

· 计算机技术 ·

# UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 降解微囊藻毒素的人工神经网络模型

王文清 高乃云 黎 雷

(同济大学污染控制与资源化国家重点实验室, 上海 200092)

**摘要** 试验建立了 UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 高级氧化工艺降解微囊藻毒素 MG-LR 的人工神经网络模型。研究了 UV 强度、H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 投加量、MG-LR 初始浓度、pH 等对降解速率的影响, 并以反向传播算法的神经网络模型对多因素条件下的降解效果进行仿真预测。结果表明, 降解速率不受初始 MG-LR 浓度的影响; UV 的加强及 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 投加量的增加能有效提高 MG-LR 的降解速率; pH 的降低能大幅度改善降解效果, 尤其在酸性条件下, pH 的变化对降解速率的影响程度更大。

**关键词** 微囊藻毒素 UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 人工神经网络 模型 动力学

## Artificial neural network model of *microcystin*-LR degradation by advanced oxidation

Wang Wenqing, Gao Naiyun, Li Lei

(State Key Laboratory of Pollution Control and Resource Reuse,  
Tongji University, Shanghai 200092, China)

**Abstract:** An artificial neural network (ANN) model of *microcystin*-LR (MG-LR) degradation by UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> advanced oxidation process was set up. The effects on degradation rate from the influencing factors, such as the intensity of UV radiation, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> dose, MG-LR initial concentration, and pH value were studied, and the degradation effects under various influencing factors were simulated and predicted by reverse transportation calculation ANN model. The results indicated the degradation rate was invariable with different MG-LR initial concentrations; the increase of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> dose and intensity of UV radiation could improve the MG-LR degradation rate effectively; the decline of pH value could enhance the degradation effect obviously, especially in acidity condition.

**Keywords:** *Microcystin*-LR (MG-LR); UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>; Artificial neural network; Model; Kinetics

近年来世界范围内水体藻类频繁暴发, 由此引起的人畜中毒甚至死亡的事件时有发生<sup>[1-2]</sup>。在淡水藻中产生毒素最多的是蓝藻, 其中又以微囊藻毒素(MC)在蓝藻水华污染中出现频率最高、产量最大、造成危害最严重。微囊藻毒素是一类环状多肽类物质, 具有很强的肝毒性<sup>[3-5]</sup>。

国内外对各种高级氧化技术去除水中有机物的动力学模型已经有很多研究, 但多采用准一级和二

级降解模型, 此模型的前提是各影响因素均不变, 比较适合实验室控制下的单一试验条件, 很难与实际水体相符合。因此需提出一种能模拟复杂试验条件下的有机物降解模型。本试验提出采用人工神经网络建立紫外光/双氧水(UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)降解微囊藻毒素的动力学模型, 以期对试验和实际中降解藻毒素提供理论参数指导。人工神经网络(Artificial Neural Network, ANN)是一类模拟生物神经系统的结构, 可灵活方便地对多成因复杂未知系统进行高度建模<sup>[6,7]</sup>。难降解有机物在不同条件下进行降解时, 各种影响因素互相干扰, 本研究基于人工神经网络的反向传播算法(Back Propagation, BP), 建立 UV/

“十一五”国家科技支撑计划项目(2006BAJ08B06, 2007BAC26B03); 国家科技重大专项资助(2008ZX07421-002); 上海市科委重点科技项目(072312001)。

H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 工艺降解微囊藻毒素 MG-LR 的神经网络模型, 并仿真多因素同时变化时 MG-LR 降解的动力学趋势。Matlab 软件提供的神经网络工具箱( Neural Network Toolbox, 简称 NNT), 使利用这一方法建模变得更为便利。

### 1 BP 神经网络基本理论

多层 BP 网络不仅有输入节点、输出节点, 而且有一层或多层隐节点, 如图 1 所示。模型建立时需经历学习和训练过程, 由传递函数计算得到模型的输出值, 仿真输出与目标输出之间的误差反馈给模型进行参数( 权值、阈值) 修正, 修正之后又得到新的输出值, 继续与目标输出进行对比, 如此循环最终得到合适的网络模型。

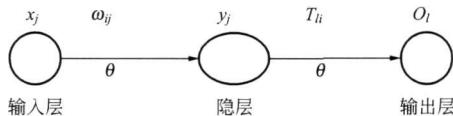


图 1 BP 网络模型结构

网络模型训练时的指导思想是, 根据当前误差对网络权值(  $\omega_{ij}$ ,  $T_{ik}$ ) 及阈值(  $\theta$ ) 进行修正, 使误差函数(  $E$ ) 沿梯度方向下降。BP 网络的三层节点表示为, 输入节点  $x_j$ 、隐节点  $y_i$ 、输出节点  $O_l$ 。输入节点与隐节点间的网络权值为  $\omega_{ij}$ , 隐节点与输出节点间的网络权值为  $T_{ik}$ 。当输出节点的期望输出为  $t_l$  时, BP 模型的计算公式为<sup>[8]</sup>:

隐节点的输出:

$$y_i = f \left( \sum_j \omega_{ij} x_j - \theta \right) \quad (1)$$

输出节点的计算输出:

$$O_l = f \left( \sum_j T_{lj} y_j - \theta \right) \quad (2)$$

输出节点的误差公式:

$$E = \frac{1}{2} \sum_l (t_l - O_l)^2 = \frac{1}{2} \sum_l \left\{ t_l - f \left( \sum_j T_{lj} f \left( \sum_j \omega_{ij} x_j - \theta \right) - \theta \right) \right\}^2 \quad (3)$$

## 2 材料与方法

### 2.1 试验设备

试验采用自制反应器, 紫外灯( 飞利浦) 主波长为 254 nm, 功率 75 W。

### 2.2 微囊藻毒素提取

太湖蓝藻暴发期间, 在无锡太湖流域收集蓝藻藻华, 晒干、捣磨制成干藻粉冷藏备用。准确称量 2 g 干藻粉, 加入 100 mL 去离子水溶解, 在室温下磁力搅拌 30 min, 然后放入 - 20 °C 的冰箱冷冻 12 h, 取出在常温下融解, 再进行冷冻, 如此操作反复 3 次。经过冻融的藻溶液离心 10 min(7 000 r/min), 收集上清液, 管底物质重复离心步骤 3 次, 上清液合并, 再经过 0.45 μm 的乙酸纤维滤膜, 得到藻毒素提取液。通过此方法, 能从 1 g 干藻粉中提取 0.227 mg 的 MG-LR。

### 2.3 分析方法

MG-LR 的浓度用高效液相色谱仪( 岛津 LG-2010AHT) 测定, 色谱柱为 BDS-C18 反相色谱柱(5 μm, 150 × 4.6 mm), 测试条件为: 流量 0.8 mL/min, 流动相体积配比为甲醇: 磷酸缓冲溶液( pH=3) = 57: 43; 检测波长 238 nm; 柱温 40 °C; 分析时间 15 min, MG-LR 的响应时间 12.5 min。pH 采用雷磁 PHS-3C 精密 pH 计测定。

### 2.4 模型的建立及分析方法

以 MG-LR 初始浓度、H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 投加量、UV 强度、pH、反应时间作为影响因素, 分别选取不同水平进行试验, 具体反应条件见表 1。选择工况时前面四个因素固定其中三个在黑体加粗的水平上, 改变另一个因素并对不同的时间进行试验, 总计 94 组试验数据。以这 5 个因素作为模型的输入层, 以 MG-LR 剩余百分率的对数为输出层。将 94 组数据中的 89 组进行归一化之后作为 ANN 的训练样本, 另外的 5 组数据作为检验样本。利用 Matlab 软件 NNT 工具箱中提供的人工神经网络反向传播算法( BP), 将训练样本输入训练模型, 以软件默认的初始权值和阈值, 设定目标均方差为  $1 \times 10^{-5}$ , 目标梯度为  $1 \times 10^{-6}$ 。当模型的训练达到精度要求后, 结束训练并输入检验样本数据。以检验样本输出值与试验值的平均相对误差来表征所建 ANN 模型的精度。确立了模型的训练函数以及各项参数后, 利用 Matlab 软件神经网络工具箱中的仿真函数( sim) 仿真出不同反应条件下 UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 降解 MG-LR 的数据, 并用三维绘图函数( mesh) 将仿真的数据绘制成三维图, 以直观分析各降解因素的影响情况。

表1 试验条件

UV 强度 / $\mu\text{W}/\text{cm}^2$	$\text{H}_2\text{O}_2$ / $\text{mmol}/\text{L}$	pH	$(\text{MG-LR})_0$ / $\mu\text{g}/\text{L}$	时间/ $\text{min}$
153.00	0	3.13	304.4	0
76.50	1	5.28	228.3	3
38.25	2	7.20	152.2	8
19.12	3	9.60	76.1	14
		11.55		23.5
				32
				50
				90

### 3 结果与讨论

#### 3.1 ANN 网络模型参数的讨论和检验

##### 3.1.1 试验数据归一化处理

通过试验所收集的数据往往不在同一个数量级,将所收集的数据映射到 $[-1, 1]$ 之间进行归一化处理,有利于提高神经网络的训练速度。使用较多的归一化算法如式(4)所示:

$$pn = 2 \times (p - \min p) / (\max p - \min p) - 1 \quad (4)$$

式中  $p$  —— 某一变量(包括输入层和输出层)每次试验取值所组成的一组数据;  
 $\max p$ 、 $\min p$  —— 该组数据的最大值和最小值;  
 $pn$  —— 通过归一化映射之后的数据。

##### 3.1.2 网络结构的确定

虽然一些定理研究了BP网络拓扑结构的映射能力和容量能力,但并不存在一个普遍的最佳隐层层数和节点数,即网络结构的大小。网络结构过小, BP网将不具有相应的映射能力和容量能力,且可能产生过训练;相反结构过大将导致网络的过拟合现象,这时得到的ANN模型虽然训练速度快,训练误差很小,但自由度太大,不能真正学到系统的规律,没有泛化能力<sup>[9]</sup>。目前一般按一个输入单元选取4~5个隐层节点,或根据试验公式来确定。考虑到该模型因素较多、训练样本数据量很大(87组数据),这里将双层网络模型4-16-1与三层网络模型4-16-10-1(输入层节点数-第一层隐层节点数-第二层隐层节点数-输出层节点数)进行对比训练,训练函数直接选用Matlab工具箱中有弹回的BP算法(trainrp),结果如表2所示。结果表明,两种不同网络结构的精度差距不大,但双层网络模型的训

表2 不同网络结构的模型精度和训练次数

BP 网络结构	4-16-1	4-16-10-1
平均相对标准偏差/%	4.06	4.00
训练次数/次	4 412 787	46 474

练次数远远大于三层网络模型,训练时间很长,因此这里选用三层网络模型4-16-10-1。

##### 3.1.3 学习方法的确定

Matlab 软件的 NNT 工具箱提供了多种训练网络模型的训练函数(学习方法),以前面选取的三层网络结构为基础,分别采用标准BP算法(traingd)、有弹回的BP算法(trainrp)、共轭梯度BP算法(traincgf)建立UV/ $\text{H}_2\text{O}_2$ 降解MG-LR的神经网络模型,其精度和训练次数如表3所示。结果表明,标准BP算法与有弹回的BP算法精度相当,但前者训练次数远远大于后者,训练时间很长。共轭梯度BP算法因最小步拍(minstep)很快达到限值而无法继续训练,所以训练失败。因此,对比之下这里采用有弹回的BP算法(trainrp)作为该网络模型的学习方法。

表3 不同学习方法的模型精度和训练次数

学习方法	traingd	trainrp	traincgf
平均相对标准偏差/%	3.87	4.00	训练失败
训练次数/次	1 696 424	46 474	—

##### 3.1.4 模型的检验

通过上面对模型结构和算法的反复比较以及模型训练参数的优化调整,最终模型结构确定为4-16-10-1,即四个输入节点,16个一层隐层节点,10个二层隐层节点,1个输出节点,学习算法采用有弹回的BP算法(trainrp),且所有的试验数据均进行归一化处理以提高训练速度和模型精度。该模型对5个检验样本的平均相对误差为4.00%,模型预测值与检验样本的试验值对比如图2所示。

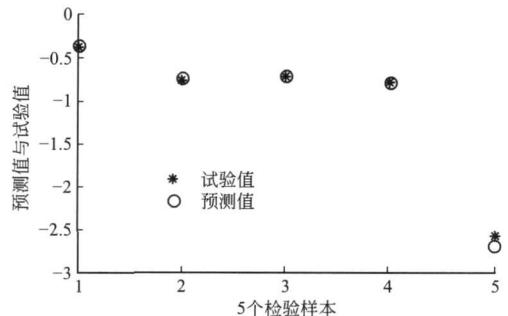


图2 模型预测值与试验值的对比

### 3.2 多因素变化时 UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 降解 MG-LR 的动力学仿真及分析

#### 3.2.1 不同的 MG-LR 初始浓度及反应时间

在 UV 强度为 153 μW/cm<sup>2</sup>、H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 浓度为 2 mmol/L、pH 为 7.2 的条件下,利用该网络模型仿真出不同 MG-LR 初始浓度及不同反应时间下的降解效果,如图 3 所示。结果显示,不同初始浓度的 MG-LR 在相同的反应时间内其降解趋势基本一致,这表明在保证 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 浓度远远大于 MG-LR 浓度的前提下,降解速率不受 MG-LR 初始质量浓度的影响。

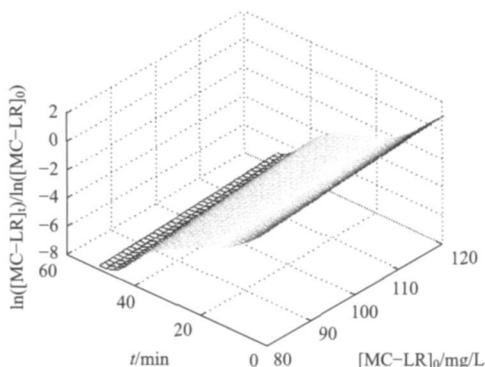


图 3 不同 MG-LR 初始浓度及反应时间下的降解效果

#### 3.2.2 不同的 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 浓度及反应时间

在 UV 强度为 153 μW/cm<sup>2</sup>、MG-LR 初始浓度为 152.2 μg/L、pH 为 7.2 的条件下,利用该网络模型仿真出不同 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 浓度及不同反应时间下的降解效果,如图 4 所示。结果表明,随着 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 投加量的增加, MG-LR 的去除率也同时增加,降解速率提高很明显。这是因为增加 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 浓度可以增加 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 分子攻击 MG-LR 的双键和氨基的几率,同时在紫外光的照射下,激发产生更多的羟基自由基·OH,

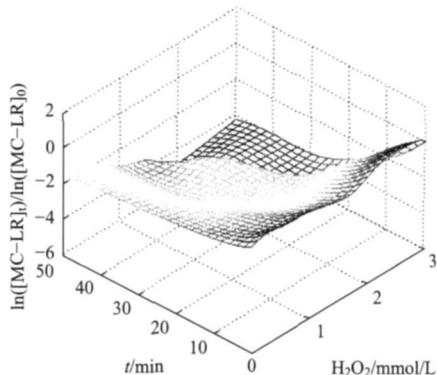


图 4 不同 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 浓度及反应时间下的降解效果

从而增强了氧化分解 MG-LR 的能力,提高了降解速率。因此适当地增加 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 的投加量对提高降解效率的作用非常明显。

#### 3.2.3 不同的 pH 及反应时间

在 UV 强度为 153 μW/cm<sup>2</sup>、MG-LR 初始浓度为 152.2 μg/L、H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 浓度为 2 mmol/L 的条件下,利用该网络模型仿真出不同 pH 及不同反应时间下的降解效果,如图 5 所示。结果表明, MG-LR 在酸性条件下降解很快,随着 pH 的增加,降解速率逐渐降低。另外从图 5 中可看出,在 pH < 7.0 时,曲面坡度比较大,而在 pH > 7.0 时,曲面坡度很小,基本上为平面。这说明在酸性条件下 pH 的变化对降解速率的影响程度相对较小。

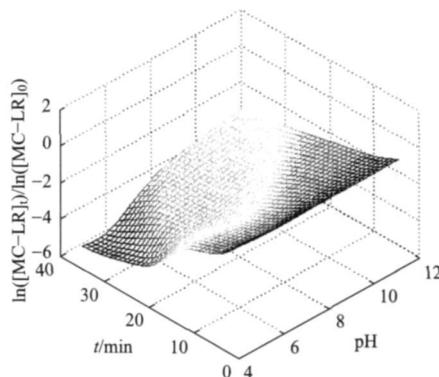


图 5 不同 pH 及反应时间下的降解效果

## 4 结论

(1) 运用人工神经网络的非线性函数动态处理能力,可有效地建立高级氧化技术降解微囊藻毒素 MG-LR 的神经网络动态模型,与一般模型相比,该模型与试验数据具有更高的相关度,其预测范围和能力更强,从而为试验及实际降解 MG-LR 提供理论指导。

(2) 采用 UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 高级氧化技术能有效地降解 MG-LR,根据模型计算结果,其降解速率与 MG-LR 的初始浓度无关。

(3) UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 降解 MG-LR 的速率受 pH、H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 投加量的影响较大。降解速率随 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 投加量的增加而提高;随 pH 的升高而降低,尤其是酸性条件下反应速率提高很明显。

(4) 为了进一步提高模型的精度应加大样本的总量,以避免神经网络容错性较差,造成不能识别新样本使误差增大。该模型的泛化能力和稳健性还需

# 大丰市二水厂自控系统防雷整改方案浅析

冯小卫 陈春平 李明明

(大丰市自来水有限公司, 大丰 224100)

**摘要** 大丰市第二水厂地处江苏省沿海滩涂湿地平原, 由于地理位置和地貌特征的影响, 投产以来曾屡次遭受雷击, 造成大量电子设备的损坏。分析了大丰市二水厂自控系统防雷现状及隐患, 从配电系统、工业控制网、户外仪器仪表、监控系统、通讯系统和合理接地等几个方面入手, 采用接闪、分流、均压、屏蔽、接地等手段, 进行全方位的防雷防过电压保护。

**关键词** 自控系统 防雷 地电位反击 瞬态过电压

## 0 概述

雷电是一种自然界中极为壮观的声、光、电作用的自然现象, 但雷电巨大电场能量的集中释放所产生的破坏力却是极其巨大的。大丰市第二水厂地处江苏省沿海滩涂湿地平原, 属多雷区。二水厂由于地理位置和地貌特征的影响, 投产以来曾屡次遭受雷击。随着电气自动化控制在水处理行业的普及, 使得大量自动化微电子设备在水处理工艺中随处可

见, 而其对雷电的抵御承受力却是十分脆弱的, 一旦遭受雷电、浪涌过压的冲击, 轻则造成控制系统的运行中断; 重则造成设备永久性损坏, 相关生产系统瘫痪; 而给水行业的一个显著特点是不可替代性和工作的连续性, 生产系统一旦瘫痪将造成不可估量的损失和影响, 由此可见, 对自动化设备采取行之有效的防雷保护是二水厂自控系统一项必不可少的重要措施。

进一步研究, 以保证模型预测的可靠性。BP 神经网络的训练速度较慢且可能陷入局部极小点, 针对此有人提出动态模糊神经网络<sup>[10, 11]</sup>。

(5) 以后的研究中该模型可以进一步改进, 以降解毒单位 MG-LR 所消耗成本作为模型的第二个输出节点。即同时考虑去除效果与消耗成本, 得到功能更全、更实用的网络模型。

## 参考文献

- Jacquet C, Thermes V, Luze A, et al. Effects of microcystin-LR on development of medaka fish embryos (*Oryzias latipes*). *Toxicol*, 2004, 43(2): 141~ 147
- Azevedo S M F O, Carmichael W W, Jochimsen E M, et al. Human intoxication by microcystins during renal dialysis treatment in Caruaru-Brazil. *Toxicology*, 2002, 181-182 ( 27): 441~ 446
- 柳丽丽, 钟儒刚, 曾毅. 微囊藻毒素及其毒性研究进展. *卫生研究*, 2006, 35(2): 247~ 249
- Kujbida P, Hatanaka E, Campa A, et al. Effects of microcystins on human polymorphonuclear leukocytes. *Biochem Biophys Res Commun*, 2006, 341(1): 273~ 277
- Karim M, Daniele P, Simone P D, et al. Global quantitative analysis of protein expression and phosphorylation status in the liver of the medaka fish (*Oryzias latipes*) exposed to microcystin-LR I. *Balnearion study. Aquat Toxicol*, 2008, 86 ( 2): 166~ 175
- 叶晓, 黄小葳, 俞军, 等. 基于 BP 神经网络建立姬松茸多糖超滤分离模型. *化学研究与应用*, 2006, 18(9): 1210~ 1213
- 阎平凡, 张长水. *神经网络与模拟进化计算*. 北京: 清华大学出版社, 1999. 102~ 103
- 闻新, 周露, 李翔, 等. *Matlab 神经网络仿真与应用*. 北京: 科学出版社, 2003. 258~ 260
- 伍世虞, 徐军. *动态模糊神经网络——设计与应用*. 北京: 清华大学出版社, 2008. 17~ 18
- Er M J, Li Z, Cai H. Adaptive noise cancellation using enhanced dynamic fuzzy neural network. *Fuzzy Systems*, 2005, 13(3): 331~ 341
- Er M J, Wu S Q. A fast learning algorithm for parsimonious fuzzy neural systems. *Fuzzy Sets and Systems*, 2002, 126(3): 337~ 351

✉ 通讯处: 200092 上海市四平路 1239 号同济大学环境学院明净楼 209 室  
 电话: (021) 65982691  
 E-mail: gaonaiyun1@126.com  
 收稿日期: 2009-04-14