

# 基于 KPCA 初始化卷积神经网络的方法

蔡楠,李萍

(宁夏大学 物理与电子电气工程学院,宁夏 银川 750021)

**摘要:**为了解决卷积神经网络中卷积核不能得到有效初始化,导致网络训练难度增加,使网络收敛速度过慢的问题,提出了一种基于 KPCA 初始化卷积核的方法(KPCA-CNN)。该方法首先创建一个与卷积核大小相同的感受野对每个卷积层第一次输入的所有图像进行滑动采样,采样后的数据经过 KPCA 处理提取主成分,初始化卷积核。与 PCA 相比,KPCA 对图像中的非线性特征有较好的提取能力,所提取的主成分中包含了输入图像的非线性特征,能够更加有效地初始化卷积核,从而降低网络的训练难度,使网络收敛速度变快。分别将 PCA 初始卷积核方法和 KPCA 初始化卷积核方法应用在 MNIST 手写数字识别上进行实验仿真,结果表明 KPCA 初始化卷积核的方法增加了网络的准确率,加快了网络的收敛速度。

**关键词:**卷积神经网络;卷积核初始化;主成分分析;核主成分分析;MNIST

中图分类号:TP391

文献标识码:A

文章编号:1673-629X(2019)07-0076-04

doi:10.3969/j.issn.1673-629X.2019.07.015

## Method of Initializing Convolution Neural Network Based on KPCA

CAI Nan, LI Ping

(School of Physics, Electronic and Electrical Engineering, Ningxia University, Yinchuan 750021, China)

**Abstract:** In order to solve the problem that convolution neural network cannot initialize convolution kernel effectively, leading to increase of difficulty in network training and slow convergence speed of network, we propose a method based on KPCA initialization convolution kernel (KPCA-CNN). Firstly, a receptive field with the same size of convolution kernel is created for sliding sampling to all images first input in each convolution layer. Then the sampled data are extracted by KPCA, and the convolution kernel is initialized. Compared with PCA, KPCA has a better capacity to extract the nonlinear features in the image. The extracted principal components contain the nonlinear features of the input image and can initialize the convolution kernel more effectively, thus reducing the training difficulty of the network and making the network convergence faster. The PCA and KPCA-CNN are applied to the MNIST handwritten digit recognition to carry out the experimental simulation, which shows that KPCA-CNN increases the accuracy of the network and speeds up the convergence of the network.

**Key words:** convolution neural network; convolution kernel initialization; PCA; KPCA; MNIST

## 0 引言

卷积神经网络(convolution neural network, CNN),属于人工神经网络的一种<sup>[1]</sup>,相对于传统的识别算法不需要将输入的数据进行特征提取和数据重建,而直接可以将图像作为网络的输入,自动提取特征并且对图像具有高度不变性。其权值共享的网络结构显著降低了模型的复杂度,减少了权值的数量,是目前语音分析和图像识别领域研究的热点<sup>[2]</sup>。网络参数的训练与更新是 CNN 的关键环节,占用了大量的运算资

源和时间,并且为了获得足够的拟合精度,通常需要大量的有标签样本来进行训练<sup>[3]</sup>。

卷积神经网络一般由输入层、卷积层、池化层、全连接层、输出层组成,其中卷积层的可训练权值被称为卷积核。卷积神经网络的初始化是针对卷积核及全连接层的权重值进行合理有效的初始化,使网络降低训练难度,更快收敛<sup>[4]</sup>。

在初始化方法中最为常见的是随机初始化,其主要方法是通过选取某种概率分布生成一组随机数来初

收稿日期:2018-08-21

修回日期:2018-12-26

网络出版时间:2019-03-21

基金项目:2016 宁夏回族自治区高等学校科学技术研究项目(NGY2016014)

作者简介:蔡楠(1993-),男,硕士研究生,研究方向为模式识别与图像处理;李萍,教授,硕导,CCF 会员(14282M),研究方向为计算机控制。

网络出版地址: <http://kns.cnki.net/kcms/detail/61.1450.TP.20190321.0942.070.html>

始化卷积核<sup>[5]</sup>。该方法十分简单且易于操作,但是存在较大的偶然性和不确定性,导致网络的不稳定性大大增加。在2010年,由Glorot等提出了Xavier算法初始化CNN,由于一般的神经网络在前向传播时神经元输出值的方差会不断增大,而利用Xavier算法理论上可以保证每层神经元输入输出方差一致<sup>[6-7]</sup>,但是Xavier算法从本质上讲还是通过生成随机数来完成初始化,因此网络仍然存在着不稳定性。文献[8]中通过主成分分析(principal component analysis, PCA)对每个卷积层输入的每幅图像先进行所有感受野的采集,然后通过PCA提取主成分将其作为网络的权重,从而达到初始化网络权重的目的。该方法解决了通过随机数初始化网络带来的不稳定性,同时避免了人工设定超参数,但是由于PCA在提取非线性特征上能力

较差,无法提取图像中存在的非线性特征,不能更加有效地初始化网络权重。为此,文中提出了一种基于核主成分分析(kernel principal component analysis, KPCA)的方法来初始化卷积神经网络的权重,称为KPCA-CNN。KPCA-CNN通过对每个卷积层输入的每幅图像的所有感受野进行取样作为KPCA的输入样本,经KPCA映射至高维特征空间提取出所有感受野的非线性特征作为网络权重的初始值,以提高网络的准确率,加快网络的收敛速度。

## 1 卷积神经网络

### 1.1 基本结构

一般卷积神经网络由输入层、卷积层、池化层(下采样层)、全连接层、输出层构成,如图1所示<sup>[9]</sup>。

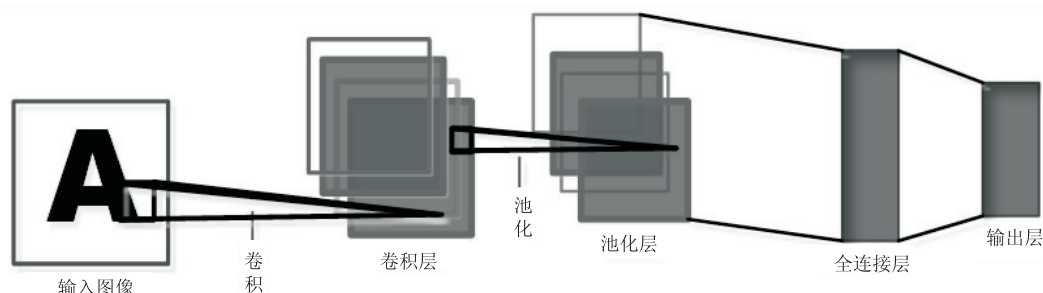


图1 卷积神经网络模型

与传统的神经网络相比,CNN主要增加了两层:卷积层与池化层。其中卷积层是由输入图像与卷积核通过卷积后所得到的特征图,通过卷积运算使输入图像特征增强,降低噪声干扰,从而更好地提取图像特征<sup>[10]</sup>。池化层一般在卷积层之后,主要目的是通过池化操作将卷积层中的特征图进行特征降维,减少网络的计算量。将经过多个卷积层与池化层后的特征图通过全连接层完成对图像的分类和识别<sup>[11]</sup>。具体过程如下:

假设卷积神经网络第 $i$ 层的输入图像为 $X_i$ (输入层的图像为 $X_0$ ), $C_i$ 表示第 $i$ 个卷积层, $S_i$ 表示 $C_i$ 之后的池化层, $H_i$ 表示第 $i$ 个卷积层中的特征图, $J_i$ 表示 $S_i$ 中池化后的特征图。

生成 $H_i$ 的过程如下:

$$H_i = f(w_i * X_i + b_i) \quad (1)$$

其中, $w_i$ 表示第 $i$ 个卷积层中的卷积核;“ $*$ ”表示卷积运算符; $b_i$ 表示第 $i$ 个卷积层中的偏置项; $f(\cdot)$ 表示非线性激励函数。

之后通过池化层( $S_i$ )所得特征图 $J_i$ 如下式所示:

$$J_i = \text{subsampling}(H_i) \quad (2)$$

其中,subsampling表示池化操作。

最后由全连接层根据卷积层与池化层所提取特征进行图像分类与识别。

### 1.2 卷积神经网络初始化

卷积神经网络在训练过程中通过反向传播使损失函数达到最小,最终收敛于某个值,而有效的初始化,能减少网络的训练复杂度和迭代次数,因此卷积神经网络初始化就是更好地为各个卷积层的卷积核,全连接层的权值,各层的偏置项进行初始化,由于池化层采用固定结构所以无需初始化。KPCA-CNN主要针对卷积核的初始化,全连接层的权值采取随机数初始化,卷积层的偏置项均设为0。

## 2 KPCA 初始化卷积核

### 2.1 KPCA 原理

核方法是解决非线性模式分析问题的一种有效途径,核心思想在于通过某种线性的映射将原始数据映射到合适的高维空间,再通过线性的学习器在新的空间中分析处理模式<sup>[12-13]</sup>。

核函数如下所示:

$$k = \langle \phi(x_i), \phi(x_j) \rangle \quad (3)$$

其中,“ $\langle \cdot \rangle$ ”表示内积运算符; $\phi$ 为原样本向高维特征空间的映射。

KPCA是PCA的一种非线性改进,主要是将样本经非线性变换映射至高维特征空间<sup>[14-15]</sup>,在高维特征空间中使原样本线性可分,从而更好地提取非线性

特征。

设一组样本集  $X = \{X_1, X_2, \dots, X_n\}$  ,其中  $n$  为样本个数,KPCA 原理如下:

- (1)将样本映射至高维特征空间  $\phi(X)$  ;
- (2)将映射后的样本去均值,并求出协方差矩阵

$$C, C = \frac{1}{n} \phi(X) \phi(X)^T ;$$

- (3)求解协方差矩阵  $C$  的特征值  $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$  和特征向量  $(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n)$  ,将特征向量按与其对应的特征值从大到小的顺序排列  $(\eta'_1, \eta'_2, \dots, \eta'_n)$  。

为了后续描述方便,将上述步骤定义为:KPCA  $(X_1, X_2, \dots, X_n) = (\eta'_1, \eta'_2, \dots, \eta'_n)$  ,表示经过 KPCA 处理后样本所得的特征向量。

2.2 KPCA 初始化卷积核的方法

以网络中第一个卷积层为例,具体算法过程描述如下:

假设输入层有 2 幅图像,第一个卷积层中有 4 个卷积核,卷积核的大小为  $3 \times 3$ 。

- (1)定义一个  $3 \times 3$  的感受野对输入图像进行滑动取样,将所取的样本转化为向量的形式:  $P_i = \{p_1^i, p_2^i, \dots, p_n^i\}$  。

- (2)把转化完成的向量送入 KPCA 进行主成分提取,即:KPCA  $(X_1, X_2, \dots, X_n) = (\eta'_1, \eta'_2, \dots, \eta'_n)$  。

- (3)把所提取的主成分作为卷积核的初始值,对卷积神经网络的卷积核  $w_1, w_2, w_3, w_4$  进行初始化。

3 实验仿真

实验 1:采用 Python 中 sklearn 自带的数据库生成 100 个半月形分布数据,如图 2 所示,分别经 PCA 与 KPCA 进行处理,结果如图 3 和图 4 所示。从图 3 和图 4 中可以看出,经 PCA 处理的数据不能有效地将非线性分布的数据完全分开,而 KPCA 能够有效地使非线性分布数据完全分开,从而能更加有效地提取非线性特征。

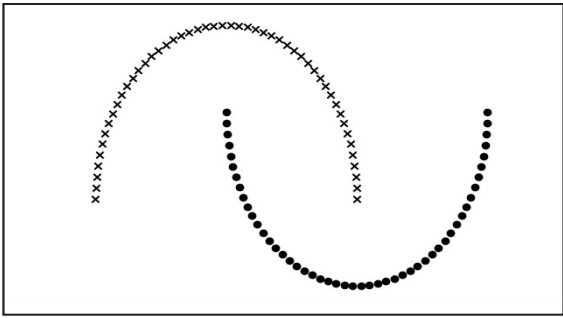


图 2 生成的半月形分布数据

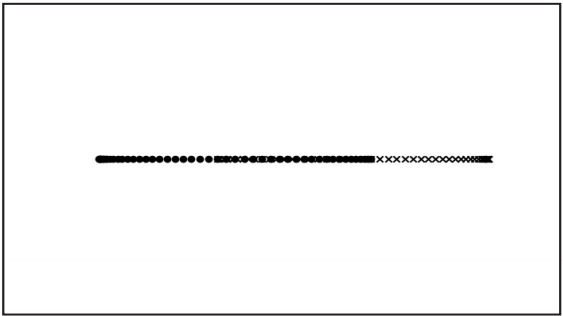


图 3 经 PCA 处理后的数据

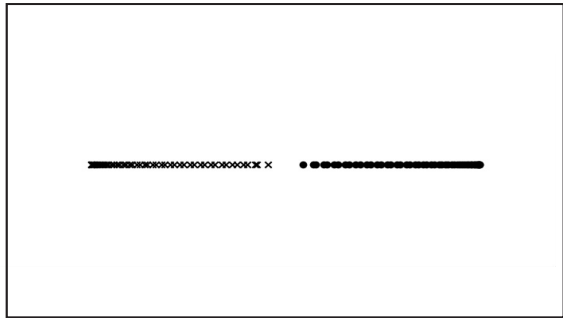


图 4 经 KPCA 处理后的数据

实验 2:使用 Python 语言,通过 TensorFlow 搭建卷积神经网络,其结构为:输入层,3 个卷积层,3 个池化层(均采用最大池化方式),感受野大小均为  $2 \times 2$ ,1 个全连接层,包含 625 个神经元,输出层包含了 10 个神经元;卷积核大小为  $3 \times 3$ ,个数分别为:32,64,128。分别用 PCA 初始化方法和 KPCA-CNN,在 MNIST 手写数字识别上进行 100 次训练,结果如图 5 所示。

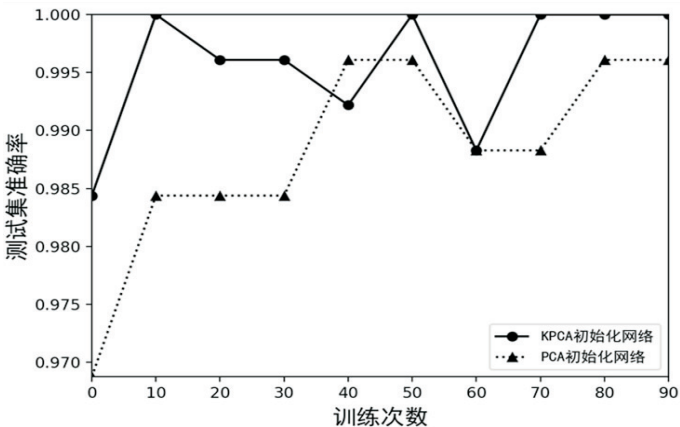


图 5 准确率

由图5可以看出,KPCA-CNN比PCA初始化CNN在测试集上的准确率整体高出许多。KPCA初始化网络训练约70次就可以达到收敛,而PCA初始化网络训练约80次才能达到收敛。

4 结束语

针对卷积神经网络中卷积核初始化的问题,提出了一种基于KPCA的初始化方法。实验1的结果说明了KPCA比PCA有更好的非线性特征提取能力。实验2用KPCA和PCA两种初始化CNN的方法在MNIST数据集上进行训练,由于KPCA提取了原图像中大量的非线性特征来初始化卷积核,从而增加了网络识别准确率,加快了网络的收敛速度,从而表明KPCA能更有效地初始化卷积神经网络。

参考文献:

[1] 许可. 卷积神经网络在图像识别上的应用的研究[D]. 杭州:浙江大学,2012.

[2] 常亮,邓小明,周明全,等. 图像理解中的卷积神经网络[J]. 自动化学报,2016,42(9):1300-1312.

[3] 李寰宇,毕笃彦,查宇飞,等. 一种易于初始化的类卷积神经网络视觉跟踪算法[J]. 电子与信息学报,2016,38(1):1-7.

[4] 史鹤欢,许悦雷,马时平,等. PCA预训练的卷积神经网络目标识别算法[J]. 西安电子科技大学学报:自然科学版,

2016,43(3):161-166.

[5] 赵菲妮. 基于深度学习网络的SAR图像目标识别研究[D]. 西安:西安电子科技大学,2017.

[6] GLOROT X, BENGIO Y. Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks[J]. Journal of Machine Learning Research,2010,9:249-256.

[7] 沈成恺. 卷积神经网络权值初始化方法研究[D]. 北京:北京工业大学,2017.

[8] 李玉鑑,沈成恺,杨红丽,等. 初始化卷积神经网络的主成分洗牌方法[J]. 北京工业大学学报,2017,43(1):22-27.

[9] 黄新波,胡潇文,朱永灿,等. 基于卷积神经网络算法的高压断路器故障诊断[J]. 电力自动化设备,2018,38(5):136-140.

[10] 陈旭,张军,陈文伟,等. 卷积网络深度学习算法与实例[J]. 广东工业大学学报,2017,34(6):20-26.

[11] 周飞燕,金林鹏,董军. 卷积神经网络研究综述[J]. 计算机学报,2017,40(6):1229-1251.

[12] 马旭,刘应安,业宁,等. 基于核PCA与SVM算法的木材缺陷识别[J]. 常州大学学报:自然科学版,2017,29(3):60-68.

[13] 何新,李大辉,付军. 特征提取算法KPCA的改进与设计[J]. 高师理科学刊,2015(6):34-37.

[14] 王满. 基于PCA与KPCA的多光谱遥感影像特征提取对比研究[J]. 矿山测量,2016,44(2):49-52.

[15] 梁佐堂,刘欣涛. 基于主成分分析的手写体数字识别方法研究[J]. 信息技术,2016(8):121-124.

《计算机技术与发展》投稿要求

1. 文稿具有创新性,内容科学可信,结构严谨,图表清晰,文稿必须使用 word 排版,应在 4 页以上(A4 纸,Word03 默认页面,5 号宋体,包括图表在内),文稿包括:题名(20 字以内),作者姓名,作者单位(包含地区名和邮编),摘要(须达到 300 汉字以上,包括:目的、方法、结果、结论,英译文同步、准确),关键词(4~8 个),中图分类号,正文,参考文献(总数应在 15 篇以上,外文文献不少于 5 篇),与中文对照的英文(包括:题名、作者姓名、作者单位、摘要、关键词)。提供所有作者的简介:姓名、性别、出生年、学位(职称)、研究方向。
2. 文中的图表要符合国家规范,一般不应超过 6 个,图形尽量用 visio 处理,版面要清晰、紧凑、美观,图中文字采用六号宋体或 Times New Roman,打印清晰,不用彩色,坐标图中要注计量单位、符号,表格一律采用三线表(不画竖线)。
3. 文中所有物理量和单位应符合国家标准或国际标准,外文字母、单位、符号的大小写、正斜体、上下角标及易混字母应标注清楚,标量用白斜体字母(可以加下标)表示,矢量、矩阵和张量用黑斜体字母(可以加下标)表示。数学公式必须用数学编辑器处理。
4. 文稿章节编号采用三级标题:一级如 1,2,3,⋯;二级如 1.1,1.2,1.3,⋯;三级如 1.1.1,1.1.2,1.1.3,⋯。
5. 参考文献尽量选用近几年计算机专业期刊论文,未公开发表的资料请勿引用。参考文献序号按文中引用顺序排列。