DOI:10.11918/202510068

基于集成学习的饮用水处理预测模型

贲雅雯[1,2],张 欢[1,2],周 琪[1,2],庞宏娇[3],宋怡藩[1,2],荆家琪[1,2],曲 申[1,2]

(1.北京理工大学 能源与环境政策研究中心,北京 100081; 2.北京理工大学 管理学院,北京 100081;
3.环境水质学国家重点实验室(中国科学院生态环境研究中心),北京 100085)

摘 要:为解决传统单一模型在应对复杂水质预测等现实挑战时面临的局限性,提出模型简单平均法与两种 Stacking 集成策略,即基于最小二乘法(Least Square,LS)的加权集成、以极端随机森林回归(Extra Trees Regressor,ETR)为元学习器的 Stacking 集成。实地采集了某饮用水处理厂的全流程小时级监测数据,并对原始数据集进行了严格的预处理。在此基础上,在测试集上对所有单一模型和集成模型的预测性能进行综合评估与比较。结果表明,提出的3种集成模型在所有4项水质指标的预测上,其性能均显著优于任何单一模型,预测误差大幅降低。其中,LS 加权模型在平均误差上表现最优,平均绝对百分比误差(MAPE)约为1.08%,ETR 加权模型在平均误差略高0.02%。此外,探究了两种 Stacking 模型对基学习器的权重分配,结果表明,ETR 加权模型具有较高的适应性。该模型在浊度骤增等高风险事件中,通过非线性的动态权重调整,能快速响应水质的复杂变化。本研究为饮用水处理的智能化管理提供了新视角,所提出的 Stacking 集成模型可为水厂的平稳运行与效率优化提供可靠的数据支撑,其强大的适应性则为工艺扰动和水质异常提供了关键的风险预警,有利于后续处理的及时调整。

关键词:饮用水处理;水质预测;集成学习;时间序列预测;药剂投加;Stacking 集成学习
中图分类号:TU991 **文献标志码**:A **文章编号**:0367-6234(2026)06-0015-10

Prediction model for drinking water treatment based on ensemble learning

BEN Yawen[1,2], ZHANG Huan[1,2], ZHOU Qi[1,2], PANG Hongjiao[3],
SONG Yifan[1,2], JING Jiaqi[1,2], QU Shen[1,2]

(1. BIT Center for Energy and Environmental Policy Research, Beijing 100081, China; 2. School of Management, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China; 3. Key Laboratory of Environmental Aquatic Chemistry (Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences), Beijing 100085, China)

Abstract: To address the limitations of traditional single models when dealing with complex water quality prediction and other real-world challenges, this study proposed the model simple averaging method and two Stacking integration strategies, namely the weighted integration based on the Least Square (LS) method and the Stacking integration with the Extra Trees Regressor (ETR) as the meta-learner. The full-process hourly monitoring data of a certain drinking water treatment plant were collected on-site, and the original data set was subjected to strict preprocessing. On this basis, the predictive performance of all individual models and ensemble models was comprehensively evaluated and compared on the test set. Results indicate that the three proposed ensemble models consistently outperform all single models across all four water quality indicators. Notably, these models achieve a substantial reduction in prediction error. Among these, the LS-weighted model performs the best in terms of average error, with an MAPE value of approximately 1.08%, while the ETR-weighted model has an average error that is slightly higher by 0.02%. Furthermore, this study investigates the weight allocation of base learners in the two Stacking models, revealing that the ETR-weighted model demonstrates greater adaptability. Specifically, this model demonstrates the ability to respond rapidly to complex water quality variations through nonlinearly dynamic weight adjustment, particularly during high-risk events such as sudden turbidity spikes. This study provides a new perspective for the intelligent management of drinking water treatment. The proposed Stacking ensemble model can provide reliable data support for the stable operation and efficiency optimization of water treatment plants. Its strong adaptability offers crucial risk warnings for process disturbances and water quality anomalies, facilitating timely adjustments in subsequent treatment processes.

Keywords: drinking water treatment; water quality prediction; ensemble learning; time series forecasting; chemical dosing; Stacking ensemble learning

收稿日期:2025-10-24;**录用日期**:2025-12-04;**网络首发日期**:2026-01-05
网络首发地址:https://link.cnki.net/urlid/23.1235.t.20260104.1325.002
基金项目:国家杰出青年科学基金(52425005);国家科技重大专项(2025ZD1202203);国家自然科学基金(52370189)
作者简介:贲雅雯(2001—),女,博士研究生;曲 申(1986—),男,教授,博士生导师
通信作者:曲 申,squ@bit.edu.cn;张 欢,zhanghuan19@bit.edu.cn

饮用水安全保障是关键的民生问题。如果饮用水质量不达标,水中的微生物、有害物质会引发多种疾病,严重危害居民健康[1]。由于一些企业违法排污和相关部门监管不到位,部分水污染事件未能及时被发现并处理,造成了较大的社会负面影响[2]。同时,大暴雨等极端天气频发加剧了污染物扩散速度和范围,增加了水质监测与管理的难度[3]。通过对水质变化趋势的分析,能够提前预见潜在的水污染风险,从而有效预防和减少水污染事件的发生,对保障饮用水安全具有重要意义[4]。

饮用水处理相关研究主要包括实验模拟、机理模型、数据驱动方法。实验模拟、机理模型这些传统方法通常依赖于一定的理想条件,需要简化现实情况,以便在可控的实验环境中进行测试和分析[5-7]。上述方法难以同时考虑水体本身的特性以及污染源的动态变化,忽略了饮用水实际处理过程中多种因素共同影响的复杂性[8]。另一方面,这些传统方法往往依赖高频人工采样与实验操作,难以满足水质实时监测的需求[9]。随着物联网、人工智能和大数据技术的不断进步,数据驱动的饮用水水质预测技术已成为当前的研究热点,推动了饮用水处理领域的可持续发展[10-11]。当前,该领域引入了多种数据驱动模型,从随机森林、SVM 等传统机器学习模型,到循环神经网络(RNN)、卷积神经网络(CNN)、长短期记忆网络(LSTM)、Transformer 等深度学习模型。研究表明,线性回归(Linear Regression,LR)模型在饮用水处理方面展现出了良好的整体性能[12]。为捕捉复杂的非线性关系,以梯度提升模型为代表的集成学习模型亦被广泛应用。这类模型通过不断迭代来生成一系列弱学习器(决策树)并将其集成为强预测模型,在饮用水处理的相关问题中取得了较好的效果[13]。近年来,随着深度学习技术的发展,针对时序数据设计的专用架构为该领域带来了新的突破。其中,时间卷积网络(Temporal Convolutional Networks,TCN)、时间融合转换器(Temporal Fusion Transformer,TFT)等模型,因其在捕捉长期依赖和处理多变量输入方面的优势,正成为水质预测研究的前沿方向[14]。由此可知,数据驱动方法能够从海量数据中学习到复杂非线性关系,有助于解决饮用水处理领域中的重大挑战,正成为保障饮水安全、实现智慧水务的关键技术[15]。

在饮用水处理领域,尽管数据驱动方法已展现出较大潜力,但目前研究多集中于训练和优化单一模型。这种策略在应对复杂多变的饮用水处理场景时,很难同时关注不同水质指标的变化趋势。如LSTM 模型更擅长捕捉长期依赖关系,可能对浊度的瞬时突变不够敏感;基于树的机器学习模型通过划分已知数据空间进行预测,难以充分学习高锰酸盐指数的趋势性、周期性规律[16]。此外,饮用水源水质在大部分时间是稳定的,但偶尔会因突发事件导致水质在短期内急剧恶化。然而,单一模型在训练时更倾向于拟合常规状态,对罕见但至关重要的异常事件并不敏感,甚至可能将其视为噪声,以至于在关键时刻无法做出及时且准确的响应[17-18]。

集成学习为解决上述问题提供了有效途径,在水文领域有很好的应用前景[19]。饮用水处理不仅要求在稳态下精准预测,更要求在面临原水水质突变、药剂投加反应滞后等异常情况时,模型能够提供迅速且可靠的反馈,指导工艺立即响应,确保水质满足国家卫生标准,保障民生安全[20]。传统的数据驱动模型往往侧重于提升整体统计精度,容易在极端的突变点产生平滑效应或响应滞后,难以兼顾对稳定状态的精准拟合与对异常状态的快速响应。集成学习通过构建并结合多种个体学习器,以提高单一模型的准确性和鲁棒性,并增强对不同类型数据、不同应用问题的适应能力,实现更可靠的预测[21]。因此,本研究针对饮用水处理领域提出了创新性的集成学习方法,为解决传统单一模型在应对复杂水质预测等现实挑战时所面临的局限性,提供了强有力的方案。

1 研究方法

1.1 基于时间序列的机器学习模型

为了捕捉水质本身的时序依赖性和化学药剂投加等人工干预带来的动态影响,选取了 6 种具有代表性的机器学习模型作为基学习器,实现了多水质指标的时间序列预测任务:以 LR 模型作为捕捉水质线性变化的基准模型;选取 XGBoost、LightGBM、CatBoost 3 种梯度提升决策树变体,利用其在树生长策略与噪声处理机制上的内在差异,提供多样化的预测视角;引入 TCN 和 TFT 两种深度学习模型,以弥补传统机器学习模型在捕捉长期时序依赖方面的不足。

进一步地,针对饮用水的水质预测,构建了基于多变量的时间序列预测框架,如图 1 所示。为实现这一目标,采用了滑动窗口方法,将原始时间序列数据转化为适用于监督学习的输入输出对。通过设定一个固定大小的窗口,在时间序列数据上以一个时间步为单位进行滑动。窗口内的数据被划分为用于模型输入的历史观测序列和用于模型预测的目标序列。模型输入变量包括进水水质指标(水温、浊度等)、药剂投加量(预臭氧投加量、加矾量等)。模型的输出是多个关键出水水质指标(出水 pH、浊度

等）。由于本研究关注的是从原水进厂、经多单元处理至出水的全尺度饮用水处理过程，模型的输入时间窗需覆盖一次完整的水力循环和化学药剂的反应过程，以更全面地体现水质变化的时间滞后特征。研究证明，在相似的时序建模场景中，12 h 的输入窗口有助于捕捉进出水水质与投药之间的延迟关联[13]。因此，结合水厂运行特性与相关研究结论，采用 12 h 作为输入步长，即利用过去 12 h 的历史数据进行学习。输出步长设为 1 h，用于预测未来 1 h 的出水水质指标。

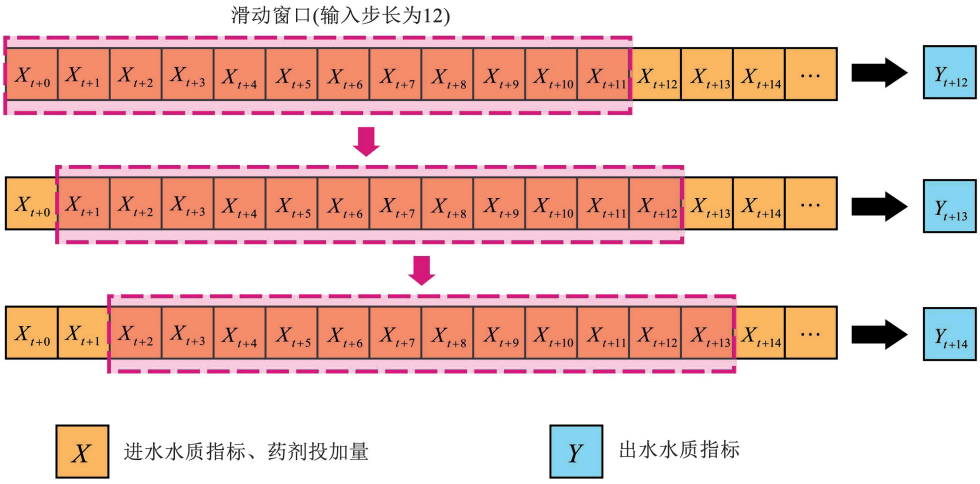


图 1　时间序列预测框架

Fig. 1　Time series forecasting framework

1.2　集成学习的模型组合策略

为了进一步提升预测模型的精确度与泛化能力，采用了 3 种集成学习策略，即模型简单平均法、基于最小二乘法（Least Square，LS）的加权集成、以极端随机森林回归（Extra Trees Regressor，ETR）模型为元学习器的 Stacking 集成。其中，模型简单平均法作为基准集成方法，用于验证 LS 加权与 ETR 优化加权策略的性能提升。本研究通过训练多个基学习器，并通过不同集成学习策略来整合这些基学习器的预测结果，从而获得比任何单一模型更优越的性能。

具体地，模型简单平均法是对 k 个基学习器的输出 $\hat{y}_i$ 进行算术平均，最终预测值 $\hat{Y}$ 可表示为

$$\hat{Y} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\hat{y}_i \tag{1}$$

LS 优化加权和 ETR 模型优化加权都属于 Stacking 集成学习模型。但 LS 优化加权采用的是一种线性的组合方式，通过优化每个基学习器的权重来最小化集成模型的误差，即

$$\hat{Y} = \sum_{i=1}^{k}\omega_i\hat{y}_i \tag{2}$$

通过最小化损失函数 $L(\omega)$ 得到一组全局最优的固定权重 ω_i，使得基学习器的加权预测尽可能地接近真实值 y_j。

$$L(\omega) = \sum_{j=1}^{N}\left(y_j - \sum_{i=1}^{k}\omega_i\hat{y}_{ij}\right)^2 \tag{3}$$

式中：y_j 为第 j 个样本的真实值，$\hat{y}_{ij}$ 为第 i 个基学习器对第 j 个样本的预测值。相比 ETR 模型，优化加权能够学习基模型预测之间的非线性关系。将 k 个基学习器的预测向量 $[\hat{y}_1,\hat{y}_2,\cdots,\hat{y}_{k'}]$ 作为输入，传递到训练好的 ETR 模型中，通过构建大量决策树来学习非线性函数，即

$$\hat{Y} = f_{\mathrm{ETR}}(\hat{y}_1,\hat{y}_2,\cdots,\hat{y}_k) \tag{4}$$

在构建的大量决策树中，向量会在森林中的每一棵树里，根据树内部的分裂规则一路向下，最终落入一个叶节点。在每个节点分裂时，算法会随机选择一个数量为 k 的特征子集。对于这个子集中的每一个特征，随机生成一个分裂点，并从中选择最优的那一个作为该节点的分裂规则。每个叶节点都包含一个预测值，该值是训练过程中落入该叶节点的所有样本的目标均值。最终，集成学习模型将所有树的预测值求平均得到输出结果。通过构建大量高度随机化的决策树，模型能够高效处理高度相关的特征，降低模型对某一组特定基学习器预测的依赖，使得组合更加稳健有效。

由于饮用水水质数据随着时间的变化会有不同的波动规律，同时，药剂投加策略受气候等外界因素的变化而不断调整，从而出现了“数据漂移”现象。这意味着静态的集成学习模型在训练阶段学习到的规律，在未来某个时间点可能不再适用。因此，提出了一种动态的加权集成学习策略，通过每 24 h 一次的滚动更新机制对模型重新训练，从而确保模型能

够持续学习并适应新的数据模式。

选取了 6 种机器学习模型作为基学习器，包括 LR、XGBoost、LightGBM、CatBoost、TCN、TFT。在处理多输出的时间序列预测问题时，为了充分利用每个模型的优势，设计了一种基于平均绝对百分比误差(MAPE)的基学习器筛选策略。该策略依据各基学习器在每一个出水水质指标上的预测表现，剔除表现最差(MAPE 最大)的模型，将筛选后的基学习器分别应用到 3 种模型组合策略，构建并评估最终的集成预测模型，预测框架如图 2 所示。

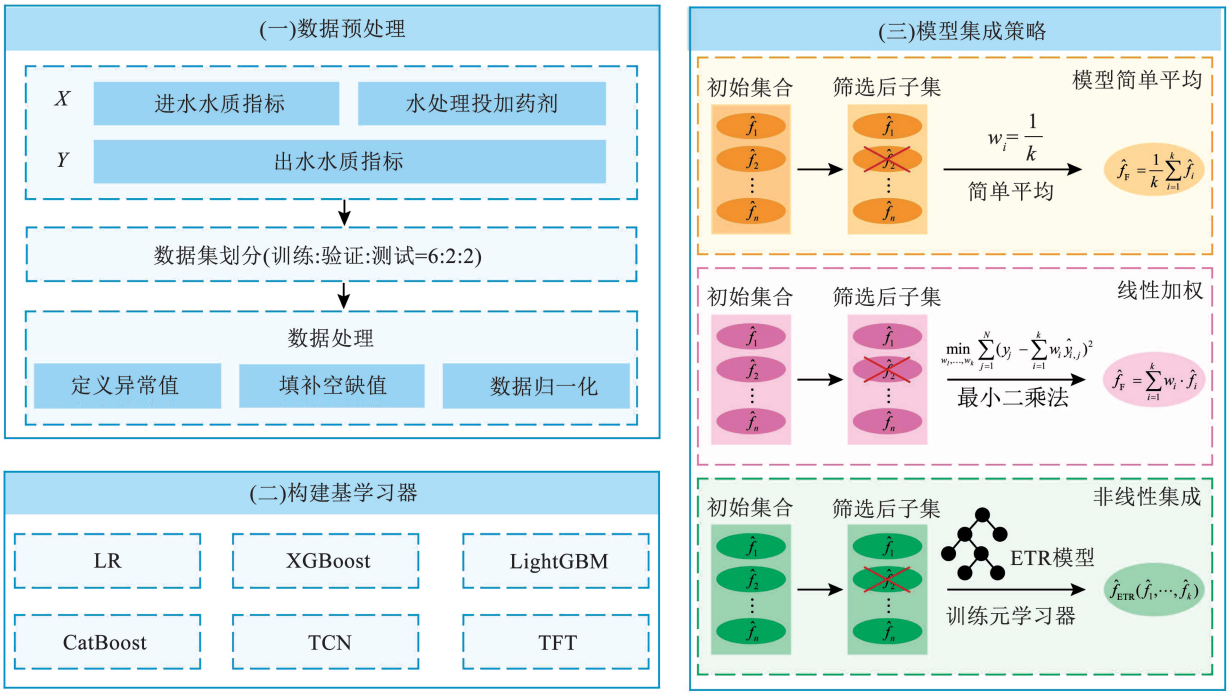


图 2 集成学习模型预测框架

Fig. 2 Prediction framework for ensemble learning models

1.3 贝叶斯超参数优化

为了确保每个机器学习模型能够达到最佳预测性能，采用贝叶斯超参数优化算法来确定最优参数组合。贝叶斯优化是一种高效的全局优化策略，其通过构建一个关于目标函数的概率代理模型，并利用采集函数选择下一个最有潜力的超参数组合进行评估[22]。与传统的网格搜索和随机搜索相比，这种方法能够以更少的迭代次数找到全局最优解。本研究采用 Optuna 超参数优化框架来实现这一过程。为每个机器学习模型定义了超参数搜索空间，如表 1所示。在持续计算优化后，最终为每个模型确定了最优超参数组合，为后续的模型训练与评估奠定了基础。

1.4 模型评价指标

为了全面反映模型在不同角度的预测性能，采用了平均绝对百分比误差(MAPE，E_{MAP})、平均绝对误差(MAE，E_{MA})、均方根误差(RMSE，E_{RMS})3 种指标，描述机器学习模型和集成模型的预测结果。这些评价指标既量化了绝对误差，又反映了相对误差，还能对异常值的惩罚效应来评估模型的稳健性，其评价指标的计算方式为

$$E_{MAP}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{y_i-\hat{y}_i}{y_i}\right|\times 100\% \tag{5}$$

$$E_{MA}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|y_i-\hat{y}_i| \tag{6}$$

$$E_{RMS}=\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2} \tag{7}$$

式中：n 为样本量，y_i 为样本真实值，$\hat{y}_i$ 为样本预测值。

1.5 模型可解释性分析

SHAP 是一种基于博弈论的方法，通过计算每个特征对预测结果的贡献度来解释模型[23]。在本研究中，ETR 模型的输入特征是所有基学习器的预测值。通过 SHAP 可解释分析方法，深入分析不同基学习器的预测结果对 ETR 元学习器的贡献程度，以阐述 ETR 元学习器在不同进水水质和药剂投加下所采用的动态组合策略。由于 ETR 模型是一种基于决策树的模型，采用 TreeExplainer 为测试集的每个样本计算了各基学习器的 SHAP 值。为了评估

每个基学习器在决策中的影响程度，对 SHAP 值取绝对值，并在每一个样本上进行归一化处理。先是计算该样本内所有基学习器的 SHAP 绝对值的总和，再将每个基学习器的 SHAP 绝对值分别除以总和，最终得到了每个样本下各基学习器的相对贡献占比，其表达式为

$$P_{i,j}=\frac{|\phi_{i,j}|}{\sum_{k=1}^{M}|\phi_{i,k}|} \tag{8}$$

式中：$P_{i,j}$为第 j 个基学习器在第 i 个样本上的相对贡献占比，$\phi_{i,j}$为第 j 个基学习器在第 i 个样本上计算得到的 SHAP 值，M 为基学习器的总数量。

表 1　机器学习模型超参数搜索空间

Tab. 1　Hyperparameter search space for machine learning models

模型	参数	数值范围	模型	参数	数值范围
CatBoost	Depth	[3,10]	XGBoost	Reg lambda	$[10^{-8},1.0]$
	L2 leaf reg	[1,10]		N estimators	{50,100,…,500}
	N estimators	{50,100,…,500}		Learning rate	$[10^{-5},10^{-2}]$
	Learning rate	$[10^{-5},10^{-2}]$		Subsample	[0.5,1.0]
	Bagging temperature	[0,1]		Colsample bytree	[0.5,1.0]
	Subsample	[0.5,1.0]	TFT	Hidden size	[16,512]
LightGBM	Num leaves	{31,63,127}		Hidden continuous size	[4,64]
	Max depth	[3,10]		LSTM layers	[1,3]
	Min data in leaf	{20,40,…,100}		Num attention heads	[1,8]
	Max bin	{8,16,…,128}		Dropout	[0.1,0.5]
	N estimators	{50,100,…,500}		Learning rate	$[10^{-5},10^{-2}]$
	Learning rate	$[10^{-5},10^{-2}]$		Batch size	{32,64,…,1 024}
	Feature fraction	[0.1,1.0]	TCN	Kernel size	{3,5,7}
	Bagging fraction	[0.1,1.0]		Num filters	[16,128]
XGBoost	Max depth	[2,10]		Num layers	[2,8]
	Min child weight	[1,10]		Dilation base	[2,3]
	Gamma	{0,0.2,…,1.0}		Dropout	[0.1,0.5]
	Max leaves	{0,20,…,100}		Learning rate	$[10^{-5},10^{-2}]$
	Reg alpha	$[10^{-8},1.0]$		Batch size	{32,64,…,1 024}

2　模型结果与分析

2.1　数据收集与处理

选取江苏省某饮用水处理厂 2022 年 10 月 11 日—2023 年 9 月 30 日（355 d）的处理过程数据，包括 6 种进水水质指标（水温、浊度、pH、高锰酸盐指数、溶解氧、藻密度）、4 种投加药剂（预臭氧投加量、加矾量、后臭氧投加量、后加氯量）和 4 种出水水质指标（pH、浊度、余氯、高锰酸盐指数）。构建了 1 h 采样频率的时间序列数据集，用于训练机器学习模型。

对原始数据进行了预处理，包括异常值剔除、空缺值填补和数据归一化。由于仪器故障等意外事故的出现，数据集会存在数据缺失、异常情况。结合专家经验判断，筛选并剔除了异常值，通过线性插值对所有空缺值进行填充，最终得到 8 520 组数据。数据集按时间顺序以 6∶2∶2 划分为训练集、验证集和测试集。

2.2　基学习器预测表现

利用 Darts 库构建了 LR、XGBoost、LightGBM、CatBoost、TCN、TFT 6 种时间序列预测模型，并采用 Optuna 框架进行超参数优化。图 3 展示了 6 种基学习器在训练集、验证集、测试集上对 4 种出水水质指标的预测结果。实验结果表明，不同模型在预测不同出水水质指标时表现出显著差异。pH 在验证集

中呈现出长期平稳、偶发突变的特性。LR 模型能够很好地拟合 pH 7.0 ~ 7.5 的平稳数据,从而获得较低的整体平均误差,MAPE 值约为 0.16%。而在测试集上,出水 pH 呈现出连续、高频的数据波动。TCN 模型通过平滑处理使其预测点离真实值的平均距离最近,获得了最小的 MAPE 值(约 0.05%)和 MAE 值(约 0.004),精度远高于其他模型。由于在 5 月—7 月出现季节性原水水质恶化问题,出水浊度在验证集中呈现持续的非线性上升。此时,TCN 模型的预测曲线与真实值的贴合度最高,LR 模型和 TFT 模型在出水浊度预测中也表现较好。在测试集中,LR 模型的 MAPE 值略低于 TCN 模型,MAE 值和 RMSE 值则相差不大。出水余氯质量浓度在验证集上长期稳定维持在 0.75 mg/L 附近,后面进入了更高的稳态区间。TCN 模型因其强大的模式识别和噪声过滤能力,获得了最低的平均误差,MAPE 值约为 2.79%。但在测试集中,余氯开始出现了持续、高频的剧烈波动,这更契合梯度提升模型的优势,XGBoost 模型、CatBoost 模型、LightGBM 模型在评价结果上均表现较好。TFT 模型在预测出水余氯上表现最差,MAPE、MAE、RMSE 值远高于其他模型。对于高锰酸盐指数的预测,LR 模型虽然在验证数据上评价指标表现优异,但其线性假设导致模型难以捕捉数据中的非线性动态。而 TCN 模型体现了较好的泛化能力,在测试集上表现出显著优势,MAE 约为 0.010 2,RMSE 约为 0.014。

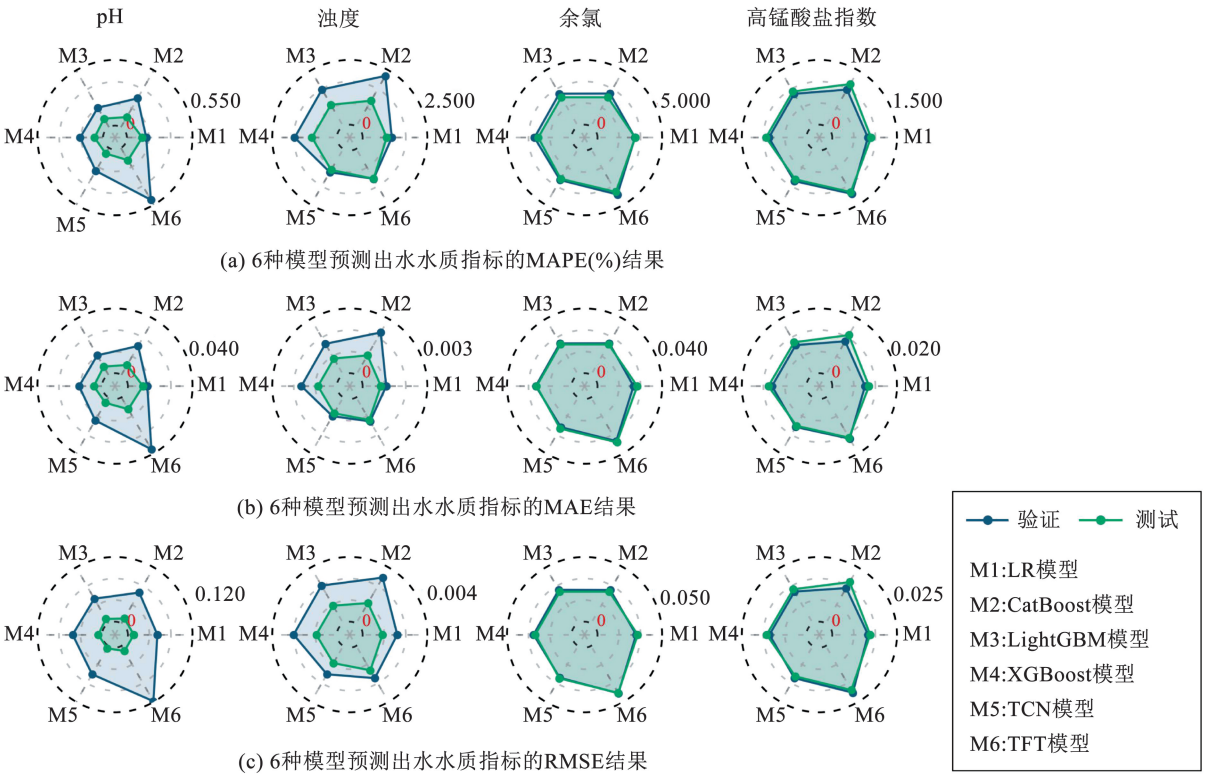


图 3 6 种机器学习模型在验证集和测试集的评价结果对比

Fig. 3 Comparison of evaluation results of six machine learning models on validation and test sets

总体来看,TCN 模型在预测出水 pH、高锰酸盐指数上明显优于其他预测模型。在预测出水浊度方面,TCN 模型和 LR 模型均表现出色。XGBoost、LightGBM、CatBoost 这 3 种梯度提升模型更适合预测出水余氯,其预测表现都很好。根据表 2 中各基学习器的 MAPE 评价结果,对集成模型的基学习器组合进行了优化筛选,结果如下:在 pH 预测中剔除 LR 模型;在浊度预测中剔除 CatBoost 模型;在余氯和高锰酸盐指数预测中均剔除 TFT 模型。经筛选保留的基学习器被应用于 3 种集成策略的构建。

2.3 集成学习模型优化结果

为了更好地融合多模型在预测不同出水水质指标的优势,根据模型在验证集上的预测表现,对每个出水水质指标剔除了表现最差的预测模型。最终构建了 3 种集成模型。表 2 展示的是 6 种单一模型和 3 种集成模型在测试集上预测 4 种出水水质指标的 MAPE 值。可以看出,作为基准的简单平均集成法在预测出水水质指标中展现出了较优的预测性能,所提出的两种 Stacking 集成学习模型在预测表现上更具优势。

表 2　单个模型与集成模型在测试集上的预测性能对比(MAPE)

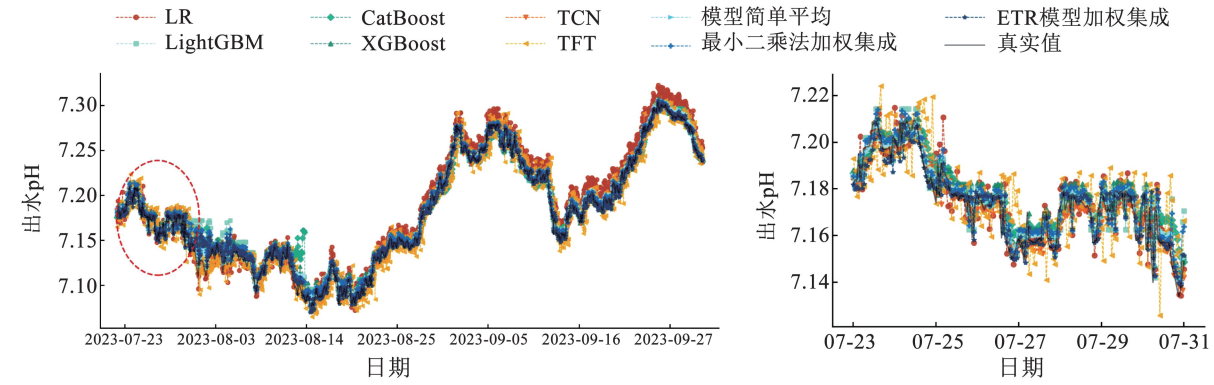
Tab. 2　Prediction performance comparison of individual and ensemble models on test set(MAPE)　　%

模型	pH	浊度	余氯	高锰酸盐指数	平均误差
LR	0.129 2	0.931 7	2.915 2	0.898 6	1.218 7
CatBoost	0.098 6	1.147 7	2.594 5	1.132 6	1.243 4
LightGBM	0.082 7	0.961 0	2.594 8	0.933 4	1.143 0
XGBoost	0.071 8	0.961 9	2.587 8	0.940 7	1.140 6
TCN	**0.054 5**	0.940 1	2.682 6	0.818 6	1.123 9
TFT	0.118 5	1.336 2	3.847 7	1.158 6	1.615 3
模型简单平均法	0.065 0	0.960 5	2.577 3	0.881 0	1.121 0
LS 加权集成	0.071 5	**0.907 0**	2.559 8	**0.780 9**	**1.079 8**
ETR 模型加权集成	0.060 9	0.955 9	**2.557 8**	0.828 1	1.100 7

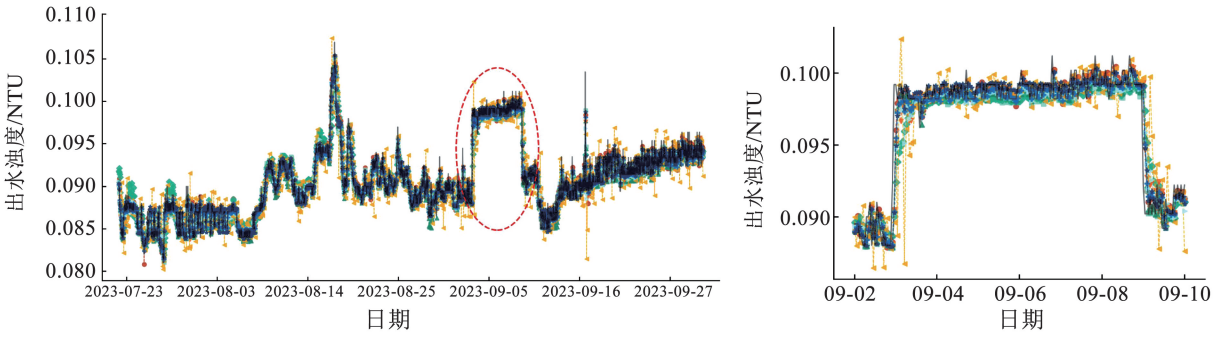
图 4 展示了 6 种基学习器和 3 种集成模型在测试集上对 4 种出水水质指标的预测结果以及模型的局部预测表现。图 4(a)中展示了出水 pH 能够在短时间内发生剧烈变化。这是因为 pH 与若干小时前的药量、进水 pH 存在复杂、非线性的响应关系。TCN 模型、TFT 模型等单一模型在预测 pH 波动较大的区域(在 7 月 24 日和 7 月 27 日附近)时,预测曲线相对平滑,且波动表现出一定程度的延迟,而集成模型预测 pH 时能够及时响应,与真实值的偏差较小。这表明集成模型不仅学到了数据的整体趋势,还能利用不同基学习器的优势捕捉到数据的动态细节,在预测 pH 上表现更好。图 4(b)中展示了出水浊度在 9 月 3 日末突然骤增,并在 9 月 9 日初突然骤减,LR 模型、LightGBM 模型、TCN 模型的预测曲线几乎没有延迟。这使得 LS 加权模型和 ETR 非线性加权模型在预测浊度时均表现出色,这两种 Stacking 集成模型在感知到数据发生突变时能够提供预测效果较好的基模型组合。一些基学习器(如 TFT 模型、CatBoost 模型)在浊度突变的情况下预测效果很差,会明显拉低简单加权集成模型的最终预测结果。从图 4(c)可以看出,TFT 模型在预测余氯中多个极端值的情况下,严重偏离真实值,而集成模型表现得非常稳健。在预测高锰酸盐指数时,图 4(d)的局部预测表现证明了集成模型不仅能处理随机波动,还可以更精确地预测非线性趋势,尤其是非线性 Stacking 模型。作为元学习器,ETR 模型能够更好地找到基学习器的最优组合,其预测效果比其他单一模型更加稳定和精确。

为揭示两种 Stacking 模型的性能差异,对其基学习器的动态权重分配进行了深入分析。如图 5、6 所示,测试集样本中基学习器的权重占比变化是根据窗口的滑动顺序展示的,横坐标代表每个窗口内输入序列的起始时间。从图 5 可以看出,LS 加权模型计算出的权重变化幅度较小,且依赖于最优基学习器。如在 pH 的预测中,LightGBM 模型在绝大多数时间内权重占比超过了 90%(图 5(a));在预测余氯(图 5(c))和高锰酸盐指数(图 5(d))时,最优基学习器(分别是 XGBoost 和 LR 模型)权重均占比过半。在实际运行过程中,原水水质和加药策略是不断变化的,这种线性加权可能无法适应进水水质突变或工艺参数调整带来的动态影响。相反,ETR 模型具有非线性动态优势,该模型会根据当前的运行状态,在每一个时间步下动态调整各基学习器的贡献权重。

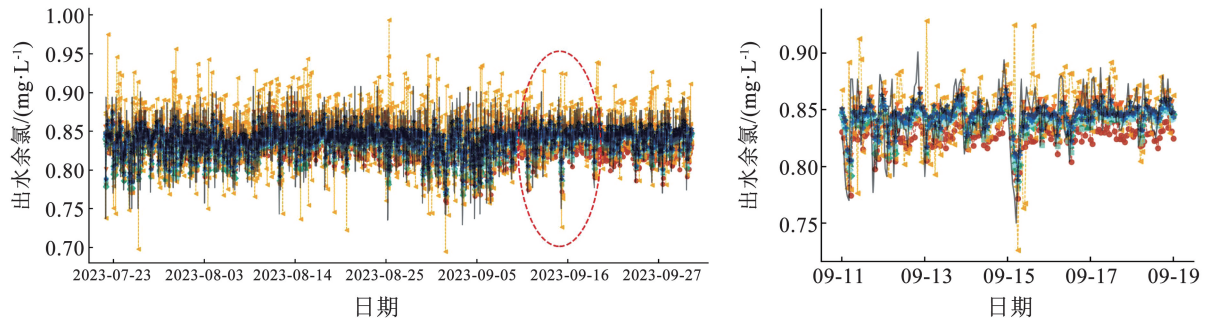
图 6 展现了 ETR 模型中各基学习器的 SHAP 贡献占比结果。这种动态优势在应对浊度突变时尤为明显,如图 6(b)所示。在 9 月 3 日浊度突然变高后,LightGBM 模型在该运行状态下表现不佳,其贡献占比下降了 26% 左右。与此同时,在这种高浊度的情况下,XGBoost 模型的预测能力更可靠,因此,将该基学习器的权重提升了 20% 左右。当浊度在 9 月 9 日突然变低时,LightGBM 模型的贡献占比回升到接近 32%,以更好地捕捉浊度下降的趋势。



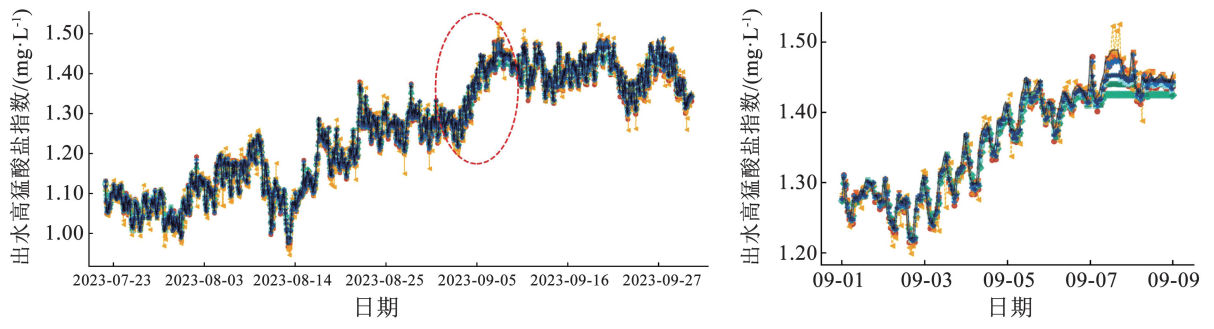
(a) 模型在测试集上的出水pH预测结果及其局部预测图



(b) 模型在测试集上的出水浊度预测结果及其局部预测图



(c) 模型在测试集上的出水余氯预测结果及其局部预测图

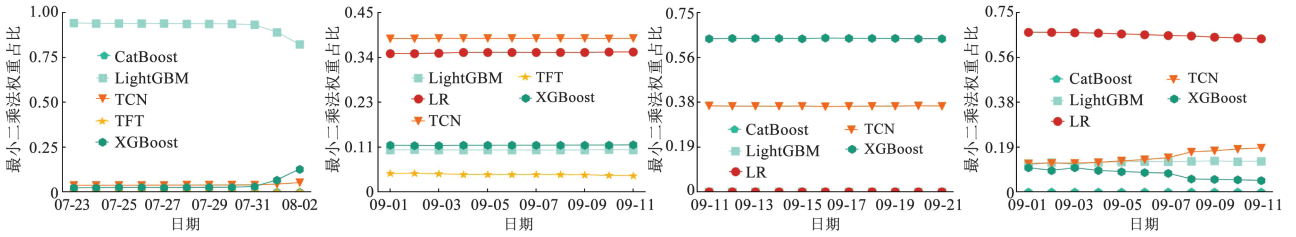


(d) 模型在测试集上的出水高锰酸盐指数预测结果及其局部预测图

图 4　4 种出水水质指标的预测值与实际值对比(测试集)

Fig. 4　Comparison of predicted and actual values for four effluent quality indicators (test set)

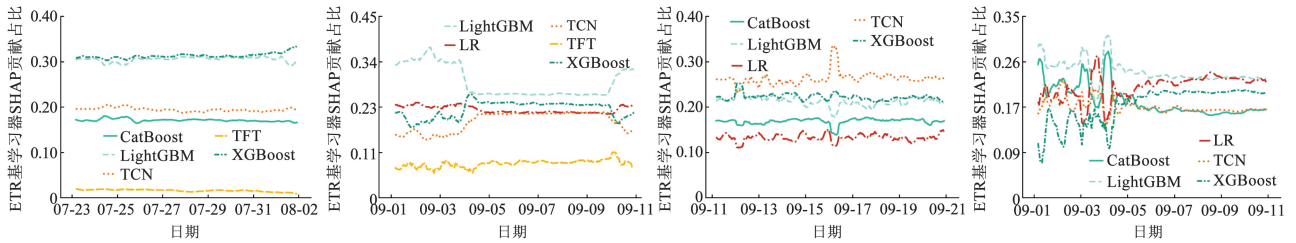
整体来看,Stacking 集成模型能够根据进水水质变化趋势和药剂投加策略,更好地模拟不同工艺条件下饮用水处理过程,为水厂的精细化运行和智能化管理提供关键支撑。通过对出水水质的精准预测,辅助水厂人员优化药剂投加量,降低运行成本并提高运营效率。相比 LS 加权模型,ETR 非线性加权模型具备更强的自适应能力。虽然其在平均误差上高于 LS 加权模型,但其动态适应性能更好地捕捉到高风险事件引起的水质突变,展现了更强的鲁棒性。ETR 非线性加权模型能快速响应水质的复杂变化,为规避水质风险提供关键预警,从而增强供水安全保障。



(a) pH　(b) 浊度　(c) 余氯　(d) 高锰酸盐指数

图 5　最小二乘法加权集成模型的基学习器组合优化结果

Fig. 5　Optimized combination results of base learners for LS-weighted ensemble models



(a) pH　(b) 浊度　(c) 余氯　(d) 高锰酸盐指数

图 6　ETR 非线性加权模型中各基学习器的 SHAP 贡献占比

Fig. 6　SHAP-based contribution share of base learners in ETR nonlinear weighted models

3　结　论

1)构建的 6 种机器学习模型在预测不同出水水质指标时表现出了显著的性能差异。通过贝叶斯优化对模型超参数寻优后,各模型的预测优势得以凸显:TCN 模型在 pH、高锰酸盐指数预测上表现最佳;LR 模型在预测浊度上误差最小;而以 XGBoost 模型、LightGBM 模型、CatBoost 模型为代表的梯度提升模型更适用于余氯的精准预测。

2)提出的 3 种集成模型(模型简单平均法、LS 优化加权、ETR 优化加权)的预测精度均优于单一模型。与基准模型(模型简单平均法)相比,这两种 Stacking 集成模型提升了预测稳定性。通过训练元学习器来学习最优的组合策略,并每 24 h 后对模型重新训练,确保模型能持续适应水质变化,从而实现更稳定的长期预测。

3)深入探究了两种 Stacking 元学习器在应对不同工艺条件时的动态优化差异。LS 加权模型展现了全局稳定性,其倾向于在饮用水处理的平稳运行期找到最优解,获得了较优的全局平均指标(MAPE 约为 1.08%)。ETR 加权模型则展现了动态适应性。在面对浊度骤增等高风险事件中,ETR 模型通过动态权重调整,精准捕捉到实际水质变化,表现出强大的鲁棒性和快速响应的能力。在饮用水处理领域,这种在关键时刻能够提供可靠预警的模型,其价值远超全局平均误差上 0.02% 的微小差异。

4)对于饮用水处理领域,改进后的集成模型凭借高精度、高稳定性与高适应性,为饮用水处理厂的智能化管理提供了坚实的技术基础,对保障供水安全和优化工艺提供了重要实践价值。为进一步提升模型的可信度,未来研究应将领域先验知识与数据驱动模型相结合,以增强其可解释性与泛化能力。

参考文献

[1]李伟英, 周艳彦, 张骏鹏, 等. 营养物质和氯对饮用水中细菌再生长的影响[J]. 哈尔滨工业大学学报, 2017, 49(2): 70
LI Weiying, ZHOU Yanyan, ZHANG Junpeng, et al. Effects of nutrients and chlorine on bacterial regrowth in drinking water[J]. Journal of Harbin Institute of Technology, 2017, 49(2): 70. DOI: 10.11918/j.issn.0367-6234.2017.02.012

[2]BIXLER T S, COLLINS M R, MO W. Human health, economic, and environmental impacts of emergency drinking water contamination events and response actions[J]. Resources, Conservation and Recycling, 2025, 221: 108391. DOI: 10.1016/j.resconrec.2025.108391

[3]BENZ S A, IRVINE D J, RAU G C, et al. Global groundwater warming due to climate change[J]. Nature Geoscience, 2024, 17(6): 545. DOI: 10.1038/s41561-024-01453-x

[4]WANG Yuqi, WANG Hongcheng, XIAO Zijie, et al. Machine learning strategy secures urban smart drinking water treatment plant through incremental advances[J]. Water Research, 2025, 280: 123541. DOI: 10.1016/j.watres.2025.123541

[5]CHIAVOLA A, DI MARCANTONIO C, D'AGOSTINI M, et al. A combined experimental-modeling approach for turbidity removal optimization in a coagulation-flocculation unit of a drinking water treatment plant[J]. Journal of Process Control, 2023, 130: 103068. DOI: 10.1016/j.jprocont.2023.103068

[6]公维佳, 王嘉硕, 刘宪武, 等. GAC/GDM 组合工艺用于村镇饮用水净化机制及调控[J]. 哈尔滨工业大学学报, 2022, 54(8): 34
GONG Weijia, WANG Jiashuo, LIU Xianwu, et al. Mechanisms and regulations of GAC/GDM hybrid process forrural drinking water

treatment[J]. Journal of Harbin Institute of Technology, 2022, 54(8): 34. DOI: 10.11918/202110099

[7] 王盼盼, 赵博. 铁盐改性蒙脱土活化过一硫酸盐去除水中双酚A效能与机理[J]. 哈尔滨工业大学学报, 2022, 54(5): 18
WANG Panpan, ZHAO Bo. Catalytic degradation performance and mechanism of bisphenol A by peroxymonosulfate activation through Fe(Ⅲ)-modified montmorillonite[J]. Journal of Harbin Institute of Technology, 2022, 54(5): 18. DOI: 10.11918/202106031

[8] DELGRANGE N, CABASSUD C, CABASSUD M, et al. Neural networks for prediction of ultrafiltration transmembrane pressure-application to drinking water production[J]. Journal of Membrane Science, 1998, 150(1): 111. DOI: 10.1016/S0376-7388(98)00217-8

[9] HUANG Yanyan, QIANG Zhimin, SUN Zhe, et al. Micropollutant degradation by UV/H_2O_2 in drinking water: facilitated prediction through combination of model simulation and portable measurement[J]. Water Research, 2022, 221: 118794. DOI: 10.1016/j.watres.2022.118794

[10] BRAZIL G R M, ARAI Y, IWAMOTO T, et al. Long duration forecasting and its performance capability for seasonal variation modelling of residual chlorine concentrations: a comparative evaluation of two small-scale water distribution systems in Japan[J]. Water Research, 2025, 268: 122766. DOI: 10.1016/j.watres.2024.122766

[11] MEI Peng, LI Meng, ZHANG Qian, et al. Prediction model of drinking water source quality with potential industrial-agricultural pollution based on CNN-GRU-Attention[J]. Journal of Hydrology, 2022, 610: 127934. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2022.127934

[12] XIE Zhan, LIU Weiting, CHEN Si, et al. Machine learning approaches to identify hydrochemical processes and predict drinking water quality for groundwater environment in a metropolis[J]. Journal of Hydrology: Regional Studies, 2025, 58: 102227. DOI: 10.1016/j.ejrh.2025.102227

[13] PANG Hongjiao, BEN Yawen, CAO Yong, et al. Time series-based machine learning for forecasting multivariate water quality in full-scale drinking water treatment with various reagent dosages[J]. Water Research, 2025, 268: 122777

[14] KOH V K Z, LI Y, KEK X Y, et al. A review of recent hybridized machine learning methodologies for time series forecasting on water-related variables[J]. Journal of Hydrology, 2025, 656: 132909. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2025.132909

[15] ALIASHRAFI A, ZHANG Yirao, GROENEWEGEN H, et al. A review of data-driven modelling in drinking water treatment[J]. Reviews in Environmental Science and Bio/Technology, 2021, 20(4): 985. DOI: 10.1007/s11157-021-09592-y

[16] DYCK R, COOL G, RODRIGUEZ M, et al. Treatment, residual chlorine and season as factors affecting variability of trihalomethanes in small drinking water systems[J]. Frontiers of Environmental Science & Engineering, 2015, 9(1): 171. DOI: 10.1007/s11783-014-0750-1

[17] POURSAEID M. Comprehensive water quality indicators modeling by environmental protection view using multi optimized weighted ensemble machine learnings[J]. Process Safety and Environmental Protection, 2025, 193: 696. DOI: 10.1016/j.psep.2024.11.042

[18] XIAO Fangnan, ZHANG Runqiao, JIAN Zhanqiang, et al. Using ensemble machine learning to predict and understand spatiotemporal water quality variations across diverse watersheds in coastal urbanized areas[J]. Ecological Indicators, 2025, 178: 113976. DOI: 10.1016/j.ecolind.2025.113976

[19] ZOUNEMAT-KERMANI M, BATELAAN O, FADAEE M, et al. Ensemble machine learning paradigms in hydrology: a review[J]. Journal of Hydrology, 2021, 598: 126266. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2021.126266

[20] YU Wenqing, ZHOU Zhiwei, YANG Yanling, et al. Artificial intelligence in chemical dosing for drinking water treatment: a systematic review of algorithmic applications, implementation frameworks, and future challenges[J]. Journal of Environmental Chemical Engineering, 2025, 13(5): 118936. DOI: 10.1016/j.jece.2025.118936

[21] LI Zilin, ZHANG Chi, LIU Haixing, et al. Developing stacking ensemble models for multivariate contamination detection in water distribution systems[J]. Science of the Total Environment, 2022, 828: 154284. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2022.154284

[22] WU Jia, CHEN Xiuyun, ZHANG Hao, et al. Hyperparameter optimization for machine learning models based on Bayesian optimization[J]. Journal of Electronic Science and Technology, 2019, 17(1): 26. DOI: 10.11989/JEST.1674-862X.80904120

[23] FENG Liyan, ZHANG Ying, WEI Xiaoting, et al. Interpretable prediction of coagulant dosage in drinking water treatment plant based on automated machine learning and SHAP method[J]. Journal of Water Process Engineering, 2025, 75: 107925. DOI: 10.1016/j.jwpe.2025.107925

(编辑 刘 彤)