

# 深度信念网络的近红外光谱分析建模方法

张 萌, 赵忠盖\*

江南大学自动化研究所轻工过程先进控制教育部重点实验室, 江苏 无锡 214122

**摘 要** 近红外光谱是一种快速、无损的定量分析工具, 现如今已广泛的应用在各个行业中。近红外光谱分析技术应用的关键就在于如何建立一个有效而又精确的模型。目前常用的定量分析方法大多为浅层模型, 深度信念网络(DBN)是一种基于概率的深层模型, 可以自动学习输入的有效特征表示, 且只要设置最后隐藏层输出节点数低于输入光谱维度, 在对光谱数据完成特征提取的同时即可实现降维。对于近红外光谱样本量大、变量多、维度高等问题, 提出一种基于深度信念网络的近红外光谱建模方法, 定量分析物性浓度。该方法以近红外光谱数据作为输入信号, 首先对多层受限玻尔兹曼机(RBM)进行无监督学习, 实现光谱自身特征的提取; 然后利用目标理化值对网络进行微调得到最优模型参数。在建立 DBN 校正模型的基础上对其进行改进, 建立 DBN-PLS 校正模型。通过建立 DBN 近红外光谱校正模型、DBN-PLS 近红外光谱校正模型, 验证了 DBN 建模和 DBN-PLS 建模的可行性, 并引入决定系数( $R^2$ )和均方误差(MSE)两个模型评价指标, 对比分析了传统 BP 建模和 DBN 建模的精度。分析结果表明, 相较于传统定量分析方法建模, 利用 DBN 方法建模和 DBN-PLS 方法建模可以提高预测精度。

**关键词** 近红外光谱; 深度信念网络(DBN); DBN-PLS; 定量校正模型

**中图分类号:** O657.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2020)08-2512-06

## 引 言

近红外光的本质是一种电磁波, 一般定义 780~2 526 nm 区间内的波段为近红外光谱区, 近红外光谱主要是由有机物质吸收光后分子振动从基态向高能级跃迁时产生的, 反映了含氢集团 X—H(X 主要为 C, N 和 O 等)基频振动的倍频和合频信息<sup>[1]</sup>。而应用近红外光谱分析技术的关键就在于如何建立准确有效的模型<sup>[2]</sup>。

在近红外光谱分析中, 目前常用的模型建立方法有多元线性回归法<sup>[3]</sup>(multiple linear regression, MLR)、主成分回归<sup>[4]</sup>(principle component regression, PCA)、偏最小二乘法(partial least squares, PLS)<sup>[5]</sup>、人工神经网络<sup>[6]</sup>(artificial neural networks, ANN)和支持向量机法(support vector machine, SVM)<sup>[7]</sup>。PLS 是目前近红外光谱分析中应用最广泛的建模方法之一, 它从自变量矩阵和因变量矩阵中提取主成分, 有效降维, 并消除自变量间可能存在的复共线性关系<sup>[5]</sup>。但 PLS 无法准确拟合非线性关系。人工神经网络是目前应用广泛的非线性建模方法, 其中反向传播(BP)算法是目

前使用最多的神经网络算法之一<sup>[6]</sup>, 但 BP 网络算法易陷入局部最优, 收敛速度慢。支持向量机是一种基于统计学理论的机器学习方法, 它有良好的泛化能力并且能避免模型陷入局部最优<sup>[7]</sup>, 现在也越来越多的应用在近红外光谱分析建模。但 SVM 没有准确的选用标准, 而且无法从给定的输入空间中选择有效特征用于建模。

深度信念网络是一种具有多个隐藏层的多层感知器, 它可以学习深层结构实现复杂函数的逼近, 从大量输入数据中学习有效的特征表示<sup>[8]</sup>。应用深度信念网络(deep belief network, DBN)建模的优点是: (1)深度网络具有复杂的多层结构, 具有很好的表示能量, 对于大数据的处理尤其有效; (2)DBN 通过逐层预训练初始优化网络参数, 可以避免由于随机初始化参数而导致模型陷入局部最优; (3)DBN 可以从输入空间中自动学习有效的特征表示。Shang 等<sup>[9]</sup>在 2014 年就应用 DBN 网络对原油蒸馏装置建立软测量传感器模型; 王宇红等<sup>[10]</sup>将 DBN 与极限学习机(ELM)结合建立软测量模型; Wang 等<sup>[11]</sup>应用 DBN 对拉萨地区的太阳辐射进行估算。

考虑到近红外光谱内部波长之间的相关性, 以及其与目标值之间的非线性关系, 提出利用深度信念网络对近红外光

收稿日期: 2019-07-11, 修订日期: 2019-11-25

基金项目: 国家自然科学基金项目(61833007, 61573169)资助

作者简介: 张 萌, 1996 年生, 江南大学自动化研究所轻工过程先进控制教育部重点实验室硕士研究生 e-mail: zhangmeng92@126.com

\* 通讯联系人 e-mail: gaizihao@jiangnan.edu.cn

谱建模。该方法不需要关于光谱数据的先验知识就可以实现对光谱自身的特征提取,且只要设置顶层隐层节点数小于输入光谱的维度,在实现光谱数据特征提取的同时也实现了降维。将其应用在近红外光谱数据中,通过验证相关系数  $R^2$ 、均方误差 MSE 指标,对比说明 DBN 模型和 DBN-PLS 模型预测的结果优于 BP 方法建模。

## 1 实验部分

### 1.1 数据与处理

选用两个数据集验证本方法。第一个数据集为从 Tecator Infratec 食品和饲料分析仪上收集的猪碎肉近红外透射光谱。波长范围为 850~1 050 nm,分辨率为  $2\text{ cm}^{-1}$ 。共包含 172 个校验集光谱,43 个验证集光谱。第二个数据集为布鲁克 MATRIX-F 型傅里叶近红外光谱仪(OPUS 分析软件包,德国 Bruker 公司)采集的柠檬酸发酵液近红外光谱,分辨率为  $16\text{ cm}^{-1}$ ,波长范围为 3 996~11 988 nm。采用 Kennard-Stone 法对 260 个样品按 2 : 1 划分校验集和验证集,得到 174 个校验集光谱和 86 个验证集光谱。Kennard-Stone 法的原理是根据变量之间的欧式距离,在样品光谱的特征空间里选择距离最大的样品作为校验集样品<sup>[17]</sup>。

为去除来自高频随机噪声、基线漂移、光散射等影响,需对光谱进行预处理。平滑是光谱信号处理中改善信噪比最

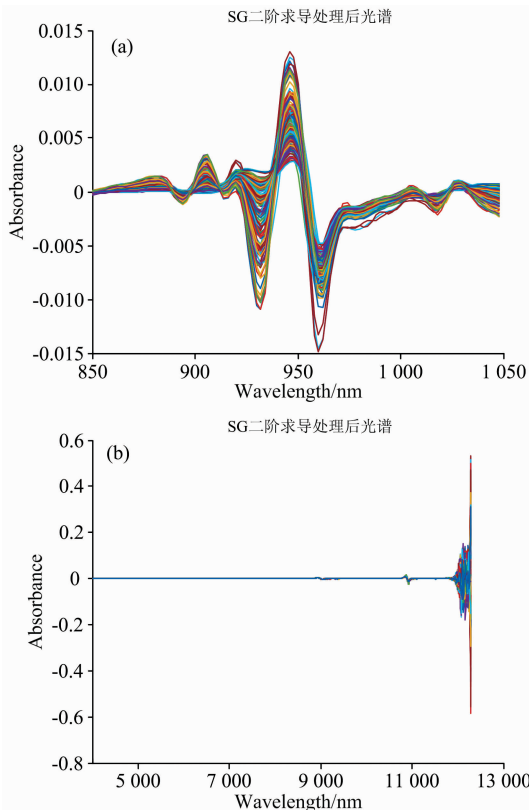


图 1 预处理后的光谱图

(a): 猪肉; (b): 柠檬酸发酵液

Fig. 1 Preprocessed near infrared spectra

(a): Pork; (b): Citric acid fermentation liquid

常用的方法<sup>[6]</sup>。采用了 Savitzky-Golay 卷积平滑法对光谱预处理,经过预处理的近红外光谱如图 1。

### 1.2 方法

#### 1.2.1 基于深度信念网络的建模

DBN 是深度学习的生成模型之一,由多层受限玻尔兹曼机(restricted Boltzmann machines, RBM)堆叠而成<sup>[12]</sup>,结构如图 2 所示。基于 DBN 的近红外光谱建模首先输入光谱数据,对 RBM 进行逐层预训练,完成对光谱数据进行特征提取和降维,得到 RBM 的初始权值;然后,利用目标理化值对初始权值进行反向微调,得到最终优化权值;最后,添加回归层,即可完成近红外光谱的预测建模。该算法的流程图如图 3。

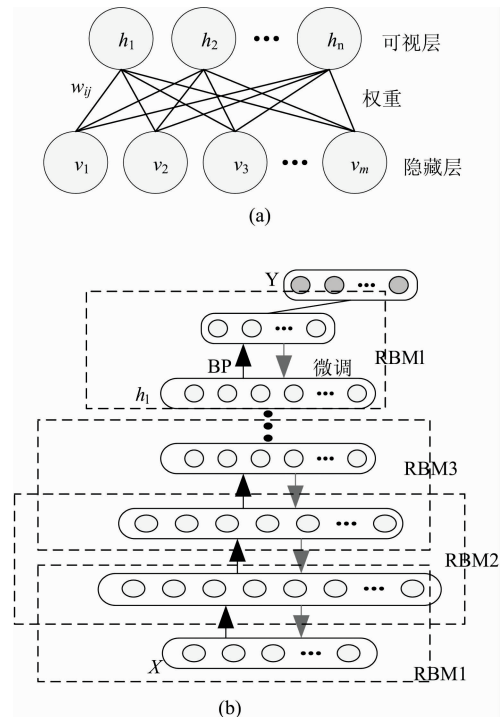


图 2 (a)RBM 结构图; (b)DBN 结构图

Fig. 2 (a) Diagram of RBM structure; (b) diagram of DBN structure

光谱吸光度  $X$  与目标理化值  $Y$  的配对组合表示为  $\{(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots, (X_n, Y_n)\}$ 。将光谱吸光度  $X$  作为第一层 RBM 的输入层。根据图 2(a)所示, RBM 结构包含一个可视层( $v$ )和一个隐含层( $h$ )<sup>[13]</sup>,可视层用于表示输入光谱数据信息,隐含层表示对输入光谱的学习能力。对于给定的状态  $(v, h)$ , RBM 作为一个系统所具备的能量定义为

$$E(v, h; \theta) = - \sum_{i=1}^m a_i v_i - \sum_{j=1}^n b_j h_j - \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n h_j w_{i,j} v_i \quad (1)$$

式(1)中,  $\theta$  为模型参数。

可视层和隐含层的联合概率为

$$P(v, h; \theta) = \frac{1}{Z_\theta} e^{-E_\theta(v, h)} \quad (2)$$

其中  $Z_\theta = \sum_{v, h} e^{-E_\theta(v, h)}$  为归一化函数。

$P(v, h)$  对  $v$  的边缘分布为

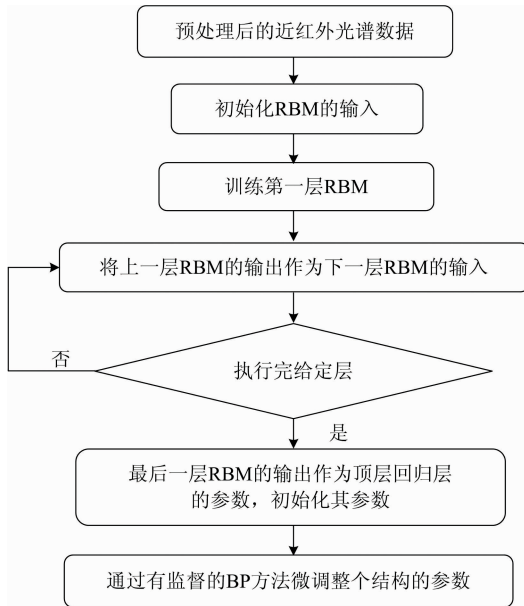


图 3 DBN 预测模型算法流程图

Fig. 3 Flow chart of DBN prediction model algorithm

$$P(v; \theta) = \sum_h (3)P(v, h) = \frac{1}{Z_0} \sum_h e^{-E_\theta(v, h)} \quad (3)$$

可以计算出第  $j$  个隐层单元和第  $i$  个可视层单元的条件概率分布分别为

$$P(h_j | v; \theta) = \frac{1}{1 + \exp(-b_j - \sum_i w_{i,j} v_i)} \quad (4)$$

$$P(v_i | h; \theta) = \frac{1}{1 + \exp(-a_i - \sum_j w_{i,j} h_j)} \quad (5)$$

训练一个 RBM 即调整参数  $\theta$ , 使其更好地拟合给定的训练样本<sup>[13]</sup>。最大化以下似然函数

$$\ln P(v; \theta) = \ln \left( \sum_{v, h} e^{-E_\theta(v, h)} \right) - \ln \left( \sum_{v, h} e^{-E_\theta(v, h)} \right) \quad (6)$$

一般采用梯度法对其求偏导, 但式中  $\sum_{v, h}$  包含  $2^{n+m}$  项, 计算复杂度太大。因此 Hinton 提出对比散度法 (contrastive divergence, CD) 对重构数据近似采样, 更新权值<sup>[14]</sup>。给定训练样本  $v^0$ , 根据式(4)和式(5)采样,  $h^0 \sim P(h | v^0)$ ,  $v^1 \sim P(v | h^0)$ ,  $h^1 \sim P(h | v^1)$ 。从而可得 RBM 参数更新公式为

$$\theta = \theta + \epsilon \frac{\partial \ln P(v; \theta)}{\partial \theta} \quad (7)$$

其中,  $\epsilon$  表示学习率。

在完成对 RBM 的逐层预训练之后, 利用目标理化值  $Y$  通过梯度下降算法最小化目标损耗函数  $L(Y, \theta) = \frac{1}{2} \sum_i (Y - \hat{Y})^2$ , 得到参数变化为

$$\Delta \theta = - \frac{\partial L(Y; \theta)}{\partial \theta} \quad (8)$$

### 1.2.2 改进的深度信念网络建模

在深度学习的过程中, 无监督过程可以提取输入样本的隐变量, 监督过程通过 BP 算法对整个网络进行参数微调。然而基于梯度的优化算法也会陷入局部最优, 将 DBN 与

PLS 结合可以避免由于梯度下降算法带来的问题。DBN 最后一层隐含层是对原始输入样本的若干次学习后得到的深层特征, 这一特征之间不存在相关性, 符合 PLS 模型对自变量的要求。因此, 考虑将 PLS 运用到 DBN 的训练过程中, 对 DBN 进行改进, 提高模型的预测效果。

DBN-PLS 模型结构图如图 4。运用 DBN-PLS 对近红外光谱建模的具体步骤如下:

- (1) 对近红外光谱数据进行预处理;
- (2) 构建近红外光谱的 DBN 模型, 完成近红外光谱的特征提取和降维;
- (3) 将提取的有效特征输入 PLS 模型, 建立 DBN-PLS 预测模型;
- (4) 将验证集数据输入到 DBN-PLS 模型中, 进行验证。

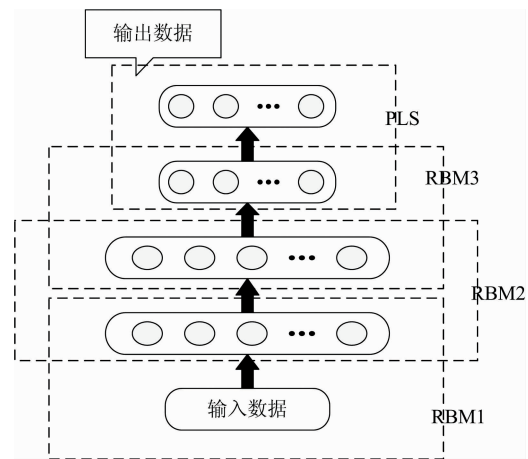


图 4 DBN-PLS 模型结构图

Fig. 4 Diagram of DBN-PLS model

### 1.3 模型评价

为验证模型预测的准确性, 本文选用决定系数 ( $R^2$ ) 和均方误差 (MSE) 两个评价指标对模型进行评价。 $R^2$  表示真实值和预测值的相关程度。MSE 可以评价数据的变化程度, MSE 的值越小说明预测模型有越好的精确度<sup>[16]</sup>。

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad (9)$$

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2 \quad (10)$$

其中,  $\hat{y}$  为光谱预测值,  $y$  为实际值,  $\bar{y}_i$  为实际值的平均值,  $n$  为的样品数。

## 2 结果与讨论

### 2.1 参数选择

模型参数选择是影响 DBN 模型特征提取能力以及模型预测精度的重要因素。本文影响结果的参数主要有 RBM 层数、迭代次数 (iteration) 和学习率 (learning rate)。随着模型层数的增加, 层间连接权值增加, 训练难度也会增加, 设置

了 2 层 RBM 结构。图 5 为不同迭代次数下整个网络的训练损失，迭代次数过小模型易欠拟合，迭代次数过大模型易过拟合。图 6 给出了在不同学习率和不同迭代次数下的  $R^2$  大小。由图 5 和图 6 可以看出，两个数据集在迭代次数大约为 200 时，模型的训练损失趋于 0，数据集 1 在学习率  $\epsilon=0.001$  时，模型的精度最高， $R^2$  为 0.990 7，MSE 为 0.910 0；数据集 2 在学习率  $\epsilon=0.000 1$  时，模型精度最高。表 1 列举了 iteration 为 200 的时候，猪肉含水量的近红外光谱预测模型在不同学习率下的  $R^2$  和 MSE 大小。

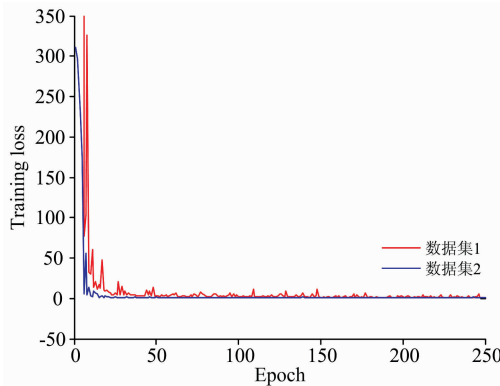


图 5 迭代次数对模型的影响

Fig. 5 The impact of iteration number on the model

表 1 学习率选择表

Table 1 Learning rate selection table

学习率	数据集 1	
	$R^2$	mse
0.001	0.990 7	0.910 0
0.000 1	0.929 3	7.085 4
0.000 01	0.880 4	11.984 9

### 2.2 结果比较

对于猪肉近红外光谱数据集，我们对三种预测模型，结果如表 2。可以看出，用 BP 方法对近红外光谱建模的  $R^2$  为 0.902 6，而用 DBN 模型和 DBN-PLS 模型建模后的  $R^2$  分别为 0.990 7 和 0.964 4，预测精度都优于 BP 模型。图 7 分别给出了猪肉含水量的 BP 模型、DBN 模型和 DBN-PLS 模型。图 7(a) 为 BP 模型预测值与实际值的对比，图 7(b) 为

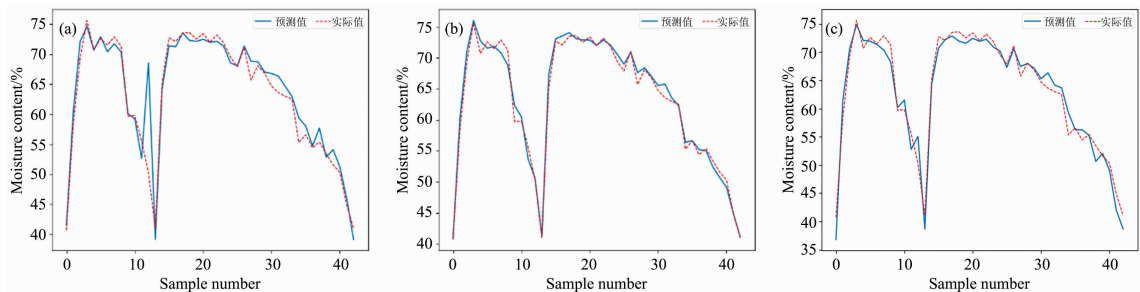


图 7 猪肉近红外光谱模型对比结果

(a): BP 模型; (b): DBN 模型; (c): DBN-PLS 模型

Fig. 7 Comparison results of model for pork near infrared spectrum

(a): BP model; (b): DBN model; (c): DBN-PLS model

用 DBN 模型建模的预测值和实际值对比，图 7(c) 为用 DBN-PLS 模型建模的对比图。可以看出，DBN 模型和 DBN-PLS 模型的预测效果都优于 BP 模型。

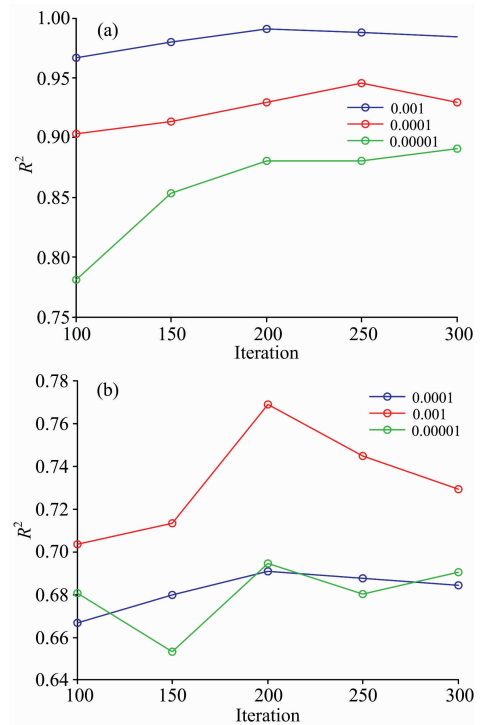


图 6 不同学习率下迭代次数对模型的影响

(a): 猪肉; (b): 柠檬酸发酵液

Fig. 6 The influence of iteration times on the model under different learning rates

(a): Pork near infrared spectrum;

(b): Citric acid fermentation liquid near infrared spectrum

表 2 猪肉近红外光谱预测模型评价指标

Table 2 Evaluation index of model for pork near infrared spectrum

预测模型	评价指标	
	$R^2$	mse
BP	0.902 6	7.563 7
DBN	0.990 7	0.910 0
DBN-PLS	0.964 4	3.576 0

对于第二个柠檬酸发酵液近红外光谱数据集,我们分别应用了 PLS 模型和 DBN-PLS 模型对其建立校正模型,并计算了其评价指标,结果如表 3 所示,并在图 8 给出了其模型预测值和实际值的对比图。图 8(a)为 PLS 模型建模效果,图 8(b)为利用 DBN 对光谱数据进行特征提取和降维后的建模效果。可以明显看出,利用 DBN-PLS 对柠檬酸发酵液近红外光谱数据集的建模效果明显优于 PLS 模型的建模效果。

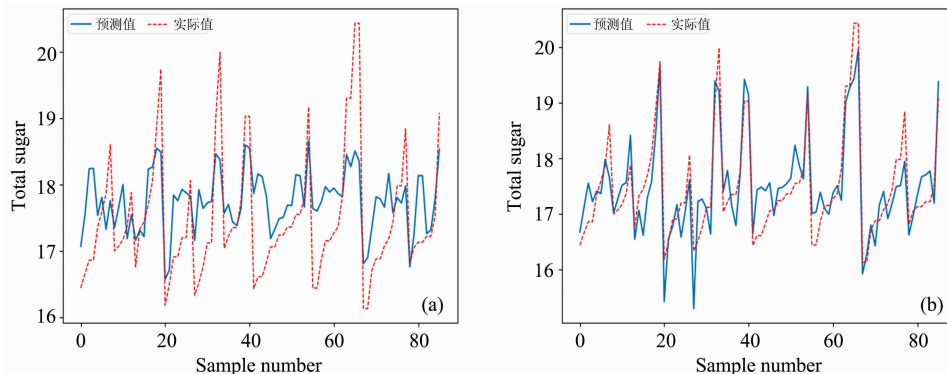


图 8 柠檬酸发酵液近红外光谱建模对比

(a): PLS 模型; (b): DBN-PLS 模型

Fig. 8 Comparison of PLS and DBN-PLS models for near infrared spectra of citric acid fermentation broth

(a): PLS model; (b): DBN-PLS model

表 3 柠檬酸发酵液近红外光谱模型评价指标

Table 3 Evaluation index of model for citric acid fermentation broth near infrared spectrum

预测模型	评价指标	
	$R^2$	mse
PLS	0.324 2	0.611 4
DBN-PLS	0.769 0	0.208 9

### 3 结 论

DBN 网络可以实现复杂函数的逼近,且由于其结构特性,可以自动实现对输入数据的特征提取,得到输入数据中更深刻的特征信息,运用 DBN 模型分析预测可以解决其他

建模方法初始参数难确定的问题。利用近红外光谱数据和 DBN 网络建立了 DBN 和 DBN-PLS 近红外光谱预测模型,通过将其与 BP 预测模型对比,验证了 DBN 模型和 DBN-PLS 模型的可行性,并且 DBN 模型和 DBN-PLS 模型预测精度优于 BP 模型。

### References

- [1] CHU Xiao-li, LU Wan-zhen(褚小立, 陆婉珍). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2014, 34(10): 2595.
- [2] CHU Xiao-li, XU Yu-peng, LU Wan-zhen(褚小立, 许育鹏, 陆婉珍). Chinese Journal of Analytical Chemistry(分析化学), 2008, 36(5): 702.
- [3] Joseclin T Diaz, Matthew W Veal. Industrial Crops and Products, 2014, 59: 119.
- [4] Matteo Ottavian, Enrica Franceschin, Elena Signorin. Journal of Food Engineering, 2015, 63(2): 199.
- [5] Chen Quansheng, Zhao Jiewen, Liu Muhua. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 2008, 46(3): 568.
- [6] Liu Yande, Sun Xudong, Ouyang Aiguo. LWT - Food Science and Technology, 2010, 43(4): 602.
- [7] Cristina Malegori, Emanuel José Nascimento Marques. Talanta, 2017, 165: 112.
- [8] Hinton G E, Salakhutdinov R R. Science, 2006, 313(5786): 504.
- [9] Shang Chao, Huang Dexian, Yang Fan. Journal of Process Control, 2014, 24: 223.
- [10] WANG Yu-hong, DI Ke-song, SHANG Chao(王宇红, 狄克松, 尚超). Journal of Chemical Industry and Engineering(化工学报), 2016, 67(12): 5163.
- [11] Wang Miaomiao, Zang Haixiang, Cheng Lilin. Energy Procedia, 2019, 158: 49.
- [12] Salakhutdinov R R. Journal of Machine Learning Research-Proceedings Track, 2009, 9(1): 448.
- [13] Hinton G E. Momentum, 2012, 9(1): 599.
- [14] Hinton G E, Osindero S, Teh Y W. Neural Comput, 2006, 18(7): 1527.
- [15] Harrington P B. Analytica Chimica Acta, 2018, 1010: 20.
- [16] Malley D F, Ronicke H, Findlay D L. Journal of Paleolimnology, 1999, 21(3): 295.
- [17] Saptoro A, Tade M O, Vuthaluru H. Chemical Product and Process Modeling, 2012, 7(1): 1.

# Near Infrared Spectral Analysis Modeling Method Based on Deep Belief Network

ZHANG Meng, ZHAO Zhong-gai\*

Key Laboratory for Advanced Process Control of Light Industry of the Ministry of Education, Institute of Automation, Jiangnan University, Wuxi 214122, China

**Abstract** Near infrared NIR spectroscopy is a fast, non-destructive quantitative analysis tool that has been widely used in various industries. How to build an effective and accurate model is of importance to the application of NIR spectroscopy. At present, most commonly used quantitative analysis methods are based on shallow models, while Deep Belief Network (DBN) is a probability-based deep model. It can automatically learn the effective feature representation of the input, and as long as the number of last hidden layer output nodes is lower than the dimension of the input spectrum, the spectral data can be reduced in dimension while the feature extraction is completed on the spectral data. Near-infrared spectroscopy is characterized by a large sample size, large variables, and high dimensionality. This paper proposes a near-infrared spectroscopy modeling method based on a deep belief network to estimate the physical concentration. The method uses near-infrared spectroscopy data as the input layer. Firstly, unsupervised learning of the multi-restricted Boltzmann Machines (RBM) is employed to achieve the feature extraction of the spectrum itself. Then the target physicochemical value is used to fine tune the network, and optimize model parameters. Based on the DBN calibration model, the final regression layer of the deep belief network is developed by the PLS method, and the DBN-PLS calibration model may avoid the optimal local problem caused by the gradient descent algorithm. In this paper, the feasibility of DBN modeling and DBN-PLS modeling is verified by two model evaluation indexes including decision coefficient ( $R^2$ ) and mean square error (mse), and the traditional BP modeling and DBN modeling are compared and analyzed. The analysis results show that DBN method modeling and DBN-PLS method modeling can improve the prediction accuracy.

**Keywords** Near infrared spectroscopy; Deep belief network(DBN); DBN-PLS; Quantitative calibration model

(Received Jul. 11, 2019; accepted Nov. 25, 2019)

\* Corresponding author