

# 基于遗传算法的 BP 神经网络模型在预测海洋沉积物烧失量中的应用

李 强, 张学华

(广州海洋地质调查局, 广东广州 510760)

**摘要:**烧失量(LOI)是进行海洋地质研究的一个重要指标,采用常规方式测定烧失量不仅操作耗时,而且对分析环境要求比较高。实验基于  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 、 $\text{CaO}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$  和  $\text{TiO}_2$  等的含量与烧失量的相关性,尝试引入 BP 神经网络模型利用其非线性拟合能力预测烧失量的含量。实验表明,以大量的海洋沉积物样品中  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 、 $\text{CaO}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$  和  $\text{TiO}_2$  的含量数据以及烧失量为训练样本,采用遗传算法优化 BP 神经网络的初始权值和偏置,成功建立了海洋沉积物烧失量的遗传算法(GA)-BP 神经网络预测模型。利用 X 射线荧光光谱(XRF)分析数据并结合 GA-BP 神经网络预测海洋沉积物烧失量,烧失量预测结果的相对标准偏差(RSD)为 1.3%;海洋沉积物标准样品和实际样品中烧失量的预测值与参考值的相对偏差绝对值在 0.1%~6.2%之间,为烧失量的测定提供了一种新的有效途径。

**关键词:**遗传算法;神经网络;海洋沉积物;烧失量;X 射线荧光光谱

中图分类号:O657.34

文献标志码:A

文章编号:1000-7571(2019)04-0025-06

海洋沉积物记录了历史时期沉积环境变化的丰富信息,是海洋地质研究的重要载体。目前,可以利用海洋沉积物中碳酸盐、有机碳和自生元素(Mn、Al)等以及与陆源有密切关系的主量元素和示踪元素等组分,研究沉积物源区的古化学侵蚀状况和古气候变化,其中,海洋沉积物的烧失量(LOI)作为一种方便和快捷获取相关信息的指标,对于古气候和古环境研究有重要的价值,已有不少学者开展了相关研究<sup>[1-2]</sup>。

海洋沉积物烧失量是指烘干(105℃)后的沉积物样品在 1000℃灼烧后失去的质量与原质量的百分比,表征原始样品加热分解的气态产物( $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$ 等)和有机质含量的多少<sup>[3]</sup>,与海洋沉积物中有机质和碳酸盐的含量有较好的相关性。目前,海洋沉积物烧失量的常规测定方法是依据 DZG 93-05(4.1)非金属矿分析规程,需要在 1000℃多次灼烧,以确保恒重,计算烧失量,操作比较耗时,同时对分析环境的要求比较高。

人工神经网络是模拟大脑神经网络结构和功能的信息处理系统,可以进行复杂的逻辑运算以及实现非线性逼近,其中 BP(Back-Propagation)神经网络

已成为应用最广泛的人工神经网络之一,相关应用领域有模式识别<sup>[4-5]</sup>、物理参数预测模型<sup>[6]</sup>和定量预测<sup>[7-9]</sup>等。本文探索了遗传算法(GA)-BP 神经网络<sup>[10-13]</sup>应用于海洋沉积物烧失量预测的可行性,依托 X 射线荧光光谱法获取的常量组分数据以及常规方法获取的烧失量数据,基于  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 、 $\text{MgO}$ 、 $\text{CaO}$ 、 $\text{Na}_2\text{O}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$ 、 $\text{MnO}$ 、 $\text{TiO}_2$  和  $\text{P}_2\text{O}_5$  与烧失量的相关性,尝试以这些常量组分的含量数据和烧失量数据为训练样本,建立海洋沉积物烧失量的预测模型,实现烧失量的高效预测。

## 1 实验部分

### 1.1 仪器及测量条件

Axios PW4400 波长色散 X 射线荧光光谱仪(荷兰马尔文帕纳科公司),端窗薄铍窗铑靶 X 射线管,最大功率 4kW, SuperQ 4.0 操作软件,各元素具体测量条件见表 1; HMS-I-MZ-051 型高频熔样机(成都多林电器有限责任公司); ELF 11/14B 马弗炉(德国卡博莱特公司)。

### 1.2 实验方法

烧失量的测定:首先将 20 mL 瓷坩埚置于 1000℃

收稿日期:2018-12-20

作者简介:李 强(1984—),男,工程师,硕士,主要从事海洋地质样品的 X 射线荧光光谱分析研究工作;E-mail: lq28477697@163.com

表 1 X 射线荧光光谱仪测量条件

Table 1 Working conditions of X-ray fluorescence spectrometer

| 元素<br>Element | 分析线<br>Line | 分析晶体<br>Crystal | 探测器<br>Detector | 电压<br>Voltage/kV | 电流<br>Current/mA | 峰位角<br>Peak/(°) |
|---------------|-------------|-----------------|-----------------|------------------|------------------|-----------------|
| Si            | K $\alpha$  | PE 002          | Flow            | 30               | 120              | 109.160         |
| Al            | K $\alpha$  | PE 002          | Flow            | 30               | 120              | 144.972         |
| Fe            | K $\alpha$  | LiF 200         | Duplex          | 60               | 60               | 57.531          |
| Mg            | K $\alpha$  | PX 1            | Flow            | 30               | 120              | 23.005          |
| Ca            | K $\alpha$  | LiF 200         | Flow            | 30               | 120              | 113.131         |
| Na            | K $\alpha$  | PX 1            | Flow            | 30               | 120              | 27.805          |
| K             | K $\alpha$  | LiF 200         | Flow            | 30               | 120              | 136.711         |
| Mn            | K $\alpha$  | LiF 200         | Duplex          | 60               | 60               | 63.000          |
| Ti            | K $\alpha$  | LiF 200         | Flow            | 40               | 90               | 86.182          |
| P             | K $\alpha$  | Ge 111          | Flow            | 30               | 120              | 141.046         |

的马弗炉中灼烧 45 min, 冷却 40 min, 称量空坩埚质量 ( $m_1$ ), 反复灼烧, 直至恒重, 准确称取烘干后的试样  $[(1.0000 \pm 0.0001) \text{ g}, m_0]$  于上述瓷坩埚, 然后将瓷坩埚置于马弗炉, 逐渐升温至 1000 °C, 灼烧 100 min, 冷却 40 min, 称量坩埚和样品总质量 ( $m_2$ ), 反复灼烧, 直至恒重, 两次称量结果之差小于 0.0005 g 则认为已经恒重, 通过公式  $\text{LOI} = (m_1 + m_0 - m_2) / m_0$  计算烧失量。

常量组分的测定: 依据 GB/T 14506.28—2010 (硅酸盐岩石化学分析方法第 28 部分: 16 个主次成分量测定), 采用熔融制样-X 射线荧光光谱法测定海洋沉积物中  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 、 $\text{MgO}$ 、 $\text{CaO}$ 、 $\text{Na}_2\text{O}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$ 、 $\text{MnO}$ 、 $\text{TiO}_2$  和  $\text{P}_2\text{O}_5$  的含量。首先, 准确称取  $(0.6000 \pm 0.0001) \text{ g}$  烘干后的样品和  $(6.0000 \pm 0.0001) \text{ g}$  硼酸锂、偏硼酸锂和氟化锂混合熔剂(质量比为 45 : 10 : 5) 于铂黄坩埚中, 搅拌均匀, 使用高频熔样机制样, 700 °C 预氧化 3 min, 1000 °C 熔融 6.5 min, 将样品转移至成型模具, 冷却

后贴上标签, 采用 X 射线荧光光谱仪按照 1.1 节测量条件测定 10 种元素的强度, 理论  $\alpha$  系数校正基体效应, 代入校准曲线计算相关组分的含量。

## 2 结果与讨论

### 2.1 常量组分含量与烧失量的相关性

海洋沉积物烧失量是指在 1000 °C 灼烧后损失的部分占样品总质量的百分比。海洋沉积物主要成分包括  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 、 $\text{MgO}$ 、 $\text{CaO}$ 、 $\text{Na}_2\text{O}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$ 、 $\text{MnO}$ 、 $\text{TiO}_2$  和  $\text{P}_2\text{O}_5$ , 为了考察海洋沉积物烧失量与主成分及相应含量的关系, 依托近 2 年积累的海洋沉积物中常量组分含量和烧失量数据, 经过统计分析, 10 个常量组分与烧失量的相关系数见表 2。由表 2 可以看出,  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 、 $\text{CaO}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$  和  $\text{TiO}_2$  与烧失量有明显的相关性, 相关系数为 0.0741 ~ 0.8523, 因此, 后续研究选择  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 、 $\text{CaO}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$  和  $\text{TiO}_2$  的含量数据为预测模型训练样本的输入向量。

表 2 海洋沉积物中常量组分含量与烧失量的相关性

Table 2 Correlation between contents of major components and LOI in marine sediments

| 组分<br>Component         | 含量范围<br>Content range w/% | 相关系数<br>Correlation coefficient | 组分<br>Component        | 含量范围<br>Content range w/% | 相关系数<br>Correlation coefficient |
|-------------------------|---------------------------|---------------------------------|------------------------|---------------------------|---------------------------------|
| $\text{SiO}_2$          | 0.77~97.96                | 0.8262                          | $\text{Na}_2\text{O}$  | 0.20~9.97                 | 0.0003                          |
| $\text{Al}_2\text{O}_3$ | 0.22~30.11                | 0.1531                          | $\text{K}_2\text{O}$   | 0.15~6.31                 | 0.2878                          |
| $\text{Fe}_2\text{O}_3$ | 0.13~19.31                | 0.0741                          | $\text{MnO}$           | 0.012~4.15                | 0.0001                          |
| $\text{MgO}$            | 0.16~9.23                 | 0.0017                          | $\text{TiO}_2$         | 0.019~5.10                | 0.1195                          |
| $\text{CaO}$            | 0.19~54.08                | 0.8523                          | $\text{P}_2\text{O}_5$ | 0.018~30.14               | 0.0063                          |

### 2.2 GA-BP 神经网络模型的建立

本文探讨了 GA-BP 神经网络应用于海洋沉积物烧失量的预测, 利用 MATLAB 软件(版本 R2014a)的

GA Tool 和 Neural Net Fitting Tool 建立了 GA-BP 神经网络结构模型, 以软件自带的神经网络工具箱代码为基础, 根据研究目的修改与补充代码, 建立网络

预测模型。

### 2.2.1 BP 神经网络模型的建立

BP 神经网络包括输入层、隐含层和输出层(图 1), 同层之间没有权值连接, 数据信息向前传播, 误差逆向传播并按一定的规则修正, 网络拓扑结构如图 1(b)所示。基于 2.1 的研究结果, 与烧失量有相关性的常量组分有  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 、 $\text{CaO}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$  和  $\text{TiO}_2$ , 因此, 输入层和输出层节点数分别为 6 和 1。隐含层神经元数目影响训练效果和运算时间, 先根据经验公式初步确定隐含层神经元数为 5, 然后考察了神经元数为 4、5、6、7、8、9 和 10 时的训练效果。结果表明, 神经元数为 7 时神经网络的均方误差 (mse) 最小, 同时训练时间也较短, 本文选择 6-7-1 的网络预测模型, 隐含层激活函数选择双曲正切函数 (tansig), 输出层激活函数选择线性函数 (purelin), 学习函数选择 Bayesian (trainbr), 该函数虽然运算时间较长, 但是能在样本相对较少的情况下获取较好的泛化能力, 训练步长 1000, 训练目标 0,  $\mu$  的初始值 0.005,  $\mu$  的缩减因子 0.1,  $\mu$  的增加因子 10, 性能函数的最小梯度  $1 \times 10^{-7}$ 。

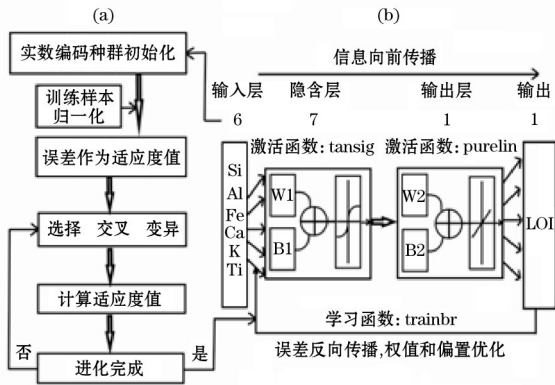


图 1 GA-BP 神经网络结构图

Fig. 1 Structure of GA-BP neural network

### 2.2.2 遗传算法模型的建立

遗传算法是基于生物进化理论和遗传变异理论, 模拟自然选择和遗传变异的生物进化过程, 适合于解决复杂的非线性问题, 算法流程见图 1(a)所示。本研究采用实数编码, 基于 2.2.1 所述 BP 网络结构模型, 每个染色体(个体)由隐含层权值、隐含层偏置、输出层权值和输出层偏置 4 个部分组成, 染色体按照权值、偏置、权值、偏置的顺序以行为单位串联编码, 长度 57(7×6+7+1×7+1)。确定种群规模为 200, 为了加快搜索速度同时又保持种群多样性, 种群初始化采用随机和指定相结合, 75% 的个体随

机产生, 25% 的个体由 BP 神经网络随机训练 50 次得到的权值和偏置组成。适应度函数选择 BP 神经网络训练性能评价函数“mse”; 选择算子采用“轮盘赌”的方式; 交叉采用两点算术交叉的方式, 交叉概率  $P_c$  取值 0.75; 变异采用基本位变异方式, 变异概率  $P_m$  取值 0.20; 进化代数选择 600。

### 2.2.3 GA-BP 神经网络的训练

为了避免常规 BP 神经网络容易陷入局部最小值的问题, 采用遗传算法优化 BP 神经网络的初始权值和偏置, 经过以适应度值为导向的选择、交叉和变异, 以及迭代进化过程, 得到适应度值最小时的权值和偏置, 然后通过 Bayesian 函数对网络进行训练, 不断修正权值和偏置, 使网络输出值逐步逼近期望值。以 4801 个海洋沉积物实际样品和标准样品中 6 个常量组分含量和烧失量数据为训练样本, 将按 1.2 节所述实验方法获取的  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 、 $\text{CaO}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$  和  $\text{TiO}_2$  的含量数据作为输入向量, 4801 个海洋沉积物样品中烧失量数据作为目标向量, 然后利用 MATLAB 编写函数(最值法)对输入向量和目标向量进行归一化处理, 将输入向量、目标向量、初始权值和偏置输入上述 BP 神经网络模型, 采用学习函数“trainbr”进行训练, 达到训练目标或最大训练步长时, 训练结束, 获取最佳隐含层、输出层权值和偏置。

### 2.3 基于 GA-BP 神经网络模型的方法精密度

选取海洋沉积物国家标准物质 GBW07309 按 1.2 节制样方式制备 7 个样片, 利用 X 射线荧光光谱仪按 1.1 节选定条件测试, 将 6 种组分的含量数据归一化后作为测试样本代入上述训练好的 BP 神经网络模型, 烧失量预测结果的相对标准偏差 (RSD) 列于表 3。从表 3 数据可见, 烧失量预测 RSD 为 1.3%。

表 3 方法精密度

Table 3 Precision of the method

| 项目<br>Item | 分次预测值<br>Predicted<br>value $w/\%$         | 平均值<br>Average<br>$w/\%$ | RSD/<br>% |
|------------|--|--------------------------|-----------|
| 烧失量        | 7.21, 7.15, 7.02, 6.97<br>7.17, 7.07, 7.18 | 7.11                     | 1.3       |

### 2.4 GA-BP 神经网络模型预测的应用

#### 2.4.1 国家标准物质烧失量的预测结果

选取未参加训练的海洋沉积物标准物质 GBW07333、GBW07334 和 GBW07314 按 1.2 节实验方法测定  $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 、 $\text{CaO}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$  和  $\text{TiO}_2$  的含

量,将6种组分的含量数据归一化后代入上述训练好的BP神经网络模型,烧失量的预测结果见表4。由表4数据可以看出,与参考值对比,预测值相对误差的绝对值为1.2%~2.1%,除GBW07334的烧

表4 标准物质烧失量的预测结果

Table 4 Prediction results of LOI in national standard materials

| 项目<br>Item | 烧失量 LOI  |          |          |
|------------|----------|----------|----------|
|            | GBW07333 | GBW07334 | GBW07314 |
| 预测值/%      | 9.82     | 21.61    | 7.35     |
| 参考值/%      | 9.70     | 22.00    | 7.20     |
| 相对误差/%     | 1.2      | -1.8     | 2.1      |

失量预测值略偏低外,预测值的相对误差均满足DZ/T 0130—2006《地质矿产实验室测试质量管理规范》的要求。

#### 2.4.2 海洋沉积物实际样品烧失量的预测结果

选取未参与BP神经网络训练的样品CJW-1、CJW-2、CJW-3和CJW-4等22个样品,按1.2节实验方法测定SiO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、CaO、K<sub>2</sub>O和TiO<sub>2</sub>的含量以及烧失量,将6种组分的含量数据归一化后代入上述训练好的BP神经网络模型,烧失量预测结果见表5,并与参考值(采用常规方法测定)对比。由表5数据可以看出,烧失量预测值与参考值比较一致,相对偏差为0.1%~6.2%,预测结果满意。

表5 海洋沉积物实际样品烧失量的预测结果

Table 5 Prediction results of LOI in marine sediment samples

| 烧失量 LOI | CJW-1  | CJW-2  | CJW-3  | CJW-4  | CJW-5  | CJW-6  | CJW-7  | CJW-8  | CJW-9  | CJW-10 | CJW-11 |
|---------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| 预测值/%   | 7.50   | 7.19   | 7.47   | 9.64   | 9.63   | 9.77   | 7.23   | 7.10   | 7.43   | 9.55   | 25.08  |
| 参考值/%   | 7.19   | 7.15   | 7.25   | 9.89   | 10.02  | 9.94   | 7.20   | 7.33   | 7.08   | 9.92   | 25.10  |
| 相对误差/%  | 4.3    | 0.6    | 3.0    | -2.5   | -3.9   | -1.7   | 0.4    | -3.0   | 4.9    | -3.8   | -0.1   |
| 烧失量 LOI | CJW-12 | CJW-13 | CJW-14 | CJW-15 | CJW-16 | CJW-17 | CJW-18 | CJW-19 | CJW-20 | CJW-21 | CJW-22 |
| 预测值/%   | 7.30   | 12.14  | 19.00  | 8.87   | 5.16   | 8.29   | 8.12   | 8.07   | 7.86   | 7.83   | 9.83   |
| 参考值/%   | 7.20   | 11.93  | 19.13  | 8.66   | 5.29   | 7.88   | 7.72   | 7.60   | 7.62   | 7.79   | 9.85   |
| 相对误差/%  | 1.4    | 1.8    | -0.7   | 2.3    | -2.4   | 5.1    | 5.3    | 6.2    | 3.1    | 0.5    | -0.2   |

### 3 结语

本研究以4801个训练样本中SiO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、CaO、K<sub>2</sub>O和TiO<sub>2</sub>等6种组分的含量数据为输入向量,4801个训练样本中烧失量的参考值作为目标向量,采用实数编码的遗传算法优化网络的初始权值和偏置,建立了海洋沉积物烧失量的GA-BP神经网络定量预测模型。该网络模型具有较强的非线性映射能力,同时避免陷入局部最小值,适合于海洋沉积物样品中烧失量的预测,结果令人满意,为烧失量的测定提供了一种新的途径。本方法简单高效,可依据X射线荧光光谱法获取的常量组分结果预测烧失量,但对于部分有机碳含量较高的样品,烧失量的预测结果与参考值存在一定偏差,今后需要改进预测模型,以实现烧失量更为准确的定量分析。

### 参考文献:

[1] 刘子亭,余俊清,张保华,等.黄旗海岩芯烧失量分析与冰后期环境演变[J].盐湖研究,2008,16(4):1-5.  
LIU Zi-ting, YU Jun-qing, ZHANG Bao-hua, et al. Investigation on loss-on-ignition of lake Huangqihai core and post-glacial environmental evolution[J]. Journal of Salt

Lake Research, 2008, 16(4): 1-5.  
[2] 杨冰洁,余凤玲,郑卓,等.南澳岛青澳湾沉积物粒度与烧失量指示的全新世沉积环境变化[J].海洋地质与第四纪地质,2015,35(6):41-51.  
YANG Bing-jie, YU Feng-ling, ZHENG Zhuo, et al. Changes in holocene depositional environment of Qin'ao embayment on Nan'ao island inferred from sediment grain-size and loss-on-ignition[J]. Marine Geology & Quaternary Geology, 2015, 35(6): 41-51.  
[3] 胡彩莉,马玉贞,郭超,等.烧失量法测定土壤有机质含量的实验条件探究[J].地球与环境,2016,44(1):110-118.  
HU Cai-li, MA Yu-zhen, GUO Chao, et al. Optimization of the experiment conditions for estimating organic matter content with loss-on-ignition method[J]. Earth and Environment, 2016, 44(1): 110-118.  
[4] 陈钢花,胡琮,曾亚丽,等.基于BP神经网络的碳酸盐岩储层缝洞充填物测井识别方法[J].石油物探,2015,54(1):99-104.  
CHEN Gang-hua, HU Zong, ZENG Ya-li, et al. Logging identification method of fillings in fractures and cavers in carbonate reservoir based BP neural network[J]. Geophysical Prospecting for Petroleum, 2015, 54(1): 99-104.  
[5] 徐星,孙光中,田坤云.GA-BP神经网络在煤矿突水水源判别中的应用[J].煤炭技术,2018,37(10):172-174.

- XU Xing, SUN Guang-zhong, TIAN Kun-yun. Application of GA-BP neural network in discrimination of water inrush source in coal mine[J]. Coal Technology, 2018, 37(10): 172-174.
- [6] 聂敏, 刘志辉, 刘洋, 等. 基于PCA和BP神经网络的径流预测[J]. 中国沙漠, 2016, 36(4): 1144-1152.
- NIE Min, LIU Zhi-hui, LIU Yang, et al. Runoff forecast based on principal component analysis and BP neural network[J]. Journal of Desert Research, 2016, 36(4): 1144-1152.
- [7] 张青, 王学雷, 张婷, 等. 基于BP神经网络的洪湖水质指标预测研究[J]. 湿地科学, 2016, 14(2): 212-218.
- ZHANG Qing, WANG Xue-lei, ZHANG Ting, et al. Prediction of water quality index of Honghu lake based on back propagation neural network model[J]. Wetland Science, 2016, 14(2): 212-218.
- [8] 李强, 刘坚, 李小穗, 等. 基于遗传算法的BP神经网络模型在岩心扫描仪测定海洋沉积物多种组分中的应用研究[J]. 岩矿测试, 2016, 35(5): 488-495.
- LI Qiang, LIU Jian, LI Xiao-sui, et al. Determination of multi-components in marine sediments by core scanner based on BP neural network of genetic algorithm[J]. Rock and Mineral Analysis, 2016, 35(5): 488-495.
- [9] 李家文, 赖华, 冯丽辉. 基于神经网络与LabVIEW平台建立焊锡真空炉粗锡含铅量的软测量模型与在线监测研究[J]. 冶金分析, 2017, 37(2): 1-6.
- LI Jia-wen, LAI Hua, FENG Li-hui. Research on soft measurement model and on-line monitoring of lead content in crude tin in solder vacuum furnace based on neural network and LabVIEW[J]. Metallurgical Analysis, 2017, 37(2): 1-6.
- [10] 邹孝恒, 郝中骐, 易荣兴, 等. 基于遗传算法和偏最小二乘法的土壤激光诱导击穿光谱定量分析研究[J]. 分析化学, 2015, 43(2): 181-186.
- ZOU Xiao-heng, HAO Zhong-qi, YI Rong-xing, et al. Quantitative analysis of soil by laser-induced breakdown spectroscopy using genetic algorithm-partial least squares[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2015, 43(2): 181-186.
- [11] 林志贵, 杜军兰, 冯林强, 等. 长江口流域亚硝酸盐预测模型与分析[J]. 海洋技术学报, 2017, 36(1): 80-85.
- LIN Zhi-gui, DU Jun-lan, FENG Lin-qiang, et al. Analysis on the prediction model of nitrite in the Yangtze river estuary[J]. Journal of Ocean Technology, 2017, 36(1): 80-85.
- [12] 李颖娜, 徐志彬, 刘双龙. 遗传神经网络-X射线荧光光谱法测定铁矿石中铅砷[J]. 冶金分析, 2017, 37(10): 22-26.
- LI Ying-na, XU Zhi-bin, LIU Shuang-long. Determination of lead and arsenic in iron ore by X-ray fluorescence spectrometry based on genetic neural network[J]. Metallurgical Analysis, 2017, 37(10): 22-26.
- [13] 范晓东, 邱波, 刘园园, 等. 一种基于遗传优化的BP神经网络的测光红移估计算法[J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(8): 2374-2378.
- FAN Xiao-dong, QIU Bo, LIU Yuan-yuan, et al. A photometric redshift estimation algorithm based on the BP neural network optimized by genetic algorithm[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2018, 38(8): 2374-2378.

## Application of BP neural network to the prediction of loss on ignition in marine sediments based on genetic algorithm

LI Qiang, ZHANG Xue-hua

(Guangzhou Marine Geological Survey, Guangzhou 510760, China)

**Abstract:** Loss on ignition is an important index for the marine geological study. The determination of loss on ignition by conventional method is time-consuming. Moreover, the requirements for analysis environment are relatively high. Based on the correlation between loss on ignition and the contents of  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CaO}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$  and  $\text{TiO}_2$ , BP neural network model was introduced to predict the loss on ignition using its nonlinear fitting ability. The loss on ignition and the contents of  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CaO}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$  and  $\text{TiO}_2$  in many ocean sediment samples were used as training pattern. The initial weights and biases of BP neural network were optimized by genetic algorithm. The experiments showed that the prediction model of loss on ignition for ocean sediments could be successfully established based on genetic algorithm (GA)-BP neural network. The loss on ignition of ocean sediments was predicted by GA-BP neural network on the basis of analysis data using X-ray fluorescence spectrometry (XRF). The relative standard deviation

(RSD) was 1.3%. The relative deviation absolute value of prediction values and reference values was in range of 0.1%-6.2% for standard samples and actual samples of ocean sediment. The proposed study provided a new and effective route for the determination of loss on ignition.

**Key words:** genetic algorithm; neural network; marine sediment; loss on ignition; X-ray fluorescence spectrometry

欢迎订阅 欢迎投稿 欢迎刊登广告

## 《冶金分析》2019 年征订启事

国内统一刊号:CN11-2030/TF

国际标准刊号:ISSN1000-7571

国际 CODEN:YEFEET

邮发代号:82-157

国外代号:1579M

京海工商广字第 8276 号

《冶金分析》由中国钢研科技集团有限公司和中国金属学会主办。作为冶金领域中权威的分析技术专业期刊,《冶金分析》的办刊宗旨是为广大冶金分析测试工作者搭建学术交流平台。自 1981 年创刊以来,《冶金分析》以高度的创新精神和严谨的科学态度,动态反映冶金领域分析测试新技术、新方法、先进经验,报导研究成果,发表综述文章,并介绍国内外冶金分析动态等。适合于冶金、矿山、石油、化工、机械、地质、环保、商检等部门技术人员和大专院校师生参考。

《冶金分析》是中国科技论文统计源期刊、中国科学引文数据库的核心库期刊、全国中文核心期刊、美国"CA"千种表中国化工类核心期刊,并为荷兰 SCOPUS 数据库、美国《剑桥科学文摘》、英国《皇家化学学会系列文摘》、中国知网(CNKI)、万方数据资源系统、中文科技期刊数据库等国内外知名数据库所收录。

《冶金分析》为月刊,大 16 开,单期页码为 80 页,定价 30.00 元,全年 12 期,360.00 元。全国各地邮局发行,如有漏订的单位和读者,请直接与编辑部联系。

欢迎订阅! 欢迎投稿! 欢迎刊登广告!

电话:010-62182398

地址:北京海淀区学院南路 76 号(100081)

网址:<http://www.chinamet.cn>

E-mail:[yjfx@analysis.org.cn](mailto:yjfx@analysis.org.cn)