

文章编号: 1000-0615(2001)05-0474-05

湖库富营养化人工神经网络评价模型

楼文高

(上海水产大学水环境科学研究中心, 上海 200090)

摘要:在分析现有应用人工神经网络评价模型局限性的基础上,根据湖库富营养化的评价标准,提出了生成 BP 神经网络训练样本、检验样本和测试样本的新方法,给出了区分湖库富营养化不同程度的分界值,论述了确定合理隐层及其节点数的方法,使得训练后的神经网络模型具有更强的泛化能力,不受初始连接权值的影响。训练后的评价模型应用于实例的评价结果表明,新的评价模型具有更好的客观性、强壮性、通用性和实用性。并且由于评价结果采用连续函数输出,能够比较精细地分析湖库的富营养化程度。

关键词:湖库;富营养化评价;神经网络;训练样本;检验样本

中图分类号:S931.3

文献标识码:A

Eutrophication assessment model using artificial neural networks for lakes and reservoirs

LOU Wen-gao

(Water Environmental Research Center, Shanghai Fisheries University, Shanghai 200090, China)

Abstract: Some faults such as too little training set data, lack of testing (verification) set data, too large network topology and lack of boundary values were found in models, using artificial neural networks (ANN), presented before. A new approach, generating training set data, verification set data and testing set data and boundary set data, was put forward in this paper. Furthermore, the principle of determining the number of hidden layers and their neurons was also discussed. And, the trained NN-based model presented in this paper possessed the capacity of higher generalization and was not affected by the initial values of connection weights. The assessed results of cases showed that the new established NN-based model was more objective, robust, reliable, practicable, and fault-tolerant compared with other methods such as gray-clustering and gray situation decision-making method etc. It is possible to make analysis and forecast of the eutrophication trend of lake and reservoir using the new model.
Key words: lake and reservoir; eutrophication assessment; neural networks; training set data; verification set data

湖库富营养化评价的目的是为了准确反映水库水环境的质量和污染状况,并预测将来的发展趋势,为开展环境污染和综合治理、环境规划及管理提供科学依据^[1-3]。现有的评价方法有:营养状态指数法、评分法、灰色关联分析法、灰色聚类分析法、模糊数学法等。但由于富营养化受多个评价因子的影响,各因子的贡献存在较大的差异,且关系复杂,使得评价变得非常困难。实践证明,上述评价方法各有

收稿日期:2001-07-05

基金项目:上海水产大学校长专项基金项目(SFU200105)

作者简介:楼文高(1964-),男,浙江杭州人,副教授,硕士,主要从事人工神经网络及其应用、CAD最优化技术和多指标综合评价等方面的研究。Tel:021-65710203, E-mail: wglou@shfu.edu.cn

其适用条件和局限性,且与权值、隶属函数等人为因素有关。因此,迄今还没有一种公认的评价方法。

人工神经网络方法是目前最活跃的前沿学科之一,尤其适合于处理非线性系统^[4-9]。国内,人工神经网络技术虽已在湖库的富营养化评价方面获得了应用^[10-15],但没有取得比其他评价方法更好的结果。经分析,主要原因是:(1)在确定人工神经网络评价模型时,均没有使用检验样本和测试样本,多数文献使用了太少的训练样本;(2)没有给出区分相邻富营养化等级的边界值(分界值);(3)使用太多的隐层及其节点数;(4)部分文献输出层采用多个输出单元,富营养化等级的识别比较困难。这些缺陷造成了建立的人工神经网络评价模型泛化能力较差。

通过在各富营养化等级的评价参数标准数据范围内构造随机分布样本的方法,生成足够多的训练样本、检验样本和测试样本,采用扩张法确定最佳神经网络结构,以确保训练后网络评价模型的泛化能力和强壮性。输出层采用连续函数输出,分类较方便。给出了区分相邻富营养化等级的分界值,直接用于分类研究。

本文旨在:(1)比较本文建立的 BP 网络评价模型与他人建立的人工神经网络模型、灰色评价法的精度;(2)判定最重要评价参数以及评价参数重要度排序;(3)提出由标准等级数据生成足够多的训练、检验及测试样本的方法。

1 材料与方法

1.1 湖库富营养化评价参数的选择和评价参数标准数据的确定

根据我国湖库的实际情况,一般选择与湖库富营养化状况直接有关的总氮(TN)、总磷(TP)、耗氧量(COD)、透明度(SD)等水质指标和浮游生物量、叶绿素(Chla)等生物指标作为评价指标。

表 1 湖库富营养化评价参数标准数据

Tab.1 Standard values of evaluation index for eutrophication assessment

富营养化等级	评价参数					
	TP ($\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	COD ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	SD (m)	TN ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	生物量 (万个 $\cdot\text{L}^{-1}$)	神经网络分界样本 实际输出
	\leq	\leq	\geq	\leq	\leq	\leq
极贫营养(I)	1	0.09	37	0.02	4	1.50
贫营养(II)	4	0.36	12.0	0.06	15	2.57
中营养(III)	23	1.80	2.4	0.31	50	3.49
富营养(IV)	110	7.10	0.55	1.20	100	4.45
重富营养(V)	660	27.10	0.17	4.60	1000	5.59
极富营养(VI)	>660	>27.1	<0.17	>4.60	>1000	>5.59

1.2 部分湖库富营养化状况的评价

部分湖库评价参数的实测资料如表 2 所示。

1.3 BP 神经网络模型

人工神经网络是一种模拟人脑信息处理方法的大规模并行处理的自学习、自组织、自适应的非线性模拟系统,共有几十种^[4-9]。其中基于误差反传算法的多层前馈神经网络(简称 BP 网络)是目前应用最广(约占 80%以上)、通用性最好的能用于分类、模式识别和函数逼近的网络。因此,本文采用 BP 网络,其结构和工作原理参见文献^[4-9]。

表2 部分湖库评价参数监测数据及其不同方法的评价结果

湖库名称	评价参数					神经网络 实际输出	本文方法 评价结果	蔡文方法 评价结果	灰色局势法 评价结果
	TP ($\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	COD ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	SD (m)	TN ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	生物量 (万个 $\cdot\text{L}^{-1}$)				
太湖	20	2.83	0.50	0.90	100	4.00	IV	III	III
滇池	20	10.13	0.50	0.23	189.3	4.12	IV	IV	III - IV
武汉东湖	105	10.7	0.40	2.0	1913.7	5.24	V	VI	IV
杭州西湖	130	10.3	0.35	2.76	6920	6.39	VI	VI	IV
外海南	42	3.68	0.90	0.96	1011	4.44	IV - V *	III	III
海西海	45	1.28	3.50	-0.318	7.32	3.48	III - IV	III	III

注:(1)IV - V表示该湖库的富营养化状况处于IV类和V类的过渡状态,其他意义同;(2)依据文献[10,11,16,17]。

2 湖库富营养化 BP 神经网络评价模型的建立

2.1 现有的人工神经网络评价模型的局限性分析

2.1.1 没有检验样本和测试样本,部分文献训练样本太少

文献[10-15]在建立湖库富营养化评价模型时均没有使用检验样本和测试样本,文献[10-13]仅将不同富营养化程度的评价参数标准值作为训练样本,训练样本太少。有关神经网络文献^[5-9,18]明确指出:(1)人工神经网络建立评价、预测模型是一种数据驱动型方法,只有通过对足够多训练样本的自学习、自适应和自组织等才能归纳出有效的模型。如训练样本太少,不仅不能从训练样本中提取到足够的信息,反而有可能得到错误的信息,且网络波动较大;(2)人工神经网络模型的性能主要不是看它对训练样本的拟合能力,而是看它对检验样本和测试样本(非训练样本)的泛化预测能力。因此,神经网络评价模型泛化能力的高低是其应用成功与否的关键,如果没有检验样本和测试样本,也就无法判断神经网络模型的泛化和预测能力。

2.1.2 未能给出区分相邻富营养化等级的分界值

文献[10-15]只求不同富营养化等级的网络输出代表值,而没有给出区分相邻富营养化等级的分界值。这样给实际样本等级的判定带来很大不便,有时根本无法进行。

2.1.3 对隐层及其节点数的选取未加比较研究,使用了太大的网络结构

据研究,隐层及其节点数越多,BP神经网络的训练能力越强,而其泛化能力则越差^[4-9,18,19]。因此,在选取隐层及其节点数时,必须综合考虑训练能力和泛化能力。蔡煜东等^[10]针对5个训练样本,BP神经网络采用5-8-5结构(数字5、8和5分别表示输入层、隐层和输出层的神经元数),根本不符合用BP神经网络建模的条件^[5,18,19],由此将造成BP神经网络结构和参数的多模式现象。

2.2 BP神经网络评价模型的建立

2.2.1 样本的生成及其分界值样本的确定

生成足够多符合湖库富营养化评价标准的训练样本、检验样本和测试样本是应用BP神经网络建立鲁棒性和泛化能力好的模型的关键。

由于对应于各富营养化等级的各项评价参数均是一个区间值,因此,评价参数值在此范围内的湖库均处于该富营养化等级。通过在每等级规定的范围内进行随机取值,就能生成足够多的样本。

2.2.2 隐层及其节点数的确定

为了确保训练后神经网络模型的泛化能力和预测能力,应在满足精度要求的前提下取尽可能紧凑的神经网络结构^[4-9,18,19],一般采用三层结构(一个输入层,一个隐层和一个输出层)。一般地,随隐层节点数的增加,训练误差减少,但趋势逐渐减缓,而检验样本误差一般先减小,在发生“过学习”后则增大。因此,取训练误差曲线发生明显转折而检验样本误差没有出现增大趋势的节点数为合理的节点数。

2.2.3 网络模型理论输出值的确定

为了进行湖库富营养化等级的分类,分析和预测富营养化的发展趋势,网络模型输出采用连续函数是较好的一种方案。为此,设对应于各富营养化等级的模型理论输出值分别为1、2、3、4、5和6。

为了满足富营养化分级的需要,必须给出区分相邻富营养化等级的分界值。事实上,表1给出的就是区分湖库富营养化等级的评价参数的临界值,本研究以此表给出的临界值为分界样本,共5个。

3 实例研究分析

3.1 训练样本、检验样本和测试样本

利用2.2.1所论述的方法生成1200个样本(可以更多),另取所有样本和待评价湖库评价参数的最大和最小值生成两个样本,共计1202个样本。各随机抽取150个(约12%)检验样本和测试样本。

3.2 软件的选用

本研究采用Statsoft公司出品的Statistica Neural Networks软件^[5]。该软件内含数据归一化功能,能对输入和输出数据分别进行归一化操作和逆操作。

3.3 训练拟合精度、泛化和预测能力指标

对于本例,合理隐层节点数为3。训练时,取学习率 $\alpha=0.1$,冲量 $\eta=0.3$;结束训练的条件是训练样本的均方根误差(RMSE)小于0.1或训练次数达到4000次;隐层采用Sigmoid转换函数,输出层采用线性转换函数。经4000次训练,对应于训练样本、检验样本和测试样本的平均绝对误差(AAE)分别为0.1188、0.1224和0.1146;平均相对误差(ARE)分别为5.22%、5.22%和5.24%;均方根误差分别为0.1606、0.1639和0.1555;相关系数分别为0.9956、0.9953和0.9958。这些指标表明,该神经网络模型不仅对训练样本具有较好的拟合能力,而且对检验样本和测试样本也具有很高的泛化和预测能力。

3.4 对应于各等级富营养化水平的网络输出值及其范围

将分界样本的各项评价参数值输入训练好的神经网络模型,模型输出值分别为:1.50、2.57、3.49、4.45和5.59,如表1所示。这样,对应于I~VI级富营养化等级水平,神经网络模型输出值的范围分别为: ≤ 1.50 、 $1.50 \sim 2.57$ 、 $2.57 \sim 3.49$ 、 $3.49 \sim 4.45$ 、 $4.45 \sim 5.59$ 和 > 5.59 。

3.5 实际样本的输出值和富营养化等级的判定

对于实际湖库,将测定的五项评价参数值输入训练好的神经网络模型,并根据其输出值落在I~VI级的范围内的情况,判定该湖库的富营养化等级。如果模型的输出值非常接近于分界值,则表明该湖库的富营养化状况处于相邻两级的过渡状态。部分湖库的模型输出值和评价结果如表2所示。

3.6 各评价参数的灵敏性(重要性)分析

根据富营养化分级标准评价湖库富营养化等级时,TN最重要,TP次之,然后是DO、SD和生物量。

4 结果与讨论

目前,用于富营养化评价的人工神经网络模型是在没有检验样本、测试样本和采用了过大的网络结构的情况下建立的,即在不符合BP神经网络建模条件的情况下建立的,极易造成训练时出现“过拟合”和“过学习”现象,建立的神经网络模型的泛化能力得不到保障。

比较发现,本文评价结果有些要重于文献[10,17]的评价结果(其它11个湖库的评价结果相同,表2未列出)。主要原因是文献[10,17]将分界样本和代表值混合使用。根据评价标准,评价参数比分界值大或小应分别属于相邻的不同富营养化等级,但文献[10,17]并没有按这个原理来判定湖库的富营养化等级,因此,这样得到的评价结果似是而非。再者,文献[10]的训练样本太少,训练得到的网络连接权值仅是无穷多组中的一组,即存在多模式性;而文献[17]在分析计算时,将各评价参数作等权处理,即认为

各评价参数对湖库富营养化的作用是相同的,这显然也与实际情况不符。而本文用足够多训练样本、检验样本和测试样本建立的神经网络模型的连接权系数的大小是从训练样本数据中归纳而来,并经检验样本和测试样本验证,尽最大可能地避免人为主观因素影响,比主观给定的权值要合理,其评价结果也更客观、合理和可靠。针对表2列出的几个主要湖库分析如下:①对于外海南,TP、COD、SD和TN均属于IV级,而生物量属于V级,其综合评价结果是III级^[10,17]显然是不可能的,而本文的结果为IV级并偏向V级是较合理的;②对于武汉东湖,COD、SD和TN为V级,TP为IV级,生物量为VI级,显然综合评价结果为IV级^[10]偏轻,为VI级^[17]偏重,评为V级较合理;③对于滇池,COD、SD、TN和生物量为IV级,TP为III级,评价结果为IV级比III级^[10,17]更合理;④对于太湖,COD和生物量为V级,SD为IV级,TP和TN为III级,其评价结果为IV级也是合理的。此外,本文方法还能较清楚地揭示滇池的富营养化程度比太湖严重。

根据富营养化评价标准,用神经网络模型评价湖库富营养化时,TN的影响最大,TP次之,然后是DO、SD和生物量指标,这仅表明各个评价参数的整体影响,但不表示实际湖库的情况。对于实际湖库,其影响参数重要度排序要通过求富营养化等级对评价参数的导数得到。

5 结束语

本文提出了生成足够多训练样本、检验样本和测试样本的方法,解决了建立BP网络模型时训练样本太少和没有检验样本、测试样本的难题,给出了区分相邻富营养化等级的分界值、不同富营养化等级的模型输出值范围。网络输出结果和富营养化等级用连续函数表示,便于精细地分析和预测湖库的富营养化状态。对用不同方法的评价结果的分析比较表明,本文建立的神经网络评价模型具有较好的客观性、可比性和公正性,评价结果最符合实际情况。

本文提出的生成样本的方法具有一般性,对其他多指标综合评价问题的研究也具有借鉴作用。

参考文献:

- [1] 张忠祥,钱易. 城市可持续发展与水污染防治对策[M]. 北京:中国建筑工业出版社,1998.290-324.
- [2] 程声通,陈毓龄. 环境系统分析[M]. 北京:高等教育出版社,1990.164-196.
- [3] 金相灿,屠清瑛. 湖库富营养化调查规范[M]. 北京:中国环境科学出版社,1990.286-317.
- [4] 张立明. 人工神经网络的模型及其应用[M]. 上海:复旦大学出版社,1994.
- [5] Statsoft. Statistica Neural Networks[M]. (Manual)Tulsa:Statsoft, Inc, 1999.
- [6] Mayer H R, Dandy G C. Neural networks for the prediction and forecasting of water resources variables: a review of modelling issues and applications[J]. Environmental Modelling and Software, 1999, 15(1):101-123.
- [7] Najjar Y M, Basheer I A, Hajmeer M N. Computational neural networks for predictive microbiology: methodology [J]. International Journal of Food Microbiology, 1997, 34(1):27-49.
- [8] Anderson J A. An Introduction to Neural Networks[M]. London: MIT Press, 1995.
- [9] Bishop C M. Neural Networks for Pattern Recognition[M]. Oxford: Clarendon Press, 1995.
- [10] 蔡煜东,汪列,姚林声. 水质富营养化程度的人工神经网络决策模型[J]. 中国环境科学,1995,15(2):123-127.
- [11] 胡明星,郭达志. 湖泊水质富营养化评价的模糊神经网络方法[J]. 环境科学研究,1998,11(4):40-42.
- [12] 卢文喜,祝廷成. 应用人工神经网络评价湖库的富营养化[J]. 应用生态学报,1998,9(6):645-650.
- [13] 卢文喜,祝廷成. 应用人工神经网络评价长春南湖水的营养状态[J]. 地理科学,1999,19(5):462-465.
- [14] 刘首文,冯尚友. 人工神经网络在湖泊营养化评价中的应用研究[J]. 上海环境科学,1996,15(1):11-14.
- [15] 郭宗楼,刘肇炜. 径向基函数网络在湖泊富营养化程度评价中的应用[J]. 水利学报,1997,(10):72-76,82.
- [16] 金菊良,杨晓华,金保明,等. 水环境质量综合评价的新模型[J]. 中国环境监测,2000,16(4):42-47.
- [17] 冯玉国. 水环境质量评价的灰色局势决策法[J]. 环境科学学报,1994,14(4):426-430.
- [18] 江学军,唐焕文. 前馈神经网络泛化能力的系统分析[J]. 系统工程理论与实践,2000,20(8):36-40.
- [19] 董 聪. 多层前向网络的全局最优化问题[J]. 大自然探索,1996,15(58):27-31.