

研究论文

DOI: 10.11949/0438-1157.

# 基于一致性约束与熵加权集成的污水处理半监督软测量方法

周金卫<sup>1</sup>, 林勉<sup>1</sup>, 吴菁<sup>1</sup>, 唐莉丽<sup>2</sup>, 陈建育<sup>1</sup>, 董宏远<sup>1,2</sup>, 陈妍<sup>1,2</sup>, 刘乙奇<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> 贵州民族大学数据科学与信息工程学院, 贵州 贵阳 550025; <sup>2</sup> 华南理工大学自动化科学与工程学院, 广东 广州 510641)

**摘要:** 针对污水处理过程中总氮 (total nitrogen, TN) 和五日生化需氧量 (five-day biochemical oxygen demand, BOD<sub>5</sub>) 等关键水质指标存在实验室检测滞后、标注样本稀缺以及过程噪声强等问题。提出一种基于一致性约束与熵加权集成的半监督软测量方法。按时间顺序划分外部训练集和测试集, 在训练阶段采用指数移动平均和标准化预处理, 以 MiniRocket-Ridge 构建多尺度动态基学习器; 随后由双学习器交叉生成伪标签, 利用内部真实标签验证集对增强候选模型进行结构保真度门控, 接纳或回退候选模型, 并依据各输出预测信息熵进行自适应融合, 最终聚合多轮扰动结果完成预测。与最优全监督基线相比, TN 和 BOD<sub>5</sub> 的均方根误差在模拟数据集上分别降低 72.43% 和 79.44%, 在真实污水处理厂数据上分别降低 37.67% 和 32.46%。半监督策略比较和消融实验表明, MiniRocket 和 EWC-SS 对性能提升贡献较大, 熵加权与结构保真度门控进一步降低联合误差; SHapley 加性解释 (SHapley Additive exPlanations, SHAP) 分析显示主要变量贡献与污水处理过程机理一致。研究为标签获取代价高、过程动态复杂的污水处理软测量提供了一种准确、轻量且可解释的实现路径。

**关键词:** 污水处理; 软测量; 半监督学习; MiniRocket; 一致性约束; 熵加权集成; SHAP

中图分类号: TP 277

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (XXXX) XX-0001-19

## Semi-supervised soft sensor for wastewater treatment based on consistency constraints and entropy-weighted ensemble

ZHOU Jinwei<sup>1</sup>, LIN Mian<sup>1</sup>, WU Jing<sup>1</sup>, TANG Lili<sup>2</sup>, CHEN Jianyu<sup>1</sup>, DONG Hongyuan<sup>1,2</sup>, CHEN Yan<sup>1,2</sup>, LIU Yiqi<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> School of Data Science and Information Engineering, Guizhou Minzu University, Guiyang 550025, Guizhou, China; <sup>2</sup> School of Automation Science and Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510641, Guangdong, China)

**Abstract:** To address issues such as delays in laboratory testing, a scarcity of labeled samples, and high process noise for key water quality indicators, including total nitrogen (TN) and five-day biochemical oxygen demand (BOD<sub>5</sub>), in the wastewater treatment process, this study proposes a semi-supervised soft-measurement method based on consistency constraints and entropy-weighted integration. The external training and test sets are divided

收稿日期: 2026-07-16 修回日期: 2026-08-25

通信作者: 吴菁 (1988—), 女, 博士, 副教授, ipicq@gzmu.edu.cn

第一作者: 周金卫 (2000—), 男, 硕士研究生, 20240714001020@stu.gzmu.edu.cn

基金项目: 国家自然科学基金项目 (12461077, 62273151, 62073145); 贵州省教育厅自然科学研究项目 ([2023]012, [2023]061); 贵州省教育厅自然科学基金项目 (QJJ2022047); 贵州省科技支撑计划项目 (黔科合支撑 [2026]—一般 237, 一般 184); 贵州省高层次创新型人才项目 (GCC[2023]027); 贵州民族大学博士科研启动项目 (GZMUZK[2024]QD11); 海南省自然科学基金项目 (623QN256); 贵州省数据科学与计算智能科技创新人才团队项目 (黔科合人才 CXTD[2025]038); 贵州省应用数学与算力算法全省重点实验室项目 (黔科合平台 ZSYS[2025]039)

引用本文: 周金卫, 林勉, 吴菁, 唐莉丽, 陈建育, 董宏远, 陈妍, 刘乙奇. 基于一致性约束与熵加权集成的污水处理半监督软测量方法[J]. 化工学报, XXXX, XX(XX): 1–19

Citation: ZHOU Jinwei, LIN Mian, WU Jing, TANG Lili, CHEN Jianyu, DONG Hongyuan, CHEN Yan, LIU Yiqi. Semi-supervised soft sensor for wastewater treatment based on consistency constraints and entropy-weighted ensemble[J]. CIESC Journal, XXXX, XX(XX): 1–19

chronologically. During the training phase, exponential moving average and standardization are applied for preprocessing, and a multiscale dynamic basis learner is constructed using MiniRocket-Ridge; Subsequently, pseudo-labels are generated through cross-validation between the two learners, and the internal true-label validation set is used to perform structural fidelity gating on the enhanced candidate models to accept or reject them. The models are then adaptively fused based on the entropy values of their respective output predictions, and the prediction is finalized by aggregating the results from multiple rounds of perturbation. Compared to the optimal fully supervised baseline, the RMSE for TN and BOD<sub>5</sub> on the BSM2 dataset was reduced by 72.43% and 79.44%, respectively, and by 37.67% and 32.46% on real wastewater treatment plant data. Comparisons of semi-supervised strategies and ablation experiments indicate that MiniRocket and EWC-SS contribute significantly to performance improvements, while entropy weighting and structural fidelity gating further reduce the combined error; SHapley Additive Explanations (SHAP) analysis shows that the contributions of key variables are consistent with the mechanisms of the wastewater treatment process. This study provides an accurate, lightweight, and interpretable implementation approach for soft metrics in wastewater treatment, where label acquisition costs are high and process dynamics are complex.

**Keywords:** wastewater treatment; soft sensor; semi-supervised learning; MiniRocket; consistency constraints; Entropy-weighted integration; SHAP

## 引 言

现代工业过程控制的目标已由维持单一变量稳定,扩展为在安全、质量、能耗与排放约束下实现多目标协同优化。闭环控制、运行优化和故障诊断均依赖对关键状态与质量指标的连续感知,但化工、生物过程及污水处理中的部分指标只能通过离线化验、昂贵分析仪或具有显著时滞的实验获得。过程监测研究表明,数据质量、动态相关性和工况变化会直接影响控制决策的可靠性<sup>[1-2]</sup>。因此,在常规传感器与上层控制器之间构建可信的虚拟测量通道,是智能工控系统实现高频质量反馈的重要基础。

软测量利用温度、流量、压力、酸碱度、溶解氧等易测变量估计难以在线获取的质量变量,已由早期机理回归发展为多变量统计学习、集成学习和深度时序建模。数据驱动软测量具有部署灵活、维护成本较低和便于接入现有控制系统等优势,但模型有效性不仅取决于拟合算法,还取决于变量选择、时序对齐、样本代表性以及漂移后的适应机制<sup>[3-7]</sup>。尤其在标签稀缺的生产场景中,继续增加模型复杂度并不必然带来更强泛化能力,稳定的表征、严格的验证和可控的更新策略同样关键。

污水处理系统是软测量的典型应用对象。其生化反应具有强非线性、多变量耦合、长时滞和周期性负荷变化,总氮(total nitrogen, TN)和五日生化需

氧量(five-day biochemical oxygen demand, BOD<sub>5</sub>)又分别反映脱氮效果和可生化有机物去除水平,直接关系到曝气、内外回流、碳源投加和污泥龄调节。已有研究采用极端梯度提升(Extreme Gradient Boosting, XGBoost)、人工神经网络、自适应多输出模型、循环神经网络及混合深度网络预测 BOD<sub>5</sub>、出水超标风险、能耗和多项水质指标<sup>[8-12]</sup>,说明数据驱动模型能够补充低频实验室检测。然而,多数工作仍以充分且同步的标签为前提,难以直接利用污水处理厂长期积累的大量无标签过程数据。

实际工况进一步放大了这一矛盾。进水水量与组分冲击、季节温度变化、曝气和回流策略调整会引起过程分布缓慢或突变式漂移;传感器还可能存在噪声、偏置、缺失和维护造成的间断<sup>[13-14]</sup>。与此同时, TN 和 BOD<sub>5</sub> 标签通常来自低频化验,其时间分辨率远低于在线过程变量,且可能伴随检测延迟。若只用少量标签训练监督模型,模型容易记忆局部工况;若将受干扰的无标签样本直接赋予伪标签并反复回灌,早期误差又可能被自增强。因此,污水软测量需要同时处理动态表征、伪标签可靠性和多模型不确定性。

半监督软测量通过联合利用少量有标签样本与大量无标签样本,为上述问题提供了可行路径。工业过程领域已经形成协同训练、奖励机制、伪标签优化、标签分布估计、在线动态聚类和质量相关深度表示等路线<sup>[15-21]</sup>;针对污水检测时滞造成的数

据稀缺,也出现了多任务网络协同学习的研究<sup>[22]</sup>。这些方法证明无标签数据能够改善软测量,但其增益通常依赖伪标签质量、样本筛选阈值或数据流稳定性。当两个学习器在同一偏差方向上形成错误共识时,仅以置信度或迭代次数作为接纳依据仍可能造成确认偏差。

一般半监督学习中的协同训练、时间集成、均值教师、虚拟对抗训练、MixMatch 和 FixMatch,分别从多视图互补、时间平均、扰动一致性、局部平滑和高置信伪标签等角度缓解标签不足<sup>[23-24]</sup>。这些研究共同表明,一致性约束的价值在于限制模型对合理扰动的敏感性,而不是默认所有未标记样本都有益。将其迁移到多输出工业回归还面临两个问题:一是污水指标的预测误差具有幅值和相关结构,单一逐点阈值难以全面评价伪标签增强效果;二是不同学习器对不同输出的可靠性并不相同,固定平均会掩盖这种差异。

污水过程的动态性还要求基学习器从有限标签中提取稳定的多尺度时序特征。LSTM、GRU 和 TCN 可通过门控记忆或扩张卷积描述动态关联<sup>[25-27]</sup>,Transformer 及其长序列变体利用注意力、分解和分块机制扩展了预测范围<sup>[28]</sup>。但在中小样本工业任务中,深层模型的参数规模、随机优化和超参数成本可能与有效标签量不匹配。ROCKET 系列采用大量固定或近确定性的卷积核提取多尺度特征,MiniRocket 进一步简化核参数并提高计算效率<sup>[29-31]</sup>;与具有凸优化和抗共线性能能力的 RidgeCV<sup>[32]</sup>结合,可形成轻量且稳定的双学习器基础。

基于上述原因,本文提出一致性约束与熵加权集成半监督软测量方法。其核心不是无条件扩大伪标签训练集,而是构建从动态表征、伪标签协同利用到候选模型验证与融合输出的闭环优化:首先以 EMA、标准化和滑动窗口形成动态样本;随后由 MiniRocket-Ridge 学习器在不同内部扰动下生成并交换伪标签;再利用内部真实标签验证集上的联合结构差异比较增强模型与纯监督模型,仅当增强候选降低验证风险时才被接纳,否则执行显式回退;最后依据预测信息熵为不同输出分配融合权重,并对多轮扰动结果进行聚合。该设计将无标签数据利用由开放式自训练转化为带验证与回退机制的闭环更新。

本文的主要贡献包括:(1)建立保持外部时间顺序的半监督软测量数据流程,避免随机外部划分

造成未来信息泄露;(2)构建适用于多输出回归的 EWC-SS 半监督框架,通过双学习器交叉伪标记、内部验证驱动的候选模型接纳与回退以及逐输出熵加权融合,控制无标签样本利用过程中的伪标签传播风险;(3)设计逐输出熵加权与多轮扰动集成,使学习器的互补性能随目标变量自适应调整;(4)在 BSM2 和真实污水处理厂数据上,从全监督基线、半监督学习策略与门控机制、消融、残差分布、运行时间和 SHAP 解释等方面进行验证。用于检验方法在仿真—真实场景下的稳定性;不作为跨工艺、跨季节和极端进水冲击工况普适性的充分证明。本文不在当前实验中施加无法在两类数据上统一计算的硬机理约束。

## 1 相关知识

### 1.1 数据预处理(data preprocessing)

设原始多变量序列按采样时刻排列。为避免未来信息泄露,所有标准化参数、EMA 状态及模型超参数均应由训练阶段确定,再应用于后续样本。如前所述,污水处理过程具有复杂非线性、强噪声与时变动态等特性,本文引入指数移动平均平滑法,并结合归一化方法实现可靠的数据预处理。设输入数据为  $X \in \mathbb{R}^{N \times F}$ ,其中  $N$  为样本数量, $F$  为特征维度, $X_t$  表示第  $t$  个采样时刻的  $F$  维过程变量向量。EMA 计算公式如下:

$$S_t = \begin{cases} X_{t,t} = 1 \\ \alpha \times X_t + (1 - \alpha)S_{t-1}, t \geq 2 \end{cases} \quad (1)$$

式中, $S_t$  为时刻  $t$  对应的 EMA 处理后的结果, $\alpha$  为平滑因子,平滑因子的取值尤为重要,波动剧烈的数据集通常采用较高的值,以提升信号变化的灵敏度,而平稳数据则建议使用较低的值,以增强降噪效果。本文采用穷尽网格搜索结合交叉验证的方式最终确定最优  $\alpha$ 。为进一步统一特征量纲、优化特征表示,将 EMA 处理后的数据归一化至  $[0,1]$  区间,计算公式为:

$$x'_i = \frac{x_i - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \quad (2)$$

式中, $x_i$  为原始数据中第  $i$  个数据点, $x_{\min}$  和  $x_{\max}$  分别为数据中的最大值和最小值, $x'_i$  为归一化后的值。经过上述预处理后的数据为后续建模提供高质量输入,为保证模型输出具备物理可解释性并便于结果验证,需对模型输出进行逆向还原操作,先进行 EMA 逆变换:

$$S_t = \begin{cases} S_{t,t} = 1 \\ S_t - \frac{(1-\alpha)X_{t-1}}{\alpha}, t \geq 2 \end{cases} \quad (3)$$

式中,  $X_{t-1} \in \mathbb{R}^{N \times F}$  表示输入特征与模型输出特征组合。并进行反归一化,恢复数据原始量纲与物理意义,计算公式为:

$$x_t = x'_t \cdot (x_{\max} - x_{\min}) + x_{\min} \quad (4)$$

逆变换按照与前向处理相反的顺序执行,使模型输出恢复为原始物理量纲。需要强调,平滑用于抑制高频测量噪声而非消除真实过程突变,因此平滑跨度通过训练数据上的候选搜索确定;测试数据不参与跨度和标准化参数的选择。

## 1.2 MiniRocket-Ridge 模型

在污水处理厂运行过程中,进水与出水数据均呈现出极为复杂的时序模式。且关键水质指标之间存在复杂的相互依赖关系。为解决这一问题,MiniRocket 算法提供了一种高效解决方案。采用一组固定的膨胀卷积核,实现高效、多尺度的特征变换,可直接从原始时间序列输入中生成具有判别性的特征,且无需大量参数调优。随后,这些特征被输入至岭回归模型,该模型作为轻量、高效的预测器,用于估计关键污水参数。MiniRocket 使用权重与偏置均确定性的预定义卷积核。卷积核权重被限制为二值(如  $\alpha = -1$  和  $\beta = 2$ ),而膨胀率与填充参数则根据输入序列长度自适应配置。对于给定输入  $X$ ,卷积运算定义如下:

$$C = \alpha X * 1_{\alpha,d} + \beta X * 1_{\beta,d} \quad (5)$$

式中,  $\alpha X$  与  $\beta X$  分别表示输入  $X$  与权重  $\alpha$  和  $\beta$  按元素乘积。  $1_{\alpha,d}$  和  $1_{\beta,d}$  为考虑膨胀参数  $d$  的指示矩阵,分别表示权重  $\alpha$  和  $\beta$  在卷积核中的位置。符号  $*$  表示卷积运算。借助二值权重,卷积运算可仅通过加法完成,无需显式乘法。针对每一组卷积核与膨胀率组合,MiniRocket 提取多个特征值。其主要采用 Positive Predictive Value (PPV) 作为核心特征提取方式。PPV 计算公式如下:

$$PPV(C) = \frac{\sum_{i=0}^n I(C_i > 0)}{n} \quad (6)$$

式中,  $n$  为卷积结果  $C$  的长度,  $I$  为指示函数,当  $C_i > 0$  值为 1,否则为 0。PPV 的本质是衡量卷积结果中大于 0 的数值占比,等价于计算经验累积分布函数。MiniRocket 通过不同偏置  $b$  计算多个 PPV 特征,并将这些特征值依次拼接,形成高维特征向量  $F \in \mathbb{R}^{N \times M}$ ,其中  $M$  为定义的卷积核数量,可高效捕捉污水数据内部的复杂关联。随后,特征向量  $F$  被

输入岭回归模型进行回归分析。岭回归的目标函数为:

$$Loss = \sum_{i=1}^N (y_i - \sum_{j=0}^f \beta_j F_{ij})^2 + \sigma \sum_{j=1}^f \beta_j^2 \quad (7)$$

式中,  $y_i$  为第  $i$  个样本的真实观测值,  $\beta_j$  为第  $j$  个特征的回归系数,  $F_{ij}$  为第  $i$  个样本第  $j$  个特征的取值,  $\sigma$  为正则化参数,  $f$  为输入岭回归模型的特征维数。本文采用均方误差 (Mean Squared Error, MSE) 作为评价指标,计算公式为:

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (8)$$

MiniRocket 将每个多变量窗口映射为由 PPV 统计量构成的高维特征。相较于端到端深层网络,该变换不需要反向传播学习卷积核,能够降低小样本场景下的优化不稳定性。特征经标准化后输入多输出 RidgeCV,正则化系数在  $10^{-3}$  至  $10^3$  的对数网格上选择。岭惩罚可缓解随机卷积特征之间的共线性,并使两套基学习器在不同内部划分下保持可比较的容量。

## 1.3 EWC-SS 半监督框架 (Entropy-Weighted Consensus Semi-Supervised Framework)

为充分利用无标签数据,本文提出一种新型的半监督方法,名为熵加权共识半监督 (Entropy-Weighted Consensus Semi-Supervised, EWC-SS) 框架,旨在控制半监督学习中的伪标签不稳定性及噪声传播。为降低单一数据划分的偶然性,本文采用  $K=5$  次不同随机种子的重复扰动,而非传统五折交叉验证。对于训练标签数据  $D_L$ ,在每次迭代  $k \in \{1, \dots, 5\}$  中,通过不同的随机种子将  $D_L$  划分为训练集(占  $D_L$  所有数据的 95%)和内部验证集(占  $D_L$  所有数据的 5%)。初始化两个独立的学习器  $M_1$  和  $M_2$ 。  $M_1$  和  $M_2$  通过不同的随机种子得到训练集来进行训练。并对无标签数据  $D_U$  生成伪标签  $\hat{Y}_u$ 。将带有伪标签的无标签数据注入对方的训练流程中,得到新的  $M_1$  和  $M_2$ 。分别利用新的模型与之前的模型对分割出的验证集进行评定,用于比较引入未标记数据前后的验证风险,并据此构建内部验证驱动的联合结构差异准则(以下简称结构门控):

$$c(Y, \hat{Y}, \alpha, \beta) = 1 - (\alpha \sqrt{\text{Tr}((Y - \hat{Y})^T \cdot (Y - \hat{Y}))} + \beta \cdot (\sum_{k=1}^N \sigma_k (Y - \hat{Y}))) \quad (9)$$

式中,  $\alpha$  和  $\beta$  为自适应权重,  $\text{Tr}()$  为求矩阵迹,  $\sigma_k$  为奇异值。该指标用于比较监督候选与伪标签增强候选在内部真实标签验证集上的联合残差差异,

作为候选模型接纳与回退的经验风险代理,而不构成对未知测试集性能提升的确定性保证。

为进一步说明式(9)为何适用于多输出水质回归,补充如下范数解释。令内部验证集包含  $n$  个样本和  $q$  个输出,其真实输出矩阵与候选预测矩阵分别记为  $Y$  与  $\hat{Y}$ ,残差矩阵记为  $E=Y-\hat{Y}$ 。式(9)括号内的差异量记为  $D_{\alpha\beta}(E)$ ,式中  $\alpha, \beta \geq 0$  且不同时为 0。由于 Frobenius 范数与核范数均为矩阵范数,其非负加权和仍满足非负性、齐次性和三角不等式,因此  $D_{\alpha\beta}(E)$  可作为候选预测相对真实输出的联合残差度量。式(9)的保真度得分  $c=1-D_{\alpha\beta}(E)$  与最小化  $D_{\alpha\beta}(E)$  在候选排序上单调等价;下文直接以  $D_{\alpha\beta}(E)$  作为门控量。这里结构仅指残差矩阵的整体能量与奇异谱结构,而非污水处理机理结构。

$$D_{\alpha\beta}(E) = \alpha \|E\|_F + \beta \|E\|_* \quad (10)$$

命题 1(范数界与量级一致性)。设残差矩阵的秩为  $r$ , 且  $r \leq q$ 。由 Frobenius 范数与核范数的标准关系可得式(11)中的上下界。因此,  $D_{\alpha\beta}(E)$  始终被 Frobenius 误差的两个常数倍所夹逼;对于本文  $q=2$  的情形,有  $r \leq 2$ 。该界说明核范数项是对多输出残差谱分布的受控修正,门控量不会脱离总体预测误差的量级。

$$\|E\|_F \leq \|E\|_* \leq \sqrt{r} \|E\|_F, \quad (\alpha + \beta) \|E\|_F \leq D_{\alpha\beta}(E) \leq (\alpha + \beta \sqrt{r}) \|E\|_F \quad (11)$$

命题 2(伪标签增益/偏差的验证集判别)。记纯监督候选与伪标签增强候选在同一内部真实标签验证集上的残差矩阵分别为  $E_{(sup)}$  与  $E_{(aug)}$ , 并定义差值  $\Delta D$  如式(12)。当  $\Delta D < 0$  时,增强候选在  $D_{\alpha\beta}(E)$  所定义的联合残差度量下更接近真实标签,门控接受该候选;当  $\Delta D \geq 0$  时,说明伪标签并未降低该联合经验风险,模型回退至纯监督状态。因而,式(9)能够在真实标签验证集上对伪标签带来联合误差下降与伪标签导致联合残差不降或增大进行定量区分。

$$\Delta D = D_{\alpha\beta}(E_{aug}) - D_{\alpha\beta}(E_{sup}) \quad (12)$$

进一步考虑从内部验证集到未知样本的推广。设增强候选和纯监督候选的标准化验证风险分别记为  $R_{(aug)}$  与  $R_{(sup)}$ 。若内部验证集对当前工况具有代表性,并且以至少  $1 - \delta$  的概率,两个候选的验证风险与总体风险偏差均不超过  $\varepsilon$ , 则当  $R_{(sup)} - R_{(aug)} > 2\varepsilon$  时,可以推出  $R_{(sup)} > R_{(aug)}$ 。证明由总体风险的上、下偏差界直接得到:增强候选的总体风

险不超过其验证风险加  $\varepsilon$ , 而纯监督候选的总体风险不低于其验证风险减  $\varepsilon$ 。这给出了增强候选具有更低总体风险的充分条件。由于有限验证样本、分布漂移及非独立过程数据都会影响  $\varepsilon$ , 本文不把该门控表述为对未知测试集性能提升的无条件保证, 而将其定位为具有范数界和验证风险充分条件支撑的经验风险门控。集成模型阶段, 传统的简单平均忽略了不同模型预测置信度的差异, 本文引入信息熵来量化模型输出的不确定性。对于模型的预测矩阵  $\hat{Y}$ ,  $H$  为当前模型在某一输出维度上的归一化预测熵指标, 其熵  $H$  的计算公式为:

$$H = -\frac{1}{\ln(N)} \sum_{i=1}^N \hat{Y}_i \ln(\hat{Y}_i + \varepsilon) \quad (13)$$

式中,  $\varepsilon = 10^{-10}$  为稳定性修正因子, 定义两个模型的融合权重  $w$  为:

$$w_k = \frac{1 - H_k}{(1 - H_1) + (1 - H_2)}, k \in \{1, 2\} \quad (14)$$

式中,  $k \in \{1, 2\}$  为学习器编号,  $H_k$  为第  $k$  个学习器在当前输出维度上的预测熵,  $w_k$  为相应融合权重, 且  $w_1 + w_2 = 1$ 。最终的集成预测值  $\hat{Y}_{final}$  由两模型的加权值决定

$$\hat{Y}_{final} = w_1 * \hat{Y}_1 + w_2 * \hat{Y}_2 \quad (15)$$

结构保真度门控将结果加权组合, 若交叉伪标签增强后的熵融合验证预测具有更小结构差异, 则接受增强训练集; 反之回退到纯监督训练集。对于最终选中的两个候选模型, 熵权重按当前预测矩阵、当前输出维度重新计算, 而不是把验证阶段权重固定迁移到测试集。五次扰动各产生一个门控后的融合预测, 最终取算术平均, 以降低单次内部划分的偶然性。

## 2 一致性约束与熵加权集成软测量方法

### 2.1 方法总体框架

为充分利用污水处理过程中大量未标记的在线运行数据, 并降低伪标签误差累积对模型性能的影响, 本文构建基于一致性约束与熵加权集成的半监督软测量方法。该方法由数据预处理、MiniRocket-Ridge 基学习器、交叉伪标记、验证集门控、逐输出熵加权融合和多轮扰动聚合等环节组成。各环节并非相互独立的算法简单叠加, 而是按照动态数据表征、伪标签协同利用、候选模型验证、预测结果融合的顺序形成完整的半监督软测量流

程。如图1所示。图中从左到右依次为数据预处理、半监督建模和模型测试三个阶段:数据预处理阶段完成样本划分、EMA与归一化;半监督建模阶段生成伪标签候选,并结合验证门控与熵权融合筛选模型组;模型测试阶段完成加权输出、尺度恢复和性能评价。该流程的核心是先验证、后接纳,即无标签信息仅在改善验证集多输出结构差异时进入最终模型。

其中,EMA用于抑制在线过程变量中的短周期随机扰动;MiniRocket-Ridge作为轻量化的多尺度动态特征学习器和回归预测器;RidgeCV仅用于训练阶段正则化系数的选择;EWC-SS则负责无标签样本的交叉利用、伪标签增强候选模型的筛选以及多学习器预测结果的自适应融合。因此,EMA、MiniRocket和RidgeCV属于模型实现的基础组件,EWC-SS半监督框架是本文方法的核心。设经预处理得到的有标签集、无标签集和外部测试集分别如下公式:

$$D_L = \{(X_i, y_i)\}_{i=1}^{n_l}, \quad D_U = \{X_i\}_{i=1}^{n_u}, \quad D_T = \{X_i\}_{i=1}^{n_t} \quad (16)$$

其中, $X_i$ 表示由多个在线过程变量构成的输入时间窗口, $y_i$ 表示对应的多输出水质标签,包括TN和BOD<sub>5</sub>。为模拟模型对未来运行区间的预测过程,所有数据首先按照采集时间顺序进行外部训练区间和测试区间划分,不对时间序列窗口进行随机打乱。无标签数据仅参与训练阶段的半监督建模,不参与外部测试性能评价。第k轮中,两个初始监督学习器分别由具有不同随机扰动的有标签子集训练,并对无标签集生成伪标签。为降低同源预测误差在自训练过程中的累积,采用交叉伪标记策略:学习器1使用学习器2的预测扩充训练集,学习器2则使用学习器1的预测,从而形成两个半监督增强候选集:

$$\begin{aligned} \hat{Y}_{U,m}^{(k)} &= f_{m,0}^{(k)}(X_U) \quad , m \in \{1, 2\} \\ D_i^{(k)} &= D_{L,i}^{(k)} \cup \{X_U, \hat{Y}_{U,j}^{(k)}\} \quad , i = \{1, 2\}, j = \{2, 1\} \end{aligned} \quad (17)$$

为减弱单一模型自训练造成的误差自增强,本文采用交叉伪标记策略:学习器 $f_1(k)$ 使用学习器 $f_2(k)$ 生成的伪标签扩充训练集,学习器 $f_2(k)$ 使用学习器 $f_1(k)$ 生成的伪标签扩充训练集,从而形成两个半监督增强候选模型。该过程并不假定所有无标签样本都能带来正向信息,而是将伪标签视为需要进一步验证的候选训练信息。为避免低质量伪标签被无条件引入,本文在同一内部真实标签验证集上比较监督候选模型和伪标签增强候选模型的联

合残差差异,并利用式(9)和式(12)计算结构保真度变化。令增强候选与监督候选的联合残差度量差值为 $\Delta D$ :当 $\Delta D < 0$ 时,说明增强候选在当前验证集上具有更小的联合残差,接纳该增强候选;当 $\Delta D \geq 0$ 时,说明伪标签增强没有降低联合验证风险,模型回退至对应的监督候选。由此,一致性约束具体体现为伪标签引入前后模型在真实标签验证集上的联合误差不恶化。

对于门控后保留的两个候选模型,按照式(13)-式(15)分别计算TN和BOD<sub>5</sub>输出维度上的预测熵及其融合权重,并对两个学习器的预测结果进行逐输出融合。与固定平均不同,逐输出熵加权允许不同学习器在TN和BOD<sub>5</sub>预测任务上具有不同的贡献比例。第k轮扰动得到一个门控后的融合预测结果,最终对K轮扰动结果求算术平均,并通过尺度变换的逆映射恢复TN和BOD<sub>5</sub>的原始物理量纲。

## 2.2 模型训练与预测流程

为使所提方法能够在标签稀缺的污水处理场景中复现,下面分别说明模型训练阶段和预测阶段的具体操作。训练阶段的主要任务是确定预处理参数、训练基学习器、生成和筛选伪标签增强模型,并确定多轮模型的融合结果;预测阶段不再利用目标变量真实标签,而是将新的在线过程窗口按照训练阶段确定的处理方式输入已训练模型。

模型训练过程如下。首先,按照采集时间顺序确定外部训练区间和测试区间,并将无标签样本限制在训练阶段可使用的数据范围内。对于第k轮扰动,在有标签训练区间内部划分监督训练子集 $D_{L,r}^{(k)}$ 和内部验证子集 $D_{L,a}^{(k)}$ 。EMA状态、归一化参数以及RidgeCV候选正则化系数均仅由 $D_{L,r}^{(k)}$ 确定;随后使用相同的参数处理 $D_{L,a}^{(k)}$ 、 $D_U$ 和 $D_T$ 。该步骤保证预处理和正则化参数的确定不依赖验证集或测试区间的未来信息。

(1)利用 $D_{L,r}^{(k)}$ 训练两个具有不同随机扰动的MiniRocket-Ridge监督学习器。MiniRocket将每个多变量时间窗口转换为由不同膨胀率、偏置和卷积响应构成的高维特征向量,RidgeCV在预设候选集中选择正则化系数,并完成TN和BOD<sub>5</sub>的多输出回归。

(2)利用两个监督学习器分别预测无标签数据 $D_U$ ,得到两组伪标签。伪标签不直接作为最终训练标签,而是按照交叉伪标记方式交换给另一学习器,用于构建两个增强训练集。

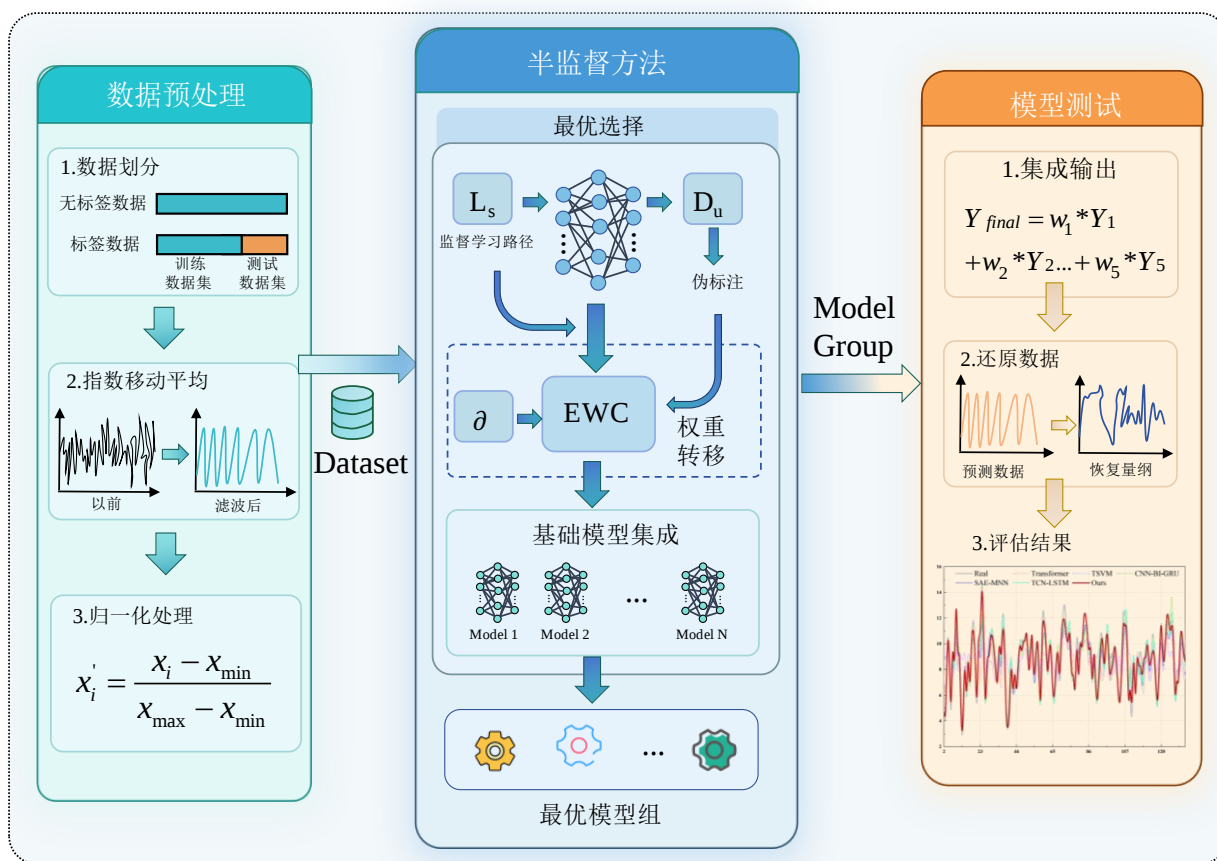


图1 一致性约束与熵加权集成软测量方法总体流程

Fig. 1 Overall framework of the consistency-constrained entropy-weighted ensemble soft-sensing method

(3) 分别利用两个增强训练集重新训练候选模型,并在同一内部真实标签验证集  $D_u^r(k)$  上计算监督候选和增强候选的联合残差度量。验证集只用于候选模型的接纳或回退,不参与伪标签生成。

(4) 根据结构保真度变化执行门控。如果增强候选的联合残差度量下降,则保留增强候选;否则删除当前轮的伪标签增强状态,回退至监督候选。该操作使每一轮无标签样本的利用均受到真实标签验证集约束。

(5) 对门控后保留的两个模型按输出变量计算预测熵及融合权重,并分别得到 TN 和  $BOD_5$  的融合预测。完成 K 轮扰动后,对各轮融合结果求平均,以减弱单一随机划分对最终输出的影响。

模型预测过程如下。当获得新的污水处理过程数据时,首先按照训练阶段相同的窗口长度和变量顺序构造输入时间窗口,并使用训练阶段确定的 EMA 状态和归一化参数进行预处理。随后,将处理后的窗口输入各轮保留的 MiniRocket-Ridge 模型,

分别得到 TN 和  $BOD_5$  预测结果。对于每个输出变量,根据式(13)–式(15)完成模型融合,再对 K 轮预测结果求平均,最后通过逆归一化恢复原始浓度单位,得到最终的软测量结果。预测阶段不使用 TN 和  $BOD_5$  的真实标签,也不重新利用测试区间数据选择 RidgeCV 正则化系数或伪标签接纳条件。在本文的批量测试设置下,熵权按照式(13)–式(15)根据当前预测矩阵计算。详细算法流程伪代码如下算法 1 所述。

#### 算法 1 EWC-SS 模型训练与预测流程

Algorithm 1: EWC-SS Model Training and Prediction Workflow

算法 1 将所提方法概括为一个由预处理、监督建模、交叉伪标记、候选模型门控、熵加权融合和多轮聚合组成的闭环过程。与直接将无标签样本加入训练集的自训练方法相比, EWC-SS 的关键区别在于:伪标签只能形成候选增强状态,只有当该状态在内部真实标签验证集上降低多输出联合残差

**输入:**有标签数据  $D_L$ 、无标签数据  $D_U$ 、外部测试数据  $D_T$ ; 扰动轮数  $K$ ; 结构门控参数  $\alpha$ 、 $\beta$ ; RidgeCV 候选正则化系数集合  $\Lambda$ 。

**步骤1:**按照时间顺序划分外部训练区间和测试区间,避免将相邻时间窗口随机分散到训练集和测试集。

**步骤2:**在第  $k=1, K$  轮扰动中,将当前训练区间划分为监督训练子集  $D_{Lr}^i(k)$  和内部验证子集  $D_{La}^i(k)$ 。

**步骤3:**利用  $D_{Lr}^i(k)$  确定 EMA 状态、归一化参数及 RidgeCV 正则化系数  $\lambda$ ; 使用相同变换处理  $D_{La}^i(k)$ 、 $D_U$  和  $D_T$ 。

**步骤4:**分别在  $D_{Lr}^i(k)$  上训练具有不同随机扰动的两个 MiniRocket-Ridge 学习器  $f_1(k)$  和  $f_2(k)$ 。

**步骤5:**利用  $f_1(k)$  和  $f_2(k)$  对  $D_U$  进行预测,得到两组伪标签,并采用交叉伪标记构建两个增强训练集。

**步骤6:**分别利用两个增强训练集训练候选模型  $f_1^{aug}(k)$  和  $f_2^{aug}(k)$ ,并在同一内部验证集上计算监督候选与增强候选的联合残差度量。

**步骤7:**若增强候选满足  $\Delta D < 0$ ,则接纳增强候选;否则回退至对应监督候选。对门控后保留的模型按输出变量计算熵权并进行融合。

**步骤8:**对  $K$  轮扰动得到的融合预测求算术平均,并通过逆归一化恢复 TN 和  $BOD_5$  的原始量纲。

**步骤9:**对新数据执行相同的 EMA 和归一化处理,输入各轮保留的模型,分别获得预测结果。

**步骤10:**按照式(13)-式(15)完成逐输出融合,对  $K$  轮预测结果求平均,并输出原始量纲下的软测量结果。

**输出:**训练完成的半监督软测量模型及测试区间的 TN、 $BOD_5$  预测结果。

时才被接纳。

### 3 实验分析

#### 3.1 数据集介绍

(a) BSM2 是国际水协会相关研究社区建立的污水处理厂全流程动态基准,包含进水、五段生物反应池、二沉池、污泥处理和控制策略,可用于在同一工况下比较建模与控制方法<sup>[33-36]</sup>。本文从连续仿真序列中选取 12 个在线过程变量作为输入,以出水

TN 和  $BOD_5$  为输出,共 14 个变量。原始 4000 个按时间排列的样本首先按 1:3 顺序分为 1000 个无标签样本和 3000 个有标签样本;随后将有标签部分按 7:3 顺序划分为训练段与测试段,不打乱时间顺序。顺序划分使测试段位于训练段之后,更接近软测量模型上线后预测未来运行区间的情形,也避免随机划分将相邻窗口分散到训练与测试集合所造成的时间泄漏。BSM2 变量定义见表 1,工艺结构见图 2。

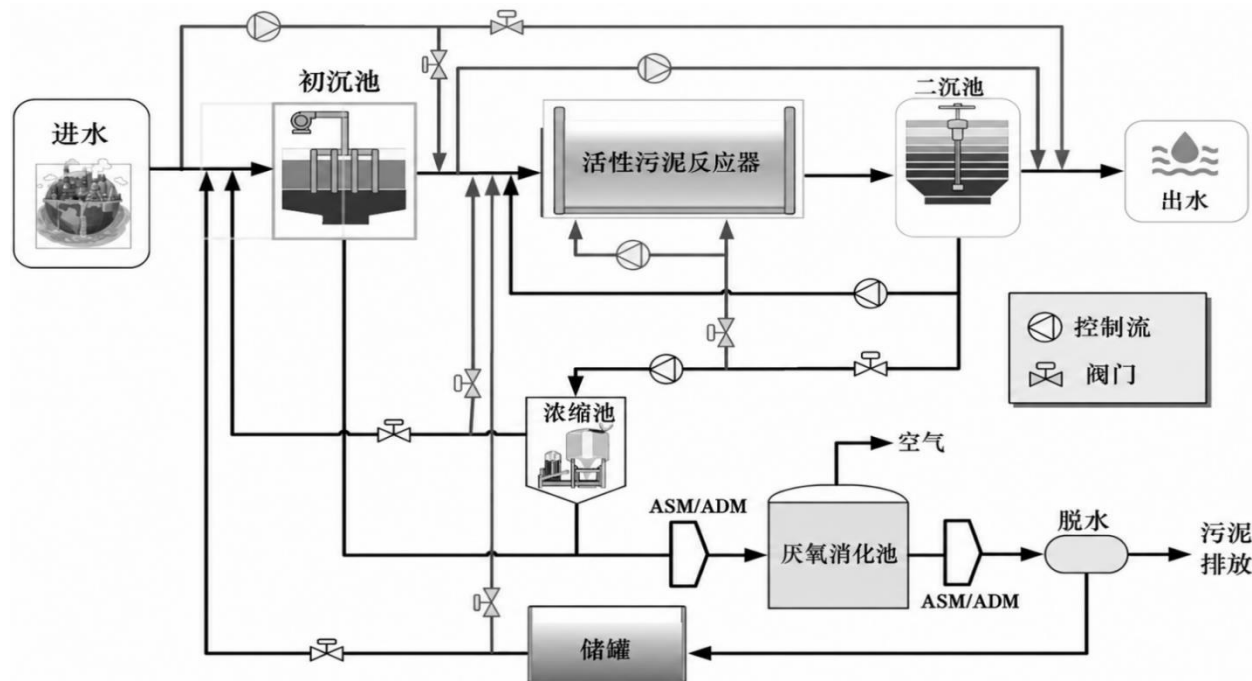


图2 BSM2 污水处理过程示意图

Fig. 2 Schematic Diagram of the BSM2 Wastewater Treatment Process

(b) 真实污水处理厂数据来源于我国某省一座实际运行的多阶段污水处理厂。工艺包含预处理、厌氧/缺氧/好氧生物处理、二沉、化学除磷、补充碳

源、深度过滤和紫外消毒等环节。由于  $BOD_5$  实验室测定周期长,在线过程变量与低频质量标签天然不同步,形成 532 个有标签样本和 2812 个无标签样

表1 BSM2数据集变量表

Table 1 BSM2 Dataset Variable Table

| 序号 | 符号               | 变量说明             | 用途 |
|----|------------------|------------------|----|
| 1  | SN-Oe            | 出水硝酸盐/亚硝酸盐氮浓度    | 输入 |
| 2  | SN-He            | 出水氨氮浓度           | 输入 |
| 3  | SN-Or5           | 第5反应池硝酸盐/亚硝酸盐氮浓度 | 输入 |
| 4  | SN-Hr5           | 第5反应池氨氮浓度        | 输入 |
| 5  | SN-Hr3           | 第3反应池氨氮浓度        | 输入 |
| 6  | SN-Or1           | 第1反应池硝酸盐/亚硝酸盐氮浓度 | 输入 |
| 7  | SN-Or2           | 第2反应池硝酸盐/亚硝酸盐氮浓度 | 输入 |
| 8  | SN-OP            | 初沉池硝酸盐/亚硝酸盐氮浓度   | 输入 |
| 9  | S-Or5            | 第5反应池溶解氧浓度       | 输入 |
| 10 | S-Or1            | 第1反应池溶解氧浓度       | 输入 |
| 11 | S-Se             | 出水易生物降解底物浓度      | 输入 |
| 12 | SN-Hr1           | 第1反应池氨氮浓度        | 输入 |
| 13 | TN               | 出水总氮浓度           | 输出 |
| 14 | BOD <sub>5</sub> | 出水五日生化需氧量        | 输出 |

本。11个输入包括进出水pH、COD、NH<sub>3</sub>-N、TP、SS以及TN,输出为出水TN与BOD<sub>5</sub>。该数据集并不是跨季节或高冲击专项验证数据。

有标签数据严格按采集顺序以7:3划分训练段

和测试段,全部无标签数据仅参与半监督训练。该数据集同时包含负荷变化、测量噪声和真实运行扰动,可用于检验模型从标准化仿真平台迁移到实际污水场景后的稳健性。变量见表2,工艺流程见图3。

### 3.2 实验设置

EWC-SS外层扰动迭代次数为5。岭回归正则化系数由交叉验证选择。所有模型均使用相同的外部训练/测试时段和同一目标量纲进行评价。为保证可复现性,设置系统随机种子为42。硬件环境为NVIDIA GeForce GTX 1650 GPU和Intel Core i5-9400F 2.90 GHz CPU,主要软件环境为PyTorch 1.13.0+cu117及scikit-learn/sktime相关组件,为统一全文单位与符号格式,水质浓度单位统一写为mg/L;Transformer编码器层数=8、注意力头数=4;PatchTST编码器层数=8、patch长度=16、步长=32;iTransformer编码器层数=8、注意力头数=4;batch size=32、学习率=0.001、优化器=AdamW、损失函数=MSE,并使用相同停止准则。

对比模型包括Transformer、CNN-BiGRU、SAE-

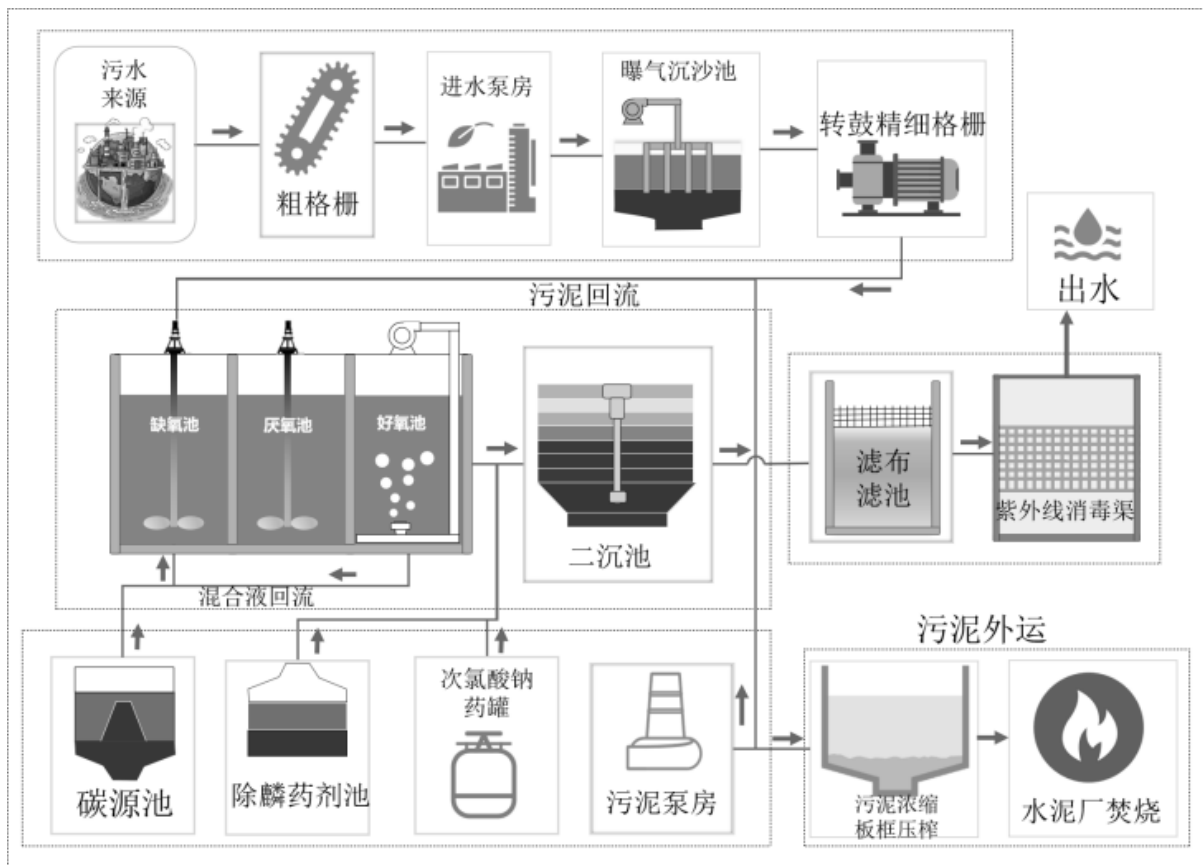


图3 真实污水处理厂处理工艺流程图

Fig. 3 Actual process flowchart for wastewater treatment plants

表2 真实污水处理厂数据集变量表

Table 2 Real Wastewater Treatment Plant Dataset  
Variable Table

| 序号 | 符号                     | 变量说明      | 用途 |
|----|------------------------|-----------|----|
| 1  | pH-IN                  | 进水pH      | 输入 |
| 2  | COD-IN                 | 进水化学需氧量   | 输入 |
| 3  | NH <sub>3</sub> -N     | 进水氨氮      | 输入 |
| 4  | TP-IN                  | 进水总磷      | 输入 |
| 5  | SS-IN                  | 进水悬浮物     | 输入 |
| 6  | TN-IN                  | 进水总氮      | 输入 |
| 7  | pH-OUT                 | 出水pH      | 输入 |
| 8  | COD-OUT                | 出水化学需氧量   | 输入 |
| 9  | NH <sub>3</sub> -N-OUT | 出水氨氮      | 输入 |
| 10 | TP-OUT                 | 出水总磷      | 输入 |
| 11 | SS-OUT                 | 出水悬浮物     | 输入 |
| 12 | TN                     | 出水总氮      | 输出 |
| 13 | BOD <sub>5</sub>       | 出水五日生化需氧量 | 输出 |

CNN、TCN-LSTM、PatchTST 和 iTransformer, 覆盖注意力网络、卷积—循环混合网络、自编码特征学习、时序卷积以及分块/倒置 Transformer 等代表性结构<sup>[37-40]</sup>。评价指标包括均方根误差 (root-mean-square error, RMSE)、平均绝对误差 (mean absolute error, MAE)、Pearson 相关系数 (Pearson correlation coefficient, R)、决定系数 (coefficient of determination, R<sup>2</sup>) 对角线均方根和 (Root Mean Sum of Squares of the Diagonal, RMSSD)。RMSE 与 MAE 越小越好, R 与 R<sup>2</sup> 越接近 1 越好。各指标具体计算公式参见文献[22]。本文的核心研究目标在于标签稀缺条件下半监督软测量的伪标签可靠利用、候选模型接纳与回退机制, 以及多输出预测精度与稳定性的验证。因此, 当前评价体系主要围绕预测误差、相关性、多输出联合偏差、残差分布及整体计算开销展开。对于工况突变条件下的预测延迟、最大动态误差以及模型部署后的单样本在线推理耗时等工程动态指标, 本文通过按时间顺序划分测试集、真实值—预测值时序拟合曲线和带符号残差曲线对动态跟踪能力进行了初步考察。

为进一步评价无标签数据利用策略及候选模型接纳机制对半监督软测量性能的影响, 在保持数据预处理方式、MiniRocket-Ridge 基学习器、外部训练/测试划分、无标签样本和评价指标一致的前提下, 进一步设置六组受控对比策略, 记为 S0-S5。S0 为 Supervised MiniRocket-Ridge, 仅使用有标签样本训练; S1 为 Self-training, 由单学习器生成伪标签并

扩充训练集; S2 为 Co-training (no gate), 由双学习器交叉生成伪标签但不设置候选模型接纳门控; S3 为 Co-training + confidence gate, 在协同训练基础上采用预测置信度门控; S4 为 Co-training + validation MSE gate, 以内部验证集 MSE 下降作为增强候选的接纳依据; S5 为完整 EWC-SS, 采用双学习器交叉伪标记、联合结构差异验证与熵加权集成。通过统一基学习器和数据划分, 可将比较重点集中于半监督学习范式及候选模型接纳策略本身。

### 3.3 全监督基线对比实验分析

所有精度指标均由测试集真实值与预测值逐样本计算; 提升率以各指标上的最优保留基线为参照。表3给出了BSM2上的正式比较结果。所提方法在两个输出和五类指标上均取得最优综合表现: TN 的 RMSE、MAE、R 和 R<sup>2</sup> 分别为 0.0829、0.0382、0.9993 和 0.9986, BOD<sub>5</sub> 分别为 0.0201、0.0096、0.9984 和 0.9969, RMSSD 为 0.0853。最优基线 CNN-BiGRU 的 TN RMSE 和 BOD<sub>5</sub> RMSE 分别为 0.3009 和 0.0978, 所提方法相对降低 72.43% 和 79.44%; TN 和 BOD<sub>5</sub> 的 MAE 分别降低 81.54% 和 84.40%。这说明优势不仅来自少量极端点的改善, 也体现在大多数样本的绝对偏差同步收缩。

图4展示全部保留模型的带符号残差曲线图。OURS 的 TN 和 BOD<sub>5</sub> 残差大部分围绕零轴形成窄幅、连续波动, 能够跟随局部工况变化而不产生长期单侧偏移; 其残差标准差分别约为 0.0827 和 0.0201。相比之下, PatchTST 的 TN 残差标准差约 0.5987, Transformer 和 iTransformer 还出现较大的瞬态尖峰。带正负号的曲线保留了低估与高估方向, 可观察到 OURS 虽在少数突变位置仍有峰值, 但峰值后的恢复更快, 未形成持续漂移。

图5的箱型图进一步比较误差分布。OURS 在两个输出上的中位数接近零, TN 和 BOD<sub>5</sub> 的四分位距分别约 0.0420 和 0.0115, 显著小于各基线; 异常点数量和离散范围也明显收缩。曲线和箱型图与 RMSE/MAE 结论一致, 表明性能提升来自整个残差分布的压缩, 而不是只改善平均水平。

表4显示, 在真实污水处理厂数据上, OURS 对 TN 的 RMSE、MAE、R 和 R<sup>2</sup> 分别为 0.8423、0.6299、0.9551 和 0.9111, 对 BOD<sub>5</sub> 分别为 0.3963、0.2813、0.9580 和 0.9178, RMSSD 为 0.9308。与各指标上的最优保留基线相比, TN RMSE 和 MAE 分别降低 37.67% 和 39.51%, BOD<sub>5</sub> RMSE 和 MAE 分别降低

表3 BSM2在各模型下的性能指标结果

Table 3 Performance Metrics of BSM2 Across Different Models

| 评价指标           | 输出               | Transformer | PatchTST | CNN-BiGRU | SAE-CNN | TCN-LSTM | iTransformer | OURS     | OURS较最优<br>基线/% |
|----------------|------------------|-------------|----------|-----------|---------|----------|--------------|----------|-----------------|
| RMSE           | TN               | 0.4163      | 0.5987   | 0.3009    | 0.3729  | 0.3373   | 0.4182       | 0.0829   | 72.43           |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.1173      | 0.1605   | 0.0978    | 0.1045  | 0.1174   | 0.1232       | 0.0201   | 79.44           |
| MAE            | TN               | 0.2522      | 0.4253   | 0.2068    | 0.2537  | 0.2345   | 0.2602       | 0.0382   | 81.54           |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.0803      | 0.1155   | 0.0614    | 0.0696  | 0.0775   | 0.0853       | 0.0096   | 84.40           |
| R              | TN               | 0.9836      | 0.9667   | 0.9917    | 0.9871  | 0.9894   | 0.9826       | 0.9993   | 0.76            |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.9476      | 0.9201   | 0.9649    | 0.9590  | 0.9480   | 0.9423       | 0.9984   | 3.47            |
| R <sup>2</sup> | TN               | 0.9653      | 0.9283   | 0.9819    | 0.9722  | 0.9772   | 0.9650       | 0.9986   | 1.70            |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.8929      | 0.7995   | 0.9256    | 0.9150  | 0.8927   | 0.8819       | 0.9969   | 7.70            |
| RMSSD          | —                | 0.4325      | 0.6198   | 0.3163    | 0.3873  | 0.3572   | 0.4360       | 0.0853   | 73.02           |
| 总运行时间/s        | —                | 35.4785     | 38.8716  | 51.7267   | 18.1643 | 181.3466 | 45.2058      | 179.4819 | —               |

32.46%和32.88%;TN和BOD<sub>5</sub>的R<sup>2</sup>分别提高18.16%和11.95%,联合RMSSD降低37.24%。尽管真实场景的噪声、负荷变化和样本规模使绝对误差高于BSM2,所提方法在两个输出上的R<sup>2</sup>均超过0.91,说明其优势不依赖理想仿真分布。

图6给出真实值与各模型预测值的时序拟合。OURS能够较好地追踪TN与BOD<sub>5</sub>的总体趋势、局部峰谷和阶段性水平变化;CNN-BiGRU与TCN-LSTM在平稳区间表现较好,但在若干突变段出现振幅不足或滞后,PatchTST和SAE-CNN偏离更明显。图7的带符号残差箱型图显示,OURS的TN和BOD<sub>5</sub>残差中位数分别约0.0013和0.0289,接近零;四分位距分别约1.0235和0.3766,均小于保留基线。由此可见,模型在真实数据上同时降低了系统偏差与随机离散。

### 3.4 半监督学习策略与门控机制对比分析

本节在统一MiniRocket-Ridge基学习器的条件

下,进一步比较纯监督学习、自训练、协同训练以及不同候选模型接纳策略。该实验具有两个目的:一是分析无标签数据及双学习器协同机制是否能够改善标签稀缺条件下的预测性能;二是在相同半监督实验设置下比较无门控、置信度门控、验证MSE门控以及本文联合结构差异准则的性能差异,从而明确不同策略的作用边界。

表5为BSM2数据集上不同半监督策略的对比结果。以仅使用有标签样本的S0为基准,在MiniRocket-Ridge基础模型相同的条件下,完整EWC-SS方法S5将TN、BOD<sub>5</sub>的RMSE分别由0.1139、0.0279降至0.0829、0.0201,降幅为27.22%、27.96%,联合RMSSD由0.1173降至0.0853,降低27.28%,说明合理利用无标签样本能够有效提升多输出软测量模型性能。单学习器自训练方案S1性能提升有限,TN RMSE仅由0.1139小幅降至0.1137,BOD<sub>5</sub> RMSE由0.0279升至0.0307,RMSSD

表4 真实污水数据集在各模型下的性能指标结果

Table 4 Performance Metrics of the real wastewater dataset Across Different Models

| 评价指标           | 输出               | Transformer | PatchTST | CNN-BiGRU | SAE-CNN | TCN-LSTM | iTransformer | OURS    | OURS较最优<br>基线/% |
|----------------|------------------|-------------|----------|-----------|---------|----------|--------------|---------|-----------------|
| RMSE           | TN               | 1.8396      | 2.5820   | 1.3514    | 2.7544  | 1.3925   | 1.8485       | 0.8423  | 37.67           |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.7484      | 1.3350   | 0.6109    | 1.2365  | 0.5868   | 0.7956       | 0.3963  | 32.46           |
| MAE            | TN               | 1.4467      | 1.8047   | 1.0478    | 2.0163  | 1.0413   | 1.4062       | 0.6299  | 39.51           |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.5153      | 0.7816   | 0.4191    | 0.7436  | 0.4307   | 0.5444       | 0.2813  | 32.88           |
| R              | TN               | 0.7943      | 0.6788   | 0.9052    | 0.6020  | 0.8970   | 0.8029       | 0.9551  | 5.51            |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.8434      | 0.5653   | 0.9102    | 0.6495  | 0.9228   | 0.8260       | 0.9580  | 3.81            |
| R <sup>2</sup> | TN               | 0.5759      | 0.1645   | 0.7711    | 0.0493  | 0.7570   | 0.5718       | 0.9111  | 18.16           |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.7068      | 0.0671   | 0.8046    | 0.1997  | 0.8198   | 0.6687       | 0.9178  | 11.95           |
| RMSSD          | —                | 1.9860      | 2.9067   | 1.4830    | 3.0192  | 1.5111   | 2.0124       | 0.9308  | 37.24           |
| 总运行时间/s        | —                | 13.3382     | 8.9116   | 13.9299   | 4.7035  | 39.0897  | 7.0531       | 68.0351 | —               |

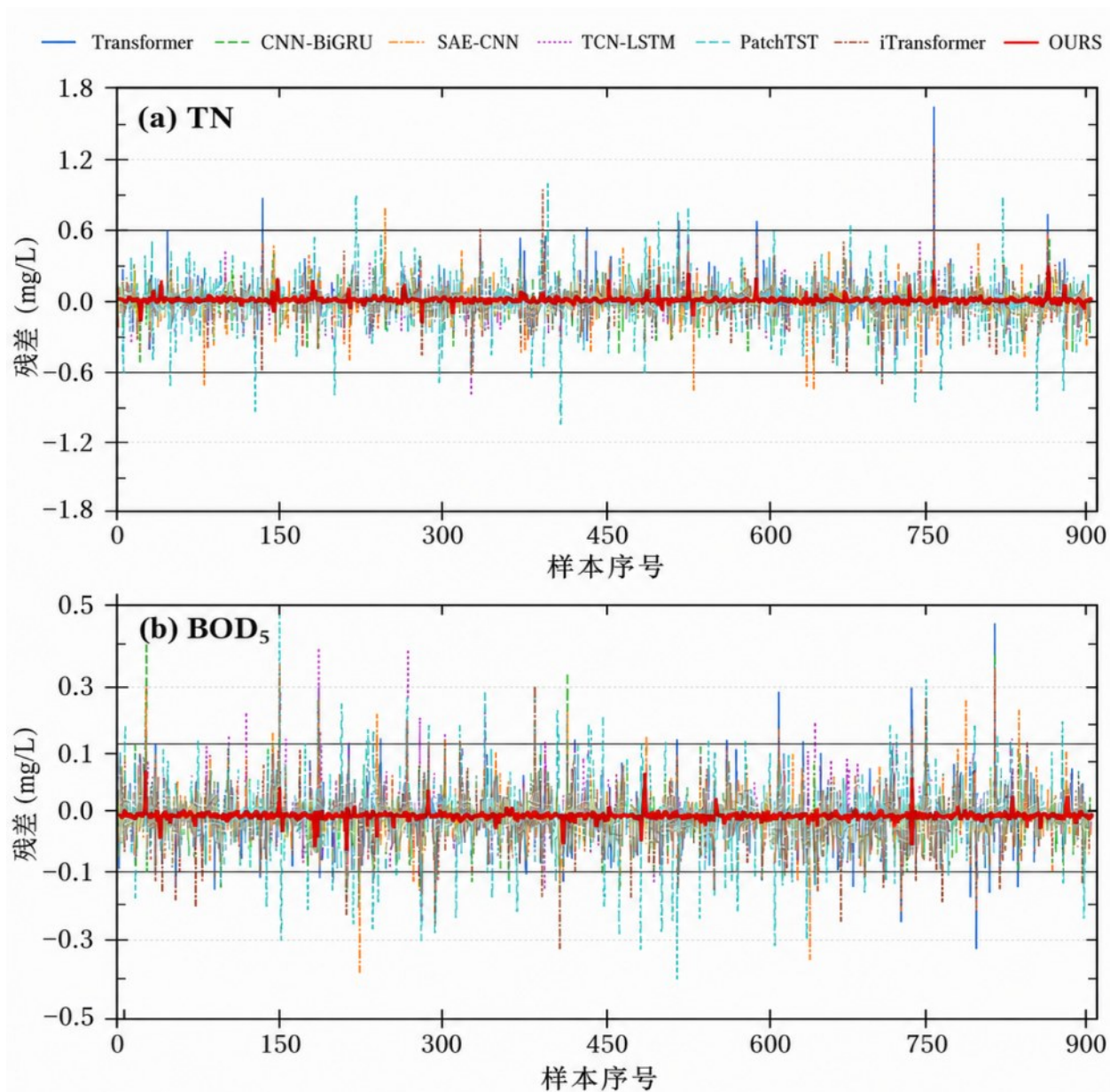


图4 BSM2数据集各模型带符号残差曲线(a)TN变量结果(b) $\text{BOD}_5$ 变量结果

Fig. 4 Symbolic residual curves for each model in the BSM2 dataset: (a) Results for the TN variable; (b) Results for the  $\text{BOD}_5$  variable.

略增至 0.1178, 表明直接利用模型自预测结果扩充训练集无法保证无标签信息带来稳定增益; 双学习器交叉伪标记方案 S2 将 TN、 $\text{BOD}_5$  RMSE 分别降至 0.0924、0.0243, RMSSD 降至 0.0955, 证实学习器交叉信息交换可在一定程度上缓解单模型自训练引发的误差自增强问题。在 S2 架构中引入候选模型筛选机制可进一步优化模型性能: 置信度门控 S3 与验证 MSE 门控 S4 的 TN/ $\text{BOD}_5$  RMSE 分别为 0.0851/0.0227、0.0864/0.0231, 均优于无门控策略 S2; 完整 EWC-SS 方案 S5 的对应指标进一步优化至 0.0829/0.0201, RMSSD 为 0.0853。相比于 S3, S5

的 TN RMSE、 $\text{BOD}_5$  RMSE 与 RMSSD 分别降低 2.59%、11.45%、3.18%; 相比于 S4 则分别降低 4.05%、12.99%、4.59%。实验结果表明, 在 BSM2 数据集上, 候选模型接纳机制能够有效降低伪标签传播风险, 本文所提联合结构差异准则具备更优异的多输出综合误差控制能力。

表 6 给出了真实污水处理厂数据上的比较结果。整体而言, 随着纯监督、自训练、协同训练以及候选模型筛选机制的逐步引入, 多输出联合误差总体呈下降趋势。S0 的 RMSSD 为 1.0227, S1、S2、S3 和 S4 分别下降至 0.9913、0.9880、0.9616 和 0.9437,

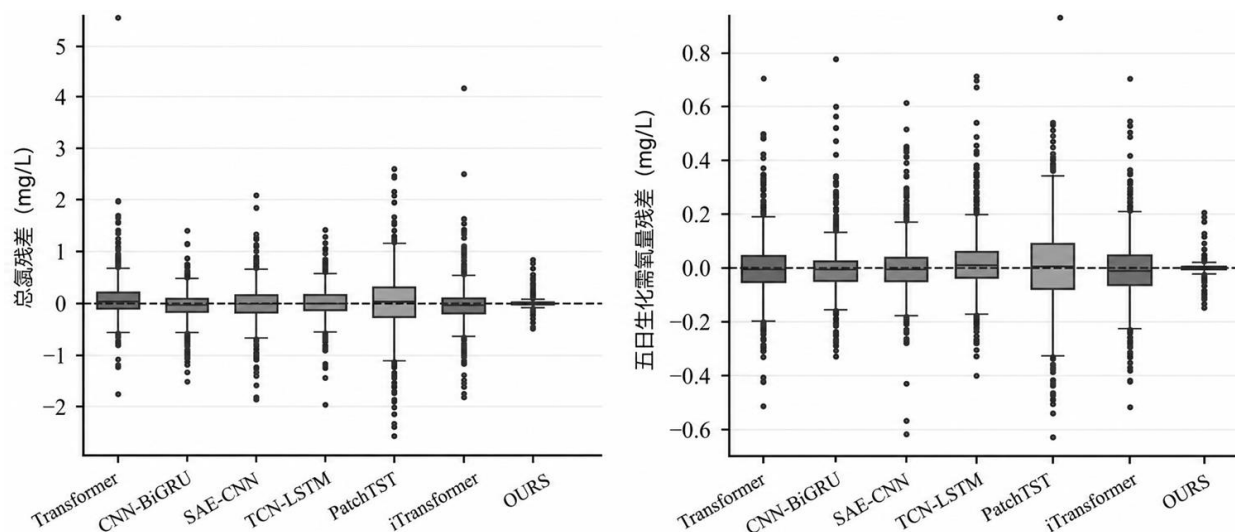


图5 BSM2数据集各模型带符号残差箱型图(a)TN变量的箱形图(b)BOD<sub>5</sub>变量的箱形图

Fig. 5 Box plots showing the symbolic residuals for each model in the BSM2 dataset: (a) Box plot of the TN variable; (b) Box plot of the BOD<sub>5</sub> variable.

完整EWC-SS进一步下降至0.9308。相较纯监督S0, S5的RMSSD降低8.99%, TN RMSE和MAE分别降低9.51%和9.30%, 表明在真实运行噪声和有限标签条件下, 无标签数据仍能够为TN预测提供有效补充。对不同门控方式进行比较可见, S3、S4和S5的TN RMSE分别为0.8722、0.8557和0.8423, RMSSD分别为0.9616、0.9437和0.9308; 与S3相比, S5的TN RMSE和RMSSD分别进一步降低3.43%和3.20%, 与S4相比则分别降低1.57%和1.37%, 其总体趋势与BSM2数据集一致。

从计算成本看, 引入双学习器和重复半监督训练后, 各Co-training策略的运行时间明显高于S0和S1, 反映出半监督性能提升需要额外的离线建模成本。BSM2上S5耗时179.4819 s, 略高于S3但低于S2和S4; 真实数据上S5耗时68.0351 s, 为S2-S5四种双学习器策略中最低。

### 3.5 消融实验分析

本节进一步从完整方法内部组成角度考察EMA预处理、MiniRocket动态表征和EWC-SS半监督模块对最终性能的贡献。设置w/o EMA、w/o MiniRocket、w/o EWC、w/o Entropy Weighting和w/o Structural Fidelity Gate五种变体。w/o EMA不使用EMA滤波方法, 直接进行后续建模; w/o MiniRocket仅使用Ridge模型, 不进行MiniRocket动态特征提取; w/o EWC完全移除EWC-SS模块, 仅保留MiniRocket-Ridge监督训练; w/o Entropy Weighting保留交叉伪标签和结构保真度门控, 将逐输出熵加

权融合替换为等权融合; w/o Structural Fidelity Gate保留交叉伪标签和熵加权融合, 但取消候选模型的结构保真度门控。所有变体使用相同的外部数据划分、输入变量、评价指标和实验设置。

如表7所示, 在BSM2数据集上, 完整模型的TN和BOD<sub>5</sub> RMSE分别为0.0829和0.0201, 联合RMSSD为0.0853。取消EMA后, TN和BOD<sub>5</sub> RMSE分别升至0.1032和0.0260, 联合RMSSD升至0.1065; 取消MiniRocket后, TN和BOD<sub>5</sub> RMSE进一步升至0.4366和0.4020, BOD<sub>5</sub> R<sup>2</sup>降至-0.2579。取消EWC后, TN和BOD<sub>5</sub> RMSE分别为0.4228和0.0586, RMSSD为0.4269。上述结果说明, MiniRocket动态表征和EWC-SS半监督模块对BSM2性能具有较大贡献, EMA则主要改善整体误差波动。进一步考察EWC-SS内部组件可见, 去除熵加权后TN和BOD<sub>5</sub> RMSE分别为0.0937和0.0260, 联合RMSSD为0.0972; 去除结构保真度门控后相应指标为0.0925、0.0240和0.0955。两种消融均劣于完整模型, 表明熵加权融合和结构保真度门控分别从学习器贡献分配和伪标签候选接纳两个层面发挥作用。

如表8所示, 在真实污水处理厂数据集上, 完整模型的TN和BOD<sub>5</sub> RMSE分别为0.8423和0.3963, 联合RMSSD为0.9308。取消EMA后, 联合RMSSD升至1.0845; 取消MiniRocket后, TN RMSE升至2.2316且TN R<sup>2</sup>降至-1.4693; 取消EWC后, TN和BOD<sub>5</sub> RMSE分别升至0.9828和0.4674。这些结果表明, 动态时序表征、噪声抑制和半监督风险控制

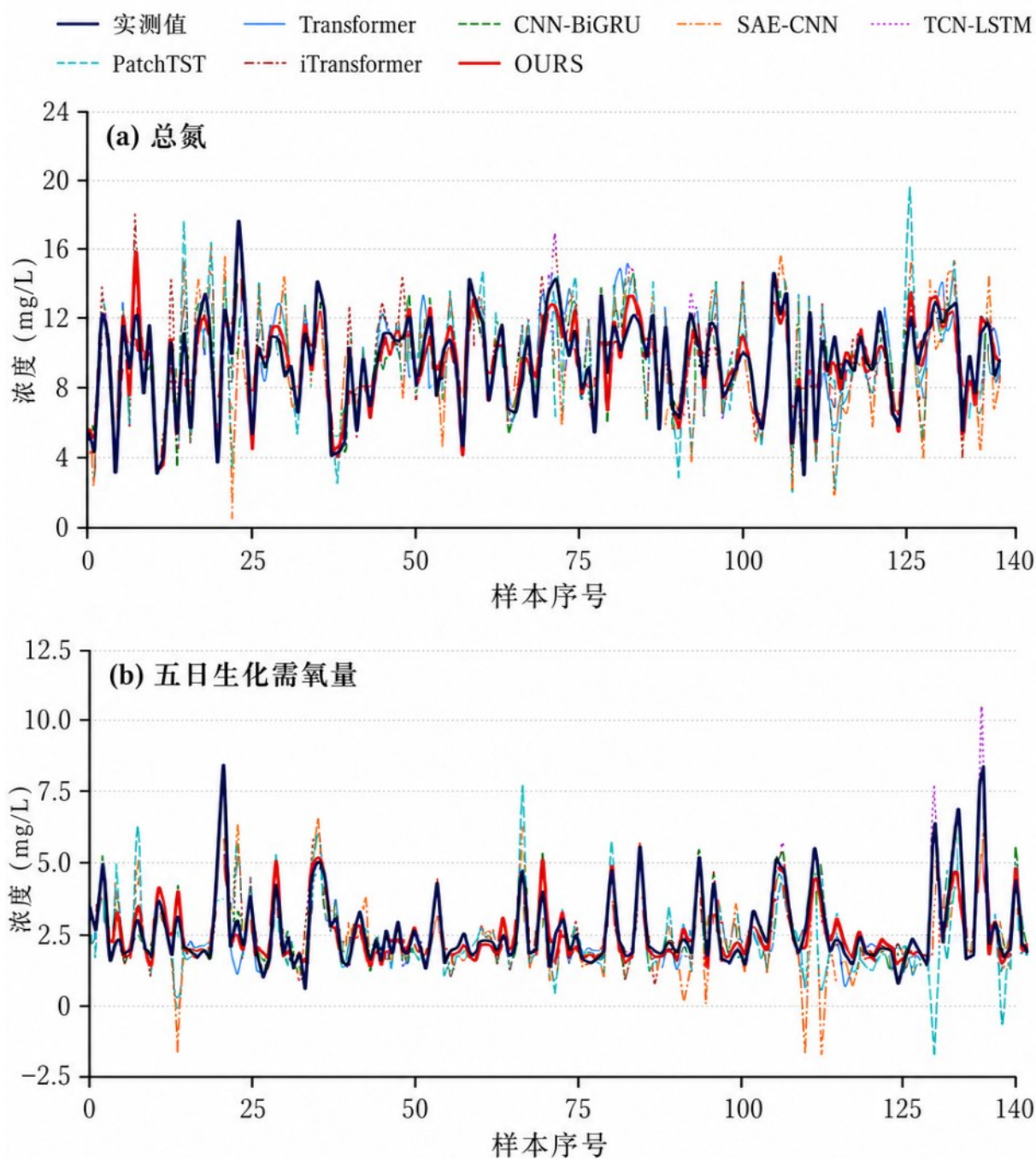


图6 真实污水处理厂数据集各模型真实值—预测值拟合曲线(a)TN变量的拟合曲线(b)BOD<sub>5</sub>变量的拟合曲线

Fig. 6 Real data sets from wastewater treatment plants: fitting curves of actual values versus predicted values for each model (a); fitting curves for the TN variable (b); fitting curves for the BOD<sub>5</sub> variable.

共同支撑了真实污水处理厂数据上的预测稳定性。

对于EWC-SS内部组件,去除熵加权后TN和BOD<sub>5</sub> RMSE分别为0.9161和0.4277, R<sup>2</sup>分别为0.8894和0.8951,联合RMSSD为1.0110;去除结构保真度门控后相应RMSE为0.9068和0.4243, R<sup>2</sup>为0.8943和0.8965,联合RMSSD为1.0011。两种变体

的主要误差指标均未达到完整模型水平,说明熵加权和结构保真度门控具有互补作用。

综合两个数据集的消融结果可以看出,MiniRocket动态表征、EMA预处理、EWC-SS伪标签风险控制以及逐输出自适应融合共同构成了完整模型的性能基础。其中,MiniRocket和EWC-SS的

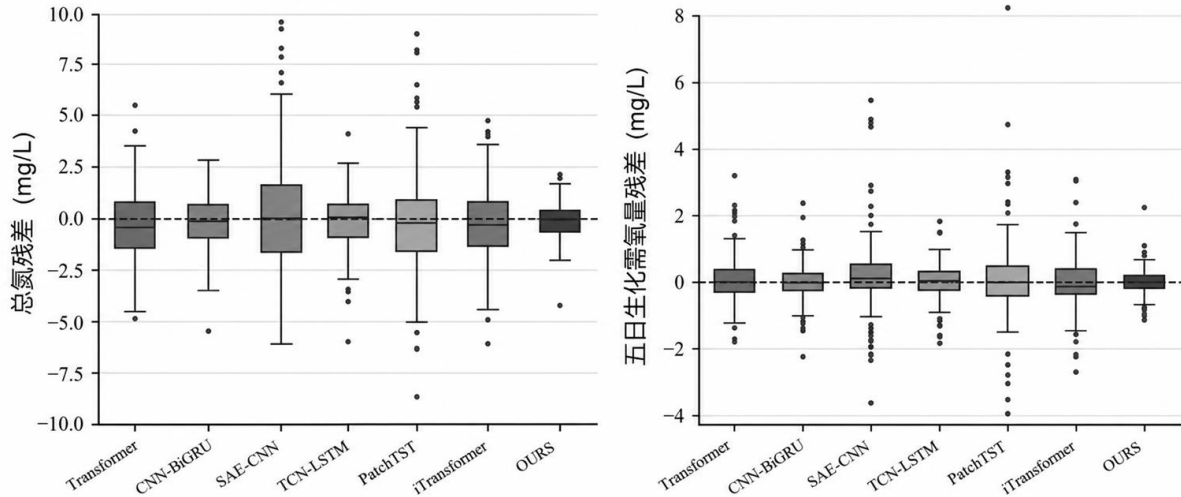
图7 真实污水处理厂数据集各模型带符号残差箱型图(a)TN变量的箱形图(b)BOD<sub>5</sub>变量的箱形图

Fig. 7 Box plots showing the symbolic residuals for each model in the Real dataset: (a) Box plot of the TN variable; (b) Box plot of the BOD<sub>5</sub> variable.

表5 BSM2数据集不同半监督学习与门控策略性能比较

Table 5 Performance comparison of different semi-supervised learning and gating strategies on the BSM2 dataset

| 评价指标           | 输出               | S0     | S1      | S2       | S3       | S4       | S5       |
|----------------|------------------|--------|---------|----------|----------|----------|----------|
| RMSE           | TN               | 0.1139 | 0.1137  | 0.0924   | 0.0851   | 0.0864   | 0.0829   |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.0279 | 0.0307  | 0.0243   | 0.0227   | 0.0231   | 0.0201   |
| MAE            | TN               | 0.0785 | 0.0757  | 0.0574   | 0.0475   | 0.0496   | 0.0382   |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.0195 | 0.0214  | 0.0151   | 0.0133   | 0.0135   | 0.0096   |
| R              | TN               | 0.9987 | 0.9987  | 0.9992   | 0.9993   | 0.9993   | 0.9993   |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.9970 | 0.9963  | 0.9977   | 0.9980   | 0.9979   | 0.9984   |
| R <sup>2</sup> | TN               | 0.9974 | 0.9974  | 0.9983   | 0.9986   | 0.9985   | 0.9986   |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.9939 | 0.9926  | 0.9954   | 0.9960   | 0.9958   | 0.9969   |
| RMSSD          | —                | 0.1173 | 0.1178  | 0.0955   | 0.0881   | 0.0894   | 0.0853   |
| 运行时间/s         | —                | 5.5443 | 12.4120 | 208.7705 | 174.7768 | 192.3496 | 179.4819 |

移除引起最明显的性能退化;EMA对真实噪声场景下的稳定性改善更加突出;熵加权融合和结构保真度门控则分别改善学习器贡献分配和伪标签候选接纳。

### 3.6 SHAP解释分析

为解释模型对输入变量的依赖,采用分组置换Shapley方法进行SHAP分析<sup>[41-42]</sup>。图8和图9均同时给出全局与样本级解释:图8采用统一的四子图结构:上排(a)、(b)对应TN,下排(c)、(d)对应BOD<sub>5</sub>;左列(a)、(c)为平均绝对SHAP值的特征贡献排序图,右列(b)、(d)为SHAP蜂群散点图。图9沿用与图8一致的四子图与图例设置。每个散点对应一个测试样本,颜色由蓝到红表示该变量取值由低到高。图8表明,在BSM2的TN预测中,排名前三的变量为第

表6 真实污水处理厂数据集不同半监督学习与门控策略性能比较

Table 6 Performance comparison of different semi-supervised learning and gating strategies on the real wastewater treatment plant dataset

| 评价指标           | 输出               | S0     | S1      | S2       | S3      | S4       | S5      |
|----------------|------------------|--------|---------|----------|---------|----------|---------|
| RMSE           | TN               | 0.9308 | 0.9134  | 0.8980   | 0.8722  | 0.8557   | 0.8423  |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.4238 | 0.3850  | 0.4118   | 0.4047  | 0.3979   | 0.3963  |
| MAE            | TN               | 0.6945 | 0.6821  | 0.6772   | 0.6562  | 0.6414   | 0.6299  |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.3082 | 0.2888  | 0.2969   | 0.2820  | 0.2897   | 0.2813  |
| R              | TN               | 0.9469 | 0.9478  | 0.9489   | 0.9515  | 0.9537   | 0.9551  |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.9520 | 0.9605  | 0.9549   | 0.9562  | 0.9578   | 0.9580  |
| R <sup>2</sup> | TN               | 0.8914 | 0.8954  | 0.8989   | 0.9047  | 0.9082   | 0.9111  |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.9060 | 0.9224  | 0.9112   | 0.9143  | 0.9171   | 0.9178  |
| RMSSD          | —                | 1.0227 | 0.9913  | 0.9880   | 0.9616  | 0.9437   | 0.9308  |
| 运行时间/s         | —                | 1.3801 | 10.1975 | 165.6535 | 80.9789 | 124.8539 | 68.0351 |

二反应池硝酸盐/亚硝酸盐氮SN-OR2(15.47%)、出水硝酸盐/亚硝酸盐氮SN-OE(13.31%)和第五反应池硝酸盐/亚硝酸盐氮SN-OR5(9.62%);这些变量直接表征硝化—反硝化链条和出水氮形态。对BOD<sub>5</sub>而言,第一反应池氨氮SN-HR1(15.79%)、第一反应池溶解氧S-OR1(10.30%)以及初沉池硝酸盐/亚硝酸盐氮SN-OP(10.22%)贡献较高,反映进水可降解物负荷、供氧状态与氮转化过程之间的耦合。

图9显示,真实污水处理厂TN预测的主要变量为出水SS(19.24%)、进水pH(18.82%)和出水COD(12.87%);BOD<sub>5</sub>预测则主要受出水TP(16.06%)、进水SS(15.62%)和出水SS(15.08%)影响。出水SS和

表7 BSM2数据集消融结果

Table 7 Ablation results for the BSM2 dataset

| 评价指标           | 输出               | w/o EMA | w/o MiniRocket | w/o EWC | w/o Entropy Weighting | w/o Structural Fidelity Gate | OURS   |
|----------------|------------------|---------|----------------|---------|-----------------------|------------------------------|--------|
| RMSE           | TN               | 0.1032  | 0.4366         | 0.4228  | 0.0937                | 0.0925                       | 0.0829 |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.0260  | 0.4020         | 0.0586  | 0.0260                | 0.0240                       | 0.0201 |
| MAE            | TN               | 0.0358  | 0.2461         | 0.1145  | 0.0424                | 0.0339                       | 0.0382 |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.0100  | 0.2503         | 0.0313  | 0.0117                | 0.0100                       | 0.0096 |
| R              | TN               | 0.9989  | 0.9810         | 0.9822  | 0.9991                | 0.9991                       | 0.9993 |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.9974  | 0.5357         | 0.9866  | 0.9974                | 0.9978                       | 0.9984 |
| R <sup>2</sup> | TN               | 0.9979  | 0.9619         | 0.9641  | 0.9982                | 0.9983                       | 0.9986 |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.9947  | -0.2579        | 0.9730  | 0.9947                | 0.9954                       | 0.9969 |
| RMSSD          | —                | 0.1065  | 0.5935         | 0.4269  | 0.0972                | 0.0955                       | 0.0853 |

表8 真实污水处理厂数据集消融结果

Table 8 Ablation results for the actual wastewater treatment plant dataset

| 评价指标           | 输出               | w/o EMA | w/o MiniRocket | w/o EWC | w/o Entropy Weighting | w/o Structural Fidelity Gate | OURS   |
|----------------|------------------|---------|----------------|---------|-----------------------|------------------------------|--------|
| RMSE           | TN               | 0.9353  | 2.2316         | 0.9828  | 0.9161                | 0.9068                       | 0.8423 |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.5491  | 0.7553         | 0.4674  | 0.4277                | 0.4243                       | 0.3963 |
| MAE            | TN               | 0.7360  | 1.7914         | 0.7296  | 0.6812                | 0.6711                       | 0.6299 |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.3764  | 0.4772         | 0.3198  | 0.2976                | 0.2964                       | 0.2813 |
| R              | TN               | 0.9440  | 0.6315         | 0.9386  | 0.9464                | 0.9479                       | 0.9551 |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.9177  | 0.8596         | 0.9422  | 0.9510                | 0.9517                       | 0.9580 |
| R <sup>2</sup> | TN               | 0.8904  | -1.4693        | 0.8750  | 0.8894                | 0.8943                       | 0.9111 |
|                | BOD <sub>5</sub> | 0.8422  | 0.3884         | 0.8828  | 0.8951                | 0.8965                       | 0.9178 |
| RMSSD          | —                | 1.0845  | 2.3560         | 1.0883  | 1.0110                | 1.0011                       | 0.9308 |

COD可表征颗粒/有机物去除状态,pH会影响微生物活性和氮转化环境,因而这些排序具有过程合理性。需要指出,SHAP度量的是模型层面的条件贡献而非因果效应;高贡献变量可用于传感器维护优先级、异常诊断和后续机理实验设计,但不能单独作为工艺调控因果依据。

### 3.7 讨论与分析

所提方法的性能提升来自动态表征、伪标签风险控制与逐输出集成的协同,而不是单一模块或单一指标的偶然优势。半监督策略比较进一步表明,性能提升并非仅来自MiniRocket-Ridge基学习器:与纯监督S0相比,完整EWC-SS在两个数据集上均降低联合RMSSD;S1与S2的比较说明双学习器交叉伪标记总体上比单模型自训练更有利于稳定利用无标签数据;S2-S5之间的比较则表明,候选模型接纳准则会进一步影响半监督学习效果。OURS在少数冲击位置出现瞬时峰值,却较快回到零轴附近。该现象与EWC-SS的设计相符:MiniRocket提供多尺度局部变化特征,结构门控阻止使整体联合误差恶化的伪标签候选,熵加权则允许两个学习器

在TN与BOD<sub>5</sub>上采用不同贡献比例。消融结果进一步区分了各组件作用。运行时间结果反映了精度与计算成本之间的权衡。OURS在BSM2和真实污水处理厂数据上的端到端时间分别为179.4819 s和68.0351 s。BSM2上的耗时与TCN-LSTM的训练与推理总和181.3466 s接近;真实污水处理厂上的OURS耗时仍高于全部保留基线,但仍能够满足工业现场实时应用要求。SHAP结果为统计性能提供了过程层面的可解释补充。

本研究仍存在若干局限。第一,仅使用一个基准数据集和一个真实污水处理厂,尚不能覆盖不同处理工艺、气候季节和地区水质;第二,门控依赖5%的内部标签验证集,在极端标签稀缺、突发分布漂移或验证样本代表性不足时可能失稳;第三,当前方法仍属于离线重复训练,尚未集成在线漂移检测、持续学习和不确定性校准。

后续研究将在多污水处理厂、多季节和不同工艺线上开展滚动时序验证,报告多随机种子均值、置信区间及统计显著性;引入概念漂移检测、在线更新和校准不确定性,使门控阈值能够随工况变

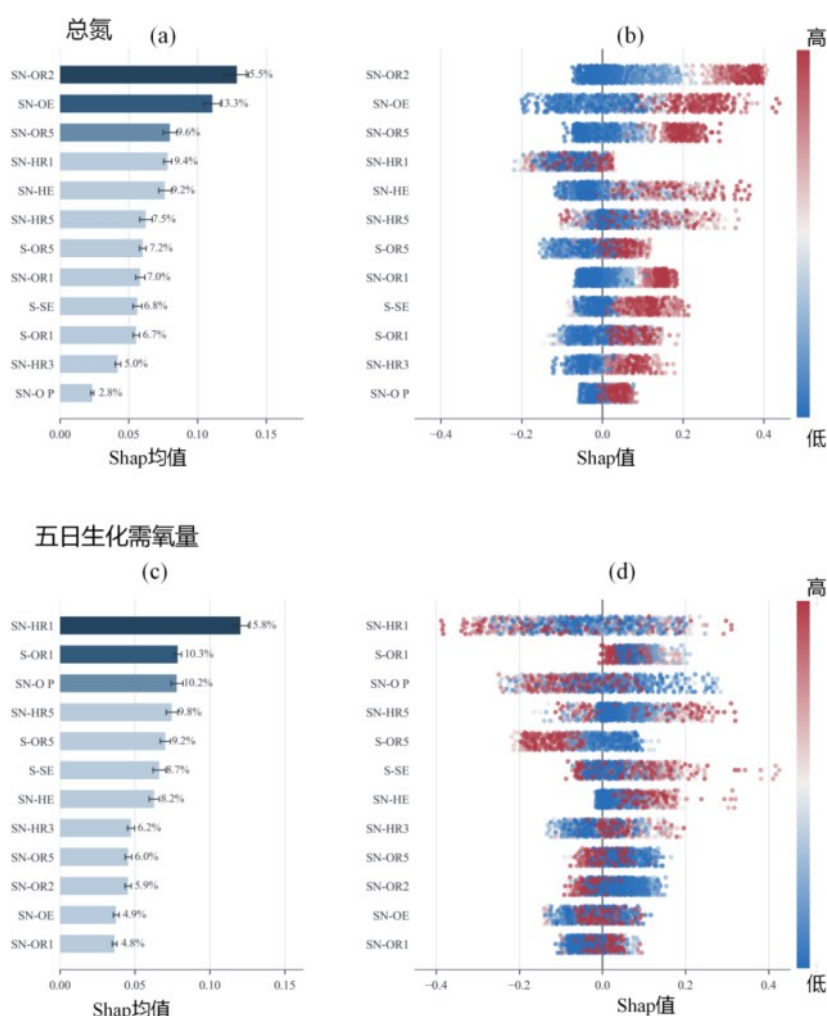


图8 BSM2数据集SHAP分析:(a)TN贡献排序;(b)TN蜂群图;(c)BOD<sub>5</sub>贡献排序;(d)BOD<sub>5</sub>蜂群图

Fig. 8 SHAP analysis on BSM2: (a) TN ranking; (b) TN beeswarm; (c) BOD<sub>5</sub> ranking; (d) BOD<sub>5</sub> beeswarm

注:蜂群图(b)、(d)中,红色表示高特征值、蓝色表示低特征值;SHAP值正/负分别表示正/负向贡献(下同)。

In Figures (b) and (d), red denotes high eigenvalues and blue denotes low eigenvalues; positive or negative SHAP values indicate positive or negative contributions, respectively (the same applies below).

化;结合质量守恒、反应动力学或控制约束构建物理信息一致性。在工程部署层面,将进一步围绕进水负荷突变、运行参数调整及出水异常等典型动态场景,建立事件级动态评价协议,量化模型从工况变化发生到预测响应的延迟、冲击窗口内的最大动态误差,以及模型加载后的在线推理耗时,并结合边缘计算或实际控制平台开展持续在线验证。

## 4 结论

本文提出一种基于一致性约束与熵加权集成的污水处理半监督软测量方法。该方法以EMA和标准化抑制短周期扰动,以MiniRocket-Ridge构建多尺度动态基学习器,并通过双学习器交叉伪标

记、内部真实标签验证驱动的候选模型接纳与回退、逐输出熵加权融合及多轮扰动聚合,形成从模型训练到预测输出的闭环流程。与最优全监督基线相比,TN和BOD<sub>5</sub>的RMSE在BSM2数据集上分别降低72.43%和79.44%,在真实污水处理厂数据上分别降低37.67%和32.46%;在统一MiniRocket-Ridge基学习器下,EWC-SS在两个数据集上均取得最低联合RMSSD,分别为0.0853和0.9308。消融实验表明,去除MiniRocket或EWC-SS后联合RMSSD分别升至BSM2上的0.5935和0.4269、真实污水处理厂数据上的2.3560和1.0883,性能退化最为明显;去除熵加权或结构保真度门控后,联合RMSSD在BSM2上分别升至0.0972和0.0955,在真实污水处理

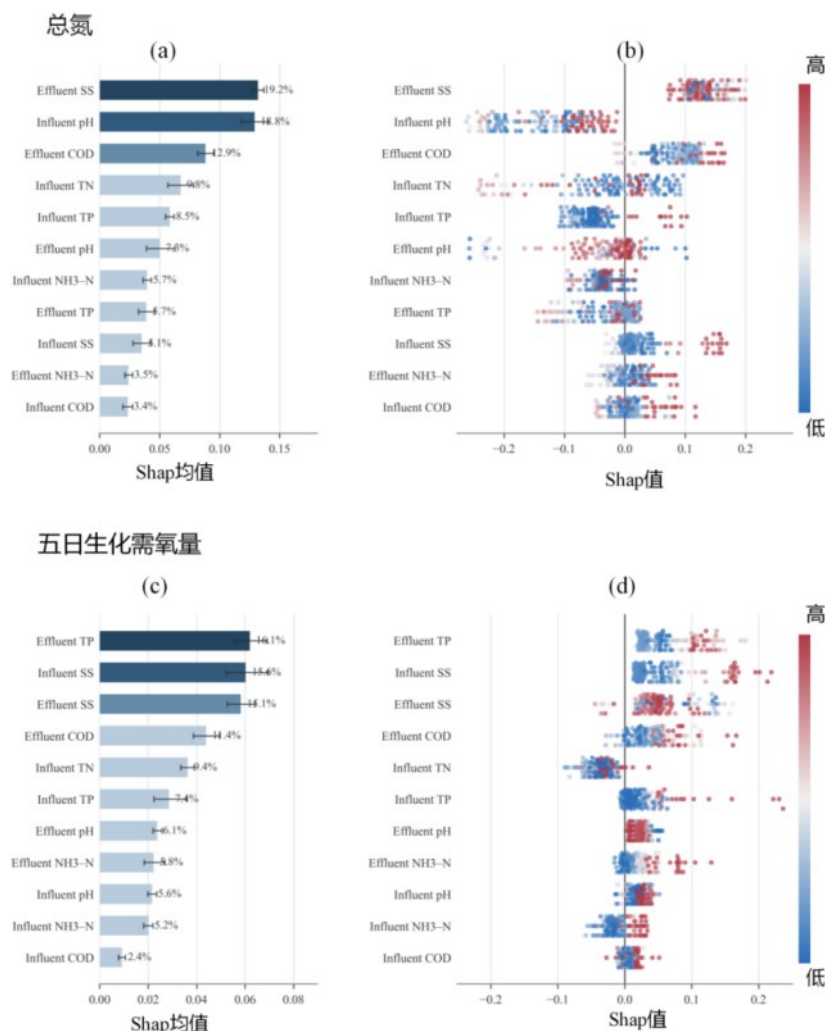


图9 真实污水处理厂数据集SHAP分析:(a)TN贡献排序;(b)TN蜂群图;(c)BOD<sub>5</sub>贡献排序;(d)BOD<sub>5</sub>蜂群图

Fig. 9 SHAP analysis on the real dataset: (a) TN ranking; (b) TN beeswarm; (c) BOD<sub>5</sub> ranking; (d) BOD<sub>5</sub> beeswarm

厂数据上分别升至1.0110和1.0011,说明动态表征、伪标签风险控制、候选模型筛选和自适应融合共同构成了方法的性能基础。SHAP分析表明,主要变量贡献与污水处理过程中氮转化、有机物去除和固体状态变化的机理认识一致。需要指出的是,本文结论目前基于BSM2和一个真实污水处理厂数据集,且未施加质量守恒或反应动力学硬约束,因而不宜外推为跨厂、跨季节或极端冲击工况下的普适结论。后续将围绕跨厂迁移、长期概念漂移、置信区间预测和在线闭环验证开展研究。

## 参考文献

- [1] Venkatasubramanian V, Rengaswamy R, Yin K W, et al. A review of process fault detection and diagnosis Part I: Quantitative model-based methods[J]. Computers & Chemical Engineering, 2003, 27(3): 293–311.
- [2] Qin S J. Survey on data-driven industrial process monitoring and diagnosis[J]. Annual Reviews in Control, 2012, 36(2): 220–234.
- [3] Perera Y S, Ratnaweera D A A C, Dasanayaka C H, et al. The role of artificial intelligence-driven soft sensors in advanced sustainable process industries: a critical review[J]. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 2023, 121: 105988.
- [4] Luttmann R, Bracewell D G, Cornelissen G, et al. Soft sensors in bioprocessing: a status report and recommendations[J]. Biotechnology Journal, 2012, 7(8): 1040–1048.
- [5] Mowbray M, Vallerio M, Perez-Galvan C, et al. Industrial data science – a review of machine learning applications for chemical and process industries[J]. Reaction Chemistry & Engineering, 2022, 7(7): 1471–1509.
- [6] Kadlec P, Gabrys B, Strandt S. Data-driven soft sensors in the process industry[J]. Computers & Chemical Engineering, 2009, 33(4): 795–814.
- [7] Kadlec P, Grbić R, Gabrys B. Review of adaptation mechanisms for data-driven soft sensors[J]. Computers & Chemical Engineering, 2011, 35(1): 1–24.
- [8] 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: 88–107.

- [9] Ching P M L, So R H Y, Morek T. Advances in soft sensors for wastewater treatment plants: a systematic review[J]. *Journal of Water Process Engineering*, 2021, **44**: 102367.
- [10] Bahramian M, Dereli R K, Zhao W Q, et al. Data to intelligence: the role of data-driven models in wastewater treatment[J]. *Expert Systems with Applications*, 2023, **217**: 119453.
- [11] Ching P M L, Zou X, Wu D, et al. Development of a wide-range soft sensor for predicting wastewater BOD5 using an eXtreme gradient boosting (XGBoost) machine[J]. *Environmental Research*, 2022, **210**: 112953.
- [12] Pisa I, Santfín I, Vicario J L, et al. ANN-based soft sensor to predict effluent violations in wastewater treatment plants[J]. *Sensors*, 2019, **19**(6): 1280.
- [13] Teh H Y, Kempa-Liehr A W, Wang K I. Sensor data quality: a systematic review[J]. *Journal of Big Data*, 2020, **7**(1): 11.
- [14] Wang X Y, Wei W G, Yoo C, et al. Data-driven fault detection and diagnosis methods in wastewater treatment systems: a comprehensive review[J]. *Environmental Research*, 2025, **268**: 120822.
- [15] Wu J, Tang L L, Jin S Q, et al. Modeling an adaptive hybrid soft sensor with co-training learning toward applications in wastewater treatment[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2023, **62**(41): 16841–16853.
- [16] Li T Z, Gao S W, Dong X H. Semi-supervised soft sensor modeling based on reward mechanism[J]. *Measurement*, 2025, **247**: 116761.
- [17] Li Y W, Jin H P, Dong S L, et al. Pseudo-labeling optimization based ensemble semi-supervised soft sensor in the process industry[J]. *Sensors*, 2021, **21**(24): 8471.
- [18] Jin H P, Rao F H, Yu W Y, et al. Pseudo label estimation based on label distribution optimization for industrial semi-supervised soft sensor[J]. *Measurement*, 2023, **217**: 113036.
- [19] Wang Y C, Jin H P, Chen X G, et al. Online-dynamic-clustering-based soft sensor for industrial semi-supervised data streams[J]. *Sensors*, 2023, **23**(3): 1520.
- [20] Jin H P, Liu G K, Qian B, et al. Semi-supervised soft sensor development based on dynamic dimensionality reduction-assisted large-scale pseudo label optimization and sample-weighted quality-relevant deep learning[J]. *Chemical Engineering Science*, 2024, **298**: 120387.
- [21] Ramírez-Sanz J M, Maestro-Prieto J A, Arnaiz-González Á, et al. Semi-supervised learning for industrial fault detection and diagnosis: a systemic review[J]. *ISA Transactions*, 2023, **143**: 255–270.
- [22] Wu J, Zhou J W, Tang L L, et al. Tackling data scarcity in wastewater treatment resulting from time-delay: a semi-supervised collaborative MTN-MRR framework with batch consistency confidence[J]. *Water Research*, 2026, **292**: 125249.
- [23] Blum A, Mitchell T. Combining labeled and unlabeled data with co-training[C]//*Proceedings of the Eleventh Annual Conference on Computational Learning Theory*. Madison Wisconsin USA. ACM, 1998: 92–100.
- [24] Laine S, Aila T. Temporal ensembling for semi-supervised learning[EB/OL]. 2016: arXiv: 1610.02242. <https://arxiv.org/abs/1610.02242>
- [25] Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory[J]. *Neural Computation*, 1997, **9**(8): 1735–1780.
- [26] Cho K, van Merriënboer B, Gulcehre C, et al. Learning phrase representations using RNN encoder – decoder for statistical machine translation[C]//*Proceedings of the 2014 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP)*. Doha, Qatar Association for Computational Linguistics, 2014: 1724–1734.
- [27] Bai S J, Kolter J Z, Koltun V. An empirical evaluation of generic convolutional and recurrent networks for sequence modeling[EB/OL]. 2018: arXiv: 1803.01271. <https://arxiv.org/abs/1803.01271>
- [28] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, et al. Attention is all you need [J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2017, **30**: 5998–6008.
- [29] Zhou H Y, Zhang S H, Peng J Q, et al. Informer: beyond efficient transformer for long sequence time-series forecasting[J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2021, **35**(12): 11106–11115.
- [30] Wu H X, Xu J H, Wang J M, et al. Autoformer: decomposition transformers with auto-correlation for long-term series forecasting [C]//*Neural Information Processing Systems*, 2021
- [31] Nie Y Q, Nguyen N H, Sinthong P, et al. A time series is worth 64 words: long-term forecasting with transformers[EB/OL]. 2022: arXiv: 2211.14730. <https://arxiv.org/abs/2211.14730>
- [32] Hoerl A E, Kennard R W. Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems[J]. *Technometrics*, 1970, **12**(1): 55–67.
- [33] Jeppsson U, Pons M N, 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.
- [34] Nopens I, Benedetti L, Jeppsson U, et al. Benchmark Simulation Model No2: finalisation of plant layout and default control strategy [J]. *Water Science and Technology*, 2010, **62**(9): 1967–1974.
- [35] Gernaey. Benchmarking of Control Strategies for Wastewater Treatment Plants[M]. IWA Publishing, 2014.
- [36] Jeppsson U, Alex J, Batstone D J, et al. Benchmark simulation models, quo vadis? [J]. *Water Science and Technology*, 2013, **68** (1): 1–15.
- [37] Benedetti L, De Baets B, Nopens I, et al. Multi-criteria analysis of wastewater treatment plant design and control scenarios under uncertainty[J]. *Environmental Modelling & Software*, 2010, **25**(5): 616–621.
- [38] Lundberg S M, Lee S I. A unified approach to interpreting model predictions[C]//*Neural Information Processing Systems*, 2017
- [39] Marco Tulio Ribeiro, Sameer Singh, Carlos Guestrin. "Why Should I Trust You "[C]. *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, 2016: 1135–1144.
- [40] Gupta R, Zhang L, Hou J Y, et al. Review of explainable machine learning for anaerobic digestion[J]. *Bioresource Technology*, 2023, **369**: 128468.
- [41] Duarte M S, Martins G, Oliveira P, et al. A review of computational modeling in wastewater treatment processes[J]. *ACS ES&T Water*, 2024, **4**(3): 784–804.
- [42] Alprol A E, Mansour A T, Ibrahim M E E, et al. Artificial intelligence technologies revolutionizing wastewater treatment: current trends and future prospective[J]. *Water*, 2024, **16**(2): 314.