

# 基于灰色 GA-LM-BP 模型的 COD<sub>Mn</sub> 预测

崔雪梅

(湖北工程学院生命科学技术学院,湖北 孝感 432000)

**摘要:**针对灰色 GM(1,1)模型拟合误差较大和 LM-BP 神经网络泛化能力不强的问题,提出了灰色 GA-LM-BP 模型,该模型采用灰色 GM(1,1)模型预测数据并得到其残差,利用 LM-BP 神经网络对残差进行拟合、测试、预测后,对灰色 GM(1,1)模型的数据预测值进行修正从而得到较合理的预测值,并运用遗传算法对 LM-BP 神经网络的初始权值和阈值进行优化。运用该模型对伦河孝感段的 COD<sub>Mn</sub>进行了预测,预测误差不超过 2.33%,表明模型的预测数据是合理的,可用于 COD<sub>Mn</sub>的预测和水质预警预报。

**关键词:**灰色理论;GA-LM-BP 模型;化学需氧量;水质预测

**中图分类号:**TP181;X703.1      **文献标志码:**A      **文章编号:**1006-7647(2013)05-0038-04

**Prediction of COD<sub>Mn</sub> value based on the grey GA-LM-BP model**//CUI Xuemei (College of Life Science and Technology, Hubei Engineering University, Xiaogan 432000, China)

**Abstract:** Due to the large fitting-errors of grey GM(1,1) model and the weak generalization ability of LM-BP neural network, a model of grey GA-LM-BP network was proposed in this paper. The grey GM(1,1) model was used to predict data and obtain residual errors. After the residual errors were fitted, tested and forecasted with LM-BP neural network, more reasonable predicted values can be obtained by correcting the predicted values of the GM(1,1) model. In the meantime, the initialized weights and threshold of LM-BP neural network were optimized with the genetic algorithm (GA). The grey GA-LM-BP model was then used to predict the COD<sub>Mn</sub> values at the Xiaogan segment of Lunhe River. Since the prediction errors were found to be less than 2.33%, the accuracy of the model is considered to be reasonable. The model can be used to predict the COD<sub>Mn</sub> values and the water quality early warning.

**Key words:** grey theory; GA-LM-BP model; COD<sub>Mn</sub>; water quality prediction

化学需氧量(COD<sub>Mn</sub>)是反映水中有机污染程度的指标,也是唯一能比较全面反映水中有机污染程度的指标,根据 COD<sub>Mn</sub>可以比较准确地计算废水有机污染物的排放总量<sup>[1-2]</sup>。用于预测 COD<sub>Mn</sub>的方法主要有逐步回归法、神经网络法、灰色预测法等<sup>[3-5]</sup>。利用微分方程描述灰色系统动态情况的模型,能反映地表水中 COD<sub>Mn</sub>浓度随时间变化的规律,但胡惠彬等<sup>[3]</sup>采用灰色 GM(1,1)模型进行数据预测时,拟合误差比较大。LM-BP 神经网络存在拟合能力强、泛化能力差的特点,采用多次拟合测试能够在一定程度上提高其泛化能力,但该方法需要反复试验,有时试验上万次还不一定能够取得很好的效果<sup>[6]</sup>。采用遗传算法对 LM-BP 神经网络的初始权值和阈值进行优化,能够提高其泛化能力<sup>[7]</sup>。

本文首先采用灰色 GM(1,1)模型预测 COD<sub>Mn</sub>并

得到其残差,再用 LM-BP 神经网络对该残差进行拟合,同时用遗传算法对 LM-BP 神经网络的初始权值和阈值进行优化。利用灰色 LM-BP 模型对残差进行拟合、测试、预测后,对灰色 GM(1,1)模型的数据预测值进行修正,最后得到较合理的 COD<sub>Mn</sub>预测值。

## 1 灰色 GA-LM-BP 模型

### 1.1 灰色 GM(1,1)模型

单序列一阶线性灰色 GM(1,1)模型以微分拟合为核心,根据原始数据序列的特征,找出各数据之间的变化规律,它是灰色系统理论的基本预测模型,其动态预测建模过程<sup>[8-10]</sup>如下:

**步骤 1** 数据预处理。设系统原始数据为  $X_0 = \{x_{0,1}, x_{0,2}, \dots, x_{0,k}\}$ , 进行一阶累加,生成的序列为

$$X_1 = \{x_{1,1}, x_{1,2}, \dots, x_{1,k}\} \tag{1}$$

$$\text{其中 } x_{1,p} = \sum_{i=1}^p x_{0,i} \quad (p = 1, 2, \dots, k) \quad (2)$$

式中: $k$  为原始序列数据的个数。

**步骤 2** 建立灰色 GM(1,1) 模型。由灰色 GM(1,1) 模型的定义<sup>[9]</sup>可得

$$x_{0,p} + az_{1,p} = b \quad (p = 1, 2, \dots, k) \quad (3)$$

$$\text{其中 } z_{1,p} = \frac{1}{2}(x_{1,p} + x_{1,p-1}) \quad (p = 2, 3, \dots, k)$$

式中: $a$  为发展系数; $b$  为灰色作用量; $z_{1,p}$  为  $x_{1,p}$  的紧邻均值生成序列。

GM(1,1) 模型的白化微分方程<sup>[11]</sup>为

$$\frac{dx_1}{dt} + ax_1 = b \quad (4)$$

利用最小二乘法求解  $a$ 、 $b$  可得

$$(a, b)^T = (B^T B)^{-1} B^T Y \quad (5)$$

$$\text{其中 } B = \begin{bmatrix} -z_{1,2} & 1 \\ -z_{1,3} & 1 \\ \vdots & \vdots \\ -z_{1,k} & 1 \end{bmatrix} \quad Y = \begin{bmatrix} x_{0,2} \\ x_{0,3} \\ \vdots \\ x_{0,k} \end{bmatrix}$$

**步骤 3** 求  $p+1$  时刻的预测值。

$$\hat{x}_{0,p+1} = \left(x_{0,1} - \frac{b}{a}\right) (1 - e^a) e^{-ap} \quad (6)$$

## 1.2 遗传算法

遗传算法是借鉴达尔文进化思想和遗传学理论演化出的一种随机搜索算法<sup>[12]</sup>,其基本思想是:随机产生若干个所求解问题的数字编码,形成初始群体;通过适应度函数对每个个体进行评价,淘汰适应度低的个体,选择适应度高的个体参加遗传操作,生成下一代新的种群,再对这个新种群进行下一轮进化。

## 1.3 LM-BP 神经网络

标准 BP 神经网络的基本思想是:将输出误差以一定的方式通过隐含层向输入层逐层反向传播,并传给各层的所有节点,最后根据各层节点的误差来修正各节点的权值。该方法速度慢,容易陷入局部极小值,针对该问题,人们提出了很多改进算法,其中 LM(levenberg marquardt) 算法是精度很高且速度最快的一种<sup>[6]</sup>。LM 算法又称阻尼最小二乘法,它解决了标准 BP 神经网络的局部极小值问题。

LM 算法对标准 3 层 BP 神经网络改进的主要步骤如下<sup>[13]</sup>:

**步骤 1** 初始权阈值初始化:随机产生初始权值和阈值,确定所有样本的误差平方和以及要达到的收敛准则  $\varepsilon$ ,在编程中  $\varepsilon$  一般取 1 个很小的数。

**步骤 2** 计算输出误差:对于  $r$  个输入层节点、 $n$  个隐含层节点、 $m$  个输出层节点的 3 层网络来说,隐含层第  $i$  节点输出  $a_i$  为

$$a_i = f_1\left(\sum_{j=1}^r w_{1ij}x_j + b_{1i}\right) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (7)$$

式中: $w_{1ij}$ 、 $b_{1i}$  分别为第 1 层(输入层)节点的权重和阈值; $x_j$  为隐含层的节点输入; $f_1$  为变换函数。

隐含层的节点输出为输出层的节点输入,输出层第  $j$  节点输出  $y_j$  为

$$y_j = f_2\left(\sum_{i=1}^n w_{2ji}a_i + b_{2j}\right) \quad (j = 1, 2, \dots, m) \quad (8)$$

式中: $w_{2ji}$ 、 $b_{2i}$  分别为第 2 层即隐含层节点的权重和阈值; $f_2$  为变换函数。

输出层节点输出误差  $E$  为

$$E = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m (y_{sj} - y_j) \quad (9)$$

式中: $y_{sj}$  为期望输出。

**步骤 3** 计算雅可比矩阵:

$$J(w) = \begin{bmatrix} \frac{\partial E_{1,1}}{\partial w_1} & \dots & \frac{\partial E_{1,1}}{\partial w_u} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial E_{S_u,Q}}{\partial w_1} & \dots & \frac{\partial E_{S_u,Q}}{\partial w_u} \end{bmatrix} \quad (10)$$

式中: $S_u$  为第  $u$  层节点数; $Q$  为训练样本数。

**步骤 4** 求 BP 网络权值的调整量  $\Delta w_v$ :

$$\Delta w_v = w_{v+1} - w_v = -[J^T(w_v)J(w_v) + \mu_v I]^{-1} J^T(w_v)E(w_v) \quad (11)$$

式中: $w_v$ 、 $w_{v+1}$  分别为  $v$ 、 $v+1$  时刻的权值; $I$  为单位矩阵; $\mu_v$  为 LM 算法内部使用的一个大于零的调整因子,用于控制 LM 算法的迭代。通过自适应调整该值,LM 算法可以完成梯度下降法与高斯-牛顿法的较好结合。

## 1.4 灰色 GA-LM-BP 模型

灰色 GA-LM-BP 模型数据预测修正流程如图 1 所示。该模型的总体思想是:首先建立灰色 GM(1,1) 模型并预测数据,得到其残差。由于灰色 GM(1,1) 模型拟合精度不高,采用 LM-BP 神经网络对该残差进行拟合、测试、预测,同时采用遗传算法对 LM-BP 神经网络的初始权阈值进行优化。最后,将 LM-BP 神经网络得到的残差预测结果对 GM(1,1) 模型的数据预测值进行修正,得到合理的数据预测值。该模型包含灰色 GM(1,1) 预测和 LM-BP 神经网络的预测,其中 LM-BP 神经网络预测过程相对比较复杂,里面包含 GA 对 LP-BP 神经网络初始权阈值的优化。

遗传算法对 LM-BP 神经网络的初始权值和阈值进行优化的核心思想如下:①建立 BP 神经网络,设置好网络训练参数,随机初始化遗传算法 GA 种群;②将遗传算法种群的每组个体作为 BP 神经网络的初始权值和阈值,采用 LM 算法对 BP 神经网络

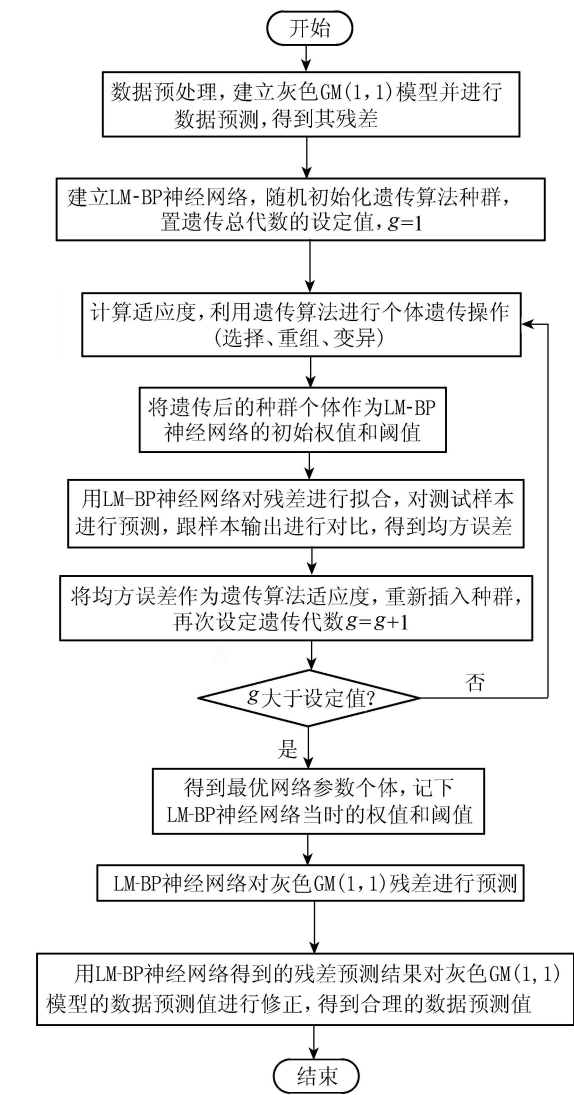


图1 灰色 GA-LM-BP 模型数据预测修正流程

进行训练;③将训练好的 LM-BP 神经网络对残差进行测试、预测,计算其均方误差,将均方误差作为遗传算法的评价函数,计算每个个体的适应度;④根据适应度对个体进行遗传(选择、交叉、变异)操作;⑤满足遗传代数  $g$  大于设定值的条件就结束,否则转第②步,进入下一代遗传。

在编程的过程中,可以求出所有代所有个体中适应度最小的值,并且记下此时神经网络的权值和阈值,这样就能保证网络经过多次训练多代遗传后,最终得到最优的网络参数。经过遗传算法对初始权值和阈值的优化后,神经网络的泛化能力将大幅增强。遗传算法适应度跟种群的个体之间是一种间接的关系,中间经过了神经网络的训练和测试,这是该模型实现的一个难点。

## 2 实例应用

采用灰色 GA-LM-BP 模型对伦河孝感段的  $COD_{Mn}$  进行拟合、测试、预测。数据取样每 2 个月

1 次,采用 2008 年 8 月至 2011 年 12 月共 21 个月的  $COD_{Mn}$  监测数据。建立灰色 GM(1,1) 模型,得到  $COD_{Mn}$  的模拟值、残差及残差相对误差,如表 1 所示。

表 1 灰色 GM(1,1) 模型对  $COD_{Mn}$  的拟合结果

| $\rho(COD_{Mn})/(mg \cdot L^{-1})$ |      |       | 残差相对误差/% |  | $\rho(COD_{Mn})/(mg \cdot L^{-1})$ |      |       | 残差相对误差/% |  |
|------------------------------------|------|-------|----------|--|------------------------------------|------|-------|----------|--|
| 实测值                                | 模拟值  | 残差    |          |  | 实测值                                | 模拟值  | 残差    |          |  |
| 2.26                               | 2.26 | 0     | 0        |  | 3.37                               | 2.70 | -0.67 | -19.91   |  |
| 2.56                               | 2.28 | -0.28 | -10.82   |  | 3.36                               | 2.74 | -0.62 | -18.31   |  |
| 2.15                               | 2.32 | 0.17  | 7.98     |  | 3.25                               | 2.79 | -0.46 | -14.12   |  |
| 2.10                               | 2.36 | 0.26  | 12.42    |  | 2.77                               | 2.84 | 0.07  | 2.46     |  |
| 1.90                               | 2.40 | 0.50  | 26.35    |  | 3.25                               | 2.89 | -0.36 | -11.20   |  |
| 2.40                               | 2.44 | 0.04  | 1.72     |  | 2.85                               | 2.93 | 0.08  | 2.97     |  |
| 2.03                               | 2.48 | 0.45  | 22.29    |  | 2.76                               | 2.98 | 0.22  | 8.12     |  |
| 1.93                               | 2.52 | 0.59  | 30.79    |  | 2.71                               | 3.03 | 0.32  | 11.98    |  |
| 2.23                               | 2.57 | 0.34  | 15.11    |  | 2.76                               | 3.09 | 0.33  | 11.80    |  |
| 2.33                               | 2.61 | 0.28  | 12.03    |  | 2.78                               | 3.14 | 0.36  | 12.87    |  |
| 4.25                               | 2.65 | -1.60 | -37.55   |  |                                    |      |       |          |  |

由表 1 可见,灰色 GM(1,1) 模型的拟合精度不高,且残差的相对误差没有规律性,需采用灰色 GA-LM-BP 模型对数据进行修正。建立 LM-BP 神经网络,将最后 3 个数据作为测试数据,前 17 个数据作为拟合数据, BP 网络输入层节点数为 8,输出层节点数为 1,经反复试验确定隐含层节点数为 6 比较合适。设置遗传算法个体(31 个数据)变量的二进制位数为 20,代沟为 0.9,遗传代数为 10。将遗传算法的种群个体作为 LM-BP 神经网络的初始权值和阈值,经过 LM-BP 神经网络训练后,对测试样本进行对比,求出其均方误差,将均方误差作为遗传算法的评价函数,进一步求出种群个体的适应度。经过 10 代遗传后,得到各代种群适应度的最优解和均值变化如图 2 所示。

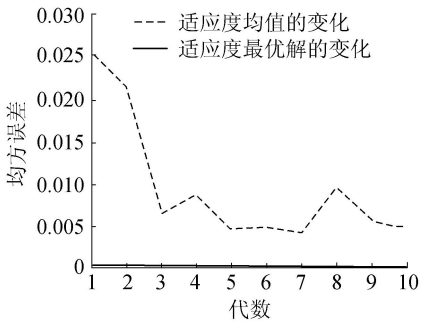


图2 各代种群的最优解和均值的变化

利用灰色 GA-LM-BP 模型对灰色 GM(1,1) 预测得到的残差相对误差进行拟合,其拟合相对误差分别为: $1.70 \times 10^{-6}$ 、 $-2.87 \times 10^{-7}$ 、 $6.68 \times 10^{-8}$ 、 $-6.50 \times 10^{-6}$ 、 $-5.88 \times 10^{-6}$ 、 $-2.90 \times 10^{-6}$ 、 $-7.44 \times 10^{-6}$ 、 $4.16 \times 10^{-5}$ 、 $1.96 \times 10^{-6}$ ,可以看出灰色 GA-LM-BP 模型对训练样本基本上能百分之百拟合。对表 1 中最后 3 个残差数据的相对误差进行预测,预测的相对误差分别为-1.3831%、-0.32296%、-2.3206%,从预测

结果可以看出,其误差均不超过 2.33%,说明可以用该灰色 GA-LM-BP 模型对残差的相对误差进行预测。

最后,利用灰色 GM(1,1) 模型预测 2012 年 2—10 月的 5 个 COD<sub>Mn</sub> 质量浓度数据,采用灰色 GA-LM-BP 模型对残差的相对误差进行预测,然后修正预测的 COD<sub>Mn</sub> 质量浓度数据,最后得到较合理的 COD<sub>Mn</sub> 质量浓度值,如表 2 所示。

表 2 COD<sub>Mn</sub> 质量浓度灰色预测、修正结果

| 灰色 GM(1,1) 模型<br>预测值/(mg·L <sup>-1</sup> ) | 灰色 GA-LM-BP 模型<br>预测残差相对误差/% | 修正值/<br>(mg·L <sup>-1</sup> ) |
|--------------------------------------------|------------------------------|-------------------------------|
| 3.190820                                   | 0.095817                     | 2.91181831                    |
| 3.244674                                   | 0.070337                     | 3.03145084                    |
| 3.299437                                   | 0.084326                     | 3.04284597                    |
| 3.355124                                   | 0.006962                     | 3.33192580                    |
| 3.411752                                   | -0.010193                    | 3.44688611                    |

3 结 语

灰色 GA-LM-BP 模型是一种有效的水质预测方法,其吸收了灰色预测方法、遗传算法和 LM-BP 神经网络的优点,但同时也增加了编程的复杂性和计算工作量,主要体现在遗传算法的优化过程中。运用灰色 GA-LM-BP 模型对伦河孝感段 21 个月的 COD<sub>Mn</sub> 实测数据进行拟合、预测,应用结果表明,采用该模型对本地区的 COD<sub>Mn</sub> 值进行预测是合理可行的,一方面该方法利用灰色 GM(1,1) 模型能很好地反映本地区河流 COD<sub>Mn</sub> 值随时间的变化规律,另一方面可以采用 LM-BP 神经网络的残差预测结果对预测数据进行修正,得到合理的预测数据。

参考文献:

[ 1 ] 朱玉磊. 化学需氧量几种测定方法研究[J]. 科技资讯, 2008, 28 ( 10 ): 83-85. ( ZHU Yulei. The research of determination of chemical oxygen demand ( COD ) [ J ]. Science & Technology Information, 2008, 28 ( 10 ): 83. ( in Chinese ) )

[ 2 ] 远振海, 鲁治冰. 基于神经网络的 COD 值预测研究 [ J ]. 黑龙江水专学报, 2008, 35 ( 1 ): 84-86. ( YUAN Zhenhai, LU Zhibing. COD data forecast based on NN [ J ]. Journal of Heilongjiang Hydraulic Engineering College, 2008, 35 ( 1 ): 84-86. ( in Chinese ) )

[ 3 ] 胡惠彬. 灰色系统的 GM(1,1) 模型在地表水 COD 浓度预测中的应用 [ J ]. 中国环境监, 1993, 9 ( 4 ): 45-46. ( HU Huibin. Application of grey system GM ( 1, 1 ) models in forecasting cod concentration of surface water [ J ]. Environmental Monitoring in China, 1993, 9 ( 4 ): 45-46. ( in Chinese ) )

[ 4 ] 刘玉存, 于国强, 王少华, 等. 基于神经网络的传爆药废水 COD 去除率预测研究 [ J ]. 含能材料, 2009, 17 ( 3 ): 361-364. ( LIU Yucun, YU Guoqiang, WANG Shaohua, et

al. Elman model in prediction of COD removal rate of booster explosive wastewater [ J ]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2009, 17 ( 3 ): 361-364. ( in Chinese ) )

[ 5 ] 赵英, 崔福义, 郭亮, 等. 基于 BP 神经网络的天津于桥水库 COD<sub>Mn</sub> 预测研究 [ J ]. 南京理工大学学报: 自然科学版, 2008, 32 ( 3 ): 376-380. ( ZHAO Ying, CUI Fuyi, GUO Liang, et al. COD<sub>Mn</sub> forecast based on BP neural network at Yuqiao Reservoir in Tianjin [ J ]. Journal of Nanjing University of Science and Technology: Nature Science, 2008, 32 ( 3 ): 376-380. ( in Chinese ) )

[ 6 ] 阮仕平, 党志良, 胡晓寒, 等. 基于 LM-BP 算法的综合水质评价研究 [ J ]. 水资源研究, 2004, 25 ( 1 ): 12-14. ( YUAN Shiping, DANG Zhiliang, HU Xiaohan, et al. Study on comprehensive water quality assessment based on LM-BP algorithm [ J ]. Journal of Water Resources Research, 2004, 25 ( 1 ): 12-14. ( in Chinese ) )

[ 7 ] GUO hairu, LI Zhimin. A method of improving generalization ability for neural network based on genetic algorithm [ C ] // 2010 IEEE International Conference on Intelligent Computing and Intelligent Systems ( ICIS 2010 ). Beijing: IEEE PRESS, 2010: 742-745.

[ 8 ] 刘思峰, 谢乃明. 灰色系统理论及其应用 [ M ]. 第 4 版. 北京: 科学出版社, 2008.

[ 9 ] 邓聚龙. 灰色系统基本方法 [ M ]. 武汉: 华中科技大学出版社, 2004.

[ 10 ] 周媛, 朱大奇. 水下机器人传感器故障诊断的灰色预测模型 [ J ]. 中国造船, 2011, 52 ( 1 ): 137-144. ( ZHOU Yuan, ZHU Daqi. A sensor fault diagnosis method for underwater vehicles based on GM ( 1, 1 ) [ J ]. Shipbuilding of China, 2011, 52 ( 1 ): 137-144. ( in Chinese ) )

[ 11 ] 阎威武, 常俊林, 邵惠鹤. 基于滚动时间窗的最小二乘支持向量机回归估计方法及仿真 [ J ]. 上海交通大学学报, 2004, 38 ( 4 ): 524-527. ( YAN Weiwu, CHANG Junlin, SHAO Huihe. Least square SVM regression method based on sliding time window and its simulation [ J ]. Journal of Shanghai Jiaotong University, 2004, 38 ( 4 ): 524-527. ( in Chinese ) )

[ 12 ] 原思聪, 江祥奎. 基于 GA-BP 神经网络的双目摄像机标定 [ J ]. 西安建筑科技大学学报: 自然科学版, 2011, 43 ( 4 ): 604-608. ( YUAN Sicong, JIANG Xiangkui. Binocular camera calibration based on GA-BP neural network [ J ]. Journal of Xi'an University of Architecture & Technology: Natural Science Edition, 2011, 43 ( 4 ): 604-608. ( in Chinese ) )

[ 13 ] 缪新颖, 褚金奎, 杜小文. LM-BP 神经网络在大坝变形预测中的应用 [ J ]. 计算机工程与应用, 2011, 47 ( 1 ): 220-222. ( MIAO Xinying, CHU Jinkui, DU Xiaowen. Application of LM-BP neural network in predicting dam deformation [ J ]. Computer Engineering and Applications, 2011, 47 ( 1 ): 220-222. ( in Chinese ) )

( 收稿日期: 2012 - 09 - 10 编辑: 周红梅 )