DOI:10.11918/202508022

基于机器学习识别面向重金属分离的纳滤膜物化特性

刘 鹏,徐杭镔,刘 超,徐达梁,李圭白,梁 恒
(城乡水资源与水环境全国重点实验室(哈尔滨工业大学),哈尔滨 150090)

摘 要:纳滤技术为工业废水中重金属分离与资源化回收提供了解决方案。然而,适配重金属分离的纳滤膜物化特性仍然不明确,难以制备面向重金属分离的高性能纳滤膜。为此,构建融合膜属性、操作参数和溶液特性的机器学习预测模型,10种模型对比中,XGBoost模型对膜通量和重金属截留率的R^2分别为0.98和0.92。SHAP分析结果表明,水接触角、截留分子质量和膜表面电位是影响性能的关键特征,通过适当提高亲水性和截留分子质量以及增加膜表面正电荷有利于膜通量的提高,而重金属截留率受到尺寸排阻效应与静电排斥效应的共同影响。基于高精度预测模型构建NGSA-Ⅱ双目标优化算法,结果表明,水接触角为60°~66°、截留分子质量为200~412 u、膜表面电位为47~73 mV时,纳滤膜可实现对10种重金属离子的高效处理,重金属截留率超过99%,膜通量为25~30 L/(m²·h)。本研究构建的纳滤膜优化设计框架为高性能纳滤膜材料的开发与应用提供了理论与技术支持。

关键词:纳滤;重金属回收;机器学习;沙普利加性解释;双目标优化
中图分类号:TU991 **文献标志码**:A **文章编号**:0367-6234(2026)06-0040-08

Physicochemical property identification of nanofiltration membranes for heavy metal separation based on machine learning

LIU Peng, XU Hangbin, LIU Chao, XU Daliang, LI Guibai, LIANG Heng
(State Key Laboratory of Urban-rural Water Resource and Environment (Harbin Institute of Technology), Harbin 150090, China)

Abstract: Nanofiltration technology offers an effective solution for the separation and resource recovery of heavy metals in industrial wastewater. However, the physicochemical properties of nanofiltration membranes suitable for heavy metal separation remain unclear, making it difficult to prepare high-performance nanofiltration membranes for heavy metal separation. This paper developed a machine learning prediction model incorporating membrane characteristics, operating parameters, and solution properties. Through a comparison of ten models, the XGBoost model yielded R^2 values of 0.98 and 0.92 for membrane flux and heavy metal rejection rate, respectively. The SHAP analysis results revealed that water contact angle, molecular weight cut-off, and membrane surface potential were the key determinants of performance. Enhancing hydrophilicity, moderately increasing the molecular weight cut-off, and imparting more positive charges on the membrane surface collectively enhanced membrane flux. In contrast, heavy metal rejection rate was governed by the combined effects of size exclusion and electrostatic repulsion. Based on the high-accuracy prediction model, an NSGA-Ⅱ bi-objective optimization algorithm was constructed. The results show that within the ranges of water contact angle from 60° to 66°, molecular weight cut-off from 200 to 412 u, and membrane surface potential from 47 to 73 mV, nanofiltration membranes can achieve efficient treatment of 10 kinds of heavy metal ions, with rejection rate exceeding 99% and membrane flux ranging from 25 to 30 L/(m²·h). The nanofiltration membrane optimization framework developed in this paper provides both theoretical and technical support for the development and application of high-performance nanofiltration materials.

Keywords: nanofiltration; heavy metal recovery; machine learning; SHapley Additive exPlanation; bi-objective optimization

工业废水排放量正逐年增加[1],其中,废水中的重金属污染因其剧毒性和生物富集性,严重威胁了生态安全与公众健康[2]。同时,铅、铬、镍等重金属又是重要的战略资源,在新能源、芯片、医疗领域需求量巨大[3]。尽管纳滤膜在重金属分离中的应用前景广阔,其应用仍受到膜通量和截留率的制

收稿日期:2025-08-11;**录用日期**:2025-09-05;**网络首发日期**:2025-09-17
网络首发地址:https://link.cnki.net/urlid/23.1235.T.20250917.0929.002
基金项目:国家自然科学基金(52341001);黑龙江省自然科学基金(TD2023E003)
作者简介:刘 鹏(2001—),男,博士研究生;梁 恒(1979—),男,教授,博士生导师
通信作者:梁 恒,hitliangheng@163.com

约[4]。纳滤膜的分离性能受其物化特性的显著影响，Xu 等[5]制备出表面正电荷增强的 PA 纳滤膜，可截留 98% 的 Zn^{2+} 和 Pb^{2+}，Lasisi 等[6]通过二次交联，制备截留分子质量为 563 u 的 PEI 纳滤膜，实现对多种重金属 90% 的截留。然而，由于截留机制和物化特性与纳滤膜性能构效关系的不明确，如何精准识别关键因素并进行膜性能的优化，仍是当前研究中的重大挑战[7]。

数据驱动的机器学习方法可以有效揭示关键影响因素，已成功应用于分离膜的污染物截留机制探索、膜材料智能筛选和膜工艺参数优化[8-10]，为纳滤膜研究范式带来颠覆性转变。Jeong 等[11]构建的 Transformer 神经网络以纳滤膜物化特性作为输入，明确了静电排斥作用在新污染物分离中的主导作用，Wang 等[12]利用梯度回归模型发现了 10 种全新单体组合，制备了具有超高甲醇渗透性的纳滤膜。尽管已有的研究揭示了膜性能的部分关键因素，但重金属离子截留机制仍不清晰，应用机器学习提高纳滤膜重金属处理性能的研究少有报道。

本研究通过现有实验构建了纳滤膜性能的机器学习预测模型，分析影响膜通量和重金属截留率的关键因素，结合非支配排序遗传算法（NSGA-Ⅱ）进行双目标优化，提出了一种膜性能优化策略，实现了低压力和高质量浓度条件下膜属性的最佳组合。为膜材料设计和高效的重金属污染处理与资源回收提供了新的理论与技术支持。

1　实验方法

1.1　数据集建立

整理近 10 年重金属回收的 50 篇纳滤处理文献，提取关键信息以构建数据集。模型的输入特征分为膜属性、操作参数和溶液特性 3 类。膜属性包括水接触角、截留分子质量、有效膜孔径、膜厚度、平均粗糙度和中性条件下膜表面电位，操作参数包括过滤压力、溶液 pH、溶液温度和重金属离子质量浓度，溶液特性包括阴阳离子价态和阴阳离子水合半径。模型输出为纳滤膜通量（L/（m^2 · h），基于 0.1 MPa过滤压力均一化处理）和重金属截留率（%）。使用 WebPlotDigitizer 工具从图表中进行数据提取，膜通量和重金属截留率的有效数据各 1 155 个。采用相关性和缺失度筛选去除了膜厚度、平均粗糙度和有效膜孔径 3 个特征，对缺失值在整体上进行众数填充，其中，过滤 pH 根据重金属盐类型分别进行众数填充以符合实际水体，使用 MinMaxScaler 将特征归一化至[- 1，1]，以避免数值范围差异的潜在干扰。

1.2　机器学习预测模型构建

选取 10 种机器学习算法进行对比，包括适用于处理线性关系的套索回归（LASSO）和弹性网络回归（ElasticNet），适用于处理非线性关系的 K 近邻算法（KNN）、支持向量机（SVM）和决策树（DT），基于决策树集成的随机森林（RF）、梯度提升决策树（GBDT）、分类提升（CatBoost）算法、轻量级梯度提升（LightGBM）算法和极端梯度提升（XGBoost）算法。数据集按照 8∶2 划分为训练集和测试集，使用贝叶斯优化分别对预测模型在训练集上进行超参数优化，应用十折交叉验证降低过拟合风险，在测试集上进行模型性能评估。

1.3　预测模型性能评估

在模型性能评估阶段，应用拟合优度（R^2）、平均绝对误差（E_{MA}）和均方根误差（E_{RMS}）评估模型性能，3 个评估指标根据以下公式计算：

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{a=1}^{n}(y_a - y_{a,pre})^2}{\sum_{a=1}^{n}(y_a - y_{a,ave})^2}$$

$$E_{MA} = \frac{1}{n}\sum_{a=1}^{n} | y_a - y_{a,pre} |$$

$$E_{RMS} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{a=1}^{n}(y_a - y_{a,pre})^2}$$

式中：y_a 为样本 a 的实验值，$y_{a,pre}$ 为模型对样本 a 的预测值，$y_{a,ave}$ 为样本平均值。

1.4　特征解释

SHAP（SHapley Additive exPlanations）是基于博弈论夏普利值的模型无关解释框架，将预测任务视为所有特征的合作博弈，从而计算出各输入特征的具体贡献。SHAP 值根据以下公式计算：

$$SHAP_b = \sum_{S \subseteq N/\{b\}} \frac{|S|!(|N| - |S| - 1)!}{|N|!} \cdot [f(S \cup \{b\}) - f(S)]$$

$$SHAP_{|b|} = \frac{1}{n}\sum_{a=1}^{n} | SHAP_b^a |$$

式中：N 为所有特征的集合，S 为不包括特征 b 的所有特征集合，$f(S)$ 与 $f(S \cup \{b\})$ 分别表示在特征为集合 S 以及集合 S 添加 b 特征时的预测值，$|N|$ 和 $|S|$ 表示集合 N 和 S 的特征数，n 为总样本数。

1.5　基于双目标优化算法的高性能纳滤膜设计

选择最优的纳滤膜性能预测模型后，构建 NSGA-Ⅱ多目标优化算法。NSGA-Ⅱ结合非支配排序和精英保留策略在迭代过程中持续推进解的优化，从而实现对具有固有权衡关系的膜通量与截留率的协同优化。根据实际工业废水处理条件，确定

操作参数如下:过滤压力为 0.4 MPa,过滤 pH 与缺失值填充相同,过滤温度为 25 ℃,重金属离子质量浓度为 1 000 mg/L。同时考虑数据集中的 10 种常见重金属离子在硫酸根、硝酸根、氯离子的溶液环境,以重金属截留率 >90% 和膜通量 >20 L/(m^2·h)为同步优化目标,对关键膜属性进行优化,其优化范围根据 SHAP 分析进行确定。优化结果将产生一个帕累托前沿(Pareto front),包含一系列膜通量和截留率之间的实现最佳折中的优化解,为纳滤膜优化设计提供决策参考。

2　结果与讨论

2.1　输入特征统计学分析

纳滤膜通量集中于 7 ~ 18 L/(m^2·h),平均值为 16 L/(m^2·h),截留率集中在 70% ~97.4%,平均值为 80%,表明纳滤膜在重金属处理方面具有潜力。图 1 为皮尔逊相关性分析结果,输入特征间的相关性均小于 0.7,避免了特征共线性导致的过拟合风险。重金属截留率仅与截留分子质量显示出高度负相关,表明尺寸排阻效应可能发挥关键作用。膜通量与截留分子质量正相关,而与过滤压力、阴离子价态和阴离子水合半径呈负相关。有效膜孔径的增大会降低水分子跨膜运输阻力,有利于膜通量的提高[13]。高价、水合半径较大的阴离子会导致更显著的浓差极化效应,使膜通量和渗透性同步降低[14]。同时,显著性分析表明,所选择的输入特征与两个关键膜性能具有显著性(P <0.01)关系,验证了数据集构建的合理性。

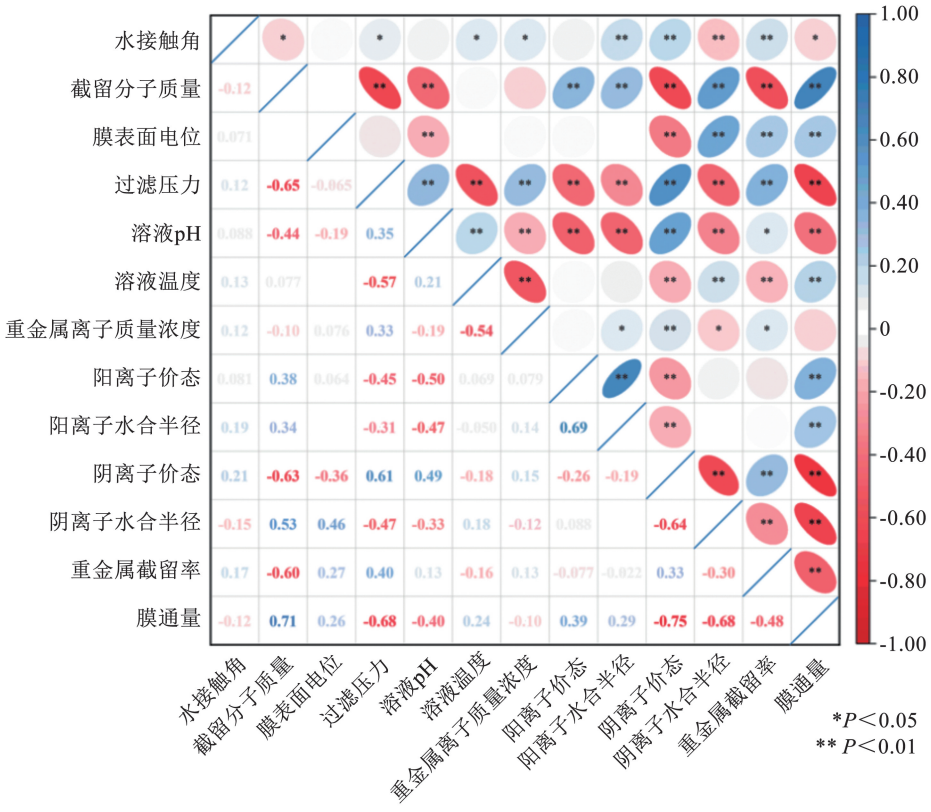


图 1　模型输入特征与模型输出之间的皮尔逊相关性分析

Fig. 1　Pearson correlation analysis between model input features and model output

2.2　不同机器学习算法的性能预测模型评价

图 2 为不同模型的评估指标对比,线性模型(LASSO、ElasticNet)预测能力有限,R^2 均低于 0.4,具有最高的预测误差。相比之下,非线性模型(KNN、DT、SVM)展现出较优性能,R^2 可达到 0.8 左右,证明了纳滤膜性能与输入特征之间存在高维复杂关系。然而,此类模型对数据集的划分较为敏感,模型评估指标波动范围高达 20%,表示其泛化能力不足。基于 Boosting 集成的 4 种算法(GBDT、LightGBM、CatBoost、XGBoost)在膜通量(R^2 >0.96)及重金属截留率(R^2 >0.90)预测中均具有极高的准确率。性能提高的原因在于 Boosting 算法通过迭代拟合残差和动态样本权重调整,实现了更优的偏差与方差间的权衡[15]。得益于正则化调控和二阶梯度的残差拟合[16],XGBoost 模型综合性能最为突出,对膜通量和重金属截留率的 R^2 可分别达到0.98 和 0.92,具有最低的预测误差,且各指标波动范围均低于 5%,表明该模型在膜性能预测中的准确性和鲁棒性。

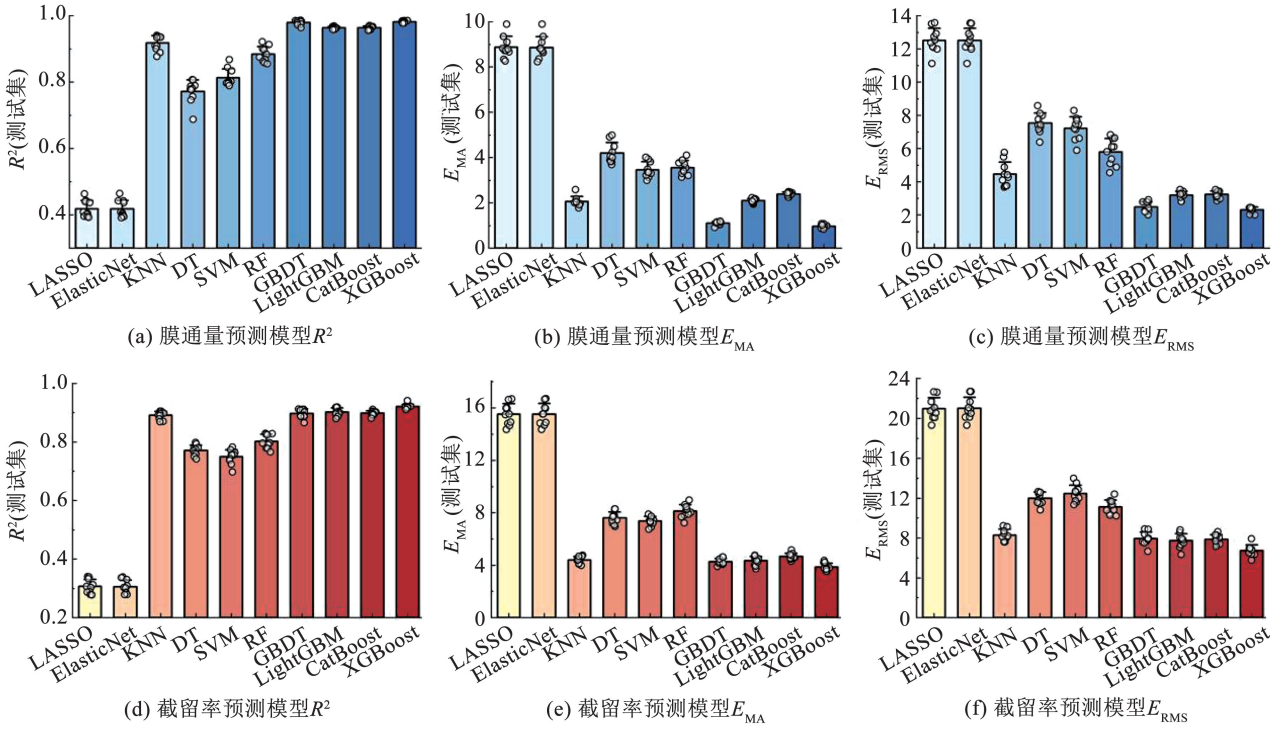


图 2　基于 10 种机器学习算法构建的预测模型的性能对比

Fig. 2　Performance comparison of prediction models based on 10 machine learning algorithms

联合散点图提供了实验值和预测值的直观比较。图 3 展示了 4 个代表性模型的预测散点分布，其中，LASSO 模型的散点呈现无规律分布，严重偏离理想预测参考线，证明了其较差的预测性能。基线模型 DT 的散点则基本分布在理想预测参考线周围，但仍然具有较多离散点。相比之下，基于 Boosting 集成的树模型中 GBDT 模型和 XGBoost 模型的散点紧密分布在参考线周围，二者具有类似的膜通量预测精度，但 XGBoost 模型的重金属截留率预测具有更少的离散点，表示更低的预测误差。

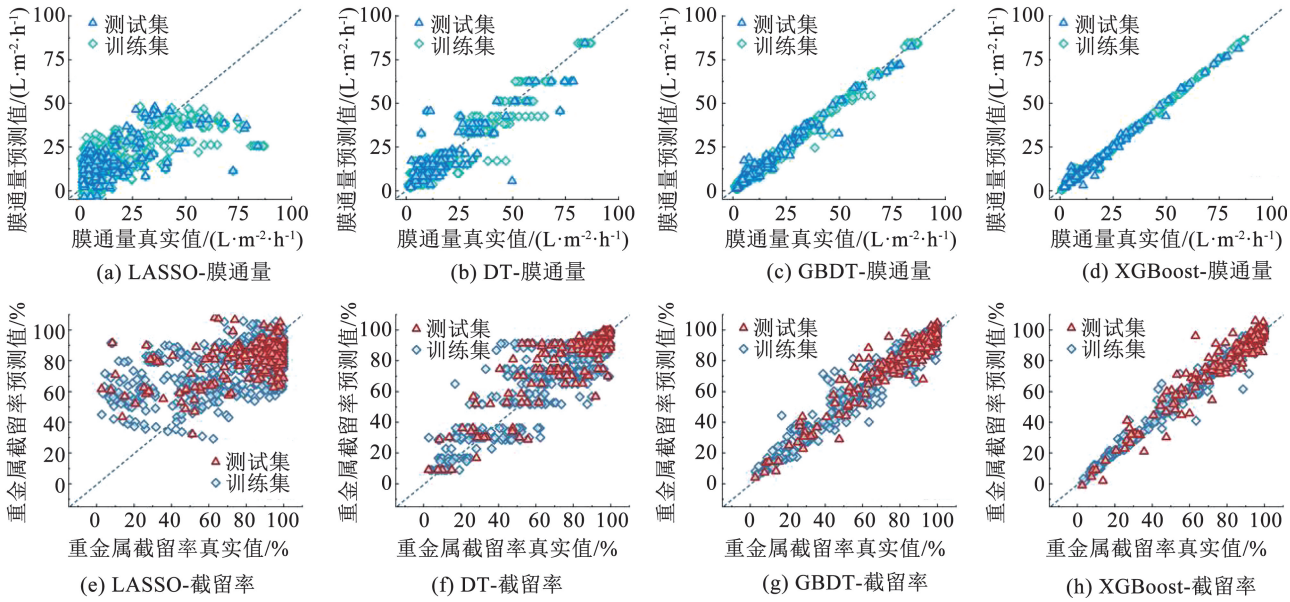


图 3　4 种代表性预测模型实验值与预测值的联合散点图

Fig. 3　Joint scatter plots of experimental values and predicted values of four representative prediction models

2.3　特征贡献度分析

采用 SHAP 分析评估膜性能关键影响因素的贡献度。图 4 展示了输入特征在所有样本中的具体贡献，图中散点的颜色代表特征值的大小，SHAP 值的大小表示该特征在每个样本中的贡献度大小，正负号则表示正贡献和负贡献。平均绝对 SHAP 值表示特征的全局贡献度。

图 4(a) 中膜通量的全局贡献度排序显示，过滤

压力(4.92)、水接触角(3.32)、膜表面电位(3.17)和截留分子质量(2.72)是主要影响因素。过滤压力贡献度最高,低压下呈正贡献,随压力的增加转为负贡献,这是由于实际运行中对于通量较低的纳滤膜,增加压力是最常用的增效方式[17]。3 个膜属性具有非单调的贡献度,水接触角的减小、膜表面电位和截留分子质量的增大有利于膜通量的提高,但水接触角过高和过低会导致其 SHAP 值接近 0,截留分子质量过大时 SHAP 值变负。亲水性过低时,膜孔内会形成不利于水分子运输的气隙,而过度亲水时,较厚的膜表面水合层会阻碍水分子运输,二者均会导致膜通量的下降[18]。截留分子质量代表了膜的有效孔径,孔径的增大直接降低了水分子运输阻力,但当膜孔径过大时,纳滤膜更容易产生孔道变形和膜孔堵塞,从而产生负贡献[19]。膜表面电位的增大主要通过强化静电排斥作用减少了重金属离子的孔内吸附与堵塞,维持了膜通量[20]。

图 4(b)显示重金属截留率受多种因素的共同影响,截留分子质量(7.90)具有最高贡献度,水接触角(4.38)与膜表面电位(3.72)次之,溶液 pH、过滤压力及阴阳离子水合半径贡献度相近。重金属截留首先受到有效膜孔径和离子水合半径的影响,然后受膜表面电位和离子价态的影响,这表明重金属截留以尺寸排阻为主导机制,静电排斥效应为关键补充。截留分子质量、水接触角对截留率具有负贡献,膜表面电位、溶液 pH、过滤压力和阴阳离子水合半径则具有正贡献。各因素对重金属截留率的贡献具有明显的单调关系,因此,为实现重金属截留率的提高,应当采取减小膜孔径、增加亲水性和膜表面正电荷的方式。值得注意的是,膜属性对膜通量和重金属截留率的贡献高达 54.6% 与 51.4%,表明纳滤膜固有特性在优化设计中的关键作用。

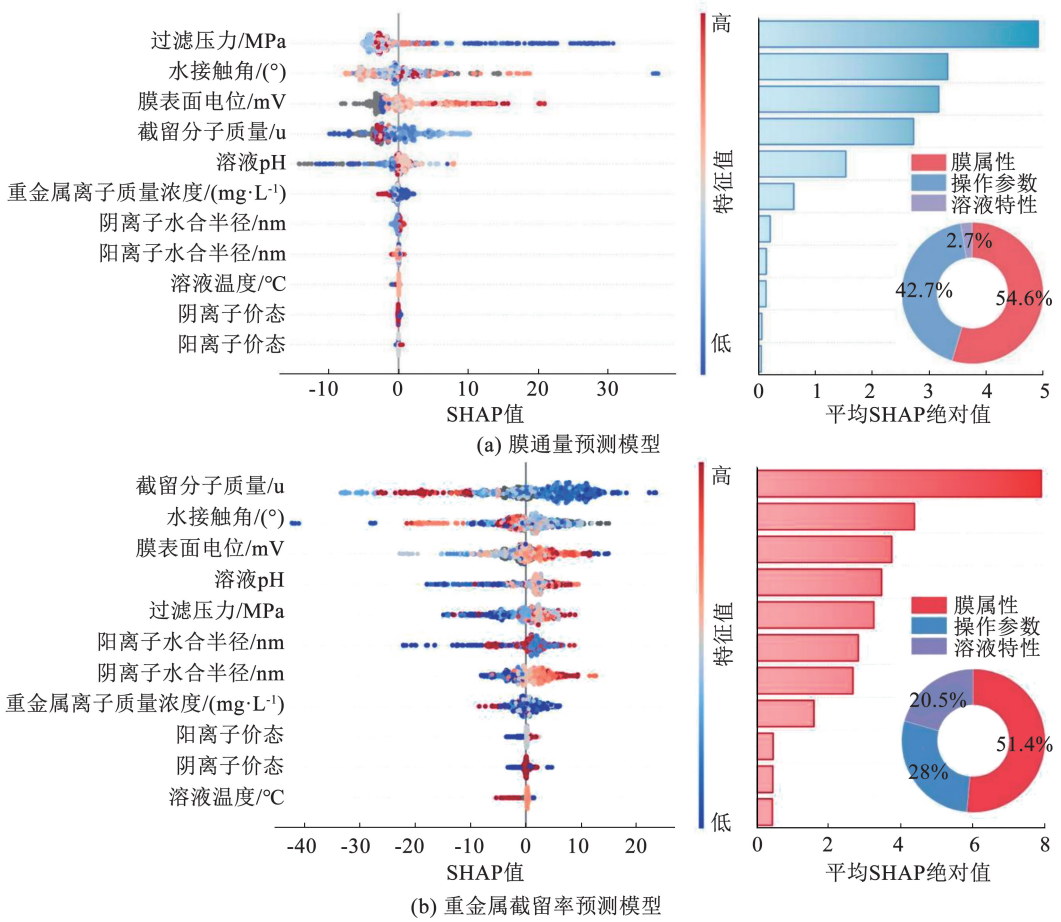


图 4 XGBoost 性能预测模型的 SHAP 分析结果

Fig. 4 SHAP analysis results of XGBoost performance prediction models

2.4 关键特征边际效应分析

特征贡献度分析发现了各因素的非单调影响,因此,挖掘同时对通量和截留率具有正贡献的参数范围是实现性能优化的关键。分析了关键膜属性和操作参数在连续变化过程中的边际效应,对于膜属性(图 5(a)~(c)),水接触角和截留分子质量对膜通量和重金属截留率的贡献变化趋势不同,水接触角位于 20°~30°可以实现重金属截留率和膜渗透通量的同步提高,而 40°~70°可以在一定程度降低膜通量的情况下实现截留率的提高。分析发现,当

截留分子质量处于 200 ~ 650 u 时，其对膜通量和重金属截留率的 SHAP 值均为正，表明该范围内的膜结构可以在保证重金属离子截留能力的同时提高膜通量。当截留分子质量 > 650 u 时，重金属截留率随着截留分子质量的增加持续下降，这是由于有效膜孔径的增大导致排阻截留效应的降低，膜通量在小幅度升高之后也开始降低，膜孔径的适当增大有利于水分子跨膜运输，但同样会导致膜机械性能的降低，在过滤过程中出现更显著的压实现象以降低膜通量。膜表面电位位于 - 60 ~ 20 mV 时，SHAP 正负值同时出现，当膜表面电位 > 20 mV 时，膜对重金属离子的静电排斥逐渐增强，实现了同步提高。对于操作参数（图 5（d）~（f）），当过滤压力 > 0.4 MPa、溶液 pH > 4 和重金属离子质量浓度 > 200 mg/L时，有利于重金属截留率的提高。

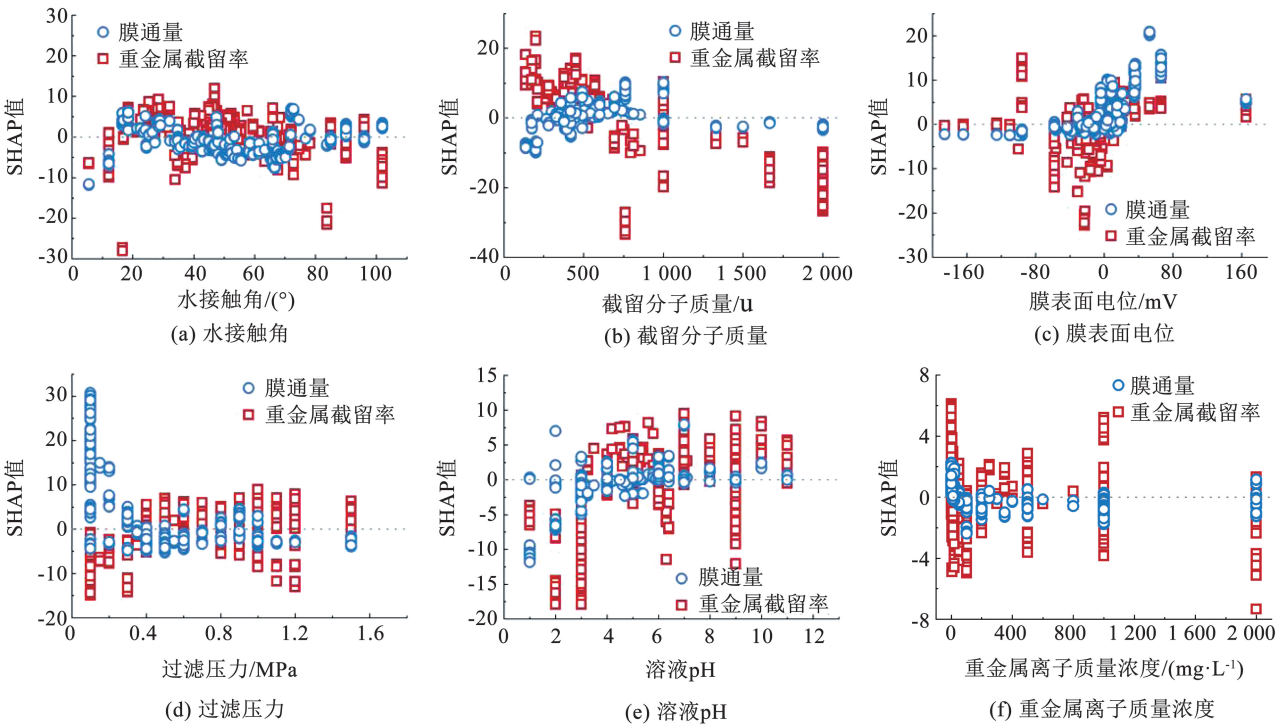


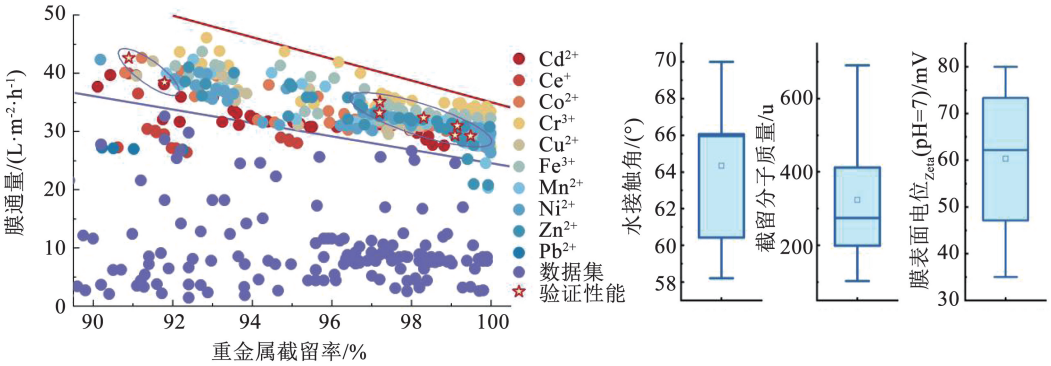
图 5　关键特征 SHAP 依赖图

Fig. 5　SHAP dependence plot of key features

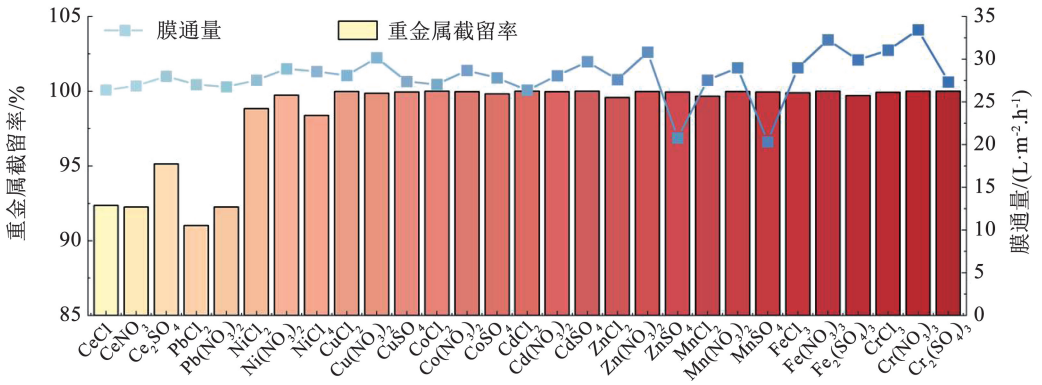
2.5　基于双目标优化算法的纳滤膜设计

传统研究多通过试错实验实现纳滤膜通量和重金属截留率的同步提高，受限于截留机制的不清晰，导致研发周期长、研发成本高昂。为了在精准预测的基础上进一步实现定制设计，本研究基于高精度预测模型，面向低压力（0.4 MPa）和高质量浓度（1 000 mg/L）重金属回收场景，构建了 NSGA-Ⅱ双目标优化算法框架。图 6（a）为数据集中的实验数据点与 NGSA-Ⅱ算法优化结果的帕累托前沿，帕累托前沿由优化算法获取的所有双目标最优解组成，包含 10 种重金属离子在不同溶液特性下的纳滤性能。可以看出，随着重金属截留率的升高，数据集散点的通量大幅下降，当重金属截留率 > 99% 时，只有低于 10 L/（m^2·h）的低通量，这表示了膜通量和截留率的固有权衡效应。帕累托前沿的分布同样符合膜通量和截留率的权衡关系，但均位于数据集散点之上，突破了纳滤膜性能上限。该优化性能得到了数据集中部分实验的验证，表明优化算法的可行性。

分析了帕累托前沿中折中解对应的膜属性分布，如图 6（b）所示，纳滤膜的水接触角位于 60° ~ 66°，截留分子质量位于 200 ~ 412 u 以及膜表面电位位于 47 ~ 73 mV，符合 SHAP 分析结果。因此，重金属处理纳滤膜应当具有更强的亲水性、更小的截留分子质量和带正电荷的膜表面，这充分证明了纳滤膜在尺寸排阻机制和静电排斥效应协同控制下的重金属截留性能。图 6（c）展示了 10 种重金属离子的截留性能，Pb^{2+} 和 Ce^{+} 离子具有更小的水合半径[21-22]，同样能实现截留率 > 90% 的优化目标，其他重金属离子的截留率 > 99%，并具有 25 ~ 30 L/（m^2·h）的通量，体现了本研究所构建的纳滤膜优化设计框架指导设计重金属高效处理纳滤膜的潜力。



(a) 性能上限与帕累托前沿　　(b) 关键膜属性的优化分布



(c) 不同溶液环境下重金属离子的最优纳滤性能

图 6　膜通量和重金属截留率的 NSGA-Ⅱ优化结果

Fig. 6　NSGA-Ⅱ optimization results of membrane flux and heavy metal rejection rate

3　结　论

1)成功构建了 10 种机器学习算法用于预测纳滤膜的性能,并通过性能评估明确了 XGBoost 为最优模型。XGBoost 模型在膜通量和重金属截留率预测中的 R^2 分别达到 0.98 和 0.92,表现出极高的准确性和鲁棒性。

2)SHAP 分析揭示了膜通量和重金属截留率的关键影响因素及其贡献度,发现重金属截留率由尺寸排阻效应发挥主导作用,静电排斥效应作为重要补充。

3)采用双目标优化算法来识别纳滤膜的物化特性,优化算法的预测结果显示,膜的最佳性能出现在水接触角为 60° ~ 66°、截留分子质量为 200 ~ 412 u和膜表面电位为 47 ~ 73 mV 的区间,相应参数的纳滤膜对重金属截留率超过 99%,膜通量为 25 ~ 30 L/(m²·h)。

参考文献

[1]KHAMIS F, HEGAB H M, BANAT F, et al. Development of sustainable pH-responsive adsorptive modified mangrove-based polylactic acid ultrafiltration membrane for the removal of heavy metals from aqueous solution[J]. Chemical Engineering Journal, 2023, 474: 145471. DOI: 10.1016/j.cej.2023.145471

[2]FULLER R, LANDRIGAN P J, BALAKRISHNAN K, et al. Pollution and health: a progress update[J]. The Lancet Planetary Health, 2022, 6(6): e535. DOI: 10.1016/S2542-5196(22)00090-0

[3]LIU Shihua, SUN Qiuhong, XU Nuo, et al. Recent advances in the treatment of heavy/precious metal pollution, resource recovery and reutilization: progress and perspective[J]. Coordination Chemistry Reviews, 2025, 523: 216268. DOI: 10.1016/j.ccr.2024.216268

[4]SAHU L R, YADAV D, INGOLE P G. Recent developments and innovations in thin-film nanocomposite nanofiltration: the next-generation selective membrane for heavy metal ion removal from water[J]. Chemical Engineering Journal, 2025, 513: 162579. DOI: 10.1016/j.cej.2025.162579

[5]XU Sunjie, SHEN Qian, LUO Lihan, et al. Surfactants attached thin film composite (TFC) nanofiltration (NF) membrane via intermolecular interaction for heavy metals removal[J]. Journal of Membrane Science, 2022, 642: 119930. DOI: 10.1016/j.memsci.2021.119930

[6]LASISI K H, AJIBADE T F, ZHANG K. 3, 3′-diaminodiphenyl sulfone engagement in polysulfonamide-based acid-resistant nanofiltration membrane fabrication for efficient separation performance and heavy metal ions removal from wastewater[J]. Journal of Membrane Science, 2022, 661: 120909. DOI: 10.1016/j.memsci.2022.120909

[7]李亚宁, 郝亚超, 李亮, 等. 响应曲面法优化纳滤去除废水中重金属离子的研究[J]. 膜科学与技术, 2020, 40(6): 111
LI Yaning, HAO Yachao, LI Liang, et al. Optimization of removal heavy metal ions from high-salt wastewater by nanofiltration based on response surface methodology [J]. Membrane Science and

Technology, 2020, 40(6): 111 DOI: 10.16159/j.cnki.issn1007 - 8924.2020.06.016

[8] REN Yuling, QI Pengfei, HAN Yujie, et al. Mix-charged nanofiltration membrane for efficient organic removal from high-salinity wastewater: the role of charge spatial distribution [J]. Environmental Science & Technology, 2025, 59(2): 1434. DOI: 10.1021/acs.est.4c10120

[9] ZHU Yunyi, WANG Yuan, ZHU E, et al. Predicting membrane fouling of submerged membrane bioreactor wastewater treatment plants using machine learning[J]. Environmental Science & Technology, 2025, 59(20): 10010. DOI: 10.1021/acs.est.4c12835

[10] 徐达梁, 徐杭镔, 靳心瑶, 等. 基于机器学习的纳滤膜预测筛选模型构建与评估[J]. 哈尔滨工业大学学报, 2024, 56(6): 8
XU Daliang, XU Hangbin, JIN Xinyao, et al. Construction and evaluation of prediction model for nanofiltration membranes based on machine learning[J]. Journal of Harbin Institute of Technology, 2024, 56(6): 8. DOI: 10. 11918/202402004

[11] JEONG N, PARK S, MAHAJAN S, et al. Elucidating governing factors of PFAS removal by polyamide membranes using machine learning and molecular simulations[J]. Nature Communications, 2024, 15(1): 10918. DOI: 10.1038/s41467 - 024 - 55320 - 9

[12] WANG Mao, SHI Cuimin, ZHAO Daohui, et al. Machine learning-assisted design of thin-film composite membranes for solvent recovery[J]. Environmental Science & Technology, 2023, 57(42): 15914. DOI: 10.1021/acs.est.3c04773

[13] LIANG Yuanzhe, ZHU Yuzhang, LIU Cheng, et al. Polyamide nanofiltration membrane with highly uniform sub-nanometre pores for sub-1 Å precision separation[J]. Nature Communications, 2020, 11(1): 2015. DOI: 10.1038/s41467 - 020 - 15771 - 2

[14] CUHORKA J, WALLACE E, MIKULáŠEK P. Removal of micropollutants from water by commercially available nanofiltration membranes[J]. Science of the Total Environment, 2020, 720: 137474. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.137474

[15] BENTéJAC C, CSöRGÖ A, MARTíNEZ-MUñOZ G. A comparative analysis of gradient boosting algorithms[J]. Artificial Intelligence Review, 2021, 54(3): 1937. DOI: 10.1007/s10462 - 020 - 09896 - 5

[16] GONG Weijia, XU Hangbin, LU Jinyan, et al. Gradient boosting decision tree algorithms for accelerating nanofiltration membrane design and discovery[J]. Desalination, 2024, 592: 118072. DOI: 10.1016/j.desal.2024.118072

[17] ZHAO Yali, LAI G S, CHONG J Y, et al. Dissecting the structure-compaction-performance relationship of thin-film composite polyamide membranes with different structure features[J]. Journal of Membrane Science, 2022, 654: 120553. DOI: 10.1016/j.memsci.2022.120553

[18] AN Xiaochan, ZHANG Keming, WANG Zongsheng, et al. Improving the water permeability and antifouling property of the nanofiltration membrane grafted with hyperbranched polyglycerol [J]. Journal of Membrane Science, 2020, 612: 118417. DOI: 10.1016/j.memsci.2020.118417

[19] IMBROGNO A, CALVO J I, BREIDA M, et al. Molecular weight cut off (MWCO) determination in ultra-and nanofiltration: review of methods and implications on organic matter removal [J]. Separation and Purification Technology, 2025, 354: 128612. DOI: 10.1016/j.seppur.2024.128612

[20] 沈倩, 徐孙杰, 许振良, 等. 含重金属废水膜分离技术的应用进展[J]. 山东化工, 2019, 48(5): 59
SHEN Qian, XU Sunjie, XU Zhenliang, et al. Application of membrane separation technology in industry heavy metal wastewater [J]. Shandong Chemical Industry, 2019, 48(5): 59. DOI: 10.19319/j.cnki.issn.1008 - 021x.2019.05.021

[21] JIA Tianzhi, LU Jinpeng, CHENG Xinyao, et al. Surface enriched sulfonated polyarylene ether benzonitrile (SPEB) that enhances heavy metal removal from polyacrylonitrile (PAN) thin-film composite nanofiltration membranes [J]. Journal of Membrane Science, 2019, 580: 214. DOI: 10.1016/j.memsci.2019.03.015

[22] DUVAIL M, D′ANGELO P, GAIGEOT M P, et al. What first principles molecular dynamics can tell us about EXAFS spectroscopy of radioactive heavy metal cations in water[J]. 2009, 97(7): 339. DOI: 10.1524/ract.2009.1616

（编辑　刘　彤）