DOI:10.11918/202511104

人工智能驱动的膜滤净水技术研究进展

徐达梁,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:膜技术具有高效分离、操作简便、集成化高等优势,是推动饮用水提质增效的关键技术。然而,膜技术仍受限于膜材料本征性能不足、膜单元动态调控困难、膜系统运维复杂的问题,制约了其实际工程应用的效能。人工智能通过数据与智能分析的高度耦合,可赋能材料的逆向设计、工艺的精准调控与系统的智能调度。推动人工智能与膜技术的深度融合,对实现膜技术的跨越式发展具有重要意义。本研究综述了人工智能在膜材料、膜单元与膜系统3个层面中的耦合特点与发展路径,重点探讨了人工智能在高性能膜材料设计、工艺节能降耗与水质安全保障、全流程系统评估与多目标智慧化管控的应用潜力。目前,人工智能在膜滤净水技术中的应用仍面临关键数据稀疏、模型预测精度与泛化能力不足、集成与部署复杂度高等问题,亟需构建跨场景的标准化数据集、开发数据-机制融合的强化模型、建立模块化与轻量化的边缘智能框架,以期为人工智能驱动的膜滤净水技术研究与应用提供理论与技术参考。

关键词:人工智能;膜材料;膜单元;膜系统;净水技术

中图分类号:TU991 **文献标志码**:A **文章编号**:0367-6234(2026)06-0150-09

Research progress on artificial intelligence-driven membrane filtration technology for water treatment

XU Daliang, LIANG Heng

(State Key Laboratory of Urban-rural Water Resources and Environment (Harbin Institute of Technology), Harbin 150090, China)

Abstract: Membrane technology, possessing advantages such as high-efficiency separation, simple operation, and high integration, is a key technology for promoting the quality improvement and efficiency enhancement of drinking water. However, membrane technology is still limited by the problems of insufficient intrinsic performance of membrane materials, difficulty in dynamic regulation of membrane units, and complex operation and maintenance of membrane systems, which constrain the effectiveness of its practical engineering applications. Through the high coupling of data and intelligent analysis, artificial intelligence can empower reverse design of materials, precise regulation of processes, and intelligent scheduling of systems. Promoting the deep integration of artificial intelligence and membrane technology is of great significance for achieving the leapfrog development of membrane technology. This paper reviewed the coupling characteristics and development pathways of artificial intelligence at the three levels of membrane material, membrane unit, and membrane system and emphatically discussed the application potential of artificial intelligence in high-performance membrane material design, process energy conservation and consumption reduction and water quality safety assurance, and whole-process system evaluation and multi-objective intelligent management and control. At present, the application of artificial intelligence in membrane filtration technology for water treatment still faces problems such as sparse key data, insufficient model prediction accuracy and generalization ability, and high integration and deployment complexity. It is urgent to construct cross-scenario standardized datasets, develop data-mechanism fusion reinforcement models, and establish modular and lightweight edge intelligence frameworks, so as to provide theoretical and technical references for the research and application of artificial intelligence-driven membrane filtration technology for water treatment.

Keywords: artificial intelligence; membrane material; membrane unit; membrane system; water treatment technology

收稿日期:2025-11-30;**录用日期**:2026-01-09;**网络首发日期**:2026-01-23
网络首发地址:https://link.cnki.net/urlid/23.1235.T.20260123.1332.006
基金项目:国家自然科学基金(52570002)
作者简介:徐达梁(1993—),男,副教授;梁 恒(1979—),男,教授,博士生导师
通信作者:梁 恒,hitliangheng@163.com

饮用水安全保障是维护公众健康与社会稳定的重大民生工程[1]。《中华人民共和国国民经济和社会发展第十四个五年规划和2035 年远景目标纲要》指出，把保障人民健康放在优先发展的战略位置，全面推进健康中国建设。2023 年 4 月 1 日，GB 5749—2022《生活饮用水卫生标准》的正式实施为饮用水安全带来新挑战，对饮用水品质要求日趋严格[2]。膜滤净水技术通过分离过程净化水体中的污染物并避免有害物质的产生，保障了饮用水的天然、安全与健康属性，成为第三代饮用水净化工艺的核心[3]。

当前，中国正以绿色发展重构城乡水系统建设以应对全球气候变化，净水技术需顺应“双碳”目标，通过绿色低碳转型，实现污染物与碳排放的协同控制[4]。然而，由于膜材料本征性能受限、膜单元动态调控困难、膜系统运行维护复杂，膜滤净水技术具有高能耗与高碳排放特征[5]。据统计，由于能耗的上升，以分离膜为核心的饮用水生产成本约为传统工艺的 1.2 倍[6]。因此，亟需加速新型先进膜材料的开发与探索，推动膜单元智能感知与优化调度，形成“水–能–碳”多目标协同的膜系统智控策略，支撑“双碳”约束下膜滤净水技术的理论与技术创新。

人工智能具备感知理解、推理决策和创造生成的能力，为解析与优化复杂工程问题提供了全新路径[7]。本研究系统梳理了人工智能在高性能膜材料设计、膜单元调控与膜系统智控的研究进展，为统筹膜滤净水技术在水质安全保障、工艺节能降碳、系统智能调度等方面提出重点攻关方向，以推动膜滤净水技术的智慧化转型与发展。

1　人工智能驱动的膜材料设计

1.1　膜材料特征工程构建

膜材料智能设计的基础在于选取涵盖关键物理信息的输入特征并构建数据集。膜性能受到单体材料、制备方法与膜特性等多元特征的复杂高维影响[8]，输入特征的质量直接决定了模型的预测性能。Jeong 等[9]构建了包含截留分子质量、水接触角、离子强度、跨膜压力的盐截留数据集，其预测模型决定系数（R^2）仅为 0.74、均方根误差（RMSE）为 16.65；Gao 等[10]进一步考虑了分离膜的厚度、粗糙度及表面电位，预测 6 种典型盐截留率的 R^2 可达 0.84、RMSE 降低至 11.74。基于原料属性和制备参数的“端到端”预测模型摆脱了对大量昂贵表征的依赖，成为新的研究趋势。

膜材料设计的关键是材料分子属性的提取（表 1）。分子指纹和分子描述符是从 SMILES 编码中提取信息的两种重要方式，分子指纹记录分子的原子组成、官能团和结构[11]，分子描述符则通过原子贡献度和经验计算公式，获取分子的拓扑结构和物理化学性质，提供更丰富的输入信息[12]。分子指纹和经验性的分子描述符可以通过计算化学平台如 RDkit[13]、Chemdes[14] 快速获取，得到了广泛的应用，但也表现出信息丢失和描述能力受限的问题[15]。基于密度泛函理论（DFT）和分子动力学模拟（MD）可获取更高精度的描述符，Liu 等[16]通过 DFT 计算了含羟基单体的分子前线轨道能量、偶极矩和表面电荷极值，基于此数据集对膜通量、染料截留及盐截留性能进行预测，R^2 均高于 0.85；Tao 等[17]则通过 MD 获取了上千种聚合物膜的自由体积分数，构建了预测膜分离性能的高精度前馈神经网络，从 800 种聚合物中筛选出 10 种高性能聚酰胺材料。虽然 DFT 和 MD 模拟显著增加了计算成本，但其分子层面的精确描述极大提高了模型泛化能力，随着高通量计算的持续发展，可为膜材料模拟计算提供算力支撑[18]。

表 1　膜材料预测模型与特征工程

Tab. 1　Prediction model and feature engineering of membrane material

机器学习算法	描述符	特征处理方法	模型性能评价	参考文献
XGBoost	DFT 描述符	皮尔逊相关性分析 反向差分编码 Power transformer 归一化	R^2 = 0.88	[16]
GBM	分子指纹、MD 描述符	领域知识筛选 标准差筛选	R^2 = 0.74	[17]
LGBM	分子指纹	独热编码	R^2 = 0.87	[23]
XGBoost	分子描述符	斯皮尔曼相关性分析	R^2 = 0.87	[24]

在数据集构建后，输入特征完整性、共线性和冗余度是特征工程需要同时解决的关键问题。典型的缺失值填充方法有平均数插值、中位数插值、K 近邻插值，Ji 等[19]构建了多变量链式插补算法，从已有的数据点中进行局部匹配回归，显著提高了截留率预测精度（R^2 = 0.96）。为降低特征共线性，通常采用皮尔逊相关性分析，相关系数高于 0.7 的特征往往包含了高度相似信息，需要根据领域知识选择性

去除[20]。主成分分析、共现网络等无监督学习算法常用于特征降维[21]，计算基线模型的基尼系数、信息增益可提供初步的特征重要性见解，随后，通过递归特征消除法去除冗余特征[22]。特征工程作为连接原始数据与机器学习模型的桥梁，是膜材料智能设计的重要步骤。然而，当前特征工程仍因数据稀疏导致模型性能不足，未来需通过“物理信息”或“机制嵌入”的方式强化机器学习模型效能。

1.2 膜材料构效关系解析

膜材料预测模型具有“黑箱”的特性，其决策过程往往不易理解，通过可解释机器学习分析模型的内部机制，对于提供可靠的决策支持至关重要。基于合作博弈论的沙普利加性解释(SHAP)通过遍历特征子集计算预测值差异并量化特征的全局贡献[25]，部分依赖分析(PDP)可以直观反映特征值或特征组变化时目标变量预测值的变化，揭示特征局部贡献[26]。Zhang 等[27]使用 SHAP 解析分离膜对不同类型盐的截留机制，结果显示膜电势在多价盐截留中具有最高的贡献度，而对二价盐截留贡献度最高的特征是孔径，PDP 分析进一步量化了不同类型盐的高截留区间，为分离膜设计提供理论依据；Lu 等[28]为探究有机污染物的去除机制，结合分子指纹、膜特性与分离机制建立了数据机制融合模型，将 R^2 从纯数据驱动模型的 0.82 提升至 0.88，揭示了单体材料二级亚结构的作用。SHAP 和 PDP 的组合分析已成为了模型解释的有力工具，但其本质依旧是基于统计关联的相关性解释。Wang 等[29]构建了基于因果随机森林的机器学习模型，解耦特征之间的直接和间接因果效应，识别了关键因素对分离膜有机污染物截留的影响，如 pH 通过改变分子电荷和膜电位改变了有机污染物截留率。未来，膜材料设计需开发新型可解释模型，揭示膜结构对目标变量的条件效应、对称效应和时间依赖效应。

1.3 膜材料逆向设计

膜材料逆向设计是从目标性能出发，利用人工智能高效逆推所需的化学结构、制备条件和操作参数(图 1)。膜材料性能上限主要取决于制备原料的固有性能，如低压分离膜(微滤、超滤)的聚合物、高压分离膜(纳滤、反渗透)的两相单体、金属有机框架膜的金属离子与有机配体等，在庞大的化学空间进行实验性探索与筛选极大延长了材料研发周期。Ma 等[30]建立了基于分子片段的分离膜溶质排斥预测模型，从包含 133 864 种单体组合中筛选出 3 种全新单体组合，其纯水通量提升 2 倍。结合分子指纹、计算化学等技术对分子性质的准确描述以及机器学习的高通量筛选能力，可加速膜材料的更新与迭代。

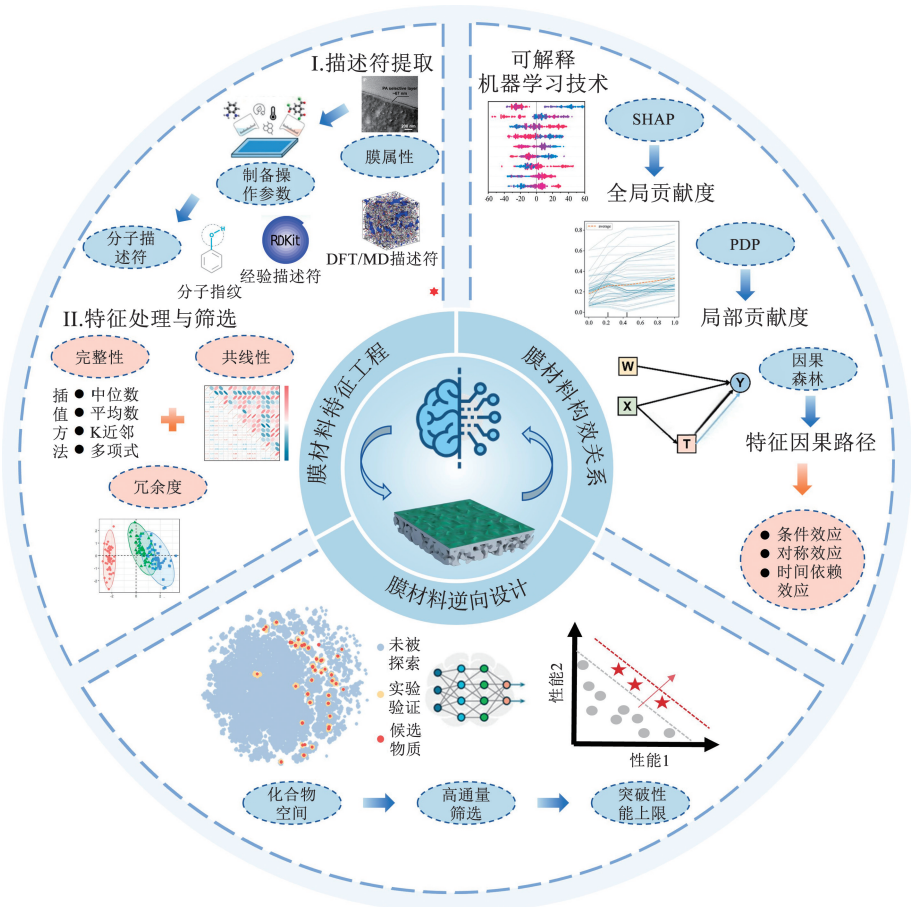


图 1 人工智能驱动的膜材料设计框架

Fig. 1 Design framework of artificial intelligence-driven membrane material

膜材料的制备涉及多元参数，如低压分离膜相转化制备过程中刮刀间隙与刮涂速度、凝固浴配比与温度等，高压膜界面聚合过程中的单体浓度、反应温度与反应时间等，具有多参数耦合导致的数据维度指数级增长的挑战。机器学习模型可以结合优化算法，如贝叶斯优化、粒子群优化和遗传算法等快速筛选高维参数空间并获取最优组合。刘鹏等[31]面向重金属截留需求构建了 NSGA-Ⅱ多目标优化算法，以重金属截留率和膜通量为同步优化目标，对关键膜属性进行优化，从帕累托前沿中提取出可实现重金属离子截留 99% 以上的参数组合。

尽管如此，膜材料逆向设计仍面临挑战，当前优化算法在高维空间中的全局寻优能力与计算效率有待提升，从虚拟设计到实验验证的自动化平台尚未普及，模型性能严重依赖训练数据的广度与质量，对于全新化学空间的外推预测存在风险[32]。未来研究应致力于开发自适应、强全局搜索能力的智能算法，并构建集成自动化合成、表征、测试的实验平台，实现膜材料的逆向设计。

2　人工智能驱动的膜单元调控

2.1　膜前精准投药

膜前精准投药是调控进水特性，缓解分离膜污染的有效途径。然而，传统人工投药存在经验依赖性强、药剂投加量高、难以应对水质波动的问题[33]。基于原水水质与处理目标的人工智能模型可精准预测最佳膜前药剂投量和处理时间，在减少药剂消耗的同时去除水中离子、有机物、微生物等，有效减缓膜污染并提升出水水质。Feng 等[34]构建了用于混凝剂投加的随机森林模型，通过自动化特征选取、模型筛选及超参数优化，实现了混凝剂投加量和混凝时间的精准预测（R^2 = 0.96、RMSE = 0.89），有效改善了絮体与污染物的碰撞、吸附及架桥等相互作用过程；Aftab 等[35]以温度、污染物浓度和 pH 等参数作为输入特征建立了支持向量回归模型，有效预测基于黑豆蔻合成的活性炭的最佳投加量（R^2 = 0.99、RMSE = 0.46），提升了吸附剂对溶解性有机物的处理效能与利用率，缓解了分离膜的有机污染与新污染物穿透问题。膜前氧化剂投加可有效灭活原水中的细菌和病毒，但投加量过大会导致残余试剂对膜面的氧化破坏，使分离膜使用寿命降低。Khan 等[36]利用溶解性有机碳、UV_{254}、氯投加量等参数建立用于氧化剂投加的人工神经网络模型（ANN），实现了原水中细菌和病毒的有效控制，解决了分离膜的生物污染问题。

2.2　膜面污染预警

膜污染是污染物在膜表面或膜孔内沉积的现象，会导致膜通量下降与分离性能恶化，是制约膜技术发展与应用的关键因素。传统膜污染预测模型通常基于数学模型或经验方程，利用监测数据分析膜污染程度与各影响因素的关系，从而对膜污染演化过程进行评估。响应面法通过中心复合设计和二次回归模型对多因素交互作用进行拟合，在较少监测数据下建立跨膜压力与关键影响因素（pH、温度、污染物浓度等）的定量关系[37]。这有助于优化运行压力、运行时间及清洗频率等关键运行参数。然而，传统数学模型预测方法通常建立在简化的运行工况下，模型建立过程中引入的假设条件会导致预测结果与实际情况间的误差。此外，膜污染是一个受水质与运行参数影响的复杂动态过程，静态数学模型难以实现对膜污染的精准预测。

人工智能技术可从原始运行数据提取特征，捕捉数学模型难以表征的复杂关系。Mu 等[38]以紫外-可见光谱、同步荧光光谱和激发-发射矩阵光谱等为输入特征，建立反向传播神经网络模型，结果显示，在多种污染情境下均可实现精准预测（R^2 > 0.96）；Li 等[39]采用遗传算法优化的人工神经网络量化了膜污染与界面黏附力关系（R^2 = 0.99），与传统的热力学模型相比，显著降低了计算时间。同时，将物理规律融入机器学习框架对于提升其泛化性、可解释性及膜污染预测能力极为重要。Garakani 等[40]将 Hermia 污染方程与神经网络结合，构建了基于物理信息的神经网络架构，将物理定律融入学习过程并为每种机制赋予权重因子，相较于传统机器学习模型具有更精准的膜面污染预警能力。

2.3　膜后水质保障

随着水源污染物复杂度和国家水质标准的提升，膜滤技术因其高效分离和出水稳定性的优势成为水质安全保障的关键技术。然而，膜分离效能受进水水质、运维条件、耦合工艺等多因素影响，传统经验运维方式难以实现对分离过程的调控。近期研究发现，将人工智能与膜后水质保障结合，可预测分离膜对多元污染物的去除效能（表 2）。Zhou 等[41]基于微塑料浓度、混凝剂投加量、水力条件等影响因素，构建了 ANN 预测微塑料去除率。ANN 的激活函数可为网络提供适配的非线性映射能力，缓解模型因特征分布广、非线性程度高、数据差异大导致的预测性能不足的问题。同时，通过归一化处理降低输入特征均值和方差的差异，避免 ANN 层间参数更新导致的内部协变量偏移问题，预测微塑料去除率的 R^2 达 0.99。

表 2 人工智能驱动的膜后水质预测

Tab. 2 Artificial intelligence-driven water quality prediction of membrane effluent

污染物	机器学习算法	输入特征	模型性能评价	参考文献
微塑料	ANN	药剂投加量 pH 水力条件 微塑料浓度	$R^2 > 0.99$	[41]
全氟辛烷磺酸	AdaBoost	温度 pH 压力 阳离子浓度	$R^2 = 0.96$	[43]
	ANN	温度 pH 压力 阳离子浓度	$R^2 = 0.89$	[44]
有机微污染物	XGBoost	孔径 膜电位 水接触角 污染物电荷	$R^2 = 0.74$	[45]
离子	RF	膜孔径 膜电位 压力 进料浓度	$R^2 > 0.81$	[46]

Sukarno 等[42]基于膜特性与测试条件建立了 XGBoost 模型用于硼去除率预测,该模型在测试集上表现出优异的性能($R^2 = 0.84$、RMSE = 10.45),显著优于线性回归、决策树与随机森林模型。模型的优异性能归因于梯度提升、树结构分裂与特征重要性量化的协同作用。梯度提升框架通过多轮迭代逐步拟合残差,使模型能够有效捕捉硼去除率与多变量之间复杂的非线性和阈值关系。树结构分裂机制通过信息增益准则选择最优特征及分裂点,实现了对变量交互作用的自动学习与特征加权。同时,在训练过程中引入正则化项以抑制过拟合,实现在有限样本条件下保持较强的泛化能力。综上,机器学习方法可通过原水水质、处理目标、污染物特性、膜特性及运行参数等多维信息构建膜后水质的预测框架,以满足膜后水质安全保障的需求。

3 人工智能驱动的膜系统应用

3.1 膜系统效能评估与智能调度

水处理过程中,膜系统运行与维护相对复杂。依赖人工经验的系统调度模式难以适配动态波动的原水特征,导致膜系统通量衰减快、能量损耗高、药剂用量大等问题[47]。构建集成效能评估、参数决策、智能调度的数字化平台,通过智能算法优化膜前预处理、膜面清洗、膜后消毒等环节是解决该问题的有效途径[48]。Wang 等[49]开发了集成 8 种经典算法的渐进式分步机器学习模型,对深圳某饮用水厂内消毒单元运行参数进行智能调控,实现了消毒剂减量 22%,出水浊度降低 16%;Liu 等[50]基于华东地区某水厂运行数据,训练了涵盖数字、图像双模态信息的残差网络模型,可实现出水浊度的高精度预测和混凝剂投量的精准调控($R^2 > 0.97$);Dagher 等[51]构建自组织映射模型对膜系统内投药过程进行优化,在不影响产水水质和通量衰减速率的条件下,可减少 75% 以上的化学品使用,显著降低膜系统运行成本。

然而,当前膜系统智能调度缺乏对各单元间相互影响的综合考量[52]。实际运行中,膜系统往往呈现显著的链式响应特征,混凝剂投量、跨膜压力等运行条件的调整会改变膜污染发展进程,进而影响清洗单元决策;清洗方式与清洗周期的设定又会反向作用于过滤过程,改变其最优运行参数[53]。因此,需建立贯穿膜系统运行全周期的集成式智能调度框架,通过融合“云-边”协同信息采集策略、多模态强化学习算法及数字孪生技术,对药剂投量、清洗参数、跨膜压力等参数进行综合决策与协同控制,推动膜系统性能全面升级。

3.2　“水–能–碳”多目标协同减控

“双碳”目标背景下，控制能耗与碳排放量已成为重点任务[54]。饮用水处理工程作为典型的能源密集型基础设施，其能耗占中国电力消耗总量的 0.22%，年均碳排放量占全国碳排放总量的 0.15%[55]。因此，水处理系统调控需在保证产水水质安全的前提下，统筹考虑能源利用效率及碳排放水平，推进“水–能–碳”多目标协同减控[56]。

人工智能为膜系统的“水–能–碳”多目标协同减控提供了重要的方法（图 2）。其中，机器学习算法可从膜系统历史运行数据中提取关键特征，构建能够准确反馈水质变化、能耗负荷及碳排放水平的工况预测模型；多目标决策算法可将水质、能耗、碳排放量等指标同时纳入调度框架，实现系统运行参数的全局优化；虚拟仿真建模可将流体力学、传质学、反应动力学等过程特征融入水处理模型体系，实现“水–能–碳”协同调控。Li 等[57]应用 XGBoost 模型对华南地区某水厂运行过程中因能源、化学品消耗造成的温室气体排放进行了预测，通过特征重要性分析揭示了污染物去除性能与碳排放水平间的关系；Chen 等[58]应用数据增强型机器学习模型和非支配排序遗传算法对重庆某水厂运行数据进行优化（R^2 >0.94、RMSE =0.01），为水质达标、能耗削减、碳减排量及运行成本控制等多目标开展运行参数调控提供了理论支持；Zhang 等[59]基于长短期记忆神经网络模型，对北京某水厂运行过程中的甲烷和氧化二氮排放进行预测，通过情景分析模拟了设备运行优化、可再生能源利用等碳减排策略，可在不影响出水水质的前提下实现能源消耗降低 23.4%，碳排放量减少 43.7%。

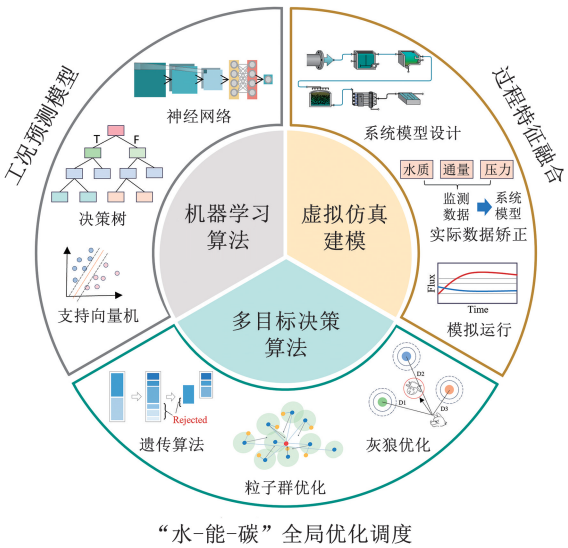


图 2　膜系统的“水–能–碳”多目标协同减控路径

Fig. 2　Multi-objective synergistic reduction and control pathway for "water, energy, and carbon" of membrane system

尽管膜滤净水技术已在水厂中广泛应用，但关键数据的在线监测设备仍安装有限，难以获取适配高精度模型训练的输入特征与样本规模，导致模型精度下降。因此，亟需引入迁移学习等数据增强策略或进一步优化算法的特征提取能力，开发基于小样本、少特征的高精度机器学习模型。同时，在膜系统运行过程中，现有模型需持续接收新增数据并进行增量学习与参数更新，实现预测能力与工程适用性的动态提升。

3.3　基于 LLM 的智能代理与管控

大语言模型（LLM）具备强大的跨模态数据理解、信息检索、任务规划与自主决策能力，有望为构建水处理系统智能体（Agent）提供新的技术路径[60]。在科研任务中，LLM 能够结合检索增强生成（RAG）框架，对大规模文献和技术报告进行动态检索与系统解析，自动梳理已有研究进展，提取关键科学问题与研究空白，并对尚未开展的研究情境进行趋势性推断或结果预测；在工程任务中，基于 Agent 架构的 LLM 能够整合传感器数据、工艺文档、巡检记录等多源异构信息，通过持续的“感知—推理—行动”闭环机制，对水处理系统内复杂运行情境形成整体认知，辅助自控系统实现精准调控与事故预警。

目前，以 GPT-4、Gemini、Llama3-8B 等为代表的通用模型由于缺乏水系统管理知识的针对性训练，在处理专业性运维任务时存在明显局限，决策错误率高达 30%[61]。因此，亟需通过提示工程、模型微调与 RAG 等技术定制适配水处理系统的专用 LLM（图 3）。Xu 等[61]通过低秩自适应技术对 Llama3-8B 模型进行微调，结合角色扮演和小样本学习技术开展提示工程，开发了面向水处理工程任务专用模型，相比基础模型提升 48.9% 的性能；Zhu 等[62]基于国际水协出版的 22 本专业书籍构建领域知识库，通过 RAG 框架对 GPT-4 进行定向训练，所得模型在常规水系统管理任务中表现稳定，仅在高复杂度工程任务中存在性能衰减；Xu 等[63]将多个基于专业知识训练的小模型作为功能模块，与 LLM Agent 进行协同集成，应用于水处理系统运营，可显著提升系统运行效率和故障诊断能力。

结合 RAG 与 Agent 架构的专用 LLM 为水处理系统的智能化升级带来了突破性进展，其自然语言交互模式可有效降低操作门槛，为水厂工作人员提供易于理解的技术指引，提升现场处理效率[64]。同时，随着 RAG 框架下专业数据的持续积累和 Agent 学习机制的不断演进，LLM 有望从辅助决策工具逐步发展为具备自学习、自诊断与自优化能力的智能决策单元，助力膜系统实现自治运行。

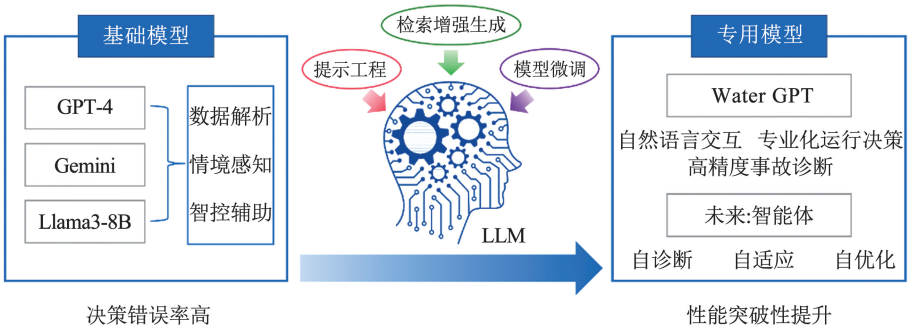


图 3 基于 LLM 智能体架构与运行管控

Fig. 3 LLM-based intelligent agent architecture and operation control

4 总结与展望

膜技术智慧化转型是兼顾高品质供水与绿色低碳发展的内在需求,更是膜技术产业升级和智慧化管控的必由之路。在膜材料方面,融合机器学习与高通量计算,解析膜材料电子/原子/分子尺度属性、微观/介观/宏观结构特征对膜性能的影响,识别分离膜关键制备参数,加速膜材料设计的智慧革新;在膜单元方面,通过实时监测进水水质特征与工艺运行状态,动态预测并调控膜前药剂投加、膜面污染控制与膜后水质保障,推动膜单元运行的智慧赋能;在膜系统方面,构建精准感知、自主优化与智能调度的膜系统,统筹各子系统运行工况并实现水质提升、能耗优化、碳减排的综合目标,实现膜系统管控的智慧升级,引领膜技术向高效、低碳与智慧的方向发展。

参考文献

[1] MILLER J D, STADDON C, SALZBERG A, et al. Self-reported anticipated harm from drinking water across 141 countries [J]. Nature Communications, 2024, 15(1): 7320. DOI: 10.1038/s41467-024-51528-x

[2] 张岚. 我国饮用水卫生标准的定位、发展与思考[J]. 给水排水, 2023, 59(1): 16
ZHANG Lan. The positioning, development and considerations of China's standards for drinking water quality [J]. Water & Wastewater Engineering, 2023, 59(1): 16. DOI: 10.13789/j.cnki.wwe1964.2022.11.02.0005

[3] 梁恒, 李圭白. 饮用水净化工艺的代际认知与融合[J]. 给水排水, 2021, 57(1): 1
LIANG Heng, LI Guibai. Generations' implication and integration of drinking water purification processes [J]. Water & Wastewater Engineering, 2021, 57(1): 1. DOI: 10.13789/j.cnki.wwe1964.2021.01.001

[4] 梁恒, 马子欣, 徐达梁. 城市水系统碳足迹管控研究进展[J]. 哈尔滨工业大学学报, 2025, 57(12): 107
LIANG Heng, MA Zixin, XU Daliang. Research progress in carbon footprint management in urban water systems[J]. Journal of Harbin Institute of Technology, 2025, 57(12): 107

[5] YATEH M, LI Fengting, TANG Yuling, et al. Energy consumption and carbon emissions management in drinking water treatment plants: a systematic review[J]. Journal of Cleaner Production, 2024, 437: 140688. DOI: 10.1016/j.jclepro.2024.140688

[6] SKORONSKI E, ROSA A B, SIMIONI F V J. Is conventional drinking water treatment more economically viable than ultrafiltration in Brazil? A technical, economic, comparative study with risk assessment[J]. Water Supply, 2024, 24(6): 2092. DOI: 10.2166/ws.2024.132

[7] NIU Chengxin, LI Xuesong, DAI Ruobin, et al. Artificial intelligence-incorporated membrane fouling prediction for membrane-based processes in the past 20 years: a critical review [J]. Water Research, 2022, 216: 118299. DOI: 10.1016/j.watres.2022.118299

[8] CAO Zhonglin, BARATI F O, OCK J, et al. Machine learning in membrane design: from property prediction to AI-guided optimization [J]. Nano Letters, 2024, 24(10): 2953. DOI: 10.1021/acs.nanolett.3c05137

[9] JEONG N, EPSZTEIN R, WANG Ruoyu, et al. Exploring the knowledge attained by machine learning on ion transport across polyamide membranes using explainable artificial intelligence [J]. Environmental Science & Technology, 2023, 57(46): 17851. DOI: 10.1021/acs.est.2c08384

[10] GAO Haiping, ZHONG Shifa, ZHANG Wenlong, et al. Revolutionizing membrane design using machine learning: Bayesian optimization [J]. Environmental Science & Technology, 2022, 56(4): 2572. DOI: 10.1021/acs.est.1c04373

[11] BADER L, IGNACZ G, SZEKELY G. Virtual enumeration and evaluation of thin-film monomers for potential membrane synthesis via interfacial polymerization [J]. Journal of Membrane Science, 2025, 733: 124234. DOI: 10.1016/j.memsci.2025.124234

[12] ZHANG Zhiming, PAN Fusheng, MOHAMED S A, et al. Accelerating discovery of water stable metal-organic frameworks by machine learning [J]. Small, 2024, 20(42): 2405087. DOI: 10.1002/smll.202405087

[13] TAYARA A, SHANG Chii, ZHAO Jing, et al. Machine learning models for predicting the rejection of organic pollutants by forward osmosis and reverse osmosis membranes and unveiling the rejection mechanisms [J]. Water Research, 2024, 266: 122363. DOI: 10.1016/j.watres.2024.122363

[14] DONG Jie, CAO Dongsheng, MIAO Hongyu, et al. ChemDes: an integrated web-based platform for molecular descriptor and fingerprint computation [J]. Journal of Cheminformatics, 2015, 7(1): 60. DOI: 10.1186/s13321-015-0109-z

[15] YUE Jiapeng, PANG Hongjiao, WEI Renke, et al. Machine learning-assisted molecular structure embedding for accurate prediction of emerging contaminant removal by ozonation oxidation [J]. Environmental Science & Technology, 2025, 59(18): 9298. DOI: 10.1021/acs.est.4c14193

[16] LIU Peng, XU Hangbin, JIN Pengrui, et al. DFT-assisted machine learning for polyester membrane design in textile wastewater recovery applications[J]. Water Research, 2025, 279: 123438. DOI: 10.1016/j.watres.2025.123438

[17] TAO Lei, HE Jinlong, ARBAUGH T, et al. Machine learning prediction on the fractional free volume of polymer membranes[J]. Journal of Membrane Science, 2023, 665: 121131. DOI: 10.1016/j.memsci.2022.121131

[18] ALDOSSARY A, CAMPOS-GONZALEZ-ANGULO J A, PABLO-GARCÃ-A S, et al. In silico chemical experiments in the age of AI: from quantum chemistry to machine learning and back[J]. Advanced Materials, 2024, 36(30): 2402369. DOI: 10.1002/adma.202402369

[19] JI Zhanlin, GUAN Hao, WANG Meng, et al. Polymeric membrane concentration of lithium-magnesium solution for sustainable resource recovery with machine learning[J]. Water Research, 2025, 287: 124438. DOI: 10.1016/j.watres.2025.124438

[20] TAKEFUJI Y. Reevaluating feature importance in machine learning: concerns regarding SHAP interpretations in the context of the EU artificial intelligence act[J]. Water Research, 2025, 280: 123514. DOI: 10.1016/j.watres.2025.123514

[21] LIU Mengjie, GRAHAM N, WANG Wenyu, et al. Spatial assessment of tap-water safety in China[J]. Nature Sustainability, 2022, 5(8): 689. DOI: 10.1038/s41893-022-00898-5

[22] FU Xingjia, SUN Jiachun, TIAN Kun, et al. Predicting the sorption capacity of perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances in soils: meta-analysis and machine learning modeling[J]. Environmental Science & Technology, 2025, 59(33): 17699. 10.1021/acs.est.4c11313

[23] LU Qinglin, ZHANG Hao, FAN Rong, et al. Machine learning-based Bayesian optimization facilitates ultrafiltration process design for efficient protein purification[J]. Separation and Purification Technology, 2025, 363: 132122. DOI: 10.1016/j.seppur.2025.132122

[24] WANG Hejia, ZENG Jin, DAI Ruobin, et al. Understanding rejection mechanisms of trace organic contaminants by polyamide membranes via data-knowledge codriven machine learning[J]. Environmental Science & Technology, 2024, 58(13): 5878. DOI: 10.1021/acs.est.3c08523

[25] AAS K, JULLUM M, LLAND A. Explaining individual predictions when features are dependent: more accurate approximations to Shapley values[J]. Artificial Intelligence, 2021, 298: 103502. DOI: 10.1016/j.artint.2021.103502

[26] WANG Mao, SHI Guimin, 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

[27] ZHANG Yuanji, HAN Bingxue, SONG Qiangqiang, et al. Revealing key structural and operating parameters on salt/dye separation of loose nanofiltration membrane by ensemble machine learning[J]. Journal of Membrane Science, 2025, 732: 124274. DOI: 10.1016/j.memsci.2025.124274

[28] LU Dan, ZHAO Zihang, XIANG Xinchen, et al. A smart framework to design membranes for organic micropollutants removal[J]. Nature Sustainability, 2025, 8(10): 1177. DOI: 10.1038/s41893-025-01617-6

[29] WANG Hejia, MA Bozhan, LI Yana, et al. Customizing interpretable machine learning strategy to unravel causal mechanisms in organic micropollutant rejection by polyamide membranes[J]. Journal of Membrane Science, 2026, 738: 124805. DOI: 10.1016/j.memsci.2025.124805

[30] MA Jun, XU Hang, ZHANG Meng, et al. Accelerating inverse design of thin-film composite polyamide membranes for water purification via fragment-based machine learning[J]. Journal of Membrane Science, 2025, 736: 124719. DOI: 10.1016/j.memsci.2025.124719

[31] 刘鹏，徐杭镔，刘超，等. 基于机器学习识别面向重金属分离的纳滤膜物化特性[J]. 哈尔滨工业大学学报, 2026, 58(6): 40
LIU Peng, XU Hangbin, LIU Chao, et al. Physicochemical properties of nanofiltration membranes for heavy metal separation based on machine learning[J]. Journal of Harbin Institute of Technology, 2026, 58(6): 40. DOI: 10.11918/202508022

[32] 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

[33] PANG Hongjiao, BEN Yawen, CAO Yong, et al. Time series-based machine learning for forecasting multivariate water quality in full-scale drinking water treatment with various reagent dosages[J]. Water Research, 2025, 268: 122777. DOI: 10.1016/j.watres.2024.122777

[34] FENG Liyan, ZHANG Ying, WEI Xiaoting, et al. Interpretable prediction of coagulant dosage in drinking water treatment plant based on automated machine learning and SHAP method[J]. Journal of Water Process Engineering, 2025, 75: 107925. DOI: 10.1016/j.jwpe.2025.107925

[35] AHMAD A R, ZAIDI S, ASLAM P A, et al. Removal of congo red from water by adsorption onto activated carbon derived from waste black cardamom peels and machine learning modeling[J]. Alexandria Engineering Journal, 2023, 71: 355. DOI: 10.1016/j.aej.2023.03.055

[36] KHAN F, ZUTHI M F R, RAHMAN M S, et al. Predicting disinfection by-products (DBPs) in supply water within a real water distribution network using an artificial neural network[J]. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2025, 303: 118762. DOI: 10.1016/j.ecoenv.2025.118762

[37] RICCERI F, BLANKERT B, GHAFFOUR N, et al. Unraveling the role of feed temperature and cross-flow velocity on organic fouling in membrane distillation using response surface methodology[J]. Desalination, 2022, 540: 115971. DOI: 10.1016/j.desal.2022.115971

[38] MU Situ, LIU Yuxiang, ZHANG Hongwei, et al. Characterization of coagulant-induced ultrafiltration membrane fouling by multi-spectral fusion: DOM properties and model prediction based on machine learning[J]. Desalination, 2022, 531: 115711. DOI: 10.1016/j.desal.2022.115711

[39] LI Bowen, SHEN Liguo, ZHAO Ying, et al. Quantification of interfacial interaction related with adhesive membrane fouling by genetic algorithm back propagation (GABP) neural network[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2023, 640: 110. DOI: 10.1016/j.jcis.2023.02.030

[40] GARAKANI S S, CHEW J W. Development of physics-informed machine-learning models to enhance understanding and prediction of membrane fouling[J]. Journal of Membrane Science, 2025, 728: 124133. DOI: 10.1016/j.memsci.2025.124133

[41] ZHOU Guanyu, CHEN Guijing, TANG Peng, et al. Revealing the removal behavior of five neglected microplastics in coagulation-ultrafiltration processes: insights from experiments and predictive modeling[J]. Journal of Hazardous Materials, 2025, 491:

137857. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2025.137857
[42] SUKARN O, CHONG J Y, CONG Gao. Predicting the boron removal of reverse osmosis membranes using machine learning[J]. Desalination, 2024, 586: 117854. DOI: 10.1016/j.desal.2024.117854
[43] HOSSEINZADEH A, ZHOU J L, ZYAIE J, et al. Machine learning-based modeling and analysis of PFOS removal from contaminated water by nanofiltration process[J]. Separation and Purification Technology, 2022, 289: 120775. DOI: 10.1016/j.seppur.2022.120775
[44] SINGH S, SUTHAR G, BHUSHAN G A, et al. Machine learning approach for predicting perfluorooctanesulfonate rejection in efficient nanofiltration treatment and removal[J]. ACS ES&T Water, 2025, 5(3): 1216. DOI: 10.1021/acsestwater.4c01003
[45] HU Airan, LIU Yanling, WANG Xiaomao, et al. A machine learning based framework to tailor properties of nanofiltration and reverse osmosis membranes for targeted removal of organic micropollutants[J]. Water Research, 2025, 268: 122677. DOI: 10.1016/j.watres.2024.122677
[46] MA Xuanchao, LU Dan, LU Jiancong, et al. Revealing key structural and operating features on water/salts selectivity of polyamide nanofiltration membranes by ensemble machine learning[J]. Desalination, 2023, 548: 116293. DOI: 10.1016/j.desal.2022.116293
[47] SAFEER S, PANDEY R P, REHMAN B, et al. A review of artificial intelligence in water purification and wastewater treatment: recent advancements[J]. Journal of Water Process Engineering, 2022, 49: 102974. DOI: 10.1016/j.jwpe.2022.102974
[48] LI Lei, RONG Shuming, WANG Rui, et al. Recent advances in artificial intelligence and machine learning for nonlinear relationship analysis and process control in drinking water treatment: a review[J]. Chemical Engineering Journal, 2021, 405: 126673. DOI: 10.1016/j.cej.2020.126673
[49] WANG Yuqi, WANG Hongcheng, XIAO Zijie, et al. Machine learning strategy secures urban smart drinking water treatment plant through incremental advances[J]. Water Research, 2025, 280: 123541. DOI: 10.1016/j.watres.2025.123541
[50] LIU Hongbo, CHEN Yang, PAN Xuwei, et al. Image recognition enhances efficient monitoring of the coagulation-settling in drinking water treatment plants[J]. Journal of Cleaner Production, 2024, 482: 144251. DOI: 10.1016/j.jclepro.2024.144251
[51] DAGHER G, MARTIN A, MOULIN L, et al. Optimizing the membrane ultrafiltration process using machine learning: a decision making tool based on self-organizing maps[J]. Journal of Water Process Engineering, 2025, 69: 106787. DOI: 10.1016/j.jwpe.2024.106787
[52] RIZKI Z, OTTENS M. Model-based optimization approaches for pressure-driven membrane systems[J]. Separation and Purification Technology, 2023, 315: 123682. DOI: 10.1016/j.seppur.2023.123682
[53] YU Wenqing, ZHOU Zhiwei, YANG Yanling, et al. Artificial intelligence in chemical dosing for drinking water treatment: a systematic review of algorithmic applications, implementation frameworks, and future challenges[J]. Journal of Environmental Chemical Engineering, 2025, 13(5): 118936. DOI: 10.1016/j.jece.2025.118936
[54] 田萌, 陈泽昕, 李帅, 等. 给水厂深度处理工艺碳排放量化特征研究[J]. 给水排水, 2025, 61(8): 14
TIAN Meng, CHEN Zexin, LI Shuai, et al. Research on quantitative characteristics of carbon emission from advanced treatment process of a water treatment plant[J]. Water & Wastewater Engineering, 2025, 61(8): 14. DOI: 10.13789/j.cnki.wwe1964.2024.12.30.0005
[55] LI Fukuan, ZHANG Xiangyu, HUANG Jiale, et al. Greenhouse gas emission inventory of drinking water treatment plants and case studies in China[J]. Science of the Total Environment, 2024, 912: 169090. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2023.169090
[56] SALA-GARRIDO R, MAZIOTIS A, MOLINOS-SENANTE M. Assessing eco-efficiency of drinking water treatment plants: a synthetic index approach within water-energy-carbon nexus[J]. Journal of Cleaner Production, 2025, 495: 145067. DOI: 10.1016/j.jclepro.2025.145067
[57] LI Zexing, LV Yuejin, ZHANG Lingfei, et al. Investigating carbon emissions in drinking water treatment plant through machine learning: a case study in South China[J]. Journal of Water Process Engineering, 2025, 75: 108070. DOI: 10.1016/j.jwpe.2025.108070
[58] CHEN Z, CHENG H, WANG X, et al. Development and application of an intelligent nitrogen removal diagnosis and optimization framework for WWTPs: low-carbon and stable operation[J]. Water Research, 2024, 266: 122337. DOI: 10.1016/j.watres.2024.122337
[59] ZHANG Zitan, QI Fei, LIU Yao, et al. Comprehensive assessment, intelligent prediction, and precise mitigation strategies for greenhouse gas emissions in full-scale wastewater treatment plants[J]. Environmental Research, 2025, 270: 121052. DOI: 10.1016/j.envres.2025.121052
[60] 冯钧, 畅阳红, 陆佳民, 等. 基于大语言模型的水工程调度知识图谱的构建与应用[J]. 计算机科学与探索, 2024, 18(6): 1637
FENG Jun, CHANG Yanghong, LIU Jiamin, et al. Construction and application of knowledge graph for water engineering scheding based on large language mode[J]. Journal of Frontiers of Computer Science and Technology, 2024, 18(6): 1637. DOI: 10.3778/j.issn.1673-9418.2311098
[61] XU Boyan, LI Zihao, YANG Yuxin, et al. Evaluating and advancing large language models for water knowledge tasks in engineering and research[J]. Environmental Science & Technology Letters, 2025, 12(3): 289. DOI:10.1021/acs.estlett.5c00038
[62] ZHU Junjie, YANG Meiqi, JIANG Jinyue, et al. Enabling GPTs for expert-level environmental engineering question answering[J]. Environmental Science & Technology Letters, 2024, 11(12): 1327. DOI:10.1021/acs.estlett.4c00665
[63] XU Shanshan, WANG Xiaodong, BI Xuejun. Enhancing large language models by integrating domain knowledge based data-driven small models for anomaly diagnosis and trouble shooting in wastewater treatment plants[J]. Journal of Environmental Chemical Engineering, 2025, 13(4): 117379. DOI: 10.1016/j.jece.2025.117379
[64] SELA L, SOWBY R B, SALOMONS E, et al. Making waves: the potential of generative AI in water utility operations[J]. Water Research, 2025, 272: 122935. DOI: 10.1016/j.watres.2024.122935

(编辑 刘 彤)