

DOI: 10.3969/j.issn.1004-6933.2013.06.004

水质综合评价的 LM-BP 神经网络通用模型应用

崔东文

(云南省文山州水务局, 云南 文山 663000)

摘要:分析 BP 神经网络应用于水质评价中存在的问题和目前水质评价中的不足, 基于地表水环境质量分级标准和 L-M 算法原理, 提出 LM-BP 神经网络水质综合评价通用模型。利用随机内插方法在地表水环境质量分级标准阈值间生成训练样本和检验样本, 采用顺序和随机两种方法选取训练样本和检验样本进行随机模拟; 利用平均相对误差、最大相对误差等统计指标评价 LM-BP 模型性能, 并构建传统 BP、RBF 模型作为对比模型; 以某水质评价实例进行模型验证, 并与灰色关联分析法、模糊综合评判法和 TOPSIS 法评价结果进行比较。结果表明: LM-BP 通用模型具有评价精度高、泛化能力强、收敛速度快、算法稳定和通用性能好等优点, 可应用于任意水质评价。在实际应用中只需对通用模型的评价因子、输入维数和隐含层神经元数进行删减即可满足评价要求。

关键词:水质评价; BP 神经网络; L-M 算法; 通用模型

中图分类号: X820.2 文献标志码: A 文章编号: 1004-6933(2013)06-0018-08

Application of general model of LM-BP neural network for comprehensive evaluation of water quality

CUI Dongwen

(Wenshan Water Conservancy Bureau of Yunnan Province, Wenshan 663000, China)

Abstract: Existing problems and shortcomings in water quality evaluation using the BP neural network were analyzed. Based on surface water environmental quality grading standards and the principle of the L-M algorithm, a general model of the LM-BP neural network was developed for comprehensive assessment of water quality. First, the random interpolation method was used to generate training and testing samples at the surface water environmental quality grading standard threshold, and the order and random methods were used to select training and testing samples for random simulation. Then, statistical indices such as the average relative error and the maximum relative error were used to evaluate the performance of the LM-BP model, and the traditional BP and RBF models were constructed as the contrast models. Finally, the model was applied to water quality evaluation in a case study and compared with the gray correlation analysis method, fuzzy comprehensive evaluation method, and TOPSIS method. The results show that the LM-BP model has the advantages of high evaluation precision, strong generalization ability, fast convergence speed, a stable algorithm, and good performance; it can be applied to any water quality evaluation. In practical application, we only need to delete the evaluation factors, input dimensions, and the number of hidden layer neurons of the model to meet the evaluation requirements.

Key words: water quality assessment; BP neural network; L-M algorithm; general model

水质评价在水资源管理、保护和规划中具有重要的意义和作用, 如何科学、客观、公正地对水质进行综合评价一直是水质评价中的热点和难点。传统的单因子评价指数法、评分法、比值法、统计法等评

价方法已不能满足日益严格的水资源管理需求。目前, 主要应用于水质综合评价的方法有模糊评价法^[1-2]、灰色系统评价法^[3]、人工神经网络法^[4-5]、模糊物元分析法^[6]、多目标决策 TOPSIS 法^[7]、集

对分析法^[8]和投影寻踪法^[9]等,每种方法各有优劣,均在一定条件下的水质评价中取得了较好的效果。但上述评价方法存在一个共性问题:即水质综合评价的污染因子(评价指标)均不超过10项(维),且在实际应用中,各种评价模型在污染因子改变的情况下需重新构建模型,没有一种通用性强的模型能够适用于不同的污染因子和任意维数的水质综合评价。水质综合评价所表现出的多因子、高维、非线性等特征适宜借助人工神经网络(artificial neural network, ANN)等智能方法以处理复杂系统的评价问题。BP(back-propagation, BP)神经网络具有较强的非线性映射能力、鲁棒性、容错性和自适应、自组织、自学习等许多特性,是ANN中应用最为广泛的神经网络模型之一。将BP神经网络应用于水质综合评价中存在着以下几个问题:①标准BP神经网络采用梯度下降算法,在实际应用中存在着收敛速度慢、易陷入局部极值等缺点。为克服BP算法中的不足,提出了基于附加动量等的改进算法^[10-13],但仍不能完全克服BP算法的固有缺陷。遗传算法(genetic algorithm, GA)对BP神经网络的权值及阈值进行优化,可以有效提高BP神经网络的精度和泛化能力,但对于较大容量的学习样本,GA-BP神经网络也存在着收敛速度慢,精度和泛化能力不高等不足。②神经网络在训练过程中易出现“欠拟合”与“过拟合”导致网络泛化能力降低的问题^[13-14]。③样本容量对于神经网络模型的精度和泛化能力的影响程度。BP神经网络模型的泛化能力主要取决于3个因素,即问题本身的复杂程度和模型的结构、算法、参数以及样本容量的大小。对于实际应用,问题本身无法改变,欲提高模型的精度和泛化能力只能依靠选择恰当的模型和样本容量。④样本的获取以及输入变量间因高度相关导致“多重共线性”降低网络泛化能力的问题。一般而言,具有一定数量和代表性的训练样本是决定模型泛化能力强弱的关键因素。由于实际应用中很难获取具有一定数量和代表性的样本,目前普遍采用线性内插或随机生成的方法获取样本。

针对上述水质评价中的共性问题和BP神经网络应用于水质评价中存在的不足,笔者基于BP神经网络和L-M(Levenberg-Marquardt, L-M)算法原理,依据GB3838-2002《地表水环境质量标准》^[15],以DO、COD_{Mn}等21个基本评价项目为输入因子,水质类别为期望输出,在分级标准阈值间随机生成训练样本和检验样本,提出LM-BP神经网络水质综合评价的通用模型。为保证评价模型的评价精度和泛化能力,采用以下方法对模型进行评价和控制:①构

建传统BP、RBF水质评价模型作为对比模型;②选用平均相对误差 e_{MRE} 、最大相对误差 e_{maxRE} 等统计学指标对评价模型进行性能评价,以控制网络训练过程中的“欠拟合”和“过拟合”问题。在模型达到预期的评价精度和泛化能力后对文献[7]中的实例进行评价分析。

1 LM-BP 算法原理

BP神经网络是一种单向传播的多层前馈神经网络,主要特点是信号前向传播,误差反向传播。其算法的精髓是将网络的输出与期望输出间的误差通过反向传播“分摊”到各神经元的权值和阈值,通过多次迭代使BP神经网络预测输出不断逼近期望输出,其权值和阈值的调整是沿着误差函数下降最快的方向——负梯度方向进行的,限于篇幅,其网络拓扑结构及算法步骤可参阅相关文献[9-13, 16-18]。由于梯度下降算法在最初几步下降较快,但随着接近最优值,梯度趋于零,导致误差函数下降缓慢,而牛顿法则可在最优值附近产生一个理想的搜索方向。L-M算法就是在这样的背景下提出的一种由梯度下降法和牛顿法相结合的改进算法,与传统BP及其他改进算法相比,该算法具有迭代次数少、收敛速度快、预测精度高、不易陷入局部极值等优点。L-M算法的基本思想是使其每次迭代不再沿着单一负梯度方向,而是允许误差沿着恶化的方向进行搜索,同时通过在最速梯度下降和高斯-牛顿法之间自适应调整来优化网络权值,使网络能够有效收敛,提高网络的收敛速度和泛化能力^[9, 19-20]。L-M算法步骤简述如下:

设标准梯度BP算法误差函数 $E(x)$ 为

$$E(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n e_i^2(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n [(\hat{y}(i) - y(i))]^2 \quad (1)$$

式中: $\hat{y} = (\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_n)$ 为期望输出向量; $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ 为实际输出向量; $e(x) = (e_1(x), e_2(x), \dots, e_n(x))$ 为误差向量。

设 $x^{(k)}$ 为第 k 次迭代的权值和阈值所组成的向量,新的权值和阈值所组成的向量 $x^{(k+1)}$ 可根据下面的规则求得

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x \quad (2)$$

式中: Δx 为权值及阈值变化量。

由于L-M算法是从牛顿法修正而来,而牛顿法是通过最小二乘法求解 $E(x)$ 的二阶泰勒公式极值得到,因此 Δx 可由下式表示:

$$\Delta x = -[\nabla^2 E(x)^{-1}] \cdot \nabla E(x) \quad (3)$$

式中: $\nabla^2 E(x)$ 为误差函数 $E(x)$ 的Hessian矩阵;

$\nabla E(x)$ 为梯度。

由于每次迭代计算中不能保证 Hessian 矩阵 $\nabla^2 E(x)$ 都可逆,所以需对 $\nabla^2 E(x)$ 进行近似计算。

可以证明:

$$\nabla E(x) = \mathbf{J}^T(x) \mathbf{e}(x) \quad (4)$$

$$\nabla^2 E(x) = \mathbf{J}^T(x) \mathbf{J}(x) + S(x) \quad (5)$$

其中, $\mathbf{J}(x)$ 为 Jacobian 矩阵,即:

$$\mathbf{J}(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial e_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial e_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial e_N(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial e_N(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (6)$$

由于 $S(x) = \sum_{i=1}^n e_i(x) \nabla^2 e_i(x)$, 在靠近极值点时, $S(x) \approx 0$, 因此牛顿法可以修正为高斯-牛顿法:

$$\Delta \mathbf{x} = - [\mathbf{J}^T(x) \mathbf{J}(x)]^{-1} \mathbf{J}(x) \mathbf{e}(x) \quad (7)$$

L-M 算法是高斯-牛顿法的一种改进形式:

$$\Delta \mathbf{x} = - [\mathbf{J}^T(x) \mathbf{J}(x) + \mu \mathbf{I}]^{-1} \mathbf{J}(x) \mathbf{e}(x) \quad (8)$$

式中: $\mu (\mu > 0)$ 为比例系数; \mathbf{I} 为单位矩阵。

从式(8)可见,如果 $\mu = 0$, 则为高斯-牛顿法;如果 μ 取值很大,则 L-M 算法接近梯度下降法,每迭代成功一步,则 μ 的值减少一些,在接近误差目标时,则逐渐与高斯-牛顿法相似。由于 L-M 算法利用了近似的二阶导数信息,因此它比梯度下降法快得多。

L-M 算法步骤可归纳为:①初始化各训练参数,包括误差目标 ε 、比例系数 μ 等;②按式(1)计算误差函数 $E(\mathbf{x}^{(k)})$,如果 $E(\mathbf{x}^{(k)}) < \varepsilon$, 则结束;否则,计算 $\mathbf{x}^{(k+1)}$ 为新的权值和阈值,计算误差指标函数 $E(\mathbf{x}^{(k+1)})$;③按式(6)计算 Jacobian 矩阵 $\mathbf{J}(x)$;④按式(8)计算 $\Delta \mathbf{x}$;⑤若 $E(\mathbf{x}^{(k+1)}) < E(\mathbf{x}^{(k)})$, 则转至②;否则不更新权值和阈值,转至④;⑥结束。

2 LM-BP 水质评价通用模型

2.1 评价指标的选取

GB 3838—2002《地表水环境质量标准》^[15] 中基本评价项目为 24 个,但由于:①pH 值、水温 2 个评价项目没有分级标准;②COD_{Mn} 和 COD 二者具有较强的相关性,仅检测方法不同,考虑到目前化学需氧量的监测普遍为 COD_{Mn},因此在剔除 pH 值、水温和 COD 3 个评价因子后,本文选定 DO、COD_{Mn} 等 21 个基本评价项目为评价因子,并以各评价因子 I 类和 V 类阈值的 0.5 倍和 2 倍作为评价因子极小值(下限值)和极大值(上限值)。实际应用中,对于超出上、下限值的评价因子,其因子值分别以上、下限

值计。

2.2 评价的实现

2.2.1 评价因子的标准化处理

为了消除各评价因子因不同量纲对评价结果的影响,需对评价指标数据进行归一化处理。基本项目评价因子中除 DO 外,其余评价因子值越大,表示水质超差,处理方法为:

$$\hat{x} = (x - x_{\min}) / (x_{\max} - x_{\min}) \quad (9)$$

DO 处理方法为:

$$\hat{x} = 1 - (x - x_{\min}) / (x_{\max} - x_{\min}) \quad (10)$$

式中: \hat{x} 为经过标准化处理的数据; x 为原始数据; x_{\max} 和 x_{\min} 分别为数据序列中的最大值和最小值。经过标准化处理后,数据处于 0 ~ 1 范围之内,有利于网络训练。

2.2.2 样本及输出设计

选择合适的网络训练样本及样本容量是神经网络实际应用中的关键性问题。增加样本容量虽然有益于提高网络的精度和泛化能力,但势必增加网络的复杂性和运行时间;降低样本容量虽然有益于缩短网络的训练时间,但网络会因得不到充分训练而降低网络的泛化能力。目前尚没有选择“合适样本容量”的指导性原则,样本容量主要凭经验选取。为不失一般性,利用随机内插的方法在地表水环境质量标准每级阈值间生成 600 个样本,选取 400 个样本作为训练样本,200 个作为检验样本,以此计算共随机内插得到 3 000 个样本,其中 2 000 个作为训练样本,1 000 个作为检验样本,并采用“顺序”和“随机”两种方法选取训练样本和检验样本进行模拟。模型样本及输出设计见表 1。

表 1 水质评价模型样本及期望输出设计

训练/检验样本		评价等级	期望输出
顺序选取	随机选取		
1 ~ 600	1 ~ 600	I 类	1
601 ~ 1 200	601 ~ 1 200	II 类	2
1 201 ~ 1 800	1 201 ~ 1 800	III 类	3
1 801 ~ 2 400	1 801 ~ 2 400	IV 类	4
2 401 ~ 3 000	2 401 ~ 3 000	V 类	5

2.2.3 模型性能评价

选用平均相对误差 e_{MRE} 、最大相对误差 $e_{\max RE}$ 、平均绝对误差 e_{MAE} 、均方根绝对误差 e_{RMSE} 、均方根相对误差 e_{RMAPE} 、决定系数 R^2 以及运行时间 7 个统计学指标对 LM-BP、RBF 以及传统 BP 模型进行性能评价,以控制模型在训练过程中因“欠拟合”或“过拟合”导致泛化能力降低等问题。其中, R^2 范围在 [0, 1] 内,愈接近 1,表明模型的性能越好;其余评价指标越小,表明模型的性能越好。

$$e_{\text{MRE}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|\hat{y}_i - y_i|}{y_i} \times 100\% \quad (11)$$

$$e_{\text{maxRE}} = \max_{1 \leq i \leq n} \frac{|\hat{y}_i - y_i|}{y_i} \times 100\% \quad (12)$$

$$e_{\text{MAE}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\hat{y}_i - y_i| \quad (13)$$

$$e_{\text{RMSE}} = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2} \quad (14)$$

$$e_{\text{RMAPE}} = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{|\hat{y}_i - y_i|^2}{y_i}} \quad (15)$$

$$R^2 = \frac{(n \sum_{i=1}^n \hat{y}_i y_i - \sum_{i=1}^n \hat{y}_i \sum_{i=1}^n y_i)^2}{[n \sum_{i=1}^n \hat{y}_i^2 - (\sum_{i=1}^n \hat{y}_i)^2] [n \sum_{i=1}^n y_i^2 - (\sum_{i=1}^n y_i)^2]} \quad (16)$$

式中： \hat{y}_i 为第 i 个样本模拟值； y_i 为第 i 个样本实测值； $i=1, 2, \dots, n$ ； n 为模拟样本数。

2.2.4 网络训练及评价

采用 MATLAB 神经网络工具箱，创建及训练传统 BP、LM-BP 和 RBF 神经网络水质评价模型，并利用训练样本、检验样本和期望输出对模型相关参数进行率定。经反复调试，传统 BP、LM-BP 和 RBF 神经网络评价模型在下述参数设置条件下具有较好的评价精度和泛化能力^[14,21]。

传统 BP 模型：由于 BP 神经网络的隐含层节点数、期望误差、训练次数和传递函数等参数目前并没有较理想的确定和选择方法，主要凭经验确定和选取。本例的做法是：在给定训练次数为 1000，期望误差为 0.00001 的条件下，首先根据 Kolmogorv 定理得出一个初始隐含层节点数，然后利用逐步增长或逐步修剪法确定最终隐含层节点数；然后采用替换隐含层函数和输出层函数的方法获得最佳预测效果时的各相关参数；最终确定传统 BP 模型结构为 21-26-1，隐含层和输出层传递函数分别采用 logsig 和 purelin，学习速率为 0.05。

LM-BP 模型：做法及模型设定条件同传统 BP 模型，仅将传统 BP 模型的梯度下降算法改为 L-M 算法。

RBF 模型：RBF 神经网络人为调节的参数少，只有一个阈值，程序采取循环训练算法，最终确定 RBF 神经网络的光滑因子 (SPREAD) 和期望误差分别为 0.7 和 0.001。

由于训练样本和检验样本采用随机内插生成和随机选取产生，因此模型每次运行结果均不一样。某次随机连续 10 次运行的 7 个统计指标值见表 2 和表 3，并以某次随机运行的检验样本模拟图作为参考，以此来评价传统 BP、LM-BP 和 RBF 模型性能

的优劣。对比实验结果见图 1~6 和表 2、表 3。

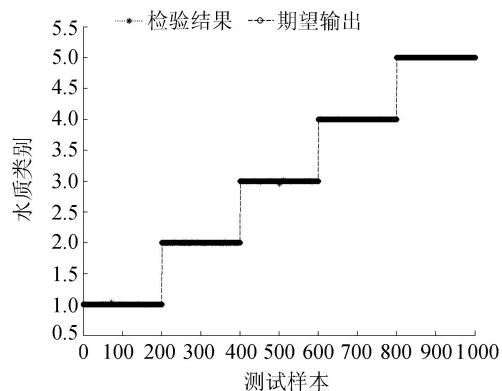


图 1 LM-BP 模型检验样本评价结果对比 (顺序)

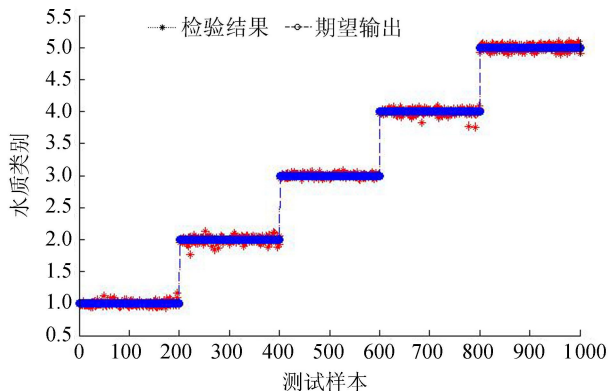


图 2 RBF 模型检验样本评价结果对比 (顺序)

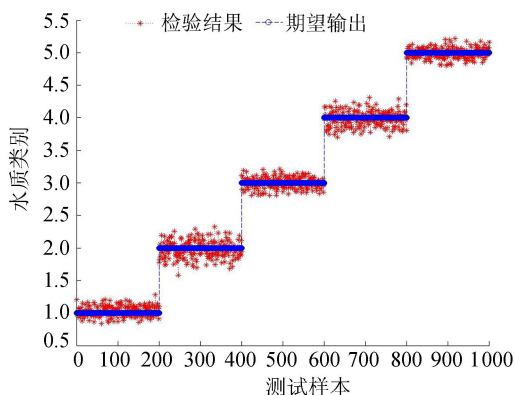


图 3 传统 BP 模型检验样本评价结果对比 (顺序)

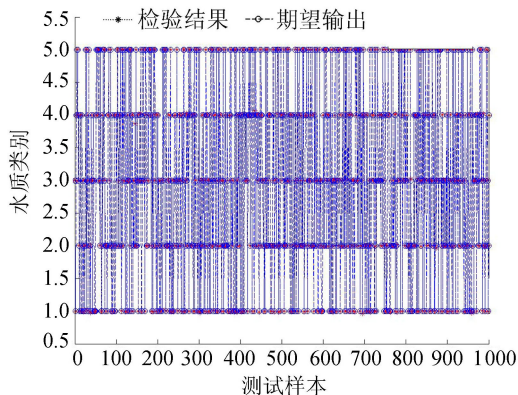


图 4 LM-BP 模型检验样本评价结果对比 (随机)

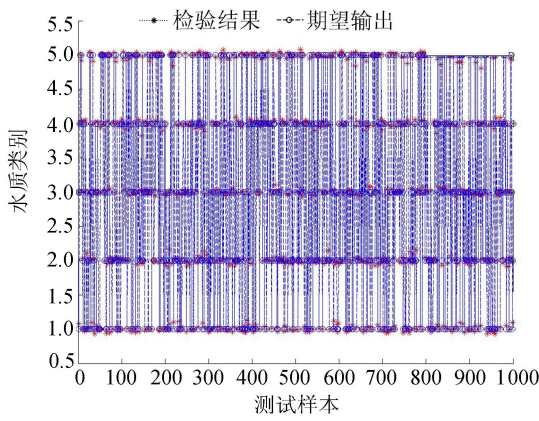


图5 RBF模型检验样本评价结果对比(随机)

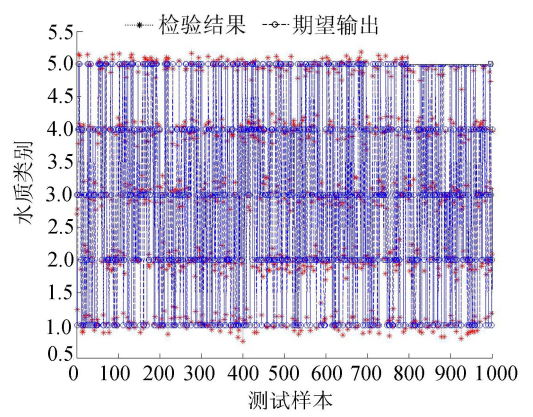


图6 传统BP模型检验样本评价结果对比(随机)

表2 LM-BP、传统BP和RBF评价模型对比实验结果(顺序选取样本)

评价模型	运行次数	训练样本						检验样本						运行时间/s
		$e_{MRE}/\%$	$e_{maxRE}/\%$	e_{MAE}	e_{RMSE}	e_{RMAPE}	R^2	$e_{MRE}/\%$	$e_{maxRE}/\%$	e_{MAE}	e_{RMSE}	e_{RMAPE}	R^2	
LM-BP模型	1	0.0733	1.0632	0.0018	0.0001	0.0000	1.0000	0.0943	3.5069	0.0022	0.0001	0.0001	1.0000	4.58
	2	0.0296	0.2545	0.0008	0.0000	0.0000	1.0000	0.0356	1.9083	0.0009	0.0001	0.0000	1.0000	4.98
	3	0.0811	1.6731	0.0022	0.0001	0.0000	1.0000	0.0949	4.8545	0.0025	0.0002	0.0001	1.0000	9.09
	4	0.0669	1.7191	0.0016	0.0001	0.0000	1.0000	0.0794	3.2793	0.0020	0.0002	0.0001	1.0000	12.79
	5	0.0863	2.6491	0.0018	0.0001	0.0000	1.0000	0.1088	6.5729	0.0021	0.0002	0.0001	1.0000	9.38
	6	0.0681	1.1954	0.0016	0.0001	0.0000	1.0000	0.0823	3.1650	0.0019	0.0001	0.0001	1.0000	17.64
	7	0.0520	1.2312	0.0015	0.0001	0.0000	1.0000	0.0636	2.8290	0.0019	0.0002	0.0001	1.0000	4.83
	8	0.0143	0.5430	0.0005	0.0000	0.0000	1.0000	0.0176	2.9782	0.0006	0.0001	0.0000	1.0000	5.71
	9	0.0887	2.1004	0.0021	0.0001	0.0000	1.0000	0.1154	4.1594	0.0028	0.0002	0.0001	1.0000	9.34
	10	0.0597	2.8316	0.0013	0.0000	0.0000	1.0000	0.0733	2.1773	0.0016	0.0001	0.0001	1.0000	8.09
	平均		0.0620	1.5261	0.0015	0.0001	0.0000	1.0000	0.0765	3.5431	0.0018	0.0001	0.0001	1.0000
传统BP模型	1	3.7903	24.1474	0.0867	0.0025	0.0012	0.9939	3.8549	23.8981	0.0864	0.0035	0.0018	0.9939	24.89
	2	4.3668	35.0949	0.0910	0.0026	0.0015	0.9932	4.5474	30.0844	0.0949	0.0038	0.0021	0.9927	24.62
	3	4.6285	32.4325	0.0964	0.0027	0.0015	0.9926	4.6281	32.9015	0.0917	0.0037	0.0023	0.9931	25.57
	4	3.8769	31.7093	0.0832	0.0023	0.0013	0.9946	3.9576	29.2707	0.0833	0.0033	0.0019	0.9946	24.08
	5	3.6993	25.2200	0.0822	0.0023	0.0012	0.9947	3.7399	27.8777	0.0827	0.0033	0.0017	0.9945	23.53
	6	4.4158	28.8695	0.0932	0.0026	0.0015	0.9934	4.3745	31.9786	0.0927	0.0036	0.0020	0.9934	25.46
	7	4.0315	28.0571	0.0882	0.0025	0.0013	0.9937	3.9356	29.5866	0.0880	0.0036	0.0018	0.9935	24.02
	8	4.2498	25.8949	0.0933	0.0026	0.0014	0.9931	4.1856	28.5182	0.0919	0.0037	0.0019	0.9932	28.64
	9	3.7295	28.8825	0.0787	0.0023	0.0012	0.9949	3.6867	26.8343	0.0774	0.0031	0.0017	0.9951	24.50
	10	4.3031	37.6211	0.0952	0.0027	0.0014	0.9926	4.1024	33.8484	0.0898	0.0036	0.0019	0.9935	31.30
	平均		4.1092	29.7929	0.0888	0.0025	0.0014	0.9937	4.1013	29.4799	0.0879	0.0035	0.0019	0.9938
RBF模型	1	1.0364	9.6425	0.0239	0.0007	0.0003	0.9995	1.2337	10.1693	0.0292	0.0012	0.0006	0.9993	60.82
	2	1.0754	12.4063	0.0241	0.0007	0.0004	0.9995	1.2374	10.9720	0.0282	0.0012	0.0006	0.9993	58.58
	3	1.0145	11.5329	0.0238	0.0007	0.0003	0.9995	1.1119	11.4870	0.0266	0.0011	0.0005	0.9994	53.75
	4	1.0531	10.7620	0.0238	0.0007	0.0004	0.9995	1.1566	12.5951	0.0273	0.0012	0.0005	0.9993	59.03
	5	1.0297	12.1036	0.0233	0.0007	0.0004	0.9995	1.2026	23.2214	0.0266	0.0011	0.0006	0.9993	58.44
	6	1.0684	13.3627	0.0238	0.0007	0.0004	0.9995	1.2486	11.8283	0.0286	0.0012	0.0006	0.9993	53.67
	7	1.0385	13.9005	0.0235	0.0007	0.0004	0.9995	1.1682	16.9876	0.0272	0.0012	0.0006	0.9993	58.01
	8	1.0765	11.9449	0.0235	0.0007	0.0004	0.9995	1.1835	15.8071	0.0267	0.0011	0.0006	0.9994	56.37
	9	1.0743	13.0452	0.0241	0.0007	0.0004	0.9995	1.2192	14.8143	0.0270	0.0011	0.0006	0.9994	55.79
	10	1.1031	15.4925	0.0240	0.0007	0.0004	0.9995	1.2180	13.3293	0.0272	0.0012	0.0006	0.9993	56.77
	平均		1.0570	12.4193	0.0238	0.0007	0.0004	0.9995	1.1980	14.1211	0.0275	0.0012	0.0006	0.9993

从表2、表3和图1~6可以得出以下结论:①在随机生成样本的条件下,无论是顺序选取样本还是随机选取样本,LM-BP模型训练样本和检验样本的 e_{MRE} 、 e_{maxRE} 、 e_{MAE} 、 e_{RMSE} 、 e_{RMAPE} 、 R^2 以及运行时间7个统计学指标均优于传统BP和RBF模型。在随机运行10次条件下,训练样本或检验样本的 e_{MRE} 均在

0.15%以内, e_{maxRE} 均在8.2%以内, e_{MAE} 均在0.004以内, e_{RMSE} 均在0.0003以内, e_{RMAPE} 均在0.0001以内,且每次运行的各统计指标值相近,波动不大,说明LM-BP算法稳定,模型具有较高的评价精度和泛化能力。各模型的综合性能从优到劣依次是:LM-BP、RBF、传统BP。②从同一模型不同的样本选取

表3 LM-BP、传统 BP 和 RBF 评价模型对比实验结果(随机选取样本)

评价模型	运行次数	训练样本						检验样本						运行时间/s
		e_{MRE}	e_{maxRE}	e_{MAE}	e_{RMSE}	e_{RMAPE}	R^2	e_{MRE}	e_{maxRE}	e_{MAE}	e_{RMSE}	e_{RMAPE}	R^2	
LM-BP 模型	1	0.0961	1.9928	0.0021	0.0001	0.0000	1.0000	0.1464	3.3228	0.0030	0.0002	0.0001	1.0000	12.68
	2	0.0932	2.1973	0.0021	0.0001	0.0000	1.0000	0.1187	3.9343	0.0026	0.0002	0.0001	1.0000	21.47
	3	0.0814	1.7475	0.0019	0.0001	0.0000	1.0000	0.1121	2.9011	0.0027	0.0002	0.0001	1.0000	17.14
	4	0.0813	1.6337	0.0019	0.0001	0.0000	1.0000	0.1243	8.1346	0.0028	0.0002	0.0001	1.0000	10.07
	5	0.0886	1.4827	0.0021	0.0001	0.0000	1.0000	0.1121	2.5343	0.0026	0.0002	0.0001	1.0000	19.10
	6	0.0988	1.0584	0.0020	0.0001	0.0000	1.0000	0.1028	1.2085	0.0021	0.0001	0.0000	1.0000	5.96
	7	0.0992	2.8657	0.0021	0.0001	0.0000	1.0000	0.1168	5.0979	0.0024	0.0001	0.0001	1.0000	14.64
	8	0.0739	1.0598	0.0020	0.0001	0.0000	1.0000	0.0964	2.0608	0.0028	0.0002	0.0001	1.0000	20.66
	9	0.0851	3.0172	0.0020	0.0001	0.0000	1.0000	0.1028	5.5986	0.0024	0.0002	0.0001	1.0000	10.44
	10	0.0912	1.8477	0.0021	0.0001	0.0000	1.0000	0.1287	5.7024	0.0032	0.0003	0.0001	1.0000	12.42
	平均	0.0889	1.8903	0.0020	0.0001	0.0000	1.0000	0.1161	4.0495	0.0027	0.0002	0.0001	1.0000	14.46
传统 BP 模型	1	4.0837	28.0043	0.0906	0.0025	0.0013	0.9938	4.1199	34.0714	0.0912	0.0036	0.0019	0.9934	17.03
	2	3.9732	30.5396	0.0851	0.0023	0.0013	0.9945	3.8076	26.6838	0.0823	0.0033	0.0018	0.9946	19.10
	3	4.0160	23.5034	0.0879	0.0025	0.0013	0.9940	3.8340	20.9289	0.0893	0.0036	0.0017	0.9934	18.28
	4	4.5264	35.9642	0.0930	0.0026	0.0016	0.9933	4.6862	38.9854	0.0964	0.0038	0.0022	0.9927	19.12
	5	4.0496	29.3233	0.0858	0.0024	0.0013	0.9941	3.8711	26.9869	0.0824	0.0033	0.0018	0.9943	18.21
	6	3.7938	28.6115	0.0799	0.0022	0.0013	0.9950	3.9265	30.3576	0.0832	0.0033	0.0019	0.9944	18.32
	7	3.7113	25.3596	0.0850	0.0024	0.0012	0.9940	3.7289	18.8651	0.0861	0.0035	0.0016	0.9942	18.20
	8	3.8340	32.4760	0.0831	0.0024	0.0013	0.9944	4.1153	30.5621	0.0883	0.0036	0.0019	0.9935	19.44
	9	3.5338	27.6221	0.0816	0.0023	0.0011	0.9945	3.6818	23.9916	0.0815	0.0033	0.0017	0.9946	18.14
	10	4.0573	23.5086	0.0902	0.0025	0.0013	0.9937	4.1489	23.0580	0.0929	0.0037	0.0018	0.9932	18.08
	平均	3.9579	28.4913	0.0862	0.0024	0.0013	0.9941	3.9920	27.4491	0.0874	0.0035	0.0018	0.9938	18.39
RBF 模型	1	1.0950	12.7809	0.0238	0.0007	0.0004	0.9995	1.2892	13.2836	0.0287	0.0012	0.0006	0.9992	55.44
	2	1.0464	16.6011	0.0241	0.0007	0.0004	0.9995	1.1344	14.8533	0.0270	0.0012	0.0005	0.9993	55.41
	3	1.0644	10.2934	0.0239	0.0007	0.0004	0.9995	1.1747	12.4251	0.0283	0.0012	0.0006	0.9993	52.16
	4	1.0893	10.9849	0.0244	0.0007	0.0004	0.9995	1.1380	10.1989	0.0269	0.0012	0.0005	0.9993	53.75
	5	1.0879	12.9850	0.0235	0.0007	0.0004	0.9995	1.1897	14.0193	0.0270	0.0011	0.0006	0.9993	57.65
	6	1.1250	13.5314	0.0239	0.0007	0.0004	0.9995	1.2913	12.5758	0.0279	0.0012	0.0006	0.9993	52.70
	7	1.0759	10.9983	0.0237	0.0007	0.0004	0.9995	1.2507	16.2173	0.0275	0.0011	0.0006	0.9993	58.16
	8	1.0416	10.9049	0.0238	0.0007	0.0004	0.9995	1.1061	12.6283	0.0256	0.0011	0.0005	0.9994	59.45
	9	1.0907	10.9307	0.0238	0.0007	0.0004	0.9995	1.3353	13.3405	0.0296	0.0013	0.0007	0.9992	55.89
	10	1.0471	14.9781	0.0237	0.0007	0.0004	0.9995	1.1573	10.5780	0.0274	0.0011	0.0005	0.9994	56.10
	平均	1.0763	12.4989	0.0239	0.0007	0.0004	0.9995	1.2067	13.0120	0.0276	0.0012	0.0006	0.9993	55.67

方法评价结果可以看出,各模型训练样本和检验样本的统计指标值相差不大且变化平稳,表明在随机生成样本的条件下,无论是顺序选取样本还是随机选取样本对模型的评价精度影响并不显著。

本文主要基于模型的评价精度、泛化能力及运行时间考虑,选取 LM-BP 模型(顺序选取和随机选取样本两种方法)对文献[7]中的实例进行评价分析。

2.3 通用模型的实际应用步骤

在实际应用中,水质综合评价通常不可能所有评价因子均参与评价,即评价因子达不到 21 项(维),因此,可针对水质评价中评价因子和数量(维数)的不同,对 LM-BP 通用模型的评价因子、输入维数和隐含层神经元数进行删减即可满足实际需求。采用 LM-BP 水质评价通用模型实现任意水质评价步骤可归纳如下:

a. 确定评价因子和模型输入维数,根据实际评价需求对 LM-BP 通用模型评价因子和输入维数进

行删减。

b. 适当减少隐含层神经元数并调试模型,对比训练样本和检验样本的 e_{MRE} 、 e_{maxRE} 等统计指标值,对模型性能进行评价分析,在模型达到较佳评价精度和泛化能力时,确定隐含层神经元数(一般较佳的隐含层神经元数量是在输入维数基础上增加 1 ~ 10 为宜,以获得较好的评价精度、泛化能力和运行时间)。其他参数如模型的训练次数、期望误差、隐含层和输出层传递函数等参数不变,只有在模型通过调整隐含层神经元数还达不到期望精度的前提下才可适当调整这些参数。

c. 在模型达到期望的精度和泛化能力时,将通过一致性处理后的待评价样本和评价等级阈值输入模型,连续运行 10 次(建议),取其平均值作为最终评价价值。

d. 利用训练好并满足精度要求的 LM-BP 模型对水质进行综合评价和分析。

3 实例应用

3.1 数据来源

为了验证 LM-BP 模型的有效性和便于同其他评价方法进行比较,以文献[7]中某地区 4 个测点的监测数据为例进行分析,监测数据见表 4。

表 4 各测点水质污染实测值 mg/L

测点	$\rho(\text{DO})$	$\rho(\text{COD}_{\text{Mn}})$	$\rho(\text{BOD}_5)$	$\rho(\text{CN})$	$\rho(\text{FN})$	$\rho(\text{NH}_3\text{-N})$
A ₁	2.70	5.42	2.80	0.005	0.0067	0.83
A ₂	1.25	7.77	3.45	0.001	0.0014	0.25
A ₃	7.20	1.35	0.90	0.0031	0.0041	0.09
A ₄	5.91	1.85	1.20	0.003	0.001	0.17

3.2 LM-BP 评价模型的调整

由于该实例中的评价因子和维数与 LM-BP 神经网络水质综合评价通用模型的评价因子和维数存在差异,因此需依据前述通用模型的实际应用步骤对 LM-BP 通用模型进行调整。经调试,LM-BP 通用模型在隐含层神经元数为 8 时(其他相关参数不变),即 LM-BP 模型结构为 6-8-1 时模型具有较好的评价精度和泛化能力。LM-BP 模型随机连续 10 次运行的 7 个统计指标平均值见表 5。

从表 5 可以,经调整后的 LM-BP 水质评价通用模型同样具有较高的评价精度和泛化能力,且算法稳定,收敛速度快。

3.3 评价结果及分析

利用上述训练好的 LM-BP 模型对表 4 中 A₁ ~ A₄ 4 个测点的水质进行综合评价,将水质分级标准阈值进行“模拟计算”,并将“模拟计算”结果作为划分水质类别的依据。模拟及评价结果见表 6、表 7。

表 6 水质类别分级阈值模拟结果(随机 10 次平均)

顺序选取样本		随机选取样本	
评价等级	模拟结果	评价等级	模拟结果
I 类	≤1.7709	I 类	≤1.8867
II 类	(1.7709 2.1061]	II 类	(1.8867 2.1293]
III 类	(2.1061 3.4360]	III 类	(2.1293 3.4685]
IV 类	(3.4360 4.3163]	IV 类	(3.4685 4.1224]
V 类	(4.3163 5.0001]	V 类	(4.1224 5.0010]
劣 V 类	>5.0001	劣 V 类	>5.0010

分析表 6、表 7 可以看出,LM-BP 模型评价法与文献[3]灰色关联分析法评价结果一致;与文献[1]模糊综合评判法和文献[7]TOPSIS 法评价结果仅有测点 A₄ 偏小一个等级,这主要是由于各评价因子的

表 5 LM-BP 评价模型实验结果(随机 10 次平均)

样本选取方式	训练样本						检验样本						运行时间/s
	$e_{\text{MRE}}/\%$	$e_{\text{maxRE}}/\%$	e_{MAE}	e_{RMSE}	e_{RMAPE}	R^2	$e_{\text{MRE}}/\%$	$e_{\text{maxRE}}/\%$	e_{MAE}	e_{RMSE}	e_{RMAPE}	R^2	
顺序	0.0518	3.2224	0.0011	0.0001	0.0000	1.0000	0.0554	3.6939	0.0012	0.0001	0.0001	1.0000	12.56
随机	0.0887	3.2826	0.0019	0.0001	0.0000	1.0000	0.1030	5.0319	0.0024	0.0002	0.0001	1.0000	10.31

表 7 各测点不同评价方法的评价等级比较(随机 10 次平均)

测点	LM-BP 模型				文献[3]	文献[1]	文献[7]
	顺序选取样本		随机选取样本		灰色关联分析法	模糊综合评判法	TOPSIS 法
	模拟结果	评价等级	模拟结果	评价等级			
A ₁	2.9458	III 类	3.0740	III 类	III 类	III 类	III 类
A ₂	3.1640	III 类	3.1497	III 类	III 类	III 类	III 类
A ₃	1.0006	I 类	1.0021	I 类	I 类	I 类	I 类
A ₄	1.1091	I 类	1.0081	I 类	I 类	II 类	II 类

权重是由 LM-BP 模型确定,较为客观地反映了各评价因子对水质评价等级的影响程度。从表 4 可以看出,测点 A₃ 的各评价因子中,DO、COD_{Mn}、BOD₅ 和 NH₃-N 指标优于测点 A₄,而 CN、FN 劣于测点 A₄,互有优劣,因此测点 A₃、测点 A₄ 评价为 I 类更为客观、合理。

4 结语

依据 GB 3838—2002《地表水环境质量标准》^[15],提出 LM-BP 神经网络水质综合评价通用模型。通过与 RBF、传统 BP 模型的对比,利用 e_{MRE} 、 e_{maxRE} 等统计学指标对模型性能的评价和采用 LM-BP 模型对实例进行评价分析等方法来验证 LM-BP 模型,结果表明 LM-BP 模型具有较好的通用性、评价精度和泛化能力,将其应用于水质评价是合理可行和有效的。在实际应用中,仅需根据待评价水质特征对模型的输入因子、输入维数和隐含层神经元数进行适当删减即可满足实际应用需求,且模型调整过程简单便捷,具有良好的适用性与推广价值。

参考文献:

- [1] 马雪艳,张江山.应用模糊数学方法评价福州市山仔水库水质[J]. 济南大学学报:自然科学版,2004,18(2): 136-138. (MA Xueyan,ZHANG Jiangshan. Application of fuzzy mathematics model in the evaluation of water quality of Shanzai Reservoir of Fuzhou [J]. Journal of Jinan University:Natural Sciences,2004,18(2):136-138. (in Chinese))
- [2] 周维博,郭小砾.塔里木河水水质模糊模式识别评价[J]. 水资源保护,2007,23(4):33-36. (ZHOU Weibo, GUO Xiaoli. Fuzzy pattern recognition of water quality in Tarim River [J]. Water Resources Protection,2007,23(4):33-36. (in Chinese))

- [3] 杨继东,侯晓军.灰色关联分析在环境质量评价中的应用[J].环境工程,1993,11(3):58-60.(YANG Jidong, HOU Xiaojun. Application of grey correlation analysis in the evaluation of environmental quality [J]. Environmental Engineering, 1993, 11 (3) : 58-60. (in Chinese))
- [4] 华祖林,钱蔚,顾莉.改进型LM-BP神经网络在水质评价中的应用[J].水资源保护,2008,24(4):22-25.(HUA Zulin, QIAN Wei, GU Li. Application of improved LM-BP neural network in water quality evaluation [J]. Water Resources Protection, 2008, 24 (4) : 22-25. (in Chinese))
- [5] 伊璇,孙安帅,宿立明,等.基于BP神经网络的农村饮用水水源地水质评价[J].水利经济,2011,29(5):65-67.(YI Xuan, SUN Anshuai, SU Liming, et al. Evaluation of water quality in water source areas for rural drinking water based on BP neural network [J]. Journal of Economics of Water Resources, 2011, 29 (5) : 65-67. (in Chinese))
- [6] 张先起,梁川.基于熵权的模糊物元模型在水质综合评价中的应用[J].水利学报,2005,36(9):1057-1061.(ZHANG Xianqi, LIANG Chuan. Application of fuzzy matter-element model based on coefficients of entropy in comprehensive evaluation of water quality [J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2005, 36 (9) : 1057-1061. (in Chinese))
- [7] 吴智诚,张江山,陈盛.TOPSIS法在水环境质量综合评价中的应用[J].水资源保护,2007,23(2):10-12.(WU Zhicheng, ZHANG Jiangshan, CHEN Sheng. Comprehensive evaluation of water environmental quality by TOPSIS method of multi-objective decision-making [J]. Water Resources Protection, 2007, 23 (2) : 10-12. (in Chinese))
- [8] 郑志宏,魏明华.基于熵值法的改进集对分析水质模糊评价[J].河海大学学报:自然科学版,2013,41(2):136-139.(ZHENG Zhihong, WEI Minghua. Water quality fuzzy evaluation based on entropy method-improved set pair analysis [J]. Journal of Hohai University: Natural Sciences, 2013, 41 (2) : 136-139. (in Chinese))
- [9] 金菊良,魏一鸣,丁晶.水质综合评价的投影寻踪模型[J].环境科学学报,2001,21(4):431-434.(JIN Juliang, WEI Yiming, DING Jing. Projection pursuit model for comprehensive evaluation of water quality [J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2001, 21 (4) : 431-434. (in Chinese))
- [10] 张德丰.MATLAB神经网络应用设计[M].北京:机械工业出版社,2009.
- [11] 张良均,曹晶,蒋世忠.神经网络实用教程[M].北京:机械工业出版社,2008.
- [12] 傅荟璇,赵红.MATLAB神经网络应用设计[M].北京:机械工业出版社,2009.
- [13] 崔东文.支持向量机在水资源类综合评价中的应用研究:以全国31个省级行政区水资源合理性配置为例[J].水资源保护,2013,29(4):26-30.(CUI Dongwen. Application of support vector machine to lake and reservoir trophic status recognition [J]. Water Resources Protection, 2013, 29 (4) : 26-30. (in Chinese))
- [14] 崔东文.基于极限学习机的长江流域水资源开发利用综合评价[J].水利水电科技进展,2013,33(2):14-19.(CUI Dongwen. Comprehensive evaluation of water resources development and utilization in Yangtze River Basin based on extreme learning machine [J]. Advances in Science and Technology of Water Resources, 2013, 33 (2) : 14-19. (in Chinese))
- [15] GB 3838—2002 地表水环境质量标准[S].
- [16] 崔东文.基于BP神经网络的文山州水资源承载能力评价分析[J].长江科学院报,2012,29(5):9-15.(CUI Dongwen. Evaluation and analysis of water resources carrying capacity in Wenshan prefecture based on BP neural network [J]. Yangtze River Scientific Research Institute, 2012, 29 (5) : 9-15. (in Chinese))
- [17] 崔东文.基于改进BP神经网络模型的区域水资源脆弱性综合评价[J].长江科学院报,2013,30(2):1-7.(CUI Dongwen. Comprehensive assessment of the vulnerability of water resources by improved BP neural network model [J]. Yangtze River Scientific Research Institute, 2013, 30 (2) : 1-7. (in Chinese))
- [18] 崔东文.几种神经网络模型在湖库富营养化程度评价中的应用[J].水资源保护,2012,28(6):12-18.(CUI Dongwen. Applications of several neural network models to eutrophication evaluation of lakes and reservoirs [J]. Water Resources Protection, 2012, 28 (6) : 12-18. (in Chinese))
- [19] 葛玲,贾志成,夏克文,等.基于LM算法的神经网络语音识别[J].计算机工程与设计,2006,27(14):2534-2539.(GE Ling, JIA Zhicheng, XIA Kewen, et al. Neural network speech recognition based on LM algorithm [J]. Computer Engineering and Design, 2006, 27 (14) : 2534-2539. (in Chinese))
- [20] 冯今朝,王仲生.基于LM优化算法的神经网络在航空发动机转子故障诊断中的应用[J].宇航计测技术,2007,27(2):18-21.(FENG Jinzhao, WANG Zhongsheng. Application of neural network based on LM optimization algorithm in fault diagnosis of aircraft engine rotor [J]. Journal of Astronautic Metrology and Measurement, 2007, 27 (2) : 18-21. (in Chinese))
- [21] MATLAB中文论坛.MATLAB神经网络30个案例分析[M].北京:北京航空航天大学出版社,2010.

(收稿日期:2013-05-20 编辑:徐娟)