

改进 BP 神经网络在地下水环境质量评价中的应用

曹剑峰, 平建华, SUMARE Oumar, 姜纪沂, 沈媛媛, 钦丽娟

(吉林大学环境与资源学院, 吉林 长春 130026)

摘要:以 LM 算法和步长自适应法对 BP 神经网络进行改进, 并将输入数据采用压缩系数法进行处理, 用改进后的 BP 神经网络对黄河流域某地区地下水环境质量进行评价, 并和内梅罗指数法、灰色聚类法评价结果相比较, 结果表明改进后的 BP 神经网络计算速度快、评价精度高、结果客观准确。

关键词:改进 BP 神经网络; 地下水; 环境质量评价

中图分类号: X824; TP183 文献标识码: A 文章编号: 1006-7647(2006)03-0021-03

Application of improved BP neural network to groundwater environmental quality evaluation//CAO Jian-feng, PING Jian-hua, SUMARE Oumar, JIANG Ji-yi, SHEN Yuan-yuan, QIN Li-juan(College of Environment and Resources, Jilin University, Changchun 130026, China)

Abstract: The BP neural network was improved with LM algorithm and adaptive variable step-size algorithm, and the input data were processed with the method of compression coefficient. Then the improved BP neural network was applied to groundwater environmental quality evaluation for a region in the Yellow River Basin. The comparison of the evaluated result with those of the Nemero index method and gray clustering method shows that the improved BP neural network is fast in calculation, the evaluation accuracy is high, and the result is objective and reasonable.

Key words: improved BP neural network; groundwater; environmental quality evaluation

地下水环境质量评价是地下水资源评价的一项重要内容,它根据地下水中主要物质成分和给定的水质标准,分析地下水水质的时空分布状况和可用程度,为地下水资源的开发利用、规划和管理提供科学依据^[1-2]。地下水水质评价方法很多,如模糊数学法、灰色聚类法、物元分析法、内梅罗指数法等。在设计模糊数学的隶属度函数、灰色聚类的白化函数时,以及在确定各评价指标的权重时,都存在着人为因素,造成评价模式难以通用,并且存在着因计算时丢失信息太多而使评价结果与实际不符的情况。内梅罗指数法具有数学过程简捷、运算方便、物理概念清晰等特点,但该方法的主要缺点是过于突出最大污染因子、未考虑权重因素、对各污染因子等对待等。以上方法都没有很好地解决评价因子与水质等级间复杂的非线性关系,以及水体污染的模糊性与随机性关系,至今还没有统一的评价模型。人工神经网络能够模仿人脑的功能,具有对信息进行并行处理、分布式存储,以及良好的自适应性、自组织性、自学习与推理的能力,表现出容错性、非线性、非局域性、非凸性等特点,适于对模糊信息或复杂的非线性

性关系进行识别与映射^[3-4]。BP 神经网络是最为重要的一种人工神经网络,其在水质评价中得到了应用,但大多没有改进^[1-2],即使改进也大多是基于梯度下降法的改进^[5-8]。笔者将用基于数值优化的方法——LM 算法和基于梯度下降法的改进——自适应步长方法对 BP 神经网络加以改进,并尝试用改进后的 BP 神经网络评价地下水环境质量。

1 BP 算法及其改进

标准的 BP 算法是基于梯度下降法,通过计算目标函数对网络权值和阈值的梯度进行修正。学习过程是通过调整权重和阈值使期望值和神经网络输出值的均方误差趋于最小实现的,只用到目标函数对权值和阈值的一阶导数信息^[4,9]。

标准梯度下降法权值和阈值的迭代过程可表示为^[9]

$$X(k+1) = X(k) - \eta \nabla F(X(k))$$

式中: $X(k)$ 为由网络所有权值和阈值所形成的向量; η 为学习速率; $F(X(k))$ 为目标函数; $\nabla F(X(k))$ 为目标函数的梯度; k 为迭代次数。

BP 神经网络表现出结构确定的人为性、训练速度慢以及初始权值对结果影响的随机性等缺陷,同时 BP 神经网络还具有学习过程易陷入局部极小、易出现震荡和网络存在冗余连接或节点等缺陷,隐含层单元数的确定至今没有统一的方法。对此,许多学者对 BP 神经网络进行了改进或使之与遗传算法相结合来克服这些缺点^[3-4]。这些改进的方法可以归纳为两类:第一类是基于标准梯度下降的改进方法,如附加动量法、弹性 BP 算法、自适应调整参数法等;第二类是基于标准数值优化的改进方法,如拟牛顿法、共轭梯度法和 LM 算法等。

本文作出以下改进:

a. LM 算法^[4,9]。BP 神经网络的训练实质上是非线性目标函数的优化问题,与前面基于一阶梯度的 BP 算法不同,基于数值优化的 LM 算法不仅利用了目标函数的一阶导数信息,还利用了目标函数的二阶导数信息。LM 算法的迭代公式为

$$\mathbf{X}(k+1) = \mathbf{X}(k) - (\mathbf{J}^T(k)\mathbf{J}(k) + \mu\mathbf{I})^{-1}\mathbf{J}(k)F(\mathbf{X}(k))$$

式中: $\mathbf{J}(k)$ 为包含网络误差对权值和阈值一阶导数的 Jacobin 矩阵; $\mathbf{I}$ 为单位矩阵; μ 为阻尼因子。

LM 算法根据迭代结果动态地调整迭代的收敛方向,使每次的迭代误差都有所下降,收敛速度快。

b. 步长自适应^[8,10]。标准 BP 算法的步长 λ 是定值,这就导致了 λ 难以选择。若 λ 过小,在误差曲面较平坦的区域收敛较慢;当 λ 较大时又会在峡谷区域引起震荡。步长自适应就是针对上述缺点提出来的,即

$$\lambda(p+1) = \begin{cases} (1+\beta)\lambda(p) & E_p > E_{p+1} \\ (1-\beta)\lambda(p) & E_p \leq E_{p+1} \end{cases}$$

式中: β 为某一小正数, $\beta \in [0.01, 0.03]$; p 为训练次数; E_p 为第 p 次的训练误差。

当误差减小时步长相应增大,当误差增大时步长相应减小,在应用时此方法十分有效。

2 BP 神经网络用于地下水环境质量评价

笔者于 2000 年 8 月在研究区采集了 12 个样品进行水质分析,部分分析成果列于表 1 中。现以

GB/T14848—93《地下水环境质量标准》作为评价标准,采用改进后的 BP 神经网络对这 12 个样品的水质进行评价。

表 1 水质资料指标值 mg·L⁻¹

样品 序号	$\rho(\text{Cl}^-)$	$\rho(\text{SO}_4^{2-})$	$\rho(\text{NO}_3^-)$	溶解性总固体 质量浓度	总硬度 质量浓度
1	54.57	53.39	<0.10	936.05	369.9
2	39.75	27.98	<0.10	930.65	343.3
3	36.48	40.10	<0.10	996.80	354.4
4	136.10	111.80	<0.10	1490.15	549.9
5	51.34	69.16	<0.10	1161.85	368.6
6	135.90	316.90	<0.10	2296.70	391.7
7	274.60	233.00	64.71	2026.10	664.1
8	59.91	72.04	8.40	1179.78	436.5
9	41.48	40.83	0.60	700.18	244.7
10	18.08	25.94	2.80	900.96	257.9
11	35.10	75.41	13.03	857.64	280.4
12	32.26	63.40	0.20	667.98	247.1

2.1 训练样本选择

GB/T14848—93《地下水环境质量标准》的分级标准指标即为 BP 神经网络的训练样本,而此标准的划分是一个浓度区间。为了评价需要,本文按夏军^[11]提出的方法来确定分级代表值:Ⅰ类水的标准界值为Ⅰ类水的分级代表值,Ⅱ类水的分级代表值为Ⅰ类水和Ⅱ类水标准界值的中值,其余依此类推。将Ⅳ类水或Ⅴ类水的界值作为Ⅴ类水的分级代表值。由此得到本次 BP 神经网络的训练样本见表 2。

2.2 数据的预处理

BP 神经网络模型一般以 S 形函数作为转换函数,该函数的值域为 $[0, 1]$,因此在网络训练时要将原始数据进行处理,规范到 $[0, 1]$ 之间,常用的数据预处理方法主要有标准化法、重新标法、变换法、比例压缩法、压缩系数法。为了将网络输入数据信息集既进行合理的压缩,又能够体现原始输入数据信息之间的差别,建议使用压缩系数法^[3],公式如下:

$$T = \alpha X$$

式中: X 为原始数据; α 为压缩系数, $0 < \alpha < 1$,根据具体对象选取; T 为变换后的数据。

2.3 隐层及隐层神经元节点数的确定

地下水环境质量评价是一个非线性关系较为复杂的问题,神经网络具有逼近任意非线性函数的能

表 2 地下水质量标准分级类别和 BP 神经网络期望输出值

级别	水质指标值/(mg·L ⁻¹)					期望输出值				
	$\rho(\text{Cl}^-)$	$\rho(\text{SO}_4^{2-})$	$\rho(\text{NO}_3^-)$	溶解性总固体 质量浓度	总硬度 质量浓度	Cl^-	SO_4^{2-}	NO_3^-	溶解性 总固体	总硬度
Ⅰ	50	50	2.0	300	150	1	0	0	0	0
Ⅱ	100	100	3.5	400	225	0	1	0	0	0
Ⅲ	200	200	12.5	750	375	0	0	1	0	0
Ⅳ	300	300	25.0	1500	500	0	0	0	1	0
Ⅴ	350	350	30.0	2000	550	0	0	0	0	1

表 3 地下水环境质量评价结果

样本 序号	神经网络仿真输出结果					神经网络 评价结果	内梅罗指数 法评价结果	灰色聚类法 评价结果
	Cl ⁻	SO ₄ ²⁻	NO ₃ ⁻	溶解性总固体	总硬度			
1	-0.990	1.000	0.779	-0.503	-0.052	Ⅱ	Ⅱ	Ⅲ
2	-0.751	1.000	0.257	-0.272	-0.049	Ⅱ	Ⅱ	Ⅲ
3	-0.907	1.000	0.409	-0.330	-0.025	Ⅱ	Ⅱ	Ⅲ
4	-0.999	0.996	1.000	-0.983	-0.044	Ⅲ	Ⅳ	Ⅴ
5	-0.995	1.000	0.808	-0.560	0.037	Ⅱ	Ⅳ	Ⅲ
6	-0.999	0.998	1.000	-0.989	0.355	Ⅲ	Ⅴ	Ⅴ
7	0.991	-0.966	-0.494	-0.652	1.000	Ⅴ	Ⅴ	Ⅴ
8	0.957	0.803	1.000	-0.224	0.302	Ⅲ	Ⅳ	Ⅳ
9	0.976	1.000	-0.100	-0.177	-0.031	Ⅱ	Ⅱ	Ⅲ
10	1.000	0.986	-0.300	0.358	0.131	Ⅰ	Ⅱ	Ⅲ
11	1.000	-0.483	-0.061	0.946	0.405	Ⅰ	Ⅱ	Ⅲ
12	0.871	1.000	-0.070	-0.279	-0.056	Ⅱ	Ⅱ	Ⅱ

力,且一般的 3 层 BP 神经网络模型就能够满足大部分非线性系统的要求^[3-4],因此本次采用 1 个隐含层。

隐含层神经元节点数的确定是人工神经网络设计中最关键的步骤,它直接影响网络对复杂问题的映射能力。目前出现的确定隐含层神经元的方法是多样的,但都缺乏令人信服的依据,有时常常也是无效的。本文采用“试算法”确定神经元个数,经试算,最佳隐含层节点数为 15 个。

2.4 地下水环境质量评价

由于本次评价指标选择了 5 个评价因子,因此输入层神经元节点数为 5 个,评价等级为 5 个,输出层神经元节点数为 5 个,隐含层神经元节点数经试算为 15 个。本次 BP 神经网络的拓扑结构为:1 个输入层,神经元节点数为 5 个;1 个隐含层,神经元节点数为 15 个;1 个输出层,神经元节点数为 5 个。程序采用 Visual Basic 6.0 编制而成。

系统误差精度设为 0.000 001,用训练样本(表 2)中的数据来训练网络,当训练次数达到 40 次的时候满足了系统的误差精度。然后将表 1 中的实测值代入训练好的网络,评价结果及与内梅罗指数法、灰色聚类法评价结果进行的比较见表 3。

从评价结果来看,内梅罗指数法过于突出最大污染因子,如样本 4 总硬度,样本 5,6,8,10,11 的溶解性总固体含量较大。如前所述,灰色聚类法受人为因素影响过多,具有偏颇性,造成评价结果分别偏重,如受样本 1,2,3,5,6,8,9,10,11 的溶解性总固体和样本 4 的溶解性总固体与总硬度值偏高的影响,造成综合评价结果偏重。相比之下改进后的 BP 神经网络评价结果的准确性和精度都非常高,结果更为实际、客观、合理,很好地解决了评价因子与水质等级间复杂的非线性关系,而且计算速度快,还可选用更多的参数指标进行学习,程序具有广泛的适用性。

3 结 语

应用 BP 神经网络进行地下水环境质量评价,只需将地下水环境质量标准作为训练样本来进行网络的训练,当训练达到误差要求后,就可以用来进行地下水环境质量评价。改进后的 BP 神经网络计算速度快、方法简单、评价结果客观准确,有推广应用前景。

参考文献:

[1] 虞登梅,江晓益.地下水水质评价的人工神经网络法[J].西安科技学院学报,2003,23(1):27-29.

[2] 倪深海,白玉慧.BP 神经网络在地下水水质评价中的应用[J].系统工程理论与实践,2000(8):124-127.

[3] 苑希民,李鸿雁,刘树坤,等.神经网络和遗传算法在水科学领域的应用[M].北京:中国水利水电出版社,2002.

[4] 阎平凡,张长水.人工神经网络与模拟进化计算[M].北京:清华大学出版社,2000.

[5] 蒋福兴,田立慧,白国峰.改进的 BP 神经网络在浑河水水质评价中的应用[J].辽宁工程技术大学学报,2004,23(5):616-617.

[6] 张文鸽,李会安,蔡大应.水质评价的人工神经网络方法[J].东北水利水电,2004,22(10):42-45.

[7] 杨志英.BP 神经网络在水质评价中的应用[J].中国农村水利水电,2001(9):27-29.

[8] 黄胜伟,董曼玲.自适应变步长 BP 神经网络在水质评价中的应用[J].水利学报,2002(10):119-123.

[9] 吴凌云.BP 神经网络学习算法的改进及其应用[J].信息技术,2003,27(7):42-44.

[10] 金丕彦,丙勇.BP 算法各种改进算法的研究及应用[J].南京航空航天大学学报,1994,26(增刊):201-205.

[11] 夏军.区域水环境及生态环境质量评价——多级关联评估理论的应用[M].武汉:武汉水利电力大学出版社,1999.

(收稿日期:2005-09-01 编辑:高建群)