

DOI:10.13205/j.hjgc.202603011

许轲桐,曾鸿滨,陈丽萍,等.基于小波去噪的LSTM-Transformer模型在河流断面水质预测分析中的应用研究[J].环境工程,2026,44(3):125-135.

XU K T, ZENG H B, CHEN L P, et al. Application of a wavelet denoising-based LSTM-Transformer model for water quality prediction at river cross-sections[J]. Environmental Engineering, 2026, 44(3): 125-135.

基于小波去噪的LSTM-Transformer模型在河流断面水质预测分析中的应用研究

许轲桐¹ 曾鸿滨¹ 陈丽萍¹ 郑茜匀¹ 陈航¹ 谢晓婧¹ 袁婧¹ 韦朝海^{1,2,3} 邱光磊^{1,2,3,4*}

(1. 华南理工大学 环境与能源学院, 广州 510006; 2. 工业聚集区污染控制与生态修复教育部重点实验室, 广州 510006; 3. 固体废物污染控制与资源化广东省重点实验室, 广州 510006; 4. 国家黄河流域生态保护和高质量发展联合研究中心, 北京 100012)

摘要:提出了一种基于小波去噪的长短时记忆网络(LSTM)-Transformer模型。以我国华南地区2个市控河流断面2021—2024年的逐小时水质监测数据(水温、浊度、pH、电导率、溶解氧)为基础,首先采用离散小波变换进行去噪,随后构建了融合LSTM与Transformer的预测模型。研究表明:该模型在2个站点对溶解氧(DO)未来4 h的预测中均表现出色[站点1:决定系数(R^2)=0.8015,平均绝对误差(MAE)=0.5169 mg/L,均方根误差(RMSE)=0.8494 mg/L;站点2: R^2 =0.8873, MAE=0.4456 mg/L, RMSE=0.7143 mg/L],性能显著均优于单一的LSTM、Transformer模型(R^2 平均提高5.7%, MAE和RMSE平均分别降低20.2%和10.4%)。此外,应用SHAP可解释性方法进行特征重要性分析与全局影响解读,揭示了影响DO的关键水质因子及其与DO之间复杂的非线性关系具有显著的站点异质性,强调了结合具体环境背景(如地理特征、水文条件、污染源分布等)进行机理解释的必要性。研究结果可为区域河流水质的高精度实时预测与智慧化管理提供一种有效且可解释的技术参考。

关键词:水质预测;深度学习;小波去噪;LSTM-Transformer模型;SHAP可解释性分析

Application of a wavelet denoising-based LSTM-Transformer model for water quality prediction at river cross-sections

XU Ketong¹, ZENG Hongbin¹, CHEN Liping¹, ZHENG Qianyun¹, CHEN Hang¹, XIE Xiaojing¹, YUAN Jing¹,
WEI Chaohai^{1,2,3}, QIU Guanglei^{1,2,3,4*}

(1. School of Environment and Energy, South China University of Technology, Guangzhou 510006, China; 2. Key Laboratory of Pollution Control and Ecological Restoration in Industrial Clusters, Ministry of Education, Guangzhou 510006, China;
3. Guangdong Provincial Key Laboratory of Solid Wastes Pollution Control and Recycling, Guangzhou 510006, China;
4. National Joint Research Center for Ecological Conservation and High Quality Development of the Yellow River Basin, Beijing 100012, China)

Abstract: This study proposed a hybrid Long Short-Term Memory (LSTM)-Transformer model integrated with wavelet denoising for water quality prediction. Using hourly monitoring data (water temperature, turbidity, pH, conductivity, and

收稿日期:2026-02-01; 修改日期:2026-03-09; 接收日期:2026-03-10

基金项目:国家自然科学基金项目(52270035, 51808297); 广东省自然科学基金项目(2021A1515010494); 广东省珠江人才计划(2019QN01L125); 广州市重点研发计划(2023B03J1334)

第一作者:许轲桐(2002—),男,硕士研究生,主要研究方向为水环境大数据科学与工程。xuketong@scut.edu.cn

* 通信作者:邱光磊(1984—),男,教授,主要研究方向为水污染控制理论与技术。qiugl@scut.edu.cn

dissolved oxygen) collected from two municipally controlled river cross-sections in South China from 2021 to 2024, the discrete wavelet transform was first applied for noise reduction. Subsequently, a predictive model combining LSTM and Transformer architectures was constructed. Experimental results demonstrated that the proposed model achieved outstanding performance in predicting dissolved oxygen (DO) concentrations for the next four hours at both sites (Site 1: coefficient of determination (R^2)=0.8015, mean absolute error (MAE)=0.5169 mg/L, root mean square error (RMSE)=0.8494 mg/L; Site 2: R^2 =0.8873, MAE=0.4456 mg/L, RMSE=0.7143 mg/L), significantly outperforming standalone LSTM and Transformer models (the R^2 of the proposed model increased by 5.7%, while MAE and RMSE decreased by 20.2% and 10.4%, respectively). Furthermore, the SHAP interpretability method was employed for feature importance analysis and global impact interpretation, revealing that the key water quality factors influencing DO and their complex nonlinear relationships exhibited significant site-specific heterogeneity. This underscores the necessity of incorporating specific environmental contexts (e.g., geographical features, hydrological conditions, and pollution source distribution) for mechanistic interpretation. The findings of this study provide an effective and interpretable technical reference for high-precision real-time prediction and intelligent management of regional river water quality.

Keywords: water quality prediction; deep learning; wavelet denoising; LSTM-Transformer model; SHAP interpretability analysis

0 引言

“双碳”目标为我国生态文明建设提供了战略指引,也对水环境治理提出了更高要求。河流水质实时精准预测是保障水资源可持续利用与生态安全的关键环节。尤其在在我国南方感潮河段,水体受潮汐往复流、盐淡水混合及城市排污等多重压力影响,溶解氧(DO)动态变化剧烈,低氧事件频发,已成为威胁河流生态健康与城市水安全的典型问题^[1]。我国“十五五”生态文明建设的总体目标是美丽中国建设取得新的重大进展^[2]。随着我国生态环境治理体系和治理能力现代化的推进,水环境管理与生态可持续发展日益受到重视,对水质动态变化的监测与预警需求也愈发迫切^[3]。若能实现DO等水质极端变化的早期识别与预测,将有助于及时制定应对策略,有效保护水生态环境、降低污染损失,为水环境精细化管理提供技术支持。

当前,水质监测与预测仍面临数据稀缺性与模型方法局限性的双重挑战。尽管已开发出多传感器组合等提高监测效率的方法^[4],但已有传感器部署范围有限,监测站点空间覆盖不足,导致数据获取不充分^[5]。同时,自然水体变化具有强非线性特征^[6],物理输移、生物降解及化学反应在时空尺度上形成级联反馈,导致传统模型常陷入“维数灾难”^[7],这要求模型具备良好的泛化能力^[8]。传统统计模型(如WRTDS^[9]和LOADEST^[10])是基于浓度-流量-时间的线性假设,难以捕捉多变量协同作用的动态非线性响应^[11]。

由于监测数据中常存在传感器漂移、异常波动等噪声,会干扰模型学习与泛化效果,故对数据进行降噪处理至关重要。与传统滤波方法相比,小波去噪(wavelet denoising)技术^[12]能在多尺度上分解信号,有效分离噪声与有用信息,自适应地保留信号真实突变(如水质突发性波动),同时抑制高频随机噪声,特别适用于非平稳、非线性的水质时间序列,为水质数据预处理提供了可行手段。

近年来,深度学习技术凭借其强大的特征提取与复杂模式识别能力,为水质预测研究开辟了新路径。Li等^[13]通过构建对抗式生成网络(GAN)以同时考虑传感器位置与水质指标时间信息之间的空间相关性,并用以检测配水系统中的污染事件。许佳辉等^[14]通过图神经网络(GNN)和长短时记忆网络(LSTM),分别模拟监测站复杂的空间和时间依赖关系。Peng等^[15]提出了一种基于Transformer的深度迁移学习模型,通过自注意力机制整合多变量、长周期数据,有效地提升了长期预测精度。López-Andreu等^[16]评估了十几个面向时间序列的高级神经网络的性能,认为使用专门用于时间序列预测的神经网络预测叶绿素a和DO的浓度是可行的。此外,由于LSTM并行性较差,且难以捕捉长序列数据中的时空关系^[17],本研究结合Transformer在并行处理序列的优势,提取复杂依赖关系,提高模型性能。

深度学习模型常被视为“黑箱”,缺乏可解释性,限制了其在实际管理中的推广应用。近年来,可解释人工智能(XAI)技术(如SHAP)能够量化特征贡

献,提升模型可信度。Aldrees等^[18]对预测性能较低的模型进行SHAP分析,解释了模型表现不佳的原因。Sun等^[19]在研究土壤有机碳动力学时利用SHAP值和模型解释器量化特征重要性,揭示非线性响应。Lu等^[20]提出一种CNN-SHAP-蒙特卡洛模型,用以提升模型的可部署性和风险可量化性,为城市污水处理厂(WWTPs)的低碳运行控制提供了可行路径。

基于此,本研究提出一种基于小波去噪的LSTM-Transformer混合预测模型。以2021—2024年我国华南地区2个市控河流监测站点数据为基础,选取水温、浊度、pH、电导率等特征变量,对DO浓度进行建模预测,并通过对比实验与SHAP解释器验证模型性能的优越性与可解释性,以期为区域/流域水质预测与水环境管理提供技术参考。

1 数据收集与实验方法

1.1 水质数据来源

本研究对象为我国华南地区珠江某区域流域,在2个市控河流断面设立监测站点,监测指标为水温、浊度、pH、电导率、DO共5项,监测频率为逐小时,收集站点自2021年1月—2024年12月的水质指标监测数据作为预测模型数据集。平均每个站点包含超3万条有效记录,构成了1个规模可观且具有时间连续性的水质时序数据集。

1.2 实验方法

1.2.1 数据预处理方法

在深度学习中,数据预处理是极为关键的环节,具备对初始信息进行净化处理的能力,包括数据清洗、格式转换以及标准化调整等功能。通过消除干扰因素和冗余内容,确保信息结构规范统一,同时优化数值分布特征,为后续的模型构建和优化奠定坚实基础。

1) 缺失值处理。

在本研究中,水质监测相关数据为时间序列数据。在多数情况下,这些数据在时间上具有一定的连续性和线性关系,这与线性插值法的时序特性相符合。且考虑到实际应用情况,现实水质数据往往存在数据量大的特征,线性插值法可以提高效率,降低计算成本,快速填补缺失值^[21]。故本研究采用线性插值法来处理原始数据中的缺失值。

2) 异常值处理。

在实际水质监测中,除了可能存在缺失值,还可能同样会对模型训练和结果预测产生干扰的异

常值。这些异常值可能来源于传感器故障、数据传输错误或环境干扰等。本研究采用孤立森林(isolation forest)算法来处理可能存在的异常值。孤立森林是一种基于树的无监督学习算法,主要用于识别数据中的离群点^[22]。

3) 小波去噪处理。

小波去噪是一种基于小波变换的降噪方法^[23]。数据在不同频率空间中进行分解,以获得包含高频信号的详细部分和包含低频信号的近似部分。工程中常用运算速度快、简便性高的离散小波变换(DWT),将信号通过阈值进行去噪处理,然后通过逆小波变换重构小波系数:

$$W_{j,k} = \sum_{n=0}^{n-1} x[n] \cdot \frac{1}{\sqrt{2^j}} \psi\left(\frac{n-2^j k}{2^j}\right) \quad (1)$$

式中: $W_{j,k}$ 为小波系数,表示信号在尺度 j 和位置 k 处的特征; j 为尺度参数,控制小波函数的伸缩; k 为位置参数,控制小波函数的平移; $x[n]$ 为输入信号的离散样本; $\psi\left(\frac{n-2^j k}{2^j}\right)$ 为小波基函数。

小波去噪过程分为3个步骤:确定分解层数和相应的小波系数;选择处理高频信号的阈值;对经过小波系数阈值处理后的信号进行滤波,并采用软、硬阈值折衷方法进行小波重构和降噪。

4) 归一化处理。

由于各项数据的数量级和量纲都存在着较大差距,本研究对原始数据采用Max-Min归一化方法^[24],将数据缩放到 $[0,1]$ 区间,以确保实验的准确性和可靠性:

$$x^* = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \quad (2)$$

式中: x^* 为归一化后的数据; x 为未归一化的数据; $x_{\max}$ 为所有数据中的最大值; $x_{\min}$ 为所有数据中的最小值。

1.2.2 LSTM模型

LSTM是循环神经网络(RNN)的改进版本^[25],引入了由输入门、遗忘门和输出门构成的“细胞状态”门控结构^[26],不仅能有效维护远距离关键数据,同时具备智能筛选冗余信息的能力,克服了传统RNN在处理长序列时面临的梯度消失或爆炸问题。模型运行流程如下:

步骤1):模型在每一时间步 t 接收当前时间步的输入和上一时间步的隐藏状态。

步骤2):遗忘门决定从上一时间步的细胞状态

中丢弃哪些信息。它通过1个sigmoid激活函数层实现,输出1个介于0(完全忘记)和1(完全保留)之间的值。

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

式中: f_t 为遗忘门的输出; σ 为sigmoid激活函数; W_f 为遗忘门的权重; b_f 为偏置项; h_{t-1} 为上一时间步的隐藏状态; x_t 为当前时间步的输入。

步骤3):输入门决定将哪些新信息存储到细胞状态中。其包含2部分:sigmoid层决定更新的值,tanh层创建1个新的候选值向量。

$$i_t = \sigma(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i) \quad (4)$$

$$\tilde{C}_t = \tanh(W_c \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_c) \quad (5)$$

式中: i_t 为输入门的输出; $\tilde{C}_t$ 为候选细胞状态; W_i 、 W_c 为权重矩阵; b_i 、 b_c 为偏置项。

步骤4):更新细胞状态,将旧状态与遗忘门输出逐点乘以丢弃部分的信息,然后加上输入门的输出与候选值的乘积,以增加新信息,详见式(6)。

$$C_t = f_t C_{t-1} + i_t \tilde{C}_t \quad (6)$$

式中: C_t 为新的细胞状态; C_{t-1} 为上一个时间步的细胞状态。

步骤5):输出门基于当前的细胞状态决定最终的隐藏状态输出,通过1个sigmoid激活函数决定细胞状态的哪个部分将被输出,然后与细胞状态经过tanh函数处理后的值相乘,得到最后的隐藏状态。

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

$$h_t = o_t \cdot \tanh(C_t) \quad (8)$$

式中: o_t 为输出门的输出; h_t 为新的隐藏状态; W_o 为权重矩阵; b_o 是偏置项。

步骤6):最终的隐藏状态将被传递到下一时间步,并可用于当前时间步的预测输出,细胞状态也同时被传递,承载着经过筛选的长期记忆信息。

1.2.3 Transformer模型

Transformer模型是一种完全基于注意力机制的深度学习架构,摒弃了传统的循环或卷积结构^[27]。其核心为自注意力机制^[28],能够并行计算序列中任意2个位置之间的关联权重,从而高效地捕捉长距离依赖关系和全局上下文信息。标准Transformer由编码器和解码器堆叠组成。模型运行流程如下:

步骤1:对输入序列中的每个词元进行嵌入,将其转换为1个稠密向量。同时,为向量添加位置编码,以注入序列的顺序信息,弥补模型本身不具备位

置感知能力的缺陷。

步骤2:嵌入向量作为输入,送入由N个相同层堆叠而成的编码器。每1层包含2个主要子层:

多头自注意力机制层:将输入线性映射为多组查询(Query)、键(Key)、值(Value)向量。每组向量独立计算注意力分数,关注输入序列的不同子空间信息,计算式见式(9):

$$\text{attention}(Q, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}}\right)^V \quad (9)$$

式中: d_k 为键向量的维度,用于缩放点积,防止梯度消失,多个头的输出被拼接后再次进行线性变换;softmax为归一化函数。

前馈神经网络层:一个简单的两层全连接网络(通常中间包含ReLU激活函数),独立且相同地应用于每个位置,进行非线性特征变换。

$$\text{FFN}(x) = \max(0, xW_1 + b_1)W_2 + b_2 \quad (10)$$

式中: W_1 和 W_2 为权重矩阵; b_1 和 b_2 为偏置项;max(0, ·)为ReLU激活函数。

步骤3:每个子层周围都采用残差连接,即将子层的输入与其输出相加,随后进行层归一化。这有助于缓解深度网络中的梯度消失问题,稳定训练过程。

步骤4:经过N层编码器的处理后,得到包含丰富上下文信息的序列表示,可作为解码器的输入或直接用于序列分类等任务。解码器的流程与此类似,但额外包含1个“编码器-解码器注意力”层,用于关注编码器的输出序列,从而在生成目标序列时利用源序列信息。最终通过1个线性层和softmax函数生成输出序列的概率分布。

1.2.4 LSTM-Transformer模型

本研究模型采用LSTM提取局部时序特征,再加上Transformer捕捉长距离依赖的混合架构,用于处理具有复杂时空依赖关系的多变量时间序列数据。模型首先将经过去噪和归一化的数据进行时间嵌入编码,保留并增强时间的周期性特征,为后续模型提供额外的时间上下文信息。经过序列化处理将连续的时间步组织成滑动窗口形式,每个样本包含24个历史时间步(即1d的数据),和需要预测的4个未来时间步(即未来4h的预测目标)。

进入特征提取阶段后,模型采用LSTM结构进行初级时序特征学习,捕捉水质参数在短时间尺度

的局部变化模式,提取跨时间步的特征交互。局部特征提取完毕之后,进入Transformer模块,其自注意力机制和多头注意力机制能够在模型需要预测当前时刻的DO值时,自动发现历史数据上哪些时刻的状态最具参考价值,实现了直接建模跨越大时间间隔的依赖关系的结果。Transformer模块还包含2个核心组件,层归一化用于稳定深度网络中的梯度流动,前馈神经网络则通过非线性变换增强特征表达能力。最终通过全局平均池化将时序维度压缩为固定长度的特征向量,实现从序列到预测值的转换。

在多步预测阶段,模型采用全连接层直接输出未来4个时间步的预测值。这种端到端而非迭代式单步预测的输出策略,有效避免了传统方法中因误差累积导致的预测偏差放大问题。

模型相关的超参数如表1所示。

表1 LSTM-Transformer模型的超参数设置
Table 1 Hyperparameter settings of the LSTM-Transformer model

超参数名称	参数设置
LSTM层数	2
LSTM单元数	第1层128单元 第2层64单元
Transformer层数	1
Transformer单元数	64
Transformer注意力头数	4
Transformer前馈网络维度	128
批量大小	64
初始学习率	0.001
训练轮次	200
耐心值	30
Dropout率	0.2

1.2.5 可解释性分析方法

SHAP分析是基于博弈论中的Shapley值,通过计算每个特征在每个样本中的边缘收益,来确定该特征的重要性^[29,30],其公式为:

$$\phi_i(f, x) = \sum_{S \in N \setminus \{i\}} \frac{|S|!(|N| - |S| - 1)!}{|N|!} [f_x(S \cup \{i\}) - f_x(S)] \quad (11)$$

式中: N 为所有特征的集合; S 为不考虑特征 i 时的特征子集; $f_x(S)$ 为基于特征子集 S 的预测值。

主要通过以下2种方式进行可视化分析:

1)全局特征重要性:通过对每个特征的SHAP绝对值取平均,得到该特征的全局重要性排序,从而识

别出对DO预测整体影响最大的水质参数。

2)SHAP依赖图:展示某个特征的取值与其SHAP值之间的关系,可以揭示该特征与DO之间的正、负向关联性,以及该关联是否为线性。

1.3 模型运行流程

模型构建的整体框架如图1所示。将数据集按训练集:验证集:测试集=7:2:1的比例划分,进行小波去噪、归一化等预处理操作。完成预处理后,首先,数据输入LSTM模块,用于捕捉原始时间序列的局部特征。其次,Transformer模块完整接收来自LSTM的特征数据,基于自注意力机制捕捉全局依赖,并采用多头注意力并行关注不同的特征。然后,数据依次经过平均池化层和全连接层,将神经网络提取的深层特征转换至目标输出维度输出。最后,采用指标MAE、RMSE和 R^2 对模型性能进行评估。

1.4 模型评估指标

平均绝对误差(mean absolute error, MAE)是预测值与实际值之间绝对差的平均值,对所有误差给予相同级别的权重,计算见式(12)。

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (12)$$

式中: y_i 为实际值; $\hat{y}_i$ 为预测值; n 为样本个数。

均方根误差(root mean square error, RMSE)是预测值与实际值之差平方的期望的平方根,对较大的偏差值给予更大的权重,同MAE相比提供更高的惩罚系数,对异常值的识别更加敏感。

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (13)$$

式中: y_i 为实际值; $\hat{y}_i$ 为预测值; n 为样本个数。

决定系数(coefficient of determination, R^2)是衡量模型预测拟合优度的常用指标,取值越接近于1,表示模型的拟合效果越好,计算见式(14)。

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (14)$$

式中: y_i 为实际值; $\hat{y}_i$ 为预测值; $\bar{y}$ 为实际值的平均值; n 为样本个数。

2 实验结果与讨论

2.1 水质数据特征分析

由于水质指标监测数据时序相关性强,线性相关度与正态性较差,为探究各水质指标间的关联关

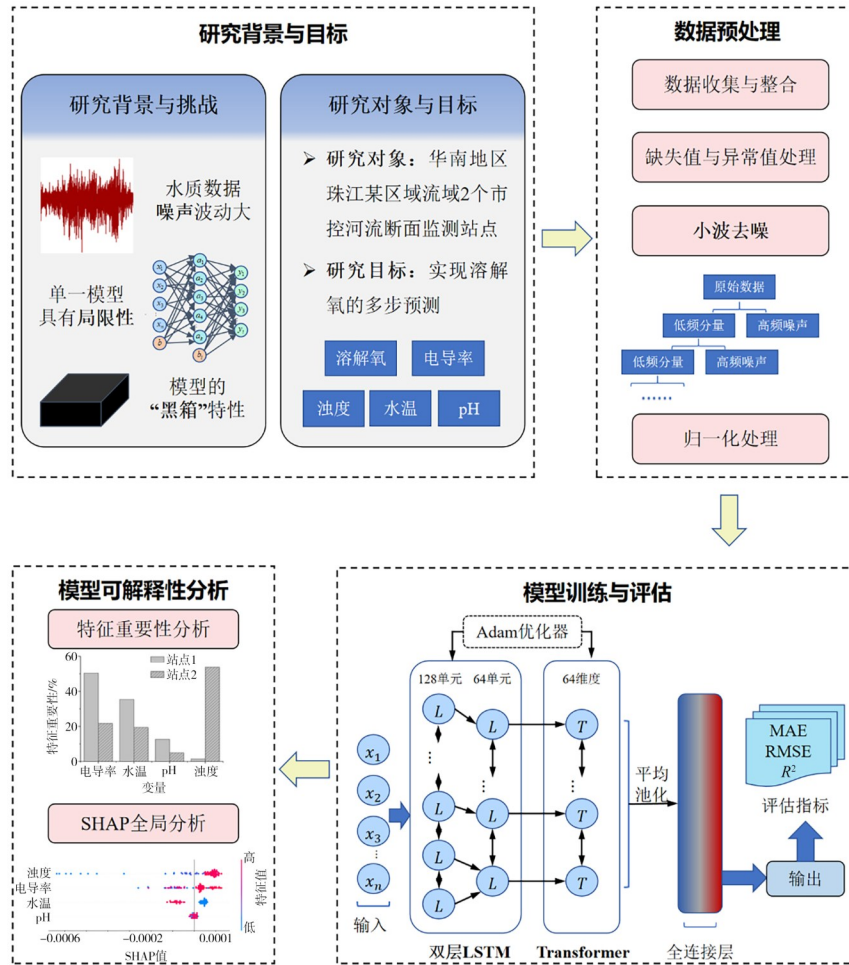


图1 研究基本流程

Figure 1 Basic flowchart of the research

系,采用Spearman相关系数对8项水质指标进行统计分析^[31]。与常用的Pearson相关系数不同,Spearman相关系数是基于数据的级别排名,而非具体的数值,通过比较变量之间的排名来衡量变量之间的相关性,适用于非正态分布数据的相关性分析。相关性分析热图见图2。可知:水质指标之间具有不同程度的关联性,且不同站点间各指标的相关性亦不同。例如站点1中,DO与浊度之间呈显著正相关。水体浑浊时,DO含量较低,反之亦然。DO与水温之间呈显著负相关,表明当出水温升高时,水中DO的含量趋于减少,这与水体温度升高通常会减少氧气的溶解度相符。

2.2 小波去噪结果

本研究选取离散小波变换作为噪声消除的技术手段。在实施小波变换过程中,存在多种可供选择的小波基函数,dbN小波中的db5小波函数比较适合

处理数据平滑的水质数据集^[32],故选择db5作为小波函数。

经高频噪声处理与信号重构后,获得了去噪后的水质数据如图3所示。可知:原始数据呈频繁且剧烈的波动特征。其中,部分峰值与谷值可能反映实际水质变化,但多数波动表现出非自然、过于密集与陡峭的特点,可归因于噪声干扰。在实际环境监测中,此类噪声往往掩盖数据中的真实趋势与规律,增加分析难度。经去噪处理后,数据曲线趋于平滑稳定,波动幅度降低,整体趋势更为清晰,在可读性与分析准确性方面均得到明显提升。

2.3 LSTM-Transformer模型实验结果

将预处理后的水质指标数据集输入LSTM-Transformer模型中,分别得到MAE、RMSE和 R^2 的评估结果如表2所示。可知:模型在2个站点均表现出较好的拟合结果。站点1的预测结果中,MAE为

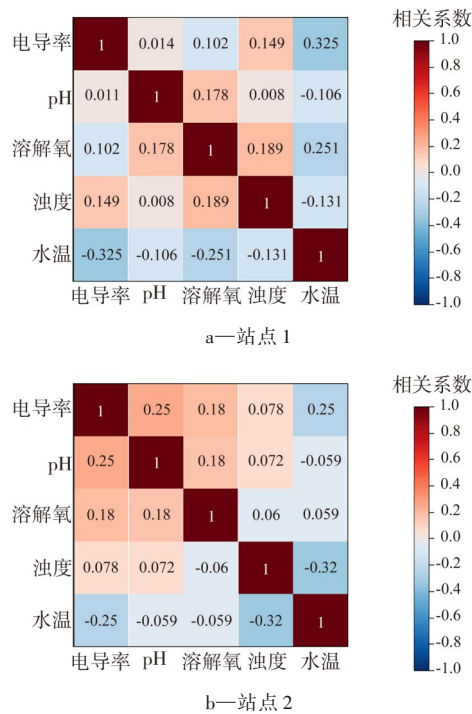


图 2 Spearman 相关性分析结果

Figure 2 Heatmap of Spearman correlation analysis

0.5169 mg/L, RMSE 为 0.8494 mg/L, R^2 为 0.8015; 站点 2 的预测结果中, MAE 为 0.4456 mg/L、RMSE 为 0.7143 mg/L、 R^2 为 0.8873。这表明模型在不同环境条件下均能保持较高的预测稳定性与解释力, R^2 值均超过 0.80, 说明模型能够有效捕捉 DO 变化的主要趋势。

尽管 2 个站点的评价指标结果存在一定差异, 但这很可能与其各自所处的水文环境、污染源分布及气象条件的复杂性不同有关, 整体上模型在 MAE 与 RMSE 上均控制在较低水平, 显示出其具备良好的泛化能力与鲁棒性。这一结果验证了 LSTM-Transformer 混合模型在融合时序依赖特征与全局关键信息方面的优势, 适用于具有动态性、非线性特点的水质指标预测。

同时, 基于 2 个站点 DO 预测值与真实值对比情况, 绘制预测值-真实值散点图如图 4 所示。可知: 模

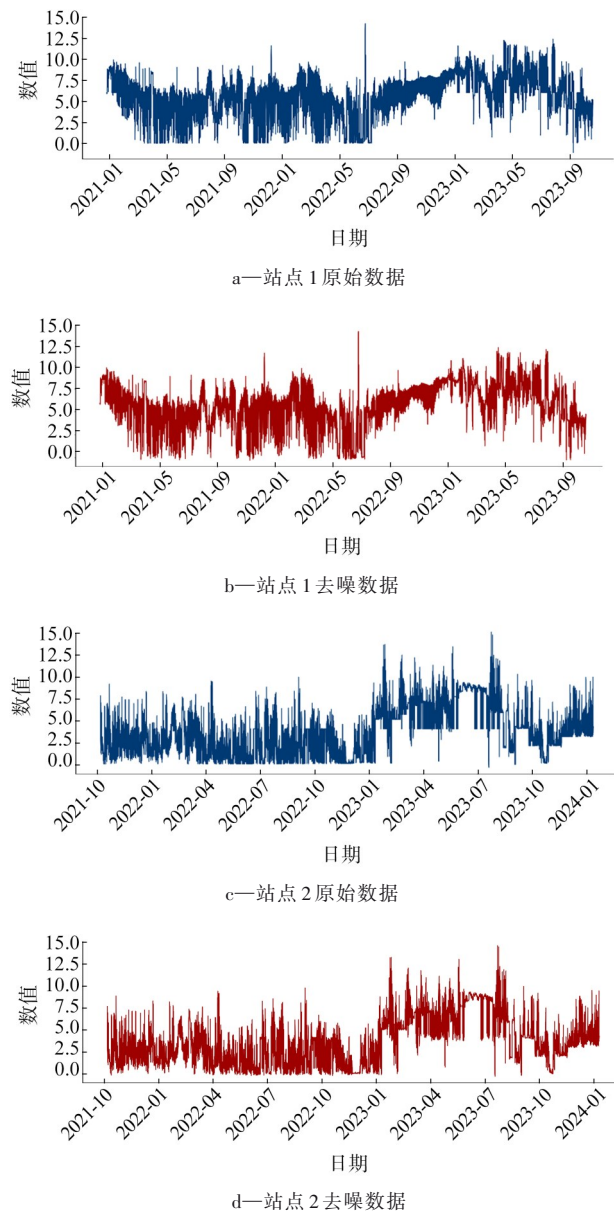


图 3 2 个站点 DO 值的低频数据和高频数据

Figure 3 Low- and high-frequency DO data plots for the two monitoring stations

型在站点 1 与站点 2 的预测值与真实值总体上呈较高的一致性, 散点大多分布于对角线附近, 表明模型具有较强的整体拟合能力。

表 2 模型实验结果

Table 2 Experimental results of the models

站点 编号	LSTM-Transformer 模型			1 号消融模型			2 号消融模型		
	MAE/ (mg/L)	RMSE/ (mg/L)	R^2	MAE/ (mg/L)	RMSE/ (mg/L)	R^2	MAE/ (mg/L)	RMSE/ (mg/L)	R^2
1	0.5169	0.8494	0.8015	0.6157	0.9174	0.7684	0.6663	0.9792	0.7362
2	0.4456	0.7143	0.8873	0.6145	1.0986	0.7484	0.4786	0.7173	0.8864

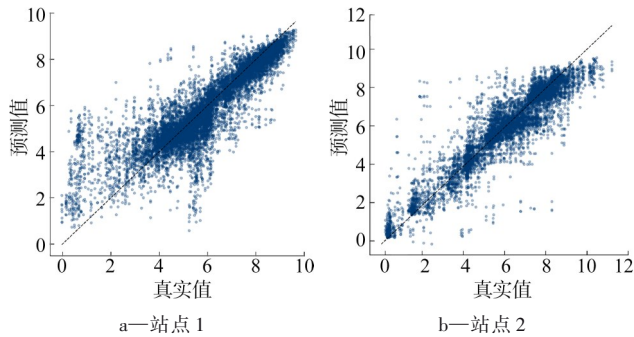


图4 2个站点预测值-真实值散点图

Figure 4 Scatter plots of predicted vs. actual values at the two stations

此外,模型的预测偏差呈一定的系统性:在真实值较高时,模型倾向于低估;而在真实值较低时,则多出现高估。这种偏差与2个站点所处河段的水文动态(如流速变化大、排污口间歇性排放)及气象因素(如温度、光照)的剧烈波动有关,这些因素增加了DO变化的非线性与突发性。

LSTM-Transformer模型通过LSTM层捕捉短期依赖,并借助Transformer的自注意力机制强化关键时间点的全局影响,整体上适用于DO等具有时序记忆性、且受多因素协同影响的水质指标。然而,研究结果也表明:在面对局部环境扰动显著、数据噪声较大的站点时,纯时序模型的预测稳定性会下降,建议可引入实时气象、水文协同观测数据作为外部特征,采用多变量输入结构,以增强模型对复杂环境条件的解释与预测鲁棒性。

2.4 对比实验

本研究分别使用消融Transformer和LSTM模块进行对比实验,将消融了Transformer模块的模型命名为1号消融模型,将消融了LSTM模块的模型命名为2号消融模型,通过消融实验验证2个模块设置的必要性和优越性。

分析表2可知,LSTM-Transformer模型的表现优于1号、2号消融模型:在站点1,与1号消融模型相比,LSTM-Transformer模型的MAE降低了16.0%,RMSE降低了7.4%, R^2 提高了4.3%;与2号消融模型相比,MAE降低了22.4%,RMSE降低了13.3%, R^2 提高了8.9%。在站点2,与1号消融模型相比,性能提升更为显著,MAE降低了35.4%,RMSE降低了22.6%, R^2 提高了9.3%;与2号消融模型相比,MAE降低了6.9%,RMSE降低了0.4%, R^2 提升了0.1%,表明LSTM模块能有效提取局部时序特征,而

Transformer模块更擅长捕捉长距离依赖关系,两者的融合产生了显著的协同效应。2号消融模型在站点2表现接近混合模型,但在站点1误差较大,说明其对不同站点数据特征的适应性不及混合模型稳定。

2.5 模型可解释性分析

2.5.1 特征重要性分析

本研究采用SHAP作为模型的可解释性分析工具,具体采用SHAP库中的Permutation解释器,这是一种基于特征置换的模型解释方法,通过打乱特征值来近似计算SHAP值,兼具通用性、直观性和效率性。

沿用前文分层抽样的分组,计算了各站点的SHAP值。首先将每个变量的SHAP值取绝对值累加,得到了各变量对DO预测值的总贡献程度,即特征重要性。各抽样站点的特征重要性分析结果如图5所示。

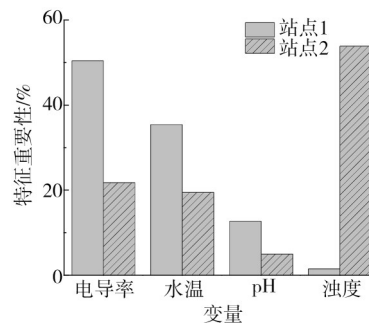


图5 2个站点特征重要性分析条形图

Figure 5 Bar chart of feature importance analysis for the two stations

由图5可知:2个站点的特征重要性都各有特点。对于站点1,电导率和水温是最重要的特征,二者对DO变化的总贡献超过85%,说明这2个变量对该站点的DO具有重要和显著的影响。而pH和浊度的特征重要性较低,两者对DO影响的贡献较低。对于站点2,浊度的特征重要性最高(53.8%),说明在站点2,水体的浑浊程度对DO的影响最为关键,通过降低透光度影响水生植物的光合作用,进而影响DO含量。电导率和水温的特征重要性大致相当(21.8%和19.4%),说明两者对DO均具有一定的重要性,但远低于浊度。pH的特征重要性最低(4.97%),说明在站点2 pH对DO的贡献作用很小。特征重要性的站点差异对水质管理具有直接启示,本研究展示了一种通过可解释AI识别不同断面“关键控制因子”的分析框架,可为实施差异化、精准化的河流水质管理提供科学依据。

2.5.2 SHAP全局分析

将SHAP分析所得数据绘制成蜂群图,如图6所示。可知:当某个特征对应的特征值为正时,意味着该参数数值增大将促使模型输出结果上升,即与DO浓度呈正相关。反之,若数值为负则表明该参数与预测结果呈反向变动趋势。坐标轴上数值的绝对值大小直接反映了该特征参数对最终预测结果的影响力强弱,数值偏离零点越远,说明该变量在模型中的权重越大。纵轴则是除了目标变量以外的其余特征变量,图中每个点表示该特征的某个观测值,红色表示该特征值较高,蓝色表示该特征值较低。

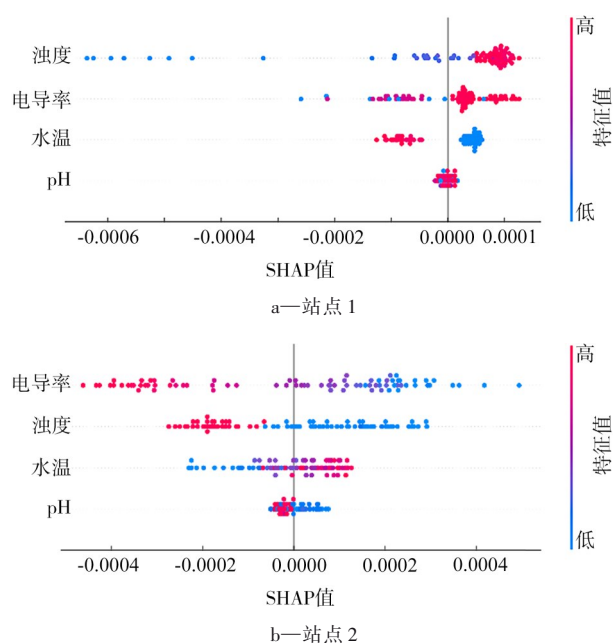


图6 2个站点的SHAP蜂群图

Figure 6 Beeswarm plots of SHAP values for the two stations

由各站点的蜂群图可以发现,各水质指标对DO的影响是复杂的。一般来说,pH偏弱碱性、电导率降低、水温降低和浊度降低对DO预测值存在正向影响。但结合实际情况,变量与变量之间的作用是复杂的,除了直接影响,还需要结合时空因素和人为因素等间接作用进行分析论证。水质数据的时空异质性会对预测结果产生影响,需要具体问题具体分析。其中,人为因素指站点附近由于工程施工或工业园区聚集等导致该站点的水质数据受到的人为影响。

站点1中,高浊度反而能对DO预测值有正向作用,这可以归因为该站点存在河道工程施工的现象,机械在水中的搅动导致浊度升高,同时起到曝气作用,促进水体DO含量升高。站点2中,低pH能够对

DO预测值起正向作用,可推测相对低的pH值正好是水中某些氧化还原反应的合适条件。这些现象揭示了水体DO影响机制的复杂性,即多因素耦合下可能呈现非典型的表观关系。

因此,SHAP蜂群图可以直观地揭示各水质特征对DO预测值的非线性影响及其作用方向。整体来看,各水质指标与DO预测值的关系受不同站点的时空异质性和人为因素的干扰,表现出显著差异。这些例外现象凸显了水体环境的复杂性,实际分析需结合站点特异性进行综合研判。尽管其具体环境成因有待深究,但模型成功学习到了这种站点特异的非线性关联,印证了混合模型在捕捉复杂时空异质性方面的优势。后续研究应当进一步考虑和量化间接因素的交互作用,提升模型在异质环境中的解释力与预测精度。

3 结论

本研究针对河流水质数据噪声干扰与复杂时序依赖问题,提出了一种融合小波去噪与LSTM-Transformer的深度学习耦合模型,并以华南地区2个市控断面2021—2024年的逐小时水质监测数据为基础,对DO浓度进行多步预测与机理解析。主要结论如下:

1) 本研究通过离散小波变换进行去噪,使原始数据的波动幅度明显降低、趋势更为平滑,减少了因传感器噪声与异常波动引起的预测偏差,增强了模型在复杂水文条件下的鲁棒性。通过消融实验和多模型对比,验证了LSTM与Transformer模块融合的有效性,模型在MAE、RMSE和 R^2 3项指标上均优于各种对比模型,说明基于小波去噪的LSTM-Transformer结构能更好地捕捉水质时序的局部与全局依赖关系。

2) 可解释性分析揭示了DO影响因素的站点异质性,凸显了结合实际环境进行综合研判的必要性。特征重要性分析显示,水质指标与DO的关联性具有强烈的站点特异性。SHAP蜂群图进一步揭示了其中复杂的非线性关系,说明水质预测与机理解释必须紧密结合具体站点的地理、水文与人为活动背景进行分析。

3) 本研究所构建的基于小波去噪的LSTM-Transformer模型能对不同断面、不同水文气象条件下的DO变化进行有效预测,为河流水质实时预警与精细化管控提供了可靠技术工具。模型虽利用华南地

区河流数据进行了验证,但其方法学(小波去噪、模型耦合、可解释性分析)具有普适性,理论上可适用于不同气候和水文特征的流域。

参考文献

- [1] ZHANG P, PANG Y, PAN H C, et al. Factors contributing to hypoxia in the Minjiang River estuary, southeast China [J]. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 2015, 12(8): 9357–9374.
- [2] 沈满洪. 我国“十五五”生态文明建设规划的若干思考: 学习党的二十届四中全会精神体会[J]. *生态经济*, 2026, 42(1): 1–6.
- SHEN M H. Some reflections on China's 15th Five-Year Plan for ecological civilization construction: Insights from studying the spirit of the Fourth Plenary Session of the 20th Central Committee of the Communist Party of China[J]. *Ecological Economy*, 2026, 42(1): 1–6.
- [3] 曾鸿滨, 龙琦, 高景恒, 等. 机器学习在河流断面水质预测分析中的应用[J/OL]. *环境工程*, 1–14[2026-03-25]. <https://link.cnki.net/urlid/11.2097.X.20250902.1655.012>.
- ZENG H B, LONG Q, GAO J H, et al. Application of machine learning in water quality prediction and analysis in river segments [J/OL]. *Environmental Engineering*, 1–14[2026-03-25]. <https://link.cnki.net/urlid/11.2097.X.20250902.1655.012>.
- [4] 姜莹, 陈喆, 向大亨, 等. 面向水资源监测任务的星载多传感器组合方法[J]. *长江科学院院报*, 2024, 41(12): 162–170.
- JIANG Y, CHEN Z, XIANG D X, et al. Spaceborne multi-sensor combination method for water resources monitoring tasks [J]. *Journal of Yangtze River Scientific Research Institute*, 2024, 41(12): 162–170.
- [5] ZHI W, APPLING A P, GOLDEN H E, et al. Deep learning for water quality[J]. *Nature Water*, 2024, 2: 228–241.
- [6] TEICHERT N, BORJA A, CHUST G, et al. Restoring fish ecological quality in estuaries: Implication of interactive and cumulative effects among anthropogenic stressors[J]. *Science of The Total Environment*, 2016, 542: 383–393.
- [7] ZHANG Q S, WEI Y L, HOU J, et al. AEGAN–Pathifier: a data augmentation method to improve cancer classification for imbalanced gene expression data [J]. *BMC Bioinformatics*, 2024, 25(1): 392.
- [8] SHEN C P. A transdisciplinary review of deep learning research and its relevance for water resources scientists [J]. *Water Resources Research*, 2018, 54(11): 8558–8593.
- [9] VIRRO H, AMATULLI G, KMOCH A, et al. GRQA: global river water quality archive[J]. *Earth System Science Data*, 2021, 13(12): 5483–5507.
- [10] MA X X, PENG W F, TONG B W, et al. Estimation of pollutant load in typical drainage ditches of Ningxia Yellow River Diversion Irrigation Area based on LOADEST statistical model[J]. *Water*, 2024, 16(1): 107.
- [11] ZHANG Q, BLOMQUIST J D, MOYER D L, et al. Estimation bias in water-quality constituent concentrations and fluxes: a synthesis for chesapeake bay rivers and streams[J]. *Frontiers in Ecology and Evolution*, 2019, 7: 109.
- [12] ZHANG P, LIU X Y, ZHANG H R, et al. Optimized SVR model for predicting dissolved oxygen levels using wavelet denoising and variable reduction: Taking the Minjiang River estuary as an example[J]. *Ecological Informatics*, 2025, 86: 103007.
- [13] LI Z L, LIU H X, ZHANG C, et al. Generative adversarial networks for detecting contamination events in water distribution systems using multi-parameter, multi-site water quality monitoring [J]. *Environmental Science and Ecotechnology*, 2023, 14: 100231.
- [14] 许佳辉, 王敬昌, 陈岭, 等. 基于图神经网络的地表水水质预测模型[J]. *浙江大学学报(工学版)*, 2021, 55(4): 601–607.
- XU J H, WANG J C, CHEN L, et al. Surface water quality prediction model based on graph neural network [J]. *Journal of Zhejiang University (Engineering Science)*, 2021, 55(4): 601–607.
- [15] PENG L, WU H, GAO M, et al. TLT: Recurrent fine-tuning transfer learning for water quality long-term prediction[J]. *Water Research*, 2022, 225: 119171.
- [16] LÓPEZ-ANDREU F J, LÓPEZ-MORALES J A, HERNÁNDEZ-GUILLEN Z, et al. Deep learning-based time series forecasting models evaluation for the forecast of chlorophyll a and dissolved oxygen in the mar menor [J]. *Journal of Marine Science and Engineering*, 2023, 11(7): 1473.
- [17] SIAMI-NAMINI S, TAVAKOLI N, NAMIN A S. The performance of LSTM and BiLSTM in forecasting time series [C]// *IEEE International Conference on Big Data (Big Data)*, 2019: 3285–3292.
- [18] ALDREES A, KHAN M, TAHA A, et al. Evaluation of water quality indexes with novel machine learning and shapley additive explanation (SHAP) approaches [J]. *Journal of Water Process Engineering*, 2024, 58: 104789.
- [19] SUN X, DU Z L, DING J, et al. Machine learning integrated with a causal pathway framework unravels differential mechanisms of biochar-driven soil organic carbon dynamics under cadmium stress[J]. *Environmental Science & Technology*, 2026, 60(6): 1234–1245.
- [20] LU Y, BU Y N, LI B Y, et al. From black-box prediction to probabilistic control: An explainable CNN-SHAP-Monte Carlo framework for low-carbon wastewater treatment [J]. *Journal of Water Process Engineering*, 2025, 79.
- [21] WANG C, WANG X, HARDEBERG J Y. A linear interpolation algorithm for spectral filter array demosaicking [M]// *Cherbourg, France: Springer International Publishing*, 2014.
- [22] XU H Z, PANG G S, WANG Y J, et al. Deep isolation forest for anomaly detection[J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2023, 35(12): 12591–12604.
- [23] SONG C G, YAO L H. Application of artificial intelligence based on synchrosqueezed wavelet transform and improved deep extreme learning machine in water quality prediction [J]. *Environmental*

- Science and Pollution Research, 2022, 29(25): 38066–38082.
- [24] REES P A, LOWY R J. Optimizing reduction of western blotting analytical variations: Use of replicate test samples, multiple normalization methods, and sample loading positions [J]. Analytical Biochemistry, 2023, 674: 115198.
- [25] HOCHREITER S, SCHMIDHUBER J. Long short-term memory [J]. Neural Computation, 1997, 9(8): 1735–1780.
- [26] GUO J, LIU Y, ZOU Q, et al. Study on optimization and combination strategy of multiple daily runoff prediction models coupled with physical mechanism and LSTM [J]. Journal of Hydrology, 2023, 624: 129969.
- [27] VASWANI A, SHAZEER N, PARMAR N, et al. Attention is all you need [C]//Advances in Neural Information Processing Systems, 2017: 5999–6009.
- [28] HU Y K, LYU L, WANG N, et al. Long-term prediction of multiple river water quality indexes based on hybrid deep learning models [J]. Measurement Science and Technology, 2024, 35(12): 125803.
- [29] LUNDBERG S M, LEE S I. A unified approach to interpreting model predictions [C]//Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems. Long Beach, CA: Curran Associates Inc., 2017: 4768–4777.
- [30] PAN M Y, XIA B S, HUANG W B, et al. PM_{2.5} concentration prediction model based on random forest and SHAP [J]. International Journal of Pattern Recognition and Artificial Intelligence, 2024, 38(5): 2452012.
- [31] PANDEY R, DHOUNDIYAL M, KUMAR A. Correlation analysis of big data to support machine learning [C]//Gwalior, MP, India: IEEE, 2015.
- [32] 孙铭,魏守科,王莹洁,等. 基于小波分解的LSTM水质预测模型. 计算机系统应用, 2020, 29(12): 55–63.
- SUN M, WEI S K, WANG Y J, et al. Water quality prediction model of LSTM based on wavelet decomposition [J]. Computer Systems & Applications, 2020, 29(12): 55–63.