

BP 网络在生物滴滤塔去除硫化氢中的仿真

韩洪军, 欧阳力

(哈尔滨工业大学 城市水资源与水环境国家重点实验室, 150090 哈尔滨, han13946003379@163.com)

摘要: 在生物滴滤塔对硫化氢的去除过程中, H_2S 的进气质量浓度、停留时间和去除率之间存在着复杂的非线性关系, 使得常规的建模方法很难获得理想的结果. 针对这一问题, 引入 BP 神经网络, 通过 BP 网络对试验数据的学习建立系统的非参数模型, 并利用该模型对系统进行仿真与预测. 结果表明, 经过训练的 BP 网络模型可以很好地对系统进行仿真和预测, 对全部试验数据网络仿真的相关系数为 0.986 0; 在 9 组不同的试验条件下, 网络预测值与相应的试验结果值线性回归相关系数高达 0.965 9.

关键词: 生物滴滤塔; H_2S ; BP 神经网络; 仿真与预测

中图分类号: X701.3 **文献标志码:** A **文章编号:** 0367-6234(2012)02-0043-05

Application of back-propagation neural network on removal of hydrogen sulfide in biotrickling filter

HAN Hong-jun, OUYANG Li

(State Key Laboratory of Urban Water Resource and Environment, Harbin Institute of Technology, 150090 Harbin, China, han13946003379@163.com)

Abstract: It was difficult to develop a normal parametric model to match the results well for the complex non-linear relationship among the inlet concentration, retention time and removal efficiency of hydrogen sulfide in the biotrickling filter. Aiming at this problem, back-propagation neural network (BPNN) was introduced into the research. A non-parametric model was established by the training of BPNN with the experimental data. And this model could simulate and predict the experimental results well. The correlation coefficient of simulation with all experimental data was 0.986 0. In nine different experimental conditions, the linear regression correlation coefficient of network predicted values and the corresponding experimental results was as high as 0.965 9.

Key words: biotrickling filter; hydrogen sulfide; back-propagation neural network; simulation and prediction

神经网络由许多具有非线性映射能力的神经元组成^[1-2], 各个神经元之间通过权系数相互连接, 其信息分布式地存储于连接权系数中, 从而具有很高的容错性和鲁棒性. 而且, 神经网络的自组织、自适应学习功能使得神经网络不需要任何先验公式, 就能从已有数据中自动地归纳规律, 获得这些数据的内在联系, 具有很强的非线性映射能力, 极大地放松了传统方法所需的约束条件, 显示了巨大的优越性和应用潜力^[3-7]. 在生物滴滤塔对硫化氢的去除过程中, 影响因素众多, 还存在噪

声干扰和输入模式的部分损失, 常规的建模方法很难获得理想的结果, 基于神经网络的上述特点, 可以成功地解决生物滴滤塔对硫化氢去除效果的仿真与预测问题. 在提出的几十种神经网络模型中, BP 神经网络是目前应用最广的网络模型^[8-10]. 它采用最小均方差学习方式, 有导师训练, 可以以任意精度逼近任意连续函数, 广泛应用于非线性建模、函数逼近和模式分类等方面. 本文将进行 BP 网络应用于生物滴滤塔对硫化氢去除效果的仿真与预测研究.

1 BP 网络的典型结构和基本流程

BP 网络是一种多层前馈神经网络^[11], 由输

收稿日期: 2011-01-09.

基金项目: 国家科技支撑计划项目(2006BAC19B00).

作者简介: 韩洪军(1955—), 男, 教授, 博士生导师.

入层、隐含层和输出层组成. 层与层之间采用全互连方式, 同一层之间不存在相互连接, 隐含层可以有一个或多个. 构造一个 BP 网络需要确定其处理单元神经元的特性和网络的拓扑结构. 神经元是神经网络最基本的处理单元, 隐含层中的神经元采用 S 型变换函数, 输出层的神经元可采用 S 型或线性型变换函数. 典型的 BP 网络结构如图 1 所示.

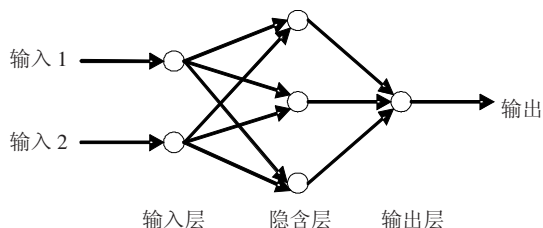
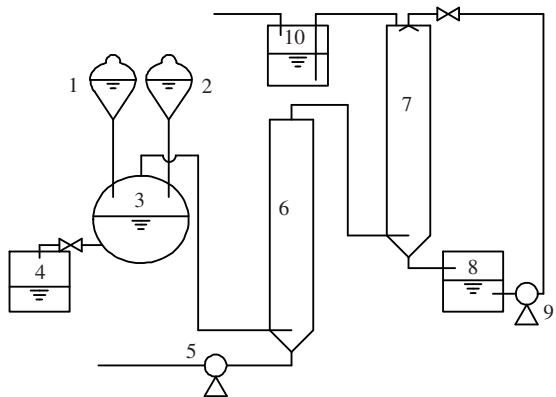


图1 BP网络结构

神经网络学习采用改进 BP 算法^[12], 学习过程由前向计算过程和误差反向传播过程组成. 在前向计算过程中, 输入信息从输入层经隐含层逐层计算, 并传向输出层, 每层神经元的状态只影响下一层神经元的状态. 如输出层不能得到期望的输出, 则转入误差反向传播过程, 误差信号沿原来的连接通路返回, 通过修改各层的神经元权值, 使得网络系统误差最小. 如此反复, 使最终网络的实际输出与各自对应的期望输出逼近.

2 生物滴滤塔去除硫化氢试验

在硫化氢的去除试验中, 采用的试验装置为生物滴滤塔. 该滴滤塔采用有机玻璃制成, 内径 50 mm, 塔体高 600 mm, 其中填料层高 350 mm, 有效容积为 0.687 L. 试验装置如图 2 所示. 将一定质量浓度的硫化钠溶液与稀硫酸溶液分别以一定流速从滴液漏斗中滴入三口瓶, 使二者在其中进



1—硫酸滴液漏斗; 2—硫化钠滴液漏斗; 3—硫化氢反应瓶; 4—废液瓶; 5—空气泵; 6—气体混合器; 7—生物滴滤塔; 8—循环液储瓶; 9—循环泵; 10—尾气吸收瓶.

图2 生物滴滤塔去除硫化氢装置

行反应, 生成硫化氢气体. 用空气泵向气体混合室中通入一定量的空气与硫化氢气体混合, 混合后的气体从滴滤塔底部进入, 与由上喷淋而下的循环液形成气水逆流, 硫化氢气体与水接触并溶解于水中, 即从气相转移到液相. 溶解于水中的硫化氢再被微生物吸收降解, 即硫化氢得以去除. 脱除硫化氢的气体通过尾气吸收瓶后排入大气. 试验过程中主要的测量指标为硫化氢质量浓度, 采用硫化氢检测管进行测定.

3 BP 网络在生物滴滤塔去除硫化氢试验中的应用

3.1 生物滴滤塔去除硫化氢的试验数据

通过上述试验方法, 在室温 (25 °C 左右) 条件下, 以 4 L/h 的生活污水 (pH = 7.0) 为循环喷淋液, 获得了 H_2S 进气质量浓度为 0 ~ 1 100 mg/m^3 和气体停留时间为 8.24 ~ 24.7 s 内, 生物滴滤塔对 H_2S 去除率的 115 组数据, 见图 3.

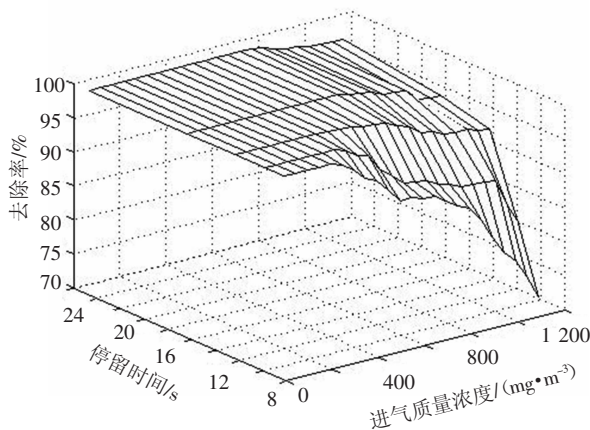


图3 生物滴滤塔在不同进气质量浓度和气体停留时间条件下对 H_2S 的去除率

3.2 BP 网络的建立与训练

由前述可知, 本试验中有两个自变量, 即 H_2S 进气质量浓度和气体停留时间; 1 个因变量, 滴滤塔对 H_2S 的去除率. 对该试验过程建立含 1 个隐含层的 BP 神经网络, 网络结构如图 1 所示. 其输入层含两个神经元, 分别对应于输入条件 H_2S 进气质量浓度和气体停留时间; 输出层含 1 个神经元, 对应于滴滤塔对 H_2S 的去除率; 经试验确定 BP 网络的隐含层含 3 个神经元时, 对网络模拟已达到很好的精度.

由于两个输入和输出的数值范围相差很大, 如果直接对网络进行训练将导致网络模型的歧化, 所以, 首先必须对输入输出数据进行标准化处理, 即将每组数据都转化成均值为 0、方差为 1 的

数据.采用函数 `prestd` 进行标准化处理时,各组数据的标准化参数为: H_2S 进气质量浓度 ($0 \sim 1\,100\text{ mg/m}^3$) 的平均值为 $550.000\,0$,标准差为 $333.114\,0$;气体停留时间 ($8.24 \sim 24.7\text{ s}$) 的平均值为 $14.344\,6$,标准差为 $5.915\,5$; H_2S 去除率的平均值为 $96.437\,7$,标准差为 5.581 .

数据标准化后,对建立的 BP 网络采用常用的动量梯度下降算法 (`Traingdm`) 训练全部数据.随着训练步数的增加,网络的误差平方和逐渐减小,但是减小的速度越来越慢.如果过多地增加训练步数,不仅使训练时间增加,网络也不会有太大的改进.最终,经试验确定动量梯度下降算法的最大训练步数为 $100\,000$,进行 10 次平行训练,结果如表 1 所示,第 10 次训练结果见图 4.

表 1 `Traingdm` 训练结果

训练次数	训练步数	误差平方和	R
1	100 000	0.029 959 7	0.984 8
2	100 000	0.032 899 6	0.983 3
3	100 000	0.023 916 2	0.987 9
4	100 000	0.023 884 0	0.987 9
5	100 000	0.030 326 1	0.984 6
6	100 000	0.024 960 1	0.987 3
7	100 000	0.025 716 7	0.986 9
8	100 000	0.023 906 9	0.987 9
9	100 000	0.025 640 8	0.987 0
10	100 000	0.023 906 5	0.987 9
平均	100 000	0.026 511 7	0.986 6

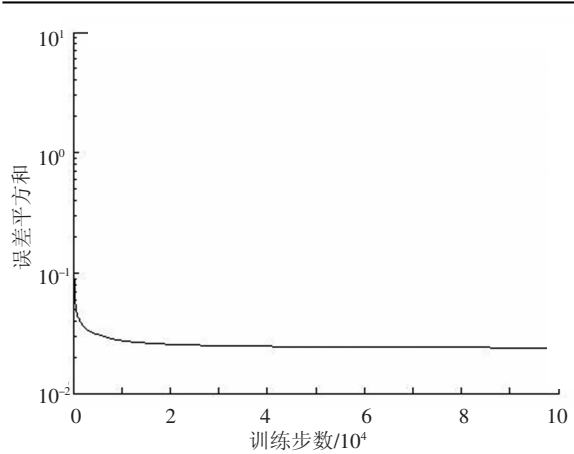


图 4 第 10 次 `Traingdm` 训练性能曲线

从表 1 可以看出,达到最大训练步数 $100\,000$ 时,网络的误差平方和很小,平均为 $0.026\,511\,7$, R 值接近于 1 ,平均为 $0.986\,6$.训练效果很好,但是训练步数太多,即训练时间过长.

为了克服网络收敛速度过慢的现象,采用数字优化技术中的 Levenberg-Marquardt 方法 (`Train-`

`lm`) 训练全部数据.与动量梯度下降算法训练过程类似,随着训练步数的增加,网络的误差平方和也逐渐减小,同时减小的速度越来越慢.过多地增加训练步数,网络并不会会有太大的改进,反而导致训练时间的大量增加.所以,经试验确定 Levenberg-Marquardt 方法的最大训练步数为 100 ,也进行 10 次平行训练,训练结果如表 2 所示,第 10 次训练结果见图 5.

表 2 `Trainlm` 训练结果

训练次数	训练步数	误差平方和	R
1	100	0.028 328 6	0.985 6
2	100	0.019 038 6	0.990 4
3	100	0.027 017 7	0.986 3
4	100	0.017 826 7	0.991 0
5	100	0.023 008 3	0.988 3
6	100	0.020 868 0	0.989 4
7	100	0.023 008 3	0.988 3
8	100	0.019 600 2	0.990 1
9	100	0.023 008 3	0.988 3
10	100	0.028 328 5	0.985 6
平均	100	0.023 003 3	0.988 3

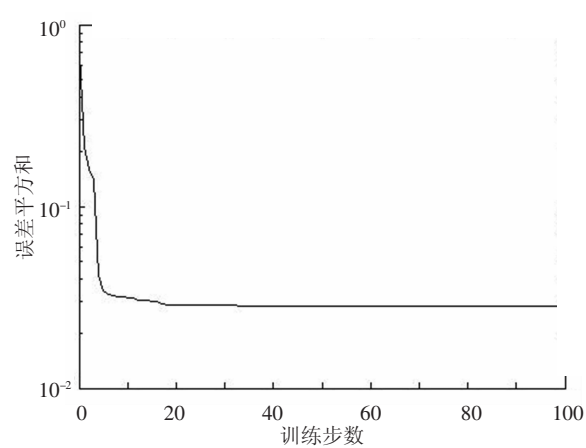


图 5 第 10 次 `Trainlm` 训练性能曲线

从表 2 可以看出,达到最大训练步数 100 时,Levenberg-Marquardt 方法训练的网络误差平方和很小,平均为 $0.023\,003\,3$, R 值接近于 1 ,平均为 $0.988\,3$.训练效果很好,且与动量梯度下降算法相比,训练步数缩小很多,有很大改进.

为了保证网络的泛化能力,在 Levenberg-Marquardt 训练方法 (`Trainlm`) 的前提下,同时采用设置验证组、测试组 ($1/2$ 数据训练、 $1/4$ 数据验证、 $1/4$ 数据测试) 的提前停止法对网络进行改进训练.利用改进的训练方法对 BP 网络也进行了 10 次平行训练,结果如表 3 所示,第 10 次训练结果见图 6.

从表 3 可以看出,利用 Trainlm 函数,采用设置验证组、测试组的提前停止法对网络进行改进训练时,平均在 24 步左右,由于验证组而提前终止了训练,此时网络的误差平方和很小,平均为 0.024 597 7, R 值接近于 1, 平均为 0.986 5. 训练效果很好,与前两种训练方法相比,训练步数进一步缩小很多,有很大改进,并且增加了网络的泛化能力. 故在本试验中,将采用这种改进的训练方法对 BP 网络进行训练.

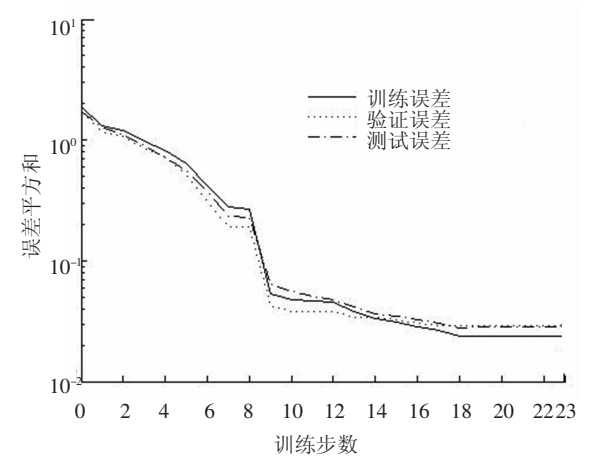


图 6 第 10 次改进训练方法的训练性能曲线

表 3 改进训练方法的训练结果

训练次数	训练步数	误差平方和	R
1	32	0.029 666 4	0.984 4
2	26	0.036 976 5	0.980 7
3	14	0.021 240 5	0.987 1
4	31	0.023 758 5	0.987 6
5	34	0.016 981 6	0.990 2
6	16	0.021 021 8	0.988 2
7	17	0.032 034 9	0.982 7
8	30	0.025 398 0	0.986 9
9	18	0.015 337 1	0.991 1
10	23	0.023 561 4	0.98 6 0
平均	24	0.024 597 7	0.986 5

3.3 BP 网络的仿真检验

用改进的训练方法对 BP 神经网络进行训练后,对试验数据进行模拟仿真. 将由网络输入得出的网络仿真输出与相应的训练目标进行线性回归分析,结果见图 7. 可以看出,网络仿真输出与相应的训练目标线性回归曲线的斜率为 $m = 0.971$, 截距为 $b = 2.89$, 即回归方程为 $A = 0.971 * T + 2.89$ (其中 A 为网络仿真输出, T 为训练目标), 相关系数为 $R = 0.986 0$, 非常接近于 1, 可以看出上一步训练出的 BP 神经网络对试验结

果具有极好的拟合.

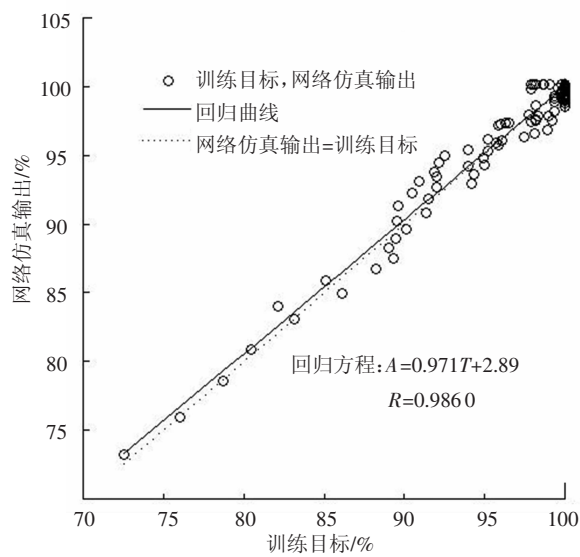


图 7 网络仿真输出与相应的训练目标线性回归

3.4 运用 BP 网络进行预测

按照表 4 中的 H_2S 进气质量浓度和气体停留时间条件,利用 3.2 中训练好的 BP 网络对试验结果进行预测,同时按前述的试验过程进行脱硫试验,将网络预测值与相应的试验结果值进行线性回归分析,结果见图 8.

表 4 BP 网络预测的试验条件

气体停留时间/s	H_2S 进气质量浓度/($mg \cdot m^{-3}$)		
10	500	800	1 100
15	300	900	1 000
20	100	400	700

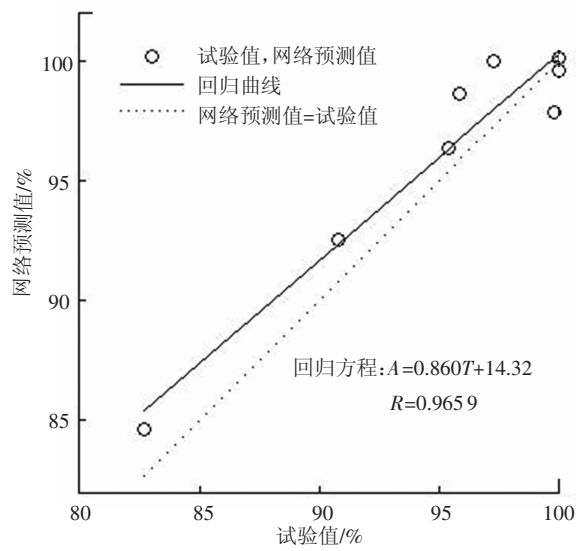


图 8 网络预测值与相应的试验值线性回归

可以看出,网络预测值与相应的试验值线性回归曲线斜率为 $m = 0.860$, 截距为 $b = 14.32$, 即回归方程为 $A = 0.860 * T + 14.32$ (其中 A 为网络

预测值, T 为试验值), 相关系数为 $R = 0.965\ 9$, 非常接近于 1, 即 BP 网络的预测结果和试验结果十分接近, 说明所建立训练的 BP 网络具有良好的预测能力. 因此, 可以利用该 BP 网络在模型的输入条件内, 即 H_2S 进气质量浓度在 $0 \sim 1\ 100\ \text{mg}/\text{m}^3$, 气体停留时间在 $8.24 \sim 24.70\ \text{s}$, 对试验结果直接进行预测, 而不必再进行重复试验.

4 结 论

1) 与常用的试验曲线拟合方法-分段进行最小二乘法相比, 采用 BP 神经网络对试验结果进行拟合时, 不需要预知待拟合结果的方程形式, 只需根据系统的输入值及其对应的输出值即可进行拟合. 尤其当变量间的非线性关系复杂、用最小二乘法不能直接拟合试验曲线时, BP 神经网络拟合试验曲线的优点就更加突出. BP 神经网络为输入输出映射关系复杂系统的建模、仿真与预测的实现提供了可行途径.

2) 3 种训练方法训练的网络误差平方和均很小, R 值均很接近于 1, 效果很好, 可以满足应用要求. 但相对来说, Levenberg-Marquardt 算法比动量梯度下降算法训练速度要快得多, 训练步数少很多, Levenberg-Marquardt 算法加上设置验证组、测试组的提前停止法的改进训练方法, 收敛速度更快, 网络的泛化能力也得到提高.

3) 将用改进训练方法训练好的 BP 网络应用于生物滴滤塔对硫化氢去除效果的仿真, 网络仿真输出与试验结果具有很好的一致性, 其相关系数 R 高达 $0.986\ 0$, 具有极好的拟合效果.

4) 在 9 组不同的试验条件下, 对网络预测值与相应的试验结果值进行线性回归分析, 相关系数 R 高达 $0.965\ 9$, 说明所建立训练的 BP 网络具有良好的预测能力.

参考文献:

- [1] 高隽. 人工神经网络原理及仿真实例[M]. 北京: 机械工业出版社, 2003.
- [2] 胡守仁. 神经网络导论[M]. 长沙: 国防科技大学出版社, 1993.
- [3] CHAVEZ-RAMIREZ A U, MUNOZ-GUERRERO R, DURON-TORRES S M, *et al.* High power fuel cell simulator based on artificial neural network [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2010, 35(21): 12125 - 12133.
- [4] YANG S H, NATARAJAN U, SEKAR M, *et al.* Prediction of surface roughness in turning operations by computer vision using neural network trained by differential evolution algorithm [J]. International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2010, 51(9/12): 965 - 971.
- [5] GUNTURKUN R. Estimation of medicine amount used anesthesia by an artificial neural network [J]. Journal of Medical Systems, 2010, 34(5): 941 - 946.
- [6] LONG Jiao. QSPR studies on soot-water partition coefficients of persistent organic pollutants by using artificial neural network [J]. Chemosphere, 2010, 80(6): 671 - 675.
- [7] FU H C, XU Y Y. Recognition of handwritten similar Chinese characters by self-growing probabilistic decision-based neural network [J]. International Journal of Neural System, 1999, 9(6): 545 - 561.
- [8] YANG Shengqiang, SUN Yan, CHEN Zu-yun, *et al.* Establishment of grey-neural network forecasting model of coal and gas outburst[C]//Proceedings of the International Conference on Mining Science & Technology. Xuzhou: China Univ Min Technol, 2009: 148 - 153.
- [9] RAJ K R, KARDA M A, ARORA J K, *et al.* Artificial Neural Network (ANN) design for Hg-Se interactions and their effect on reduction of Hg uptake by radish plant [J]. Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 2010, 283(3): 797 - 801.
- [10] CHEN K J, HUANG M. Prediction of milled rice grades using Fourier transform near-infrared spectroscopy and artificial neural networks [J]. Journal of Cereal Science, 2010, 52(2): 221 - 226.
- [11] 罗成汉. 基于 MATLAB 神经网络工具箱的 BP 网络的实现[J]. 计算机仿真, 2004, 21(5): 109 - 111.
- [12] YAN Xuefeng. Hybrid artificial neural network based on BP-PLSR and its application in development of soft sensors [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2010, 103(2): 152 - 159.

(编辑 刘 彤)