

DOI :10.3880/j.issn.1006-7647.2009.02.004

水库水温分布结构识别的高斯过程机器学习方法

张 研,苏国韶,燕柳斌

(广西大学土木建筑工程学院,广西 南宁 530004)

摘要 利用高斯过程机器学习模型建立水库水温垂直分布结构类型与其复杂影响因素之间的非线性映射关系,提出一种基于高斯过程机器学习的水库水温垂直分布结构类型的模式识别方法。工程实例应用表明,该方法具有模型参数自适应确定、容易实现且识别精度高等优点。

关键词 高斯过程 机器学习 水库水温垂直分布 模式识别

中图分类号 :TV697 **文献标识码** :A **文章编号** :1006-7647(2009)02-0013-03

Study on Gaussian process machine learning method for identifying the distribution structure of reservoir water temperature//ZHANG Yan, SU Guo-shao, YAN Liu-bin (School of Civil and Architecture Engineering, Guangxi University, Nanning 530004, China)

Abstract :Based on the Gaussian process machine learning model and the nonlinear mapping relation between the vertical distribution structure type of the reservoir water temperature and the complex influence factors, a pattern recognition method of the vertical distribution structure type of reservoir water temperature is proposed. Application to engineering examples shows that the method is adaptive to model parameters, precise, and easily implemented.

Key words :Gaussian process ; machine learning ; reservoir water temperature vertical distribution ; pattern recognition

水库水温垂直分布结构的分类对农业灌溉、水产养殖、水库水质和取水建筑物的设计具有重要意义。一般来说,水库水温的垂直分布结构大致分为分层型、混合型和过渡型 3 种类型。由于影响因素众多,且部分影响因素具有一定的模糊性和随机性,水库水温分布结构类型的识别是一类复杂的模式识别问题。多年来,学者们采用库水替换次数的 α 和 β 指标判别法、水库宽深比判别法、密度弗劳德数判别法以及热平衡因子判别法等众多计算方法对此问题进行了大量研究,取得了一定成效^[1-3]。但由于问题的高度复杂性,传统方法还难以完全满足生产实践的要求。近年来,一些学者另辟蹊径,提出采用模糊回归、人工神经网络(ANN)等软科学方法来判别水库水温分布结构类型,取得了有价值的研究成果^[4-5]。然而模糊回归中权值的确定无法摆脱人为因素的影响,神经网络存在着最优网络结构不易确定的问题,因此寻求更为合理有效的水库水温分布结构类型的识别方法是很有必要的。

高斯过程(Gaussian process,GP)是近年来发展起来的一种新的机器学习方法,它有着严格的统计学

习理论基础,对处理高维数、小样本、非线性等复杂问题具有很好的适应性^[6-10]。

为解决水库水温分布结构类型的合理识别问题,笔者在介绍二元分类高斯过程模型的基本原理之后,提出一种基于高斯过程的水库水温结构分布类型的模式识别方法,并应用于实际工程,为该问题的解决提供一种新的途径。

1 GP 二元分类模型的基本原理

在机器学习领域中,高斯过程是指建立在高斯随机过程与贝叶斯学习理论的基础上发展起来的一种机器学习方法。高斯过程二元分类(Gaussian process for binary classification,GPB)模型是一种基于高斯过程机器学习原理的分类模型。在 GPB 模型中,设某个输入 x 相对应的输出值为二元分类标志 $y, y \in \{-1, 1\}$; 观察数据集为 $D = \{(x_i, y_i) | i = 1, \dots, m\}$ 。GPB 模型的目标就是预测新的测试输入 x_* 对应的类别 y_* 。

对于确定的 $x, p(y|x)$ 分布为伯努利分布, $y = 1$ 的概率为 $p(y = 1|x) = \Phi(f(x))$, 其中 $f(x)$

称为潜在函数, $\Phi(\cdot)$ 为标准高斯分布的累计概率密度函数, 一般可取为 sigmoid 函数: $\Phi(z) = 1/(1 + e^{-z})$, sigmoid 函数的作用是将区间约束的 $f(x)$ 转换为 $[0, 1]$ 区间的函数值, 从而保证概率值落在 $[0, 1]$ 区间。为行文方便, 设 $f_i = f(x_i)$, $f = [f_1, \dots, f_m]^T$, $y = [y_1, \dots, y_m]^T$, $X = [x_1, \dots, x_m]^T$ 。

对于给定的潜在函数, 观察值是独立的伯努利分布变量, 其似然函数为

$$p(y | f) = \prod_{i=1}^m p(y_i | f_i) = \prod_{i=1}^m \Phi(y_i f_i) \quad (1)$$

潜在函数的先验分布为

$$p(f | X, \theta) = N(0, K) \quad (2)$$

式中: θ 为超参数, $\theta = \{\theta, \sigma_f\}$, 与神经网络中的超参数含义类似; K 为 $m \times m$ 阶协方差矩阵, $K_{ij} = k(x_i, x_j, \theta)$, $k(\cdot)$ 表示与 θ 有关的正定协方差函数。

常用的协方差函数为 Squared Exponential 函数:

$$k_y(x_p, x_q) = \sigma_f^2 \exp\left[-\frac{1}{2l^2}(x_p - x_q)^2\right] \quad (3)$$

不断获得实际观察值后, 根据贝叶斯规则, f 的后验分布为

$$p(f | D, \theta) = \frac{p(y | f)p(f | X, \theta)}{p(D | \theta)} = \frac{N(0, K) \prod_{i=1}^m \Phi(y_i f_i)}{p(D | \theta)} \quad (4)$$

注意式(4)中 f 的后验分布为非高斯分布。

以上为 GPC 的学习过程, 下面介绍 GPC 的预测过程。

与 x_* 对应的潜在函数值 f_* 的条件概率为

$$p(f_* | D, \theta, x_*) = \int p(f_* | f, X, \theta, x_*) p(f | D, \theta) df \quad (5)$$

y_* 的预测概率为

$$p(y_* | D, \theta, x_*) = \int p(y_* | f_*) p(f_* | D, \theta, x_*) df_* \quad (6)$$

当 y_* 的预测概率值大于 0.5 时, $y_* = 1$; 否则 $y_* = -1$ 。

但是, 式(4)、式(5)和式(6)均没有解析解。可采用 Laplace's 法或 Expectation Propagation 法等逼近方法获得近似解^[11]。若采用后一种方法, f 的后验分布的近似分布可表示为

$$p(f | D, \theta) \approx \frac{p(f | X, \theta)}{q(D | \theta)} \prod_{i=1}^m t(f_i, \mu_i, \sigma_i^2, Z_i) = q(f | D, \theta) = N(m, A) \quad (7)$$

式中: $t(f_i, \mu_i, \sigma_i^2, Z_i) = Z_i N(\mu_i, \sigma_i^2)$, 称为 site 函数; μ_i, σ_i, Z_i 为 site 函数的参数; m 和 A 为近似解的均值和方差。潜在函数 f 后验分布的近似高斯分布为

$$p(f | D, \theta) \approx q(f | D, \theta) = N(m, A) \quad (8)$$

$$m = A \Sigma^{-1} \mu \quad (9)$$

$$A = (K^{-1} + \Sigma^{-1})^{-1} \quad (10)$$

其中 $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_m)$, $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_m^2)$ 。

同样, f_* 的后验分布可设为近似的高斯分布:

$$q(f_* | D, \theta, x_*) = N(\mu_*, \sigma_*^2) \quad (11)$$

其中的均值和方差为

$$\mu_* = k_*^T K^{-1} m \quad (12)$$

$$\sigma_*^2 = k(x_*, x_*) - k_*^T (K^{-1} - K^{-1} A K^{-1}) k_* \quad (13)$$

式中 $k_* = [k(x_1, x_*), \dots, k(x_m, x_*)]^T$, 表示 x_* 与训练输入 X 之间的先验协方差矢量。

通过上述非高斯分布转换为近似高斯分布的逼近方法处理后, x_* 属于第 1 类的预测概率有如下解析解:

$$q(y_* = 1 | D, \theta, x_*) = \Phi\left(\frac{\mu_*}{\sqrt{1 + \sigma_*^2}}\right) \quad (14)$$

当 $q > 0.5$ 时, $y_* = 1$; 否则 $y_* = -1$ 。

协方差函数中的最优超参数可通过极大似然法来估计。学习样本的对数似然的极大化可通过其对超参数的偏导(式(15))来实现, 方程的最优解可采用共轭梯度法获得。

$$\frac{\partial \ln q(D | \theta)}{\partial \theta_i} = -\frac{1}{2} \text{tr} \left\{ \frac{\partial K}{\partial \theta_i} [(K + \Sigma)^{-1} - (K + \Sigma)^{-1} \mu \mu^T (K + \Sigma)^{-1}] \right\} \quad (15)$$

受篇幅限制, 这里仅对 GPC 的基本原理做简单介绍, 详见文献[11]。

2 水库水温分布结构识别的 GPC 方法

2.1 水库水温分布结构的主要影响因素

水库水温分布结构受多种因素影响, 概括起来可归纳为以下 5 种主要影响因素: ①水库几何特征(库容, 水深, 面积, 平均宽度, 库底坡等); ②水文水力因素(入、出库流量, 水体流态, 平均流速等); ③地质地貌(库周地形, 库底质, 糙率等); ④气象因素(太阳辐射, 气温, 风速、风向, 降雨, 蒸发等); ⑤地理位置等。

2.2 方法的实现步骤

水库水温分布结构类型的识别是一个多元分类问题。笔者的思路是将多元分类问题分解成若干个二元分类问题, 分别对多种水温分布结构类型进行“是与非”的判别。二元分类方法的实现步骤如下:

a. 收集已建成水库的水温分布结构实例作为学习样本。 k 个学习样本的表达形式为 (x_i, y_i) ($i = 1, 2, \dots, k$), x_i 为 n 维矢量, 表示影响水温分布结构

的 n 个因素; y_i 为水库水温分布结构的某种类型 (是为 1,非为 - 1)。

b. 根据贝叶斯规则对训练样本进行“归纳推理学习”。根据式(4)及式(7) ~ (10) 获得学习样本潜在函数 f 后验分布的近似高斯分布,其中,协方差函数的最优超参数 θ 通过极大化学习样本的对数似然函数获得式(15)。

c. 根据式(11) ~ (13) 获得预测样本潜在函数 f_* 的后验近似高斯分布。

d. 根据式(14) 获得水库水温分布结构类型的预测概率。当预测概率 $q > 0.5$ 时,水库水温分布结构判定为“属于某结构类型”,预测概率 $q \leq 0.5$ 时,水库水温分布结构判定为“不属于某结构类型”。

根据上述建模步骤,编写相应的 MATLAB 程序。

3 工程应用实例

以文献[5]收集的 35 个水库水温垂直结构分布数据为例进行工程应用研究,验证笔者方法的可行性。

与文献[5]一样,水温垂直分布结构的类别为分层型、过渡型和混合型,以水库平均水深 H 、总库容 V 以及平均流量 Q 与总库容 V 的比值 Q/V 作为主要影响因素。此水库水温分布结构类型的识别是个三元分类问题,可分解成为 3 个二元分类问题。按前述方法建立 35 个学习样本,选取其中 25 个作为学习样本,其余 10 个作为预测样本,见表 1。

最优超参数搜索过程中,超参数的初始值设为 (- 1,1),共轭梯度优化算法的收敛标准设为最大迭代步数等于 200 或迭代步之间的目标值的绝对差值小于 1.0×10^{-6} 。经过 3 次分类判别计算所得的最优超参数分别为: $l = 0.59, \sigma_f = 132.25$ (分层型判别); $l = 0.20, \sigma_f = 169.73$ (过渡型判别); $l = 1.37, \sigma_f = 4.87$ (混合型判别)。

GPC 方法预测结果见表 2。从表 2 中可以看出

表 1 高斯过程模型的学习样本与预测样本

序号	水库名称	总库容 $V/亿\ m^3$	平均水深 H/m	多年平均 径流量 $Q/亿\ m^3$	$\frac{Q}{V}$	水温垂直结构 类型
1	黄龙滩	11.625	33.50	60.000	5.161	分层
2	花山	1.725	17.25	0.536	0.311	分层
3	王英	6.360	19.27	2.100	0.330	分层
4	青山	4.280	20.88	3.721	0.869	分层
5	漳河	20.350	18.38	8.910	0.438	分层
6	温峡口	5.490	16.00	2.050	0.373	分层
7	吴山	1.888	13.88	0.302	0.160	分层
8	白莲荷	12.500	14.57	11.700	0.936	分层
9	丹江口	208.900	24.69	379.000	1.814	分层
10	龙坪	1.420	14.73	0.850	0.598	过渡
11	郑家河	1.930	10.20	0.800	0.414	过渡
12	石桥	0.172	7.31	0.092	0.536	过渡
13	金沙河	1.787	10.00	0.590	0.330	过渡
14	尾斗山	1.105	10.00	0.410	0.371	过渡
15	明山	1.690	13.02	0.950	0.562	过渡
16	花园	1.004	16.14	0.629	0.602	过渡
17	双石	0.588	16.20	0.400	0.680	过渡
18	白洋河	0.240	9.21	0.139	0.580	混合
19	清水河	0.330	5.88	0.589	1.785	混合
20	黄沙	0.181	10.03	0.172	0.953	混合
21	蔡贤	0.470	10.68	0.387	0.824	混合
22	刘店	0.170	4.10	0.123	0.724	混合
23	雨林山	0.156	4.64	0.084	0.540	混合
24	乐山坡	0.154	4.60	0.078	0.506	混合
25	龙欲湖	0.169	5.93	0.084	0.499	混合
26	三河口	1.600	21.50	0.940	0.588	待预测
27	大同	2.659	17.84	1.429	0.530	待预测
28	梅店	1.763	11.02	0.762	0.412	待预测
29	道观河	1.070	13.53	0.540	0.505	待预测
30	香山	0.255	8.60	0.232	0.912	待预测
31	安洼	0.133	5.14	0.063	0.474	待预测
32	天河口	1.168	18.99	0.240	0.205	待预测
33	牛车河	0.706	9.40	0.228	0.323	待预测
34	龙当	0.142	4.15	0.096	0.672	待预测
35	陈坡	0.165	3.77	0.150	0.909	待预测

预测结果与实际情况完全吻合,预测结果令人满意。此外,尽管所采用的学习样本数明显小于 ANN 方法的 29 个学习样本^[5],但 GPC 方法仍与 ANN 方法的预测结果^[5] 完全一致,说明GPC方法在处理小样本

表 2 预测样本的预测结果

样本序号	输入矢量	水温分布结构类型判别的预测概率						水库水温分布类型		
		分层		过渡		混合		GPC 预测	ANN 预测 ^[5]	实际
		是	否	是	否	是	否			
26	[1.600, 21.50, 0.588]	0.90	0.10	0.33	0.67	0.03	0.97	分层	分层	分层
27	[2.659, 17.84, 0.530]	0.88	0.12	0.35	0.65	0.01	0.99	分层	分层	分层
28	[1.763, 11.02, 0.412]	0.02	0.98	0.87	0.13	0.05	0.95	过渡	过渡	过渡
29	[1.070, 13.53, 0.505]	0.04	0.96	0.89	0.11	0.02	0.98	过渡	过渡	过渡
30	[0.255, 8.60, 0.912]	0.02	0.98	0.21	0.79	0.95	0.05	混合	混合	混合
31	[0.133, 5.14, 0.474]	0.01	0.99	0.03	0.97	0.86	0.14	混合	混合	混合
32	[1.168, 18.99, 0.205]	0.93	0.07	0.23	0.77	0.01	0.99	分层	—	分层
33	[0.706, 9.40, 0.323]	0.03	0.97	0.88	0.12	0.15	0.85	过渡	—	过渡
34	[0.142, 4.15, 0.672]	0.03	0.97	0.05	0.95	0.96	0.04	混合	—	混合
35	[0.165, 3.77, 0.909]	0.07	0.93	0.32	0.68	0.98	0.02	混合	—	混合

(下转第 39 页)

题,运用得当可以获得与高坝相同的消能防冲效果,且经济效益可观,如蟒塘溪电站工程减少工程量和提前发电的直接经济效益就达 4 000 多万元。

b. 笔者给出的宽尾墩参数范围、对应关系、经验公式和选择步骤,作为实用方法可用于这种辅助消能工的初选,但应通过模型试验进行校正确定。

c. 需要进一步做的工作是完善宽尾墩水力学计算理论的研究,深化其运用条件和调度管理条件的研究。

致谢 谨以此文向艾克明先生和课题组其他同志表示谢忱。

参考文献：

[1] 童显武. 高水头泄水建筑物收缩式消能工[M]. 北京: 中国农业科技出版社, 2000 38,376-377.
[2] 欧阳福生,艾克明,林珍喜,等. 宽尾墩联合消能在中低

水头中的应用[J]. 工程实践,2007(5) 57-59.
[3] 湖南省水利水电勘测设计研究总院. 蟒塘溪水利水电枢纽工程水工整体模型试验报告(及补充报告)[R]. 长沙: 湖南省水利水电勘测设计研究总院,1992 1995.
[4] 湖南省水利水电勘测设计研究总院. 朗江水电站水力学整体模型试验报告[R]. 长沙 湖南省水利水电勘测设计研究总院,2001.
[5] 湖南省水利水电勘测设计研究总院. 张家渡电站水工模型试验报告[R]. 长沙 湖南省水利水电勘测设计研究总院,2002.
[6] 湖南省水利水电勘测设计研究总院. 龙湘水电站工程水工整体模型试验报告[R]. 长沙 湖南省水利水电勘测设计研究总院,2004.
[7] 湖南省水利水电勘测设计研究总院. 铜信溪水电站工程水工模型试验报告[R]. 长沙 湖南省水利水电勘测设计研究总院,2004.

(收稿日期 2008-07-01 编辑 高建群)

(上接第 15 页)

分类问题上的良好性能和优势。最后,值得指出的是,GPC 方法的超参数是自适应确定,巧妙地克服了 ANN 方法最优结构与超参数不易确定的困难,具有方法容易实现的优点。

4 结 论

a. 水库水温分布结构类型与其影响因素之间是复杂的非线性关系,高斯过程机器学习方法能够很好地处理这种关系,笔者将高斯过程机器学习引入该领域的研究,提出了水库水温分布结构识别的高斯过程机器学习方法。工程实例分析表明,该方法可行的,无需建立复杂的微分方程或数值计算模型,只要以多个已建水库资料作为知识源进行机器学习,就能推断出准确可靠的预测结果,为实现水库水温分布结构类型的合理识别提供了一条有效途径。

b. 在实际工程应用中,应尽可能多地收集与整理已建水库水温分布结构的实例数据,通过考虑更多的影响因素和更多的学习样本,不断地丰富学习样本的多样性,将有利于进一步提高高斯过程机器学习预测结果的可靠性和方法的适用性。

c. 高斯过程机器学习方法具有优良的分类性能,与神经网络分类方法相比,在不损失性能的前提下,具有参数自适应确定、模型容易实现和有概率意义的预测输出等优点,在水利水电工程中具有广阔的应用前景。

参考文献：

[1] 陈永灿,张宝旭,李玉梁. 密云水库垂向水温模型研究

[J]. 水利学报,1998(9) 14-20.
[2] 蒋红. 水库水温计算方法探讨[J]. 水力发电学报,1999 (2) 60-69.
[3] 蔡为武. 水库及下游河道的水温分析[J]. 水利水电科技进展,2001,21(5) 20-23.
[4] 刘金禄. 水库水温结构划分的模糊回归预测模型及其应用[J]. 水资源与水工程学报,2004,15(3) 56-58.
[5] 郝志红,吴鑫淼,郑旌辉,等. 一种基于人工神经网络的水库水温分层模式判别方法[J]. 农业工程学报,1999, 15(3) 204-207.
[6] BELHOUARI S B, BERMAK A. Gaussian process for nonstationary times series prediction [J]. Computational Statistics & Data Analysis, 2004, 47(4) 705-712.
[7] GIROLAMI M, ROGERS S. Variational Bayesian multinomial probit regression with Gaussian process priors [J]. Neural Computation, 2006, 18(8) 1790-1817.
[8] SEEGER M. Gaussian processes for machine learning [J]. International Journal of Neural System,2004,14(2) 99-106.
[9] SU Guo-shao, YAN Liu-bin, SONG Yong-chun. Gaussian process for non-linear displacement time series prediction of landslide [J]. Journal of China University of Geosciences, 2007,18 219-212.
[10] 熊志化,张继承,邵惠鹤. 基于高斯过程的软测量建模 [J]. 系统仿真学报,2005,17(4) 793-794.
[11] KUSS M, RASMUSSEN C E. Assessing approximate inference for binary Gaussian process classification [J] Journal of machine learning research,2005, 6 1679-1704.

(收稿日期 2008-09-22 编辑 高建群)