# 基于混合神经网络模型的污水 COD 值预估法

方 骏, 戴连奎

(浙江大学 智能系统与决策研究所,浙江 杭州 310027)

摘 要: 提出了| 种基于物理测量的 COD 值快速预估方法,它采用混合神经网络模型直接 由UV分光光度计测得的吸光度数据预估出水样的 COD 值。实例分析表明,采用该混合模型具 有比常规的 BP 网络和传统回归模型更好的预估精度,同时混合模型的预估值与标准分析值之间 也有着良好的相关性。

关键词: 水质分析; COD; 混合神经网络模型 中图分类号: X832 文献标识码: A 文章编号: 1000-4602(2003)12-0006-05

# Prediction Method for Wastewater COD Based on Hybrid Neural Network Model

FANG Jun, DAI Lian-kui

(Research Institute of Intelligent System and Decision- making, Zhejiang University,

Hangzhou 310027, China)

**Abstract:** A rapid *COD* prediction method was presented based on physical measurement. It adopted the hybrid neural network to predict *COD* value of water sample based on absorbency data measured directly by UV spectrophotometer. The case study showed that the hybrid model is more accurate in predicting *COD* than the conventional BP network and traditional regression model, and shows good correlation between prediction value and normal analytical data.

Keywords: water quality analysis; COD; hybrid neural network model

现有的 COD 测量方法中绝大部分为化学计量 法<sup>[1~6]</sup>,大都存在需使用化学试剂、测量速度不能 满足实时性要求及需要一定维护工作量的缺点。相 反,基于 UV 光谱测量数据进行 COD 值检测的方 法(UV 法)便显示了极大的优势:无需化学试剂、可 以进行瞬时和连续分析、具有极好的测量重现性、日 常维护量极小。关于利用 UV 光谱测量数据进行 COD 值检测的方法已有一些研究成果,Mrkva 得出 了水样 COD 值与 254 nm 的 UV 吸光度数据呈线 性关系的结论; Matsche 与 Stumwohrer 利用 258 和 380 nm 的 UV 吸光度数据建立了其与 COD 值相关 的回归模型<sup>[7]</sup>; 张凤丽等认为, 水体中污染物含量 (如 COD、 $BOD_5$ 等) 常与某一波长的原始波谱数据 成一定的函数关系<sup>[8]</sup>; Azedine、Antoine 和 Patrick 提出了基于 BP 神经网络的水质 COD 值预估方法, 取得了良好的预测效果<sup>[9]</sup>。

由于 BP 网络存在收敛速度慢、易陷入局部最 小点等局限性,笔者提出了一种由多项式模型和多 层前向神经网络构成的混合神经网络模型。同时, 提出的训练算法可以自行确定多项式拟合中的有效 拟合项,自动产生最简化的多项式模型;另外该算法 可以根据拟合精度的要求自动确定多层前向网络的

基金项目: 国家高技术研究发展计划(863)资助项目(9845005)

隐节点数, 这样的设计可以确保生成具有最少隐节 点数的前向神经网络, 即生成具有最大范化能力的 预测模型。

1 训练样本的获取与特征频率提取

*COD* 值预估方法是根据 UV 分光光度计测得 的吸光度数据和经直接化学分析得到的水样 *COD* 值训练混合神经网络模型, 然后利用训练得到的模 型直接估计未知水样的 *COD* 值。所采用的样本数 据来自54 次采样的城市污水, 利用 UV 分光光度计 得到各自对应的光强数据, 即原始 UV 谱图(采用如 图 1 所示的测量过程获取)。



图 1 UV 光谱测量过程示意图

接着,利用下式计算得出各个水样的吸光度:

$$A = \log \frac{I_0 - I_{\text{dark}}}{I - I_{\text{dark}}} \tag{1}$$

式中 A ——吸光度

I ——透射光强度

I<sub>0</sub> ——入射光强度

Idark —— 暗光谱的强度

在得到如图 2 所示的吸收光谱后采用重铬酸钾 法获得每个水样的实际 COD 值。



#### 图 2 污水样品的吸收光谱

由于全波段的吸光度数据中只有部分波长区域 的值与水样的 *COD* 值相关性较强,具有相对重要 的建模信息,为此在训练混合模型之前必须进行吸 收光谱的特征波段选取工作。采用相关性分析方法 选取特征波段时,为消除因样本差异对 *COD* 值产 生的影响,分别求取奇数组样本、全部样本、偶数组 样本和对应水样 COD 值的相关系数,进而进行综 合分析。以三组相关系数值都最接近为原则,从全 波段中选取 3 个特定波段(254、265、360 nm)的吸 光度数据作为建模时的输入数据。于是,就可以根 据训练样本的特征光谱数据与对应的 COD 分析值 来建立数据模型以期对未知水样的 COD 值进行预 测。

2 混合神经网络模型的建立

采用 U V 法检测 *COD* 值的关键在于建立吸光 度数据与*COD* 分析值之间合适的数学模型,即基于 样本数据{xi(k), y(k) | i= 1, 2, ..., n; k= 1, 2, ..., p}[其中 *n* 为特征波段数, *p* 为训练样本数,  $x_i(k)$ 为各样本在特征波段所对应的吸光度数据, y(k)为 水样的 *COD* 分析值] 建立 *COD* 预估模型,并可描 述为:

$$y(t) = f(x_1(t), ..., x_n(t))$$
 (2)

式中  $\hat{y}(t)$  — 未知水样的 COD 预估值  $x_1(t), \dots, x_n(t)$  — 未知水样于特征波段

的吸光度数据

针对 BP 神经网络建模方法存在的收敛速度 慢、易陷入局部极小点以及隐节点数目不易确定等 问题,提出了一种具有最简化结构的混合神经网络 模型。

该混合模型的结构如图 3 所示, 其输入为  $x_1$ (k),  $x_2(k)$ , ...,  $x_n(k)$ , 输出变量为  $\hat{y}(k) = \sum_{j=1}^{m} \hat{y}_j$ (k)+  $\hat{y}_0(k)$ , 其中  $\hat{y}_0(k)$ 为多项式模型的输出, 最 简化的多项式模型可以描述为:

$$\hat{y}_{0}(k) = \alpha_{0} + \sum_{i=n_{1}}^{n_{2}} \alpha_{x}_{i}(k) + \sum_{i=k_{1}j=m_{1}}^{k_{2}} \sum_{m_{1}}^{m_{2}} b_{ij}x_{i}$$

$$(k) x_{j}(k)$$
(3)

而  $\hat{y}_j(k)(j = 1, 2, ..., m)$ 为混合模型中 3 层前 向神经网络的 *m* 个输出值:

$$\hat{y_j}(k) = v_j \hat{z_j}(k) + v_{0j}$$
 (4)

$$\hat{z_j}(k) = f(\hat{h_j}(k)) \tag{5}$$

$$\hat{h}_{j}(k) = \sum_{i=1}^{n} x_{i}(k) w_{ij} + w_{0j}$$
(6)

式中  $\hat{h}_{j}(k)$  — 第 *j* 个隐层节点的输入  $\hat{z}_{j}(k)$  — 隐层的第 *j* 个隐节点输出  $w_{ij} \subseteq w_{0j}$  — 隐层输入权值  $y_{j}$ 和 $y_{0j}$  — 输出权值 游前向神经网络的隐层激发感物采用。

该前向神经网络的隐层激发函数采用 Sigmoid



### 图 3 混合神经网络模型结构示意图

混合神经模型学习算法的实现如图 4 所示, 其 中y(k)表示混合模型的期望输出, e(k)为模型最终 的拟合误差。首先基于样本数据{ $x_i(k), y(k)$  i =1, 2, ..., n; k = 1, 2, ..., p}采用逐步回归的方法, 构 造具有最简化形式的二次多项式模型; 然后将此多 项式模型输出与期望输出的拟合误差  $\Delta y_1(k)$ 作为 前向网络学习的期望输出。对于前向神经网络, 采 用逐步增加隐节点的方法来提高拟合精度, 而隐节 点数完全根据拟合误差的改善状况自动决定。



#### 图 4 学习算法设计示意图

采用线性最小二乘法对网络权值进行估计和调整。这里仅讨论第一个隐节点的引入与相应的权值 学习方法。先根据人为预定的隐层节点输出值的变 化范围和期望的模型输出值来确定隐层输出权值 v<sub>1</sub>和阈值 v<sub>01</sub>,由此求得隐节点的期望输出 z<sub>1</sub>(k), 再对隐层节点函数求逆运算,得出隐节点的输入期 望值 h<sub>1</sub>(k)。因为输入节点采用线性函数神经元, 因此可以利用线性最小二乘法确定隐层输入权值 w<sub>i1</sub>(i=0,1,2,...,n)。接着,在固定隐层输入权值 后进行正向计算,再利用线性最小二乘法对多项式 模型的参数和隐层输出权值进行重新计算。如果不 能符合精度要求,则增加一个新的隐节点。重复上 述计算过程,直至满足预定义的精度要求或直到增 加一个新的隐节点对减小误差作用不大为止。

实际的建模过程是根据特征波段的吸光度数据 和采用标准的 COD 测试方法获得的每个水样实际 COD 值,采用上述的算法建立相应的混合神经网络 模型,从而实现对未知水样 COD 值的预测。在建 模过程中为防止模型偏差,可以先同时利用 2 个或 3 个特定谱段的吸光度数据作为输入,而后从中选 取最好的预测模型。由于数据点较少,因而采用留 一检验<sup>[10]</sup>来比较和验证各个模型预估的精确性,即 依次取出 54 个样本数据点中的一个作为测试数据, 采用剩余的 53 个数据作为训练数据,然后用训练完 成的模型预测该测试数据,如此重复 54 次,得到 54 个水样的 COD 预估值。

3 模型预测性能比较与分析

中国给水排水

为验证上述混合神经网络模型用于预估水样 COD 值的有效性,将混合神经网络模型与常规的 BP 网络和传统回归模型的预测性能进行比较与分 析。为定量地刻画模型的拟合误差,引入了误差综 合评价指数:

$$E_{1} = \sqrt{\frac{1}{p - \frac{1}{1^{k = 1}} \left[ y(k) - \hat{y}(k) \right]^{2}}$$
(7)

$$E_{2} = E_{1} / \sqrt{\frac{1}{p-1} \sum_{k=1}^{p} [y(k) - \overline{y}]^{2}}$$
(8)

表 1、2 显示了各种模型在留一检验时的预测误 差的比较情况。

表1 混合模型与多项式模型的预测误差的比较

| 特征波长        | 混合模型   |                       |                       | 多项式模型  |           |                       |
|-------------|--------|-----------------------|-----------------------|--------|-----------|-----------------------|
| (nm)        | 平均值    | <i>E</i> <sub>1</sub> | <i>E</i> <sub>2</sub> | 平均值    | $E_1$     | <i>E</i> <sub>2</sub> |
| 254、265、360 | 17.654 | 25. 947 8             | 0.3874                | 31.659 | 36.063 1  | 0.5384                |
| 254,265     | 17.511 | 24. 344 6             | 0.3634                | 21.755 | 39. 676 9 | 0.5923                |
| 265,360     | 16.979 | 25.0146               | 0.3734                | 17.469 | 26. 187 2 | 0.3909                |
| 265         | 17.936 | 24. 500 4             | 0.3657                | 18.175 | 25.0016   | 0.373 2               |
| 360         | 16.473 | 24. 427 7             | 0.3647                | 16.843 | 24. 434 1 | 0.3648                |

表 2 线性模型与 BP 网络模型的预测误差的比较

| 特征波长        | 线性模型    |           |         | BP 网络模型 |           |         |
|-------------|---------|-----------|---------|---------|-----------|---------|
| ( nm)       | 平均值     | $E_1$     | $E_2$   | 平均值     | $E_1$     | $E_2$   |
| 254、265、360 | 27.044  | 43.8642   | 0.654 8 | 23. 229 | 38. 659 5 | 0.5771  |
| 254、265     | 32. 991 | 50. 909 2 | 0.7600  | 27.678  | 58. 194 5 | 0.8687  |
| 265,360     | 27. 221 | 40. 322 4 | 0.601 9 | 24. 986 | 47. 797 4 | 0.713 5 |
| 265         | 30.685  | 46. 408 3 | 0.692 8 | 21.802  | 36. 257 4 | 0.541 3 |
| 360         | 28. 230 | 40. 427 5 | 0.603 5 | 22. 981 | 47.0347   | 0.702 2 |

由表 1、2 可知, 混合神经网络模型具有很好的 适应性(模型对于不同输入维度的训练样本都呈现 了接近的结果); 而较之单纯的 BP 神经网络, 多项 式模型又体现了一定的优势,这可能是由于数据本 身存在较强的多项式关系所致。总之,采用的混合 神经网络模型综合了单纯的多项式和单纯的 BP 网 络的优点,而又克服了它们各自的缺点,取得了比两 者都好的预估结果。

图 5(a)、(b)、(c) 分别反映了不同特征波段下的混合模型 *COD* 预估值与标准分析方法获得的 *COD* 值之间的相关性。





由上述分析可知,选择 254 nm 和 265 nm 的吸 光度数据用于 COD 值预估具有最好的预估精度, 同时混合神经网络模型预估得到的 COD 值与标准 测量方法获得的 COD 值之间也具有最好的相关性。 图 6 显示了采用 254 nm 和 265 nm 的吸光度数据得 到的 54 个 *COD* 的预估值和实际标准值之间的偏 差变化情况。



图 6 COD 值预估偏差图示

4 结论

提出的混合神经网络模型可以有效地根据水样 的UV吸光度数据快速预估水样的 COD 值,并具 有比 BP 网络和传统回归模型更好的预估精度。同 时,利用该模型得出的 COD 预估值和用标准测量 方法得出的COD 值之间也有着良好的相关性。该 COD 检测方法实质是基于物理光谱的检测方法,因 此具有方便快速、无需化学试剂、可以进行瞬时和连 续分析、具有极好的测量重现性和日常维护量极小 等优点,适用于生活污水与工业废水的快速分析,特 别适用于连续在线测定。

# 参考文献:

[1] 马玉琴.环境检测[M].武汉:武汉工业大学出版社,

1998.

- [2] 李德豪,何海荣.Ag<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>- CuSO<sub>4</sub> 催化- 微波消解快速 测定炼油污水中化学需氧量[J].分析实验室,2000,19
   (3):34-37.
- [3] 李德豪,李连香.无银催化一微波消解快速测定污水中 化学需氧量研究[J].环境工程,2002,20(5):52-55.
- [4] 刘学文, Mike P L. 一种新型 COD 在线自动检测仪
   [J].分析仪器, 2002, (2):15-17.
- [5] Korenaga T, Zhou X, Okada K. Determination of chemical oxygen demand by flow – injection method using cerium (IV) sulphate as oxidizing agent[J]. Anal Chin Acta, 1993, (272): 237-239.
- [6] Canals A, Cuesta A, Gras L, et al. New ultrasound assisted chemical oxygen demand determination[J]. Ultrasonics Sonochemistry, 2002, (9): 143-149.
- [7] Matsche N, Stumwohrer K. UV absorption as control-

parameter for biological treatment plants[J]. Water Science and Technology, 1996, 33(12): 211-218.

- [8] 张凤丽,杨锋杰,万余庆.水体污染物与反射波谱的相关性分析[J].中国给水排水,2002,18(8):81-83.
- [9] Azedine C, Antoine G, Patrick B, et al. Water quality monitoring using a smart sensing system [J]. Measurement, 2000, 28(3): 219-224.
- [10] 边肇祺,张学工.模式识别(第2版)[M].北京:清华 大学出版社,2000.
  - 作者简介:方骏(1978-), 男, 浙江舟山人, 硕 士研究生, 主要研究方向为神经网络和软 测量技术。

电话: (0571)87932783(H) 87951894×810(O) E- mail: jfang@ iipc. zju. edu. cn 收稿日期: 2003-07-10

## ・技术交流・

# 罗克韦尔全方位自动化解决方案在石景山水厂的应用

北京石景山自来水厂供水规模为 5×10<sup>4</sup> m<sup>3</sup>/d, 可满足古城路、八角、鲁谷地区和金鼎开发区等地的用水要求, 年营业额达 400 万美元。为提高运行能力和效率, 迫切需要引进高性能的自动化系统。

在该水厂的自动化控制解决方案中,罗克韦尔自动化公司提供了重要的技术咨询,包括就地控制和遥控的双重化热备实现方案。新的自动化平台纳入了罗克韦尔自动化公司的可编程逻辑控制器(PLCs)、1336变频器、 个SCADA系统,联网能力以及逻辑接口和人机接口软件。新系统还安装了智能化电动机控制器 [Smart Motor Control (SMC) Dialog Plus Controller]以减少在抽水系统中的涌浪带来的损害,提高设备的可用时间。该系统可以手动和自动模式对配网和井泵进行控制,并采用了比例积分和微分控制[Proportional Integral and Derivative(PID)] 策略以及自整定功能以控制出水压力。

新的体系结构还包括故障分析和报警功能,可以为整 个控制平台提供完全数据报告。由于在就地控制 台和中央控制室安装了 RSV iew 32 和活动显示服务器[Active Display Server(ADS)],管理层人员也能够通过 活动显示服务器观察到系统的动态情况,实现远程监控。

规模为 5×10<sup>4</sup> m<sup>3</sup>/d 的自来水厂通常都需要 70 名作业人员,但石景山水厂只需 31 名。按每人节省资金近 3 000 美元计算,改造后水厂节省资金 11.7 万美元/a。能源成本在进行 全自动控制改造之前平均为 0.45 (kW•h)/m<sup>3</sup>,现在已降至 0.38 (kW•h)/m<sup>3</sup>,节省能源 1.3×10<sup>6</sup>(kW•h)/a,并且该系统易于维护,可靠 性、水处理测量精确度高,还可节省 30% 的维护成本。

## (罗克韦尔自动化公司 供稿)