

DOI:10.19853/j.zgjsps.1000-4602.2026.14.004

面向智能化运行的污水处理厂生化反应模拟进展与挑战

沈浩¹, 信昆仑²

(1. 宁波水务环境集团有限公司, 浙江 宁波 315800; 2. 同济大学 环境科学与工程学院, 上海 200092)

摘要: 城镇污水处理厂智能化运行是水污染控制领域的关键发展方向。基于数据驱动的人工智能(AI)模型为污水处理生化反应模拟提供了新途径,突破了传统机理模型结构复杂、参数校准困难的限制。本文系统综述了AI方法在污水处理厂生化反应模拟中的进展,重点分析了传统机器学习与深度学习模型的性能特点与适用场景。结果表明,传统机器学习在小样本和连续流工艺中表现稳健,而深度学习凭借其强大的时序建模与特征提取能力,在动态性强、机理复杂的工艺中预测精度更高。当前研究仍面临模型可解释性不足、关键控制参数输入缺失、数据质量依赖性强等挑战。未来应推动机理与数据融合、构建面向控制的智能模型,以实现从预测到优化决策的跨越,为污水处理厂智能化、低碳化运行提供关键技术支撑。

关键词: 人工智能; 机器学习; 深度学习; 污水处理厂; 生化反应模拟

中图分类号: TU992 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-4602(2026)14-0026-09

Advances and Prospects of Artificial Intelligence Applications in Biochemical Reaction Simulation for Municipal Wastewater Treatment Plants

Shen Hao¹, Xin Kunlun²

(1. Ningbo Water Environment Group Co. Ltd., Ningbo 315800, China; 2. College of Environmental Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China)

Abstract: The intelligent operation of municipal wastewater treatment plants (WWTPs) is a crucial development direction in the field of water pollution control. Data-driven artificial intelligence (AI) models offer a new approach for simulating biological reactions in wastewater treatment, overcoming the limitations of traditional mechanistic models, such as structural complexity and difficult parameter calibration. This paper systematically reviews the progress of AI methods in biological reaction simulation for WWTPs, with a focus on analyzing the performance characteristics and applicable scenarios of traditional machine learning and deep learning models. The results indicate that traditional machine learning performs robustly with small datasets and in continuous-flow processes, while deep learning, leveraging its powerful capabilities in temporal modelling and feature extraction, achieves higher prediction accuracy in processes with strong dynamics or complex mechanisms. Current research still faces challenges including poor model interpretability, lack of input of key control parameters, and strong dependence on data quality. Future efforts should promote the integration of mechanism and data, construct control-oriented intelligent models, and achieve the leap from prediction to optimized decision-making, thereby providing key technological support for the intelligent and low-carbon operation of

基金项目: 国家自然科学基金项目(52470109)

wastewater treatment plants.

Keywords: artificial intelligence; machine learning; deep learning; wastewater treatment plants; biological reaction simulation

城市污水处理作为降低污染物排放、优化水资源循环利用并提升水体环境质量的途径,在环境保护中扮演着关键角色。面对进水水质波动大、出水标准日益严格、能耗/药耗高等多重运行压力^[1],我国污水处理厂亟须向智能化运行模式转型。其中,进水碳源不足和生化过程调控滞后导致的过量曝气与加药问题尤为突出,不仅提高了运行成本,更会制约行业的可持续发展^[2]。在此背景下,通过水质动态预测实现精准调控,成为破解当前困境、响应“双碳”目标的关键路径。

实现智能化运行的核心在于生化反应模拟,其模型主要分为机理模型与数据驱动模型两类。机理模型以活性污泥模型(ASMs)^[3]为代表,基于微生物动力学与质量守恒定律构建,虽精度较高,但因结构复杂、参数繁多、校准耗时,在实际工程中难以广泛应用。

随着信息技术的发展,数据驱动的人工智能(AI)策略在工业和环境领域中展现出显著潜力^[4]。自 20 世纪 90 年代起,已有学者开始该方向的研究,但早期的研究较为零散,且多集中于验证可行性。近年来,随着物联网与在线监测技术的普及,污水处理厂积累了海量运行数据,同时人工智能算法(尤其是深度学习)取得革命性进展,使得数据驱动建模重新成为研究热点。已有大量综述从不同角

度总结了 AI 在水处理中的应用,但多侧重于算法类型的性能比较^[5-7],缺乏对“生化反应过程”这一核心对象的针对性剖析,未能系统回答以下关键问题:针对不同生物处理工艺(如 AAO、SBR、MBR),何种 AI 模型更具优势;在模型构建过程中,如何从数据采集、特征工程到模型选择进行全流程优化;从“预测”走向“控制”的路径上存在哪些关键空白。针对上述不足,本文通过聚焦生化反应模拟这一具体任务,系统梳理传统机器学习与深度学习方法的适用场景、性能瓶颈与实践要点,并深入探讨其与机理模型融合、面向控制优化等前沿方向,以期为污水处理厂智能化运行的深入研究和工程实践提供清晰的路线图与决策参考。

1 污水处理厂生化反应过程与模拟方法

1.1 污水处理生化反应过程

污水处理是一个包含预处理、生物处理与深度处理的多环节复杂非线性系统,其中生物处理环节承担降解污染物的核心作用。我国广泛应用的生物处理工艺包括 AAO、氧化沟和 SBR 等,以活性污泥法与生物膜法为主。以典型的 AAO 工艺为例,其利用厌氧、缺氧、好氧 3 种不同的微生物环境,实现氮、磷等污染物的高效去除。该过程受进水水质、回流比、碳氮比、溶解氧、pH 和温度等参数的影响,具体流程与影响因素如图 1 所示。

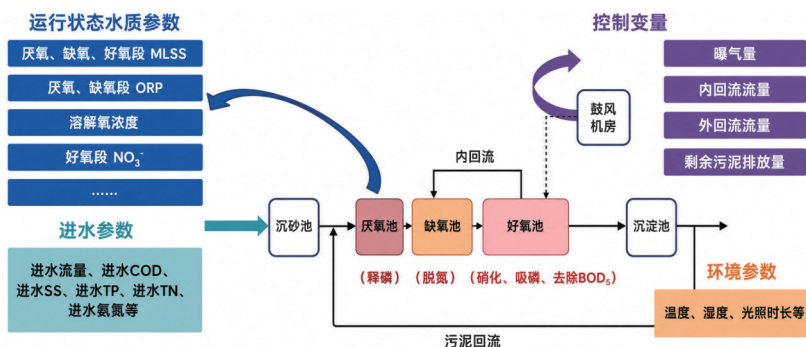


图 1 AAO 流程及影响因素

生化反应过程表现出显著的不确定性与非线性特征:首先,进水水质易受降雨、排污来源变化及季节性波动影响,生物系统稳定性差,存在出水超

标风险;其次,活性污泥中微生物种类多样,硝化、反硝化、除磷等生化反应路径复杂,其活性和数量易受环境干扰,进一步增加了处理过程的不确定

性;此外,控制参数对系统的影响存在时滞,且多个参数之间往往相互耦合,使得调控难度加大。综上,污水处理生化反应是一个具有动态时变特性的复杂系统。

1.2 生化反应模拟方法

生化反应模拟是驱动污水处理厂实现智能化运行的核心技术,模型精度与实用价值直接决定了智能化系统的应用成效。与传统运行模式(仅依赖实时数据、无法预判水质变化)相比,生化反应模拟通过分析历史数据与生化规律之间的关联,能够预测未来水质趋势,帮助运行人员从被动响应转向主动调控,为工艺调整争取关键窗口。在优化运行方面,传统依赖人工经验调整参数的方式往往缺乏系统量化分析,容易造成能耗过高或处理效果不稳定。而模拟方法能够统筹水质达标、能耗控制与运行稳定性等多重目标,通过模拟推演生成量化的优化方案,为参数设定提供科学依据,推动污水处理从经验操作向精细化管理转变。

生化反应模拟模型包括机理模型和数据驱动模型两种,机理模型是指使用数学模型来模拟废水处理过程中微生物(如细菌)降解有机污染物、去除氮磷等营养物的动态过程。这种模拟有助于优化污水处理厂的设计、运行和控制,常用于活性污泥法等生物处理系统。常见模型包括国际水协(IWA)开发的ASM系列,如ASM1(焦点在碳和氮的去除上)和ASM3(考虑储存化合物)。这些模型通过数值模拟软件(如BioWin或WEST)实现,可结合动力学方程描述微生物生长、底物消耗和产物生成。在建立其数学模型时,必须充分考虑多参数间的交互作用,这也是当前生化反应模拟面临的主要挑战。

由于传统机理模型难以建立精确的在线模型,当前研究重点已转向数据驱动的人工智能方法。整个生物处理过程实质上由一系列串行或并行的化学反应构成,以硝化反应为例,硝化反应可视为输入与输出之间的函数关系(见图2)。因此,污水处理过程可被抽象为一个复杂的数学函数,通过将历史运行数据与人工智能建模相结合,有效降低建模难度,并进一步提升模拟预测的准确性与实用性。相比传统机理模型,数据驱动方法的核心优势在于无需精确掌握复杂的生化反应机理,仅通过从历史数据中挖掘“输入-输出”之间的潜在规律,即可有效适配污水处理过程中生化反应的复杂性与

非线性特征。

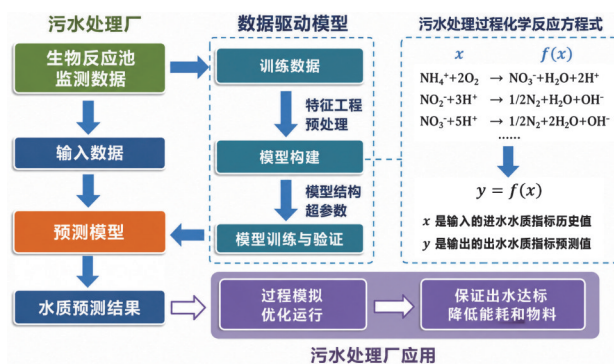


图2 基于数据驱动的生化反应模拟方法

2 生化反应模拟的传统机器学习模型

2.1 传统机器学习的类型与应用案例

传统机器学习模型注重模型学习机制的研究。目前,应用于污水处理生化反应过程水质预测的传统机器学习模型包括贝叶斯网络(BN)、决策树(DT)及其集成模型、支持向量机(SVM)等。

BN是一种基于有向无环图的概率推理模型,通过节点与有向边表达变量之间的条件依赖关系,能够直观呈现多参数间的相互影响。该模型与污水处理中多参数耦合的生化特性较为契合。Li等^[8]将BN用于改进型序批式反应器(MSBR)的建模和预测,出水总氮和总磷预测准确率在90%以上。该研究还测试了进水参数的不同状态组合对输出的影响,从而可判断出有利于高效处理的情况。尽管BN模型的预测精度未必最高,但其具备揭示参数间因果关系的潜力,更适合作为工艺诊断的辅助工具,在新建污水处理厂的初期模拟中具有一定适用性。

DT模型采用树形结构表达变量与结果之间的映射关系,结构清晰、易于理解。Shi等^[9]利用梯度提升树(GBDT)预测了厌氧/缺氧生物膜工艺的运行性能。刘子铭等^[10]基于实验数据集,采用极致梯度(XGBoost)、GBDT等算法预测膜生化反应器的膜污染情况,结果表明,XGBoost(平均绝对百分比误差MAPE=0.18)在膜污染预测中表现出更高的准确性与效率,其通过正则化策略有效缓解了过拟合问题。然而,该类模型在处理高维、大规模数据时性能往往受限,且XGBoost等算法参数较多,调优过程较为烦琐。

SVM模型在线性分类的基础上,通过核函数将数据映射到高维空间以处理非线性问题,特别适用

于样本量有限的情形。吴菁^[11]针对北京某污水处理厂数据量较小且强非线性问题,构建了多核相关向量机模型(RVM)并优化其参数,取得了较好的预测效果。Guo等^[12]基于污水处理厂进水水质和温度等小批量日监测数据构建SVM模型以预测1 d后出水TN浓度,其泛化能力优于人工神经网络(ANN)。由于SVM建模过程需要求解凸二次规划问题,计算复杂性较大,为提升计算效率,Suykens等^[13]提出了最小二乘支持向量机(LS-SVM),其可应用于序批式工艺研究工艺变量与出水COD间的非线性关系,

以及基于污水处理厂进水水质参数等数据预测出水有机物指标。不过,随着数据量的积累,SVM计算复杂度高的劣势会凸显^[14-15],因此作为过渡方案更适用于数据条件有限的中小型厂站。

2.2 传统机器学习优势与不足

总体来看,传统机器学习方法在污水生物处理过程建模中展现出良好的适用性,能够依据不同工艺条件和数据基础构建预测模型,具有一定的实用价值。

传统机器学习模型的优势与不足如表1所示。

表1 传统机器学习模型在生化反应模拟中的优势与不足

传统机器学习模型优势	传统机器学习模型不足
计算效率高:模型结构相对简单,训练与预测速度快,适合实时性要求较高的场景	处理能力有限:难以有效处理全流程、高频监测产生的大规模、高维数据
小样本适应性强:如SVM,在处理样本量有限、维度较高的数据时表现稳定	特征依赖性强:模型性能很大程度上依赖于人工特征工程的质量
部分可解释性:如BN、DT,能在一定程度上揭示变量间关系,辅助工艺理解	机理融合度低:本质上属于“黑箱”或“灰箱”,难以与深层生化反应机理结合,泛化性与机理解释能力不足
实现简便:算法成熟,开源库丰富,易于快速部署和验证	输入参数局限:现有研究多局限于水质参数,对曝气量、回流比等关键控制参数纳入不足

3 生化反应模拟的深度学习模型

3.1 深度学习模型的类型与应用案例

深度学习源自人工神经网络(ANN)的研究,于2006年由Hinton等^[16]首次提出。ANN以生物神经元为模型,给定适当的训练算法和适量的数据,可以解决多元非线性问题。

ANN在结构上呈现出多样性,从仅有一两层单向逻辑的简单网络,到包含多输入、多反馈回路和众多层次的复杂结构。这类模型能够从训练数据中自主学习和捕捉数据点间的内在关系,因而被广泛用于污水处理过程的模拟、预测与优化^[17]。正如Khataee等^[18]所强调的,ANN建模不需要任何有关水和废水处理过程中污染物的反应机理和生物动力学的额外信息。这一优势也推动了近年来种类繁多的ANN逐渐用于模拟预测污水处理的生物过程^[19]。大量研究与实践表明,神经网络模型的预测值与实际测量值吻合性较高。例如,Khatri等^[20]利用构建的前馈人工神经网络(FF-ANN)模型,基于进水水质参数,成功实现了对出水水质的预测;Kundu等^[21]采用反向传播人工神经网络(BP-ANN)模型,对序批式反应器的出水水质进行预测,显示出较高的相关性。在与响应面法等传统方法的对

比中,ANN及其优化变体如结合蛾焰优化算法的混合模型,也被证明在模拟芬顿反应、预测好氧颗粒污泥法的脱氮除磷效果等方面具有更优越的性能。

将ANN与其他计算方法相结合的混合技术思路,即混合神经网络,也为克服单一方法的局限性提供了有效途径。模糊逻辑(FL)擅长处理不确定性,已被成功用于水质预测,但其自身缺乏学习能力。将模糊推理与神经网络结合形成的模糊神经网络(FNN),则同时具备了知识表达与自我学习的能力,在实际预测中展现出比单一系统更佳的性能。例如,Wan等^[22]基于自适应神经模糊推理系统(ANFIS)开发了用于预测造纸厂污水处理SS和COD去除率的模型。遗传算法、粒子群优化算法等则常被用于优化神经网络的初始参数,以提高模型的可靠性与泛化能力,经优化后的模型预测结果往往更加准确^[23]。林佳敏等^[24]采用BP-ANN和差分整合移动平均自回归模型(ARIMA)预测污水处理厂的出水总氮,虽然这种组合模型在预测准确性上显著提升,但其计算效率的下降也限制了在线应用的可行性。

近年来,深度学习作为传统神经网络的进阶,通过解决深层网络训练中的梯度消失问题,进一步

释放了从数据中挖掘深层信息的能力。深度学习神经网络包括深度置信网络(DBN)、循环神经网络(RNN)、卷积神经网络(CNN)、堆叠自动编码器(SAE)网络等。其中,RNN及其改进型——长短期记忆网络(LSTM),因能有效处理时间序列数据和长期依赖关系,被广泛用于预测污泥体积指数、出水含氮化合物浓度等动态指标^[25-26]。此外,CNN凭借其强大的特征提取能力,常与LSTM或门控递归单元(GRU)等模型结合,形成CNN-LSTM-Attention^[27]、CNN-BiLSTM-Attention^[28]、CNN-GRU^[29]等复合架构。这些模型通过引入注意力机制、滑动窗口或贝叶斯优化等技术,在预测出水COD、SS等关键水质参数时,不仅实现了更快的预测速度和更高的精度,也展现出更优的泛化能力。同时,堆叠去噪自

动编码器(SDAE)等深度网络模型具有优异的特征提取能力和更好的泛化性^[30],在处理带有测量误差的原始水质数据时,其预测表现也优于传统的浅层神经网络和SVM等模型。总体来看,深度学习模型的演进主要围绕对时间序列特性的优化和对高维特征的提取两大方向展开。

3.2 深度学习模型的优势与不足

在解决污水处理中复杂的生化反应问题方面,深度学习模型的核心优势在于能够充分利用污水处理厂运行中积累的大量数据进行自适应学习,无需了解所有内在的生化机理,且在实践中被证实具有优秀的预测能力。

深度学习模型在生化反应模拟中的优势与不足如表2所示。

表2 深度学习模型在生化反应模拟中的优势与不足

深度学习模型优势	深度学习模型不足
强大的表征学习能力:能自动从原始数据中提取高层次、抽象的特征,减少对人工特征工程的依赖	数据量与质量依赖:需要大量高质量数据,小数据场景下容易过拟合,对缺失值和噪声敏感
卓越的时序建模能力:如LSTM、GRU,能有效捕捉生化反应过程的动态时序依赖和长期记忆	“黑箱”特性显著:模型决策过程极度不透明,运行人员难以理解和信任,妨碍工程应用
高精度预测性能:在处理大规模、非线性、高维度数据时,通常能取得比传统机器学习更优的预测精度	计算资源消耗大:模型结构复杂,训练需要大量的计算资源和时间
架构灵活可扩展:易于形成CNN-LSTM、注意力机制等复合模型,以针对特定问题优化性能	可控性输入缺失:与传统机器学习类似,多数研究未系统地将可控操作参数作为模型输入,限制其直接用于优化控制

在深度学习模型的应用中,之前研究神经网络选择的输入参数多集中于溶解氧和各类进水水质参数,较少系统性地纳入曝气量、回流比等直接影响生化环境的可控操作参数,导致模型更侧重于“预测”出水水质,而难以直接输出用于工艺调控的优化策略,限制了其在实时优化控制中的应用深度。

4 生化反应模拟面临的挑战

传统机器学习与深度学习方法在污水处理厂生化反应模拟中通过不同的输入/输出设计、应用场景选取、数据收集可以构建不同结构的模型,并实现良好的预测效果。其中,随着深度学习技术的突飞猛进,其在处理生化反应较为复杂的输入/输出情况时具有更好的适应性与灵活性,应用前景较为广阔,但在模型输入、可解释性、人工智能模型自身发展等方面尚需开展更深入的研究。

4.1 人工智能模型输入的确定

对于数据驱动模型而言,不同特征参数的输入

直接决定了模型对数据的理解和预测能力。在污水处理生化反应中,选择适当的输入参数组合,能够使模型更好地理解历史数据的含义和规律,从而获得更准确的预测结果。

① 考虑模型可控性输入

对现有有关机器学习和深度学习研究中使用模型的输入和输出进行总结^[14-15,21-22,25,30],具体如表3所示。由表3可知,当前大多数预测模型主要聚焦于建立进水与出水水质之间的对应关系,而未能充分纳入曝气量、内外回流比等关键工艺控制参数。模型的输入变量多局限于温度、进水水质和溶解氧等监测指标,对实际运行调控至关重要的操作参数却鲜有涉及。这一局限直接制约了模型在实时优化控制中的应用潜力。需要指出的是,调控曝气量与药剂投加量是实现节能降耗的关键手段。已有研究表明,将控制参数作为机器学习模型的输入,能够有效提升模型的可控性^[31]。同样,剩余污泥排放量的优化对于污水处理厂的绿色运行具有重要

意义,然而在现有数据驱动模型中,这一参数尚未得到系统考虑。

由于生化反应系统中各参数之间存在复杂的

耦合关系,如何科学地引入控制参数,以及这些参数对模型精度与可控性的具体影响机制,仍需后续研究的深入探索。

表 3 不同机器学习、深度学习模型的输入与输出

学习方法	预测模型输入	预测模型输出
PSO-LASSVM ^[15]	进水流量,进水 SS、COD、NH ₃ -N、TN、TP、BOD ₅ 等水质参数	出水 COD、NH ₃ -N、TN、TP
ANN 和 SVM ^[14]	月份、温度等环境因素,进水 COD、TN 等水质参数	1 d 后出水 TN
ANN ^[21]	进水 COD、NH ₄ ⁺ -N 等水质参数,微生物浓度、pH、DO 等运行参数	COD、NH ₄ ⁺ -N 去除率
ANFIS 和 ANN ^[22]	进水 COD、SS 等水质参数,进水流量,温度等环境因素	出水 COD 和 SS
前馈神经网络(FFNN) ^[25]	进水 COD 等水质参数,表观气速和缺氧时间等运行参数	出水 TN
LSTM ^[30]	进水 COD、TN 等水质参数,DO、混合液悬浮固体(MLSS)等生化反应参数	出水 TN

② 污水处理厂水质数据获取

在实际污水处理厂中,数据驱动模型的构建面临输入参数有限与训练数据不足的挑战。与机理模型研究或小试不同,多数污水处理厂监测指标覆盖不全,未能实现生化反应池出水水质数据全覆盖,且采集到的数据质量普遍较低,存在大量缺失值与异常记录。训练数据量不足会削弱模型的泛化能力,影响其拟合效果与应用稳定性。因此,有必要研究有效的数据获取与清洗方法,以提升模型在实际场景中的准确性与可靠性。

在数据获取方面,可依托逐步普及的在线传感器与监测设备,构建完整的仪表系统,选用性能更优的监测手段,从而提升源头数据的可靠性,如在生化反应池的关键廊道、不同水深位置增设溶解氧、氧化还原电位、混合液悬浮固体等监测点,构建立体化监测网络;在数据分析与清洗环节,可采用插值方法或基于机理公式的外推法来填补缺失数据,如 Asami 等^[32]将数据挖掘模型用于估计缺失值,显示出良好的鲁棒性与泛化能力;针对不同类型的数据缺失,需区分随机缺失与非随机缺失,并采取差异化策略;针对噪声与异常值,则可借助数据降噪与滤波等技术进行净化,建立“阈值筛选-统计检验-机理验证”三级净化机制,即基于物理阈值剔除越界数据,采用孤立森林或变分自编码器检测潜在异常,最后通过质量平衡校验确保数据合理性。但是,应用于污水处理厂大批量时序数据自动处理的通用工具较为缺乏,相关方法有待进一步开发。

4.2 黑箱模型可解释性的完善:与可解释模型相结合

对于污水处理厂生化反应过程的模拟预测,与机理模型相比,神经网络、传统机器学习模型等具有更好的预测性能,但它们本质是不透明的黑箱,

可解释性较差,制约了 AI 模型在模型解释性重要领域中的使用。因此完善数据驱动模型的可解释性,是推动其应用的重要因素。

对于生化反应模拟而言,机理模型能够获取反应过程与系统变化的原因,可直接解释模拟结果。但是,数据驱动模型缺失污水输入与输出间直观的因果,人工智能模型存在无法正确捕捉反应过程特征的风险。机理模型可以提供生化反应的化学反应方程式,用于指导数据驱动模型的构建。此外,机理模型还可以提供更多的生化反应参数,以更好地理解 and 解释预测结果。将机理模型包含的质量守恒、反应动力学等第一性原理嵌入数据驱动模型,可使模型学习过程符合科学规律,输出结果具备物理一致性,从而增强可信度。已有部分学者开展了以上研究的初步探索,如殷逢俊等^[33]提出了结合机理模型与数据驱动模型的一种理论思路,其可解释性有理论基础。其他解释性较好的模型如专家系统,其内部含有大量污水处理领域专家水平的经验,能够根据系统知识进行推理和判断。Dürrenmatt 等^[34]尝试将专家知识库引入机器学习模型,以提高模型的可解释性,并在应用于长期预测时取得了更好的精度。此外,可解释架构设计(如注意力机制可视化、图神经网络边权重解释)以及事后解释技术等均为黑箱模型提供了多样化的解释。

4.3 不同模型的集成与联用

已有研究^[14-15,21-22,25,27-30,35](见表 4)表明,相较于单一模型,联合使用多种机器学习方法能够显著提升预测准确性。模型的性能受到输入变量、输出目标、处理工艺及数据集规模等多种因素的影响。目前,尚无任何一种模型能在泛化能力、求解速度与预测精度等方面占绝对优势,因此开发适用场景广

泛、性能稳定的复合模型已成为重要的研究方向。通过加权平均、堆叠等集成方法融合多个模型的预测结果,可以进一步提升模型的精确度与可靠性,但更高质量的模型集成方案仍有待深入探索。

表 4 不同机器学习模型研究结论

机器学习方法	研究结论
PSO-LASSVM ^[15]	PSO 优化后效果优于传统 SVM,但预测精度仍待进一步提高
ANN 和 SVM ^[14]	针对本研究的小样本量,SVM 泛化能力优于 ANN,但 SVM 难以获得机理解释
ANN ^[21]	对污水处理厂未知数据集进行测试时能够很好地泛化
ANFIS 和 ANN ^[22]	将可控参数代替溶解氧作为模型输入,提高了模型的可控性
FFNN ^[25]	ANFIS 采用优化模糊规则提高了传统神经网络的性能
LSTM ^[30]	预测较为精准,深度学习适合用于污水处理中动态的长时间序列数据
CNN-LSTM ^[27-28,35]	CNN-BiLSTM-Attention 模型表现最佳,能够有效捕捉数据中的局部特征与长期依赖关系,进一步提升预测准确性
CNN-GRU ^[29]	CNN-GRU 模型具有更好的泛化能力和预测性能,且在复杂工况下展现出更强的鲁棒性

4.4 模型性能比较、工艺适用性与构建实践要点

基于文献调研,模型的普遍性能、最佳适用工艺及实践总结如下:

① 模型的普遍性能与工艺适用性

目前,数据驱动模型对出水 COD、NH₄⁺-N、TN 等关键水质参数的预测已能达到较高的精度。传统机器学习在数据量适中、特征明显的场景下表现稳健,尤其适用于连续流工艺的稳态或准稳态模拟。深度学习模型在处理间歇式、强动态时序特性的工艺时,因其能捕捉周期性的进水、反应、沉淀、排水阶段,展现出显著优势。对于涉及复杂物理-生物耦合过程的工艺,CNN 与 LSTM 的结合模型在预测膜污染(跨膜压差)方面表现突出,能有效提取空间特征(如污泥絮体形态)与时间特征。

② 模型构建实践中的关键注意事项

数据基石即数据质量决定模型上限,需建立规范的数据采集、清洗与预处理流程。对于缺失值,可采用基于机理的插值或机器学习方法进行填补,对于异常值,需结合工艺知识进行甄别与处理;特征工程除了常规水质和运行参数外,应考虑引入衍生特征,例如污染物负荷率(COD 负荷)、各反应段的污泥龄(SRT)、碳氮比(C/N)等;模型选择流程不应盲目追求复杂,建议采用从简到繁的策略,即先使用线性模型或决策树建立基线,再用随机森林、XGBoost 等集成方法,最后在数据充足且问题复杂时尝试深度学习,同时需结合交叉验证确保泛化能力;评估指标多元化,除均方误差(MSE)、MAPE 外,应增加对预测结果区间的估计(如使用分位数回归、贝叶斯神经网络)和模型鲁棒性(如对输入扰动

的稳定性)的评估。

5 污水处理厂智能化运行展望

工程实践表明,污水处理厂的智能化运行技术实施目前已从概念验证进入规模应用阶段,国内外部分污水处理厂构建了数字孪生系统,已实现实时异常诊断、场景模拟决策与提前预测。目前,污水处理厂的智能化运行案例覆盖数字孪生、AI 优化、智能巡检等多元场景,展示了智能化运行的工程可行性,但在跨厂迁移性、极端工况鲁棒性、中小厂经济性方面仍需持续优化。综上所述,基于数据驱动的污水处理厂生化反应模型作为先进的建模方法受到广泛关注和研究。该类模型的应用必将大幅推动污水处理厂智能化运行相关技术的研究与实际应用。除了前述针对生化反应过程自身的模拟模型进行优化和提升外,基于反应过程模拟的污水处理厂工艺控制模型是真正实现污水处理厂智能化运行的另一个关键。其中,强化学习算法(RL)作为一种能够通过自主与环境交互来学习最优策略的 AI 方法,在污水处理过程优化中展现出独特价值。该算法凭借其强大的通用性和自主学习能力,在处理复杂动态过程时表现出突出的自主优化能力。研究与实践表明,将其用于构建智能曝气控制框架^[36-37],或与贝叶斯优化等方法结合调控关键运行参数,已在仿真环境中取得显著的节能与运营成本降低效果^[38]。尽管相关研究仍局限于模拟环境,与大规模工程应用尚有差距,但如何将深度强化学习与生化反应过程的数据驱动模拟有机结合,将为污水处理厂智能化运行的实际工程应用提供新的发展思路。

6 结论

本文系统综述了AI方法在污水处理厂生化反应模拟中的研究进展、应用现状与面临挑战。首先,分析了从依赖明确机理的模型,到以传统机器学习和深度学习为代表的驱动模型,阐述了AI方法通过从历史数据中学习复杂非线性关系,可以显著降低建模难度,并在水质预测精度上表现出巨大潜力。其次,研究比较了模型的性能与适用性,传统机器学习在小样本和连续流工艺中应用成熟,深度学习凭借其强大的时序建模和特征提取能力,在动态性强或机理复杂的工艺中表现更优,预测精度普遍较高。最后,提出污水处理厂智能化运行的核心挑战,未来的突破在于推动数据驱动与过程机理的深度融合、构建可控可解释的智能模型框架,并实现从预测到实时优化决策的跨越,从而为污水处理行业迈向智慧化、精准化和低碳化运行提供坚实支撑。

参考文献:

- [1] Gurung K, Tang W Z, Sillanpää M. Correction to: unit energy consumption as benchmark to select energy positive retrofitting strategies for Finnish wastewater treatment plants (WWTPs): a case study of Mikkeli WWTP[J]. *Environmental Processes*, 2018, 5(3): 931.
- [2] Big Earth Data Program Chinese Academy of Sciences. Report on Big Earth Data in Support of the Sustainable Development Goals [R]. Beijing: Big Earth Data Program Chinese Academy of Sciences, 2019.
- [3] Elawwad A, Zaghoul M, Abdel-Halim H. Simulation of municipal-industrial full scale WWTP in an arid climate by application of ASM3 [J]. *Journal of Water Reuse and Desalination*, 2017, 7(1): 37-44.
- [4] Cote M, Grandjean B P A, Lessard P, et al. Dynamic modelling of the activated sludge process: improving prediction using neural networks [J]. *Water Research*, 1995, 29(4): 995-1004.
- [5] Fan M Y, Hu J W, Cao R S, et al. A review on experimental design for pollutants removal in water treatment with the aid of artificial intelligence [J]. *Chemosphere*, 2018, 200: 330-343.
- [6] Ahmed A N, Othman F B, Afan H A, et al. Machine learning methods for better water quality prediction [J]. *Journal of Hydrology*, 2019, 578: 124084.
- [7] Long S, Zhao L, Liu H B, et al. A Monte Carlo-based integrated model to optimize the cost and pollution reduction in wastewater treatment processes in a typical comprehensive industrial park in China [J]. *Science of the Total Environment*, 2019, 647: 1-10.
- [8] Li D, Yang H Z, Liang X F. Prediction analysis of a wastewater treatment system using a Bayesian network [J]. *Environmental Modelling & Software*, 2013, 40: 140-150.
- [9] Shi S, Xu G R. Novel performance prediction model of a biofilm system treating domestic wastewater based on stacked denoising auto-encoders deep learning network [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2018, 347: 280-290.
- [10] 刘子铭. 基于XGBoost混合模型的MBR膜污染预测研究[D]. 天津: 天津工业大学, 2019.
- [11] 吴菁. 污水处理非稳态特性下核建模方法关键问题的研究[D]. 广州: 华南理工大学, 2020.
- [12] 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.
- [13] Suykens J A K, Vandewalle J. Least squares support vector machine classifiers [J]. *Neural Processing Letters*, 1999, 9(3): 293-300.
- [14] Guo X P, Fan L P. COD prediction for SBR batch processes based on MKPCA and LSSVM method [C]// Liu D, Zhang H G, Polycarpou M, et al. *Advances in Neural Networks-ISNN 2011 (Proceedings of 8th International Symposium on Neural Networks)*. Germany: Springer, 2011: 130-135.
- [15] 赖剑人. 基于PSO-LSSVM水质预测污水处理控制系统研究与实现 [D]. 杭州: 浙江工业大学, 2020.
- [16] Hinton G E, Osindero S, Teh Y. A fast learning algorithm for deep Belief nets [J]. *Neural Computation*, 2006, 18(7): 1527-1554.
- [17] Zhang Y Y, Gao X, Smith K, et al. Integrating water quality and operation into prediction of water production in drinking water treatment plants by genetic algorithm enhanced artificial neural network [J]. *Water Research*, 2019, 164: 114888.
- [18] Khataee A R, Kasiri M B. Modeling of biological water and wastewater treatment processes using artificial neural networks [J]. *CLEAN-Soil Air Water*, 2011, 39(8): 742-749.
- [19] Zhao L, Dai T J, Qiao Z, et al. Application of artificial intelligence to wastewater treatment: a bibliometric analysis and systematic review of technology, economy,

- management, and wastewater reuse [J]. *Process Safety and Environmental Protection*, 2020, 133: 169-182.
- [20] Khatri N, Khatri K K, Sharma A. Prediction of effluent quality in ICEAS-sequential batch reactor using feedforward artificial neural network [J]. *Water Science and Technology*, 2019, 80(2): 213-222.
- [21] Kundu P, Debsarkar A, Mukherjee S. Artificial neural network modeling for biological removal of organic carbon and nitrogen from slaughterhouse wastewater in a sequencing batch reactor [J]. *Advances in Artificial Neural Systems*, 2013, 2013: 1-15.
- [22] Wan J Q, Huang M Z, Ma Y W, et al. Prediction of effluent quality of a paper mill wastewater treatment using an adaptive network-based fuzzy inference system [J]. *Applied Soft Computing*, 2011, 11(3): 3238-3246.
- [23] Huang M Z, Han W, Wan J, et al. Multi-objective optimisation for design and operation of anaerobic digestion using GA-ANN and NSGA-II [J]. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 2016, 91(1): 226-233.
- [24] 林佳敏, 陈金良, 林晶晶, 等. BP神经网络和ARIMA模型对污水处理厂出水总氮浓度的模拟预测[J]. *环境工程技术学报*, 2019, 9(5): 573-578.
- [25] Zhao Z, Wang Z, Yuan J, et al. Development of a novel feedforward neural network model based on controllable parameters for predicting effluent total nitrogen [J]. *Engineering*, 2021, 7(2): 195-202.
- [26] Wongburi P, Park J K. Prediction of sludge volume index in a wastewater treatment plant using recurrent neural network [J]. *Sustainability*, 2022, 14(10): 6276.
- [27] Li Y, Kong B, Yu W W, et al. An attention-based CNN-LSTM method for effluent wastewater quality prediction [J]. *Applied Sciences*, 2023, 13(12): 7011.
- [28] Liu L B, Tian X Y, Ma Y G, et al. Online soft measurement method for chemical oxygen demand based on CNN-BiLSTM-Attention algorithm [J]. *PLOS One*, 2024, 19(6): e0305216.
- [29] Yang C Y, Guo Z Y, Geng Y, et al. Optimized deep learning models for effluent prediction in wastewater treatment processes [J]. *Environmental Science: Water Research & Technology*, 2024, 10(5): 1208-1218.
- [30] Yaqub M, Asif H, Kim S, et al. Modeling of a full-scale sewage treatment plant to predict the nutrient removal efficiency using a long short-term memory (LSTM) neural network [J]. *Journal of Water Process Engineering*, 2020, 37: 101388.
- [31] 高嵩, 邱勇, 孟凡琳, 等. 污水处理工艺数据分析技术的现状与趋势[J]. *环境工程*, 2022, 40(6): 194-203.
- [32] Asami H, Golabi M, Albaji M. Simulation of the biochemical and chemical oxygen demand and total suspended solids in wastewater treatment plants: data-mining approach [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2021, 296: 126533.
- [33] 殷逢俊, 徐泽宇, 刘鸿. 基于机理模型与数据模型融合的污水处理智能控制系统构建思路[J]. *环境工程*, 2022, 40(6): 138-144.
- [34] Dürrenmatt D J, Gujer W. Data-driven modeling approaches to support wastewater treatment plant operation [J]. *Environmental Modelling & Software*, 2012, 30: 47-56.
- [35] Khozani Z S, Ehteram M, Mohtar W H M W, et al. Convolutional neural network-multi-kernel radial basis function neural network-salp swarm algorithm: a new machine learning model for predicting effluent quality parameters [J]. *Environmental Science and Pollution Research*, 2023, 30(44): 99362-99379.
- [36] Chen K H, Wang H C, Valverde-Pérez B, et al. Optimal control towards sustainable wastewater treatment plants based on multi-agent reinforcement learning [J]. *Chemosphere*, 2021, 279: 130498.
- [37] Croll H C, Ikuma K, Ong S K, et al. Reinforcement learning applied to wastewater treatment process control optimization: approaches, challenges, and path forward [J]. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 2023, 53(20): 1775-1794.
- [38] Zhu Z A, Dong S K, Zhang H, et al. Bayesian optimization-enhanced reinforcement learning for self-adaptive and multi-objective control of wastewater treatment [J]. *Bioresource Technology*, 2025, 421: 132210.
- 作者简介:** 沈浩(1977—), 男, 浙江宁波人, 学士, 高级工程师, 主要从事城市污水系统智能化运行方面的工作。
E-mail: sh_nbwater@126.com
收稿日期: 2025-12-08
修回日期: 2026-03-04

(编辑: 丁彩娟)