

利用神经网络模型建立有机物厌氧生物降解性定量结构关系

欧阳军 杨宏伟 蒋展鹏 师绍琪 W.Z.Tang

提要 利用 三层前馈型 BP 神经网络,对试验测得的有机物厌氧生物降解性的定量指数和有机物分子连接性指数进行建模,得到有机物厌氧生物降解性定量结构关系(QSBR)模型。探索了新的 QSBR 建模方法。

关键词 厌氧生物降解性 AI(有机物厌氧生物降解性定量指数) QSBR 神经网络

有机物厌氧生物降解性是指有机物在厌氧条件下被微生物利用,在一定的时间内完全降解为 CH₄ 和 CO₂ 的程度。它是有机废水生物处理方案选择和工艺设计的理论依据,对有机污染控制有很大的指导意义^[1~2]。由于有机物种类繁多,并且生物降解性试验周期长,因此,对各种有机物逐一进行厌氧生物降解性测定是不现实的。定量结构与生物降解性关系(QSBR)是从定量结构活性关系(QSAR)基础上发展起来的,它们的理论基础是物质的活性和分子结构存在着一定的关系。对于有机物的厌氧生物降解性研究,如果能够建立相对可靠和准确的 QSBR 模型,就可以利用此模型通过有机物分子结构参数来预测有机物的厌氧生物降解性。

吴行知^[3~4]测定了 45 种有机物的厌氧生物降解性,并在分子连接性指数以及 Hansch 取代常数 π 、分子量、偶极距等参数中选取与厌氧生物降解性相关显著的参数,建立了不同类别有机物的 QSBR 模型,效果较好。但是,由于表征有机物结构的参数很多,在模型建立时需要对不同的参数进行相关性分析,过程比较复杂。而且,最终得到的各类有机物模型方程也是各不相同,适应性范围较小。针对这些问题,本文利用神经网络的方法,在文献[3]的试验基础上,建立了有机物厌氧生物降解性与其分子结构(以分子连接性指数^[5]表示)的定量关系。

1 试验数据

本文使用表 1 所列的 19 种有机物作为试验有机物,按照文献[4]的方法进行试验,并计算得到分别表示有机物的生物厌氧降解性的产气指数 GPI^[4]

和 COD 降解指数 CRI^[4],并定义综合指数 AI (Anaerobic Index):

$$AI = \sqrt{\frac{GPI^2 + CRI^2}{2}} \quad (1)$$

试验结果如表 1 所示。

表 1 试验得到的各有机物的 GPI, CRI 和 AI

有机物	GPI	CRI	AI	有机物	GPI	CRI	AI
正己烷	0.631 3	0.563 4	0.598 3	对氯苯甲酸	0.469 8	0.407 6	0.439 8
庚烷	0.617 4	0.555 8	0.587 4	对苯二胺	0.486 4	0.424 3	0.456 4
草酸	0.451 4	0.389 1	0.421 4	正丁醇	0.758 2	0.696 9	0.728 2
酒石酸	0.666 9	0.605 4	0.636 9	正己醇	0.773 0	0.711 7	0.743 0
柠檬酸	0.753 6	0.692 1	0.723 5	苯酚	0.631 9	0.570 3	0.601 9
甲酸	0.476 8	0.649 4	0.569 7	邻甲酚	0.462 7	0.400 4	0.432 7
正戊酸	0.750 0	0.688 7	0.720 0	间甲酚	0.402 2	0.339 6	0.372 2
正己酸	0.699 6	0.638 2	0.669 6	间苯二酚	0.633 5	0.571 9	0.603 5
苯乙酸	0.593 9	0.845 5	0.730 6	1-萘酚	0.168 3	0.100 1	0.138 4
				邻苯二甲酸	0.789 3	0.749 4	0.769 6

2 神经网络模型简介^①

2.1 人工神经网络模型

人工神经网络是由大量的、同时也是很简单的处理单元(称为神经元)广泛地互相连接而形成的复杂网络系统(或称为高度的非线性动力学系统)。BP 网络是当今神经网络模型中使用最为广泛的一类, BP 网络含有输入层、隐藏层和输出层,并使用误差反向传播算法(Back-Propagation)实现多层网络学习。

2.2 BP 神经网络和学习算法^[7]

三层 BP 网络分为输入层 LA, 隐藏层 LB, 输出层 LC(见图 1)。输入数据通过 LA 层经过 LB 层从 LC 层输出的过程中利用转换函数经过两次转换。对转换过程中权值(Weight)和域值(Bias)进行调整

* 国家自然科学基金资助项目(59778018)(59910760984)。

达到减小输出层与实际值的误差的过程称为网络的学习或训练。BP 网络学习的基本思路是:把网络学习时输出层的误差归结为连结层中各节点的连接权值及阈值的“过错”,通过把输出层的误差逐层向输入层逆向传播以“分摊”给各连接节点,从而可算出各节点的参考误差,并据此对各连接权值和阈值进行相应的调整,再重新计算输出值,如此反复,直到误差足够小,使网络适应所要求的映射。

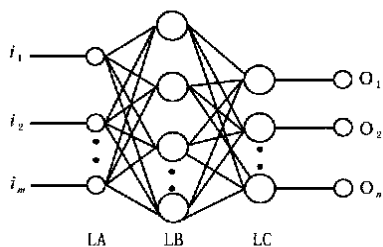


图 1 三层 BP 网络模型

图 1 中的 LA 中含 m 个节点,对应 m 个输入值,LC 中含 n 个节点,对应 n 个输出值,LB 中的节点数 u 可根据需要调试选取。

令 LA 的节点 a_i 到 LB 节点 b_r 的连接权值为 W_{ir} , b_r 到 LC 节点 c_j 的权值为 V_{rj} ; T_r 为 LB 层的阈值; S_j 为 LC 层的阈值; LB, LC 的转换函数分别为 fb , fc 。则有如下关系:

$$b_r = fb(W_{ir} \cdot a_i + T_r) \quad (r = 1, 2, \dots, u) \quad (2)$$

$$c_j = fc(V_{rj} \cdot b_r + S_j) \quad (j = 1, 2, \dots, n) \quad (3)$$

预报值 c_j 与实际值 y_j 之间的误差 e_j 可以表示为: $e_j = c_j - y_j$ 。一种 BP 算法的运行过程如下:

- (1)设置网络结构,初设权、阈值;
- (2)向网络输入学习使用的输入值;
- (3)输入值经计算向前传递,得到第一遍的输出值;
- (4)反向传递误差,调整各层的权、阈值,再重新计算输出值;
- (5)重复(2)~(4)步骤,直到总体误差满足要求。

输入 m 个输入数据和 n 个输出期望值(本次试验中输入数据即为各有机物的一系列分子连接性指数,输出期望值为实际测得的有机物厌氧生物降解性定量值)后,三层 BP 网络利用模型输出值与期望值间的误差对各权值和阈值进行调整,当满足误差要求后,网络停止学习,完成模型建立。

3 模型的建立

预测模型的建立是在 Matlab 平台上编程实现的,网络中的转换函数选择的是 Matlab 中常用的非线性转换函数 $\text{tansig}(y = 2 / (1 + \exp(-2 \cdot n))) - 1$ 函数和 $\text{logsig}(y = 1 / (1 + e^{-x}))$ 函数。转换函数通常要求是可微的有界函数,这样的函数的输出值不会因过大而引起收敛过快。

在建模的过程中,数据分为训练、验证和检验 3 个部分,参加验证的数据并不参与训练,神经网络在训练的过程中,各层节点的权值、阈值不断的变化。对于训练数据来说,模型的输出误差越来越小。同时,参加验证的数据的输出误差也越来越小,当训练达到一定程度时,参加验证的数据的输出误差开始增大,此时训练停止以防止训练过度,防止得到的模型仅仅对训练数据适用。这个时候参加训练的数据和参加验证的数据的输出误差已经达到比较理想的程度了。最后用一部分数据来检验这个模型,当检验误差同时也达到一个比较理想的状况时,就完成了模型的建立。这样通过训练、验证和检验的模型是比较可靠的,能够很好地应用到实践中。如果有了新的试验数据,可以加入到已有的数据中来,重新进行模型建立以得到更准确的模型。

试验中选用了 10 种有机物数据利用 BP 算法对网络进行训练,5 种有机物的数据来验证,用 4 种有机物的数据来检验最终结果。从以前的 QsBR 模型中可以看出,种类不同的有机物的厌氧生物降解性和分子连接性指数的关系是有差异的,因此,在本文中将有有机物分类编号,和有机物的 11 种分子连接性指数一起构成一个 19×12 的输入矩阵。输出向量即为试验得到的各有机物的 AI 值构成的向量。表 1 的数据组成输出向量,表 2 为输入矩阵,表 3 显示了模型输出值和实际值的比较。图 2 是利用模型输出值和实际值在 Matlab 中绘出的图形。可以看出,对大部分有机物来说,结果是比较好的。

4 结论和建议

本文在 Matlab 软件中利用三层前馈型 BP 网络算法对有机物的分子连接性指数和试验所测得的有机物厌氧生物降解性综合指数进行训练并检验,最终得到的神经网络模型的输出结果和实际值具有很好的符合。由此可见,神经网络作为一种新兴的数

表 2 输 入 矩 阵

有机物	编号	$^0X^V$	$^1X^V$	$^2X^V$	$^3X_P^V$	$^3X_C^V$	$^4X_P^V$	$^4X_{PC}^V$	$^4X_C^V$	$^5X_P^V$	$^5X_{PC}^V$	$^5X_C^V$
正己烷	1	4.828 0	2.914 0	1.707 0	0.957 0	0	0.5	0	0	0.25	0	0
正庚烷	1	5.535 6	3.414 2	2.060 7	1.207 1	0	0.676 8	0	0	0.353 6	0	0
草酸	2	2.710 9	1.105 5	0.610 3	0.183 0	0.091 3	0	0.078 1	0	0	0	0.008 3
酒石酸	2	4.760 0	2.282 5	1.566 1	0.805 1	0.254 5	0.270 1	0.376 7	0	0.061 0	0.242 2	0.043 9
柠檬酸	2	6.472 8	3.171 0	2.477 8	1.285 4	0.569 7	0.714 1	0.707 6	0.055 9	0.236 3	0.746 8	0.051 7
甲酸	3	2.355 5	0.927 7	0.519 0	0	0.091 3	0	0	0	0	0	0
正戊酸	3	4.476 8	2.488 4	1.497 3	0.744 2	0.064 5	0.328 0	0.045 6	0	0.151 2	0.032 2	0
正己酸	3	5.183 9	2.988 4	1.850 8	0.994 2	0.064 5	0.526 2	0.040 5	0	0.231 9	0.032 3	0
苯乙酸	4	5.449 3	3.045 5	2.056 1	1.198 2	0.182 4	0.770 5	0.227 3	0	0.279 5	0.273 6	0
邻苯二甲酸	4	6.020 3	3.182 8	2.155 9	1.387 9	0.235 6	0.856 1	0.460 6	0	0.330 8	0.531 6	0.047 2
对氯苯甲酸	4	5.797 1	3.056 2	2.247 5	1.342 6	0.317 7	0.718 2	0.438 1	0	0.350 5	0.360 5	0.015 2
对苯二胺	5	4.309 4	2.321 3	1.577 3	0.884 9	0.166 7	0.470 2	0.192 4	0	0.165 7	0.151 8	0
正丁醇	6	3.568 5	2.023 3	1.077 2	0.511 7	0	0.213 9	0.045 6	0	0	0.045 6	0
正己醇	6	4.983 0	3.023 0	1.784 0	1.012 0	0	0.538 0	0	0	0.256 0	0	0
苯酚	7	3.834 0	2.134 3	1.335 5	0.756 2	0.074 5	0.428 0	0.086 1	0	0.818	0.074 5	0
邻甲酚	7	4.756 6	2.550 9	1.786 5	1.115 4	0.208 9	0.563 4	0.370 3	0	0.177 8	0.283 4	0.037 3
间甲酚	7	4.756 6	2.545 0	1.839 0	1.001 6	0.241 2	0.628 0	0.259 8	0	0.167 0	0.294 2	0
间苯二酚	7	4.203 8	2.268 6	1.519 8	0.829 7	0.149 1	0.493 0	0.160 6	0	0.113 8	0.169 1	0
1-萘酚	0	6.195 8	3.802 7	2.775 9	2.029 9	0.259 9	1.436 2	0.599 6	0	0.643 0	0.820 2	0.055 5

注: ①表中编号一栏是有机物的分类号, 根据有机物分子的官能团将试验中的有机物分为 8 类, 从 0 开始编号;

②表中分子连接性指数可按下式计算: ${}^mX_w^v = \sum_{j=1}^n \prod_{i=1}^{m+1} (\delta_i)^{-1/2}$, 式中 v 表示在计算中考虑了原子的价态; w 表示计算的分子平面图形, P 表示路径, C 表示簇, PC 表示路径/簇; m 表示计算的阶数。

表 3 模型预测值与实测值比较

物质	实测值 T	预测值 A	误差 $(1 - A/T)/\%$
1-萘酚	0.138 4	0.166 0	-19.9
正己烷	0.598 3	0.661 9	-10.6
正庚烷	0.587 4	0.581 4	1.0
草酸	0.421 4	0.512 2	-21.5
酒石酸	0.636 9	0.592 3	7.0
柠檬酸	0.723 5	0.758 1	-4.8
甲酸	0.569 7	0.536 9	5.8
正戊酸	0.720 0	0.673 3	6.5
正己酸	0.669 6	0.686 5	2.5
苯乙酸	0.730 6	0.598 6	18.1
邻苯二甲酸	0.769 6	0.718 1	6.7
对氯苯甲酸	0.439 8	0.410 7	6.6
对苯二胺	0.456 4	0.477 3	4.6
正丁醇	0.728 2	0.702 8	3.5
正己醇	0.743 0	0.681 7	8.2
苯酚	0.601 9	0.545 6	9.4
邻甲酚	0.432 7	0.434 4	0.4
间甲酚	0.372 2	0.433 7	16.5
间苯二酚	0.603 5	0.499 1	17.3

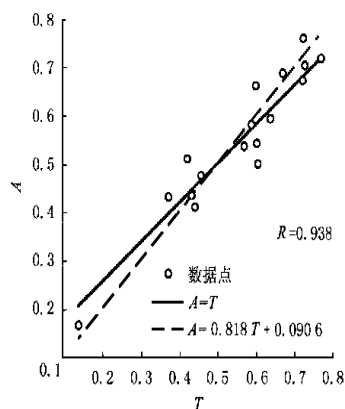


图 2 模型输出结果和试验值

学手段在 QSBR 发展过程中有很好的应用前景。利用神经网络得到的模型没有一个很直观的数学式子, 得到的模型是由多个矩阵和多个向量加上中间转换函数的一个复杂的矩阵计算系统, 很难给人们一个直观的印象, 如果纯粹手工计算是很复杂的, 但

威海高新区污水处理厂设计与运行

邹笑蓉 李宏敏 梁衷华 曹拱辰 张云华

提要 根据威海高新区污水处理厂调试运行的实践,介绍了该处理工程(氧化沟工艺)的工艺特点、处理效果等,并总结了设计和运行经验,提出存在的问题及改进建议。

关键词 污水处理厂 氧化沟 除磷脱氮 缺氧区 好氧区 冲击负荷

威海高新区污水处理厂进水水质以生活污水为主。据该工程所处的地理位置和海域环境,出水水质要求较高。氧化沟工艺具有出水水质好、运行可靠、工艺成熟、经济实用等特点,故该工程采用此工艺。

1 污水处理厂工艺设计

威海高新区污水处理工程设计处理规模为 1 万 m^3/d 。该工程采用将氧化沟、最终沉淀池、污泥回流泵房三者合建为一体的方式,具有工艺流程短、构筑物少、占地面积小、投资少、易于操作管理等优点。

1.1 工艺流程

威海高新区污水处理厂工艺流程见图 1。

1.2 主要设计参数

(1)氧化沟。氧化沟采用 Carrousel 改进型氧化沟。将氧化沟、最终沉淀、污泥回流泵房三者合建,从整体上看为圆形。这种布局便于集中管理,有利于改善氧化沟内的水力条件和流态,减少水流死角积泥现象。每座氧化沟分 2 个廊道,每个廊道宽

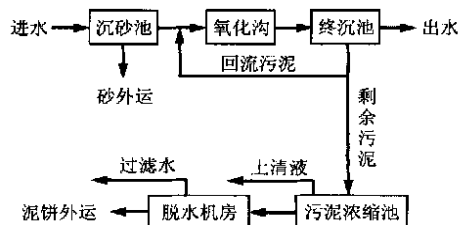


图 1 威海高新区污水处理工程工艺流程

6.5 m, 深 3.5 m, 有效容积 4 700 m^3 。曝气设备采用倒伞式 300 表面曝气机 2 台, 每台充氧能力为 57 kgO_2/h , 功率为 45 kW, 电机为调速电机。氧化沟主要设计参数: 污泥负荷 0.06 $\text{kgBOD}/(\text{kgMLSS} \cdot \text{d})$; 混合液平均污泥浓度 4 g/L ; 水力停留时间 22.56 h; 泥龄 22.76 d。

(2)终沉池。最终沉淀池采用周边进水周边出水辐流式沉淀池, 即“双周边”沉淀池, 它比一般沉淀池效率高。由于采用周边进出水方式, 进水的均匀程度将影响沉淀效果, 因此进水采用两级配水方式。

是以现在计算机技术的水平解决这个问题是很容易的。不仅仅对于有机物的厌氧生物降解性, 对于有机物的其他一些性质也可以利用神经网络建立结构关系, 在此基础上还可以开发出应用软件, 使得研究成果进一步智能化和产品化。

参考文献

- 1 ISO11734. Water quality-evaluation of the “ultimate” anaerobic biodegradability of organic compounds in digested sludge-method by measurement of biogas production. 1995
- 2 U Pages D B Beiborn. Anaerobic biodegradation test for organic compounds. Chemosphere, 1993, 27 (8): 1499 ~ 1509
- 3 吴行知. 有机物厌氧生物降解性研究与定量结构关系: [学位论文]. 北京: 清华大学环境科学与工程系, 1999

- 4 吴行知. 有机物厌氧生物降解性研究. 给水排水, 2000, 26(7): 28 ~ 31
- 5 王连生 支正良. 分子连接与分子机构-活性. 北京: 中国环境科学出版社 1992. 8 ~ 11
- 6 李士勇. 模糊控制·神经控制和智能控制论. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 1996
- 7 刘增良, 刘有才. 模糊逻辑与神经网络——理论研究与探索. 北京: 北京航空航天大学出版社, 1996

◎作者通讯处: 100084 清华大学环境科学与工程系

电话: (010)62772987(O)

E-mail: yang98@stunmail.tsinghua.edu.cn

W.Z. Tang 美国佛罗里达国际大学土木与环境工程系

收稿日期: 2001-3-27

ABSTRACTS

Determination of Sludge Discharge from Waterworks *Ye Hui et al* (1)

Abstract: The liquid sludge water discharged from waterworks has to be treated. The sludge discharge of waterworks could be divided into two parts: the liquid sludge water and the solid dry sludge. The liquid sludge water could be determined by the sludge discharge manner of sedimentation tanks and the backwashing operation of the filters. There are two ways to determine the solid sludge discharge, namely, the calculation and mass balancing analysis. The later might be an indispensable complement and checking to the former. These two methods are presented and compared in this paper.

Wastewater Reuse of East WTP in Handan City *Shang Yaoqing et al* (5)

Abstract: The basic status on wastewater reuse of the East Wastewater Treatment Plant in Handan City, Hebei Province in North China is presented. On the basis of user investigation of reused water, the delivery of reuse water would be made certain qualitatively and quantitatively. In this case the filtration and chlorination processes were adopted for wastewater treatment, and it has been approved by the practical application of both qualified quality and economic benefit.

Advances in Research on Pre-ozonization of Drinking Water *Sun Xin et al* (7)

Abstract: The principal objectives of pre-ozonization are removals of color, odor, algae and algal toxins, disinfect by-products control, pollutant conversion and coagulation aid. The treatment efficiency is directly influenced by the raw water quality and ozonation condition. Some hazardous ozonation by-products, such as aldehydes and bromates are introduced. Several key problems of pre-ozonation are summarized and discussed.

Neural Network Applied for Quantitative Structure of Anaerobic Biodegradability Relationship Model of Organic Substances *Ouyang Jun et al* (10)

Abstract: In this paper, a quantitative structure anaerobic biodegradability relationship (QSBR) model was established using the method of tri-layer feed-forward back-propagation neural network. In this model, anaerobic biodegradability was quantified by anaerobic index (AI), and molecular connective indexes of organic compound are the variables. A new method of building QSBR model is explored.

Study on Submerged Bio-film for P-Removal *Li Jun et al* (23)

Abstract: A Study on the bio-film characteristics of phosphorus removal is the premise of ascertaining the mechanism of biological phosphorus removal. It is characterized by keeping a large amount of biomass in the submerged bio-film reactor, and the sludge in form of stripped bio-film from the media contained high percent of phosphorus. The sludge production yield was 0.199 6 kgDS/ kgCOD. Through the bacterial species identification test, the article analyzes the microorganism characteristics in phosphorus removal bio-film and the function in biological phosphorus removal process. Moreover, it is certain that the dominant phosphorus removal bacterial species is *Pseudomonas* and then *Aeromonas*, *Bacillus*, *Micrococcus*, *Nitrobacter* in the submerged bio-film process.

Hydrolysis Acidification-Air Floatation-SBR Process Treating Linen Wastewater *Yu Deshuang et al* (32)

Abstract: The aerobic biological treatment of linen wastewater seems poorly, because the organic matters in the wastewater is not easy to degrade. A facility with capacity of 1 000 m³/d and using a combined processes of hydrolysis acidification, air floatation and SBR was designed. The designed inflow has strengthenings as COD= 800 ~ 1 000 mg/L, BOD= 400 ~ 500 mg/L, SS= 200 ~ 300 mg/L and pH= 7. When normal operation of hydrolysis acidification was guaranteed, COD removal over 25% could be reached. After airfloatation and SBR process the final COD removal would be 85%. The effluent could meet the national integrated wastewater discharge standard GB 8978-96.

Micro-electrolysis and Slag Adsorption Treating Dyeing Wastewater *Wang Youle et al* (34)

Abstract: This paper deals with the principle, mechanism and working conditions of micro-electrolysis used in purifying dyed wastewater, analyses the characteristic of slag adsorption under constant temperature condition and the process of mass transfer based on experiments. The capital investment and the operating cost of this technology are much lower and the effluent can meet the wastewater discharge standards.

Design and Operation of Antibiotics Wastewater Treatment *Mai Wenning et al* (42)

Abstract: The antibiotic wastewater of Huazhong Pharmaceutical Group is treated by combined technology of pre-treatment, anaerobic and aerobic biological processes. The engineering application shows that by this technology the effluent is stable and good enough to meet the requirements of class II for the pharmaceutical industry in the national