机器学习驱动加氢催化剂研究进展

周 杰*,郝 伟
(天津凯莱英医药科技发展有限公司,天津 300052)

摘要:系统分析了近年来机器学习在加氢催化剂领域的前沿应用,重点阐述了机器学习在催化剂活性位点设计、反应路径优化及抗失活性能预测等方面的突破性进展。通过剖析国内外创新成果,全面阐述机器学习技术在加氢催化剂理性设计、性能预测与工艺优化中的前沿应用,并对未来发展趋势提出前瞻性展望。

关键词:机器学习;加氢催化剂;催化剂设计;高通量筛选
中图分类号:TQ426 **文献标志码**:A **文章编号**:0253-4320(2026)11-0076-05
DOI:10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2026.11.014

Advances in hydrogenation catalyst research driven by machine learning

*ZHOU Jie**, *HAO Wei*
(Tianjin Asymchem Medical Science & Technology Co., Ltd., Tianjin 300052, China)

Abstract: This review systematically analyzes the frontier applications of machine learning in the field of hydrogenation catalysts in recent years, focusing on the breakthrough progress of machine learning in catalyst active site design, reaction path optimization, and prediction of anti-deactivation performance. By analyzing the innovative achievements at home and abroad, it comprehensively elaborates the frontier applications of machine learning technology in rational design, performance prediction, and process optimization of hydrogenation catalysts, and provides forward-looking prospects for future development trends.

Key words: machine learning; hydrogenation catalyst; catalyst design; high-throughput screening

加氢催化技术在能源化工、精细化学品合成及环境催化等领域具有不可替代的地位,过程效率直接关系到化工生产的经济性与环保性。在“双碳”战略背景下,开发高性能加氢催化剂已成为产业升级的迫切需求。然而,传统催化剂研发模式严重依赖研究人员的经验与直觉,面临着实验周期长、资源消耗大及优化效率低等严峻挑战。

机器学习技术的迅猛发展,特别是机器学习与深度学习算法的突破,为加氢催化剂研发注入了全新动力[1-2]。通过构建“数据驱动设计-高通量计算-自动化验证”的智能研发新范式,ML技术正在从根本上改变催化材料的设计理念与开发流程[3-4]。本综述将聚焦于近几年机器学习在加氢催化剂领域的关键进展,通过系统梳理国内外创新研究成果,全面阐述ML技术在加氢催化剂理性设计、性能预测与工艺优化中的前沿应用,并对未来发展趋势提出前瞻性展望。

1 机器学习赋能加氢催化剂理性设计的新范式

1.1 催化剂表面结构与稳定性的智能预测

催化剂表面性质直接影响其活性位点暴露与反应物吸附行为,是决定催化性能的关键因素。传统的密度泛函理论(DFT)计算虽然精度较高,但计算成本昂贵,严重制约了大规模催化剂筛选的效率[5-6]。机器学习(ML)结合DFT计算在多相催化剂设计与筛选中的成功应用越来越广泛。

Fang等[7]利用可获取的特征和密度泛函理论(DFT)计算结果,训练了机器学习模型,以预测葡萄糖和氢原子在A_xB_{4-x}二元合金催化剂上的吸附能,通过机器学习预测技术对1 044种二元合金催化剂进行了筛选,从中确定了9种可能的具有高预测活性的二元合金催化剂,其中Pd_3Mg表现最好,已实现比Raney-Ni更好的催化性能。Li等[8]通过结合机器学习原子模拟和催化实验在反应条件下钯银合金催化剂的表面状态,并筛选出一种具有高性能的锐钛矿型二氧化钛负载的Pd_1Ag_3催化剂,在96%的乙炔转化率下,100 h内具有85%的选择性。Marlowe等[9]通过DFT计算上训练的机器学习模型在催化剂用于生物质增值的加氢脱氧(HDO)反应中,确定了WO_x优先占据协调良好的Pt位点(≥8 Pt配位数)以及控制WO_x-Pt稳定性的结构特征,通过可还原金属氧化物对后过渡金属表面特定位点的优先修饰的识别和控制多相催化中金属-载

收稿日期:2025-12-31;**修回日期**:2026-08-30
作者简介:周杰(1987-),男,硕士,工程师,研究方向为工业催化剂的开发与应用,通讯联系人,zhoujie123999@126.com。

体相互作用来开发高性能催化剂。Yang 等[10]报告了机器学习为基于银和铜的催化剂的草酸二甲酯加氢提供最优解,然后应用于在催化剂性能和反应条件的全局优化领域中筛选和预测新型催化剂,成功预测了 6 种用于草酸二甲酯加氢的新型催化剂,即 Ag-B_2O_3/HAP、Ag-CuO/KCC-1、Cu-Au/SNT、Cu-Al_2O_3/SiO_2、Cu-B/SNT 和 Cu-Ni-泡沫/RGO。预测的新催化剂具有显著的潜力,能够分别将草酸二甲酯加氢过程中的乙醇酸甲酯(MG)、乙二醇(EG)和乙醇(ET)的产率提高 10.60%、5.55%和 4.08%。

通过训练机器学习模型,研究人员能够高效地预测关键催化参数(如吸附能、稳定性、选择性),从而从海量候选材料中快速识别出高性能催化剂。

1.2　加氢反应活性与选择性的智能调控

加氢反应的选择性控制是工业应用中的核心难题,特别是在炔烃半加氢、CO 加氢等复杂反应体系中。机器学习技术通过挖掘关键描述符与反应路径的内在关联,为实现精准选择性调控提供了全新途径。

Zaffran 等[11]将金属掺杂钯基负载型催化剂表面上的蒽醌(AQ)加氢作为反应并关注主要反应产物,机器学习首要目的是加速 DFT 计算,从而能够在创纪录的时间内筛选各种表面的催化活性和选择性。Wang 等[12]基于从 15 个沸石样品的表征和相应催化剂的催化性能得出的数据集,在机器学习建模的帮助下建立了多因素关系。根据模型的预测,定量描述了孔隙和酸度特性的影响,观察到介孔对转化率有很大影响,而微孔对苯、甲苯和二甲苯(BTX)选择性有很大的提高,沸石的性能不仅可以通过酸催化反应直接影响催化剂的加氢裂化性能,还可以通过调节与金属成分分散相关的加氢活性。Feng 等[13]通过 DFT 计算和 3 轮机器学习迭代对 C═O 键和 C═C 键吸附的吸附能进行探究,从而筛选出有利于 C═O 吸附的 SAA(单原子合金)催化剂,其中 Ti_1Au SAA 催化剂表现出对 C═O 键特异性吸附活化。进而通过对巴豆醛在 Ti_1Au SAA 表面上反应路径计算以及微动力学模拟,结果表明 Ti_1Au(111)和 Ti_1Au(320)表面具有高的催化活性和将近 100%巴豆醇选择性,是潜在的 α,β-不饱和醛选择性加氢制不饱和醇的高性能催化剂。Alexandra 等[14]对 2,4-二硝基甲苯加氢合成甲苯二胺催化剂的文献数据进行了分析,开发 MIRA21 模型的首要目标是利用来自 3 种不同描述符的客观数值数据来表征多相催化剂,探索性数据分析(EDA)用于了解催化剂性能、反应条件、催化剂成分和可持续参数等各个变量之间的关系,发现含铂的过渡金属氧化物催化剂在短时间内就能在 2,4-二硝基甲苯的氢化反应中表现出优异的性能,且活性金属含量较低。

Liu 等[15]利用组内开发的基于 LASP 软件的全局神经网络方法,研究了铁基费托合成这一重要工业催化体系的结构和反应机理,证明了基于机器学习全局优化,从第一性原理出发解决反应条件下的复杂催化问题已具有较为完善可行的研究模式。建立 4 元 Fe-C-H-O 全局神经网络势函数,基于机器学习全局模拟的方法,探索了百万个在费托合成条件下碳化铁体相与表面的候选结构,从而解析出 CO 活化的活性中心。Fang 等[16]采用基于机器学习的方法来预测金属氧化物催化剂在乙炔氢化反应中的催化性能,确定了一些潜在的优秀催化剂,如 CuO、ZnO 和 V_2O_5。实验验证证实了它们的活性,其中 CuO 在 50~100℃时的转化率约为 100%,选择性约为 90%,ZnO 在 200℃以上的温度下表现出约 100%的转化率和约 80%的选择性。并且 V 在 275℃时的转化率为 41%,选择性为 52%。

机器学习驱动的催化研究已经从“快速筛选”迈向“精准设计”,能够系统性地揭示反应机理、解析关键活性结构,并提出具有高选择性和活性的新型催化剂设计方案。

1.3　反应动力学与过渡态的 ML 加速

反应动力学参数的准确预测对理解加氢反应机理至关重要,但传统的过渡态搜索方法计算成本极高,成为催化剂理性设计的瓶颈。

Shi 等[17]通过大规模的机器学习原子模拟,开发了一种基于微观动力学的机器学习路径搜索方法,以探索二氧化碳和一氧化碳在热力学有利的铜-锌表面结构[包括铜(111)、铜(211)以及锌合金化的铜(211)表面]上的数千种反应路径,从中确定出最低能量的路径,研究表明混合气体中的一氧化碳对于还原阳离子锌并暴露金属位点以用于 Cu/ZnO/Al_2O_3 催化剂上通过 CO 和 CO_2 混合物的加氢合成甲醇起着关键作用。Wu 等[18]提出了一个专为单原子催化剂量身定制的机器学习框架,可以准确预测吸附状态,即关键中间体(*OH、*O 和 *OOH)的吸附自由能和电荷,并提供了基于振动模式分析的红外信号的可解释注意力图。Ma 等[19]通过机器学习揭示了 Y 型分子筛结构与正癸烷加氢裂化反应性能的构效关系,发现转化率主要受晶胞参数、酸

量和介孔体积影响；C_3/C_7 比主要受晶胞参数、酸量、介孔体积和微孔体积的影响；对 $i-C_4/n-C_4$ 比影响较大的变量为晶胞参数、酸量和微孔体积。预测结果与实验结果吻合良好，模型对新催化剂设计具有较好的预测能力。Hu 等[20]采用大规模机器学习驱动的全局优化，在实际反应条件下（即 5 MPa H_2 压力，Zn^{2+} 水溶液）探索数百万个 Ru 和 Ru-Zn 结构候选物以及完整的苯部分加氢反应生成环己烯（CHE）网络。微动力学模拟进一步证实，Zn 的存在通过毒害 Ru 纳米颗粒中的波纹表面，将产率从 0% 提高到 50%。基于这些原子见解，建议在 Ru 晶格中引入 2% 的拉伸应变可以将 CHE 产率提高到 60%，具有 100% 的 CHE 选择性，突出了定制催化剂载体以最大限度地提高性能的潜力。

ML 对反应动力学、中间态的深度理解与分析进一步凸显了 ML 与微观动力学模拟、全局优化的深度结合，正在从“初步筛选”走向“机理解析”提供全方位的支持。

2 机器学习驱动的催化剂制备与工艺优化

2.1 ML 加速催化剂筛选与性能预测

Diptendu 等[21]通过机器学习研究了高熵合金（Cu、Co、Ni、Zn 和 Sn）基催化剂的高通量筛选用于 CO_2 加氢制甲醇反应中。基于训练 ML 模型训练数据成功在 36 750 种催化剂中筛选了一系列高熵基催化剂，预测了吸附物的吸附能。Wang 等[22]提出的结构描述符的预测模型成功地阐明了钯基合金之间的活性和选择性趋势，并且还可以扩展到合理化单原子合金和镍基合金之间乙炔甚至其他炔烃半氢化的动力学趋势，与现有的实验参考非常一致。借助热力学稳定性分析和结构描述符，通过高通量筛选方案对 489 种 Pd 基双金属合金进行了评估，其中 Pd_1Nb_3 和 Pd_1Hf_3 被鉴定为乙烯产率高、成本低廉，并通过实验研究得到验证。黄成等[23]通过机器学习中的人工神经网络完成了 CO_2 加氢合成航煤动力学研究，建立了关键组分 CO 和 CO_2 预测模型、碳链增长模型和产物分布模型，可准确预测一定实验条件下关键组分 CO 和 CO_2 物质的量分数与产物分布。

机器学习将催化科学家从繁重的重复性筛选和试错中解放出来，使其能更专注于提出科学假设、设计算法和解读更深层次的物理化学规律，凸显了机器学习在加速催化剂发现、深化机理认识和优化反应性能方面的强大能力，正深刻变革着催化剂的设计与开发流程。

2.2 工业过程的智能优化与运维

机器技术在工业加氢过程的优化与运维中同样展现出巨大潜力。

Ge 等[24]描述了在主动机器学习与密度泛函理论计算相结合的辅助下，高性能镍基金属间催化剂的原子设计。工程化的 NiIn 催化剂在温和温度下完全转化乙炔和丙炔时，对乙烯和丙烯的选择性 >97%，优于报道的镍基催化剂，甚至优于贵金属钯基催化剂。使用理论计算和高级表征的详细机理研究表明，原子级定义的 Ni 位点配位环境以及精心设计的 Ni 3d 与 In 5p 轨道的杂化决定了半氢化途径。董毅[25]通过机器学习方法高性能多元金属氧化物基 CO_2/CO 加氢制甲醇催化剂的高效开发，结合文献数据和自测实验数据，构建了甲醇合成催化剂组成-制备条件-结构参数-反应工况-催化性能数据库，实现了在催化剂组成、制备条件等参数空间内对甲醇合成催化剂的高效、宏量搜索，成功获得了兼具高活性和高选择性的甲醇合成催化剂，筛选出 CuZnAlTi 催化剂在 250℃时 CO 加氢制甲醇的时空收率为 0.979 g/(g·h)，CO_2/CO 混合气加氢制甲醇的时空收率为 2.78 g/(g·h)。Lee 等[26]创新性地采用了高斯过程贝叶斯优化（GPBO）方法对直接 CO_2 加氢制甲醇的“超结构”进行优化。该方法能够同时优化反应器配置、催化剂负载和操作参数等离散与连续变量，设计出的新工艺将 CO_2 转化率提升至 52.5%，从甲醇生产中获得的收入从每吨 4.3 美元的赤字变为 2.5 美元的利润，展示了机器学习在颠覆性工艺创新中的巨大潜力。

工业过程与 ML 的深度结合标志着机器学习已不再仅是辅助工具，而是能够从原子到系统，全方位地引领颠覆性催化技术与工艺的创新引擎。

3 挑战与未来展望

3.1 当前面临的关键挑战

机器学习在加氢催化剂研发的深化应用中，正面临一系列核心制约。

数据壁垒与质量困境：该领域的研究严重受制于标准化数据的匮乏与分散。实验数据不仅总量稀缺，更因其源于各异的研究平台而存在显著的测度差异与系统误差，构成了彼此隔离的“数据孤岛”[25]。这种状况直接导致了模型训练样本不足，并严重削弱了其外推至未知体系时的稳健性与可信度。

模型决策的“黑箱”迷雾:许多高性能的机器学习模型,内部的决策逻辑往往难以追溯。当模型预测出一种高活性催化剂时,研究人员却可能无法从中提取出关于“构-效关系”的清晰物理图像或化学机制[27-28]。这种可解释性的缺失,使得 ML 的输出更像是一个无法验证的统计结论,而非能够推动理论发展的科学见解,从而限制了其在本质创新上的贡献。

多尺度系统整合的鸿沟:催化剂的宏观表现是微观活性位点结构、介观孔道特性以及反应器工程环境等多层级因素复杂交织的结果[29]。现有的学习模型多聚焦于单一尺度(例如基于量子化学描述符的活性预测),而如何构建一个能无缝耦合从原子级描述到宏观反应动力学数据的统一计算框架,是实现精准“量-效”关联与全局优化的关键瓶颈。

3.2　展望

突破当前困境,未来的发展路径呈现出高度的融合与自动化特征。

自主驱动的高通量研发闭环:发展的终极形态将是 ML 智能体与自动化实验设施的深度集成。在此范式下,ML 不仅负责提出优化方案,更能直接调度 robotic 实验系统执行合成与性能表征,并即时分析反馈数据,自主启动下一轮优化循环。这种“决策-执行-学习”的闭环将革命性地压缩研发周期,并系统性构建高质量、标准化的专属数据库。

机理引导的知识发现模型:单纯的数据驱动将逐步演进为“物理信息增强”的混合建模策略。通过将热力学定律、动力学方程等先验知识作为约束条件嵌入模型架构,或与第一性原理计算进行跨模态融合,能够孕育出既符合物理规律又具备强大数据拟合能力的新一代模型。这不仅能提升在稀疏数据区的预测可靠性,更有望直接从复杂数据中反演和发现新的科学规律。

生成式智能与逆向设计范式:超越传统的性质预测,生成式人工智能将开启“逆向设计”的新纪元。模型能够学习并内化高性能催化剂的核心特征,进而根据特定的应用需求(如在复杂原料中实现特定分子的精准加氢),直接生成在理论上具备最优组成与结构的全新候选材料。这将把催化剂研发从“筛选”时代推向“创造”时代,实现真正意义上的源头创新。

机器学习技术正在深刻重塑加氢催化剂的研发范式,从传统的“试错”模式向高效的“理性设计”模式转变。通过 SurFF、CaTS 等创新算法,机器学习实现了在催化剂表面设计、反应路径优化及动力学分析中的革命性突破。国内研究团队在单原子合金设计、金属间化合物筛选等方面的成果,展示了中国在机器学习驱动催化研究中的创新能力。未来,随着专用大模型、自动化实验平台及标准化数据库的发展,机器学习技术将在加氢催化剂设计中发挥更加关键的作用。同时,解决数据质量、模型可解释性及跨尺度建模等挑战,需要催化科学家、数据专家及工程师的紧密合作。当前正处在催化研究新范式的起点,机器学习驱动的加氢催化技术必将为化学工业的绿色、低碳转型提供核心创新动力。

参考文献

[1] Xin H L.Catalyst design with machine learning[J].Nature Energy, 2022,7(9):790-791.

[2] Muhammad A, Yao C X, Zuo Z T, *et al*. Machine learning-driven catalyst design, synthesis and performance prediction for CO_2 hydrogenation[J]. Journal of Industrial and Engineering Chemistry, 2025,144:32-47.

[3] Rinehart N I,Zahrt A F,Henle J J,*et al*.Dreams,false starts,dead ends,and redemption:A chronicle of the evolution of a chemoinformatic workflow for the optimization of enantioselective catalysts [J].Accounts of Chemical Research,2021,54(9):2041-2054.

[4] Shields B J,Jason S,Li J,*et al*.Bayesian reaction optimization as a tool for chemical synthesis[J].Nature,2021,590(7844):89-96.

[5] Aklilu E G,Bounahmidi T.Machine learning applications in catalytic hydrogenation of carbon dioxide to methanol:A comprehensive review[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2024, 61: 578-602.

[6] 常师恺.机器学习辅助密度泛函理论计算指导单/双原子催化剂发现[D].苏州:苏州大学,2024.

[7] Fang Z C,Wang S F,Fan H A,*et al*.Machine-learning-assisted catalytic performance predictions of binary alloy catalysts for glucose hydrogenation [J]. Applied Catalysis A: General, 2025, 691: 120086.

[8] Li X T,Chen L,Shang C,*et al*.In situ surface structures of PdAg catalyst and their influence on acetylene semihydrogenation revealed by machine learning and experiment[J].Journal of the American Chemical Society,2021,143(16):6281-6292.

[9] Marlowe J,Deshpande S,Vlachos D G,*et al*.Effect of dynamic and preferential decoration of Pt catalyst surfaces by WO_x on hydrodeoxygenation reactions[J].Journal of the American Chemical Society, 2024,146(20):13862-13874.

[10] Yang Q C,Zhou J L,Bao R J,*et al*.An automatic recognition of target product and multiparameter collaborative regulation-based machine learning framework for dimethyl oxalate hydrogenation catalysts optimization and prediction[J]. Chemical Engineering Science,2025,305:121125.

[11] Zaffran J,Jiao M Y,Wischert R,*et al*.Upgrading the density functional theory with machine learning for the fast prediction of polyar-

omatic reactivity at bimetallic catalysts[J].The Journal of Physical Chemistry C,2024,128(12):5084-5092.
[12] Wang W,Li M F,Zhang Y,*et al*.Structure-performance relationship between zeolites properties and hydrocracking performance of tetralin over NiMo/Al_2O_3-Y catalysts: A machine-learning-assisted study[J].Fuel,2025,390:134652.
[13] Feng H S,Zhang M,Ge Z,*et al*.Designing efficient single-atom alloy catalysts for selective C═O hydrogenation: A first-principles, active learning and microkinetic study[J].ACS Applied Materials & Interfaces,2023,15(48):55903-55915.
[14] Alexandra J N,Attila G,Fiser B,*et al*.Towards machine learning in heterogeneous catalysis: A case study of 2,4-dinitrotoluene hydrogenation[J].International Journal of Molecular Sciences,2023,24(14):11461.
[15] Liu Q Y,Shang C,Liu Z P.In situ active site for CO activation in Fe-catalyzed fischer-tropsch synthesis from machine learning[J].Journal of the American Chemical Society,2021:143(29):11109-11120.
[16] Fang R B,Zhang Q J,Yao C,*et al*.Prediction of catalytic performance of metal oxide catalysts for alkyne hydrogenation reaction based on machine learning[J].Applied Catalysis A:General,2024,687:119969.
[17] Shi Y F,Kang P L,Shang C,*et al*.Methanol synthesis from CO_2/CO mixture on Cu-Zn catalysts from microkinetics-guided machine learning pathway search[J].Journal of the American Chemical Society,2022,144(29):13401-13414.
[18] Wu F,Ye K,Jiang J.Identifying adsorption states of OER intermediates on single-atom catalysts via a spectral machine learning framework[J].The Journal of Physical Chemistry Letters,2025,16(31):7780-7788.
[19] Ma Q L,Nie H,Yang P,*et al*.Insights into structure-activity relationships between Y zeolites and their n-C_{10} hydrocracking performances via machine learning approaches[J].Chinese Journal of Catalysis,2025,71:187-196.
[20] Hu Z Y,He Z Z,Chen L,*et al*.In situ selective site-blocking dictates benzene partial hydrogenation to cyclohexene on Zn-promoted Ru-based catalysts[J].ACS Catalysis,2025:15(9):7015-7027.
[21] Diptendu R,Shyama C M,Biswarup P,*et al*.Machine learning-driven high-throughput screening of alloy-based catalysts for selective CO_2 hydrogenation to methanol[J].ACS Applied Materials & Interfaces,2021,13(47):56151-56163.
[22] Wang J Y,Xu H X,Wu J G,*et al*.Rational design of alloy catalysts for alkyne semihydrogenation via descriptor-based high-throughput screening[J].ACS Catalysis,2024,14(2):1220-1230.
[23] 黄成,刘操,黄磊,等.基于机器学习的 CO_2 催化加氢制航空煤油筒式反应器数学模拟分析与优化[J].低碳化学与化工,2024,49(7):120-128.
[24] Ge X H,Yin J,Ren Z H,*et al*.Atomic design of alkyne semihydrogenation catalysts via active learning[J].ACS,2024,146(7):4993-5004.
[25] 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.
[26] Lee H W,Kim K,An J J,*et al*.Toward the practical application of direct CO_2 hydrogenation technology for methanol production[J].International Journal of Energy Research,2020,44(11):8229-8239.
[27] 胡建钰,杨峻毅,胡素磊,等.可解释机器学习辅助建立催化科学理论[J].中国科学:化学,2025,55(6):1704-1714.
[28] Li A M,Cui P,Wang X,*et al*.The artificial intelligence-catalyst pipeline:Accelerating catalyst innovation from laboratory to industry[J].Chemical Engineering Science,2025,19(7):55.
[29] Alkadhem A,Botella E P,Braune S P,*et al*.Engineering catalysts at the multiscale: Past, present, and future of catalyst manufacturing and shaping processes[J].ChemCatChem,2025,18:e01109.■

(上接第 75 页)

[14] Zhong Z L,Ji Y J,Zhao M K,*et al*.Comparison of emission characteristics and risk assessment of volatile organic compounds of typical pharmaceutical industries in central plains,China[J].Atmospheric Pollution Research,2025,16(3):102396.
[15] 张昱,冯皓迪,唐妹,等.β-内酰胺类抗生素的环境行为与制药行业源头控制技术研究进展[J].环境工程学报,2020,14(8):1993-2010.
[16] 李胜,曾晓希,王格,等.四环素类抗生素的微生物降解研究进展[J].工业微生物,2024,54(5):13-15.
[17] 王丽,韩成龙.有机溶媒回收工艺在工业生产中的应用[J].化工管理,2024,(20):142-145.
[18] 李彬,张晨阳,陶伟伟.制药废水处理技术研究进展[J].工业水处理,2022,42(11):7-17.
[19] 李俊生,李思航,李嘉慧,等.光催化氧化技术处理制药废水的研究进展[J].应用化工,2024,53(8):1949-1954.
[20] Ganiyu S O,Martínez-Huitle C A,Oturan M A.Electrochemical advanced oxidation processes for wastewater treatment: Advances in formation and detection of reactive species and mechanisms[J].Current Opinion in Electrochemistry,2021,27:100678.
[21] Fang Z,Yao P,Lin Hua,*et al*.Fugitive emissions of volatile organic compounds from the pharmaceutical industry in China based on leak detection and repair monitoring,atmospheric prediction,and health risk assessment[J].Journal of Environmental Science and health.Part A,Toxic/hazardous Substances & Environmental Engineering,2023,58(7):11-14.
[22] 钟敏.制药废水处理技术及应用概述[J].大众标准化,2022,(6):147-148,151.
[23] 王晓杰,冷雪,杜浩升,等.厌氧生物技术在工业废水处理中的应用分析[J].工业微生物,2025,55(2):62-64.
[24] Li M S,Wang X,Ma M Y,*et al*.Efficient treatment of high-concentration pharmaceutical wastewater with high-salinity by chemical synthesis coupling with evaporation: From lab-scale to pilot-scale[J].Chemical Engineering Journal,2024,496:154278.
[25] 生态环境部,国家发展和改革委员会,公安部,等.国家危险废物名录(2025 年版)[J].中华人民共和国国务院公报,2025,(7):17-47.
[26] 生态环境部.GB 378222019 挥发性有机物无组织排放控制标准[J].中国人造板,2019,26(7):41.
[27] 生态环境部.GB 41616—2022 印刷工业大气污染物排放标准[J].广东印刷,2023,(1):8.
[28] 常城.复合处理工艺对于生物发酵废气处理效果的研究[J].科学技术创新,2021,(12):192-194.
[29] Bai L J.Nanofiltration membrane wastewater treatment technology for pharmaceutical enterprise wastewater[J].Journal of Biotech Research,2024,16:264-274.■