

文章编号: 2095-2163(2019)06-0029-03

中图分类号: TP391.47

文献标志码: A

# 两种偏最小二乘特征提取方法的比较

张文杰, 韩纪庆

(哈尔滨工业大学 计算机科学与技术学院, 哈尔滨 150001)

**摘要:** 偏最小二乘法是解决自变量和因变量关系的一种常用的特征提取方法。同时可以用来对因变量进行回归,或者引入类别标识信息提取更有区分性的特征。在引入类别标识信息提取特征的过程中,偏最小二乘方法可以通过常用的两种方法进行求解,一种是非线性迭代的偏最小二乘法,另一种是基于奇异值分解的偏最小二乘法。本文通过分析两种方法在求解过程上的差异,以及在心音分类上的性能,对两种偏最小二乘方法进行了比较。

**关键词:** 偏最小二乘法; 特征提取; 心音分类

## Comparison of two partial least squares methods for feature extraction

ZHANG Wenjie, HAN Jiqing

(School of Computer Science and Technology, Harbin Institute Of Technology, Harbin 150001, China)

**【Abstract】** Partial least squares is a commonly used feature extraction method to solve the relationship between independent variables and dependent variables. It can also be used to regress the dependent variable or introduce category identification information to extract more distinguishing features. In the process of introducing the feature of class identification information, the partial least squares method can be solved by two commonly used algorithms, one is a nonlinear iterative partial least squares method, and the other is a partial least squares method based on singular value decomposition. This paper compares the two methods of partial least squares by analyzing the difference in the solution process between the two methods and the performance of the classification for heart sounds.

**【Key words】** speaker recognition; feature extraction; speaker modeling

## 0 引言

偏最小二乘法是解决自变量和因变量关系的一种常用的特征提取方法。同时考虑因变量和自变量,使得二者之间的相关性最大<sup>[1]</sup>,从而使得提取的特征同时包含二者的信息。在特征提取方法中,尤其是在小样本的特征提取方法中,偏最小二乘法通常是有效而稳定的,且被广泛使用<sup>[2]</sup>。

除了解决因变量和自变量之间的关系,当自变量是类别标识信息时,偏最小二乘法还可以引入类别标识信息提取更有区分性的特征<sup>[3]</sup>。在这个过程中,偏最小二乘法将类别标识信息融入到提取的特征里,使得到的特征含有类别标识信息,从而更加具有区分性。

使用偏最小二乘法引入类别标识信息,提取更有区分性的特征,根据具体的求解算法,可以将偏最小二乘法分为两类。一类是非线性迭代偏最小二乘法 (Nonlinear iterative partial least squares,

NIPLS)<sup>[4]</sup>,其在每次迭代的时候,根据最大化特征和类别标识信息得到的权值向量,求得得分向量,根据得分向量分别对原始特征和类别标识信息进行表示,得到残差矩阵,最终求得每次迭代得到的权值向量,构成权值矩阵。另一类是基于奇异值分解的偏最小二乘法 (Partial least squares based on singular value decomposition, PLS-SVD)<sup>[5]</sup>,其目标函数仍然是最大化特征和类别标识信息得到的权值向量,所不同的是,根据目标函数 PLS-SVD 方法进行 SVD 分解,得到的原始特征对应的奇异矩阵的前  $n$  个向量构成方法 PLS-SVD 的权值矩阵,无须进行迭代。由于特殊的求解过程 PLS-SVD 方法无法实现自变量对因变量的回归,也即是原始特征对类别标识的回归。但这里主要用偏最小二乘法进行特征提取,而无须进行回归。因此 PLS-SVD 方法在提取特征的时候是可以使用的。

NIPLS 方法在心音识别中取得了一定的效果,而 PLS-SVD 方法在心音识别上的效果还没有被充

**基金项目:** 国家自然科学基金(61471145; U1736210)。

**作者简介:** 张文杰(1989-),男,博士研究生,主要研究方向:心音识别、信号处理;韩纪庆(1964-),男,博士,教授,博士生导师,主要研究方向:语音信号处理、音频信息处理。

收稿日期: 2018-07-04

分挖掘。本文在基于规整频谱的基础上,对 NIPLS 和 PLS-SVD 方法,分别在 PASCAL 心音挑战赛<sup>[6]</sup> 上的数据集 Dataset-A 和 Dataset-B 进行了实验,并分析了二者的实验结果。

## 1 NIPLS 方法概述

对于心音识别,假设心音样本的特征用  $\mathbf{X}$  来表示,对应的类别标识信息用  $\mathbf{Y}$  来表示,则 NIPLS 方法主要是基于迭代的过程求解使得原始特征  $\mathbf{X}$  和类别标识信息  $\mathbf{Y}$  最相关的权值向量,

$$\max_{\|\mathbf{w}\|=1, \|\mathbf{c}\|=1} \mathbf{w}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Y} \mathbf{c}, \quad (1)$$

其中,数值向量  $\mathbf{w}$  的值,可以通过如下方式求解:

$$(1) \mathbf{w} = \mathbf{X}^T \mathbf{u} / (\mathbf{u}^T \mathbf{u})$$

$$(2) \|\mathbf{w}\| \rightarrow 1$$

$$(3) \mathbf{t} = \mathbf{X} \mathbf{w}$$

$$(4) \mathbf{c} = \mathbf{Y}^T \mathbf{w} / \mathbf{t}^T \mathbf{t}$$

$$(5) \|\mathbf{c}\| \rightarrow 1$$

$$(6) \mathbf{u} = \mathbf{Y} \mathbf{c}$$

迭代以上 6 个步骤直到收敛,既可以得到第一次迭代的权值向量  $\mathbf{w}$ ,根据权值向量  $\mathbf{w}$ ,得到得分向量  $\mathbf{t} = \mathbf{X} \mathbf{w}$ ,再根据得分向量分别对原始特征  $\mathbf{X}$  和类别标识信息  $\mathbf{Y}$  进行降解,

$$\mathbf{X}^{(2)} = \mathbf{X} - \tilde{\mathbf{t}} \tilde{\mathbf{t}}^T \mathbf{X} \quad (2)$$

$$\mathbf{Y}^{(2)} = \mathbf{Y} - \tilde{\mathbf{t}} \tilde{\mathbf{t}}^T \mathbf{Y}, \quad (3)$$

其中,  $\tilde{\mathbf{t}}$  表示归一化后的得分向量  $\mathbf{t}$ 。根据求得的  $\mathbf{X}^{(2)}$  和  $\mathbf{Y}^{(2)}$ ,可以进行下一轮的迭代,直到迭代合适的次数,即可满足要求。这样就得到了 NIPLS 方法求得的特征,即是每次迭代过程中得到的得分向量  $\mathbf{t}$  构成的矩阵。

对于测试样本  $\hat{\mathbf{X}}$ ,可以通过权值矩阵进行映射:

$$\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{X}} \mathbf{W}^*. \quad (4)$$

其中,  $\mathbf{W}^* = \mathbf{W} (\mathbf{P}^T \mathbf{W})^{-1}$ ,而  $\mathbf{P}$  是在每次迭代时求得的,矩阵中向量  $\mathbf{p}$  由  $\mathbf{p} = \mathbf{X}^T \mathbf{t} / \|\mathbf{t}\|^2$  得到。这就完成了 NIPLS 的求解方法,以及对于测试样本的求解。

## 2 PLS-SVD 方法概述

PLS-SVD 方法与 NIPLS 方法的目标一致,同样是求解使得原始特征  $\mathbf{X}$  和类别标识信息  $\mathbf{Y}$  最相关的权值向量,也即是:

$$\max_{\|\mathbf{w}\|=1, \|\mathbf{c}\|=1} \mathbf{w}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Y} \mathbf{c}$$

所不同的是,PLS-SVD 方法没有进行迭代,所有的权值向量都是通过对  $\mathbf{X}^T \mathbf{Y}$  进行 SVD 分解得到的,其中对应的左奇异矩阵的前  $n$  个向量构成方法 PLS-SVD 的权值矩阵。

事实上,PLS-SVD 方法,也可以看成一种迭代的求解过程,只不过与 NIPLS 的降解方法不一样。首先按照 NIPLS 方法可以求得权值向量  $\mathbf{w}$  和  $\mathbf{c}$ ,根据  $\mathbf{w}$  和  $\mathbf{c}$  分别对原始特征  $\mathbf{X}$  和类别标识信息  $\mathbf{Y}$  进行降解,

$$\mathbf{X}^{(2)} = \mathbf{X} - \mathbf{X} \mathbf{w} \mathbf{w}^T, \quad (5)$$

$$\mathbf{Y}^{(2)} = \mathbf{Y} - \mathbf{Y} \mathbf{c} \mathbf{c}^T, \quad (6)$$

根据求得的  $\mathbf{X}^{(2)}$  和  $\mathbf{Y}^{(2)}$ ,可以进行下一轮的迭代,直到迭代合适的次数。按照这种迭代求得的权值矩阵和直接对  $\mathbf{X}^T \mathbf{Y}$  进行 SVD 分解得到的权值矩阵是等价的。

对于 PLS-SVD 方法,同样可以对测试样本  $\hat{\mathbf{X}}$  通过权值矩阵进行映射:

$$\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{X}} \mathbf{W}. \quad (7)$$

上述过程即为 PLS-SVD 的求解方法,以及对于测试样本的求解。

## 3 实验结果

在介绍了 NIPLS 和 PLS-SVD 方法之后,根据具体的求解过程分别对 NIPLS 方法和 PLS-SVD 方法求取特征的性能进行比较。主要使用 PASCAL 心音挑战赛<sup>[6-7]</sup> 的数据集 Dataset-A 和 Dataset-B 进行实验。在实验过程中,使用论文中的评估方法进行评估<sup>[6,8]</sup>。同时使用支持向量机(Support vector machine, SVM)<sup>[9]</sup>进行分类,SVM 分类器使用径向基核函数,其中核参数的取值集合为:[1, 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001];SVM 分类器的惩罚因子的取值集合为:[1, 10, 100, 1000]。使用网格搜索法<sup>[10]</sup>确定最终选择的参数。

### 3.1 数据集 Dataset-A 的实验结果

方法 NIPLS 和 PLS-SVD 在数据集 Dataset-A 上的实验结果见表 1。其中方法 NIPLS 使用的分类器的参数为径向基核函数的参数为 0.01,使用的惩罚因子为 100。方法 PLS-SVD 方法使用的径向基核函数的参数为 0.001,使用的惩罚因子同样是 100。

由实验结果可以看出:方法 NIPLS 和 PLS-SVD 相比较,Extra Heart Sound 类别和 Artifact 类别的准确率有所下降,但是总体准确率和归一化准确

率有所提升。综合两种方法的所有差别, NIPLS 的性能更好一些。

### 3.2 数据集 Dataset-B 的实验结果

方法 NIPLS 和 PLS-SVD 在数据集 Dataset-B 上的实验结果见表 2。其中方法 NIPLS 使用的分类器为径向基核函数, 参数值为 0.01, 惩罚因子为 1。方法 PLS-SVD 使用的径向基核函数的参数为 0.001, 惩罚因子为 100。

表 1 数据集 Dataset-A 的实验结果

Tab. 1 Experimental results of Dataset-A

评价指标	NIPLS	PLS-SVD
Normal 类别准确率	0.60	0.57
Murmur 类别准确率	1.00	0.83
Extra Heart Sound 类别准确率	0.30	0.40
Artifact 类别准确率	0.94	1.00
Artifact 类别灵敏度	1.00	1.00
Artifact 类别特异度	0.61	0.61
Artifact 的 Youden 指数	0.61	0.61
异常类别的 F-score	0.62	0.63
总体准确率	2.84	2.80
归一化准确率	0.76	0.75

表 2 数据集 Dataset-B 的实验结果

Tab. 2 Experimental results of Dataset-B

评价指标	NIPLS	PLS-SVD
Normal 类别准确率	0.73	0.79
Murmur 类别准确率	0.89	0.61
Extrasystole 类别准确率	0.22	0.10
异常类别灵敏度	0.17	0.39
异常类别特异度	0.95	0.76
异常类别 Youden 指数	0.12	0.15
判别度	0.31	0.17
总体准确率	1.84	1.50
归一化准确率	0.71	0.68

从实验结果可以看出: 方法 NIPLS 和 PLS-SVD 相比较, Normal 类别的准确率有所下降, 但是

总体准确率和归一化准确率有所提升。综合来看, NIPLS 的性能更好一些。

## 4 结束语

本文介绍了两种偏最小二乘方法— NIPLS 和 PLS-SVD。并分别介绍了其求解过程, 比较了求解过程中的异同点。并对二种方法各自在心音数据上的性能表现进行了实验。由实验结论分析, NIPLS 方法相比 PLS-SVD 方法的性能有所提升。

## 参考文献

- [1] Beaton D, Dunlop J, Abdi H. Partial least squares correspondence analysis: A framework to simultaneously analyze behavioral and genetic data[J]. Psychological methods, 2016, 21(4): 621.
- [2] Jiao J, Zhao N, Wang G, et al. A nonlinear quality-related fault detection approach based on modified kernel partial least squares [J]. ISA transactions, 2017, 66: 275-283.
- [3] Cheung M J, Kovacevic N, Fatima Z, et al. [MEG] PLS: A pipeline for MEG data analysis and partial least squares statistics [J]. NeuroImage, 2016, 124: 181-193.
- [4] Rosipal R, Trejo L J. Kernel partial least squares regression in reproducing kernel hilbert space [J]. Journal of machine learning research, 2001, 2(Dec): 97-123.
- [5] De Jong S. SIMPLS: an alternative approach to partial least squares regression [J]. Chemometrics and intelligent laboratory systems, 1993, 18(3): 251-263.
- [6] Bentley P, Nordehn G, Coimbra M, & Mannor, S. (2011). The PASCAL classifying heart sounds challenge. See <http://www.peterjbentley.com/heartchallenge/index.html>.
- [7] Zhang W, Han J, Deng S. Heart sound classification based on scaled spectrogram and partial least squares regression [J]. Biomedical Signal Processing and Control, 2017, 32: 20-28.
- [8] Zhang W, Han J, Deng S. Heart sound classification based on scaled spectrogram and tensor decomposition [J]. Expert Systems with Applications, 2017, 84: 220-231.
- [9] Chang C C, Lin C J. LIBSVM: a library for support vector machines [J]. ACM transactions on intelligent systems and technology, 2011, 2(3): 27.
- [10] LaValle S M, Branicky M S, Lindemann S R. On the relationship between classical grid search and probabilistic roadmaps [J]. The International Journal of Robotics Research, 2004, 23(7-8): 673-692.

(上接第 28 页)

- [12] JIANG Y, WANG M. Image fusion with morphological component analysis [J]. Inf. Fusion, 2014, 18(1): 107-118.
- [13] LI H, HE X, TAO D, et al. Joint medical image fusion, denoising and enhancement via discriminative low-rank sparse dictionaries learning [J]. Pattern Recognit, 2018, 79: 130-146.
- [14] ZHANG Y, BAI X, WANG T. Boundary finding based multi-

focus image fusion through multi-scale morphological focus-measure [J]. Inf. Fusion, 2017, 35: 81-101.

- [15] KIM M, HAN D, KO H. Joint patch clustering-based dictionary learning for multimodal image fusion [J]. Inf Fusion, 2016, .27: 198-214.