# 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<sub>5</sub> 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。

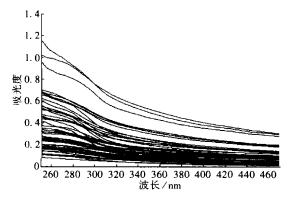


图 2 污水样品的吸收光谱

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 $\{x_i(k),y(k)\mid i=1,2,...,n;\ k=1,2,...,p\}$ [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:

$$\hat{y}(t) = f(x_1(t), ..., x_n(t))$$
 (2)

式中  $\hat{y}(t)$  ——未知水样的 COD 预估值

x 1(t), ..., 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:

$$\hat{y}_0(k) = \alpha_0 + \sum_{i=n_1}^{n_2} \alpha_i x_i(k) + \sum_{i=k_1 j=m_1}^{k_2} \sum_{i=m_1}^{m_2} b_{ij} x_i$$

$$(k) x_i(k)$$
(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:

$$\hat{y}_{i}(k) = v_{i}\hat{z}_{i}(k) + v_{0i}$$
 (4)

$$\hat{z}_i(k) = f(\hat{h}_i(k)) \tag{5}$$

$$\hat{h_j}(k) = \sum_{i=1}^{n} x_i(k) w_{ij} + w_{0j}$$
 (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  $w_{ij}$ 与  $w_{0j}$  ——隐层输入权值  $y_i$  和 $y_{0j}$  ——输出权值

该前向神经网络的隐层激发函数采用 Sigmoid

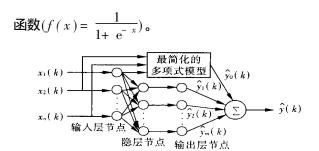


图 3 混合神经网络模型结构示意图

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 $\{x_i(k), y(k) \mid i=1,2,...,n; k=1,2,...,p\}$  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。

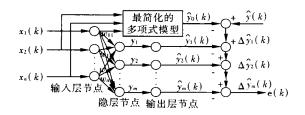


图 4 学习算法设计示意图

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 $v_1$ 和阈值 $v_0$ ,由此求得隐节点的期望输出 $z_1(k)$ ,再对隐层节点函数求逆运算,得出隐节点的输入期望值 $h_1(k)$ 。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 $w_{i1}(i=0,1,2,...,n)$ 。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

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:

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

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

式中  $E_1$  ——估计模型的平均拟合误差

 $E_2$  ——估计模型的相对拟合误差 y ——样本输出 $\{y(k)|\ k=1,2,...,p\}$ 的均

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	$E_1$	$E_2$	平均值	$E_1$	$E_2$	
254, 265, 360	17.654	25. 947 8	0.3874	31.659	36. 063 1	0.538 4	
254,265	17.511	24. 344 6	0.3634	21.755	39. 676 9	0.592 3	
265,360	16.979	25. 014 6	0.3734	17.469	26. 187 2	0.3909	
265	17.936	24. 500 4	0.3657	18. 175	25. 001 6	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. 864 2	0.6548	23. 229	38. 659 5	0.577 1	
254, 265	32. 991	50. 909 2	0.760 0	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	0.6928	21. 802	36. 257 4	0.541 3	
360	28. 230	40. 427 5	0.603 5	22. 981	47. 034 7	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。

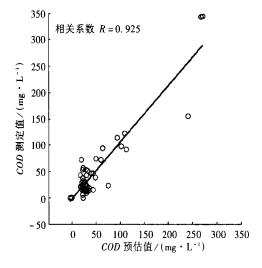


图 5(a) COD 预估值与标准值的相关性 (特征波长为 254、265、360 nm)

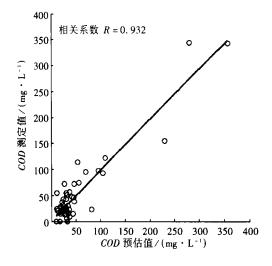


图 5(b) COD 预估值与标准值的相关性 (特征波长为 254, 265 nm)

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  $54 \land COD$  的预估值和实际标准值之间的偏差变化情况。

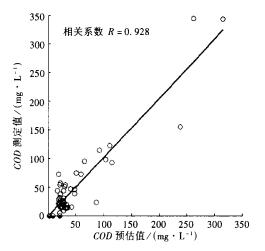


图 5(c) COD 预估值与标准值的相关性 (特征波长为 265、360 nm)

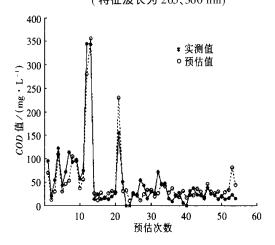


图 6 COD 值预估偏差图示

#### 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  $5 \times 10^4 \text{ m}^3/\text{d}$ , 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RSView 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  $5 \times 10^4$  m³/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)/m³,现在已降至 0.38 (kW•h)/m³,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)