

研究论文

DOI: 10.11949/0438-1157.

基于注意力增强梯度的径向基函数神经网络颗粒态有机氮预测研究

宋贞海¹, 王功明², 赵赫楠², 曹亚新³

(¹ 曲阜师范大学继续教育学院, 山东 曲阜 273165; ² 北京工业大学信息科学技术学院, 北京 100124; ³ 曲阜师范大学图书馆, 山东 曲阜 273165)

摘要: 针对水环境颗粒态有机氮浓度预测问题, 本文提出了一种基于双尺度注意力机制的自适应径向基函数神经网络 (Adaptive radial basis function neural network with dual-scale attention, ARBFNN-DSA); 首先设计了一种具备输入特征注意力机制的数据驱动型RBFNN来提高有效特征的提取能力; 其次将注意力机制的差异化权重与核函数的中心和宽度相关联, 使核函数具备较好的自适应能力, 从而实现对输入数据分布和特征重要性的自适应定量评估; 同时利用互信息度量方法分析ARBFNN-DSA输入输出之间的敏感性, 从而量化关联变量对PON状态演化的因果贡献程度; 最后将ARBFNN-DSA模型应用于山东省青岛地区的大沽河流域PON浓度的软测量, 结果显示ARBFNN-DSA模型不仅实现了对PON动态特性的精确建模与预测, 还能为潜在的污染源提供诱因变量的定量分析。相较于对比模型SODBN-AAL和EDBN, ARBFNN-DSA在预测精度和泛化性能上分别提高了16.98%和13.39%以上。

关键词: PON预测; RBF神经网络; 双尺度注意力机制; 软测量模型; 水环境

中图分类号: TP 183

文献标志码: AA

文章编号: 0438-1157 (XXXX) XX-0001-10

Research on particle organic nitrogen prediction using radial basis function neural network with enhanced attention gradient

SONG Zhenhai¹, WANG Gongming², ZHAO Henan², CAO Yaxin³

(¹ School of Continuing Education, Qufu Normal University, Qufu, 273165, Shandong, China; ² School of Information Science and Technology, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China; ³ Library, Qufu Normal University, Qufu 273165, Shandong, China)

Abstract: For the problem of predicting the particle organic nitrogen (PON) concentration in water environment, this paper proposes an adaptive radial basis function neural network with dual-scale attention (ARBFNN-DSA); Firstly, a data-driven RBFNN with an input feature attention mechanism is designed to enhance the extraction ability of effective features; Secondly, the differentiated weights of the attention mechanism are associated with the center and width of the kernel function, enabling the kernel function to have better adaptive ability, thereby achieving the adaptive quantitative evaluation of the input data distribution and feature importance; At the same time, the mutual information measurement method is used to analyze the sensitivity between the input and output of the ARBFNN-DSA, thereby quantifying the causal contribution degree of the associated variables to the evolution

收稿日期: 2026-06-25 修回日期: 2026-07-20

通信作者: 王功明(1987—),男,博士,教授, wanggm@bjut.edu.cn

第一作者: 宋贞海(1975—),男,硕士,副教授, css_tsg@126.com

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(62373018); 中国博士后科学基金特别资助项目 (2025T180479)

引用本文: 宋贞海, 王功明, 赵赫楠, 曹亚新. 基于注意力增强梯度的径向基函数神经网络颗粒态有机氮预测研究[J]. 化工学报, XXXX, XX(XX): 1–10

Citation: SONG Zhenhai, WANG Gongming, ZHAO Henan, CAO Yaxin. Research on particle organic nitrogen prediction using radial basis function neural network with enhanced attention gradient[J]. CIESC Journal, XXXX, XX(XX): 1–10

of the PON state; Finally, the ARBFNN-DSA model is applied to the soft measurement of PON concentration in the Dagū River Basin of Shandong province. The results show that the ARBFNN-DSA model not only achieves accurate modeling and prediction of PON dynamics, but also provides quantitative analysis of the potential pollution source variables. Compared with the comparative models SODBN-AAL and EDBN, ARBFNN-DSA has improved the predictive accuracy and generalization performance by 16.98% and 13.39%, respectively.

Keywords: PON prediction; RBF neural network; dual-scale attention; soft-measuring model; water environment

引 言

水环境是水生态系统的重要组成部分,也是地球生命赖以生存的基础。水环境不仅为人类提供饮用水并支撑工农业发展,还能调节气候、净化环境。在水环境体系中,河流及其流域等地表水体是关键组成部分。然而,受人类活动与工业生产影响,河流水环境质量持续恶化。因此,对河流水质进行精准预测及分析^[1-4],是实现水环境科学管理的关键。

河流水环境状态演化具有强非线性、多因素耦合及无向开环特性,是一个不可控因素较多的复杂动态过程,例如颗粒态有机氮(PON)的状态演化便是一个难以精确跟踪与预测的过程。近年来,机理模型因具备清晰的物理化学过程与较高的可解释性,被视为水质预测的可靠方法。但这类模型需要基于水体中的物理、化学及生物过程开展研究与分析,导致计算复杂度较高。为提高对水质非线性特征的拟合效率,近年来数据驱动的神经网络被广泛研究并应用于水质建模和预测。Wang等人^[5]构建了一种数据驱动的深度神经网络并基于实际水质数据进行训练与迭代,从而实现了水质状态的软测量及未来趋势的预测,为关键水质指标的潜在调控提供了重要依据。Bi等人^[6]提出了一种融合深度学习与长短期记忆神经网络(LSTMNN)的混合模型用于水质预测。实验结果表明,经过深度学习优化的长短期记忆网络在河流水质预测中效果显著^[7]。Chang等人^[8]提出了一种基于小波变换与数据嵌入模块的Mamba模型并将其应用于水质建模与预测,该模型通过提取多尺度特征实现了对水质状态的精确解析与软测量^[9]。尽管以上数据驱动模型及其变体模型在预测效率与智能化水平上均优于机理模型^[3,10],但在预测精度与可解释性方面仍表现欠佳。主要挑战体现在以下几个方面:

(1) 数据驱动的预测模型在训练与预测过程中的性能受限于数据规模与效率。由于从分布式传

感器采集的数据不可避免地会包含噪声,因此数据驱动模型势必存在不确定性^[11]。为应对不确定性,重复验证及产生的计算成本难以避免,不仅增加了计算复杂度,也降低了运行效率。

(2) 受传感器数据不确定性与噪声干扰的影响,数据驱动模型的精度往往低于机理模型^[12]。主要原因在于利用数据驱动的方法选取模型输入变量缺乏可解释性,且极易受数据噪音和非平稳性的影响,这也是数据驱动的软测量面临的核心挑战之一。

(3) 现有基于机器学习的水质预测模型结构通常过于复杂(为提升表征能力)^[5,13],其固定的学习模式降低了模型的自适应能力与精度,导致训练耗时且误差较大,进而影响了水质预测效果。

如何解决以上挑战是进一步提升水质预测精度与效率的迫切需要。为增强深度神经网络的学习效率,Zhuang等人^[14]提出了一种基于主动自适应学习的动态优化方法,该方法用于提升深度置信网络对输入数据的主动学习能力,以降低水质预测中的计算复杂度。Cao等人^[15]设计了一种具有权值记忆机制的径向基函数神经网络(RBFNN),其网络参数通过多步梯度信息进行训练。这种基于多步梯度信息的RBFNN在水质预测及非线性系统建模中展现出良好的性能^[16]。Tan等人^[17]提出了一种基于多特征融合机制的Mamba模型,旨在动态提取有效特征并进一步提升水质预测的精度。然而,现有的优化方法及多特征融合机制多为独立模块,未能平衡预测精度与计算复杂度之间的关系。但在水质软测量任务中,软测量模型应具备简易化、训练高效、特征学习能力强和自适应能力突出的优势^[18]。研究表明,RBFNN模型具有可解释性较好、结构简单、全局稳定性较好等优点,但学习精度(数据表征能力)相对较差,主要原因在于关键参数(中心、宽度、输出权值)在逼近复杂、非平稳、多因素耦合数据的学习过程中很难找到最优解。同时,RBFNN模型的固定核函数参数在数据动态输入、动

力学特性非平稳变化过程中也会影响对颗粒态有机氮动态特性的逼近精度。

基于以上分析,本文提出了一种基于双尺度注意力机制的自适应径向基函数神经网络(ARBFNN-DSA)用于河流水体PON软测量建模及预测。本文设计的方法将注意力权重参数融合到RBF神经网络的核函数设计过程中,实现了RBF神经网络在数据处理、特征学习的输入端和学习过程端的自适应动态匹配。因此,基于自适应核函数输出信息设计了具有注意力增强的复合损失函数,并由此给出了注意力增强梯度,进而实现了较为精确的参数更新(有监督学习)和预测效果,主要贡献如下:

(1)通过分析PON状态演化的机理模型,确定了ARBFNN-DS软测量模型的输入变量,提高了软测量模型输入输出因果关联的可解释性。

(2)该算法不仅对输入数据分布和特征重要性进行了定量评估,还实现了对核函数的自适应动态设计与优化,提高了PON浓度预测的精度和效率。

(3)通过互信息度量法定量分析了ARBFNN-DSA软测量模型输出对输入变量的敏感度,量化了关联变量对PON状态演化的因果关联度。

(4)将ARBFNN-DSA软测量模型用于山东省青岛地区大沽河流域PON浓度预测中,结果显示,ARBFNN-DSA相较于对比模型在预测精度和泛化性能上分别提高了16.98%和13.39%以上。

1 问题描述

1.1 PON的动态特性

在河流水环境中,PON浓度是评价水环境治理的关键指标,因此研究PON浓度演化过程是分析其动态特性的前提。描述PON浓度演化和动力学特性的机理模型可以表示为:

$$\frac{\partial \text{PON}}{\partial t} = \sum (\text{FN} \cdot \text{BM} + \text{FP} \cdot \text{PR}) \cdot \text{AN} \cdot \text{AB} - K_{\text{PON}} \cdot \text{PON} - \frac{S_{\text{PON}} \cdot \text{PON}}{H} + \frac{E_{\text{PON}}}{V} \quad (1)$$

其中,各参数的含义如表1所示。公式(1)右側第一项表示颗粒态有机氮的所有输入生成项,主要包括底泥内源释放、藻类初级生产、絮状生成等过程;第二项和第三项表示颗粒态有机氮的所有消耗迁出项,主要包括微生物矿化、光降解、重力沉降、生物摄食、水流稀释等过程;第四项表示颗粒态有机氮的外部负荷,主要包括陆源输入、上游输入等水体系统边界以外的外源性输入。

表1 公式(1)中参数的定义

Table 1 Definitions of parameters in Eq. (1)

变量	定义	单位
FN	藻类代谢氮中PON所占比例	--
BM	藻类的基础代谢率	d ⁻¹
FP	捕食氮中PON所占比例	--
PR	藻类被捕食速率	d ⁻¹
AN	藻类种群的氮碳比	--
AB	藻类的生物量	g/m ³
K _{PON}	PON的水解速率	d ⁻¹
S _{PON}	PON的沉降速度	m/d
E _{PON}	PON的外部负荷	g/d
H	平均水深	m
V	水体体积	m ³

问题1:如式(1)和表1所示,PON的演化过程实际上是一个具有非平稳性、多因素耦合和外部干扰的复杂非线性系统,仅依靠机理模型或基本神经网络,PON演化过程不可能得到精确的近似结果。因此,有必要将数据驱动模型与机理模型相结合,以深入理解并拟合其复杂的动态特性。

1.2 RBFNN模型

径向基函数神经网络(RBFNN)是一类以局部核驱动激活函数为特征的前馈神经网络,已被广泛应用于复杂系统的时序数据建模、关键参数预测等场景。通常,RBFNN包含三层数据映射结构,即输入层、径向基函数层和输出层,结构如图1所示。RBF层的输出可表示为:

$$h_j(t) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}(t) - \mathbf{c}_j(t)\|^2}{2\sigma_j^2}\right), j = 1, 2, \dots, m \quad (2)$$

其中, $\mathbf{c}_j = [c_{j1}, c_{j2}, \dots, c_{jn}]$ 和 $\sigma = [\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m]$ 表示核函数的中心和宽度。RBFNN的最终输出计算为:

$$\hat{y}(t) = \sum_{j=1}^m w_j h_j(t), j = 1, 2, \dots, m \quad (3)$$

式中, w_j 为连接第 j 个隐层神经元与输出神经元的权值参数, m 表示径向基函数节点的数量。训练过程的目标是对参数集 $\Psi = \{\mathbf{c}, \sigma, \mathbf{w}\}$ 进行优化求解。给定训练数据后,该参数集可按如下方式更新:

$$\Psi(t+1) = \Psi(t) + \eta \frac{\partial J(t)}{\partial \Psi(t)}, J(t) = \frac{1}{2} (\hat{y}(t) - y(t))^2 \quad (4)$$

其中, η 和 $y(t)$ 表示学习速率和期望输出, $J(t)$ 是提供梯度信息和参数演化方向的成本函数。

问题2:根据公式(2)–(4),RBFNN直接在原始数据样本上进行训练,并采用固定的学习率,通过重

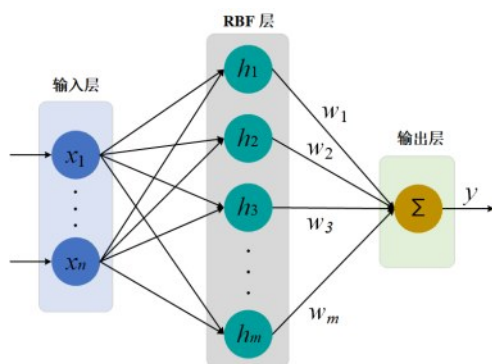


图1 RBFNN模型结构

Fig. 1 Structure of RBFNN model

复的单次学习方式不断更新。这种基于粗差的扩展学习策略更适用于结构简单的数据集或变化平缓的非线性系统。然而,在建模PON与其相关变量之间的动态特性时,目标函数具有非平稳性,系统存在多因素耦合和外部干扰,导致RBFNN难以充分发挥其性能,面临诸多挑战。

问题3: RBF层的核函数通常是固定不变的,而PON的输入数据是动态变化的,因此不变的核函数难以适应变化的输入数据,从而降低了在非平稳条件下对PON的逼近精度。

1.3 RBFNN预测PON所面临的挑战

如**问题1-3**所述,利用RBFNN对PON浓度进行预测时存在许多问题和挑战,主要体现如下:

(1) 数据采集过程中的不确定性与噪声:在通过传感器采集数据时,数据样本中不可避免地会混入噪声与不确定性因素。RBFNN作为一种数据驱动模型,若直接将未经过特征提取的原始数据输入网络,将难以获得理想的建模与预测性能。

(2) 高度非线性和非平稳性: PON的动态演化过程受多种生化反应的共同影响,这些反应之间存在复杂的非线性相互作用,并呈现出非平稳特性。在此情况下,RBFNN难以对这种复杂动态行为进行有效逼近与预测,这构成了主要挑战之一。

(3) 多因素耦合效应: PON的动态变化是物理、化学和生物过程共同作用的结果,其中各种环境因素相互影响。具体而言, $\partial \text{PON} / \partial t$ 受到表1中所列相互耦合参数的影响。因此,耦合效应加剧了动态特性的复杂性,从而给建模与预测过程带来了困难。

(4) 非凸目标函数难以求解: 受复杂动态特性的影响, PON建模与预测过程中构建的目标函数极可能呈现非凸性。然而,现有RBFNN的优化求解方法

多采用基于简单梯度的反向传播算法,该类算法在处理此类复杂且非凸的目标函数时表现欠佳。

(5) 人类活动与政策的影响: 水环境监测与调控过程往往涉及人类行为与决策,而后者主要受人类活动及管理政策的影响。在此背景下,预测模型的设计将面临更多约束,从而进一步增加了基于RBFNN进行PON预测的难度。

上述挑战对基于RBFNN的预测模型提出了更高要求,尤其是在非线性拟合能力、小样本适应性、抗干扰能力以及自适应学习能力等方面。

2 ARBFNN-DSA框架设计

为了克服RBFNN在PON建模与预测中的困难,本文提出了ARBFNN-DSA模型。通过引入输入特征注意力机制,为不同重要性的输入特征分配相应的权重,并将这些注意力权重与核函数的中心及宽度相关联,从而提升模型的自适应性和精度。

2.1 输入特征注意力层

输入特征注意力层的任务是利用差异化权重对输入特征的重要性进行评估。若将输入特征向量记为 $\mathbf{x}(t)$, 则可通过一个可学习注意力网络,计算出输入特征的注意力得分,具体公式如下:

$$s_i = \omega^T \cdot \tanh(\omega x_i + b), i = 1, 2, \dots, n \quad (5)$$

式中, b 为偏置项, ω 为注意力权重, $\tanh(\cdot)$ 表示激活函数。为区分输入向量中各特征的重要程度,可对输入特征得分 β_i 进行归一化处理,公式如下:

$$\beta_i = \frac{e^{s_i}}{\sum_{j=1}^n e^{s_j}} \quad (6)$$

其中, β_i 可视为输入向量基于注意力机制的特征权重。据此,输入向量的有效特征可表示为:

$$\tilde{\mathbf{x}} = [\beta_1 x_1, \beta_2 x_2, \dots, \beta_n x_n]^T \quad (7)$$

式(7)表明,通过动态评估并分配特征权重, $\tilde{\mathbf{x}}$ 相比原始输入 $\mathbf{x}$ 能够体现出更为有效的特征信息。

推论1: 式(5)–(7)不仅使RBF神经网络模型具备了关键特征提取能力,还通过差异化注意力权重实现了对特征重要性的定量分析。因此,该基于注意力机制的特征学习机制能够有效应对由不确定性与非平稳性所带来的挑战。

2.2 基于注意力权重的自适应核函数

在RBF设计过程中引入差异化注意力权重,构建自适应核函数,具体如下所示:

$$\phi_j(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{c}_j, \sigma_j, \beta) = \exp\left(-\frac{\|\tilde{\mathbf{x}}(t) - \mathbf{c}_j \odot \beta\|^2}{2\sigma_j^2}\right) \quad (8)$$

其中, $j = 1, 2, \dots, m$, $\odot$ 表示逐元素乘积。为了区分不同节点的激活有效性, 并进一步反映各节点对整体样本的贡献度, 定义节点注意力权重 α_j 如下:

$$\alpha_j = \frac{\exp(a_j)}{\sum_{k=1}^m \exp(a_k)} \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (9)$$

$$a_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \phi_j(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{c}_j, \sigma_j, \beta) \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (10)$$

其中, α_j 表示第 j 个 RBF 节点的注意力权重, 而 a_j 则表示第 j 个 RBF 节点的平均激活值。

推论 2: 根据式(8), 自适应核函数的主要优势在于它能够使中心向量随输入特征的重要性动态移动。此外, 如式(9)和式(10)所示的 RBF 节点的注意力权重和平均激活值, 反映了其对整体样本及输出的贡献度。在这种情况下, 基于注意力权重的自适应核函数提升了 RBFNN 模型的自适应能力与精度。

2.3 ARBFNN-DSA 模型

基于输入特征注意力层和基于注意力权重的自适应核函数, 我们可以构建如图 2 所示的 ARBFNN-DSA 模型。

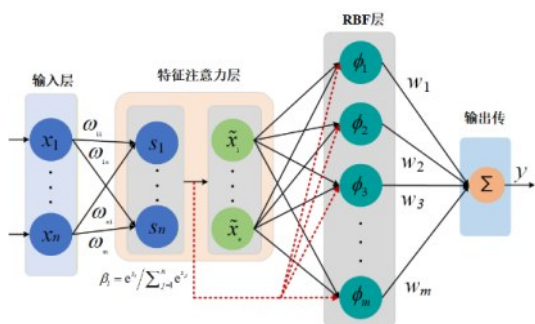


图2 ARBFNN-DSA 模型结构

Fig. 2 Structure of ARBFNN-DSA model

模型输出可描述如下:

$$\tilde{y}(t) = \sum_{j=1}^m \alpha_j \cdot w_j \cdot \phi_j(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{c}_j, \sigma_j, \beta) \quad (11)$$

其中, $j = 1, 2, \dots, m$ 。由式(11)可知, ARBFNN-DSA 的输出同时受到基于注意力的特征、自适应核函数以及 RBF 节点注意力权重的影响。基于公式(11)的输出, 构建 ARBFNN-DSA 的代价函数如下:

$$\begin{aligned} \ell(t) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y(t) - \tilde{y}(t))^2 \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y(t) - \sum_{j=1}^m \alpha_j \cdot w_j \cdot \phi_j(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{c}_j, \sigma_j, \beta))^2 \end{aligned} \quad (12)$$

其中, $y(t)$ 是目标输出; m 和 N 分别表示 RBF 节点数和训练样本数。基于代价函数, 待训练参数 w_j 、 α_j 、 $\mathbf{c}_j$ 、 ω 和 σ_j 的梯度可表示为:

$$\frac{\partial \ell(t)}{\partial w_j} = -\frac{2}{N} \sum_{i=1}^N (y(t) - \tilde{y}(t)) \sum_{j=1}^m \alpha_j \phi_j(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{c}_j, \sigma_j, \beta) \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ell(t)}{\partial \alpha_j} &= -\frac{2}{N} \sum_{i=1}^N (y(t) - \tilde{y}(t)) \sum_{j=1}^m w_j \phi_j(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{c}_j, \sigma_j, \beta) \\ &\quad + \lambda \frac{\partial}{\partial \alpha_j} \left(\sum_{j=1}^m \alpha_j^2 \right) \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ell(t)}{\partial \mathbf{c}_j} &= -\frac{2}{N} \sum_{i=1}^N (y(t) - \tilde{y}(t)) \sum_{j=1}^m \alpha_j w_j \phi_j(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{c}_j, \sigma_j, \beta) \\ &\quad \cdot \frac{1}{\sigma_j^2} (\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{c}_j \odot \beta) \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ell(t)}{\partial \omega} &= \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N (y(t) - \tilde{y}(t)) \sum_{j=1}^m \alpha_j w_j \phi_j(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{c}_j, \sigma_j, \beta) \\ &\quad \cdot \frac{1}{\sigma_j^2} (\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{c}_j \odot \beta) \cdot \mathbf{x} \cdot \frac{e^{s_j}}{\sum_{j=1}^n e^{s_j}} \\ &\quad \cdot (\tanh(\omega \mathbf{x} + b) + \omega \mathbf{x} \frac{e^{(\omega \mathbf{x} + b)} - e^{(\omega \mathbf{x} + b)}}{e^{(\omega \mathbf{x} + b)} + e^{(\omega \mathbf{x} + b)}}) \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ell(t)}{\partial \sigma_j} &= -\frac{2}{N} \sum_{i=1}^N (y(t) - \tilde{y}(t)) \sum_{j=1}^m \alpha_j w_j \phi_j(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{c}_j, \sigma_j, \beta) \\ &\quad \cdot \frac{1}{\sigma_j^3} (\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{c}_j \odot \beta)^2 \end{aligned} \quad (17)$$

其中, λ 为 L2 正则化系数, 用于避免注意力权重过度集中, $\mathbf{x}$ 为原始输入数据。基于各参数梯度, 可得参数更新规则如下:

$$w_j(t+1) = w_j(t) + \eta \frac{\partial \ell(t)}{\partial w_j} \quad (18)$$

$$\alpha_j(t+1) = \alpha_j(t) + \eta \frac{\partial \ell(t)}{\partial \alpha_j} \quad (19)$$

$$\mathbf{c}_j(t+1) = \mathbf{c}_j(t) + \eta \frac{\partial \ell(t)}{\partial \mathbf{c}_j} \quad (20)$$

$$\omega(t+1) = \omega(t) + \eta \frac{\partial \ell(t)}{\partial \omega} \quad (21)$$

$$\sigma_j(t+1) = \sigma_j(t) + \eta \frac{\partial \ell(t)}{\partial \sigma_j} \quad (22) \text{ 其中, } \eta \text{ 为学习}$$

率, 梯度信息如公式(13)–(17)所示。

推论 3: 由此构建的 ARBFNN-DSA 模型结合了输入特征注意力层与自适应核函数, 可实现高效的特征提取、自适应学习以及精确的有监督逼近。因此, ARBFNN-DSA 模型在河流水环境中 PON 浓度的建模与预测方面能够表现出更优的性能。

3 实验研究

本节通过对河流水环境中 PON 浓度进行建模与预测, 验证所提 ARBFNN-DSA 模型的有效性与优越性。图 3 展示了整体运行框架。

3.1 实验设置

根据 PON 的转化机理, 本文为 ARBFNN-DSA 模型构建了 7 维输入向量, 包括藻类种群氮碳比

(AN)、藻类生物量(AB)、PON 水解速率(K_{PON})、PON 沉降速率(S_{PON})、平均水深(H)、PON 外源负荷(E_{PON})以及水体体积(V)。ARBFNN-DSA 的输入向量与输出可表示为:

$$\mathbf{x} = [\text{AN}, \text{AB}, K_{\text{PON}}, S_{\text{PON}}, H, E_{\text{PON}}, V]^T, \tilde{y} = \text{PON} \quad (23)$$

本文实验中用到的数据来自山东省青岛地区大沽河流域各断面传感器采集的实测数据,共收集

了2025年1月至2025年10月期间的3000个数据样本。其中2500组、300组和200组数据分别作为训练样本、验证样本和预测样本。采用均方误差(MSE)作为评价指标,其定义如下:

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y(t) - \tilde{y}(t))^2, \quad (24)$$

其中, $y(t)$ 和 $\tilde{y}(t)$ 分别表示ARBFNN-DSA模型的目标输出和预测输出; N 为数据样本的数量。

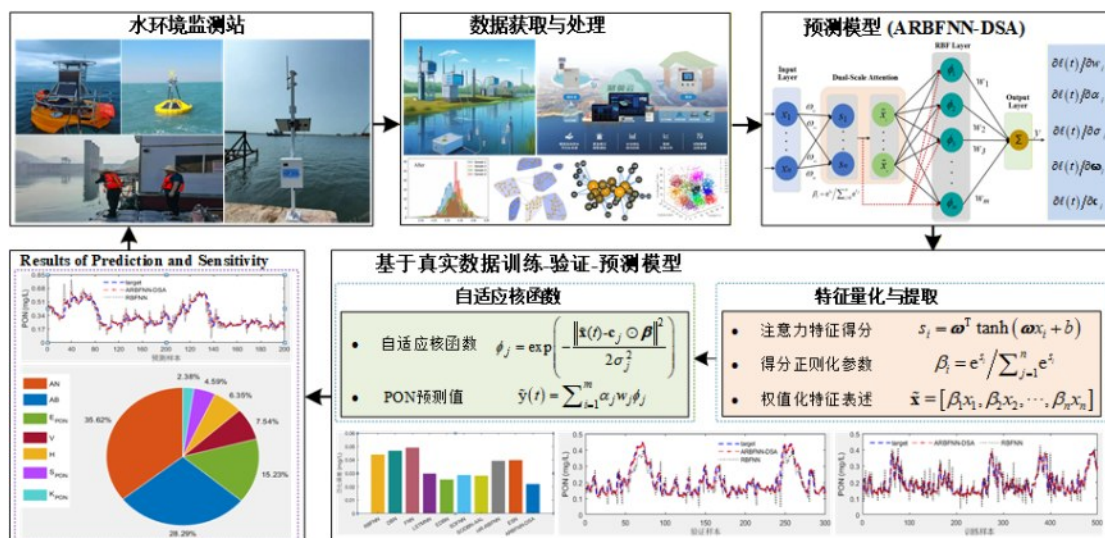


图3 基于ARBFNN-DSA的颗粒态有机氮浓度预测与分析框架

Fig. 3 Framework of Predicting and analyzing PON concentrations with ARBFNN-DSA

3.2 建模与预测

在建模与预测过程中,本文提出的ARBFNN-DSA首先在训练样本上进行训练,然后在验证样本上进行验证。最后,在预测样本上对其预测性能进行验证。相关超参数设定为: $n=7, m=12, \eta=0.6, b=0.1, \lambda=0.5$ 。图4~6展示了ARBFNN-DSA与基本RBFNN在训练样本、验证样本及预测样本上的跟踪结果与误差。为了便于直观观察跟踪效果,训练结果的训练样本从总本中以 $t=5$ 的采用间隔进行抽样。可以看出,ARBFNN-DSA在三个数据集上总体均取得了优于RBFNN的近似效果。具体来看,相较于RBFNN,ARBFNN-DSA在训练集上的精度提升45.27%,在验证集上提升44.56%,在预测集上提升46.81%。此外,在训练样本上的近似精度略高于验证样本,而在验证样本上的近似精度又略高于预测样本。这种在三个数据集上近似精度逐渐下降的趋势,与数据驱动的机器学习模型的结论基于一致。尤其是当对从传感器采集的真实数据集进行建模与预测时,这一泛化误差水平仍然相对较小。

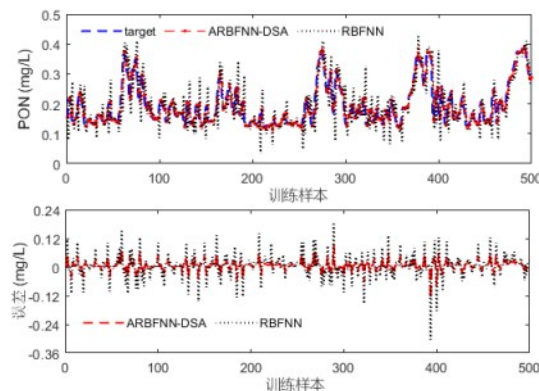


图4 训练结果及误差

Fig. 4 Training results and errors

为了充分验证ARBFNN-DSA在PON浓度状态建模与预测中的有效性和优越性,我们进行了20次独立重复对比实验。对比模型包括:RBFNN、深度信念网络(Deep belief network, DBN)^[5]、模糊神经网络(Fuzzy neural network, FNN)^[19]、事件驱动DBN(EDBN)^[20]、长短期记忆神经网络(Long short-term memory neural network, LSTMNN)^[7]、自组织模糊神经网络(Self-organizing FNN, SOFNN)^[12]、具有自适应主

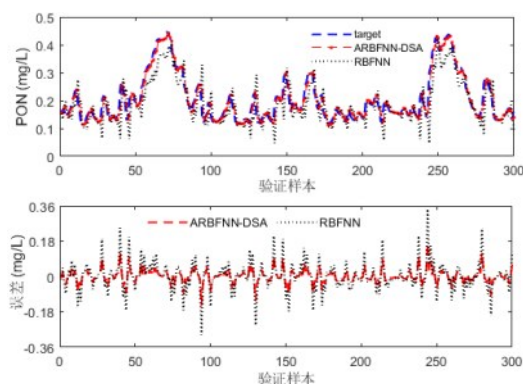


图5 验证结果及误差

Fig. 5 Validating results and errors

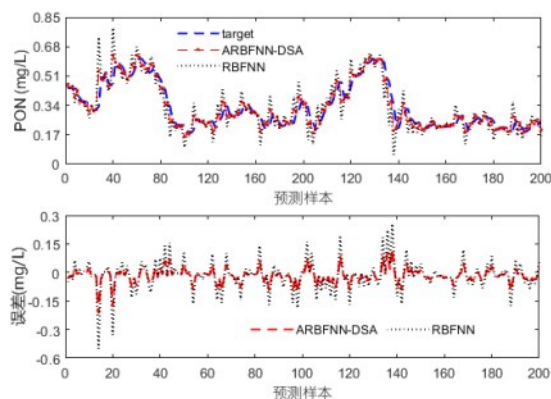


图6 预测结果及误差

Fig. 6 Predicting results and errors

动学习的自优化 DBN (Self-optimizing DBN with adaptive-active learning, SODBN-AAL)^[14]、基于混合正则化的 RBFNN (Hybrid regularization RBFNN, HR-RBFNN)^[16]、回声状态网络 (Echo state network, ESN)^[21]、基于注意力机制的编码器 (Multi-attention encoder-decoder, AMED)^[22]、基于注意力的向双 LSTM 神经网络 (Attention-based bidirectional LSTM, AB-LSTM)^[23] 和基于注意力时空卷积神经网络 (Attention-based spatiotemporal convolutional neural network, AS-CNN)^[24], 对比结果列于表 2 中。可以看出, ARBFNN-DSA 模型性能总体上优于其他对比模型。三种注意力机制模型 AMED、AB-LSTM 和 AS-CNN 在注意力特征学习下整体取得了不错的学习和预测性能, 而 ARBFNN-DSA 模型不仅基于注意力机制实现了对输入特征的定量评估和学习, 还将注意力特征权重参数融合到核函数自适应设计过程中, 因此性能更加优越。然而, ARBFNN-DSA 的训练均方误差 (MSE) 和总运行时间分别为 0.0538 mg/L 和 36.28 秒, 并未优于对比模型 ESN (0.0526 mg/L) 和 RBFNN (35.73s)。这主要是因为 ESN 模型

的内部状态仅依赖于输入历史而非初始条件, 从而能够稳定记忆过去的时间信息, 并进一步避免了因长期依赖所导致的梯度爆炸或消失问题。而 RBFNN 结构简单且无特征学习过程, 收敛速度快, 因此总运行时间更短。从对比结果中还可以看出, 提出的 ARBFNN-DSA 软测量模型在验证均方误差和预测均方误差方面均小于其他对比模型, 同时其波动幅度也更小。特别是, 与 SODBN-AAL 和 RBFNN 相比, ARBFNN-DSA 软测量模型的预测精度分别提高了 16.98% 和 46.81%。在取得上述性能的同时, ARBFNN-DSA 软测量模型在网络结构上具有更少的神经元数量, 相比其他模型更加紧凑。

此外, 预测模型的泛化性能是一个不可忽视的重要指标, 甚至决定着预测模型能否使用的问题。为此, 在深入分析实验结果的同时给出了泛化误差 (即训练误差与预测误差之间的差值), 如图 7 所示。可以看出, 所提出的 ARBFNN-DSA 软测量模型的泛化误差 (0.022 mg/L) 小于其他对比模型 (EDBN: 0.0254 mg/L, SODBN-AAL: 0.0282 mg/L, SOFNN: 0.0289 mg/L, LSTMNN: 0.0298 mg/L, HR-RBFNN: 0.0395 mg/L, ESN: 0.04 mg/L, RBFNN: 0.0442 mg/L, DBN: 0.047 mg/L, FNN: 0.0492 mg/L, AMED: 0.0355, AB-LSTM: 0.0255, AS-CNN: 0.0361)。具体而言, 与 EDBN 和 FNN 相比, 所提出的 ARBFNN-DSA 软测量模型泛化误差分别降低了 13.39% 和 55.28%。最小的泛化误差表明, ARBFNN-DSA 软测量模型具有更好的稳定性、抗干扰能力和适用性, 尤其适用于平稳性状态下的 PON 浓度状态预测。

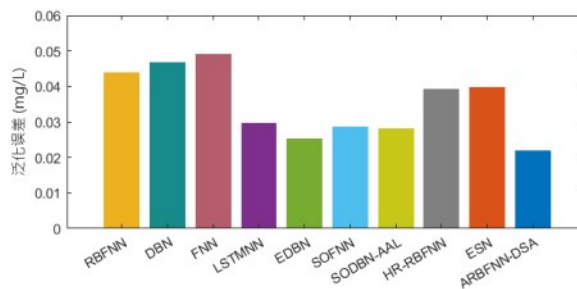


图7 不同模型的泛化误差

Fig. 7 Generalization errors of the different models

推论 4: 基于对真实数据集进行建模与预测的结果, ARBFNN-DSA 总体上取得了更优的性能, 并展现出相对于其他主流模型的优势。尤其值得注意的是, ARBFNN-DSA 的泛化误差在所有对比模型中最小, 这进一步表明其对于 PON 浓度的预测具有更强的适用性。

表2 不同模型对 PON 预测比较结果

Table 2 Comparison results of predicting PON with different models

模型	结构	训练 MSE (mg/L)	验证 MSE (mg/L)	预测 MSE (mg/L)	总运行时间(s)
RBFNN	7-32-1	0.0983±0.0038	0.1167±0.0048	0.1425±0.0087	35.73±1.32
DBN	7-20-18-15-1	0.0713±0.0045	0.0867±0.0059	0.1183±0.0076	59.62±1.31
FNN	7-20-16-1	0.0794±0.0052	0.0916±0.0062	0.1286±0.0067	45.29±1.18
LSTMNN	7-30-1	0.0629±0.0056	0.0785±0.0065	0.0927±0.0068	48.72±1.24
EDBN	7-16-12-10-1	0.0682±0.0031	0.0829±0.0035	0.0936±0.0039	46.14±0.98
SOFNN	7-18-10-1	0.0653±0.0042	0.0791±0.0047	0.0942±0.0051	40.38±1.13
SODBN-AAL	7-18-12-8-1	0.0624±0.0040	0.0810±0.0043	0.0913±0.0047	43.16±1.21
HR-RBFNN	7-48-1	0.0813±0.0037	0.0954±0.0049	0.1208±0.0052	39.45±1.30
ESN	7-36-1	0.0526±0.0035	0.0698±0.0046	0.0926±0.0049	42.56±1.28
AMED	7-32-1	0.0618±0.0041	0.0759±0.0055	0.0973±0.0062	38.95±1.33
AB-LSTM	7-20-16-12-1	0.0597±0.0044	0.0734±0.0057	0.0852±0.0063	44.87±1.35
AS-CNN	7-26-18-1	0.0623±0.0058	0.0797±0.0069	0.0984±0.0074	41.23±1.27
ARBFNN-DSA	7-7-7-10-1	0.0538±0.0027	0.0647±0.0029	0.0758±0.0032	36.28±0.96

注:加粗为最优值

3.3 输入变量敏感性分析

在构建颗粒态有机氮(PON)浓度预测模型时,在保证模型具备优良预测性能的前提下,开展输入变量敏感性分析是非常重要的。本节基于互信息度量方法,对输入变量开展定量敏感性分析,其中输入变量集为 $x=[AN, AB, K_{PON}, S_{PON}, H, E_{PON}, V]$,预测输出为 $y=PON$ 。根据 ARBFNN-DSA 的输入与预测输出,其归一化互信息可表述如下:

$$NMI = \int_0^N \int_0^N P(x_i, \tilde{y}) \log \frac{P(x_i, \tilde{y})}{P(x_i)P(\tilde{y})} dx_i d\tilde{y} \quad (25)$$

式中, $i = 1, 2, \dots, 7$, $P(x_i, \tilde{y})$ 为输入变量 x_i 与预测输出 $\tilde{y}$ 的联合概率密度函数; $P(x_i)$ 和 $P(\tilde{y})$ 分别为 x_i 与 $\tilde{y}$ 的边缘概率分布; N 为数据样本总数。对于上述 7 个输入变量,各变量的归一化互信息(NMI)取值均落在区间(0,1)内,且所有变量的 NMI 之和为 1,这样便于定量分析各变量对颗粒态有机氮(PON)浓度的贡献程度与敏感性大小。

图 8 给出了各输入变量对颗粒态有机氮(PON)浓度因果关联度贡献的占比结果。可以看出,各输入变量针对 PON 浓度的归一化互信息(NMI)重要性排序为: $AN > AB > E_{PON} > V > H > S_{PON} > K_{PON}$ 。因此,在分析 PON 浓度演变规律、追溯异常状态诱因时,应重点关注排名前三的变量: AN 、 AB 与 E_{PON} 。此外,各输入变量对 PON 浓度的 NMI 排序结果整体上与 PON 状态演化机理研究、场观测结果及工程实践经验相一致。

3.5 讨论

根据实验结果,总结了能够揭示在预测 PON 浓

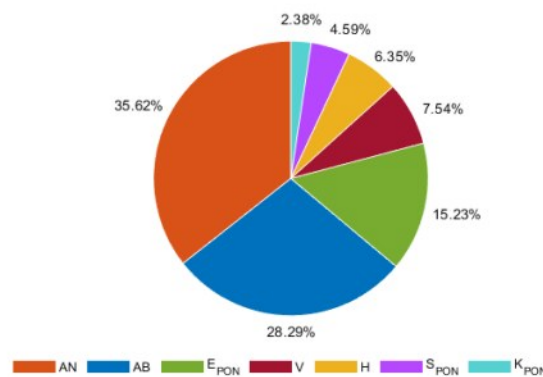


图8 输入变量对 PON 的敏感度

Fig. 8 Sensitivity degrees of the input variables on the PON

度时影响 ARBFNN-DSA 性能的规律,具体如下:

(1) 输入特征注意力层:本文提出的输入特征注意力层能够量化输入变量的重要性,并进一步从原始数据中提取关键特征。这些关键特征不仅使 RBFNN 模型具备了关键特征选择的能力,还能够实现对特征重要性的定量分析,从而提升了模型的可解释性。这种基于特征的建模方法更适用于逼近具有不确定性和非平稳性的实际数据集,进而提高了 PON 建模与预测的能力和精度。

(2) 自适应核函数:RBFNN 的核函数对于构建其逼近能力具有至关重要的作用。然而,传统核函数的参数在处理数据的过程中始终保持不变。这种固定参数与随时间变化的数据特征之间的不匹配,削弱了 RBFNN 逼近能力。本文提出了一种基于输入特征得分的自适应核函数,能够动态捕捉时变的数据特征。通过这种方式,所提出的 ARBFNN-DSA 软测量模型在逼近 PON 浓度时表现更好,并能

给出准确的预测结果。

(3) 多参数协同学习:在PON浓度的建模与预测过程中,需要同时逼近或学习多条信息,包括动态特性、定量特征以及RBF层的参数等。针对这一问题,本文设计了一种多参数协同学习方法,该方法由输入特征得分和自适应核函数协同驱动,具体如式(13)–(22)所示。从整个学习过程可以看出,ARBFNN-DSA的演化行为是一种基于对输入数据进行深度解析的闭环策略。

(4) 输入变量的敏感性分析:针对多因素耦合的PON浓度预测问题,输入变量的敏感性分析是一个重要环节。尤其当出现异常状态时,找出哪个输入量对异常状态具有最直接的关系,是一项重要的任务。本文提出基于互信息的方法解决了这一问题,为后续的污染源追溯分析提供了基础。

(5) 机理与数据驱动策略:在训练ARBFNN-DSA的过程中,输入变量的选取是通过分析机理模型完成的,从输入特征有效性的角度提高了数据驱动建模和预测过程的精度。这种机理和数据协同驱动的状态逼近、建模与预测方法有效地提升了ARBFNN-DSA对PON浓度的预测性能。

4 结论

本文提出了一种具有双尺度注意力的自适应RBF神经网络(ARBFNN-DSA),用于对河流水环境PON浓度进行预测分析。所提出的ARBFNN-DSA的主要优势在于基于注意力的特征学习与自适应核函数,由此形成的多参数协同学习策略更适用于处理具有不确定性和非平稳性的PON数据。同时,利用数据-机理协同驱动的方式从PON机理模型中获取输入变量(而非依赖人工经验),显著提升了建模的可解释性。最后,将所提出的ARBFNN-DSA用于预测山东省青岛地区大沽河流域PON浓度。实验结果表明,ARBFNN-DSA不仅能够给出准确的预测结果,还能为潜在的污染溯源提供各诱导因素的定量信息。尤其值得注意的是,与其他主流模型相比,ARBFNN-DSA在预测精度和泛化能力上分别至少提高了16.98%和13.39%。

然而,PON浓度的状态演化过程实际上是一个多因素耦合的复杂动态系统,其中的状态行为受到多维度信息和因素的共同影响。在这种情况下,未来的工作将聚焦于以下三个方面:1)设计有效的算

法或机制以处理多模态数据;2)在多个数据集上进一步优化和验证ARBFNN-DSA;3)研究如何发展滚动优化机制,以适应PON浓度状态演化过程中的不确定性与非平稳性。

符号说明

- c ——RBF层神经元的中心向量
 $P(\mathbf{x}, \tilde{y})$ ——输入量 $\mathbf{x}$ 与输出量 $\tilde{y}$ 的联合概率密度函数
 s_i ——第 i 个输入样本数据的特征得分
 w ——ARBFNN-DSA模型的输出权值参数
 y ——ARBFNN-DSA模型输出PON的期望值, mg/L
 $\tilde{y}$ ——ARBFNN-DSA模型输出PON的实际值, mg/L
 β_i ——第 i 个输入样本数据的特征得分系数
 η ——ARBFNN-DSA模型有监督学习阶段的学习率
 σ ——RBF层神经元的宽度向量
 ω ——输入样本数据的特征注意力权重

参考文献

- [1] Wang G M, Chen H, Han H G, et al. Predicting water quality with nonstationarity: event-triggered deep fuzzy neural network[J]. IEEE Transactions on Fuzzy Systems, 2024, 32(5): 2690–2699.
- [2] 李欣怡, 王功明, 王自鹏, 等. 基于事件触发的污水处理过程水质智能预测研究[J]. 化工学报, 2025, 76(6): 2828–2837.
Li X Y, Wang G M, Wang Z P, et al. Research on intelligent prediction of water quality in sewage treatment process based on event triggering[J]. CIESC Journal, 2025, 76(6): 2828–2837.
- [3] Alfa U, Tijjani A S, Fabresse L, et al. AI-driven decision support for spatio-temporal water quality monitoring using aquatic drones[J]. IFAC-PapersOnLine, 2025, 59(33): 25–31.
- [4] 王功明, 李文静, 乔俊飞. 基于PLSR自适应深度信念网络的出水总磷预测[J]. 化工学报, 2017, 68(5): 1987–1997.
Wang G M, Li W J, Qiao J F. Prediction of effluent total phosphorus using PLSR-based adaptive deep belief network[J]. CIESC Journal, 2017, 68(5): 1987–1997.
- [5] Wang G M, Jia Q S, Zhou M C, et al. Soft-sensing of wastewater treatment process via deep belief network with event-triggered learning[J]. Neurocomputing, 2021, 436: 103–113.
- [6] Bi J, Lin Y Z, Dong Q X, et al. Large-scale water quality prediction with integrated deep neural network[J]. Information Sciences, 2021, 571: 191–205.
- [7] Bi J, Wang Z Q, Yuan H T, et al. Long-term water quality prediction with transformer-based spatial-temporal graph fusion[J]. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, 2025, 22: 11392–11404.
- [8] Chang P, Shi S Q. Soft-sensor of the key water quality indicators in the wastewater treatment process based on improved mamba[J]. IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, 2025, 74: 2548809.

- [9] Chang P, Zhang S R, Wang Z C. Soft sensor of the key effluent index in the municipal wastewater treatment process based on transformer[J]. IEEE Transactions on Industrial Informatics, 2024, **20**(3): 4021–4028.
- [10] Liu Y, Liang Y X, Ouyang K, et al. Predicting urban water quality with ubiquitous data – a data-driven approach[J]. IEEE Transactions on Big Data, 2022, **8**(2): 564–578.
- [11] Zhou P, Wang X, Chai T Y. Multiobjective operation optimization of wastewater treatment process based on reinforcement self-learning and knowledge guidance[J]. IEEE Transactions on Cybernetics, 2023, **53**(11): 6896–6909.
- [12] Wang G M, Qiao J F. An efficient self-organizing deep fuzzy neural network for nonlinear system modeling[J]. IEEE Transactions on Fuzzy Systems, 2022, **30**(7): 2170–2182.
- [13] Wang G M, Yuan G H, Hu Z Q, et al. Complexity-based structural optimization of deep belief network and application in wastewater treatment process[J]. IEEE Transactions on Industrial Informatics, 2024, **20**(4): 6974–6982.
- [14] Zhuang K Z, Luan X W, Jiang X T, et al. A self-optimizing deep belief network with adaptive-active learning: dynamic optimization for neural network[J]. IEEE Systems, Man, and Cybernetics Magazine, 2025, **11**(2): 75–83.
- [15] Cao Y X, Zhuang K Z, Wang G M, et al. Using radial basis function neural network with weight memory mechanism: nonlinear system identification[J]. IEEE Systems, Man, and Cybernetics Magazine, 2025, **11**(4): 33–38.
- [16] Wang L J, Feng M H, Wang G M, et al. An efficient radial basis function neural network with hybrid regularizations for predicting library loan volume: generalization and adaptability are improved [J]. IEEE Systems, Man, and Cybernetics Magazine, 2026, **12**(1): 112–117.
- [17] Tan X B, Bai Y L, Yue X X, et al. A Mamba-based method for multi-feature water quality prediction fusing dual denoising and attention enhancement[J]. Journal of Hydrology, 2025, **660**: 133424.
- [18] Yang H Y, Ding Y F, Wu X L, et al. An identification model of sludge bulking based on self-organized recurrent fuzzy neural network[J]. IEEE Transactions on Industrial Informatics, 2025, **21**(1): 357–365.
- [19] Wang G M, Jia Q S, Qiao J F, et al. A sparse deep belief network with efficient fuzzy learning framework[J]. Neural Networks, 2020, **121**: 430–440.
- [20] Wang G M, Chen H, Jiang S L, et al. Neurodynamics-driven prediction model for state evolution of coastal water quality[J]. IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, 2024, **73**: 2519409.
- [21] Yang C L, Yang S, Tang J, et al. Evolving deep delay echo state network for effluent NH₄-N prediction in wastewater treatment plants[J]. IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, 2023, **72**: 2513812.
- [22] Li Y B, Wang Z Q, Yuan H T, et al. Hybrid water quality prediction based on attention combined with frequency enhancement and multi-seasonal decomposition[J]. Journal of Water Process Engineering, 2025, **78**: 108747.
- [23] Bi J, Chen Z X, Yuan H T, et al. Accurate water quality prediction with attention-based bidirectional LSTM and encoder – decoder [J]. Expert Systems with Applications. 2024, **238**:121807.
- [24] Qiao J F, Lin Y Z, Bi J, et al. Attention-based spatiotemporal graph fusion convolution networks for water quality prediction[J]. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, 2025, **22**: 1–10.