

基于机器学习的 OCM 反应产物表现预测

常大山^{1,2*}, 孙雨桐², 陈光进¹

(1. 中国石油大学(北京)化学工程与环境学院, 北京 102249;

2. 中石化(北京)化工研究院有限公司, 北京 100013)

摘要:基于反应评价数据集和机器学习的方法,建立集成通道注意力机制的多层感知机模型(SE-MLP)并实现对 OCM 反应产物表现的精准预测,与决策树、支持向量机及传统多层感知机模型相比,SE-MLP 模型具有最高的预测精度,同时,SHAP 法结果揭示了反应条件与各产物选择性的关联,提高模型可解释性。模型为 OCM 产物快速预测和工艺调控提供了数据支撑。

关键词:机器学习;甲烷氧化偶联;乙烯;产物预测

中图分类号:TQ202

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2026)09-0221-05

DOI:10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2026.09.037

Machine learning-based prediction of product performance in the oxidative coupling of methane (OCM) reaction

CHANG Da-shan^{1,2*}, SUN Yu-tong², CHEN Guang-jin¹

(1. College of Chemical Engineering and Environment, China University of Petroleum (Beijing), Beijing 102249,

China; 2. Sinopec (Beijing) Research Institute of Chemical Industry Co., Ltd., Beijing 100013, China)

Abstract: In this work, a squeeze-and-excitation multilayer perceptron model (SE-MLP) was developed via machine learning on a reaction evaluation dataset, enabling accurate prediction of OCM product performance. Comparisons with decision tree, support vector machine, and conventional multilayer perceptron models demonstrate that the SE-MLP model achieves the highest prediction accuracy. The SHapley Additive exPlanations (SHAP) method uncovers the correlations between reaction conditions and the selectivity of individual products, thereby enhancing model interpretability. This SE-MLP model provides reliable data support for the rapid prediction of OCM products and the regulation of reaction processes.

Key words: machine learning; OCM; ethylene; product prediction

乙烯是重要的石油化工原料,其产量、生产规模和生产技术是衡量一个国家石油化工水平高低的重要标志。近年来,我国乙烯需求量和产能增长量逐年上涨,整体上,我国乙烯行业处于扩张周期,截至 2025 年,我国乙烯总产能已突破 6 300 万 t,整个“十四五”期间国内乙烯新增产能近 3 000 万 t,规模达“十三五”时期的 2 倍^[1-3]。乙烯来源更加多元化,但仍以石脑油蒸气裂解和轻烃裂解为主,而甲烷是天然气、页岩气的核心组分,甲烷氧化偶联制乙烯(OCM)能实现甲烷向乙烯的高效转化,对缓解能源危机、优化一次能源结构至关重要,是催化化学与化工领域的研究热点^[4-6]。

机器学习已成为催化反应研究的重要工具,尤其是在反应性能预测方面,机器学习方法能够有效处理催化反应中的高维度、非线性数据,捕捉多因素间的复杂关联,显著提升预测精度与效率^[7-9],因此机器学习可以为更高效而准确的 OCM 反应产物表

现预测提供方法。现有研究主要使用历史文献数据,采用多种机器学习方法构建数据集,建立不同回归模型进行模型建立和数据处理,成功开发了预测 C₂ 产率的机器学习模型^[10-11],但部分产物预测效果不佳,主要是不同文献采用的催化剂、反应器形式、工艺条件差别较大,影响数据质量^[12-13]。

本文中基于 OCM 反应的实验评价数据,对复杂 OCM 反应网络进行优化并针对性建立模型特征值以提升数据质量和特征工程科学性,并采用机器学习中的神经网络回归方法构建集成通道注意力机制的多层感知机(SE-MLP)模型作为 OCM 反应产物的预测模型,将该模型与决策树、支持向量机、传统多层感知机等多种模型进行对比,验证所建立 SE-MLP 模型的预测精度和泛化能力,以实现针对不同实验条件下反应产物组成及转化结果的精准预测。结合 SHAP 可解释性分析揭示模型特征值之间的影响关系和非线性作用机制,为 OCM 反应工艺参

收稿日期:2026-04-27;修回日期:2026-06-24

作者简介:常大山(1992-),男,博士,高级工程师,研究方向为化工新工艺开发,通讯联系人,010-59202474, changds.bjhy@sinopec.com。

数优化、反应过程调控提供可靠的理论支撑与实践依据。

1 研究方法 with 原理

1.1 实验数据

本文中所用实验数据均来源于评价实验,采用内径 $\phi 20$ mm 的单管固定床反应器,在反应器恒温区装填 Mn-Na-W-SiO₂ 催化剂 2.52 g,装填床层高度 20 mm,设置反应器进料组分为甲烷、氧气、水蒸气,对原料在不同水烷比、反应空速、烷氧比和反应温度的条件下进行 OCM 反应产物表现测试,实验共获得 751 组有效实验数据,所有样本数据均在标准化实验室批次反应装置中获取,确保数据的可靠性、可重复性与代表性,为机器学习模型构建提供高质量数据支撑。

1.2 模型特征值的设定

典型的 OCM 反应网络主要涉及乙烷、乙烯、碳氧化物等主要产物,同时涉及丙烯、乙炔、碳四等微量副产物,反应网络中多种产物同时存在平行反应和连串反应,反应方程总数在 10 个以上^[14],构成了高复杂度的反应网络。在构建机器学习模型特征值时,该复杂性导致难以构建准确的特征描述符对实验数据进行量化转化。为建立可靠的模型输入特征,对 OCM 反应网络开展简化优化,将复杂的多级反应网络转化为 5 个甲烷与氧气的平行反应,建立的简化后的 OCM 反应网络如表 1 所示。

表 1 OCM 反应网络

序号	反应方程式
R1	$4\text{CH}_4 + \text{O}_2 \longrightarrow 2\text{C}_2\text{H}_6 + 2\text{H}_2\text{O}$
R2	$2\text{CH}_4 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$
R3	$3\text{CH}_4 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{C}_3\text{H}_8 + 2\text{H}_2\text{O}$
R4	$2\text{CH}_4 + 3\text{O}_2 \longrightarrow 2\text{CO} + 4\text{H}_2\text{O}$
R5	$\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \longrightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$

将复杂 OCM 反应网络转化成 5 个甲烷与氧气的平行反应后,每个方程式对应一种 OCM 关键产物,同时将碳二收率、碳二选择性等关键综合性反应性能指标,映射为各平行反应对应的甲烷选择性以提升 OCM 反应特征工程的科学性,建立的模型特征值见表 2 所示,为机器学习模型提供精准、适配的输入特征。

1.3 数据预处理

为消除不同变量的量纲差异对模型训练的干扰,提升模型的收敛速度和预测精度,保证数据的合

表 2 OCM 反应产物预测模型特征值

序号	输入变量	符号	输出变量	符号
1	水烷比	$n_{\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_4}$	甲烷转化率/%	X_{CH_4}
2	气体空速/($\text{mL}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$)	V_0	R1 的甲烷选择性/%	$S_{\text{CH}_4\text{-R1}}$
3	烷氧比	$n_{\text{CH}_4/\text{O}_2}$	R2 的甲烷选择性/%	$S_{\text{CH}_4\text{-R2}}$
4	反应温度/ $^{\circ}\text{C}$	T	R3 的甲烷选择性/%	$S_{\text{CH}_4\text{-R3}}$
5			R4 的甲烷选择性/%	$S_{\text{CH}_4\text{-R4}}$
6			R5 的甲烷选择性/%	$S_{\text{CH}_4\text{-R5}}$

理分布,对 751 组实验数据进行了系统性的预处理。首先对原始数据进行完整性与异常性校验。针对实验中可能因仪器波动、操作微小偏差导致的异常数据,采用 3σ 准则进行识别与剔除;计算各输入变量及输出变量的均值 μ 与标准差 σ ,将超出 $[\mu-3\sigma, \mu+3\sigma]$ 区间的样本判定为异常值,同时结合实验实际工况进行二次验证,最终剔除异常样本 5 组,保留有效样本 746 组用于后续分析。由于输入变量与输出变量的量纲及数值范围差异显著,容易导致模型对某部分变量敏感,因此采用 Min-Max 归一化方法对所有变量进行线性变换,将数据映射到 0~1 之间,该方法可在保留变量原始分布特征与相对关系的前提下消除量纲影响,同时提升模型训练的稳定性与收敛效率。

采用随机采样方式将预处理后的 746 组样本划分为训练集与测试验证集,其中训练集占比 80%,主要用于模型参数的拟合与训练,测试验证集占比 20%。划分过程中采用随机种子固定策略,确保数据集分布与原始数据一致,避免抽样偏差导致模型性能评估失真,为后续模型训练与性能验证提供公平、可靠的数据集基础。

1.4 SE-MLP 模型的建立

机器学习作为人工智能的重要分支,是一种通过算法使计算机从大量历史数据中学习模式和规律来实现自主决策和预测的方法。典型的算法包括多元线性回归、决策树回归、随机森林回归、支持向量回归、朴素贝叶斯法和神经网络等,而神经网络回归方法相较于其他算法,在处理大规模的非结构化数据时,具有自动适应性与强泛化能力,以及良好的高维建模能力等显著优势^[15-16]。

针对 OCM 反应条件与产物组成的多输入多输出非线性回归任务,本文中基于神经网络回归方法,构建了融合通道注意力机制的多层感知器(SE-MLP)作为预测模型,模型的原理见图 1 所示。

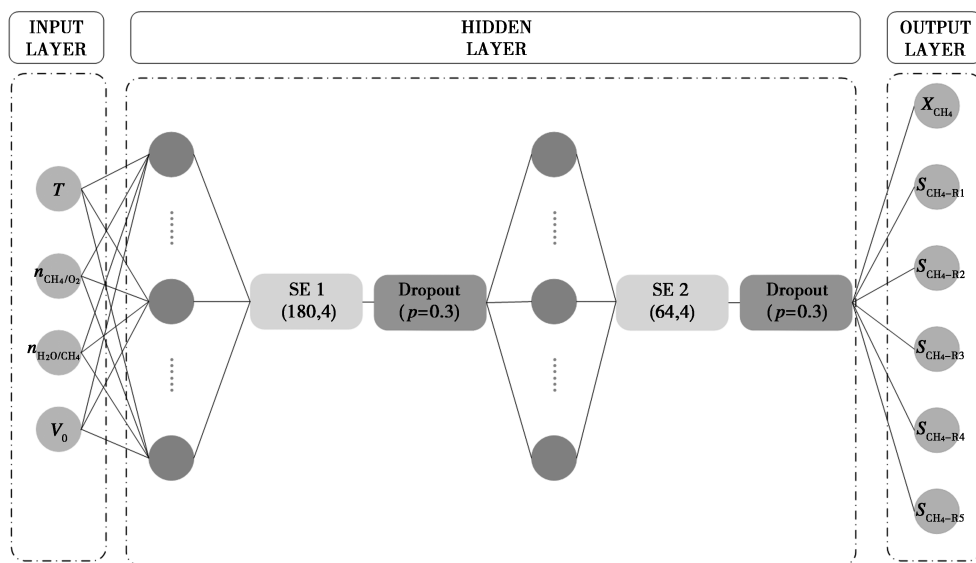


图 1 预测 OCM 产物的 SE-MLP 模型原理

该模型采用前馈神经网络作为基本架构,使用标准的三层网络结构,包含输入层、2 个隐藏层和输出层。输入层接收水烷比、反应空速、烷氧比、反应温度 4 个条件参数后,经过特征标准化处理后的输入向量首先进入第一隐藏层,通过全连接变换将低维输入映射到高维特征空间,特征在隐藏层通过激活函数 ReLU 函数引入非线性变换,同时,在每个隐藏层后引入 Dropout 层防止模型对特定神经元过度依赖,从而增加模型的泛化能力。最后输出层则采用线性激活函数,确保预测值的有效表示,全程保持维度适配与特征的递进。为了提升模型对关键输入特征的敏感度,本文中在隐藏层后集成了挤压-激励(squeeze-and-excitation, SE)注意力模块^[17],通过对输入特征进行压缩和激励,利用自适应学习各特征通道的重要性权重,实现对其的动态重新标定,来提高模型的表现能力,该机制能够使模型自适应地增强对输出结果即反应过程有重要影响的特征,抑制无关或冗余信息,从而提高特征利用效率,精准适配实验数据的内在规律。

为优化神经网络模型的训练过程并提高预测精度,综合考虑损失函数(Loss)在训练方向和结果上的影响,采用均方误差(MSE)、均方根误差(RMSE)、平均绝对误差(MAE)和决定系数(R^2)作为模型性能评价指标。MSE 和 RMSE 用于量化预测误差的绝对大小,MAE 反映绝对偏差均值, R^2 表征模型对反应数据规律的解释能力,越接近 1 说明拟合效果越优。各个指标的计算方法如式(1)~

(5)所示。

$$Loss = \sum_{i=1}^6 \alpha_i (1/n) \sum_{j=1}^n (y_j - \hat{y}_j)^2 \quad (1)$$

$$MSE = (1/n) \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (2)$$

$$RMSE = \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (3)$$

$$MAE = (1/n) \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (4)$$

$$R^2 = 1 - \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 / \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (5)$$

式中, α_i 为第 i 个输出变量的权重系数; y 、 $\hat{y}$ 、 $\bar{y}$ 分别为样本的真实值、预测值、平均值; n 为数据个数。

2 结果与分析

2.1 模型性能分析

在训练过程中,训练集和验证集的损失值(Loss)均随训练轮次增加呈现迅速持续下降直至最终平稳的趋势,在 100 轮次时两者均下降至 0.1 左右,在 100~300 轮区间,损失下降速度逐渐减缓,曲线斜率平缓变化,350 轮之后,2 条损失曲线均趋于平稳,最终训练损失稳定在 0.05,验证损失稳定在 0.01,两者差距保持在 0.03 以内,表明模型具有良好的泛化能力且未出现明显过拟合现象。模型验证集的平均决定系数(R^2)在训练初期从 0.41 快速上升至 0.87,在 50~200 轮期间,从 0.88 稳步提升至 0.95 左右,保持着稳定增长的趋势,最终,平均 R^2 稳定在 0.98 附近,波动幅度小于 0.005,说明模型已达到较高的预测精度水平并具备良好

的收敛稳定性。

对最优轮次回归模型 ($R^2 = 0.975\ 3$) 进行详细的性能评估,该轮次模型在验证集上表现出最佳的综合预测性能,为直观展示模型对 S_{CH_4} 、 $S_{\text{CH}_4\text{-R1}}$ 、 $S_{\text{CH}_4\text{-R2}}$ 、 $S_{\text{CH}_4\text{-R3}}$ 、 $S_{\text{CH}_4\text{-R4}}$ 和 $S_{\text{CH}_4\text{-R5}}$ 6 个输出变量的预测值与真实值(实验测量值)之间的相关关系,6 个输出变量的回归分析如图 2 所示。从整体回归分布来看,所有输出变量的预测值与真实值均呈现显著的

线性相关特征,数据点普遍紧密贴合 1:1 参考线。其中对于 $S_{\text{CH}_4\text{-R3}}$ 的拟合精度相对较小,对应丙烷生成反应的甲烷选择性在 6%~10% 之间预测效果较好,当真实值上升至 12%~14% 区间时,预测值的误差相对增大,但波动幅度仍控制在 $\pm 0.4\%$ 以内,无明显高估或低估的系统性偏差。并且 MAE 相对其他输出变量为最低,反映模型对该结果的预测误差被稳定控制在极小范围内。

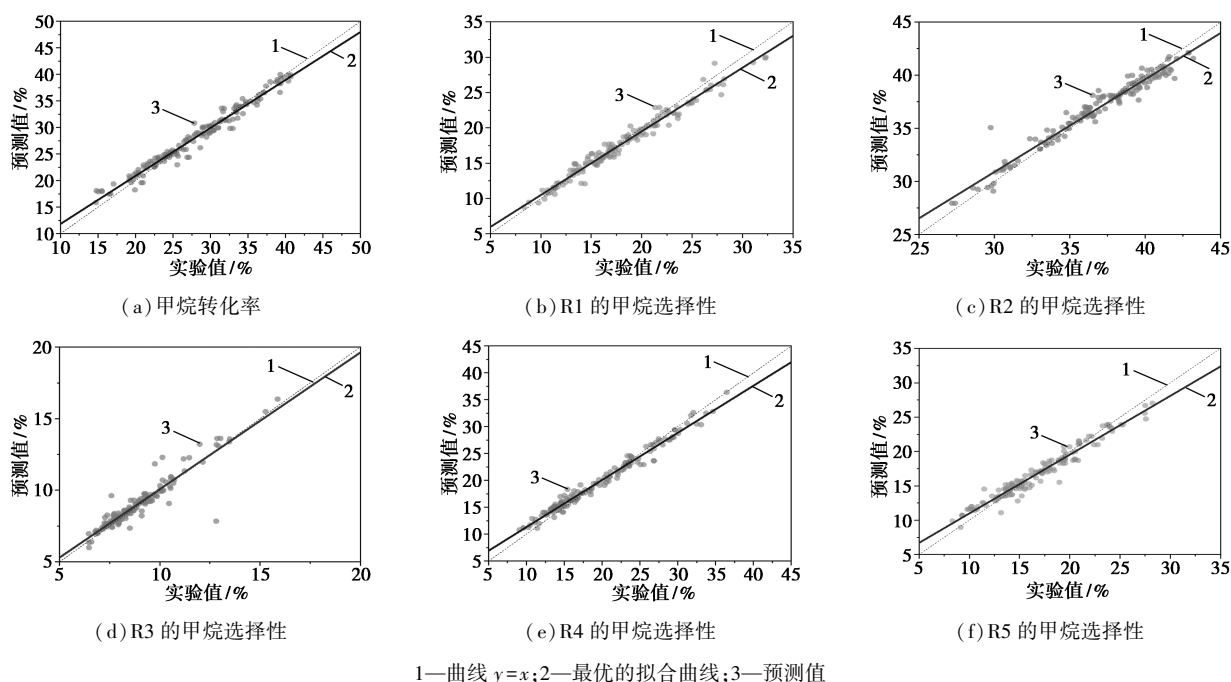


图 2 最优轮次模型 ($R^2 = 0.975\ 3$) 的输出变量回归分布

2.2 模型对比分析

为进一步评估本文中使用的 SE-MLP 模型性能,将其与 3 种经典机器学习模型进行了对比分析,包括决策树、支持向量机以及传统多层感知机,对比结果如表 3 所示。

表 3 不同机器学习模型性能对比

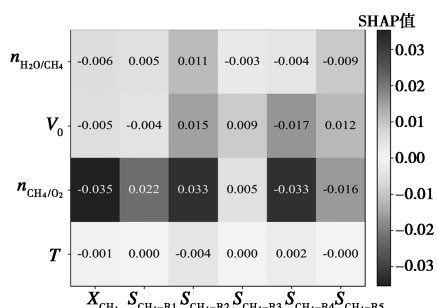
模型	MSE	RMSE	MAE	R^2
决策树	3.7363	1.8763	1.4366	0.7849
支持向量机	2.6078	1.5555	1.2962	0.8583
传统多层感知机	1.5475	1.2203	0.9186	0.9672
SE-MLP	0.9479	0.9554	0.7152	0.9753

从结果可以看出,构建的 SE-MLP 模型在所有评价指标上均展现出最佳性能,平均均方误差 MSE 相比决策树、支持向量机和传统多层感知机分别降低了 74.6%、63.6% 和 38.7%,这一显著的误差降低

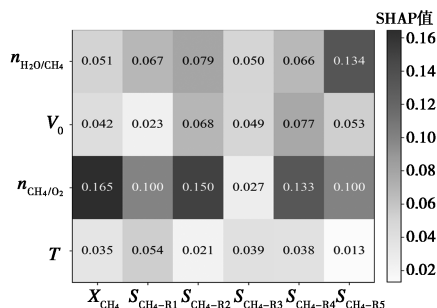
表明 SE-MLP 模型能够更精确地捕捉 OCM 反应条件与产物分布之间的复杂非线性关系。并且 RMSE 和 MAE 明显低于其他模型,表明其预测值更接近实验测量值,对异常值的敏感性更低,系统偏差更小。从预测精度角度来看,SE-MLP 模型的决定系数 R^2 较其他 3 个模型分别提升了 24.3%、13.6% 和 0.84%。传统多层感知机模型虽然已表现出较高的预测精度 ($R^2 = 0.967\ 2$),但 SE-MLP 模型通过集成注意力机制实现了进一步的性能提升,验证了注意力模块(SE)在特征选择方面的有效性;支持向量机模型在中等数据规模下拟合精度尚可 ($R^2 = 0.858\ 3$),但核函数选择和参数调优的复杂性限制了其灵活性;决策树模型由于结构简单,难以捕捉复杂非线性关系,在所有模型中表现最弱 ($R^2 = 0.784\ 9$)。因此,SE-MLP 在 OCM 反应产物预测任务中展现出了卓越的综合性能,预测精度和误差控制均显著优于对比模型。

2.3 模型可解释性分析

进一步地,基于 SHAP 法对最优轮次回归模型,分析 4 个输入特征对输出变量的非线性作用机制以提高所建立模型的可解释性,分析结果如图 3 所示。



(a) 平均 SHAP 值热图



(b) SHAP 值标准差热图

图 3 最优轮次模型 ($R^2=0.9753$) 的均值 SHAP 值热图

图 3(a) 为均值 SHAP 值热图,通过颜色梯度编码了 4 个输入特征对 6 个反应输出变量的平均 SHAP 值,其中暖色调(红色)表示正向影响,冷色调(蓝色)表示负向影响,颜色强度与影响程度呈正比。从热图的颜色梯度与 SHAP 值绝对值可知,进料烷氧比是所有输出变量的核心调控特征,其 SHAP 值范围为 $-0.035 \sim 0.033$,绝对值显著高于其他输入变量,表明烷氧比不仅对甲烷总转化率影响最大,也是调控产物选择性分布的关键参数,其中对甲烷总转化率呈现强负向影响,对 OCM 生成乙烯量则呈现强正向影响,与 OCM 的微反应器评价结果对应。图 3(b) 显示烷氧比 SHAP 值标准差在所有输入中最高,说明烷氧比不仅影响强度突出,且对不同样本的影响波动也最显著。其次为水烷比,结果显示水烷比对 OCM 生成乙烯量为正向影响,对各个输出的平均影响强度中等,同时对 OCM 生成二氧化碳量的影响波动最明显,对其他输出的波动相对平稳。反应空速对各个输出的平均影响强度仅次于进料烷氧比,并且影响波动也相对稳定;而反应温度对所有输出的平均 SHAP 值均接近 0,标准差也最小(均低

于 0.06),表明该特征对所有输出的平均影响与波动都比较弱。

3 结论与展望

以 Mn-Na-W-SiO₂ 催化剂在 $\phi 20$ mm 单管固定床反应器中进行 OCM 反应的产物分布的 751 组评价数据为基础,围绕 OCM 反应产物分布及甲烷转化性能的精准预测目标,构建并验证了集成通道注意力机制的多层感知机回归模型,通过系统性的模型训练、模型性能对比及可解释性分析,明确了 OCM 反应条件对产物指标的调控规律,构建的“数据+模型+可解释性”闭环验证体系既能提升机器学习模型的实用价值,又能为 OCM 工艺优化提供可靠支撑。

参考文献

- [1] 隋谨伊,吕晓东,肖冰,等.我国石化行业发展困境及“十五五”趋势展望[J].石油石化绿色低碳,2026,11(1):11-15.
- [2] 董雁春.我国乙烯产业链发展现状及对策建议[J].现代化工,2025,45(1):1-6.
- [3] Liu J, Yue J, Lv M, *et al.* From fundamentals to chemical engineering on oxidative coupling of methane for ethylene production: A review[J]. Carbon Resources Conversion, 2022, 5(1): 1-14.
- [4] 罗霞,余晓钟,辜穗,等.新质生产力驱动天然气产业高质量发展的作用机制、关键问题与路径研究[J].中国矿业,2026,35(2):74-88.
- [5] Ramos-Yataco J, Notestein J. Assessment of catalysts for oxidative coupling of methane and ethylene[J]. Catalysis Today, 2023, 416: 113770.
- [6] Cruellas A, Bakker J J, Van Sint Annaland M, *et al.* Techno-economic analysis of oxidative coupling of methane: Current state of the art and future perspectives[J]. Energy Conversion and Management, 2019, 198: 111789.
- [7] Wang Z, Li W, Wang S, *et al.* The future of catalysis: Applying graph neural networks for intelligent catalyst design[J]. WIREs Computational Molecular Science, 2025, 15(2): e70010.
- [8] Li Z, Zhao C, Wang H, *et al.* Interpreting chemisorption strength with AutoML-based feature deletion experiments[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2024, 121(12): e2320232121.
- [9] Pillai H S, Li Y, Wang S, *et al.* Interpretable design of Ir-free trimetallic electrocatalysts for ammonia oxidation with graph neural networks[J]. Nature Communications, 2023, 14(1): 792.
- [10] Ohyama J, Nishimura S, Takahashi K. Data driven determination of reaction conditions in oxidative coupling of methane via machine learning[J]. ChemCatChem, 2019, 11(17): 4307-4313.

(下转第 231 页)

系统的运行情况,利用 Aspen HYSYS 软件建立碳捕集全工艺流程模型,进行系统能耗分析。在此基础上单独对 MVR 解析系统建模,并采用单因素敏感性分析法对影响 MVR 解析过程和系统性能关键参数进行分析与优化,得到如下主要结论。

(1)对于烟气碳捕集工艺系统,MVR 解析系统(富液再生工艺单元)能耗占比最高,约占烟气碳捕集工艺过程总能耗的 83.77%,其次为烟气增压工艺单元,故 MVR 解析系统的节能效果对烟气碳捕集工艺过程能耗水平起到决定性作用。

(2)对于贫液碳负载,关键影响因素包括富液进塔温度、解析压力、闪蒸压力,二次蒸气终压影响较小;相应地,CO₂ 解析率的关键影响因素为富液进塔温度、解析压力、闪蒸压力,二次蒸气终压影响较小。

(3)对于单位再生能耗的影响,富液进塔温度、解析压力、闪蒸压力和二次蒸气压缩终压均有较大影响,提高富液进塔温度,适当地提高解析压力、降低闪蒸压力或采用常压闪蒸、降低二次蒸气终压,均有助于降低再生能耗。

参考文献

- [1] 陆诗建,张娟娟,刘玲,等.工业源二氧化碳捕集技术进展与发展趋势[J].现代化工,2022,42(11):59-64.
- [2] 俞苗,徐燕洁,方梦祥,等.基于压缩式热泵的 CO₂-MDEA/PZ 碳捕集工艺优化[J].洁净煤技术,2024,30(10):69-76.
- [3] 张天娇,刘欣,张青,等.基于 HYSYS 模拟的低浓度 CO₂ 捕集配方优选及参数优化[J].当代化工,2024,59(9):31-36.
- [4] Liu Z, Deng Z, Davis S, et al. Monitoring global carbon emissions in 2022[J]. Nat Rev Earth Env, 2023, 4(4): 205-206.
- [5] 张天娇,刘永铎,刘欣.新型双塔吸收半贫液脱碳工艺模拟与分析[J].低碳化学与化工,2025,50(10):142-148.
- [6] Wang S, Yu F, Yue G, et al. Novel NMBZA-based water-lean monophasic solvent enabling low-temperature and energy-efficient CO₂ capture[J]. Separation and Purification Technology, 2026, 388: 136735.
- [7] 盛荟霖,胡大鹏,魏炜.混合醇胺法吸收电厂烟气中 CO₂ 的性能研究[J].现代化工,2024,44(2):177-183,189.
- [8] 孟钦辉,陈斌,季腾辉,等.烟气 CO₂ 吸收捕集中试实验及工艺优化[J].化工进展,2025,2026,45(3):1788-1798.
- [9] 曹文浩,周明宇,周军,等.吸收法烟气二氧化碳捕集系统的工艺优化研究[J].现代化工,2025,45(3):249-253.
- [10] 张克利,刘欣,张天娇.低浓度二氧化碳捕集技术现状[J].当代化工,2025,54(3):1-7.
- [11] 张嘉伟,顾文波,张富龙.基于化学吸收法的二氧化碳捕集技术研究进展[J].低碳化学与化工,2023,48(4):96-106.
- [12] 徐达,樊俊杰,谭娜,等.MDEA-PZ 复配体系吸收电厂烟气中 CO₂ 的特性研究[J].电站系统工程,2024,40(5):1-4.
- [13] Fu L P, Ren Z K, Si W Z, et al. Research progress on CO₂ capture and utilization technology[J]. Journal of CO₂ Utilization, 2022, 66: 102260.
- [14] 韩冰,王子阳,田相峰,等.碳捕集系统集成 MVR 热泵节能工艺耦合优化[J].洁净煤技术,2023,29(4):121-128.
- [15] 魏炜,曾令梓,刘凤霞,等.混合醇胺捕集低浓度 CO₂ 性能研究[J].低碳化学与化工,2023,48(3):116-122.
- [16] 张天娇,刘欣,刘永铎,等.分流吸收-级间循环冷却耦合脱碳工艺研究[J].现代化工,2024,44(12):215-219.
- [17] 杨晋宁,王卫凡,徐冬,等.工业烟道气碳捕集膜技术放大研究进展[J].化工学报,2025,76(2):504-518. ■
- [11] Mine S, Takao M, Yamaguchi T, et al. Analysis of updated literature data up to 2019 on the oxidative coupling of methane using an extrapolative machine-learning method to identify novel catalysts[J]. ChemCatChem, 2021, 13(16): 3636-3655.
- [12] Nishimura S, Ohya J, Kinoshita T, et al. Revisiting machine learning predictions for oxidative coupling of methane (OCM) based on literature data[J]. ChemCatChem, 2020, 12(23): 5888-5892.
- [13] Nishimura S, Le S D, Miyazato I, et al. High throughput screening and literature data driven machine learning assisted investigation of multi component La₂O₃ based catalysts for the oxidative coupling of methane[J]. Catalysis Science & Technology, 2022, 12(9): 2766-2774.
- [14] Karakaya C, Kee R J. Progress in the direct catalytic conversion of methane to fuels and chemicals[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2016, 55: 60-97.
- [15] Breiman L. Random forests[J]. Machine Learning, 2001, 45(1): 5-32.
- [16] Donald F S. A general regression neural network[J]. IEEE Transactions on Neural Networks, 1991, 2(6): 568-576.
- [17] Hu J, Shen L, Sun G. 2018 IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition[C]. New York: IEEE, 2018: 7132-7141. ■

(上接第 225 页)

《现代化工》欢迎广大作者踊跃投稿,投稿系统: <http://www.xdhg.com.cn>