

# 改进算法的 BP 神经网络水质评价模型

## An improved BP neural networks model on water quality evaluation

蒋佰权 王万森 (首都师范大学信息工程学院 100000)

温香彩 (中国环境监测总站)

**摘要:**在分析 BP 神经网络算法的基础上,提出了水环境质量评价的改进 BP 神经网络模型,并编制了相应的程序。将模型运用于流域水质综合评价中,结果表明改进的 BP 神经网络模型通过变步长法和加入动量项的方法不仅可以减少训练的次数,避免网络训练陷入平坦区,还可以提高网络的精度,减小全局误差。相应所开发的评价系统简单易用,具有广泛的应用前景。

**关键词:**水质评价 人工神经网络 改进 BP 神经网络模型

### 1 概述

近年来,人工神经网络理论的迅速发展为水质评价和预测提供了一种新的有效方法。人工神经网络以其具有自学习、自组织、较好的容错性和优良的非线性逼近能力,受到众多领域学者的关注<sup>[1]</sup>。人工神经网络以其所具有的自组织和自适应的能力决定了它适于处理在已知条件和结果之间无明确关系的数据,并能够在条件与结果之间建立一定的关系,这个过程类似于人助思维过程,因此可模仿人类思维解决某些模糊性和不确定性问题。

在实际应用中,80%~90%的人工神经网络模型是采用误差反传算法或其变化形式的网络模型。BP 神经网络模型设计的最大特点是网络权值通过使网络模型输出值与已知的样本输出值之间的误差平方和达到期望值而不断调整网络权值训练出来的,并且,确定 BP 神经网络评价模型涉及隐层及其节点数、转移函数、学习参数和网络模型的最后选定等问题。BP 模型目前主要应用于函数逼近、模式识别、分类和数据压缩或数据挖掘。

笔者是在此背景下,开展了神经网络在水环境预测与评价模型的开发与设计研究工作。本研究是与中国环境监测总站合作,在研究了神经网络的原理和水环境质量预测与评价技术和方法的基础上,充分利用环境监测总站的技术方法,实际经验,应用背景下完成

了水环境质量评价神经网络模型的设计和开发工作,并把该模型应用到流域水质数据进行水质量评价。

随后介绍了水环境质量评价神经网络模型的设计和开发,应用该模型系统对长江流域进行水环境质量评价,并对该模型的水环境评价的结果做出比较和分析。这一新的水环境质量评价方法在实际的水质量评价中能够对水质进行正确的评价,值得推广和应用。

### 2 BP 神经网络介绍

BP 神经网络是人工神经网络最普遍、最通用的一种形式,它是一种前馈形多层感知器结构。BP 网络通常包括一个输入层,一个或多个隐含层,一个输出层。各层神经元之间无反馈连接,各层内神经元之间无任何连接,仅相邻层神经元之间有连接。典型的 BP 网络是 3 层前馈网络,即输入层、隐含层和输出层,各层之间实行全连接,其结构如图 1 所示。

BP 神经网络的输入层和输出层的神经元数可以根据输入矢量的指标数和期望输出的结果数来确定,而隐节点数的确定可根据复杂的运算或者由经验来确定。确定一个适当的隐节点数不仅能够减少训练时间,加快收敛,而且能够增强网络的泛化能力<sup>[2]</sup>。

BP 网络中的信息是单向传递的,同一层神经元不存在相互联系,而层与层之间采用全连接方式,其连接程度用权值表示,并通过学习调整其值。每层神经元

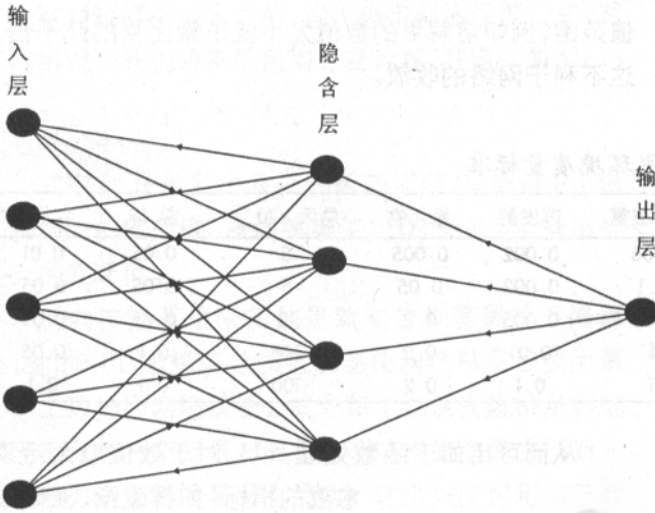


图 1 简单的三层神经网络结构示意图

的状态都将影响下一层的神经元状态，每个神经元状态都对应着一个作用函数  $f$  和阈值  $\theta$ ，输入层神经元阈值为零，作用函数  $f(x) = x$ ，隐层和输出层的作用函数为非线性的 Sigmoid 型函数，一般用下式表示：

$$f(\text{net}_i) = \frac{1}{1 + e^{-\frac{\text{net}_i}{\theta_i}}}$$

式中代表神经元温度，温度越高，sigmoid 函数变化越趋平缓。在非常低的温度下，它接近于阶跃函数。

BP 网络神经元就是通过上述的作用函数来工作的。将输入矢量输入至输入层，经函数  $f(x) = x$  作用并传至后面的隐含层，在隐含层和输出层，每个神经元通过上一层各神经元的连接权重和输出结果来计算本神经元的输入，通过作用函数  $f$  计算结果传递下一层的神经元来工作，其数学描述如下：

$$\text{out}_i = f(\text{net}_i) = f(\sum W_{ij} \text{out}_j + \theta_i)$$

这里  $\text{out}_i$  是所考虑层中第  $i$  个神经元的输出； $\text{out}_j$  前一层第  $j$  个神经元的输出。 $W_{ij}$  为神经元  $i$  到神经元  $j$  的权值。为神经元  $\theta_i$  阈值。

构建一个神经网络并把它应用于实际问题要经过两个截然不同的阶段。最初，被给定问题域的权值是未知的，直到找到有用权值之前，神经网络不能解决问题。训练首先是提供训练集合，本文下边会详细讨论如何得到一个“合理的”训练集；然后通过网络训练阶段，调整网络权值，减少期望输出误差以表现问题域。

第二个阶段或称工作阶段，权值固定不变，如果训练算法有效的话，网络应能正确对不属于训练集合的输入量正确分类，这个现象有时称作为推广。

### 3 构建水环境质量评价的 BP 网络模型

#### 3.1 水环境质量评价模型结构

2002 年发布的《国家地面水环境质量标准》<sup>[4]</sup> 中规定了水环境评价的五类水的标准（见表 1）。本模型是采用这五类水的标准并进行插值来建立学习样本。国家地面水环境质量标准中规定了 30 多个评价指标，我们构建输入模式时删除了那些对水质影响不大的评价指标，只选用了如表 1 所示的十个评价指标来构建本模型的输入矢量。测试样本通过网络输出的结果仅能定性地判断其所属水质类别，而这种定性的方法就会造成许多人为因素影响，使结果尚欠客观性。因此在模型网络输出中我们引入隶属度的概念，隶属度神经网络模型的核心就是试图解决水质评价的客观性和不确定性问题。结合水质评价来分析，就是将 I-V 类水质级别看作是论域（即对所研究的对象确定一个所在的范围），根据 BP 网络对各水质样本的中间结果输出值，可以计算出实测样本属于各级水质的隶属度值，最终输出为测试样本准确、具体的水质类别。输出层可以确定为一个神经元，其输出为网络的隶属度值。

由于三层的 BP 网络可以模拟任何复杂的空间曲线，我们确定评价模型的隐含层为单一隐含层；隐含层单元数的确定很多研究者采用下面两个公式：

$$\text{隐含层单元数目} = (\text{输入层单元数} \times \text{输出层单元数})^{1/2}$$

$$\text{或者公式：} \frac{1}{2} \times \text{隐含层单元数目} = (\text{输入层单元数} \times \text{输出层单元数})$$

而大多数的情况是通过经验和不断试验来确定；本模型的隐含层单元数通过计算和尝试，我们确定神经元数目为 7。

因此水环境质量评价的神经网络模型结构为 10-7-1，其结构如下图（图 2）所示，这种结构的神经网络模型能够加快网络的学习速度，而且能够满足水环境质量评价的精度，正确反映水质类别。

#### 3.2 预处理输入模式

对输入模式进行预处理主要有两个原因：

(1) 所应用的数据来源是由全国许多河流监测站提供的各个流域的原始数据,在这些报表中存在着格式不统一,数据不规范的数据;

(2) 每个监测指标数据都有自己的计量单位和数值范围,例如溶解氧的数值大小就是氰化物的几千倍,这不利于网络的收敛。

表 1 国家地面水环境质量标准

水体类别	溶解氧	BOD <sub>5</sub>	锰酸盐	非离子铵	亚硝酸氮	挥发酚	氰化物	总汞 * 10 <sup>-5</sup>	总砷	六价铬
I	7	2.8	2	0.015	0.06	0.002	0.005	5	0.05	0.01
II	6	3	4	0.02	0.1	0.002	0.05	5	0.05	0.05
III	5	4	6	0.02	0.15	0.005	0.2	10	0.05	0.05
IV	3	6	8	0.2	1	0.01	0.2	100	0.1	0.05
V	2	10	10	0.2	1	0.1	0.2	100	0.1	0.1

从而可用如下函数处理:(1) 对于数值愈大污染愈重的指标(如挥发酚、亚硝酸氮等)

$$x' = \frac{1}{e^{[0.223 + (-1.609 - 0.223) \times \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}}]}}$$

(2) 对于数值愈大污染愈轻的指标(如溶解氧等)

$$x' = \frac{1}{e^{[0.223 + (-1.609 - 0.223) \times \frac{x_{max} - x}{x_{max} - x_{min}}]}}$$

通过这样处理后输入数据将全部在[0.2,0.8]之间,可以大大加快网络学习速度,而数据间的联系并不减少。

### 3.3 输出介绍

在水质量评价标准中规定有五个水质类别,在已有的水环境评价方法中通常采用整数 1,2,3,4,5 来表示五类水质

级别。考虑到神经元作用函数的值域为[0,1],故令目标输出为 0.1,0.3,0.5,0.7,0.9。在实际的应用中我们能够得出各水质样本属于或接近哪一水质类别,但就接近的程度并未能有量化的判断。因此将隶属度的概念引入水环境评价模型,对网络输出结果通过进行隶属度的计算,使评价结果能够更加贴近实际水质量的结果。

### 3.4 算法及改进

网络训练实际是要使用多个学习样本,并对这些学习样本进行多次迭代的一个过程。一个学习样本的一次学习,主要包括正向和反向两个过程,正向过程计

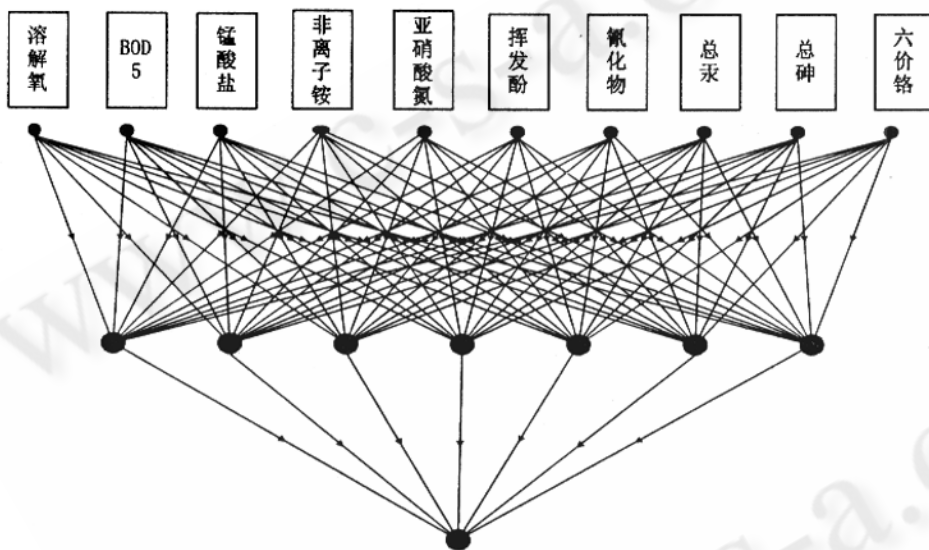


图 2 水环境质量评价的神经网络模型结构

因此在网络学习和应用之前必须对这些数据进行非线性规格化。大多数 BP 神经网络模型以 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规范到[0,1]区间。所以本文建议将输入数据规范到[0.2,0.8]区间<sup>[5]</sup>。由

$$0 \leq \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \leq 1, 0 \leq \frac{x_{max} - x}{x_{max} - x_{min}} \leq 1$$

可知:

$$0.2 \leq \frac{1}{e^{[0.223 + (-1.609 - 0.223) \times \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}}]}} \leq 0.8,$$

$$0.2 \leq \frac{1}{e^{[0.223 + (-1.609 - 0.223) \times \frac{x_{max} - x}{x_{max} - x_{min}}]}} \leq 0.8,$$

算网络误差,反向过程通过调整网络权值来缩小误差。

在讨论网络训练之前,首先确定网络误差公式,对于网络误差我们通常采用均方差计算,其定义如下:

$$E_p = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (t_{pi} - O_{pi})^2$$

式中  $E_p$  是第  $P$  个表征矢量的误差,  $t_{pi}$  是第  $i$  个输出神经元的期望值(及训练集值),  $O_{pi}$  是第  $i$  个输出神经元的实际值。

反向传播算法采用的是熟知的剃度最速下降算法,他的中心思想就是调整权值使网络总误差变为最小。上边神经网络误差公式中每个权值变量都是影响误差变化的一个因素。因此在这个权值变量空间有一个梯度方向使得误差减小最快。这个方向可用如下数学公式表示:

$$\Delta_p W_{ij} \propto - \frac{\partial E_p}{\partial W_{ij}}$$

其中,  $\Delta_p W_{ij}$  表示连接  $L-1$  层的源神经元和  $L$  层的目的神经元  $j$  权值的变化,为了将上式转换成适合于计算机实现的微分方程,我们经过计算,导出如下公式:

$$\Delta W_{ij} = \eta \delta_{pj} O_{pi}$$

其中,  $\eta$  为学习速率,  $\delta_{pj}$  为  $L$  层神经元的误差信号,  $O_{pi}$  为  $L-1$  层神经元  $i$  的输出. 误差信号  $\delta_{pj}$  可表示为:

$$\text{对输出神经元: } \delta_{pj} = (t_{pj} - O_{pj}) O_{pj} (1 - O_{pj})$$

$$\text{对隐含层神经元: } \delta_{pj} = O_{pj} (1 - O_{pj}) \sum_k \delta_{pk} W_{kj}$$

上面描述的算法经过有限次的迭代过程后使网络的误差减小到允许的范围,表示这为成功的网络训练,否则为网络训练失败。网络失败的原因主要有:

(1) 学习样本的不规范;

(2) 学习算法存在收敛速度慢、容易陷入局部极小点而无法得到全局最优解、网络学习出现震荡。

目前神经网络研究的热点也主要集中在解决这两个问题。对于后者已有很多神经网络学者提出了有效的改进算法,我们采用了其中两项改进措施来加快和修正水环境质量评价神经网络学习算法。

① 加入附加动量因子加快网络的收敛速度。

通常情况下在权值中加入一动力因子,以便于在某些问题中加快网络的收敛速率。该动力因子考虑过去权值变化的影响。动力因子常数  $\alpha$  决定了这项这项

的重要性。通过滤掉高频变量,该动量能使权值空间的误差表面平滑。当加入了动力项时,权值由式:  $\Delta W_{ij}(n+1) = \eta \delta_{pj} O_{pi} + \alpha \Delta W_{ij}(n)$  调整,这是反向传播算法的一个变形,其目的在于提高算法迅速收敛的能力。

② 自适应学习速率。

对于一个特定的问题要选择适当的学习速率不是一件容易的事情。通常是凭经验或实验获得,但即使这样,对训练开始初期功效较好的学习速率,不一定对后来的训练合适。而且在网络不同神经元的权值每次学习变化的趋势也是不同的,有的急剧上升,有的确变化平稳。为了解决这个问题,可以在训练过程中自动调整学习速率。自适应学习速率的调整为一个递归到下一个递归的递推过程,其公式为:

$$\eta_{ij}(n+1) = \eta_{ij}(n) + \Delta \eta_{ij}(n)$$

其中,  $\eta_{ij}$  表示连结第  $i$  和第  $j$  个神经元权值的学习速率,学习速率的变化率  $\Delta \eta_{ij}(n)$  可按式计算:

$$\Delta \eta_{ij}(n) = \begin{cases} \kappa, & \text{如果 } (-1) \frac{\partial E(n)}{\partial W_{ij}} > 0 \\ -\phi \Delta \eta_{ij}(n), & \text{如果 } (-1) \frac{\partial E(n)}{\partial W_{ij}} < 0 \\ 0, & \text{其它情况} \end{cases}$$

这里  $\kappa, \phi$  是恒定参数。

## 4 水环境质量评价的 BP 网络模型实现和应用

### 4.1 程序实现

水环境质量评价的神经网络模型及其学习算法是采用面向对象技术的 C++ 语言开发的。主要实现四个功能:

(1) 数据预处理功能。

(2) 神经网络模型构建。按照神经网络模型可以抽象出网络类,层类,神经元类,权类等主要对象,采用面向对象技术实现一个前馈多层感知器。

(3) 学习算法实现。对于学习算法的实现主要包括正向和反向两个过程,正向过程通过已建立的模型计算网络误差,反向过程通过调整网络权值来缩小误差。

(4) 水环境质量评价结果的展现。

### 4.2 学习过程

接下来我们运行上边建立的水环境质量评价神经网络评价模型系统对学习样本进行学习。首先确定水环境质量评价模型的参数。设置神经元阶跃函数的温度值为:0.9,学习算法的初始学习速率为1.05,学习算法的动量因子为:0.1,最大学习次数为2250000,最大学习允许误差0.00001。然后,以水环境质量评价标准作建立的学习样本循环作为输入,经过2019次学习,使得网络的误差达到网络允许的精度。

### 4.3 应用实例

改进的BP神经网络建立的上述模型通过样本训练就能达到一定网络精度后,就能够应用到实际的水质评价应用中。我们采用了国内某流域2005-2006年内的几个断面的水质数据。由于水质数据的监测指标达到30多项,我们只选用了其中的符合我们神经网络模型的10项指标,其他的监测指标我们略去;为了测试新建的水质评价模型,只列出了部分监测数据作为测试实例。如表2所示。

表 2 BP 网络水质评价模型测试实例

水域	评价指标									
	溶解氧	BOD	锰酸盐	非离子铵	亚硝酸氮	挥发酚	氰化物	总汞	总砷	六价铬
河流流域 A	8.3	1.1	2.4	0.012	0.015	0.001	0.002	5.2	0.001	0.005
河流流域 B	8.8	4.2	3.1	0.006	0.037	0.001	0.003	4	0.004	0.002
河流流域 C	5.7	2.2	7.2	0.049	0.07	0.001	0.005	4.7	0.004	0.002
河流流域 D	2.6	14.9	8.4	0.078	0.077	0.006	0.019	5	0.004	0.015
河流流域 E	1.4	21.2	9.4	0.03	0.079	0.007	0.022	6.9	0.005	0.018

把表2中的测试实例样本作为输入,通过评价模型计算我们得到了这几个实例的输出结果,如表3所示,同时表3也给出了网络的实际输出模式,目标模式,和水质的实测结果。

只要先将网络模型训练好,应用时只需将新的实测数据标准化后输入模型,可立即得出综合评价结果,且评价结果非常客观、合理,完全可以应用于实际的水质综合评价工作。

表 3 网络识别结果

水体名称	网络输出模式	目标模式	识别类别	实测类别
河流流域 A	0.295	0.3	II	II
河流流域 B	0.556	0.5	III	III
河流流域 C	0.715	0.7	IV	IV
河流流域 D	0.684	0.7	IV	IV
河流流域 E	0.932	0.9	V	V

实际的评价结果来看,我们建立的水环境神经网络评价系统的评价结果与水域的水质情况基本一致。

## 5 总结

采用改进算法BP神经网络水质综合评价方法具有理论完善、评价客观、适用性强和应用方便等优点。

### 参考文献

- 1 神经网络原理 Simon Haykin 著,叶世伟、史忠植译,机械工业出版社,2004.5.
- 2 神经网络设计 Martin T. Hagan Howard B. Demuth Mark H. Beale 著,戴葵等译,机械工业出版社,2002.9.
- 3 神经网络模式识别及其实现 Abhijit S. Pandya Robert B. Macy 著,徐勇、荆涛等译,电子工业出版社,1999.6.
- 4 水质评价的人工神经网络方法,张文鹤、李会安蔡大应,东北水利水电,2004年第10期.
- 5 地面水环境质量标准——GB3838-88.中国环境监测总站,2002.