

工业水处理

安路阳, 张立涛, 赵春竹, 等. 人工智能辅助紫外光芬顿处理废水工艺的优化[J]. 净水技术, 2026, 45(7): 122-131.

An L Y, Zhang L T, Zhao C Z, et al. Optimization of artificial intelligence assisted UV-Fenton wastewater treatment process[J]. Water Purification Technology, 2026, 45(7): 122-131.

人工智能辅助紫外光芬顿处理废水工艺的优化

安路阳¹, 张立涛^{1,*}, 赵春竹¹, 尹健博¹, 卫皇翌²

(1. 中钢集团鞍山热能研究院有限公司, 炼焦技术国家工程研究中心, 辽宁省钢铁行业废水深度处理技术工程研究中心, 辽宁鞍山 114044; 2. 中国科学院大连化学物理研究所, 辽宁大连 116023)

摘要 【目的】 人工智能(AI)因其强大的数据处理能力,在污水处理过程控制和参数优化已有研究,在反应结果预测、参数模型构建、成本优化方面具有明显优势。将AI应用于紫外光芬顿(UV-Fenton)氧化体系以提升反应参数预测准确度和时效性,考察 $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量、30%(质量分数) H_2O_2 投加量、催化剂投加量、反应时间、pH和底物质量浓度6个因素对总有机碳(TOC)去除率和TOC含量/ H_2O_2 投加量的影响,确定最佳反应条件,减少氧化剂投加量的同时提高其利用率,使得反应保持较高的污染物去除率。【方法】 对比人工神经网络(ANN)和响应面法(RSM)对不同工艺条件的TOC去除率和TOC含量/ H_2O_2 投加量的关系拟合结果,训练集中ANN的 R^2 (分别为0.988 6和0.952 7)高于RSM的 R^2 (分别为0.913 0、0.825 3),在6组测试集上ANN的均方误差(MSE)分别为27.11、149.22远小于RSM的124.45、450.44。【结果】 在ANN训练好的TOC去除率模型中通过枚举法寻找最佳反应条件: $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量为20.94 mg/L,30%(质量分数) H_2O_2 投加量为1.52 mL/L,催化剂投加量为0.16 g/L,反应时间为22.36 min,初始pH值为4.53,间甲酚底物质量浓度为83.75 mg/L,UV-Fenton反应TOC去除率为84.81%,与预测TOC去除率89.95%相近,TOC去除率最大的同时 H_2O_2 没有剩余,说明预测模型准确性较高与效率较高。【结论】 因此,利用AI可以快速、高效地确定及优化反应参数,提高污染物去除率,降低药剂投加量,降低运行成本。

关键词 人工智能; 人工神经网络; 预测模型; 优化参数; 紫外光芬顿; 间甲酚

中图分类号: X703 **文献标志码:** A **文章编号:** 1009-0177(2026)07-0122-10

DOI: 10.15890/j.cnki.jsjs.2026.07.014

Optimization of Artificial Intelligence Assisted UV-Fenton Wastewater Treatment Process

An Luyang¹, Zhang Litao^{1,*}, Zhao Chunzhu¹, Yin Jianbo¹, Wei Huangzhao²

(1. Liaoning Engineering Research Center for Advanced Wastewater Treatment Technology in Iron and Steel Industry Sinosteel, National Engineering Research Center for Coking Technology, Anshan Research Institute of Thermo-Energy Co., Ltd., Anshan 114044, China; 2. Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, China)

Abstract [Objective] Owing to the powerful data processing capability, artificial intelligence (AI) has been applied in the process control and parameter optimization of wastewater treatment, and presents prominent advantages in reaction result prediction, parametric model establishment and cost optimization. This paper adopts AI for the UV-Fenton oxidation system to improve the accuracy and timeliness of reaction parameter prediction. Six influencing factors, namely the dosage of ferrous sulfate heptahydrate ($\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$), dosage of 30% (mass fraction) hydrogen peroxide (H_2O_2), catalyst dosage, reaction time, pH value and substrate mass

[收稿日期] 2024-08-02

[基金项目] 2023年度中国石化联合会科技指导计划

[作者简介] 安路阳(1985—),男,正高级工程师,主要从事工业固废资源化利用及高浓度、难降解煤化工废水深度处理技术研发及工程转化等工作,E-mail:anluyang2008@126.com。

[通信作者] 张立涛(1989—),男,高级工程师,主要从事煤炭资源高效利用与废水处理等工作,E-mail:15040786507@163.com。

concentration, are investigated for their effects on total organic carbon (TOC) removal rate and the ratio of TOC content to H_2O_2 dosage. The optimal reaction conditions are determined to reduce the dosage and improve the utilization efficiency of oxidant, while maintaining a high pollutant removal rate. [Methods] The fitting performances of artificial neural network (ANN) and response surface methodology (RSM) for the correlation between TOC removal rate, the ratio of TOC content to H_2O_2 dosage and various process conditions were compared. In the training set, the coefficients of determination (R^2) of ANN were 0.988 6 and 0.952 7 respectively, which were higher than those of RSM (0.913 0 and 0.825 3). For six groups of test sets, the mean square error (MSE) values of ANN were 27.11 and 149.22, substantially lower than 124.45 and 450.44 obtained from RSM. [Results] Based on the well-trained ANN model for TOC removal rate, the enumeration method was used to screen the optimal reaction conditions; $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ dosage of 20.94 mg/L, 30% (mass fraction) H_2O_2 dosage of 1.52 mL/L, catalyst dosage of 0.16 g/L, reaction time of 22.36 min, initial pH of 4.53, and m-cresol substrate mass concentration of 83.75 mg/L. Under the above conditions, the actual TOC removal rate of UV-Fenton reaction reached 84.81%, which was close to the predicted value of 89.95%. The maximum TOC removal rate was achieved with no residual H_2O_2 , proving that the prediction model possessed high accuracy and efficiency. [Conclusion] Accordingly, AI can rapidly and efficiently identify and optimize reaction parameters, increase pollutant removal efficiency, cut down chemical dosage and reduce operational costs.

Keywords artificial intelligence (AI); artificial neural network (ANN); prediction model; optimized parameter; UV-Fenton; m-cresol

人工智能(AI)是通过计算机科学、数学、心理学、语言学、神经科学等多学科的综合应用,使机器能够模拟、延伸和扩展人的智能行为。近年来,对于AI的理论及技术研究日益成熟,其应用领域也不断扩展。AI在污水处理过程控制、水质监测、污水处理建模和污水处理过程中故障诊断等方面已有应用^[1-3]。相比传统处理模型,AI模型能够处理和分析大量数据,能够自主学习规律和模式,用时更少,大幅降低人工成本^[4-5]。

Aghaeinejad-Meybodi等^[6]针对降解氟西汀建立人工神经网络(ANN)和中心组合设计(CCD)建模,ANN模型在预测催化过程非线性行为以及预测氟西汀减小效率值准确性方面较CCD更优;Dragoi等^[7]采用ANN建立了质量传递过程中污染物类型、渗透温度、渗透压力和渗透量之间的模型;Vasseghian等^[8]在高级氧化过程中,通过ANN建立二硫酸盐质量浓度、紫外灯辐照度、温度、染料质量浓度、时间5个变量和染料去除率的关系,并找到最佳去除率下对应的反应条件;在类光芬顿体系下采用360组试验数据建立模型,考察pH、过硫酸根含量、铁离子含量、马来酸含量、不同无机盐离子含量5个变量对马来酸去除率的影响^[9]。这些研究表明,运用AI技术能够较好地优化污染物去除过程中的工艺参数。

紫外光芬顿(UV-Fenton)技术作为高级氧化技术的分支,相比于传统的Fenton法具有明显优势,

UV与Fenton试剂的联合应用降低了 Fe^{2+} 的用量,提高了过氧化氢(H_2O_2)的利用率^[10-11];紫外光和 Fe^{2+} 对 H_2O_2 的催化分解存在协同作用^[12]。但是目前存在 H_2O_2 利用率不高,污染物去除率低等问题^[13-14]。因此,将AI与UV-Fenton工艺优化相结合,解决现有技术存在的不足具有重要的应用意义。

本文将AI应用于UV-Fenton工艺优化中,考察 $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量、30%(质量分数) H_2O_2 投加量、催化剂投加量、反应时间、pH和底物质量浓度6个因素对总有机碳(TOC)去除率和TOC含量/ H_2O_2 投加量的影响,确定最佳反应条件,提高TOC去除率,减少 H_2O_2 投加量。

1 试验方法

1.1 试验材料及仪器

材料:硫酸亚铁、氢氧化钠、浓硫酸均为分析纯,天津市科密欧化学试剂有限公司;30%(质量分数) H_2O_2 为分析纯,天津市富宇精细化工有限公司;间甲酚,分析纯,百灵威化学技术有限公司;

仪器:TOC-VCPN总有机碳测定仪,P1021型高效液相色谱仪,ATX239电子天平,AXLC1820超纯水机,驰久84-1搅拌器。

1.2 分析方法

1.2.1 间甲酚含量的测定

采用大连依利特分析仪器有限公司生产的HPLC-P1201型高效液相色谱分析仪,分析间甲酚的含量。色谱柱为C18反相色谱柱(SinoChrom ODS-BP

5 μm , 4.6 mm $\times$ 250 mm);流动相为甲醇:水=80:20 (体积分数比);流速为 1.0 mL/min;柱温为常温。

1.2.2 总有机碳的测定

采用日本岛津公司生产的 TOC-VCPN 分析仪测定溶液总有机碳。

1.2.3 H_2O_2 含量的测定

采用紫外分光光度法测定 H_2O_2 含量,波长为 400 nm,补充摩尔吸光系数^[15]为 1 010 L/(mol $\cdot$ cm)。

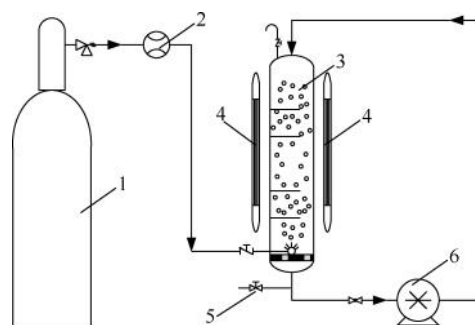
1.3 试验设计

取 500 mL 质量浓度为 100 mg/L 间甲酚溶液,加入一定量 $\text{FeSO}_4\cdot 7\text{H}_2\text{O}$,一定量光催化剂,混合后加入磁子放在磁力搅拌机上搅拌,加入一定体积 30% (质量分数) H_2O_2 ,充分混匀;将混匀后的废水注入反应器中;通入空气 37 mL/min,开启循环泵,开紫外灯开始反应,此时为反应零点;每隔 5 min 取一次样,取样前需要放空 2 mL,取样过滤检测 TOC 和 H_2O_2 含量。紫外灯型号为 LD-365,功率为 9.6 kW,辐照度为 120 W/cm,装置的光程为 600 mm。反应装置如图 1 所示。

2 结果与讨论

2.1 响应面法(RSM)试验设计

采用数学模型关联反应条件与反应结果,可根据模型预测某一条件下的反应结果。本文使用 RSM 建立紫外光芬顿反应条件和 TOC 去除率和 H_2O_2 投加量之间的数学模型,同时研究 $\text{FeSO}_4\cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量、催化剂投加量、反应时间、初始 pH 及



注:1—空气瓶;2—流量计;3—反应器;4—紫外灯;5—取样口;6—循环泵。

图 1 紫外光芬顿反应装置

Fig. 1 UV-Fenton Reaction Device

底物质量浓度对 UV-Fenton 中 TOC 去除率和 H_2O_2 投加量的影响。

选择 $\text{FeSO}_4\cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量、30% (质量分数) H_2O_2 投加量、催化剂投加量、反应时间、初始 pH 及底物质量浓度 6 个变量为控制因素,开展中心旋转组合试验设计(CCRD)。

试验因素水平编码如表 1 所示。在试验设计中,使用式(1)对变量进行编码。

$$x_i = \frac{\alpha[2X_i - (X_{\max} + X_{\min})]}{X_{\max} - X_{\min}} \quad (1)$$

其中: x_i ——变量的编码值;

X_i ——变量实际值;

$X_{\max}$ 和 $X_{\min}$ ——轴向变量的上限和下限;

α ——取值为 1.565。

表 1 试验因素水平编码

Tab. 1 Levels and Codes of Experiment-Factors

试验因素	单位	水平和编码				
		-1.565	-1	0	1	1.565
$\text{FeSO}_4\cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量	mg/L	1.48	6	14	22	26.52
H_2O_2 (质量分数为 30%) 投加量	mg/L	0.57	0.8	1.2	1.6	1.83
催化剂投加量	g/L	0.02	0.06	0.13	0.2	0.24
反应时间	min	3.20	8	16.5	25	29.80
pH 值	—	0.73	2	4.25	6.5	7.77
底物质量浓度	mg/L	35.87	50	75	100	114.13

试验设计如表 2 所示,由 86 组编码条件组成。使不可控制因素最小化,试验顺序被随机排列。其中 X_1 、 X_2 、 X_3 、 X_4 、 X_5 和 X_6 分别代表 $\text{FeSO}_4\cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量、30% (质量分数) H_2O_2 投加量、催化剂投加量、反应时间、初始 pH 及底物浓

度, Y_1 和 Y_2 分别代表 TOC 去除率和 TOC 含量/ H_2O_2 投加量。

2.2 模型及评价

式(2)~(4)是用来预测响应值的二次方程表达式。

表 2 中心反旋转设计(CCRD)和试验结果
Tab. 2 Central Counter-Rotation Design (CCRD) and Experiment Results

序号	不同因素水平						Y ₁	Y ₂	序号	不同因素水平						Y ₁	Y ₂
	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆											
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	13.69%	18.73	44	1	1	-1	1	-1	1	32.20%	44.05
2	1	-1	-1	-1	-1	-1	31.70%	43.36	45	-1	-1	1	1	-1	1	27.47%	75.15
3	-1	1	-1	-1	-1	-1	21.90%	14.98	46	1	-1	1	1	-1	1	31.02%	84.87
4	1	1	-1	-1	-1	-1	19.40%	13.27	47	-1	1	1	1	-1	1	22.10%	30.24
5	-1	-1	1	-1	-1	-1	21.65%	29.62	48	1	1	1	1	-1	1	31.23%	42.72
6	1	-1	1	-1	-1	-1	45.53%	62.27	49	-1	-1	-1	-1	1	1	17.87%	43.92
7	-1	1	1	-1	-1	-1	21.24%	14.53	50	1	-1	-1	-1	1	1	29.10%	71.55
8	1	1	1	-1	-1	-1	40.15%	27.46	51	-1	1	-1	-1	1	1	17.73%	21.79
9	-1	-1	-1	1	-1	-1	29.28%	40.05	52	1	1	-1	-1	1	1	20.66%	25.39
10	1	-1	-1	1	-1	-1	49.23%	67.34	53	-1	-1	1	-1	1	1	16.66%	40.95
11	-1	1	-1	1	-1	-1	36.58%	25.02	54	1	-1	1	-1	1	1	23.10%	56.79
12	1	1	-1	1	-1	-1	68.58%	46.90	55	-1	1	1	-1	1	1	16.41%	20.18
13	-1	-1	1	1	-1	-1	43.06%	58.90	56	1	1	1	-1	1	1	27.24%	33.48
14	1	-1	1	1	-1	-1	73.85%	101.01	57	-1	-1	-1	1	1	1	18.81%	46.25
15	-1	1	1	1	-1	-1	60.43%	41.33	58	1	-1	-1	1	1	1	69.77%	171.51
16	1	1	1	1	-1	-1	72.65%	49.69	59	-1	1	-1	1	1	1	24.64%	30.29
17	-1	-1	-1	-1	1	-1	19.09%	22.26	60	1	1	-1	1	1	1	78.18%	96.10
18	1	-1	-1	-1	1	-1	65.05%	75.86	61	-1	-1	1	1	1	1	31.59%	77.67
19	-1	1	-1	-1	1	-1	20.53%	11.97	62	1	-1	1	1	1	1	73.66%	181.08
20	1	1	-1	-1	1	-1	65.50%	38.19	63	-1	1	1	1	1	1	22.17%	27.25
21	-1	-1	1	-1	1	-1	17.44%	20.35	64	1	1	1	1	1	1	69.11%	84.95
22	1	-1	1	-1	1	-1	52.78%	61.56	65	-1.565	0	0	0	0	0	36.23%	44.74
23	-1	1	1	-1	1	-1	21.08%	12.29	66	1.565	0	0	0	0	0	85.97%	106.17
24	1	1	1	-1	1	-1	62.02%	36.17	67	0	-1.565	0	0	0	0	81.01%	59.28
25	-1	-1	-1	1	1	-1	38.85%	45.31	68	0	1.565	0	0	0	0	86.96%	59.28
26	1	-1	-1	1	1	-1	83.79%	97.72	69	0	0	-1.565	0	0	0	84.04%	103.79
27	-1	1	-1	1	1	-1	35.50%	20.70	70	0	0	1.565	0	0	0	85.99%	106.20
28	1	1	-1	1	1	-1	84.55%	49.31	71	0	0	0	-1.565	0	0	19.78%	24.42
29	-1	-1	1	1	1	-1	30.29%	35.32	72	0	0	0	1.565	0	0	88.09%	108.78
30	1	-1	1	1	1	-1	84.51%	98.56	73	0	0	0	0	-1.565	0	33.31%	41.14
31	-1	1	1	1	1	-1	39.46%	23.01	74	0	0	0	0	1.565	0	22.63%	27.95
32	1	1	1	1	1	-1	87.74%	51.17	75	0	0	0	0	0	-1.565	83.30%	48.53
33	-1	-1	-1	-1	-1	1	19.26%	52.70	76	0	0	0	0	0	1.565	77.67%	141.42
34	1	-1	-1	-1	-1	1	20.18%	55.22	77	0	0	0	0	0	0	80.00%	98.79

(续表2)

序号	不同因素水平						Y ₁	Y ₂	序号	不同因素水平						Y ₁	Y ₂
	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆				X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆		
35	-1	1	-1	-1	-1	1	17.06%	23.33	78	0	0	0	0	0	0	83.16%	102.70
36	1	1	-1	-1	-1	1	23.16%	31.68	79	0	0	0	0	0	0	84.81%	104.74
37	-1	-1	1	-1	-1	1	19.24%	52.63	80	0	0	0	0	0	0	88.90%	109.79
38	1	-1	1	-1	-1	1	21.06%	57.62	81	0	0	0	0	0	0	88.27%	109.01
39	-1	1	1	-1	-1	1	19.15%	26.20	82	0	0	0	0	0	0	85.80%	105.97
40	1	1	1	-1	-1	1	22.28%	30.48	83	0	0	0	0	0	0	87.25%	107.75
41	-1	-1	-1	1	-1	1	22.87%	62.58	84	0	0	0	0	0	0	87.73%	108.34
42	1	-1	-1	1	-1	1	35.00%	95.76	85	0	0	0	0	0	0	88.20%	108.92
43	-1	1	-1	1	-1	1	24.67%	33.75	86	0	0	0	0	0	0	81.39%	100.52

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^6 b_i x_i + \sum_{i=1}^5 \sum_{j=i+1}^6 b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^6 b_{ii} x_i^2 + \varepsilon \quad (2)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (y_i - f_i)^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} \quad (3)$$

$$F = \frac{R^2/(k-1)}{R^2/(n-k)} \quad (4)$$

其中:Y——预测的响应值;

b_0 ——偏移项;

b_i ——线性效应;

b_{ij} ——交互作用;

b_{ii} ——平方项;

i, j ——不同试验因素的编号;

ε ——随机误差;

R^2 ——多项式模型拟合程度;

F ——变量显著性;

y ——实际实验值;

f ——模型的预测值;

n ——数据的数量;

k ——因素数量。

进行回归分析,方差分析因素与变量之间的关系。TOC去除率和TOC含量/ H_2O_2 投加量作为试验的响应值。采用Design Expert软件进行回归分析,使用方差分析试验结果,用以研究过程变量和响应值间的交互作用。

2.3 RSM模型评价

由表3可知,在TOC去除率模型中,预测决定系数 R^2_{Pred} (0.838 0)与调整决定系数 R^2_{Adj} (0.910 0)

基本一致。精密度(Adeq Precision)测量信号的信噪比,当其大于4时可取,该模型的比率为19.25,表示其有足够的信号,即可以用来指导试验设计。 F 值为32.84表明模型是显著的,只有0.01%的几率因波动而导致 F 值变大。概率值(p)小于0.1,表明其对应项是显著的。在这个模型中, X_1X_4 、 X_1X_5 、 X_1X_6 、 X_3X_5 、 X_1^2 、 X_4^2 、 X_5^2 是显著项。而 p 值大于0.1表示其对应项是不显著的,在该模型中包含很多不显著项目。失拟项的 F 值为8,表示其相对于纯误差是显著的。

在TOC含量/ H_2O_2 投加量模型中, R^2_{Pred} (0.824 0)与 R^2_{Adj} (0.671 2)基本一致。“Adeq Precision”为测量信号的信噪比,当其大于4时可取,该模型的比率为15.844 8,表示其有足够的信号,即可以用来指导试验设计。 F 值为15.73表明模型是显著的,只有0.01%的几率波动而导致 F 值变大。 p 值小于0.1,表明其对应项是显著的。在这个模型中, X_1X_2 、 X_1X_4 、 X_1X_5 、 X_2X_4 、 X_2X_6 、 X_1^2 、 X_1^2 、 X_4^2 、 X_5^2 是显著项。而 p 值大于0.1表示其对应项是不显著的,在该模型中包含很多不显著项目。失拟项的 F 值为18.75,表示其相对于纯误差是显著的。

对式(2)通过式(1)变换可以得到最终模型[式(5)和式(6)]。

$$\begin{aligned} Y_1 = & -109.05 + 5.11 F + 2.11 H + \\ & 71.22 C + 6.52 t + 38.69 p - 0.03 m + \\ & 0.06 F_t + 0.34 F_p - 0.02 F_m - \\ & 12.07 C_p - 0.16 F^2 - 0.18 t^2 - \\ & 4.69 p^2 \end{aligned} \quad (5)$$

$$Y_2 = -247.63 + 0.67 F + 249.69 H + 23.31 C + 7.18 t + 37.25 p + 0.78 m - 1.64 FH + 0.09 F_t + 0.41 F_p - 1.19 H_t - 0.35 H_m - 90.98 H^2 - 0.16 t^2 - 4.87 p^2 \quad (6)$$

其中: F —— Fe^{2+} 投加量, mg/L;
 H —— H_2O_2 投加量, mg/L;
 C ——催化剂投加量, g/L;
 t ——反应时间, min;
 p ——初始 pH 值;
 m ——底物质量浓度, mg/L;
 F_t —— FeSO_4 投加量与反应时间的交互作用;
 F_p —— FeSO_4 投加量与体系 pH 的交互作用;
 F_m —— FeSO_4 投加量与光催化剂投加量

的交互作用;
 C_p ——间甲酚初始浓度与体系 pH 的交互作用;
 H_t —— H_2O_2 投加量与反应时间的交互作用;
 H_m —— H_2O_2 投加量与光催化剂投加量的交互作用。

2.4 ANN 模型

由表 3 可知, RSM 模型对于 TOC 去除率模型的 R^2 为 0.938 6, 对于 TOC 含量/ H_2O_2 投加量模型的 R^2 为 0.879 9, 模型拟合程度不高, 无法精准确定最优工艺参数, 所以采用 ANN 进行数据分析、拟合及判断, 寻找最佳工艺参数。图 2 为通过 ANN 建立 $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量、 H_2O_2 投加量(质量分数为 30%)、催化剂投加量、反应时间、初始 pH 及底物质量浓度 6 个变量与 TOC 去除率和 TOC 含量/ H_2O_2 投加量的联系。

表 3 响应面模型的方差分析和回归方程系数显著性检验
Tab. 3 Significance Test of RSM Variance Analysis and Regression Equation Coefficient

方差来源	TOC 去除率			TOC 变化/ H_2O_2 投加量		
	系数	F 值	p 值	系数	F 值	p 值
模型	—	32.84	<0.000 1	—	15.73	<0.000 1
截距	85.29	—	—	100.67	—	—
X_1	12.54	160.75	<0.000 1	15.68	71.17	<0.000 1
X_2	0.84	0.73	0.396 7	-14.90	64.31	<0.000 1
X_3	1.39	1.99	0.164 1	1.63	0.77	0.383 5
X_4	11.19	127.94	<0.000 1	14.82	63.58	<0.000 1
X_5	4.52	20.86	<0.000 1	3.70	3.96	0.051 2
X_6	-7.56	58.49	<0.000 1	8.99	23.40	<0.000 1
X_1X_2	-0.28	0.08	0.782 5	-5.24	7.40	0.008 6
X_1X_3	-0.14	0.02	0.888 7	-0.55	0.08	0.775 8
X_1X_4	3.88	14.30	0.000 4	6.19	10.30	0.002 2
X_1X_5	6.11	35.45	<0.000 1	7.44	14.88	0.000 3
X_1X_6	-3.87	14.22	0.000 4	0.20	0.01	0.917 1
X_2X_3	-0.09	0.01	0.930 7	-0.93	0.24	0.629 5
X_2X_4	0.70	0.46	0.499 3	-4.04	4.39	0.040 5
X_2X_5	-0.13	0.02	0.897 4	-1.60	0.69	0.410 8
X_2X_6	-1.03	1.02	0.317 6	-3.47	3.24	0.077 0

(续表3)

方差来源	TOC 去除率			TOC 变化/ H_2O_2 投加量		
	系数	<i>F</i> 值	<i>p</i> 值	系数	<i>F</i> 值	<i>p</i> 值
X_3X_4	0.67	0.42	0.518 7	1.12	0.34	0.562 3
X_3X_5	-1.90	3.43	0.069 0	-1.93	1.00	0.321 6
X_3X_6	-1.38	1.81	0.184 0	-1.19	0.38	0.541 1
X_4X_5	1.51	2.17	0.146 1	3.10	2.58	0.113 6
X_4X_6	-1.49	2.10	0.152 4	3.00	2.42	0.125 5
X_5X_6	0.15	0.02	0.885 9	2.89	2.25	0.139 4
X_1^2	-9.73	19.49	< 0.000 1	-7.43	3.22	0.077 8
X_2^2	-0.39	0.03	0.861 8	-14.04	11.50	0.001 3
X_3^2	0.04	0.00	0.986 4	4.63	1.25	0.268 2
X_4^2	-12.65	32.98	< 0.000 1	-11.05	7.12	0.009 9
X_5^2	-23.25	111.35	< 0.000 1	-24.13	34.00	< 0.000 1
X_6^2	-1.81	0.68	0.413 8	0.53	0.02	0.897 6
失拟	—	8.00	0.001 1	—	18.75	< 0.000 1
R^2	0.938 6	—	—	0.879 9	—	—
R_{adj}^2	0.910 0	—	—	0.824 0	—	—
R_{pred}^2	0.838 0	—	—	0.671 2	—	—
Adeq Precision	19.253 0	—	—	15.844 8	—	—

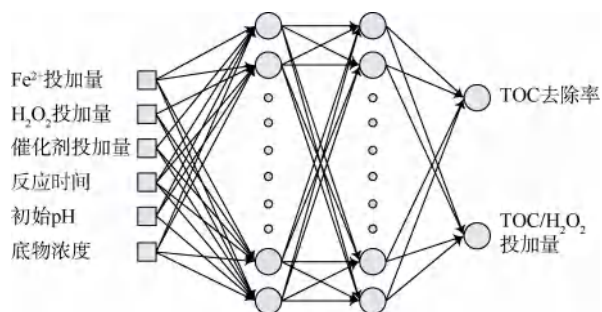


图2 基于ANN预测反应后的TOC去除率和
TOC含量/ H_2O_2 投加量

Fig.2 TOC Removal Rates and TOC Content / H_2O_2 Dosages
after Reaction Based on ANN Prediction

选择响应面试验中 77 组有效数据进行神经网络拟合。其中,前面 71 组数据作为训练集,采用交叉验证方式调参,后 6 组数据作为测试集;交叉验证 $k=10$,数据标准化方式选择 StandardScaler。对于 TOC 去除率, $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量、30% (质量分数) H_2O_2 投加量、催化剂投加量、反应时间、初始 pH 及

底物质量浓度 6 个因素作为输入层,第 1 层隐藏层数为 9,第 2 层隐藏层层数为 10,训练集上 R^2 为 0.988 6,在 6 组测试集上的均方误差 (MSE) 为 27.11。对于 TOC 含量/ H_2O_2 投加量, $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量、30% (质量分数) H_2O_2 投加量、催化剂投加量、反应时间、初始 pH 及底物质量浓度 6 个因素作为输入层,第 1 层隐藏层数为 8,第 2 层隐藏层层数为 9,训练集上 R^2 为 0.952 7,在 6 组测试集上的 MSE 为 149.22。图 3 为 RSM 和 ANN 在训练集和测试集的实测值和预测值,ANN 预测精准于 RSM。

如图 4 所示,对于 TOC 去除率,在 71 组训练集上 R^2 分别为 ANN(0.988 6)>RSM(0.913 0),在 6 组测试集上 MSE 分别为 ANN(27.11)<RSM(124.45)。对于 TOC 含量/ H_2O_2 投加量训练集上 R^2 分别为 ANN(0.952 7)>RSM(0.825 3),在 6 组测试集上 MSE 分别为 ANN(149.22)<RSM(450.44)。这充分证明 ANN 预测更加准确。

将 TOC 作为模型优化目标。 $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加

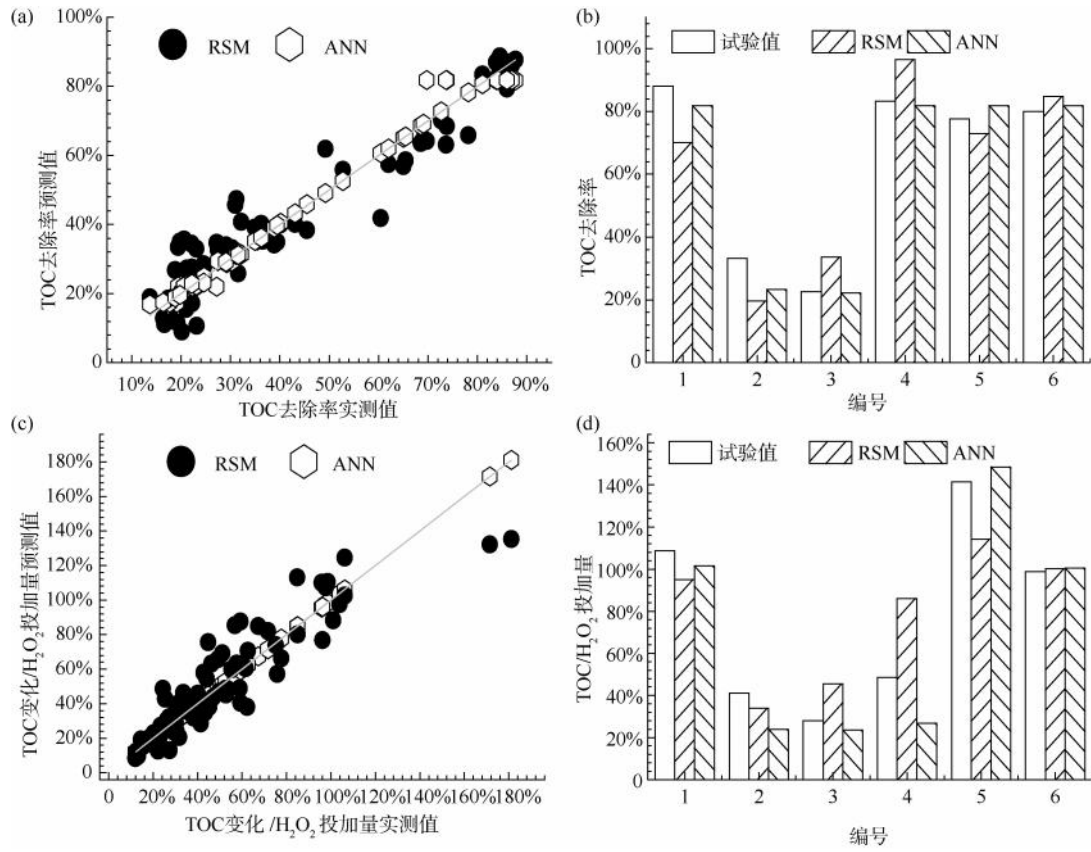


图3 RSM 和 ANN 对 TOC 去除率和 TOC 含量/ H_2O_2 投加量在训练集和测试集的对比

Fig. 3 Comparison of RSM and ANN for TOC Removal and TOC Content / H_2O_2 Dosages on Training and Testing Sets

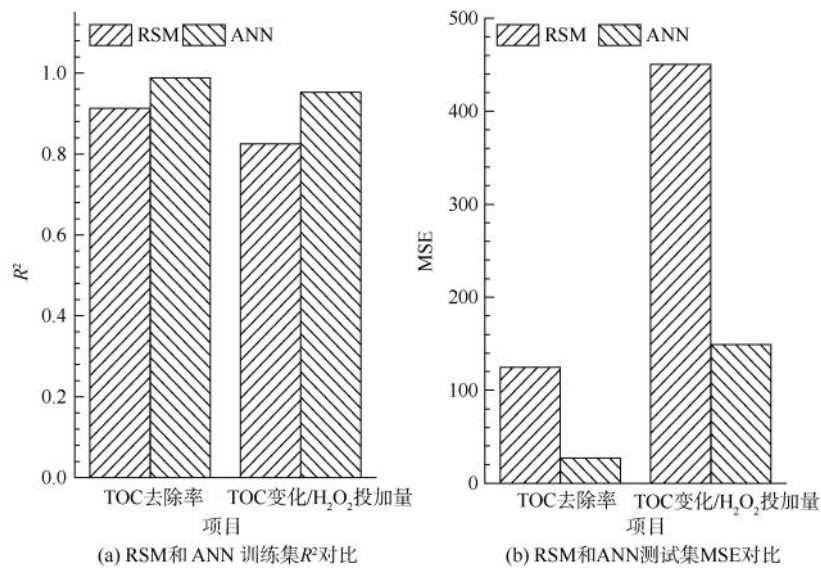


图4 RSM 和 ANN 在训练集和测试集上的 R^2 and MSE

Fig. 4 Comparison of R^2 and MSE of RSM and ANN on Training and Testing Sets

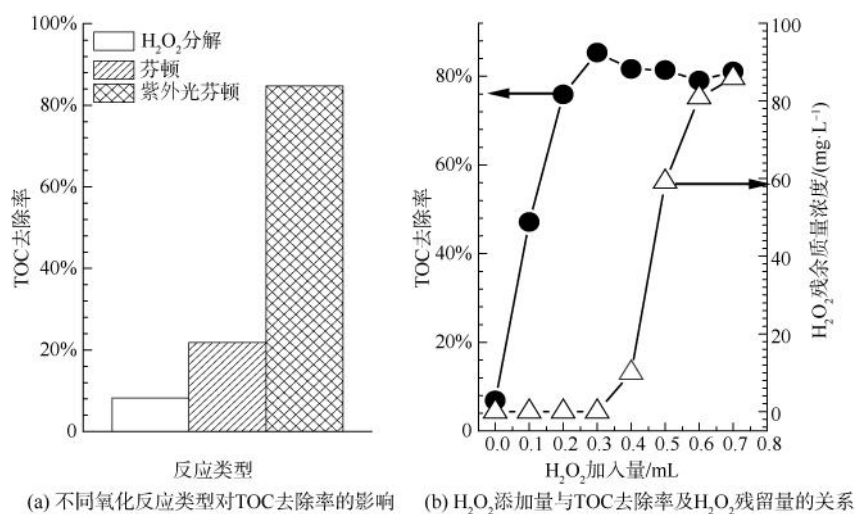


图5 最优条件下UV-Fenton、芬顿反应、 H_2O_2 分解对比

Fig. 5 Comparison of UV-Fenton Reaction, Fenton Reaction, H_2O_2 Decomposition under Optimal Conditions

量从 1.48 mg/L 到 26.52 mg/L 划分 20 小份, 30% (质量分数) H_2O_2 投加量从 0.57 mL/L 到 1.83 mL/L 划分 20 小份, 催化剂投加量 (0.02~0.24 g/L) 划分 20 小份, 反应时间从 3.20 min 到 29.80 min 划分 20 小份, pH 值从 0.73 到 7.77 划分 20 小份, 底物质量浓度从 35.87 mg/L 到 114.13 mg/L 划分 20 小份, 总共获得 6.4×10^7 个样本点, 输入上述训练好的 TOC 去除率模型中, 得到最佳反应条件是 $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量 20.94 mg/L, 30% (质量分数) H_2O_2 投加量为 1.52 mL/L, 催化剂投加量为 0.16 g/L, 反应时间为 22.36 min, pH 值为 4.53, 底物质量浓度为 83.75 mg/L。

基于上述 ANN 预测的最佳反应条件, 开展氧化试验研究。如图 5 所示, 没有外界紫外光照射, 不投加 $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, 此时为 H_2O_2 分解产生羟基自由基 ($\text{HO}\cdot$), TOC 去除率为 8.25%; 没有外界紫外光照射, 投加 $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, 此时为 Fenton 反应, TOC 去除率为 21.87%, 当有外界紫外光照射, 此时为 UV-Fenton 反应, TOC 去除率为 84.81%。由试验结果可知, UV-Fenton 效果最好, 相对于芬顿反应 TOC 去除率大幅提升, 且与预测 TOC 去除率 89.95% 相近, 预测模型准确性较高。UV 与 Fenton 技术相结合, 提高了 H_2O_2 的利用率, 来自紫外光的能量辐射促进亚铁离子的生成, 使得更多的 $\text{HO}\cdot$ 生成, 提高了污染物的去除能力^[16]。

在 UV-Fenton 反应中, 研究 H_2O_2 投加量和 TOC

去除率及 H_2O_2 残留量的关系, 当 30% (质量分数) H_2O_2 投加量为 0.30 mL 时, TOC 去除率最高, 且 H_2O_2 残余含量为零, 确定 30% (质量分数) H_2O_2 最佳投加量为 0.30 mL。

3 结论

(1) 采用枚举法考察 ANN 模型预测 TOC 去除率的最佳反应条件是: $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量为 20.94 mg/L, 30% (质量分数) H_2O_2 投加量为 1.52 mL/L, 催化剂投加量为 0.16 g/L, 反应时间为 22.36 min, pH 值为 4.53, 间甲酚质量浓度为 83.75 mg/L, UV-Fenton 反应中 TOC 去除率为 84.81%, 与预测 TOC 去除率 89.95% 相近, 预测模型准确性较高。

(2) 对于 TOC 去除率, 采用 ANN 在 71 组训练集上的 R^2 为 0.988 6 大于 RSM 的 0.913 0; 对于 TOC 含量/ H_2O_2 投加量训练集上 ANN 的 R^2 为 0.952 7 大于 RSM 的 0.825 3, 充分证明 ANN 预测更加准确。

(3) $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 投加量为 20.94 mg/L, 30% (质量分数) H_2O_2 投加量为 0.30 mL/L, 催化剂投加量为 0.16 g/L, 反应时间为 22.36 min, pH 值为 4.53, 间甲酚质量浓度为 83.75 mg/L 时, TOC 去除率最大且 H_2O_2 没有剩余。

参考文献

- [1] 李若飞, 达尔仁·阿斯哈提, 王振豪, 等. 人工智能应用于水污染控制过程的研究进展[J]. 智能城市, 2019, 5(20): 9-

- 10.
- Li R F, Da' erren A, Wang Z H, et al. Research progress of artificial intelligence applied to water pollution control process [J]. *Intelligent City*, 2019, 5(20): 9-10.
- [2] 赵秉举. 基于人工智能的微型生活污水处理过程控制与优化 [J]. *智能建筑与智慧城市*, 2024(3): 174-176.
- Zhao B J. Control and optimization of micro domestic sewage treatment process based on artificial intelligence [J]. *Intelligent Building & Smart City*, 2024(3): 174-176.
- [3] 高嵩, 邱勇, 孟凡琳, 等. 污水处理工艺数据分析技术的现状与趋势 [J]. *环境工程*, 2022, 40(6): 194-203.
- Gao S, Qiu Y, Meng F L, et al. State-of-art and trends of data analytical techniques for wastewater treatment processes [J]. *Environmental Engineering*, 2022, 40(6): 194-203.
- [4] 胡锦文, 孟广源, 张之杰, 等. 人工智能在电化学水处理过程中的应用 [J]. *化工进展*, 2022, 41(S1): 497-506.
- Hu J W, Meng G Y, Zhang Z J, et al. Application of artificial intelligence model in electrochemical water treatment process [J]. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2022, 41(S1): 497-506.
- [5] 张橙, 孙文静, 王盛哲, 等. 人工智能助力臭氧催化剂 $\text{SrFe}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_3$ 的开发 [J]. *环境科学学报*, 2021, 41(5): 1868-1877.
- Zhang C, Sun W J, Wang S Z, et al. Artificial intelligence assisted the development of ozonation catalyst $\text{SrFe}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_3$ [J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2021, 41(5): 1868-1877.
- [6] Aghaeinejad-Meybodi A, Ebadi A, Shafiei S, et al. Degradation of Fluoxetine using catalytic ozonation in aqueous media in the presence of nano- γ -alumina catalyst: Experimental, modeling and optimization study [J]. *Separation and Purification Technology*, 2019, 211: 551-563. DOI: 10.1016/j.seppur.2018.10.020.
- [7] Dragoi E N, Vasseghian Y. Modeling of mass transfer in vacuum membrane distillation process for radioactive wastewater treatment using artificial neural networks [J]. *Toxin Reviews*, 2021, 40(4): 1526-1535.
- [8] Vasseghian Y, Dragoi E N. Modeling and optimization of acid blue 193 removal by UV and peroxydisulfate process [J]. *Journal of Environmental Engineering*, 2018, 144(8): 06018003.
- [9] Vasseghian Y, Moradi M, Pirsahab M, et al. Pesticide decontamination using UV/ferrous-activated persulfate with the aid. neuro-fuzzy modeling: A case study of Malathion [J]. *Food Research International*, 2020, 137: 109557. DOI: 10.1016/j.foodres.2020.109557.
- [10] 祁浩杰, 马磊, 邢佳枫, 等. 光芬顿深度处理制药废水的参数影响研究 [J]. *环境科技*, 2021, 34(6): 32-36.
- Qi H J, Ma L, Xing J F, et al. Study on the influence of parameters for the advanced treatment of pharmaceutical wastewater via photo Fenton [J]. *Environmental Science and Technology*, 2021, 34(6): 32-36.
- [11] 谢腾飞, 李一兵, 张娟娟, 等. 光芬顿法处理次磷酸盐同步回收磷性能及参数研究 [J]. *环境科学学报*, 2023, 43(3): 89-95.
- Xie T F, Li Y B, Zhang J J, et al. The influencing factors for the treatment of hypophosphite and simultaneous recovery of phosphorus via photo-Fenton [J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2023, 43(3): 89-95.
- [12] Wu P F, Zhou C L, Li Y P, et al. Flower-like FeOOH hybridized with carbon quantum dots for efficient photo-Fenton degradation of organic pollutants [J]. *Applied Surface Science*, 2021, 540: 148362.
- [13] 阮洋, 邹禾宇, 白红霞, 等. 光芬顿法在废水处理中的应用进展 [J]. *山东化工*, 2021, 50(15): 61-62.
- Ruan Y, Zou H Y, Bai H X, et al. Application progress of UV-Fenton method in wastewater treatment [J]. *Shandong Chemical Industry*, 2021, 50(15): 61-62.
- [14] 郑祥雷. 可见光催化氧化与光芬顿氧化降解水中有机物的研究 [D]. 青岛: 青岛科技大学, 2022.
- Zheng X L. Study on visible light catalytic oxidation and photo-Fenton oxidation for the degradation of organic compounds in water [D]. Qingdao: Qingdao University of Science & Technology, 2022.
- [15] 张瑛洁, 马军, 张亮, 等. 钛盐分光光度法测定酸性染料体系中的过氧化氢 [J]. *工业水处理*, 2008, 28(11): 72-74.
- Zhang Y J, Ma J, Zhang L, et al. Spectrophotometric determination of hydrogen peroxide in acidic dye system with titanium oxalate [J]. *Industrial Water Treatment*, 2008, 28(11): 72-74.
- [16] Wang T H, Kang S F, Lin Y H. Comparison among Fenton-related processes to remove 2, 4-dinitrophenol [J]. *Journal of Environmental Science and Health, Part A*, 1999, 34(6): 1267-1281.