
可解释人工智能驱动的CO₂还原反应器模块化集成架构分析

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/42667.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

可解释人工智能驱动的CO₂还原反应器模块化集成架构分析。可再生电力驱动的新兴净零化工制造过程广泛使用质子交换膜电解槽/燃料电池、CO₂还原反应器、液流电池系统等模块化制造及储能系统。为提升波动输入和宽负荷范围运行下的生产效能，必须优化反应器堆栈的尺寸、数量与互连方式，缓解堆内及堆间传输与反应的非均匀性，但由于系统多层级、多尺度的复杂结构，各层级结构参数对系统性能的调控机制难以厘清。华东理工大学曹晨熙团队在ENG. Chem. Eng. 发表论文，以CO₂还原微反应器为研究对象，提出了一套可解释人工智能驱动的分析框架，用于发掘模块化制造系统的最优集成架构。研究结合极端梯度提升树（XGBoost）与沙普利可加解释值（SHAP）分析，建立了结构与性能间定量映射关系，阐明了各类结构参数的调控机制；构建了可解释分类模型，提炼出模块化集成准则；通过K均值聚类，可辨识适应不同生产规模与原料波动的最优模块化集成设计范式。结果表明：年生产成本由基板层级参数主导，而系统CO₂转化率与净碳足迹由反应器堆栈层级参数决定；反应基板数量在100~200之间、基板上分配通道尺寸< 5.4 mm可作为集成方案Pareto最优的有效判据；以兼顾成本与反应性能为目标，最优模块化集成方案是小型少堆并联架构或大型单堆架构。

构建了面向多级模块化CO₂还原反应器的可解释AI一体化数据驱动分析框架

现有研究仅单独采用机器学习回归/聚类，缺少从数据生成→构效解析→最优构型判别→工况模式挖掘的完整闭环。本文搭建了三层可解释机器学习流水线：拉丁超立方采样生成随机数据集+多目标NSGA-II生成帕累托最优数据集；XGBoost回归耦合SHAP解析跨层级结构-性能定量调控机制；XGBoost分类实现非劣模块化集成架构的快速筛选，PCA-K-means无监督聚类提取分场景最优模块化集成范式。

量化厘清了不同层级结构对三类竞争性能指标的差异化主导调控规律

过往研究仅分析单一结构对单一性能指标（转化率或成本）的影响，未区分不同结构层级对多性能指标的主导作用。依托XGBoost-SHAP可解释模型定量证明：年总成本由基板底层参数（单基板流道数N1和基板分配管H1）主导，存在尺寸阈值7 mm的成本拐点；CO₂转化率和净碳足迹由堆栈级拓扑参数（堆栈总数N3和堆间连接方式G3）决定，并联堆栈上限10组可规避堆间偏流，同时可区分串联/并联/单堆三种连接模式对流动不均、间接碳排放的差异化影响，从流体分布机理阐明结构调控底层逻辑。

建立了高准确率帕累托最优反应器定量判别经验准则，大幅缩减设计搜索空间

传统模块化集成设计需全域遍历海量结构，计算成本极高。本文利用平衡样本后的XGBoost分类模型（测试集F1 = 0.97）提取可落地定量筛选规则： $100 \leq N_2 < 200$ 、 $H_1 < 5.4\text{mm}$ 、 $N_1 \geq 25$ ，满足该条件的架构帕累托最优概率超过90%。明确了超大基板分配管、多级串联、过多堆叠是三类劣架构典型特征，直接为工程设计剔除了无效方案，将大规模仿真优化计算量降低了6~7个数量级。

基于无监督聚类可识别分产能和分进料波动的多类最优模块化放大范式

现有放大方案无工况适配性划分，无法适配波动绿氢场景。通过PCA降维可消除性能及模组多尺度架构的多重共线性，结合轮廓系数最优K-means聚类，区分出6种场景专属的最优构型：低产能工况仅适用小型/大型单堆或少量小堆并联；标准稳定工况使用4类基础架构（单堆/少堆，各自大小两种构型）；绿氢进料高波动场景需多堆大并联构型缓冲流量扰动。系统阐明了产能规模和进料波动性对最优拓扑和管路几何尺寸的调控逻辑，给出了成本优先、转化优先、均衡兼顾三类工程选型方案。

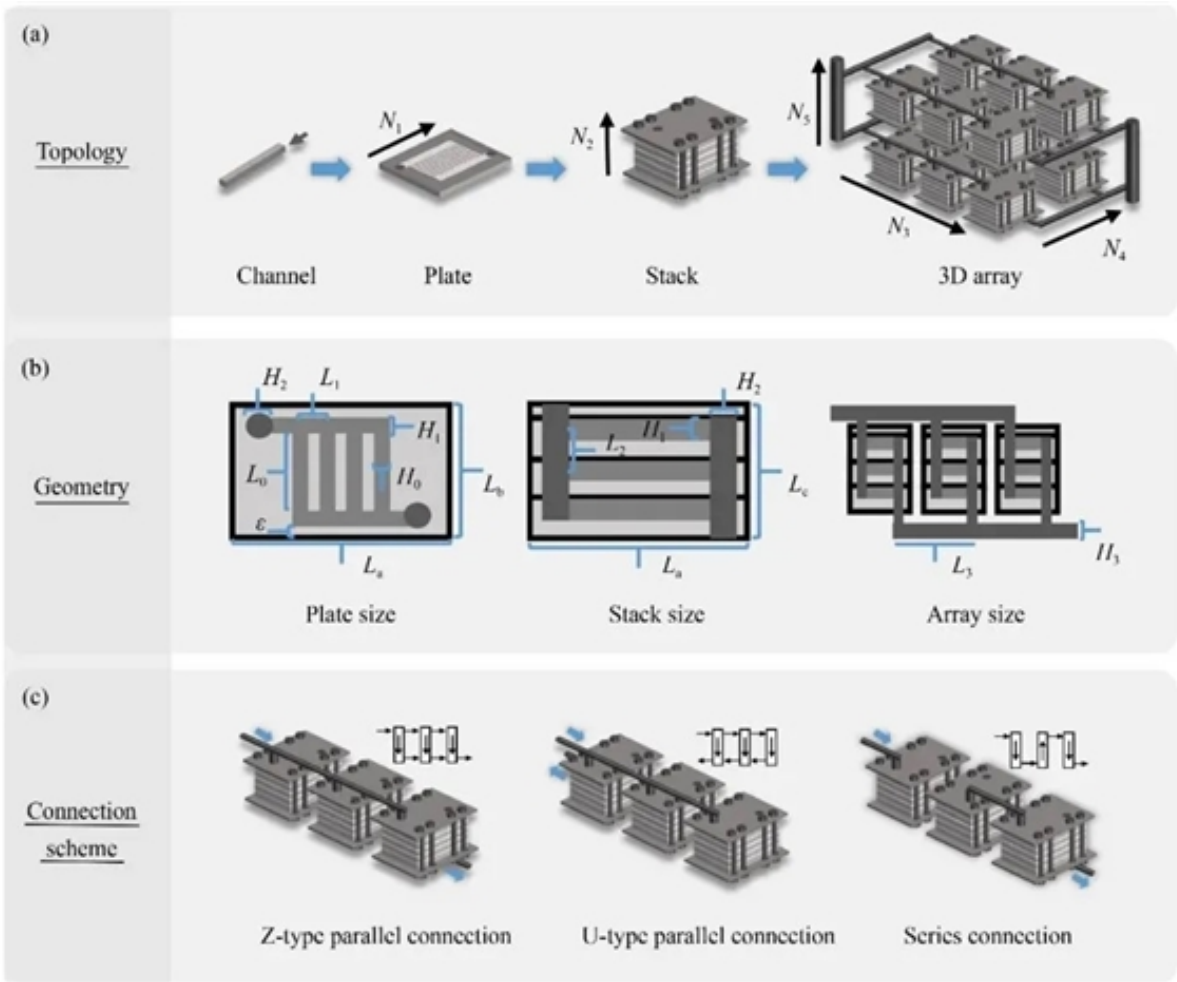


图1.模块化CO₂还原反应器层级架构：(a) 层级拓扑，(b) 各级几何尺寸，(c) 堆栈间流体连接方案。

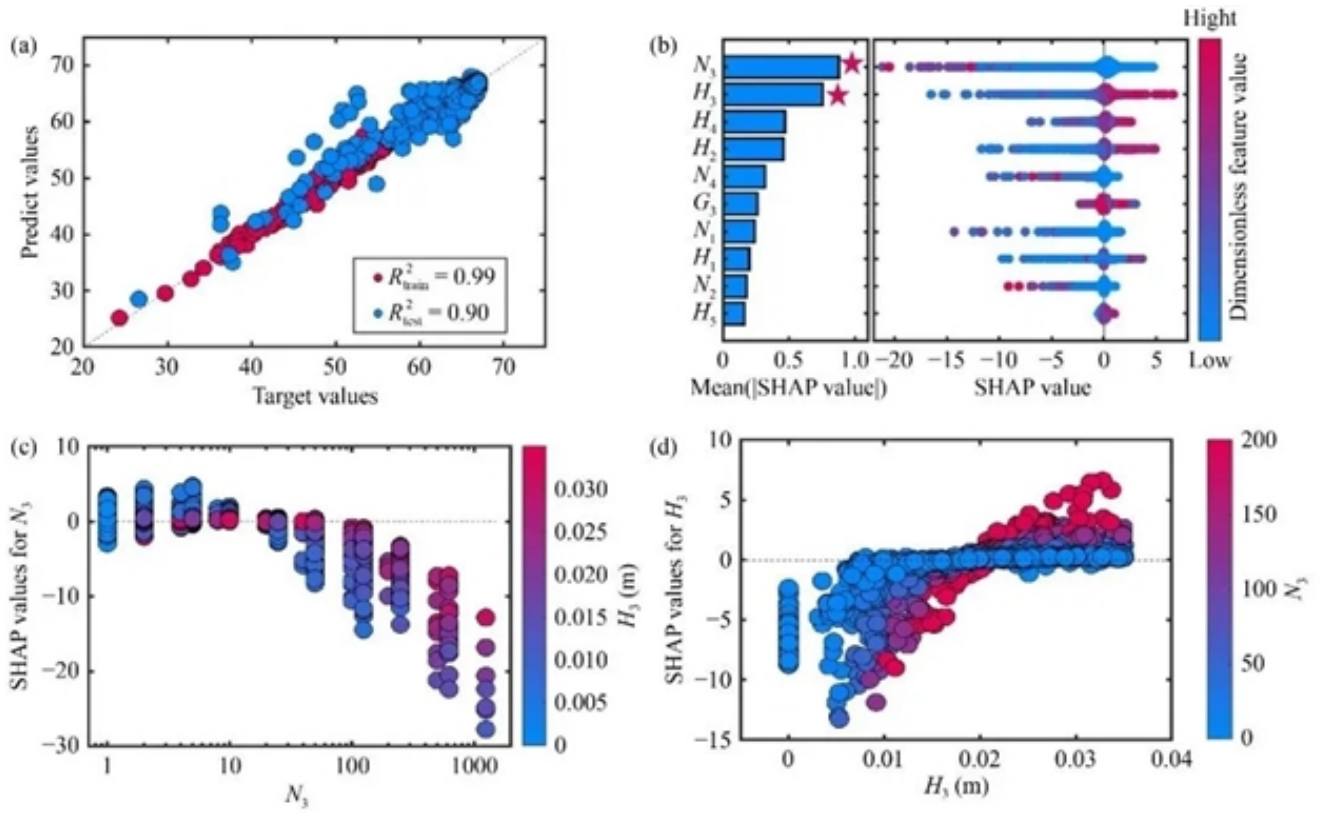


图2.XGBoost回归 + SHAP解析反应性能：(a) XGB模型预测散点（训练 $R^2 = 0.99$ ，测试 $R^2 = 0.90$ ）；(b) 特征SHAP均值重要度排序；(c) N_3 堆栈数量SHAP依赖曲线；(d) 堆间分配管径 H_3 的SHAP依赖曲线。

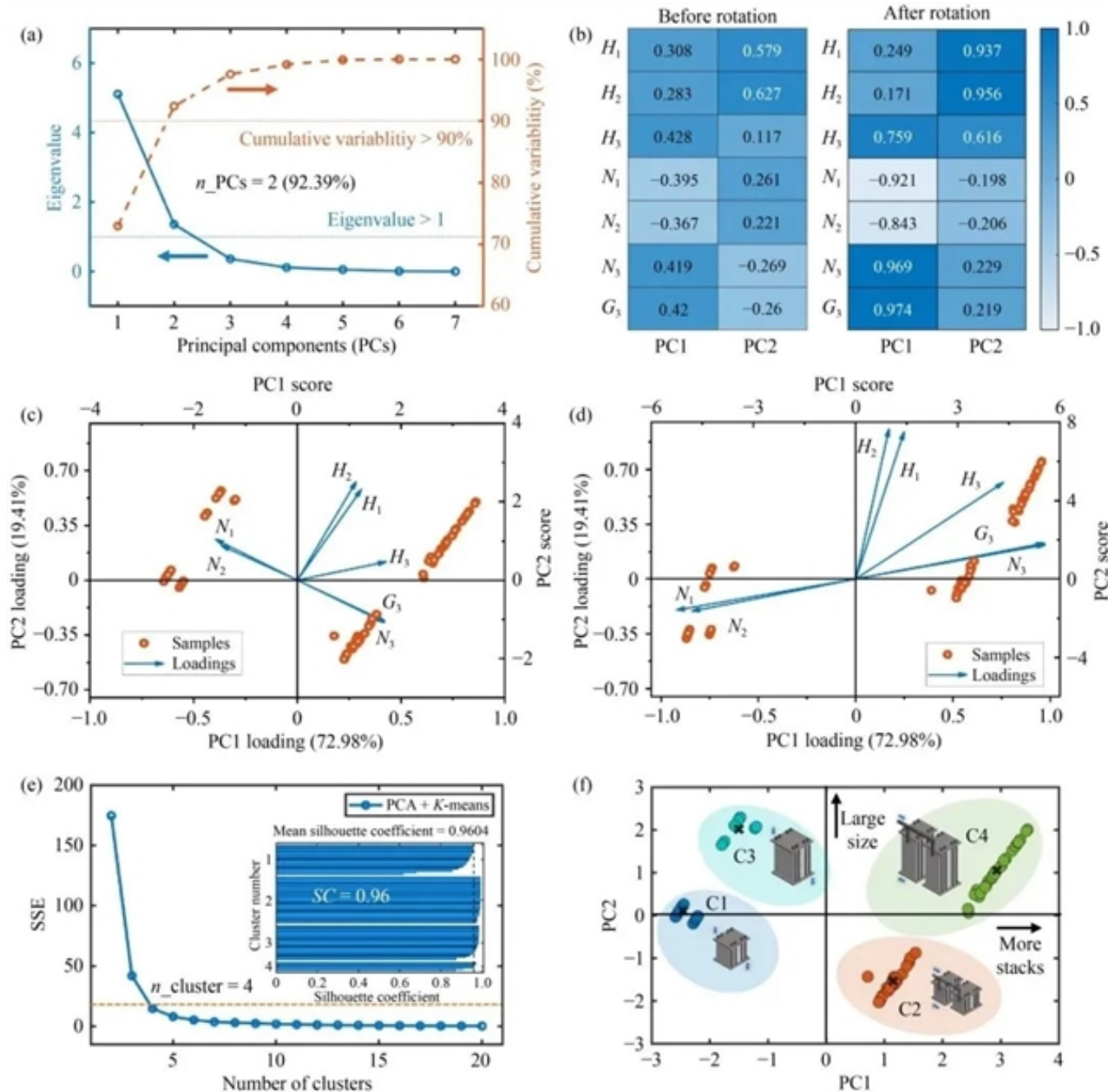


图3.PCA+K-means无监督聚类识别最优架构模式：(a) 主成分方差贡献率筛选；(b) 原始因子载荷矩阵；(c, d) 旋转前后因子载荷分布；(e) 肘部法+轮廓系数确定聚类数；(f) 四大最优模块化集成范式二维聚类分布图。

(来源：EngineeringJournals微信公众号)

相关论文信息：<https://journal.hep.com.cn/fcse/EN/10.1007/s11705-026-2678-y>

作者：曹晨熙等 来源：《工程·化学工程》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发