

# Применение искусственных нейронных сетей на основе многослойного персептрона для моделирования адсорбционной активности сорбента в системах водоочистки

А.В. Калач<sup>1</sup>, Д.С. Пономарёв<sup>2</sup>, Е.А. Сушко<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Воронежский институт Федеральной службы исполнения наказаний, Иркутская 1-а, Воронеж, Россия, 394072

<sup>2</sup>Ижевский государственный технический университет им. М.Т. Калашникова, Студенческая 7, Ижевск, Россия, 426069

<sup>3</sup>Воронежский государственный технический университет, Московский проспект 14, Воронеж, Россия, 394026

**Аннотация.** Одним из актуальных вопросов защиты окружающей среды является грамотное использование водных ресурсов. Особую проблематику современности в данной области представляет сбалансированное применение реагентов в системах водоочистки. В статье рассмотрен один из технологических процессов подготовки питьевой воды (дезодорация воды). Исследована возможность применения современных методов системного анализа и машинного обучения для моделирования адсорбционной активности применяемых сорбентов при проведении водоочистки. Полученные результаты помогут сократить расход ресурсов на водоподготовку и улучшить технологические процессы в целом.

## 1. Введение

На сегодня актуальным вопросом для водоочистки и систем водоподготовки является применение наиболее подходящих технологических схем и подбор значений параметров реагентов. Оптимальным решением в области дезодорации воды является использование сорбентов (в частности очистка воды порошкообразными активированными углями (ПАУ)) [15]. Данный способ может быть применен практически на любых водоочистных сооружениях. Однако существует ряд проблем связанных с использованием сорбентов, например, такие, как отсутствие рекомендации по выбору параметров дезодорации (а именно, марки активированного угля и его смесей). Определение марки сорбента (в данном случае ПАУ - порошкообразного активированного угля) согласно ГОСТ 4453-74 отчасти зависит от его адсорбционной активности. Не всегда применение марок с хорошей (порядка 225мг/г) адсорбционной активностью экономически выгодно для предприятия [7]. Другими словами, применение дорогостоящих марок с высокой адсорбционной активностью вкупе с неправильным дозированием и ограниченным временем контакта может привести к неоправданным денежным затратам. Кроме того, в данном аспекте следует учитывать и влияние параметров исходной воды, например, таких как концентрация геосмина [17, 18]. В статье рассматривается разработка модели при помощи которой, в зависимости от параметров

исходной воды, можно определить наиболее подходящую адсорбционную активность сорбента при проведении технологического процесса дезодорации в системах водоподготовки. Для начала следует рассмотреть водоочистные сооружения и технологическую схему дезодорации как открытую сложную систему, которая подвергается внешним воздействиям. На рисунке 1 представлена схема водоснабжения как система и воздействие на блок углевания питьевой воды внешних факторов.

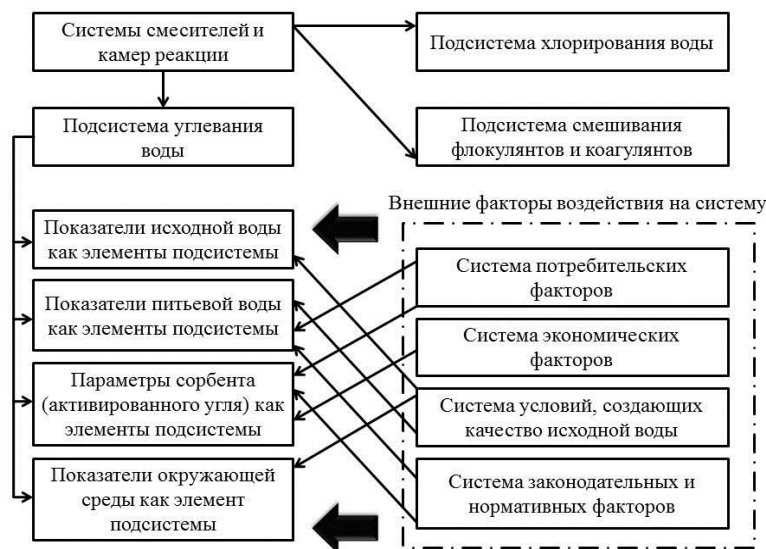


Рисунок 1. Структура рассматриваемой системы и внешнее воздействие.

Как видно из рисунка, основополагающими параметрами для подсистемы углевания воды будут показатели исходной и питьевой воды, параметры сорбента и окружающая среда. В нашем случае показатели питьевой воды следует взять как обязательное условие, которое формируется в соответствии с СанПиН 2.1.4.1074-01, а показатели исходной воды – как изменяющийся с течением времени неконтролируемый параметр. Относительно параметров сорбента (а в данном случае это адсорбционная активность) следует вести разработку модели [16]. Определение условий для разработки модели представлено на рисунке 2.

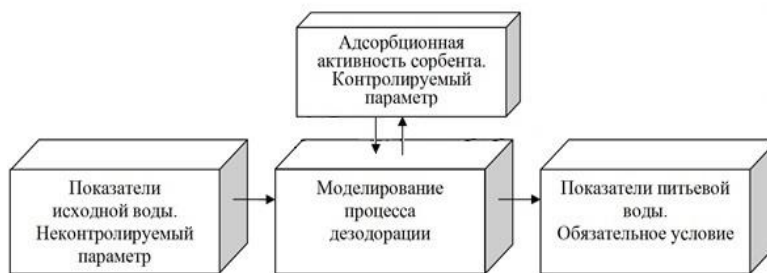


Рисунок 2. Определение условий для разработки модели.

Особый интерес в разработке модели представляет применение искусственной нейронной сети (ИНС): проведя ее обучение можно выявить скрытые зависимости и тем самым более точно описать рассматриваемые процессы. ИНС создается путем разработки структуры, определения числа скрытых слоев, выбора функции активации, и самое главное - выбора исходящих и входящих сигналов. При помощи ИНС можно решить обширный круг задач из различных областей, однако это не позволяет создать универсальные нейронные сети. Для каждой конкретной проблематики следует разрабатывать специализированную нейронную сеть, функционирующую по определенным алгоритмам [13, 19, 20].

Для распространения входящих сигналов применялась формула (1) [8, 12]:

$$X = Wf \tag{1}$$

где:  $W$  - матрица весовых коэффициентов всех нейронов;  $I$  – матрица входящих сигналов ИНС;  $X$  – результирующая матрица для нейронов скрытого слоя.

Наиболее подходящим в разрабатываемой искусственной нейронной сети будет применение сигмоидальной функции активации (2) [8, 9].

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2)$$

Где  $x$  значение каждого нейрона скрытого слоя. Для обратного распространения ошибки одного персептрона применяется формула (3) [11]:

$$E(w) = -\frac{1}{N} \sum_i^N (y_i \log \sigma(w^T x_i) + (1 - y_i) \log(1 - \sigma(w^T x_i))) \quad (3)$$

Где  $N$  объем данных,  $y_i$  – исходящий сигнал,  $w$ - весовые коэффициенты,  $x_i$  – входящий сигнал  
В работе была выбрана ИНС на основе многослойного персептрона так как: он имеет нелинейную (в нашем случае сигмоидальную) функцию активации; содержит слои скрытых нейронов, обладает высокой степенью связности, реализуемой через синапсы [1-3, 10]. Исходя из сказанного, совокупность этих свойств обеспечивает наиболее подходящие условия для разработки модели.

## 2. Разработка модели ИНС на основе многослойного персептрона для значений адсорбционной активности сорбента в системах водоподготовки

В работе была использована выборка из 62 данных, которые были сформированы по данным СПВ «Пруд-Ижевск» с 2005 по 2017 год [14, 15]. Для реализации поставленных задач разработки структуры ИНС был использован программный пакет *Excel Neural Package*. Для проведения обучения нейросети использовался алгоритм обратного распространения ошибки – *Backpropagation Algorithm* [5]. В качестве входящих сигналов для обучения ИНС были выбраны: органолептические свойства прудовой воды, баллы; температура исходной воды, градусы; температура окружающей среды, градусы; фенольный индекс; концентрация хлоридов, мг/дм<sup>3</sup>; биологическое потребление кислорода, мг/дм<sup>3</sup>; концентрация сине-зеленых водорослей тыс.кл/мл; мутность исходной воды, мг/л; цветность, градусы. В качестве исходящего сигнала ИНС была выбрана адсорбционная активность.

Адсорбционная активность смеси марок активированного угля рассчитывалась из процентного соотношения годового расхода угля в тоннах (дезодорация активированным углем производилась только в теплые периоды времени). Для марок ОУ-А и ОУ-Б адсорбционная активность была взята из ГОСТ 4453-74. Для ОУ-В данный показатель был выбран из экспериментальных расчетов [9, 10] (в ГОСТ 4453-74 данный показатель для ОУ-В не нормируется). Для определения значимости входящих сигналов относительно исходящих данные были переведены в безразмерную форму путем вычитания среднего и нормированием на дисперсию. Значения параметров нормализации представлено в таблице 1.

**Таблица 1.** Значения параметров нормализации при первом определении значимости входов.

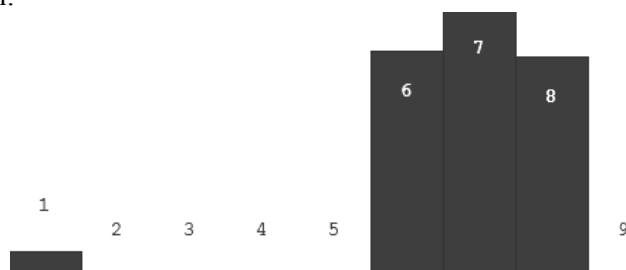
Параметры нормализации	Адсорбционная активность
Среднее параметра нормализации	0,404
Дисперсия	0,113
Отношение Среднее/Дисперсия	3,57

Далее был применен алгоритм *Boxcounting*, который базируется на оценке энтропии входящего сигнала относительно исходящего. Полученные при этом результаты представлены на рисунке 3.

Каждому параметру был присвоен номер:

1. Органолептические свойства прудовой воды, баллы;
2. Температура воды, градусы;
3. Температура окружающей среды, градусы;

- 4. Фенольный индекс;
- 5. Концентрация хлоридов, мг/дм<sup>3</sup>;
- 6. Биологическое потребление кислорода, мг/дм<sup>3</sup>;
- 7. Концентрация сине-зеленых водорослей тыс.кл/мл;
- 8. Мутность, мг/л;
- 9. Цветность, градусы.



**Рисунок 3.** Определение значимости входных параметров для адсорбционной активности.

Как видно из рисунка 3, значимыми параметрами для адсорбционной активности порошкообразного активированного угля являются:

- 1. Органолептические свойства исходной воды, баллы;
- 6. Биологическое потребление кислорода, мг/дм<sup>3</sup>;
- 7. Концентрация сине-зеленых водорослей тыс.кл/мл;
- 8. Мутность исходной воды, мг/л.

Менее значимыми параметрами для адсорбционной активности являются:

- 2. Температура воды, градусы;
- 3. Температура окружающей среды, градусы;
- 4. Фенольный индекс;
- 5. Концентрация хлоридов, мг/дм<sup>3</sup>;
- 9. Цветность, градусы.

Для улучшения предсказательной силы модели удалим наименее значимые входящие сигналы (рисунок 4). Повторные значения параметров нормализации представлено в таблице 2.



**Рисунок 4.** Вторичное определение значимости входных параметров для адсорбционной активности активированного угля.

**Таблица 2.** Значения параметров нормализации при втором определении значимости входов.

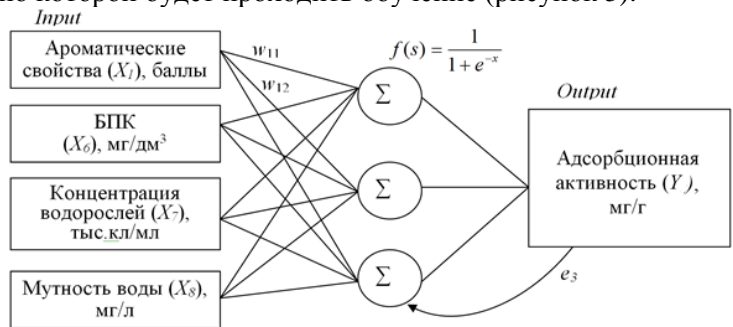
Значения параметров нормализации	Адсорбционная активность
Среднее значение параметра нормализации	0,548
Дисперсия	0,113
Отношение Среднее/Дисперсия	4,84

Далее следует разработать структуру нейронной сети. Разработаем двухслойную нейросеть (с одним скрытым слоем) и архитектурой «4-3-1» для параметра адсорбционной активности, при этом:

- число слоев без входного – 2;

- число входов – 4 для адсорбционной активности;
- число нейронов в 1-м слое – 3;
- порядок нелинейности первого слоя – 1;
- число нейронов во втором слое – 1;
- порядок нелинейности второго слоя – 1.

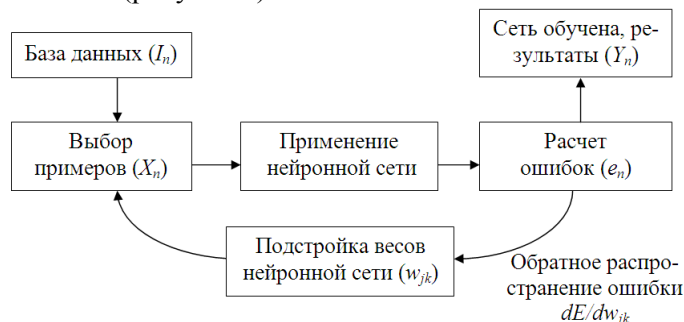
Учитывая показатели исходной воды, составим подробную схему описывающую работу нейронной сети и по которой будет проходить обучение (рисунок 5).



**Рисунок 5.** Структура нейронной сети с учетом входных сигналов для адсорбционной активности.

В нашем случае для адсорбционной активности имеется 15 связей, а объем выборки равен 62. Таким образом, необходимое условие успешного обучения выполняется (62 больше чем 15 в 4 с лишним раза) [8].

Обучение нейронной сети. Процесс обучения нейронной сети проходил в программном комплексе, в обучении использовалось обратное распространение ошибки (3) [11]. Графическая схема процесса обучения нейронной сети приведена на рисунке 8 [9]. С увеличением количества эпох при помощи обратного распространения ошибки были скорректированы веса нейронов скрытого слоя ИНС (рисунок 6).



**Рисунок 6.** Графическая схема процесса обучения искусственной нейронной сети.

Изначально погрешность нейронной сети для адсорбционной активности – составляла 1,48. После проведения обучения, через 6132 эпохи погрешность нейронной сети сократилась до 0,53.

### 3 Анализ полученных результатов, разработка уравнений нейрорегрессии

Для более подробной оценки полученных результатов обученной ИНС проведем регрессионный анализ данных. Уравнения регрессии являются эффективным инструментом для анализа полученных результатов. Для моделирования адсорбционной активности уравнение линейной регрессии имеет вид (6):

$$Y = 160 + 2,94X_1 + 3,79X_6 + 0,022X_7 + 1,87X_8 \tag{4}$$

где: Y – адсорбционная активность, мг/г; X<sub>1</sub> – органолептические свойства прудовой воды, баллы; X<sub>6</sub> – биологическое потребление кислорода, мг/дм<sup>3</sup>; X<sub>7</sub> – концентрация сине-зеленых водорослей тыс.кл/мл; X<sub>8</sub> – мутность исходной воды, мг/л.

Результаты статистики для полученных результатов представлены в таблице 3.

**Таблица 3.** Статистика для модельных данных основных параметров дезодорации воды.

Статистика	Параметр адсорбента
Число обучающих примеров	62
Число независимых переменных	4
Коэф. детерминации,	0,851
Коэффициент множественной корреляции	0,922
Стандартная ошибка	6,187
Критерий Фишера	81,148
Значимость критерия Фишера	$7,39 \cdot 10^{-23}$

Табличное значение критерия Фишера при доверительной вероятности для адсорбционной активности  $\nu_1=4$ ,  $\nu_2=57$  составляет 2,53.  $F_{\text{расч}}=81,148 > F_{\text{табл}}=2,53$ , что говорит об адекватности полученных результатов.

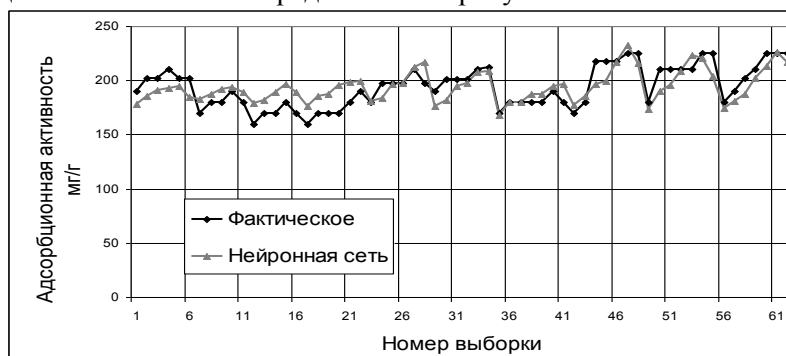
Далее составим уравнение нейрорегрессии. В таблице 4 представлены коэффициенты уравнения регрессии для моделирования значений нейронной сети и критерий Стьюдента ( $t$ -критерий).

**Таблица 4.** Коэффициенты уравнения регрессии полученных на основе обученной искусственной нейронной сети.

Параметр	Коэффициент нейрорегрессии	Стандартная ошибка	Критерий Стьюдента
Адсорбционная активность, мг/г	160,09	3,12	51,37
Органолептические свойства, баллы	2,94	1,26	2,33
БПК полное, мг/дм <sup>3</sup>	3,80	0,70	5,42
Концентрация сине-зеленых, тыс.кл/мл	0,02	0,0001	5,93
Мутность воды, мг/л	1,87	0,68	2,75

Табличное значение критерия Стьюдента при уровне значимости 5% и степенях свободы 62-4-1 =57 составляет 2,00. Расчетное значение критерия Стьюдента больше табличного для всех значений параметров исходной воды, поэтому уравнение нейрорегрессии будет аналогичным уравнению, полученному в результате регрессионного анализа.

График сравнения значений фактических и полученных в результате обученной нейронной сети для адсорбционной активности представлен на рисунке 7.



**Рисунок 7.** Сравнение результатов нейрорегрессионного моделирования и фактических значений для адсорбционной активности сорбента.

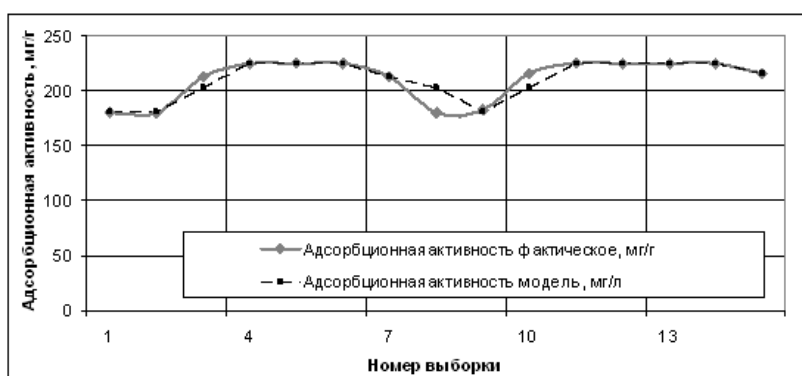
#### 4. Проверка полученных результатов на независимой выборке

Для проверки возможности использования на практике полученных результатов на основе системного анализа в водоснабжении больше всего подходит применение правила Парето. При этом тестовая выборка значений параметров дезодорации составляет 20% от общей генеральной совокупности [16]. Тестовая выборка была сформирована за два последних года по данным выбранного предприятия и не использовалась ни в обучении ИНС, ни в регрессионном анализе данных. Результаты сравнения фактических и полученных при помощи модели значений для адсорбционной активности сорбента приведены в таблице 5.

**Таблица 5.** Сравнение фактических и полученных при помощи обученной ИНС данных.

№	Фактические значения	Значения ИНС
1	180,00	180,93
2	180,00	180,93
3	212,71	202,88
4	225,00	225,00
5	225,00	225,00
6	225,00	225,00
7	212,71	212,71
8	180,00	202,88
9	182,80	180,93
10	215,93	202,88
11	225,00	225,00
12	225,00	225,00
13	225,00	225,00
14	225,00	225,00
15	215,93	215,93

Сравнение фактических значений (которые не участвовали в обучении ИНС) и полученных при помощи искусственной нейронной сети данных нагляднее можно оценить в графическом виде (рисунок 8).



**Рисунок 8.** Сравнение результатов моделирования и фактических значений для параметра адсорбционная активность.

Полученные на основе обученной ИНС результаты хорошо аппроксимируют фактические данные. Средняя ошибка аппроксимации при этом для адсорбционной активности составила 1,7%.

## 5. Выводы

1. Доказана возможность применения искусственных нейронных сетей и регрессионного анализа данных для моделирования параметров технологического процесса дезодорации.
2. На основе обученной нейронной сети была разработана модель для значений адсорбционной активности при проведении дезодорации. Кроме того, были разработаны уравнения нейрорегрессии, при помощи которых можно более точно понять взаимосвязь между элементами процесса в системах водоочистки. Выявлены скрытые зависимости и значимость параметров исходной воды для адсорбционной активности.
3. Доказано, что полученная модель адекватно рассчитывает данные показатели ( $F_{\text{расч}} = 81,148 > F_{\text{табл}} = 2,53$ ). Проверка возможности применения разработанной модели была проверена на независимой выборке, которая составляет 20% от общей генеральной совокупности. При этом результаты нейромоделирования хорошо аппроксимируют фактические данные (средняя ошибка аппроксимации составила 1,7%).
4. Актуальным представляется применение полученных результатов в качестве инструмента для прогнозирования значений параметров дезодорации.

## 6. Литература

- [1] Борисов, В.В. Основы построения нейронных сетей / В.В. Борисов, В.В. Круглов, Е.В. Харитонов. – Смоленск: Изд-во Военного ун-та войсковой ПВО ВС РФ, 2002. – 193 с.
- [2] Борисов, Ю. Нейросетевые методы обработки информации и средства их программно-аппаратной поддержки / Ю. Борисов, В. Кашкаров, С. Сорокин // Открытые системы. – 2001. – № 4. – 215 с.
- [3] Васильев, В.И. Распознающие системы. – Киев: Наукова думка, 1988. – 198 с.
- [4] Галушкин, А.И. Синтез многослойных систем распознавания образов. – М.: Энергия, 1974. – 217 с.
- [5] Документация по Excel Neural Network. Компания НейроОК. – Москва, 2001. – 57 с.
- [6] Когановский, А.М. Адсорбция и ионный обмен в процессах водоподготовки и очистки сточных вод. – Киев: Наук. думка, 1983. – 240 с.
- [7] Когановский, А.М. Адсорбция органических веществ из воды / А.М. Когановский, Н.А. Клименко, Т.М. Левченко, И.Г. Рода. – Л.: Химия, 1990. – 256 с.
- [8] Круглов, В.В. Нейронные сети конфигурации обучение, применение / В.В. Круглов, В.В. Борисов, Е.В. Харитонов // Изд-во Моек энерг ин-та фил-л. – Смоленск, 1998. – 215 с.
- [9] Круглов, В.В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика / В.В. Круглов, В.В. Борисов. – М.: Горячая линия-Телеком, 2002. – 382 с.
- [10] Куффлер, С. От нейрона к мозгу / С. Куффлер, Дж. Николе. – М.: Мир, 1979. – 119 с.
- [11] Николенко, С.И. Глубокое обучение погружение в мир нейронных сетей / С.И. Николенко, А.А. Кадулин, Е.В. Архангельская. – СПб.: Санкт-Петербург, 2018. – С. 94-115.
- [12] Рашид, Т. Создаем нейронную сеть на Python. – СПб.: ООО «Альфа-книга», 2018. – 272 с.
- [13] Журнал по проведению пробного коагулирования и пробного хлорирования воды // СПВ «Пруд-Ижевск», 2006. – 96 с.
- [14] Технологические отчеты водопроводного узла № 2, 2002-2016 г. // ВКХ СПВ «Пруд-Ижевск», 2014. – 50 с.
- [15] Технологический справочник СПВ «Пруд-Ижевск» ВУ № 1,2,3 // СПВ «Пруд-Ижевск», 2005. – 46 с.
- [16] Благодатский, Г.А. Системный анализ показателей исходной воды при производстве питьевой воды в системе центрального водоснабжения / Г.А. Благодатский, А.А. Бас, М.М. Горохов, Д.С. Пономарев // Интеллектуальные системы в производстве. – 2018. – Т. 2, № 16. – С. 84-96.
- [17] Исаков, В.Г. Математическая модель определения концентрации геосмина в питьевой воде / В.Г. Исаков, Д.С. Пономарёв // Вестник ИжГТУ имени М.Т. Калашникова. – 2016. – Т. 1, № 69. – С. 59-60.



- [18] Регрессионное моделирование концентрации геосмина в питьевой воде на основании данных МУП «Ижводоканал» / Д.С. Пономарёв, В.Г. Исаков // Интеллектуальные системы в производстве. – 2015. – Т. 2, № 26. – С. 107-108.
- [19] Пономарёв, Д.С. Нейрорегрессионная модель дезодорации воды на основе многослойного перцептрона // Вестник КГТУ имени А.Н. Туполева. – 2015. – №4. – С. 16-19.
- [20] Пономарёв, Д.С. Применение нейронных сетей в разработке модели дозирования активированного угля при очистке питьевой воды от запаха // Вестник КГТУ имени А.Н. Туполева. – 2016. – № 1. – С. 15-18.

## The use of artificial neural networks based on multilayer perceptron for modeling the adsorption activity of the sorbent in water treatment systems

A.V. Kalach<sup>1</sup>, D.C. Ponomarev<sup>2</sup>, E.A. Sushko<sup>3</sup>

<sup>1</sup>VRI of the FPS of Russia, Irkutskaya 1-a, Voronezh, Russia, 394072

<sup>2</sup>Kalashnikov Izhevsk State Technical University, Studencheskaya 7, Izhevsk, Russia, 426069

<sup>3</sup>VSTU, 20-Ietya Oktyabry st. 84, Voronezh, Russia, 394026

**Abstract.** The questions of application of methods of modeling for the balanced use of reagents in the systems of water purification in the research is devoted. In article, features of application of methods of artificial intelligence in the course of preparation of drinking water (water deodorization) are considered. Authors investigated a possibility of application of modern methods of the system analysis and machine learning for modeling of adsorptive activity of the applied sorbents when carrying out water purification. The received results allow increasing significantly efficiency deodorization, to reduce an expense of resources on water treatment, and to improve technological processes in general. The received results will allow using water resources competently.