

航天器环境工程

SPACECRAFT ENVIRONMENT ENGINEERING

────• 中国科技核心期刊

利用RBF神经网络预测沸石分子筛对水分子的吸附能力

乔宝韵 乔佳 张军 谢春旭 赵伟立

Application of RBF neural network in predicting the adsorption capacity of zeolite molecular sieves for water molecules

QIAO Baoyun, QIAO Jia, ZHANG Jun, XIE Chunxu, ZHAO Weili

在线阅读 View online: https://doi.org/10.12126/see.2024025

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

沸石分子筛材料在航天器污染控制中的应用与发展

Application and development of zeolite molecular sieve materials in contamination control of spacecraft 航天器环境工程. 2020, 37(3): 228–234 https://doi.org/10.12126/see.2020.03.003

陶瓷基分子吸附器的航天器污染控制性能试验研究

The test of contamination control performance of molecular adsorber based on ceramic for spacecraft 航天器环境工程. 2022, 39(4): 409–412 https://doi.org/10.12126/see.2022.04.012

高比表面积5A沸石分子吸附热控涂层的制备及性能测试

Preparation and performance of high specific surface area zeolite 5Amolecular adsorption thermal control coating 航天器环境工程. 2024, 41(5): 602–609 https://doi.org/10.12126/see.2024029

空间环境对光学元件分子污染的影响及减缓方法

Effects of space environments on optical component molecular contamination and their mitigation methods 航天器环境工程. 2022, 39(6): 651–660 https://doi.org/10.12126/see.2022086

基于概率神经网络的航天结构响应映射预示方法

Method for response mapping prediction of aerospace structures based on probabilistic neural network 航天器环境工程. 2023, 40(4): 392-399 https://doi.org/10.12126/see.2023070

基于前馈神经网络的柔性连续臂建模与仿真

Modeling and simulation of flexible continuum arm based on feedforward neural network 航天器环境工程. 2022, 39(2): 133–139 https://doi.org/10.12126/see.2022.02.003

https://www.seejournal.cn

E-mail: htqhjgc@126.com

Tel: (010)68116407, 68116408, 68116544

利用 RBF 神经网络预测沸石分子筛 对水分子的吸附能力

乔宝韵¹, 乔 佳^{1*}, 张 军², 谢春旭², 赵伟立³

(1. 江苏海洋大学 电子工程学院,连云港 222005; 2. 大陆汽车电子(连云港)有限公司,连云港 222006; 3. 兰州空间技术物理研究所,兰州 730000)

摘要:针对空间望远镜水污染问题,本研究选取 4 种常见的沸石分子筛材料(ZSM-5、ZSM-22、MCM-41 和 SAPO-11)为研究对象,利用原子氧和紫外综合模拟实验设备,测试了不同环境下沸石分子筛对水分子的吸附性能,并结合实验结果和机器学习技术,构建了一个基于径向基函数(RBF)神经网络的污染物吸附能力预测模型。分析结果表明,该模型能够有效预测分子筛的吸附性能,其决定系数 R^2 均大于 0.99,平均绝对误差和均方根误差均达到 10^{-5} 量级,优于长短期记忆(LSTM)神经网络、卷积神经网络(CNN)、基于反向传播(BP)算法训练的神经网络等模型。该模型的建立解决了仅通过实验方法研究分子筛吸附性能耗时耗力的难题,并为构建更复杂的数据预估模型奠定了基础。

关键词: 空间望远镜; 水污染控制; 沸石分子筛; 水分子吸附; 机器学习; RBF 神经网络

中图分类号: V484.4; TQ426.34; TP182 文献标志码: A 文章编号: 1673-1379(2025)01-0109-08

DOI: 10.12126/see.2024025

Application of RBF neural network in predicting the adsorption capacity of zeolite molecular sieves for water molecules

QIAO Baoyun¹, QIAO Jia^{1*}, ZHANG Jun², XIE Chunxu², ZHAO Weili³

- (1. School of Electronic Engineering, Jiangsu Ocean University, Lianyungang 222005, China;
- 2. Continental Automotive Electronics (Lianyungang) Co., Ltd., Lianyungang 222006, China;
 - 3. Lanzhou Institute of Space Technology and Physics, Lanzhou 730000, China)

Abstract: To address the challenge of water contamination in space telescopes, four common zeolite molecular sieve materials: ZSM-5, ZSM-22, MCM-41, and SAPO-11 were investigated in this study. Using a combined simulation facility that provides atomic oxygen exposure and ultraviolet radiation, the adsorption capacities of these zeolites for water molecules under various environmental conditions were evaluated. Furthermore, a predictive model for the adsorption capacity of contaminants was developed using radial basis function (RBF) neural networks, combining experimental data with machine learning techniques. The results demonstrate the model's effectiveness in predicting the adsorption performance of molecular sieves, achieving R² values greater than 0.99 and mean absolute error and root mean square error values below 10⁻⁵. This performance surpasses that of other models, including Long Short-Term Memory (LSTM) neural networks, Convolutional Neural Networks (CNN), and neural networks trained with backpropagation (BP) algorithm. The establishment of this model overcomes the time-consuming and labor-intensive challenges of studying molecular sieve adsorption performance through experimental methods alone and lays a foundation for the development of more complex data prediction models.

Keywords: space telescope; water contamination control; zeolite molecular sieve; water adsorption; machine learning; radial basis function (RBF) neural network

收稿日期: 2024-03-08; 修回日期: 2025-02-06

引用格式: 乔宝韵, 乔佳, 张军, 等. 利用 RBF 神经网络预测沸石分子筛对水分子的吸附能力[J]. 航天器环境工程, 2025, 42(1): 109-116

QIAO B Y, QIAO J, ZHANG J, et al. Application of RBF neural network in predicting the adsorption capacity of zeolite molecular sieves for water molecules[J]. Spacecraft Environment Engineering, 2025, 42(1): 109-116

0 引言

以空间望远镜为代表的空间光学系统在空间 光学成像领域扮演着至关重要的角色。然而, 航天 器材料脱气、冷却系统泄漏、实验废弃物以及其他 潜在的污染源,对空间光学成像系统的性能和寿命 构成严峻挑战。其中水分子在光学表面的沉积会严 重影响望远镜的成像质量和探测器的使用寿命[1-2]。 传统的清除方法,如加热光学表面,对于某些对温 度敏感光学系统来说,可能会引起不良后果。此 外,引入额外的加热设备不仅增加了成本和系统的 复杂性,还可能降低整体的系统可靠性。为了应对 这一挑战,研究人员开发了多种水污染清除方法, 包括物理擦拭、高压溶剂喷射、CO、冰晶吹洗和分 子筛吸附等。这些方法中,沸石分子筛吸附方法因 其效费比高、制作简单、可重复使用以及对空间辐 射的良好耐受性而得到广泛应用。沸石分子筛的物 理吸附机制主要依赖于气体分子与分子筛表面之 间的范德华力和氢键作用。这些分子筛具有特定的 孔径和结构, 使得只有尺寸合适的污染分子才能进 入其内部通道。一旦水分子进入这些通道,它们便 会因为分子筛骨架内的各种作用力(如静电力、色 散力和分子间的范德华力)而被有效捕获[3]。

在分子筛的应用领域,国内外已积累了丰富的 科研成果。早期研究主要关注分子筛的基础吸附性 能。例如: 蔡英超等[4] 和何海洋等[5] 的研究表明, 分 子筛在超高真空和常温环境下具有良好的吸附能 力; 马薇等[6] 进一步通过实验验证了分级分子筛在 不同温度下的水吸附性能,并优化了其在极端环境 下的适用性。随着研究深入,学者们开始关注分子 筛的实际应用性能和对复杂污染物的分离能力。例 如:李阳等[7] 探讨了分子筛在空间环境中的物理化 学协同吸附; Yoon等[8]研究了碳分子筛膜中水与 有机物的共传输行为,为复杂污染物分离提供了新 思路; 高帅琪等[9] 开发的烷氧基功能化 COF 膜则 实现了高效筛分和高水渗透性,为太空水处理提供 了高效解决方案。近年来,研究趋势逐渐向多功能 集成和可持续方向发展。例如:崔世猛等[10]设计的 MOF 分子筛可同时捕获二氧化碳和收集水分,实 现了资源的循环利用; 张琼丹等[11] 成功开发了一种 可再生分子筛,能够有效降低空间任务成本,并为 可持续发展提供了新途径。

尽管分子筛在空间水污染控制方面展现出巨 大的应用潜力,但仍面临一些难题与挑战。例如, 田双双等[12] 指出,分子筛的吸附性能受其物理结构 和化学修饰的显著影响,且在极端环境下的结构稳 定性研究仍不充分。此外,现有分子筛难以有效区 分分子大小、形状、化学性质相似的多种污染物[8,10], 在同时处理多种污染物时往往面临选择性不足的 问题。同时,太空环境模拟实验成本高昂,且难以 获取大量实验数据。为了克服上述不足,引入神经 网络模型模拟分子筛的吸附性能成为一种有前景 的研究方向。神经网络模型能够通过大量实验数据 学习分子筛结构与性能之间的复杂关系,从而预测 分子筛在极端环境下的吸附行为。在众多机器学习 方法[13-15]中,径向基函数(RBF)神经网络因其强大 的非线性拟合能力和高效的学习效率特别适用于 处理复杂的材料性能预测问题[16-17]。其优异的局部 调整特性、非线性逼近能力和泛化能力使其能够有 效地处理和预测复杂系统中的污染物吸附数据,从 而为空间望远镜水污染问题提供解决方案。

鉴于此,本研究采纳神经网络建模的优势,选择4种常用沸石分子筛材料,并运用机器学习方法构建一个基于 RBF 神经网络的污染物吸附能力预测模型。研究考虑原子氧(AO)和紫外(UV)环境因素的影响,以确保预测模型的广泛适用性。为验证模型的预测精度,通过绘制预测值与真实值的散点图,并计算平均绝对误差(MAE)、均方根误差(RMSE)和决定系数(R²)来进行评估,对比 RBF 神经网络模型和长短期记忆(LSTM)、卷积神经网络模型和长短期记忆(LSTM)、卷积神经网络模型对分子筛吸附性能的预测结果。

1 原子氧(AO)/紫外(UV)实验

1.1 实验目的

为了精确预测分子筛对特定污染物的吸附能力,本研究首先开展了一项实验,目的是搜集关键数据,这些数据将用于训练网络模型,使其能够对不同条件下分子筛的吸附性能进行预测。实验利用兰州空间技术物理研究所的 AO/UV 综合模拟实验装置,并构建了一套专用的吸附性能测试装置。在该装置中,对 4 种常见的沸石分子筛材料进行了辐照处理,并对比了辐照前后它们对水分子的吸附能力。

1.2 实验材料

本研究选取的 4种沸石分子筛材料分别为 ZSM-5、ZSM-22、MCM-41 和 SAPO-11。这些材料的扫描电镜照片如图 1 所示。具体来说,ZSM-5 是一种具有 MFI 结构的三维孔道分子筛,其特征为椭圆形十元环直孔道和正弦形的十元环孔道;ZSM-22则属于 TON 结构,含有五元环、六元环和十元环孔道,其中十元环孔道形成平行的一维通道;MCM-41是一种有序介孔材料,以其高比表面积和均匀的中孔结构而著称;SAPO-11是一种 AEL 结构的正交晶系分子筛,由 $A1O_2$ 、 PO_2 ⁺和 SiO_2 四面体单元构成,并具有椭圆形的十元环直孔道。表 1 列出了这些材料的详细特性参数。

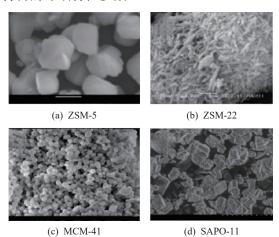


图 1 沸石材料的扫描电镜照片 Fig. 1 SEM images of zeolite materials

表 1 沸石分子筛材料的特性

Table 1 Characteristics of the zeolite materials

材料	孔径/nm	硅铝比	BET比表面积/ (m²·g ⁻¹)	相对洁净度/%	残钠/ %
ZSM-5	0.55	≥45	≥310	≥95	≤0.1
ZSM-22	0.57	200	≥180		
MCM-41	4	全硅	600		
SAPO-11	0.5	0.7	≥180		

将沸石分子筛粉末放入直径为 10 mm、高度 为 10 mm 的圆形模具内,用千斤顶施加压力,挤压 约 30 min,获得直径 10 mm 的圆形片状物。制得的样品用于 AO/UV 辐照试验。

1.3 实验方法

1.3.1 实验装置

本研究主要涉及两种实验装置,分别为 AO/UV 综合模拟实验装置和吸附性能测试装置。其中

AO/UV 综合模拟实验装置包括真空系统、AO 发生 装置以及 UV 光源,用来模拟低地球轨道环境下分 子筛所遭受的 AO 和 UV 辐射影响。

吸附性能测试装置用来测量材料的吸附性能,主要由恒温恒湿箱、高精度电子天平和数据采集系统组成。恒温恒湿箱的温度控制精度为 ± 1 °C,湿度控制精度为 ± 2 %,高精度电子天平的精度为 0.1 mg。 1.3.2 实验步骤

制备 16 个样品,每种材料(ZSM-5、ZSM-22、MCM-41 和 SAPO-11)各 4 个,确保样品初始质量一致。将样品分为 4 组,每组包含 4 种材料各 1 个,分别用作对照组、AO 辐照组、UV 辐照组和协同效应组。然后分别对各组样品进行相应的辐照实验,辐照结束后将样品置于 125 ℃ 烘箱中烘烤 48 h,以去除辐照期间分子筛吸收的实验舱内的污染物。

将处理后的样品放入电子天平上,并将天平置于恒温恒湿箱内。设定箱内温度为 25 ℃,相对湿度为 60%,并保持压力为 1 个标准大气压。将吸满水的海绵放置于箱内,并通过数据线将天平连接至电脑,实时记录样品质量变化。每隔 5 s 记录 1 次质量,并计算吸附率(被吸附的水分子质量与分子筛质量之比)。

1.3.3 数据处理

重复实验 3~5次,以确保实验数据的有效性。对于同种材料,吸附率差异应控制在不超过0.1%,超出此范围的异常值将被剔除,且剔除的异常值数量不得超过总样品数的17%。若剔除异常值后的剩余数据无法满足要求,则必须重新进行实验。最终,每种材料在不同环境下的吸附量和吸附率均基于满足要求的实验数据的平均值得出。

2 RBF 神经网络模型

2.1 模型结构

本研究选用 RBF 神经网络构建分子筛水污染物吸附能力预测模型。RBF 神经网络是一种前馈型神经网络,包含输入层、隐含层和输出层。输入层用于接收输入数据,隐含层对输入数据进行非线性变换、特征提取和数据压缩,输出层将隐含层的输出转换为模型的输出结果。模型结构如图 2 所示。

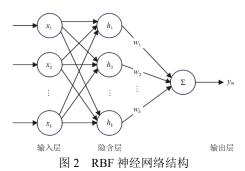


Fig. 2 Structure diagram of the RBF neural network model

在网络的隐含层中,通常采用 RBF 作为径向基神经元的激活函数,对输入数据进行非线性变换,其数学表达式为

$$R(\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{c}_i) = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma} \|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{c}_i\|^2\right), \tag{1}$$

式中:i 为第 i 个径向基函数;k 为第 k 个输入样本; $x_k(k=1,2,\cdots,K)$ 为样本的输入; c_i 为样本的高斯函数中心值; σ 为径向基函数的方差。

网络的输出可表示为

$$y_i = \sum_{i=1}^m w_{ij} R(\mathbf{x}_i - \mathbf{c}_i), j = 1, 2, \dots, m,$$
 (2)

其中:m 为输出层的节点数; w_{ij} 为第i个隐含层节点到第j个输出层节点的权值。

2.2 数据处理与模型训练过程

在机器学习中,特征选择对模型性能至关重要。由于吸附量能够有效反映分子筛的吸附能力,且易于处理和解释,因此本研究选择吸附量作为训练数据。实验过程中,每隔 5 s 测量 1 次吸附量,并记录数据。当吸附量趋于稳定时,判定吸附达到平衡状态,并记录此时的吸附量作为最大吸附量,每组实验测得 44 个原始数据点。为了增加数据样本量,并提高模型训练的精度,使用 Origin 软件对实验数据进行插值处理。具体方法为:在前 39 个数据点两两之间插入 5 个新点。最终得到 216 个数据样本。

使用这 216 个数据样本构建数据集。每个样本的前 kim 个历史数据作为自变量,第 kim+zim 个数据作为因变量,存储在矩阵 res 中。其中: kim 为历史数据长度; zim 为预测时间步长。将数据按照70% 训练集和 30% 测试集的比例进行划分。均方误差目标设定为 1×10⁻⁸。模型训练采用 10 个输入神经元、150 个隐含层神经元和 1 个输出神经元。使用训练好的模型对训练集和测试集进行预测。

在 MATLAB 中,可以使用 newrbe 函数创建 RBF 神经网络,该函数的语法为

$$net = newrbe(P, T, Spread),$$
 (3)

式中: P 为输入向量; T 为目标输出向量; Spread 为 径向基函数的扩展速度。本研究中, 将 Spread 设置 为 150, 以获得较好的预测性能。

创建神经网络后,可以使用 sim 函数进行模拟,其语法如下:

$$y = sim(net, P),$$
 (4)

式中: net 为已训练好的神经网络; y 为模型的输出向量。

3 结果分析

本研究采用 MATLAB 软件构建了 RBF 神经 网络模型,并利用实验数据对模型进行了训练。通过对训练集和测试集进行预测,并与真实值结果对比,评估模型的预测性能。

为了量化预测结果与实际值之间的差异,本研究采用了平均绝对误差(MAE)和均方根误差(RMSE)两种指标,对预测结果进行分析,其计算公式为:

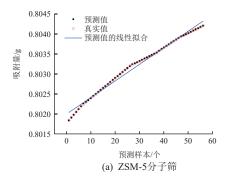
$$E_{\text{MAE}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |\hat{y}_i - y_i|;$$
 (5)

$$E_{\text{RMSE}} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2} \,. \tag{6}$$

其中:ŷi为预测值;yi为实际值。

3.1 对照组

图 3 展示了对照组 4 种分子筛对水分子吸附量的预测值与真实值对比。由图可知,模型预测值与真实值吻合度较高,两者曲线趋势基本一致,表明模型能够有效地捕捉分子筛吸附行为的变化规律。



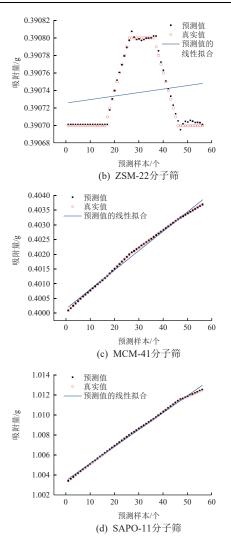


图 3 对照组 4 种分子筛对水分子吸附量的预测值与真实值结果对比

Fig. 3 Comparison of predicted and actual water adsorption capacity by four types of molecular sieves in the unexposed group

表 2 列出了模型应用于对照组时的评价指标, 其中 MAE 和 RMSE 均小于 0.1, R² 值均大于 0.9, 再次证实了模型预测的准确性。这一结果也反映 了 RBF 模型具有较强的泛化能力,能够稳定适应 新数据。

表 2 RBF 模型对照组吸附性能评价指标

Table 2 Adsorption performance metrics of the unexposed group using the RBF model

-					
材料	MAE	RMSE	R ²		
ZSM-5	2.677 4×10 ⁻⁶	4.120 6×10 ⁻⁶	0.999 96		
ZSM-22	2.469 3×10 ⁻⁶	3.293 1×10 ⁻⁶	0.993 65		
MCM-41	5.788 1×10 ⁻⁶	6.483 3×10 ⁻⁶	0.999 96		
SAPO-11	1.408 8×10 ⁻⁵	2.070 2×10 ⁻⁵	0.999 94		

3.2 辐照组

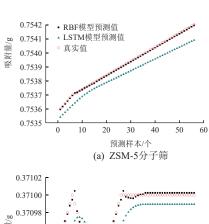
为了进一步验证模型的预测准确性,本研究将

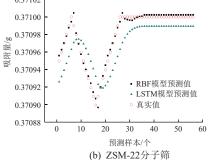
AO 辐照、UV 辐照以及 AO+UV 综合辐照 3 种环境下的实验数据用于训练 RBF 神经网络模型,并与当前应用较为广泛的几种神经网络模型做了对比分析。

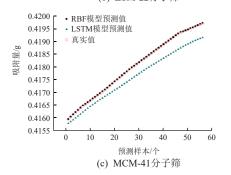
3.2.1 AO 辐照

图 4 展示了在 AO 辐照环境下, 4 种分子筛对水分子吸附量的预测值与实际测量值的对比情况。在此, 选择长短期记忆(LSTM)神经网络模型作为对照组。该模型参数设置如下: 包含 100 个隐藏层单元, 采用 ReLU 激活函数, 初始学习率为 5×10⁻³, 优化算法为 Adam。

LSTM 模型的预测值与真实值之间存在较大偏差,且 R^2 值普遍低于 0.8,其中 ZSM-22 材料的 R^2 值甚至低于 0.5。LSTM 模型在 4 种分子筛上的 MAE 值和 RMSE 值都接近 0.000 4,而 RBF 模型的 MAE 值和 RMSE 值均达到 10^{-5} 量级,显著低于 LSTM 模型。这表明 RBF 模型的预测精度远高于 LSTM 模型,能够更准确地捕捉数据的变异性。







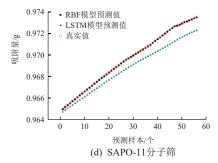


图 4 AO 辐照组 4 种分子筛对水分子吸附量的预测值与真实值对比

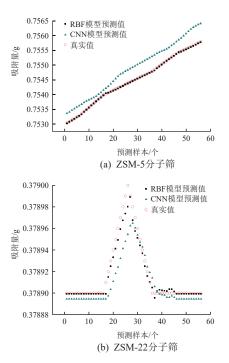
Fig. 4 Comparison of predicted and actual water adsorption capacity by four types of molecular sieves in the AO exposure group

通过对比图 4 中 RBF 模型与 LSTM 模型的预测结果,可以发现 RBF 模型的预测精度明显优于 LSTM 模型。

3.2.2 UV 辐照

图 5 展示了 UV 辐照环境下, RBF 模型与其他神经网络模型的预测结果对比。本研究选择了卷积神经网络(CNN)模型作为参照组。该模型参数设置如下:包含 16 个 1×1 大小的卷积核, 深度为 3,同样采用 ReLU 激活函数, 初始学习率为 0.005, 优化算法为 Adam。

通过对比图 5 中 RBF 模型与 CNN 模型的预测结果,可以发现 RBF 模型的预测精度同样优于 CNN 模型。CNN 模型的预测值与真实值之间存在较大偏差,且 R² 值普遍低于 0.7。



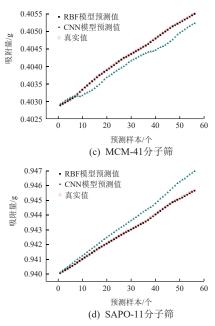


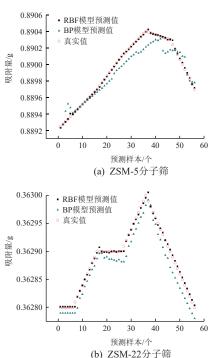
图 5 UV 辐照组 4 种分子筛对水分子吸附量的预测值与真实值对比

Fig. 5 Comparison of predicted and actual water adsorption capacity by four types of molecular sieves in the UV radiation group

CNN 模型的 MAE 值和 RMSE 值都接近 0.0003,而 RBF 模型的 MAE 值和 RMSE 值也都达到了 10^{-5} 量级,明显低于 CNN 模型。这说明 RBF 模型的预测精度远高于 CNN 模型的。

3.2.3 AO+UV 辐照

图 6 展示了在 AO+UV 综合辐照环境下, RBF 模型与基于 BP 算法训练的神经网络模型作为对照组。



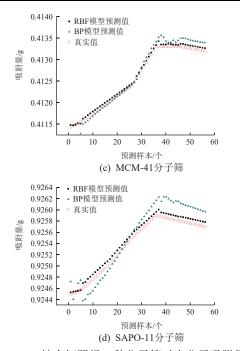


图 6 AO+UV 综合辐照组 4 种分子筛对水分子吸附量的预测值与真实值对比

Fig. 6 Comparison of predicted and actual water adsorption capacity by four types of molecular sieves in the AO and UV exposure group

该模型参数设置如下:包含10个输入层神经元,100个隐含层神经元,迭代次数800次,学习率为0.005。

通过对比图 6 中 RBF 模型与使用 BP 算法训练的神经网络模型的预测结果,可以发现,使用 BP 算法训练的神经网络模型在预测精度上相较于 LSTM 和 CNN 模型有所提高, R² 值接近 0.9, 然而仍不及 RBF 模型的表现;使用 BP 算法训练的神经网络模型的 MAE 值和 RMSE 值接近 0.0001,而 RBF 模型的 MAE 值和 RMSE 值达到 10⁻⁵ 量级。

3.3 小结

经过比较分析, RBF 神经网络在预测分子筛吸附性能的任务中, 相较于 LSTM、CNN 以及使用BP 算法训练的神经网络, 表现出了更为突出的优势:

- 1) 在数据量有限的情况下, LSTM 模型的复杂结构容易导致过拟合, 而 RBF 模型能够更高效地提取和利用数据特征, 避免过拟合风险。
- 2) CNN 模型的核心特性是平移不变性,这在时间序列分析中可能限制其性能。相比之下,RBF神经网络通过径向基函数对输入数据进行非线性映射,能够有效捕捉数据中的局部特性,更适合处

理序列任务。

3) 基于 BP 算法训练的神经网络存在局部最优解问题,而 RBF 神经网络通过使用径向基函数作为激活函数,能够实现全局逼近,在整个输入空间中找到最优解,避免了局部最优解的局限性。

4 结束语

针对空间光学成像系统中水污染问题,利用沸石分子筛对水污染物的吸附特性,构建并验证了一个基于 RBF 神经网络的分子筛水污染物吸附能力预测模型。通过精心的实验设计和详尽的数据分析,确认了 RBF 模型在处理复杂非线性问题上的准确性和快速收敛性,以及在预测不同环境条件下分子筛吸附能力方面的有效性。与传统吸附能力预测方法相比,本模型展现了更高的效率和适用性。在本研究中,对 RBF 神经网络的架构和参数进行了精细化调整。同时,将其性能与 LSTM 网络、CNN 以及采用 BP 算法训练的神经网络等模型进行了比较。研究结果表明,在本次研究案例中,RBF 神经网络模型表现出了明显的优势。这些研究成果为分子筛材料的设计和实际应用提供了参考依据。

本研究虽然主要集中在特定类型的分子筛和水污染物上,但所开发的模型和优化方法具有广泛的应用潜力。未来可以考虑将模型扩展至更广泛的污染物类型和环境条件,并进一步探索神经网络模型在材料科学领域其他预测问题上的应用潜力。

参考文献 (References)

- [1] SCHIRMER M, THÜRMER K, BRAS B, et al. Euclid preparation XXIX. Water ice in spacecraft Part I: The physics of ice formation and contamination[J]. Astronomy & Astrophysics, 2023, 675(A&A), A142.
- [2] XIE L H, ZHANG X P, ZHENG Y C, et al. The effects of spacecraft charging and outgassing on the LADEE ion measurements[J]. Journal of Geophysical Research: Space Physics, 2017, 122(5): 5825-5834.
- [3] JOSHI U D, JOSHI P N, TAMHANKAR S S, et al. Adsorption behavior of N₂, water, C₆ hydrocarbons, and bulkier benzene derivative (TMB) on Na–X zeolite and its K⁺-, Rb⁺-, and C_s⁺-exchanged analogues[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2001, 235(1): 135-143.
- [4] 蔡英超、王银平、沸石分子筛在大气与水污染治理中的

- 应用[J]. 清洗世界, 2024, 40(2): 81-83.
- [5] 何海洋, 方建军, 刘梅. 煤矸石制备 NaX 分子筛及其对 Cu^{2+} 的吸附性能研究[J]. 化工矿物与加工, 2024, 53(11): 60-66.
 - HE H Y, FANG J J, LIU M. Molecular sieve preparation of NaX from coal gangue and its adsorption performance in absorbing to Cu²⁺[J]. Chemical Minerals & Processing, 2024, 53(11): 60-66.
- [6] 马薇, 杨志平, 郭萃萍, 等. Na-A 型分级多孔分子筛的合成及吸水性能研究[J]. 陶瓷学报, 2023, 44(4): 727-735. MA W, YANG Z P, GUO C P, et al. Synthesis and water efficiency of Na-A hierarchical porous molecular sieves[J]. Journal of Ceramics, 2023, 44(4): 727-735.
- [7] LI Y, WEI W J, CHEN J Q, et al. Atomic layer deposition precisely modified zeolite 13X: Physicochemical synergistic adsorption of space molecular contaminants[J]. Applied Surface Science, 2022, 590, 153084.
- [8] YOON Y H, LIVELY R P. Co-transport of water and pxylene through carbon molecular sieve membranes[J]. Journal of Membrane Science, 2022, 654, 120495.
- [9] GAO S Q, YANG Y Y, ZHAI L Y, et al. Alkoxyfunctionalized covalent organic framework membranes for efficient molecular sieving with high water permeance[J]. Separation and Purification Technology, 2025, 356(Part A), 129903.
- [10] CUI S M, SHAO Y J, ZHONG W Q. Molecular sieves hybrid metal-organic framework for efficient simultaneously capturing carbon dioxide and collecting water from air[J]. Chemical Engineering Journal, 2024, 499, 155912.

- [11] ZHANG Q D, ZHAO X H, ZHENG Y, et al. Facile synthesis of regenerable NaY zeolite adsorbent relying on alcohol-terminated compounds for efficient trace sulfur dioxide capture[J]. Chemical Engineering Journal, 2023, 475, 146265.
- [12] TIAN S S, LIU W H, LIU B L , et al. Study on the effect of physical structure and chemical modification of molecular sieve on the adsorption properties of C_4F_7N and its decomposition products[J]. Materials Today Communications, 2023, 35, 105739.
- [13] 段海鹏. 缺陷工程 MOFs 的定量构筑及其吸附分离性能的机器学习研究[D]. 广州: 华南理工大学, 2021: 63-79.
- [14] 董毅. 基于机器学习的多元金属氧化物基催化剂的高效 开发与性能研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2024: 44-61.
- [15] 李伟可. ZSM-5 分子筛的固相合成、改性研究及其结晶 倾向预测[D]. 汕头: 汕头大学, 2021: 77-80.
- [16] 裘城聪, 樊鑫宇, 潘国祥, 等. 丛林伪装用水滑石材料合成与近红外光谱的 RBF 神经网络研究[J]. 光散射学报, 2024, 36(4): 392-398.
 - QIU C C, FAN X Y, PAN G X, et al. Research on the synthesis of hydrotalcite and RBF neutral network prediction for simulating near-infrared water peaks in jungle camouflage[J]. The Journal of Light Scattering, 2024, 36(4): 392-398.
- [17] GAO J, JASIM D J, SAJADI S M, et al. An RBF-based artificial neural network for prediction of dynamic viscosity of MgO/SAE 5W30 oil hybrid nano-lubricant to obtain the best performance of energy systems[J]. Materialstoday Communications, 2024, 38, 107836.

(编辑:武博涵)