



浙江工业大学

# 硕士学位论文

基于 LSTM-AM 混合模型的  
污水处理厂出水水质预测方法

作者姓名

王颖

指导教师

陈博 教授

学科专业

电子信息

学位类型

工程硕士

培养类别

全日制专业学位硕士

所在学院

信息工程学院

提交日期:

2023 年 6 月

# Effluent Quality Prediction Method for Wastewater Treatment Plant Based on LSTM-AM Hybrid Model

Dissertation Submitted to

**Zhejiang University of Technology**

in partial fulfillment of the requirement

for the degree of

**Master of Engineering**



by

**Ying WANG**

Dissertation Supervisor: Prof. Bo CHEN

Jun., 2023

## 浙江工业大学学位论文原创性声明

本人郑重声明：所提交的学位论文是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的研究成果。除文中已经加以标注引用的内容外，本论文不包含其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果，也不含为获得浙江工业大学或其它教育机构的学位证书而使用过的材料。对本文的研究作出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人承担本声明的法律责任。

作者签名：王颖

日期：2023年 5 月

## 学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解学校有关保留、使用学位论文的规定，同意学校保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅。本人授权浙江工业大学可以将本学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存和汇编本学位论文。

本学位论文属于： 1、保密□，在一年解密后适用本授权书。

2、保密□，在二年解密后适用本授权书。

3、保密□，在三年解密后适用本授权书。

4、不保密☒。

(请在以上相应方框内打“√”)

作者签名：王颖

日期：2023年 5 月

导师签名：陈博

日期：2023年 5 月

中图分类号 TP391

学校代码 10337

UDC 004

密级 公开

研究生类别 全日制专业型硕士研究生



# 浙江工业大学

## 工程硕士学位论文

基于 LSTM-AM 混合模型的污水处理厂出水水质预测方法

Effluent Quality Prediction Method for Wastewater Treatment  
Plant Based on LSTM-AM Hybrid Model

作者姓名 王颖

第一导师 陈博 教授

学位类型 工程硕士

第二导师

学科专业 电子信息

培养单位 信息工程学院

研究方向 工业数据分析

答辩日期: 2023 年 05 月 14 日

## 基于 LSTM-AM 混合模型的污水处理厂出水水质预测方法

### 摘 要

在污水处理厂的建设和运行过程中,系统建模已逐渐成为一项不可或缺的基础性工作,所建立的模型在水质预测、工艺控制、成本优化等诸多方面发挥作用。由于涉及参数众多、反应方程式表达的局限性等因素,以专家知识为前提的机理模型难以用于实际工程系统。与此同时,随着传感器测量精度的提高,污水处理厂运行监测数据的可靠性大幅提升,使得基于数据驱动的污水处理过程建模优势变得愈发明显。因此,研究数据驱动建模方法对实现污水处理系统的智能化具有重要的应用价值和工程意义。

数据驱动模型不依赖于反应机理,而仅取决于监测的时序数据,这也决定了此类模型的建立不仅要考虑如何屏蔽量测数据中具有不相关性与冗余性的特征,而且还应考虑如何设计时序特征提取方法以更加有效地建立输入变量与目标变量之间的映射关系。为此,本文聚焦于污水处理厂数据驱动建模算法的研究,提出了一种基于长短期记忆(Long Short-Term Memory, LSTM)网络与注意力机制(Attention Mechanism, AM)混合学习模型的出水水质预测方法,其主要工作如下:

(1) 通过污水处理厂运行模拟软件 GPS-X 和二号基准模拟模型提供的动态进水数据,搭建了基于厌氧-缺氧-好氧工艺的动态流程模型,将其中涉及的各种关键水质参数和状态变量构成仿真监测数据集,为后续的仿真实验提供数据支撑。

(2) 针对监测数据存在的不相关与冗余特征对模型精度和计算效率造成负面影响的问题,首先采用递归特征消除策略筛选出对出水水质预测重要性程度较高的特征子集,然后引入包含门控结构的 LSTM 单元来建立循环神经网络模型以实现输入序列的特征提取与非线性动态过程的建模,从而有效捕捉时间序列中的长期依赖关系。最后利用仿真监测数据集进行对比实验验证了所设计方法的有效性。

(3) 针对工程实践中大型污水处理系统的长时滞性和进水流量不规则变化导致的滞后时间不定性问题,设计基于卷积神经网络的注意力模块以通过 AM 获得进水流量数据中隐含的滞后时间信息,从而分配历史数据在不同时刻的权重。在此基础上,联合基于 LSTM 网络的时序特征模块对每个时刻的输入数据进行特征提取,实现对历史数据关键信息的挖掘,从而给出可精准预测出水水质的混

合模型方法。最后基于真实污水处理厂监测数据集试验验证了所设计方法的有效性。

**关键词：**污水处理，数据驱动，递归特征消除，长短期记忆网络，注意力机制

# **Effluent Quality Prediction Method for Wastewater Treatment Plant Based on LSTM-AM Hybrid Model**

## **ABSTRACT**

During the construction and operation of wastewater treatment plants, system modeling has gradually become an indispensable basic work. The established models play an important role in water quality prediction, process control, cost optimization and many other aspects. Due to the large number of parameters involved and the limitation of reaction equation expression, the mechanism model based on expert knowledge is difficult to be used in actual engineering system. At the same time, with the improvement of sensor measurement accuracy, the reliability of wastewater treatment plant operation monitoring data has been greatly improved, which makes the advantages of data-driven wastewater treatment process modeling become more obvious. Therefore, the study of data-driven modeling methods has important application value and engineering significance to realize the intelligence of wastewater treatment system.

The data-driven model does not depend on the reaction mechanism, but only on the monitored time series data, which determines that the establishment of such models should not only consider how to shield the irrelevant and redundant features in the measurement data, but also consider how to design the time series feature extraction method to more effectively establish the mapping relationship between the input variable and the target variable. To this end, this thesis focuses on the research of data-driven modeling algorithms for wastewater treatment plants, and proposes an effluent quality prediction method based on the hybrid learning model of Long Short-Term Memory (LSTM) network and Attention Mechanism (AM). The main work is as follows:

(1) A dynamic process model based on Anaerobic-Anoxic-Oxic process is built through the wastewater treatment plant simulated running software GPS-X and the dynamic influent data provided by Benchmark Simulation Model no.2. Various key water quality parameters and state variables involved in the process model are used to establish the simulation monitoring dataset, which provides data support for subsequent simulation experiments.

(2) Aiming at the problem that the irrelevant and redundant features of the monitoring data have a negative impact on the accuracy and computational efficiency of modeling, firstly, the recursive feature elimination strategy is used to screen out the feature subset with high importance to the effluent quality prediction. Then, the LSTM unit containing the gated structure is introduced to establish the recurrent neural network model to realize the feature extraction of the input sequence and the modeling of the nonlinear dynamic process, so as to effectively capture the long-term dependence in the time series data. Finally, the effectiveness of the designed method is verified by contrast experiments on simulation monitoring dataset.

(3) Aiming at the long time lag of large-scale wastewater treatment system and the lag time uncertainty problem caused by irregular changes of influent flow in engineering practice, the attention module based on convolutional neural network is designed to obtain the lag time information implicit in the influent flow data through AM, so as to assign the weights at different times of the history data. On this basis, the time series feature module is jointly used to extract the input features at each time step to realize the mining of key information of history data, so as to provide a hybrid modeling method that can accurately predict effluent quality. Finally, the effectiveness of the proposed method is verified by experiments based on real wastewater treatment plant monitoring dataset.

**KEY WORDS:** wastewater treatment, data-driven, recursive feature elimination, long short-term memory network, attention mechanism



## 目 录

摘 要.....	I
ABSTRACT.....	III
目 录.....	V
第一章 绪论 .....	1
1.1 研究背景及意义.....	1
1.2 国内外研究现状及趋势.....	3
1.2.1 污水处理机理模型研究现状.....	3
1.2.2 污水处理数据驱动模型研究现状.....	4
1.3 本文研究内容.....	5
1.4 本文组织架构.....	6
第二章 基于 BSM2 的仿真数据集建立.....	8
2.1 BSM2 基准仿真平台 .....	8
2.1.1 BSM 基准模拟模型 .....	8
2.1.2 BSM1 和 BSM2 的布局.....	8
2.1.3 BSM2 动态进水数据 .....	10
2.2 A <sup>2</sup> O 污水处理工艺.....	12
2.2.1 A <sup>2</sup> O 工艺的组成.....	12
2.2.2 A <sup>2</sup> O 工艺的处理过程.....	13
2.2.3 A <sup>2</sup> O 工艺模型的搭建.....	14
2.3 仿真数据集的建立过程.....	15
2.3.1 进水变量的转换.....	15
2.3.2 外加碳源数据的生成.....	15
2.3.3 污水处理过程的模拟.....	16
2.3.4 仿真数据的调整与样本构建.....	17
2.4 小结.....	18
第三章 基于 RFE-LSTM 的出水水质预测方法.....	19
3.1 引言.....	19
3.2 基于 RFE 的特征选择 .....	20
3.2.1 污水监测数据的高维特性.....	20

3.2.2 特征选择类型的选取.....	21
3.2.3 RFE 方法的特征筛选过程 .....	22
3.3 基于 RFE-LSTM 的出水水质预测模型的建立 .....	23
3.3.1 污水监测数据的时间依赖性.....	23
3.3.2 RFE-LSTM 模型的计算 .....	23
3.4 实验分析.....	27
3.5 小结.....	33
第四章 基于 LSTM-AM 的出水水质预测方法.....	34
4.1 引言.....	34
4.2 注意力模块的建立.....	36
4.2.1 注意力机制模型的计算.....	36
4.2.2 外部注意力机制的设计.....	39
4.2.3 基于 CNN 的进水流量特征提取 .....	40
4.3 基于 LSTM-AM 的出水水质预测模型的建立 .....	42
4.3.1 数据集中变量的定义.....	42
4.3.2 LSTM-AM 混合模型的计算 .....	42
4.4 实验分析.....	44
4.5 小结.....	51
第五章 总结与展望 .....	52
5.1 研究结论.....	52
5.2 研究展望.....	53
参考文献.....	54
致 谢.....	59
作者简介.....	60
1 作者简历.....	60
2 攻读硕士学位期间发表的学术论文.....	60
3 发明专利.....	60
学位论文数据集.....	61

# 第一章 绪论

## 1.1 研究背景及意义

水是人类赖以生存的物质基础，也是人类社会发展的必要资源。虽然地球 70% 的表面积被水资源覆盖，但可以直接利用的淡水资源却十分稀缺。人类在生产活动中会不可避免地产生污水，如果不对其进行处理而直接排放，将对水资源造成严重危害，造成无法挽回的后果。而随着社会的发展和人口数量的增加，很多国家的工业、农业与城市用水量都在持续增长，水污染事故的发生也变得愈发频繁。

作为水资源保护的关键环节，污水处理厂对水污染防治和再生水资源的利用来说至关重要。污水处理厂是一个复杂的多流程系统，能够利用物理、化学和生物的方法将污水中的有机物、氨氮、磷等污染物去除，以达到污水净化与回收的目的。近年来，我国高度重视环境治理工作，对污水处理厂出水水质的要求也日趋严格。因此，如何及时发现污水处理厂的异常状态和潜在风险，保障污水处理厂的安全平稳运行，使出水水质达到国家排放标准是每一位污水处理工作者所应关心的问题。

如今，在污水处理厂的建设和运行中，系统建模已逐渐成为一项不可或缺的基础性工作，它能为污水处理系统的设计、控制和优化提供有效的技术支持，从而提高系统可靠性，降低运营成本。通过模型来实现对出水水质的预测，可以反映系统的污水处理能力和未来出水水质的变化趋势，据此可对处理策略做出及时调整，从而预防出水水质中污染物超标而造成的水资源污染。因此，如何精确构建污水处理系统模型是解决人类社会生产生活中污水治理问题的重要挑战。

污水处理方法涵盖多种策略，其中活性污泥法<sup>[1]</sup>由于高质量、高效率的优点被世界各国的污水处理厂广泛采用。例如，目前广泛用于城市生活污水处理的厌氧-缺氧-好氧(Anaerobic-Anoxic-Oxic, A<sup>2</sup>O)工艺就是一种基于活性污泥法的污水处理工艺。活性污泥法是一种污水生物处理技术，它以活性污泥为主体，利用微生物活动降解污染物质，是一种被公认兼具经济性和可持续性的方法<sup>[2]</sup>。然而，活性污泥法的处理过程中涉及了多种复杂的动态生化反应机制，这些反应具有高度非线性、强耦合性、时滞性等特点，这意味着此类工艺过程的建模将更具挑战性<sup>[3]</sup>。

在污水处理过程的建模中，根据数据依赖程度和可解释性，通常可将模型分为两种类型：机理模型和数据驱动模型。

机理模型是指通过生化反应的数学表达式来描述各反应组分之间的关系,进而建立污水处理复杂动态过程的模型。伴随着微生物生长和衰亡机理、有机物的水解机理、溶解性残留物形成机理等研究的不断进步,活性污泥法数学模型的演化历程也经历了多个阶段。最初阶段是对实验数据的简单拟合,随后转向应用经典微生物生长动力学模型,目前已逐步发展成基于生物处理自身的特性进行过程分析和辨识<sup>[4]</sup>。机理模型的优势在于它是一种白箱模型,通过严谨的生化反应方程式来表达每一步反应过程,具有可解释性。与基于进出水数据分析统计的黑箱模型相比,机理模型能够更加全面地模拟污水处理过程中各项水质参数的变化。除进出水水质以外,还能反映污染物在系统中的沿程降解过程<sup>[5]</sup>。然而,由于机理模型涉及的化学计量学与动力学参数过多,且很多参数需依据特定污水处理系统中的微生物群落结构和主导菌种等不同情况反复调整,该类方法难以应用于污水处理厂的实际运行中<sup>[6]</sup>。此外,微生物除磷机理的不明确性与数学模型表达的局限性也是限制该方法用于工程实际的原因之一。

数据驱动模型从实测数据出发,通过统计学方法或机器学习算法挖掘特征之间存在的映射关系。相对于基于机理的建模方法而言,基于数据关系识别的数据驱动模型无需依赖反应机理的专家知识,无需人工对工艺参数进行反复调整,同时又避免了反应方程式表达能力上的不足。在污水处理过程中,为了在去除污染物以保证出水水质达标的同时节约能源消耗,污水处理工作者往往需要对各种水质和状态变量进行观察。为此,大量的传感器被部署到污水处理系统中以实现参数的监测,这使得污水处理厂在运行过程中存储并积累了大量时序监测数据,进而为数据驱动方法在工程实际中对污水处理过程的建模提供数据基础。需要指出的是,对数据量的依赖性限制数据驱动方法投入应用的主要因素,即需要以污水处理厂进行过长期的数据积累为前提。此外,所部署传感器的测量精度也是影响数据驱动模型可靠性的关键要素之一。

近年来,得益于电子技术的进步,传感器的测量精度也得到了明显提升。因此,目前很多学者尝试利用部署在污水处理系统中的各类传感器采集数据,并且仅通过监测数据来构建模型。然而,现有的大多数相关研究仍然存在着局限性,它们忽略了建模过程中污水处理过程的长时滞性以及滞后时间的不确定性,导致模型的有效性往往受限于仿真或实验条件,无法扩展到真实应用场景中。因此,为突破现有方法的局限性,需要对基于数据驱动的建模方法作进一步的设计与研究。

## 1.2 国内外研究现状及趋势

### 1.2.1 污水处理机理模型研究现状

国际水协(International Water Association, IWA)一直致力于机理模型的研究,并于 1987 年、1995 年和 1999 年陆续推出了一系列活性污泥模型(Activated Sludge Model, ASM)<sup>[7]</sup>,用于描述活性污泥法污水处理系统在生化反应过程中的动态行为。ASM 系列模型目前已成为污水处理工艺模拟的一个重要手段。

ASM 系列模型包括 ASM1、ASM2、ASM2d、ASM3 等多个版本。ASM1 是最早发布的版本,它描述了对单个活性污泥系统的有机物和氮源污染物的去除过程。此后 IWA 陆续开发了 ASM2 和 ASM2d,前者在 ASM1 的基础上增加了除磷、厌氧水解等过程,后者则进一步完善了 ASM2,增加了两个缺氧过程从而改善了对反硝化功能的描述。ASM3 是目前最新的版本,修正了 ASM1 在实际应用中反应流程复杂的问题,将有机底物的胞内贮存作为重点,并且对异养菌和硝化菌的转换过程作了区分<sup>[8]</sup>。

无论是哪个版本的 ASM 模型,均是采用矩阵的形式描述生化反应过程,其中包含着大量的动力学参数和化学计量参数。以 ASM2d 模型为例,共有 19 种组分、21 种反应、22 个化学计量参数及 45 个动力学参数被囊括。此外,ASM 系列模型的应用存在一些限制条件。例如,ASM1 和 ASM2 要求反应环境的 pH 值接近中性且维持恒定,ASM1 还要求系统处于恒定温度的条件下,而 ASM2 要求温度限制在 10-25℃范围内<sup>[9]</sup>。虽然 ASM 系列模型得到了污水处理人员的普遍认可,但这些限制和缺陷也为其在污水处理厂实际运行中的应用带来了很大困难。

针对 ASM 系列模型的不足,目前已有很多学者对 ASM 系列模型做出改进来使其适用于特定污水处理厂的模拟。Veldhuizen 等人<sup>[10]</sup>在试验研究中开发出一个好氧和缺氧生物除磷的机理模型,并将该模型与 ASM1 相结合,检验其对生产性污水处理厂的模拟效果。作者依据工艺、模型机理和灵敏度分析,将校正模型时需调整的参数数量缩小到了 4 个。Meijer 等人<sup>[11]</sup>利用生物除磷模型和 ASM2d 模型的复合模型模拟实际污水处理厂的脱氮除磷过程。研究表明,这种复合模型无需改变化学计量学矩阵即可模拟污水厂稳态运行时各组分浓度,并具有较好的出水水质预测精度。Hao 等人<sup>[12]</sup>利用 ASM2d 模型与 Delft 除磷模型的复合模型研究了两种生物营养物处理(Biological Nutrient Removal, BNR)工艺。该研究表明这种复合模型在不同的污泥停留时间(Sludge Retention Time, SRT)和温度条件下能对这两种工艺的出水水质、污泥产量、耗氧情况进行较为准确的评价。Kim 等人<sup>[13,14]</sup>提出了 ASM2 模型的简化线性模型用来模拟序批式活性污泥法(Sequencing Batch Reactor, SBR)工艺中基质去除过程,该模型预测了 SBR 工艺中释磷和摄磷、硝化作用、氨化作用和反硝化作用的动力学过程。由于线性模型包

含较少的参数,该模型有效降低了在参数校正时的开销。文献[15]对 ASM1 模型做了简化,开发了一个包含更少状态变量和参数的降阶模型,并将其应用于基于在线测量的污水处理过程模拟。

然而,由于反应方程式表达的局限性、微生物特性的不明确性等因素,无论是简化模型、复合模型还是 ASM 的完整模型都难以反映污水处理过程中不同的环境状况、进水条件与出水水质之间的复杂非线性关系。

### 1.2.2 污水处理数据驱动模型研究现状

作为时间序列预测分析的经典统计方法,差分整合移动平均自回归模型(Autoregressive Integrated Moving Average model, ARIMA)被应用于北美 5 个站点的日流量预测<sup>[16]</sup>。然而,ARIMA 及其变体仅在时序数据规律变化时能提供较好的预测效果,当时序数据存在不规则波动时,则无法进行有效预测。

在人工智能的时代背景下,机器学习算法已被广泛应用于污水处理厂基于数据驱动的建模中。为了解决污水出水水质参数难以在线测量的问题,Huang 等人<sup>[17]</sup>对软测量方法进行了研究,提出了一种改进的最小二乘支持向量回归(Least Square Support Vector Regression, LS-SVR)方法实现了对化学需氧量(Chemical Oxygen Demand, COD)、总氮(Total Nitrogen, TN)等出水参数的预测。仿真数据集的实验结果表明,LS-SVR 方法能够以较高的精度预测污水处理厂的出水水质参数,并且能够适应天气的变化。文献[18]利用日常水质数据和气象数据构建了一个支持向量机(Support Vector Machine, SVM)模型,并将其用于韩国蔚山污水处理厂一天间隔的出水 TN 浓度预测,获得了较好的预测精度。文献[19]将一种基于 K 近邻(K Nearest Neighbor, KNN)的机器学习方法用于悬浮固体(Suspended Solid, SS)、TN、COD 等水质变量的预测。实验表明,KNN 能够在干燥天气下给出较好的预测结果,但在潮湿天气下的预测性能会有所下降。

在众多基于机器学习算法的数据驱动模型中,人工神经网络(Artificial Neural Network, ANN)作为一种模拟生物神经元的算法,可以通过堆叠和连接多层神经元来逼近多元非线性函数,实现对数据模式的识别。由于其强大的非线性拟合能力与自适应性,ANN 现已成为污水处理领域应用最为广泛的模型<sup>[20,21]</sup>。Santin 等人<sup>[22]</sup>通过使用仅含全连接(Fully Connected)结构的 ANN 实现了对出水污染物浓度峰值的预测,并将该网络应用于受控状态下的污水处理厂上。实验表明,所设计的 ANN 在运行时能够较好地完成出水水质的检测任务,并在超标时发出信号。文献[23]对连续流缺氧-好氧(Anaerobic-Oxic, AO)工艺处理低碳氮比生活污水的外加碳源系统进行了仿真研究,利用 BP 神经网络对试验数据的学习拟合系统中外加碳源量、总回流比和出水 TN 之间存在的复杂非线性关系,达到了优化碳源投加量的目的。文献[24]提出了一种数据驱动的多目标预测控制方法来提高污水处理厂的运行性能,该方法基于自适应模糊神经网络(Adaptive Fuzzy Neural

Network, AFNN)从相关的工艺数据中捕捉污水处理过程的非线性关系。通过基准仿真平台上的实验,验证了所提控制方法的可行性。Han 等人<sup>[25]</sup>对一种非线性模型预测控制系统的设计与实现作了讨论,在该系统的组成模块中设计了一种具有并行结构和参数学习功能的自组织径向基函数神经网络(Self-organizing Radial Basis Function Neural Network, SORBFNN),并将其用于污水处理系统在线状态的识别。实验结果表明,所提出的控制方法具备良好的跟踪和抗干扰性能。Lin 等人<sup>[26]</sup>将极限学习机(Extreme Learning Machine, ELM)作为一种建模方法来解决污水处理厂的建模问题,并使用差分进化(Differential Evolution, DE)算法对 ELM 的隐藏神经元参数进行优化,得到的模型能够有效用于 15 分钟间隔下出水水质的预测。

随着大数据和深度学习技术的发展,人们在各类应用场景中设计了各种深度学习模型来提高时序数据的预测性能。深度学习模型级联了多层神经网络结构,能够在有限的人工指令下自动从海量数据中提取相关信息,并通过更复杂的结构设计,使模型对数据的理解更加深入。深度学习技术已经成功改变了包括智慧城市在内的众多领域,在污水处理过程建模以及特征变量的预测方面也存在相关研究。Foscoliano 等人<sup>[27]</sup>讨论了多变量预测控制器在活性污泥过程中的应用,其在控制器策略中引入了循环神经网络(Recurrent Neural Network, RNN)来预测污水处理厂的水质参数,以确保水质浓度低于既定的限制。文献[28]构建了 6 种不同的 RNN 改进模型,用于对污水处理厂进出水水质等关键参数进行预测,利用真实污水处理厂积累的历史数据验证了所研究模型的有效性,并对不同模型的预测精度和训练效率作了对比。

综上所述,神经网络在污水处理过程建模中应用广泛,在工艺控制,水质预测以及成本优化等诸多方面发挥着重要作用。对比基于机理的建模方法,神经网络无需调试大量参数,不受环境因素限制,更加符合实际应用情景。然而,虽然上述研究取得了很多阶段性成果,但它们都指向一个共同的局限性:在模型设计时没有将工程实际中污水处理系统本身的高度非线性、长时滞性和滞后时间不定性作统一考虑。因此,发挥神经网络强大的非线性拟合能力与自适应能力,选择合适的神经网络类型并进一步设计有效的神经网络结构,对实现污水处理系统的智能化具有重要的理论意义与应用价值。

### 1.3 本文研究内容

本文基于污水处理厂运行监测数据集,对污水处理厂的数据驱动建模算法展开设计与实现,并将其用于出水水质的预测。主要研究内容如下:

(1) 基于二号基准模拟模型(Benchmark Simulation Model no. 2, BSM2)提供的动态进水数据和污水处理厂运行模拟软件 GPS-X, 构建了 A<sup>2</sup>O 工艺动态流程模型, 并将其中涉及的各种关键水质参数和状态变量构成仿真监测数据集, 为后续的仿真实验提供数据支撑。

(2) 针对监测数据中不相关和冗余的特征对模型精度和计算效率造成负面影响的问题, 引入递归特征消除(Recursive Feature Elimination, RFE)方法筛选对出水水质预测重要性程度较高的特征子集。对于污水处理时序数据中存在的时间依赖关系, 利用 RNN 的信息传递方式实现对输入序列的特征提取以及非线性动态过程的建模。引入长短期记忆(Long Short-Term Memory, LSTM)架构实现信息的选择性记忆, 克服了经典 RNN 的梯度消失和爆炸问题, 有效捕捉了时间序列中的长期依赖关系。最后利用仿真监测数据集进行对比实验, 验证了所设计方法的有效性。

(3) 针对工程实践中大型污水处理系统的长时滞性和进水流量不规则变化导致的滞后时间不定性问题, 建立了一种基于 LSTM 网络与注意力机制的混合水质预测模型。通过 LSTM 网络构建的时序特征模块实现对输入序列的特征提取, 并通过以进水流量为外部知识的注意力模块自动获取各个工艺段的历史特征在时间上对出水水质预测的权重分布。最后利用真实污水处理厂监测数据集进行对比实验, 验证了所设计方法的有效性。

## 1.4 本文组织架构

本论文的组织架构如图 1-1 所示。

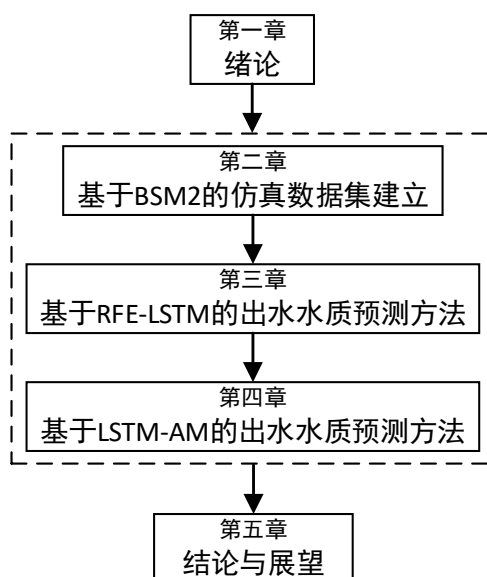


图 1-1 本文组织架构示意图

Figure 1-1. Schematic diagram of the organizational structure of this thesis



本文共分为五个章节，各章节内容安排如下：

第一章，绪论。本章首先介绍了污水处理过程建模方法的研究背景与意义，然后介绍了国内外污水处理过程建模的研究现状，并对比了机理模型方法和数据驱动模型方法，指出已有算法的优缺点并引入本文的研究动机，最后对本文的研究内容作简要介绍。

第二章，基于 BSM2 的仿真数据集建立。本章首先介绍了 BSM2 基准仿真平台及其中包含的动态进水数据，接着介绍了 A<sup>2</sup>O 处理工艺的组成及处理过程，并说明了利用工艺模拟软件 GPS-X 搭建 A<sup>2</sup>O 工艺动态流程模型的步骤，最后给出了建立仿真监测数据集的具体过程。

第三章，基于 RFE-LSTM 的出水水质预测方法。本章首先给出了特征选择类型的选取依据以及 RFE 方法的实现过程，接着对 RFE-LSTM 模型的计算过程作了说明，最后给出了所提方法在仿真监测数据集下的实验结果。

第四章，基于 LSTM-AM 的出水水质预测方法。本章首先介绍了注意力模块的建立过程，包括典型注意力机制的计算和外部注意力机制的设计，并对用于进水流量特征提取的卷积神经网络(Convolutional Neural Network, CNN)的结构作了说明，接着给出了 LSTM-AM 混合模型的计算过程，最后提供了所提方法在真实监测数据集下的实验结果。

第五章，结论与展望。对本文的研究工作和研究成果进行了总结，并对未来的研究工作做了展望与建议。

## 第二章 基于 BSM2 的仿真数据集建立

### 2.1 BSM2 基准仿真平台

#### 2.1.1 BSM 基准模拟模型

污水处理系统相较于其它化工系统来说,具有高度非线性、强耦合性、时间滞后性等特点,导致工程技术人员难以实现水质指标的精确控制。此外,污水处理厂的运行无法间断,且其处理要求和排放标准在国内外受到了愈发严格的约束条件限制,污水处理任务也因此变得更加困难。为了解决这一问题,很多学者提出了不同的控制方案,对这些方案需要进行公平且合理的评估与比较。然而,在实践中,由于污水处理系统的多变性和不确定性,方案评估面临着较大困难。此外,排放标准和数据采集过程的差异性也为各方案的比较增加了难度,各方案的适用范围和优劣程度也难以确定<sup>[29]</sup>。为了提高创新控制策略的可接受性,性能评估应基于严格的规则进行<sup>[30]</sup>。

自 1998 年起,欧盟科学技术合作组织(European Cooperation Scientific Technical Research, COST)和 IWA 研究小组开始开发基准模拟模型(Benchmark Simulation Model, BSM),通过模拟方法评估活性污泥污水处理厂的控制策略。BSM 是一个模拟环境,其中定义了工厂布局、模拟模型、进水负荷、测试程序和性能评价标准等。用户在验证了仿真代码的正确性后,就可以在 BSM 上实施任何自定义的控制策略,并根据预先设定的评价指标,对控制策略的性能进行量化分析。

如今,BSM 已经成为监测污水中各种污染物的动态变化并控制污水净化反应的重要工具,为水质治理工作提供了有力支持<sup>[31]</sup>。

#### 2.1.2 BSM1 和 BSM2 的布局

一号基准模拟模型(Benchmark Simulation Model no. 1, BSM1)于 2002 年推出,被广泛用于测试和评估生物脱氮废水处理厂的各种控制策略<sup>[29]</sup>。BSM1 基准仿真平台主要由活性污泥反应池和沉淀池两部分组成,其中活性污泥反应池分为 5 个单元,包括 2 个缺氧池和 3 个好氧池,如图 2-1 所示<sup>[29]</sup>。缺氧池内主要进行反硝化过程,即反硝化菌在缺氧条件下将硝态氮还原为氮气的过程。好氧池内主要进行硝化过程,即硝化菌在好氧条件下将氨氮氧化成硝态氮的过程。沉淀池内主要

进行泥水分离，分离后上层的上清液从出水端排放，下层的污泥回流到缺氧池或作为剩余污泥排出。

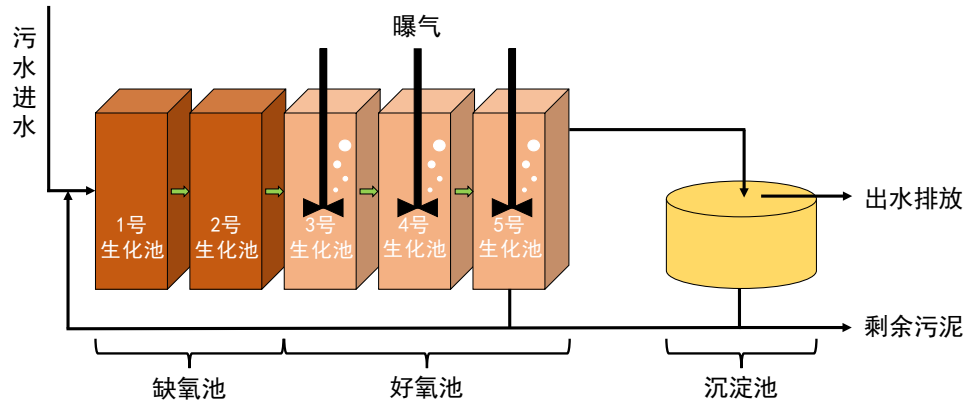


图 2-1 BSM1 基准仿真平台的布局

Figure 2-1. Layout of BSM1 simulation platform

虽然 BSM1 是一个基准模拟的有效工具，但其也具有一定的局限性。BSM1 囊括的工厂范围较小，无法较好地考虑到污水处理厂中污水收集、处理和排放等每一个环节以及它们之间的相互影响。此外，BSM1 的时间尺度较小，主要用于评估短期的控制策略，因此也无法反映出季节变化、气候变化等因素对污水处理过程的影响<sup>[32]</sup>。

BSM2 在 BSM1 的基础上进行升级，是一个更加详细的协议<sup>[33]</sup>。BSM2 以更长的时间尺度和更大的工厂范围来更好地实现对控制策略性能的实施、分析和评估。在 Watermatex2004 研讨会上提出 BSM2 的概念后，COST 和 IWA 研究小组在“污水处理厂控制策略基准测试”框架内进行 BSM2 的研究和开发工作，并在 Watermatex2007 研讨会上展示了 BSM2 首个较为完整的版本<sup>[33]</sup>。

污水处理厂应当被视为一个完全集成的系统，其中各个组件和过程有效连接在一起，不仅可以进行局部单元的控制，还可以通过监控系统进行全局的过程优化，以防止因局部最优而造成出水水质超标或是运行成本增加。因此，BSM2 在包含活性污泥的 BSM1 的基础上，将污泥处理和污水预处理一同纳入考虑<sup>[30]</sup>。BSM2 以整个污水处理厂作为建模尺度，将全厂视为一个整体，包含了全厂中所有的常规处理设备和处理流程，如污水进水口、带有初沉池的前置预处理工艺、带有二沉池的活性污泥工艺以及带有浓缩器、厌氧消化器和脱水装置的污泥处理工艺等。BSM2 的布局如图 2-2 所示<sup>[32]</sup>。

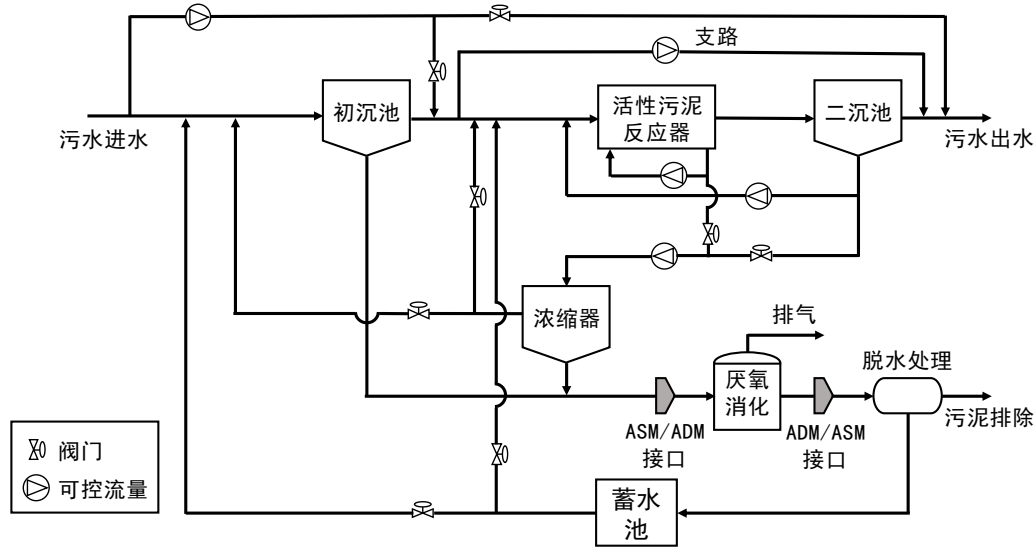


图 2-2 BSM2 基准仿真平台的布局

Figure 2-2. Layout of BSM2 simulation platform

为了更全面地评估污水处理控制策略的性能，BSM2 的基准评估周期由 BSM1 规定的一周延长至一年。通过延长评估周期使得 BSM2 具备更强的可靠性，能够更好地评估系统在更长时间尺度上的运行状况和控制效果。

需要强调的是，BSM2 开发的目的是提供一种工具和流程，用于评估控制策略的性能，而不是模拟实际污水处理厂处理流程中所有可能的细节。因此，BSM2 中污水处理厂的基准不是由任何国家标准或设计原则定义的，而是旨在描述一个进水负荷为 100000PE(80000PE 的生活污水和 20000PE 的工业污水)的活性污泥污水处理厂，其中包括了世界各地大型污水处理厂中的常见工艺。

BSM2 能够在多个仿真平台上实现，可直接使用 C/C++、MATLAB 等编程语言在开发环境中进行编码，也可使用商业模拟软件，如 SUMO、WEST、GPS-X 等<sup>[30]</sup>。

### 2.1.3 BSM2 动态进水数据

本研究基于可靠性更高的 BSM2 生成污水处理厂仿真监测数据集。BSM2 为污水处理工作者提供了动态进水数据，该数据来源于 2006 年 Gernaey 等人<sup>[34]</sup>提出的进水模型，其中氮负荷降低了 15%以避免冬季污水处理厂出现明显的氮过载。BSM2 中的进水数据反映了进水情况的动态性，包括了昼夜、周末、季节性和节假日效应以及降雨、污泥在下水道系统中的沉降、初始冲刷等因素。进水中的温度曲线由一个周期为一年的正弦函数组成，用于模拟季节性温度变化，并在其上叠加一个周期为一天的正弦函数，用于模拟昼夜之间温度的小幅度变化<sup>[32]</sup>。

BSM2 生成动态进水数据的过程包括恒定进水模拟和动态进水模拟两个阶段。首先是对恒定进水进行为期 200 天的模拟,以获得稳态值。恒定进水期间,温度保持在 15℃。在第一次模拟中获得的稳态值随后被用作动态进水模拟的初始值。接着,BSM2 进行 63 天的动态进水模拟,以达到准稳态。此后,进行为期 182 天的动态模拟,以获得用于控制策略实验的动态数据。最后,BSM2 进行额外的 364 天模拟,在此期间获得的共 609 天的数据用于对污水处理厂性能和监控策略性能进行评估<sup>[32]</sup>。

时间跨度为 609 天,采样周期为 15 分钟的动态进水数据集文件可以从 BSM2 官网上下载<sup>[33]</sup>。该文件中包含的主要数据特征如表 2-1 所示:

表2-1 BSM2主要进水特征

Table 2-1. Main influent features of BSM2

定义	符号	单位
可溶性惰性有机物	$S_I$	mg COD/L
易于生物降解的基质	$S_S$	mg COD/L
颗粒状惰性有机物	$X_I$	mg COD/L
缓慢可生物降解基质	$X_S$	mg COD/L
活性异养生物量	$X_{B,H}$	mg COD/L
活性自养生物量	$X_{B,A}$	mg COD/L
生物质分解产生的颗粒产物	$X_P$	mg COD/L
氧	$S_O$	mg O <sub>2</sub> /L
硝酸盐和亚硝酸盐氮	$S_{NO}$	mg N/L
$NH_4^+ + NH_3$ 氮	$S_{NH}$	mg N/L
可溶性生物可降解有机氮	$S_{ND}$	mg N/L
可降解有机氮微粒	$X_{ND}$	mg N/L
碱度	$S_{ALK}$	mole/m <sup>3</sup>
总悬浮物	$TSS$	mg/L
进水流量	$Q_i$	m <sup>3</sup> /d
温度	$T$	℃

其中,包括 $S_I$ 、 $S_S$ 、 $S_{NH}$ 和 $T$ 在内的部分进水特征如图 2-3 所示。

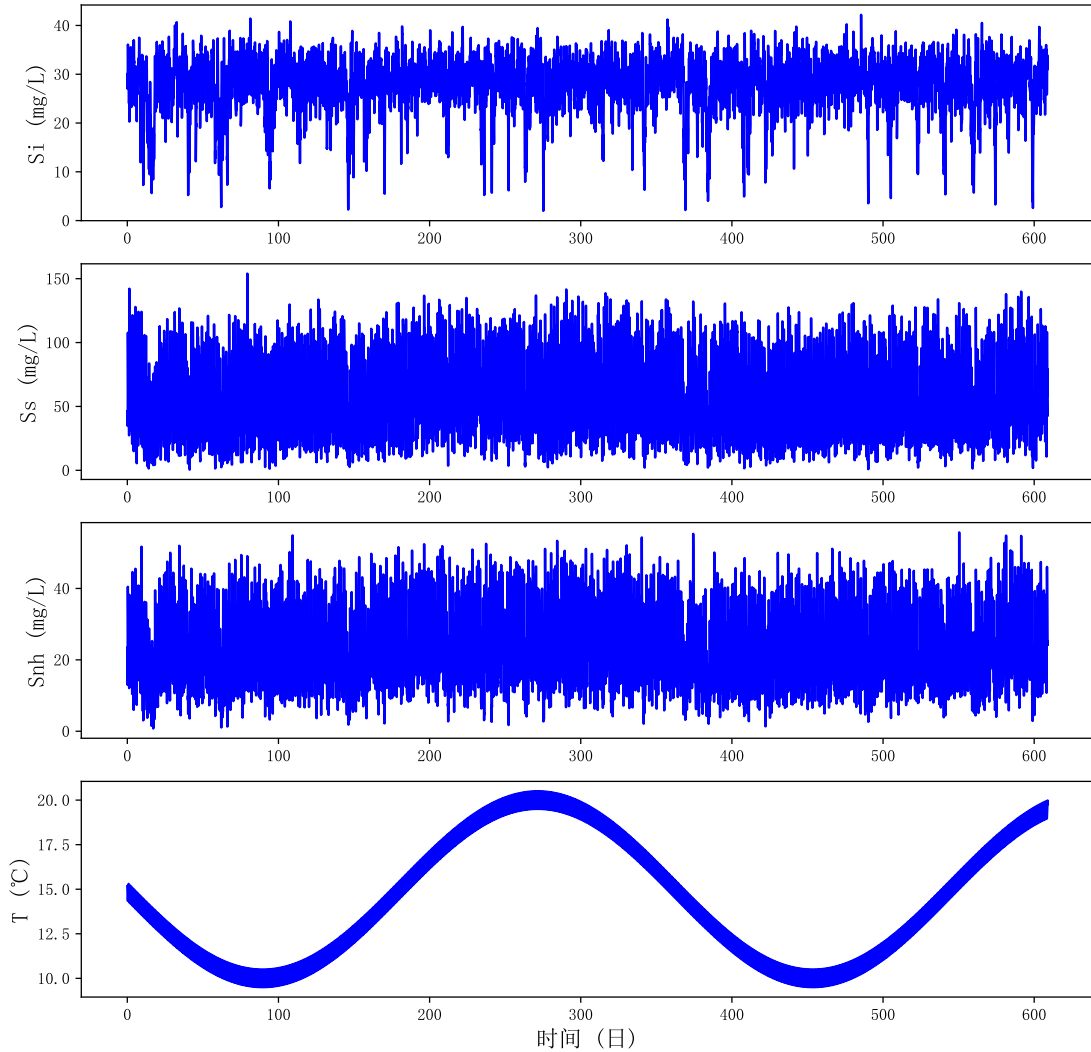


图 2-3 BSM2 部分进水特征

Figure 2-3. Some influent features of BSM2

## 2.2 A<sup>2</sup>O 污水处理工艺

### 2.2.1 A<sup>2</sup>O 工艺的组成

A<sup>2</sup>O，即厌氧-缺氧-好氧工艺，是在 20 世纪 70 年代由美国部分污水处理研究人员在 AO（厌氧-好氧法脱氮工艺）的基础上开发的一项污水处理技术，具备脱氮除磷的作用<sup>[35]</sup>。

A<sup>2</sup>O 工艺的基本流程如图 2-4 所示<sup>[35]</sup>。A<sup>2</sup>O 工艺的组成通常包括：初沉池、厌氧池、缺氧池、好氧池和二沉池。初沉池和二沉池分别用于悬浮物和活性污泥的沉降。厌氧池、缺氧池和好氧池是通过生物降解和化学反应去除污水中污染物的核心装置，污水流经这三个反应池并沿着内回流管道不断充分反应后得以净化

并排放。本研究将外加碳源一并纳入  $A^2O$  工艺的考虑范畴，并将其视作进水组分之一。工程实际中外加碳源的使用十分普遍，常用的外加碳源有甲醇、乙酸钠、葡萄糖等。

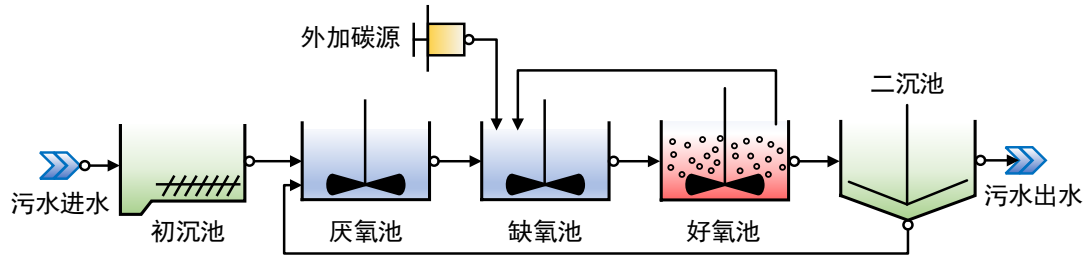


图 2-4  $A^2O$  工艺基本流程图

Figure 2-4. Basic flow chart of  $A^2O$  process

### 2.2.2 $A^2O$ 工艺的处理过程

在以  $A^2O$  工艺实现污水处理的过程中，存在厌氧、缺氧、好氧三种不同的环境条件和不同种类微生物菌群的有机配合，以实现同步脱氮除磷及 COD 的去除<sup>[35]</sup>。

污水在经历初沉池去除悬浮颗粒物质以后，首先流入厌氧池，与池内的回流污泥混合。厌氧池可以对部分有机物进行氨化，同时厌氧池中含有的聚磷菌可以吸收易降解有机物并释放磷。包含有机物的污水从厌氧池流出之后会进入缺氧池，而回流至缺氧池的混合液中含有硝酸盐。缺氧池中的反硝化菌可利用有机物和硝酸盐进行反硝化反应，将硝酸盐转换成氮气排入大气中，达到脱氮的目的。缺氧池流出的污水进入好氧池进行后续反应，此时污水中的有机物已在之前的反应过程中被大量消耗，浓度已经很低。好氧池可将氨氮转换为硝态氮，聚磷菌在此处大量吸收磷。随后，好氧池混合液进入二沉池后进行泥水分离，上清液流至出水端排放，沉淀污泥回流至厌氧池或是作为剩余污泥进行处理<sup>[36,37]</sup>。

由于不能保证每一批次的污水进水都能为反硝化菌的反硝化反应提供充足的有机物，因此需要将额外的碳源加入到反硝化反应的缺氧区中来提高污水中可生化有机物的含量，以增强反硝化脱氮的效果。这也是本研究将外加碳源考虑在内的原因。

一般条件下， $A^2O$  工艺具备很高的处理效率，五日生化需氧量(5-day Biochemical Oxygen Demand, BOD)和 SS 的去除率可高达 90%~95%，TN 去除率可保持在 70%以上，总磷(Total Phosphorus, TP)去除率也能达到 90%<sup>[38]</sup>。

除了能高效去除污染物以外， $A^2O$  工艺还具备很多其它的优越特性，如结构和控制复杂度较低、水力停留时间(Hydraulic Retention Time, HRT)较短、设计运行经验成熟和不易产生污泥膨胀等。因此， $A^2O$  工艺自诞生以来就在国内外污水

处理界上获得了强烈关注,目前已广泛应用于世界各地需要进行脱氮除磷的中大型污水处理厂<sup>[39]</sup>。本研究将  $A^2O$  工艺作为模拟污水处理过程时所选择的工艺。

### 2.2.3 $A^2O$ 工艺模型的搭建

目前,主流的污水处理工艺商业模拟软件有 BioWin、SUMO、GPS-X、WEST 等<sup>[40]</sup>。本研究采用了加拿大 Hydromantis 公司开发的 GPS-X 软件进行特定污水处理工艺的搭建和模拟运行。GPS-X 能够对城市生活污水和工业废水的处理过程进行动态仿真,是一款具有模块化、多功能、高效率的建模仿真工具,可以为污水处理厂的设计、新建、扩建、改造和优化提供强大的技术支持。GPS-X 在国内外广泛应用于污水处理领域,因其简洁的操作界面、先进的工艺模块系统和优良的仿真性能而受到众多用户的青睐<sup>[41]</sup>。

本模拟使用的软件版本 GPS-X 7.0 中集成了多种工艺模型,包括 IWA 发布的 ASM 系列模型以及 Hydromantis 自主开发的 Mantis、NewGeneral 等模型。用户可根据实际需求,选择不同的模型来建立和模拟各种污水处理工艺<sup>[42]</sup>。

Mantis 模型在 ASM1 基础上加入了一些与异养和自养生物相关的额外生长过程的修正,并将好氧反硝化作为其组成的一部分。本研究使用的 Mantis2 模型是 Mantis 模型的升级版本,该模型基于 ASM2d。Mantis2 模型可以估算液体和固体溶液中的 pH 值,因此在 Mantis2 模型中可以使用其它进水对象,如酸料、碱料等来估算对 pH 值进行调节时所需的化学物浓度。此外, Mantis2 模型还在硝化、沉淀等反应过程中考虑了更多的状态变量<sup>[43]</sup>。

本研究使用 GPS-X 构建基于  $A^2O$  工艺的污水处理厂动态流程模型,使用 GPS-X 内置的 mantis2lib 模型库。根据  $A^2O$  工艺的运行流程,从 GPS-X 的单元过程库中选择过程单元图标,包括“污水进水”、“长方形初沉池”、“缺氧全混流式反应器(厌氧池或缺氧池)”、“药品剂量(外加碳源)”、“完全混合反应器(好氧池)”、“圆形二沉池”和“排放(污水出水)”,并将这些过程单元通过流路径连接,如图 2-5 所示。

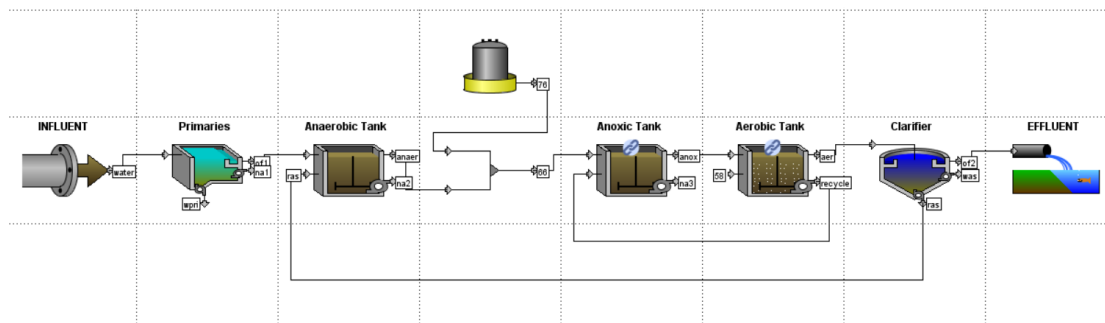


图 2-5 在 GPS-X 中搭建的  $A^2O$  模型

Figure 2-5.  $A^2O$  model built in GPS-X



其中所选择的厌氧池、缺氧池和好氧池模型均是 Mantis2，沉淀池模型为 Simple1d。Simple1d 是一个一阶模型，该模型对沉淀过程作出了一些假设，如固体在进料层的整个横截面上瞬时均匀分布，仅垂直流动而不存在分散等<sup>[43]</sup>。

“污水进水”单元和“药品剂量(外加碳源)”单元分别选择基于 COD 组分的 codstates 和 codfeed 模型，“排放(污水出水)”单元设定为默认值。

## 2.3 仿真数据集的建立过程

### 2.3.1 进水变量的转换

在污水处理厂实际运行过程中，不会对 BSM2 所提供的每个主要进水变量，即表 2-1 中出现的所有变量全都进行连续在线监测，因为这样会导致高昂的时间、人力和资源成本。通常的做法是选择一些关键变量进行实时监测，如进水流量、COD、氨氮、TN 等。因此，本研究对表 2-1 中的一些变量进行了转换。

进水 COD 可由式(2-1)计算得到：

$$S_{COD} = S_I + S_S + X_I + X_S + X_{B,H} + X_{B,A} + X_P \quad (2-1)$$

进水 TN 可由式(2-2)计算得到：

$$S_{TN} = S_{NO} + S_{NH} + S_{ND} + X_{ND} \quad (2-2)$$

考虑到 GPS-X 在默认参数下所搭建的 A<sup>2</sup>O 模型的尺寸规模不适用于水量较大的情况，本次实验对进水流量进行尺度缩放，缩小为原来的十分之一：

$$Q'_i = 0.1 * Q_i \quad (2-3)$$

### 2.3.2 外加碳源数据的生成

本研究将甲醇作为外加碳源，在 GPS-X 的默认设置下，甲醇纯度可在 0%~500%范围内调节，这一数值越高表示碳源投加量越高。由于 BSM2 提供的进水数据中并未包含外加碳源这一变量，因此，本研究通过以下步骤生成甲醇纯度模拟数据：

- 1) 在[0,500]范围内随机采样得到起始时刻的甲醇纯度 $\rho$ (单位:%);
- 2) 从二项分布中生成随机数，若为 0 则下一时刻的甲醇纯度值减 1，若为 1 则下一时刻的甲醇纯度值加 1；
- 3) 重复步骤 2，直到获得 609 天的完整数据；
- 4) 对步骤 3 得到的数据进行归一化处理，并乘以系数 500，使数据的尺度缩放到[0,500]。

生成的甲醇纯度模拟数据如图 2-6 所示。

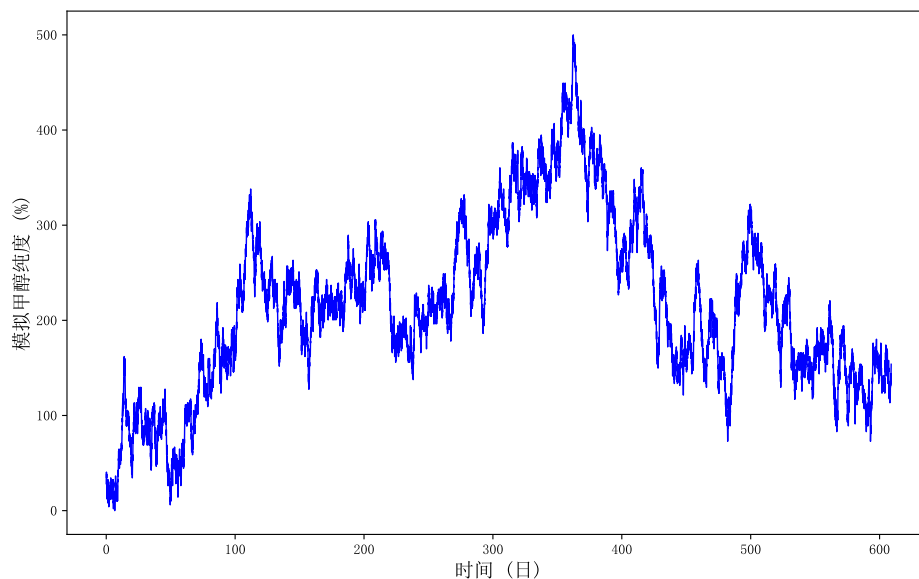


图 2-6 甲醇纯度模拟数据

Figure 2-6. Methanol purity simulation data

### 2.3.3 污水处理过程的模拟

进水 COD( $S_{COD}$ )、进水氨氮( $S_{NH}$ )、进水 TN( $S_{TN}$ )、进水流量缩放值( $Q_i'$ )、温度( $T$ )和甲醇纯度模拟值( $\rho$ )即为本研究构造仿真数据集所需的关键进水变量。将以上数据按照 GPS-X 所规定的格式(第一行是隐式变量名称,第二行是变量单位)保存在 Excel 文件中,以便模拟时导入。

在 GPS-X 中利用已搭建完成的 A<sup>2</sup>O 工艺模型进行污水处理过程模拟的步骤如下:

- 1) 在 GPS-X 中切换到模拟模式,右键单击“污水进水”单元图标,进入“组分-进水特性”页面,将除温度、甲醇浓度外的关键进水变量拖动到控制窗口;
- 2) 右键单击模型界面空白处,进入“系统-输入变量-物理环境设置”页面,将温度拖动到控制窗口;
- 3) 右键单击“药品剂量”单元图标,进入“组分-进料化学品细节”页面,将甲醇浓度拖动到控制窗口;
- 4) 点击“模拟方案”选项卡,单击“配置”按钮,选择默认方案后单击“数据文件”按钮,接着点击“添加”并选中对应的 Excel 数据文件;
- 5) 在输出窗口中新建绘图选项卡,右键单击“排放”单元图标,进入“输出变量-综合水质”页面,将需要观察的出水水质变量拖动到绘图窗口中;
- 6) 按照与步骤 5 类似的方式,将其它过程单元中值得考虑的水质参数变量一并拖入至绘图窗口中;

- 7) 勾选“稳态”，设置停止时间为 609d，单击“模拟开始”图标，进行为期 609 天的模拟，通过绘图窗口可以查看并导出这 609 天里内部反应池及出水端各项水质变量的模拟数据。

本研究在 GPS-X 中模拟的水质变量包括溶解氧(Dissolved Oxygen, DO)、混合液悬浮固体浓度(Mixed Liquid Suspended Solids, MLSS)、污泥沉降比(Sludge Settling Velocity, SV)等，具体变量名称如表 2-2 所示。

表2-2 GPS-X中模拟的水质变量

Table 2-2. Water quality variables simulated in GPS-X

出水端水质变量	内部反应池水质变量
出水COD	厌氧池DO
出水TN	内回流量
出水氨氮	缺氧池DO
——	好氧池MLSS
——	好氧池DO
——	好氧池pH
——	好氧池SV
——	二沉池排泥量

#### 2.3.4 仿真数据的调整与样本构建

所构建的仿真数据集由三部分组成：由 BSM2 得到的关键进水变量数据、通过 GPS-X 模拟得到的出水端水质变量数据以及内部反应池水质变量数据。

考虑到真实环境中存在的测量噪声，本研究在仿真数据集中引入高斯噪声。为适应所使用的不同传感器在测量不同特征时存在的量程范围差异，引入的高斯噪声均值为 0，方差按式(2-4)计算：

$$var = 0.02 * (max(x) - min(x)) \quad (2-4)$$

其中 $max(x)$ 和 $min(x)$ 分别表示当前特征变量的最大值和最小值，方差 $var$ 的上限为 2。

在一批污水的处理流程中，污水从进水端流经各个反应池到达出水端需消耗一定时间，该时间被称为滞后时间。在工程实际中，常常通过污水处理系统的有效容积和进水流量之比来估算滞后时间。而在使用 GPS-X 进行污水处理过程的模拟中，滞后时间并未被纳入考虑。此外，一些水质参数的检测手段较为复杂，污水处理厂真实运行过程中不会进行频繁的测量。因此，为模拟污水处理厂真实运行环境及传感器采样特性，本研究对引入噪声后的仿真数据进行两项调整：

- 1) 假定进水端到缺氧池，缺氧池到好氧池以及好氧池到出水端这三个工艺段的局部滞后时间均为 2h。将仿真数据中的特征按所属反应段分为进水段、缺氧段、好氧段和出水段 4 组，在时间轴上对这 4 组特征分别后移，每组后移的时间单位分别是 0h、2h、4h 和 6h；
- 2) 对仿真数据进行降采样处理，只保留每个偶数整点时刻的数据。该步骤使数据的采样周期由原来的 15min 变为 2h，数据量减少为原来的 1/8。

接着根据所要预测的时间点和所要利用的历史数据的时间尺度来建立仿真数据样本。假设利用过去 $r$ 小时的数据预测未来 $u$ 小时时刻的出水水质，则样本可按如下步骤建立：

- 1) 在起始时刻处构造一个长度为 $r$ 小时的时间窗口，窗口内包含起始时刻起 $r$ 小时内的全部特征；
- 2) 将时间窗口内的所有特征作为输入变量，将时间窗口末端时刻之后 $u$ 小时的出水特征作为输出变量，形成第一个样本；
- 3) 将时间窗口沿着时间轴正向移动一个单位，重复步骤 2，得到第二个样本；
- 4) 重复步骤 3，直到获得所有样本。

样本构建完成的仿真数据集中共计 7310 个样本，每个样本包含 17 个特征。本研究在时间轴上按 7:3 的比例将其划分成训练集和测试集，即 5114 个样本位于训练集，用于模型训练，剩余 2196 个样本位于测试集，用于验证模型的泛化能力。

## 2.4 小结

本章基于 BSM2 提供的动态进水数据，通过 GPS-X 搭建 A<sup>2</sup>O 工艺模型并模拟污水处理过程，利用其中涉及的各种关键水质参数和状态变量建立仿真监测数据集，不仅为后续章节的仿真实验提供数据支撑，也为污水处理领域中数据驱动模型的研究人员提供便利。

### 第三章 基于 RFE-LSTM 的出水水质预测方法

#### 3.1 引言

本章将 RFE 和 LSTM 两种方法联合，用于污水处理厂出水水质的预测。所提出的 RFE-LSTM 出水水质预测方法的流程如图 3-1 所示，该方法包含 4 个步骤：数据预处理、数据集构建、RFE-LSTM 模型建立(包括特征选择、时序特征提取与回归决策三个阶段)和 RFE-LSTM 模型的训练与调用。

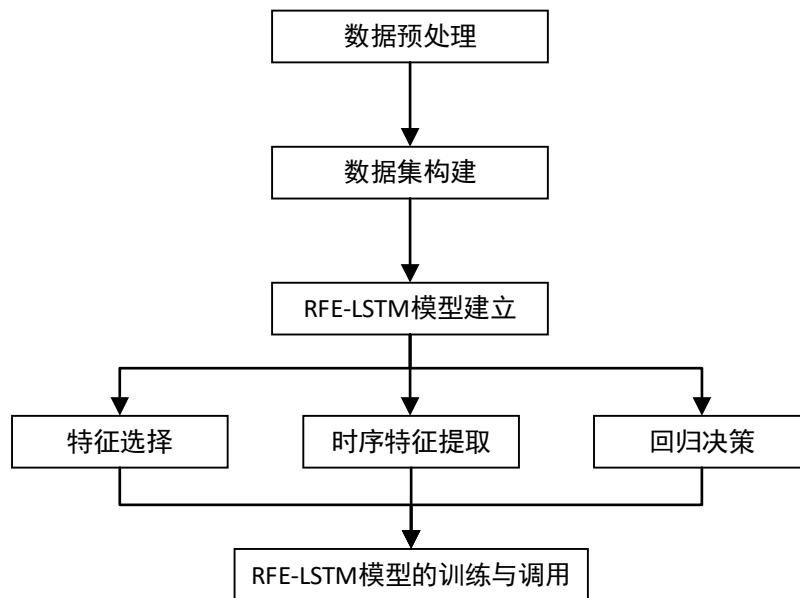


图 3-1 RFE-LSTM 方法流程图

Figure 3-1. Flow chart of RFE-LSTM method

- 1) 数据预处理。对原始数据中包含的缺失值和异常值进行筛查与清洗。为提高计算效率，加速网络训练时的收敛，对数据进行归一化处理。
- 2) 数据集构建。根据所要预测的时间点和所要利用的历史数据的时间尺度来建立样本，将已经完成样本构建的仿真数据集按一定比例划分成训练集和测试集。
- 3) RFE-LSTM 模型建立。利用 RFE 筛选出对出水水质预测重要性程度较高的特征子集，利用 LSTM 网络实现污水时序数据的特征提取，利用全连接层实现回归决策。

- 4) RFE-LSTM 模型的训练与调用。对于建立完成的 RFE-LSTM 模型, 设置损失函数, 利用已构建的训练集训练模型并利用测试集验证模型的泛化性能, 直至达到精度要求。在调用时将新样本输入到训练完成的模型中, 对模型输出值执行反归一化后得到预测的出水水质。

## 3.2 基于 RFE 的特征选择

### 3.2.1 污水监测数据的高维特性

污水处理过程中涉及大量的水质参数与状态变量, 监测数据的维度较高, 其中普遍存在大量的噪声以及无关或冗余的特征, 这导致机器学习算法的应用容易遭遇两个关键的问题: 一是维数灾难, 指的是在高维空间中, 数据点之间的距离变得非常稀疏, 限制了机器学习算法对高维数据的处理能力; 二是过拟合, 当模型参数数量过多时, 模型可能会过度拟合训练数据中的噪声, 而不是识别真正的模式, 高维空间中数据分布的分散性和特征的冗余性都会加剧过拟合的风险。因此, 高维数据不仅增加了存储空间和计算资源的需求, 也容易导致模型泛化能力和预测准确性的降低。

降维可以用于处理高维数据, 它能够生成低维模型, 节省存储空间和计算时间, 降低过拟合的风险, 提高模型精度和可解释性。在通过反应机理对污水处理过程进行建模时, 灵敏度分析方法可以计算参数变化对输出结果的影响比例, 常被用于对模型中的参数进行判定, 筛选出对模型影响较大的需要被着重考虑的参数, 以此来实现降维<sup>[44]</sup>。基于数据驱动的建模中也存在着类似的思想, 对应的方法被称为特征选择。

作为实现降维的一类有效方法, 特征选择直接筛选相关特征的子集进行模型构建。特征选择作为一种数据预处理策略, 可以定义为消除模型输入的数据集中冗余和不相关的特征, 以增强学习算法的过程。因此, 本研究应用特征选择方法筛选出对出水水质预测重要性程度较高的特征集合以更好地建立污水处理过程的数据驱动模型。

特征集合是确定预测模型假设的关键因素。特征数量与假设空间成正比, 即随着特征数量的增加, 假设空间也会增加。通过丢弃冗余和不相关的特征, 可以进一步减少假设空间<sup>[45]</sup>。对于最优特征子集的搜索, 可以通过穷举方式生成所有可能的子集来实现, 但这种方式并不适用于规模较大的数据集。在穷举方式下, 如果一个数据集包含 $N$ 个特征, 那么需要生成和评估 $2^N$ 个解, 这将导致极高的计算成本。另一种是启发式的搜索方式, 即使用启发式信息来指导搜索。尽管启发式搜索策略不能保证找到最佳子集, 但它通常会在合理时间内找到较为出色的解<sup>[46]</sup>。如何利用启发式信息来搜索最优特征子集是特征选择中的一个关键问题。

### 3.2.2 特征选择类型的选取

基于评价标准和与学习算法的交互，特征选择可分为 Filter、Wrapper 和 Embedded 三种类型。

在 Filter 方法中，特征的选择是基于某种统计度量实现的。Filter 方法是一个典型的数据预处理步骤，与机器学习算法的选择无关。在 Filter 方法中，模型从所有特征出发，基于方差选择、相关系数、卡方检验或者互信息等度量来评估特征的重要性，并选择最优特征子集<sup>[47]</sup>。所有这些统计方法都依赖于数据集中的响应和特征变量，皮尔逊相关和互信息法是其中最为常用的统计方法<sup>[48]</sup>。在 Filter 方法中，每个特征被分配一个评分值，按照评分降序排列所有特征，使用分数或排名阈值选择特征子集。Filter 方法的优点是进行特征选择的时间复杂度较低，计算时间成本低于其它类型的特征选择。但其缺点在于，由于在选择特征时没有考虑自变量之间的相关性，会导致冗余特征的选择。

Wrapper 方法根据预定义的学习算法的预测性能来评估所选特征的质量，进而选择特征子集<sup>[46]</sup>。给定一个特定的学习算法，典型的 Wrapper 方法执行两个步骤：(1)搜索特征的子集；(2)根据预测性能评估所选的特征。Wrapper 方法重复(1)和(2)，直到满足某些停止条件，例如达到了最高学习性能或者获得了指定数量的选定特征。Wrapper 方法的优点在于考虑了特征与标签之间的相关性，也考虑了不同特征之间的依赖关系，可以为特定学习算法识别最佳性能的特征子集，比 Filter 方法选择精度更高。但其缺点在于重复的学习和交叉验证，导致 Wrapper 方法计算的时间复杂度相对于 Filter 方法来说较大。同时，Wrapper 方法不适用于处理维度很大的数据，也不适合用于经常需要变更输入特征的场景中。

不同于前面讨论的两种特征选择方法是在数据预处理阶段进行特征选择，Embedded 方法将特征选择嵌入到模型学习中，提供了 Filter 方法和 Wrapper 方法之间的折中方案，在学习过程中选择最佳特征。如稀疏正则化是 Embedded 特征选择中的一种常用技术，用于限制参数，从而选择相关特征。稀疏正则化可以在很多机器学习方法中实现，例如支持向量机和 Logistic 回归<sup>[45]</sup>。Embedded 方法的时间复杂度和所应用的算法有很大关系，但其避免了重复选择特征子集进行评价，因此计算效率一般介于 Filter 方法和 Wrapper 方法之间。该方法的缺点在于它的引入会增加模型训练负担，并且 Embedded 方法的超参数，即权值系数的临界值难以确定。

Filter、Wrapper 和 Embedded 三类方法具有各自的优缺点，各自分别适用于不同类型的数据集和任务场景。简而言之，Filter 方法计算开销小，效率高，但无法捕获特征的相互作用；Wrapper 方法计算开销较大，但可以为特定学习算法识别最佳性能的特征子集；Embedded 方法的计算复杂度一般低于 Wrapper 方法，但会增加模型训练负担<sup>[49]</sup>。

考虑到污水处理过程的强耦合性决定了其特征之间存在相关性,无法捕捉特征之间相关性的 Filter 方法并不适用。此外,在相同的处理工艺下,进水段以及反应池内部的各种水质组分与出水水质之间具有较为固定的影响关系。当我们拥有在相同工艺模式下运行的多个不同污水处理厂的运行监测数据时,可以先对其一进行特征选择和模型建立。若模型的性能表现达到了令人满意的效果,可以认为此次特征选择获得了在该处理工艺下对于预测目标变量重要性程度较高的特征子集。在对其它污水处理厂进行建模时可以沿用这些特征作为模型的输入,从而避免进行重复的特征选择而造成计算成本的增加。因此特征选择适合作为污水处理过程建模前的一个预处理步骤,与模型的训练过程区分开。相较于 Embedded 方法,Wrapper 方法显然更适用于本文的研究。

### 3.2.3 RFE 方法的特征筛选过程

RFE 是一个应用非常广泛的 Wrapper 方法,该方法通过迭代的方式将重要性排名最低的特征一一消除<sup>[50]</sup>。RFE 通过构建不同子集进行基模型训练,以特定方式增加或移除某些特征来最大化模型性能,从而筛选出最佳特征组合<sup>[51]</sup>。本研究将 RFE 方法引入污水处理过程的特征筛选中,代替传统的灵敏度分析方法,其具体实现过程可概括为:

- 1) 使用污水处理厂监测数据集中所有待选特征训练基模型;
- 2) 计算每个特征的重要性并排序;
- 3) 从当前的待选特征集合中移除重要性最低的特征;
- 4) 重复步骤 1-3 直至剩余特征数量达到设定值;
- 5) 比较每个子集获得的模型的效果,确定最优的特征集合。

RFE 需要通过基模型的训练来评判特征的重要性,因此基模型的选择将直接影响 RFE 消除特征的合理性。本研究选择随机森林作为 RFE 的基模型。随机森林属于集成学习中的 Bagging 方法,它由多个决策树构成,模型的最终输出由各决策树共同决定<sup>[52]</sup>。对于分类问题,随机森林以投票的方式来决定测试样本的类别;对于回归问题,随机森林会将每个树输出的均值作为最终的预测值。

相对于神经网络等其它机器学习方法,随机森林因具备以下优点而非常适合作为 RFE 的基模型并应用于污水监测数据的特征筛选:

- 1) 能够有效处理具有高维特征的污水监测数据,无需降维;
- 2) 训练速度较快,实现较为简单;
- 3) 鲁棒性好,不易过拟合;
- 4) 能够在分类或回归的同时度量特征对决策的相对重要性,相对重要性的度量原理可见文献<sup>[53]</sup>。



### 3.3 基于 RFE-LSTM 的出水水质预测模型的建立

#### 3.3.1 污水监测数据的时间依赖性

工业过程本质上是动态的，数据样本之间具有很强的时间依赖性。污水处理过程属于工业过程的一种，其运行监测数据同样也是具有高度非线性和动态性的时间序列。

在污水处理过程中，不同时刻不同批次的进水会在反应池中混合，通过内回流管道，部分混合液会从好氧池末端回流至缺氧池前端。因此，未来某个时刻的出水水质与某个时间段内的历史数据特征之间存在着复杂的相关性，只有将整个时间段内的历史数据作为输入变量才能将所有的相关因素纳入考虑，才能够实现出水水质的精准预测。

在普通的前馈神经网络中，信息是单向传递的，网络的输出只依赖于当前的输入，并不适用于处理时序数据。作为一类非常强大的用于处理和预测序列数据的神经网络模型，RNN 通过循环连接具备了根据过去状态和当前输入数据更新当前状态的能力<sup>[54]</sup>。RNN 这种特有的信息传递方式使其更加擅长时间序列任务，因此也被广泛用于描述工业领域中时间序列的动态行为<sup>[54]</sup>。

然而，随着模型深度不断增加，经典 RNN 结构并不能很好地处理长距离的依赖。原因在于随着时间跨度的增加，Jacobian 矩阵的乘积往往会以指数级减小或者增大，梯度也会以指数级收敛于 0 或以指数级放大，造成梯度消失或梯度爆炸的问题而无法可靠地传递信息<sup>[55]</sup>。为了学习时序数据中的长期依赖关系，引入了 LSTM 网络架构<sup>[56]</sup>。LSTM 网络由经典 RNN 改进而来，其结构不仅可以实现信息的长期记忆，还能够有效避免经典 RNN 中的梯度消失和爆炸问题<sup>[57]</sup>。绝大多数基于循环神经网络的突破性成果都是由 LSTM 实现的，因此它也成为深度学习的研究热点。

#### 3.3.2 RFE-LSTM 模型的计算

本研究基于 LSTM 网络学习污水处理厂时序监测数据中的时间依赖关系。所建立的 RFE-LSTM 出水水质预测模型的组成中包含若干 LSTM 单元，如图 3-2 所示是单个 LSTM 单元的结构<sup>[56]</sup>。

LSTM 单元内部通过门控处理单元实现信息的选择性记忆，具有三种特定的门控结构，分别为：输入门、遗忘门和输出门<sup>[58]</sup>。门控用于实现选择性信息传递，LSTM 可以通过门控单元决定信息是否通过或者通过的比例。门控的一般形式可以表示为：

$$g(x) = \sigma(Wx + b) \quad (3-1)$$

其中， $W$ 和 $b$ 是网络中可学习的权重矩阵和偏置， $\sigma(x) = 1/(1 + e^{-x})$ ，为 Sigmoid 函数，它将一个实数映射到(0,1)区间。门的输出越接近于 0，信息通过越少，越

接近于 1 则表示信息通过越多，重要信息对应门控单元中的权重较大，而无关信息对应的权重较小。

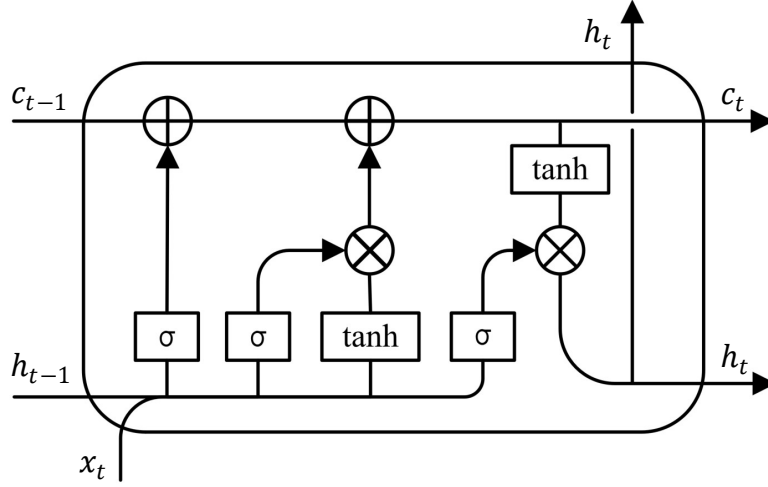


图 3-2 LSTM 单元的结构

Figure 3-2. Structure of LSTM unit

LSTM 单元内部包含两条信息流转的通路，分别为单元状态和隐藏状态。单元状态能够对重要的历史信息进行长期记忆，即便时间跨度很大。隐藏状态负责存储短期记忆，实现信息的传递并做出当下的决策。

在 LSTM 中，时间序列的演进方向被称为时间步，对应着序列的不同时刻。假设输入数据共包含  $T$  个时间步，LSTM 单元在其中单个时间步  $t$  上的前向计算过程可以通过以下步骤实现。

首先是进行遗忘门的计算。遗忘门不是 LSTM 单元最初版本的一部分，而是由 Gers 等人<sup>[59]</sup>提出的。遗忘门对历史信息进行筛选，即保留长期记忆中的重要部分而遗忘长期记忆中那些对预测用处较小的部分，从而为当前时刻输入的新信息腾出空间。通过遗忘门的信息选择，梯度沿时间反向传播时的梯度消失和爆炸问题将得到缓解。遗忘门  $f_t$  的计算公式为：

$$f_t = \sigma(W_f[h_{t-1}, x_t] + b_f) \quad (3-2)$$

其中， $h_{t-1}$  为前一时间步  $t-1$  上长短期记忆单元输出的隐藏状态， $x_t$  为当前时间步  $t$  的输入数据， $W_f$  和  $b_f$  是遗忘门中可学习的权重矩阵和偏置。

输入门控制当前时间步的输入数据  $x_t$  中有多少信息需要存入单元状态，输入门  $i_t$  和单元状态更新值  $\tilde{c}_t$  分别由  $x_t$  和  $h_{t-1}$  经一个神经网络层得到，激活函数分别为 Sigmoid 与 Tanh：

$$i_t = \sigma(W_i[h_{t-1}, x_t] + b_i) \quad (3-3)$$

$$\tilde{c}_t = \tanh(W_c[h_{t-1}, x_t] + b_c) \quad (3-4)$$

其中,  $W_i$  和  $b_i$  表示输入门中可学习的权重矩阵和偏置,  $W_c$  和  $b_c$  表示单元状态更新值计算的神经网络层中可学习的权重矩阵和偏置。Tanh 函数即双曲正切函数, 可按公式表述为:

$$\text{Tanh}(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (3-5)$$

当前时间步的单元状态  $c_t$  由上个时间步的单元状态  $c_{t-1}$  与当前时间步的单元状态更新值  $\tilde{c}_t$  分别以遗忘门  $f_t$  和输入门  $i_t$  作为加权系数得到:

$$c_t = f_t * c_{t-1} + i_t * \tilde{c}_t \quad (3-6)$$

其中, 符号 \* 表示计算 Hadamard 乘积。

LSTM 单元输出的隐藏状态  $h_t$  根据单元状态  $c_t$  确定。输出门控制单元状态  $c_t$  对隐藏状态  $h_t$  的影响, 同遗忘门和输入门一样, 输出门  $o_t$  也是由  $x_t$  和  $h_{t-1}$  计算得到:

$$o_t = \sigma(W_o[h_{t-1}, x_t] + b_o) \quad (3-7)$$

最终, 由单元状态  $c_t$  和输出门  $o_t$  经过 Hadamard 乘法得到当前时间步长短期记忆单元输出的隐藏状态  $h_t$ :

$$h_t = o_t * \text{Tanh}(c_t) \quad (3-8)$$

LSTM 网络由若干 LSTM 单元连接而成, 如图 3-3 所示。

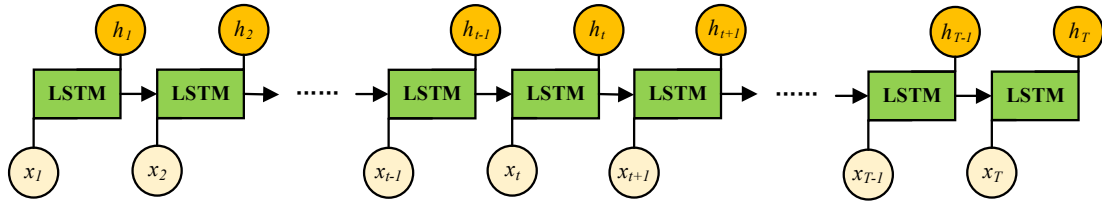


图 3-3 LSTM 网络的结构

Figure 3-3. Structure of LSTM network

总的来说, LSTM 网络转变了原始 RNN 网络的信息传递模式, 并引入了门控单元, 产生梯度长时间持续流动的路径, 并引入了线性自循环操作, 从而解决了长期依赖问题<sup>[60]</sup>。如果 LSTM 单元能够在早期阶段从输入序列中检测到重要特征, 则 LSTM 可在长时间内保留该特征信息, 从而捕获潜在的大范围序列依赖关系<sup>[61]</sup>。

在建立完整的 RFE-LSTM 出水水质预测模型前, 首先定义特征未经筛选时的原始历史特征数据  $X_0 = \{X_0^d | d = 1, 2, \dots, D\}$  (其中  $D$  为原始特征的维度); 定义待预测时刻的出水水质数据为  $Y = \{y^d | d = 1, 2, \dots, m_o\}$  (其中  $m_o$  为预测的出水水质特征的维度)。

如图 3-4 所示, 所建立的 RFE-LSTM 出水水质预测模型的计算主要由 3 个阶段组成: 特征选择、时序特征提取和回归决策。

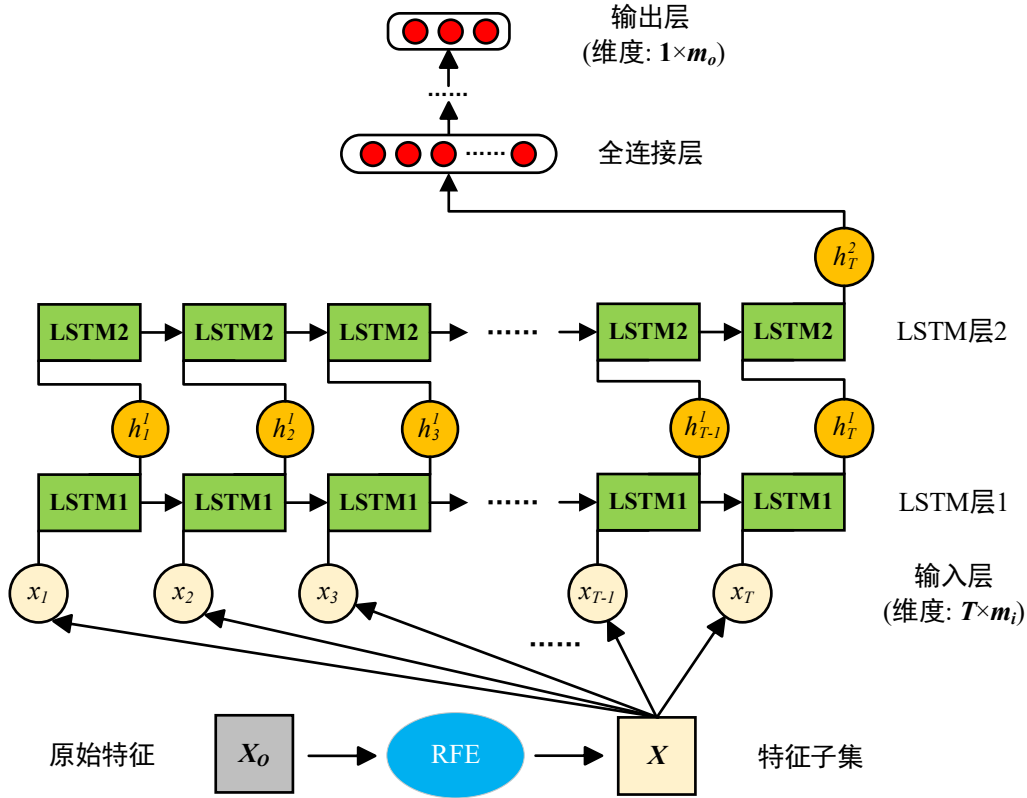


图 3-4 RFE-LSTM 模型的结构

Figure 3-4. Structure of RFE-LSTM model

预处理完成的原始历史特征数据 $X_0$ 中包含 $D$ 个特征。在特征选择阶段，RFE方法会以迭代的方式一一消除 $X_0$ 中重要性排名最低的特征，得到的特征子集可定义为 $X = \{X^d | d = 1, 2, \dots, m_i\}$ ，其中 $m_i$ 为特征子集中包含的特征数量。特征子集 $X$ 将作为下一阶段的输入。

在时序特征提取阶段中，输入的特征子集 $X$ 可以按另一种方式定义为 $X = \{x_t | t = 1, 2, \dots, T\}$ ，其中 $T$ 为每个样本设定的时间跨度内采样历史特征的次数。在对复杂任务中的输入数据作特征提取时，可以通过增加 LSTM 层的数量提升网络的学习能力。然而，一味增加 LSTM 层数会导致网络参数过多，降低网络收敛效率，在训练数据量不够的情况下增加过拟合的风险。在本章研究的 RFE-LSTM 模型中，LSTM 层的个数设定为 2，时序数据的特征提取由两个 LSTM 层连接而成的 LSTM 网络来实现，两个 LSTM 层都由 $T$ 个 LSTM 单元组成。LSTM 层 1 以特征子集 $X$ 作为输入，将每个时间步的 $m_i$ 个特征输入到对应的 LSTM 单元。LSTM 层 2 的输入是 LSTM 层 1 输出的 $T$ 个隐藏状态 $H^1 = \{h^1_t | t = 1, 2, \dots, T\}$ ，LSTM 层 2 最后一个时间步输出的隐藏状态 $h^2_T$ 将作为下一阶段的输入。

最后一个阶段是回归决策，该阶段由若干全连接层实现，全连接层的计算与公式(3-1)中门控的计算类似，区别在于所使用的激活函数为修正线性单元(Rectified Linear Unit, ReLU)，其公式表述如下：

$$ReLU(x) = \begin{cases} x, & \text{if } x > 0 \\ 0, & \text{if } x \leq 0 \end{cases} = \max(x, 0) \quad (3-9)$$

为达到输出实数的目的，输出层设置为纯线性层，不使用激活函数。回归决策阶段负责对 LSTM 层提取的特征表示进行进一步计算，并将其映射到 $m_o$ 个目标值(即预测的出水水质特征 $Y$ )所在的特征空间中。

### 3.4 实验分析

基于上一章通过 BSM2 和 GPS-X 得到的仿真监测数据集，对 RFE-LSTM 方法进行实验验证。由于仿真监测数据集中不包含缺失值及异常值，因此在归一化后直接根据所要预测的时间点和所要利用的历史数据的时间尺度来构建数据集，按照上一章给出的步骤建立样本输入输出变量之间的对应关系。

本章的实验旨在利用过去 24h 的历史数据预测未来 6 小时时刻的出水水质(包括出水 COD、出水 TN、出水氨氮)，因此设置 $r$ 为 24， $u$ 为 6，得到仿真数据集以及划分后的训练集与测试集。本次实验在训练时，将训练集中 30%的样本作为验证集，验证集的性能表现将作为模型超参数调整和确定的依据。

对于划分后得到的训练集，执行 RFE 特征选择，从所有特征中获得特征数量为 13 的特征子集。设定随机森林回归模型中树的个数为 100，将待预测的出水水质目标值作为输出，历史特征数据作为输入。RFE 最终给出的入选特征包括：进水 COD、进水氨氮、进水 TN、进水流量、温度、甲醇纯度、好氧池 pH、好氧池 SV、好氧池 MLSS、好氧池 DO、出水 COD(历史值)、出水 TN(历史值)和出水氨氮(历史值)。厌氧池 DO、内回流量、缺氧池 DO 等特征被排除。在出水水质预测时，RFE-LSTM 预测模型的输入将屏蔽特征子集以外的特征。

为了验证 RFE-LSTM 方法的有效性和优越性，引入经典 LSTM 方法和目前常用于出水水质预测的全连接神经网络即多层感知机(Multi-Layer Perception, MLP)方法作为对比实验。三种方法均使用上述步骤构建的数据集，区别在于经典 LSTM 方法和 MLP 方法使用的数据集中包含所有特征，而 RFE-LSTM 方法的输入层屏蔽了 RFE 消除的特征。

本次实验设置的网络模型结构和超参数如表 3-1、3-2、3-3 所示。各隐藏层神经元数量为 $2^M$ ， $M$ 为[6,11]区间内的整数，选取使验证集误差最小的网络模型参数作为最佳参数组合。

表3-1 RFE-LSTM超参数设置

Table 3-1. Hyper-parameters of RFE-LSTM

超参数	描述	设置值
输入节点数	与输入变量(特征选择后的历史数据)维度相匹配	$13 \times 13$
输出节点数	与输出变量(出水水质)维度相匹配	3
各层节点数和类型	除输入层外各层的输出维度和类型	$[13 \times 512(\text{LSTM}), 512(\text{LSTM}), 256(\text{Fully Connected}), 3(\text{Fully Connected})]$
激活函数	隐藏层神经元的激活函数	[Tanh, Tanh, ReLU, 无]
梯度下降优化算法	最小化损失函数的模型优化方法	Adam
学习率设定	每次执行梯度下降的步长	0.0003
迭代Epoch数	训练时最多执行的Epoch数	200
批大小	单次训练参与的数据样本数	128
正则化方法	Dropout随机失活	0.2

表3-2 经典LSTM超参数设置

Table 3-2. Hyper-parameters of classic LSTM

超参数	描述	设置值
输入节点数	与输入变量(历史数据)维度相匹配	$13 \times 17$
输出节点数	与输出变量(出水水质)维度相匹配	3
各层节点数和类型	除输入层外各层的输出维度和类型	$[13 \times 512(\text{LSTM}), 512(\text{LSTM}), 256(\text{Fully Connected}), 3(\text{Fully Connected})]$
激活函数	隐藏层神经元的激活函数	[Tanh, Tanh, ReLU, 无]
梯度下降优化算法	最小化损失函数的模型优化方法	Adam
学习率设定	每次执行梯度下降的步长	0.0003
迭代Epoch数	训练时最多执行的Epoch数	200
批大小	单次训练参与的数据样本数	128
正则化方法	Dropout随机失活	0.2

表3-3 MLP超参数设置  
Table 3-3. Hyper-parameters of MLP

超参数	描述	设置值
输入节点数	与输入变量(历史数据)维度相匹配	221
输出节点数	与输出变量(出水水质)维度相匹配	3
各层节点数和类型	除输入层外各层的输出维度和类型	[512(Fully Connected), 512(Fully Connected), 256(Fully Connected), 3(Fully Connected)]
激活函数	隐藏层神经元的激活函数	[Sigmoid, Sigmoid, Sigmoid, 无]
梯度下降优化算法	最小化损失函数的模型优化方法	Adam
学习率设定	每次执行梯度下降的步长	0.003
迭代Epoch数	训练时最多执行的Epoch数	200
批大小	单次训练参与的数据样本数	128
正则化方法	Dropout随机失活	0.2

本研究选择均方误差(Mean Square Error, MSE)作为以上各个模型训练时的损失函数:

$$MSE(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3-10)$$

其中,  $n$  为样本个数,  $y_i$  表示第  $i$  个样本目标的真实值,  $\hat{y}_i$  表示第  $i$  个样本目标的预测值。

将 MSE 和  $R^2$  决定系数作为模型性能评价指标,  $R^2$  决定系数是一种用于度量回归模型的拟合优度的统计量, 其计算公式如下:

$$R^2(y, \hat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=0}^{n-1} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=0}^{n-1} (y_i - \bar{y})^2} \quad (3-11)$$

其中,  $n$  为样本个数,  $y_i$  表示第  $i$  个样本目标的真实值,  $\hat{y}_i$  表示第  $i$  个样本目标的预测值,  $\bar{y}$  表示所有样本目标真实值的均值。决定系数的取值一般在 0~1 之间, 越接近 1 表示回归模型拟合性能越好, 越接近于 0 则表示模型性能越差。

实验结果如表 3-4、图 3-5、图 3-6、图 3-7、图 3-8 以及图 3-9 所示。表 3-4 是各方法训练完成的模型在测试集上计算的  $R^2$  和 MSE, 图 3-5 为各方法在模型训练时测试集 MSE 随着迭代的 Epoch 变化的曲线(纵轴标签 MSE\*表示通过归一化数据计算的均方误差), 图 3-6、图 3-7 和图 3-8 为各方法下出水水质预测值与

真实值的比较折线图,图3-9为各方法下出水水质预测值与真实值的比较散点图。可以看出,所提出的 RFE-LSTM 方法相较于其它两种方法而言,具有更高的预测精度和更强的泛化能力。

表3-4 三种方法在测试集中的性能指标

Table 3-4. Test set performance metrics of three methods

指标	RFE-LSTM	classic LSTM	MLP
$R^2$ (出水COD)	0.9161	0.8474	0.7989
$R^2$ (出水TN)	0.9589	0.9501	0.8978
$R^2$ (出水氨氮)	0.9652	0.9578	0.9420
$R^2$	0.9467	0.9184	0.8796
$MSE$	0.9810	1.7651	2.3509

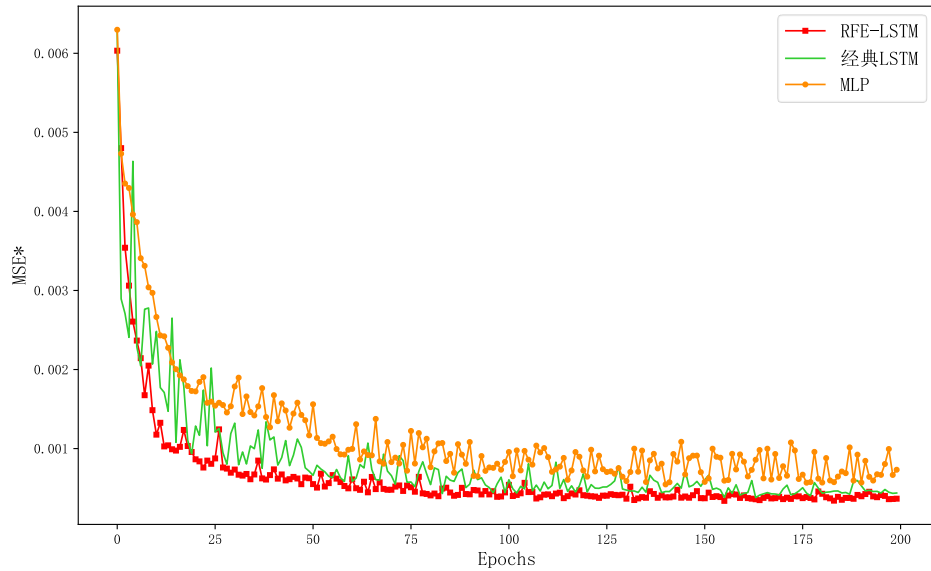


图 3-5 训练时的测试集 MSE 变化曲线

Figure 3-5. MSE curves on the test set during training



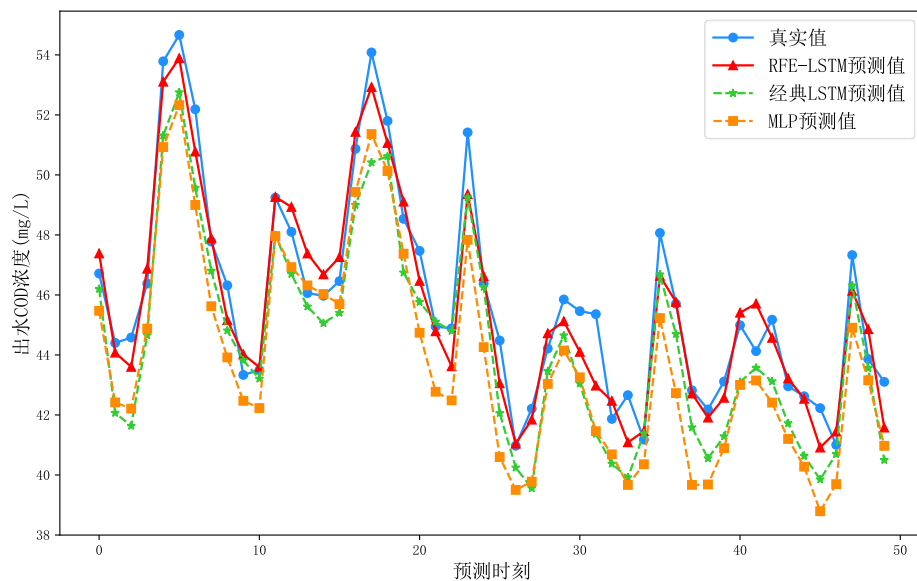


图 3-6 出水 COD 预测值与真实值的比较折线图

Figure 3-6. Compare line plot of predicted and true values of effluent COD

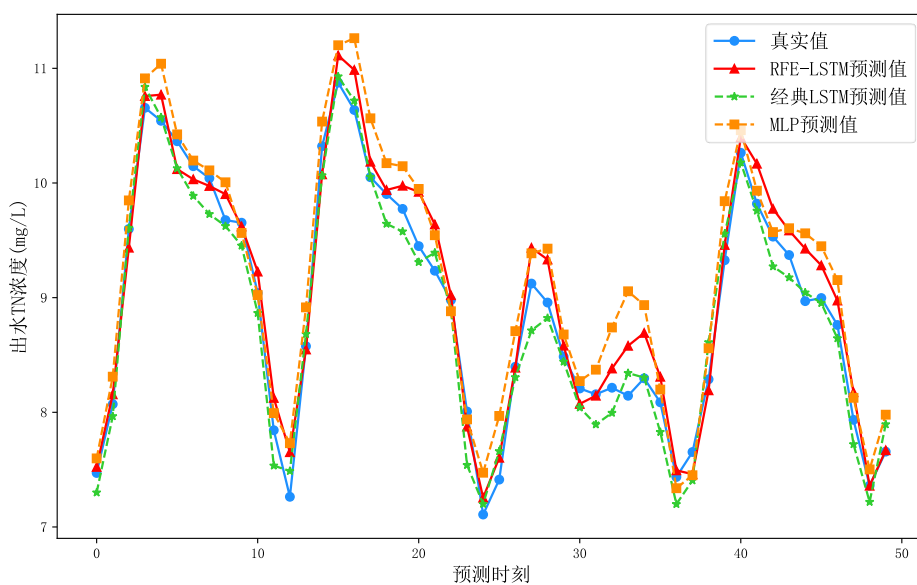


图 3-7 出水 TN 预测值与真实值的比较折线图

Figure 3-7. Compare line plot of predicted and true values of effluent TN

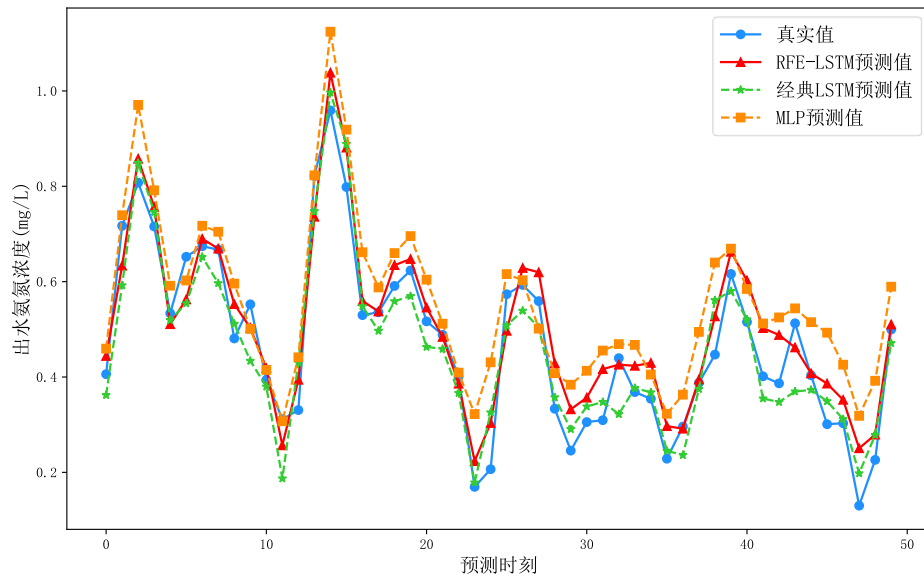


图 3-8 出水氨氮预测值与真实值的比较折线图

Figure 3-8. Compare line plot of predicted and true values of effluent ammonia nitrogen

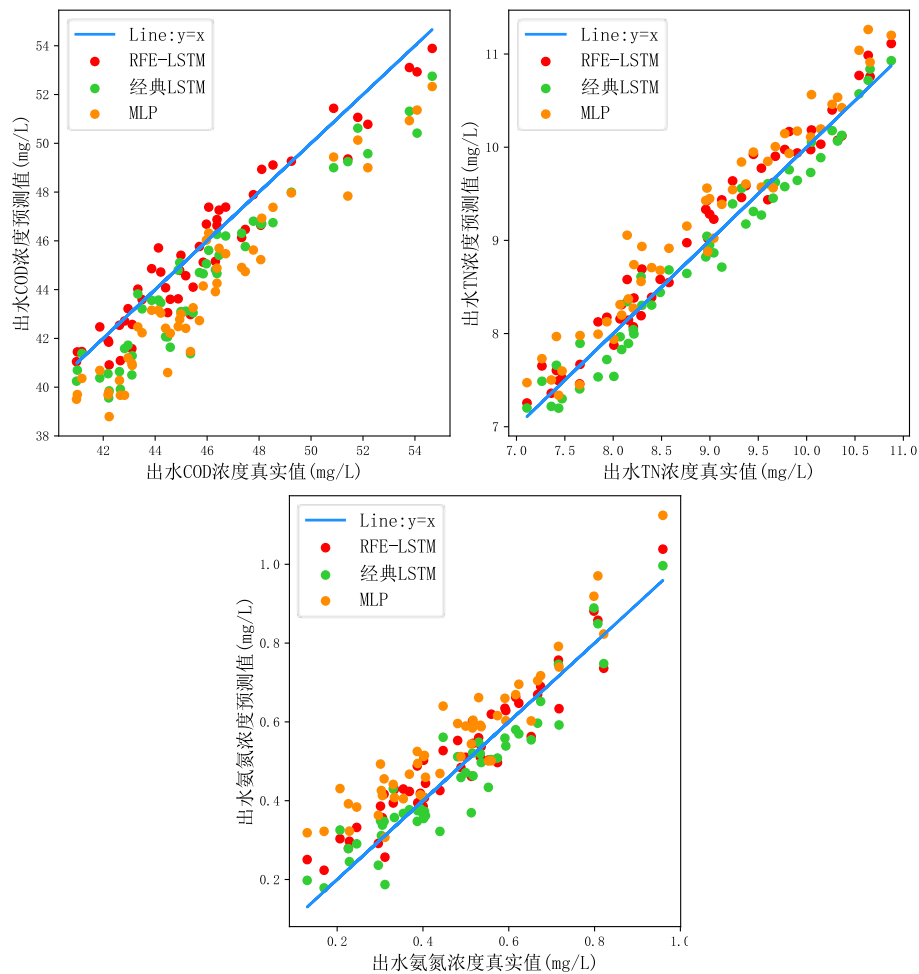


图 3-9 出水水质预测值与真实值的比较散点图

Figure 3-9. Compare scatter plot of predicted and true values of effluent water quality

### 3.5 小结

本章重点研究了数据驱动下污水处理厂的系统建模问题，提出了一种基于 RFE 和 LSTM 的联合方法，并将其用于出水水质的预测。具体而言，采用 RFE 从进水和各工艺段采集的数据中消除不相关和冗余的特征，以构建特征子集；然后，LSTM 网络被用于从所选特征组成的时序数据中提取关键信息；最后，通过全连接层实现回归决策，将 LSTM 网络提取到的特征表示映射为出水水质的预测值。

基于仿真监测数据集，利用本章提出的 RFE-LSTM 方法预测出水水质，并进行了对比实验，验证了该方法的有效性和优越性。与经典 LSTM 方法和 MLP 方法相比，RFE-LSTM 方法表现出了更好的预测性能和更强的泛化能力。结合 RFE 在搜索最优特征子集方面的优势以及 LSTM 对于时序数据中重要信息的强大的提取能力，RFE-LSTM 方法实现了对出水水质的精准预测。

## 第四章 基于 LSTM-AM 的出水水质预测方法

### 4.1 引言

本章旨在利用真实污水处理厂积累的运行监测数据来对真实污水处理厂的动态处理过程进行建模。与基于仿真数据的建模相比，实际处理过程的建模面临着更大的挑战性。除了活性污泥法处理过程本身具有的高度非线性和强耦合性特点以外，实际污水处理系统往往还具有长时滞性。对于比较大型的污水处理厂来说，一批污水由进水端流经各反应池到达出水端的耗时可能高达 20 小时甚至更久，因此某一时刻的出水水质会受到更大时间跨度的历史变量的影响。此外，实际污水处理系统的滞后时间难以确定。滞后时间的长短与进水流量的大小成反比，在工程实践中，由于进水流量无法保持恒定，污水流经各工艺段的耗时也因此具有不定性。进水流量的不规则变化使得污水处理工作者难以衡量历史各个时段流入的污水对未来出水水质的影响程度。

为了克服现有污水处理厂出水水质预测方法无法同时将系统本身的高度非线性、长时滞性和滞后时间不定性作统一考虑的问题，本章节提出一种基于 LSTM 网络和注意力机制(Attention Mechanism, AM)的污水处理厂出水水质预测方法，所提出的方法称为 LSTM-AM 方法，所建立的模型称为 LSTM-AM 混合模型。通过 LSTM 网络对时序输入数据作特征提取，通过 AM 获取提取后的特征表示在时间上对出水水质预测的权重分布。

所提出的 LSTM-AM 出水水质预测方法的流程如图 4-1 所示，该方法包括以下 6 个步骤：

- 1) 数据采集与预处理。在污水处理厂实际运行的过程中进行各项水质参数和状态变量的监测与采集。对于采集后的原始数据中包含的缺失值和异常值进行筛查与清洗。为提高计算效率，加速网络训练时的收敛，对数据进行归一化处理。
- 2) 特征筛选。参考上一章 RFE 特征选择给出的特征子集，筛选并保留与出水水质具有相关性的特征。
- 3) 数据集构建。根据所要预测的时间点和所要利用的历史数据的时间尺度来建立样本，将已经完成样本构建的真实数据集按一定比例划分成训练集和测试集。

- 4) 特征分组。按照所属的工艺段对数据集中的输入特征进行分组。分组的原因在于，不同工艺段中的污水流至出水端的时间不一致，因此位于不同组别的特征与出水水质之间具有不同的时间依赖性。本研究将进水流量特征作为独立的输入，因此将其置于单独的组别。
- 5) LSTM-AM 模型建立。通过 LSTM 网络建立时序特征模块实现污水时序数据的特征提取，通过 CNN 建立注意力模块提取进水流量中隐含的滞后时间信息，通过全连接层的组合建立回归决策模块以实现出水水质预测值的输出。
- 6) LSTM-AM 模型的训练与调用。对于建立完成的 LSTM-AM 模型，设置损失函数，利用已构建的训练集训练模型并利用测试集验证模型的泛化性能，直至达到精度要求。在调用时将新样本输入到训练完成的模型中，对模型输出值执行反归一化后得到预测的出水水质。

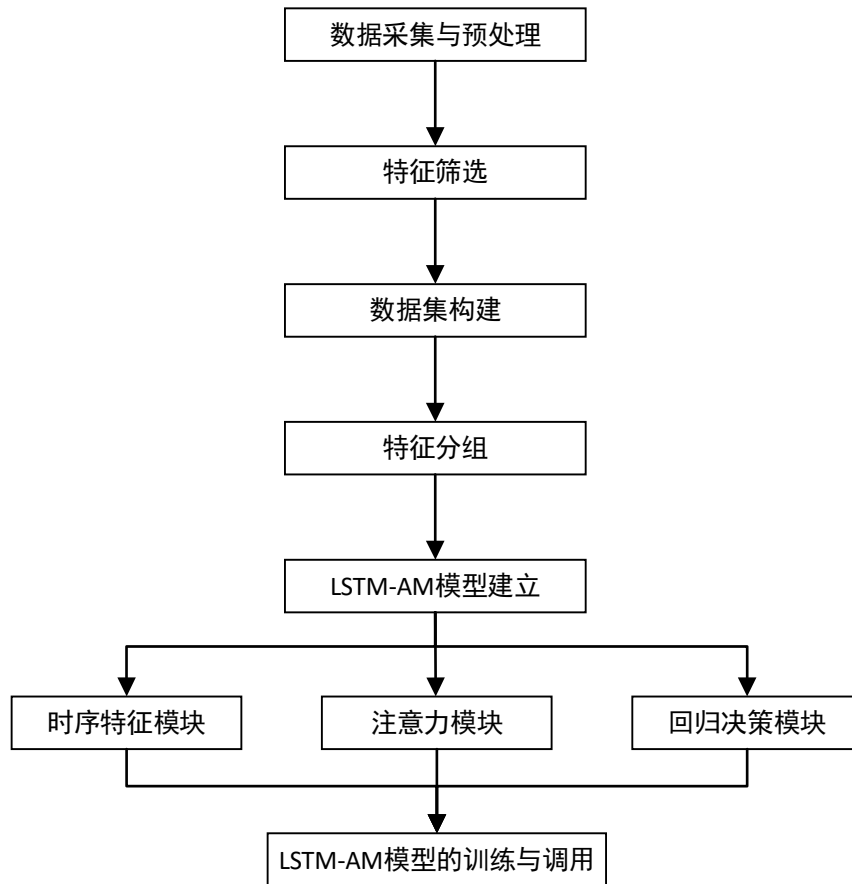


图 4-1 LSTM-AM 方法流程图

Figure 4-1. Flow chart of LSTM-AM method

## 4.2 注意力模块的建立

### 4.2.1 注意力机制模型的计算

注意力机制即 AM 是一种模仿人脑注意力的计算方法，其灵感来自于生物学家和心理学家对人类感知过程的研究。由于人脑的计算资源有限，不能同时处理所有输入的信息，因此它在某个特定时刻会将注意力集中在需要重点关注的区域，减少甚至忽略对其它区域的关注，以节省计算资源，提取更多有用的信息，抑制干扰信号。例如，当一幅画进入人类视野时，往往是画面中那些显眼的主体或者突兀的颜色被优先感知，而背景中那些较为平凡的细节则被暂时性忽略。人脑这种在感知和处理信息时进行资源分配和优化的能力即为注意力<sup>[62]</sup>。

在机器学习领域中，注意力机制是一种提高神经网络信息处理能力的方法，是指在模型计算过程中，通过对输入信息的不同部分如不同时刻或不同的特征通道上赋予不同的权重，度量不同信息的重要性，以便模型有针对性地关注与当前任务相关的重要信息，弱化无用信息的干扰，从而大大提高模型对信息感知处理的效率和准确性。如今，注意力机制已成为深度学习领域中最重要方法之一，是神经网络架构中的一个十分常见的组成部分，被广泛应用于各种任务，如文本分类，情感分析，语音识别，自动驾驶等等<sup>[63]</sup>。

根据注意力机制的定义，其基本网络框架如图 4-2 所示。

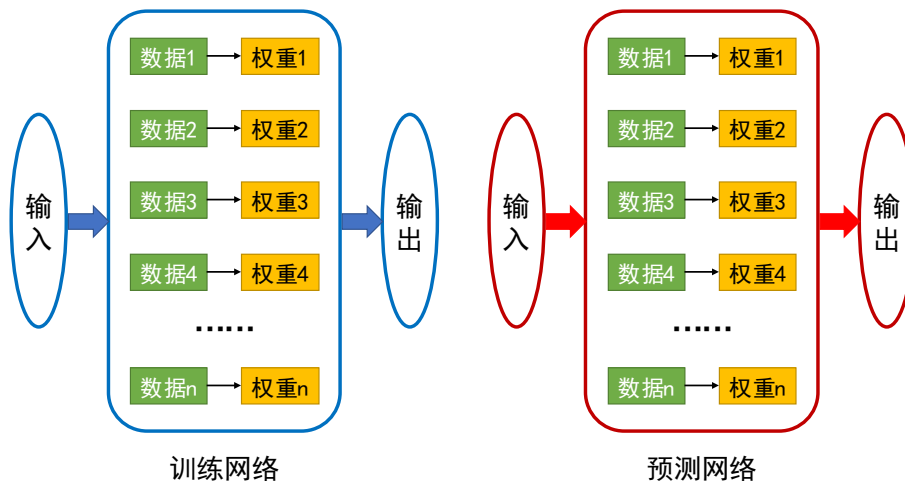


图 4-2 注意力机制基本网络架构

Figure 4-2. Basic network architecture of attention mechanism

注意力机制可以抽象为由查询(Query, Q)、键(Key, K)和值(Value, V)组成的特征筛选过程。其中 Query 表示由特定任务发起的查询，Key 和 Value 表示某个候选特征的键值对。一个典型的注意力机制模型的实现过程可以简要概括为以下 4 个步骤：

- 1) 定义输入向量，其中包括 Query、Key 和 Value；
- 2) 根据 Query 和 Key 计算输入信息上的注意力权重；
- 3) 根据注意力权重和 Value 计算上下文向量；
- 4) 将得到的上下文向量作为输出，可以对其进行进一步处理，如加入分类、回归的网络层。

典型注意力机制模型的计算过程如图 4-3 所示<sup>[63]</sup>。

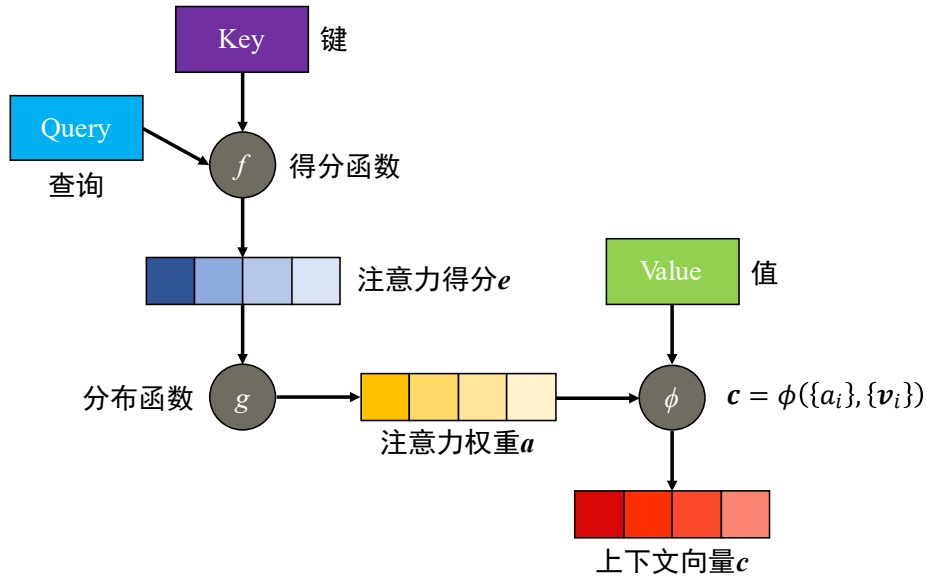


图 4-3 典型注意力机制模型的计算过程

Figure 4-3. Computational process of the typical attention mechanism model

具体地，在计算注意力权重前，首先将源数据特征编码为键(K)，K 可以根据特定的任务和神经网络结构以各种形式表示。同时引入一个与任务相关的表示向量，即查询(Q)。接着，通过得分函数 $f$ 计算 Q 和 K 之间的相似度或相关性，以获得注意力得分 $e$ 。注意力得分 $e$ 反映了查询相对于键的重要性，用于决定下一个输出：

$$e = f(Q, K) \quad (4-1)$$

得分函数 $f$ 是注意力模型的关键部分，因为它定义了键和查询是如何匹配或组合的，决定着输入信息的权重分配。目前常用的得分函数主要有内积和余弦相似度，对应公式如表 4-1 所示。

表4-1 常用得分函数

Table 4-1. Common Score function

函数名	公式
点积	$f(Q, K) = Q^T K$
余弦相似度	$f(Q, K) = \frac{Q \cdot K}{\ Q\  \cdot \ K\ }$

除了使用函数以外,也可以通过引入其它计算机制实现注意力得分 $e$ 的计算,如额外的神经网络。

在得到注意力得分 $e$ 之后,通过注意力分布函数 $g$ 将注意力得分 $e$ 映射为注意力权重 $a$ :

$$a = g(e) \quad (4-2)$$

分布函数 $g$ 有多种选择,其中 Softmax 最为常用,它将所有注意力得分归一化为一个概率分布。

最后进行上下文向量的计算,此时通常需要引入另一个数据特征表示,称为值( $V$ )。 $V$  中每个元素的位置与  $K$  中的每个元素一一对应,注意力权重 $a$ 即为  $V$  对应的权重系数。上下文向量 $c$ 将通过以下方式计算:

$$c = \phi(\{a_i\}, \{v_i\}) \quad (4-3)$$

其中 $\phi$ 是一个函数,其最为常见的实现方式是执行  $V$  的加权和:

$$c = \sum_{i=1}^d a_i v_i \quad (4-4)$$

其中 $d$ 是向量  $V$  的维度,也即注意力权重向量 $a$ 的维度。

除了加权求和以外,函数 $\phi$ 还有其它实现方式,但无论哪种方式,上下文向量都会主要取决于值  $V$  中对应注意力权重更高的部分。

以上是对典型注意力机制计算过程的描述,各种具体的注意力机制模型大多都满足上述的抽象计算过程<sup>[63]</sup>。

除了帮助性能提升以外,注意力机制也可以作为一种解释神经网络行为的工具。到目前为止,深度学习的可解释性一直是一个备受关注的问题。虽然注意力机制是否可以作为一种可靠方法来解释神经网络行为仍然是一个有争议性的问题,但它可以在一定程度上提供直观的解释。通过可视化注意力权重分布,可以直观地了解模型在处理数据时哪些信息被重点关注,以及哪些信息被忽略或弱化。这种解释性手段不仅可以帮助我们更好地理解模型,还能够帮助我们发现模型在处理数据时的偏差和缺陷,从而为优化模型的性能和可靠性提供依据。

因此,在污水处理厂的出水水质预测中,注意力机制的引入主要可以实现两个功能:一是根据不同时刻监测数据的重要程度,赋予相应权重,从而提取更多



有价值的信息以实现更加精准的出水水质预测；二是通过可视化不同时刻上的权重分布，直观反映污水处理过程的时间依赖性，为污水处理人员提供过程分析和模型优化的依据。

#### 4.2.2 外部注意力机制的设计

从信息来源的角度，注意力机制可分为内部注意力机制和外部注意力机制。内部注意力机制是指模型在计算注意力权重时只考虑自身的信息。比如在自注意力机制中，查询、键、值都是通过模型自身的不同位置的嵌入向量来表示，注意力权重计算时只考虑不同位置嵌入向量之间的相似度<sup>[64]</sup>。不同于内部注意力机制在模型内部计算注意力权重，外部注意力机制的模型在计算注意力权重时利用外部知识，包括其它信息或者其它模型的输出，实现了跨模态、跨域的信息交互。

Transformer 模型的诞生改变了人工智能领域的众多方向，在各种任务场景中实现了性能突破。自注意力机制是 Transformer 模型中最有效的部分，它使模型能够动态地利用不同位置的输入特征进行计算，避免了信息损失，能够更好地捕捉序列中的长距离依赖关系<sup>[65]</sup>。

在 Transformer 模型的开发过程中存在一个现象：规模较大的模型往往具有更好的学习能力，尤其是在与大规模数据相结合的情况下。这促使了超大型 Transformer 模型的发展，从具有 1.1 亿个参数的 BERT 到具有 1750 亿个参数的 GPT-3<sup>[66]</sup>。

然而，在数据规模不大的情况下，大规模的复杂注意力模型往往得不到较好的训练。文献[67]研究了当前基于 Transformer 的模型的机制，解释了训练数据的缺乏会阻碍复杂注意力模型使用的原因，并通过为模型提供各种来源的外部知识如知识图谱、字典等来训练中等规模的注意力模型，即引入外部注意力机制这一策略。实验表明，该策略可以在几乎没有额外计算成本的情况下带来可观的性能提升。文献[68]提出了一种通过人声分析来自动分类讲述人认知负荷级别的系统，其中建立了一种外部注意力模型，将对数能量和基频作为外部知识，来加权 LSTM 网络中每个时间步的贡献，在获得性能提升的同时降低了注意力模型对大规模数据的依赖。

由于污水处理厂在实际运行状态下无法对每一种水质参数或状态变量都进行高频的监测与采样，因此，即使是长达数年的运行，所积累的数据也远远无法达到大规模数据的标准。同时，进水流量这一特征作为影响污水处理系统滞后时间的决定性因素，其中隐含着决定输入特征序列在不同时刻上所占权重的时滞信息。而 LSTM 网络在对输入特征序列的每个时间步作特征提取时，在每个隐藏状态中给出了当前时间步提取后的特征表示，即当前时间步上的重要信息。因此，本研究开创性地将进水流量数据作为外部注意力机制的外部知识，由注意力模块实现外部注意力机制并利用其中的卷积神经网络结构提取进水流量中的有效特

征，将其映射为注意力权重并连接到时序特征模块中 LSTM 网络输出的隐藏状态上。

本研究所设计的注意力模块中，采用外部注意力机制，对注意力权重的计算可按式(4-5)抽象表示：

$$a = g(CNN(Q_i)) \quad (4-5)$$

其中 $Q_i$ 表示进水流量， $CNN(\cdot)$ 表示卷积神经网络，其结构将在下一小节中阐述，用于输出注意力得分； $g(\cdot)$ 为分布函数，将注意力得分映射为注意力权重 $a$ ，本研究选择 Softmax 作为分布函数。

#### 4.2.3 基于 CNN 的进水流量特征提取

卷积神经网络即 CNN 最初被广泛应用于针对图像等二维数据的机器学习任务，如 MNIST 手写数字识别等。随着时间的推移，越来越多的研究人员将 CNN 推广到图像以外的各种领域并取得了突破性进展，诸如信号分类、故障检测、剩余寿命预测这种数据多为一维信号的场景，如今也普遍使用 CNN 来进行信息的提取。在一维数据上实现卷积运算的方法被称作一维卷积。污水处理厂提供的进水流量数据是一维的，本研究将其视作一维信号，并采用一维卷积的方法提取其中隐含的时滞信息。

本文在注意力模块中设计 CNN 用于实现对进水流量中有效特征的自动提取，将提取后的特征表示映射为注意力权重向量，并将注意力权重向量与 LSTM 网络组成的时序特征模块相连接。

CNN 采用局部连接和权值共享的方式，对原始数据进行了更高层次的抽象处理，能够有效提取其中隐含的内部特征<sup>[69]</sup>。CNN 的结构如图 4-4 所示。

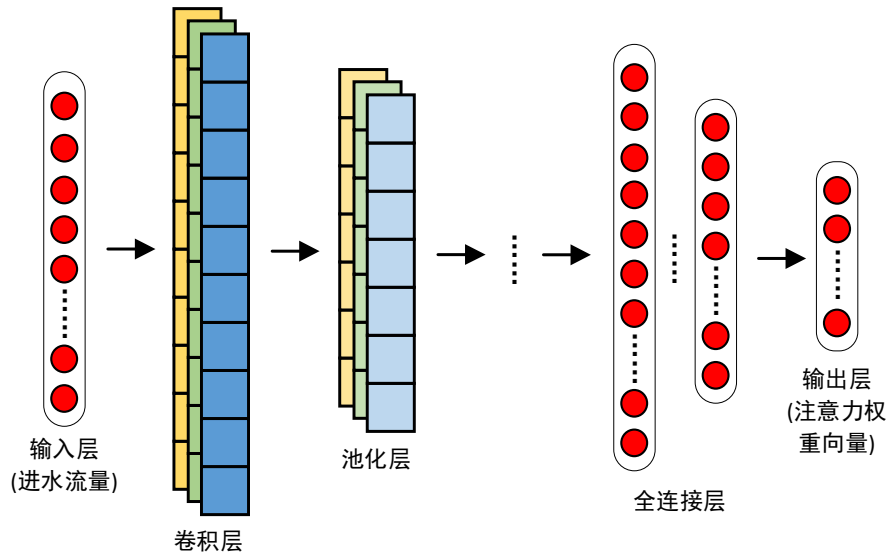


图 4-4 CNN 的结构

Figure 4-4. Structure of CNN

具体地, CNN 内部通常由卷积层、池化层(降采样层)和全连接层组成。卷积层和池化层被交替使用以实现输入特征的层层提取,全连接层则用于对提取后的特征表示进行更深入的处理,同时将其映射到输出目标即注意力权重向量所在的特征空间中。

卷积层可以看作是一个模糊滤波器,可以增强原始数据的特征并减少噪声。在卷积层中,前一层输出的特征图会与当前层的卷积核进行卷积运算,并通过非线性激活函数形成当前层输出的特征图<sup>[70]</sup>。卷积层的可以用数学公式表述为:

$$x_j^l = f\left(\sum_{i \in M_j} x_i^{l-1} \otimes k_{ij}^l + b_j^l\right) \quad (4-6)$$

其中,  $\otimes$  表示卷积运算,  $M_j$  表示输入特征图的集合,  $x_i^{l-1}$  和  $x_j^l$  分别表示卷积过程中网络第  $l$  层输入的第  $i$  个特征图和第  $l$  层输出的第  $j$  个特征图,  $k_{ij}^l$  为对应卷积核的权值矩阵,  $b_j^l$  为偏置项,  $f(\cdot)$  是一个非线性激活函数。

池化层通过降采样来减小特征维度,去除冗余信息,对特征进行进一步压缩,简化网络复杂度。池化层一般只进行降维操作,没有参数,不需要进行权值更新。如果输入的特征图数量为  $N$ , 则经过池化层后会输出  $N$  个维度降低的特征图<sup>[71]</sup>。池化层可以用数学公式表示为:

$$x_j^l = f(\beta_j^l \text{down}(x_j^{l-1}) + b_j^l) \quad (4-7)$$

其中,  $\text{down}(\cdot)$  表示降采样函数,  $x_j^{l-1}$  和  $x_j^l$  分别表示池化过程中网络第  $l$  层的输入特征图和输出特征图,  $\beta_j^l$  表示加权系数,  $b_j^l$  为偏置项,  $f(\cdot)$  是一个非线性激活函数, 为可选项。常用的池化方法有最大值池化(Max Pooling)、均值池化(Mean Pooling)等。对于卷积层输出的特征图,指定每个不重叠的大小固定的区域进行池化操作(考虑到池化操作导致的信息损失,池化区域的大小不宜取值过大)。最大值池化将保留每个区域上的最大值,而均值池化将计算每个区域上的平均值,实现对特征图的缩放映射。

对降采样之后得到的所有特征图展开为一维特征向量,将其作为全连接层的输入。全连接层可用下式表示:

$$x^l = f(W^l x^{l-1} + b^l) \quad (4-8)$$

其中  $x^l$  表示当前全连接层中第  $l$  层的输出,  $x^{l-1}$  表示该层输入的一维特征向量,  $W^l$  和  $b^l$  分别表示权重矩阵和偏置项,  $f(\cdot)$  是一个非线性激活函数,本研究选择 ReLU 作为以上除池化层外各隐藏层中的非线性激活函数。

注意力模块所设计的目的是得到注意力权重向量,因此 CNN 需要输出一个实数向量,其节点数与时序特征模块中输入序列的时间步的个数保持一致,每个

节点的输出值表示对应时间步对于出水水质目标变量的权重。因此本文将 Softmax 函数设置为 CNN 输出层的非线性激活函数：

$$\text{Softmax}(x_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_{d=1}^{D_o} e^{x_d}} \quad (4-9)$$

其中,  $x_i$  为第  $i$  个节点的输出值,  $D_o$  为输出节点的个数。Softmax 函数的作用是将注意力模块的输出值转换为范围在 (0,1), 总和为 1 的概率分布, 达到输出注意力权重的目的。

### 4.3 基于 LSTM-AM 的出水水质预测模型的建立

#### 4.3.1 数据集中变量的定义

在建立完整的 LSTM-AM 混合模型前, 首先定义数据集中的变量。对于在真实运行环境下采集、清洗并完成特征筛选、样本构建及特征分组后的数据集, 本文通过下述方式对其内部的变量进行定义: 定义进水流量数据  $Q_i = \{q^{(n)} | n = 1, 2, \dots, N\}$  (其中  $q^{(n)} = \{q_t^{(n)} | t = 1, 2, \dots, T_1\}$  为第  $n$  个样本的进水流量向量,  $N$  为样本总数,  $T_1$  为单个样本设定的时间跨度内采样进水流量值的次数); 定义除进水流量数据外的其它历史特征数据  $X = \{X^{(n)} | n = 1, 2, \dots, N\}$  (其中  $X^{(n)} = \{X^{k(n)} | k = 1, 2, \dots, K\}$  为第  $n$  个样本的历史特征数据,  $X^{k(n)} = \{x_t^{k(n)} | t = 1, 2, \dots, T_2\}$  为第  $n$  个样本第  $k$  组特征构成的矩阵,  $K$  为特征分组总数,  $T_2$  为单个样本设定的时间跨度内采样历史特征的次数); 定义待预测时刻的出水水质数据  $Y = \{y^{(n)} | n = 1, 2, \dots, N\}$  (其中  $y^{(n)}$  为第  $n$  个样本的出水水质向量)。

#### 4.3.2 LSTM-AM 混合模型的计算

本节将整合三个模块(包括由 LSTM 网络组成的时序特征模块, 由 CNN 组成的用于获取时滞信息的注意力模块, 以及由全连接神经网络组成的回归决策模块), 以构建完整的 LSTM-AM 混合模型, 其结构如图 4-5 所示。该模型的计算过程如下:

首先, 对  $K$  个不同工艺段下的特征组分别搭建时序特征模块用于实现对每组历史特征的提取, 该模块由 LSTM 网络组成, 每个 LSTM 网络都由若干 LSTM 单元连接而成。对于样本  $n$  中的第  $k$  组历史特征  $X^{k(n)}$ , 其中包含了  $T_2$  个时间步的数据, 本研究在每个 LSTM 网络层中设计  $T_2$  个 LSTM 单元来提取  $X^{k(n)}$  中每个时间步上的重要信息, 输出的隐藏状态序列  $h^k$  中包含  $T_2$  个隐藏状态:

$$h^k = [h_1^k, h_2^k, \dots, h_{t-1}^k, h_t^k, h_{t+1}^k, \dots, h_{T_2-1}^k, h_{T_2}^k] \quad (4-10)$$

其中,  $h_t^k$  表示 LSTM 网络在时间步  $t$  上输出的隐藏状态。

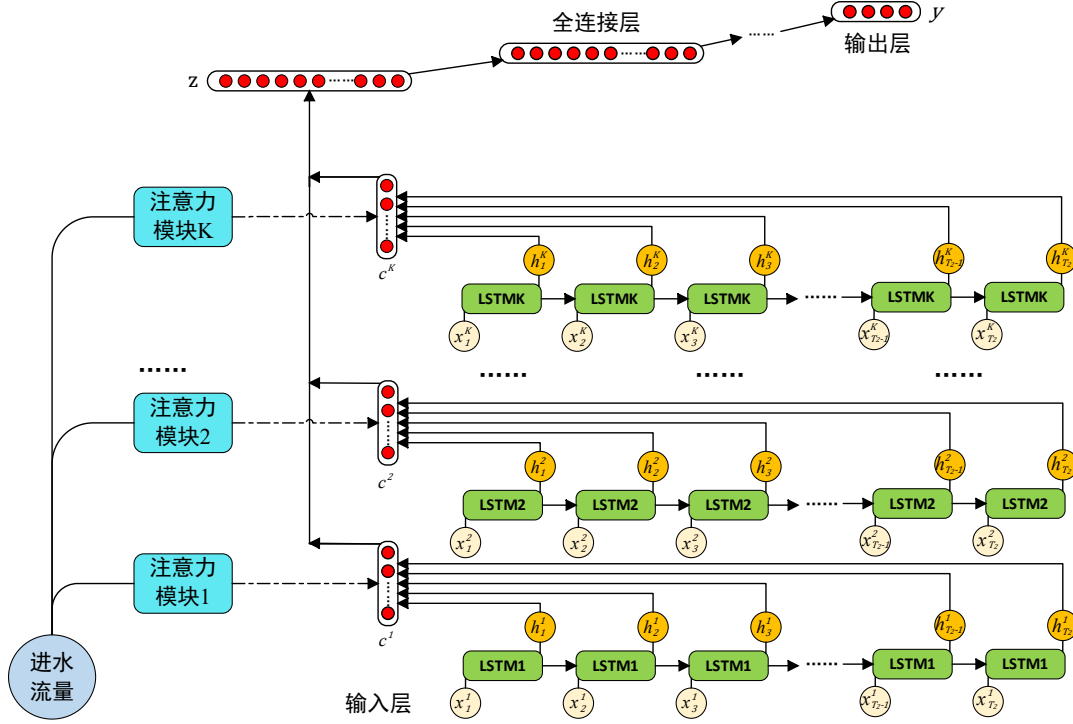


图 4-5 LSTM-AM 混合模型的结构

Figure 4-5. Structure of LSTM-AM hybrid model

然后，对 $K$ 个不同工艺段下的特征组分别搭建注意力模块用于实现时滞信息获取，该模块由 CNN 组成。对于样本 $n$ 中的第 $k$ 组历史特征 $X^{k(n)}$ ，CNN 的输入为相同时间尺度上长度为 $T_1$ 的一维进水流量数据 $q^{(n)}$ ，经过卷积层、池化层和全连接网络层的计算后输出注意力权重向量 $a^k$ 。注意力权重向量 $a^k$ 的维度和时序特征模块中 LSTM 网络输出的隐藏状态的维度一致：

$$a^k = [a^k_1, a^k_2, \dots, a^k_{t-1}, a^k_t, a^k_{t+1}, \dots, a^k_{T_2-1}, a^k_{T_2}] \quad (4-11)$$

其中， $a^k_t$ 表示 LSTM 网络在时间步 $t$ 上输出的隐藏状态 $h^k_t$ 所对应的注意力权重。

在得到注意力模块输出的注意力权重向量 $a^k$ 和时序特征模块输出的隐藏状态向量 $h^k$ 后，对各个特征分组计算上下文向量 $c^k$ 。每个上下文向量都是某个时间尺度下的单组历史特征中可用于出水水质预测的关键信息的抽象表示。对于样本 $n$ 中的第 $k$ 组历史特征 $X^{k(n)}$ ，其上下文向量 $c^k$ 的计算公式如下：

$$c^k = (a^k)^T(h^k) = a^k_1 h^k_1 + a^k_2 h^k_2 + \dots + a^k_{T_2} h^k_{T_2} \quad (4-12)$$

最后，搭建回归决策模块。回归决策模块中仅包含全连接层，本研究将该模块中各隐藏层的非线性激活函数设置为 ReLU。为达到输出实数的目的，输出层设置为纯线性层，不使用激活函数。回归决策模块的输入 $z$ 称为全局上下文向量，它由每个特征分组所对应的上下文向量拼接而成：

$$z = [c^1, c^2, \dots, c^{k-1}, c^k, c^{k+1}, \dots, c^{K-1}, c^K] \quad (4-13)$$

回归决策模块的作用是对各个时序特征模块所提取到的特征表示作进一步的运算,将其映射到预测目标即未来出水水质所在的特征空间中。该模块的输出即为出水水质目标变量的预测值。

#### 4.4 实验分析

本次实验所使用的真实运行监测数据集来自于黑龙江某污水处理厂,该厂占地面积 20 余公顷,采用 A<sup>2</sup>O 污水处理工艺,处理规模高达 10 万立方米/日。该厂累计稳定运行时间已超过 10 年,各项出水指标均达到国家标准。本次实验所采集数据的时间范围为 2019 年 10 月至 2021 年 8 月。对于所采集的数据中包含的少量缺失值和异常值,使用前后两个时刻的均值进行填补与修正。为加速网络训练时的收敛,对各个数据特征进行归一化处理,缩放到[0,1]范围内。

根据前文仿真数据集实验中特征选择的结果,对所采集的真实数据进行特征的筛选。筛选后保留的特征与上一章实验中使用 RFE 方法得到的特征子集一致,出水水质特征包括:出水 COD、出水 TN、出水氨氮;其它工艺段特征包括:进水 COD、进水氨氮、进水 TN、进水流量、温度、甲醇纯度、好氧池 pH、好氧池 SV、好氧池 MLSS、好氧池 DO。除进水流量数据的采样间隔为 1 分钟以外,其余数据的采样间隔均为 2 小时,共计 8149 条。

在特征筛选完成后,进行数据集的构建。根据所要预测的时间点和所要利用的历史数据的时间尺度来建立样本,按照第二章给出的步骤建立样本输入输出变量之间的对应关系。

根据池体有效容积和单位时间处理水量之比,可以估算污水在处理系统中的滞后时间。通过该污水处理厂提供的数据计算得到,其进水高峰期和低谷期的滞后时间分别为 6 小时和 36 小时,即当前时刻的出水水质会与过去 6 至 36 小时(共计 30 小时)的进水水质特征具备相关性。因此,本次实验设置时间窗口中的参数 $k$ 为 30,参数 $u$ 为 6,即使用过去 30 小时的历史数据预测未来 6 小时时刻的出水水质。将已经完成样本构建的真实数据集按 7:3 的比例在时间轴上划分成训练集和测试集,并确保二者中的样本不存在时间上的重叠。在训练时,训练集中 30%的样本将作为验证集,验证集用于泛化性能的初步判断,其性能表现将作为模型超参数调整和确定的依据。

接着对训练集和测试集中的特征进行分组,分组后的特征组别与污水处理流程中的工艺段一一对应。分组的原因在于,不同工艺段中的污水流至出水端的时间不一致,因此位于不同组别的特征与出水水质之间具有不同的时间依赖性。特征分组的结果如表 4-2 所示。

表4-2 特征分组结果

Table 4-2. Result of feature grouping

组别	特征
特征组1(进水段)	进水COD、进水氨氮、进水TN、温度*
特征组2(缺氧段)	甲醇纯度
特征组3(好氧段)	好氧池pH、好氧池SV、好氧池MLSS、好氧池DO
特征组4(出水段)	出水COD、出水TN、出水氨氮

表 4-2 中温度\*为全局状态变量,由于该变量与进水水温之间存在强相关性,本研究将其视作进水水温的代替,归于进水段特征组。

除了以上 4 组特征以外,进水流量特征被单独列为一组,作为输入给注意力模块的外部知识。

所搭建的网络中各模块的详细结构如表 4-3、4-4、4-5 所示。

表4-3 注意力模块超参数设置

Table 4-3. Hyper-parameters of attention module

超参数	描述	设置值
输入节点数	与外部知识(进水流量)维度相匹配	1801
输出节点数	即注意力权重向量的维度	16
各层节点数和类型	除输入层外各层的输出维度和类型	[ $897 \times 16$ (Conv1D*), $299 \times 16$ (MaxPooling1D*), 512(Fully Connected), 16(Fully Connected)]
激活函数	隐藏层神经元的激活函数	[ReLU, 无, ReLU, Softmax]

表 4-3 中, Conv1D\*为一维卷积层,其卷积核个数为 16,卷积核长度为 9,步幅为 2,即每次卷积后在输入特征向量上移动 2 个单位;MaxPooling1D\*为一维池化层,使用最大池化方法,池化区域长度为 3。

表4-4 时序特征模块超参数设置

Table 4-4. Hyper-parameters of time series feature module

超参数	描述	设置值
输入节点数	与输入变量(对应特征组的历史数据)维度相匹配	$16 \times n_k^*$
输出节点数	即输出的隐藏状态序列的维度	$16 \times 128 n_k^*$
各层节点数和类型	除输入层外各层的输出维度和类型	$[16 \times 128 n_k^* (\text{LSTM})]$
激活函数	隐藏层神经元的激活函数	$[\text{Tanh}]$

表 4-4 中,  $n_k^*$  为输入的特征组  $k$  中包含的特征数目。

将每个注意力模块输出的注意力权重向量与对应时序特征模块输出的隐藏状态序列加权求和, 得到各特征组的上下文向量。4 个特征组所属的上下文向量拼接后得到全局上下文向量, 将其作为回归决策模块的输入。全局上下文向量的维度  $d^*$  可通过下式计算:

$$d^* = 128 \sum_{k=1}^4 n_k^* \quad (4-14)$$

表4-5 回归决策模块超参数设置

Table 4-5. Hyper-parameters of regression decision module

超参数	描述	设置值
输入节点数	即输入的全局上下文向量的维度	1536
输出节点数	与输出变量(出水水质)维度相匹配	3
各层节点数和类型	除输入层外各层的输出维度和类型	$[2048(\text{Fully Connected}), 512(\text{Fully Connected}), 64(\text{Fully Connected}), 3(\text{Fully Connected})]$
激活函数	隐藏层神经元的激活函数	$[\text{ReLU}, \text{ReLU}, \text{ReLU}, \text{无}]$

由以上三个模块所组成的网络模型中, 各隐藏层神经元数量的确定方式与上一章相同, 在训练时设置的其它超参数如表 4-6 所示:



表4-6 模型训练时的其它超参数设置

Table 4-6. Other hyper-parameters during model training

超参数	描述	设置值
梯度下降优化算法	最小化损失函数的模型优化方法	MBGD
学习率设定	每次执行梯度下降的步长	0.01
迭代Epoch数	训练时最多执行的Epoch数	3000
提前停止	允许验证集误差未下降的最大迭代次数	300
批大小	单次训练参与的数据样本数	64
正则化方法	Dropout随机失活	0.2

表4-7 经典LSTM方法超参数设置

Table 4-7. Hyper-parameters of classic LSTM method

超参数	描述	设置值
输入节点数	与输入变量(特征选择后的历史数据)维度相匹配	16×13
输出节点数	与输出变量(出水水质)维度相匹配	3
各层节点数和类型	除输入层外各层的输出维度和类型	[16×256(LSTM), 2048(Fully Connected), 512(Fully Connected), 64(Fully Connected), 3(Fully Connected)]
激活函数	隐藏层神经元的激活函数	[Tanh, ReLU, ReLU, ReLU, 无]
梯度下降优化算法	最小化损失函数的模型优化方法	MBGD
学习率设定	每次执行梯度下降的步长	0.01
迭代Epoch数	训练时最多执行的Epoch数	3000
提前停止	允许验证集误差未下降的最大迭代Epoch数	300
批大小	单次训练参与的数据样本数	64
正则化方法	Dropout随机失活	0.2

为了验证 LSTM-AM 方法的有效性和优越性, 引入经典 LSTM 方法和双向长短期记忆(Bidirectional Long Short-Term Memory, Bi-LSTM)方法<sup>[72]</sup>作为对比实验。Bi-LSTM 是 LSTM 的一种变体, 它对 LSTM 做了增强, 可以同时从前向和后向处理输入序列以更好地捕捉输入序列中的上下文信息<sup>[73]</sup>。经典 LSTM 方法

和 Bi-LSTM 方法均使用特征分组前的训练集与测试集，将 2 小时采样间隔的进水流量数据与其它历史特征合并，共同作为网络模型的输入。

所设计的经典 LSTM 网络模型和 Bi-LSTM 网络模型的结构和超参数如表 4-7 和表 4-8 所示，各隐藏层神经元数量的确定方式与上一章相同。

表4-8 Bi-LSTM方法超参数设置

Table 4-8. Hyper-parameters of Bi-LSTM method

超参数	描述	设置值
输入节点数	与输入变量(特征选择后的历史数据)维度相匹配	16×13
输出节点数	与输出变量(出水水质)维度相匹配	3
各层节点数和类型	除输入层外各层的输出维度和类型	[16×256(Bi-LSTM), 2048(Fully Connected), 512(Fully Connected), 64(Fully Connected), 3(Fully Connected)]
激活函数	隐藏层神经元的激活函数	[Tanh, ReLU, ReLU, ReLU, 无]
梯度下降优化算法	最小化损失函数的模型优化方法	MBGD
学习率设定	每次执行梯度下降的步长	0.01
迭代Epoch数	训练时最多执行的Epoch数	3000
提前停止	允许验证集误差未下降的最大迭代Epoch数	300
批大小	单次训练参与的数据样本数	64
正则化方法	Dropout随机失活	0.2

本研究将模型训练时的损失函数设定为 MSE。调用训练好的网络模型来进行出水水质的预测，并通过测试集验证模型的泛化性能。

实验结果如表 4-9 所示，将 MSE 和  $R^2$  决定系数作为模型性能的评价指标。图 4-6、图 4-7 和图 4-8 给出了三种方法的模型在训练时的损失函数曲线，图 4-9 和图 4-10 给出了三种方法的模型输出的出水水质预测值与真实值的比较。考虑到该厂数据保密性的要求，本文仅展示出水氨氮这一变量作为预测目标的实验结果，并隐藏图 4-8 中纵轴的刻度和图 4-9 中纵轴和横轴的刻度。可以看出，在出水氨氮的预测上，相较于其它两种方法而言，LSTM-AM 方法得到的预测值与真实值更为接近，预测精度提升明显，泛化效果较好。因此，本文所设计的 LSTM-AM 混合模型可以作为一种对实际污水处理厂的出水水质进行有效预测的方法。

表4-9 三种方法在测试集中的性能指标

Table 4-9. Test set performance metrics of three methods

指标	LSTM-AM方法	经典LSTM方法	Bi-LSTM方法
$R^2$	0.8009	0.6985	0.7078
$MSE$	0.1885	0.2875	0.2786

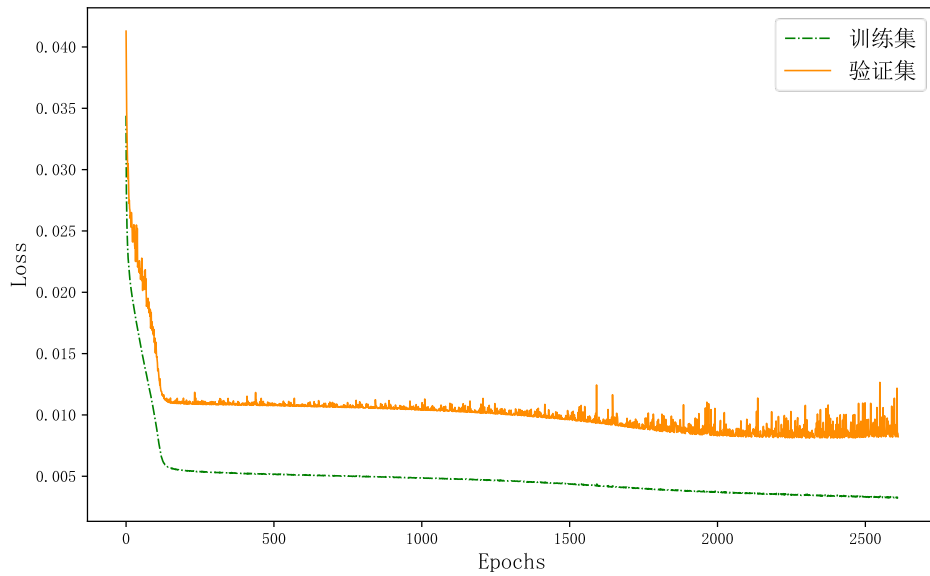


图 4-6 LSTM-AM 方法在训练时的损失曲线

Figure 4-6. Loss curve of LSTM-AM method during training

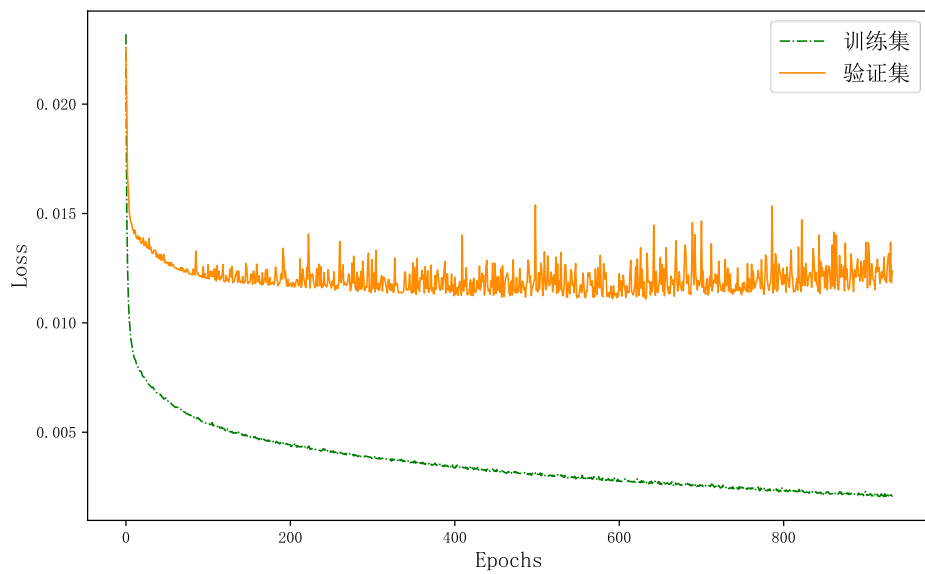


图 4-7 经典 LSTM 方法在训练时的损失曲线

Figure 4-7. Loss curve of the classic LSTM method during training

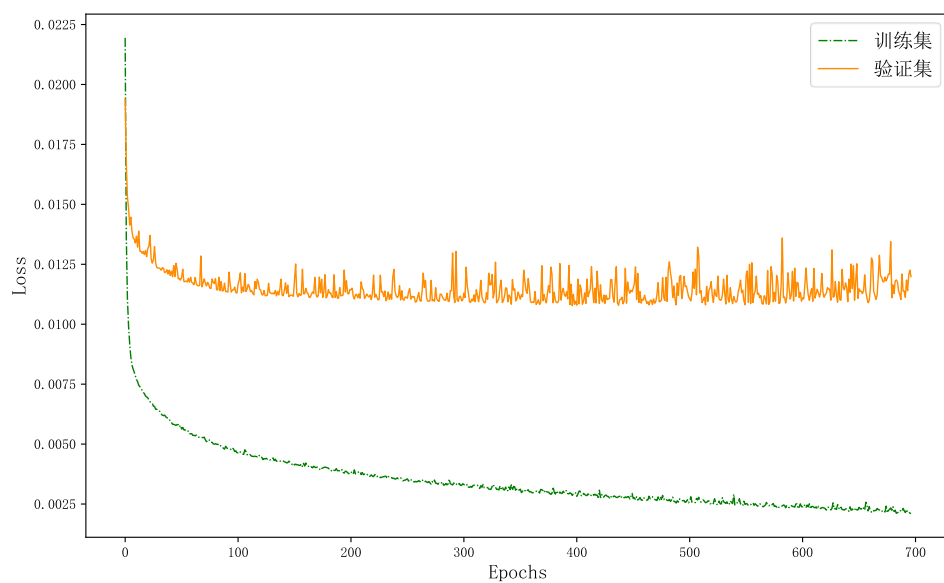


图 4-8 Bi-LSTM 方法在训练时的损失曲线

Figure 4-8. Loss curve of the Bi-LSTM method during training

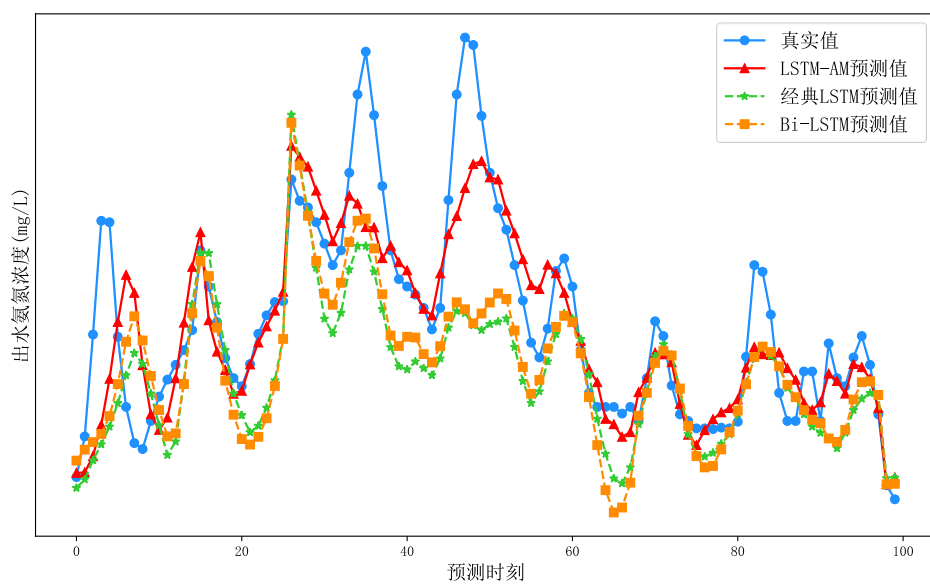


图 4-9 出水氨氮预测值与真实值的比较折线图

Figure 4-9. Compare line plot of predicted and true values of effluent ammonia nitrogen

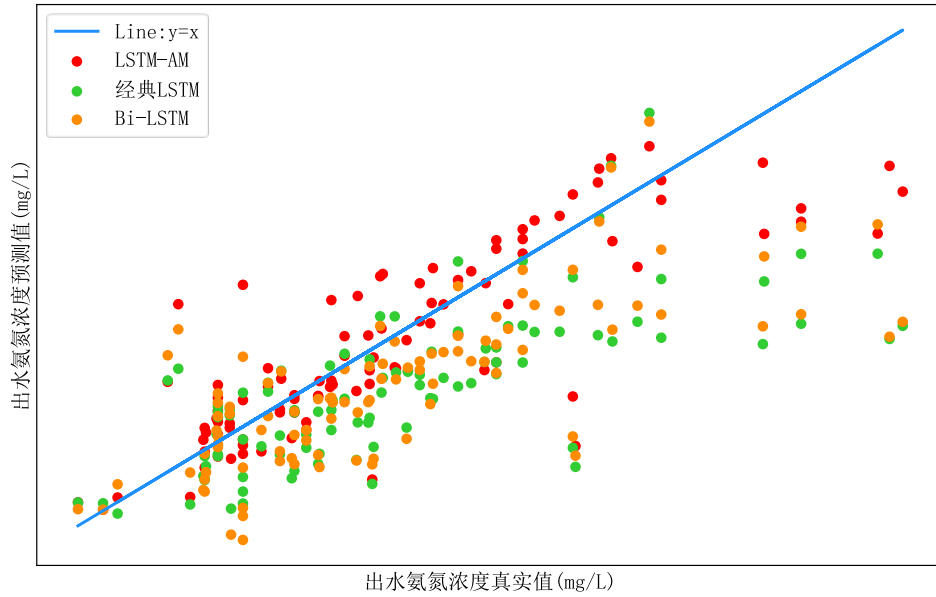


图 4-10 出水氨氮预测值与真实值的比较散点图

Figure 4-10. Compare scatter plot of predicted and true values of effluent ammonia nitrogen

## 4.5 小结

针对真实污水处理厂出水水质预测时难以避免的系统高度非线性、长时滞性和滞后时间不定性问题，设计了一种基于 LSTM 网络和 AM 的出水水质预测方法。具体而言，通过 LSTM 网络实现时序输入数据的特征提取，通过基于 CNN 的 AM 来提取进水流量中隐含的滞后时间信息并获取历史数据在时间上对于出水水质预测的权重分布。所提出的 LSTM-AM 混合模型能够依据进水流量自动判断时滞性的影响，并将不同时段的历史特征有效用于预测。

基于真实监测数据集，利用本章提出的 LSTM-AM 方法预测未来 6 小时时刻的出水氨氮，并进行了对比实验。与经典 LSTM 方法和 Bi-LSTM 方法相比，LSTM-AM 方法得到的出水氨氮预测值与真实值更为接近，测试集  $R^2$  达到了 0.8009，泛化性能提升明显，验证了该方法的有效性和优越性，表明该方法应用于实际污水处理过程的可行性。

## 第五章 总结与展望

### 5.1 研究结论

近年来,随着我国对环境治理工作的日益重视,对污水处理厂出水水质的要求也日趋严格。系统建模可以为污水处理厂的设计、控制和优化提供支持,已逐渐成为一项不可或缺的基础性工作。在污水处理过程的建模中,机理模型由于涉及参数众多、反应方程表达的局限性等因素,难以用于工程实际中。随着传感器测量精度的提高,污水处理厂运行监测数据的可靠性得以提升,数据驱动模型的优势变得愈发明显。

本文聚焦于污水处理厂数据驱动建模算法的研究,提出了一种基于 LSTM 网络与 AM 混合学习模型的出水水质预测方法。本文的主要工作如下:

(1) 通过污水处理厂模拟软件 GPS-X 和 BSM2 基准仿真平台提供的动态进水数据,构建了由 A<sup>2</sup>O 工艺处理过程中涉及的各种关键水质参数和状态变量所组成的仿真监测数据集,为后续的仿真实验提供数据支撑,也为污水处理领域中数据驱动模型的研究人员提供便利。

(2) 针对监测数据中不相关和冗余的特征对模型精度和计算效率造成负面影响的问题,引入 RFE 方法以迭代方式筛选出对出水水质预测重要性程度较高的特征集合。对于污水处理时序数据中存在的时间依赖关系,利用 LSTM 架构实现信息的选择性记忆,克服了经典 RNN 的梯度消失和爆炸问题,有效捕捉了时间序列中的长期依赖关系。对于所建立的 RFE-LSTM 模型,利用仿真监测数据集进行对比实验,验证了所提方法的有效性。

(3) 针对工程实践中大型污水处理系统的长时滞性和进水流量不规则变化导致的滞后时间不定性问题,设计基于 CNN 的注意力模块,以进水流量作为外部知识,通过 AM 获得进水流量数据中隐含的滞后时间信息,从而分配历史数据在不同时刻的权重。在此基础上,联合 LSTM 网络的时序特征模块对每个时刻的输入数据进行特征提取,实现对历史数据关键信息的挖掘,从而给出用于出水水质预测的混合模型方法。对于所建立的 LSTM-AM 混合模型,利用真实污水处理厂监测数据集进行对比实验,验证了 LSTM-AM 方法应用于实际污水处理过程的可行性。

## 5.2 研究展望

本文主要是基于 LSTM 网络和 AM 来对污水处理过程建模方法以及出水水质预测方法进行研究,并通过仿真和真实数据集验证所提方法的有效性。虽然取得一定研究成果,但仍然存在不足,若进行深入研究,可基于以下几点开展:

(1) 将输入特征按工艺段进行分组时,对不同特征组使用不同的 LSTM 网络层会使模型结构的参数和复杂度增加,如何使用并行化方法避免在网络中产生冗余的结构是在网络设计时尚待解决的难点;

(2) 在注意力模块中,需要有效地提取进水流量这一决定污水处理滞后时间的关键特征。然而,进水流量数据维度大,特征提取较为困难。目前针对这一特征设计的注意力模块中使用常规的 CNN 结构,还有较大改进空间。如何设计更加有效的结构来提取进水流量特征中隐含的滞后时间信息以及如何使不同时刻上分配的注意力权重更加合理是后续研究值得关注的问题;

(3) 采用 LSTM 网络建立的出水水质预测模型仍属于“黑箱”操作,如何通过改进使其可以反映水质内在机理变化,以进一步提高预测精度还有待探索。

## 参考文献

- [1] 张建丰. 活性污泥法工艺控制[M]. 中国电力出版社, 2011.
- [2] Guerrero J, Guisasola A, Comas J, et al. Multi-criteria selection of optimum WWTP control setpoints based on microbiology-related failures, effluent quality and operating costs[J]. Chemical Engineering Journal, 2012, 188(8): 23-29.
- [3] 朱奥. 污水生物脱氮过程数学模拟与应用[D]. 北京工业大学, 2013.
- [4] 徐李真. 基于 ASM2D 模型的废水同步脱氮除磷过程的动力学模拟研究[D]. 华南理工大学, 2020.
- [5] 蒋源. 活性污泥数学模型(ASM3)及其计算机模拟研究[D]. 北京工业大学, 2009.
- [6] 章康树. 基于神经网络的污水处理自适应控制方法初探[D]. 浙江大学, 2019.
- [7] Henze M, Gujer W, Mino T, et al. Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3[M]. IWA Publishing, 2000.
- [8] 杨婷. 污水处理过程的模糊建模与控制[D]. 哈尔滨工业大学, 2011.
- [9] 王鹏. 城市污水活性污泥处理系统模拟-ASM2D[D]. 重庆大学, 2007.
- [10] Veldhuizen H, Loosdrecht M, Heijnen J J. Modelling biological phosphorus and nitrogen removal in a full scale activated sludge process[J]. Water Research, 1999, 33(16): 3459-3468.
- [11] Meijer S C F, Van Loosdrecht M C M, Heijnen J J. Metabolic modelling of full-scale biological nitrogen and phosphorus removing WWTP's[J]. Water Research, 2001, 35(11): 2711-2723.
- [12] Hao X, Van Loosdrecht M C M, Meijer S C F, et al. Model-based evaluation of two BNR processes—UCT and A2N[J]. Water Research, 2001, 35(12): 2851-2860.
- [13] Kim H, Hao O J, McAvoy T J. SBR system for phosphorus removal: ASM2 and simplified linear model[J]. Journal of Environmental Engineering, 2001, 127(2): 98-104.
- [14] Kim H, Hao O J, McAvoy T J. SBR system for phosphorus removal: linear model based optimization[J]. Journal of Environmental Engineering, 2001, 127(2): 105-111.
- [15] Birs I R, Nascu I, Darab C, et al. Modelling and calibration of a conventional activated sludge wastewater treatment plant[C]. //2016 IEEE International Conference on Automation. IEEE, 2016: 1-6.
- [16] Newhart K B, Holloway R W, Hering A S, et al. Data-driven performance analyses of wastewater treatment plants: A review[J]. Water Research, 2019, 157: 498-513.
- [17] Huang Z, Luo J, Li X, et al. Prediction of effluent parameters of wastewater treatment plant based on improved least square support vector machine with PSO[C]. //2009 First International Conference on Information Science and Engineering. IEEE, 2009: 4058-4061.



- [18] Guo H, Jeong K, Lim J, et al. Prediction of effluent concentration in a wastewater treatment plant using machine learning models[J]. *Journal of Environmental Sciences*, 2015, 32: 90-101.
- [19] Kim M, Kim Y, Kim H, et al. Evaluation of the k-nearest neighbor method for forecasting the influent characteristics of wastewater treatment plant[J]. *Frontiers of Environmental Science & Engineering*, 2016, 10(2): 299-310.
- [20] Corominas L, Garrido-Baserba M, Villez K, et al. Transforming data into knowledge for improved wastewater treatment operation: A critical review of techniques[J]. *Environmental Modelling & Software*, 2018, 106: 89-103.
- [21] Haimi H, Mulas M, Corona F, et al. Data-derived soft-sensors for biological wastewater treatment plants: An overview[J]. *Environmental Modelling & Software*, 2013, 47(3): 88-107.
- [22] Santin I, Pedret C, Meneses M, et al. Artificial neural network for nitrogen and ammonia effluent limit violations risk detection in wastewater treatment plants[C]. //2015 19th International Conference on System Theory, Control and Computing (ICSTCC). IEEE, 2015: 589-594.
- [23] 彭永臻, 王之晖, 王淑莹. 基于 BP 神经网络的 A/O 脱氮系统外加碳源的仿真研究[J]. *化工学报*, 2005, 56(2): 5.
- [24] Qiao J, Zhou H. Modeling of energy consumption and effluent quality using density peaks-based adaptive fuzzy neural network[J]. *IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica*, 2018, 5(5): 968-976.
- [25] Han H, Qiao J. Nonlinear model-predictive control for industrial processes: An application to wastewater treatment process[J]. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2013, 61(4): 1970-1982.
- [26] Lin M, Zhang C, Su C. Prediction of effluent from WWTPS using differential evolutionary extreme learning machines[C]. //2016 35th Chinese Control Conference (CCC). IEEE, 2016: 2034-2038.
- [27] Foscoliano C, Del Vigo S, Mulas M, et al. Predictive control of an activated sludge process for long term operation[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2016, 304: 1031-1044.
- [28] Cheng T, Harrou F, Kadri F, et al. Forecasting of wastewater treatment plant key features using deep learning-based models: A case study[J]. *IEEE Access*, 2020, 8: 184475-184485.
- [29] 刘大伟, 沈文浩. 废水处理仿真基准模型 BSM1 简介[J]. *广州环境科学*, 2007, 22(1): 5.
- [30] Jeppsson U, Pons MN, Nopens I, et al. Benchmark simulation model no 2: general protocol and exploratory case studies[J]. *Water Science and Technology*, 2007, 56(8): 67-78.
- [31] 袁睿泽. BSM1 基准仿真数学模型在污水监测中的可行性分析[J]. *能源与环保*, 2021, 43(06): 56-61.

- [32] Vrecko D, Gernaey K V, Rosén C, et al. Benchmark simulation model No 2 in Matlab-Simulink: towards plant-wide WWTP control strategy evaluation[J]. Water Science and Technology, 2006, 54(8): 65-72.
- [33] Nopens I, Benedetti L, Jeppsson U, et al. Benchmark Simulation Model No 2: Finalisation of plant layout and default control strategy[J]. Water Science and Technology, 2010, 62(9): 1967-1974.
- [34] Gernaey K V, Rosén C, Jeppsson U. WWTP dynamic disturbance modelling—an essential module for long-term benchmarking development[J]. Water Science and Technology, 2006, 53(4-5): 225-234.
- [35] Dai H, Sun Y, Wan D, et al. Simultaneous denitrification and phosphorus removal: A review on the functional strains and activated sludge processes[J]. Science of the Total Environment, 2022, 835: 155409.
- [36] 王辰辰. A~2/O 工艺处理城镇污水的脱氮除磷性能研究[D]. 河北工程大学, 2020.
- [37] 吴昌永. A~2/O 工艺脱氮除磷及其优化控制的研究[D]. 哈尔滨工业大学, 2010.
- [38] 刘荣荣, 居之安. 城市污水处理厂 A~2/O 工艺调试运行实例分析[J]. 广东化工, 2023, 50(02): 103-106.
- [39] 吴昌永, 彭永臻, 彭轶. A2O 工艺处理低 C/N 比生活污水的试验研究[J]. 化工学报, 2008, 59(12): 6.
- [40] 何胜杰. 基于 GPS-X 评估 A~2O 工艺对低 B/C 污水的承载能力与接收啤酒废水作为碳源的影响[D]. 青岛理工大学, 2022.
- [41] 赖后伟. 阿莫西林对 AAO 城市污水处理工艺运行的影响及其生物降解行为研究[D]. 哈尔滨工业大学, 2013.
- [42] 丁晓倩, 赵剑强. GPS-X 模拟的三种 A~2/O 工艺脱氮除磷效果比较[J]. 中国给水排水, 2016, 32(19): 26-30.
- [43] Pereira S F. Modelling of a wastewater treatment plant using GPS-X[D]. Faculdade de Ciências e Tecnologia, 2014.
- [44] Liwarska-Bizukojc E, Biernacki R. Identification of the most sensitive parameters in the activated sludge model implemented in BioWin software[J]. Bioresource Technology, 2010, 101(19): 7278-7285.
- [45] Venkatesh B, Anuradha J. A review of feature selection and its methods[J]. Cybernetics and Information Technologies, 2019, 19(1): 3-26.
- [46] Mafarja M, Mirjalili S. Whale optimization approaches for wrapper feature selection[J]. Applied Soft Computing, 2018, 62: 441-453.

- [47] Rodriguez-Galiano V F, Luque-Espinar J A, Chica-Olmo M, et al. Feature selection approaches for predictive modelling of groundwater nitrate pollution: An evaluation of filters, embedded and wrapper methods[J]. Science of the Total Environment, 2018, 624: 661-672.
- [48] Li W, Chen L, Zhao J, et al. Embedded feature selection based on relevance vector machines with an approximated marginal likelihood and its industrial application[J]. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics: Systems, 2021, 52(4): 2601-2614.
- [49] Chandrashekar G, Sahin F. A survey on feature selection methods[J]. Computers & Electrical Engineering, 2014, 40(1): 16-28.
- [50] Bron E E, Smits M, Niessen W J, et al. Feature selection based on the SVM weight vector for classification of dementia[J]. IEEE Journal of Biomedical and Health Informatics, 2015, 19(5): 1617-1626.
- [51] Darst B F, Malecki K C, Engelman C D. Using recursive feature elimination in random forest to account for correlated variables in high dimensional data[J]. BMC Genetics, 2018, 19(1): 1-6.
- [52] Zhou X, Wen H, Zhang Y, et al. Landslide susceptibility mapping using hybrid random forest with GeoDetector and RFE for factor optimization[J]. Geoscience Frontiers, 2021, 12(5): 101211.
- [53] Haq A U, Zeb A, Lei Z, et al. Forecasting daily stock trend using multi-filter feature selection and deep learning[J]. Expert Systems with Applications, 2021, 168: 114444.
- [54] Yuan X, Li L, Wang Y. Nonlinear dynamic soft sensor modeling with supervised long short-term memory network[J]. IEEE Transactions on Industrial Informatics, 2019, 16(5): 3168-3176.
- [55] 杨丽, 吴雨茜, 王俊丽, 等. 循环神经网络研究综述[J]. 计算机应用, 2018, 38(A02): 1-6.
- [56] Yu Y, Si X, Hu C, et al. A review of recurrent neural networks: LSTM cells and network architectures[J]. Neural Computation, 2019, 31(7): 1235-1270.
- [57] Smagulova K, James A P. A survey on LSTM memristive neural network architectures and applications[J]. The European Physical Journal Special Topics, 2019, 228(10): 2313-2324.
- [58] Van Houdt G, Mosquera C, Nápoles G. A review on the long short-term memory model[J]. Artificial Intelligence Review, 2020, 53: 5929-5955.
- [59] Gers F A, Schmidhuber J, Cummins F. Learning to forget: Continual prediction with LSTM[J]. Neural Computation, 2000, 12(10): 2451-2471.
- [60] 陈自强. 基于 LSTM 网络的设备健康状况评估与剩余寿命预测方法的研究[D]. 中国科学技术大学, 2019.
- [61] 刘建伟, 宋志妍. 循环神经网络研究综述[J]. 控制与决策, 2022, 37(11): 16.
- [62] 任欢, 王旭光. 注意力机制综述[J]. 计算机应用, 2021, 41(S1): 1-6.

- [63] Niu Z, Zhong G, Yu H. A review on the attention mechanism of deep learning[J]. *Neurocomputing*, 2021, 452: 48-62.
- [64] Guo M H, Liu Z N, Mu T J, et al. Beyond self-attention: External attention using two linear layers for visual tasks[J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2022, 45(5), 5436-5447.
- [65] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, et al. Attention is all you need[J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2017, 30.
- [66] Floridi L, Chiriatti M. GPT-3: Its nature, scope, limits, and consequences[J]. *Minds and Machines*, 2020, 30: 681-694.
- [67] Xu Y, Zhu C, Wang S, et al. Human parity on commonsenseqa: Augmenting self-attention with external attention[J]. *arXiv preprint*, 2021, arXiv:2112.03254.
- [68] Gallardo-Antolín A, Montero J M. External attention LSTM models for cognitive load classification from speech[C]. //2019 Statistical Language and Speech Processing: 7th International Conference, Springer-Verlag, 2019: 139-150.
- [69] 赵兵, 王增平, 纪维佳, 等. 基于注意力机制的 CNN-GRU 短期电力负荷预测方法[J]. *电网技术*, 2019, 43(12): 7.
- [70] Li D, Zhang J, Zhang Q, et al. Classification of ECG signals based on 1D convolution neural network[C]. //2017 IEEE 19th International Conference on e-Health Networking, Applications and Services. IEEE, 2017: 1-6.
- [71] Qiu G, Gu Y, Cai Q. A deep convolutional neural networks model for intelligent fault diagnosis of a gearbox under different operational conditions[J]. *Measurement*, 2019, 145: 94-107.
- [72] Graves A, Schmidhuber J. Framewise phoneme classification with bidirectional LSTM and other neural network architectures[J]. *Neural Networks*, 2005, 18(5-6): 602-610.
- [73] Imrana Y, Xiang Y, Ali L, et al. A bidirectional LSTM deep learning approach for intrusion detection[J]. *Expert Systems with Applications*, 2021, 185(8): 115524.

## 致 谢

三年前，我怀着对科研的热爱踏入浙江工业大学，成为了一名电子信息专业的研究生；三年后的今天，这段读研经历将在烈日与盛夏中结尾，人生的新篇章也即将开启。时光总是那么短暂，回首这段校园生活，内心感到无比的留恋与不舍，但更多的则是感激。

感谢我的导师陈博教授，他用严谨的学风和热情的关怀为我指明了方向。从论文选题到文章撰写再到后期的修改，都离不开陈老师的悉心指导。科研之余，陈老师在生活上也给予了我很多的关心与帮助。同时，我要感谢沈英老师、孙哲老师和王浙明老师在我论文工作上的言传身教，令我受益匪浅。

感谢 316 和 A307 大家庭里与我一起学习、一起进步的朋友们。感谢我的室友金学成、李琛玮、许建华和严新豪这三年来的陪伴与照顾。感谢数据分析小组的沈怡俊师兄和杨望卓师兄在我实验和项目工作上的指导与协助。感谢我的同门傅金波、高烨、胡明南、胡舒杰、李沛增、刘炯、罗傅宜、毛佳炜、孟过、石水萌、文茜、周娴和周袁等人，大家志趣相投，一同玩耍，留下了很多美好且珍贵的回忆。在实验室的这段时光里，我们一起在科研中探索奥秘，一起分享成果和快乐，一起克服困难和挑战。感谢你们的出现，让我的这段旅程不再枯燥乏味。

最后，特别感谢我的父母，你们用无条件的支持和付出为我创造了良好的学习和生活条件，为我提供了优质的教育资源，让我有机会站在你们的肩膀上去看更为广阔的世界。养育之恩，无以为报，你们的爱我将牢记于心，它将激励着我，让我有勇气去面对未来更多的风雨。

凡是过往，皆为序章。衷心祝愿所有关心、支持和帮助过我的人幸福安康，前程似锦！愿自己能够不忘初心，保持热忱，奔赴下一场山海！

## 作者简介

### 1 作者简历

1999 年 01 月出生于安徽铜陵。

2020 年 10 月——2023 年 06 月，浙江工业大学信息工程学院电子信息专业学习，获得工程硕士学位。

### 2 攻读硕士学位期间发表的学术论文

- [1] **Wang Y**, Shen Y, Liu J, et al. RFE-LSTM-Based Effluent Quality Prediction Method for Wastewater Treatment Plant[C], 2022 IEEE 31st International Symposium on Industrial Electronics (ISIE), 2022, 已录用. (第一作者).

### 3 发明专利

- [1] 陈博, 傅金波, 沈怡俊, **王颖**, 黄大建, 刘涛, 张文安. 一种多数据模型融合的光伏发电功率预测方法和系统. 浙江省, CN113919545A, 2022-01-11. (已公开).
- [2] 陈博, **王颖**, 沈怡俊, 刘炯, 杨望卓. 基于注意力机制和长短期记忆网络的污水处理厂出水水质预测方法. 浙江省, CN115345344A, 2022-11-15. (已公开).

## 学位论文数据集

密 级*	中图分类号*	UDC*	论文资助
公开	TP391	004	
学位授予单位名称*	学位授予单位代码*	学位类型*	学位级别*
浙江工业大学	10337	工程硕士	全日制专业型硕士
论文题名*	基于 LSTM-AM 混合模型的污水处理厂出水水质预测方法		
关键词*	污水处理, 数据驱动, 注意力机制, 长短期记忆网络, 递归特征消除		论文语种*
并列题名	Effluent Quality Prediction Method for Wastewater Treatment Plant Based on LSTM-AM Hybrid Model		中文
作者姓名*	王颖	学 号*	2112003182
培养单位名称*	培养单位代码*	培养单位地址*	邮政编码*
浙江工业大学信息 工程学院	10337	杭州市留和路 288 号	310023
学科专业*	研究方向*	学 制*	学位授予年*
电子信息	工业数据分析	3	2023
论文提交日期*	2023 年 06 月		
导师姓名*	陈博	职 称*	教授
评阅人	答辩委员会主席*	答辩委员会成员	
	倪洪杰	仇翔, 付明磊	
电子版论文提交格式: 文本 ( <input checked="" type="checkbox"/> ) 图像 ( <input type="checkbox"/> ) 视频 ( <input type="checkbox"/> ) 音频 ( <input type="checkbox"/> ) 多媒体 ( <input type="checkbox"/> ) 其他 ( <input type="checkbox"/> )			
电子版论文出版 (发布) 者	电子版论文出版 (发布) 地		版权声明
论文总页数*	60		
注: 共 33 项, 其中带*为必填数据, 为 25 项。			