵元素分组方法,即按位置的行与列之和取模(模为 g) 余数相等的元素为同组的原则进行分组,将自变量矩阵元素分成 g 组,每次用 $(g-1)$ 组的元素建立模型预测未参加建模的自变量矩阵元素。

1.3 算法流程

Step1: 取 $k=0$

Step2: 计算

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p x_{ij}^2 / p - k - 1;$$

Step3: 计算 $\sigma_{\text{分组}}^2$ 。

1) 进行分组,将其中一组元素视为缺损,用剩余的数据预测缺损一组元素并计算预示残差。下面用到的数据均为不缺损的数据。

① $u = y_j, y_j$ 为矩阵 Y 中的任一列作为 U 得初始向量;

② $\omega^T = u^T X / u^T u;$

③ $\omega_{\text{new}}^T = \omega^T / \|\omega^T\|;$

④ $t = X\omega / \omega^T \omega;$

⑤ $q^T = t^T Y / t^T t;$

⑥ $q_{\text{new}}^T = q^T / \|q^T\|;$

⑦ $u_{\text{new}} = Yq / q^T q;$

⑧ 若 $\|u_{\text{new}} - u\| \geq 10^{-6} \|u\|$ 则转至第(2)步,否则紧接下一步;

⑨ $p^T = t^T X / t^T t;$

⑩ $p_{\text{new}}^T = p^T / \|p^T\|;$

⑪ $t_{\text{new}} = t \|p^T\|;$

⑫ $\omega_{\text{new}} = \omega^T \|p^T\|;$

⑬ $b = u^T t / t^T t;$

⑭ 计算缺损元素的预示残差 $e_{ij} = x_{ij} - t_i p_j, x_{ij}$ 为缺损元素; $i=1, 2, \dots, n; j=1, 2, \dots, p; f_{ij} = y_{ij} - b t_i q_j; y_{ij}$ 为缺损元素; $i=1, 2, \dots, n; j=1, 2, \dots, m$ 。

2) 重复步骤 1 直到所有的元素均被视为缺损一次。

3) 计算。

$$\sigma_{\text{分组}}^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p e_{ij}^2 / p - k - 1。$$

Step4: 若 $\sigma_{\text{分组}}^2 < \sigma^2$, 置 $k = k + 1$, 将所有元素视为不缺损,按步骤 1 计算预残差矩阵 $E = (e_{ij})_{n \times p}$ 和 $F = (f_{ij})_{n \times m}$, 用 E 和 F 分别代替 X 和 Y 返回到 Step2, 否则,主成分数为 k , 结束。

2 建模思想

基于 NIPALS 算法的基本原理,本文提出 PLS-BP 网络模型,具体计算步骤如下:

1) 设 $X = (x_1, \dots, x_p), Y = (y_1, \dots, y_m)$ 为 BP 网络的输入、输出矩阵。

首先用 NIPALS 算法对数据进行预处理,计算得到主成分数、各主成分的权重和主成分间的关系矩阵 B 。

2) 用 X 的主成分数 k 确定 BP 网络的隐层节点数,用样本 X 作为 BP 网络的输入节点, Y 作为输出节点。 X, Y 的主成分权重 P, Q 分别确定输入层和输出层的初始权值,具体的初始权值确定见图 1。

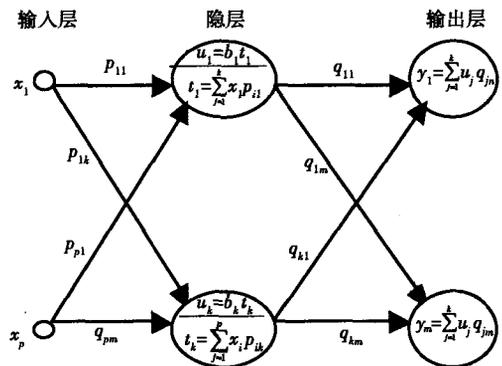


图1 基于 PLS 的三层前馈网络

3) 在该模型中,输入、输出的响应函数分别采用线性函数

$$t_i = \sum_{j=1}^p x_j p_{ji}, u_i = b_i t_i, i = 1, \dots, k,$$

$$y_j = \sum_{i=1}^k u_i q_{ij}; j = 1, \dots, m。$$

4) 采用残差来决定训练过程是否结束,通过如下公式来修改权重。

$$SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (4)$$

其中 y_i 和 \hat{y}_i 分别表示预测值与实际值。上述的训练步骤如图 2。

3 数值仿真实验

3.1 数据及其实验方案

采用笔者建立的 PLS-BP 模型,以山西省卫生厅农村状况调查的部分数据为基础,对几个乡镇的卫生院的收入进行了预测,并与一般的模型进行比较。具体数据见文献[3]。文中设计了 3 种计算方案:

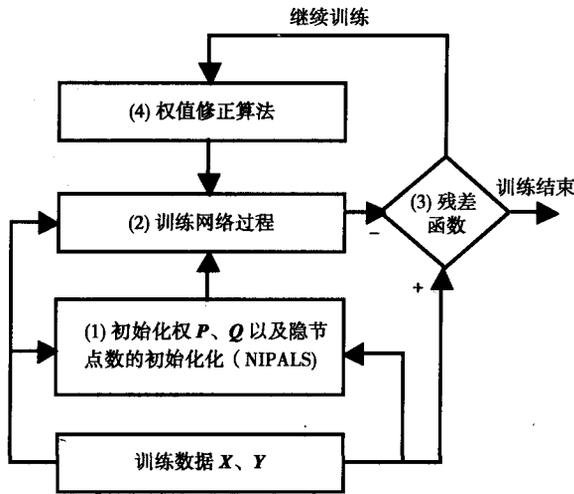


图2 PLS-BP 的训练过程

方案一 (PLS 模型): 采用基于元素缺损的 NIPALS 算法来进行建模并预测。

方案二 (BP 模型): 采用 Matlab 6.5 工具包中的 BP 网络进行预测。样本分成 3 组, 10 个样本用于 BP 网络训练, 2 个样本进行校验, 3 个样本进行预测。网络结构为 10-6-1。输入层采用 S 形函数, 输出层采用线性函数, 初始权值取随机数。

方案三 (PLS-BP 模型): 采用文中提出的 PLS-BP 模型进行预测。样本分成 3 组, 10 个样本用于 BP 网络训练, 2 个样本进行校验, 3 个样本进行预测。用元素缺损的 NIPALS 算法确定的主成分数确定隐节点数, 网络结构为 10-4-1。输入层采用线性函数, 输出层采用线性函数, 用元素缺损的 NIPALS 算法确定 X, Y 的主成分权重 P, Q 分别确定输入层和输出层的初始权值。

3.2 实验结果

3.2.1 主成分数的选取

首先用 Matlab 6.5 编制上述的基于元素缺损的 NIPALS 算法, 用上述数据进行主成分数的选取。计算结果如表 1。

表 1 农村状况调查数据的元素缺损偏最小二乘法选择成分数计算结果 (g=3)

k	0	1	2	3	4
σ	0.994	0.743	0.631	0.592	0.483
$\sigma_{\text{分组}}^2$	0.697	0.638	0.591	0.564	0.506

表 1 当分组数, $g=3$ 主成分数 $k=4$ 时, $\sigma_{\text{分组}}^2 < \sigma^2$ 且 $\sigma_{\text{分组}}^2$ 不等于 ∞ , 所以可以确定主成分数为 4。并且在主成分数确定之后, 应用 PLS 法对 3 组数据作验证性预测。取主成分数为 4 ($g=3$) 对数据进行预测。

3.2.2 拟合与预测结果

由表 2 可知, 在 3 种方案中, PLS-BP 模型的平均

模拟相对误差和平均预测相对误差较好。

表 2 三种方案的结果比较 %

方案	PLS 模型	BP 模型	PLS-BP 模型
平均模拟相对误差	7.61	9.53	6.69
平均预测相对误差	9.72	11.18	8.64

4 结 语

偏最小二乘回归是一种新型的多元统计分析方法, 它集多元线性回归分析、典型相关分析和主成分分析的基本功能于一体, 将建模预测类型的数据分析方法与非模型式的数据认识性分析有机地结合起来, 能很好地解决自变量集合内部存在的严重多重相关性问题, 并且在提取主成分的时候, 不仅考虑自变量的信息, 也考虑因变量的信息, 使提取的主成分同时反映自变量和因变量的信息, 在回归和预测方面能达到很好的效果。

而神经网络以其独特的结构和处理方法, 对环境变化具有较强的自适应学习能力, 理论上可以实现任意函数的逼近。根据基于元素缺损的 NIPALS 算法预先确定的主成分数确定隐节点数, 根据主成分的权重来初始化权值, 不仅可以减少迭代步数, 跳出局部极小, 提高收敛速度, 而且可以从数据的含义上去解释该权重的意义, 这样更易于解释神经网络本身的含义。中间隐层函数采用 NIPALS 算法给出了关系矩阵 B, 很好地描述了因变量与自变量之间的关系, 使模型的准确度更高。仿真结果表明预测效果较好。

参考文献:

- [1] E OJA. A simplified neuron model as a principal component analyzer [J]. Math Biol, 1982, 15: 267-273.
- [2] SANGER T D. Optimal unsupervised learning in a single-layer linear feed-forward neural network [J]. Neural Network, 1989, 2: 459-473.
- [3] 肖琳, 何大卫. PLS 回归方法及其医学应用 [J]. 中国卫生统计, 2002, 19(2): 76-79.
- [4] 苏越, 郭寅龙. 偏最小二乘法中主成分确定的新方法 [J]. 计算机与应用化学, 2001, 18(3): 238-240.
- [5] 杨晓丽, 张运陶, 朱 斌. 元素缺损偏最小二乘法的程序实现及应用 [J]. 吉林化工学院学报, 2004, 21(2): 102-104.
- [6] 王惠文. 偏最小二乘回归方法及其应用 [M]. 北京: 国防工业出版社, 1999.

Improvement and Application on Back Propagation Network Based on Partial Least-squares Algorithm

LIU Qiong-sun, ZHANG Yan-fen

(College of Mathematics and Physics, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

Abstract: This paper proposes a novel BP network model based on nonlinear iterative partial least-squares algorithm which can fit nonlinear data. The novel BP network model can reduce iterative step number and advance learning efficiency. This paper pretreats data by nonlinear iterative partial least-squares algorithms. The weights initialization of input floor and output floor are set by applying the loading weights of dependent variable and cause variable, the member of hidden nodes are set by applying factor numbers of nonlinear iterative partial least-squares algorithm, the connection coefficient is set by applying the connection matrix B . Performances of the BP, PLS, and PLS-BP are analyzed and compared. The results show that the PLS-BP has better fitting and forecasting than BP and PLS.

Key words: partial least-squares; nonlinear iterative partial least-squares algorithm; weights initialization; back-propagation network

(编辑 张小强)

(上接第 147)

Attractors of Partly Dissipative Reaction-diffusion Equation on R^n

ZHAO lei-na¹, ZHANG Xing-you², XING Ting-li²

(1. Science College of Chongqing Jiao Tong University, Chongqing 400074, China;

2. Mathematics and Physics College of Chongqing University, Chongqing 400030, China)

Abstract: We discuss the problem related to the long time behavior of solutions of the partly dissipative reaction-diffusion equations in unbounded domain, and prove the existence of the compact attractors. The coefficient of the reaction-term depends on space variables, which extend Wang B and Marion M's results.

Key words: global attractor; reaction-diffusion equations; priori estimates; asymptotic compactness

(编辑 陈移峰)