应用广义回归神经网络进行土壤空间变异研究*

沈掌泉[1,2]　周　斌[1]　孔繁胜[2]　John S. Bailey[3]
(1 浙江大学农业遥感与信息技术应用研究所, 杭州　310029)
(2 浙江大学计算机科学与技术学院, 杭州　310027)
(3 *Department of Agriculture for Northern Ireland, Agricultural and Environmental Science Division, Belfast, UK*)

STUDY ON SPATIAL VARIETY OF SOIL PROPERTIES BY MEANS OF GENERALIZED REGRESSION NEURAL NETWORK

Shen Zhangquan[1,2]　Zhou Bin[1]　Kong Fansheng[2]　John S. Bailey[3]
(1 *Institute of Remote Sensing and Information System Application, Zhejiang University, Hangzhou　310029, China*)
(2 *College of Computer Science, Zhejiang University, Hangzhou　310027, China*)
(3 *Department of Agriculture for Northern Ireland, Agricultural and Environmental Science Division, Belfast, UK*)

关键词　广义回归神经网络; 径向基网络; 土壤性质; 空间变异; 克里格插值法
中图分类号　S152, TP183　　文献标识码　A

对土壤性质空间变异的充分了解, 是土壤养分管理和合理施肥的基础。90 年代以来, 随着发达国家精确农业技术的开展, 土壤特性的空间变异和空间插值技术研究得到众多农学家和土壤科学工作者的关注和重视[1, 2]。由法国学者 Matheron 于 20 世纪 60 年代建立起来的地统计学(Geostatistics)方法, 已被广泛用于土壤养分空间变异研究的定量分析; 它是以区域化变量、随机函数和平稳性假设等概念为基础, 以变异函数为核心, 以克里格插值为手段, 来分析研究自然现象的空间变异问题[3, 4]。但克里格插值有三个重要的前提条件: (1) 区域变量可表达为与均值有关的结构成分、与空间有关的随机成分和随机噪声三部分之和; (2) 所研究区域是均质的; (3) 对景观的不同部分应使用不同的半方差图。在一些情况下, 克里格插值法由于无法满足上述前提条件而不能可靠地应用地统计学来研究空间变异问题[5]。

近年来发展迅速的人工神经网络技术为解决这一问题提供了新的途径。神经网络具有传统建模方法所不具备的很多优点, 对建模对象不要求很多的先验知识, 只需给出对象的输入、输出数据, 而且对样点数据的分布、边界条件等无特殊要求。

径向基网络(也称为径向基函数神经网络, Radial Basis Function Neural Network, RBF) 是 Moody 和 Darken 于 20 世纪 80 年代末提出的一种具有单隐层的三层前馈网络, 其网络结构模拟人脑中局部调整、相互覆盖接收域的神经网络结构, 是一种局部逼近网络。它可以实现从输入到输出的非线性映射, 从几何意义上来说, 相当于根据稀疏的给定样本数据点恢复一个连续的超曲面, 在给定点处曲面的值要满足样点值, 网络应用时相当于估计其间未知点的值; 径向基网络与前向网络一样具有以任意精度逼近任意连续函数的能力, 且其逼近、分类和学习速度等方面优于 BP 网络, 因此近年来成为一个研究的热点[6, 7]。广义回归网络是径向基网络的变形, 主要用于解决函数逼近问题。在日照率、月平均太阳辐射、晴朗指数、岩石多孔性的空间分布及地质曲面重建等方面均有研究报道[8~11], 但在土壤空间变异

* 国家自然科学基金项目(40201021)、浙江省自然科学基金项目(402016) 和中英交流合作项目(SHA/992/308) 资助
作者简介: 沈掌泉(1969~), 男, 副研究员, 高级程序员, 硕士, 目前在浙江大学计算机学院计算机科学与技术专业攻读博士学位, 主要研究领域为遥感、地理信息系统及人工智能应用等。E-mail: zhqshen@zju.edu.cn
收稿日期: 2003-03-31; 收到修改稿日期: 2003-08-15

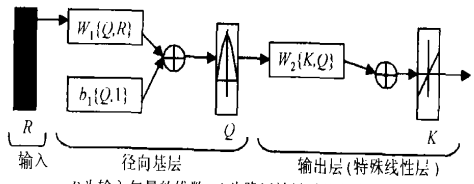
方面目前国内外尚无相关的研究报道。

本文在已有研究成果的前提下, 应用广义回归径向基神经网络来研究土壤养分的空间变异和插值精度, 并与地统计学方法的 Kriging 插值法进行比较, 来探索广义回归神经网络在土壤性质空间变异和插值方面的应用潜力及特点。

1 广义回归神经网络

广义回归神经网络(Generalized Regression Neural Network, GRNN) 是由 Donald F. Specht 提出的, 它是径向基网络的变形, 其结构与径向基网络接近, 仅在输出的线性层有一些不同, 非常适合于函数的逼近。其网络结构如图 1 所示, 除输入层外, 还包含二层: 第一层为径向基隐层, 包含的单元个数等于训练样本数, 该层的权值函数为欧几里德距离度量函数 $\left(\| dist \|_j = \sqrt{\sum_{i=1}^{R}(x_i - W_{j,i})^2} (j = 1, 2, \cdots, Q) \right)$, 其作用是计算网络输入与第一层的权值 W_1 之间的距离。b_1 为隐层阈值, 设置为 0.8326/SPREAD, 可通过改变 SPREAD 的值来调节它。网络积函数将阈值与权输入相乘的结果传送到传递函数。隐层的传递函数为径向基函数, 一般采用高斯函数。隐层节点中的传递函数对输入信号在局部产生响应, 当输入信号靠近传递函数的中央范围时, 隐层节点产生较大的输出, 因此网络具有局部逼近能力。网络的第二层为线性输出层, 其权值函数为归一化点积权函数, 它将隐层的输出与本层的权值 W_2 的点积作为权输入, 直接送入传递函数; 本层传递函数为线性函数[12]。

广义回归网络的特点是人为调节的参数少, 只需要通过 SPREAD 这一个参数来调节。网络的学习基本依赖于样本数据, 而且学习速度极快, 是曲面拟合和建模的一种理想的手段和工具。



R 为输入矢量的维数; Q 为隐层神经元的个数; K 为输出层神经元的个数; W 为连接权重; b 为阈值

图 1 广义回归网络结构示意图

2 研究材料

本研究以英国北爱尔兰 Hayes 的一块 7.7 hm^2 的牧草地为试验区, 该地块的土壤为棕壤。从北爱尔兰地籍数据库中得到该地块的图形信息, 然后用 20 m × 20 m 网格覆盖该地块并确定采样点的位置, 共布置 171 个采样点。在采样时, 先用一个 Trimble GPS 仪(通过与北爱尔兰海岸的 GPS 基站进行实时差分, 其定位精度可以达到 ±0.5 m 以内) 来精确地确定各采样点的位置, 然后以采样点为中心、半径 2 m 的圆形区域内, 用直径 35 mm 的取土器取 20 个土壤样本进行混合, 取样深度为 7.5 cm; 土样经风干、磨碎及过 2 mm 筛后, 按英国农业部标准常规分析方法[13], 进行土壤 pH 及土壤有效 P、土壤有效 K、土壤有效 Mg 和土壤有效 S 含量的分析测定。

为了分析不同样点密度和布局方式下神经网络的插值精度, 将包含全部 171 个采样点的原始田间布局称为方案 a, 然后以此为基础按一定的样点间隔和方法进行抽取。方案 b 为斜向间隔抽取, 使采样点呈三角形布局, 间距为 $20\sqrt{2}$ m; 方案 c 为横竖均隔行抽取, 间距为 40 m × 40 m; 方案 d 为在方案 c 的基础上, 斜向间隔抽取, 使采样点呈三角形布局, 间距为 $40\sqrt{2}$ m; 方案 e 为横竖向均隔三行取一行, 间距为 80 m × 80 m。各布局方案的样点分布见图 2。

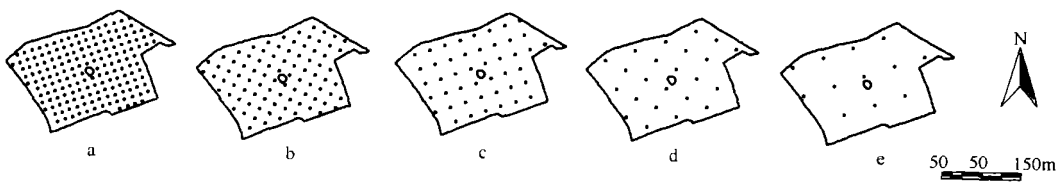


图 2 原始布局方案和其它布局方案的样点分布图

表 1 是原始采样数据集和各方案数据集的各土壤性质的统计特征。从表中可知, 土壤 pH 的变异系数很小, 说明土壤 pH 在研究区域内变化较小, 而土壤有效 P 和土壤有效 K 的变异系数较大, 表明土壤有效 P 和有效 K 的空间变异较大, 也较复杂。从表 1 中还可以看到, 随着样点数的减少, 样点间距的加大, 代表性呈下降趋势。这样, 结合不同样点布局方案和土壤性质就比较有利于全面地考察广义回归网络的插值和逼近能力。

表 1　不同采样布局下土壤各项性质的实测数据的基本统计特征

布局方案	样点数	土壤 pH			土壤有效 P			土壤有效 K	
		范围	平均值	变异系数 (%)	范围 (mg kg^{-1})	平均值 (mg kg^{-1})	变异系数 (%)	范围 (mg kg^{-1})	平均值 (mg kg^{-1})
方案 a	171	5.72~ 6.52	6.08	2.70	12.0~ 78.0	25.8	36.61	118.0~ 1 170.0	257.1
方案 b	87	5.72~ 6.52	6.09	2.70	12.0~ 78.0	26.1	38.94	121.0~ 1 170.0	259.1
方案 c	45	5.79~ 6.34	6.06	2.22	13.0~ 49.0	25.5	32.99	130.0~ 1 060.0	266.0
方案 d	23	5.79~ 6.34	6.07	2.33	13.0~ 39.0	24.7	27.26	130.0~ 537.0	249.7
方案 e	12	5.93~ 6.52	6.14	2.59	16.0~ 38.0	23.1	25.47	148.0~ 330.0	202.8

布局方案	样点数	土壤有效 K	土壤有效 Mg			土壤有效 S		
		变异系数 (%)	范围 (mg kg^{-1})	平均值 (mg kg^{-1})	变异系数 (%)	范围 (mg kg^{-1})	平均值 (mg kg^{-1})	变异系数 (%)
方案 a	171	56.50	414.0~ 1 200.0	549.4	18.13	10.5~ 26.2	17.9	14.19
方案 b	87	61.15	414.0~ 1 200.0	554.5	20.42	10.5~ 26.2	17.9	14.75
方案 c	45	58.83	419.0~ 782.0	538.3	16.54	11.3~ 22.9	17.8	13.99
方案 d	23	39.42	419.0~ 746.0	536.9	17.49	11.3~ 21.4	17.7	13.20
方案 e	12	28.93	414.0~ 1 200.0	607.8	34.27	13.2~ 20.7	17.2	13.31

3　研究方法

3.1　克里格插值方法

对不同样点布局方案的样点数据集进行偏度和峰度检验, 对不符合正态分布的样点数据集进行变换, 使之符合正态分布; 在此基础上, 进行半方差分析, 根据软件的推荐用球面模型拟合半方差图, 然后用点状克里格法进行插值。以上各项计算均在 Gamma Design Software 公司的 GS^{+}: Geostatistics for the Environment Sciences 软件中完成。

3.2　广义回归网络(GRNN) 方法

为方便数据处理, 加快网络收敛, 将所有样点数据进行归一化处理到[- 1, 1], 然后以各布局方案样点的地理坐标为输入, 相应的土壤性质为输出, 对网络进行训练, 在训练完成后, 计算研究区范围内不同位置的土壤性质, 从而得到研究区内土壤性质的空间分布特性。对于不同的样点布局方案, SPREAD 的选择与样点间的间距有关, 且需进行归一化处理, 其计算公式为:

SPREAD = 样点间距 ÷ 研究区地理坐标最大最小值之间的差

本研究部分的计算均以 MATLAB 为平台, 以神经网络工具箱为基础, 经编程实现。

3.3　插值精度评价

本研究用预测吻合度(Goodness of prediction, G) 作为插值精度的衡量指标, 其计算公式如下:

$$G = \left(1 - \left\{ \sum_{i=1}^{k} [z(i) - \hat{z}(i)]^2 / \sum_{i=1}^{k} [z(i) - \bar{z}]^2 \right\}\right) \times 100\%$$

式中 $z(i)$ 为第 i 个采样点实际测定的值, $\hat{z}(i)$ 为第 i 个采样点用 Kriging 或广义回归网络预测的值, $\bar{z}$ 是所有参与预测吻合度 G 计算的采样点实测值的平均值(即 $\bar{z} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} z(i)$), k 为参与计算 G 的样点数。从 G 的计算公式可知, 预测值越接近实际值, 则 G 的值就越高; 显然 G 的值越靠近 100%, 其插值精度就越高[14]。本研究中以实际采样方案的所有样点数据来计算插值精度。

4 结果与讨论

分别用广义回归网络和 Kriging 以各样点布局方案的样点数据为训练样本, 在训练完成后进行预测, 其插值精度的比较见表 2。从表 2 可知, 在大多情况下, 广义回归网络的插值精度超过了 Kriging 的插值精度, 尤其是当样点数仅为原始布局的不到 15% 时 (方案 d), 除土壤有效 P 外插值精度仍在 30% 以上; 但当样点的间距太大、样点太稀疏时, 由于样点的代表性下降, 因此插值精度较差。由于篇幅所限, 只列出应用二种方法获得的研究区土壤有效 K 的插值结果(图 3), 从图中可以看出, 对于方案 a 和方案 b, 广义回归网络所得插值结果的详度高于克里格; 而对于方案 c 和方案 d, 二者的结果比较接近。其原因是广义回归网络是局部逼近的, 越是与某个样点接近, 则输出受它的影响也越大, 这在样点密度较高时会更加明显; 而这与 Kriging 法的插值思想有一定的差异。

从本研究的结果可知, 对于土壤性质的空间变异性研究而言, 由于广义回归网络具有很强的曲面逼近能力, 与地统计方法相比, 可以得到相近或更好的结果; 而且即使在适当减少采样数量和加大采样间隔时, 也能获得较好的结果; 因此在空间变异性研究中具有很大的潜力。但值得注意的是, 参数 SPREAD 的设置将会明显影响广义回归网络的拟合和插值精度, 合适的 SPREAD 值的确定需要进行一些试验摸索; 而且, 广义回归网络无法象地统计方法那样能定量描述土壤性质的空间自相关性, 这也是其不足之处。此外, 正因为神经网络具有很强的函数拟合和逼近的能力, 因此训练样本数据的代表性也是非常重要的, 关于训练样本数据中的误差或者说噪声对神经网络预测精度的影响及如何减少其影响, 需作进一步的研究。

表 2 克里格和广义回归网络插值精度的比较

布局方案	样点数	插值精度 G (%)									
		土壤 pH		土壤有效 P		土壤有效 K		土壤有效 Mg		土壤有效 S	
		Kriging	GRNN	Kriging	GRNN	Kriging	GRNN	Kriging	GRNN	Kriging	GRNN
方案 a	171	74. 08	98. 50	65. 02	98 08	78 42	98. 65	93. 64	98. 56	74 81	96 89
方案 b	87	56. 76	79. 44	52. 92	78 84	66 69	84. 87	77. 14	83. 79	63 58	70 17
方案 c	45	45. 82	52. 98	39. 41	45 23	62 04	66. 04	47. 03	40. 33	51. 14	46 33
方案 d	23	37. 30	38. 84	39. 56	20 61	42 52	47. 08	19. 61	36. 03	43 91	33 46
方案 e	12	—	34. 82	—	- 5. 45	—	3. 13	—	8. 09	—	19 77

注: 对于方案 e, 克里格法由于样点太少, 无法拟合出半方差方程而不能获得插值结果

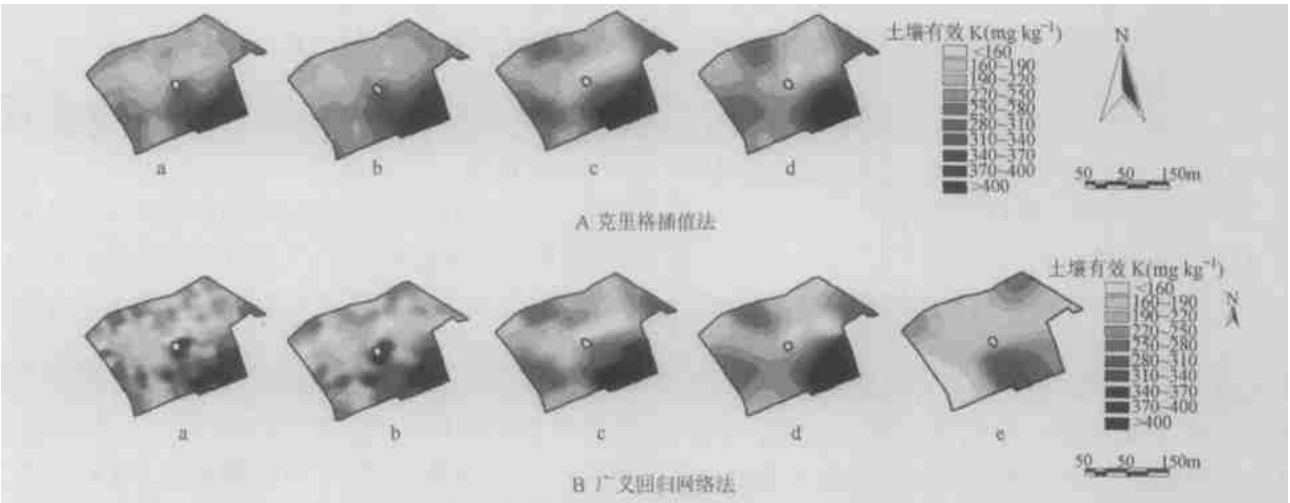


图 3 广义回归网络和克里格法在研究区插值结果比较

参 考 文 献

[1] 王珂, 沈掌泉, Bailey J S, 等. 精确农业田间土壤空间变异与采样方式研究. 农业工程学报, 2001, 17(2): 33~36

[2] Shi Z, Wang K, Bailey J S, *et al*. Sampling strategies for mapping soil phosphorus and soil potassium distributions in cool temperate grassland. Precision Agriculture, 2000, 2: 347~357

[3] 李毅, 刘建军. 土壤空间变异性研究方法. 石河子大学学报(自然科学版), 2000, 4(4): 331~337

[4] 黄绍文, 金继运. 土壤特性空间变异研究进展. 土壤肥料, 2002, (2): 8~14

[5] 岳天祥, 刘纪远. 多源信息融合数据模型. 世界科技研究与发展, 2001, 23(5): 1~4

[6] 柴杰, 江青茵, 曹志凯. RBF 神经网络的函数逼近能力及其算法. 模式识别与人工智能, 2002, 15(3): 310~316

[7] 段晓君. 神经网络的函数逼近能力分析. 模糊系统与数学, 1998, 12(4): 79~84

[8] 屈永华, 曾勇, 杨永国, 等. 径向基函数神经网络地质曲面重建及应用. 中国矿业大学学报, 2000, 29(3): 318~321

[9] Lawati A A, Dorvlo A S, Jervase A J. Monthly average daily solar radiation and cleamess index contour maps over Oman. Energy Conversion and Management, 2003, 44: 691~705

[10] Jervase A J, Lawati A A, Dorvlo A S. Contour maps for sunshine ratio for Oman using radial basis function generated data. Renewable Energy, 2003, 28: 487~497

[11] Fishetti A I, Andrade A. Porosity images from well logs. Journal of Petroleum Science and Engineering, 2002, 36: 149~158

[12] Specht D F. A general regression neural network. IEEE Transactions on Neural Networks, 1991, 2(6): 568~576

[13] Ministry of Agriculture. Fisheries and Food, The Analysis of Agricultural Materials. MAFF/ADAS Reference Book 427. London: HMSO, 1986

[14] Agterberg F P. Trend surface analysis. *In*: Gaile G L, Willmott C J. eds. Spatial Statistics and Models. The Netherlands: Reidel, Dordrecht, 1984. 147