

文章编号: 2095-2163(2023)07-0045-08

中图分类号: TP391.9; R737.9

文献标志码: A

基于粒子群算法优化的乳腺癌化合物活性预测研究

王江翔, 肖清泉

(贵州大学 大数据与信息工程学院, 贵阳 550025)

摘要: 在治疗乳腺癌的药物研发过程中,通常采用建立化合物活性预测模型的方法来筛选潜在活性化合物。针对传统的回归预测模型对化合物活性预测的效果较差的问题,提出了一种基于粒子群算法优化的化合物活性预测模型,分别采用粒子群算法对 SVR 模型、Random Forest 模型、XGBoost 模型和 LightGBM 模型进行优化,对比分析优化前后的均方误差、平均绝对误差、拟合度等评价指标。结果表明,粒子群算法优化能够带来模型预测性能的提升,优化后的 LightGBM 模型预测效果更好,可为其他回归预测模型的优化提供方法参考。

关键词: 粒子群算法; 回归预测模型; 化合物活性

Prediction of optimized breast cancer compound activity based on particle swarm algorithm

WANG Jiangxiang, XIAO Qingquan

(College of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang 550025, China)

[Abstract] In the process of drug development for the treatment of breast cancer, the method of building compound activity prediction models is usually used to screen potentially active compounds. To address the problem of poor prediction effect of traditional regression prediction models, a compound activity prediction model optimized based on particle swarm algorithm is proposed, and the particle swarm algorithm is used to optimize the SVR model, Random Forest model, XGBoost model and LightGBM model, respectively, to compare and analyze the evaluation of mean square error, mean absolute error and goodness-of-fit before and after optimization. The results show that the optimization of the particle swarm algorithm can improve the prediction performance of the models, and the optimized LightGBM model has better performance, which can provide a reference method for the optimization of other regression prediction models.

[Key words] particle swarm algorithm; regression prediction model; compound activity

0 引言

国内人口的乳腺癌发病率不容小觑,平均每年有大约 30 万的女性乳腺癌患者和少数男性患者^[1]。乳腺癌是乳腺上皮细胞在多种因素作用下,发生增殖失控的现象。患者早期的症状为乳房肿块、乳头溢液、腋窝淋巴结肿大等症状,晚期可能发生癌细胞扩散转移,感染其他器官,直接威胁患者的生命。随着医疗新兴技术的出现与发展,全球乳腺癌的发病率得到了初步的控制,但是乳腺癌发病机制和抗乳腺癌药物的关系依然是近年来研究的重点和难题。

目前,在药物研发中,为了节约时间和成本,通常采用建立化合物活性预测模型的方法来筛选潜在活性化合物。

本文针对传统的回归预测模型对化合物活性预测的效果较差的问题,采用粒子群算法分别对 4 种传统预测模型进行优化。通过对比分析模型优化前后的均方误差、平均绝对误差等指标,验证了粒子群算法带来的模型预测性能的提升,可为回归预测模型的优化提供思路。

基金项目: 贵州省留学回国人员科技活动择优资助项目([2018]09); 贵州省高层次创新型人才培养项目([2015]4015); 贵州省研究生科研基金([2020]035); 贵州大学智能制造产教融合创新平台及研究生联合培养基地建设项目(2020520000-83-01-324061)。

作者简介: 王江翔(1998-),男,硕士研究生,主要研究方向:光电子材料与器件研究;肖清泉(1970-),男,博士,教授、博士生导师,主要研究方向:半导体硅化材料与器件研究。

通讯作者: 肖清泉 Email: qqxiao@gzu.edu.cn

收稿日期: 2022-06-23

1 整体设计流程

本文采用粒子群算法分别改进了 SVR 算法、Random Forest 算法、XGBoost 算法和 LightGBM 模型,用于构建生物活性的定量预测模型。同时,以验证集 MSE 、 MAE 、拟合度作为评价指标,对比分析各个模型的预测效果,以验证所改进模型的性能。具体流程如图 1 所示。

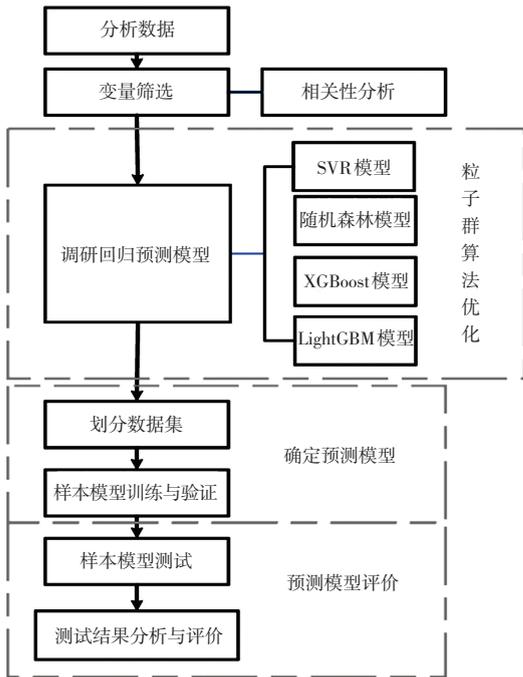
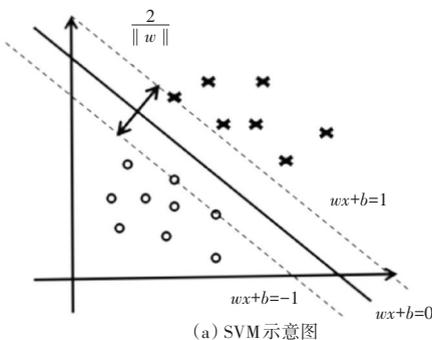
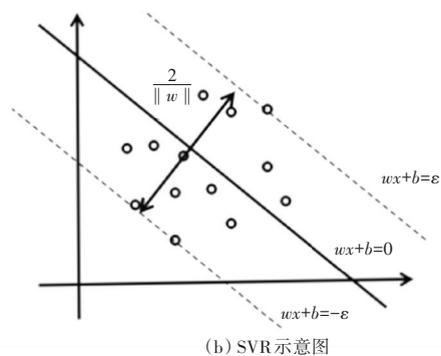


图 1 整体设计流程图

Fig. 1 Overall design flow chart



(a) SVM 示意图



(b) SVR 示意图

图 2 SVR 与 SVM 对比示意图

Fig. 2 Schematic diagram of the comparison between SVR and SVM

SVR 模型将变量的输入映射到特征空间,使得非线性的数据可以通过回归进行线性拟合,以此得到的构造决策函数如下:

$$f(x_i) = \omega^T x_i + b \quad (3)$$

SVR 在 SVM 的中心线性函数设置了一个宽度

2 基于粒子群算法优化的预测模型

2.1 粒子群算法

粒子群算法^[2]来自对鸟群捕食行为的研究,通过群体中个体之间的协作和信息共享来寻找最优解,该方法简单、且易于实现。粒子群算法中每个粒子都关注 2 个点—位置和速度,在寻找到自己的最优位置和速度时,将其与种群中的其它粒子进行信息共享,其它粒子共享到信息后会以此调整自身的最优位置与速度。这样随着越来越多的位置与速度信息的出现,就能通过计算得到一个全局最优解。

假设 $X = (X_1, X_2, X_3, \dots, X_n)$ 为一个种群, $X_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}, \dots, x_{id})^T$ 为 i 个粒子的位置向量矩阵, $V_i = (v_{i1}, v_{i2}, v_{i3}, \dots, v_{id})^T$ 为 i 个粒子的速度向量矩阵。单个粒子更新自身位置与速度信息的公式如下:

$$v_{id}^{k+1} = v_{id}^k + c_1 r_1 (p_{id}^k - x_{id}^k) + c_2 r_2 (p_{gd}^k - x_{id}^k) \quad (1)$$

$$x_{id}^{k+1} = x_{id}^k + v_{id}^{k+1} \quad (2)$$

其中,相较于位置属性,粒子对速度属性更加依赖,粒子根据自身前一时刻的速度来思考自身能够到达的位置, c_1 就是调节此次位移的步长, c_2 调节粒子靠近群体的位置的步长。

2.2 粒子群算法优化的 SVR 模型设计

支持向量回归 (SVR) 模型^[3]是以支持向量机 (SVM) 为基础的,两者间的区别在于 SVR 是使得最远距离的样本点尽量靠近拟合线, SVM 是使得最近距离的样本点尽量疏远拟合线。SVR 和 SVM 对比示意如图 2 所示。

为 ε 的容忍偏差,落到这个宽度内的样本不做损失计算。 ε 的损失函数计算公式如下:

$$L_\varepsilon(f(x_i) - y_i) = \begin{cases} 0 & |f(x_i) - y_i| \leq \varepsilon \\ |f(x_i) - y_i| - \varepsilon & \text{其他} \end{cases} \quad (4)$$

此外,引入松弛变量 ε, ϵ 以适应数据在容忍偏差之外的松弛程度不同的需求,公式如下:

$$\min_{\omega, b, \varepsilon_i, \epsilon_i} \frac{1}{2} \|\omega\|^2 + C \sum_{i=1}^N (\varepsilon_i + \epsilon_i) \quad (5)$$

其中, C 表示惩罚因子。引入拉格朗日函数,将一般问题转化为对偶问题,公式如下:

$$\max G(\alpha) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (\alpha_i - \hat{\alpha}_i)(\alpha_j - \hat{\alpha}_j) \langle x_i, x_j \rangle - \varepsilon \sum_{i=1}^N (\alpha_i + \hat{\alpha}_i) + \sum_{i=1}^N y_i (\alpha_i - \hat{\alpha}_i) \quad (6)$$

对于非线性回归问题需要对映射空间进行一个转换,转化为一个可以进行线性回归的更高维度的特征空间,这个过程主要依赖于核函数,其高斯核函数公式如下:

$$K(x_i, x_j) = e^{-g \|x_i - x_j\|^2} \quad (7)$$

映射到高维度的空间以后就能使用回归函数进行回归,回归函数如下:

$$f(x) = \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \hat{\alpha}_i) \Phi(x_i) \Phi(x) + b = \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \hat{\alpha}_i) k(x_i, x) + b \quad (8)$$

粒子群算法的引入主要是为了对 SVR 模型中惩罚参数 C 和高斯核函数的宽度系数 g 进行优化,寻找 C, g 的最优解。SVR 对样本数据采用惩罚机制,惩罚力度的大小就由参数 C 控制,在容忍偏差之外的惩罚力度要适当,因为惩罚力度过大,会使得模型泛化能力较弱,而惩罚力度过小,会使得模型误差大,精度不高。高斯核函数的宽度系数 g 的大小表示样本之间的相关程度, g 的值越大,样本的相关性就越大, g 的值越小,样本的相关性就越小。 g 的值如果太大,模型精度会被影响, g 的值如果太小,模型泛化性能就不足。

因此,优化后的 SVR 模型通过使用粒子群算法对惩罚参数 C 和高斯核函数的宽度系数 g 进行算法寻优,找到最优解,以此大幅度增加模型的精度以及泛化能力。

2.3 粒子群算法优化的 Random Forest 预测模型设计

Random Forest 算法^[4]是为了整合多种决策树算法而提出的一种集成学习算法,其中的每棵决策树都是使用 bootstrap 技术随机抽取样本构建的,每棵决策树的分裂点是从随机特征子空间中随机选择而来。这样,每棵决策树都是随机生成,涵盖多种可能性,Random Forest 算法在其中通过投票的方式选择最好的预测结果。

决策树是一种分类器,通过模仿树木枝干分枝,

从树的根部进行分裂,选取适当的分裂准则,在满足条件时进行分裂,直至生成一颗完整的树状,多个分枝就代表了多个路径规则,在预测数据时,依靠这些规则对数据进行分类和预测。决策树的生成算法常见的有 ID3、C4.5、CART,其中 ID3、C4.5 基于香农熵进行分裂,CART 是基于基尼系数分裂。香农熵的公式表达式如下:

$$H(X) = - \sum_{i=1}^n p(x_i) \ln p(x_i) \quad (9)$$

香农熵可以用来计算信息增益的大小, ID3 算法就是通过选择信息增益最大的属性进行决策树生成的。信息增益的计算公式如下:

$$\text{Gain}(A) = H(D) - \sum_{j=1}^v \left(\frac{|D_j|}{|D|} \times H(D_j) \right) \quad (10)$$

但是, ID3 算法对于连续变量的选择性很差, C4.5 算法针对这一算法缺陷引入分裂信息比率因子,数学公式如下:

$$\text{SplitInfo}_A(D) = - \sum_{j=1}^v \left(\frac{|D_j|}{|D|} \times \log \frac{|D_j|}{|D|} \right) \quad (11)$$

引入分裂信息比率因子后的分裂准则公式如下:

$$\text{GainRatio}(A) = \frac{\text{Gain}(A)}{\text{SplitInfo}_A(D)} \quad (12)$$

这一准则计算方法将连续变量进行离散化处理,使得决策树对连续变量的选择性变好。而 CART 采用一种全新的方法,把基尼系数衡量的信息纯度作为分裂准则,基尼系数公式如下:

$$\text{Gini}(X) = 1 - \sum_{i=1}^n p(x_i)^2 \quad (13)$$

决策树在建树时根据基尼系数最小进行分裂。

2.4 粒子群算法优化的 XGBoost 预测模型设计

XGBoost 算法^[5]是通过串联不同的知识点,合理高效地解决回归、排序等复杂问题,是近年来机器学习领域应用最广泛的算法之一。boosting 是数学建模中运用最广泛的方法,就是通过集成不同的模型来得到一个高精度的模型,但是 boosting 每次计算需要迭代几千上万次,因此效率低下。XGBoost 是在 boosting 的基础上进行改进, XGBoost 是一种向前特征的算法,其模型公式为:

$$\hat{y}_i = \sum_{k=1}^K f_k(x_i) \quad f_k \in \tau \quad (14)$$

其中, k 为树的棵树; f 表示回归树,并且 $f(x) = w_{q(x)}$, $q: R^m \rightarrow T, w \in R^T$; q 为每一颗树的结构; T 表示树中的叶子树;一个 q 对应一个叶子权重 w ; τ 表示全部回归树组成的函数空间。在实际计算当中,将规则安排到叶子里,然后由 w 进行求和,得到最

终的预测值。*XGBoost* 的整个建模过程如下:

设定要预测模型:

$$F(x) = \sum_{i=1}^T w_i f_i(x) \quad (15)$$

设置目标函数为:

$$obj^t = \sum_{i=1}^N L(y_i, F_i^t(x_i)) + \emptyset(f_i) + N \quad (16)$$

每个样本落在叶子节点上:

$$f_i(x) = m_q(x), m \in R^T, q: R^d \rightarrow \{1, 2, 3, \dots, T\} \quad (17)$$

$$\emptyset(f_i) = \gamma T + \frac{1}{2} \mu \sum_{i=1}^T m_j^2 \quad (18)$$

其中, T 为 t 棵树叶子节点的的总数, m_j 是 j 个叶子的权重。

进一步, 得到新的目标函数:

$$\begin{aligned} obj^t &= \sum_{i=1}^N \left[g_i w_i f_i(x_i) + \frac{1}{2} h_i w_i^2 f_i^2(x_i) \right] + \\ &\phi(f_i) = \\ &\sum_{i=1}^N \left[g_i w_i m_q(x_i) + \frac{1}{2} h_i w_i^2 m_q^2(x_i) \right] + \\ &\gamma T + \frac{1}{2} \mu \sum_{i=1}^T m_j^2 = \\ &\sum_{j=1}^T \left[\left(\sum_{i \in I_j} g_i \right) w_i m_j + \right. \\ &\left. \frac{1}{2} \left(\sum_{i \in I_j} h_i w_i^2 + \mu \right) m_j^2 \right] + \gamma T \quad (19) \end{aligned}$$

令:

$$\begin{aligned} G_j &= \sum_{i \in I_j} g_i, H_j = \sum_{i \in I_j} h_i, obj^t = \\ &\sum_{j=1}^T \left[G_j w_i m_j + \frac{1}{2} (H_j w_i^2 + \mu) m_j^2 \right] + \gamma T \quad (20) \end{aligned}$$

对函数进行优化:

$$m_j^* = - \frac{G_j^2 w_i}{H_j w_i^2 + \mu} \quad (21)$$

$$obj_j^* = - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^T \frac{G_j^2 w_i}{H_j w_i^2 + \mu} + \gamma T \quad (22)$$

$$\text{令: } w_i = 1, m_j^* = - \frac{G_j}{H_j + \mu},$$

$$obj_j^* = - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^T \frac{G_j^2}{H_j + \mu} + \gamma T \quad (23)$$

增加的切分点的增益:

$$gain = \frac{G_L^2}{H_L + \mu} + \frac{G_R^2}{H_R + \mu} - \frac{(G_L + G_R)^2}{H_L + H_R + \mu} - \gamma \quad (24)$$

2.5 粒子群算法优化的 LightGBM 预测模型设计

LightGBM^[6] 是以 GBTD 为基础的一种算法, 而 GBTD (Gradient Boosting Decision Tree) 是一种通过迭代构建模型的算法, GBTD 具有梯度提升和决策树的特点, 具有精度高、速度快、不容易过拟合的优

点。LightGBM 弥补了 GBTD 处理海量数据时速度较慢的问题。LightGBM 是一种以直方图决策树为基础的算法, 其基本过程是: 将特征划分成 s 个整数, 然后生成一个宽度为 s 的直方图, 在输入数据时, 离散值被累积起来作为直方图的索引, 在遍历一次数据后, 所有累计的量全被直方图统计起来, 然后根据生成的索引值进行遍历找到最佳的切分点。这个算法的优点在于减小了存储量, 使得运算速度加快, 并且降低了运算成本, XGBoost 需要计算一次效益后, 再遍历每一个特征, 然而采用直方图算法的 LightGBM 只需要计算 s 次。直方图算法如图 3 所示。

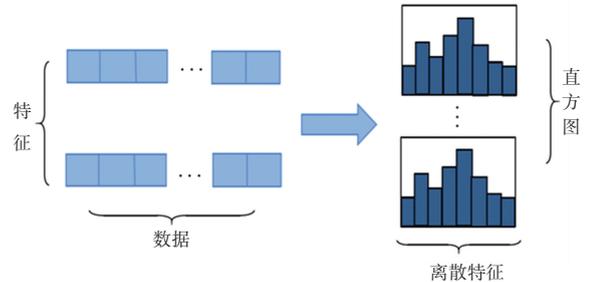


图 3 直方图算法

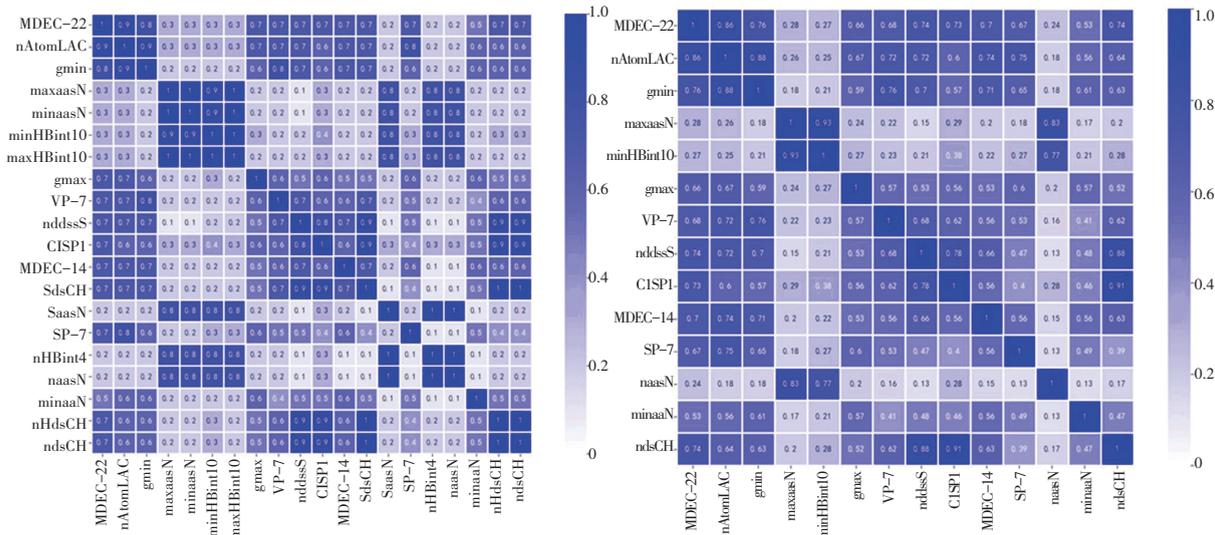
Fig. 3 Histogram algorithm

迄今为止, LightGBM 已经普遍用于机器学习领域。大量的数据表明, LightGBM 已比目前应用的 Boosting 工具拥有更高的准确率和计算效率, LightGBM 比 XGBoost 的计算速度更快, 效率和精度也更高, LightGBM 采用直方图算法可以有效地解决 XGBoost 算法把所有特征加入内存进行排序所造成的内存消耗。

3 实验结果分析

3.1 数据处理

本文数据主要源于第十八届华为杯数学建模 D 题, 数据包括 1 974 个化合物对 ER α 的生物活性数据, 以及 729 个分子描述符信息 (变量)。由于数据中存在部分对生物活性影响不大的变量, 本文通过相关性分析筛选出 20 个对生物活性最具有显著影响的变量。20 个变量之间相关度分布图如图 4(a) 所示。由图 4(a) 可见, 20 个主要变量的相关系数矩阵中, 有部分变量的相关性过高, 对模型的预测效果具有一定的影响。因此, 为了使得模型预测性能更佳, 本文进一步研究了变量之间是否具有高度的线性关系或者非线性关系, 去除了部分相关系数较大的变量, 最后得到 14 个变量, 如图 4(b) 所示。这 14 个变量之间的整体独立性更高, 对模型预测更加有利, 故将这 14 个变量的值作为建立生物活性定量预测模型。



(a) 20 个变量之间相关度分布图

(b) 处理后的 14 个变量之间相关度分布图

图 4 变量间的相关度分布图

Fig. 4 Correlation distribution between variables

3.2 评估指标

3.2.1 均方误差

均方误差 (MSE) 是观测值与真值偏差的平方和观测次数 n 比值的平方根, 当对某一变量进行多次的测量时, 取这一测量结果误差的均方误差, 称均方误差, 公式如下:

$$MSE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (25)$$

3.2.2 平均绝对误差

平均绝对误差 (MAE), 又叫平均绝对离差, 是所有单个观测值与算术平均值的偏差的绝对值的平均。平均绝对误差可以避免误差相互抵消的问题, 因而可以准确反映实际预测误差的大小。绝对误差的平均值公式如下:

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |(f_i - y_i)| \quad (26)$$

3.2.3 拟合优度

拟合优度 (R^2) 是指回归线对预测值的拟合程度。度量拟合优度的统计量是可决系数 (亦称确定系数) R^2 。 R^2 最大值为 1。 R^2 的值越接近 1, 说明回归直线对观测值的拟合程度越好。反之越差。

3.3 四种粒子群算法优化的预测模型

本文首先对 1 974 个化合物进行样本划分, 为了在保证精度的同时让模型具有更好的泛化能力, 采用随机抽取样本的方法对数据进行划分, 其中以

90% 的化合物为训练集, 10% 的化合物为验证集。构建了 4 种算法模型, 分别是 SVR 算法、Random Forest 算法、XGBoost 算法、LightGBM 算法^[6]。对这 4 种算法模型采用粒子群算法进行优化, 对比分析各模型的最终实验结果, 选择预测性能最好的模型作为本文的最终预测模型进行测试集的预测。

3.3.1 模型预测值对比分析

将划分好的训练集样本数据送入优化模型进行训练回归, 得到训练好参数的优化模型, 使用验证集对模型进行验证。为了验证粒子群算法给各个原始模型带来的性能提升效果, 本文对原始模型进行相同的训练与验证, 将得到的预测值与样本真实值做对比, 如图 5 所示。

从图 5(a) 中可以看到, 原始 SVR 模型的预测结果拟合准确度并不高, 预测值与真实值的误差较大。这在很大程度上是由于惩罚参数 C 和高斯核函数的宽度系数 g 的优化程度不高所导致。而用粒子群算法改进后的 SVR 模型, C 和 g 数值经过优化后, 将明显提升模型预测准确率。优化后 SVR 模型的预测值与样本真实值对比如图 5(b) 所示。由图 5(b) 可看出, 粒子群算法优化后的 SVR 模型的预测结果与真实值拟合程度更高, 这也表明优化后的 SVR 模型性能更好, 误差更小。同时, 图 5(c) 至图 5(h) 也表明了经过粒子群算法优化后的模型预测效果更好, 整体性能更佳。

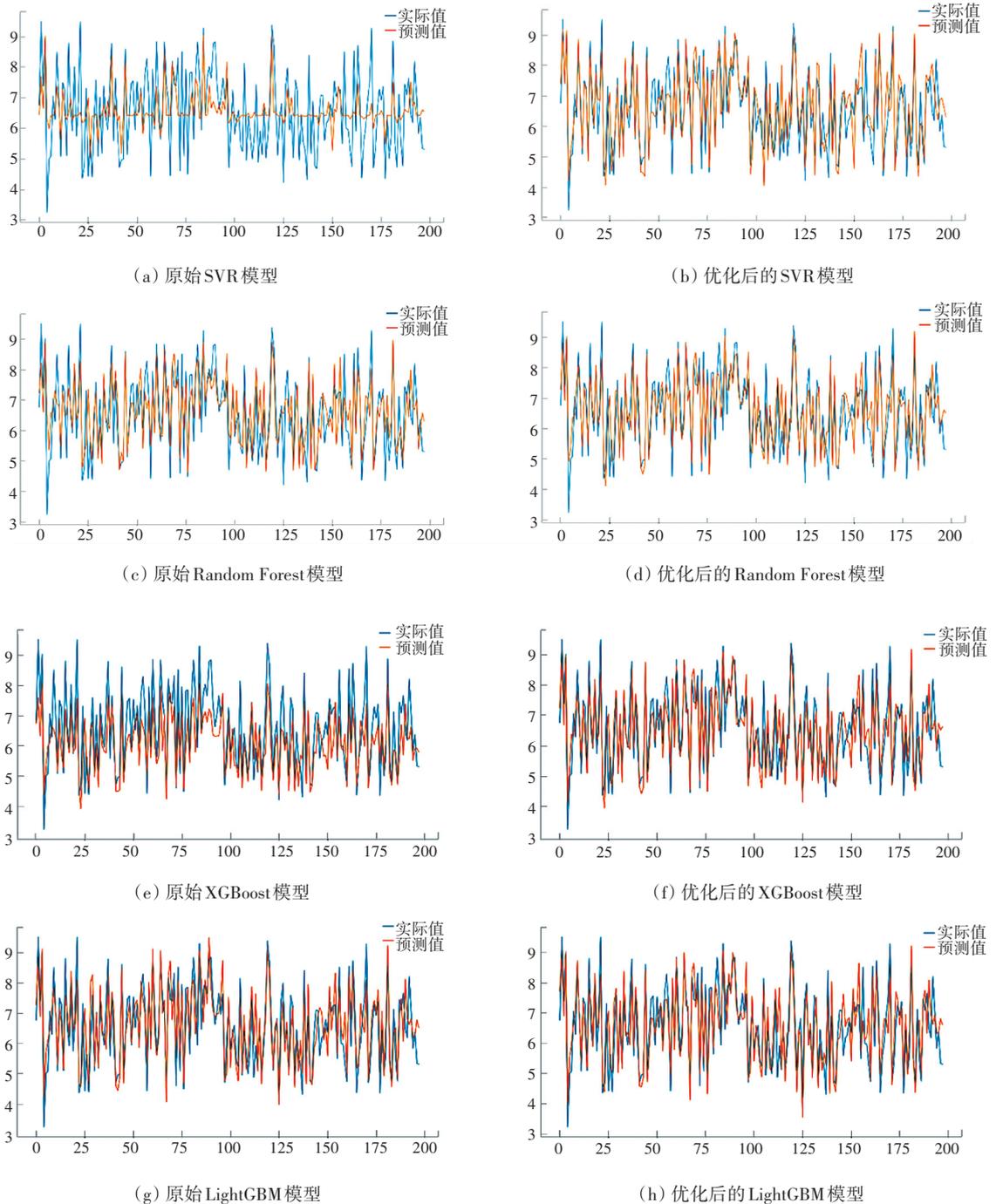


图 5 4 个模型优化前后的预测结果与真实值对比

Fig. 5 Comparison of the prediction results with the actual value before and after optimization of the four models

3.3.2 拟合度对比分析

本文对模型拟合度进行了可视化分析,如图 6 所示。从图 6 中可以看出,优化后 SVR 模型的预测拟合度在迭代回归 5 次以后基本收敛,预测值与真实值的拟合度维持在 79.52%。而优化后的 Random Forest 模型的误差较小,预测值拟合度稳定在 81.29%。同时,优化后 XGBoost 模型在训练过程中出现“局部最优”现象,拟合度维持在了 77.20%,通

过粒子群算法对参数进行寻优,使其训练能够自主跳出局部最优,拟合度最终达到 84.52%。

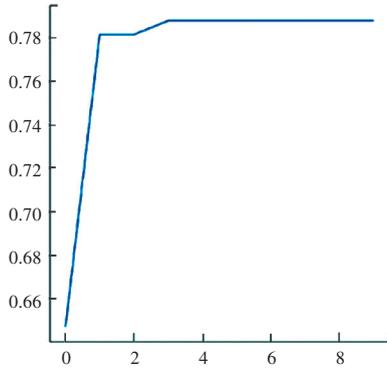
相比之下,优化后的 LightGBM 模型拟合误差更小,不断通过参数优化参数,跳出局部最优,拟合度最终稳定在 84.68%。

3.3.3 预测误差对比分析

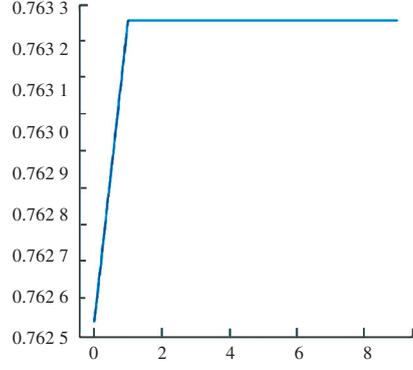
为了进一步验证粒子群算法给预测模型带来的影响,本文分别绘制了 4 个优化后的模型的预测值

与真实值的误差曲线图,如图 7 所示。由图 7 可见,优化后的模型预测误差大多数都低于改进前的模型,预测效果得到了较好的改善。其中,SVR 模型

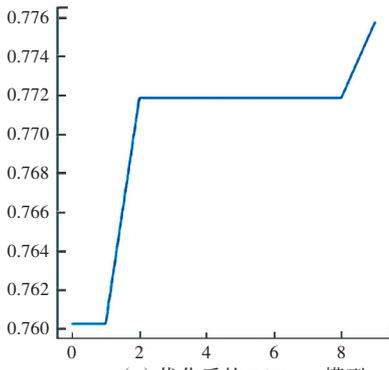
和 XGBoost 模型的性能提升较大,整体误差基本都有所降低。而相比之下,LightGBM 模型的整体预测误差更低,预测效果更好。



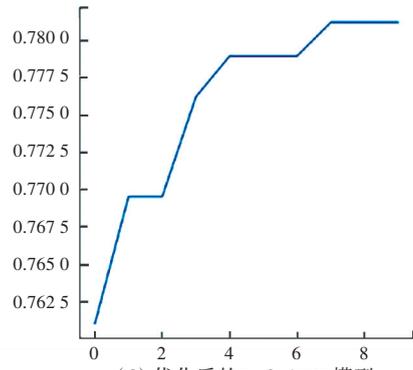
(a) 优化后的SVR模型



(b) 优化后的Random Forest模型



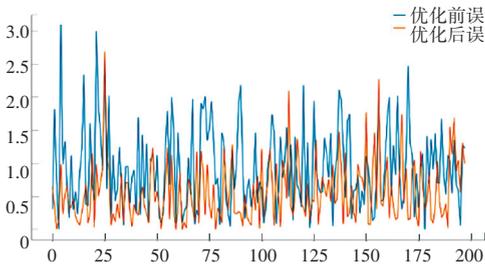
(c) 优化后的XGBoost模型



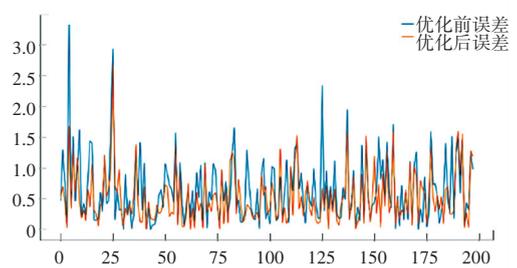
(d) 优化后的LightGBM模型

图 6 各个模型优化后的拟合度

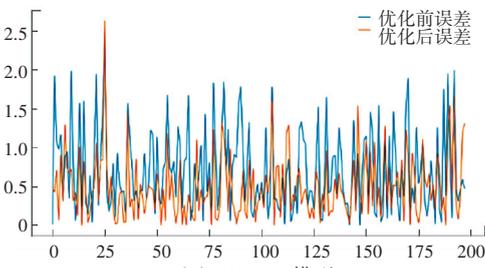
Fig. 6 Fitting degree of each model after optimization



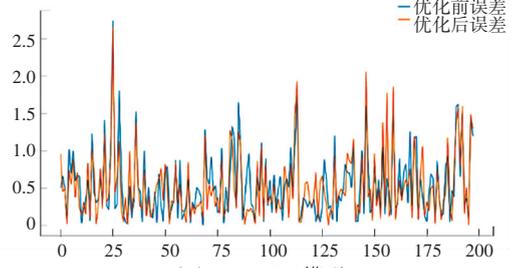
(a) SVR 模型



(b) Random Forest 模型



(c) XGBoost 模型



(d) LightGBM 模型

图 7 各个模型的预测值与真实值的误差曲线

Fig. 7 The error curve between the predicted value and the true value of each model

3.3.4 评价指标对比分析

本文给出了4个模型评价指标 MSE (均方误差)、 MAE (平均绝对误差)、 R^2 (拟合度), 见表1。由表1可看到, 优化后 LightGBM 模型的 MSE 和 MAE 值分别为 0.283 3 和 0.334 9, 均低于其它 3 个模型。同时, 优化后 LightGBM 模型的 R^2 值达到了最高的 84.68%。

表1 优化后的模型的评价指标

Tab. 1 Evaluation indicators of the optimized model

模型	评价指标		
	MSE	R^2	MAE
SVR	0.382 0	0.795 2	0.411 7
Random Forest	0.349 0	0.812 9	0.433 8
XGBoost	0.288 7	0.845 2	0.355 2
LightGBM	0.283 3	0.846 8	0.334 9

4 结束语

本文针对传统回归预测模型对化合物活性预测的效果较差的问题, 分别采用粒子群算法优化了 SVR 模型、Random Forest 模型、XGBoost 模型和

LightGBM 模型。对比分析各个模型的拟合度、 MSE 、 MAE 等评价指标的结果表明, 优化后的 LightGBM 模型对化合物活性的预测效果更好。同时, 通过可视化优化前后模型的预测结果和预测误差, 直观地展示了粒子群算法优化带来的模型效果的提升, 可为回归预测模型的优化方法提供思路。

参考文献

- [1] 左文述, 于金明, 方晋平. 我国乳腺癌研究的现状—第二届国际暨第五届全国乳腺癌学术会议资料综述[J]. 齐鲁肿瘤杂志, 1997(01): 3-8.
- [2] 张刘, 叶楠, 马灵玲. 改进粒子群优化算法的高光谱波段选择[J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41(10): 3194-3199.
- [3] 吕瑞宏, 赵晗, 赵柏山, 等. 基于主成分 SVM 的防腐层缺陷分类识别算法研究[J]. 微处理机, 2020, 41(05): 43-49.
- [4] 仇文岗, 唐理斌, 陈福勇. 基于 4 种超参数优化算法及随机森林模型预测 TBM 掘进速度[J]. 应用基础与工程科学学报, 2021, 29(05): 1186-1200.
- [5] 申明尧, 韩萌, 杜诗语. 融合 XGBoost 和 Multi-GRU 的数据中心服务器能耗优化算法[J]. 计算机应用, 2022, 42(01): 198-208.
- [6] 刘中强, 邹维维. 基于采样技术和 LightGBM 的用户用电异常检测模型[J]. 计算机系统应用, 2021, 30(09): 232-236.
- [7] Intelligence, 2017, 39(6): 1137-1149.
- [8] REDMON J, DIVVALA S, GIRSHICK R, FARH ADI A. You only look once: unified, real-time object detection[C]// IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Las Vegas, Nevada, USA: IEEE, 2016: 779-788.
- [9] LIU Wei, ANGUELOV D, ERHAN D, et al. SSD: Single shot multibox detector [C]// Proc. of European Conference on Computer Vision. Amsterdam, The Netherlands: Springer, 2016, 9905: 21-37.
- [10] 李成豪, 张静, 胡莉, 等. 基于多尺度感受野融合的小目标检测算法[J]. 计算机工程与应用, 计算机工程与应用. 2022, 58(12): 177-182.
- [11] 周迎峰, 张荣芬, 刘宇红, 等. 基于 RetinaNet 的海洋鱼类检测算法[J/OL]. 激光与光电子学进展: 1-15 [2022-07-18]. <http://kns.cnki.net/kcms/detail/31.1690.TN.20220714.1339.443.html>.
- [12] HE Kaiming, ZHANG Xiangyu, REN Shaoqing, et al. Spatial pyramid pooling in deep convolutional networks for visual recognition [J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2015, 37(9): 1904-1916.
- [13] DAN H, KEVIN G. Gaussian error linear units [J]. arXiv preprint arXiv: 1606.08415, 2020.
- [14] GAO Xinwen W, LI Shuaiqing, JIN Bangyang, et al. Intelligent crack damage detection system in shield tunnel using combination of retinanet and optimal adaptive selection [J]. Journal of Intelligent & Fuzzy Systems, 2021, 40(7): 1-17.
- [15] ZHOU Zihao, LI Yang, PENG Chenglei, et al. Image processing: Facilitating RetinaNet for detecting small objects[J]. Journal of Physics: Conference Series, 2021, 1815(1): 012016.
- [16] GIRSHICK R. Fast R-CNN [C]// IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV). Santiago: IEEE, 2015: 1440-1448.
- [17] LIN T, GOYAL P, GIRSHICK R, et al. Focal loss for dense object detection [J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2020, 42(2): 318-327.
- [18] ZHENG Zhong, QI Haoyang, ZHUANG Li, et al. Automated rail surface crack analytics using deep data-driven models and transfer learning[J]. Sustainable Cities and Society, 2021, 70: 102898.
- [19] ZHANG Luyang, WANG Haitao, WANG Xinyao, et al. Vehicle object detection based on improved RetinaNet [J]. Journal of Physics: Conference Series, 2021, 1757: 012070.
- [20] 习近平. 在全国抗击新冠肺炎疫情表彰大会上的讲话[N]. 人民日报, 2020-09-09(002).
- [21] GIRSHICK R, DONAHUE J, DARRELL T, et al. Rich feature hierarchies for accurate object detection and semantic segmentation [C]// IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Piscataway: IEEE, 2014: 580-587.
- [22] REN Shaoqing, HE Kaiming, GIRSHICK R, et al. Faster R-CNN: Towards real-time object detection with region proposal networks[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine

(上接第44页)

的优缺点, 基于整合链路网络和注意力融合网络的特性改进得到了 PSA 模块, 并将其融入到 RetinaNet 中, 同时改进预测器的 $GELUs$ 激活函数以避免梯度爆炸, 进一步结合 $GFocal Loss$ 损失函数, 最终提出了一个全新的适用于口罩识别的 PSA-Retina 检测网络。实验结果表明, PSA-Retina 网络能够有效检测人脸戴口罩和未戴口罩情况, 平均检测精度达到 85.13%, 运行帧率为 33.7 f/s, 且非口罩物体遮挡嘴部情况下, 该网络对于检测人脸未戴口罩情形也能同样进行高效识别, 在公共场景下的口罩检测也取得了显著效果, 证明了该网络在检测口罩上的有效性和优越性。

参考文献