

DOI: 10.11949/0438-1157.

基于深度学习的连续结晶形貌表征与表观生长动力学分析

李强, 张相洋

(华东理工大学化学工程与低碳技术全国重点实验室, 上海 200237)

摘要: 面向连续结晶中产品形貌表征难的问题, 提出基于轻量化深度学习的表观动力学分析方法。引入视觉基础大模型SAM3辅助预标注, 利用轻量化网络(YOLO26m-seg)对晶体图像进行实例分割(单张耗时约17 ms), 结合图像二阶矩提取形貌特征。以库埃特-泰勒连续结晶器内双氰胺结晶过程为研究对象, 结果表明在稳态工况下产品 D_{50} 为117.0 μm , 并基于双判据方法识别出约2.9%的可疑团聚体。建立二维表观动力学模型, 量化双氰胺长短轴表观生长速率比(1.75), 讨论了强剪切流场对传质边界层的非对称影响。为连续结晶产品质量控制提供算法支撑。

关键词: 连续结晶; 深度学习; 实例分割; 晶体形貌

中图分类号: TQ 026.5

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (XXXX) XX-0001-11

Lightweight deep learning-based shape characterization and apparent growth kinetics analysis in continuous crystallization

LI Qiang, ZHANG Xiangyang

(State Key Laboratory of Chemical Engineering and Low-carbon Technology, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: To address the challenge of characterizing product habits in continuous crystallization, an apparent kinetic analysis method based on lightweight deep learning is proposed. A vision foundation model (SAM3) was introduced for auxiliary pre-labeling, and a lightweight network (YOLO26m-seg) was utilized for the instance segmentation of crystal images, achieving a processing speed of approximately 17 ms per frame. Morphological features were then extracted using image second-order moments. Using the continuous crystallization of dicyandiamide in a Couette-Taylor crystallizer as a case study, the median particle size (D_{50}) under steady-state conditions was determined to be 117.0 μm , and approximately 2.9% of suspicious agglomerates were identified based on a dual criterion. Furthermore, a two-dimensional apparent kinetic model was established to quantify the apparent growth rate ratio of the major to minor axes of dicyandiamide (1.75), and the asymmetrical effect of the strong shear flow field on the mass transfer boundary layer was discussed. This study provides algorithmic support for the quality control of continuous crystallization products.

Keywords: continuous crystallization; deep learning; instance segmentation; crystal habits

收稿日期: 2026-06-11 修回日期: 2026-07-08

通信作者: 张相洋(1981—), 男, 博士, 教授, zxydcom@ecust.edu.cn

第一作者: 李强(2001—), 男, 博士研究生, shaun.liqiang@outlook.com

基金项目: 上海市自然科学基金项目(23ZR1417100)

引用本文: 李强, 张相洋. 基于深度学习的连续结晶形貌表征与表观生长动力学分析[J]. 化工学报, XXXX, XX(X): 1–11

Citation: LI Qiang, ZHANG Xiangyang. Lightweight deep learning-based shape characterization and apparent growth kinetics analysis in continuous crystallization[J]. CIESC Journal, XXXX, XX(X): 1–11

引 言

相较于传统间歇结晶,连续结晶在生产效率、产品一致性和过程稳定性等方面具有显著优势,已成为精细化工与制药领域的重要发展方向^[1-4]。晶体粒度分布(CSD)、长径比等形貌参数是影响产品质量与下游加工性能的关键指标,其精准表征与稳定调控对于实现连续结晶过程的高效运行具有重要意义^[5-7]。目前,晶体形貌表征方法主要包括离线检测、在线监测及基于图像的分析手段^[8]。离线分析虽具有较高精度,但在连续结晶体系中存在明显的时间滞后,难以满足过程实时调控需求^[9]。在线监测技术(如FBRM、PVM等)虽可实现原位检测,但通常依赖专用设备和侵入式探头,不仅硬件成本高昂,且探头的插入极易破坏连续结晶器内微观流场结构,从而影响真实的结晶动力学环境,对体系适配性及操作条件要求较高^[10-12]。相比之下,基于图像的分析方法因具有信息直观、数据获取灵活等优势,仍旧是晶体形貌定量表征的重要手段^[13,14]。传统图像处理方法多依赖阈值分割,在晶体粘连、重叠及复杂背景条件下分割精度有限,同时在大规模图像数据处理过程中面临效率与鲁棒性不足的问题,制约了其在连续结晶中的进一步应用^[15]。

近年来,深度学习技术逐步应用于图像识别与分割领域,为解决传统图像处理方法在复杂场景下分割精度不足的问题提供了新的技术路径^[16-18]。然而,深度学习在连续结晶过程落地中面临两大挑战:一是高质量实例分割数据集的构建高度依赖人工标注,工作量大、效率低^[19,20];二是现有多数深度学习模型结构复杂、计算量大,对硬件资源依赖较强^[21-23],难以满足工业实际连续结晶过程中对大规

模图像数据进行低延迟高效处理的实际需求^[13,24-26]。

本文构建了一种面向连续结晶体系的低成本、轻量化晶体图像分割与粒径分析方法。引入视觉基础大模型(Segment Anything Model 3, SAM3)^[27]进行样本辅助预标注,有效降低数据集构建难度与标注成本。选用轻量化实例分割模型对晶体图像进行特征提取与颗粒识别,在降低计算复杂度的同时保证分割精度,并结合几何特征提取实现晶体粒径及长径比形貌参数的自动计算。以泰勒结晶器内双氰胺连续结晶过程为研究对象^[28,29],对所提出方法进行验证。本文旨在建立一种面向连续结晶过程的晶体形貌快速表征方法,为过程的实时监测与晶体产品质量控制提供算法支撑。

1 材料和方法

1.1 实验材料与试剂

双氰胺(分析纯,质量纯度 $\geq 99.5\%$),由宁夏贝利特有限公司提供,实验前未经进一步纯化处理,直接使用。实验全过程工艺用水为自制去离子水。

1.2 连续结晶装置与显微图像采集系统

连续冷却结晶实验平台核心为带有冷却夹套的库埃特—泰勒结晶器(CTC),有效体积 $V = 250$ mL。流体动力由三相异步电动机(YE3-80M2-6,江苏普斯电机有限公司)提供,并通过配套变频器(PS320-0.75G1,江苏普斯)控制CTC内筒转速。使用电子天平(ME104/02,梅特勒—托利多)称量固体溶质,并在单工位磁力搅拌水浴锅(SN-HWS-1DJ,上海尚普)中配制恒温双氰胺母液($0.05 \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$)。随后,经蠕动泵(BT100L,上海圣科)连续稳定注入CTC内(图1)。冷却梯度由标准型加热制冷循环器(F32,德国Julabo)进行控制。

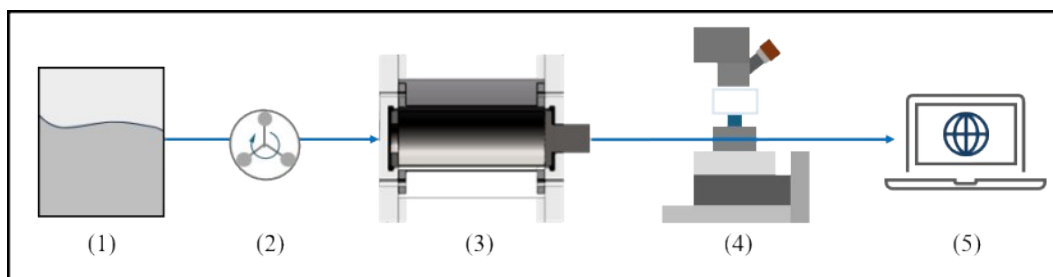


图1 实验装置图

Fig.1 Schematic diagram of the experimental setup

注:(1)—母液罐;(2)—蠕动泵;(3)—CTC连续结晶器;(4)—偏光显微镜;(5)—计算机

三倍停留时间后,CTC达到稳态,于出料口采样点进行离线取样。为防止取样后因环境温度骤降或过饱和度波动导致晶体发生二次成核、生长或溶解,取出的悬浮液样品被立即注入对应出口操作温度下的饱和溶液中进行淬灭。后迅速置于三目透反射偏光显微镜(LW300PT,上海测维光电科技有限公司)下进行显微成像。输出的原始彩色图像分辨率为2304×1728像素。为确保图像像素坐标与真实物理尺寸的准确对应,实验前使用标准显微测微尺对光学成像系统在各级放大倍数下进行独立的空间标定。定义空间像素当量 κ 为特定放大倍数下单个像素所代表的实际物理长度,实验工况下 $\kappa = 0.5348 \mu\text{m} \cdot \text{pixel}^{-1}$ 。

1.3 基于SAM3的图像数据集构建

深度学习实例分割网络的泛化能力与分割精度依赖于高质量的像素级掩膜(Mask)。然而,双氰胺晶体在显微视野下常呈现高密度、多局部重叠和几何边界交叉等复杂分布,逐点描边手工标注耗时巨大且带有主观误差。为此,采用开源智能标注软件X-AnyLabeling^[30],结合Meta SAM3进行辅助标注。借助其强大的零样本泛化与概念追踪能力,仅提供少量的视觉范例提示(点击视野中的一颗典型双氰胺晶体),即可精准分割。对于少数过度分割或由于晶体严重聚团导致边界模糊的复杂区域,再辅以人工微调。

所涉工况涵盖CTC连续结晶过程双侧非等温换热条件下的三组温度(内筒温度/外筒温度: $T_i/T_o = 24^\circ\text{C}/20^\circ\text{C}$ 、 $26^\circ\text{C}/22^\circ\text{C}$ 、 $28^\circ\text{C}/24^\circ\text{C}$)与三组内筒转速(200、400、600 $\text{r} \cdot \text{min}^{-1}$)的9种正交工况,以及单侧冷却条件($T_i = 24^\circ\text{C}$)下200 $\text{r} \cdot \text{min}^{-1}$ 的1种,共合计10种工况。每个工况在稳态操作下,每间隔1倍停留时间取样一次,从对应的原始图像库中随机抽取20张,构成共200张多工况图像数据集。

数据集按照实验工况进行分层划分。同一工况下采集的所有图像被整体分到一个集合中,避免数据泄露。此外,选择内筒转速400 $\text{r} \cdot \text{min}^{-1}$,单侧冷却($T_i = 24^\circ\text{C}$),流量 $Q = 1.0 \text{ mL} \cdot \text{s}^{-1}$ 操作条件为独立工况,全程不参与模型构建,仅用于晶体形貌分析。数据集导出为YOLO实例分割标准格式供下游网络训练(图2)。

1.4 YOLO26m-seg模型搭建与训练

为在常规计算硬件下实现对连续结晶过程大规模显微图像的快速、高精度处理,选用Ultralytics

YOLO26m-seg^[31]中等规模实例分割模型,未对模型架构进行自定义修改。模型训练与推理在配备NVIDIA RTX 4060 Laptop GPU(8 GB显存)的PC上进行,基于Miniconda环境管理依赖,使用PyTorch 2.5.1框架。网络输入尺寸设定为640×640像素,采用Letterbox自适应等比例缩放与边缘填充策略,在满足输入张量要求的同时严格保持晶体原始长径比。为在有限数据集条件下提升模型泛化能力,训练中采用了全面的数据增强策略,具体超参数配置见表1,训练共进行100个轮次(Epoch),总耗时约1.5 h。

1.5 基于图像二阶矩的晶体形貌特征提取

通过YOLO26m-seg获取单颗粒双氰胺晶体的Mask后,需进一步将其转化为具体的宏观几何物理量。为此建立基于图像二阶矩的等效惯性几何模型解析形貌参数^[13, 32, 33]。定义二值化晶体掩膜区域的 $p+q$ 阶原点矩:

$$m_{pq} = \sum_{(x,y) \in R} x^p y^q f(x,y) \quad (1)$$

式中 R 为晶体区域的像素集合, $f(x,y) = 1$ 表示前景像素。计算单个晶体二值化掩膜的空间零阶矩(像素面积 m_{00})及一阶矩 m_{01} 、 m_{10} ,确定几何质心坐标 (x_c, y_c) :

$$x_c = \frac{m_{10}}{m_{00}} \quad (2)$$

$$y_c = \frac{m_{01}}{m_{00}} \quad (3)$$

随后以质心为中心,计算掩膜区域的二阶中心矩:

$$\mu_{20} = \sum_{(x,y) \in R} (x - x_c)^2 f(x,y) \quad (4)$$

$$\mu_{02} = \sum_{(x,y) \in R} (y - y_c)^2 f(x,y) \quad (5)$$

$$\mu_{11} = \sum_{(x,y) \in R} (x - x_c)(y - y_c) f(x,y) \quad (6)$$

由上述中心二阶矩构建协方差矩阵,对协方差矩阵进行特征值分解,展开后得到特征值 λ_1 与 λ_2 ^[32, 33]:

$$\lambda_{1,2} = \frac{\mu_{20} + \mu_{02}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\mu_{20} - \mu_{02}}{2}\right)^2 + \mu_{11}^2} \quad (7)$$

基于等效惯性椭圆理论,结合空间像素当量,单颗晶体的实际物理特征长度(L)、特征宽度(W)及长径比(AR)计算公式如下^[13]:

$$L = 4 \sqrt{\lambda_1} \times \kappa \quad (8)$$

$$W = 4 \sqrt{\lambda_2} \times \kappa \quad (9)$$

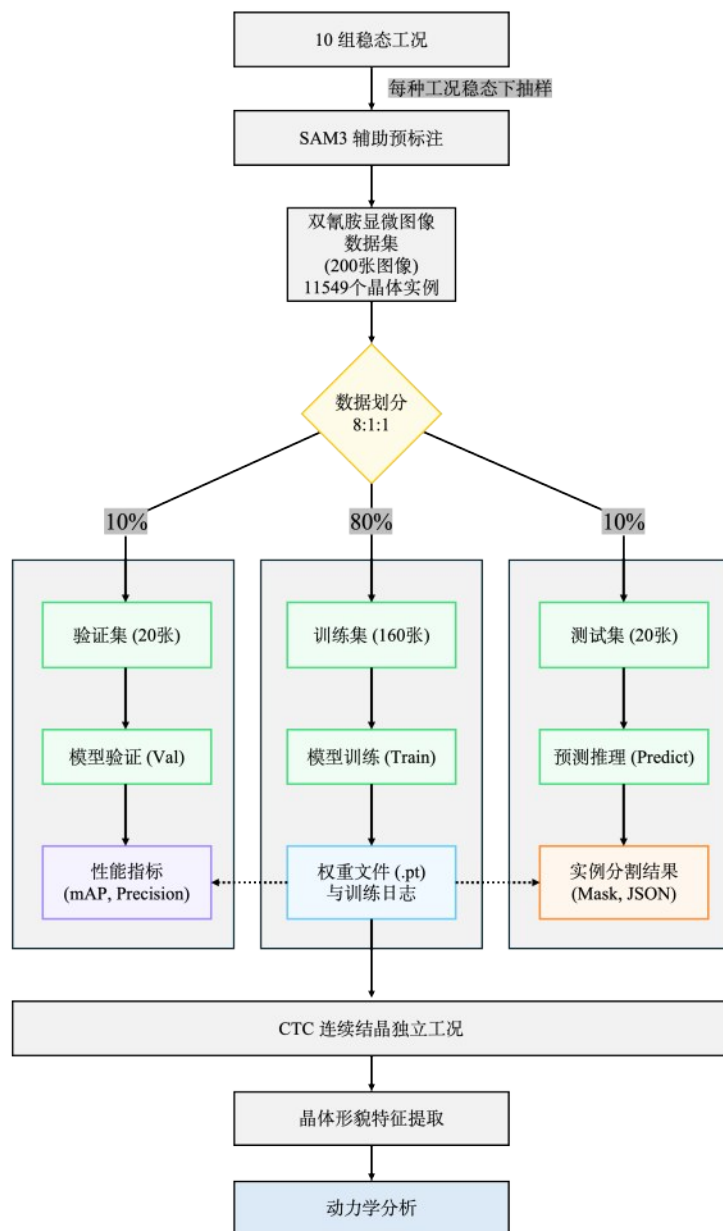


图2 数据集构建流程

Fig.2 Flowchart of dataset construction

$$AR = \frac{L}{W} = \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_2}} \quad (10)$$

完整的在线推理与特征提取路线为:输入显微图像首先经 Letterbox 缩放至 640×640 像素送入 YOLO26m-seg 模型进行实例分割;模型输出每个晶体的掩膜坐标后,通过逆缩放因子将掩膜映射回原始分辨率;随后根据式(1)–(7)在原始分辨率下计算空间矩,结合标定的空间像素当量 κ ,根据式(8)–(10)得到晶体特征长度与长径比,以物理尺寸输出。

2 结果与讨论

2.1 模型验证

2.1.1 模型训练过程与收敛特性分析 为量化模型的学习效率和泛化能力,图3展示了模型在100个训练轮次内的掩膜损失(Mask Loss)与交并比阈值为0.5时的平均精度均值(mean Average Precision at IoU = 0.50, mAP@50)的动态演变过程。掩膜损失反映了模型预测的双氰胺晶体几何边界与真实人工标注边界之间的偏差,其数值越低表明模型对单晶拓扑轮廓的贴合度与重构精度越高。mAP@50则

表1 YOLO26m-seg训练超参数配置
Table 1 Training hyperparameters of YOLO26m-seg

参数	配置值
基础模型	YOLO26m-seg
计算量(训练/推理)	131.9/121.2 GFLOPs
训练轮次(Epoch)	100
Batch size	2
优化器	AdamW (lr=0.002)
最终学习率因子	0.001
动量	0.9
权重衰减	0.0005
预热轮次	3
混合精度训练(AMP)	启用
水平翻转	0.5
HSV-H/S/V	0.015/0.7/0.4
Mosaic增强	1.0(前10轮后关闭)
随机缩放	0.5
随机平移	0.1
随机擦除	0.4
自动增强策略	RandAugment

直接关联模型的宏观识别准确度,代表在预测色块与双氰胺真实颗粒的重叠面积大于50%的判定标准下,模型正确捕获单颗粒晶体的平均综合准确率,该值越接近1.0反映检测与分割越精准。

训练集掩膜损失与验证集掩膜损失在前40轮均快速且同步下降,表明网络正在迅速捕获双氰胺晶体的底层几何特征。40~60轮期间,两者趋于平稳。约在第60轮后验证损失出现上升趋势(图3中虚线标注),提示模型开始对训练集产生轻微的过

拟合,而训练损失在该阶段持续缓慢下降。然而,验证集 mAP@50 在此阶段保持相对稳定,表明过拟合主要影响掩膜边界的精细精度,对目标晶体检测性能的影响有限。最终以出现在第64轮验证集 mAP@50 最高(0.885)的权重文件作为推理权重。

2.1.2 测试集量化评估 为客观评估模型在 CTC 连续结晶真实工况下的泛化能力,避免数据泄露带来的评估虚高。将训练完成的最优权重模型应用于未参与训练的测试集中。图4为模型在测试集上的掩膜精确率-召回率曲线。

在连续结晶的颗粒识别任务中,精确率代表模型提取的晶体真实有效的比例,而召回率则反映了模型从重叠与杂乱背景中成功找回单晶的能力。如图4所示,曲线整体饱满贴附于图像右上角,表明模型能够在维持极高召回率的同时,依然不牺牲精确率。曲线下面积为0.912,这一量化指标证明该模型不仅在训练分布内表现出色,在独立测试集上具备优异的形貌特征提取能力。单张图像的完整在线处理耗时:预处理0.3 ms, YOLO推理14.4 ms,后处理2.1 ms,合计约17 ms/张。

2.1.3 可视化分割定性评估 在连续 CTC 的剪切作用下,双氰胺晶体不可避免地呈现高密度的空间重叠与交叉。图5对比了测试集中三种晶体密度场景下的原始显微图像、人工标注掩膜与模型预测掩膜。即使在多颗双氰胺晶体发生遮挡与交叉堆叠的像素区域,模型依然能够准确提取并重构各晶体独立的空间拓扑边界,输出的多边形掩膜具有较高的像素级边界贴合度。这种在微观层面展现出的

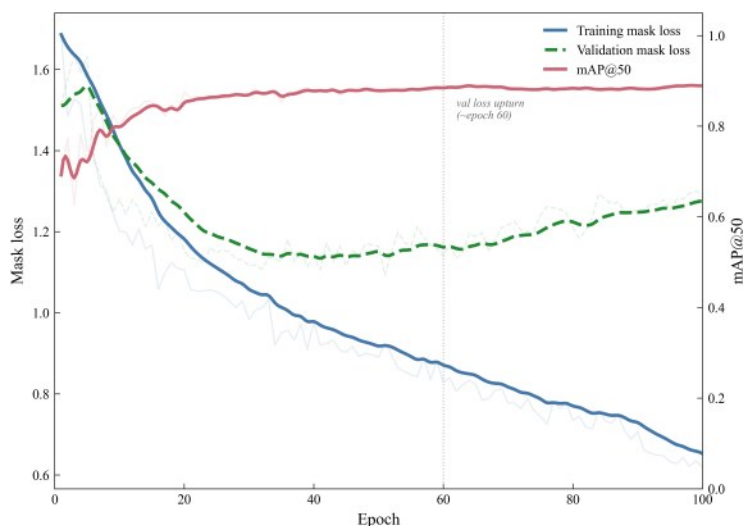


图3 模型训练过程的损失与精度曲线

Fig.3 Training and validation curves of mask loss and mAP@50

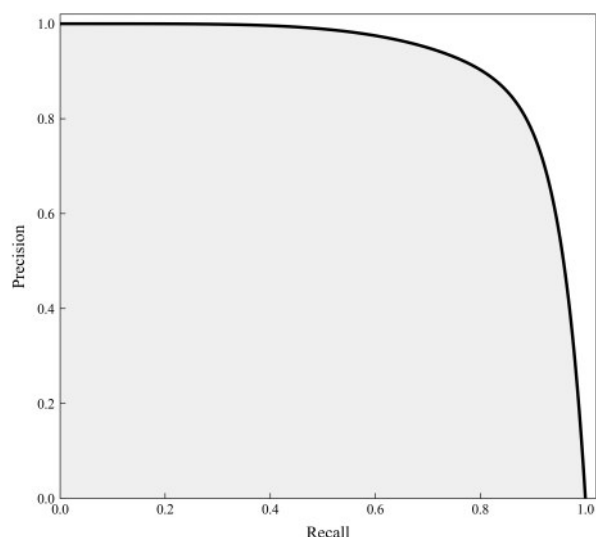


图4 测试集上的掩膜精确率—召回率曲线

Fig.4 Mask Precision-Recall (P-R) curves on the test set

高鲁棒性分割效果,从根本上保障了目标晶体二阶矩几何特征的测量置信度。

2.1.4 几何测量精度验证 为验证模型计算的几何参数的准确性,从测试集工况中随机选取一批双

氰胺晶体,使用Fiji 2023软件测量每颗晶体的 L 和 W 作为人工参考值。将模型自动计算结果与人工测量值进行对比,并绘制Bland-Altman一致性分析图(图6)。

结果表明,长轴和短轴的平均偏差在 $\pm 8 \mu\text{m}$ 以内,相对 D_{50} 不超过7%。Bland-Altman图中偏差呈均匀分布,未观测到偏差随尺寸的系统性变化。长径比的偏差较大(MAPE = 12.9%),主要是由于 AR 作为两个独立测量量的比值,误差传播放大了 L 和 W 的各自偏差,但其偏差绝对值仍然较小(+0.1)。证明模型自动几何测量的精度满足后续形貌统计分析和动力学计算的需求。

2.2 连续结晶中晶体粒度与宏观形貌演变

2.2.1 稳态粒度分布与特征尺寸分析 在利用上述深度学习模型获取大量高保真的单晶形态数据后,将其应用于CTC连续结晶器在特定稳态操作边界($\tau = 4.2 \text{ min}$,冷却温度 24°C ,转速 $400 \text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$)下的晶体形貌分析中。为定量评估该特定工况下CTC内部的流体动力学状态,引入内筒雷诺数(Re)与泰

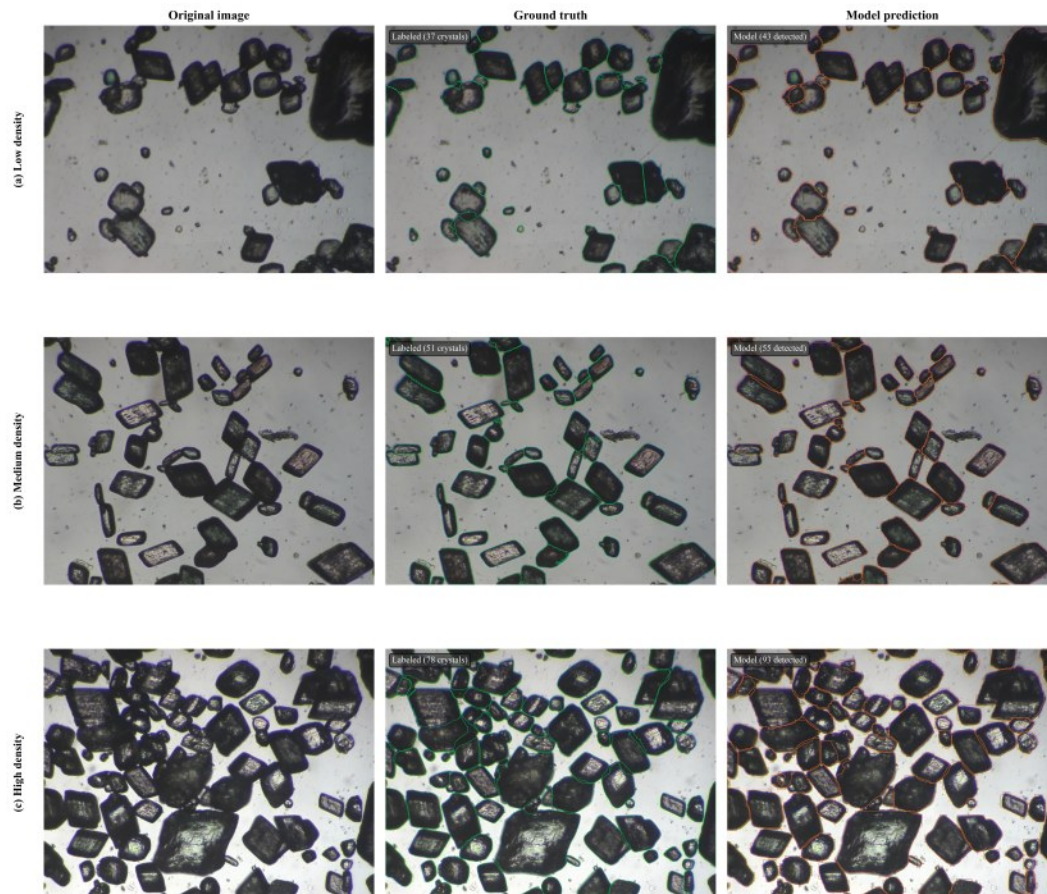


图5 双氰胺晶体的原始显微采集标注图像与YOLO模型的实例掩膜预测结果

Fig.5 Original microscopic labeled images of dicyandiamide crystals and instance mask prediction results by YOLO model

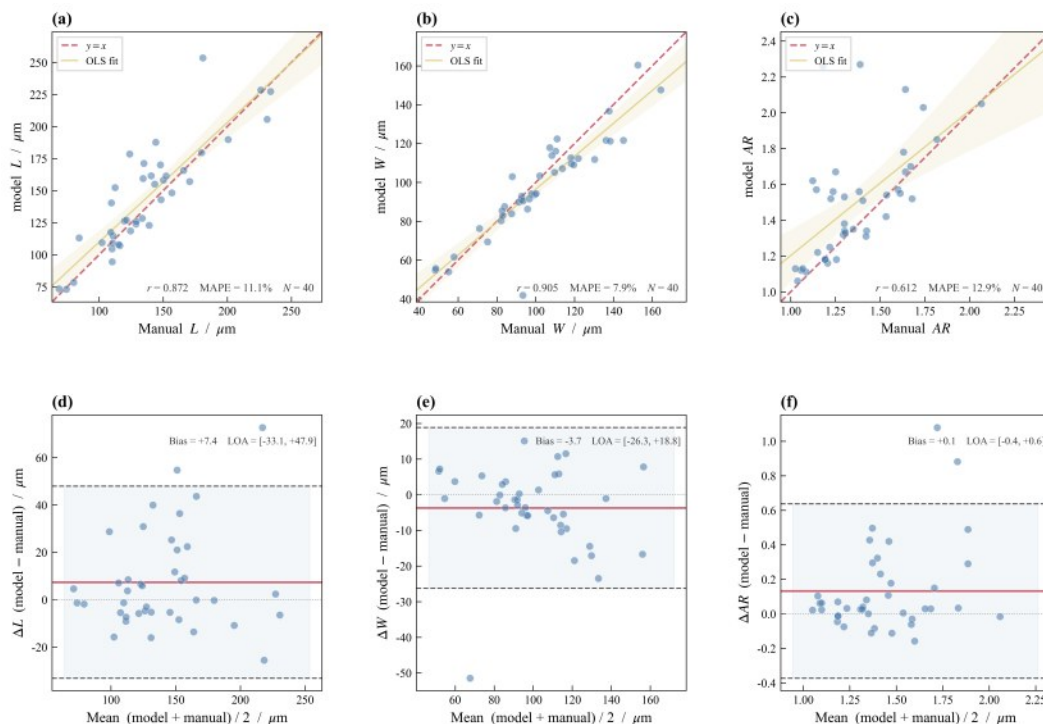


图6 模型自动测量与人工测量的几何精度对比:(a-c)长轴、短轴、长径比散点回归;(d-f)长轴、短轴、长径比Bland-Altman图
Fig.6 Comparison of geometric measurement accuracy between model-based automatic measurements and manual measurements: (a-c) scatter regression plots of L , W , and AR ; (d-f) Bland-Altman plots of L , W , and AR

勒数 (Ta) 来表征 CTC 环隙流场特征, 计算公式如下:

$$Re_i = \frac{\rho \omega_i R_i}{\mu} \quad (11)$$

$$Ta = \frac{\rho^2 \omega^2 R_i d^3}{\mu^2} = Re_i^2 \left(\frac{d}{R_i} \right) \quad (12)$$

图 7(a) 为该工况下 ($Re_i = 9785$, $Ta = 1.01 \times 10^7$) 双氰胺特征长度 L 的概率密度直方图及其对数正态分布拟合 (Log-Normal Fit) 曲线 (总样本量 $N = 4130$)。对数正态拟合采用最大似然估计, 概率密度函数如下, 拟合系数 $\mu = 4.811$, $\sigma = 0.412$ 。

$$f(L|\mu, \sigma) = \frac{1}{L\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\ln L - \mu)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (13)$$

结合图 7(b) 的累积概率分布曲线进一步量化, 特征下限尺寸 D_{10} 、中位尺寸 D_{50} 及上限尺寸 D_{90} 分别为 $68.3 \mu\text{m}$ 、 $117.0 \mu\text{m}$ 和 $215.2 \mu\text{m}$ 。其中 D_{50} 作为表征产品宏观粉体质量的核心特征值, 表明在泰勒涡流与冷却结晶作用下, 双氰胺产品主要集中在 $100 \mu\text{m}$ 以上的微米尺度。此外, 由特征尺寸推算的粒径分散度指标 $Span$, 即 $(D_{90} - D_{10})/D_{50}$ 为 1.26, 偏大的分散度可能源于连续操作下停留时间分布 (RTD) 的宽化, 也暗示了局部高剪切引发二次成核和晶体破碎。在后续工艺优化中, 可通过优化结晶器几何构

型或操作参数以进一步窄化 RTD, 实现晶体产品质量的精准调控。

2.2.2 多维几何形貌特征 相较于一维粒径分布, 多维形貌参数能够更深刻地揭示双氰胺在 CTC 连续结晶中的各向异性生长规律。图 8(a) 为 L 与等效长径比 AR 的散点图, 图 8(b) 进一步绘制了二维核密度等高线图以定量表征其二维分布的集中趋势。深色高密度区域对应产品主体晶粒, 集中于 $L = 60 \sim 160 \mu\text{m}$, $AR = 1.3 \sim 1.7$, 产品主体为近等轴晶。随着晶粒尺寸增大, 长宽比逐渐升高, 大粒径晶体择优生长, 形貌趋向细长。由于双氰胺不同晶面的表面能与生长动力学对过饱和度梯度的敏感性存在内在差异, CTC 流场选择性地放大了沿其主轴方向的生长速率, 进而导致大尺寸晶体普遍脱离等轴形态, 等高线沿粒径轴向右弥散拖尾。

2.2.3 表面密实度与颗粒团聚 为进一步探究 CTC 流场剪切对双氰胺晶体结构完整性的影响, 引入无量纲密实度 ($Solidity$) 进行形态学诊断。密实度定义为晶体实际投影面积与其最小凸包面积之比。该值越趋近于 1.0, 表征颗粒表面越完整平滑。值域降低则指示晶体投影可能存在局部凹陷、晶体缺角或边缘破损, 或是发生了不规则团聚, 同时该指标

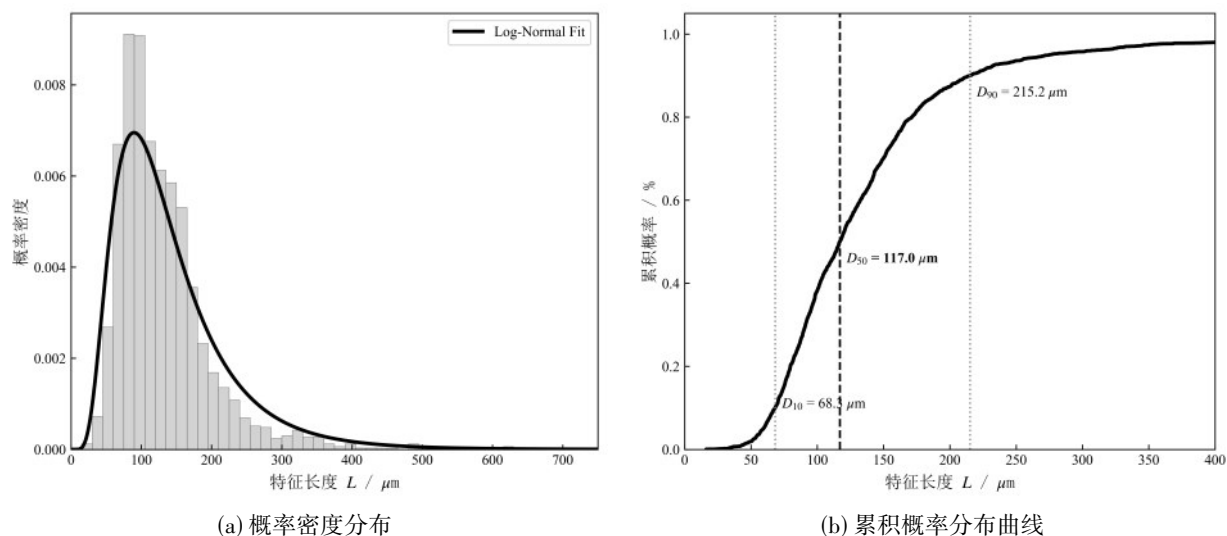
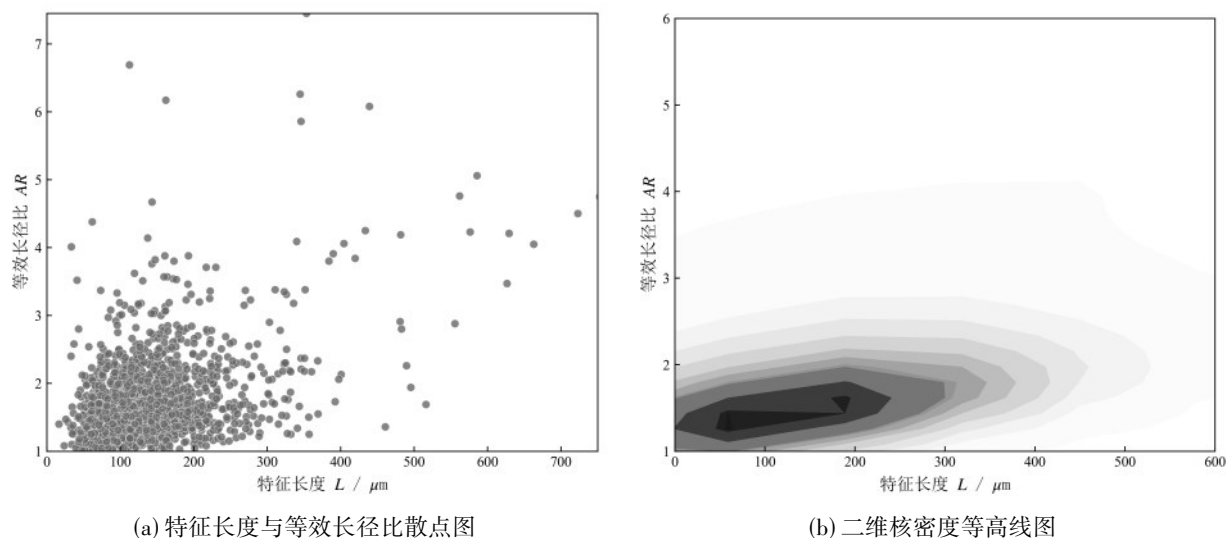
图7 冷却温度24℃,转速400 r·min⁻¹下的双氰胺晶体粒度分布和特征参数Fig.7 CSD and characteristic parameters of dicyandiamide crystals at cooling temperature of 24℃ and rotational speed of 400 r·min⁻¹

图8 双氰胺晶体长径比分析

Fig.8 Aspect ratio analysis of dicyandiamide crystals

的降低亦可能受到图像实例分割算法边界识别误差的影响。如图9(b)所示,中、小尺度的主体双氰胺晶粒($L < 200 \mu\text{m}$)的密实度密集在0.85至0.95之间,展现出较为完好的几何多面体结构。然而,随着 L 持续增大,其密实度呈现出下降趋势,最低值跌至0.6以下。这种形貌的劣变,印证了该工况下强剪切流场($Ta = 1.01 \times 10^7$)带来的负面效应。高长径比的晶体在剧烈碰撞下抗折断强度较弱,导致轴向断裂与棱角磨损,同时在涡流中易发生二次附着。

为定量识别可能的团聚体,建立凸性和尺度的双判据:密实度低于0.85且投影面积 > 3 倍该工况

下所有单晶的投影面积中位数。在该工况下:密实度 < 0.85 的晶体有960颗,面积超过阈值($15399 \mu\text{m}^2$)的晶体有484颗,同时满足双判据的占全部晶体的2.9%。排除这部分团聚体(图10),从而避免后续对表观生长速率的回归计算产生干扰。

2.3 二维各向异性表观生长动力学建模

从二维显微图像统计各粒径区间的晶体计数,本质为相对频数密度。在稳态条件下,该相对频数密度的自然对数与特征尺寸服从线性递减关系:

$$\ln f(L) = \ln f_0 - \frac{L}{G\tau} \quad (14)$$

在进行回归计算前,剔除由非理想统计噪声,

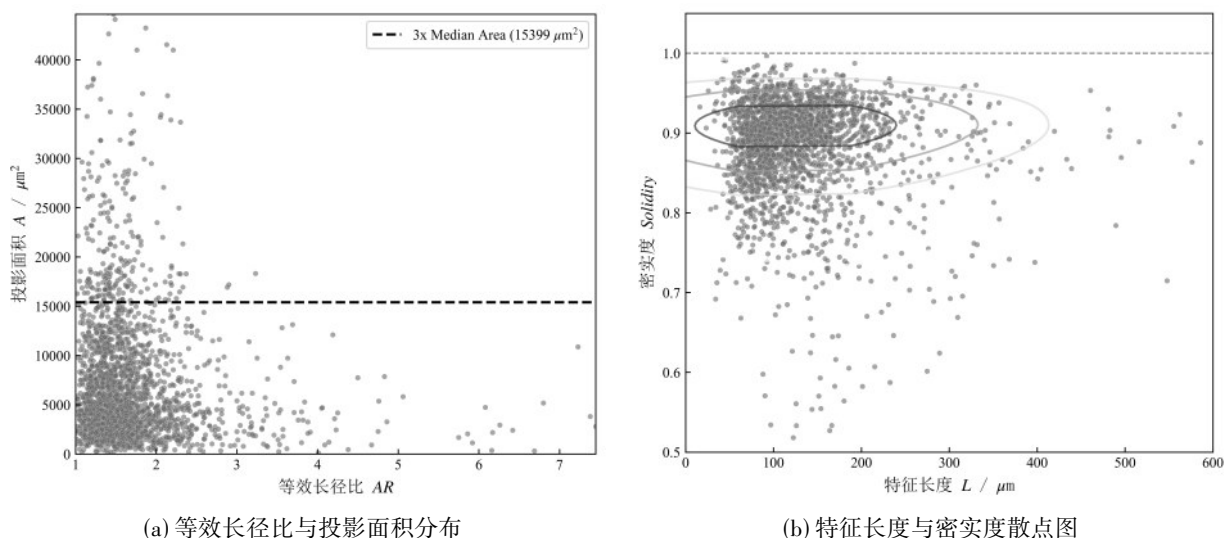


图9 双氰胺晶体形态特征参数散点分析

Fig.9 Scatter analysis of parameters of dicyandiamide crystals

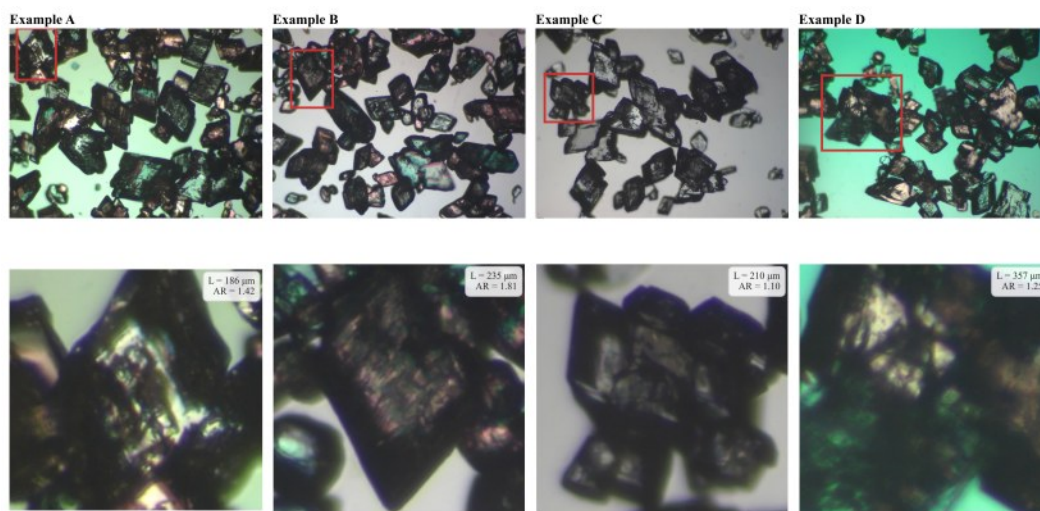


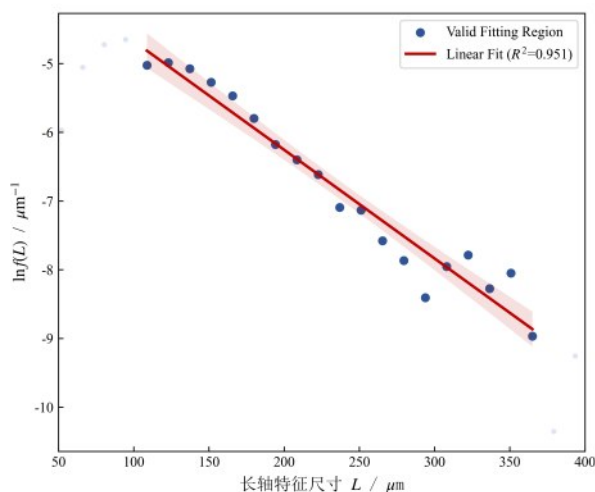
图10 基于双判据识别的典型可疑团聚体示例

Fig.10 Representative examples of suspected agglomerates identified by the dual criterion

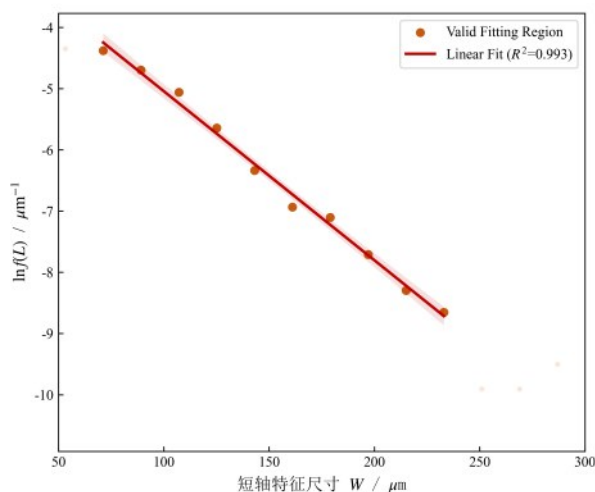
精准锁定双氰胺稳态生长窗口。为揭示双氰胺晶体在多维空间中的不对称生长行为,分别针对长轴和短轴的特征尺寸分布进行了二维表观动力学拟合(图11)。如图11(a)所示,在长轴的有效稳态生长窗口(100 ~ 350 μm)内,数据点阵展现出较高的连续性,决定系数 R^2 为0.951。据此,长轴稳态表观生长速率 G_L 为15.18 $\mu\text{m}\cdot\text{min}^{-1}$ 。同理,图11(b)为短轴特征尺寸的动力学拟合结果,在75 ~ 280 μm 的有效拟合区间内,短轴的生长同样契合一阶线性分布模型, R^2 达0.993,短轴稳态表观生长速率 G_w 为8.69 $\mu\text{m}\cdot\text{min}^{-1}$ 。

在该工况下,双氰胺晶体的长短轴表观生长各

向异性比(G_L/G_w)为1.75。这一动力学比值印证了双氰胺晶体向柱状生长的微观择优趋势,也诠释了前文所述的宏观形貌演变特征,即产品主体表现为近等轴晶,但随尺寸增大呈现出温和的细长化偏离。双氰胺晶体的表观各向异性生长,是其内在晶体学特性与CTC特异性流场协同作用的结果。高强度的泰勒涡流诱发了剧烈的流体微团耗散,压缩了颗粒周边的传质边界层。由于长轴端点在湍流剪切中具备更大的有效迎流截面,其局部边界层更新速率超过短轴侧面,使得溶质向端面扩散的传质阻力产生空间上的非对称性骤降。这种由局部流场驱动的传质强化效应,最终体现为1.75倍的宏观



(a) 长轴特征尺寸与数密度自然对数



(b) 短轴特征尺寸与数密度自然对数

图 11 双氰胺晶体长/短轴特征尺寸与数密度的线性拟合分析

Fig.11 Linear fitting of crystal number density vs. major/minor axis dimensions

生长速率差异,为工程化晶体形貌定制提供支撑。

3 结 论

(1)基于SAM3辅助标注与轻量化YOLO26m-seg网络,构建了适用于连续结晶体系的晶体实例分割与形貌表征框架。模型运行在独立测试集上,单张图像推理速度约17 ms,可对高密度、重叠状态下的晶体图像进行实时、精确的实例分割。

(2)针对CTC连续结晶器内双氰胺冷却结晶体系开展实验,稳态下产品中位粒径 D_{50} 为117.0 μm ,晶体主体为近等轴形貌。结合密实度与投影面积双判据,识别出约2.9%的可疑团聚体。建立了二维表观生长动力学模型,长轴与短轴表观生长速率之比 $G_L/G_W = 1.75$ 。讨论了强剪切流场诱导的非对称传质边界层作为双氰胺晶体各向异性生长的可能机制,多工况跨系统验证将是后续研究的重要方向。

(3)该轻量化深度学习方法可实现晶体形貌特征的快速检测,推理速度可满足连续结晶过程在线监测的实时性需求,为晶体产品工程中的形貌反馈控制和工艺优化提供了可行的技术方法支撑。

符 号 说 明

A ——晶体投影面积, μm^2
 AP ——平均精度(Average Precision), 无量纲
 AR ——晶体等效长径比, 无量纲
 d ——CTC环隙宽度, m

D_{10} ——晶体粒度累计分布10%对应粒径, μm
 D_{50} ——晶体中位粒径, μm
 D_{90} ——晶体粒度累计分布90%对应粒径, μm
 $f(L)$ ——相对频数密度, μm^{-1}
 G ——表观生长速率, $\mu\text{m} \cdot \text{min}^{-1}$
 G_L ——晶体长轴表观生长速率, $\mu\text{m} \cdot \text{min}^{-1}$
 G_W ——晶体短轴表观生长速率, $\mu\text{m} \cdot \text{min}^{-1}$
 L ——晶体长轴特征长度, μm
 m_{00} ——二值化掩膜零阶矩
 m_{01}, m_{10} ——二值化掩膜一阶矩
 N ——样本总量
 Q ——进料流量, $\text{mL} \cdot \text{s}^{-1}$
 R_i ——CTC旋转内筒直径, m
 R^2 ——决定系数, 无量纲
 Re_i ——内筒雷诺数, 无量纲
 $Span$ ——晶体粒径分散度, 无量纲
 T ——温度, $^{\circ}\text{C}$
 T_i ——内筒温度, $^{\circ}\text{C}$
 T_o ——外筒温度, $^{\circ}\text{C}$
 Ta ——泰勒数, 无量纲
 V ——结晶器有效体积, mL
 W ——晶体短轴特征长度, μm
 x_c ——晶体几何质心横坐标
 y_c ——晶体几何质心纵坐标
 κ ——图像空间像素当量, $\mu\text{m} \cdot \text{pixel}^{-1}$
 λ_1, λ_2 ——协方差矩阵特征值
 μ ——动力粘度, $\text{Pa} \cdot \text{s}$
 $\mu_{20}, \mu_{02}, \mu_{11}$ ——掩膜区域中心二阶矩
 τ ——停留时间, min
 ω ——内筒角速度, $\text{rad} \cdot \text{s}^{-1}$

ρ ——密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$

参考文献

- [1] Eren A, Civati F, Ma W C, et al. Continuous crystallization and its potential use in drug substance manufacture: a review[J]. Journal of Crystal Growth, 2023, **601**: 126958.
- [2] Orehek J, Teslić D, Likozar B. Continuous crystallization processes in pharmaceutical manufacturing: a review[J]. Organic Process Research & Development, 2021, **25**(1): 16–42.
- [3] Ma Y M, Wu S G, Macaringue E G J, et al. Recent progress in continuous crystallization of pharmaceutical products: precise preparation and control[J]. Organic Process Research & Development, 2020, **24**(10): 1785–1801.
- [4] Zhang D J, Xu S J, Du S C, et al. Progress of pharmaceutical continuous crystallization[J]. Engineering, 2017, **3**(3): 354–364.
- [5] Biri D, Rajagopalan A K, Mazzotti M. Autonomous control of the crystal size and shape in dense suspensions *via* imaging[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2025, **64**(19): 9794–9805.
- [6] Kim S, et al. Codesigning tubular flow and noncontact sonication for antisolvent crystallization: rapid fouling-free production of uniform rifampine crystals with reduced aspect ratios[J]. Crystal Growth & Design, 2026, **26**(6): 2249–2261.
- [7] Ilett T P, Hazlehurst T A, Jiang C, et al. Reconstruction of 3D crystal growth from transmission optical microscopy images[J]. PNAS Nexus, 2026, **5**(4): pgag080.
- [8] Burgdorf S J, Roddelkopf T, Thurow K. Automated crystallization monitoring in material development using computer vision and neuronal networks[J]. Chemie Ingenieur Technik, 2024, **96**(8): 1107–1115.
- [9] Nagy Z K, Fujiwara M, Braatz R D. Monitoring and advanced control of crystallization processes[M]//Handbook of Industrial Crystallization. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2019: 313–345.
- [10] Acevedo D, Wu W L, Yang X C, et al. Evaluation of focused beam reflectance measurement (FBRM) for monitoring and predicting the crystal size of carbamazepine in crystallization processes[J]. CrystEngComm, 2021, **23**(4): 972–985.
- [11] Li H Y, Kawajiri Y, Grover M A, et al. Application of an empirical FBRM model to estimate crystal size distributions in batch crystallization[J]. Crystal Growth & Design, 2014, **14**(2): 607–616.
- [12] Yu L X, Lionberger R A, Raw A S, et al. Applications of process analytical technology to crystallization processes[J]. Advanced Drug Delivery Reviews, 2004, **56**(3): 349–369.
- [13] Li W L, Chu T F, Cheng Y Y, et al. An improved method for crystal morphology extraction using *in situ* imaging[J]. Chemical Engineering & Technology, 2025, **48**(12): e70138.
- [14] Odziomek K, Ushizima D, Oberbek P, et al. Scanning electron microscopy image representativeness: morphological data on nanoparticles[J]. Journal of Microscopy, 2017, **265**(1): 34–50.
- [15] Zong S L, Zhou G Z, Li M, et al. Deep learning-based on-line image analysis for continuous industrial crystallization processes[J]. Particuology, 2023, **74**: 173–183.
- [16] Bharati P, Pramanik A. Deep learning techniques: R-CNN to mask R-CNN: a survey[C]//Computational Intelligence in Pattern Recognition. Singapore: Springer, 2020: 657–668.
- [17] Kang Y L, Duan Z Y, Tong T L, et al. An enhanced deep learning-based pharmaceutical crystal detection with regional filtering[J]. Crystals, 2024, **14**(8): 709.
- [18] Yao T, Liu J, Wan X X, et al. Deep-learning based *in situ* image monitoring crystal polymorph and size distribution: Modeling and validation[J]. AIChE Journal, 2024, **70**(2): e18279.
- [19] Wang X, Duan T S, Ouyang G X, et al. Comprehensive review of segment anything model across multiple domains[J]. Digital Signal Processing, 2025, **167**: 105459.
- [20] Zhang C H, Liu L, Cui Y W, et al. A comprehensive survey on segment anything model for vision and beyond[EB/OL]. 2023: arXiv: 2305.08196. <https://arxiv.org/abs/2305.08196>
- [21] Bochkovskiy A, Wang C Y, Liao H M. YOLOv4: optimal speed and accuracy of object detection[EB/OL]. 2020: arXiv: 2004.10934. <https://arxiv.org/abs/2004.10934>
- [22] Redmon J, Divvala S, Girshick R, et al. You only look once: unified, real-time object detection[C]//2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). June 27–30, 2016. Las Vegas, NV, USA. IEEE, 2016: 779–788.
- [23] Rath S. YOLOv8 Ultralytics: state-of-the-art yolo models[EB/OL]. LearnOpenCV, 2023. <https://learnopencv.com/ultralytics-yolov8>
- [24] Manee V, Zhu W, Romagnoli J A. A deep learning image-based sensor for real-time crystal size distribution characterization[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2019, **58**(51): 23175–23186.
- [25] Salami H, McDonald M A, Bommaris A S, et al. *In situ* imaging combined with deep learning for crystallization process monitoring: application to cephalixin production[J]. Organic Process Research & Development, 2021, **25**(7): 1670–1679.
- [26] Moenck K, Thieu D T, Koch J, et al. Industrial language-image dataset (ILID): adapting vision foundation models for industrial settings[J]. Procedia CIRP, 2024, **130**: 250–263.
- [27] Carion N, Hu Y T, Debnath S, et al. SAM 3: Segment anything with concepts[EB/OL]. 2025: arXiv: 2511.16719. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2511.16719>
- [28] Nguyen A T, Yu T, Kim W S. Couette-Taylor crystallizer: Effective control of crystal size distribution and recovery of L-lysine in cooling crystallization[J]. Journal of Crystal Growth, 2017, **469**: 65–77.
- [29] Nguyen A T, Joo Y L, Kim W S. Multiple feeding strategy for phase transformation of GMP in continuous couette - Taylor crystallizer[J]. Crystal Growth & Design, 2012, **12**(6): 2780–2788.
- [30] Wang W. X-AnyLabeling: advanced auto labeling solution with added features[CP/OL]. GitHub, 2023. <https://github.com/CVHub520/X-AnyLabeling>
- [31] Jocher G, Qiu J, Liu M Y, et al. Ultralytics YOLO26: unified real-time end-to-end vision models[EB/OL]. 2026: arXiv: 2606.03748. <https://arxiv.org/abs/2606.03748>