

机器学习辅助的双膜耦合氨氮回收过程优化

游伟明, 唐 函, 黄飞云, 姚婧梅, 韩 乐*

(重庆大学 环境与生态学院, 重庆 400045)

摘要: 氨氮的高效回收对构建可持续氮循环至关重要。道南渗析-渗透蒸馏(DD-OD)双膜耦合系统以浓差自驱低耗回收氨氮,但复杂的传质过程与显著的非线性特征使其难以建模以优化调控工艺系统。本研究引入机器学习(ML)方法,构建了基于 CatBoost 的氨氮去除率与回收率预测模型。经优化后,两模型在测试集上的拟合优度(R^2)分别达 0.97 和 0.95。通过沙普利解释(SHAP)与偏依赖图(PDP)分析,揭示了运行时间、进料浓度等关键参数对系统的非线性影响规律。进一步构建贝叶斯优化框架,实现了多目标协同优化。在进料室 NH_4^+-N 浓度 52 mmol/L、运行时间 28.0 h 及驱动离子与目标离子浓度比(ρ 值)1.92 的最优工况下,去除率与回收率分别达 92.28% 与 88.03%。研究表明,ML 方法可有效应对复杂环境过程的非线性耦合特性,为新型环保系统的智能运行提供支撑。

关键词: 氨氮回收; 机器学习; 膜; 耦合

中图分类号: TQ028; TP181 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-8924(2026)03-0162-10

doi: 10.16159/j.cnki.issn1007-8924.2026.03.016

氨氮兼具“资源-污染”双重属性,既为现代工农业生产中关键的基础化工原料,广泛应用于化肥制造、化工生产及新兴的“氨经济”能源领域^[1],也会因不当排放引发水体富营养化及生态毒性等环境问题^[2]。传统硝化-反硝化等生物脱氮工艺虽应用广泛,但存在能耗高、碳排放量大等局限,难以满足“双碳”战略绿色发展相关需求^[3]。因此,基于污/废水中氨氮构建高效低耗且可持续的氮资源化循环路径,逐渐成为水处理领域的重要研究方向^[4]。

膜分离技术因具有高效选择性传质、高集成度等优势而备受关注^[5]。针对废水中氨氮,富集其中的铵离子,再通过碱介导下的氨汽化,最后将氨气酸固定,可得到高纯的铵盐,实现变废为宝。基于这一

思路,前期研究提出了将基于离子膜的道南渗析(DD)与透气膜的渗透蒸馏(OD)耦合的低耗高效氨氮回收工艺^[6]。该系统仅依靠铵离子或氨气的浓度差驱动,其中,DD 实现铵根离子跨阳离子交换膜的选择性迁移与富集^[7],OD 实现氨气跨疏水透气膜的纯化与(酸吸收)固定。由此耦合形成的道南渗析-渗透蒸馏(DD-OD)体系实现了废水氨氮“富集-回收”的高度集成,为氨氮资源化的新型环保技术/装备提供支撑^[8]。然而,该体系涉及离子跨膜迁移、酸碱平衡、气液相变传质及膜界面阻力等多重环节,表现出显著的动态性和强非线性^[9-10]。氨氮浓度、切向流速及 pH 等操作条件相互耦合,使得系统行为难以通过解析模型准确刻画。传统机理模型通

收稿日期: 2025-12-19; 修改稿收到日期: 2026-01-27

基金项目: 重庆市科技创新与应用发展专项重点项目(CSTB2024TIAD-KPX0084); 新重庆青年创新人才项目(2024NSCQ-QNCXX0233)

第一作者简介: 游伟明(2001-),男,福建福清人,硕士研究生,研究方向为膜法水处理、机器学习辅助的膜智能设计等。

* 通讯作者, E-mail: lehan@cqu.edu.cn

引用本文: 游伟明,唐 函,黄飞云,等. 机器学习辅助的双膜耦合氨氮回收过程优化[J]. 膜科学与技术,2026,46(3): 162-170,192.

Citation: You W M, Tang H, Huang F Y, et al. Optimization of a coupled dual-membrane process for ammonia nitrogen recovery using machine learning[J]. Membrane Science and Technology(Chinese), 2026, 46(3): 162-170, 192.

常基于稳态假设或忽略膜阻力的动态变化,难以反映真实运行特征^[11];而经验模型虽构建简便,但泛化能力有限且缺乏解释性,不利于工艺优化与调控。

随着数据驱动技术的发展,机器学习(ML)为解决复杂环境过程建模与调控等难题提供了新思路。ML 方法能够无需预设严格机理方程,即可根据实验数据学习输入变量与响应之间的非线性映射关系,在膜通量预测、污染物去除及运行优化等方面取得了积极进展^[12-14]。基于此,本研究引入 ML 方法,对 DD-OD 氨氮回收体系进行建模分析,通过比较支持向量回归(SVR)、决策树(DT)、随机森林(RF)、XGBoost 及 CatBoost 多种主流算法,筛选最优预测模型;并结合沙普利解释(SHAP)和偏依赖图(PDP)分析量化揭示关键参数的作用规律;进而借助贝叶斯优化探索系统最佳运行工况,为 DD-OD 工艺的高效运行与智能调控提供理论支撑。

1 实验部分

1.1 实验装置与过程原理

本研究以基于离子膜与透气膜双膜耦合的 DD-OD 氨氮回收系统为研究对象,其工艺流程及传质机理如图 1 所示。该系统主要由流入单元、DD 单元和 OD 单元构成[图 1(a)]。其中,DD 单元采用堆叠式阳离子交换膜组件连接进料室与接收室,OD 单元采用中空纤维疏水膜组件连接接收室与酸室。图 1(b)进一步揭示了系统内部复杂的微观传质机制。在 DD 单元中,阳离子交换膜凭借其选择透过性,利用接收室高浓度驱动离子(如 Na^+)与进料室目标离子(NH_4^+)之间的化学势梯度,实现离子的反向跨膜迁移与富集。该过程受进料浓度、 ρ 值、运行时间及切向流速等操作参数影响,不同工况下跨膜迁移速率存在差异。富集液进入 OD 单元后,在接

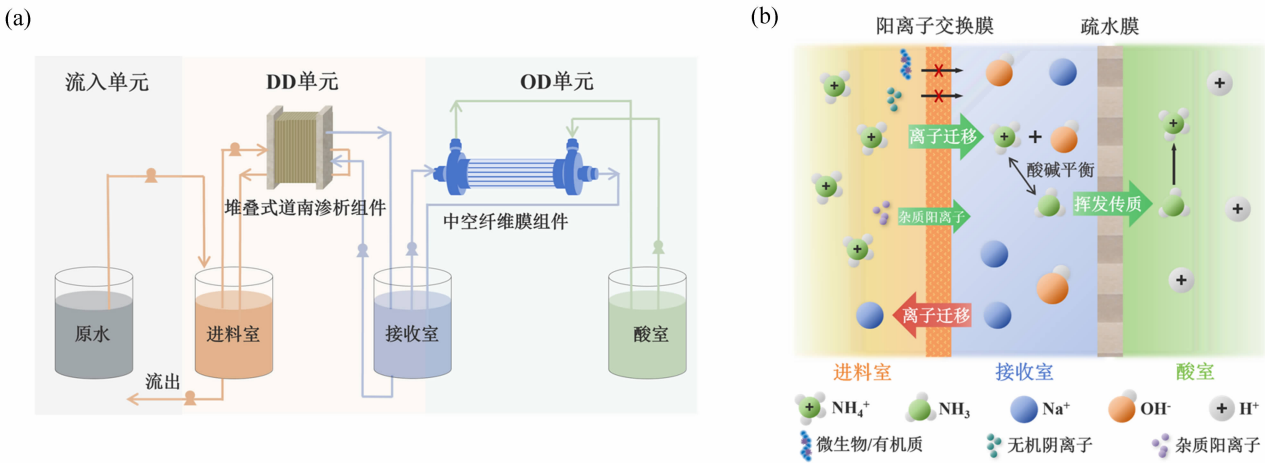


图 1 DD-OD 耦合系统工艺流程(a)与微观传质机理(b)

Fig. 1 Process flowchart (a) and microscopic mass transfer mechanism (b) of the DD-OD coupled system

收室碱性条件下, NH_4^+ 转化为 NH_3 ,后者在浓度梯度驱动下通过疏水透气膜进入酸室,并与 H^+ 反应,最终转为铵盐。该过程受到接收室 pH、进料浓度、运行时间及切向流速等因素影响,传质速率会随运行条件发生变化。

1.2 数据收集与预处理

本研究数据集由实验室原始数据与 Web of Science 文献数据构成。覆盖 DD、OD 及其耦合系统 DD-OD 在不同操作条件下的关键运行信息。文献数据以“Ammonia recovery”“Donnan dialysis”和“Osmotic distillation”为关键词筛选获得。基于数据一致性考量,仅纳入采用标准化商业膜组件(CSO/CMX 阳离子交换膜及 PVDF 疏水膜)及

DD-OD 堆叠式或相似构型的研究样本,剔除材料与工艺差异显著的数据。经整理,共获得有效样本 1 008 组,其中实验数据有 682 组,文献数据有 326 组;对应 DD 系统去除率数据 653 组,OD 系统回收率数据 355 组。模型输入特征包括:运行时间、工艺系统类型、进料室 NH_4^+ -N 浓度、接收液类型、接收液浓度、切向流速、 ρ 值、杂质阳离子浓度、阳离子交换膜(CEM)类型、膜处理负荷、接收室 NH_4^+ -N 浓度、接收室 pH 及酸室 pH。此外,引入“膜类型”与“工艺类型”作为类别特征以消除潜在系统偏差。输出响应变量设定为氨氮去除率与氨氮回收率。

为提高模型训练的稳健性与泛化能力,数据预处理流程如下:首先,针对实验数据中可能存在的异

常样本,采用基于 RF 预测残差的方法进行识别与剔除。具体而言,利用初步训练的 RF 模型对样本进行预测,计算预测值与真实值的绝对误差,经 5%~20%范围内的剔除比例测试,最终剔除残差绝对值最大的前 10%样本,以减少噪声干扰,提升数据质量^[15]。其次,为了确保模型评估的客观性,将清洗后的数据按 8:2 的比例随机划分为训练集与测试集。随后,针对文献数据中存在的缺失项,为避免直接删除样本造成的信息丢失,本研究采用链式方程多重插补法(MICE)进行填补。MICE 通过迭代回归的方式利用其他特征信息来估计缺失值,相比于传统的均值或中位数填补,能够更好地保留数据的统计特征与变量间的相关性^[16]。最后,为消除不同量纲差异对模型训练收敛性的影响,将数值特征进行归一化处理,并对类别特征实施编码转换。鉴于不同预处理策略可能影响模型性能,后续模型构建将进一步对比不同缩放和编码方法的组合效果。

1.3 模型构建与评估

为了构建适用于本系统的最优预测模型,本研究采用“模型-预处理组合筛选”与“超参数调优”的两阶段建模策略。首先,选取 SVR、DT、RF、XGBoost 和 CatBoost 共 5 种主流回归模型进行初步比较。考虑不同算法对数据分布敏感性存在的差异,引入多种编码方式(如 OneHotEncoding、SumEncoder)与缩放方式(如 MinMaxScaler、PowerTransformer)进行组合,以在控制特征维度增长的同时刻画类别结构信息,并减小编码方式对树模型分裂过程的潜在影响。各模型-预处理组合的预测性能通过 5 折交叉验证进行系统评估^[10]。

模型性能评价指标包括拟合优度(R^2)、均方根误差(RMSE)和平均绝对误差(MAE)。其中, R^2 用于衡量模型对数据变异的解释能力,值越接近 1 表明拟合效果越好;RMSE 和 MAE 用于衡量预测值与真实值之间的偏差程度,值越小表示模型精度越高^[17]。各指标计算公式如式(1)~式(3):

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

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

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y - \hat{y}_i| \quad (3)$$

式中: n 为样本数量; y_i 为真实值; $\hat{y}$ 为预测值; $\bar{y}$ 为真实值的均值。

在确定最优基模型及预处理策略后,基于 Hyperopt 库采用树结构 Parzen 估计器(TPE)贝叶斯优化算法,对学习率、树深度及正则化系数等关键超参数进行全局优化。相比传统网格搜索,TPE 在高维参数空间中具有更高的搜索效率与全局敏捷性^[18]。随后,利用优化后的超参数在完整训练集上进行模型训练,并通过独立测试集验证其泛化性能。

1.4 模型解释与应用

为了克服 ML 模型的“黑箱”局限性,本研究引入 SHAP 方法量化各输入特征对模型预测结果的边际贡献。具体而言,基于构建的回归模型,计算测试集中各样本的 SHAP 值,通过摘要图展示特征对目标变量的正负向影响及重要性排序,从而识别主控因素^[11]。此外,采用 PDP 进一步可视化关键特征(如浓度、流速、时间等)与系统响应之间的非线性量化关系,揭示参数变化的阈值效应与敏感区间^[19]。

在此基础上,构建基于贝叶斯优化的 TPE 算法框架,对 DD-OD 耦合系统进行多目标协同优化^[18]。优化目标设定为同时最大化氨氮去除率与回收率。优化过程中,将 DD 模型的输出与进料浓度耦合,作为 OD 模型的动态输入,以模拟真实的级联传质过程。利用 Optuna 框架在多维参数空间内进行全局寻优,通过帕累托前沿筛选兼顾去除与回收效率的最佳工艺参数组合,为实际工况提供理论指导。

2 结果与讨论

2.1 特征相关性分析

基于斯皮尔曼(Spearman)相关系数,对 DD 与 OD 系统的变量关系进行了初步探究,结果如图 2 所示。图中色标表示相关系数 r ,取值范围为 $-1 \sim 1$,颜色由蓝至红分别代表负相关到正相关。在 DD 系统中[图 2(a)],运行时间与氨氮去除率呈显著正相关($r=0.81$),表明跨膜迁移过程主要受动力学驱动,运行时间是提升去除量的主导因素。除运行时间外,进料室 NH_4^+-N 浓度、杂质阳离子浓度及 ρ 值等操作变量与去除率的相关性均较弱($|r| < 0.2$)。这一特征反映出 DD 过程受道南平衡、膜位点竞争吸附及浓差极化等多机制共同制约,呈现明显的非

单调过程,难以通过传统的线性方法解释^[7]。相比之下,OD 系统呈现出不同的相关性特征[图 2(b)]。接收室 $\text{NH}_4^+ - \text{N}$ 浓度与回收率呈强正相关($r=0.80$),符合亨利定律及气液传质理论,即较高的初始氨气分压差可显著增强跨膜传质驱动力,从而提高回收效率。同时,酸室 pH 与回收率亦呈正相关关系($r=0.65$)。酸相吸收氨气过程中 H^+ 持续消耗

并引起 pH 升高,该变量可用于表征吸收过程的强弱^[20]。DD 过程特征与目标的普遍弱相关性同 OD 过程的强相关性形成鲜明反差。这一结果充分说明,仅依靠传统的变量相关性分析难以全面解析机理复杂的 DD-OD 耦合过程,迫切需要引入 ML 算法以深入挖掘特征间的复杂交互作用,从而实现对系统性能的精准预测与优化。

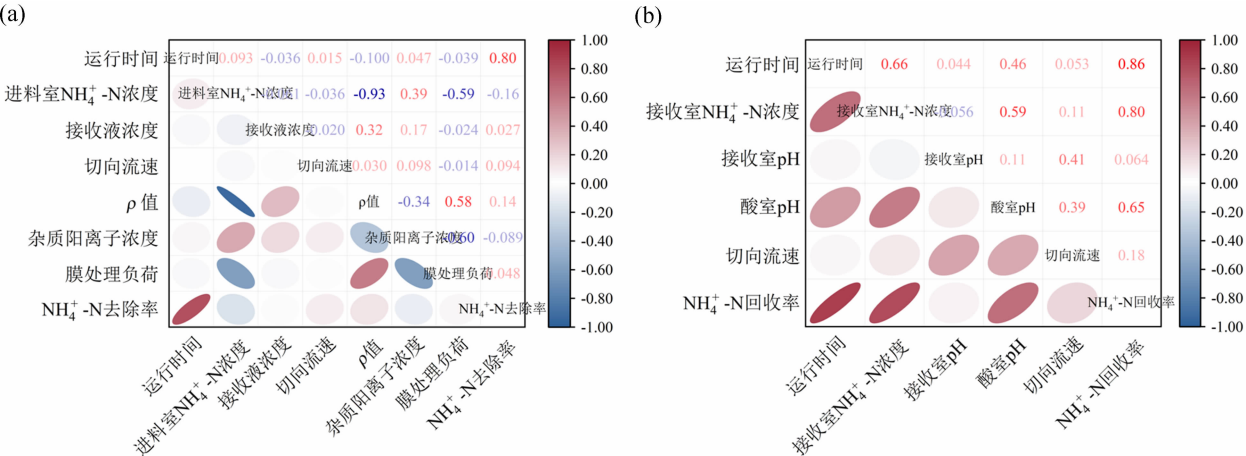


图 2 DD(a)与 OD(b)系统各变量间斯皮尔曼相关性分析(ρ 值为驱动离子与目标离子浓度比)
Fig. 2 Spearman correlation analysis among variables in the DD (a) and OD (b) systems
(ρ value represents the concentration ratio of driving ions to target ions)

2.2 模型筛选与性能评估

基于前述“模型-预处理组合筛选”策略,本研究首先比较了各主流回归模型在不同数据预处理方案下的预测性能。模型筛选结果(表 1)显示,CatBoost 模型在“ $\text{NH}_4^+ - \text{N}$ 去除率”和“ $\text{NH}_4^+ - \text{N}$ 回收率”两项任务中均表现出较高的拟合精度和稳定性。在去除率预测中,其测试集 R^2 、MAE 和 RMSE 分别为 0.96、0.052 和 0.047;在回收率预测中分别为 0.93、0.048 和 0.053。考虑 DD 与 OD 子系统的不同

同传质特性,采用 TPE 算法在设定的超参数空间内对 CatBoost 模型进行了全局优化。优化结果(表 2)显示,DD 去除率预测倾向于较大的 L2 正则化系数(4.616),用于增强模型对弱相关特征数据的稳定性;而 OD 回收率预测采用较小的 L2 正则化系数(1.319),使模型能够更充分地学习由接收室 $\text{NH}_4^+ - \text{N}$ 浓度作为主要输入变量的信息,提高对回收效率变化的表征能力。优化后模型的拟合结果见图 3,两模型在测试集上的 R^2 分别达 0.97 和 0.95,测试

表 1 针对不同预测目标的模型筛选

Table 1 Model selection for different prediction targets

目标	R^2	MAE	RMSE	算法	缩放器	编码器
$\text{NH}_4^+ - \text{N}$ 去除率	0.962	0.052	0.047	CatBoost	幂变换	求和编码
	0.955	0.074	0.054	XGBoost	幂变换	M-估计编码
	0.931	0.084	0.071	RF	幂变换	赫尔默特编码
	0.912	0.067	0.082	SVR	幂变换	独热编码
	0.902	0.069	0.090	DT	幂变换	独热编码
$\text{NH}_4^+ - \text{N}$ 回收率	0.931	0.048	0.053	CatBoost	幂变换	赫尔默特编码
	0.909	0.053	0.061	XGBoost	幂变换	基数 N 编码
	0.894	0.070	0.062	RF	幂变换	求和编码
	0.878	0.082	0.070	SVR	归一化	独热编码
	0.837	0.069	0.085	DT	幂变换	独热编码

表 2 针对不同预测目标的 CatBoost 模型最佳参数配置

Table 2 Best hyperparameter configurations of CatBoost models for different prediction targets

目标	模型	超参数	数值
NH ₄ ⁺ -N 去除率	CatBoost	学习率	0.086
		树深度	6
		L2 正则化系数	4.616
		迭代次数	1 200
		样本采样率	0.789
NH ₄ ⁺ -N 回收率	CatBoost	学习率	0.039
		树深度	7
		L2 正则化系数	1.319
		迭代次数	1 100
		样本采样率	0.649

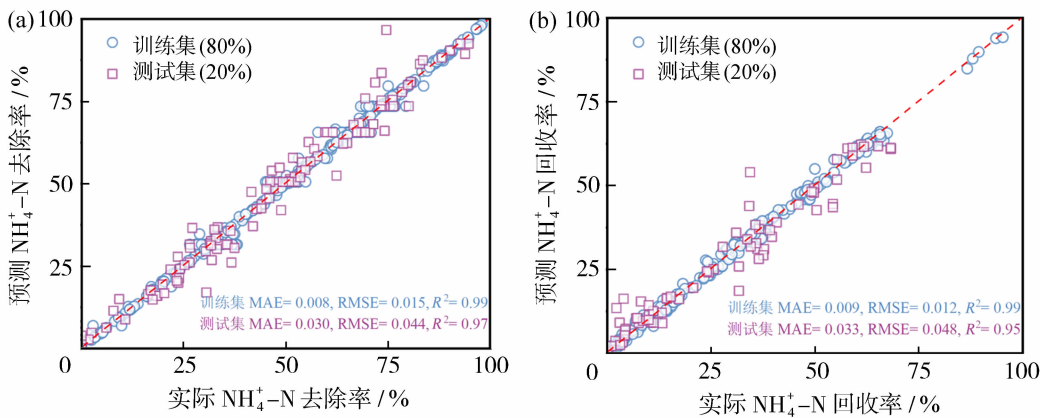


图 3 超参数优化后 NH₄⁺-N 去除率(a)与回收率(b)的预测模型拟合结果

Fig. 3 Fitting results of the prediction models for NH₄⁺-N removal (a) and recovery (b) after hyperparameter optimization

集表现与训练集相近,未观察到明显的性能衰减。结果说明,经贝叶斯优化后的 CatBoost 模型具备良好的泛化能力,能够对 DD 去除过程与 OD 回收过程的动态变化进行可靠预测。

2.3 特征重要性解析

使用 SHAP 方法评估每个输入特征对膜性能的重要性 and 影响,如图 4 所示。SHAP 摘要图直观展示了特征重要性排序(y 轴)及其对预测目标的正负影响(x 轴)。对于 NH₄⁺-N 去除率[图 4(a)],运行时间的影响权重最大且 SHAP 值分布范围最广,表明 DD 阶段的脱氮效果呈现明显的时间积累效应,与浓度差驱动过程中较慢的传质动力学特征相一致^[6]。杂质阳离子浓度呈现显著负向影响,符合杂质离子(如 K⁺、Mg²⁺)竞争膜交换位点抑制去除效果的物理机制^[21]。ρ 值与去除率呈正相关,表明较高的驱动离子相对浓度设置或跨膜化学势梯度利于去除性能提升^[22]。在接收液类型方面,纯碱相较于废碱更有利于氨氮去除。此外,膜处理负荷的

SHAP 值分布较为离散,其影响规律尚不明确;切向流速因数据分布单一,对结果的影响亦不显著。对于 NH₄⁺-N 回收率[图 4(b)],接收室 NH₄⁺-N 浓度是最显著的正向特征,高浓度提供了更大的传质驱动力^[23]。酸室 pH 与回收率呈正相关,反映了氨吸收消耗 H⁺ 导致的 pH 升高。接收室 pH 同样表现为正向影响,符合碱性条件下 NH₄⁺ 向 NH₃ 转化的化学平衡规律^[24]。此外,本研究数据范围内,切向流速和杂质阳离子(有/无)对回收率的影响未呈现明确趋势。

2.4 偏依赖图分析

为进一步阐明特征依赖性,单变量 PDP 分析量化了各参数影响模型决策的具体区间与阈值,如图 5 所示。对于 NH₄⁺-N 去除率[图 5(a)~5(d)]:运行时间与去除率呈非线性正相关[图 5(a)],初期增长较快,至 12 h 时,因膜两侧浓度差减小而趋于平缓^[25]。进料室 NH₄⁺-N 浓度与去除率呈负相关[图 5(b)],在膜面积与运行时间一定的条件下,提高进

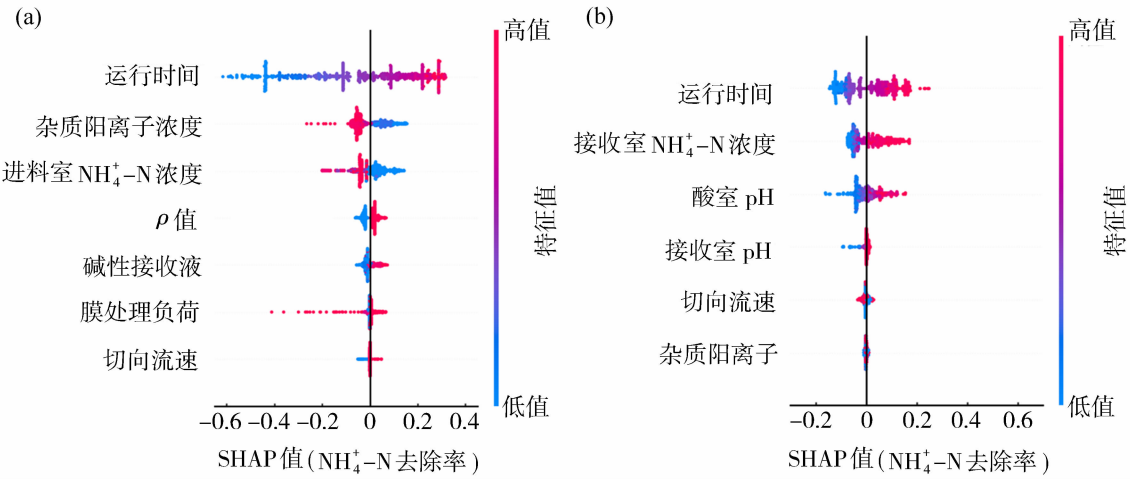


图 4 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 去除率(a)与回收率(b)预测模型的 SHAP 特征重要性分析

Fig. 4 SHAP feature importance analysis of the prediction models for $\text{NH}_4^+\text{-N}$ removal (a) and recovery (b)

料浓度会增加处理负荷,从而降低去除比例。 ρ 值升高有助于提高去除率[图 5(c)],表明驱动离子相对浓度对浓差传质过程具有重要影响^[6]。切向流速在 0~15 cm/s 范围内对去除率具有促进作用[图 5(d)],说明适度提高流速可缓解浓差极化,但进一步增大流速的提升幅度有限^[26]。对于 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 回收率[图 5(e)~5(h)]:回收率随运行时间延长而增加[图 5(e)],前期增幅较大,随后趋于稳定。接收室 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 浓度与回收率呈正相关[图 5(f)],较高浓度有利于增强传质驱动力^[22]。酸室 pH 与回收率呈正相关[图 5(g)],由于酸液吸收 NH_3 会消耗 H^+

导致酸室 pH 升高,该指标可间接反映 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 的回收水平;接收室 pH 同样与回收率呈正相关[图 5(h)],且在 pH 高于 12.5 时提升更为明显,这与高碱性条件下 NH_4^+ 向 NH_3 转化增强、传质效率提高有关^[27]。双变量 PDP 分析(图 6)进一步揭示了关键变量的协同效应。图 6(a)表明, $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 去除率随运行时间延长而提高,当运行时间超过 12 h 时可获得较高去除率;同时,在较低进料浓度(小于 60 mmol/L)条件下去除效果更佳。图 6(b)显示,当接收室 pH 高于 12.9 且接收室 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 浓度大于 75 mmol/L 时,回收率显著提升,说明高碱性性与较

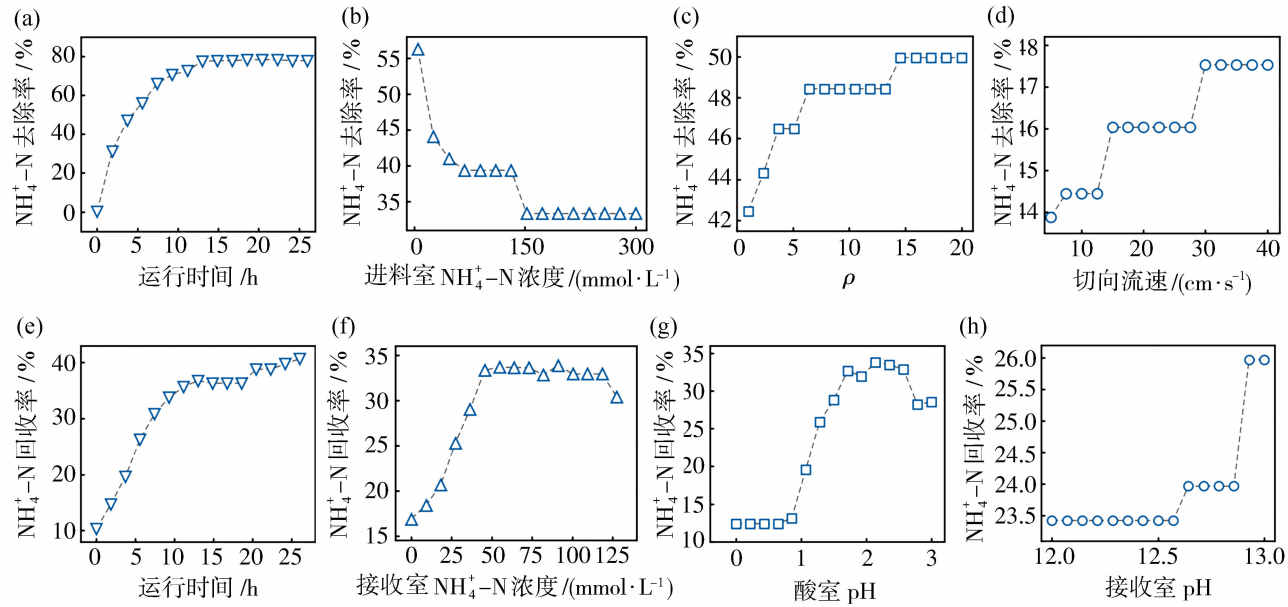


图 5 关键特征对 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 去除率[(a)~(d)]与回收率[(e)~(h)]影响的单变量 PDP 分析

Fig. 5 Univariate PDP analysis of the impact of key features on $\text{NH}_4^+\text{-N}$ removal [(a)~(d)] and recovery [(e)~(h)]

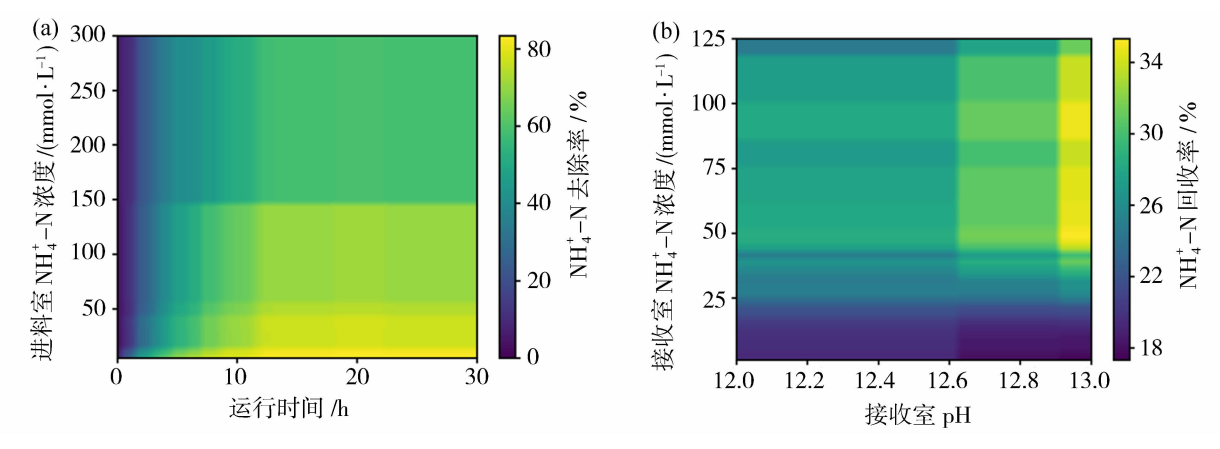


图 6 关键特征对 NH_4^+-N 去除率(a)与回收率(b)影响的双变量 PDP 分析

Fig. 6 Bivariate PDP analysis of the impact of key features on NH_4^+-N removal (a) and recovery (b)

高浓度条件的协同作用有利于强化氨氮回收。

2.5 工艺参数优化

为了提升 DD-OD 系统的整体性能,研究构建了基于贝叶斯优化的全局调控策略,如图 7(a)所示。该策略在算法内部建立了 DD 与 OD 单元的参数耦合机制,即将 DD 模型预测的 NH_4^+-N 去除率与进料室 NH_4^+-N 浓度耦合,计算所得接收室 NH_4^+-N 浓度作为 OD 模型的动态输入。在此基础

上,以 NH_4^+-N 去除率和回收率为联合优化目标,利用 TPE 算法,在多维参数空间内进行全局寻优,并结合预设的限制条件对候选方案进行筛选与迭代更新^[28]。通过该闭环流程,可高效识别兼具去除与回收效能的可行工况区间,为系统的运行调控提供了可实施的技术路径。

基于上述策略筛选出的最优参数组合及其预测性能如图 7(b)所示。优化结果表明,在进料室

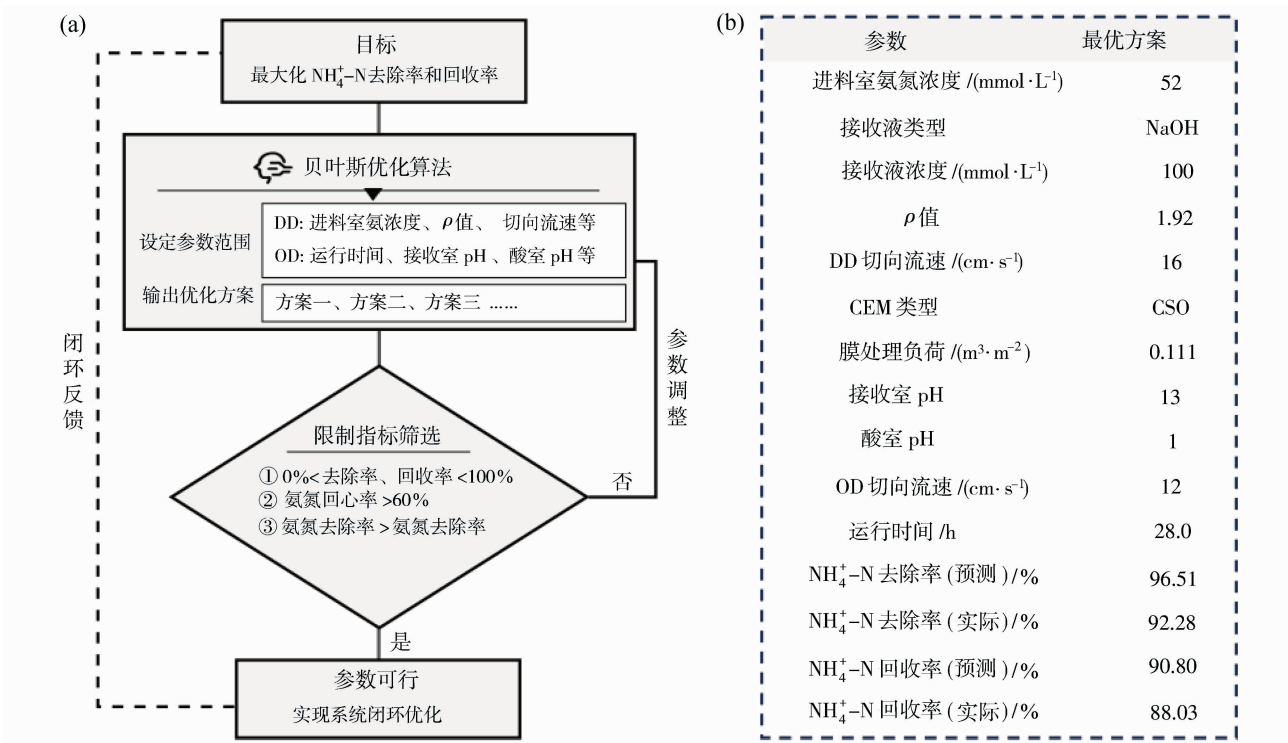


图 7 基于贝叶斯优化的 DD-OD 系统工艺参数优化策略(a)及最优参数组合预测结果(b)

Fig. 7 Optimization strategy for DD-OD process parameters based on Bayesian optimization (a) and prediction results of optimal parameter combinations (b)

NH_4^+-N 浓度 52 mmol/L、运行时间 28.0 h 及 ρ 值 1.92 的条件下,系统表现出卓越的综合性能,预测氨氮去除率与回收率分别高达 96.51% 和 90.80%。为验证优化结果的可靠性,在此工况下进行了实验室验证,实测氨氮去除率与回收率分别为 92.28% 和 88.03%,与预测值高度吻合。结果表明,利用贝叶斯优化算法可有效解析多变量间的复杂耦合效应,从而获得兼顾深度去除与高效资源回收的最优操作方案。

3 结论

本研究构建了基于 ML 的 DD-OD 耦合系统氨氮回收预测模型,并提出了基于贝叶斯优化的工艺参数调控策略。主要结论如下:

1) 构建了涵盖 1 008 组有效样本的 DD-OD 氨氮回收数据集,并通过残差筛选与 MICE 插补显著提高了数据质量,为后续建模提供了可靠基础。

2) 对比多种回归算法后发现,CatBoost 在氨氮去除率与回收率预测中均取得最优精度,经 TPE 超参数优化后测试集 R^2 分别达到 0.97 与 0.95,实现了对 DD 与 OD 传质过程的精准预测。

3) SHAP 与单/双变量 PDP 分析揭示了耦合体系的关键控制机制:DD 过程受运行时间与进料室 NH_4^+-N 浓度主导,在运行时间超过 12 h 且进料浓度小于 60 mmol/L 条件下,对氨氮的去除效果更佳;OD 过程则由接收室 NH_4^+-N 浓度与接收室 pH 协同调控,当 pH 高于 12.9 且浓度大于 75 mmol/L 时,氨氮回收率显著提升。

4) 基于贝叶斯优化构建的参数寻优框架,实现了 DD 与 OD 子系统的多目标协同优化。实验室验证结果表明,在最优工况下,实测去除率与回收率与模型预测值高度吻合。

5) 验证了 ML 在复杂膜过程建模与优化中的适用性,可为新型环保工艺的智能调控、能效提升及过程强化设计提供理论依据与决策支持。

参考文献:

[1] Mingolla S, Rosa L. Low-carbon ammonia production is essential for resilient and sustainable agriculture[J]. Nat Food, 2025, 6(6): 610-621.
[2] Farghali M, Chen Z, Osman A I, *et al.* Strategies for ammonia recovery from wastewater: A review [J]. Environ Chem Lett, 2024, 22(6): 2699-2751.

[3] Cruz H, Law Y Y, Guest J S, *et al.* Mainstream ammonium recovery to advance sustainable urban wastewater management [J]. Environ Sci Technol, 2019, 53(19): 11066-11079.
[4] Beckinghausen A, Odlare M, Thorin E, *et al.* From removal to recovery: An evaluation of nitrogen recovery techniques from wastewater[J]. Appl Energy, 2020, 263: 114616.
[5] Yan T, Ye Y, Ma H, *et al.* A critical review on membrane hybrid system for nutrient recovery from wastewater[J]. Chem Eng J, 2018, 348: 143-156.
[6] Chen C, Han M, Yao J, *et al.* Donnan dialysis-osmotic distillation (DD-OD) hybrid process for selective ammonium recovery driven by waste alkali[J]. Environ Sci Technol, 2021, 55(10): 7015-7024.
[7] Luo T, Abdu S, Wessling M. Selectivity of ion exchange membranes: A review [J]. J Membr Sci, 2018, 555: 429-454.
[8] Dutta A, Kalam S, Lee J. Elucidating the inherent fouling tolerance of membrane contactors for ammonia recovery from wastewater [J]. J Membr Sci, 2022, 645: 120197.
[9] Yang K, Qin M. Understanding ammonia and water transport in direct contact membrane distillation toward selective ammonia recovery[J]. ACS EST Eng, 2024, 4(6): 1321-1330.
[10] Rall D, Schweidtmann A M, Kruse M, *et al.* Multi-scale membrane process optimization with high-fidelity ion transport models through machine learning[J]. J Membr Sci, 2020, 608: 118208.
[11] Tayyebi A, Alshami A S, Tayyebi E, *et al.* Machine learning -driven surface grafting of thin-film composite reverse osmosis (TFC-RO) membrane [J]. Desalination, 2024, 579: 117502.
[12] Jeong N, Chung T H, Tong T. Predicting micropollutant removal by reverse osmosis and nanofiltration membranes: Is machine learning viable [J]. Environ Sci Technol, 2021, 55(16): 11348-11359.
[13] Ma J, Xu H, Wang A, *et al.* Machine learning-guided underlying decisive factors of high-performance membrane distillation system: Membrane properties, operation conditions and solution composition[J]. Sep Purif Technol, 2023, 327: 124964.
[14] Gao H, Zhong S, Zhang W, *et al.* Revolutionizing membrane design using machine learning-bayesian optimization[J]. Environ Sci Technol, 2022, 56(4):

- 2572-2581.
- [15] 陈亚松, 刘家雯, 赵云鹏, 等. 基于机器学习的人工湿地出水水质预测与影响因素[J]. 中国环境科学, 2025, 45(6):3161-3170.
- [16] Buuren S V, Groothuis-Oudshoorn K. Mice: Multivariate imputation by chained equations in R[J]. *Int J Biostat*, 2014, 45(2):1-67.
- [17] Sun J O, Hua T W, Guan Y F, *et al.* Predicting and understanding the performance of polyamide nanofiltration membrane for Li/Mg selective separation based on machine learning[J]. *Water Res*, 2025, 285: 124140.
- [18] Li Z, Yuan X, Zhang C, *et al.* Long-term degradation prediction method for proton exchange membrane fuel cells based on hybrid transfer learning [J]. *Int J Hydrog Energy*, 2025, 106: 781-789.
- [19] Wang M, Shi G M, Zhao D, *et al.* Machine learning-assisted design of thin-film composite membranes for solvent recovery[J]. *Environ Sci Technol*, 2023, 57(42): 15914-15924.
- [20] Qu D, Sun D, Wang H, *et al.* Experimental study of ammonia removal from water by modified direct contact membrane distillation[J]. *Desalination*, 2013, 326: 135-140.
- [21] Rosentreter H, Scope C, Oddoy T, *et al.* Monovalent selective ion exchange membranes: A review on preparation processes, applications, performance criteria and sustainability aspects [J]. *Desalination*, 2025, 599: 118412.
- [22] Dai Z, Chen C, Li Y, *et al.* Hybrid donnan dialysis-electrodialysis for efficient ammonia recovery from anaerobic digester effluent [J]. *Environ Sci Ecotechnol*, 2023, 15: 100255.
- [23] Rodrigues M, Sleutels T, Kuntke P, *et al.* Exploiting Donnan dialysis to enhance ammonia recovery in an electrochemical system[J]. *Chem Eng J*, 2020, 395: 125143.
- [24] Narayen D, Van Berlo E, Van Lier J B, *et al.* Recovery of sulfuric acid and ammonia from scrubber effluents using bipolar membrane electrodialysis: Effect of pH and temperature[J]. *Sep Purif Technol*, 2024, 338: 126605.
- [25] Chen C, Dong T, Han M, *et al.* Ammonium recovery from wastewater by donnan dialysis: A feasibility study[J]. *J Clean Prod*, 2020, 265: 121838.
- [26] Jung O, Saravia F, Wagner M, *et al.* Quantifying concentration polarization — Raman microspectroscopy for in-situ measurement in a flat sheet cross-flow nanofiltration membrane unit[J]. *Sci Rep*, 2019, 9(1): 15885.
- [27] Kywe P P, Ratanatamskul C. Influences of permeate solution and feed pH on enhancement of ammonia recovery from wastewater by negatively charged PTFE membranes in direct contact membrane distillation operation[J]. *ACS Omega*, 2022, 7(31): 27722-27733.
- [28] Zhu Z, Dong S, Zhang H, *et al.* Bayesian optimization-enhanced reinforcement learning for self-adaptive and multi-objective control of wastewater treatment[J]. *Bioresour Technol*, 2025, 421: 132210.

Optimization of a coupled dual-membrane process for ammonia nitrogen recovery using machine learning

YOU Weiming, TANG Han, HUANG Feiyun, YAO Jingmei, HAN Le

(College of Environment and Ecology, Chongqing University, Chongqing 400045, China)

Abstract: Efficient recovery of ammonia-nitrogen is essential for establishing a sustainable nitrogen cycle. The Donnan dialysis-osmotic distillation (DD-OD) dual-membrane coupling system recovers ammonia-nitrogen via concentration-driven and low-energy mechanisms, but its complex mass transfer processes and significant non-linear characteristics render it difficult to model for optimizing and regulating the process system. This study introduced machine learning (ML) methods to develop a CatBoost-based prediction model for ammonia-nitrogen removal and recovery rates. Following optimization, the model achieved goodness-of-fit (R^2) values of 0.97 and 0.95 on the test set, respectively. Through shapley additive

(下转第 192 页)

Preparation of GO/ZIF-8 modified PVDF hollow fiber membranes and investigation of antifouling performance

*LIU Zihao*¹, *WANG Haitao*¹, *CHANG Na*², *LIU Peng*³,
*GENG Huibin*⁴, *LIU Enbin*¹, *XU Yinong*³,
*LI Zhonghua*³, *CHEN Donggen*³

- (1. School of Environmental Science and Engineering, Tiangong University, Tianjin 300387, China;
2. School of Chemical Engineering and Technology, Tiangong University, Tianjin 300387, China;
3. Zhejiang Jinmo Environmental Technology Co., Ltd., Shaoxing 312000, China;
4. School of Material Science and Engineering, Tiangong University, Tianjin 300387, China)

Abstract: Polyvinylidene fluoride (PVDF) hollow-fiber membranes are widely used in the field of water treatment, but it is prone to membrane fouling in the actual operation process, which restricts its long-term stable operation. The current research shows that the membrane modified by graphene oxide (GO) nanomaterials has excellent anti-fouling performance, but there will be problems such as membrane flux decline and structural instability. In this study, PVDF-GO / ZIF-8 composite membrane was successfully prepared by using polydopamine (PDA) as the covalent grafting medium, grafting GO as the modified layer, and GO oxygen-containing groups as the coordination sites to promote the in-situ growth of ZIF-8, and the membrane filtration performance and stability were improved. The experimental results showed that GO grafting significantly enhanced the hydrophilicity and electronegativity of the membrane. Using bovine serum albumin (BSA) as the model pollutant, the water flux recovery rate of the GO membrane increased from 57.01% to 79.65%, and the antifouling performance was enhanced. After the introduction of ZIF-8, the pure water flux increased from 334.35 L/(m² · h) of GO membrane to 558.65 L/(m² · h). At the same time, the composite membrane still maintained the high-throughput recovery rate in the pollution cycle filtration experiment, and showed better compression resistance and operational stability, which provided the new idea for the preparation of high-performance separation membrane for water treatment.

Key words: PVDF hollow fiber membrane; ultrafiltration; graphene oxide; ZIF-8; antifouling performance

(上接第 170 页)

explanations (SHAP) and partial dependence plot (PDP) analyses, the non-linear influence of key parameters, such as operating time and feed concentration, was elucidated. Furthermore, a Bayesian optimization framework was constructed to achieve multi-objective collaborative optimization. Under the optimal conditions—a feed chamber NH₄⁺-N concentration of 52 mmol/L, an operating time of 28.0 h, and a driving-to-target ion concentration ratio (ρ) of 1.92—the removal and recovery rates reached 92.28% and 88.03%, respectively. This research demonstrates that ML methods can effectively address the non-linear coupling characteristics of complex environmental processes, providing a robust foundation for the intelligent operation of novel environmental protection systems.

Key words: ammonia nitrogen recovery; machine learning; membrane; coupled system