

多向梯度孔径反应载体的结构主动设计

郑天清*, 邱泓桑, 詹友基, 徐继璇, 章蒙蒙, 王江江, 李棒棒

(福建理工大学机械与汽车工程学院福建省智能加工技术及装备重点实验室, 福建 福州 350118)

摘要: [目的] 探究隐式三角函数参数与多孔反应载体孔径大小之间的内在关系, 实现具有多向梯度孔径的反应载体结构主动设计, 进而为应用于传质传热和制氢反应的多孔反应载体的多向梯度孔径设计奠定基础. [方法] 在经典隐式三角函数的基础上, 解析其中与孔径大小相关的参数, 并建立该参数与坐标位置之间的关联, 开展梯度孔径反应载体的结构设计; 同时通过变参数的方法, 分析新型隐式三角函数参数的改变对多孔反应载体孔径梯度的影响; 利用多孔反应载体孔径梯度与其对应的隐式三角函数参数训练 BP 神经网络, 建立多孔反应载体孔径梯度与隐式三角函数参数之间的映射关系, 进而实现孔径梯度的主动设计. [结果] I-WP 型隐式三角函数可获得具有较高比表面积的多孔反应载体. 在此基础上, 通过建立隐式三角函数参数 C 与坐标位置之间的关联, 实现了多向梯度孔径反应载体的结构设计. 基于 BP 神经网络, 实现了多孔反应载体的孔径梯度主动调控, 其中, 隐式三角函数参数 A (用于调控载体的孔径大小及孔径梯度) 的预测误差率在 2%~14%, 参数 T (用于辅助调控载体的孔径大小) 的预测误差率在 0.1%~2%. [结论] 隐式三角函数可实现多向梯度孔径反应载体的结构设计, BP 神经网络可实现多孔反应载体的孔径梯度主动设计.

关键词: 反应载体; 主动设计; 梯度孔径; 隐式三角函数; 神经网络

中图分类号: TH 12

文献标志码: A

文章编号: 0438-0479(2025)02-0327-09

Active structural design of reaction support with multi-directional gradient pore-sizes

ZHENG Tianqing*, QIU Hongsang, ZHAN Youji, XU Jixuan,
ZHANG Mengmeng, WANG Jiangjiang, LI Bangbang

(Fujian Key Laboratory of Intelligent Machining Technology and Equipment, School of Mechanical & Automotive Engineering Fujian University of Technology, Fuzhou 350118 China)

Abstract: [Objective] The relationship between parameters of implicit trigonometric function and the pore-sizes size of porous reaction support is explored, and the active design of the structure of reaction support with multi-directional gradient pore-sizes is accomplished. Consequently, we have laid a design foundation for the study of the influence of the gradient pore-sizes of porous reaction support on the mass and heat transfer capacity and the pore-sizes gradient of porous reaction support with high hydrogen production performance. [Methods] Four classical implicit trigonometric functions are used to build the porous reaction support. The implicit trigonometric function, which can help build the reaction support with high specific surface area, is selected with the multi-directional gradient pore-sizes. Based on the function, its parameters related to the pore-size are analyzed, and the correlation between these parameters and the coordinate position is established to carry out the structural design of the reaction support with gradient pore-sizes. Meanwhile, the influence, related to the change of parameters imbedded in the new implicit trigonometric function, on the

收稿日期: 2024-10-31 录用日期: 2025-02-09

基金项目: 福建省自然科学基金(2024J01825); 福建建省中青年教育科研项目(JAT220219); 福建理工大学科研启动金项目(GY-Z220200); 福建省财政厅 2023 年科技专项资金(GY-Z23274)

* 通信作者: zhengtianqing886@163.com

引文格式: 郑天清, 邱泓桑, 詹友基, 等. 多向梯度孔径反应载体的结构主动设计[J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2025, 64(2): 327-335.

Citation: ZHENG T Q, QIU H S, ZHAN Y J, et al. Active structural design of reaction support with multi-directional gradient pore-sizes[J]. J Xiamen Univ Nat Sci, 2025, 64(2): 327-335. (in Chinese)



pore-sizes gradient of the porous reaction support is analyzed by the method of variable parameters. Furthermore, BP neural network is used to build a mathematical model of the influence of pore-sizes gradient of porous reaction support on the selection of parameters of the implicit trigonometric function. As a result, we can predict these parameters of the implicit trigonometric function required by the porous reaction support with a specific pore-sizes gradient. Then, based on these predicted parameters of implicit trigonometric function, the structure of reaction support with gradient pore-sizes is constructed, and the active design of pore-sizes gradient of the support is attained. [Results] Specific surface areas of porous reaction supports, which are constructed using four classic implicit trigonometric functions, are 18.640, 20.185, 15.564, and 22.407 mm^2/mm^3 , respectively. Due to the I-WP type reaction support with a larger specific surface area, they are selected to achieve the structural design of reaction support with multi-directional gradient pore-sizes. Parameters A and T , which are taken from parameter C , are main regulatory parameters of the pore size gradient of the reaction support. In the study of the influence of pore size gradient of reaction support on parameters of implicit trigonometric function, it is found that, as the pore size gradient of support increases in all directions, the corresponding parameter A of implicit trigonometric function shows an upward trend. In the porous reaction support with pore size gradient in X direction, the increase of the gradient rate of the support induces the increase of parameter T of implicit trigonometric function. Regarding the support with pore size gradient in Y or Z direction, the increase of the gradient rate of the support induces the decrease of parameter T of the function. Then, for the support with pore size gradient in XY or XZ two-directions, the increase of the gradient rate in X direction of the support induces the increase of parameter T of the function. Also, for the support with pore size gradient in XY or XZ two-directions, the increase of the gradient rate in Y or Z direction of the support induces the decrease of parameter T of the function. Finally, regarding the support with pore size gradient in XYZ three-directions, the increase of the gradient rate in X or Y or Z direction of the support induces the decrease of parameter T of the function. [Conclusion] I-WP type implicit trigonometric function can help obtain the reaction support with a larger specific surface area, and it can achieve the structural design of reaction support with multi-directional gradient pore-sizes by building the correlation between its parameter C and the coordinate position. Parameters A and T , which are taken from parameter C , are the main regulatory parameters of the pore size gradient of the reaction support. And parameter A has a significant impact on the pore size gradient. BP neural network can construct a mathematical model of the influence of pore size gradient of reaction support on the selection of the parameters of implicit trigonometric function. In this way, the active design of pore-sizes gradient of porous reaction support can be accomplished.

Keywords: reaction support; active design; gradient pore-sizes; implicit trigonometric function; neural network

氢能作为高效清洁的二次能源,在未来的能源行业发展中扮演着重要角色^[1-2].当前制氢技术作为氢能研究的重要内容,受到了国内外学者们的广泛关注.微反应器由于具有传热传质能力强,可快速集成放大,安全性高等优点,微反应器制氢技术已成为制氢技术研究的重要发展方向^[3-4].

当前制氢微反应器研究主要集中在微反应器及其反应载体的设计制造、催化剂的制备工艺等方面^[5-7].其中,反应载体作为负载制氢催化剂的结构体与微反应器内的主要传热传质媒介,是制氢微反应器的核心元件.在反应载体的研究上,由于多孔反应载体的梯度孔径可以调控载体内部流体的流动分布,提高载体的传质传热能力,受到学者们^[8-10]的广泛关注与研究.如Liu等^[10]研究泡沫铜反应载体上复合孔阵列对其制氢性能的影响,研究表明,在反应载体上复合具有梯度孔径分布的孔阵列,有利于提高反应载体内部的反应物分布均匀性,进而提高反应载体的制氢性能.综上可知,目前关于梯度孔径反应载体的研究主要关注多孔结构体单向孔径梯度对其相

关性能的影响,在多孔结构体多向孔径梯度对其相关性能的影响缺乏研究.因此,本文开展多向梯度孔径反应载体的结构主动设计研究,为掌握多孔反应载体的多向孔径梯度对其相关性能的影响奠定结构设计基础.

隐式函数 $F(x, y, z) = 0$ 可定义空间中的一个边界或曲面,因此,隐式函数能够区分结构体的固体部分和孔隙部分.例如,设定阈值 0,当 $F(x, y, z) < 0$ 表示孔隙部分, $F(x, y, z) > 0$ 表示固体部分.隐式三角函数将三角函数(如正弦、余弦)引入到隐式函数中,这样可利用三角函数的周期性和连续性来建模一些具有周期性或对称性的多孔结构体.目前已有不少学者通过隐式三角函数构建复杂多孔结构体^[11-14].如石志良等^[12]基于隐式三角函数构建多孔单元,并通过探究隐式三角函数的幅度因子和阈值对孔隙形状和孔隙率的影响,实现对多孔单元孔径以及孔隙率大小的控制.鉴于隐式三角函数在多孔结构体上的构造优势,本文以隐式三角函数为基础,开展梯度孔径反应载体结构的构建.

神经网络具有强大的数据拟合能力,能够学习到数据间的内在联系,从而可反向求取特定输出参数所对应的输入参数^[15-18].如谢延敏等^[17]以成形件的成形效果为输入,以拉伸筋几何参数为输出,建立拉伸筋参数的反求模型,实现对成形件成形效果的主动调控.为此,本文以隐式三角函数与 BP 神经网络为基础,进一步开展多向梯度孔径反应载体的结构主动设计研究.

1 梯度孔径主动设计方法

首先选用 4 种经典隐式三角函数开展均匀多孔反应载体的结构设计,确定具有较大比表面积均匀多孔反应载体结构及其隐式三角函数.接着,探究隐式三角函数中影响多孔反应载体孔径大小的主要参数.在此基础上,建立该孔径调控参数与空间坐标位置的关联,从而构建梯度孔径反应载体.进一步,利用 BP 神经网络构建反映孔径梯度与隐式三角函数参数关系的数学模型,从而预测特定孔径梯度所需的隐式三角函数参数,进而利用所预测的隐式三角函数参数构建孔径梯度反应载体结构,实现多孔反应载体孔径梯度的主动设计.

1.1 均匀孔径的隐式三角函数

隐式三角函数 $\varphi(x, y, z) = C$ 表示标准值为常数的隐式三角函数等值面.可通过改变隐式三角函数中的 C 值来改变多孔结构体的孔径大小.本文选用 4 种经典的隐式三角函数^[19-21]开展多孔结构体的构建研究,4 种经典隐式三角函数及其所对应的模型名称如表 1 所示.

表 1 4 种经典隐式三角函数及其所对应的模型名称

Tab.1 Four classic implicit trigonometric functions and their corresponding model names

模型名称	隐式三角函数
螺旋二十四面体(Gyroid)	$\varphi(x, y, z) = \sin(\pi x)\cos(\pi y) + \sin(\pi y)\cos(\pi z) + \sin(\pi z)\cos(\pi x) + C$
钻石立方型(Diamond)	$\varphi(x, y, z) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)\sin(\pi z) + \sin(\pi x)\cos(\pi y)\cos(\pi z) + \cos(\pi x)\sin(\pi y)\cos(\pi z) + \cos(\pi x)\cos(\pi y)\sin(\pi z) + C$
简单立方型(Primitive)	$\varphi(x, y, z) = \cos(\pi x) + \cos(\pi y) + \cos(\pi z) + C$
包装型(I-WP)	$\varphi(x, y, z) = \cos(\pi x)\cos(\pi y) + \cos(\pi y)\cos(\pi z) + \cos(\pi z)\cos(\pi x) + C$

利用犀牛软件(Rhinoceros 7.4, Robert McNeel & Assoc 公司,美国)中的 Grasshopper 插件进行基于隐式三角函数的多孔结构体结构设计建模.控制模型的外型尺寸为 $2\text{ mm} \times 2\text{ mm} \times 2\text{ mm}$,且各模型的最小孔径为 0.5 mm ,通过测量模型的表面积及体积以计算各模型的比表面积.

1.2 梯度孔径的隐式三角函数

为实现梯度多孔反应载体的结构设计,需在隐式三角函数的基础上建立 C 值与相应梯度方向坐标值之间的关联.将 C 值转换成一元一次函数或多元一次函数 $\mathbf{A}\mathbf{X} + T$, $\mathbf{X} = (x, y, z)^T$, $\mathbf{A} = (A_1, A_2, A_3)$ 为系数矩阵,用于调控载体的孔径大小及孔径梯度, T 用于辅助调控载体的孔径大小.以 I-WP 型反应载体为例,不同梯度孔径反应载体的隐式三角函数如表 2 所示.由于 X 方向孔径梯度是反应物在反应载体的流动前进方向,因此, X 方向为非对称梯度,而 Y 与 Z 方向孔径梯度为反应物在反应载体内容的流动扩散方向,因此 Y 与 Z 方向为对称梯度(图 1).基于此, X 向的隐式三角函数如表 2 中第 3 行所示; Y 、 Z 单向梯度孔径使用表 2 第 4 行所示的隐式三角函数, Z 向将表 2 第 4 行隐式三角函数的 x 、 y 对调即可, XY 与 XZ 双向同理.

表 2 不同梯度孔径反应载体模型所对应的隐式三角函数

Tab.2 Implicit trigonometric functions corresponding to different gradient pore-sizes reaction support models

梯度方向	隐式三角函数
无	$\varphi(r) = \cos(\pi x)\cos(\pi y) + \cos(\pi y)\cos(\pi z) + \cos(\pi z)\cos(\pi x) + T$
X 向	$\varphi(r) = \cos(\pi x)\cos(\pi y) + \cos(\pi y)\cos(\pi z) + \cos(\pi z)\cos(\pi x) + A_1x + T$
$Y(Z)$ 向	$\varphi(r) = \cos(\pi x)\cos(\pi y) + \cos(\pi y)\cos(\pi z) + \cos(\pi z)\cos(\pi x) + A_1 y + T$
$XY(XZ)$ 双向	$\varphi(r) = \cos(\pi x)\cos(\pi y) + \cos(\pi y)\cos(\pi z) + \cos(\pi z)\cos(\pi x) + A_1x + A_2 y + T$
YZ 双向	$\varphi(r) = \cos(\pi x)\cos(\pi y) + \cos(\pi y)\cos(\pi z) + \cos(\pi z)\cos(\pi x) + A_2 y + A_3 z + T$
三向	$\varphi(r) = \cos(\pi x)\cos(\pi y) + \cos(\pi y)\cos(\pi z) + \cos(\pi z)\cos(\pi x) + A_1x + A_2 y + A_3 z + T$

梯度多孔反应载体的结构设计基本步骤为:① 选定构建梯度多孔反应载体的隐式三角函数;② 确定所建模型的外形尺寸及所含晶胞个数,并在犀牛软件的 Grasshopper 插件中进行相关参数的设定;③ 通过 Grasshopper 插件中的内置插件生成梯度多孔反应载

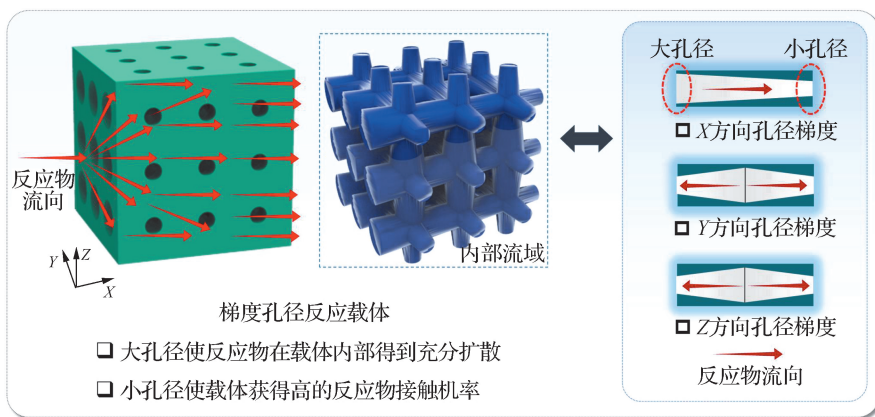


图1 梯度孔径反应载体的结构

Fig. 1 The structure of gradient pore size reaction support

体的网格模型;④ 对所生成的载体网格模型进行柔化、增厚、等比缩放等处理;⑤ 将网格模型导出,并完成网格与曲面的转换,完成建模。

建模过程中确保所构建不同梯度孔径反应载体

模型的梯度率为 1.5%、模型总孔隙率为 68.50%、模型尺寸为 16 mm×16 mm×16 mm. 根据多孔结构体的反应需求,以 I-WP 型反应载体为例,不同梯度孔径反应载体模型如表 3 所示。

表 3 不同梯度孔径反应载体模型

Tab. 3 Reaction support models with different gradient pore size

梯度方向	无	X 单向	Y(Z)单向	XY(XZ)双向	YZ 双向	XYZ 三向
模型						

1.3 隐式三角函数参数与孔径梯度的映射数据库的构建

多孔反应载体模型的孔径梯度为

$$t = M - N, \tag{1}$$

其中: t 为模型的孔径梯度; M 为模型前截取处的孔隙率; N 为模型后截取处的孔隙率. 对于 X 向的孔径梯度, M 代表模型在 X 轴方向 0 至 1/4 部分的孔隙率, N 代表模型在 X 轴 3/4 至 1 部分的孔隙率;对于 Y 或 Z 向的孔径梯度, M 代表模型在 Y 或 Z 轴方向 1/2 至 3/4 部分的孔隙率, N 代表模型在 Y 或 Z 轴方 3/4 至 1 部分的孔隙率。

映射关系类型一:保持隐式三角函数参数中的 A 值或 T 值不变,通过改变函数中的另一个参数(T 值或 A 值),获取相应的载体模型并计算孔径梯度。

映射关系类型二:保持梯度孔径反应载体前截

取处模型的孔隙率为 68.00% 不变,通过改变隐式三角函数参数,获取具有特定孔径梯度的多孔反应载体,并记录此时载体对应的隐式三角函数参数值。

最终获取 1 220 组数据. 隐式三角函数参数 A 、 T 的取值区间如表 4 所示. 将 1 220 组数据中 1 200 组作为训练数据,20 组作为验证数据。

1.4 梯度孔径反应载体的结构参数主动设计

以反应载体模型前截取处的孔隙率及模型孔径梯度作为梯度孔径反应载体的结构参数,且作为训练数据中的输入数据;以 A 、 T 作为隐式三角函数的参数,且作为训练数据中的输出数据. 通过训练数据与 BP 神经网络构建梯度孔径反应载体结构参数与隐式三角函数参数的映射关系,进而精准预测特定孔径梯度的反应载体所需的隐式三角函数参数. 本文研究所用的 BP 神经网络来自 MATLAB 2018b(MathWorks 公司,美国)软件中 Neural Net Fitting 工具箱。

隐式三角函数参数预测误差率计算式为

表 4 不同梯度孔径反应载体所对应的隐式三角函数参数 A 、 T 取值Tab. 4 The implicit trigonometric function parameters A and T values corresponding to different gradient pore-sizes reaction supports

梯度方向	参数 A 取值区间			参数 A 取值间隔	参数 T 取值区间	参数 T 取值间隔
	A_1	A_2	A_3			
无	Null	Null	Null	Null	0.200~0.900	0.001
X 向	0.02~0.07	Null	Null	0.01	0.400~0.730	0.002
Y(Z) 向	0.03~0.08	Null	Null	0.01	0.400~0.730	0.002
XY(XZ) 双向	0.04~0.08	0.14~0.08	Null	0.01	0.320~0.426	0.002
YZ 双向	Null	0.04~0.08	0.04~0.08	0.01	0.480~0.526	0.002
XYZ 三向	0.08~0.11	0.04~0.07	0.04~0.07	0.01	0.420~0.460	0.002

$$E = \left(\frac{P-F}{F} \right) \times 100\%, \quad (2)$$

式中, E 为误差率, P 为神经网络的预测值, F 为被预测数据的实际值。

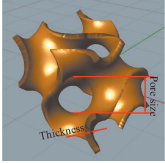
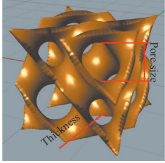
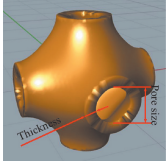
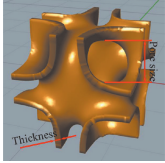
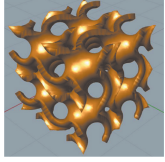
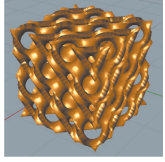
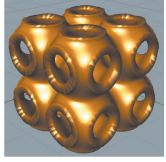
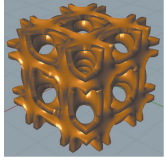
2 实验及结果分析

2.1 隐式三角函数类型选择

表 5 为 4 种经典隐式三角函数所构造的反应载体

表 5 4 种经典隐式三角函数所构造的反应载体模型及比表面积

Tab. 5 Reaction support models constructed by four classic implicit trigonometric functions and their specific surface area

模型	Gyroid	Diamond	Primitive	I-WP
晶胞模型 (尺寸: 1 mm×1 mm×1 mm)				
整体模型 (尺寸: 2 mm×2 mm×2 mm)				
比表面积(mm ² /mm ³)	18.640	20.185	15.564	22.407

2.2 隐式三角函数参数与孔径梯度的映射数据库

2.2.1 映射数据库类型一

图 2 为隐式三角函数参数 A 对 I-WP 型反应载体孔径梯度的影响趋势。由图 2 可知, 在隐式三角函数参数 T 为 0.500 时, 随着函数参数 A 的增大, X 单向梯度孔径反应载体的孔径梯度呈整体下降的趋势, $Y(Z)$ 单向梯度孔径反应载体的孔径梯度呈正增长的

模型及比表面积, 由表 5 可知, 相比于其他隐式三角函数, I-WP 型隐式三角函数所构造多孔反应载体模型具有较高的比表面积, 在模型外型尺寸为 2 mm×2 mm×2 mm 时, 其比表面积为 22.407 mm²/mm³。多孔反应载体具有高比表面积, 可使其拥有更高的传质传热能力以及更高的催化剂负载面积, 进而使其具有更高的制氢性能。因此本文的后序实验均选择 I-WP 型隐式三角函数。

趋势; 随着函数参数 $A(A_1$ 与 $A_2)$ 的增大, XY 、 XZ 、 YZ 双向梯度孔径反应载体的孔径梯度呈上升的趋势; 随着函数参数 $A(A_1$ 、 A_2 与 $A_3)$ 的增大, XYZ 三向梯度孔径反应载体的孔径梯度呈上升的趋势。

图 3 为隐式三角函数参数 T 对 I-WP 型反应载体孔径梯度的影响趋势。由图 3 可知, 在隐式三角函数参数 A 为 0.04 时, 随着函数参数 T 的增大, 各向梯度孔径反应载体的孔径梯度均呈上升趋势。

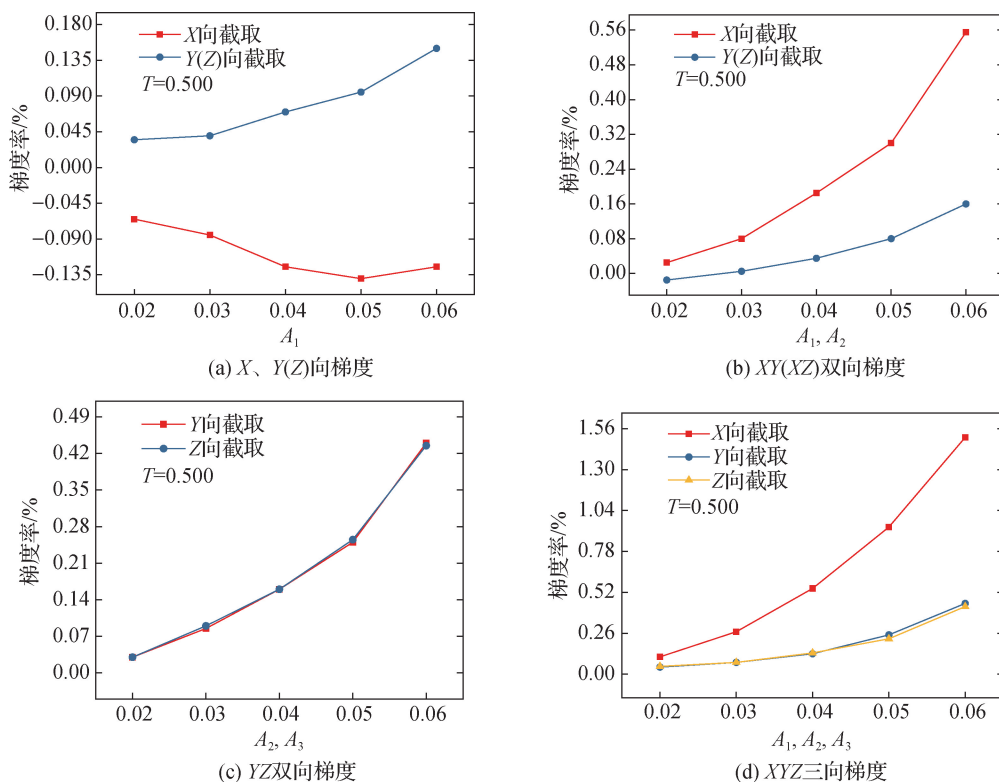


图 2 隐式三角函数参数 A 对 I-WP 型反应载体孔径梯度的影响趋势

Fig. 2 The influence trend of implicit trigonometric function parameter A on the pore size gradient of I-WP type reaction supports

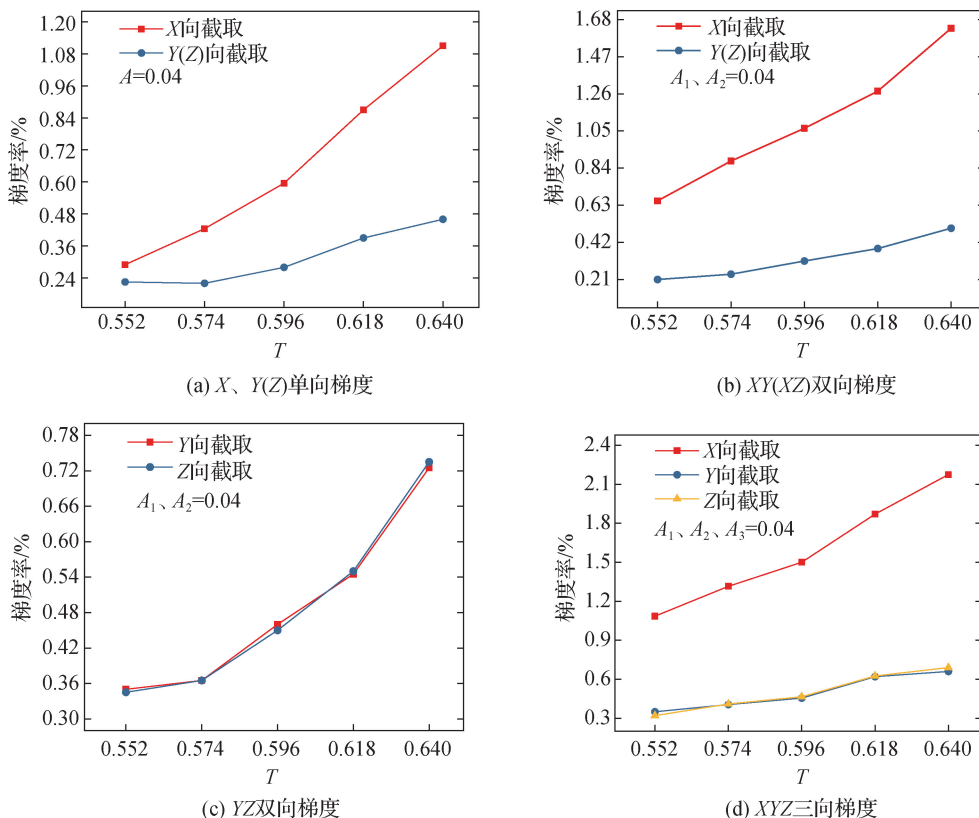


图 3 隐式三角函数参数 T 对 I-WP 型反应载体孔径梯度的影响趋势

Fig. 3 The influence trend of implicit trigonometric function parameter T on the pore size gradient of I-WP type reaction supports

2.2.2 映射数据库类型二

图 4 展示了 I-WP 型反应载体梯度率对建模参数 A 的影响趋势. 由图 4 可知,在梯度孔径反应载体前截

取处模型孔隙率为 68.00% 时,随着梯度孔径反应载体各向孔径梯度的增大,相对应的隐式三角函数参数 A 均呈上升趋势.

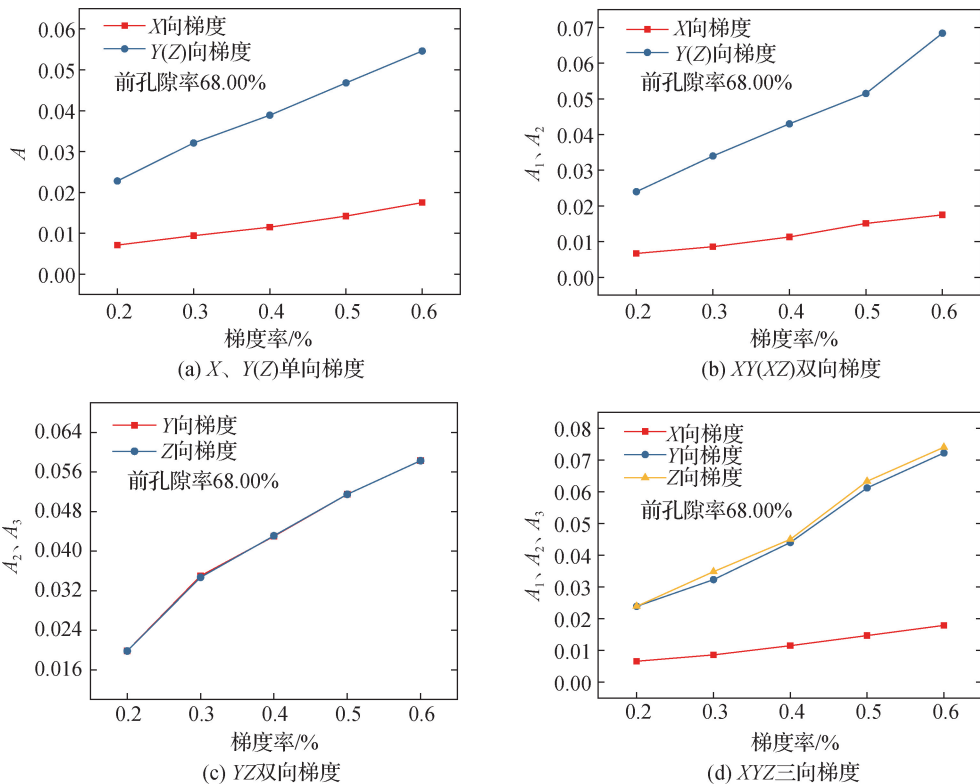


图 4 I-WP 型反应载体孔径梯度对隐式三角函数参数 A 的影响趋势

Fig. 4 The influence trend of pore size gradient of I-WP type reaction support on implicit trigonometric function parameter A

图 5 展示了 I-WP 型反应载体孔径梯度对建模参数 T 的影响趋势. 由图 5 可知,在梯度孔径反应载体前截取处模型孔隙率为 68.00% 时,随着梯度孔径反应载体 X 单向孔径梯度的增大,相对应的隐式三角函数的 T 值呈现上降趋势. 随着单向梯度孔径反应载体 Y 或 Z 向孔径梯度的增大,相对应的隐式三角函数的 T 值呈现下降趋势. 随着 XY(XZ) 双向梯度孔径反应载体中 X 向孔径梯度的增大,相对应的隐式三角函数的 T 值呈现上升趋势. 随着 XY(XZ) 双向梯度孔径反应载体中 Y 或 Z 向孔径梯度的增大,相对应的隐式三角函数的 T 值呈现下降趋势. 随着 YZ 双向梯度孔径反应载体中 Y 或 Z 向孔径梯度的增大,相对应的隐式三角函数的 T 值呈现下降趋势. 随着三向梯度孔径反应载体中 X 或 Y 或 Z 向孔径梯度的增大,相对应的隐式三角函数的 T 值呈现下降趋势.

6 可知, BP 神经网络的主动预测结果中, 隐式三角函数参数 A 的预测误差率较大, 误差率在 0.9%~14%; 隐式三角函数参数 T 的预测误差率较小, 误差率在 0.1%~2%. 综上可知, 通过 BP 神经网络可较为精确地预测具有特定孔径梯度的 I-WP 型反应载体所需的隐式三角函数参数, 尤其是双向和三向梯度孔径的预测, 具有较高的准确率, 误差率在 6% 以下, 这可能与双向、三向梯度具有更多的数据信息有关, 或许后期可以考虑将比表面积引入数据库, 增加模型约束, 提高神经网络的预测准确率.

2.3 BP 神经网络的预测性能

表 6 为 BP 神经网络对特定孔径梯度的 I-WP 型反应载体的隐式三角函数参数的主动预测结果. 由表

3 结 论

本研究提出了一种基于隐式三角函数的多向梯度孔径反应载体的结构主动设计方法. 在 4 种经典隐式三角函数的基础上, 选择了具有较高比表面积的 I-WP 型结构作为梯度孔径反应载体的研究对象, 通过对其隐式三角函数的改变, 实现了多向梯度孔径反应载体的结构设计. 此外, 探究了各向梯度孔径反应载

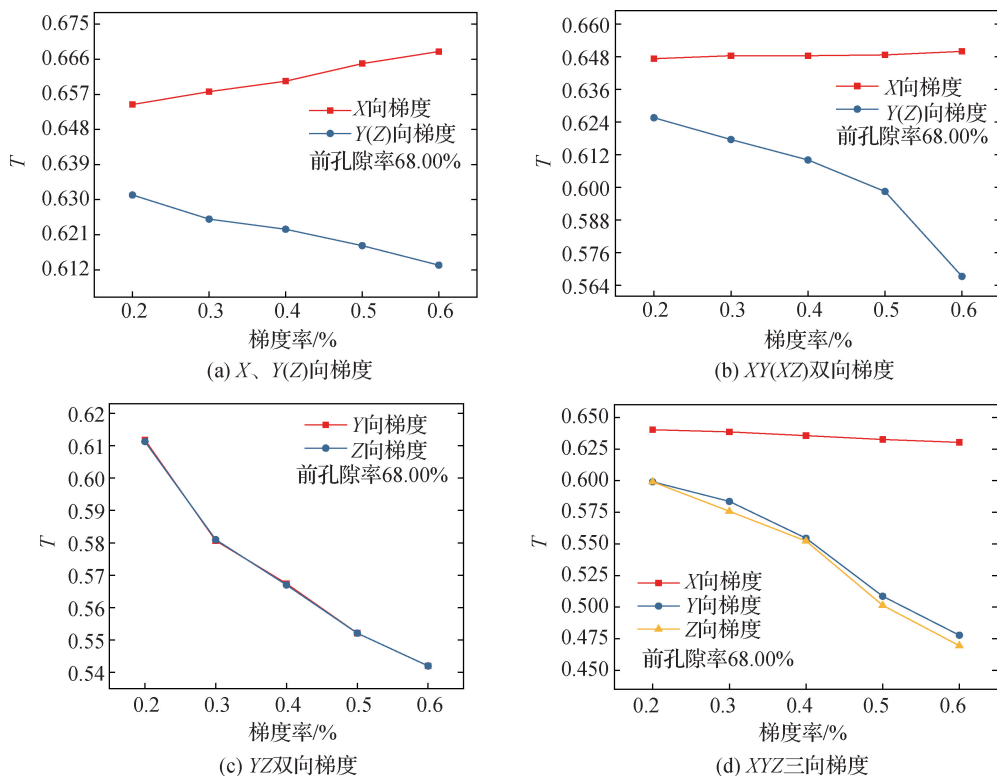


图 5 I-WP 型反应载体孔径梯度对隐式三角函数参数 T 的影响趋势

Fig. 5 The influence trend of pore size gradient of I-WP type reaction support on implicit trigonometric function parameter T

表 6 具有特定孔径梯度的 I-WP 型反应载体所需的隐式三角函数参数主动预测结果

Tab. 6 Active prediction results of implicit trigonometric function parameters required for I-WP type reaction supports with specific pore size gradients

梯度方向	误差率/%			
	参数 A_1	参数 A_2	参数 A_3	参数 T
无	Null	Null	Null	0.120
X 向	13.080	Null	Null	1.740
Y(Z) 向	13.335	Null	Null	1.795
XY(XZ) 双向	3.085	2.735	Null	1.090
YZ 双向	Null	3.275	4.890	0.715
XYZ 三向	0.960	5.345	4.135	0.895

体建模参数与梯度率的关系. 研究得出, 参数 A 、 T 作为载体孔径梯度的主要调控参数, 参数 A 对孔径梯度影响较为显著. 在此基础上, 引入 BP 神经网络构建孔径梯度与隐式三角函数参数的映射关系, 实现了梯度孔径反应载体的主动设计. 其中, 隐式三角函数参数 A 的预测误差率在 0.9%~14%, 参数 T 的预测误差率在 0.1%~2%. 本研究为当前梯度孔径反应载体的主动设计研究提供了一种新思路, 对多孔模型的设计制

造与应用具有参考价值.

参考文献:

[1] 张庆生, 黄雪松. 国内外氢能产业政策与技术经济性分析[J]. 低碳化学与化工, 2023, 48(2): 133-139.

[2] 周文强, 程载哲, 蓝国钧, 等. 甲醇蒸汽重整制氢催化剂的研究进展(上)[J]. 石油化工, 2022, 51(1): 73-82.

[3] 王勤, 赵青, 吴荣生, 等. Cu 基和 Pd 基甲醇水蒸气重整制氢催化剂研究进展[J]. 现代化工, 2019, 39(6): 50-53.

[4] 詹友基, 邱泓桑, 郑天清. 有序多孔不锈钢催化剂主动负载工艺及制氢性能[J]. 石油化工, 2023, 52(11): 1489-1496.

[5] ZHOU W, KE Y Z, WANG Q H, et al. Development of cylindrical laminated methanol steam reforming microreactor with cascading metal foams as catalyst support[J]. Fuel, 2017, 191: 46-53.

[6] ZENG D H, PAN M Q, WANG L M, et al. Fabrication and characteristics of cube-post microreactors for methanol steam reforming[J]. Applied Energy, 2012, 91(1): 208-213.

[7] 周伟, 李新颖, 钟雨晨, 等. 甲醇重整制氢微反应器的研究进展[J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2021, 60(3): 598-613.

[8] 李佳阳, 陈宝明, 云和明, 等. 具有梯度孔隙率的多孔介质

- 封闭方腔内的自然对流[J]. 洁净与空调技术, 2020(1): 11-16.
- [9] 李松, 司天誉, 梁可丞, 等. 基于定制孔隙的多孔介质反应流热质传递研究[J]. 工程热物理学报, 2023, 44(10): 2849-2854.
- [10] LIU Y X, ZHOU W, LIN Y, et al. Novel copper foam with ordered hole arrays as catalyst support for methanol steam reforming microreactor[J]. Applied Energy, 2019, 246:24-37.
- [11] LIU H Y, MEI D Q, QIAN S Y, et al. Vat photopolymerization of polymer-derived SiC ceramic with triply period minimal surface structure for hydrogen production[J]. Additive Manufacturing, 2023, 73:103694.
- [12] 石志良, 王伟, 高杰. 变形三周期极小曲面多孔结构参数化设计[J]. 计算机辅助设计与图形学学报, 2022, 34(6):970-976.
- [13] KUMAR J, VERMA R, SINGH N K, et al. Mechanical property analysis of triply periodic minimal surface inspired porous scaffold for bone applications: a compromise between desired mechanical strength and additive manufacturability [J]. Journal of Materials Engineering and Performance, 2023, 32(7):3335-3347.
- [14] WANG S F, JIANG Y, HU J B, et al. Efficient representation and optimization of TPMS-based porous structures for 3D heat dissipation[J]. Computer-Aided Design, 2022, 142:103123.
- [15] 熊文韬, 刘泓滨, 李华文. 基于 PSO-BP 和灰色关联度分析的盒形件成形工艺参数反求[J]. 锻压装备与制造技术, 2016, 51(3):86-90.
- [16] 韩利芬, 高晖, 李光耀, 等. 神经网络与遗传算法在拉延筋参数反求中的应用[J]. 机械工程学报, 2005, 41(5): 171-176.
- [17] 谢延敏, 王新宝, 王智, 等. 基于灰色理论和 GA-BP 的拉延筋参数反求[J]. 机械工程学报, 2013, 49(4):44-50.
- [18] 刘立君, 姜亚青, 王晓鹏, 等. 激光熔凝参数 BP 神经网络的反求[J]. 哈尔滨理工大学学报, 2017, 22(3):112-116.
- [19] MASKERY I, AREMU A O, PARRY L, et al. Effective design and simulation of surface-based lattice structures featuring volume fraction and cell type grading [J]. Materials & Design, 2018, 155:220-232.
- [20] 雷鸿源, 李静蓉, 徐志佳, 等. 孔隙表征参数驱动的 TPMS 多孔结构建模[J]. 计算机辅助设计与图形学学报, 2020, 32(1):156-163, 172.
- [21] 曾寿金, 刘广, 李传生, 等. 基于 SLM 的股骨柄多孔结构设计力学性能分析[J]. 中国激光, 2022, 49(2): 174-187.

(责任编辑:任滢滢)