

## 神经网络在 DMMP 红外光谱判别中的应用

张国胜<sup>1</sup>, 黄启斌<sup>1</sup>, 孙玉峰<sup>2</sup>

(1. 防化研究院 第四研究所, 北京 102205; 2. 中国科学院 力学研究所 NML 实验室, 北京 100080)

**摘要:**介绍了神经网络在化学毒剂红外遥感监测领域应用的概况,探讨了反向传播人工神经网络分类器应用于红外光谱鉴别的可能性。用一个甲基膦酸二甲酯红外光谱数据样本集进行了实际的训练和鉴别性能预测。训练结果表明,这种分类器在一定条件下可以将95%以上的样本正确分离;预测结果表明,经过适当训练的神经网络分类器可以获得70%以上的鉴别率,具备了一定的识别能力。

**关键词:**神经网络; 红外光谱; 遥感; 防化

**中图分类号:**X851 **文献标识码:**B **文章编号:**1007-2276(2004)04-0351-03

## Application of neural network in discrimination of DMMP infrared spectra

ZHANG Guo-sheng<sup>1</sup>, HUANG Qi-bin<sup>1</sup>, SUN Yu-feng<sup>2</sup>

(1. The Fourth Institute, Research Institute of Chemical Defense, Beijing 102205, China;

2. NML laboratory, the Institute of Mechanics, China Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

**Abstract:** The application of the neural network to remote sensing infrared chemical detection is introduced. The possibility that the back-propagation artificial neural network (BP-ANN) classifier is implemented to discriminate infrared spectra is approached. A data set of DMMP (dimethyl methylphosphonate) infrared spectra is used to perform the actual training and discrimination performance prediction of this classifier. The training results show that 95% samples in the data set can be correctly classified under certain conditions. The prediction results show that the neural network classifier which has been properly trained has possessed relatively high discrimination ability, and the discrimination rates more than 70% can be obtained from such classifiers.

**Key words:** Neural network; Infrared spectra; Remote sensing; Chemical defense

### 0 引言

化学毒剂红外遥感监测系统是国外防化武器装

备研究领域高度重视的一个研究项目<sup>[1,2]</sup>。该系统是一个典型的化学计量学装置。它通过一个去掉光源的 FTIR 干涉仪探测周围大气中的红外吸收/发射特征;用一个鉴别器对采集到的红外光谱加以分析,

收稿日期:2003-10-02; 修订日期:2003-12-07

作者简介:张国胜(1966-),男,河南温县人,副研究员,博士,主要从事新型功能材料及化学侦察方面的研究。

给出光谱中是否含有化学毒剂特征的 yes/no 判决。

鉴别器设计是该系统的核心。早期采用的是线性分类器,后来为了提高鉴别率采用分段线性分类器<sup>[5]</sup>。近年来,随着神经网络技术在分析化学领域的应用日趋广泛,利用神经网络分类判别技术进行化学毒剂红外光谱自动识别的研究越来越受到相关领域的关注<sup>[1,2]</sup>。H. T. Mayfield 等人在这方面进行了一些探索性工作,但是并未得到切实的实验结果<sup>[6]</sup>。本文利用甲基磷酸二甲酯(DMMP)模拟剂光谱样本集对反向传播人工神经网络(BP-ANN)的判别特性进行了研究,旨在探讨其在防化领域应用的可能性及实用性。

## 1 BP-ANN 的基本理论

20 世纪 80 年代以来,有关神经网络的研究又一次引起了广泛的关注,各种理论研究和应用性研究纷纷涌现<sup>[7]</sup>。在化学领域,利用神经网络对各种化学信号进行分析、解读、提取有用信息等已成为一个重要的研究方向。其中 BP 网为实用性最强的网络之一<sup>[8]</sup>。这种网络一般采用三层(输入层、隐含层、输出层)或更多层数(多个隐含层)的结构,用 Sigmoid 函数作为激励函数,在模式识别应用中可以实现对贝叶斯界面的非线性模拟。

本文采用三层结构的 BP 神经网络,用双极性 Sigmoid 函数:

$$f(x) = \frac{1 - \exp(-x)}{1 + \exp(-x)} \quad (1)$$

作为激励函数。该函数具有如下特征:

$$f'(x) \propto (1 - f^2(x)) \quad (2)$$

$$\begin{cases} \lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) = -1 \\ f(0) = 0 \\ \lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 1 \end{cases} \quad (3)$$

这些特征使其作为神经网络激励函数具有多种优势。根据梯度下降法,公式(2)决定神经元输出误差与输入误差的传递关系。试验中输入层单元数设定为光谱数据的维数;隐含层单元数根据训练结果决定;输出层单元数设定为 1,如果输出值为正则判定为毒剂光谱,反之判定为背景光谱。一般来说,输出层单元

数应该等于输出模式数<sup>[9]</sup>。对于本文的情况,存在两个输出模式,却采用一个输出单元,除了可以简化神经网络结构之外,还可以减小训练强度,而对分类器的性能不会产生影响。

## 2 实验

用 DMMP 作含磷毒剂的模拟剂并用草木烟、尘土等作干扰物进行外场试验,采集各种光谱 500 条。然后对这些光谱进行背景扣除、滑动平均、偏置调节等预处理步骤,得到 DMMP 信号被增强了的光谱,有关预处理的详细情况可参阅参考文献[2]。光谱数据的维数(亦即神经网络输入层单元数)为 130。用其中的 400 条进行训练,剩余的 100 条作鉴别率预测。所有程序均用 C 语言编写,在 Pentium III 微机上完成运算。

## 3 试验结果及分析

### 3.1 对隐含层单元数 $H$ 的影响

与早期的神经网络相比,BP 网络无论在网络理论还是性能方面都更加成熟。其突出的优点就是具有很强的非线性映射能力和柔性的网络结构。各层的单元数可以根据具体情况任意设定。对于本文的情况,隐含层单元数  $H$  成为网络结构的唯一待定参数。根据以往的经验和前人的研究结果<sup>[6]</sup>,将  $H$  在 3~20 之间进行了连续训练和预测试验。结果表明,在  $H=8$  时训练结果最佳,样本正确分离程度达到了 95.5%,同时预测结果在各  $H$  值中也是比较高的,达到了 78%,如图 1 所示。

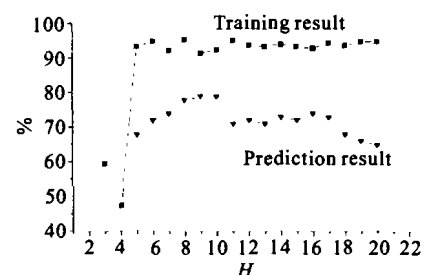


图 1 不同的隐含层单元数  $H$  对应的训练结果和预测结果  
Fig. 1 The training results and prediction results with unit number  $H$  of the different hidden layer

### 3.2 学习步长的影响

公式(2)给出了神经元输出值与输入值之间的函数关系,但比例系数待定。事实上,在进行迭代运算时,通常将各种影响因素都综合到比例系数当中,统称为学习步长。在训练时通过不断地调整学习步长来获得理想的训练结果。本文取隐含层单元数  $H=8$ ,试验了学习步长分别为 0.1、0.25、0.5、1.0 时的训练情况,结果如图 2 所示。

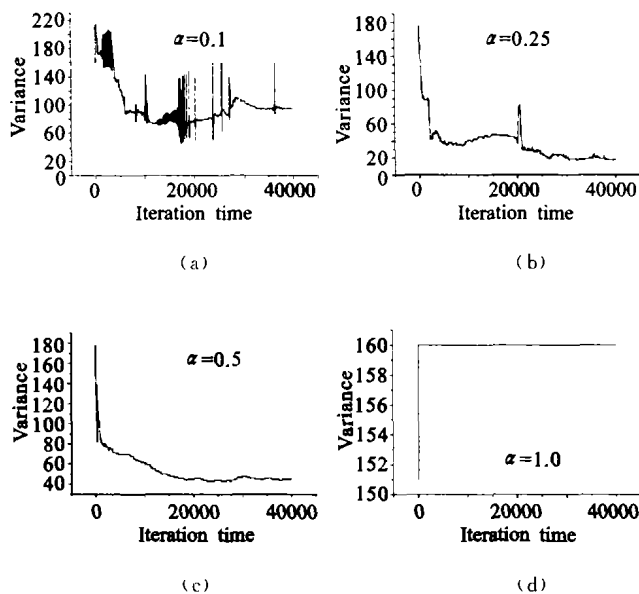


图 2 不同学习步长对应的训练进程

Fig. 2 The training courses corresponding to different learning steps

从图 2 中可以看出,在本文情况下学习步长对训练结果的影响是很大的。学习步长为 0.1 时网络震荡现象比较严重,而学习步长为 1.0 时程序不收敛。学习步长为 0.25 和 0.5 时训练情况较好,其中 0.25 学习步长最终得到的方差最小。

### 3.3 偏差单元的影响

由于判别结果是根据输出单元的符号做出的,所以偏差单元的调整势必会对各权值的校正具有重大影响。为了考察这种影响的程度,取隐含层单元数  $H=8$  进行了无偏差单元的训练试验,结果如图 3 所示。

与图 2(b)相比,训练进程有很大的不同,但训练结果尚可。最佳训练结果为 86.5%(迭代次数约为 25000 时),预测结果为 74%,这说明不要偏差单元的 BP-ANN 也是一个可供选择的方案。

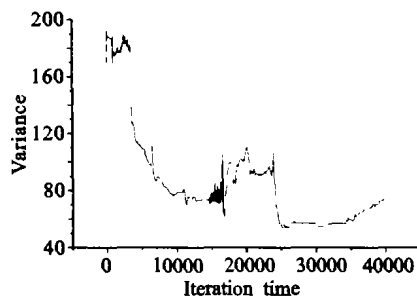


图 3 对应于  $H=8, \alpha=0.25$  无偏差单元网络的训练进程  
Fig. 3 The training course of the BP-ANN without bias unit ( $H=8, \alpha=0.25$ )

## 4 结论

通过对 BP-ANN 分类器的隐含层单元数、学习步长以及偏差单元等因素的初步考察,综合上述各种试验结果可以认定, BP-ANN 分类器作为化学毒剂红外遥感监测系统鉴别器具有很大的发展潜力,而且有必要进一步深入研究。

### 参考文献:

- [1] Deepak A, Fleming H E, Chahine M T. Advances in Remote Sensing Retrieval Methods[M]. New York: Wiley Interscience, 1984.
- [2] Meuzelaer H. Computer Enhanced Analytical Spectroscopy[M]. New York and London: Plenum, 1990.
- [3] Kaltenbach T F, Small G W. Development and optimization of piecewise linear discriminants for the automated detection of chemical species[J]. Analytical Chemistry, 1991, 63(9): 936-944.
- [4] Shaffer R E, Rose-Pehrsson S L. Improved network assisted rapid screening of large infrared spectral databases[J]. Analytical Chemistry, 1999, 71(19): 4263-4271.
- [5] Yang H, Griffiths P R. Application of multilayer feed-forward neural networks to automated compound identification in low-resolution open-path FT-IR spectrometry[J]. Analytical Chemistry, 1999, 71(3): 751-761.
- [6] Mayfield H T, Eastwood D, Burggraf L W. Infrared spectral classification with artificial neural networks and classical pattern recognition in chemical and biological sensing[A]. Proceedings of SPIE[C]. 2000, 4036, 54.
- [7] 边肇祺, 张学工. 模式识别[M]. 北京: 清华大学出版社, 2000.
- [8] Zupan J, Gasteiger J. Neural networks: a new method for solving chemical problems or just a passing phase? [J]. Analytica Chimica Acta, 1991, 248(1): 1-30.