

工业技术

微通道聚氨酯合成的小样本建模与机理解析

张 静¹, 秦睦轩², 张 玮^{2*}

(1. 山西省工业管理学校, 山西 太原 030012; 2. 太原理工大学化学与化工学院, 山西 太原 030024)

摘要:针对聚氨酯微反应合成中因复杂机制与实验高成本导致的数据稀缺难题,提出一种基于Transformer架构的TabPFN通用小样本建模策略。不同于传统迁移学习对源域数据的依赖,该模型利用其预训练的通用推理能力,仅凭67个实验样本即构建了高精度预测模型(测试集 $R^2 > 0.95$, MAPE $< 3.45\%$)。对比实验表明,TabPFN不仅精度显著优于经贝叶斯优化的LightGBM及随机森林,建模效率更提升两个数量级(推理仅0.62秒)。结合SHAP可解释性分析,研究定量阐明了温度与催化剂的主导效应,并揭示了流速对混合的强化机制。该策略有效突破了微化工过程的数据瓶颈,为过程建模提供了高效通用的工具。

关键词:微反应器;建模;系统工程;可解释性分析

中图分类号:TP181;TQ052

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2026)10-0219-06

DOI:10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2026.10.036

Small-sample modeling and mechanistic analysis of microchannel-based polyurethane synthesis

ZHANG Jing¹, QIN Mu-xuan², ZHANG Wei^{2*}

(1. Shanxi Industrial Management School, Taiyuan 030012, China;

2. College of Chemistry and Chemical Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: To address the data scarcity challenge in microreactor-based polyurethane synthesis—caused by complex reaction mechanisms and high experimental costs—we propose a general few-shot modeling strategy based on the Transformer architecture, termed TabPFN. Unlike conventional transfer learning approaches that rely on source-domain data, this model leverages its pre-trained general inference capability to build a highly accurate predictive model using only 67 experimental samples (achieving $R^2 > 0.95$ and MAPE $< 3.45\%$ on the test set). Comparative experiments demonstrate that TabPFN not only significantly outperforms Bayesian-optimized Light GBM and Random Forest in prediction accuracy but also improves modeling efficiency by two orders of magnitude (inference time of only 0.62 seconds). Combined with SHAP interpretability analysis, this study quantitatively elucidates the dominant effects of temperature and catalyst, and reveals the flow-rate-enhanced mixing mechanism. This strategy effectively overcomes the data bottleneck in microchemical processes and provides an efficient, general-purpose tool for process modeling.

Key words: microreactor; modeling; systems engineering; explainable analysis

聚氨酯预聚体作为聚氨酯合成的关键前驱体,其结构与品质直接决定了最终材料的力学性能及化学稳定性^[1]。由于预聚反应属于典型的强放热过程,且伴随反应体系黏度的急剧增加,这对过程的传质混合均匀性及温度精确控制提出了严苛要求^[2]。然而,传统的间歇釜式反应器受限于传热传质效率低下、反应周期长及批次间稳定性差等固有缺陷,难以实现高品质聚氨酯预聚体的可控制备,严重制约了在高端领域的应用与发展^[3]。

为突破传统釜式工艺的局限,微反应器作为过程强化的核心装备,凭借极高的比表面积,展现出卓越的传热传质效率及对反应参数的精确控制能力,在聚氨酯连续化合成领域表现出巨大的应用潜

力^[4]。例如,Lopez等^[5]利用微反应器构建了聚氨酯快速合成平台,结合在线红外光谱技术实时监测单体转化率,成功实现了软硬段比例的精确调控及端基官能团的定点引入。此外,Siragusa等^[6]首次在连续流动微反应器中完成了CO₂基非异氰酸酯聚氨酯的制备,实现了该类绿色聚氨酯的高效连续合成。

尽管微反应器在实验层面取得了显著进展,但构建高精度的微反应器工艺模型对于充分挖掘其合成潜力仍具有重要意义^[7]。然而,微通道内的合成过程涉及复杂的反应动力学与传递机制耦合,且伴随剧烈的放热与黏度突变^[8]。虽然基于计算流体力学CFD的机理建模已被广泛应用于微化工过程

收稿日期:2025-11-26;修回日期:2026-07-31

基金项目:国家自然科学基金面上项目(22178241)

作者简介:张静(1976-),女,本科,高级讲师,研究方向为计算机应用,zj6616318@163.com;张玮(1973-),女,博士,教授,博士生导师,研究方向为智能化工,通讯联系人,zhangwei01@tyut.edu.cn。

分析,但面对此类复杂反应体系,该方法仍面临计算负荷沉重及关键动力学参数难以准确获取的挑战^[9]。另一方面,虽然机器学习等数据驱动方法为解决复杂非线性问题提供了新途径,但现有主流算法通常依赖海量样本进行训练以避免过拟合^[10]。受限于化工实验的高昂成本与长周期特征,微反应器实验数据往往呈现典型的小样本特性,严重制约了对聚氨酯预聚体合成工艺的快速理解与迭代优化^[11]。

针对上述数据稀缺的挑战,小样本机器学习策略在微反应器建模领域已得到初步应用^[12]。例如,Chang 等^[13]利用迁移学习将文献数据库中的知识转移至 T 型微混合器模型,有效提高了预测准确性;Qin 等^[14]通过元学习将传统反应器的知识应用于微反应器建模,仅利用 13 个数据点便建立了准确模型。然而,上述小样本学习策略依赖相关的源域数据以提供先验知识^[15]。对于微通道内的聚氨酯预聚体合成,不仅缺乏可用的同源数据,且传统釜式反应器与微通道之间存在巨大的数据维度差异。这种源域缺失的困境限制了迁移学习与元学习等现有策略的有效性,需要一种无需依赖特定源域数据的小样本建模方法。

针对上述源域数据缺失导致现有迁移策略失效的困境,需探索一种不依赖特定领域先验知识的通用小样本建模方法。近年来,基于 Transformer 架构的表格先验数据拟合网络(TabPFN)为解决这一难题提供了全新思路^[16]。与传统算法不同,TabPFN 在海量合成数据集上完成了预训练,具备通用的表格推理能力,使其能够在无需特定源域数据支持的情况下,直接对从未见过的小样本任务实现高精度预测^[17]。鉴于此,本研究将 TabPFN 引入聚氨酯预聚体微通道合成过程建模。基于 Huang 等^[18]的实验数据,本研究构建了包含溶剂用量及温度等关键变量的工艺预测模型,并与传统机器学习算法进行了对比,以验证 TabPFN 在化工小样本场景下的优越性。此外,研究结合 SHAP 可解释性分析方法,定量解析了各工艺参数对反应结果的影响机制,为微反应器的数字化设计与工艺优化提供理论指导。

1 方法论

1.1 数据集描述

本研究采用 Huang 等^[18]关于连续流微反应技术合成水性聚氨酯预聚体的实验数据作为建模基础。该实验针对传统釜式反应中传热传质效率低及

批次稳定性差等共性问题,利用微反应器极高的比表面积显著强化反应过程中的热质传递,从而实现**对强放热聚合反应的精确控制**。实验装置主要由精密柱塞泵、微混合器及串联微反应器模块组成,实验装置主要由精密柱塞泵、微混合器及串联微反应器模块组成,异佛尔酮二异氰酸酯与包含聚丙二醇、2,2-二羟甲基丙酸及 1,4-丁二醇的混合溶液在微通道内快速混合并进行逐步加聚反应。

为构建高精度的工艺预测模型,本研究从实验记录中筛选出 67 组有效样本。数据集涵盖了影响聚合反应动力学及产物特性的 6 个关键工艺参数作为输入特征变量。其中,溶剂用量(%)指溶剂在反应体系中的质量分数,用于调节体系黏度及溶解性以平衡流动阻力与反应速率;催化剂类型反映了化学结构对反应活性的本质影响;催化剂用量(%)直接决定反应速率常数;反应温度(℃)通过阿伦尼乌斯方程控制反应进程;停留时间(s)与总流速(mL/min)则共同调控反应程度与混合效率,体现了微反应器的流动特性。

模型输出为预聚体中 NCO 含量(%),通过二正丁胺滴定法测定,用于定量表征反应转化程度。如表 1 所示,NCO 含量范围为 3.17%~9.72%(均值 5.47%,标准差 2.26%),覆盖低至高转化率区间,具有良好的代表性与分布广度,为 TabPFN 在小样本条件下的高精度建模提供了可靠数据基础。

表 1 描述性统计数据

变量	最小值	最大值	均值	标准差
溶剂用量/%	20.00	40.00	20.75	3.29
催化剂用量/%	0.00	1.00	0.30	0.19
反应温度/℃	100.00	180.05	134.49	24.08
停留时间/s	43.50	262.00	64.27	47.08
总流速/(mL·min ⁻¹)	1.36	8.14	5.16	0.99
NCO 含量/%	3.17	9.72	5.47	2.26

1.2 TabPFN 建模策略

针对化工实验数据普遍存在的小样本与高维非线性特征,本研究采用了一种新型的表格基础模型 TabPFN(tabular prior-data fitted network)进行工艺预测建模。TabPFN 是一种基于 Transformer 架构的预训练大模型,颠覆了传统机器学习“先定义模型结构,再在特定数据集上迭代训练权重”的固有流程^[17]。该模型在包含数百万个合成数据集的庞大先验分布上完成了离线预训练,从而习得了通用的表格数据推理能力与贝叶斯推断模式。这种预训练

策略赋予了模型强大的先验知识,使其无需针对具体任务进行微调即可直接应用。

TabPFN 利用上下文学习机制处理下游任务。在推理阶段,模型将训练集中的样本作为上下文信息输入 Transformer 网络,通过多层自注意力机制捕捉特征与标签之间的复杂非线性关联,进而直接输出测试样本的预测分布。这一过程仅需一次前向传播即可完成,无需进行基于梯度的参数更新或烦琐的超参数寻优,极大地提高了建模效率,并有效避免了传统算法在小样本条件下容易陷入局部最优或过拟合的问题。

对于本研究中的聚氨酯微反应合成任务,TabPFN 展现出显著的适用性优势。首先,传统深度学习模型在仅有几十个样本的数据量下极易发生过拟合,而 TabPFN 通过在海量合成数据上的预训练引入了强大的归纳偏置,使其在小样本场景下能够逼近贝叶斯推理的理论最优解,从而保证了极高的泛化能力。其次,TabPFN 无需对分类变量进行独热编码或对数值变量进行标准化处理,能够直接处理包含溶剂用量及催化剂类型等混合属性的原始表格数据,保留了数据的完整语义信息,这对于包含离散型催化剂类型变量的本研究尤为重要。基于上述特性,TabPFN 有效克服了微反应器实验数据稀缺的瓶颈,为构建高精度、高可靠性的工艺模型提供了坚实的方法支撑。

1.3 模型验证

为客观评估 TabPFN 模型在小样本化工数据上的泛化性能,并有效避免因数据划分随机性导致的过拟合问题,本研究采用了严格的五折交叉验证策略。具体流程如下,首先将经过预处理的 67 组实验数据随机打乱,并按照 8:2 的比例均匀划分为 5 个互斥的子集。在每一轮验证过程中,依次选取其中 1 个子集作为测试集,其余 4 个子集作为训练集用于构建模型的上下文信息。该过程重复进行 5 次,直至所有子集均作为测试集被评估一次。最终的模型性能指标取 5 次验证结果的算术平均值,以消除单次数据划分可能引入的偏差。

在模型性能评价方面,本研究选取了决定系数 (coefficient of determination, R^2)、均方根误差 (root mean square error, RMSE)、平均绝对误差 (mean absolute error, MAE) 及平均绝对百分比误差 (mean absolute percentage error, MAPE) 作为综合评价指标。其中, R^2 用于表征模型对数据变异的解释能力,其值越接近 1 表明拟合效果越好;RMSE 与 MAE

用于量化预测值与真实值之间的绝对偏差,数值越小代表预测精度越高;MAPE 则反映了预测误差的相对程度,消除了量纲的影响。各指标的计算公式如式(1)~(4)所示:

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

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

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

$$\text{MAPE} = (1/n) \sum_{i=1}^n |(y_i - \hat{y}_i)/y_i| \times 100\% \quad (4)$$

式中, n 为测试样本数量; y_i 为第 i 个样本的 NCO 含量真实值; $\hat{y}_i$ 为模型预测值; $\bar{y}$ 为真实值的平均值。

通过上述多维度指标的综合考量,能够全面评估模型在微反应器工艺预测任务中的准确性与鲁棒性。

2 结果与讨论

2.1 TabPFN 模型预测性能

本研究采用五折交叉验证策略对 TabPFN 模型在聚氨酯预聚体微通道合成工艺预测任务中的性能进行了全面评估。表 2 详细列出了模型在训练集与测试集上的各项核心评价指标统计结果。

表 2 TabPFN 模型五折交叉验证性能统计

数据集	评价指标	平均值	标准差
训练集	R^2	0.9962	0.0026
	MAE	0.0601	0.0205
	RMSE	0.1265	0.0578
	MAPE	1.04%	0.32%
测试集	R^2	0.9528	0.043
	MAE	0.2143	0.0898
	RMSE	0.4321	0.2478
	MAPE	3.45%	1.29%

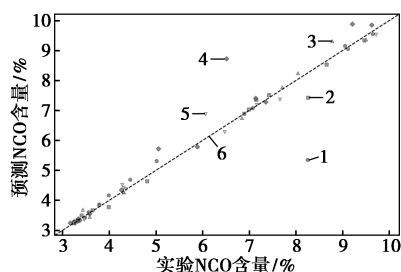
实验结果显示,TabPFN 在训练集上表现出极高的拟合精度,平均决定系数 R^2 达到 0.996 2,平均绝对百分比误差 MAPE 仅为 1.04%。这表明模型具备极强的特征提取能力,成功捕捉到了工艺参数与 NCO 含量之间复杂的非线性映射关系。

更关键的是,模型在测试集上仍保持优异泛化能力:平均 R^2 达 0.952 8,MAE 为 0.214 3。考虑到 NCO 含量实验范围为 3.17%~9.72%,该误差在工程上可接受。RMSE 为 0.432 1,略高于 MAE,暗示个别样本存在较大偏差,可能源于极端工况下的系

统波动或测量噪声,但整体仍处于较低水平,体现良好鲁棒性。

对比训练集与测试集的表现可以发现,两者的 R^2 差值仅为 0.043 4,且测试集 R^2 的标准差仅为 0.043 0。这一微小的性能衰减与极低的波动性充分证明了 TabPFN 模型并未发生传统小样本建模中常见的过拟合现象,在不同数据划分下均展现出良好的鲁棒性。

图 1 展示了模型在测试集上的预测值与真实实验值的散点分布情况。可以看出,绝大多数数据点紧密分布在对角线(完美预测线)附近,即使在 NCO 含量较低(3%~4%)或较高(8%~9%)的区间内,模型均未出现明显的系统性偏差。



1—折1;2—折2;3—折3;4—折4;5—折5;6—1:1线

图1 TabPFN 模型在测试集上预测值与真实值散点图

2.2 模型对比验证

为了全面评估 TabPFN 在化工小样本数据建模中的有效性与优越性,本研究选取了 5 种经典的机器学习算法作为对比基准,包括极端梯度提升树(extreme gradient boosting, XGBoost)、轻量级梯度提升机(light gradient boosting machine, LightGBM)、随机森林(random forest, RF),以及支持向量回归(support vector regression, SVR)和多层感知机(multi-layer perceptron, MLP)。

为确保公平性,所有基准模型均通过 Optuna 框架进行了严格的超参数寻优(如树深、学习率及隐藏层结构等),并对分类变量实施了序数编码^[19]。相比之下,TabPFN 凭借预训练特性,原生支持混合数据输入且无需烦琐调参,显著简化了建模流程。

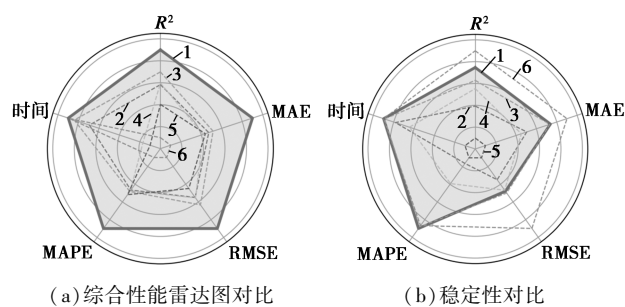
表 3 展示了不同模型在测试集上的性能对比结果。横向对比显示,在同等实验条件下,TabPFN 展现出了显著的性能优势,测试集平均决定系数 R^2 高达 0.952 8,显著优于经过精细调优的基准模型 LightGBM($R^2=0.921 4$)和随机森林($R^2=0.905 5$)。在误差控制方面,TabPFN 的均方根误差 RMSE 仅为 0.432 1,平均绝对百分比误差 MAPE 低至 3.45%,

而其他所有对比模型的 MAPE 均超过了 6%,其中 SVR 模型的误差最大,MAPE 达到 9.53%。这一结果表明,TabPFN 不仅在预测精度上大幅领先,更具备极高的可靠性,能够满足微反应器合成工艺对 NCO 含量精确预测的要求。

表3 不同模型预测性能对比(均值±标准差)

模型	R^2	MAE	RMSE	MAPE	运行时间/s
TabPFN	0.9528±0.0430	0.2143±0.0898	0.4321±0.2478	3.45%±1.29%	0.62±0.77
LightGBM	0.9214±0.0527	0.3667±0.0908	0.5950±0.2418	6.62%±1.32%	7.92±1.31
RF	0.9055±0.0589	0.4049±0.1345	0.6434±0.2513	6.68%±2.09%	92.04±16.74
XGBoost	0.9033±0.0721	0.3834±0.1262	0.6465±0.2862	6.74%±2.45%	26.48±8.08
MLP	0.8752±0.0962	0.3967±0.1896	0.7080±0.3590	6.35%±2.55%	100.92±51.15
SVR	0.8279±0.0304	0.5309±0.0644	0.9216±0.1243	9.53%±1.34%	1.50±0.68

为了更直观地评估各模型的综合效能,本研究构建了包含预测精度(R^2)、误差水平(MAE、RMSE、MAPE)及计算效率(时间)在内的多维评价体系。图 2 展示了各模型在均值性能与稳定性方面的雷达图对比。图 2 中各指标已进行归一化处理,数值越接近外圈代表性能越优或稳定性越好。



(a) 综合性能雷达图对比

(b) 稳定性对比

1—TabPFN;2—XGBoost;3—LightGBM;4—RF;5—MLP;6—SVR

图2 不同机器学习模型在预测精度、误差及运行效率方面的综合性能雷达图对比与稳定性对比

如图 2(a)所示,TabPFN 在 5 个评价维度上构成的多边形面积显著大于其他对比模型,这直观地反映了其在“精度-效率”平衡上的优势。特别是在计算效率维度上,得益于其无需迭代训练的一次前向传播机制,TabPFN 的平均运行耗时仅为 0.62 s。相比之下,为了获得最佳性能,MLP 和 RF 经历了漫

长的超参数搜索过程,耗时分别高达 100.92、92.04 s,效率相差 2 个数量级。这充分证明了 TabPFN 在实际化工过程中,能够以极低的时间成本提供高质量的预测模型。

图 2(b) 进一步展示了模型的稳定性(标准差)对比。图中数值越接近外圈代表标准差越小,即模型越稳定。结果显示,TabPFN 不仅在预测均值上表现优异,其在五折交叉验证中的性能波动也处于极低水平,尤其是在 R^2 和 MAPE 维度上表现出极高的鲁棒性。相比之下,XGBoost 和 MLP 模型受限于小样本数据的分布扰动,其性能标准差较大,这在实际化工应用中可能导致预测结果的不确定性增加。综上所述,TabPFN 在保证高精度、低误差的同时,兼具极快的推理速度与优异的稳定性,是聚氨酯预聚体微通道合成过程建模的最佳选择。

2.3 模型可解释性分析

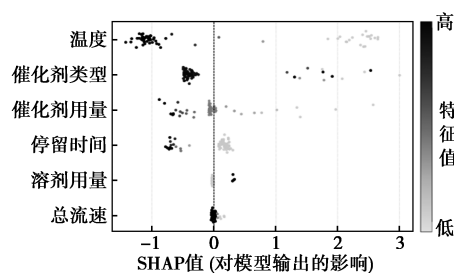
为了揭示 TabPFN 模型的决策机制并阐明各工艺参数对微通道内聚氨酯预聚体合成过程的具体影响,本研究引入了 SHAP 方法对模型进行后验分析。

图 3(a) 展示了各输入特征的 SHAP 值分布摘要图,其中特征按照其对模型输出的平均绝对影响(即特征重要性)从上至下排序。结果表明,温度是影响微反应器内 NCO 含量的最关键因素,其 SHAP 值分布范围最广,表明温度波动对反应进程具有决定性作用。图中灰度值较高点(高温值)主要集中在 SHAP 值的负区间,灰度值较高低点(低温值)则集中在正区间,这直观地反映了温度与 NCO

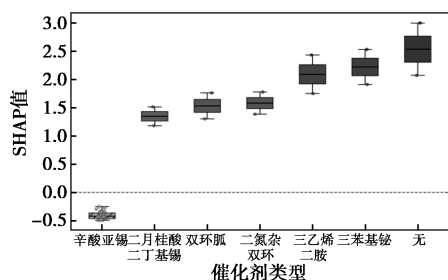
含量之间显著的负相关关系,即高温能显著加速反应速率,促进 NCO 基团的消耗,这完全符合阿伦尼乌斯方程所描述的温度与反应速率常数之间的指数关系。

催化剂类型重要性居次,说明其种类对反应活性的影响超过用量。图 3(b) 箱线图显示,辛酸亚锡催化剂的 SHAP 值中位数最低且多为负,表明其催化活性最强,能显著降低 NCO 残留;而无催化剂或低活性催化剂(如双环脲)则对应正 SHAP 值,导致更高 NCO 残留,验证了模型对催化剂构效关系的准确捕捉。此外,停留时间与催化剂用量均呈明显负相关:前者延长反应接触时间,后者降低活化能,均提升转化率。溶剂用量影响较弱但亦呈负相关,提示在保证流动性的前提下减少溶剂可提高反应物浓度,促进反应。

微反应器内的聚氨酯预聚体合成过程是一个传递-反应耦合的复杂系统,单一变量往往难以全面解释反应行为。图 4 展示了基于 SHAP 值的特征交互网络图,图中节点大小代表特征的主效应强度,连线粗细及颜色深浅则表征了特征间的交互作用强度。从网络拓扑结构可以看出,总流速与停留时间之间存在最强的交互连接,揭示了这 2 个参数在控制反应转化率时的协同机制。为了进一步解析这种耦合关系,图 5 展示了关键参数的 SHAP 依赖图。



(a) 全局特征 SHAP 值分布摘要图



(b) 催化剂类型对 NCO 含量的影响分布箱线图

图 3 基于 SHAP 方法的特征重要性分析

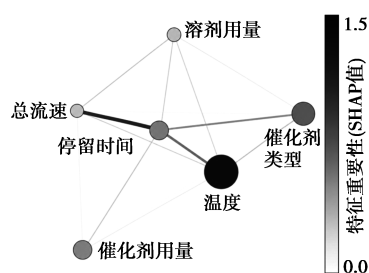
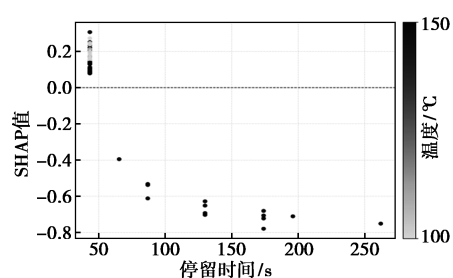
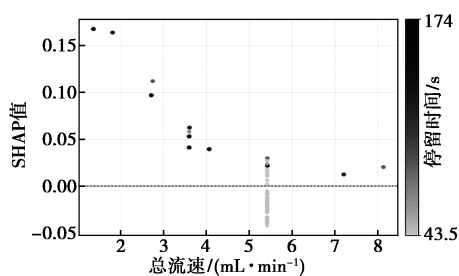


图 4 基于 SHAP 构建的工艺参数特征交互网络图

图 5(a) 描绘了停留时间与温度的交互依赖关系。随着停留时间的延长,SHAP 值初期快速下降,随后在约 150 s 处出现拐点并进入平台期。这一非线性趋势表明,在微反应器内前 150 s 是反应的主要发生阶段,超过此时间后,受限于单体浓度的降低及扩散限制,反应速率显著放缓。图中颜色映射进一步显示,在相同的较短停留时间下,高温(灰度值较高点)对应的 SHAP 值显著低于低温(灰度值较低点),说明高温能有效补偿停留时间的不足,加速反应达到平衡。这一结果为确定最佳工艺窗口提



(a) 停留时间与温度的协同影响图



(b) 总流速与停留时间的交互依赖图

图 5 关键工艺参数的 SHAP 非线性依赖与交互效应分析

供了直接依据,即在保证产品质量的前提下,将停留时间控制在 150 s 左右可实现生产效率与能耗的最优平衡。

图 5(b)展示了总流速与停留时间的交互效应。虽然流速本身对反应的直接化学影响较小,但其通过改变流体雷诺数影响微通道内的混合效率。交互图显示,在特定的停留时间窗口内,较高的流速往往对应更低的 SHAP 值(即更低的 NCO 残留),这佐证了高流速下微混合器内的强剪切作用能有效消除传质阻力,强化了反应物分子的微观混合,从而提升了反应效率。

3 结论

针对聚氨酯预聚体微通道合成过程中普遍面临的实验数据稀缺与反应机理复杂等挑战,本文中引入了基于 Transformer 架构的预训练通用表格模型 TabPFN,成功构建了无需特定源域数据支持的高精度工艺预测模型。研究表明,TabPFN 能够有效捕捉溶剂用量、催化剂类型及温度等关键工艺参数与产物 NCO 含量之间复杂的非线性映射关系,克服了传统深度学习模型在小样本条件下易过拟合的固有缺陷,验证了该方法在微化工数据建模中的适用性。

在模型性能对比方面,TabPFN 展现出了卓越的预测精度与计算效率。在仅利用 67 组实验样本的情况下,该模型在测试集上的 R^2 达到 0.952 8,

MAPE 仅为 3.45%,显著优于经过贝叶斯超参数优化的 LightGBM、XGBoost 及随机森林等传统机器学习算法。更为关键的是,得益于独特的预训练机制,TabPFN 无需进行烦琐的迭代训练与超参数寻优,推理耗时仅为 0.62 s,相比传统算法效率提升了 2 个数量级,展现了在实际化工过程建模中“精度-效率”平衡优势。

此外,结合 SHAP 可解释性分析方法,本研究深入揭示了微反应器内的多物理场耦合机制。定量分析表明,反应温度与催化剂类型是影响反应进程的主导因素;特征交互分析进一步证实了高流速通过强化微观混合与传质效率进而促进反应的协同机制,并识别出停留时间在 150 s 附近存在反应速率拐点。这一发现不仅验证了模型的物理一致性,更为确定最佳工艺窗口、实现聚氨酯预聚体的高效连续化合成提供了明确的理论指导。综上所述,TabPFN 为解决微化工领域的小样本建模难题提供了一种强有力的通用型工具,对于推动微反应器的数字化设计与智能制造具有重要意义。

参考文献

- [1] Liu L, Zhang X, Li X, *et al.* Study on effect of boric acid on the stability of 1,5-naphthalene diisocyanate-based prepolymer and properties of the elastomers therefrom[J]. *Materials Today Chemistry*, 2025, 44: 102578.
- [2] Carratt G M, Shervin C R, Soong D S. Experimental study and computer simulation of a two-stage continuous polymerization process for the production of methyl methacrylate[J]. *Polymer Engineering & Science*, 1984, 24(6): 442-454.
- [3] Zhang Z, Li T, Dong Y, *et al.* Unusual phenomena of ethylene homopolymerization catalyzed by α -diimine nickel emerging in a microflow platform[J]. *RSC Advances*, 2025, 15(8): 5801-5807.
- [4] Chang Y, Xing Y, Shang Q, *et al.* High time-resolution and data-driven kinetic modeling of cumene autoxidation based on a microreactor system[J]. *AIChE Journal*, 2025, 71(9): e18873.
- [5] Lopez de Pariza X, Erdmann T, Arrechea P L, *et al.* Synthesis of tailored segmented polyurethanes utilizing continuous-flow reactors and real-time process monitoring[J]. *Chemistry of Materials*, 2021, 33(20): 7986-7993.
- [6] Siragusa F, Crane L, Stiermet P, *et al.* Continuous flow synthesis of functional isocyanate-free poly(oxazolidone)s by step-growth polymerization[J]. *ACS Macro Letters*, 2024, 13(5): 644-650.
- [7] Pistikopoulos E N, Tian Y. Advanced modeling and optimization strategies for process synthesis[J]. *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*, 2024, 15(1): 81-103.
- [8] Ma H, Zhao Q, Yao C, *et al.* Effect of fluid viscosities on the liquid-liquid slug flow and pressure drop in a rectangular microreactor[J]. *Chemical Engineering Science*, 2021, 241: 116697.

(下转第 231 页)

13. 76%和 44. 76%,这也使得整个乙酸生产工艺的年总费用降低了 7. 60%和 31. 57%,这说明了这 2 种改造方法都是从降低公用工程费用的角度来降低年总费用,并且换热网络效果更好。本研究为工业上甲醇羰基化生产乙酸的流程进行流程优化提供了理论基础和技术方案,未来可以在这项研究的基础上结合废液处理技术完善整体的生产流程,或者结合可再生能源和其他的节能技术进一步降低能源的损耗。

参考文献

- [1] Tezel Özge, Beyler Çiğil Aşlı, Kahraman M V. Encapsulation of trichloroacetic acid and trifluoroacetic acid for autonomous self healing coatings[J]. *Polymer-Plastics Technology and Materials*, 2020, 59(18): 2040–2049.
- [2] Kalck P, Le Berre C, Serp P. Recent advances in the methanol carbonylation reaction into acetic acid[J]. *Coordination Chemistry Reviews*, 2020, 402: 213078.
- [3] 邱文高. 乙醛氧化制醋酸[J]. *金山油化纤*, 1987, (2): 26–28, 68.
- [4] 袁媛, 徐佩若, 朱志华. 乙烯直接氧化制乙酸的研究 II. Mo 氧化物对催化剂性能的影响[J]. *华东理工大学学报*, 2000, (2): 130–133.
- [5] Lopez-Sanchez J A, Tanner R, Collier P, *et al.* Acetic acid stability in the presence of oxygen over vanadium phosphate catalysts: Comments on the design of catalysts for the selective oxidation of ethane[J]. *Applied Catalysis A: General*, 2019, 226(1/2): 323–327.
- [6] 李凤娟. 甲醇羰基化生产醋酸技术分析[J]. *现代盐化工*, 2023, 50(1): 4–6.
- [7] Wang W X, Yang Q Y, Xu H B, *et al.* Effects of separation sequences on the reactive distillation coupled with extractive distillation under different pressures[J]. *Chemical Engineering Science*, 2024, 300: 120604.
- [8] Xu Z Y, Wang R Z, Yang C. Perspectives for low-temperature waste heat recovery[J]. *Energy*, 2019, 176: 1037–1043.
- [9] Markowski M, Trafczynski M, Kisielski P. The dynamic model of a rectification heat exchanger using the concept of heat-integrated distillation column[J]. *Energy*, 2022, 256: 124622.
- [10] Labidi J, Paris J, Le Goff P. A new concept in gas-fired heat pump reversed rectification heat pump[J]. *Renewable Energy*, 1994, 5(5/6/7/8): 1235–1239.
- [11] 刘佳男, 李宗衡, 李智, 等. 醋酸乙烯的热泵精馏工艺模拟[J]. *现代化工*, 2021, 41(1): 215–218.
- [12] Yang D M, Wan D H, Yun Y, *et al.* Energy-saving distillation process for mixed trichlorobenzene based on ORC coupled MVR heat pump technology[J]. *Energy*, 2022, 262: 125565.
- [13] 黄良德, 童张法, 金庸, 等. 低含水量乙酸废液分离过程的模拟与能耗-经济性分析[J]. *华东理工大学学报: 自然科学版*, 2025, 51(4): 468–475.
- [14] Matsuda K, Hirochi Y, Tatsumi H, *et al.* Applying heat integration total site based pinch technology to a large industrial area in Japan to further improve performance of highly efficient process plants[J]. *Energy*, 2009, 34(10): 1687–1692.
- [15] Aleksandar A. Design of common heat exchanger network for batch processes[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2014, 65(1/2): 458–468.
- [16] Linnhoff B, Hindmarsh E. The pinch design method for heat exchanger networks[J]. *Chemical Engineering Science*, 1983, 38(5): 745–763.
- [17] 叶启亮, 赵成辉, 孙浩, 等. 乙腈法抽提丁二烯流程模拟与优化[J]. *现代化工*, 2023, 43(12): 204–208, 212. ■
- (上接第 224 页)
- [9] Jurtz N, Kraume M, Wehinger G D. Advances in fixed-bed reactor modeling using particle-resolved computational fluid dynamics (CFD)[J]. *Reviews in Chemical Engineering*, 2019, 35(2): 139–190.
- [10] Li Y, Cao H, Wang X, *et al.* A new correlation-similarity conjoint algorithm for developing encoder-decoder based deep learning multi-step prediction model of chemical process[J]. *Chemical Engineering Science*, 2024, 288: 119748.
- [11] Xu X, Kang Q, Zhang W, *et al.* An FPM-DM hybrid model for yield prediction of gas-liquid micro-sulfonation[J]. *Chemical Engineering Science*, 2025, 312: 121670.
- [12] Chang Y, Shang Q, Yan Z, *et al.* Data-driven models for microfluidics: A short review[J]. *Biomicrofluidics*, 2024, 18(6): 061503.
- [13] Chang Y, Sheng L, Wang J, *et al.* A general neural network model co-driven by mechanism and data for the reliable design of gas-liquid T-junction microdevices[J]. *Lab on a Chip*, 2023, 23(22): 4888–4900.
- [14] Qin M, Liu Y, Wang M, *et al.* Meta-learning driven low-data multi-objective optimization of microchannel gas-liquid sulfonation[J]. *Chemical Engineering Science*, 2025, 320: 122379.
- [15] Peng Y, Wang L. Heterogeneity-aware transfer learning for high-dimensional linear regression models[J]. *Computational Statistics & Data Analysis*, 2025, 206: 108129.
- [16] Wang H, Pei J, Yan F, *et al.* Application of TabPFN model on the energy performance improvement of high-power multistage centrifugal pump[J]. *Energy*, 2025, 336: 138399.
- [17] Hollmann N, Müller S, Purucker L, *et al.* Accurate predictions on small data with a tabular foundation model[J]. *Nature*, 2025, 637(8045): 319–326.
- [18] Huang W, Chen X, Lv Q, *et al.* Rapid preparation of waterborne polyurethane dispersions using continuous-flow microreaction technology[J]. *Reaction Chemistry & Engineering*, 2025, 10: 1326–1336.
- [19] Choooplou C A, Balahang S, Ghodsian M, *et al.* Predicting scour depth in the presence of aprons using XGBoost-Optuna[J]. *Applied Soft Computing*, 2025, 184: 113766. ■