



2024过程工程大数据与智能化前沿论坛

The 2024 Frontier Forum on Big Data and Intelligitization for Process Engineering

摘要集

主办单位：

中国颗粒学会



中国科学院过程工程研究所



中国科学院大连化学物理研究所



承办单位：

榆林中科洁净能源创新研究院



协办单位：

国际介科学组织



南京工业大学材料化学工程国家重点实验室



苏州实验室前沿材料研究部

苏州实验室
前沿材料研究部

中国科学院山西煤炭化学研究所



昆明理工大学



榆林学院



榆林市青年科技工作者协会

榆林市青年科技
工作者协会

2024年7月26-28日

陕西省榆林市

目录

第 1 分会场.....	5
1. 主题报告.....	6
智能响应性聚合物系统的多尺度模型与模拟.....	6
SAFT 模型：主体到界面和传质的拓展.....	8
面向膜材料构效关系的机制和数据驱动——从 AI for Science 角度考虑.....	9
Unraveling the Separation Mechanism of Gas Mixtures in MOFs by Combining the Breakthrough Curve with Machine Learning and High-Throughput Calculation.....	10
2. 特邀报告.....	11
聚集诱导油水分离材料与技术.....	11
AI 加速高性能膜分离材料的开发.....	12
A Three-stage Optimization Framework for Achieving Optimal Hydrocyclone's Overall Performance Aligning with Decision-makers' Preferences.....	14
柔性吸附材料结构智能化调控及其应用.....	15
高分子复合材料的多尺度模拟计算：从微观结构到宏观力学.....	17
介观热力学与电池设计.....	19
替代甾体行业重金属的绿色催化剂设计、制备及应用.....	20
有机杂化硅膜的分子模型重构与气体传输机理探讨.....	21
机器学习辅助纤维基油水分离复合材料的结构设计与性能预测.....	23
纳滤膜智能设计及传质机制研究.....	25
数据驱动离子杂化多孔材料设计及低碳烃吸附分离性能研究.....	26
3. 墙报.....	27
基于机理与数据驱动的离子液体粘度数据获取.....	27
蛋白质吸附在氧化石墨烯膜表面的分子洞察：计算机模拟研究.....	28
CO ₂ /CH ₄ 在聚酰亚胺膜中分离性能的分子动力学模拟研究.....	29
第 2 分会场.....	30
1. 主题报告.....	31
基于无监督学习策略构建晶体结构原型数据库.....	31
基于数实融合的流程工业智能研发平台.....	32
2. 特邀报告.....	33
物理约束动态模态分解方法实现数据与机理的快速融合计算.....	33
第 3 分会场.....	34
1. 主题报告.....	35
多相反应器的 OpenFOAM 模拟与应用研究.....	35
基于人工智能的流化床反应器原位测量与高精度模拟的深度融合.....	37
动物细胞培养反应器原位图像的深度学习分析技术.....	39
小型精细化工生产过程数字孪生系统设计构想.....	41
On-line Imaging as a PAT Tool for Monitoring an Industrial Fluidized Bed Granulation – Drying Process.....	43
基于深度学习的热态反应器多尺度变量分析与应用.....	44
机器学习在真实燃料复杂反应网络中的应用.....	45
基于人工智能方法的 Ag@TiO ₂ 光催化颗粒光吸收特性预测.....	47
基于 AI+DEM 方法流化床中铁颗粒烧结过程研究.....	49

数据驱动大尺度湍流反应流计算模式研究.....	51
多孔碳基颗粒 CO ₂ 吸附过程分子动力学研究与 AI 预测.....	52
分子表征学习辅助含能材料设计.....	54
2. 特邀报告.....	56
基于神经网络模型和流动机理模型耦合的低温质子交换膜燃料电池性能研究.....	56
融合介科学与人工智能的多相反应器模拟.....	58
Chemical evolution of solid particle aggregates in fluids.....	59
基于深度强化学习的多相流动控制策略—剪切流动下的液滴尺寸控制.....	61
基于机器学习势的高导热材料多尺度热输运特性研究.....	62
基于深度学习的生物炭半纤维素含量分析方法.....	64
基于人工智能方法的湿颗粒碰撞过程弹性恢复系数分布预测.....	66
基于甲醇制烯烃及其下游生产链的 m-PIOT 模型定量研究.....	68
基于聚类算法的提升管内颗粒聚团碰撞过程演化特性研究.....	69
基于物理信息神经网络的褐煤内部传质过程预测.....	71
机器学习模型中的记忆和遗忘.....	73
基于 PBM/DNN 的鼓泡流化床 CFD 建模及应用.....	75
基于 BiLSTM 方法的锂离子电池健康状态与剩余寿命预测.....	76
基于区间预测方法的流态化干燥特性预测.....	78
基于物理信息神经网络的化学链制氢预测.....	80
机器学习在真实燃料复杂反应网络中的应用.....	81
耦合深度学习与 OpenFOAM 的两相流模拟方法研究.....	83
气固反应器智能化建模与优化.....	84
人工智能辅助气体泄漏溯源研究.....	86
微型缠绕丝强化环隙式微通道液-液传质性能研究.....	87
稀疏回归方法挖掘均匀冷却颗粒流系统流动控制方程.....	89
深度学习在结晶过程中的多尺度应用.....	90
第 4 分会场.....	91
1. 主题报告.....	92
基于“智能化工大模型”的中国甲醇价格分析与预测.....	92
融合密度泛函理论计算和机器学习的氧解耦载氧体高通量筛选与性能预测.....	96
基于神经网络优化污泥衍生燃料.....	98
物理信息机器学习驱动的化工数字孪生建模基础研究.....	99
人工智能和理论计算在电化学储能中的应用.....	102
智能化连续流光催化反应过程研究.....	104
2. 特邀报告.....	106
基于深度学习的煤炭解耦层燃污染物生成反应特性研究.....	106
人工智能设计锂电池电解液.....	107
基于人工智能方法的光催化制氢催化剂优化研究.....	109
数据驱动的煤直接液化预测模型及影响因素分析.....	111
基于“谱-构-效”关系的智能化学研究.....	113
基于机理和数据驱动的气固流态化过程数字孪生研究.....	114
基于 PINN-LBM 的单个圆形多孔颗粒绕流预测研究.....	116
基于神经网络方法的颗粒曳力系数预测.....	118
人工智能赋能生物质/塑料快速热解流化床反应器多尺度研究.....	120

3. 墙报.....	121
基于文本挖掘与数据驱动的金属氧化物释氧性能预测	121
Intelligent Control of Coke Dry Quenching Process using Decision Transformer Algorithm	122
第 5 分会场.....	124
1. 主题报告.....	125
烧结工序智能解析及节能降碳.....	125
A novel hybrid intelligent model for molten iron temperature forecasting	127
based on machine learning	127
Predicting cobalt ion concentration in process of hydrometallurgy zinc using data decomposition and machine learning	130
2. 特邀报告.....	134
基于强化学习的化工过程设计和过程控制	134
基于 CFD 和机器学习的变径搅拌槽反应器研发	136
非线性强化搅拌技术在二次高含钢物料回收中的应用	137
图智均衡——智能图像处理技术在气液两相流混合度检测应用	138

第 1 分会场

分离材料与过程的智能化

1. 主题报告

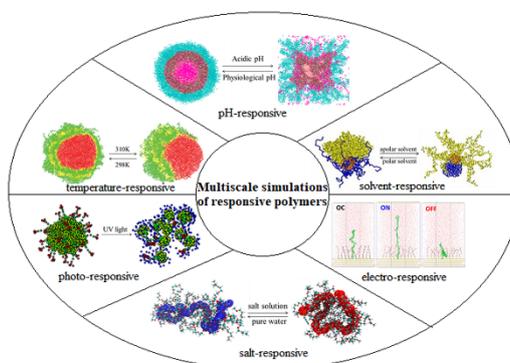
智能响应性聚合物系统的多尺度模型与模拟

周健*

华南理工大学化学与化工学院, 广州, 510640

*Email: jianzhou@scut.edu.cn

摘要: 智能高分子体系在生产生活中发挥着重要作用。通过全原子分子动力学、粗粒化分子动力学、耗散粒子动力学等多尺度计算机模拟方法, 我们对具有 pH、温度、溶剂、盐浓度等响应性的智能高分子体系进行了合理建模, 并探索不同的体系在药物传递、微纳流控、膜分离等应用过程中, 发生刺激-响应的结构变化, 从分子水平上揭示智能高分子体系的构效关系。智能高分子体系的多尺度建模和模拟可以为智能材料的设计提供分子机理, 也可为智能高分子体系的相关应用、开发与制备提供指导。



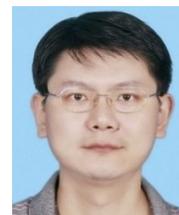
关键词: 智能高分子; 响应性; 多尺度模拟; 构效关系

参考文献

- [1] F Z. Chen, J.H. Huo, L.X. Hao, Jian Zhou. Multi-scale modeling and simulation of responsive polymers. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 2019, 23: 21-33.

报告人/墙报展示人简介:

周健教授, 江苏人。1998 年获南京工业大学化学工程专业博士学位。1998.8-2005.12 先后在北京化工大学、美国华盛顿大学(University of Washington)、美国犹他大学(University of Utah)从事博士后研究。2006 年起, 任华南理工大学化学与化工学院教授、博士生导师。主要研究兴趣是采用计算机分子模拟与机器学习的方法研究在化学、化工、环境、能源、材料、生命等学科中涉及软物质及界面体系的若干问题。



先后主持国家自然科学基金、广东省基金、教育部、科技部、华南理工大学以及其他企业合作项目等 20 余项。在 *AIChE J.*, *Chem. Eng. Sci.*, *ACS Nano*, *Nano Lett*, *Nanoscale*, *Small*, *J. Mat. Chem. A/B*, *J. Phys. Chem. B/C*, *Langmuir*, *J. Chem. Phys.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, *Chem. Comm.* 等国内外化学化工期刊上已发表 SCI 论文 160 余篇(封面论文 15 篇), 被 *Nature*, *Nature Nanotechnology*, *Nature Communication*, *PNAS*, *Chem. Rev.* 等国际期刊 SCI 引用 6000 余次。研究工作受到 *Materials Views*, *Environmental Science: Nano* 的亮点报导。任国际期刊 *FPE* 客座编辑 1 次, 国际会议秘书长 1 次, 分会主席 4 次。在国内外重要学术会议上作邀请报告 20 余次。获霍英东高等院校青年教师奖、教育部新世纪优秀人才、江苏省科技进步二等奖、教育部自然科学一

等奖等。中国化工学会过程模拟及仿真专业委员会、化工大数据与智能设计专委会专业委员会委员。2021-2023 年度 Elsevier 中国高被引学者。

附：报告人/墙报展示人是否为学生：否

SAFT 模型：主体到界面和传质的拓展

摘要：

微纳界面的引入是现代化工过程强化的一种有效手段，但微纳界面引入导致传统模型失效，无法预测限域流体的物性，如膜的传质通量，为过程放大带来挑战。本研究以能够定量描述体相流体热力学物性的状态方程，PC-SAFT（Perturbed Chain Statistical Associating Fluid，微扰链统计缔合流体理论）为基础，围绕 1）如何通过 PC-SAFT 获得动力学物性，2）如何将 PC-SAFT 与 DFT（Density Function Theory，密度泛函理论）结合获取界面热力学物性，两个方面对模型进行开发并拓展已预测动力学物性，有效地实现将 PC-SAFT 模型用于二维膜通量的定量预测，实现了 PC-SAFT 模型由主体相到界面和传质的拓展。同时，在此基础上，本团队构建了基于量子化学方法获取 PC-SAFT 模型参数的有效途径，为从量子化学到宏观物性的定量预测奠定了基础，助推化工基础物性数据结合人工智能的化工智能化设计。

面向膜材料构效关系的机制和数据驱动——从 AI for Science 角度考虑

陆小华

南京工业大学材料化学工程国家重点实验室, 江苏 南京, 211816

苏州实验室, 苏州, 215125

xhlu@njtech.edu.cn

摘要: 膜分离是碳中和所需工业系统流程再造的关键颠覆性技术, 认知膜材料构效关系是膜材料设计的关键。相较传统化工精馏分离过程中理论可理性指导, 膜分离多机制、跨尺度的复杂性远远超出传统化工基础理论的适用范围, 且存在分离膜数据库信息缺失和信息不规范的难题, 大数据、机制驱动耦合的人工智能(AI for Science)成为分离膜材料智能化必由之路。从分离膜微纳界面处流体状态出发建立限域传递阻力模型, 可作为机制模型; 由此分析、甄别科学表征平台所获得表征信息, 构建面向分离膜的微纳界面结构及作用数据库。结合“机制驱动”和“数据驱动”, 通过膜材料的微纳结构来深化限域传递阻力模型, 建立分离膜材料筛选的决策方程, 指导分离膜的智能设计。

关键词: 构效关系、微纳界面、限域传递、分离膜数据库

Unraveling the Separation Mechanism of Gas Mixtures in MOFs by Combining the Breakthrough Curve with Machine Learning and High-Throughput Calculation

Jinfeng Li ^a, Yu Li ^a, Yizhen Situ ^c, Yufang Wu ^a, Wenfei Wang ^a, Lanqing Huang ^a, Chengzhi Cai ^a, Xiaoshan Huang ^a, Yafang Guan ^a, Shouxin Zhang ^b, Heguo Li ^b, Li Li ^b, Yue Zhao ^{b,*}, Hong Liang ^{a,*}, and Zhiwei Qiao ^{a,*}

^a Guangzhou Key Laboratory for New Energy and Green Catalysis, School of Chemistry and Chemical Engineering, Guangzhou University, Guangzhou 510006, China;

^b State Key Lab NBC Protect Civilian, Beijing 102205, Peoples R China;

^c State Key Laboratory of Organic-Inorganic Composites, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China;

* Correspondence: SA11226532@mail.ustc.edu.cn (Y. Zhao); lhong@gzhu.edu.cn (H. Liang); zqiao@gzhu.edu.cn (Z. Qiao).

Abstract:

In the field of metal-organic frameworks (MOFs) screening studies, the batch calculation of the mixed gas breakthrough time difference (ΔT_i) in MOFs and its intricate correlation with various descriptors remain underexplored. This research undertook batch calculations of the breakthrough curves (BC) for different gases within a simulated natural gas environment, designating ΔT_i as the performance metric for MOFs in gas separation. The separation performance of computation-ready experimental MOFs for CH₄/C₂H₆ and CH₄/CO₂ mixtures was analyzed in depth utilizing machine learning (ML)-assisted high-throughput computational screening (HTCS) techniques. Then, five ML algorithms were used to quantify the relationship between MOF descriptors and performance, and the effect of the metal center site on the separation performance was further explored. Ultimately, the top ten MOFs were selected for each system. Combining HTCS, ML, and BC, this work provides fresh insights for understanding and designing MOFs with customized adsorption and separation properties.

Keywords: metal-organic frameworks; high-throughput computational screening; breakthrough time; machine learning; separation.

2. 特邀报告

聚集诱导油水分离材料与技术

马福鑫^{1,2}, 马鹏程^{1,2,*}

¹中国科学院新疆理化技术研究所, 新疆维吾尔自治区乌鲁木齐市, 830011

²中国科学院大学, 北京市怀柔区, 101408

*Email: mapc@ms.xjb.ac.cn

摘要: 石油开采、石油炼化及煤化工行业产生大量含油污水, 此类污水的任意排放不仅会造成资源浪费, 还会破坏生态环境, 影响人类健康。本研究以油水混合物中油含量及其分布特征(浮油、分散油、乳化油等)为出发点, 构筑了一系列具有多元化特性的纳米复合油水分离材料, 形成了制备上述材料的普适性方法体系; 阐明了纳米复合油水分离材料表面特性(形貌、功能基团等)与材料宏观亲水/疏水性质之间的关系, 建立了由材料表面能和粗糙度控制的油水分离过程方法; 借助流体模拟仿真技术验证分离机理并提出了基于聚集诱导现象实现油水混合物分离的新技术; 完成了材料与分离设备有效集成关键技术, 并形成从分离材料、组件到智能装备的全链条技术布局, 在多行业成功实现了油水分离的新型应用。

关键词: 聚集诱导分离; 纳米复合材料; 破乳技术; 油-水分离; 流体仿真

参考文献

- [1] F.-X. Ma, B. Hao, X.-Y. Xi, R. Wang, P.-C. Ma, Aggregation-induced demulsification technology for the separation of highly emulsified oily wastewater produced in the petrochemical industry, *Journal of Cleaner Production*, 2022, 374: 134017.
- [2] Qian-Ru Li, Xin-Yi Wang, Akram Yasin, Ting-Yong Qi, Xuqing Liu, Zhixin Mao, Peng-Cheng Ma, Charge-induced aggregation of emulsified oil droplets in water with the presence of functionalized stainless steel felt, *Separation and Purification Technology*, 2025, 353: 128530.
- [3] Wang X Y, Zhang Y R, Yasin A, et al. Polyethylenimine-modified glass fiber by a sulfur-based coupling reaction for selective demulsification of oil/water emulsions[J]. *ACS Applied Polymer Materials*, 2023, 5(9): 6886-6896.
- [4] Dou Y L, Yue X, Lv C J, et al. Dual-responsive polyacrylonitrile-based electrospun membrane for controllable oil-water separation[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2022, 438: 129565.
- [5] Lv C J, Hao B, Yasin A, et al. Molecular and structural design of polyacrylonitrilebased membrane for oil-water separation[J]. *Polymer*, 2022, 253: 124969.

AI 加速高性能膜分离材料的开发

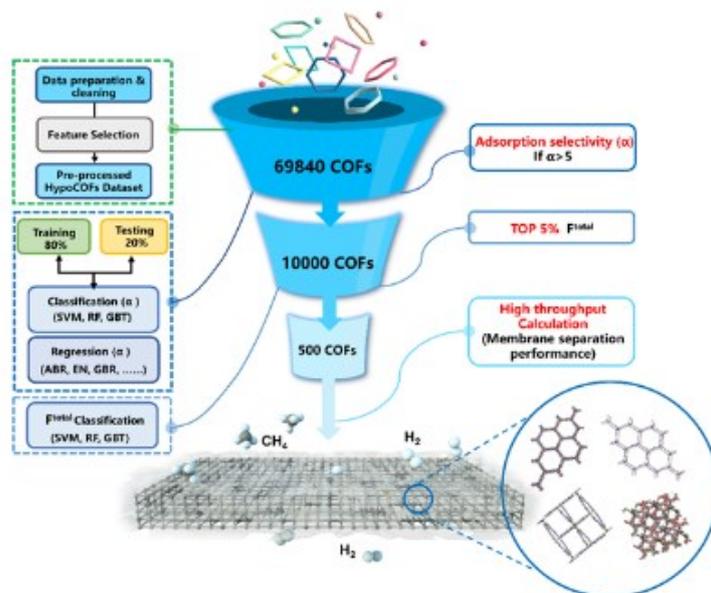
田芸*, 邱勇, 周震*

¹ 郑州大学化学工程学院新能源科学与工程交叉中心, 河南省郑州市, 450001

*Email: ytian009@zzu.edu.cn; zhouzhen@nankai.edu.cn

摘要正文:

通过结合经典密度泛函理论、弦算法和机器学习方法, 我们提出了一种高效且准确预测膜分离性能的通用机器学习框架。通过该框架, 我们在工业条件下对近70,000个COF结构进行了高通量计算和机器学习模型训练, 用于CH₄/H₂膜分离材料的筛选。我们发现, 最优的COF材料性能超越了文献中报道的MOF和COF数据库中的材料, 对CH₄/H₂的吸附选择性超过82, 膜选择性高达248。通过这一框架预测得到的部分高性能膜分离材料已经得到了先前实验工作的验证。此外, 该机器学习框架及其对应的评分系统不仅能够实现对高性能膜分离材料的快速和自动识别, 还有助于全面理解吸附分离和膜分离机理的主导机制。



A universal framework for automatic discovery of membrane materials.

关键词: 经典密度泛函; 机器学习; 膜分离

参考文献

- [1] Y. Tian and J. Wu*, A thermodynamic route for efficient prediction of gas diffusivity in nanoporous materials. *Langmuir* 2017, 33 (42): 11797–11803.
- [2] Y. Tian, W. Fei and J. Wu*, Separation of carbon isotopes in methane with nanoporous material. *Industrial Engineering Chemistry Research* 2018, 57 (14): 5151–5160.
- [3] Y. Qiu, L. Chen, X. Zhang, D. Ping, Y. Tian* and Z. Zhou*, A universal framework to automatically identify high-performance COF membranes for CH₄/H₂ separation. *AIChE Journal* 2024, just accepted.

报告人简介：

田芸，副教授，2012年本科毕业于华东理工大学化学工程与工艺专业，2017年博士毕业于加州大学河滨分校吴建中教授课题组，现就职于郑州大学化工学院。主要应用分子理论，包括经典密度泛函理论和弦算法等，结合机器学习开展多尺度模拟，以微观孔道结构中的流体吸附、扩散和分离机制为主要研究对象，通过人工智能算法和统计热力学理论的结合实现对工况条件下材料的高通量筛选和正-逆向设计。目前主持国家级青年项目一项，省级人才项目和博士后项目一项，已发表SCI论文20余篇。



注：报告人不是学生

A Three-stage Optimization Framework for Achieving Optimal Hydrocyclone's Overall Performance Aligning with Decision-makers' Preferences

Dianyu E^{a, b, c, 1}, Cong Tan^{a, b}, Qing Ye^d, Jiaxin Cui^{a, b}, Zongyan Zhou^{a, b}, Ruiping Zou^d,

Aibing Yu^{d, e}, Shibo Kuang^d,

^a Jiangxi Provincial Key Laboratory for Simulation and Modelling of Particulate Systems, Jiangxi University of Science and Technology, Nanchang 330013, PR China

^b International Institute for Innovation, Jiangxi University of Science and Technology, Nanchang 330013, PR China

^c Alber Particle Science and Technology Research Institute, Nanchang 330000, PR China

^d ARC Research Hub for Smart Process Design and Control, Department of Chemical and Biological Engineering, Monash University, VIC 3800, Australia

^e Centre for Simulation and Modeling of Particulate Systems, Southeast University - Monash University Joint Research Institute, Suzhou 215123, PR China

*Email:dianyu.e@jxust.edu.cn; shibo.kuang@monash.edu

Abstract: Previous hydrocyclone optimizations often neglected interactions among key objectives, potentially weakening overall performance and impeding sustainable progression of hydrocyclone applications. This study presents a three-stage optimization framework for identifying the most suitable hydrocyclone design and operating conditions aligned with decision-makers' preferences. Initially, a novel data-driven predictive algorithm, INFO-ELM, establishes nonlinear relationships between key variables and performance objectives. Subsequently, the preference-inspired cooperative evolutionary algorithm (PICEA-g) captures comprehensive trade-offs among key performance objectives. Finally, a multi-criteria decision-making method (TOPSIS) determines the optimal solution based on decision-makers' preferences. Rigorous cross-validation demonstrates the reliability of INFO-ELM and its superior accuracy compared to classical neural network algorithms. PICEA-g outperforms other advanced multi-objective evolutionary algorithms, facilitating faster and more accurate decision-making. Supported by computational fluid dynamics, the framework is validated across various separation scenarios employing two decision-making strategies. This study offers a comprehensive approach to address trade-offs in hydrocyclone optimization.

Keywords: Hydrocyclone, Three-stage optimization framework, INFO-ELM, PICEA-g, TOPSIS

柔性吸附材料结构智能化调控及其应用

路建美

苏州大学材料与化学化工学部，江苏省苏州市仁爱路 199 号，215123

*Email: lujm@suda.edu.cn

摘要正文：

针对液相和气相中污染物成分多样、性质迥异、作用复杂而难治理的问题，精准构筑吸附材料结构，精细调控材料表面化学特性，建立了智能化高性能柔性吸附材料设计原理。

发现了柔性高分子吸附材料对污染物的作用机制：氢键和 $\pi-\pi$ 作用协同快速选择性吸附强极性污染物，如含氮/氧基团和共轭基团分别与污染物间形成氢键和 $\pi-\pi$ 作用协同，可超快高选择性吸附双酚A等；静电力和范德华力协同高选择性吸附极性非质子污染物，如聚硫酸酯与污染物间形成极性基团间静电力和非极性基团间范德华力作用协同，可选择性吸附DMF等；不同强度范德华力作用组合选择性吸附中等极性和非极性污染物；离子间静电力和 $\pi-\pi$ 作用力协同快速选择性吸附离子型污染物，如含芘聚磺酸盐选择性吸附离子型染料。

提出了在高分子主链中引入柔刚链并存交联剂构建智能化柔性吸附材料新思路：交联剂中引入脂肪链赋予材料伸缩性，伸展时提升吸附倍率、收缩时脱附污染物；引入芳烃链提高材料强度实现重复再生。研究吸附材料表面亲疏水性和电荷效应调控吸附热力学和动力学特性，发现了材料表面亲水性正电荷的吡啶盐与疏水性十八酯基团协同实现秒级吸附，远低于国际报道的4小时。

提出将吸附与催化耦合构建“吸附/催化”双功能材料的学术思路，率先研究并发现了吸附的污染物原位催化转化并迁移出吸附材料而打破吸附平衡的理论机制，使吸附始终处于不饱和状态，实现污染物持续性吸附和催化转化。

关键词： 柔性吸附材料； 污染物降解； 智能结构

参考文献

- [1] F. Zhou, P. Gu, Z. Luo, H. Bisoyi, Y. Ji, Y. Li, Q. Xu, Q. Li*, J. Lu* Unexpected organic hydrate luminogens in the solid state, *Nat. Commun.*, 2021, 12, 2339
- [2] H. Wan, Q. Xu, J. Wu, C. Lian, H. Liu, B. Zhang, J. He, D. Chen, J. Lu* SuFEx-Enabled Elastic Polysulfates for Efficient Removal of Radioactive Iodomethane and Polar Aprotic Organics through Weak Intermolecular Forces, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2022, 61, e2022085
- [3] G. Wang, H. Li, N. Li, D. Chen, J. He, Q. Xu, J. Lu* Construction of Perylene-based Amphiphilic Micelle and Its Efficient Adsorption and In Situ Photodegradation of Bisphenol A in Aqueous Solution, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2022, e.202210619
- [4] L. Yang, Z. Chen, Q. Cao, H. Liao, J. Gao, L. Zhang, W. Wei, H. Li*, J. Lu* Structural Regulation of Photocatalyst to Optimize Hydroxyl Radical Production Pathways for Highly Efficient Photocatalytic Oxidation, *Adv. Mater.*, 2023, 35, 2306758
- [5] Y. Zhou, L. Zhang, Z. Zhu, M. Wang, N. Li, T. Qian, C. Yan*, J. Lu* Optimizing intermediate adsorption over PdM (M=Fe, Co, Ni, Cu) bimetallic for boosted nitrate electroreduction to ammonia, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, e202319029

报告人/墙报展示人简介:

路建美，浙江大学博士，苏州大学教授，俄罗斯工程院外籍院士，长期从事化工分离新材料研究。中国化工学会会士、中国化学会会士和英国皇家化学会会士。主持建设国家发改委“环保功能吸附材料制备技术国地联合工程实验室”和科技部“智能纳米环保新材料及检测技术国际联合研究中心”两个国家级平台。

先后获国家技术发明奖二等奖（2项）、国家科技进步奖二等奖、何梁何利基金科学与技术创新奖各1项以及省部级一等奖4项(均排名1)；以第一/通讯作者在 *Nat. Commun.* (2)、*JACS* (2)、*Adv. Mater.* (13)、*Angew. Chem. Int. Ed.* (18)、*Chem. Eng. J.*(15)等期刊发表SCI论文548篇；获授权发明专利225项(美国专利42项)，技术转化40项；主持国家自然科学基金重点项目（2项）、国家重点研发计划（2项）、国家“863”计划项目等各级纵向科技项目超过60项。

附：报告人是老师

高分子复合材料的多尺度模拟计算：从微观结构到宏观力学

王轩¹, 尹津平¹, 黄鑫¹, 奚帅¹, 赵双良^{1,2}, 徐小飞^{1*}

¹ 华东理工大学 化工学院, 上海, 200237

² 广西大学 化学与化工学院, 广西南宁, 530004

*Email: xuxf@ecust.edu.cn

高分子复合材料由聚合物基体、功能添加剂和填料颗粒组成。其力学性能由聚合物基体、颗粒填充和界面黏附力共同决定。它被广泛应用于航空航天、工业制造和国防安全等领域。其力学性能由基体网络结构、固体填料、填料/基体界面等因素共同决定。由于该体系具有多尺度结构特性和复杂的内部耦合特征, 从微观结构出发定量描述其宏观力学性能仍然是个挑战。针对该挑战, 利用分子动力学方法和宏观热力学理论, 建立了可定量预测颗粒填充高分子复合材料的力学性能的多尺度模型。研究成果为评估高分子复合材料的屈服应力、抗拉强度、初始模量等力学性能提供了有效工具, 为材料的理性设计提供了理论基础。具体的研究内容分为如下三个方面:

(1) 利用随机交联方法构建了高分子基体网络结构, 研究了交联网络的形成动力学特征。进行了单轴拉伸力学性能的模拟计算, 探索了温度和拉伸速率对力学性能的影响规律, 并重点研究了交联度对力学性能的影响。探索了结构缺陷对力学性能的影响规律。总结得到了微观结构(交联度、组成成份和缺陷率等)和宏观力学性能(屈服应力和最大抗拉应力)的构效关系。

(2) 利用连续介质热力学理论构建了一个理论模型, 描述颗粒填充对高分子基体力学性能的影响。该模型综合考虑了颗粒特征参数(如密度、表面积比和粒径分布等)和颗粒与基体的界面作用的影响。

(3) 建立了可定量预测颗粒填充高分子复合材料力学性能的多尺度模型。考虑了聚合物基体、颗粒填充及颗粒-基体相互作用的贡献。研究发现不同粒径的颗粒组合会对材料力学性能产生非线性影响。

关键词: 多尺度模型; 高分子复合材料; 力学性能; 颗粒填充; 颗粒-基体相互作用

致谢: 这个研究工作受到国家自然科学基金的资助(基金号: 21978079 和 22178072)。

参考文献:

- [1] Wang, X.; Zhao, S.; Xu, X. Molecular dynamics study on the stress concentration in polymer networks with dangling chains. *J. Phys. Chem. B.* 2024, 128, 4544.
- [2] Huang, X.; Wang, X.; Wang, Q.; Xu, X.; Zhao, S. Promoting cross-link reaction of polymers by the matrix-filler interface effect: Role of coupling agents and intermediate linkers. *J. Phys. Chem. B.* 2024, 128, 5534.
- [3] Yin, J.; Wang, X.; Tang, W.; Xu, X.; Zhao, S.; Xuan, F. A multiscale model for predicting mechanical properties of

polymer composites. Chem. Eng. Sci. 2023, 282, 119352.

[4] Xi, S.; Cui, M.; Gao, Q.; Zhao, S.; Xu, X. Mechanical properties of polybutadiene rubber with oxidation defects:

Insights from molecular dynamics simulations. Ind. Eng. Chem. Res. 2023, 62, 16447.

[5] Wang, X.; Song, X.; Tang, W.; Zhao, S.; Xu, X. Microstructure effects on mechanical properties of

network-forming polymer systems: An atomistic simulation study. Chem. Eng. Sci. 2023, 280, 118986

介观热力学与电池设计

练成, 刘洪来

华东理工大学, 上海市, 200030

Email: liancheng@ecust.edu.cn

摘要正文: 电化学体系是一个典型的多尺度多物理场过程, 涉及到电场、浓度场、温度场和流场从微观到宏观上的耦合。传统的电化学热力学、动力学和传递理论难以描述多物理场作用下的电化学反应和传递特性。鉴于此, 我们基于分子热力学理论, 以化学势为纽带耦合微观分子特性与宏观外场, 开发了多尺度电化学模拟方法; 揭示了复杂电化学界面电子转移-分子/离子传质规律和调控策略; 结合智能算法阐明了电化学反应-热质传递耦合机制, 指导了高性能电化学材料与器件的设计开发。

替代甾体行业重金属的绿色催化剂设计、制备及应用

王建国

浙江工业大学, 杭州, 310032

Email: jgw@zjut.edu.cn

摘要正文: “绿色化”不仅符合工业和信息化部、国家发展改革委等八部门联合印发的《关于加快传统制造业转型升级的指导意见》, 强调制造业高端化、智能化、绿色化产业发展趋势, 也是学科发展《化学工程发展战略: 高端化、绿色化、智能化》的必然选择。甾体药物广泛用于消炎、治疗心血管疾病、肿瘤、人体器官移植排异、内分泌失调和老年性疾病等, 是仅次于抗生素的第二大类药物。甾烯、甾醛是甾体药物中间体的主要品种 (约占30%以上), 但生产过程中依然重金属 (铅、铬酸酐) 等, 存在毒性高或“三废”严重, 风险大等问题, 成为甾体药物中间体制造的关键瓶颈。

针对甾烯半加氢还原到甾烯工艺中米非司酮、烯丙雌醇产品采用含铅、喹啉的林德拉催化剂问题, 在揭示铅、喹啉的主要作用是毒化活性位、降低反应活性的基础上, 创新地提出通过载体调控钨电子与几何结构的思路, 采用分子群动态吸附附动力学模型设计真实催化剂, 改善界面反应微环境、优化氢气的活化方式, 从而促进产物的脱附、提高活性与选择性, 开发出不需要任何添加剂的负载钨催化剂。针对系列甾醇氧化到甾醛工艺中采用当量铬氧化剂的难题, 揭示铬氧化机制在于形成铬酸加合物, 创新提出均相 (氮氧自由基)-非均相 (镍及催化) 协同电催化策略形成了类铬氧化机制, 研发出环境友好非铬电催化剂、构筑三维多孔膜电极及持续流动电反应器解决传质、传热难题, 实现了传质、传热与反应的耦合, 开发了绿色本质安全工艺, 实现了系列甾醛的制备。

关键词: 催化剂, 智能设计, 多尺度模拟

参考文献

- [1] Zhao J.Y., Yao Z.H., Bunting R.J., Wang J.G. *ACS.Catal.* 2023, 13, 15054-15073
- [2] Wei Z.Z., Zhao Z.J., Qiu C.L., Huang S.T., Yao Z.H., Wang M.X., Chen Y., Lin Y., Zhong X., Li X.N., Wang J.G., *Nat Commun.* 2023, 14, 661-11
- [3] Li S.Q., Wang S.B., He J.H., Zhong X., Wang J.G., *Angew.Chem.Int.Ed.*, 2023, e202306553
- [4] Li S.Q., Wang S.B., Wang Y.H., He J.H., Li K., Xu Y.J., Wang M.X., Zhao S.Y., Li X.N., Zhong X., Wang J.G., *Adv. Funct. Mater.* 2023, 33, 2214488.
- [5] He J.H., Li S.Q., Li C., Li K., Xu Y.J., Wang M.X., Zhao S.Y., Zhang J.F., Zhong X., Li X.N., Zhang Z.B., Wang J.G., *AIChE J.* 2023, e18153.

报告人简介:



王建国, 教授, 博士生导师。2016 年获得国家杰出青年基金, 2019 年入选国家“万人计划”科技创新领军人才。长期坚持负载型金属催化剂多尺度模拟、制备及应用研究。已在 *AIChE J.*, *Science*, *J. Am. Chem. Soc.* 等化学化工期刊上发表研究论文 150 多篇。先后获得中国化工学会基础研究成果一等奖, 天津市自然科学, 山东省科技进步, 中国有色金属协会等奖励多项。作为项目负责人, 主持国家、省部级及企业开发项目二十多项。授权专利 40 余项, 多项目专利成果实现应用, 其中一项专利实现超千万转让。

附: 报告人非学生

有机杂化硅膜的分子模型重构与气体传输机理探讨

靳栋梁¹, 钟璟^{1,*}

¹常州大学石油化工学院, 江苏省常州市武进区滆湖中路 21 号分析测试楼, 213164

*Email: zjwyz@cczu.edu.cn

摘要正文: 有机杂化硅膜具有优异的化学稳定性和可调的亚纳米孔径结构, 在气体分离应用中受到广泛关注^[1, 2]。但其化学结构-孔隙拓扑-气体渗透性能之间的构-效关系尚不清晰, 因此构建有机杂化硅膜分子模型对于分离膜材料及过程智能化设计具有重要的意义^[3]。分子模拟可以提供各种有机杂化硅膜的分子结构和孔隙拓扑信息, 还是测量膜材料气体渗透性能的一种重要技术手段^[4]。本文依据bis(triethoxysilyl)thane (BTESE)膜的物化参数(如原子比例), 采用模拟退火算法重构了具有不同密度的BTESE膜材料的纳米尺度模型。与实验XRD图谱对比发现, 该分子模型能够捕获BTESE纳米结构的无定形态特性。借助径向分布函数、键级分布、原子局部电荷分布等表征深度解析了BTESE分子模型, 解析结果表明该分子模型成功预测出BTESE膜的碳-硅-氧的无定形态骨架。解析的分子结构与预测(或实验)结果一致表明了该模拟方法的稳健性。此外, 通过模拟吸附过程测量了重构的分子模型的比表面积和孔隙尺寸分布, 得到的孔隙拓扑结构与实验表征结果一致。对比孔隙尺寸分布和各种气体在BTESE中的渗透性能(图1), 利用该模型成功揭示了孔径与气体渗透性之间的构-效关系。

本文将模拟退火方法应用于不同有机杂化硅膜材料(BTESE、BTESA、TEOS等)的分子结构重构研究中, 为构-效关系数据库建立提供了一种可行方案, 将促进膜材料与膜分离过程的智能化技术研发。

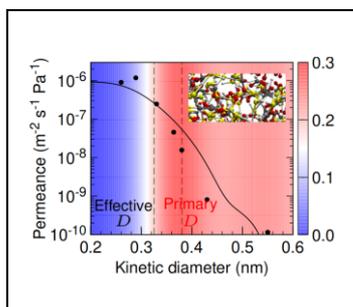


Fig. 1 Gas permeance as a function of the molecular kinetic diameter for BTESE membrane at $T = 473.15$ K. The color map corresponds to pore size distribution on two-dimensional surface. The red and green dashed lines are for the expected and minimum pore sizes, respectively. Results are shown for the BTESE model under study with density of $\rho = 1$ g/cm³.

关键词: 分子模型; 退火算法; 有机杂化硅; 孔隙拓扑; 气体渗透

参考文献

- [1] M. Kanezashi, K. Yada, T. Yoshioka, and T. Tsuru Design of silica networks for development of highly permeable hydrogen separation membranes with hydrothermal stability. *J. Am. Chem. Soc.* 2009, 131: 414.
- [2] X. Ren, and T. Tsuru Organosilica-based membranes in gas and liquid-phase separation. *Membranes* 2019, 9: 107.
- [3] M. Guo, M. Kanezashi, H. Nagasawa, L. Yu, K. Yamamoto, T. Gunji, J. Ohshita, and T. Tsuru Tailoring the microstructure and permeation properties of bridged organosilica membranes via control of the bond angles. *J. Membr. Sci.* 2019, 584: 56.
- [4] D. Jin, T. Zhang, X. Ren, M. Guo, G. Li, Y. Ji, and J. Zhong Molecular reconstruction of bis(triethoxysilyl)ethane (BTESE)-derived membranes using Simulated Annealing Algorithm. (submitted).

报告人简介：

靳栋梁，常州大学石油化工学院，讲师，博士毕业于法国 Univ. Grenoble Alpes 大学（导师：Dr. Benoit Coasne）。研究聚焦微孔材料限制空间内的吸附、输运以及结晶机制，采用多尺度模拟探究其热力学和动力学行为，建立微观特征与宏观性质之间的联系桥梁，为研发新材料和开发新技术提供科学指导和理论依据。研究领域涵盖天然气水合物、膜分离材料以及离子液体，得到了同行专家的高度评价，在 Nat Mater, PNAS, Langmuir, JPCB, J Membr Sci 等国际学术期刊发表论文 20 篇。



附：报告人非学生

机器学习辅助纤维基油水分离复合材料的结构设计与性能预测

韩青源^{1,2}, 岳秀^{1,2}, 马鹏程^{1,2,*}

¹中国科学院新疆理化技术研究所环境科学与技术研究室, 中国科学院特殊环境功能材料与器件重点实验室, 乌鲁木齐, 830011

²中国科学院大学材料科学与光电技术研究中心, 北京, 100049

*Email: mapc@ms.xjb.ac.cn

摘要正文: 伴随社会经济发展, 石油资源开采愈发频繁, 不可避免地产生了泄露与水体污染事件, 对生态环境与人类健康造成严重威胁; 而油品在炼制与储运过程中, 也不可避免地引入了少量水, 影响油品质量并损坏机械设备与交通工具。因此, 从环境治理与提高能源开发利用效率的角度考虑, 亟需设计制备出对含油污水或燃油除水过程具备高效分离效率的材料。油水分离材料的基本原理在于利用油水两相的表面性质差异, 实现对油或水的特异性浸润与油水混合物的有效分离, 可通过在材料表面构建微米级粗糙结构或修饰低表面能物质等方式实现。目前, 纤维膜材料是实现油水分离的重要方法, 例如聚酰亚胺、聚四氟乙烯、聚丙烯腈、碳纤维、玻璃纤维等有机/无机纤维材料, 上述材料在使用过程中仍存在分离效率不稳定、在油中溶胀、耐温性差、加工困难、成本高、难以系统集成等不足。基于此, 为指导纤维基油水分离材料结构组成的高效设计与优异性能实现, 采用传统实验驱动的分析方法时, 面临材料种类与改性方法多样、结构/性能表征繁琐的局限, 且缺乏对其结构-性能关系的全面把握。机器学习 (Machine learning, ML) 作为一种数据驱动的研究方法, 可同时对多变量进行研究, 给出全局最优解, 大大加速材料的设计过程, 此外还可得到各自变量的相对重要性及潜在的交互作用, 协助设计者加深对材料结构-性能关系的机理认识。综上, 本研究从课题组前期研究与他人文献中采集了关于纤维基油水分离材料的结构-性能数据集, 将表面润湿性、表面粗糙度、表面电位、孔隙结构等关键参数作为特征, 将油水分离效率作为标签, 输入基于数据挖掘与可解释性的ML算法中建模预测。结果显示, 随机森林模型 (RF) 对数据集实现了良好训练, 相对误差 (MAPE) 低至2.98%, 相关系数 (R^2) 高达0.815, 模型还在未代入的课题组测试集数据上表现出良好的泛化能力, MAPE低至2.63%。最后, 基于SHAP可解释性分析, 探究了纤维结构特征影响其油水分离性能相对重要性排序如下: 表面润湿性 > 孔隙结构 > 表面粗糙度 > 表面Zeta电位。本研究扩充了对纤维基油水分离材料构效关系的理论认识。

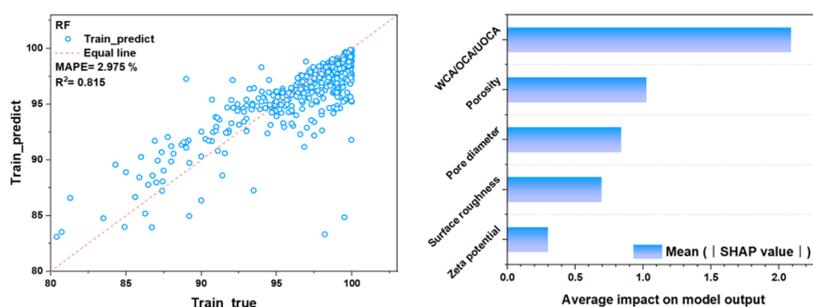


Fig. 1 Prediction of oil-water separation efficiency by machine learning and the relative impact importance of the various structural parameters for fiber-based oil-water separation materials

关键词: 机器学习; 油水分离材料; 结构-性能关系

参考文献

[1] Y. R. Zhang, B. W. Meng, B. Hao, and P. C. Ma. Aggregation-induced demulsification triggered by the hydrophilic fabric for the separation of highly emulsified oil droplets from water. *Aggregate*. 2022, 3: e131.

- [2] F. X. Ma, B. Hao, X. Y. Xi, R. Wang, and P. C. Ma. Aggregation-induced demulsification technology for the separation of highly emulsified oily wastewater produced in the petrochemical industry. *Journal of Cleaner Production*. 2022, 374: 134017.
- [3] C. Chen, D. Weng, A. Mahmood, S. Chen, and J. Wang. Separation Mechanism and Construction of Surfaces with Special Wettability for Oil/Water Separation. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2019, 11: 11006-11027.
- [4] K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright, O. Isayev, and A. Walsh. Machine learning for molecular and materials science. *Nature*. 2018, 559: 547-555.
- [5] J. R. Hattrick-Simpers, J. M. Gregoire, and A. Gilad Kusne. Perspective: Composition-structure-property mapping in high-throughput experiments: Turning data into knowledge. *APL Materials*. 2016, 4: 053211.

报告人/墙报展示人简介:

韩青源, 博士毕业于北京化工大学-材料科学与工程学院-先进弹性体材料研究中心 (张立群院士团队), 师从橡胶复合材料领域的知名学者吴友平教授, 开展橡胶复合材料的相关基础研究。主要集中于天然橡胶及其并用体系的微观结构、增强填料与界面、动态粘弹性、宏观力学性能的关联与机理研究, 旨在为轮胎材料的实际应用提供理论指导, 如耐疲劳裂纹扩展与耐老化的胎侧、良好平衡“魔三角”性能 (滚动阻力、抗湿滑性、耐磨性) 的“绿色轮胎”胎面。此外, 还开展了关于手性/亲水性有机硅热塑性弹性体的合成与生物学功能研究。申请人在攻读博士学位期间参与国家重点研发计划 1 项、国家自然科学基金面上项目 1 项。近年来取得了一定的科研成果: 以第一作者身份发表 SCI 论文 5 篇及中文核心期刊论文 1 篇, 授权国家发明专利 2 项。本人于 2022 年 7 月入职中国科学院新疆理化技术研究所环境科学与技术研究室, 从事机器学习与人工智能在玄武岩纤维高性能化与油水分离功能化中的相关应用研究, 目前已获批资助: 新疆维吾尔自治区科技厅自然科学基金青年项目 1 项、自治区人社厅“天池英才”引进计划项目 1 项。



附: 报告人是学生

纳滤膜智能设计及传质机制研究

梁立军*, 李天宇, 赵子航, 吴明, 覃瑜欢

杭州电子科技大学自动化(人工智能)学院, 杭州钱塘区 2 号大街杭电下沙校区 10 教-401, 310000

Email: llj@hdu.edu.cn

摘要正文:

钠离子通道以超高的效率选择性地将钠离子跨细胞膜进行传导。通过微秒级的分子动力学模拟, 我们观察到了由水分子介导的“软敲击”离子渗透现象, Glu177-Glu177间四个氧原子距离的变化发挥着重要作用。基于这一现象, 我们利用高通量计算和机器学习方法设计亚纳米孔道滤膜。这种纳滤膜能够充分利用自然界经过数十亿年进化所形成的提高传输效率和特异性的策略, 使其兼具高渗透性和高选择性。同时我们进一步探索了纳滤膜的分离传质机制, 以期为进一步设计高性能纳米滤膜打下坚实的基础。

关键词: 机器学习; 滤膜设计; 分子模拟

参考文献

- [1] L. Liang, Z. Zhang, H. Wang, et al. Direct proof of soft knock-on mechanism of ion permeation in a voltage gated sodium channel. *Int. J. Bio. Macro.*, 2021, 188: 369-374.
- [2] Y. Wang, L. F. Villalobos, L. Liang, et al. Scalable weaving of resilient membranes with on-demand superwettability for high-performance nanoemulsion separations. *Sci. Adv.*, 2024, 10(26): eadn3289.
- [3] X. Ma, C. Lan, H. Lin, et al. Designing desalination MXene membranes by machine learning and global optimization algorithm. *J. Mem. Sci.*, 2024, 702: 122803.

报告人/墙报展示人简介:



梁立军, 现为杭电自动化学院副研究员, 硕士生导师, 杭州电子科技大学上虞研究院副院长, 于 2009 年和 2014 年分别于浙江大学获学士和博士学位, 2015 年于瑞典皇家工学院生物技术和计算专业博士毕业, 2015 年-2016 年瑞典皇家工学院博士后, 2016 年入职杭州电子科技大学并入选浙江省海外留学高层次人才, 中国化工学会化工大数据和智能设计专委, 浙江省生物信息学会人工智能专委会, 欧洲环境、生态与可持续发展华人学会 (CESEES) 青年理事会委员。梁立军博士的主要研究方向为: 人工智能设计膜材料、智能信息感知等, 近年来在计算材料和人工智能领域等国际知名刊物上发表包括 *Nature Computational Science*、*Advanced Materials*、*Angwante Chemie* 在内 SCI 论文 80 余篇, 授权专利 6 项, 计算机软著 3 项。主持或者参与浙江省自然科学基金, 国家自然科学基金, 国家重点研发计划, 长三角协同攻关项目等项目, 成果获省部级社会力量奖 1 项。

附: 报告人非学生

数据驱动离子杂化多孔材料设计及低碳烃吸附分离性能研究

胡建波*

之江实验室-新材料计算研究中心, 杭州市余杭区中泰街道科创大道之江实验室, 311121

*Email: jianbohu@zhejianglab.edu.cn

摘要正文: 烯烃裂解气中炔烃的深度脱除是聚合级烯烃制备过程的关键技术。吸附分离技术是高效节能的低碳烃分离技术, 离子杂化多孔材料表现出良好的烯烃炔烃分离选择性和应用潜力, 但其分离性能仍待提高。离子杂化多孔材料种类多样, 现有的材料开发方法工作量庞大, 设计及优选流程长, 亟需开发高效材料设计方法。此外, 现有材料分离机制较为单一, 难以实现复杂体系的高效分离, 亟需开展材料分子识别机理与分离强化机制研究。报告人针对离子杂化多孔材料高效设计需求, 在废弃实验数据基础上, 结合材料基因组原理和机器学习算法, 筛选并设计出2种兼具高吸附容量和高分离选择性的新型离子杂化多孔材料, ZU-96和ZU-63。其中, ZU-96材料具有标杆性的二氧化碳/乙炔分离性能, 在298 K和0.1 bar条件下, 其二氧化碳吸附量达到了83.2 cm³/cm³, 二氧化碳/乙炔IAST选择性达到了81.5。同时, 结合机器学习算法定量描述了材料结构特征与吸附性能的关系, 为新型吸附剂的设计提供更精确、直观的指导^[1]。针对复杂裂解气中炔烃一步脱除需求提出常规尺寸筛分机制与反向筛分机制耦合的分离策略, 同时识别裂解气各组分尺寸和极性多重差异, 在此基础上, 构建多功能分子分离器ZU-33, 首次实现了含十余种烃类裂解气中乙炔、丙炔、丙二烯的一步超深度脱除^[2], 多机制耦合的分离策略也实现了丙烯中丙炔的高选择性高容量脱除^[3]。

关键词: 机器学习; 气体分离; 离子杂化多孔材料; 低碳烃; 分离机制

参考文献

- [1] J. B. Hu, J. Y. Cui, B. Gao, L. F. Yang, Q. Ding, Y. J. Li, Y. M. Mo, H. J. Chen, X. L. Cui, and H. B. Xing*. Machine-learning-assisted exploration of anion-pillared metal organic frameworks for gas separation. *Matter*, 2022, 11, 3901.
- [2] Q. J. Wang#, J. B. Hu#, L. F. Yang, Z. Q. Zhang, T. Ke, X. L. Cui*, and H. B. Xing*. One-step removal of alkynes and propadiene from cracking gases using a multi-functional molecular separator. *Nature Communications*, 2022, 13, 2955.
- [3] Y. J. Jiang#, J. B. Hu#, L. Y. Wang#, W. Q. Sun, N. Xu, R. Krishna, S. Duttwyler, X. L. Cui, H. B. Xing, and Y. B. Zhang*. Comprehensive Pore Tuning in an Ultrastable Fluorinated Anion Cross-Linked Cage-Like MOF for Simultaneous Benchmark Propyne Recovery and Propylene Purification. *Angewandte Chemie International Edition*, 2022, 61, e202200947.

报告人/墙报展示人简介:



胡建波, 之江实验室新材料计算研究中心, 副研究员, 博士毕业于华中科技大学。研究聚焦多孔材料设计及其性能研究, 包括基于大数据+人工智能的材料定向设计及高通量筛选研究, 以及基于计算化学的材料性能影响机制及构效关系研究。目前以一作/共一作者在 *Matter*, *Nat. Commun.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Chem. Sci*, *Fuel* 等国际知名期刊发表论文 20 篇, 作为课题负责人主持国家重点研发计划子课题、国自然重点项目子课题, 国自然青年基金等项目共 6 项。

3. 墙报

基于机理与数据驱动的离子液体粘度数据获取

范晶¹, 陆小华^{1*}

¹南京工业大学, 中国江苏省南京市江北新区浦珠南路 30 号, 211816

*Email: xhlu@njtech.edu.cn

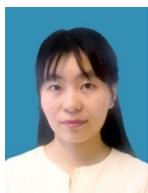
摘要正文: 黏度是离子液体智能设计过程中的关键物性数据, 然而, 目前黏度数据的快速、精准获取仍存在“测定难, 测不准”的难题。COSMO-RS是基于统计热力学和量子化学的软件, 可根据分子结构快速完成物质物性的预测。其中的离子液体黏度计算模块采用Philipp Eiden等人^[1]的黏度模型, 前期对55个离子液体体系263.15~373.15K温度范围的807组黏度数据研究发现, COSMO-RS计算值较真实实验黏度值的平均相对误差高52.45%。基于此, 本工作深度剖析了COSMO-RS中离子液体黏度模型计算偏差的分布规律, 并采用6种不同的机器学习回归算法, 包括支持向量机(SVR)、随机森林(RF)、神经网络(MLPR)、和系列集成算法(XGBoost, CatBoost, LightGBM), 建立了离子液体黏度模型系统偏差(η_{cosmo}/η_{exp})和量子化学描述符之间的定量关系。结果表明, COSMO-RS中离子液体黏度模型的系统偏差的关键影响因素为偶极矩和平均势能偏差; 其中, Catboost模型的预测性能最好, 训练集R²为0.9999, 测试集R²为0.9940, COSMO-RS离子液体黏度平均相对误差由52.45%降至1.54%。

关键词: 黏度; 离子液体; COSMO-RS; 量子化学描述符; 机器学习

参考文献

- [1] Philipp Eiden, Safak Bulut. In Silico Predictions of the Temperature-Dependent Viscosities and Electrical Conductivities of Functionalized and Nonfunctionalized Ionic Liquids, *J. Phys. Chem. B* 2011, 115, 300-309.
- [2] Jing Fan, Xiaohua Lu*. Hybrid Data-Driven and Physics-Based Modeling for Viscosity Prediction of Ionic Liquids. *Green Energy&Environment*. (DOI: 10.1016/j.gee.2024.01.007)

墙报展示人简介:



范晶, 2021年毕业于西安科技大学, 获得化学工程与工艺学士学位; 2024年毕业于南京工业大学, 获化学工程与技术硕士学位。目前在南京工业大学攻读博士学位, 导师为陆小华教授和朱育丹教授, 研究方向为非常规条件下物性数据智能化获取。她擅长将人工智能技术与化工理论相结合, 基于数据驱动和机制驱动的方法构建数学模型, 以快速、精准地获取化工过程中的基础物性数据。

联系手机: 17314413162

联系邮箱: dearfj@njtech.edu.cn

附: 墙报展示人为学生。

蛋白质吸附在氧化石墨烯膜表面的分子洞察：计算机模拟研究

张聪^{1,2}, 陆小华^{1,2}, 朱育丹^{1,2*}

¹南京工业大学, 中国江苏省南京市江北新区浦珠南路 30 号, 211816

²苏州实验室, 中国江苏省苏州市工业园区若水路 388 号, 215125

*Email: ydzhu@njtech.edu.cn

摘要正文: 膜污染是膜基过滤技术开发和实际应用中的一个不可避免的问题, 尤其是蛋白质作为典型的污染物造成的吸附污染通常会对膜造成不可逆的伤害。因此, 深入探究蛋白质在膜表面的吸附机理对于减缓膜污染以及延长膜的使用寿命具有重要意义。为此, 在本项研究中, 我们使用分子动力学模拟从微观角度来揭示牛血清蛋白(BSA)在氧化石墨烯膜(GO)表面的吸附污染机制。进一步, 我们在蛋白质吸附到膜表面后向系统中加入一个平行于表面的速度恒定的水流来模拟蛋白质在表面的解吸附过程, 能够帮助理解实际应用中的膜清洗过程中的微观机制。

关键词: 膜污染; 蛋白质; 氧化石墨烯(GO)膜; 计算机模拟

墙报展示人简介:



张聪, 2019年毕业于安徽理工大学, 获得化学工程与工艺学士学位; 2022年毕业于南京工业大学, 获化学工程硕士学位。目前在南京工业大学攻读博士学位, 研究方向为膜污染。

附: 墙报展示人为学生。

CO₂/CH₄ 在聚酰亚胺膜中分离性能的分子动力学模拟研究

刘翔¹, 赵双良^{1,2}, 徐小飞^{1,*}

¹华东理工大学 化工学院, 上海, 200237

²广西大学 化学化工学院, 广西南宁, 530004

*E-mail: xuxf@ecust.edu.cn

摘要: 利用分子动力学模拟方法, 构建了多种聚酰亚胺分子的膜结构, 研究了 CO₂/CH₄ 混合物在膜中的吸附和分离性能, 考虑了气体渗透过程中膜柔性和膜塑化等因素的影响。模拟计算的预测结果与实验数据具有较好的吻合性, 从而验证了模型构建的有效性。研究表明, 气体在膜中的扩散主要由膜的平均孔径、气体分子的大小及其与膜的相互作用综合决定。当气体扩散率相差较小时, 渗透选择性主要由 CO₂ 和 CH₄ 在膜中的溶解度差异决定。气体渗透过程中, CO₂ 强烈吸附在膜中, 膜的平均孔径增加。膜的平均孔径与 CO₂ 渗透性之间存在定量关系。我们的研究揭示了聚酰亚胺膜分离 CO₂/CH₄ 的微观机制, 并为设计高性能聚合物膜提供微观见解。

关键词: 聚酰亚胺膜; CO₂/CH₄ 分离; 气体分离; 膜分离

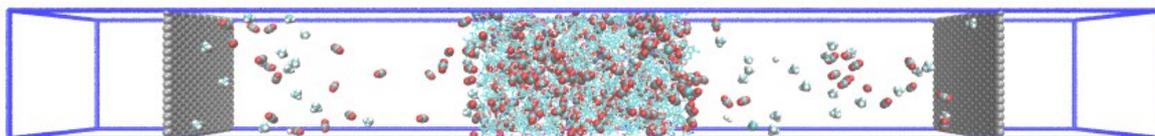


图 气体分离膜的分子动力学模拟模型

第 2 分会场

过程工程物性数据库

1. 主题报告

基于无监督学习策略构建晶体结构原型数据库

罗树林*

苏州大学功能纳米与软物质研究院，江苏省苏州市苏州工业园区仁爱路 199 号，215123

*Email: shulinluo@outlook.com

摘要正文：材料结构及物性数据库、高通量计算、机器学习三者的联合发展为材料科学家提供了数据驱动材料设计新范式。新范式下，候选新材料往往以基于已有材料空间结构框架进行元素替换，或基于已有化学组分进行结构演变的方式创建。材料空间结构框架和化学组分一起构成材料结构原型。获知材料结构原型对构建并筛选出高质量新材料至关重要。因此，我们基于无监督学习策略，通过对所有已知无机晶体材料局域原子环境进行聚类分析，构建了一个高质量大型无机晶体结构原型数据库 ICSPD。同时发展了一套晶体结构原型生成方法与软件包 SPGI。我们使用 ICSPD 和 SPGI 构建了一系列 $MgCl_2$ 体系，并计算其聚合能、带隙值等物性，以验证 ICSPD 和 SPGI 的实用性和有效性。

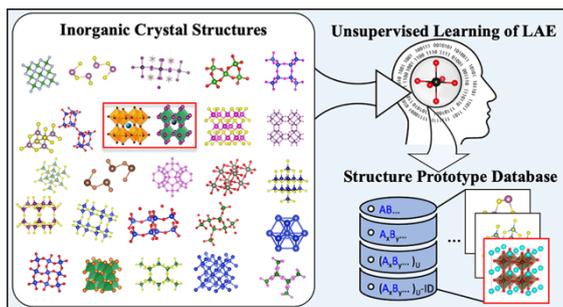


Fig. 1 Constructing the inorganic crystal structure prototype database based on unsupervised learning of local atomic environments (LAE)

关键词：晶体结构原型；数据库；局域原子环境；无监督学习聚类算法

参考文献

- [1] S. Luo, B. Xing, L. Zhang et al. Inorganic Crystal structure prototype database based on unsupervised learning of local atomic environments. *J. Phys. Chem. A* 2022, 126(26): 4300-4312.

基于数实融合的流程工业智能研发平台

韩尚伯¹, 高翔^{1,*}

¹浙江大学, 玉泉校区, 310027

*Email:12027012@zju.edu.cn

摘要正文: 流程工业（能源/化工等）是我国支柱性产业，以时序数据为主要数据载体在人工智能时代，如何通过人工智能赋能流程工业特有的时序数据，构建起流程工业的专用智能模型，解决异常检测、故障识别、优化控制、参数预测、软测量等工程问题，已然成为行业未来发展趋势。然而流程工业的时序数据获取存在诸多阻碍，如：数据监测不完备，故障等特殊工况数据确实，数据保密性强，因此难以使用工业数据直接用于智能模型开发。平台致力于依托动态仿真技术（对标数字孪生），精准且完备地还原流程工业的时序数据，进而支撑智能模型的开发，形成人工智能与时序数据的融合范式，短期内志在助力相关学科的科学研究与人才培养，长期希望推动流程工业数智化改革进程。平台建设对标美国田纳西-伊斯曼仿真平台，美国田纳西-伊斯曼仿真平台已经论证了通过动态仿真技术获取时序数据，可以用于支撑流程工业智能的科学研究。但是该平台覆盖的工业流程仅有一套，解决的工程问题主要集中于故障诊断研究，并在近些年暂无更新。因此我们所提出的基于数实融合的流程工业智能研发平台希望可以面向更多的工程对象、更多的工程问题，为相关的学术研究、人才培养、产业应用提供支撑。平台现由中国工程院院士高翔联合东方仿真集团牵头建设，与浙江大学智海平台、天津大学、北京化工大学、南京理工大学等高校联合建设。



Fig. 1 Platform construction ideas

Fig. 2 Platform construction architecture

关键词: 动态仿真; 时序数据; 人工智能; 助研助学助产

报告人/墙报展示人简介:



韩尚伯, 浙江大学能源工程学院在读博士生, 师从高翔院士, 主要从事能源/化工装置的动态仿真建模、智能控制与智能诊断研究。

附: 报告人/墙报展示人为学生

2. 特邀报告

物理约束动态模态分解方法实现数据与机理的快速融合计算

贾胜坤^{1,*}, 殷雨辉¹, 罗祎青¹, 袁希钢^{1,*}

¹ 化学工程联合国家重点实验室, 天津大学化工学院, 天津 300072

*Email: jiask@tju.edu.cn; yuanxg@tju.edu.cn

摘要正文: 化工流体和流程的模拟计算在化学工程研究中发挥着重要的作用, 但繁重的计算负担和冗长的计算时间, 都严重限制了模拟计算在很多场景中的应用。近年来, 能够快速输出结果的机器学习/数据驱动方法, 被广泛应用于化工计算中, 而在其中进一步集成机理模型强化预测效果的研究已成为前沿热点。然而, 目前流行的方法大多是将复杂神经网络作为快速计算模型, 同时将机理模型作为约束条件进行网络的优化训练, 如嵌入物理信息的神经网络 (Physics-Informed Neural Networks, PINN), 训练难度很大, 且需要较长的训练时间。为此, 本报告提出了一种数据驱动与机理模型的快速融合计算框架, 在动态模态分解方法 (Dynamic Mode Decomposition, DMD) 得到的线性模型中, 以滤波校正的方式融合机理模型的方程, 避免复杂的优化训练。此快速融合方法目前已成功应用于流体和精馏单元的模拟计算中。在DMD方法预测失效的行波与激波问题中, 本报告提出的融合方法仍然可以进行有效预测, 长时间预测误差在1%左右。提出的融合方法还可以实现数据与机理间的权衡抉择, 且在含有数据噪声甚至数据缺失的情景下仍然有效。

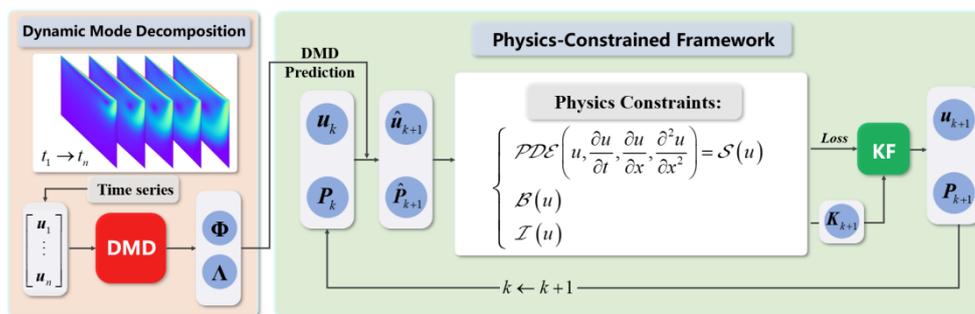


Fig. 1 The framework of Physics-constrained dynamic mode decomposition

关键词: 物理约束的机器学习; 数据与机理融合; 动态模态分解; 计算流体力学; 精馏模拟

报告人/墙报展示人简介:

贾胜坤, 天津大学化工学院, 副研究员, 化学工程联合国家重点实验室成员, 2018 年博士毕业于天津大学。研究方向为面向化学工程湍流传质与过程仿真的多源融合计算理论、方法与应用, 综合机理与数据计算方法的各自优势, 应用于化工过程设备与复杂化工流程开发, 具体包括辅助湍流传质计算、流场稀疏测量重建、拓扑结构优化设计, 以及全流程高效模拟仿真、复杂单元数字孪生建模、流程工艺快速优化、过程先进优化控制等。近年来, 以一作或通讯发表论文 40 余篇, 包括 AIChE Journal、Chemical Engineering Science 以及 Industrial and Engineering Chemistry Research 等化工领域期刊与挪威科技大、法国国家科学研究中心、美国明尼苏达大、卡内基梅隆大以及耶鲁大学统计与数据科学系等国际高校机构进行深入学术合作。

附: 报告人非学生

第 3 分会场

介科学、过程模拟与智能化前沿交叉

1. 主题报告

多相反应器的 OpenFOAM 模拟与应用研究

陈建华^{1*}, 焦云鹏^{1,2}, 温凯杰^{1,2}, 毕磊^{1,3}, Kamran Shah^{1,2}

¹中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京, 100190

²中国科学院大学化学工程学院, 北京, 100049

³天津大学化学工程学院, 天津, 300072

*Email: jhchen@ipe.ac.cn

摘要正文: 针对多相反应器内复杂过程, 考虑介尺度结构的影响, 以气液、气固流动体系为研究对象, 基于开源计算流体力学平台OpenFOAM开展数值模拟工作, 对气液鼓泡流的气泡诱导湍流[1]、气固鼓泡床内的能耗分解[2]进行了介尺度建模与分析, 并拓展应用至污水处理池[3]、精馏塔[4]、颗粒撞击流[5]等体系。在此基础上, 进一步介绍了应用OpenFOAM开展釜式法高压聚乙烯、生物油加氢、磷酸反应消化槽等体系的模拟优化实例, 探讨了其中面临的问题及其对人工智能技术应用的需求, 并介绍了OpenFOAM与深度学习相结合加速模拟的研究进展[6-7]。

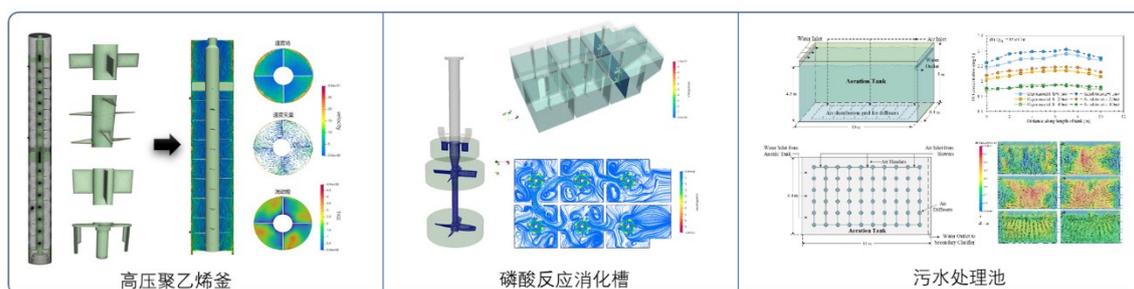


Fig. 1 Simulated cases of multiphase reactors.

关键词: 多相流; 反应器; 数值模拟; 介尺度; 深度学习

参考文献

- [1] Y. Jiao, L. Wang, J. Chen A mesoscale bubble-induced turbulence model and simulation of gas-liquid flows[J]. *Phys. Fluids*. 2023, 35: 013314.
- [2] L. Bi, Y. Jiao, C. Liu, J. Chen, W. Ge Energy budget of cold and hot gas-solid fluidized beds through CFD-DEM simulations[J]. *Particuology* 2024, 89:153-171.
- [3] K. Shah, Y. Jiao, J. Chen CFD investigation of dissolved oxygen distribution in a full-scale aeration tank of an industrial wastewater treatment plant, *J. Water Process Eng.* 2024, 59:105078.
- [4] 焦云鹏, 周晓庆, 陈建华, 基于OpenFOAM的精馏塔内气液两相流传热传质模拟[J]. *过程工程学报*, 2024, 24(4):391-402.
- [5] L. Bi, J. Chen, C. Liu, W. Ge Study of oblique granular impingement flow through CFD-DEM simulations and energy consumption statistics. *Submitted to Powder Technol. under second review.*
- [6] 温凯杰, 郭力, 夏诏杰, 陈建华, 一种耦合 CFD 与深度学习的氣固快速模拟方法[J]. *化工学报*, 2023, 74(9):3775-3785.
- [7] K. Wen, L. Guo, Z. Xia, S. Cheng, J. Chen A hybrid simulation method integrating CFD and deep learning for gas-liquid bubbly flow, *Chem. Eng. J.* 2024, 495:153515.

报告人简介:

陈建华, 男, 1981, 副研究员, 1999-2006 年就读于中国矿业大学, 获工学学士、硕士学位, 2011 年在中国科学院过程工程研究所获化学工程博士学位, 英国帝国理工学院化工系访问学者 (2020.11-2021.11)。主要从事介科学与多相流数值模拟工作, 主持国家自然科学基金面上项目、中科院先导专项子课题、国家重点实验室自主课题等基础研究项目, 积极开展与工业界的合作, 在国内外主流学术期刊发表论文 30 余篇, 参与撰写学术专著 2 部, 担任多个学术期刊的审稿人, 已授权软件著作权 2 项。

附: 报告人/墙报展示人非学生

基于人工智能的流化床反应器原位测量与高精度模拟的深度融合

郭强^{1*}, 管小平, 张璟昌, 许秋石, 杨宁^{1*}

中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室

*Email: guoqiang@ipe.ac.cn; nyang@ipe.ac.cn

摘要正文:

测量和模拟是理解流化床气固两相流最重要的两种方法, 已有大量研究工作致力于发展不同的流化床测量或模拟方法以提高测量或模拟的准确性, 但针对二者的改进基本上都是独立展开的, 二者的交叉仅体现在结果的相互验证上, 且均无法实现对流化床未来流动状态的精确预测。

近些年, 快速发展的大数据和智能化技术为深度融合测量和模拟两种方式采集的流化床流动数据带来了机遇, 有望基于此建立流化床未来时刻流动状态预测的范式。本报告将讲述国内外在此方向的一些进展, 并介绍我们在此方向的一些初步探索: (1) 基于流体力学和静电场耦合模拟设计了电容层析成像测量气固流化床虚拟实验, 通过虚拟实验采集的大规模样本, 采用机器学习训练了从原始电容值到流化床介尺度结构关键参数的映射关系, 从而跳过了电容层析成像技术传统意义上需要的逆问题求解过程, 极大地提高了测量准确度; (2) 通过实验测量采集的大量数据校正计算流体力学模拟本构模型; (3) 借鉴天气预报所用到的数据同化方法, 在流化床模拟的动态框架内, 通过数据同化算法不断融合时空上离散分布的不同来源和不同分辨率的直接或间接实验测量数据来自动调整模型预测, 以改善多相流模拟的估计精度, 从而达到对未来时刻流动状态的预测。

报告人/墙报展示人简介:



温凯杰，女，1998年11月出生，2021年在北京化工大学化工学院获学士学位，2024年在中国科学院大学过程工程研究所获硕士学位，自2024年7月在中国科学院过程工程研究所工作。研究方向为深度学习与两相流模拟。

附：报告人非学生

动物细胞培养反应器原位图像的深度学习分析技术

周光正*, 王晓丽, 王学重*

北京石油化工学院, 新材料与化工学院, 恩泽生物质精细化工北京市重点实验室, 北京 102617

*Email: zhouguangzheng@bipt.edu.cn; wangxuezhong@bipt.edu.cn

摘要正文: 动物细胞培养是重要的生物工程技术, 广泛应用于生产重组蛋白类药物。对于培养过程中一些重要生物和生化指标的监测, 目前广泛采用的是取样离线分析手段, 存在时间滞后性、潜在的染菌风险等。利用过程分析技术 (process analytical technology, PAT) 在线实时监测动物细胞培养状况, 进而实现培养过程的优化与控制, 具有重要的学术意义和工业应用价值[1]。若图 1 所示的在线监测平台, 通过原位显微成像技术和拉曼光谱可以实时分析相应的重要生物指标 (细胞数目、尺寸、形状) 与生化指标 (营养物质、代谢物质、蛋白质产物的浓度)。针对代表性的中国仓鼠卵巢细胞 (Chinese Hamster Ovary, CHO) 的培养过程, 本文重点介绍细胞图像处理, 图 2 为示意性结果。利用基于深度学习的图像分析技术分割图像中的细胞目标, 进一步统计细胞的数目与几何特征 (尺寸、形状等)。为提高识别效果, 采用多种数据增强方式扩充模型训练的数据集, 最终图片数为 184 张, 相应的细胞总数达到 183,040 个。将深度学习技术与较为先进的多重处理算法相比, 前者能更有效的分割聚团细胞。深度学习模型的 Dice 系数、准确率、精确率、灵敏性、特异性和相对体积差分别达到 0.862、0.945、0.901、0.827、0.977 和 0.082。研究结果证明了深度学习技术的较大优势, 它对实现细胞培养过程的自动化与智能化意义重大。

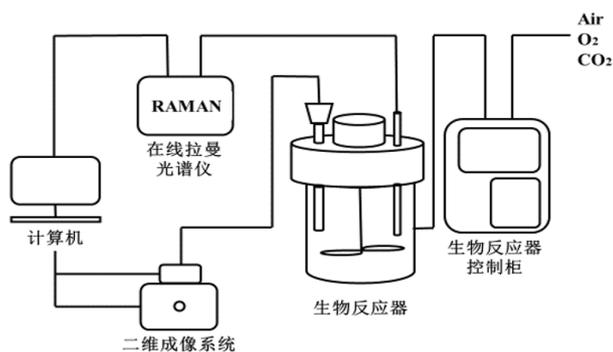


Fig. 1 On-line monitoring platform for cell culture processes

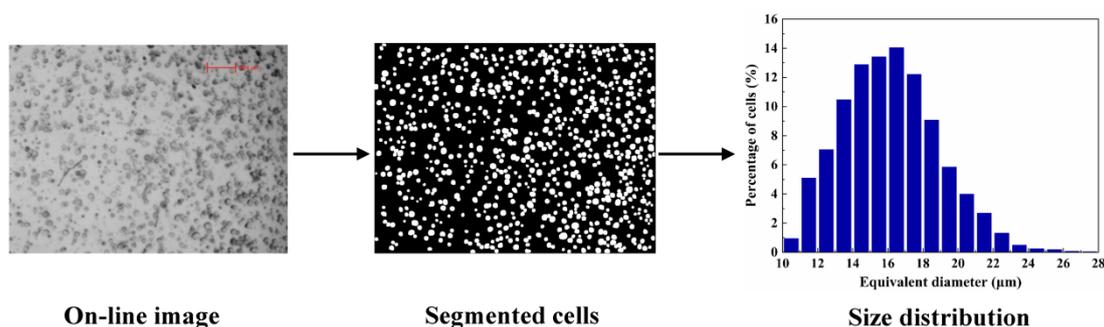


Fig. 2 On-line analysis of in situ cell images

关键词: 细胞培养; 原位成像; 图像分析; 深度学习; 过程分析技术

参考文献

- [1] G. Gerzon, Y. Sheng, and M. Kirkitadze, Process analytical technologies—advances in bioprocess integration and future perspectives. *J. Pharm. Biomed. Anal.* 2022, 207, 114379.
- [2] A. Vancleef, D. Maes, T. Van Gerven, L. C. Thomassen, and L. Braeken, Flow-through microscopy and image analysis for crystallization processes. *Chem. Eng. Sci.* 2022, 248, 117067.
- [3] S. Minaee, Y. Boykov, F. Porikli, A. Plaza, N. Kehtarnavaz, and D. Terzopoulos, Image segmentation using deep learning: A survey. *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* 2022, 44, 3523–3542.

报告人简介:



周光正，副研究员，硕士生导师。2003 年获北京化工大学工学学士学位，2009 年获中国科学院过程工程研究所工学博士学位。毕业后留所工作，2013 年获聘副研究员。2021 年入职北京石油化工学院新材料与化工学院。研究领域包括制药/化工过程的在线智能检测、过程模拟和优化设计、颗粒物加工技术等。在相关领域发表高水平论文 30 余篇，授权专利 5 项，参编《化学工程手册（第 3 版）》，参编英文专著 1 部。负责国家自然科学基金、国家 973 计划、国家重大科研装备研制、中国科学院战略性先导科技专项等项目或子课题。于 2010 年获中国颗粒学会青年优秀论文奖，荣获 *Particuology* 期刊 2022 年度、2023 年度优秀审稿人奖（Outstanding Reviewer Award）。报告人联系邮箱：zhouguangzheng@bipt.edu.cn。

附：报告人非学生

小型精细化工生产过程数字孪生系统设计构想

邹志云*, 朱文超, 田保河, 刘心洪, 邢钊溢

国民核生化灾害防护国家重点实验室, 北京, 102205

*Email: zouzhiyun65@163.com

摘要正文: 针对某小型精细化工生产过程的数字化、智能化建设要求, 设计了其数字孪生系统, 整体架构见图 1, 包括物理层、数据层、模型层和应用层^[1-2]。

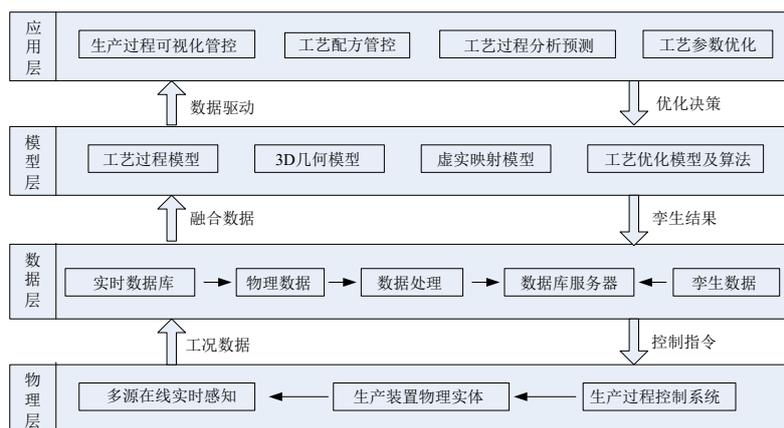


Fig. 1 Digital twin system architecture of the small scale fine chemical production process

(1) 物理层: 主要实现生产过程的多源在线实时感知和自动控制。通过设置各类检测仪表、传感器及近红外、拉曼光谱检测仪等在线分析仪器, 采集生产工艺过程运行数据、生产设备运行状态数据、产品质量数据、设备运维数据和设备几何数据。对难以直接在线实时测量的工艺技术参数, 基于大量历史运行数据和深度学习算法实现工艺参数的在线实时估算^[1], 也可设置机器视觉系统、音频感知系统, 通过图像识别、声音识别等智能感知技术识别生产过程的运行工况。生产过程控制系统接收上层下达的控制指令, 实现生产过程的在线实时控制。

(2) 数据层: 用于数据处理和数据存储。物理层的工况数据采集到实时数据库, 形成生产过程的物理数据, 经数据处理包括异常数据处理、缺失数据处理和数据的滤波降噪处理, 存入数据库服务器^[2]。来自于模型层孪生结果产生的孪生数据也一并存入数据库服务器, 应用层和模型层的工艺分析预测和优化结果经数据层形成控制指令下达到物理层。

(3) 模型层: 用于建立和运行生产过程的数字孪生模型, 包括工艺过程模型、工艺设备三维(3D)几何模型、虚实映射模型和工艺优化模型, 实现融合物理数据的输入和孪生结果数据的输出。针对小型精细化工生产过程的间歇、批次生产特征, 需要综合应用流程模拟、动态模拟、计算流体动力学模拟等机理建模方法和基于数据驱动的建模方法建立生产工艺过程模型^[1], 应用迭代学习优化控制等方法进行工艺过程的优化。虚实映射模型连接工艺过程模型和3D几何模型, 3D几何模型作为数字孪生模型可视化的载体^[2]。

(4) 应用层: 实现生产过程的管控、分析、预测与优化。除了生产过程的可视化管控外, 为了实现多用途、多产品精细化学品生产, 需要基于ISA88间歇过程控制标准, 建立精细化工生产过程工艺配方的生成和管控模块, 通过配方管理软件上工艺配方的切换实现工艺流程及操作条件的转换, 生产不同品种和牌号的精细化学品。基于数字孪生模型进行生产过程的分析、预测和优化, 实现生产过程的智能优化控制。

关键词: 精细化工过程; 数字孪生系统; 间歇过程建模; 间歇过程控制

参考文献

[1] Isuru A Udugama, William Kelton, and Christoph Bayer Digital twins in food processing: A conceptual approach to developing multi-layer digital models. Digital Chemical Engineering. 2023, 7(100087): 1-9.

[2] 吴帅, 尹爱军, 张波, 天然气三甘醇脱水装置数字孪生系统[J]. 重庆大学学报, 2024, 47 (5) :110-121.

报告人/墙报展示人简介:



邹志云, 军事科学院防化研究院研究员, 长期从事化工过程控制、化工过程仿真、化工安全工程与机电控制技术研究。

Email: zouzhiyun65@163.com

电话: 010-66758427,13021942881

附: 报告人非学生

On-line Imaging as a PAT Tool for Monitoring an Industrial Fluidized Bed Granulation – Drying Process

Yan Liu¹, Xue Zhong Wang², Tao Wu^{1*}

¹ Beijing Key Laboratory of Enze Biomass Fine Chemicals, College of New Materials and Chemical Engineering, Beijing Institute of Petrochemical Technology, Beijing 102617.

² Beijing Key Laboratory of Enze Biomass Fine Chemicals, College of New Materials and Chemical Engineering, Beijing Institute of Petrochemical Technology, Beijing 102617.

*Correspondence authors: wutao@bipt.edu.cn

Abstract: On-line microscopic imaging and near infrared spectroscopy (NIR) were investigated for monitoring the granulation and drying process in an industrial – scale fluidized granulator. In order to realize real-time online detection of particle size and moisture content during the granulation process^[1], the granulation process of corn starch was taken as the research object, and the microscope image and near-infrared spectrum of the granulation process system were gathered online in real time by in-situ microscope and near-infrared spectroscopy. Moreover, real-time online image processing and genetic algorithm combined with chemometrics approach of partial least square were adopted. The particle size distribution, change and moisture content in the granulation process were obtained in real time. The results show that the size distribution of 200 μ m small particles during granulation process can be measured by in-situ microscope and the change of particle size can be analyzed. The accuracy of the moisture content correction PLS model is high, the prediction root-mean-square error is 0.0051, and the prediction determination coefficient R_p^2 is 0.974. The real-time and accurate monitoring of particle size and water content in fluidized bed granulation process is realized, which provides research basis for process optimization and control.

Keywords: Fluidized bed granulation; Image processing; Genetic Algorithm; PLS

References

[1] GOSAVI A A, NANDGUDE T D, MISHRA R K, PURI D B. Exploring the Potential of Artificial Intelligence as a Facilitating Tool for Formulation Development in Fluidized Bed Processor: a Comprehensive Review [J]. AAPS PharmSciTech, 2024, 25(5): 111.

基于深度学习的热态反应器多尺度变量分析与应用

杜承哲^{1,2}, 鲁波娜^{1,2*}, 王维^{1,2}

¹中国科学院过程工程研究所, 北京市海淀区中关村北二街 1 号, 100190

²中国科学院大学, 北京市石景山区玉泉路 19 号甲, 100049

*Email: B. Lu (bnlu@ipe.ac.cn)

摘要正文: 曳力在流化床建模中起着主导作用, 其中能量最小多尺度(EMMS)曳力因其独特的优势而被广泛采用。在模拟变径流化床反应器(diameter-transformed fluidized bed, DTFB)时, 传统基于主反应区恒定属性和操作条件的曳力简化处理合理性受到关注。以多产异构烷烃(maximizing iso-paraffins, MIP)为例, 引入了人工神经网络, 以充分考虑整个反应器范围内与曳力修正相关的多尺度变量作用。通过先验和后验测试, 检查了所有变量中的主导因素及其可能的影响。本工作为全面考虑介尺度结构对于热态反应器各传递过程打下良好基础, 使综合反应器内部“三传一反”过程中全部涉及变量的整体影响成为可能, 本文也首次给出了相关结果。

关键词: 深度学习; 神经网络; 多尺度模拟; EMMS; MIP

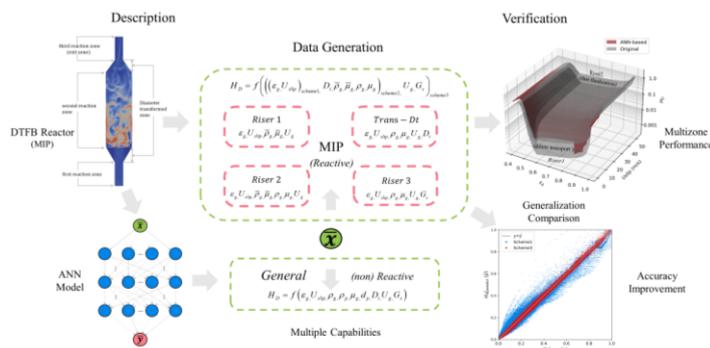


Fig. 1 Illustration of scale-dependent variables and performance comparison

参考文献

- [1] C. Z. Du, C. X. Han, and Z. Yang Multiscale CFD simulation of an industrial diameter-transformed fluidized bed reactor with artificial neural network analysis of EMMS drag markers[J]. I&EC Res. 2022, 61(24): 8566-8580.
- [2] Z. Yang, B. Lu, and, W. Wang Coupling Artificial Neural Network with EMMS drag for simulation of dense fluidized beds. Chem. Eng. Sci. 2021, 246, No. 117003.

报告人/墙报展示人简介:



杜承哲, 中国科学院大学过程工程研究所博士研究生; 研究内容包括: 多尺度模拟与介尺度科学; 机器学习与深度学习; 高性能计算; 复杂性系统科学研究兴趣: 复杂系统的“涌现”现象; 异构计算; 离散模拟 GPU 并行计算; 机器学习加速 CFD 求解; 精神分析、心理动力学、禅宗。

邮箱: czdu@ipe.ac.cn; 13240710219@163.com

附: 报告人为学生

机器学习在真实燃料复杂反应网络中的应用

郑默^{1,*}, 杨善文¹, 李晓霞^{1,*}

¹中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京市海淀区中关村北二条1号, 100190

*Email: mzheng@ipe.ac.cn, xxia@ipe.ac.cn

摘要正文: 燃料包括液体燃料(汽油、航油、柴油、高密度特种燃料油、生物油)和固体燃料(废旧塑料、生物质、煤), 研究其热解和氧化微观反应机理对控制燃烧等热化学转化过程、提高燃料利用率而言至关重要。真实燃料组分通常复杂且结构多样, 构建真实燃料热解和氧化的详细反应动力学机理是一项长期任务, 而将燃料热解和氧化微观反应机理及动力学认识耦合到宏观反应器的数值模拟是燃烧相关领域长期奋斗的目标。限于实验技术难以直接检测到“短寿命”中间体和量子力学计算的成本极高, 目前对 C4 以下燃料核心机理认识相对成熟, 直接研究真实混合燃料或固体燃料复杂结构反应行为仍十分困难。ReaxFF MD 方法的兴起为直接考察真实复杂燃料体系的热解行为提供了可能性, 可获得燃料反应过程中物种的演化趋势和物种参与的相对完整的详细反应, 但同时获得的反应体系涉及到大量的中间体和多通道的反应, 反应网络极为复杂。相应详细机理的复杂性决定了大规模模拟体系的反应分析是非人力所能及的, 并且因缺乏动力学参数, 无法直接用于燃烧反应器的数值模拟。

面向真实燃料热解和氧化体系, 本工作提出并建立了基于反应自动分类的反应网络简化方法 SRG-Reax (Skeleton Reaction network Generation for ReaxFF MD)^[1]。利用 ReaxFF MD 模拟得到的反应物种的浓度和详细反应随时间的变化隐含的反应动力学信息^[2], 特别是完整反应(反应位点)信息, 采用机器学习中的 tri-training 半监督分类方法结合主动学习的方法, 构建了燃料热解和氧化反应自动分类模型, 基于反应中心特征进行反应自动分类, 通过合并同类型反应路径提取重要反应路径和物种, 将大规模真实多组分复杂碳氢燃料体系的详细机理简化为可控的小规模骨干反应网络。该方法已成功应用于 RP-3 燃料经典的 3 组分和 4 组分替代燃料模型热解体系中正构烷烃、环烷烃和芳香烃骨干反应网络的自动构建; 轮船柴油氧化过程 >100,000 个氧化反应的自动分类; 废旧塑料主要组成聚丙烯裂解芳构化的关键反应类型自动识别等, 为从 ReaxFF MD 模拟中构建和理解大规模复杂反应体系的全局反应机理提供了一种新的途径。

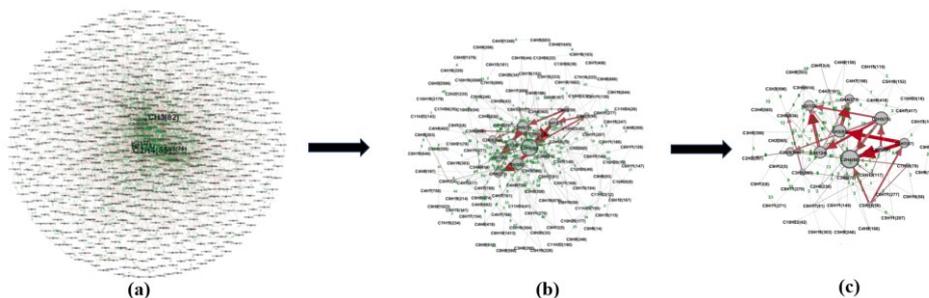


Fig.1 Detailed reaction class tagged network (RxCN) for the ReaxFF MD simulated pyrolysis reactions of the 45-component RP-3 model obtained on the basis of predicted reaction classes by the tri-training classifier: (a) Detailed RxCN of all reaction pathways; (b,c) Simplified RxCN obtained by selecting the top 15% pathways and top 5% of reaction pathways

关键词: 机器学习; 真实燃料的热解和氧化; 化学反应分子动力学模拟; 反应自动分类; 骨干反应网络

参考文献

[1] Yang S, Li X, Zheng M, Ren C, Guo L. Generating a skeleton reaction network for reactions of large-scale ReaxFF MD pyrolysis

simulations based on a machine learning predicted reaction class[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2024, 26(6): 5649-5668

[2] Yang S, Li X, Zheng M, Ren C, Guo L. Creating a reaction data set labeled with reaction class for automated reaction classification for ReaxFF molecular dynamics simulations of realistic fuel pyrolysis[J]. *Energy & Fuels*, 2024, 38(5): 4594-4612.

报告人/墙报展示人简介:



郑默，副研究员，2015年毕业于中国科学院过程工程研究所，并于当年留所工作，于2020年入选中国科学院青促会；郑默共发表论文30余篇，创建两套自主软件GMD-Reax和VARxMD，均实现成果转化，已推广至国内高校、科研单位、相关企业共20余家；其研究方向为大规模反应分子动力学模拟方法的发展和在固体能源和液体燃料中的应用。

附：报告人非学生

基于人工智能方法的 Ag@TiO₂ 光催化颗粒光吸收特性预测

高润喆^{1,2,3}, 王纾扬^{1,2,3}, 王天宇^{1,2,3}, 何玉荣^{1,2,3,*}

¹ 哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨市, 150001

² 黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨市, 150001

³ 哈工大郑州研究院, 郑州市, 450000

*Email: rong@hit.edu.cn

摘要正文:

氢气是一种理想的洁净能源, 它的能量密度大, 热值高, 是一种清洁的二次能源, 可以用作高效的储能载体, 有效解决可再生能源大规模储存和运输的问题, 被认为是最具有应用前景的能源之一^[1]。光催化制氢技术能够将太阳能转换为氢能, 是一种以化学燃料的形式储存太阳能的可持续和清洁的方法。光催化反应主要包括光能的吸收、光生载流子的分离和迁移、发生表面反应四个过程^[2], 光催化剂的光吸收特性决定了反应过程中太阳能转换氢能 (Solar to Hydrogen, STH) 效率的理论极限^[3]。因此, 对光催化材料进行光吸收特性的预测和调控对制备高效的光催化剂具有重要意义。

在太阳光谱中, 可见光占据了其中的50%左右的能量, 因此开发吸收可见光的光催化材料至关重要^[4]。目前光催化材料的开发主要依赖于实验设计和理论模拟, 然而原则上可合成的光催化剂数量巨大且机理复杂, 无法仅通过实验进行探索^[5], 第一性原理等模拟方法计算数据量大、计算时间长^[6], 合成和测试每种光催化材料成本巨大。随着计算机技术的发展, 人工智能方法在预测光催化活性方面具有较高的预测精度和泛化能力。其中, 人工神经网络模型可以有效地用于光催化剂的性能预测和设计, 大幅降低催化剂设计和开发的成本^[7]。但是目前对于光催化制氢过程的预测主要针对水的解离效率和光催化剂内部电子特性, 而对其光吸收特性的研究较少。

本研究制备并表征了Ag@TiO₂光催化颗粒, 分析了催化剂颗粒的光吸收特性, 结果表明制备的Ag@TiO₂纳米颗粒在可见光波段均表现出较高的吸收强度, 其吸收峰及峰位对太阳能的利用及水分解过程十分有利。以实验得到Ag@TiO₂颗粒吸收光谱结果作为数据样本, 利用人工神经网络方法对不同前驱体浓度比条件下制备的光催化剂颗粒光吸收特性数据进行了学习, 预测结果和实验值对比如图1所示, 预测了其他前驱体浓度比条件下的Ag@TiO₂光吸收特性, 分析了其光吸收强度、吸收峰位及吸收峰面积的变化规律。

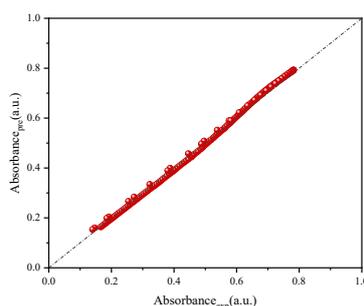


Fig. 1 Neural network prediction performance

关键词: 光催化; 神经网络; 性能预测

参考文献

- [1] 李建林, 李光辉, 马速良, 等. 碳中和目标下制氢关键技术进展及发展前景综述[J]. 热力发电, 2021, 50 (06): 1-8.
- [2] 陈掌星. 水解制氢的研究进展及前景[J]. 中国工业和信息化, 2021, (09): 56-60.
- [3] L. Y. Ge, Y. Z. Ke, X. B. Li. Machine learning integrated photocatalysis: progress and challenges[J]. *Chemical communications*,

2023, 59, 5795-5806.

- [4] L. Liang, Y. Sun, F. Lei, G. Shan, X. Yi. Free-floating ultrathin tin monoxide sheets for solar-driven photoelectrochemical water splitting[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2014, 2(27): 10647-10653.
- [5] A. Walsh. The quest for new functionality[J]. *Nature Chemistry*, 2015, 7(4): 274-5.
- [6] H. X. Mai, T. C. Le, D. H. Chen, D. A. Winkler, R. A. Caruso. Machine Learning for Electrocatalyst and Photocatalyst Design and Discovery[J]. *Chemical Reviews*, 2022, 122(16): 13478-13515.
- [7] H. Xuan, M. Li, C. Fang, X. Hu. Emerging Investigator Series: Design of Hydrogel Nanocomposites for the Detection and Removal of Pollutants: from Nanosheets, Network Structures, and Biocompatibility to Machine-Learning-Assisted Design. *Environmental Science: Nano*, 2018, 5, 2216-2240.

报告人/墙报展示人简介:

高润喆（学生），女，哈尔滨工业大学 2024 级动力工程及工程热物理专业博士研究生，导师为王天宇教授，主要研究方向为光电催化制氢。



基于 AI+DEM 方法流化床中铁颗粒烧结过程研究

吕海佳^{1,2}, 唐天琪^{1,2,3}, 何玉荣^{1,2,3,*}

¹哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨市 150001

²黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨市 150001

³哈尔滨工业大学郑州研究院, 郑州市 450000

*Email: rong@hit.edu.cn

摘要正文: 随着“碳达峰、碳中和”目标的提出, 我国的能源结构正逐渐从化石燃料能源转向低碳清洁和可再生能源转型^[1]。金属燃料因其高能量密度和低二氧化碳排放而被认为是一种很有前途的清洁能源载体。其中, 微米级铁粉由于其高体积能量密度等优点, 是理想的能源载体之一。铁粉燃烧后, 利用氢气直接还原氧化铁 (Direct Reduction of the Iron oxides, 简称 DRI) 是实现无二氧化碳铁燃料循环的关键步骤之一。由于流化床具有气固接触效率高的优点, 被广泛应用于 DRI 的化工过程, 在促进氢气和氧化铁粉接触的过程中发挥了重要作用^[2]。氧化铁粉的还原过程通常在 500°C 以上的温度下进行, 这会导致流化床中的铁粉颗粒表面熔融, 碰撞的颗粒也会形成永久的烧结颈^[3], 使流化床内出现团聚烧结现象从而脱流化, 导致反应效率降低。因此, 分析和探究流化床铁粉颗粒在高温下的团聚烧结机理十分重要。

烧结力通常发生在高温但低于颗粒熔点的两个或多个颗粒结合的边界层处。Kuczynski^[4]将烧结颈生长主要分为四个模型: 粘性流动、体积扩散、晶界扩散和表面扩散。Mikami 等^[5]指出影响烧结力的频率系数与温度之间的关系尚不明确。因此, 深入分析和研究烧结力与温度、烧结时长之间的关系, 建立全面的关系式对准确分析颗粒烧结现象对脱流化和反应速率的影响具有重要的研究意义。随着 AI 大数据技术的兴起, 利用神经网络预测数据成为当下研究的热点之一。在研究烧结过程中, 由于烧结颗粒通常较小, 对烧结颈的观测也变得困难, 因此, 有关烧结颈生长机制的探究也就变得缓慢。利用神经网络预测数据可以极大地扩宽烧结颈生长的数据范围, 为探究烧结颈生长机理提供研究基础。

本研究基于人工智能方法, 提出了一种基于神经网络的烧结颈生长预测方法, 对比了多层感知机 (Multilayer Perceptron, 简称 MLP) 与长短时记忆网络 (Long Short Term Memory Network, 简称 LSTM) 的预测性能。选取 Mikami 等^[5]在四个温度下烧结铁颗粒实验得到的数据, 输入到多层感知机和长短时记忆网络模型内, 使其预测烧结温域内不同温度、烧结时长下烧结颈与颗粒粒径比大小。后选取非线性拟合得到温度、烧结时长与烧结颈与颗粒粒径比大小关系式, 建立烧结颈生长模型并进行对比。将烧结颈生长模型与离散单元软球模型耦合后计算流化床内脱流化现象, 结果如图 1 所示, 从图 1 可知该模型与传统模型的计算结果拟合良好。

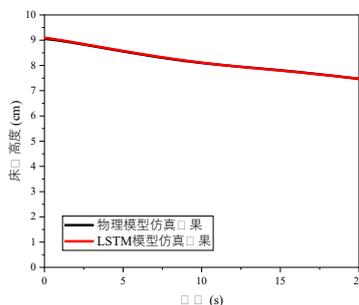


Fig. 1 Comparison of LSTM prediction results with physical results

关键词: 流化床; 氢气还原氧化铁; 烧结力; 多层感知机; 长短时记忆网络

参考文献

- [1] 聂子勋, 我国实现双碳战略的阶段性目标及路径[J]. 商业经济研究, 2023, 23:181-183.
 [2] 张玉黎, 徐庶亮, 叶茂, 甲醇甲苯烷基化流化床反应器的数值模拟[J]. 化工进展, 2020, 39 (12): 5057-5065.

- [3] X. Liu, X. Zhang, J. Li, Q. Zhu, N.G. Deen, Y. Tang. Regeneration of iron fuel in fluidized beds, Part I: Defluidization experiments and theoretical prediction model. *Powder Technol.* 2023, 420: 118182.
- [4] G. C. Kuczynski. Self-diffusion in Sintering of Metallic Particles. *AIME.* 1949, 14:169-173.
- [5] T. Mikami, H. Kamiya, M. Horio, The mechanism of defluidization of iron particles in a fluidized bed. *Powder Technol.* 89 (1996) 231-238.

报告人/墙报展示人简介:



报告人：吕海佳（学生），于哈尔滨工业大学攻读硕士学位，导师为唐天琪，研究方向为多孔介质储能研究。

数据驱动大尺度湍流反应流计算模式研究

怀英

中国科学院大连化学物理研究所化学激光重点实验室

摘要：湍流化学反应流是一种典型的流体体系，化学反应热力学过程制约流体流动，湍流又决定着反应介质的输运和混合过程，这种具有时空多尺度特征的非线性过程普遍存在于化学工程、火箭推进、生物体内。针对这一过程构建气流流动、介质传递和反应过程的精准高效计算方法是一项极具挑战的数值工作，也是掌控的湍流化学反应流性能的重要手段。为此，我们提出将化学反应和流体动力学计算解耦，流体动力学计算体系中输运方程所包含的化学反应源项的 S_i 不再依赖各种模型计算，而从湍流计算系统中分离出来，通过建立详细机理的化学反应基准数据库，训练神经网络构建化学反应条件 (P_i, T_i, C_i, τ) 与反应源项 S_i 本构关联，并以一种数据映射关系回归到湍流计算系统。项目团队针对 HF 体系建立了态-态反应数据库，包含 2106496 个样本点，发展了基于元学习的深度学习网络，构建了化学反应的详细机理与湍流封闭源项的关联，确定了反应源项具体形式，通过与传统计算流体结果比对，量化考察了新型计算模式的执行效果，其计算效率提升了近一个数量级。这样的计算模式将避免湍流模拟中化学反应模型的计算耗费，避免化学反应刚性对数值解析的严苛要求，这是计算系统能模拟大时-空尺度化学反应湍流的前提，为解决包括化学激光在内的流体机械、化工装备、航空航天等领域非线性大尺度动力学问题提供了一种研究思想和数字平台。

多孔碳基颗粒 CO₂ 吸附过程分子动力学研究与 AI 预测

程仕棋^{1,2}, 吕海佳^{1,2}, 唐天琪^{1,2,3,*}

¹ 哈尔滨工业大学, 哈尔滨市, 150001

² 黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨市, 150001

³ 哈尔滨工业大学郑州研究院, 郑州市 450000

*Email: tangtianqi@hit.edu.cn

CO₂的过量排放是化工领域始终面临的一个重大问题^[1], 为确保“双碳”战略目标的顺利实现, 如何减少和控制二氧化碳的排放成为了一个重要的研究领域。考虑到在可预见时间段内, 化石燃料仍将是我国主要能源来源^[1], 因此如何在末端实现CO₂的高效捕集至关重要。多孔碳基颗粒具有优异的比表面积和丰富的孔隙结构, 作为一种潜在的CO₂吸附材料在碳捕集领域备受关注^[2], 然而, 该颗粒CO₂吸附分离性能与其内部复杂的孔隙结构以及表面性质等因素息息相关^{[3][4]}。因此, 深入探究CO₂在多孔碳基颗粒中的吸附机理, 明晰孔隙结构、表面官能团等因素对CO₂吸附分离性能的影响, 对于指导开发和改进性能优异的多孔碳基吸附剂、提高其CO₂吸附容量和选择性具有重要意义。

分子动力学方法是研究含纳米尺度孔隙颗粒气体吸附的有效计算工具^{[5][6]}, 可模拟材料在原子尺度上的结构变化从而解释现象背后微观机制^[7]。在分子动力学模拟中, 合理的势能函数和几何模型是CO₂吸附特性研究的关键^[8]。随着计算机与人工智能技术的快速发展, 机器学习算法在微观领域的应用不断深化, 为CO₂吸附过程的预测提供了思路, 其中, 神经网络对各种模型的训练有着较强的泛化与学习能力, 能够处理大量的多维输入输出数据^[8]。研究表明BP神经网络在保证预测趋势准确的同时, 运行时间可缩短为分子动力学运行时间的千分之一至万分之一^[10]。由此可见, 分子动力学与BP神经网络的结合可提高分子动力学方法模拟效率及准确性, 并拓宽人工神经网络的应用领域。

本研究基于分子动力学方法, 在建立“多孔碳基颗粒-CO₂吸附”数学模型的基础上, 对多孔碳基颗粒吸附CO₂过程进行数值模拟, 分析颗粒孔隙结构等因素对CO₂吸附过程的影响规律, 揭示多孔碳基颗粒对CO₂的吸附本质, 为开发和改进性能优异的多孔碳基吸附剂提供一定理论依据。并以分子动力学模拟结果作为数据样本训练BP神经网络, 将预测结果与模拟结果进行对比, 最终训练至达到理想预期的神经网络的预测结果在一定程度上可替代分子动力学模拟结果用于分析判断, 其中含不同表面基团颗粒CO₂模拟与预测吸附等温线如图2所示。

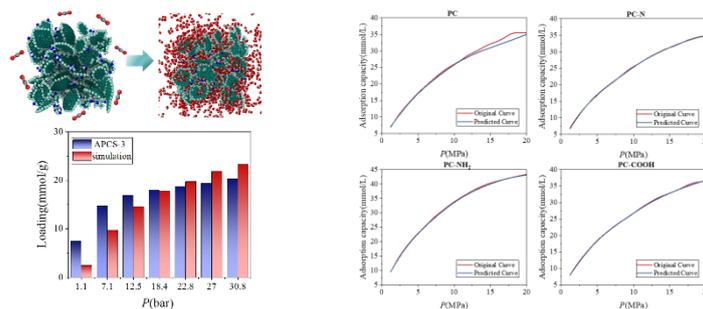


Fig.1 Geometric model validation and schematic diagram of porous carbon-based particles

Fig.2 Simulation and prediction of CO₂ Sorption isotherm with different surface group particles

关键词: 多孔碳基颗粒、CO₂吸附、分子动力学、BP神经网络

参考文献

- [1] 刘保根, 基于多孔炭的二氧化碳吸附分离研究[D]. 长沙: 中南大学硕士学位论文, 2023.
- [2] M. Ranjit, P. Prajnashree, B. Sudip. Synthesis of sulfur-doped porous carbon for supercapacitor and gas adsorption applications.

- International Journal of Energy Research, 2021, 46(3): 2585-2600.
- [3] X. Yuan, M. Suvarna, S. Low, P. D. Dissanayake, K. B. Lee. Applied machine learning for prediction of CO₂ adsorption on biomass waste-derived porous carbons. Environmental Science and Technology, 2021, 55(17): 11925-11936.
- [4] H. Chen, Y. Guo, Y. Du, X. Xu, C. Su. The synergistic effects of surface functional groups and pore sizes on CO₂ adsorption by GCMC and DFT simulations. Chemical Engineering Journal, 2021, 415: 128824.
- [5] K. Lin, Q. Yuan, Y. Zhao. Using graphene to simplify the adsorption of methane on shale in MD simulations. Computational Materials Science, 2017, 133: 99-107.
- [6] H. Zhu, S. Guo, Y. Xie, H. Zhao. Molecular simulation and experimental studies on CO₂ and N₂ adsorption to bituminous coal. Environmental Science and Pollution Research, 2020, 28: 15673-15686.
- [7] 樊康旗, 贾建援, 经典分子动力学模拟的主要技术[J]. 微纳电子技术, 2005 (3) :133-138.
- [8] L. B. Tang, X. Li, H. T. Feng, C. Ma, Q. Chang. Infiltration of salt solutions through illite particles: Effect of nanochannel size and cation type. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2022, 641: 128581.
- [9] 彭友, 基于神经网络的金属氧化物薄膜晶体管建模方法研究[D]. 广州: 暨南大学硕士学位论文, 2020.
- [10] 石湛杨, 陈志立, 杜广煜, 类金刚石结构的分子动力学与神经网络耦合研究[J]. 真空与低温, 2024, 30 (2) :119-125.

报告人/墙报展示人简介:

程仕棋 (2000-), 女, 哈尔滨工业大学硕士在读
主要研究方向新能源利用与储能过程中的多相流热物理学
基金资助: 国家自然科学基金青年基金 (NO. 52206195)

附: 请在此处注明报告人/墙报展示人是否为学生: 是

分子表征学习辅助含能材料设计

金俊选¹, 吴可君^{1,*}

¹浙江大学化学工程与生物工程学院, 浙江省杭州市西湖区余杭塘路 886 号浙江大学(紫金港西区)和同苑, 310058

*Email: k.wu@zju.edu.cn

摘要正文:

含能材料, 俗称火炸药, 是我国实现“武器装备打得很、打得远”需求的关键物质基础。然而目前新型含能材料分子的设计大多依靠实验筛选最优的性能, 存在效率低、危险性大等缺陷, 不利于新时代我国国防军工材料的更新换代。

相比传统方法, 机器学习在预测化学信息如物性、原子结构及反应进程方面更精确、快速且普适, 存在着巨大潜力。而图神经网络(GNN)可以自动学习分子的特征, 简化训练过程并进一步提高了预测能力, 在近年来成为相当受欢迎的分子学习模型。而在含能材料的物性预测方面, 数据点的缺乏使得机器学习的进展缓慢, 没有较好的模型指导含能材料领域的进展^[1]。

我们工作的总体目标是建立一系列机器学习模型, 结合物理化学性质相关领域的先验知识, 建立通用的、具有的强大表现能力的分子表征手段。采用基于图神经网络(GNN)的技术, 从原有特征工程方式转变为特征学习方式, 让模型可以直接从分子拓扑结构中, 以数据为导向, 直接得到相关性质和预测任务的分子表征, 实现端到端的含能材料性质表征预测。

具体来说, 我们的工作运用了分子力场的有关先验知识, 通过力场函数的形式, 将分子内的键长、键角、二面角以及非键连原子间的距离加入分子表征模型中, 提出了力场启发的图神经网络(FFiNet)^[2]及其加入了Transformer的拓展模型(FFiTrNet)^[3], 其模型基础见Fig.1。同时值得指出的是, 由于加入了分子位置信息, 该3D GNN模型可以对立体异构体进行区分, 对于具有复杂笼状空间结构的含能材料如CL20等, 具有更好的表达能力。而针对含能材料分子种类少、数据量不足的缺点, 我们将训练集空间拓展, 采用更加宽泛的CHON物质进行模型的训练。同时使用迁移学习的方式, 在小样本的含能材料数据集上进行进一步的训练, 获得更优的预测结果, 提高模型的表达能力。我们对含能材料生成焓的迁移学习与直接训练的预测结果进行了比较, 结果可见Table 1。

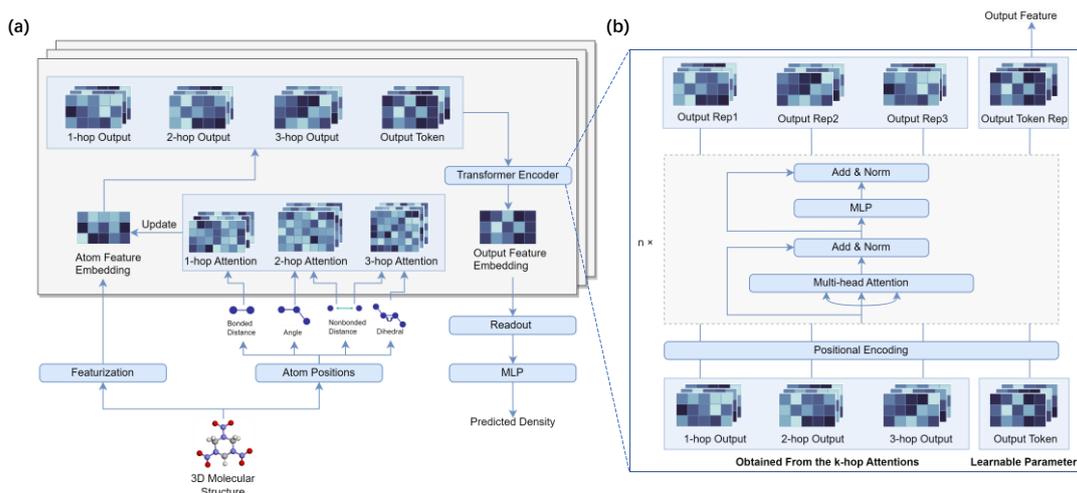


Fig. 1 (a) Structure diagram of the FFiTrNet model. Transformer encoder is used to replace the axial attention in the origin FFiNet. (b) The detailed structure of the Transformer encoder in FFiTrNet. A special output token is introduced as one of its inputs to aggregate all the information of three k-hop outputs.

Table 1. The test MAE, RMSE and R^2 for direct training and transfer learning using two different dataset prediction

the enthalpy of formation of the energetic materials.

Training methods		MAE (kJ/mol)	RMSE (kJ/mol)	R^2
Direct training		99.1128 ± 6.9296	160.7708 ± 6.4121	0.8448 ± 0.0373
Transfer learning	Casey	75.6373 ± 13.8536	145.4587 ± 45.1008	0.8729 ± 0.0716
	Argoub & Li	69.8302 ± 7.1793	106.1238 ± 22.6735	0.8824 ± 0.0410

The result is mean ± standard deviation from 3 data random splits, and the best results are marked in **bold**.

我们工作的总体目标是建立一系列机器学习模型，结合物理化学性质相关领域的先验知识，建立通用的、具有的强大表现能力的分子表征手段。采用基于图神经网络（GNN）的技术，从原有特征工程方式转变为特征学习方式，让模型可以直接从分子拓扑结构中，以数据为导向，直接得到相关性质和预测任务的分子表征，实现端到端的含能材料性质表征预测。

总的来说，机器学习的爆炸式增长为新材料研发设计提供了新的机遇和挑战。通过不断改进模型，采用迁移学习等不同的训练手段，可以期待机器学习在含能材料研发设计中发挥更大的作用。

关键词：机器学习；图神经网络；性质预测；含能材料

参考文献

- [1] Elton, D.C., Boukouvalas, Z., Butrico, M.S. et al. Applying machine learning techniques to predict the properties of energetic materials. *Sci Rep* 8, 9059 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41598-018-27344-x>
- [2] Ren, GP., Yin, YJ., Wu, KJ. et al. Force field-inspired molecular representation learning for property prediction. *J Cheminform* 15, 17 (2023). <https://doi.org/10.1186/s13321-023-00691-2>
- [3] Jin, JX., Ren, GP., Hu, J. et al. Force field-inspired transformer network assisted crystal density prediction for energetic materials. *J Cheminform* 15, 65 (2023). <https://doi.org/10.1186/s13321-023-00736-6>

报告人简介：

金俊选，浙江大学化学工程与生物工程学院 22 级硕士研究生，目前主要研究方向为机器学习辅助物性预测，发表 SCI 论文 2 篇。



2. 特邀报告

基于人工神经网络模型和流动机理模型耦合的低温质子交换膜燃料电池性能研究

龚明^{1,2}, 刘星¹, 马晓迅^{1,*}, 赵桦粮², 刘康儒², 高婷¹

¹ 西北大学化工学院, 陕西省西安市碑林区太白北路 229 号, 710069

² 北京合工仿真技术有限公司, 北京市海淀区黑泉路 8 号宝盛广场 D 座 9015 室, 100192

*Email: maxym@nwu.edu.cn

氢能是理想的清洁高效的二次能源。随着制氢、氢能储运及燃料电池技术的发展, 氢能已经跨过概念、示范进入产业化阶段^[1]。燃料电池是实现氢能与电能发生电化学反应的装置。其中, 质子交换膜燃料电池具有多个优点, 包括高能量转换率、低工作温度、无烟雾排放、无电解质泄露等特点^[2-3], 故其被广泛应用于轮船汽车等领域。目前对氢燃料电池数值模拟研究主要集中在流道的流动特性、基础的电化学反应模型以及发生在内部的汽水相变。燃料电池系统包含多个复杂的物理和化学过程, 包括气体扩散、电化学反应、传热传质等^[4]。建立准确的数值模型需要考虑这些过程之间的相互作用, 并解决耦合的非线性方程组。这种复杂性导致预测燃料电池性能需要大量的计算资源和时间, 这会限制在对计算速度有较高要求的应用方向, 如燃料电池系统研发的硬件在环验证。克服这些瓶颈问题的关键在于进一步研究和开发更准确和可靠的预测方法, 结合物理模型、实验数据和机器学习等技术, 提高预测的精度和可靠性。

近年来, 随着大数据时代的兴起, 机器学习和人工智能领域蓬勃发展。神经网络作为机器学习算法的典型代表, 显示出在复杂系统建模中的显著能力。通过学习输入-输出数据集, 神经网络能够精确地建立起这些数据之间的映射关系, 而无需求解物理或化学方程。与传统的经验模型和机理模型不同, 神经网络建模过程中不依赖于简化假设, 这使得它在实际工程应用中特别有优势^[5]。当需要改变复杂系统的工况以观察其输出性能变化时, 神经网络模型能够快速提供输出参数, 避免昂贵的实验费用或耗时的仿真模拟。在当前机器学习技术与人工智能领域迅速发展的背景下, 将人工智能和神经网络技术应用于燃料电池研究不仅可以加速创新, 提高能源利用效率, 还能为可再生能源技术的推广和应用提供重要支持, 促进环境可持续发展和能源安全。将神经网络技术应用于燃料电池研究具有重大意义。因此, 本研究的方法包括结合单电池极化曲线实验、氢燃料电池机理模型以及人工神经网络模型, 来深入研究质子交换膜燃料电池的性能。

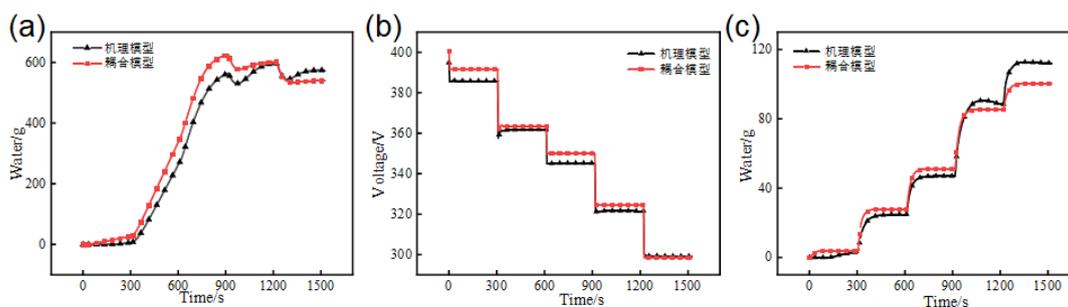


Fig. 1 (a) Voltage comparison between the mechanism model and the coupled model in the steady working condition (b) Comparison of cathode runner water content between the mechanistic model and the coupled model in the steady state working condition (c) Comparison of water content between the mechanistic model and the coupled model

GDL for the steady state working condition

对比燃料电池机理模型和流动机理-人工神经网络耦合模型的结果表明，两种模型在稳态工况下的电流、阴极水含量及 GDL 水含量变化趋势一致，相对误差均在 5% 以内。

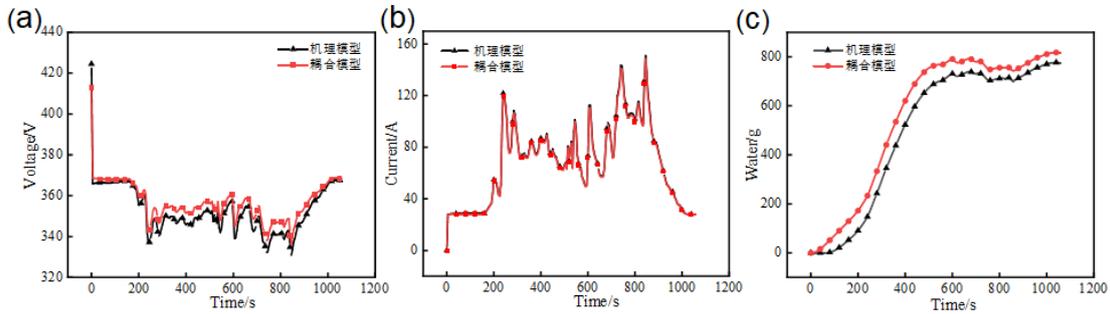


Fig. 2 (a) Comparison of dynamic pull-down voltages (b) Comparison of dynamic pull-load currents (c) Comparison of dynamic pull-load cathodic water runner content

在动态变负载工况下的对比结果表明，耦合模型对于电堆的电流和电压预测值吻合较好，阴极流道含水量变化趋势一致，可以采用耦合模型预测电堆内含水量变化情况。

关键词：质子交换膜燃料电池；流动机理模型；人工神经网络；耦合模型

参考文献：

- [1] Z. Abdin, A. Zafaranloo, A. Rafiee, W. Mérida, W. Lipiński, K. R. Khalilpour. Hydrogen as an energy vector[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2020, 120: 109620.
- [2] Y. Wang, D. F. Ruiz Diaz, K. S. Chen, Z. Wang, X. C. Adroher. Materials, technological status, and fundamentals of PEM fuel cells: A review[J]. Materials Today, 2020, 32: 178-203.
- [3] T. H. Wang, Q. Li, X. T. Wang, Y. B. Qiu, M. Liu, X. Meng, J. C. Li, W. R. Chen. An optimized energy management strategy for fuel cell hybrid power system based on maximum efficiency range identification[J]. Journal of Power Sources, 2020, 445: 227333.
- [4] K. Jiao, J. Xuan, Q. Du, Z. M. Bao, B. Xie, B. W. Wang, Y. Zhao, L. H. Fan, H. Z. Wang, Z. J. Hou, S. Huo, N. P. Brandon, Y. Yin, M. D. Guiver. Designing the next generation of proton-exchange membrane fuel cells[J]. Nature, 2021, 595(7867): 361-369.
- [5] S. Puranik, A. Keyhani, F. Khorrami. Neural Network Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cell[J]. IEEE Transactions on Energy Conversion, 2010, 25(2): 474-483.

报告人简介：

龚明（1986-），北京合工仿真技术有限公司技术总监，西北大学化工学院校外导师，毕业于西北大学化工学院，能源化工专业，博士学历。从事颗粒多相流与多相反应过程模拟、化工系统过程建模，以及氢燃料电池建模和系统模拟等研究方向。



附：报告人不是学生。

融合介科学与人工智能的多相反应器模拟

管小平¹, 杨宁^{1*}

中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室

*Email: nyang@ipe.ac.cn

摘要正文:

多相反应器是化工、能源、冶金、环保等领域的核心装备。多相反应器内部存在多层次、多尺度结构,特别是各种介尺度结构,比如颗粒聚团、湍流涡,使得多相反应器的模拟一直是一个挑战性难题。介科学是描述介尺度时空非均匀结构的形成和演化规律及其背后的驱动机制的科学理论及方法,旨在突破传统统计平均方法和还原论方法的局限性,破解化工过程的复杂性。介科学在流化床、浆态床等多相反应器模拟的成功应用为破解难题指明方向。但是,介尺度机理模型主导机制的分离和识别、封闭模型的开发是该方法的核心困难。同时,人工智能技术也为研究多相反应器提供了一种有效手段,但大部分作为一种黑箱工具使用,可解释性差,难以揭示问题的物理内涵,同时需要大量的高保真数据和强大的计算能力。将介科学与人工智能相结合,一方面有助于加速介尺度封闭模型的构建,另一方面有望提升人工智能的可解释性,降低智能模型学习过程数据量和计算量的需求,二者的协同结合是多相反应器快速智能计算潜在方向。本报告将讲述国内外在此研究领域的一些重要进展,并介绍我们的一些初步工作。

Chemical evolution of solid particle aggregates in fluids

Shuaiqi Zhao, Rui Zhang, Han Huang, Kunpeng Zhao, Bofeng Bai*

State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049

* bfbai@mail.xjtu.edu.cn

Agglomeration of reactive porous particles in fluids leads to the formation of flocs with complex structure, severely limiting the fluid-solid reaction rate in chemical industry [1]. For example, particle agglomeration in the supercritical water gasification technology significantly decreases the carbon gasification efficiency [2]. Here, we propose a three-dimensional diffusion-reaction model [3, 4], and investigate the fluid-solid reaction characteristic of char particle flocs with different structure in the supercritical water. The reaction process of randomly generated flocs with fractal dimension ranging from 1 to 2.33, floc porosity ranging from 0.35 to 0.78 and newly introduced surrounding factor ranging from 2 to 12 that represents the local compactness are numerically simulated. We observe an intraparticle porosity increase stage, followed by a floc deformation stage and a floc breakage stage. Before the floc breakage stage, the floc porosity tends to decrease while the fractal dimension tends to increase. The fluid-solid reaction rate is directly proportional to the initial floc porosity, and inversely proportional to the initial fractal dimension. However, during the floc breakage stage, both the floc porosity and fractal dimension decrease rapidly, and the fluid-solid reaction rate is inversely proportional to the initial surrounding factor. A simple analytic correlation is thereby proposed to evaluate the complete reaction time of flocs with different structure. Moreover, the denser flocs of higher fractal dimension and lower floc porosity tend to break into a larger number of smaller sized sub flocs during the breakage stage. We also discussed using physics-informed neural networks to solve the proposed numerical model for fast estimation of intraparticle fluid-solid reactions.

Keywords: aggregate; fluid-solid reaction; fractal dimension; porosity; physics-informed neural networks

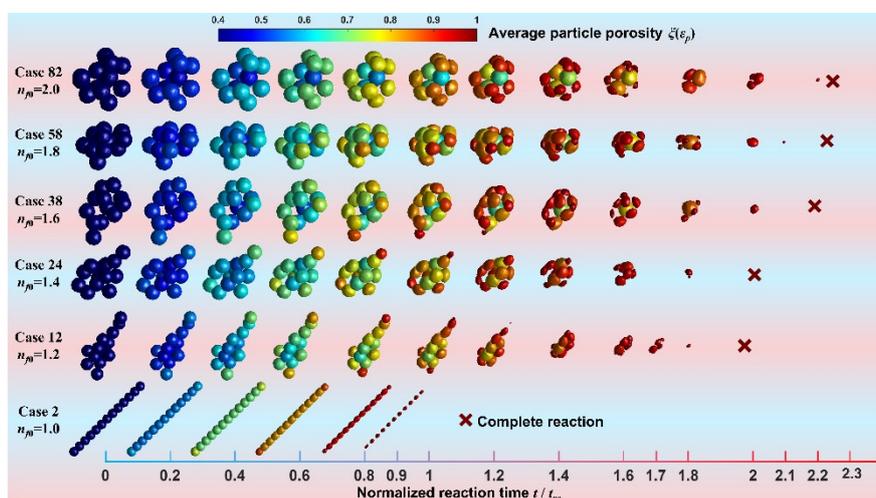


Fig. 1: Typical evolution of the structure of flocs with different initial fractal dimension n_{D0} . The reaction time t is normalized by the complete reaction time of a single isolated particle t_{sc} .

References

- [1] K. Zhao, S. Zhao, H. Huang, R. Zhang, E. Meiburg, B. Bai, Flocculation rate of locally densely distributed cohesive particles in Taylor–Green vortex flow. *Physics of Fluids*, 2024, 36, 043326.
- [2] K. Zhao, H. Huang, S. Zhao, B. Pei, E. Meiburg, B. Bai, Intermediate temperature of supercritical water enhances the dispersion of cohesive particles. *Chemical Engineering Science*, 2024, 286, 119659.
- [3] S. Zhao, R. Zhang, H. Huang, C. Sun, H. Jin, K. Zhao, B. Bai, Intrapore water–gas shift reaction inhibits coal gasification in supercritical water. *Chemical Engineering Science*, 2024, 289, 119843.

[4] R. Zhang, S. Zhao, C. Sun, H. Jin, K. Zhao, B. Bai, Particle morphology evolution and its enhancement for lignite gasification in supercritical water, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2023, 62, 16268-16279.

报告人/墙报展示人简介:

(简介内容采用宋体五号字体)



赵帅琪，西安交通大学绿色氢电全国重点实验室（原动力工程多相流国家重点实验室）在读博士生，导师白博峰教授，研究方向为结合物理信息机器学习的多孔颗粒反应动力学模型及计算方法。

附：请在此处注明**报告人/墙报展示人是否为学生：是学生**

基于深度强化学习的多相流动控制策略—剪切流动下的液滴尺寸控制

李子丰¹, 管小平¹, 杨宁^{1,*}

¹中国科学院过程工程研究所介科学与工程专业全国重点实验室, 北京 100190

*Email: nyang@ipe.ac.cn

摘要正文:

剪切流动是多相流工业过程中常见的现象, 例如在微流控装置内生成液滴、喷雾雾化、乳化过程的液滴生成和油水分离等。精准控制液滴尺寸和形成频率等参数, 尤其是通过特定的剪切流速率来控制液滴尺寸, 是至关重要的。为优化多相流剪切流动的控制, 本研究通过OpenFOAM耦合深度强化学习PPO (Proximal Policy Optimization) 框架, 使用VOF多相流数值模拟方法, 研究了微流控装置内的剪切液滴过程的主动强化控制过程。具体而言, 我们以剪切速度入口作为控制参数, 以液滴直径作为目标变量, 利用深度强化学习算法学习剪切流速控制策略。研究表明, 该算法能够通过智能体输出的剪切入口速度策略, 精准控制流场中的液滴尺寸。此外, 该深度强化学习框架作为流体力学软件工具包, 具有良好的扩展性, 可在不同多相流工况下实现数值模拟中的主动流动控制。

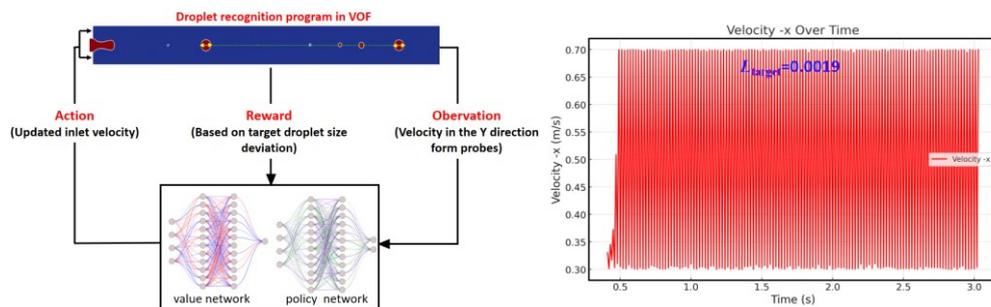


Fig. 1 PPO-VOF Algorithm Framework Fig. 2 Control the shear flow velocity for target droplet diameter of 1.9mm

关键词: OpenFOAM; 深度强化学习; 剪切流动控制

参考文献

- [1] Nathawani D, Knepley M. A one-dimensional mathematical model for shear-induced droplet formation in co-flowing fluids[J]. Theoretical and Computational Fluid Dynamics, 2024, 1(17): 1-17.
- [2] Gyimah N, Scheler O, Rang T, et al. Deep reinforcement learning-based digital twin for droplet microfluidics control[J]. Physics of Fluids, 2023, 35(8).
- [3] Liu H, Zhang Y. Lattice Boltzmann simulation of droplet generation in a microfluidic cross-junction[J]. Communications in Computational Physics, 2011, 9(5): 1235-1256.

基于机器学习势的高导热材料多尺度热输运特性研究

刘义坤^{1,2,3}, 王彪^{1,2,3}, 何玉荣^{1,2,3*}

¹哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨, 150001

²黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨, 150001

³哈工大郑州研究院, 郑州, 450000

* Email: rong@hit.edu.cn

能源化工过程中物质的运动、传递、反应及其相互作用基本都涉及到传热问题, 过程工程工业与传热的关系尤为密切。高导热材料常见用于作为过程工程等工业中的导热增强填料或热管理材料, 微米级和纳米级材料由于其独特的物化特性, 可以通过设计和优化具有特定热导率的微纳结构材料, 在众多能源工业过程中有广泛的应用, 如电力能源、石油化工、建筑节能、海水淡化等领域。同时, 随着大数据智能化技术的快速发展, 涌现出了很多先进的人工智能技术, 为过程工程和过程工业中的传热问题提供了新的解决思路和方法^[1]。因此, 结合智能化技术研究材料传热特性和设计具有特定热导率的微纳尺度结构, 有望促进过程工程工业的新质发展。

近年来, 结合机器学习技术研究材料的热性能逐渐成为了学者的关注热点。王彪等人^[2]结合神经网络方法求解玻尔兹曼输运方程, 对高导热金刚石的微尺度薄膜结构中的热输运进行预测研究, 发现金刚石在毫米尺度热导率便会出现尺寸效应。Wei等人^[3]使用高斯过程回归和卷积神经网络训练复合材料导热系数预测模型, 快速预测了复合材料和多孔介质的有效导热系数。准确获得热导率是化工工业等应用场景下进行导热材料设计和优化的必要条件, 但获得高阶力常数所需的计算资源巨大, 特别是对于像BAs^[4]、BN^[5]高阶声子散射影响较大的材料。最近一种机器学习原子间势的矩张量势方法 (Moment Tensor Potential, MTP)^[6]被应用于解决能量、力和应力输入的优化问题, 并能够以极低的计算成本获得原子间力常数。综上所述, 本研究拟开展基于机器学习原子势方法的高导热材料中多尺度下的热输运特性预测研究, 并从声子热输运角度揭示微纳结构材料中的热传导机制。

本研究基于MTP机器学习势方法评估原子间非谐性, 并将其延伸到BAs材料的四阶力常数的计算, 求解声子玻尔兹曼输运方程, 预测了BAs和金刚石两种典型高导热材料在100-600 K温度内的多尺度热导率和声子热输运特性, 计算流程和热导率结果如图1所示。该方法得到的热导率结果与采用第一性原理直接计算相比有非常高的精度, 而计算成本降低了超过95%, 具有很高的计算优势。同时, 采用机器学习训练获得的高阶力常数, 还研究了同位素效应和温度效应对BAs和金刚石材料热输运特性的影响。

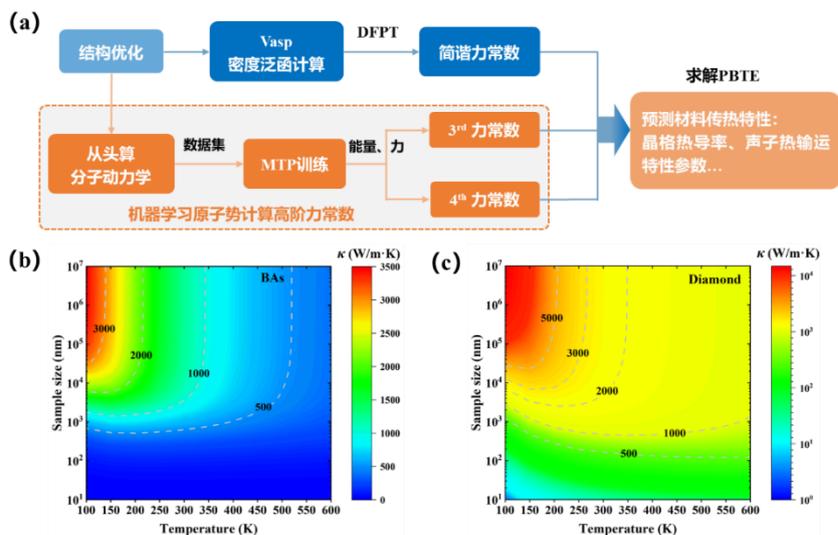


Fig. 1 (a) Schematic diagram of thermal conductivity calculation workflow based on machine learning potential.

Predicted thermal conductivity results of (b) BAs and (c) diamond

关键词: 机器学习势; 热导率; 砷化硼; 金刚石

参考文献

- [1] Z. Liu, X Yang, B. Zhang, W Li High thermal conductivity of wurtzite boron arsenide predicted by including four-phonon scattering with machine learning potential. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2021, 13, 53409-53415.
- [2] 王彪, 任海杰, 曹文鑫, 胡彦伟, 何玉荣, 韩杰才, 朱嘉琦, 基于第一性原理的金刚石薄膜热导率神经网络预测研究[J]. *中国科学:物理学 力学 天文学*, 2022, 52 (09) :62-74.
- [3] H Wei, S Zhao, Q Rong, H Bao Predicting the effective thermal conductivities of composite materials and porous media by machine learning methods. *Int. J. Heat Mass Transf.* 2018, 127: 908-916.
- [4] T. Feng, L Lindsay, and X Ruan Four-phonon scattering significantly reduces intrinsic thermal conductivity of solids. *Phys Rev B*. 2017, 96(16): 161201.
- [5] X. Yang, T. Feng, J. Li, X. Ruan Stronger role of four-phonon scattering than three-phonon scattering in thermal conductivity of III-V semiconductors at room temperature. *Phys Rev B*. 2019, 100(24): 245203.
- [6] I. S. Novikov, K Gubaev, E. V. Podryabinkin, A. V. Shapeev The MLIP package: moment tensor potentials with MPI and active learning. *Mach. Learn.: Sci. Technol.* 2021, 2, 025002.

报告人/墙报展示人简介:

报告人: 刘义坤(学生), 于哈尔滨工业大学攻读博士学位, 导师为何玉荣教授, 研究方向为材料热导率的第一性原理计算及多尺度热输运研究



基于深度学习的生物炭半纤维素含量分析方法

韩沛霖^{1,2,3}, 何玉荣^{1,2,3*}

¹哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨, 150001

²黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨, 150001

³哈工大郑州研究院, 郑州, 450000

*Email: rong@hit.edu.cn

目前我国主要的碳排放来自于工业和能源系统^[1], 为了实现“双碳”目标, 需要对能源系统进行优化升级。生物质广泛存在于自然界, 是最有前途的可再生能源之一^[2], 可以有效替代化石燃料减少碳排放。生物质能是世界上总量最大的可再生能源之一, 具有低质量和能量密度^[3]、亲水性好、可磨性差和灰分严重等特点。为了充分利用生物质能, 研究人员通常采用热解等手段对生物质进行能源升级^[4, 5]。生物质热解是提高生物质的燃料品质、能量密度和疏水性等性能的有效手段之一, 对于生物质的利用具有重要意义^[6]。然而, 热解过程十分复杂^[7], 在研究中难以捕获具体反应, 通常是根据剩余生物炭成分来推测大致反应情况。因此, 准确分析生物炭成分对于增加对生物质热解过程的理解以及充分利用生物炭产品具有重要意义。

在低温热解过程中, 生物质内的半纤维素等物质大量分解。热解后剩余生物炭中半纤维素含量是研究低温热解过程的关键。生物炭的分析方法多样, 包括元素分析、工业分析、热值分析、红外分析和热重分析等。根据元素分析和工业分析等数据, 研究人员可以计算出多种参数, 如燃烧指数和挥发物可燃性等^[8], 从而获得生物炭的产品质量。通过对热重和红外光谱数据进行分析^[9], 可以初步判断生物炭中半纤维素等组成情况, 从而进一步研究低温热解过程。然而, 研究人员需要对该过程的大量数据进行反复处理、分析, 步骤繁琐且耗时费力。近年来, 半导体技术的迅猛进步推动了计算机行业的蓬勃发展。计算机性能的跃升使得科学研究与深度学习方法进行结合逐渐成为现实。越来越多的研究人员开始关注可以进行数据挖掘的深度学习算法^[10]。这种基于科研中大量数据的深度学习方法, 可以捕获数据间的内在规律, 并对未知情形进行预测。因此, 采用深度学习分析方法分析生物炭成分逐渐具有了现实意义。

本研究基于有监督学习方法, 提出了一种基于深度学习的生物炭半纤维素含量分析方法。该方法根据生物质初始状态、热解条件(温度、时间)、生物炭元素分析结果(C、H、O、N等)以及工业分析结果等, 对生物炭微分热重曲线(DTG)进行预测, 并由所预测微分热重曲线分析半纤维素剩余含量, 实现了实验数据和人工智能的有效融合, 结构如图1所示。采用人工智能技术对实验数据进行分析, 在指导生物质热解研究, 降低实验成本以及提升生物炭品质方面具有潜在价值。

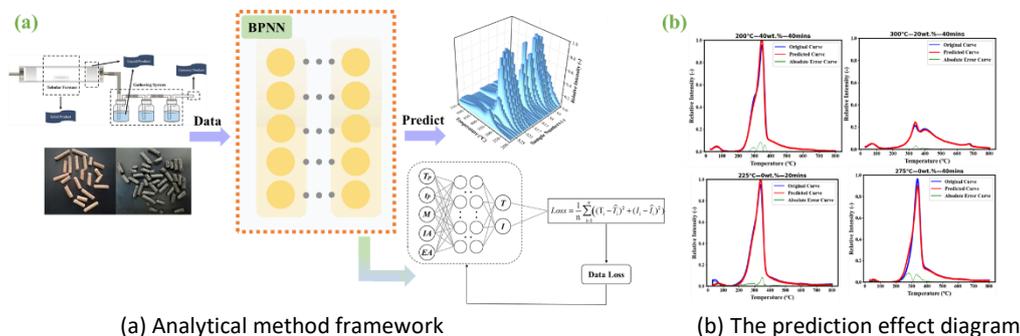


Fig. 1 Analysis method based on deep learning method

关键词: 深度学习; 生物炭; 热重分析; 半纤维素

参考文献

- [1] 苏健, 梁英波, 丁麟, 张国生, 刘合. 碳中和目标下我国能源发展战略探讨[J]. 中国科学院院刊, 2021, 36 (09) : 1001-9.
- [2] D. Medic, M. Darr, A. Shah, B. Potter, J. Zimmerman. Effects of torrefaction process parameters on biomass feedstock upgrading[J]. *Fuel*, 2012, 91(1): 147-54.
- [3] Y. Niu, Y. Lv, Y. Lei, S. Liu, Y. Liang, D. Wang, S. E. Hui. Biomass torrefaction: properties, applications, challenges, and economy[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2019, 115: 109395.
- [4] D. Zhang, P. Han, R. Yang, H. Wang, W. Lin, W. Zhou, Z. Yan, Z. Qi. Fuel properties and combustion behaviors of fast torrefied pinewood in a heavily loaded fixed-bed reactor by superheated steam[J]. *Bioresource Technology*, 2021, 342: 125929.
- [5] Q. He, L. Ding, Y. Gong, W. Li, J. Wei, G. Yu. Effect of torrefaction on pinewood pyrolysis kinetics and thermal behavior using thermogravimetric analysis[J]. *Bioresource Technology*, 2019, 280: 104-11.
- [6] D. Pritam, V. P. Chandramohan, M. Thangavel, P. Arivalagan. Recent advances in thermochemical methods for the conversion of algal biomass to energy[J]. *Science of the Total Environment*, 2021, 766: 144608.
- [7] T. Kan, V. Strezov, T. J. Evans. Lignocellulosic biomass pyrolysis: A review of product properties and effects of pyrolysis parameters[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2016, 57: 1126-40.
- [8] D. Zhang, X. Chen, Z. Qi, H. Wang, R. Yang, W. Lin, J. Li, W. Zhou, F. Ronsse. Superheated steam as carrier gas and the sole heat source to enhance biomass torrefaction[J]. *Bioresource Technology*, 2021, 331: 124955.
- [9] D. Zhang, P. Han, H. Zheng, Z. Yan, Torrefaction of walnut oil processing wastes by superheated steam: Effects on products characteristics[J]. *Science of the total environment*, 2022, 830: 154649.
- [10] J. Zhou, D. Liu, M. Ye, Z. Liu. Spatial-temporal self-attention network based on bayesian optimization for light olefins yields prediction in methanol-to-olefins process[J]. *Artificial Intelligence Chemistry*, 2024, 2(1): 100067.

报告人/墙报展示人简介:

报告人: 韩沛霖 (学生), 于哈尔滨工业大学攻读博士学位, 导师为何玉荣教授。

基于人工智能方法的湿颗粒碰撞过程弹性恢复系数分布预测

夏靖达^{1,2,3}、唐天琪^{1,2,3}、何玉荣^{1,2,3,*}

¹哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨市 150001

²黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨市 150001

³哈尔滨工业大学郑州研究院, 郑州市 450000

*Email: rong@hit.edu.cn

流化床反应器是实现流态化技术的重要反应器之一, 通常具有气固两相混合均匀、温度场均匀、传热传质效率高等优良性质。因此, 流化床反应器被广泛应用于能源、矿冶、制药以及化工等工业领域^[1], 例如: 喷雾造粒^[2]、煤气化^[3-4]、生物质气化^[5]、化学合成烯烃^[6]等。在这些工业过程中, 流化床中颗粒系统通常含有少量水分, 并且颗粒形状并不规则^[7]。颗粒形状的变化以及少量液体的存在会影响单一颗粒的碰撞过程, 导致整个颗粒系统的流化行为更加复杂, 使最终产品的尺寸分布和产品性质发生变化^[8]。因此, 如何准确描述单一湿颗粒的碰撞过程, 对指导流化床反应器的优化设计和控制产品的尺寸分布有着重要作用^[9]。

弹性恢复系数, 是颗粒碰撞过程中的重要参数之一, 表征了颗粒碰撞过程中的能量耗散。随着研究的不断进行, 研究者们提出使用湿颗粒弹性恢复系数描述湿颗粒的碰撞过程^[9]。目前, 对于湿颗粒弹性恢复系数的研究, 主要通过实验研究和模型推导两种方式, 但大多数湿颗粒弹性恢复系数模型仅适用于描述球形湿颗粒碰撞过程, 实验研究也仅在有限条件下对球形湿颗粒的碰撞过程进行研究^[10], 如何准确的预测湿颗粒弹性恢复系数在不同条件下的分布情况目前仍面临挑战。随着计算机与人工智能技术的快速发展, 神经网络在多相流领域的应用不断深化, 为进一步研究湿颗粒弹性恢复系数提供了思路^[7]。神经网络具有数据处理能力强、适应性强、可处理高维数据等优势, 鉴于目前研究人员已经对湿颗粒弹性恢复系数开展了大量实验研究, 可引入神经网络模型, 对已有数据进行训练和学习, 对湿颗粒弹性恢复系数的分布情况进行预测。

本研究基于神经网络预测与实验研究相结合的方法, 对非球形湿颗粒的碰撞过程开展研究。首先, 结合已有球形湿颗粒弹性恢复系数实验数据对模型进行训练和学习, 验证方法的可行性。之后, 开展非球形湿颗粒弹性恢复系数实验研究, 使用得到的实验数据对神经网络进行训练和学习, 预测湿颗粒弹性恢复系数在不同条件下的分布情况, 实验装置及预测结果如图1所示。

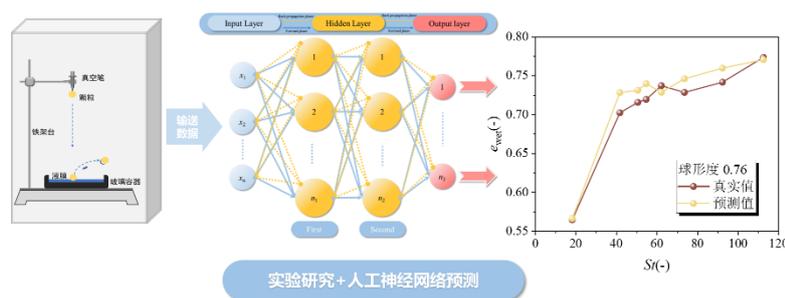


Fig. 1 Summary of the study

关键词: 神经网络; 非球形湿颗粒; 弹性恢复系数; 碰撞过程

参考文献

- [1] 邱沫凡, 蒋琳, 刘荣正, 刘兵, 唐亚平, 刘马林. 气固流化床化学反应数值模拟中颗粒尺度模型研究进展[J]. 化工进展, 2023, 42 (10): 5047-5058.
- [2] 王朝亮, 刘平, 罗旺荣, 胡捷. CRT 流化床造粒技术与传统流化床造粒技术比较[J]. 氮肥技术, 2022, 43 (05): 1-5.

- [3] 朱晓. 煤化学链燃烧塔式流化床反应器气固流动特性及数值模拟研究[D]. 东南大学, 2021.
- [4] 张家琦, 曹志凯, 周华, 张权聪. 基于颗粒团聚行为的灰熔聚流化床气化炉建模研究[J]. 煤炭学报, 1-15.
- [5] 范浩东, 李姜昊, 张涵, 张雄, 张世红. 成型生物质流化床气化及结渣影响因素研究[J]. 动力工程学报, 2024, 44(05):710-718.
- [6] 叶茂. 第三代甲醇制烯烃技术. 辽宁省, 中国科学院大连化学物理研究所, 2020-11-09.
- [7] 闫盛楠. 流化床内基于神经网络方法的非球形颗粒两相流模拟研究[D]. 哈尔滨工业大学, 2019.
- [8] Gollwitzer F, Rehberg I, Kruelle C A, Huang K. Coefficient of restitution for wet particles[J]. *Physical Review E*, 2012, 86: 011303.
- [9] Sutkar V S, Deen N G, Padding J T, Kuipers J A M. A novel approach to determine wet restitution coefficients through a unified correlation and energy analysis[J]. *AIChE Journal*, 2015, 61: 769-779.
- [10] Buck B, Heinrich S. Collision dynamics of wet particles: Comparison of literature models to new experiments[J]. *Advanced powder technology*, 2019, 30: 3241-3252.

报告人/墙报展示人简介:

报告人: 夏靖达(学生), 于哈尔滨工业大学攻读博士学位, 导师为何玉荣教授, 研究方向为喷雾流化床中多尺度动力学行为研究。

基于甲醇制烯烃及其下游生产链的 m-PIOT 模型定量研究

刘丹竹¹, 梁金强², 徐庶亮¹, 叶茂^{1,*}

¹中国科学院大连化学物理研究所, 辽宁省大连市中山路 457 号, 116023

²中国石油大学(北京)克拉玛依校区, 新疆克拉玛依市安定路 355 号, 834000

*Email: maoye@dicp.ac.cn

摘要正文: 化学品和材料在现代生活中无处不在。因此, 化工企业和园区迫切关注产业链的生产设计和优化, 以适应全球地缘政治格局和原材料市场不断波动变化的挑战。本研究以中国西部某化工园区生产数据为例, 通过建立甲醇及其下游产业链实物型投入产出模型(m-PIOT), 描述了该产业链中不同产品之间相互作用的定量分析。结果显示, 该园区甲醇下游生产链中存在缺乏强拉动及强支撑作用的产品部门; 丙烯酸异辛酯, 混合C₄对产业链发展具有较强的拉动作用; 原材料甲醇感应系数高达21.81, 对于整条产业链路具有较强的制约性。本文成果为化工产业链的生产设计和优化提供了新的方法和视角, 有助于改进资源配置、减少环境影响, 并提高整体生产效率。该模型的通用性使其可适用于其他化工产业链的生产, 为产业政策和资源配置提供了重要参考。

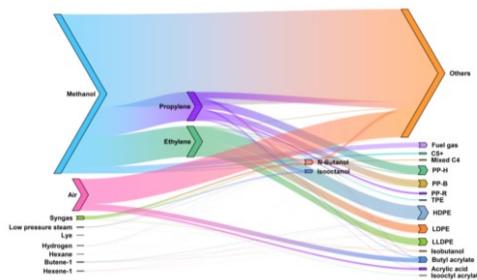


Fig. 1 Material flow diagram of downstream methanol industry chain (allocated by quality)

关键词: 实物型投入产出模型; 甲醇; 产业链; 物料流

参考文献

- [1] Wachs L, Singh S. A modular bottom-up approach for constructing physical input-output tables (PIOTs) based on process engineering models[J]. Journal of Economic Structures, 2018, 7(1): 1-24.
- [2] 陈艾, 焦洪桥, 王秀江, 等. 新型煤化工产业生态化发展的政策分析、技术路径研究[J]. 煤化工, 2023, 51(3): 1-5.

报告人/墙报展示人简介:

刘丹竹, 1983年3月, 中国科学院大连化学物理研究所, 工程师
多技术集成网络数学模型研究, 人工智能与传统化工交叉融合
Liudz@dicp.ac.cn, 13889655525



基于聚类算法的提升管内颗粒聚团碰撞过程演化特性研究

邓爱明^{1,2,3}、唐天琪^{1,2,3}、王天宇^{1,2,3}、何玉荣^{1,2,3,*}

¹哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨市 150001

²黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨市 150001

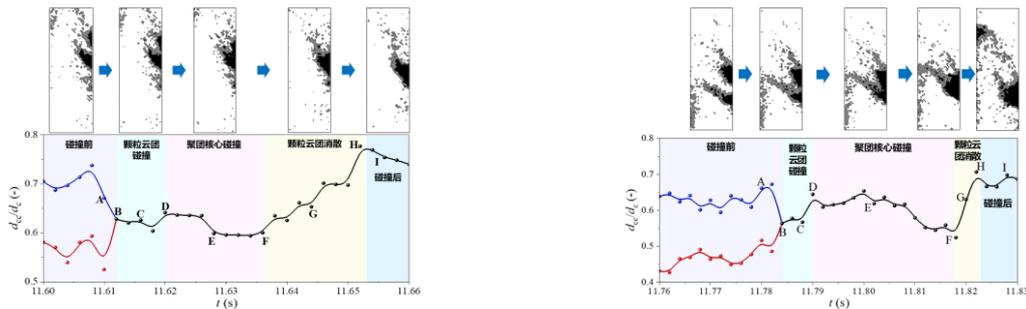
³哈尔滨工业大学郑州研究院, 郑州市 450000

*Email: rong@hit.edu.cn

循环流化床具有高效的气固混合、优良的传热传质性能以及连续操作能力强等优点^[1], 广泛应用于能源、化工以及环境保护等工业领域, 例如煤炭燃烧、生物质气化、流化催化裂化等^[2]。然而, 循环流化床反应器的流体动力学特性不均匀, 存在多个尺度的时空结构, 包括单颗粒运动的微观尺度, 颗粒聚团运动的介观尺度以及固体相运动的宏观尺度^[3]。其中, 介尺度结构即颗粒聚团在时间和空间上能够任意改变大小、形状和运动行为, 进而影响反应器内的气固交换和热质传递过程^[4, 5]。因此, 量化并预测颗粒聚团的演化特性, 对于循环流化床反应器的设计、操作优化以及实际工业生产至关重要。

颗粒聚团的判别是介尺度结构特性研究的关键, 阈值法是颗粒聚团识别的主要方式之一。由于颗粒聚团演化的多尺度性和复杂性, 不同工况下阈值的选择标准并不明确^[6]。随着计算机与人工智能技术的快速发展, 机器学习算法在多相流领域的应用不断深化, 为进一步研究流化床中颗粒聚团特性及其演化机制提供了思路^[7]。其中, 聚类算法能够根据数据属性和特征对数据进行分组, 无需预先设定阈值, 自动识别颗粒聚团, 有效提高了颗粒聚团识别的精确度^[8]。但目前针对颗粒聚团识别的研究主要针对聚团形状的识别, 忽略了颗粒与聚团以及聚团与聚团之间相互作用。

本研究基于无监督人工智能方法, 提出一种两步K-means聚类算法识别流化床内颗粒聚团。第一步是通过对颗粒瞬时分布图进行灰度处理, 基于颗粒位置信息识别颗粒聚团; 第二步是对聚团内部颗粒的速度场进行聚类分析, 考虑聚团的内各向异性。采用离散单元软球模型对循环流化床提升管内气固两相流动进行数值模拟, 并以模拟结果为数据样本, 基于两步K-means聚类算法对聚团追随过程和聚团异向碰撞过程演化特性进行研究, 颗粒聚团碰撞过程聚团核心和聚团当量直径比变化情况如图1所示。



(a) particle clusters collision process in the same direction (b) particle clusters collision process in the opposite direction

Fig. 1 clusters core and clusters equivalent diameter ratio in particle clusters collision process

关键词: 提升管; K-means聚类算法; 颗粒聚团; 聚团碰撞过程

参考文献

- [1] 李晓祥, 石炎福, 黄卫星, 余华瑞, 祝京旭. 快速流化床提升管中气固流动行为的非线性分析[J]. 化工学报, 2004 (02): 182-188.

- [2] X. H. Liu, S. Wang, S. L. Yang, H. Wang. Investigation of cluster property in the riser of circulating fluidized bed with a wide particle size distribution[J]. *Powder Technology*, 2021, 390: 273-291.
- [3] J. W. Wang. Continuum theory for dense gas-solid flow: A state-of-the-art review[J]. *Chemical Engineering Science*, 2020, 215: 115428.
- [4] J. Capecelatro, O. Desjardins, R. O. Fox. On fluid-particle dynamics in fully developed cluster-induced turbulence[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2015, 780: 578-635.
- [5] C. X. Wang, M. J. Luo, X. Su, X. Y. Lan, Z. N. Sun, J. S. Gao, M. Ye, J. Zhu. A sliding-window based signal processing method for characterizing particle clusters in gas-solids high-density CFB reactor[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2023, 452: 139141.
- [6] W. Ge, Q. Chang, C. X. Li, J. W. Wang. Multiscale structures in particle-fluid systems: Characterization, modeling, and simulation[J]. *Chemical Engineering Science*, 2019, 198: 198-223.
- [7] J. H. Li, W. Ge, W. Wang, N. Yang, W. L. Huang. Focusing on mesoscales: from the energy-minimization multiscale model to mesoscience[J]. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 2016, 13: 10-23.
- [8] S. Y. Yin, W. Q. Zhong, T. Song, P. Lu, Y. H. Chen. Clusters identification and meso-scale structures in a circulating fluidized bed based on image processing[J]. *Advanced Powder Technology*, 2019, 30(12): 3010-3020.

报告人/墙报展示人简介:

报告人: 邓爱明(学生), 于哈尔滨工业大学攻读博士学位, 导师为何玉荣教授, 研究方向为喷雾流化床中多尺度动力学行为研究。

基于物理信息神经网络的褐煤内部传质过程预测

刘汉儒^{1,2,3}, 唐天琪^{1,2,3}, 何玉荣^{1,2,3*}

¹哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨, 150001

²黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨, 150001

³哈工大郑州研究院, 郑州, 450000

*Email: rong@hit.edu.cn

煤炭产业是保障省工业生产和民生的重要基础产业之一,也是国家能源和化工等相关行业发展的重要支撑。由于煤炭储备资源主要为高水分褐煤^[1],因此,高效干燥高水分褐煤的预处理有助于加强煤炭产品的深加工和高新技术开发。干燥是化工生产中常见的操作,目的是移除颗粒内部水分或使水分达到一定标准,以便于工业产品的储存和进一步处理。然而,干燥是一个高维度、非线性、多尺度的复杂过程^[2],这为颗粒内部传质过程的准确预测带来极大困难。数值方法通常被用于计算这种复杂的、基于多个物理模型的模拟过程。然而,在面对网格畸变等特殊情况时,传统的数值方法通常很难准确地计算实际控制偏微分方程。

近年来,由于计算机与人工智能技术的快速发展,计算效率和性能得到了显著提高,这使得机器学习算法成为了探究复杂干燥过程的新方法。其中,物理信息神经网络(Physics-informed Neural Network, PINN)^[3]作为一种在传统数值领域中应用神经网络的方法,可以对除时空变量以外的其他变量进行插值,从而直接求解参数化偏微分方程。PINN的核心是在神经网络的损失函数中嵌入物理信息的控制方程,从而使网络在逼近解条件或观测结果的时候,实现在求解范围内满足控制方程。相比于基于网格的传统方法(如有限差分法和有限体积法),PINN通过深度神经网络的自动微分功能,避免了偏微分方程的离散化。因此,PINN在高维度问题上具备优势,可作为求解干燥过程中相应偏微分方程的一种替代方法。

本研究提出一种基于PINN的褐煤颗粒内部传质过程预测方法,可实现颗粒内部水分运输规律与实验数据的有效融合,其结构如图1所示。本模型在损失函数中同时考虑了数据损失、对流传质方程的残差、边界约束和相关初始条件纳入损失函数而得到的。该模型在指导褐煤颗粒干燥过程、降低运行成本以及提升产品品质方面具有潜在价值。

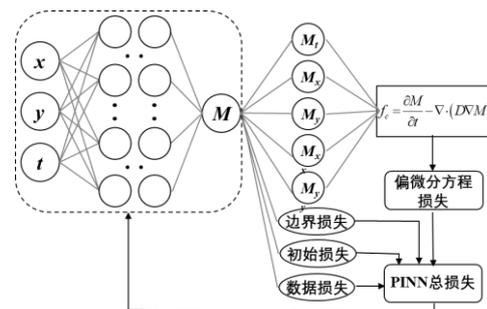


Fig. 1 Schematic diagram of PINN with spatiotemporal inputs and moisture content output with residual loss functions

关键词: 物理神经网络方法; 褐煤干燥; 传质过程

参考文献

- [1] 陈忠新, 黑龙江省煤炭矿业发展战略研究[D]. 吉林大学, 2012.
- [2] 张旭伟, 张一帆, 李红智, 吴家荣, 乔永强, 褐煤热泵预干燥超临界CO₂循环发电系统理论研究[J]. 工程热物理学报, 2023, 44(07):1753-1761.

- [3] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *J. Comput. Phys.* 2019, 378: 686–707.

报告人/墙报展示人简介:

报告人: 刘汉儒(学生), 于哈尔滨工业大学攻读博士学位, 导师为何玉荣教授, 研究方向为流化床内颗粒流动及热质传递特性研究。

机器学习模型中的记忆和遗忘

王孙洋^{1, 2}, 孟凡勇^{1, *}

¹中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京, 100190

²中国科学院大学化学工程学院, 北京, 100049

*Email: fymeng@ipe.ac.cn

摘要正文: 以神经网络模型为代表的机器学习方法在人工智能领域得到了日益广泛的应用, 但黑箱模型 (Black-Box Model) 属性是制约机器学习在化工领域发挥更大作用的瓶颈之一。从理论上对神经网络模型泛化能力进行解释, 是目前人工智能领域所需要研究的重要课题。本研究尝试将介科学的“主导机制在竞争中的协调 (Compromise in Competition, CIC)”这一思想引入机器学习模型的解释与优化研究中, 从训练样本的角度进行了尺度分解, 明确了训练批次 (Batch) 这一介尺度结构的重要性, 并分析了记忆和遗忘这对主导机制在竞争中的协调关系, 提出了记忆程度和遗忘程度来量化记忆和遗忘的相对主导关系。本研究在计算机视觉 (Computer Vision, CV)、自然语言处理 (Natural Language Processing, NLP) 数据集上开展了系列实验, 结果表明, 记忆和遗忘之间竞争中的协调导致了模型泛化能力的改变。机器学习领域广泛采用的随机丢弃法 (Dropout)、早停法 (Early Stopping)、L2 正则化 (L2 Regularization)、随机综合梯度加权上升 (Stochastic Integrated Gradient Underweighted Ascent, SIGUA) 等方法, 均可通过介科学 CIC 理论进行统一解释。本研究为机器学习领域的研究引入了一个新的视角, 为人工智能进一步应用提供了理论支持。

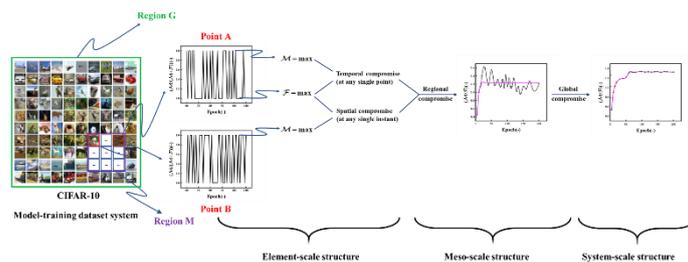


Fig. 1 CIC between memorizing and forgetting at different scales

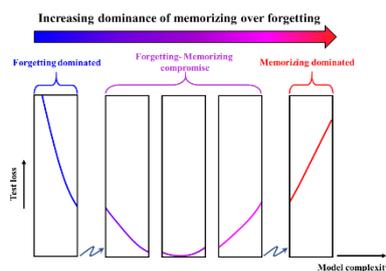


Fig. 2 Three regimes occur successively with changing the relative dominance of memorizing over forgetting

关键词: 机器学习; 泛化能力; 记忆和遗忘; 介科学; 竞争中协调

参考文献

- [1] J. H. Li, W. Ge, W. Wang, N. Yang, W. L. Huang Focusing on mesoscales: from the energy-minimization multiscale model to mesoscience. *Curr Opin Chem Eng.* 2016, 13: 10–23.
- [2] J. H. Li Exploring the Logic and Landscape of the Knowledge System: Multilevel Structures, Each Multiscaled with Complexity

at the Mesoscale. *Engineering*. 2016, 2(3): 276-285.

[3] L. Guo, J. Wu, J. H. Li Complexity at Mesoscales: A Common Challenge in Developing Artificial Intelligence. *Engineering*. 2019, 5(5): 924-929.

[4] L. Guo, F. Y. Meng, P. F. Qin, Z. J. Xia, C. Qi, J. H. Chen, J. H. Li A Case Study Applying Mesoscience to Deep Learning. *Engineering*. 2024.

报告人/墙报展示人简介:

王孙洋, 男, 2000年2月出生, 2022年6月在南京工业大学化工学院获学士学位, 自2022年9月起在中国科学院大学和中国科学院过程工程研究所攻读硕士学位。研究方向为介科学与机器学习。

附: 报告人是学生



基于 PBM/DNN 的鼓泡流化床 CFD 建模及应用

胡善伟*, 靳娜妮, 刘新华, 郭力

中国科学院过程工程研究所, 中关村北二街 1 号, 北京, 100190

*Email: swhu@ipe.ac.cn

摘要正文: 在鼓泡流化床中, 现有理论多认为气泡的产生来源于流动不稳定性 and 局部能量的耗散效应, 但其动态演化规律的物理解释仍不清晰。既往研究多关注反应器宏尺度层面的气泡尺寸和速度分布等气泡静态特征, 而对气泡碰撞、聚并和破碎等动态演化行为的机制研究及模型量化则很少涉及。另一方面, 由于计算性能的限制, 粗网格方法被广泛应用于工业反应器的计算流体力学 (Computational fluid mechanics, CFD) 模拟分析。但目前基于结构的亚格子曳力模型, 如 EMMS 曳力模型, 并没有充分的考虑气泡尺寸分布函数 (Bubble size distribution, BSD) 及其动态演化对本构关系的影响。本研究提出了两种动态封闭 EMMS 结构曳力的建模思路, 以解决传统的基于经验气泡方程来计算网格介尺度曳力的弊端。

第一种建模思路是采用群平衡模型 (PBM) 来封闭气泡尺寸项。本研究通过考虑鼓泡流化床中气泡尾涡诱导作用和气泡上升速度差异导致的气泡聚并效应, 建立了气泡的聚并频率模型; 进一步考虑尺寸效应和气泡不稳定性导致的气泡破碎效应, 建立了气泡的破碎频率模型, 而破碎产生的子气泡分布函数可以近似表达为高斯分布函数。基于该气泡聚并和破碎核, 可以获得鼓泡床气泡演化的群平衡模型。为了兼顾计算的精度和效率, 本研究采用高斯积分矩方法对群平衡模型进行求解, 并通过获得的矩序列获得各计算网格中的实时气泡直径。通过采用该气泡直径值对 EMMS 鼓泡曳力进行动态封闭, 避免了传统 EMMS 曳力修正采用的经验关联式来封闭气泡直径项的弊端。本文通过耦合 EMMS 曳力、PBM 模型和 CFD 模型实现了对鼓泡流化床反应器的粗网格高效高精度模拟。另一方面, 本研究采用拓展的积分矩方法 (EQMOM) 对 QMOM 获得的低阶矩进行离线重构, 实现了对气泡尺寸 PDF 预测的同时又不损失粗网格模拟的高效性。计算结果和实验数据呈现了良好的一致性。

第二种建模思路是采用预测气泡特性的 DNN 模型来封闭模型。通过一系列高分辨率的 TFM 模拟能够获得详细的流场数据, 并采用基于 Otsu 的自适应阈值气泡识别方法统计气泡信息。根据相关性分析和随机森林法结果, Re , h , ε_g , r/R , 和 U_g/U_{mf} 被确定为影响气泡特性的关键因素, 并作为 DNN 模型的候选输入变量。基于不同的输入变量组合, 包括 $\widetilde{Re}-h-\varepsilon_g-r/R-U_g/U_{mf}$, $\widetilde{Re}-h-\varepsilon_g-r/R$, $\widetilde{Re}-h-\varepsilon_g$, $\widetilde{Re}-h-r/R$, $\widetilde{Re}-h$ 和 $h-U_g/U_{mf}$, 开发了一组预测气泡大小和速度的 DNN 模型。为了更好地平衡训练模型的准确性和计算成本, 将模型输入简化为仅包含 \widetilde{Re} , h , ε_g 三个关键参数, 简化后的模型同样能够较好地预测气泡的大小和速度, 模型预测误差在 $\pm 30\%$ 以内。在高估团聚物尺寸或速度方面, DNN 预测精度是传统经验关联式的 5 倍。然而, DNN 模型仍然高估了小气泡的直径和速度 (例如, $\widetilde{D}_b < 0.02 \text{ m}$), 这可能是由于分布器入口条件的影响以及在量化小气泡特性时不可避免的误差造成的。将预测气泡 d_{32} 的 DNN 模型与 EMMS 气泡曳力模型进行耦合, 以封闭气泡的尺寸项。在粗网格分辨率下, CFD-DNN-EMMS 模型能够较好地预测床层的膨胀特性, 预测结果与实验和细网格模拟结果吻合度较高。

关键词: 曳力; 机器学习; 群平衡; 气泡; 流态化

参考文献

- [1] Hu S, Liu X. CFD-PBM simulation of gas-solid bubbling flow with structure-dependent drag coefficients. *Chem Eng J*, 2021, 413: 127503.
- [2] Hu S, Liu X. 3D CFD-PBM simulation of gas-solid bubbling beds of Geldart A particles with sub-grid drag correction. *Chem Eng Sci*, 2023, 275: 118660.
- [3] Jin N, Hu S, Liu X, Guo L. Machine Learning Assisted Characterization of Local Bubble Properties and Its Coupling with the EMMS Bubbling Drag[J]. *Ind Eng Chem Res*, 2024, 63(10): 4631-4646.

基于 BiLSTM 方法的锂离子电池健康状态与剩余寿命预测

于仙朋^{1,2}, 何玉荣^{1,2*}

¹ 哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨, 150001

² 黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨, 150001

*Email: rong@hit.edu.cn

摘要正文: 锂离子电池具有高能量密度、长循环寿命以及低自放电率等特性, 广泛应用于能源、环境等过程工程领域^[1]。随着充放电次数的不断增加, 锂离子电池的逐渐老化将导致电池性能下降, 并可能引发内部短路过热, 发生爆炸或火灾等危险, 因此, 锂离子电池的退化问题是实际应用中不容忽视的问题^[2]。对电池健康状态 (State of Health, SOH) 与剩余寿命 (Remaining Useful Life, RUL) 进行有效预测, 在电池达到失效阈值前进行更换, 对保障其安全稳定运行具有重要意义^[3]。然而, 锂离子电池的退化受到诸多外界因素影响, 如环境温度、过度充放电和机械应力等, 使得对于电池退化行为的预测十分困难, 为锂离子电池的安全、高效利用带来极大的挑战^[4]。

近年来, 随着深度学习的飞速发展, 基于数据驱动模型可以发现电池SOH和RUL关于电池工作参数的隐性关系, 达到更好的预测效果^[5]。Tang等人^[6]基于卷积神经网络开发了锂离子电池SOH预测模型, 该模型在两个公共数据集上得到验证, 具有较高精度。然而, 依靠锂离子电池历史数据建立的神经网络预测模型, 在实际预测过程中往往缺乏未来衰减过程的先验信息, 导致预测时出现发散或曲线偏差较大等问题^[7]。同时, 基于历史数据建立的预测模型无法充分利用电池工作的实时数据, 不能很好地对电池SOH与RUL进行即时预测^[8]。

因此, 本文基于双向长短时记忆神经网络方法, 建立可靠的锂离子电池SOH与RUL预测模型, 如图1所示。结合迁移学习算法, 提高所建立预测模型的迁移性和泛化能力, 实现对锂离子电池的即时、准确预测, 为锂离子电池的高效、安全利用提供技术参考。

关键词: 锂离子电池; 健康状态估计; 剩余寿命预测; 双向长短时记忆; 神经网络



图1 电池 RUL 迁移学习预测算法流程图与结果图

基金: 黑龙江省自然科学基金重点项目 (项目号: No. ZD2021E002)

参考文献

- [1] Yujie Wang, Tian Jiaqiang, Sun Zhendong, et al. A comprehensive review of battery modeling and state estimation approaches for advanced battery management systems. *Renew. Sust. Energ. Rev.* 2020, 131110015.
- [2] Xiaosong Hu, Xu Le, Lin Xianke, et al. Battery lifetime prognostics. *Joule*, 2020, 4(2): 310-346.
- [3] Huixin Tian, Qin Pengliang, Li Kun, et al. A review of the state of health for lithium-ion batteries: Research status and suggestions.

J. Clean. Prod. 2020, 261120813.

- [4] Rui Xiong, Li Linlin, Tian Jinpeng. Towards a smarter battery management system: A critical review on battery state of health monitoring methods. *J. Power Sources*, 2018, 40518-29.
- [5] 陈翌, 白云飞, 何瑛. 数据驱动的锂电池健康状态估算方法比较[J]. 储能科学与技术, 2019, 8 (06) : 1204-1210.
- [6] Aihua Tang, Jiang Yihan, Yu Quanqing, et al. A hybrid neural network model with attention mechanism for state of health estimation of lithium-ion batteries. *J Energy Storage*, 2023, 68107734.
- [7] Zuxin Li, Shen Shengyu, Zhou Zhe, et al. Novel method for modelling and adaptive estimation for SOC and SOH of lithium-ion batteries. *J Energy Storage*, 2023, 62106927.
- [8] Lucian Ungurean, Cârstoiu Gabriel, Micea Mihai-V, et al. Battery state of health estimation: a structured review of models, methods and commercial devices. *Int. J. Energy Res.* 2017, 41(2): 151-181.

报告人/墙报展示人简介:

于仙朋 (2002-), 哈尔滨工业大学在读博士生, 导师为何玉荣教授, 研究方向为锂离子电池热管理。



附: 报告人为学生

基于区间预测方法的流态化干燥特性预测

宋志超^{1,2,3}, 唐天琪^{1,2,3}, 何玉荣^{1,2,3*}

¹ 哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨, 150001

² 黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨, 150001

³ 哈工大郑州研究院, 郑州, 450000

*Email: rong@hit.edu.cn

摘要正文: 流化床干燥技术因其气固动量交换能力高、气固接触面积大以及传热传质效率高等优点而成为工业生产中最常用的方法之一^{[1][2]}。精确预测颗粒的干燥特性曲线, 可以在提高能源使用效率的同时减少温室气体排放。然而实际过程中流化床受到干燥气体介质、颗粒性质、床层几何结构和外场因素等参数影响, 干燥质量受到多参数多因素协同作用^[3], 在实验过程中难以同时捕捉多因素对干燥过程的影响规律, 给准确预测流态化干燥过程, 合理的进行能量分配、优化操作步骤带来极大的困难。

近年来, 随着计算机的发展, 深度学习的方法被用于在大量数据中检测数据背后隐藏关系、提取有用信息, 已被用于过程工程领域^[4]。Palancar等人^[5]利用神经网络方法对连续流化床干燥器进行模拟, 预测颗粒水分与温度。目前, 随着机器学习算法在预测流态化干燥特性方面的不断应用, 虽然预测准确率越来越高^[6], 但大多数没有考虑到预测过程中带来的不确定因素, 例如, 来自数据的偶然不确定度与来自模型的认知不确定度, 对预测结果存在盲目性, 不能预测没有真实数据的未知情况。

综上所述, 本研究发展贝叶斯优化贝叶斯神经网络框架, 如图1所示。其中, 将概率建模与人工神经网络方法相结合, 建立贝叶斯神经网络模型, 采用贝叶斯优化算法优化网络中的超参数, 以高水分褐煤为研究对象, 用于预测流态化干燥特性, 辅助工程决策。

关键词: 贝叶斯神经网络; 区间预测; 流态化干燥特性

基金: 国家自然科学基金联合基金重点项目 (No. U20A20304)

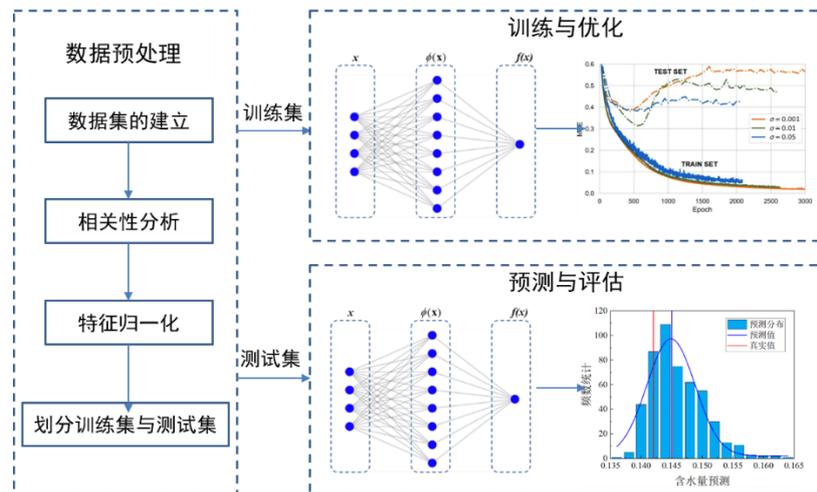


图1 贝叶斯优化贝叶斯神经网络算法流程图与效果示意图

参考文献

- [1]. Zaccariello L, Montagnaro F. Fluidised bed gasification of biomasses and wastes to produce hydrogen-rich syn-gas—a review. *J. Chem. Technol. Biotechnol.* 2023, 98(8): 1878-1887.
- [2]. 陈祁, 刘慧慧, 汪大千, 等. 小型流化床干燥器气固流动和干燥的CPFD数值模拟[J]. 中国矿业大学学报, 2019, 48 (02):

415-421.

- [3]. Lingayat A, Balijepalli R, Chandramohan V P. Applications of solar energy based drying technologies in various industries—A review. *Sol Energy*, 2021, 229: 52-68.
- [4]. Yu J, Li H, Ye M, et al. A knowledge-driven approach for automatic generation of reaction networks of methanol-to-olefins process. *Chem. Eng. Sci.* 2024, 284: 119461.
- [5]. Palancar M C, Aragon J M, Castellanos J A. Neural network model for fluidised bed dryers. *Dry. Technol.* 2001, 19(6): 1023-1044.
- [6]. Kalathingal M S H, Basak S, Mitra J. Artificial neural network modeling and genetic algorithm optimization of process parameters in fluidized bed drying of green tea leaves. *J Food Process Eng.* 2020, 43(1):13128.
- [7]. Nanvakenari S, Movagharnjad K, Latifi A. Evaluating the fluidized-bed drying of rice using response surface methodology and artificial neural network. *LWT*, 2021, 147: 111589.

报告人/墙报展示人简介:



宋志超（1997-），男，哈尔滨工业大学博士研究生在读，导师为何玉荣教授，主要研究方向为多相流热物理学

附：报告人为学生

基于物理信息神经网络的化学链制氢预测

曹佳蕾, 章冉, 孙立岩*, 肖睿*

东南大学, 江苏省南京市江宁区东南大学路 2 号, 211189

Email: sunliyan@seu.edu.cn, ruixiao@seu.edu.cn

摘要正文: 氢能是一种清洁、高效的能源, 被视为未来能源结构的重要组成部分^[1]。目前, 氢能主要通过煤化工、天然气重整等工艺来制备, 过程中伴随着大量温室气体和污染物, 后续分离提纯成本高^[2]。化学链制氢是一种新兴的清洁制氢技术, 利用金属氧化物作为氧载体, 在不同反应器间实现质量和能量传递, 可以分别获得高纯氢气和二氧化碳, 越来越多的学者对化学链制氢技术开展深入研究工作。近年来, 机器学习快速发展, 已成为化工过程优化和在线主动预测的强大工具, 为化学链制氢的研究工作提供了新的研究思路, 使得在化学链制氢的研究中应用基于数据驱动的方法成为可能。然而, 在实际实验过程中, 人力成本有限, 数据收集代价高昂, 所获得实验数据常常不足以建立一个可靠的预测模型, 导致在预测结果上脱离现实物理规律^[3]。物理信息神经网络(PINN)可以有效解决数据稀疏的情况, 在原有模型的训练过程中加入部分先验知识, 使其具有更强的可解释性并且减少对数据库的依赖^[4]。本文收集了共383组化学链制氢实验数据, 分别使用支持向量机、决策树、随机森林、人工神经网络和PINN进行模型训练。根据变量的影响比重, 采用了温度和铁含量相关的偏微分方程作为网络的物理约束嵌入到模型中。结果表明, 先验知识的引入使PINN相比较其他模型表现出了最佳的性能和可解释性, 并使用该模型对不同工况的产氢量和操作条件的影响进行分析。该研究提供了一个快速预测制氢过程的方法, 对氧载体的设计和化学链制氢工艺的优化具有指导意义。

关键词: 化学链制氢; 载氧体; 机器学习; 物理信息神经网络

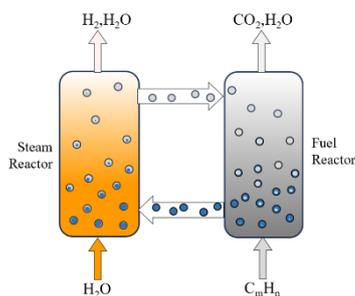


图1 化学链制氢工艺示意图

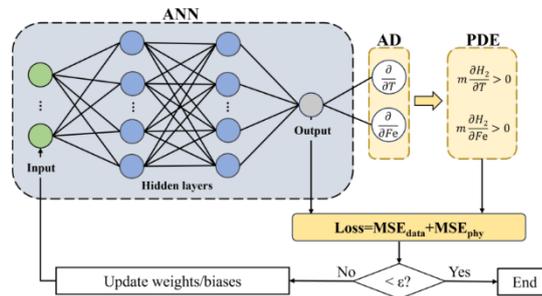


图2 物理信息神经网络示意图

参考文献

- [1] 高明. 化学链制氢研究进展[J]. 能源研究与利用, 2022(6): 29-33.
- [2] 钟鸣. 中国绿色制氢关键技术发展现状及展望[J]. 现代化工, 2023, 43(4): 13-7.
- [3] Rueden L V, Mayer S, Beckh K, et al. Informed Machine Learning – A Taxonomy and Survey of Integrating Prior Knowledge into Learning Systems [J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2023, 35(1): 614-33.
- [4] Paters J, Rana P, Ghosh P. A taxonomic survey of physics-informed machine learning[J]. Applied Sciences, 2023, 13(12): 6892.

报告人/墙报展示人简介:

曹佳蕾, 东南大学能源与环境学院硕士研究生, 主要从事化学链制氢技术研究、数值模拟、机器学习、人工智能辅助设计, 已发表 SCI 论文 1 篇、EI 论文 1 篇。附: 报告人是学生



机器学习在真实燃料复杂反应网络中的应用

郑默^{1,*}, 杨善文¹, 李晓霞^{1,*}

¹中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京市海淀区中关村北二条1号, 100190

*Email: mzheng@ipe.ac.cn, xxia@ipe.ac.cn

摘要正文: 燃料包括液体燃料(汽油、航油、柴油、高密度特种燃料油、生物油)和固体燃料(废旧塑料、生物质、煤), 研究其热解和氧化微观反应机理对控制燃烧等热化学转化过程、提高燃料利用率而言至关重要。真实燃料组分通常复杂且结构多样, 构建真实燃料热解和氧化的详细反应动力学机理是一项长期任务, 而将燃料热解和氧化微观反应机理及动力学认识耦合到宏观反应器的数值模拟是燃烧相关领域长期奋斗的目标。限于实验技术难以直接检测到“短寿命”中间体和量子力学计算的成本极高, 目前对 C4 以下燃料核心机理认识相对成熟, 直接研究真实混合燃料或固体燃料复杂结构反应行为仍十分困难。ReaxFF MD 方法的兴起为直接考察真实复杂燃料体系的热解行为提供了可能性, 可获得燃料反应过程中物种的演化趋势和物种参与的相对完整的详细反应, 但同时获得的反应体系涉及到大量的中间体和多通道的反应, 反应网络极为复杂。相应详细机理的复杂性决定了大规模模拟体系的反应分析是非人力所能及的, 并且因缺乏动力学参数, 无法直接用于燃烧反应器的数值模拟。

面向真实燃料热解和氧化体系, 本工作提出并建立了基于反应自动分类的反应网络简化方法 SRG-Reax (Skeleton Reaction network Generation for ReaxFF MD)^[1]。利用 ReaxFF MD 模拟得到的反应物种的浓度和详细反应随时间的变化隐含的反应动力学信息^[2], 特别是完整反应(反应位点)信息, 采用机器学习中的 tri-training 半监督分类方法结合主动学习的方法, 构建了燃料热解和氧化反应自动分类模型, 基于反应中心特征进行反应自动分类, 通过合并同类型反应路径提取重要反应路径和物种, 将大规模真实多组分复杂碳氢燃料体系的详细机理简化为可控的小规模骨干反应网络。该方法已成功应用于 RP-3 燃料经典的 3 组分和 4 组分替代燃料模型热解体系中正构烷烃、环烷烃和芳香烃骨干反应网络的自动构建; 轮船柴油氧化过程 >100,000 个氧化反应的自动分类; 废旧塑料主要组成聚丙烯裂解解芳构化的关键反应类型自动识别等, 为从 ReaxFF MD 模拟中构建和理解大规模复杂反应体系的全局反应机理提供了一种新的途径。

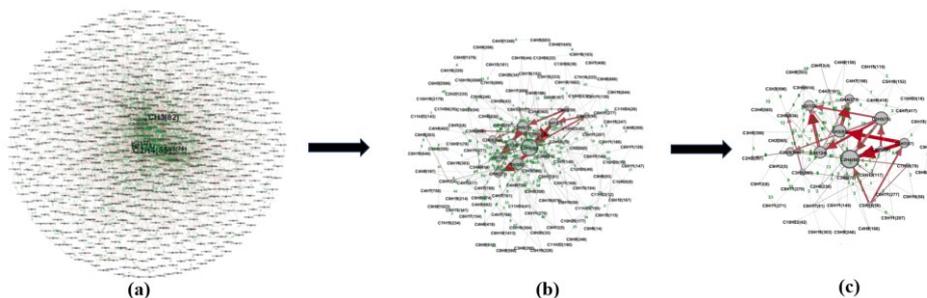


Fig.1 Detailed reaction class tagged network (RxCN) for the ReaxFF MD simulated pyrolysis reactions of the 45-component RP-3 model obtained on the basis of predicted reaction classes by the tri-training classifier: (a) Detailed RxCN of all reaction pathways; (b,c) Simplified RxCN obtained by selecting the top 15% pathways and top 5% of reaction pathways

关键词: 机器学习; 真实燃料的热解和氧化; 化学反应分子动力学模拟; 反应自动分类; 骨干反应网络

参考文献

[1] Yang S, Li X, Zheng M, Ren C, Guo L. Generating a skeleton reaction network for reactions of large-scale ReaxFF MD pyrolysis

simulations based on a machine learning predicted reaction class[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2024, 26(6): 5649-5668

[2] Yang S, Li X, Zheng M, Ren C, Guo L. Creating a reaction data set labeled with reaction class for automated reaction classification for ReaxFF molecular dynamics simulations of realistic fuel pyrolysis[J]. Energy & Fuels, 2024, 38(5): 4594-4612.

报告人/墙报展示人简介:

郑默, 副研究员, 2015年毕业于中国科学院过程工程研究所, 并于当年留所工作, 于2020年入选中国科学院青促会; 郑默共发表论文30余篇, 创建两套自主软件GMD-Reax和VARxMD, 均实现成果转化, 已推广至国内高校、科研单位、相关企业共20余家; 其研究方向为大规模反应分子动力学模拟方法的发展和在固体能源和液体燃料中的应用。



附: 报告人非学生

耦合深度学习与 OpenFOAM 的两相流模拟方法研究

温凯杰¹, 陈建华^{1,*}, 郭力^{1,2}, 夏诏杰^{1,2}

¹中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京, 100190

²中国科学院大学化学工程学院, 北京, 100049

*Email: jhchen@ipe.ac.cn

摘要正文: 本研究提出了一种耦合深度学习与OpenFOAM的两相流模拟计算方法, 该方法将OpenFOAM求解器作为物理解释器, 深度学习模型作为模拟加速器, 以探索两相流长时间模拟的有效加速方案。在Euler-Euler的模拟框架下, 以鼓泡床为例, 分析了该方法对物理场计算的准确性, 探讨了预测不同物理量组合对计算结果的影响, 并研究了深度学习模型预测时间跨度对计算结果和加速效果的影响。在Euler-Lagrange的模拟框架下, 以鼓泡塔为例, 建立了用于预测流体物理场与离散气泡运动特征的深度学习模型, 并分析了模型的预测效果, 研究了耦合计算方法在长时间计算中的误差变化, 并分析了该方法对时均物理场的计算效果。该工作为AI-CFD耦合方法在多相反应器中的应用提供了新的思路。

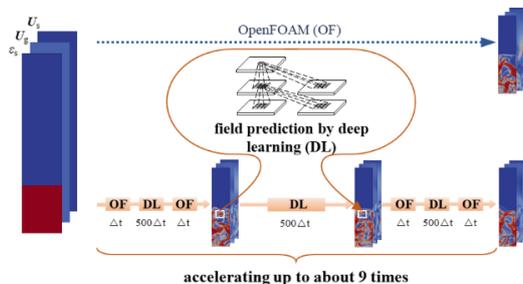


Fig. 1 The coupled calculation process of gas-solid flow system.

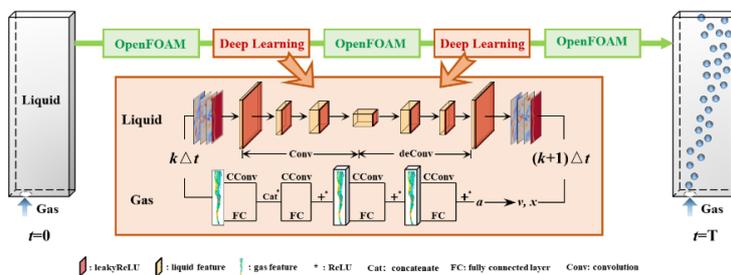


Fig. 2 The coupled calculation process of gas-liquid flow system.

关键词: 两相流; 深度学习; CFD; 反应器; 加速模拟

参考文献

[1] 温凯杰, 郭力, 夏诏杰, 陈建华, 一种耦合 CFD 与深度学习的两相流快速模拟方法[J]. 化工学报, 2023, 74(9): 3775-3785.
 [2] K. Wen, L. Guo, Z. Xia, S. Cheng, and J. Chen A hybrid simulation method integrating CFD and deep learning for gas-liquid bubbly flow, *Chem. Eng. J.* 2024, 495: 153515.

气固反应器智能化建模与优化

朱礼涛^{1*}, 罗正鸿²

¹上海交通大学智慧能源创新学院, 上海, 200240

²上海交通大学化学化工学院化工系, 上海, 200240

*Email: sjtu_zlt@sjtu.edu.cn

摘要正文: 近些年来, 以人工智能、数字孪生、大语言模型等为代表的智能化和数字化技术, 给化学工程领域带来了新的挑战与机遇。采用数智化技术研究化工学科的基本问题逐渐成为领域关注的焦点之一。本文将简要回顾数智化技术在化工中的典型应用研究案例, 重点介绍课题组近期在气固多相反应器内融合流体力学模型和数据的建模方法、基于混合方法的反应器性能多目标优化、贝叶斯在线自动优化、加速计算等方面的初步研究工作。

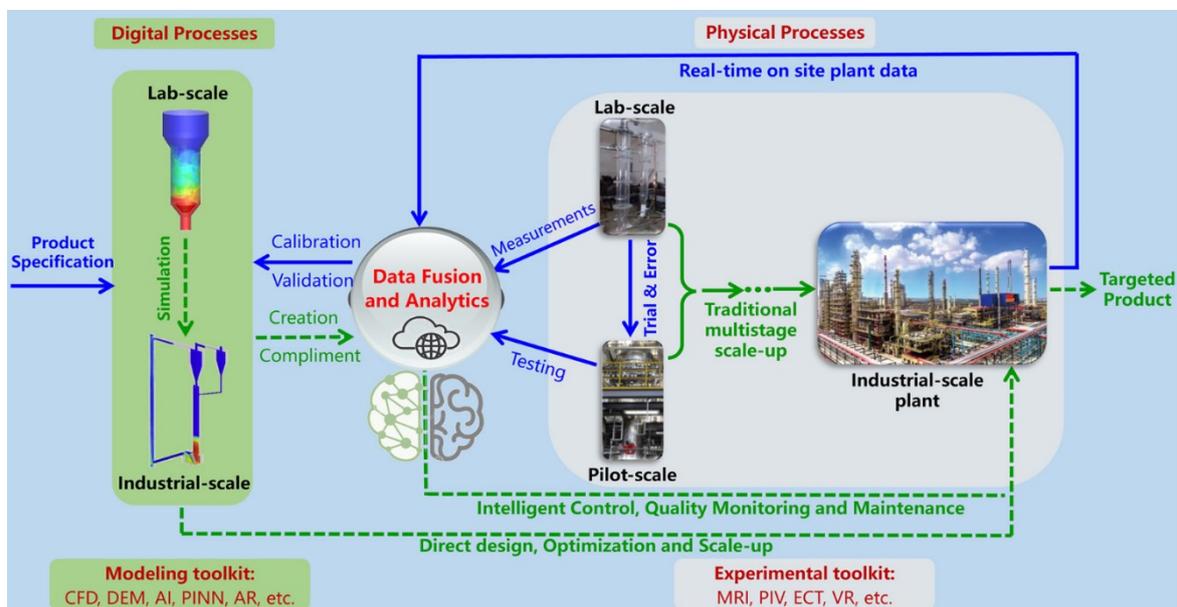


Fig. 1. A mechanistic-AI augmented digital twin platform for multiphase energy/process system engineering.

关键词: 气固反应器; 多尺度智能计算与优化; 介科学; 计算流体力学; 机器学习

参考文献

- [1] L.T. Zhu, E. Kenig, A study of methanol-to-olefins packed bed reactor performance using particle-resolved CFD and machine learning. *AIChE J.*, 2024, DOI: 10.1002/aic.18520.
- [2] L.T. Zhu, A. Wachs, Interpolation of probability-driven model to predict hydrodynamic forces and torques in particle-laden flows. *AIChE J.*, 2023, 69(11), e18209.
- [3] L.T. Zhu, X.Z. Chen, B. Ouyang, W.C. Yan, H. Lei, Z. Chen, Z.H. Luo, Review of machine learning for hydrodynamics, transport and reactions in multiphase flows and reactors. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2022, 61(28), 9901-9949.
- [4] L.T. Zhu, B. Ouyang, H. Lei, Z.H. Luo, Conventional and data-driven modeling of mesoscale drag, heat transfer and reaction rate in gas-particle flows. *AIChE J.*, 2021, e17299.
- [5] L.T. Zhu, J.X. Tang, Z.H. Luo, Machine learning to assist filtered two-fluid model development for dense gas-particle flows. *AIChE J.*, 2020, 66(6), e16973.

报告人/墙报展示人简介:

朱礼涛，本、硕、博分别毕业于大连理工及上海交大（导师：罗正鸿教授），博士后分别在上海交大、德国帕德博恩大学、英国帝国理工学院开展合作研究。围绕反应器关键装备技术前沿，主要从事多相反应器工程（反应器设计与放大）、多尺度智能计算与优化（计算流体力学、介科学、机器学习、多目标优化）、多相流传递与反应过程强化、智慧能源化工（数智化、语言模型；过程设计与综合）等。迄今以第一/通讯身份在 *AIChE J*、*Chem Eng Sci* 等国内外化工与多相流领域主流期刊发表学术论文 30 余篇（高被引论文 2 篇）。曾入选国家博新计划、德国洪堡学者、中国化工学会科学技术奖（基础研究类）一等奖（R2）、中国颗粒学会优博士学位论文奖、京博优秀博士奖铜奖、CPCIF- Clariant 可持续发展青年创新奖、加拿大班廷学者等。

附：报告人/墙报展示人非学生

人工智能辅助气体泄漏溯源研究

史天乐^{1,2}, 李飞^{2,3,*}, 王维^{2,3}

¹ 中国石油大学(北京)化学工程与环境学院, 北京, 102249

² 中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京, 100190

³ 中国科学院大学化工学院, 北京, 100049

*Email: lifei@ipe.ac.cn

摘要正文: 气体溯源机器人和溯源算法的结合是对气体泄漏事故准确溯源的重要方法之一[1], 但此方法存在溯源时间较长的局限, 而人工神经网络(ANN)与算法相结合能克服这一问题, 实现准确快速溯源[2]。本研究发展了一种基于ANN的溯源方法: 首先提出针对典型化工园区的气体泄漏事故溯源方案, 在此基础上应用高斯烟羽模型和CFD模拟分别构建了两种不同场景的气体泄漏扩散数据集, 构建适用于不同气体泄漏事故的ANN溯源模型, 结合数据集对溯源模型进行训练和优化。结果表明: ANN溯源模型成功实现了对气体泄漏源的准确预测, 将溯源模型的预测点与真实泄漏点的距离控制在20 m内, 其准确率到达84%以上; 在输入一组监测点浓度数据后, ANN溯源模型可在0.001 s内预测出泄漏源位置, 溯源速度显著高于当前机器人溯源方法。

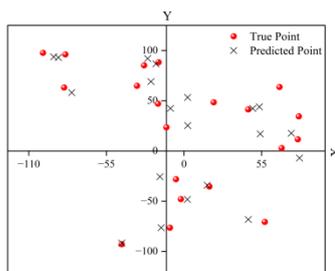


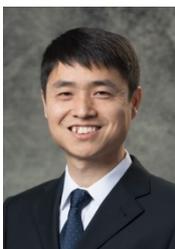
Fig. 1 Comparison between the predict source locations and the true locations of 20 gas leakage accidents

关键词: 人工神经网络; 气体泄漏溯源; 溯源方法; 高斯烟羽模型; 计算流体力学

参考文献

- [1] 李宏宇. 基于移动机器人的气体泄漏溯源应用研究[D]. 北京化工大学, 2018.
- [2] H. Kim, M. Park, C. Kim, et al. Source localization for hazardous material release in an outdoor chemical plant via a combination of LSTM-RNN and CFD simulation. *Computers & Chemical Engineering* 2019, 125: 476-89.

报告人简介:



李飞, 中国科学院过程工程研究所, 副研究员。

研究领域为多相流动的粗粒化模型、耦合 AI 的多尺度模拟方法及其在煤清洁利用中的应用。

附: 报告人非学生

微型缠绕丝强化环隙式微通道液-液传质性能研究

安敏², 王承祥¹, 李文鹏^{1,*}

¹ 郑州大学化工学院, 河南 郑州, 450001

² 郑州大学国家超级计算郑州中心, 河南 郑州, 450001

*Email: liwenpeng@zzu.edu.cn

摘要正文: 孔阵列套管式微通道 (pore-array enhanced tube-in-tube microchannel, PA-TMC), 不仅具有微通道反应器的传质系数高, 安全可控等常规优点之外, 还同时具备低压降和大通量的特点, 是一种很有前景的工业应用反应器。然而, 大部分的传质发生在上游的孔阵列空间区域, 而下游环隙空间对传质的贡献十分有限。因此, 在这项工作中, 将螺旋式微型缠绕丝以粘附在内管外表面的方式引入了环隙空间。通过实验和 VOF 方法的结合, 系统地研究了具有不同结构缠绕丝的 PA-TMC 的流动和传质特性。传质性能与螺旋线直径和数量成正比相关, 与缠绕丝螺距和两根缠绕丝组合中直径差成负相关。体积传质系数最高增加了 40%, 传质效率最大提升了 83.4%。模拟结果表明, 缠绕丝在环隙空间内带来了新的相混合区域, 因此增加了比表面积; 另一方面, 缠绕丝改变了流体流动轨迹并改变了湍流耗散率分布规律。以一个同时考虑压降和传质性能的参数作为综合指标, 提出了能源利用效率最高的缠绕丝结构。该研究可以加深对微通道内流动和传质行为的理解, 以及为微通道反应器的过程强化提供实际经验。

关键词: 微反应器; 缠绕丝; VOF; 传质; 优化

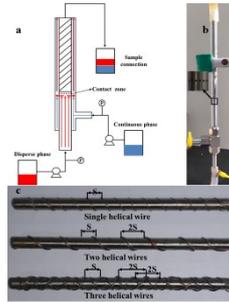


Fig.1(a) Flow diagram of the experiments; (b) A photo of the microchannel reactor with amplifying holes; (c) The structure and size of three typical helical wires

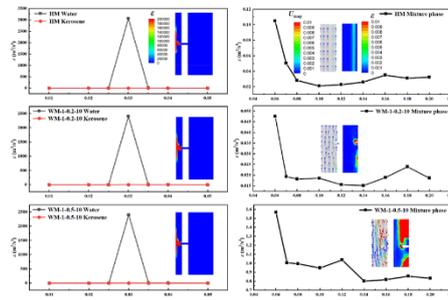


Fig.2 Axial distribution of simulated turbulent dissipation rate and corresponding contours for microchannels with helical wires of different diameter

参考文献

- [1] W.P. Li, F.S. Xia, S.C. Zhao, M.Q. Zhang, W. Li, J.L. Zhang, Characterization of liquid-liquid mass transfer performance in a novel pore-array intensified tube-in-tube microchannel, *AICHE Journal* 66 (4) (2020) e16893. <https://doi.org/10.1002/aic.16893>.
- [2] Q. Li, P. Angeli, Experimental and numerical hydrodynamic studies of ionic liquid-aqueous plug flow in small channels, *Chemical Engineering Journal* 328 (2017) 717-736. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.07.037>.

报告人/墙报展示人简介:



安敏, 女, 1990 年生, 硕士生导师。2021 年 6 月毕业于中国科学院过程工程研究所。先后参与和主持了多项国家级项目, 作为核心骨干协助多家企业单位完成产品设计优化。河南省通信学会、颗粒学会、化学工程学会等会员, 国内外期刊 (POWDER TECHNOLOGY, CIESC, 化工进展等) 审稿专家。发表高水平论文十余篇, 软著一项, 专著一本。讲授本科生课程: 《离散数学》、《多尺度仿真导论》。

主要研究方向: 面向多尺度模拟的高性能计算系统, 多尺度模拟方法与算法, 人工智能。

科研项目:

1. 国家自然科学基金青年基金项目: 气液固浆态床中颗粒-湍流涡-气泡多尺度耦合机制研究 (项目编号: 22208320)。项目时间: 2023.01-2025.12.
2. 河南中烟工业有限责任公司科技项目: 基于计算流体力学的卷烟滤嘴气流场研究 (项目编号: AW2023007)。项目时间: 2023.10-2025.10.

代表性论文:

1. An M*, Gao J, Wang T, Li X*. Particle effects on the hydrodynamics in slurry bubble column reactors: A review from multiscale mechanisms. *Particuology*, 2024, 91: 176-189..
2. An M, Guan X*, Yang N*. Modeling and optimization of flow distribution in multistage pipe distributors. *AICHE Journal*, 2021, e17462.
3. An M, Guan X, Yang N*. Modeling the effects of solid particles in CFD-PBM simulation of slurry bubble columns. *Chemical Engineering Science*, 2020, 223.
4. An M, Guan X, Yang N*, Bu Y, Xu M, Men Z. Effects of internals on fluid dynamics and reactions in pilot-scale slurry bubble column reactors: A CFD study for Fischer-Tropsch synthesis. *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 2018, 132: 194-207.
5. An M, Guan X, Yang N*, Bu Y, Men Z. Research progress on pipe-type gas distributors in large-scale reactors. *Journal of China Coal Society*, 2020, 45(S2): 1012-1021.

联系方式: anmin@zzu.edu.cn, AM_202109(微信)。

附: 报告人非学生

稀疏回归方法挖掘均匀冷却颗粒流系统流动控制方程

赵碧丹^{1,*}, 王军武¹

¹中国石油大学（北京）机械与储运工程学院

*Email: bdzhao@cup.edu.cn

摘要正文：随着大数据时代的来临及高精度离散模拟方法迅速发展，涌现出海量的高质量数据，如何从中学习出准确的物理规律仍是一个非常具有挑战意义的问题。因此，本文尝试利用稀疏回归方法，从离散微元法产生的数据样本中学习出均匀冷却颗粒流系统的流动控制方程。在多种操作条件和颗粒物性的工况下，该方法均能从DEM数据中挖掘得到准确的控制方程形式及合理的能量耗散源项。本工作初步证明了可利用纯数据驱动方法，从底层高精度数据中学习出颗粒流系统的宏观控制方程及核心本构关系。

关键词：颗粒流，控制方程，稀疏回归方法，离散微元法

深度学习在结晶过程中的多尺度应用

王靖涛*

化工学院, 天津大学, 天津, 中国

Email: wjingtao928@tju.edu.cn

摘要正文: 晶体广泛存在于医药、食品、化工等高附加值产品中, 而结晶过程是晶体生产的关键操作之一。在工业结晶过程中, 涉及到从分子、晶体颗粒、设备到智能工厂尺度等多尺度的研究。在分子与晶体尺度, 我们以分子描述符和分子图为输入, 提出了人工神经网络(ANN)和消息传递神经网络(MPNN)两种共晶熔化温度预测模型; 并利用机器学习预测了类黄酮物质的共晶形成。在颗粒尺度, 利用人工智能图片识别技术, 可以对晶体、聚集体、气泡等颗粒物进行在线识别, 辅助结晶过程监控。在设备尺度, 由于结晶搅拌釜内的流体流动对釜内混合效果起到了至关重要的作用, 我们将计算流体力学与深度学习方法结合, 提出了两种三维流场重构的新方法, 三维卷积自编码器和三维长短期记忆网络, 均有效地预测了搅拌釜中流场的速度和压力。此外, 在系统尺度上, 针对间歇或半间歇结晶过程, 我们利用深度学习的分类识别优势, 开发 DTW-CNN 与 MPR-CNN 算法, 很好地识别诊断了半间歇结晶过程中发生的不同故障与缺陷。

关键词: 深度学习, 结晶过程, 共晶预测, 流场重构, 故障诊断

参考文献

- [1] Rao Silin, Wang Jingtao, Compensation of accuracy by increased data “thickness” for high timeliness in fault diagnosis of chemical process, *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 152:105178, (2023).
- [2] Guo Pandeng, Rao Silin, Hao Lin, Wang Jingtao, Fault diagnosis of a semi-batch crystallization process through deep learning method, *Computers and Chemical Engineering*, 164:107807, (2022).
- [3] Gao Feng, Zhang Zhuang, Jia Chenyang, Zhu Yin, Zhou Chunli, Wang Jingtao, Simulation and Prediction of 3-dimensional Rotating Flows Based on Convolutional Neural Networks, *Physics of Fluids*, 34:095116, (2022).
- [4] Yue Hong, Wang Jingtao, Lu Meijin, Neural network prediction model of cocrystal melting temperature based on molecular descriptors and graphs, *Crystal Growth & Design*, 23, 2540–2549, (2023).

第 4 分会场

人工智能赋能的能源化工范式变革

1. 主题报告

基于“智能化工大模型”的中国甲醇价格分析与预测

王文洋^{1,2}, 罗玉平¹, 刘洁¹, 周吉彬², 叶茂^{2,*}, 刘中民²

¹大连海事大学航运经济与管理学院, 辽宁 大连 116023

²中国科学院大连化学物理研究所, 辽宁 大连 116023

*Email: maoye@dicp.ac.cn

摘要正文: 甲醇作为一种多用途化工产品和低碳清洁燃料, 其价格波动对全球化工产业链和能源市场具有重要影响, 现有的时间序列预测方法在捕捉甲醇价格的非平稳性和高波动性特征方面存在局限。受Transformer在自然语言处理和长序列任务成功应用的启发, 本文首先全面整合与甲醇市场相关联的27个领域的290余万条时间序列数据, 基于国内首个“智能化工大模型(CEGPT)”, 面向中国甲醇价格, 迁移构建首个生成式预训练时间序列预测模型——CEGPT-PF-M。其次, 本文应用最大互信息系数算法, 从非公开商业数据库中筛选出8100条与中国甲醇价格高度相关的指标数据, 构建私有数据库, 并基于此数据库对CEGPT-PF-M进行微调, 以实现最佳预测效果。最后, 在影响因素分析方面, 本文基于私有数据库构建影响因素指标体系, 从宏观和微观层面分析外生变量对中国甲醇价格的影响程度。实证结果表明, CEGPT-PF-M模型在中国甲醇价格预测任务中的准确性、解释性和效率性, 均显著优于现有模型。本文的研究结论为甲醇生产商、煤炭供应商和政策制定者提供有效参考, 同时也为化工产品价格研究提供新视角和新方法。

关键词: 甲醇价格预测; Transformer架构; 大语言模型; 迁移训练

参考文献

- [1] BROWN, T., MANN, B., RYDER, N., SUBBIAH, M., KAPLAN J. D., DHARIWAL, P., ... & NEELAKANTAN, A. (2020). Language models are few-shot learners. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 33, 1877-1901.
- [2] VASWANI, A., SHAZEER, N., PARMAR, N., USZKOREIT, J., JONES, L., GOMEZ, A. N., ... & POLOSUKHIN, I. (2017). Attention is all you need. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 30.
- [3] DEVLIN, J., CHANG, M. W., LEE, K., & TOUTANOVA, K. (2018). Bert: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding. *arXiv preprint arXiv:1810.04805*.
- [4] KUNZ, M., BIRR, S., RASLAN, M., MA, L., & JANUSCHOWSKI, T. (2023). Deep learning based forecasting: a case study from the online fashion industry. In *Forecasting with Artificial Intelligence: Theory and Applications* (pp. 279-311). Cham: Springer Nature Switzerland.
- [5] LI, C., NEGNEVITSKY, M., WANG, X., YUE, W. L., & ZOU, X. (2019). Multi-criteria analysis of policies for implementing clean energy vehicles in China. *Energy Policy*, 129, 826-840.
- [6] WANG, X., & DEMIREL, Y. (2018). Feasibility of power and methanol production by an entrained-flow coal gasification system. *Energy & Fuels*, 32(7), 7595-7610.
- [7] CHEN, Z., SHEN, Q., SUN, N., & WEI, W. (2019). Life cycle assessment of typical methanol production routes: The environmental impacts analysis and power optimization. *Journal of Cleaner Production*, 220, 408-416.
- [8] NYÁRI, J., MAGDELDIN, M., LARMI, M., JÄRVINEN, M., & SANTASALO-AARNIO, A. (2020). Techno-economic barriers of an industrial-scale methanol CCU-plant. *Journal of CO2 Utilization*, 39, 101166.

- [9] SU, L.W., LI, X.R., SUN, Z.Y., 2013. The consumption, production and transportation of methanol in China: a review. *Energy Policy* 63, 130-138.
- [10] China Industrial Information Network, 2018. Analysis of the Development Status and Price Trend of China's Methanol Industry in 2017. <http://www.chyxx.com/industry/201805/640922.html>. (Accessed 8 October 2018).
- [11] AL-SHARRAH, G.K., ALATIQUI, I. and ELKAMEL, A., 2003, Modeling and identification of economic disturbances in the planning of the petrochemical industry, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 42(20): 4678-4688.
- [12] 原野. 2009 年甲醇市场分析及 2010 年预测[J]. *化工管理*, 2010 (02):56-58.
- [13] 殷红,张霞,王长波.基于组合模型的大宗商品价格预测与可视分析——以甲醇价格为例[J].*东华大学学报(自然科学版)*,2017,43(04):541-546+551.
- [14] NOWNEOW, A., RUNGREUNGANUN, V. Poly vinyl chloride pellet price forecasting using ARIMA model[J]. *International Journal of Mechanical Engineering and Technology*, 2018, 8(13): 224-232.
- [15] 赵鲁涛, 郑志益, 邢悦悦,等. 2021 年国际原油价格分析与趋势预测[J]. *北京理工大学学报(社会科学版)*, 2021, 23(02):25-29.
- [16] 张金岱. 记忆性特征驱动的成品油价格预测研究[J]. *系统科学与数学*, 2022, 42(05):1300-1313.
- [17] 李慧, 李威龙, 胡一鸣,等. 2024 年成品油价格分析与趋势预测[J]. *北京理工大学学报(社会科学版)*, 2024, 26(02):59-67.
- [18] BRANCH, A., & STOPFORD, M. (2013). *Maritime Economics*. Routledge.
- [19] CHOUDHURY, S., GHOSH, S., BHATTACHARYA, A., FERNANDES, K. J., & TIWARI, M. K. (2014). A real time clustering and SVM based price-volatility prediction for optimal trading strategy. *Neurocomputing*, 131, 419-426.
- [20] NIU, H., XU, K., & WANG, W. (2020). A hybrid stock price index forecasting model based on variational mode decomposition and LSTM network. *Applied Intelligence*, 50, 4296-4309.
- [21] SAUD, A. S., & SHAKYA, S. (2020). Analysis of look back period for stock price prediction with RNN variants: a case study on banking sector of NBPSE. *Procedia Computer Science*, 167, 788-798.
- [22] REZAEI, H., FAALJOU, H., & MANSOURFAR, G. (2021). Stock price prediction using deep learning and frequency decomposition. *Expert Systems with Applications*, 169, 114332.
- [23] ZHANG, X., XUE, T., STANLEY, H. E. Comparison of econometric models and artificial neural networks algorithms for the prediction of baltic dry index. *IEEE Access* 2018;7:1647-1657.
- [24] SAEED, N., NGUYEN, S., CULLINANE, K., GEKARA, V., & CHHETRI, P. (2023). Forecasting container freight rates using the Prophet forecasting method. *Transport Policy*, 133, 86-107.
- [25] RESHEF, D. N., RESHEF, Y. A., FINUCANE, H. K., GROSSMAN, S. R., MCVEAN, G., TURNBAUGH, P. J., ... & SABETI, P. C. (2011). Detecting novel associations in large data sets. *Science*, 334(6062), 1518-1524.
- [26] LUNDBERG, S. M., & LEE, S. I. (2017). A unified approach to interpreting model predictions. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 30.
- [27] 孙善辉, 李鸿, 张祖峰. 相空间重构和参数统一求解的石油价格预测[J]. *计算机工程与应用*, 2013, 49(23):247-251.
- [28] 张学龙, 王云峰, 谢廷宇. 灰色预测模型在石油化工原料价格预测中的应用[J]. *数学的实践与认识*, 2014, 44(16):31-38.
- [29] 董振宇, 冯恩民, 尹洪超,等. 国际原油价格预测的双层随机整数规划模型、算法及应用[J]. *运筹学学报*, 2015, 19(03):18-25.
- [30] JHA, N., TANNERU, H. K., PALLA, S., & MAFAT, I. H. (2024). Multivariate analysis and forecasting of the crude oil prices: Part I—Classical machine learning approaches. *Energy*, 296, 131185.
- [31] LIU, L., ZHOU, S., JIE, Q., DU, P., XU, Y., & WANG, J. (2024). A robust time-varying weight combined model for crude oil price forecasting. *Energy*, 299, 131352.
- [32] LI, J., HONG, Z., ZHANG, C., WU, J., & YU, C. (2024). A novel hybrid model for crude oil price forecasting based on MEEMD and Mix-KELM. *Expert Systems with Applications*, 246, 123104.
- [33] 吴东武, 朱帮助. 基于 HAR-RV-CJ 模型的天然气价格预测[J]. *统计与决策*, 2017, (23):83-87.
- [34] 王建良, 雷昌然. 基于数据挖掘技术的天然气价格预测方法研究[J]. *中国矿业*, 2020, 29(02):52-58.

- [35] 裴莹,李天祥, 王慶清,等. 基于新闻的国际天然气价格趋势预测方法[J]. 计算机科学, 2021, 48(S1):235-239.
- [36] 周游, 张佳佳, 张良恺,等. 2024 年国际天然气市场分析与趋势预测[J]. 北京理工大学学报(社会科学版), 2024, 26(02):76-83.
- [37] TIWARI, A. K., SHARMA, G. D., RAO, A., HOSSAIN, M. R., & DEV, D. (2024). Unraveling the crystal ball: machine learning models for crude oil and natural gas volatility forecasting. *Energy Economics*, 107608.
- [38] 李亚鹏, 韩旭, 于旭光,等. 模型和数据混合驱动的双边协商电力市场合约价格预测方法[J]. 电力系统自动化, 2022, 46(18):179-189.
- [39] LOIZIDIS, S., KYPRIANOU, A., & GEORGHIU, G. E. (2024). Electricity market price forecasting using ELM and Bootstrap analysis: A case study of the German and Finnish Day-Ahead markets. *Applied Energy*, 363, 123058.
- [40] MASIH, A. M. M., ALBINALI, K., & DEMELLO, L. (2010). Price dynamics of natural gas and the regional methanol markets. *Energy Policy*, 38(3), 1372-1378.
- [41] DELAVARI, M., ALIKHANI, N. G., & NADERI, E. Oil and Methanol Price Volatility[J]. *Australian Journal of Business and Management Research*, 2013, 3(08): 1-10.
- [42] ZHANG, X., YIN, H., WANG, C., et al. Forecast the price of chemical products with multivariate data[C]//2015 International Conference on Behavioral, Economic and Socio-cultural Computing. IEEE, 2015: 76-82.
- [43] THÖMMES, M., & WINKER, P. Multivariate Modelling of Cross-Commodity Price Relations Along the Petrochemical Value Chain[M]//Algorithms from and for Nature and Life: Classification and Data Analysis. Cham: Springer International Publishing, 2013: 427-435.
- [44] GHANAVIEH, A. E. (2019). Time series forecasting of styrene price using a hybrid ARIMA and neural network model. *Independent Journal of Management & Production*, 10(3), 915-933.
- [45] LU, Y., TENG, Y., ZHANG, Q., et al. Prediction Model for the Chemical Futures Price Using Improved Genetic Algorithm Based Long Short-Term Memory[J]. *Processes*, 2023, 11(1): 238.
- [46] 季晨洋, 林杰. 基于随机森林方法的甲醇期货价格预测与交易策略研究[J]. 上海管理科学, 2023, 45(01):113-118.
- [47] POVEY, D., HADIAN, H., GHAREMANI, P., LI, K., & KHUDANPUR, S. (2018). A time-restricted self-attention layer for ASR. In 2018 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP) (pp. 5874-5878). IEEE.
- [48] PARMAR, N., VASWANI, A., USZKOREIT, J., KAISER, Ł., SHAZEER, N., KU, A., & TRAN, D. (2018). Image transformer. In International Conference on Machine Learning (pp. 4055-4064). PMLR.
- [49] KIM, J., OBREGON, J., PARK, H., & JUNG, J. Y. (2024). Multi-step photovoltaic power forecasting using transformer and recurrent neural networks. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 200, 114479.
- [50] WANG, X., & MA, W. (2024). A hybrid deep learning model with an optimal strategy based on improved VMD and transformer for short-term photovoltaic power forecasting. *Energy*, 295, 131071.
- [51] MO, S., WANG, H., LI, B., XUE, Z., FAN, S., & LIU, X. (2024). Powerformer: A temporal-based transformer model for wind power forecasting. *Energy Reports*, 11, 736-744.
- [52] 牛昊天, 林宇轩, 蔡念,等.CNN-Transformer 交互模型预测 IgA 肾病病理分级[J/OL]. 计算机工程与应用, 2024, 1-11.
- [53] LUO, Q., HE, S., HAN, X., WANG, Y., & LI, H. (2024). LSTTN: A Long-Short Term Transformer-based spatiotemporal neural network for traffic flow forecasting. *Knowledge-Based Systems*, 293, 111637.
- [54] NGUYEN D, FABLET R. TraISformer-A generative transformer for AIS trajectory prediction. arXiv e-prints. 2021 :arXiv-2109.
- [55] 洗浩然, 江昊, 廖娟,等. 基于 Transformer 的出租车轨迹预测方法研究[J/OL]. 武汉大学学报(工学版):1-12, 2024.
- [56] GUSTAVSSON, M., KÄLL, S., SVEDBERG, P., INDA-DIAZ, J. S., MOLANDER, S., CORIA, J., ... & KRISTIANSOON, E. (2024). Transformers enable accurate prediction of acute and chronic chemical toxicity in aquatic organisms. *Science Advances*, 10(10), eadk6669.
- [57] 刘敏毅, 崔博文, 王宇坤,等. 基于注意力机制的 Transformer 模型预测 PM_{2.5}浓度[J/OL]. 环境科学, 2024, 1-15.
- [58] SUN, W., CHANG, L. C., & CHANG, F. J. (2024). Deep dive into predictive excellence: Transformer's impact on groundwater level prediction. *Journal of Hydrology*, 131250.

- [59] FANG, J., YANG, L., WEN, X., YU, H., LI, W., ADAMOWSKI, J. F., & BARZEGAR, R. (2024). Ensemble learning using multivariate variational mode decomposition based on the transformer for multistep-ahead streamflow forecasting. *Journal of Hydrology*, 131275.
- [60] MISHRA, A. K., RENGANATHAN, J., & GUPTA, A. (2024). Volatility forecasting and assessing risk of financial markets using multi-transformer neural network based architecture. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 133, 108223.
- [61] 翁鸣昊, 项兴华, 陈俊涛,等. 基于 LSTM 与 Transformer 的大坝变形预测研究[J]. *中国农村水利水电*, 2024(04):250-257.
- [62] ZENG, H., ZHANG, H., GUO, J., REN, B., CUI, L., & WU, J. (2024). A novel hybrid STL-transformer-ARIMA architecture for aviation failure events prediction. *Reliability Engineering & System Safety*, 246, 110089.
- [63] 李明阳, 鲁之君, 曹东晶,等. 一种基于 Transformer 编码器与 LSTM 的飞机轨迹预测方法[J]. *航天返回与遥感*, 2024, 45(02):163-176.
- [64] 翟文鹏, 宋一峤, 张兆宁. 基于 Transformer-GRU 网络的 4D 航迹预测[J]. *重庆交通大学学报(自然科学版)*, 2024, 43(06):94-101.
- [65] WANG, H., YUAN, Z., CHEN, Y., et al. An industrial missing values processing method based on generating model[J]. *Computer Networks*, 2019, 158: 61-68.
- [66] DEMIRHAN, H., & RENWICK, Z. Missing value imputation for short to mid-term horizontal solar irradiance data[J]. *Applied Energy*, 2018, 225: 998-1012.
- [67] DEKKING, F. M., et al. *A Modern Introduction to Probability and Statistics: Understanding why and how*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [68] LI, S., JIN, X., XUAN, Y., ZHOU, X., CHEN, W., WANG, Y.X. and YAN, X., 2019. Enhancing the locality and breaking the memory bottleneck of transformer on time series forecasting. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 32.
- [69] WU H, XU J, WANG J, LONG M. Autoformer: Decomposition transformers with auto-correlation for long-term series forecasting. *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2021 6;34:22419-30.
- [70] ZHOU H, ZHANG S, PENG J, ZHANG S, LI J, XIONG H, ZHANG W. Informer: Beyond efficient transformer for long sequence time-series forecasting. *InProceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence 2021 Vol. 35, No. 12*, pp. 11106-11115.
- [71] NIE X, ZHOU X, LI Z, WANG L, LIN X, TONG T. Logtrans: Providing efficient local-global fusion with transformer and cnn parallel network for biomedical image segmentation. *In2022 IEEE 24th Int Conf on High Performance Computing & Communications; 8th Int Conf on Data Science & Systems; 20th Int Conf on Smart City; 8th Int Conf on Dependability in Sensor, Cloud & Big Data Systems & Application (HPCC/DSS/SmartCity/DependSys) 2022 pp. 769-776.*

报告人/墙报展示人简介:

王文洋, 副教授, 邮箱: wangwenyang@dlnu.edu.cn

通信地址: 大连市凌海路 1 号 大连海事大学 远望楼 304

研究领域/方向: 统计分析, 贝叶斯分析, 机器学习与人工智能



融合密度泛函理论计算和机器学习的氧解耦载氧体高通量筛选与性能预测

厉志鹏¹, 江宇泷^{1,2}, 汤红健^{1,*}, 段伦博^{1,*}

¹东南大学 能源与环境学院, 江苏 南京, 210096

²东南大学-蒙纳士大学苏州联合研究生院, 江苏 苏州, 215123

*Email: tanghongjian@seu.edu.cn, duanlunbo@seu.edu.cn

摘要正文: 化学链氧解耦 (Chemical Looping with Oxygen Uncoupling, CLOU) 燃烧技术可实现燃烧过程中二氧化碳的原位分离与富集, 促进煤炭的高效低碳利用。然而, 现阶段金属氧化物材料的氧解耦潜力尚未得到充分挖掘。针对目前金属氧化物材料氧解耦性能辨识效率低、发现速度慢的问题, 本文提出了一种基于机器学习的高效性能辨识策略用于金属氧化物材料的氧解耦潜力预测与筛选。首先, 基于密度泛函理论 (Density Functional Theory, DFT) 计算构建了超过 300 组晶体、1000 组氧空位形成能的氧解耦载氧体数据集, 载氧体晶体结构涵盖 7 大晶系, 涉及不同价态的 37 种金属元素, 并囊括了尖晶石、钙钛矿等典型的多元金属氧化物。其次, 借助 MechElastic 软件包[1, 2]、Lindemann 公式[3]分析了金属氧化物的熔点、机械强度信息, 用于辨别 CLOU 燃烧过程下氧解耦载氧体的抗烧结抗失活特性。然后, 基于晶体图卷积神经网络 (Crystal Graph Convolutional Neural Network, CGCNN) 模型[4], 以晶体图作为 CGCNN 模型输入, 以氧空位形成能、熔点等金属氧化物性能相关数据作为模型输出, 构建了载氧体结构与性能之间的映射关系。结果表明, 在 75% 的训练数据比例下, CGCNN 模型对于晶体平均氧空位形成能的回归系数 R^2 在训练集上达到了 0.985, 在测试集上达到了 0.718, 使用于 CLOU 过程的高活性载氧体的准确辨识与高通量筛选; 对于晶体熔点、体积模量、剪切模量的回归系数 R^2 在训练集上分别达到了 0.992、0.949、0.978, 在测试集上达到了 0.747、0.752、0.849, 可进一步结合氧解耦性能信息针对于特定应用场景下的晶体强度要求进行预测筛选。本研究融合 DFT 计算与机器学习, 实现了金属氧化物材料氧解耦性能的高通量辨识与性能预测, 为 CLOU 燃烧过程下高性能氧解耦载氧体的快速发现、筛选提供了新策略。

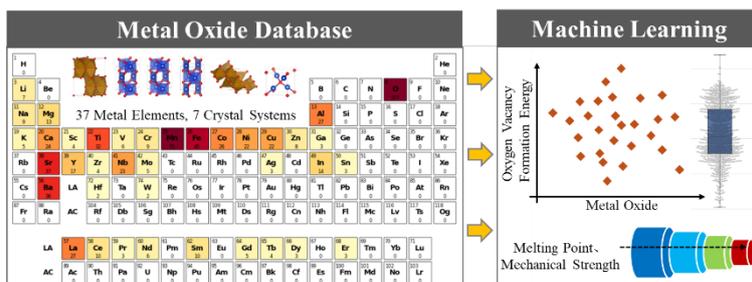


Fig. 1 Graphical Abstract

关键词: 机器学习; 数据库; 图卷积神经网络; 化学链燃烧; 氧解耦载氧体

参考文献

- [1] S. Singh, I. Valencia-Jaime, O. Pavlic, and A. Romero. Elastic, mechanical, and thermodynamic properties of Bi-Sb binaries: Effect of spin-orbit coupling. *PHYS REV B* 2018, 97, 054108.
- [2] S. Singh, L. Lang, V. Dovale-Farelo, U. Herath, P. Tavazde, F. Coudert, A. Romero. MechElastic: A Python Library for Analysis of Mechanical and Elastic Properties of Bulk and 2D Materials. *COMPUT PHYS COMMUN* 2021, 267, 108068.
- [3] F.A. Lindemann. Über die berechnung molekularer eigenfrequenzen. *Phys. Z.* 1910, 609.

[4] T. Xie, J. Grossman. Crystal Graph Convolutional Neural Networks for an Accurate and Interpretable Prediction of Material Properties. *PHYS REV LETT* 2018, 120, 145301.

报告人/墙报展示人简介:

厉志鹏, 东南大学能源与环境学院博士研究生



附: 报告人是学生

基于人工神经网络优化污泥衍生燃料

甘昭旺^{1,2}, 郭强³, 丁广超^{1*}, 李松庚^{1,2*}

(1. 中国科学院过程工程研究所 介科学与工程全国重点实验室, 北京 100190; 2. 中国科学院大学 化学工程学院, 北京 100049; 3. 绿源能源环境科技集团有限公司, 辽宁营口 115000)

*Email: dingguangchao@ipe.ac.cn (G. Ding), sgli@ipe.ac.cn (S. Li)

针对不同组分原料的污泥衍生燃料燃烧特性差异大及探究最佳配比方法局限性的问题, 首先通过热重分析探究了市政污泥 (SS)、纺织污泥 (TS) 和胶粉 (RP) 的二元/三元混合燃烧性能和交互作用, 并使用 Coats-Refern 法计算混合燃料的燃烧动力学参数。对于 SS/TS 二元混合燃烧, SS:TS=7:3 着火温度 T_i 最低, SS:TS=3:7 燃尽温度 T_b 最低, 着火指数 C_i 、稳定燃烧指数 G 和综合燃烧指数 CCI 随 TS 占比增多而增加。对于 SS/RP 的二元混合燃烧, RP 占比增多, 混合燃料 T_i 增大, T_b 降低。对于 SS、TS 和 RP 的三元混合燃烧, 在挥发分燃烧阶段存在促进交互作用, 添加 TS 和 RP 不仅提升其低位发热量, 且有利于 SS 燃烧。其次在 SS \geq 50%, RP \leq 20%, 低位发热量 \geq 14.6 MJ/kg 的限定条件下, 基于混烧实验数据构建并训练人工神经网络 (ANN), 预测 CCI 达到最大时污泥衍生燃料 (SDF) 配比。最优 ANN 模型的训练、验证和测试平均 R^2 、MAE 和 RMSE 分别为 0.9981、0.8883 和 1.0938, 预测最大 CCI 的原料配比为 SS=50.1%, TS=39%, RP=10.9%, 此配比下 SDF 的 CCI 为 $1.392 \times 10^{-8} \%^2 \cdot \text{min}^{-2} \cdot \text{C}^{-3}$ 。研究结果可为污泥衍生燃料的制备及其燃烧特性提供基础指导。

关键词: 二元/三元混合燃烧; 综合燃烧指数; 动力学分析; 交互作用; 人工神经网络模型

物理信息机器学习驱动的化工数字孪生建模基础研究

何畅^{1,2}

¹中山大学化学工程与技术学院, 广东省珠海市唐家湾中山大学珠海校区, 邮编 519082

²广东省石化过程节能工程技术研究中心, 广东省广州市新港西路 135 号, 邮编 510275

*Email: hechang6@mail.sysu.edu.cn

摘要正文: 化工过程模型的主要特征是多物理场耦合, 即装置内不同的物理现象(“三传一反”, 包括质量传递、能量传递、动量传递和化学反应)间存在着相互作用和影响。例如, 非等温吸收、蒸馏、蒸发冷却等单元过程存在能量和质量传递; 膜冷凝中的液膜吸收过程存在动量和质量传递; 对流、共轭传热过程存在动量和能量传递; 催化裂化过程则耦合了能量、质量和动量传递, 以及化学反应。物理场耦合效应在化工系统的控制和优化中起着至关重要的作用。因此, 构建高保真的化工过程的机理模型, 首先需要多物理现象及其耦合效应进行准确地数学描述。基于理论模型(如质量和能量守恒方程)、机理/半机理模型(如化学反应速率方程)和经验/半经验模型(如状态方程和活度系数方程), 可以建立表征不同化工单元过程多物理场状态的机理模型。该模型主要由连续性、动量传递、传热与传质等控制方程组成, 在数学上表现为一组高度非线性的微分/偏微分代数方程组。传统上, 研究人员需要借助计算辅助设计手段, 例如: 工艺流程建模、多相流计算、反应动力学模拟等, 从而获得过程中的关键物流和物理场分布数据, 并通过部署在GPU芯片上规模化计算平台进行机器学习训练和数字孪生建模[1]。

数字孪生模型包含了大量的对应已知物理对象的机理模型。其中, “动态”是模型的关键, 这意味着所构建的模型需具备自我学习、自主调整的能力。而由于化工过程本身的高维度、强非线性等复杂特征, 导致传统流程建模和数值建模存在收敛耗时、求解滞后, 并严重依赖计算资源, 这显然不符合数字孪生的动态性要求。例如: 提升管反应器的CFD模拟通常基于分片近似进而逼近总体的计算策略, 需要将时空域离散为有限数量的、以节点连接的网格单元, 在网格节点处应用有限元法[2]、有限差分法[3]或有限体积法[4]等算法获得控制方程的近似解。这类数值模拟的精度很大程度上取决于网格的质量, 当改变研究对象的几何形状和拓扑结构时需重新进行预处理和网格重建和边界/初始条件校准, 导致计算负荷和时间非常惊人。此外, 注意到描述多化工过程多物理现象的控制方程和边界/初始条件可能并非完全确定性, 可能涉及未知参数。在需要迅速做出决策的前提下, 传统的机理建模方法不适用于化学反应器系统的实时预测、分析和设计优化工作。最后, 化工过程模拟结果的查看和分析都依赖于专业软件编译环境, 无法实现线上部署和即时分析, 且软件工具平台间缺乏数据和模块的集成接口(如Aspen Plus和GAMs), 这表明其先天也不具备“实时”和“互联”的特点。由上可见, 无论是流程建模还是数值建模, 均难以满足数字孪生模型的基本要求, 需要新的方法解决求解效率和计算能力上的不足。

针对传统机理建模存在的问题, 常见的解决方案是在确保高保真前提下, 采用数据驱动机器学习的方法降低原机理模型复杂度, 将其转化为一个数学表达形式上简化的“代理模型[5]”。例如, 在化工和材料学领域, 研究人员通常根据实验数据或模拟数据集(例如, 温度、速度、压力分布等), 先构建模型的样本空间, 通过数据拟合来建立输入—输出样本数据间的函数映射, 最终得到参数化的、可快速响应的、能预测目标物理量的代理模型。其中, 常用的拟合函数包含多项式、神经网络、克里金插值、径向基函数和高维模型表征等[6]。数据驱动建模的准确性依赖于训练数据的质量和数量。但是, 大部分化工装置(如催化裂化、加氢裂化)均在高温高压条件下操作, 其内部温度场和浓度场等关键物理信息数据难以直接测量, 或带有一定程度的噪声和偏差。这种情况下, 训练数据的低可靠性和稀疏性可能会降低代理模型的预测和泛化能力。同时, 数据驱动得到的代理模型在数学上通常表现为一组高阶多项式或深层神经网络, 这类黑箱/灰箱模型本身缺乏物理可解释性, 难以将其与数据背后蕴藏的基本物理定律关联。再者, 训练数据常常隐含部分先验和专业信息(例如: 模拟流体流动需要满足的Navier-Stokes方程组), 但这部分知识信息并未体现在经典的数据驱动机器学习算法中, 一定程度上造成宝贵的物理信息资源的浪费。综上分析, 由于在训练过程中缺乏物理定律的约束, 基于数据驱动的数字孪生模型可解释

性、鲁棒性和泛化性能较差，缺乏自我学习和自主调整的能力。

近年来，随着计算机硬件和人工智能技术的飞速发展，计算资源和可用数据呈爆炸式增长，深度学习建模技术在科学计算领域的发展也取得重大突破。研究人员聚焦可解释的人工智能技术，通过在神经网络训练过程中耦合先验知识，以改善传统纯数据驱动数字孪生建模的黑箱体质。这方面最具代表性的研究成果是物理信息机器学习[7, 8]。该方法利用神经网络的自动微分技术，将描述物理知识定律的微分/偏微分方程（如守恒方程、传递方程和动力学方程）嵌入到神经网络的损失函数中，从而将控制方程组求解问题转化为损失函数优化问题[9]。通过最小化损失函数，使训练出的深层神经网络模型能够自动满足微分方程所遵循的守恒性质，从而获得控制方程的近似解。因此，物理信息学习一方面显著提高了数据驱动建模的可解释性，同时解决了数值建模的网格依赖性和低效性，从本质上满足了数字孪生模型的动态、实时和互联的基本要求。需要指出的是，物理信息机器学习不是一种与数据驱动方法相对立的、纯物理知识驱动的方法，而可以作为数据驱动建模与机理驱动建模间的桥梁。通过耦合标签数据（包括实验数据或模拟数据）和先验知识（包括体系的控制方程ODE/PDE、边界条件-BC、初始条件-IC），物理信息学习可在三种不同情景模式下切换：①当有大量可用标签数据，但无先验知识，它可看作单纯数据驱动建模方法；②当准确获取控制方程ODE/PDE及其参数 λ ，并且边界条件BC和初始条件IC已知，它可看作类似于CFD求解器的数值模拟方法；③标签数据量不够、先验知识获取不完备，它可看到一种新型数据和机理混合驱动的建模方法。在化工过程建模任务中，最常见的建模场景是第三种模式，即模型和数据均存在缺陷，特别是对关键单元装置内部机理过程了解不充分、不彻底，同时标签数据也无法满足建模要求。物理信息学习的提出从理论上完美地适用于解决此类问题——可实现数据和物理知识的无缝集成，并可有效处理未知参数（或边界条件缺失）的不适定问题与反演问题，还能够在数据稀疏和噪声存在的条件下实现方程未知参数的准确预测和多物理场的高保真重构。

本报告将重点阐述如何基于物理信息机器学习理论和算法，将化工领域经典的机理/理论模型、经验/半经验模型以及生产数据融入到神经网络训练过程，改善传统纯数据驱动数字孪生建模的黑箱体质。同时，将研发基于参数迁移学习加速的神经网络训练框架，可集成采样密度调整、加速线性代数和GPU并行计算等加速策略，从而显著提高计算效率、缩短训练时间。最后，针对若干典型装置，基于所构建的物理神经深度学习模型，研发可在线部署的数字孪生模型软件原型。

关键词：化工过程模型；数字孪生；代理模型；物理信息机器学习；神经网络

参考文献

- [1] N. Sharma, Y.A. Liu, A hybrid science-guided machine learning approach for modeling chemical processes: A review, *AIChE Journal*, 2022, 68, e17609.
- [2] J.N. Reddy, *Introduction to the finite element method*, McGraw-Hill Education, 2019.
- [3] K. Lipnikov, G. Manzini, M. Shashkov, Mimetic finite difference method, *Journal of Computational Physics*, 2014, 257, 1163-1227.
- [4] Moukalled F, Mangani L, Darwish M, *The finite volume method*, Springer, Cham, *The finite volume method in computational fluid dynamics*, 2016.
- [5] S. Yu, Z. Zhang, C. Peng, T. Bai, Rapid analysis of packed pebble beds for thermal-hydraulic characteristics via reduced order models, *Chemical Engineering Science*, 2023, 280, 119029.
- [6] L.T. Biegler, New nonlinear programming paradigms for the future of process optimization, *AIChE Journal*, 2017, 63, 1178-1193.
- [7] M. Raissi, P. Perdikaris, G.E. Karniadakis, Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, 2019, 378, 686-707.
- [8] M. Raissi, A. Yazdani, G.E. Karniadakis, Hidden fluid mechanics: Learning velocity and pressure fields from flow visualizations, *Science*, 2020, 367, 1026-1030.
- [9] G.E. Karniadakis, I.G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, L. Yang, Physics-informed machine learning, *Nature Reviews Physics*, 2021, 3, 422-440.

报告人简介:

何畅, 中山大学副教授, 博士生导师。研究方向为化工系统工程, 致力于化工—能源—应用数学等交叉学科方向的应用基础研究。近年来, 利用机器学习、数值模拟、过程建模等方法, 围绕石化能源高效利用和过程设备节能减排问题, 进行不确定性条件下的多尺度系统集成、设计、优化与可持续性研究。截止目前, 申请人主持完成国家国防科技工业局科研项目、国家/广东省自然科学基金项目、中山大学百人计划基金, 参与包括国家重点研发计划, 广东省产学研协同创新重大专项等项目, 共计 10 余项。共发表 SCI/EI 论文 90 余篇, 其中包括化工类顶级期刊 *AIChE J.* (7) 和 *Chem. Eng. Sci.* (3), 能源环境类 *Energ. & Environ. Sci.* (1), 与他人合作主编英文专著 4 本, 化工专业教材 1 本, 获授权发明专利 10 项, 并在 2023 年获得中国化工学会基础研究成果奖二等奖。



现任 Elsevier 出版社 *Renewable Energy Fundamentals* 丛书主编, *Frontiers in Sustainability* 期刊副主编, *J Clean Prod*、*Energies*、*Processes*、*Complexity* 期刊专刊特约编辑, 工程热物理学会热力学与能源利用分会青年委员, 化工学会过程模拟及仿真专业委员会青年委员, 曾任国际学术会议 PRES 2017、2018 和 2021 分会场主席, 完成 10 多个国际和国内会议邀请报告, *Chem. Eng. Sci.* 等十种国际权威学术期刊的优秀审稿专家。

人工智能和理论计算在电化学储能中的应用

李天宇¹, 穆晨凯^{1,2}, 李先锋^{1,*}

¹中国科学院大连化学物理研究所, 辽宁省大连市沙河口区中山路 457 号, 116023

²中国科学院大学, 北京市海淀区中关村东路 80 号, 100190

*Email: litianyu@dicp.ac.cn

摘要正文: 为实现习近平总书记提出的“双碳”目标, 必须大力加快构建以新能源为主体的清洁低碳安全高效能源体系。但可再生能源发电存在不连续、不稳定和不可控的特点, 将其所发电量直接并网会影响电力系统的稳定运行, 因此需配套大规模储能技术。液流电池储能技术因使用寿命长和安全性好等优势, 在大规模固定式储能和长时储能领域应用广泛。目前, 全钒液流电池 (Vanadium Flow Battery, VFB) 技术已经进入了产业化示范阶段, 但其还存在初投成本较高的不足, 因此提高VFB电堆性能, 降低成本有助于全钒液流电池的进一步产业化。基于研究团队在VFB电堆研发过程中十几年的积累和大量的电堆数据, 提出了一种基于机器学习的VFB电堆性能和系统成本预测方法和优化策略, 即在保证较高的电压效率和电解液利用率的前提下开发高功率密度电堆[1]。针对VFB用的多孔膜结构和性能优化研究方面, 提出了一种通过机器学习筛选多孔膜溶剂处理得溶剂策略, 并通过密度泛函理论 (Density Functional Theory, DFT) 计算详细分析了溶剂与多孔膜间的相互作用机理[2]。针对液流电池新型氧化还原活性物质的开发, 提出了基于机器学习和DFT计算羰基氧化还原活性分子发开和设计流程, 从Pubchem 1.1亿个分子数据库中筛选出370多种氧化还原势大于0.8 V (vs. SHE) 和3800多种氧化还原势小于-0.5 V (vs. SHE) 的具有潜在应用价值的羰基小分子。在电解液设计方面, 通过分子动力学模拟和DFT计算结合, 揭示了金属离子在电解液中的溶剂化结构及其对电池性能的影响[3, 4]和有机液流电池容量衰减的化学反应机理[5]。

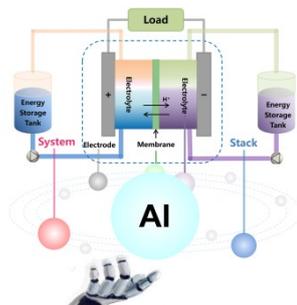


Fig. 1 AI & theoretical calculation for electrochemistry energy storage

关键词: 人工智能; 电化学储能; 液流电池

参考文献

- [1] T. Li, F. Xing, T. Liu, J. Sun, D. Shi, H. Zhang, X. Li, *Energy Environ. Sci.* **2020**, *13*, 4353-61.
- [2] T. Li, W. Lu, Z. Yuan, H. Zhang, X. Li, *J. Mater. Chem. A.* **2021**, *9*, 14545-52.
- [3] Y. Wang, T. Li, X. Yang, Q. Yin, S. Wang, H. Zhang, X. Li, X. *Adv. Energy Mater.* **2024**, *14*, 2303189.
- [4] M. Jiang, T. Li, Y. Qiu, X. Hou, H. Lin, Q. Zheng, X. Li, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 12519-12529.
- [5] W. Liu, Z. Zhao, T. Li, S. Li, H. Zhang, X. Li, *Sci. Bull.* **2021**, *66*, 457-63.

报告人简介:

李天宇，中国科学院大连化学物理研究所副研究员，2019年博士毕业于大连理工大学，2019年8月至至今在中国科学院大连化学物理研究所储能技术研究部从事人工智能和理论计算辅助电化学储能技术特别是液流电池储能技术研发的基础研究工作。在 Nat Sustain., Energy Environ. Sci., JACS, Chem. Sci., Sci. Bull. 等杂志发表 SCI 论文 40 余篇。



附：报告人非学生

智能化连续流光催化反应过程研究

温正慧¹

¹甬江实验室流动与智能化合成组, 浙江宁波, 315202

*Email: zhenghui-wen@ylab.ac.cn

摘要正文:

光催化氢原子转移 (HAT) 作为一种可用于药物C(sp³)-H键后期修饰的高效策略, 正受到学术界和业界日益增长的关注。在不同的HAT光催化剂中, 十聚钨酸四丁基铵 (TBADT) 由于其独特的选择性、稳健性和易制备性, 已经成功地实现了烷烃的烷基化、亚磺化、胺化、氟化等多种转化。尽管光催化氢原子转移的合成性能已得到充分证明, 但受限于反应过程优化复杂性、光程衰减、光催化剂成本高和低可重复性等问题, 它们在工业中的应用仍然有限。流动光催化合成因其光照强度均匀、热质传递速率高、易于放大等优点, 被视为有望解决上述难题的有效途径之一。

因此, 为应对上述难题, 我们基于自主研发的高功率流动光反应器, 系统研究了光通量对C(sp³)-H键直接胺化反应收率的作用机制, 提出了“光通量受限”的判据, 并基于该判据调控胺化反应参数获得光子利用率最大化, 实现TBADT催化C(sp³)-H键胺化反应的规模化合成[1]; 其次, 为解决光催化剂成本高的问题, 我们基于纳滤膜的选择渗透性与分子大小排斥性, 巧妙引入有机溶剂纳滤技术, 设计了流动光催化反应与在线光催化剂回收利用的集成系统, 并应用于C(sp³)-H键烷基化和胺化反应中, 在保障反应活性的前提下实现了光催化剂的多次回收利用[2]; 最后, 针对复杂光催化反应优化繁琐、重复性差、难以放大等挑战, 我们通过集成现有的硬件、自定义软件和闭环贝叶斯优化 (BO) 算法研发了多功能算法驱动的智能光催化合成平台, 实现了光催化反应的高效自优化、过程强化和放大生产[3]

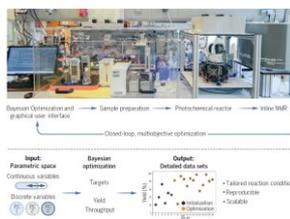


Fig. 1 RoboChem-A benchtop robotic system enabled closed-loop and multi-objective optimization of photocatalysis

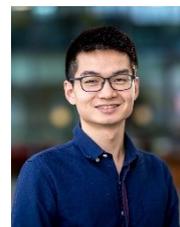
关键词: 智能化; 连续流; 光催化

参考文献

- [1] Wan T⁺, Wen Z⁺, Laudadio G, Capaldo L, Lammers R, Rincón J A, García-Losada P, Mateos C, Frederick M O, Broersma R, Noël T. Accelerated and Scalable C(sp³)-H Amination via Decatungstate Photocatalysis Using a Flow Photoreactor Equipped with High-Intensity LEDs[J]. *ACS Cent. Sci.*, 2022, 8(1): 51-56.
- [2] Wen Z⁺, Pintossi D⁺, Nuño M, Noël T. Membrane-based TBADT recovery as a strategy to increase the sustainability of continuous-flow photocatalytic HAT transformations[J]. *Nat. Commun.*, 2022, 13(1): 6147.
- [3] Slattery A⁺, Wen Z⁺, Tenblad P⁺, Sanjosé-Orduna J, Pintossi D, Den Hartog T, Noël T. Automated self-optimization, intensification, and scale-up of photocatalysis in flow[J]. *Science*, 2024, 383(6681): eadj1817.

报告人/墙报展示人简介:

甬江实验室特聘研究员, 流动与智能化合成组负责人。本科毕业于华中科技大学, 硕博先后毕业于大连化物所和阿姆斯特丹大学, 师从微化工领域先驱陈光文研究员和世界流动化学协会主席 Timothy Noël 教授。至今已在 *Science*, *Nat. Commun.*, *ACS Cen. Sci.*, *Chem. Sci.* 等期刊发表高水平文章数十篇, 研究方向包括: 自动化合成与人工智能、微反应器/流动化学、光催化有机合成等。



附: 报告人非学生

2. 特邀报告

基于深度学习的煤炭解耦层燃污染物生成反应特性研究

靳娜妮^{1,2}, 郭力^{1,2,*}, 刘新华^{1,2,*}, 胡善伟^{1,2}

¹中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京市海淀区中关村北二街 1 号, 100190

²中国科学院大学化学工程学院, 北京市石景山区玉泉路 19 号(甲), 100049

*Email: xhliu@ipe.ac.cn

摘要正文: 解耦燃烧通过将传统固体燃料燃烧方式中燃料的低温热解过程与半焦和挥发分的高温燃烧过程进行解耦, 实现了对反应过程的重构, 能够显著改善燃烧效率的同时降低污染物的排放。煤炭的解耦燃烧是指燃煤首先在热解区中的低温还原性气氛下热解, 生成的焦炭随后与还原性热解气在燃烧区中的高温氧化气氛下燃烧[1]。这样不仅可以充分利用热解气和高温半焦的还原性来抑制NO_x的生成, 还能够同时采用空气分级燃烧原理有效控制CO的排放[2]。煤炭解耦燃烧反应特性和污染物生成特性取决于复杂的热解燃烧化学反应网络与传热和传质之间的相互耦合关系, 与解耦炉宏观操作参数和几何构型参数之间密切相关。这种深层次关系虽然在数学上难以用简单的函数关系进行显式表达, 但却可以利用机器学习来进行有效的提取。鉴于各种神经网络模型已成功用于预测各种燃煤锅炉中的NO_x排放[3, 4], 本文以解耦燃煤炉为例, 结合实验与数值模拟数据, 建立并训练了预测煤炭解耦燃烧过程NO和CO排放的深度神经网络(DNN)模型和门控循环单元-深度神经网络耦合(GRU-DNN)模型。利用煤炭物性数据和解耦炉结构参数作为输入, DNN模型能够对NO和CO的排放进行同时预测, 其相对误差在±30%以内。通过结合污染物排放序列数据与DNN模型输入数据, GRU-DNN耦合模型使NO和CO排放预测的相对误差分别降至5%和10%左右。利用所建立的神经网络模型对不同煤炉组合的NO和CO排放进行预测, 可获得针对特定型煤的解耦炉优化结构参数, 实现NO和CO的最优同时减排效果。

关键词: 机器学习; 深度神经网络; 门控循环单元; 解耦层燃; 污染物排放

参考文献

- [1] J. He, W. Song, S. Gao, et al. Experimental study of the reduction mechanisms of NO emission in decoupling combustion of coal. *Fuel Processing Technology*, 2006, 87(9): 803-810.
- [2] 刘新华, 韩健, 张楠, 等. 中国分散式民用供热技术现状分析. *中国科学院院刊*, 2019, 34(4): 401-408.
- [3] H. Zhou, K. Cen, J. Fan. Modeling and optimization of the NO_x emission characteristics of a tangentially fired boiler with artificial neural networks. *Energy*, 2004, 29(1): 167-183.
- [4] J.F. Tuttle, L.D. Blackburn, K.M. Powell. On-line classification of coal combustion quality using nonlinear SVM for improved neural network NO_x emission rate prediction. *Computers & Chemical Engineering*, 2020, 141: 106990.

人工智能设计锂电池电解液

陈翔¹

¹清华大学, 北京, 100084

Email: xiangchen@mail.tsinghua.edu.cn

摘要正文: 锂电池作为先进储能技术代表之一, 在电动汽车、消费电子器件、移动通讯、无人机等领域中取得了广泛的应用, 极大地促进了当代社会智能化、便携化和多元化发展, 也是我国实现“碳中和”目标、构建可再生能源体系的关键技术之一。电解液是电池的重要组成部分之一, 发挥导通离子、绝缘电子的作用, 被形象地誉为“电池血液”, 很大程度上决定电池的实际电化学性能。探究锂电池电解液微观化学机制、理解电解液材料的工作原理和构效关系, 对构建下一代高比能电池体系具有重要的科学价值和实践意义。

本报告将围绕理解电解液溶剂化学原理和机器学习设计先进电解液研究展开。具体而言, 结合第一性原理计算和分子动力学模拟等多尺度模拟方法探究电解液溶剂化学规律, 发现离子-溶剂结构的形成是影响电解液界面稳定性的关键因素, 从而建立离子-溶剂化学模型; 发展介电常数、粘度等多种电解液物性预测方法, 可以精准预测设计电解液所需的关键物理化学性质; 集成多种物性计算方法和高通量计算, 搭建电解液大数据库, 包括20万种分子结构和20余种电解液性质; 基于所构建的电解液大数据库, 发展机器学习学习模型, 定量关联电解液分子结构与理化性质, 从而实现电解液分子的高通量筛选与反向设计, 得到了十余种新分子体系, 进一步开展实验验证。以上研究内容构建了电解液大数据库, 发展了人工智能设计先进锂电池电解液的新方法, 在上亿分子空间实现了电解液分子的快速、精准设计, 推动了下一代高比能电池的实际应用, 为实现我国“双碳”目标提供关键技术支撑。

关键词: 锂电池; 电解液; 多尺度模拟; 高通量计算; 人工智能

参考文献

- [1] Yao, N.; Chen, X.;* Fu, Z.-H.; Zhang, Q.* Chem. Rev. 2022, 122, 10970–11021.
- [2] Chen, X.; Zhang, Q.* Acc. Chem. Res. 2020, 53, 1992–2002.
- [3] Chen, X.; Shen, X.; Li, B. et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 734–737
- [4] Chen, X.; Li, H.-R.; Shen, X.; Zhang, Q. Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 16643–16647
- [5] Chen, X.; Shen, X.; Hou, T.-Z.; Zhang, R.; Peng, H.-J.; Zhang, Q. Chem 2020, 6, 2242–2256.
- [6] Chen, X.; Liu, X.; Shen, X.; Zhang, Q. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 24354–24366.
- [7] Yao, N.; Chen, X.;* Shen, X. et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 21473–21478.
- [8] Gao, Y.-C.; Yao, N.; Chen, X.* et al. J. Am. Chem. Soc. 2023, DOI: 10.1021/jacs.1023c08346.
- [9] Yao, N.; Sun, S.-Y.; Chen, X.* et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202210859.

报告人简介:



陈翔, 清华大学副研究员。主要从事锂电池人工智能, 注重多尺度模拟计算与机器学习的结合, 形成了系列高水平研究成果。以(共同)第一作者和共同通讯作者身份在 Chem. Rev., Sci. Adv., Chem, Angew. Chem., J. Am. Chem. Soc.等期刊发表SCI论文40余篇, H因子67, 被引1.7万余次; 入选2020–2023年科睿唯安全球高被引学者、2023《麻省理工科技评论》TR35 亚太区; 承担国家自然科学基金

金优秀青年科学基金、中国科协青年托举工程、科技部重点研发专项子课题等项目；担任 Nature, Nat. Catal., Nat. Commun., Angew. Chem., Joule 等期刊审稿人，J. Energy Chem. 期刊客座编辑，Chinese. Chem. Lett., Green Carbon 青年编委和中国颗粒学会青年理事。

附：报告人非学生

基于人工智能方法的光催化制氢催化剂优化研究

夏珂^{1,2}、王天宇^{1,2,3}、来金旺^{1,2}、高润喆^{1,2,3}、何玉荣^{1,2,3,*}

¹哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨市 150001

²黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨市 150001

³哈尔滨工业大学郑州研究院, 郑州市 450000

*Email: rong@hit.edu.cn

氢能作为一种理想的洁净能源, 被认为是最具有应用前景的能源之一^[1]。光催化制氢技术作为一种可持续性高, 环境友好的制氢手段, 在太阳能利用方面的应用目前受到了广泛的研究。然而, 尽管光催化或光电催化系统的设计实现了一步就能实现整个水的分解, 但在可见光下效率很低, 最好的性能几乎不能超过5%^[2]。其中, 种类组成繁多的催化剂、配比多样的反应介质以及光源光照强度的因素严重影响了最优氢气产出速率的参数确认。因此, 预测并确定光催化制氢的最优反应参数, 优化实验流程以及后续光催化制氢系统的设计至关重要。

催化剂的成分构成是影响光催化制氢速率的关键, 催化剂掺杂构成多元体系是改进催化剂活性的有效手段。由于掺杂物质的多选择性以及比重大小不同, 以往研究只能通过实验来验证催化剂活性大小。在如今AI快速发展的当下, 深度学习和机器学习的出现, 对于机理未明的问题具有指导性作用^[3,4]。其中, 反向传播算法能够利用现有数据针对机理不明问题进行数据预测。

本研究基于全连接模型方法, 搜集了有关Pt/TiO₂二元催化剂的相关数据集^[5-10]如图1所示, 建立了Pt/TiO₂光催化制氢速率预测模型。并对模型预测结果进行实验验证, 模型预测结果与实验结果对比图如图2所示, 模型给出以乙醇水溶液为反应基地时Pt/TiO₂中Pt的最优添加百分比在1%附近, 与后续验证实验结果吻合。

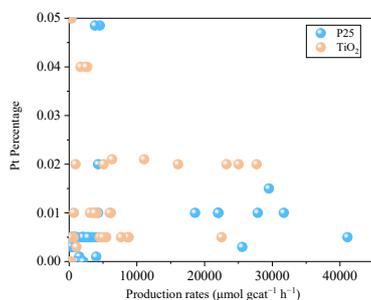


Fig. 1 Display of some standardized experimental data

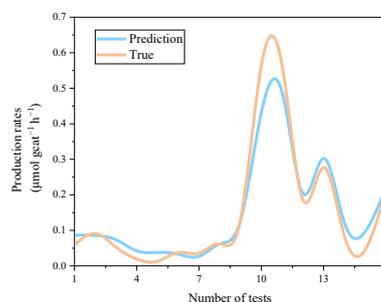


Fig. 2 Model predicted and true value curves

关键词: 光催化制氢; 催化剂; 全连接模型;

参考文献

- [1] Dincer I. Green methods for hydrogen production[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2012, 37(2): 1954-1971.
- [2] Montes-Navajas P, Serra M, Corma A. Contrasting photocatalytic activity of commercial TiO₂ samples for hydrogen generation[J]. Catalysis Today, 2014, 225: 52-54.
- [3] 杨岳, 关成立, 陈兴汉. 基于BP神经网络的多壁碳纳米管复合CdS—TiO₂光催化剂优化合成研究[J]. 环境污染与防治, 2014, 36(7): 64-68.
- [4] 张浩, 刘守城, 胡义, 黄新杰, 任崑. 基于正交设计与BP神经网络优化制备Cu—Ce/TiO₂的预测模型[J]. 稀土, 2015(2): 72-77.

- [5] Daskalaki V M, Kondarides D I. Efficient production of hydrogen by photo-induced reforming of glycerol at ambient conditions[J]. Catalysis Today, 2009, 144(1-2): 75-80.
- [6] Panagiotopoulou P, Karamerou E E, Kondarides D I. Kinetics and mechanism of glycerol photo-oxidation and photo-reforming reactions in aqueous TiO₂ and Pt/TiO₂ suspensions[J]. Catalysis today, 2013, 209: 91-98..
- [7] Shiragami T, Tomo T, Tsumagari H. Pentose acting as a sacrificial multielectron source in photocatalytic hydrogen evolution from water by Pt-doped TiO₂[J]. Chemistry Letters, 2012, 41(1): 29-31.
- [8] Li Y, Lu G, Li S. Photocatalytic production of hydrogen in single component and mixture systems of electron donors and monitoring adsorption of donors by in situ infrared spectroscopy[J]. Chemosphere, 2003, 52(5): 843-850.
- [9] Chemseddine A, Boehm H P. A study of the primary step in the photochemical degradation of acetic acid and chloroacetic acids on a TiO₂ photocatalyst[J]. Journal of Molecular Catalysis, 1990, 60(3): 295-311.
- [10] Mozia S, Heciak A, Morawski A W. Preparation of Fe-modified photocatalysts and their application for generation of useful hydrocarbons during photocatalytic decomposition of acetic acid[J]. Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, 2010, 216(2-3): 275-282.

报告人/墙报展示人简介:

报告人: 夏珂(学生), 于哈尔滨工业大学攻读硕士学位, 导师为王天宇教授, 研究方向为光催化制氢中催化剂优化研究。



报告人: 夏珂, 哈尔滨工业大学能源学院, 学生, 1652461705@qq.com

数据驱动的煤直接液化预测模型及影响因素分析

李林晟, 王兴宝*, 李文英

太原理工大学 省部共建煤基能源清洁高效利用国家重点实验室, 山西 太原, 030024

*Email: wangxingbao@tyut.edu.cn

摘要正文: 了解煤直接液化反应中各因素对煤直接液化反应过程的影响规律具有重要意义。然而, 煤液化反应是复杂的气液固三相强放热反应, 煤结构以及供氢溶剂组成的复杂性以及多样性使其研究面临着巨大的挑战。在这项研究中, 基于煤质基础信息、反应条件等液化实验参数, 采用机器学习方法建立了煤直接液化性能指标预测模型。本研究利用机器学习方法建立了煤直接液化性能指标预测模型。采用包括煤质基础信息、反应条件、催化剂因素和供氢溶剂因素的四种类型的输入变量 (总共17个输入变量) 来预测煤直接液化性能指标中的转化率和油产率。建立了MLR、RF、LightGBM和XGBoost四种机器学习模型, 树模型相较于线性模型具有更高的准确性, 其中XGBoost模型在模型预测方面具有较高的准确性。利用变量重要性分析和SHAP敏感性分析方法对XGBoost模型进行了可解释性分析。获得了各变量对液化性能指标的影响情况 (Fig. 1), 认为反应条件和煤种性质对液化性能指标的影响最大。其中反应压力对液化性能的影响最大, 挥发分、氧含量、碳含量、恒温时间以及反应温度对转化率和油产率的影响顺序不同, 此外, $n_S:n_{Fe}$ 与反应气氛对油产率具有较大的影响。

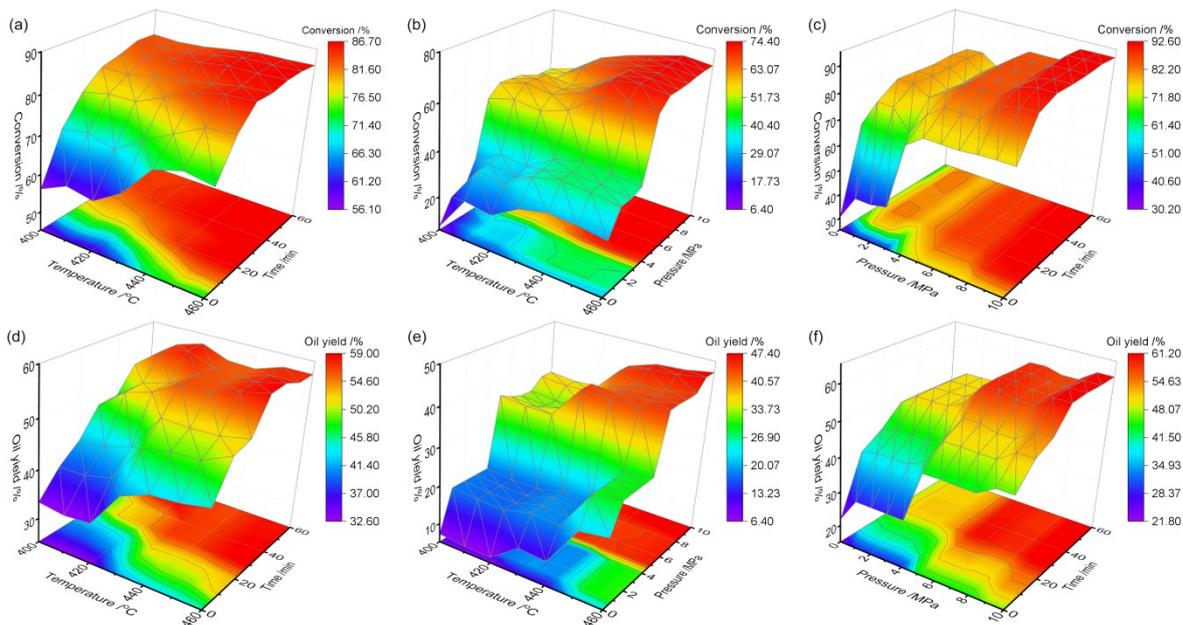


Fig. 1 Trend of influence of two factors on liquefaction performance

关键词: 煤直接液化; 性能指标; 煤直接液化影响因素; 机器学习

参考文献

- [1] I. Mochida, O. Okuma, S.-H. Yoon. Chemicals from Direct Coal Liquefaction. *Chem. Rev.* 2014, 114: 1637–1672.
- [2] S. Vasireddy, B. Morreale, A. Cugini, et al. Clean liquid fuels from direct coal liquefaction: chemistry, catalysis, technological status and challenges. *Energy Environ. Sci.* 2011, 4: 311–345.

报告人简介：

王兴宝，太原理工大学副教授。主要从事能源清洁高效转化的基础研究和工业应用方面的工作，主持国家自然科学基金、国家重点研发计划子课题、国家能源集团“2030 重大项目”先导项目、中国神华煤制油化工有限公司科技创新项目、企业横向项目等省部级项目多项，2018 年获“三晋英才”青年优秀人才称号。兼任 International Journal of Coal Science & Technology 期刊学术编辑，煤炭科学技术青年编委。目前已在 Angewandte Chemie International Edition, Chemical Engineering Journal, ACS Catalysis, Environmental Science & Technology, Fuel, Organometallics, ACS Sustainable Chemistry & Engineering, Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, Catalysis Today, Chinese Journal of Chemical Engineering 等期刊上发表 SCI 论文 60 余篇。申请发明专利 10 件，已授权 6 件。

附：报告人非学生

基于“谱-构-效”关系的智能化学研究

王嵩¹

¹中国科学技术大学，化学与材料科学学院，安徽省合肥市金寨路 96 号，230026

*Email: wsong09@ustc.edu.cn

摘要正文：随着现代科技的快速发展，科学研究的对象日益复杂化、高维化，为高值化学品研发带来了巨大挑战。基于实验试错的传统研究范式，已经难以破解复杂体系演化黑盒。究其原因，是理论大数据与实验小数据难以对齐带来的历史脱节问题。为了解决这一挑战性难题，我们团队研制了数据智能驱动的机器化学家平台，基于理实对齐的谱学描述符，驱动机器人开展理实交融的主动实验与学习。报告人在人工智能方法的帮助下，探索了通过光谱特征链接高维结构信息与低维性质信息的智能化学研究新思路。建立了“谱-构”关系模型预测化学结构，识别催化反应过程中的各种中间体，跟踪反应过程；建立了“谱-效”关系模型预测微观性质，实现了在面向实际应用场景下不完美小数据上的迁移应用；基于“谱-构-效”关系模型初步实现了目标性质的化学结构生成与定制。

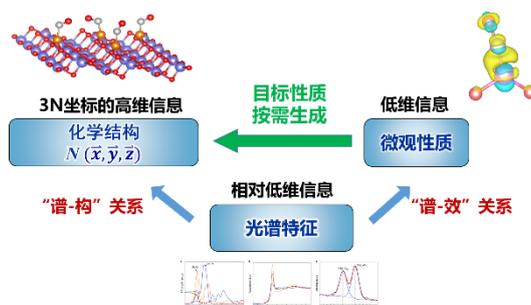


Fig. 1 On-demand generation of chemical structures based on the spectra-structure-property relationship

关键词：谱学描述符；机器化学家；催化设计；化学生成；谱-构-效关系

参考文献

- [1] Q. Zhu, et. al., W. Shang*, J. Jiang*, Y. Luo*, Natl. Sci. Rev. 2022, 9: nwac190.
- [2] Y. Chong, et. al., S. Wang*, J. Jiang*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 2023, 120: e2220789120.
- [3] T. Yang, et. al., Y. Huang*, S. Wang*, J. Jiang*, J. Am. Chem. Soc., 2023, 145: 26817-26823.

报告人/墙报展示人简介：

王嵩，现为中国科学技术大学化学与材料科学学院副研究员，主要从事理论计算化学和人工智能相结合的研究。近年来，提出了空间结构描述符、偶极耦合描述符、谱学描述符等一系列化学特色描述符，驱动机器化学家平台开展研究，实现了材料的高效预测、筛选和设计。在国际一流学术期刊如 JACS, Angew, PNAS 等发表论文 30 余篇。主持基金委青年科学基金项目，作为项目骨干参与国家重大科研仪器研制项目和 GJ 专项项目。



附：报告人非学生

基于机理和数据驱动的气固流态化过程数字孪生研究

赵陆海波^{1,*}, 彭词¹, 唐志永^{1,2,3*}

¹中国科学院上海高等研究院, 上海, 201210

²中国科学技术大学, 合肥, 230026

³ 安徽师范大学, 芜湖 241000, 中国

* Email: zhaolhb@sari.ac.cn and tangzy@sari.ac.cn

摘要正文: 本文基于多相流测试、数值仿真和机器学习方法开展了气固流化床数字孪生建模与应用研究。首先, 针对气固流化床冷模装置开展多相流测试实验和CPFD (computational particle fluid dynamic) 方法, 搭建了一种多层次的流化床数字孪生框架; 采用ResMLP (Residual MLP) 网络开发工业气固流化床轴向压力预测模型, 进一步重点在功能应用层分析了数字孪生体在设备故障诊断、参数控制优化等场景下的核心技术以及应用实现路径; 最后, 从数字孪生体构建的标准化、业务化及可视化等层面总结了气固流化床装置数字孪生技术面临的挑战。本研究可为气固流化床设备的数智化运维管控的提供技术支持。

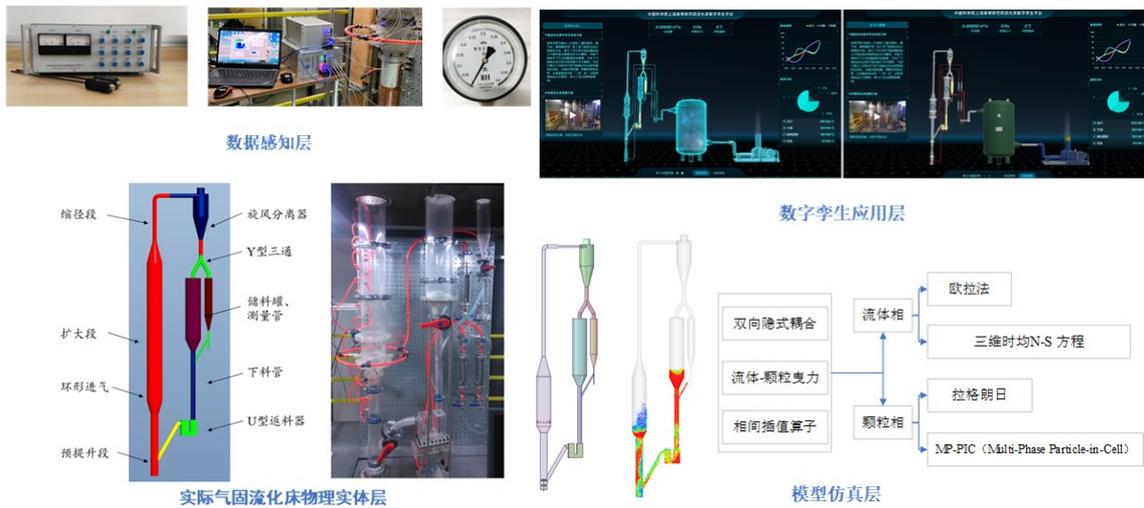


图. 1 气固流化床数字孪生体的构件框架

Fig. 1 Construction framework of gas-solid fluidized bed digital twin

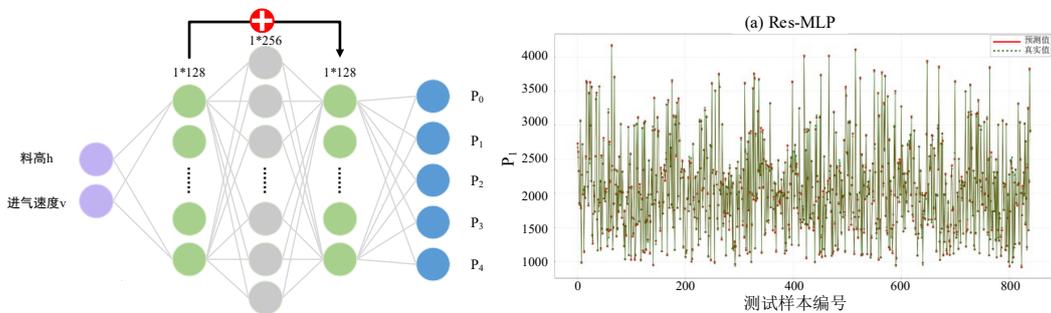


图. 2 数据驱动 Res-MLP 方法气固流态化压力预测

Fig. 2 Prediction pressure of gas-solid fluidization by data-driven Res-MLP method

关键词: 气固流化床; 数字孪生; 多相流测试; 数值模拟; 机器学习

参考文献

- [1] Fei Tao, Qinglin Qi. Nature[J].2019, 573: 490-491
- [2] 贺兴, 艾芊, 朱天怡等. 数字孪生在电力系统应用中的机遇和挑战[J]. 电网技术, 2020, 44(06):2009-2019
- [3] 余斌, 朱伟佳. 石化行业数字孪生技术的应用探索[J]. 化工进展, 2019, 38(S1):278-282.
- [4] Ge, W., L. Guo, and J. Li, Toward Greener and Smarter Process Industries[J]. Engineering, 2017. 3(2): p. 152-153.
- [5] 金涌, 程易, 白丁荣等. 中国流态化技术研发史略[J]. 化工进展, 2023, 42(06):2761-2780.

报告人/墙报展示人简介:

赵陆海波, 博士, 副研究员, 基于多相流测试和仿真方法开展碳中和能源化工过程强化及数字孪生研发, 主持和参与了多项国家重点研发计划、基金委、中科院战略先导、国际企业 (BASF、Shell、BP、中船、中海油) 等项目, 具体包括合成气直接制烯烃浆态床技术、烯烃氢甲酰化、微藻 CO₂ 固碳、电解制氢、生物质气化等实验室到工程化研究, 发表 SCI 论文 30 余篇, 授权专利 30 余项, 担任中国计量学会多相流测试专业委员会青年联谊会会员, 《AAIR》编委以及 CEJ、POF、CES、化工进展、化学工业与工程等期刊审稿人。



附: 报告人非学生

基于 PINN-LBM 的单个圆形多孔颗粒绕流预测研究

陈维奇^{1,2,3}, 何玉荣^{1,2,3*}

¹哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨, 150001

²黑龙江省新型储能材料与储能过程研究重点实验室, 哈尔滨, 150001

³哈工大郑州研究院, 郑州, 450000

*Email: rong@hit.edu.cn

摘要正文: 多孔催化剂颗粒在石油加工^{错误!未找到引用源。}、水解制氢^{错误!未找到引用源。}等化工领域有着广泛应用。催化剂颗粒的多孔结构必然对颗粒内外部流场演化有着重要影响。目前, 针对多孔催化剂颗粒内部传质及流场演化过程的实验研究手段仍然非常缺乏, 采用数值模拟方法对单个多孔催化剂颗粒内外部的流场演化和传质特性进行研究, 对优化催化剂颗粒反应性能有重要意义。

格子Boltzmann方法(Lattice Boltzmann Method, 简称LBM)被认为是模拟复杂结构中的流动问题的有效数值方法^{错误!未找到引用源。}。与传统的流体动力学数值方法相比, 由于其计算过程简洁及易于实现复杂几何结构的边界处理等优点, 已有众多研究者使用LBM对多孔颗粒流动问题进行模拟^{错误!未找到引用源。}。但LBM的求解涉及大量的计算和时间消耗, 随着模型的大小和维度的增加, 模型和程序的复杂度和计算成本也随之增加。近年来, 人工智能算法的快速发展为多孔颗粒流动计算提供了新的方法, 提高了计算效率^{错误!未找到引用源。}。利用深度学习技术直接求解复杂偏微分方程已成为计算流体动力学领域的一个突出研究热点。其中, 物理信息神经网络

(Physics-Informed Neural Network, 简称PINN)将物理信息用于约束神经网络, 可使预测结果更符合物理规律^{错误!未找到引用源。}。目前, PINN已被广泛用于求解以N-S方程形式描述的流体流动^{错误!未找到引用源。}。但关于PINN网络在多孔颗粒流动中的研究十分有限, 而结合LBM和PINN网络的相关研究更为缺乏。

基于此, 本研究将LBM方法与PINN网络结合, 建立PINN-LBM模型, 利用格子Boltzmann方程来约束神经网络, 并以单个圆形多孔颗粒为对象, 对单个圆形多孔颗粒的流场分布等特性进行预测, 为优化多孔催化剂颗粒反应性能提供参考。

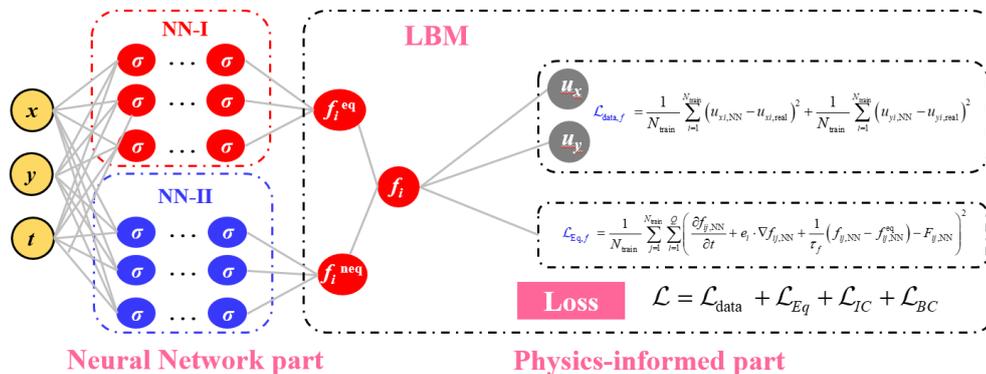


Fig. 1 Schematic of PINNs for solving the discrete velocity Lattice Boltzmann equation (PINN-LBM)

关键词: 物理信息神经网络; 多孔颗粒; LBM; 孔隙率

参考文献

- [1] 田宇, 高铭滨, 徐庶亮, 叶茂. 黏结剂对甲醇制烯烃中单颗粒催化剂内部反应过程的影响[J]. 中国粉体技术, 2024, 30(01): 66-78.
- [2] 徐凤勤, 胡小飞, 程方益, 梁静, 陶占良, 陈军. 多孔碳负载镍纳米颗粒的制备及催化氨硼烷水解制氢[J]. 无机化学学报,

2015, 31(01): 103-108.

[3]X. Li, Z. Zhu, Z. Xu, T. Ma, H. Zhang, J. Liu, X. Wang, Q. Wang. A three-dimensional pore-scale lattice Boltzmann model for investigating the supergravity effects on charging process[J]. *Applied Energy*, 2019, 254: 113507.

[4]王春雨, 李承功, 叶茂. 单个圆形非均匀多孔颗粒绕流的数值模拟[J]. *过程工程学报*, 2021, 21(06): 658-670.

[5]T. Rezaee, K. Sadeghy. Effect of porosity on the settling behavior of a 2D elliptic particle in a narrow vessel: A lattice-Boltzmann simulation[J]. *Physics of Fluids*, 2019, 31(12).

[6]M. J. Blunt, B. Bijeljic, H. Dong, , G. Oussama, I. Stefan, M. Peyman, P. Adriana, P. Christopher. Pore-scale imaging and modelling[J]. *Advances in Water Resources*, 2013, 51: 197-216.

[7]M. Raissi, P. Perdikaris, G. E. Karniadakis. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 378: 686-707.

[8]S. Cai, Z. Mao, Z. Wang, M. Yin, G. E. Karniadakis. Physics-informed neural networks (PINNs) for fluid mechanics: A review[J]. *Acta Mechanica Sinica*, 2021, 37(12): 1727-1738.

报告人/墙报展示人简介:

陈维奇（1998-），男，哈尔滨工业大学博士研究生在读。
主要研究方向为新能源利用与储能过程中的多相流热物理学。



附：报告人为学生

基于神经网络方法的颗粒曳力系数预测

闫盛楠^{1, 2*}, 李正贵^{1, 2}, 陈芳^{1, 2}, 刘小兵^{1, 2}

¹西华大学能源与动力工程学院, 成都, 610039

²流体及动力机械教育部重点实验室, 成都, 610039

*Email: yanshn@mail.xhu.edu.cn

摘要正文: 在工业领域及自然界中, 气固两相流动中的颗粒输运现象十分普遍。厘清其中的颗粒流动特性, 对于流化床反应器的有效设计、操作、优化及放大等方面至为重要^[1, 2]。实际应用过程中的颗粒多为非球形, 且颗粒形状对于气固两相间的曳力影响十分显著。因此, 在气固两相流动过程中, 不能忽略颗粒形状的影响。同时, 曳力系数是决定曳力大小的关键因素。常见测量曳力系数的实验主要包括颗粒沉降及风洞实验等, 基于实验数据, 研究者们构建了不同的曳力系数关联式^[3]。上述两种方法对于人力和物力成本要求都较高。特别是, 如果要知晓先前未测试过的非球形颗粒曳力系数, 需重复相同的实验过程, 大大增加了研究成本。

目前, 神经网络方法在曲线拟合、过程控制、数据聚类、系统预测及优化等方面有广泛的应用。因此, 为避免大量繁复的曳力系数测量实验, 可采用神经网络方法来预测曳力系数。综上, 本研究构建了径向基神经网络和反向传播神经网络框架, 如图1所示。其中, 以雷诺数和颗粒球形度为输入参数, 以曳力系数为输出参数。选取Pettyjohn等^[4]和Yow等^[5]的实验数据为训练样本, Kalman等^[6]的实验数据为测试样本。研究表明, 神经网络方法在预测和研究非球形颗粒系统的曳力系数方面比较有效。本文工作可为气固两相系统中复杂形状颗粒曳力系数预测提供一定参考。

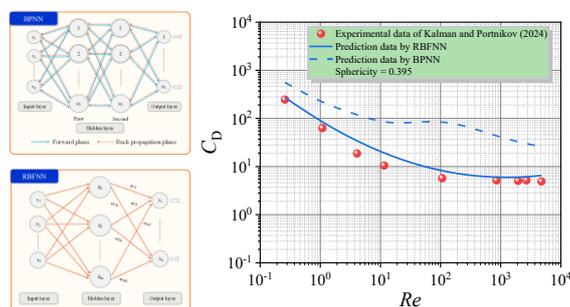


Fig. 1 Schematic diagram of artificial neural network in predicting drag coefficient

关键词: 曳力系数; 神经网络; 非球形颗粒

参考文献

- [1] Zhou Y, Wang T, Zhu J. Development of gas-solid fluidization: particulate and aggregative[J]. *Powder Technol.* 2023, 421: 118420.
- [2] 邱沫凡, 蒋琳, 刘荣正, 刘兵, 唐亚平, 刘马林. 气固流化床化学反应数值模拟中颗粒尺度模型研究进展[J]. *化工进展*, 2023, 42(10): 5047-5058.
- [3] Michaelides E E, Feng Z. Drag coefficients of non-spherical and irregularly shaped particles[J]. *J. Fluid Eng.* 2023, 145(6): 060801.
- [4] Pettyjohn E S. Effect of particle shape on free settling rates of isometric particles[J]. *Chem. Eng. Prog.* 1948, 44: 157-172.
- [5] Yow H N, Pitt M J, Salman A D. Drag correlations for particles of regular shape[J]. *Adv. Powder Technol.* 2005, 16(4): 363-372.
- [6] Kalman H, Portnikov D. Free falling of non-spherical particles in Newtonian fluids, A: Terminal velocity and drag coefficient[J]. *Powder Technol.* 2024, 434: 119357.

报告人/墙报展示人简介：

闫盛楠（1990-），男，西华大学能源与动力工程学院，讲师，主要研究方向为多相流动及热质传递



附：报告人非学生

人工智能赋能生物质/塑料快速热解流化床反应器多尺度研究

高希^{1,2,*}

¹广东以色列理工学院, 广东省汕头市大学路 241 号, 515063;

²以色列理工学院, 以色列海法市, 3200003

*Email: xi.gao@gtit.edu.cn

摘要正文: 生物质/塑料快速热解流化床反应器是典型的多相、多组分、多尺度的复杂反应系统。本报告介绍了本团队在生物质/塑料热化学转化反应器的多尺度建模、人工智能及实验验证等方面的研究进展。通过高速摄像和基于机器学习的图像处理方法,研究了生物质快速热解流化床反应器中的多组分流化现象。构建了基于机器学习的曳力模型,研究了生物质和石英砂的混合和分离的流态化行为。构建了基于神经网络的可解释型热解动力学模型,实现了热解动力学模型参数的最优化。开发了基于机器学习的离散颗粒模拟加速算法,实现了离散颗粒快速准确模拟。开发了非球形颗粒模拟求解器SuperDEM,实现大规模离散颗粒并行模拟,研究了非球形颗粒的流化现象。构建了多尺度模型框架将复杂的反应动力学模型、颗粒内传递反应模型和流化床反应器模型耦合,用于生物质/塑料快速热解流化床反应器的模拟、优化和放大。

关键词: 人工智能; 多尺度建模; 生物质快速热解; 非球形颗粒; 流化床反应器

报告人简介:

高希, 广东以色列理工学院副教授、博导、国家高层次青年人才。主要从事多相反应器、固体燃料热化学转化、人工智能和高性能计算等领域的研究。主持和参与国家、省部级和企业项目 10 余项, 在 AICHE J. 等发表 SCI 论文 60 余篇, 申请发明专利 6 项 (已授权 3 项), 开发软件 SuperDEM 等 3 个。任 Carbon Neutrality, Frontiers in Energy 青年编委, I&EC Research 客座编辑, 中国化工学会过程模拟及仿真专业委员会青年委员等。担任国际会议分会主席/主持人多次, 做主题报告、邀请报告等口头报告 20 多次, 受邀为 40 多个 SCI 期刊审稿。曾获 I&EC Research 有影响力学者奖、广东以色列理工学院青年讲习教授称号等。



3. 墙报

基于文本挖掘与数据驱动的金属氧化物释氧性能预测

江宇泷^{1,2}, 厉志鹏¹, 汤红健^{1,*}, 段伦博^{1,*}

¹东南大学 能源与环境学院, 江苏 南京, 210096

²东南大学-蒙纳士大学苏州联合研究生院, 江苏 苏州, 215123

*Email: tanghongjian@seu.edu.cn, duanlunbo@seu.edu.cn

摘要正文: 金属氧化物的氧解耦循环能够应用于多个场景中, 例如利用释氧的化学链氧解耦燃烧、利用反应能量循环的热化学储能以及利用还原态氧化物的热化学水解制氢、热化学还原CO₂裂解等诸多能源低碳利用过程。然而, 目前针对金属氧化物氧解耦过程的主要研究范式: 实验试错与计算筛选, 存在指导性弱、耗时费力等问题, 本文提出了文本挖掘与数据驱动相结合的研究范式用于金属氧化物材料筛选与释氧性能预测。首先, 基于大语言模型从已公开发表的大于5000篇文献中批量挖掘表征金属氧化物结构特征和释氧性能的文本数据, 包括X射线衍射图谱、热重曲线、释氧量、释氧温度等。其次, 对文本数据进行数据清洗和结构化表示, 进而建立了包含550组“结构特征-释氧性能”完备的释氧材料数据集。然后, 基于卷积神经网络(Convolutional Neural Network, CNN)模型, 以表征金属氧化物材料结构特征的X射线衍射数据作为输入, 以释氧温度、释氧量等释氧性能相关数据作为输出, 准确构建了金属氧化物“结构特征-释氧性能”之间的映射关系。结果表明, CNN模型对于释氧量的回归系数R²在训练集上达到了0.98, 在测试集上达到了0.86, 而对于释氧温度的分类预测的准确率在训练集上为100%, 在测试集上为78.38%, 模型对释氧量的直接预测有助于快速筛选出具备高释氧潜力的材料, 而对释氧温度的智能预测有助于选择适用于特定应用场景的材料。本研究从研究范式变革角度出发, 将文本挖掘与数据驱动有效融合, 实现了金属氧化物材料释氧性能的高通量辨识与智能预测, 为高性能释氧材料的快速筛选与定向设计提供了新的解决方案。

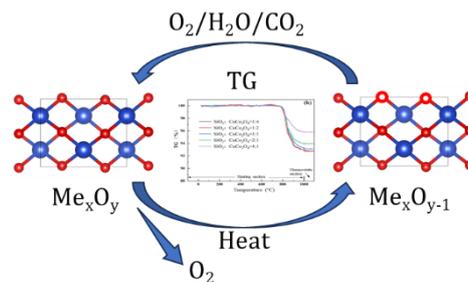


Fig. 1 Oxygen uncoupling process of metal oxide

关键词: 氧解耦; 文本挖掘; 数据驱动; 卷积神经网络

报告人/墙报展示人简介:

江宇泷, 东南大学能源与环境学院硕士

附: 报告人是学生

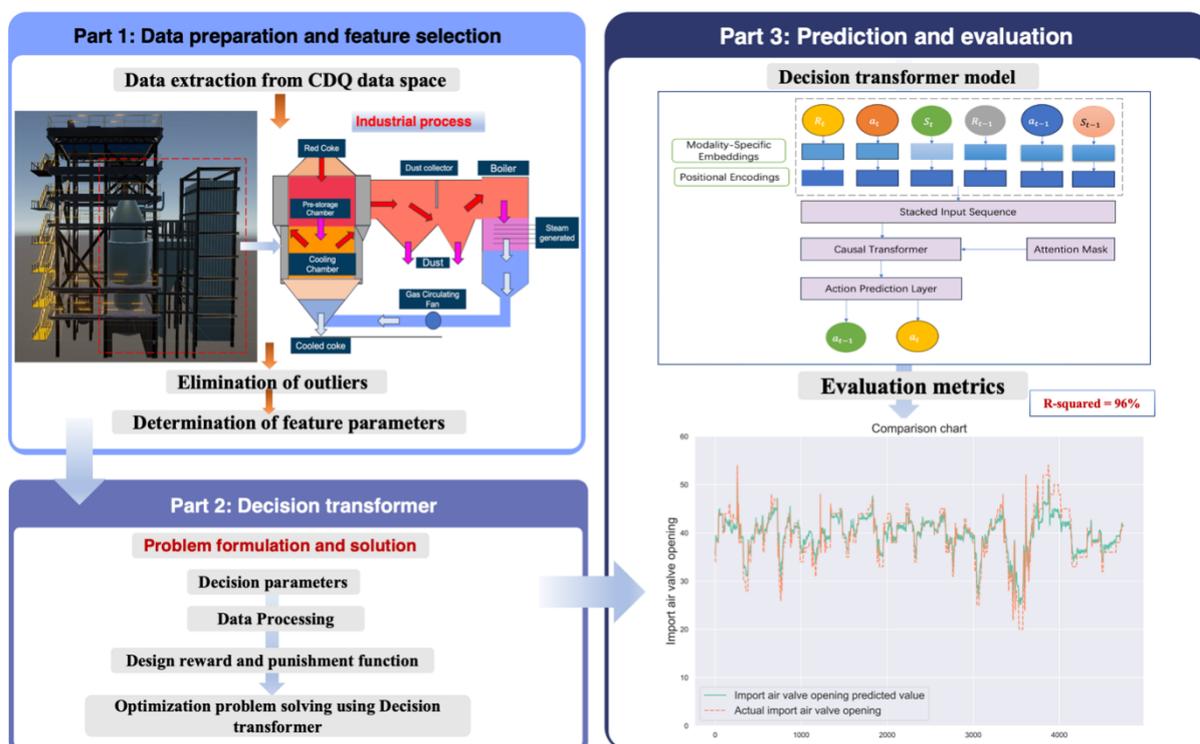


Intelligent Control of Coke Dry Quenching Process using Decision Transformer Algorithm

Heng Xu, Cheng Sheng,

Hefei Lituo Cloud Computing Technology Co., Ltd., Zhong An Chuang Gu, No.900 Wangjiang West Rd, Hefei, ANHUI, 230031, China

Graphical Abstract:



Abstract:To address the challenge of manual adjustment based on experiential knowledge for process parameters affecting production in Coke Dry Quenching (CDQ) process, a closed-loop control method utilizing the Decision Transformer algorithm is proposed. This CDQ Decision Transformer model resolves the existing problems that arise from manual operations during the CDQ process by leveraging sequence data as input to identify relationships and employing self-attention mechanisms to recognize dependencies within the sequences. The objective of training the decision transformer model is to recommend the optimal control result during the CDQ process and adjust control parameters based on changes in input parameters. This approach enables the implementation of a fully automated control system in the CDQ process. With an accuracy of up to 0.96 and achieved an average score of 5.98, this model proves to be an ideal solution for industrial applications.

Keywords: Decision Transformer algorithm, Coke Dry Quenching process, closed-loop control, Optimization, Automation

References

[1] K. Sun, C.-T. Tseng, D. Shan-Hill Wong, S.-S. Shieh, S.-S. Jang, J.-L. Kang, W.-D. Hsieh, Model predictive control for improving waste heat recovery in coke dry quenching processes, Energy 80 (2015) 275–283.

- [2] M. R. Errera, L. F. Milanez, Thermodynamic analysis of a coke dry quenching unit, *Energy Conversion and Management* 41 (2000) 109–127.
- [3] Y. Feng, X. Zhang, Q. Yu, Z. Shi, Z. Liu, H. Zhang, H. Liu, Experimental and numerical investigations of coke descending behavior in a coke dry quenching cooling shaft, *Applied Thermal Engineering* 28 (2008) 1485–1490.
- [4] E. A. Danilin, Improving the design and operation of dry-slaking systems, *Coke and Chemistry* 54 (2011) 385–387.
- [5] E. A. Danilin, B. I. Khristenko, A. E. Kaplunovskiy, A. A. Lobov, Improving the discharge system in cdq units, *Coke Chem* 57 (2014) 213–218.
- [6] S. Machenko, Yu.S. P. Kinyakin, Improving efficiency and environmental protection at coke plants by introducing cdq systems with a coke output of 160 t/h, *Prom* (2012) 82–89.
- [7] Q. Zhang, X. Wu, A. Feng, M. Shi, Prediction of coke quality at baosteel, *Fuel Processing Technology* 86 (2004) 1–11.
- [8] B. W. Bequette, Nonlinear control of chemical processes: a review, *Industrial & Engineering Chemistry Research* 30 (1991) 1391–1413.
- [9] L. Chen, K. Lu, A. Rajeswaran, K. Lee, A. Grover, M. Laskin, P. Abbeel, A. Srinivas, I. Mordatch, Decision transformer: Reinforcement learning via sequence modeling, 2021.
- [10] A. Vaswani, N. Shazeer, N. Parmar, J. Uszkoreit, L. Jones, A. N. Gomez, L. u. Kaiser, I. Polosukhin, Attention is all you need, in: I. Guyon, U. V. Luxburg, S. Bengio, H. Wallach, R. Fergus, S. Vishwanathan, R. Garnett (Eds.), *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 30, Curran Associates, Inc., 2017.
- [11] A. Radford, K. Narasimhan, T. Salimans, I. Sutskever, Improving language understanding by generative pre-training, 2018.
- [12] L. van der Maaten, G. Hinton, Visualizing data using t-sne, *Journal of Machine Learning Research* 9 (2008) 2579–2605.

报告人/墙报展示人简介:

徐姮, 现任合肥力拓云计算科技有限公司担任工业大数据分析师, 独立实现工业大数据信息挖掘机分析处理, 利用统计学方法及机器学习方法对工业大数据进行分析。

附: 报告人/墙报展示人非学生

第 5 分会场

冶金工程与智能化

1. 主题报告

烧结工序智能解析及节能降碳

王坤^{1,2}, 王福庆¹, 王坤^{1,2*}, 李昆仑¹

¹东北大学 工业智能与系统优化国家级前沿科学中心, 沈阳, 110004

²东北大学 智能工业数据解析与优化教育部重点实验室, 沈阳, 110004

*Email: wangkun@mail.neu.edu.cn

摘要正文: 烧结工序具有原料种类多、控制参数多、烧结矿质量表征实时性差等特点, 烧结过程伴随着复杂的物理化学反应, 具有多相多场动态演化等特征, 同时烧结工序能耗量仅低于高炉炼铁, 占钢铁生产总能耗的11%~16%, 也是污染物排放最多的工序, 污染负荷约占钢铁长流程的39%。烧结矿质量预测与节能降碳是烧结工序亟待解决的关键任务。本研究采用机理和数据协同的研究手段, 开展烧结矿质量预测与CO减排研究。基于现场采集的原料、工艺及烧结矿质量数据, 采用XGBoost、RF、MLP等多种方法建立烧结矿质量预测模型, 实现烧结矿FeO含量、转鼓强度、碱度、筛分指数等指标高精度预测; 通过数值模拟获得不同原料条件、工艺参数下烧结料层温度分布、CO排放浓度及液相生成率数据, 针对数值研究计算资源需求高、计算周期长、效率低的现实问题, 建立CO排放预测的数据模型, 实现了不同工况下烧结产生CO的快速准确预测; 以烧结质量(包含二级指标)、碳排放等为优化目标, 构建烧结过程多目标操作优化模型, 采用多目标进化算法, 实现烧结关键参数的多目标智能优化, 为烧结质量解析、节能降碳提供指导。

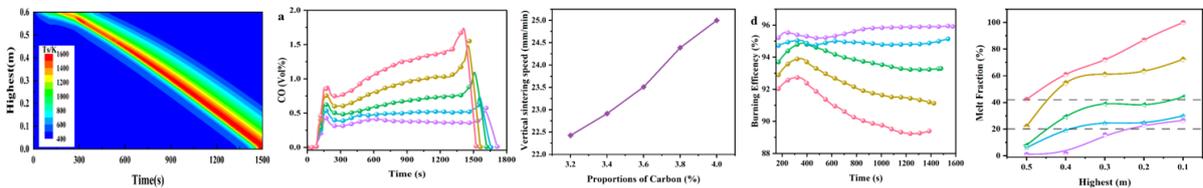


Fig. 1 Simulation of sintering process

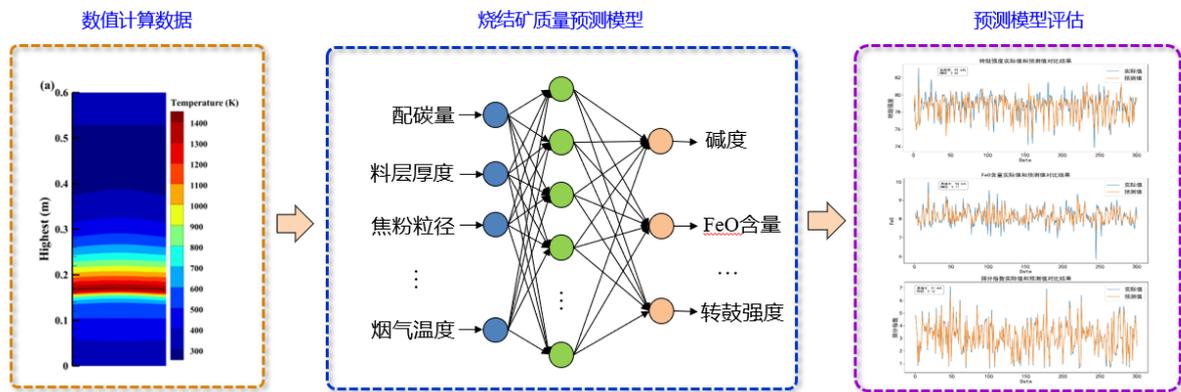


Fig. 2 Prediction of sintered ore quality

关键词: 烧结工序; 智能解析; 烧结质量预测; CO减排

报告人/墙报展示人简介:

王坤，博士，东北大学工业智能与系统优化国家级前沿科学中心副教授，博士生导师，主要研究方向为工艺机理与数据科学交叉融合研究。基于流程工业节能减排理论与技术、材料设计与性能优化等相关研究，获辽宁省优秀博士学位论文、教育部学术新人奖、辽宁省/沈阳市自然科学学术成果奖等，主持国家自然科学基金面上项目、青年项目，中国博士后科学基金，企事业合作项目等课题，发表学术论文 60 余篇，其中 SCI 检索论文 40 余篇，授权国家发明专利 12 项。



A novel hybrid intelligent model for molten iron temperature forecasting based on machine learning

Wei Xu^{1,2}, Jingjing Liu³, Jinman Li^{4,*}, Hua Wang^{1,2} and Qingtai Xiao^{1,2,*}

¹ State Key Laboratory of Complex Nonferrous Metal Resources Clean Utilization, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China

² Faculty of Metallurgical and Energy Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China

*Email: qingtai.xiao@kust.edu.cn

To address the challenges of low accuracy and poor robustness of traditional single prediction models for blast furnace molten iron temperature, a hybrid model that integrates the improved complete ensemble empirical mode decomposition with adaptive noise, kernel principal component analysis, support vector regression and radial basis functional neural network is proposed for precise and stable iron temperature prediction. First, the complete ensemble empirical mode decomposition is employed to decompose the time series of iron temperature, yielding several intrinsic mode functions. Second, kernel principal component analysis is used to reduce the dimensionality of the multi-dimensional key variables from the steel production process, extracting the major features of these variables. Then, in conjunction with the K-means algorithm, support vector regression is utilized to predict the first column of the decomposed sequence, which contains the most informative content, evaluated using the Pearson correlation coefficient method and permutation entropy calculation. Finally, radial basis function neural network is applied to predict the remaining time series of iron temperature, resulting in the cumulative prediction. Results demonstrate that compared to traditional single models, the mean absolute percentage error is reduced by 54.55%, and the root mean square error is improved by 49.40%. This novel model provides a better understanding of the dynamic temperature variations in iron, and achieves a hit rate of 94.12% within a range of $\pm 5^{\circ}\text{C}$. Consequently, this work offers theoretical support for real-time control of blast furnace molten iron temperature and holds practical significance for ensuring the stability of blast furnace smelting and implementing intelligent metallurgical processes.

Keywords: Molten iron temperature; Intelligent prediction; K-means; Empirical mode decomposition; Machine learning

References

- [5] S. Liu, Q. Xiao, An empirical analysis on spatial correlation investigation of industrial carbon emissions using SNA-ICE model, *Energy*, 224 (2021), 120183. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.120183>.
- [6] K. He, L. Wang, A review of energy use and energy-efficient technologies for the iron and steel industry, *Renew. Sust. Energy Rev.*, 70 (2017), 1022–1039. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.12.007>.
- [7] M. A. Quader, S. Ahmed, R. A. R. Ghazilla, S. Ahmed, M. Dahari, A comprehensive review on energy efficient CO₂ breakthrough technologies for sustainable green iron and steel manufacturing, *Renew. Sust. Energy Rev.*, 50 (2015), 594–614. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.05.026>
- [8] M. Smith, Blast furnace ironmaking: view on future developments, *Ironmak. Steelmak.*, 42 (2015), 734–742. <https://doi.org/10.1179/0301923315z.000000000422>
- [9] Y. Yang, S. Zhang, Y. Yin, A modified ELM algorithm for the prediction of silicon content in hot metal, *Neural Comput. Appl.*, 27 (2014), 241–247. <https://doi.org/10.1007/s00521-014-1775-x>
- [10] J. Li, X. Wei, H. Chen, Y. Yang, L. Min, Double-hyperplane fuzzy classifier design for tendency prediction of silicon content in molten iron, *Fuzzy Set Syst.*, 426 (2022), 163–175. <https://doi.org/10.1016/j.fss.2021.05.002>
- [11] R. D. Martín, F. Obeso, J. Mochón, R. Barea, J. Jiménez, Hot metal temperature prediction in blast furnace using advanced model based on fuzzy logic tools, *Ironmak. Steelmak.*, 34 (2013), 241–247. <https://doi.org/10.1179/174328107x155358>
- [12] C. S. Tsao, R. H. Day, A process analysis model of the U.S. steel industry, *Manage. Sci.*, 17 (1971), B569–B704. <https://doi.org/10.1287/mnsc.17.10.B588>
- [13] Y. Dai, J. Li, Shi C, W. Yan, Dephosphorization of high silicon hot metal based on double slag converter steelmaking technology, *Ironmak. Steelmak.*, 48 (2020), 447–456. <https://doi.org/10.1080/03019233.2020.1807288>
- [14] J. Y. Liu, W. Zhang, Blast furnace temperature prediction based on RBF neural network and genetic algorithm, *Electron. Meas. Technol.*, 41 (2018), 42–45. <https://doi.org/10.3390/lubricants9090086>
- [15] V. R. Radhakrishnan, K. M. Ram, Mathematical model for predictive control of the bell-less top charging system of a blast furnace, *J. Process Control*, 11 (2001), 565–586. [https://doi.org/10.1016/s0959-1524\(00\)00026-3](https://doi.org/10.1016/s0959-1524(00)00026-3)
- [16] M. Geerdes, R. Chaigneau, O. Lingardi, R. Molenaar, R. van Opbergen, Y. Sha, et al., *Modern blast furnace ironmaking*, IOS Press eBooks, 2020. <https://doi.org/10.3233/stal9781643681238>
- [17] S. Amano, T. Takarabe, T. Nakamori, H. Oda, M. Taira, S. Watanabe, et al., Expert system for blast furnace operation at Kimitsu works, *ISIJ Int.*, 30 (1990), 105–110. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.30.105>

- [18] T. Yang, S. Yang, G. Zuo, H. Wei, J. Xu, Y. Zhou, An expert system for abnormal status diagnosis and operation guide of a blast furnace, IFAC Proc. Vol., 25 (1992), 59–63. [https://doi.org/10.1016/S1474-6670\(17\)49899-5](https://doi.org/10.1016/S1474-6670(17)49899-5)
- [19] E. Lughofer, R. A. Pollak, C. Feilmayr, M. Schatzl, S. Saminger-Platz, Prediction and explanation models for hot metal temperature, silicon concentration, and cooling capacity in ironmaking blast furnaces, Steel Res. Int., 92 (2021), 2100078. <https://doi.org/10.1002/srin.202100078>
- [20] J. Jimenez, J. Mochon, J. S. de Ayala, F. Obeso, Blast furnace hot metal temperature prediction through neural networks-based models, ISIJ Int., 44 (2004), 573–580. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.44.573>
- [21] W. Chen, F. Kong, B. Wang, Y. H. Li, Application of grey relational analysis and extreme learning machine method for predicting silicon content of molten iron in blast furnace, Ironmak. Steelmak., 46 (2018), 974–979. <https://doi.org/10.1080/03019233.2018.1470146>
- [22] J. Song, X. Xing, Z. Pang, M. Lv, Prediction of silicon content in the hot metal of a blast furnace based on FPA-BP model, Metals, 13 (2023), 918. <https://doi.org/10.3390/met13050918>
- [23] W. Liang, G. Wang, X. Ning, J. Zhang, Y. Li, C. Jiang, et al., Application of BP neural network to the prediction of coal ash melting characteristic temperature, Fuel, 260 (2020), 116324. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116324>
- [24] X. Su, S. Zhang, Y. Yin, W. Xiao, Prediction model of hot metal temperature for blast furnace based on improved multi-layer extreme learning machine, Int. J. Mach. Learn. Cyb., 10 (2019), 2739–2752. <https://doi.org/10.1007/s13042-018-0897-3>
- [25] H. Zhang, Y. Yin, S. Zhang, An improved ELM algorithm for the measurement of hot metal temperature in blast furnace, Neurocomputing, 174 (2015), 232–237. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2015.04.106>
- [26] X. Huang, H. Chen, X. Ling, L. Liu, T. Huhe, Investigation of heat and mass transfer and gas-liquid thermodynamic process paths in a humidifier, Energy, 261 (2022), 125156. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2022.125156>
- [27] M. M. Li, B. Verma, Nonlinear curve fitting to stopping power data using RBF neural networks, Expert Syst. Appl., 45 (2016), 161–171. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2015.09.033>
- [28] K. Yang, J. Li, M. Wang, H. Wang, Q. Xiao, Identifying flow patterns in a narrow channel via feature extraction of conductivity measurements with a support vector machine, Sensors, 23 (2023), 1907. <https://doi.org/10.3390/s23041907>
- [29] P. Zhou, D. Guo, H. Wang, T. Chai, Data-driven robust M-LS-SVR-based NARX modeling for estimation and control of molten iron quality indices in blast furnace ironmaking, IEEE Trans. Neural Networks Learn. Syst., 29 (2018), 4007–4021. <https://doi.org/10.1109/tnnls.2017.2749412>
- [30] P. Zhou, D. Guo, T. Chai, Data-driven predictive control of molten iron quality in blast furnace ironmaking using multi-output LS-SVR based inverse system identification, Neurocomputing, 308 (2018), 101–110. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2018.04.060>
- [31] Y. Liao, Y. Wang, M. Li, Q. Xiao, H. Wang, Prediction for the reduction smelting temperature based on CEEMDAN-RVM-EC, Control Theory Appl., 39 (2022), 2177–2184.
- [32] Y. Wang, P. Yang, S. Zhao, J. Chevallier, Q. Xiao, A hybrid intelligent framework for forecasting short-term hourly wind speed based on machine learning, Expert. Syst. Appl., 213 (2023), 119223. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2022.119223>
- [33] K. Yang, Y. Wang, M. Li, X. Li, H. Wang, Q. Xiao, Modeling topological nature of gas-liquid mixing process inside rectangular channel using RBF combined with CEEMDAN-VMD, Chem. Eng. Sci., 267 (2023), 118353. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2022.118353>
- [34] Y. Wang, P. Yang, Z. Song, J. Chevallier, Q. Xiao, Intelligent prediction of annual CO₂ emissions under data decomposition mode, Comput. Econ., 2023. <https://doi.org/10.1007/s10614-023-10357-8>
- [35] Z. Cui, A. Yang, L. Wang, Y. Han, Dynamic prediction model of silicon content in molten iron based on comprehensive characterization of furnace temperature, Metals, 12 (2022), 1403. <https://doi.org/10.3390/met12091403>
- [36] D. O. L. Fontes, L. G. S. Vasconcelos, R. P. Brito, Blast furnace hot metal temperature and silicon content prediction using soft sensor based on fuzzy C-means and exogenous nonlinear autoregressive models, Comput. Chem. Eng., 141 (2020), 107028. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.107028>
- [37] J. Zhao, X. Li, L. Song, K. Wang, Q. Lyu, E. Liu, Prediction of hot metal temperature based on data mining, High Temp. Mat. Process., 40 (2021), 87–98. <https://doi.org/10.1515/htmp-2021-0020>
- [38] L. J. Cao, K. S. Chua, W. Chong, H. P. Lee, Q. M. Gu, A comparison of PCA, KPCA and ICA for dimensionality reduction in support vector machine, Neurocomputing, 55 (2003), 321–336. [https://doi.org/10.1016/s0925-2312\(03\)00433-8](https://doi.org/10.1016/s0925-2312(03)00433-8)
- [39] K. Yang, H. Wang, H. Wang, M. Li, Q. Xiao, Topological approach for the measurement of mixing state quality in a vertical rectangular channel, Int. J. Multiphas. Flow, 163 (2023), 104431. <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2023.104431>

报告人/墙报展示人简介:

肖清泰, 男, 1989年9月生, 山东菏泽人, 副教授, 硕士生导师。现为中国致公党云南省委第八届青年工作委员会委员、中国化工学会混合与搅拌专业委员会第二届委员会委员。2012年获曲阜师范大学理学学士学位, 2016年和2019年分别获昆明理工大学理学硕士和工学博士学位。2018年至2019年访问美国德克萨斯大学里奥格兰德河谷分校。2020年5月至今在昆明理工大学冶金与能源工程学院能源与动力工程系工作, 是科技部冶金节能减排国家重点领域创新团队和第三批全国高校黄大年式教师团队的成员之一, 以及省部共建复



杂金属资源清洁利用国家重点实验室、冶金化工节能环保技术国家地方联合工程研究中心和冶金节能减排教育部工程研究中心等国家/省部级平台的研究人员。

教学与科研：

承担《能源大数据原理与应用》《自动控制原理》等本科教学以及《动力工程及工程热物理现代测试技术》等研究生教学工作，获批昆明理工大学跨学科课程建设第一批立项项目，是中国国际“互联网+”大学生创新创业大赛第七届国家银奖负责人和第八届国家银奖、第四届和第五届全国大学生冶金科技竞赛特等奖和第四届中国可再生能源学会大学生优秀科技作品竞赛一等奖指导教师，协助培养硕士/博士研究生 4 名，获云南省研究生教学成果二等奖（排 3）。

以第一/通讯作者在《International Journal of Multiphase Flow》《International Journal of Heat and Mass Transfer》和《化工学报》等国内外期刊上发表学术论文 43 篇，取得国家知识产权局授权专利 13 件，获云南省自然科学一等奖（排 3）、中国发明协会发明创业奖二等奖（排 5）、能源与环境青年先锋和中国青少年科技创新奖等科技奖励 10 余项，是《计量学报》《铜业工程》首届青年编委，入选第七届中国科协青年人才托举工程和云南省“兴滇英才支持计划”青年人才专项。

附：报告人非学生

Predicting cobalt ion concentration in process of hydrometallurgy zinc using data decomposition and machine learning

Yinzen Tan a, b, Wei Xu a, b, Kai Yang a, b, Shahab Pasha c, Hua Wang a, b,

Min Wang d, Qingtai Xiao a, b, *

1 State Key Laboratory of Complex Nonferrous Metal Resources Clean Utilization, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China

2 Faculty of Metallurgical and Energy Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China

*Email: tanyinzen0907@163.com

Solid waste is one of the primary contributors to environmental pollution currently, it is crucial to enhance the prevention and control of solid waste pollution in environmental management. The effectiveness of the second stage of purification in the industrial zinc hydrometallurgy is determined by the concentration of cobalt ion. Manual testing and monitoring of cobalt ion concentration are time consuming and costly, and prone to delays and errors, which can result in discharge of cobalt ion concentration that does not meet the standards, leading to water pollution. Additionally, over-addition of zinc powder leads to a waste of resources, increasing the production cost and energy consumption of the company. Here, this work proposes a hybrid prediction model that combines the advantages of data decomposition and machine learning algorithms to predict the metal cobalt ion concentration in the effluent solution of a section of zinc hydrometallurgy refining purification in factory A. According to the different types of experiments, ablation experiments and contrast experiments are designed in this work under the same training and test data were used in the modelling process. Analytic and experimental results show that the proposed hybrid prediction model has the smallest error and the best fit between the actual and predicted values of cobalt ion concentration, and the appropriate graphs were finally selected for quantitative metrics analysis. The root mean square error was reduced by 95.6%, the mean absolute error by 65.5%, the mean percentage error by 25.6% and the coefficient of determination by 95.6%. The hybrid prediction model not only avoided the pollution of water resources by the cobalt ion concentration discharged in the purification section, which is also of practical significance for the technicians to control the input quantity of zinc powder according to the prediction data in time and reduce the waste of resources.

Keywords: Hydrometallurgy zinc; cobalt ion concentration; data decomposition; machine learning; hybrid modelling

References

- [40] Gao, C., Gao, W., Song, K., Na, H., Tian, F., Zhang, S. (2019). Comprehensive evaluation on energy-water saving effects in iron and steel industry. *Science of the Total Environment*, 670346-360.
- [41] Yu, P., Li, C. (2021). Can the water-saving potential of industrial sectors be quantified? An empirical approach applied on chemical and steel industries of Tianjin and Zhejiang provinces, China. *Science of the Total Environment*, 784147023-147023.
- [42] Zhu, X., He, M., Li, H. (2021). Environmental regulation, governance transformation and the green development of Chinese iron and steel enterprises. *Journal of Cleaner Production*, 328.
- [43] Wang, Y., Wen, Z., Cao, X., Zheng, Z., Xu, J. (2020). Environmental efficiency evaluation of China's iron and steel industry: A process-level data envelopment analysis. *Science of the Total Environment*, 707(C):135903.
- [44] Li, H., Zhu, X., Chen, J., Jiang, F. (2019). Environmental regulations, environmental governance efficiency and the green transformation of China's iron and steel enterprises. *Ecological Economics*, 165106397-106397.
- [45] Gu, Y., Liu, W., Wang, B., Tian, B., Yang, X., Pan, C. (2023). Analysis and Prediction of Energy, Environmental and Economic Potentials in the Iron and Steel Industry of China. *Processes*, 11(12):.
- [46] Wang, T., Jian, S., Wang, J., Yan, D. (2022). Dynamic interaction of water-economic-social-ecological environment complex system under the framework of water resources carrying capacity. *Journal of Cleaner Production*, 368.
- [47] Gao, C., Na, H., Song, K., Tian, F., Strawa, N., Du, T. (2020). Technologies-based potential analysis on saving energy and water of China's iron and steel industry. *Science of the total environment*, 699: 134225.
- [48] Akash, R., Ashish, S., Amit, B., Kumar, A. 2022. Technological advancements for the treatment of steel industry wastewater: Effluent management and sustainable treatment strategies. *Journal of Cleaner Production*, 383.
- [49] Deng, H., Zhang, Y., Kaczan, D., Qiao, Y., Wang, X., Chen, B., Wang, Y. (2023). How has China's industrial eco-efficiency been improved? Evidence from multi-scale countrywide study. *Environ Sci Pollut Res*, 30, 69379–69392.

- [50] Zhang, J., Gao, F., Wang, H. (2017). Allocation of the Environmental Impact in Iron and Steel Industry. *Materials Science Forum*, 2017, 45022413-2421.
- [51] Zeng, J., Li, C., Wang, J., Tang, L., Wu, C., Xue, S. (2022). Pollution simulation and remediation strategy of a zinc smelting site based on multi-source information. *Journal of Hazardous Materials*, 433128774-128774.
- [52] Bin, Y. (2021). Application of Pressurized Hydrometallurgical Technology in Zinc Smelting. *Advances in Material Science*, 5(1):.
- [53] Ogundele, T., Owoade, K., Hopke, K., Olise, F. (2017). Heavy metals in industrially emitted particulate matter in Ile-Ife, Nigeria. *Environmental Research*, 156320-325.
- [54] Zhuang, S., Wang, J. (2023). Efficient adsorptive removal of Cosup2+/sup from aqueous solution using graphene oxide. *Environmental science and pollution research international*, 30(45):101433-101444.
- [55] Israel, D., Youngjae, L., Hyungsoo, K., Sangyoun, L. (2022). Industrial Wastewater Discharge and Compliance Investigation for Environmentally Resilient Rwanda. *Water*, 14(19):3100-3100.
- [56] Zhu, H., Yang, C., Gui, W. (2009). Soft cobalt-ion concentration measurement for purification process based on fuzzy LS-SVM. *Chinese Journal of Scientific Instrument*. 30(6):1224-1227.
- [57] Song, S., Sun, W., Wang, L., Liu, R., Han, H., Hu, Y., Yang, Y. (2018). Recovery of cobalt and zinc from the leaching solution of zinc smelting slag. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 7(1):102777-102777.
- [58] Ni, X., Wei, W., Ding, T., Wen, T., Zhang, L., Deng, Z., Chi, X., Ku, J., Zhong, S. 2023. Extending Ag Nanoparticles as Colorimetric Sensor to Industrial Zinc Electrolyte for Cobalt Ion Detection. *Molecules*, 28(2):592-592.
- [59] Sun, B., Yang, C., Zhu, H., Li, Y., Gui, W. (2018). Modeling, optimization, and control of solution purification process in zinc hydrometallurgy. *IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica*, 5(02):564-576.
- [60] Hidekatsu, T., Tomomi, S., Yu, S., Ryo, M. (2023). Development of microfluidic devices for on-site water quality testing using glass molding process. *Analytical sciences: the international journal of the Japan Society for Analytical Chemistry*, 39(8):1269-1277.
- [61] Yu, Y., Zhang, H. (2023). Research on the water quality detection method based on fluorescence spectrometry and PSO-RBF network. *Measurement*, 218.
- [62] Chen, D., Sun, Z., Yao, S., Xu, S., Yin, B., Guo, D., Yang, G., Ding, S. (2022). Data-driven rapid prediction model for aerodynamic force of high-speed train with arbitrary streamlined head. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 16:1, 2191-2206.
- [63] Montáns, F., Chinesta, F., Gómez-Bombarelli, R., Kutz, J. (2019). Data-driven modeling and learning in science and engineering. *Comptes Rendus Mécanique*, 347(11), 845-855.
- [64] Zhang, W., Xu, M., Yang, H., Wang, X., Zheng, S., Li, X. (2024). Data-driven deep learning approach for thrust prediction of solid rocket motors. *Measurement*, 225114051-.
- [65] Yang, Y., Zhang, S., Yin, Y. (2016). A modified ELM algorithm for the prediction of silicon content in hot metal. *Neural Computing and Applications*, 27(1):241-247.
- [66] Babu, R., Syed, S. (2023). Wind Power Prediction using hybrid ELM algorithm. *Journal of Computer Science and Control Systems*, 16(1):13-15.
- [67] Liu, X., Zhang, Z., Meng, F., Zhang, Y. (2022). Fault diagnosis of wind turbine bearings based on CNN and SSA-ELM. *Journal of Vibration Engineering Technologies*, 11(8):3929-3945.
- [68] Cortes, C., Vapnik, V. (1995). Support vector network. *Machine Learning*, 20(3), 273-295.
- [69] Wang, H., Shao, Y., Zhou, S., Zhang, C., Xiu, N. (2021). Support vector machine classifier via $\mathcal{L}_0/\mathcal{L}_1$ soft-margin loss. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 44(10), 7253-7265.
- [70] Pei, H., Gui, Y., Kong, B., Jiang, Y., Shi, H. (2021). Structural parameters optimization of submerged inlet using least squares support vector machines and improved genetic algorithm-particle swarm optimization approach. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 15:1, 503-511.
- [71] Zhong, W., Ding, H., Zhao, X., Fan, L. (2023). Mechanical properties prediction of geopolymer concrete subjected to high temperature by BP neural network. *Construction and Building Materials*, 409.
- [72] Luo, N. (2024). Methods for controlling heavy metals in environmental soils based on artificial neural networks. *Scientific reports*, 14(1):2563-2563.
- [73] Wang, C., Zhang, G., Yan, J. (2024). An optimized back propagation neural network on small samples spectral data to predict nitrite in water. *Environmental research*, 247118199-118199.
- [74] Chen, D., Cheng, P. (2023). A perceptual image prediction model of professional dress style based on PSO-BP neural network. *Journal of Engineered Fibers and Fabrics*, 18.
- [75] Shi, J., Zhang, Y., Sun, Y., Cao, W., Zhou, L. (2022). Tool life prediction of dicing saw based on PSO-BP neural network. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 123(11-12), 4399-4412.
- [76] Zhang, Q. (2023). Modeling and optimal design of heliostat field based on particle swarm optimization algorithm. *Journal of Electronics and Information Science*, 8(6):.
- [77] Zhao, S., Chen, K., Xiong, B., Guo, C., Dang, Z. (2024). Prediction of adsorption of metal cations by clay minerals using machine learning. *Science of The Total Environment*, 171733.
- [78] Xu, W., Liu, J., Li, J., Wang, H., Xiao, Q. (2024). A novel hybrid intelligent model for molten iron temperature forecasting based on machine learning. *AIMS Mathematics*, 9(1), 1227-1247.
- [79] Yang, K., Wang, Y., Li, M., Li, X., Wang, H., Xiao, Q. (2023). Modeling topological nature of gas-liquid mixing process inside rectangular channel using RBF-NN combined with CEEMDAN-VMD. *Chemical Engineering Science*, 267, 118353.
- [80] Liu, T., Zhang, R. (2024). A machine learning-based hybrid model for fracture parameterization and distribution prediction in unconventional reservoirs. *Computers and Geotechnics*, 168106146-.
- [81] Ransom, K., Nolan, B., Traum, J., Faunt, C., Bell, A., Gronberg, J., Wheeler, D., Rosecrans, Z., Jurgens, B., Schwarz, G., Belitz, K., Eberts, S., Kourakos, G., Harter, T. (2017). hybrid machine learning model to predict and visualize nitrate concentration throughout the Central Valley aquifer, California, USA. *Science of the Total Environment*, 601: 1160-1172.
- [82] Altuncan, Ü., Vanhoucke, M. (2024). A hybrid forecasting model to predict the duration and cost performance of projects with Bayesian networks. *European Journal of Operational Research*, 315(2):511-527.
- [83] Zhou, J., Wei, M., Song, Q., Zhou, Z. (2023). A new hybrid model for photovoltaic output power prediction. *Environmental science and pollution research international*, 30(58):122934-122957.
- [84] Karijadi, I., Mulyana, J. (2020). Application of ensemble empirical mode decomposition based support vector regression model for wind power prediction. *Jurnal Teknik Industri: Jurnal Keilmuan dan Aplikasi Teknik Industri*, 22(1), 11-16.

- [85] Jiang, H., Zhao, K., Chen, L., Fang, D., Cheng, F., Chen, Y. (2023). Automatic bearing diagnosis based on improved empirical wavelet decomposition and nonparametric test. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 37(12), 6245-6256.
- [86] Bhupendra, K., Neha, Y., Sunil. (2024). A novel hybrid algorithm based on Empirical Fourier decomposition and deep learning for wind speed forecasting. *Energy Conversion and Management*, 300.
- [87] Lin, W., Zhang, B., Li, H., Lu, R. (2022). Short-term load forecasting based on EEMD-Adaboost-BP. *Systems Science Control Engineering*, 10(1), 846-.
- [88] Li, S., Han, Y., Gaber, J., Yang, S., Yang, Q. (2023). A multi-antenna spectrum sensing method based on CEEMDAN decomposition combined with wavelet packet analysis. *Electronics*, 12(18):
- [89] Zeng, W., Cao, Y., Feng, L., Fan, J., Zhong, M., Mo, W., Tan, Z. (2023). Hybrid CEEMDAN-DBN-ELM for online DGA serials and transformer status forecasting. *Electric Power Systems Research*, 217.
- [90] Sridhar, S., Romney, A., Manian, V. (2023). A deep neural network for working memory load prediction from EEG ensemble empirical mode decomposition. *Information*, 14(9):.
- [91] Wu, Z., Huang, N. (2009). Ensemble empirical mode decomposition: a noise-assisted data analysis method. *Advances in Adaptive Data Analysis*, 1(1), 1-41.[43]
- [92] Wu, B., Sun, L. (2024). A novel layer-by-layer recursive decomposition algorithm for calculation of network reliability. *Reliability Engineering and System Safety*, 244109968-.
- [93] Jiang, X., Chen, N., Huang, J., Li, Y., Luo, X. (2023). Prediction of the total solar irradiance based on the CEEMDAN-BiGRU-Attention model. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 45(3), 6638-6654.
- [94] Zhao, J., Nie, G., Yan, M., Wang, Y., Wang, L. (2023). A novel approach to precipitation prediction using a coupled CEEMDAN-GRU-transformer model with permutation entropy algorithm. *Water science and technology: a journal of the International Association on Water Pollution Research*, 88(4), 1015-1038.
- [95] Ahsan, A., Sajid, I., Abdul, H., Mudassir, H., Hussain, B., JongSuk, R., Zeeshan, A. (2022). Application of 0-1 test for chaos on forward converter to study the nonlinear dynamics. *Scientific reports*, 12(1), 15696-15696.
- [96] Toker, D., Sommer, F., D', E. (2020). A simple method for detecting chaos in nature. *Communications biology*, 3(1), 11.
- [97] Aviso, K., Janairo, J., Promentilla, M., Tan, R. (2019). Prediction of CO2 storage site integrity with rough set-based machine learning. *Clean Techn Environ Policy*, 21, 1655-1664.
- [98] Ooi, J., Aung, G., Chong, W., Tan, R., Aviso, B., Chemmangattuvalappil, G. (2022). Design of fragrance molecules using computer-aided molecular design with machine learning. *Computers and Chemical Engineering*, 157.
- [99] Xin, C., Xia, H., Jiang, G., Zhang, Q., Zhang, L., Xu, Y. (2022). Studies on recovery of valuable metals by leaching lead-zinc smelting waste with sulfuric acid. *Minerals*, 12(10), 1200-1200.
- [100] Zhang, Q., Yin, M., Zhang, Q., Beiyuan, J., Liu, J., Yang, X., Wang, L., Jiang, Y., Xiao, T., Zhang, Z. (2020). Cadmium isotopic fractionation in lead-zinc smelting process and signatures in fluvial sediments. *Journal of Hazardous Materials*, 411(prepublish), 125015-.
- [101] Zhang, J., Wang, Y., Niu, F., Zhang, H., Li, S., Wang, Y. (2023). Parameterization of multi-angle shaker based on PSO-BP neural network. *Minerals*, 13(7):.
- [102] Sinuhaji, P., Wismogroho, S., Sinaga, T., Siregar, K. (2020). The utilization of carbonized coffee in purifying zinc dross waste by pyrometallurgy method. *Case Studies in Thermal Engineering*, 17100576-100576.
- [103] Chen, W., Dai, Y., Liu, Z., Zhang, H. (2024). The evolution of global zinc trade network: Patterns and implications. *Resources Policy*, 90104727-.
- [104] Zhu, H., Shang, Y., Du, J., Zhou, C., Liu, X. (2023). A fuzzy control method based on rule extraction for zinc leaching process of zinc hydrometallurgy. *Mining, Metallurgy Exploration*, 40(4), 1321-1331.
- [105] Zhang, J., Wang, T., Ren, C., Zhang, L., Zhang, L., Yang, K. (2023). Ozonation precipitation for iron removal in zinc hydrometallurgy. *Canadian Metallurgical Quarterly*, 62(1):99-106.
- [106] Xu, Y., Qu, D., Xia, H., Zhang, Q., Zhang, L. (2023). Migration behavior of germanium and its related elements in zinc hydrometallurgy process. *Separation and Purification Technology*, 330(PB):.
- [107] Wan, Q., Zhu, H., Cheng, F., Yuan, J., Yang, C., Zhou, C. (2024). Automatic detection system with efficient and accurate sample preparation for cobalt ion concentration in zinc hydrometallurgy. *Microchemical Journal*, 199109991-.
- [108] Qi, C., Ye, L., Ma, X., Yang, D., Hong, J. (2017). Life cycle assessment of the hydrometallurgical zinc production chain in China. *Journal of Cleaner Production*, 156451-458.
- [109] Dong, J., Wang, Z., Wu, J., Huang, J., Zhang, C. (2023). A water quality prediction model based on signal decomposition and ensemble deep learning techniques. *Water science and technology: a journal of the International Association on Water Pollution Research*, 88(10):2611-2632.
- [110] Huang, N., Shen, Z., Long, S., Wu, M., Shih, H., Zheng, Q., Yen, N., Tung, C., Liu, H. (1998). The empirical mode decomposition and the hilbert spectrum for nonlinear and non-stationary time series analysis. *Proceedings Mathematical Physical & Engineering Sciences*, 454(1971), 903-995.
- [111] Yang, X., Ye, X., Li, Z., Wang, X., Song, X., Liao, M., Liu, X., Guo, Q. (2024). Hybrid energy storage configuration method for wind power microgrid based on EMD decomposition and two-stage robust approach. *Scientific reports*, 14(1):2733-2733.
- [112] Yan, Z., Lu, X., Lu, X., Wu, L. (2023). Exploring the effect of meteorological factors on predicting hourly water levels based on CEEMDAN and LSTM. *Water*, 15(18), 3190.
- [113] Chen, Y., Khong, E. (2022). A stacked forecasting model-CEEMDAN-BPMs model. *Academic Journal of Computing Information Science*, 5.0(9.0):.
- [114] Martinovič, T. (2020). Alternative approaches of evaluating the 0-1 test for chaos. *International Journal of Computer Mathematics*, 97(1-2):508-521.
- [115] Hashash, E., Shiekh, A. (2022). A comparison of the Pearson, Spearman Rank and Kendall tau correlation coefficients using quantitative variables. *Asian Journal of Probability and Statistics*, 36-48.
- [116] Yang, S., Li, X., Gong, Z., Gong, Z., Li, D., Cheng, X., Cai, W. (2021). New principle of pilot protection based on Kendall's rank correlation coefficient. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 827(1):.
- [117] Luo, Z., Zou, X. (2023). Pricing and replenishment decision of vegetable goods based on LSTM and XG-Boost models. *Information Systems and Economics*, 4(10):
- [118] Peng, Y., Unluer, C. (2024). Interpretable machine learning-based analysis of hydration and carbonation of carbonated reactive magnesia cement mixes. *Journal of Cleaner Production*, 434140054-.

- [119] Li, X., Ran, Z., Zheng, D., Hu, C., Qin, Z., Wang, Z., Li, P. (2024). Dynamic bond stress-slip relationship of steel reinforcing bars in concrete based on XGBoost algorithm. *Journal of Building Engineering*, 84108368-.
- [120] Anushka, J., Chalavadi, V., Krishna, C., Balasubramanian, R. (2023). Application of XGBoost model for early prediction of earthquake magnitude from waveform data. *Journal of Earth System Science*, 133(1):.
- [121] Yang, K., Liu, J., Wang, M., Wang, H., Xiao, Q. (2023). Identifying flow patterns in a narrow channel via feature extraction of conductivity measurements with a support vector machine. *Sensors*, 23(4), 1907-1907.
- [122] Arya, K., Akhavan, T. (2023). An online support vector machine algorithm for dynamic social network monitoring. *Neural networks : the official journal of the International Neural Network Society*, 171497-511.
- [123] Shi, X., Li, Y., Sun, B., Xu, H., Yang, C., Zhu, H. (2020). Optimizing zinc electrowinning processes with current switching via deep deterministic policy gradient learning. *Neurocomputing*, 380, 190-200.
- [124] Qi, C., Hu, T., Zheng, J., Li, K., Zhou, N., Zhou, M., Chen, Q. (2024). Artificial intelligence-based prediction model for the elemental occurrence form of tailings and mine wastes. *Environmental Research*, 249118378-.
- [125] Liu, S., Deng, L., Xu, H., Wei, W. (2023). LogBD: A Log Anomaly Detection Method Based on Pretrained Models and Domain Adaptation. *Applied Sciences*, 13(13):
- [126] Zhou, Y., Hu, Q., Wang, Y. (2018). Deep super-class learning for long-tail distributed image classification. *Pattern Recognition*, 80, 118-128.

无个人简介

附：报告人是学生

2. 特邀报告

基于强化学习的化工过程设计和过程控制

洪小东^{1,2}, 寿洲鹏¹, 谭辉¹, 廖祖维^{1,*}, 王靖岱¹, 阳永荣¹

¹浙江大学, 化学工程与生物工程学院, 杭州, 中国, 310058

²浙江大学, 浙江大学杭州国际科创中心, 杭州, 中国, 310058

*Email: liaozw@zju.edu.cn

摘要正文: 近年来, 随着强化学习和计算机技术的迅速发展, 强化学习在处理复杂决策上展现了出色的性能。化工过程设计和控制通常具有非凸非线性的特点, 使用传统算法无法高效求解复杂问题, 部分研究学者将强化学习用于过程设计研究, 取得初步成果^[1]。针对大规模换热网络案例, 我们提出了一种强化学习优化换热网络结构的策略^[2]。首先通过求解简单模型获得一个初始换热网络结构, 并根据最小换热网络特性将其表示为简单数组。随后基于此数组表示, 生成相应的结构调整策略。强化学习则基于Q-Learning学习策略和epsilon-贪心选择策略, 实现了对换热网络结构的调整和优化。强化学习通过迭代过程积累换热网络结构调整的经验, 并用于指导后续的优化过程。最终实现了对大规模换热网络案例的优化。针对气相法聚烯烃流化床温度控制系统存在的非线性、大时滞特点, 提出一种基于深度强化学习(DRL)的流化床反应器温度控制方案和训练方法^[3]。采用分步训练的策略得到深度强化学习控制器, 结果表明相比于传统PID控制器, DRL控制器在非线性和大时滞过程有优异的设定跟踪性能和干扰抑制性能, 各个工况下仿真实验的积分绝对误差值远小于PID控制器。与工业传统的PID-PID串级控制相比, 提出的PID-DRL、DRL-DRL串级控制的设定跟踪和干扰抑制性能更好, 仿真实验的积分绝对误差值更小。PID-DRL和DRL-DRL串级控制主回路控制器稳定反应器温度, 对各种干扰产生响应信号变送至副回路; 副回路DRL控制器对主回路快速响应, 抑制对反应器温度的各种干扰。提出的基于深度强化学习复合串级控制结构为聚乙烯流化床温度控制设计提供新思路。

关键词: 强化学习; 换热网络; 过程设计; 过程控制。

参考文献

- [1] L. Stop, R. Leenhouts, Q. Gao, A.M. Schweidtmann. Flowsheet generation through hierarchical reinforcement learning and graph neural networks. *AIChE J.* 2022, 69: e17938.
- [2] H. Tan, X. Hong, Z. Liao, J. Sun, Y. Yang, J. Wang, Y. Yang. Combining reinforcement learning with mathematical programming: An approach for optimal design of heat exchanger networks. *Chin. J. Chem. Eng.* 2024, 69: 63.
- [3] X. Hong, Z. Shou, W. Chen, Z. Liao, J. Sun, Y. Yang, J. Wang, Y. Yang. A reinforcement learning-based temperature control of fluidized bed reactor in gas-phase polyethylene process. *Comput. Chem. Eng.* 2024, 183: 108588.

报告人/墙报展示人简介:



廖祖维, 国家优青, 教授, 博士生导师, 浙江大学求是青年学者。中国系统工程学会过程工程专业委员会委员、《Scientific Reports》期刊编委。研究领域过程系统工程。发表SCI论文100余篇, 获授权发明专利30余项, 主持国家自然科学基金3项、国家国际科技合作项目1项。获2016年国家技术发明二等奖(5/6)、2016年教育部技术发明一等奖(5/6)、2020年石油和化学工业联合会科技进步一等奖(2/15)、首届石化行业专利优秀奖(2/12)、2023年石油和化学工业联合会

科技进步一等奖（1/15）。2020年获侯德榜化工科技青年奖，2021年获陈家镛论文奖，2019年入选美国化学会 Industrial & Engineering Chemistry Research 期刊评选的全球 Class of Influential Researchers。附：报告人非学生

基于 CFD 和机器学习的变径搅拌槽反应器研发

李安琪¹, 姚远¹, 张鑫¹, 万玉¹, 王运东², 刘作华^{1*}, 陶长元^{1*}

¹重庆大学化学化工学院, 重庆 401331

²清华大学化工系, 北京 100084

*Email: taocy@cqu.edu.cn, and liuzuohua@cqu.edu.cn

摘要正文: 搅拌槽反应器广泛应用于化工、冶金、制药和食品等过程行业。然而, 流场中的隔离区和中心涡耗散结构严重限制了反应器内的传质、传热以及化学反应速率。因此, 深入研究搅拌槽反应器中耗散结构的特征及其非线性动力学行为对于强化流体混沌混合至关重要。研究受“揉面团”过程的启发, 提出“挤压诱发混沌”的过程强化概念, 利用平面激光诱导荧光 (PLIF) 和计算流体力学耦合离散颗粒模拟 (CFD-DPM) 方法, 研发了一种变径搅拌槽反应器 (即椭圆或矩形搅拌槽反应器)。结果表明, 变径搅拌槽反应器能够有效消除层流流场中的隔离区和湍流流场中的中心涡。此外, 相比于圆柱形搅拌槽反应器, 在层流状态下, 变径搅拌槽反应器内面积覆盖率提高约1.8倍, 混合时间缩短约5倍; 在湍流状态下, 变径搅拌槽反应器气体卷吸能力大大提高。进一步, 为了便于从业人员高效操作和设备选型, 研究利用机器学习建立了不同设备参数和操作参数下流型的智能分类模型, 人工神经网络 (ANN) 分类模型的预测准确率高达99%。

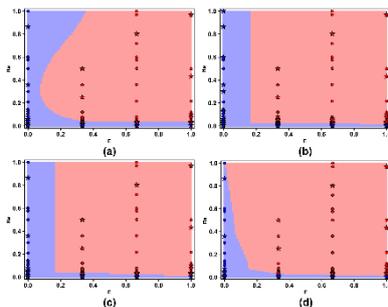


Fig. 1 Classification of flow patterns in laminar diameter-transformed stirred tank reactors based on different machine learning models. (a) Support vector machine, SVM; (b) Decision tree, DT; (c) Random forest, RF; (d) Artificial neural network, ANN.

关键词: 搅拌槽反应器; 混合; 混沌; 过程强化; 机器学习

参考文献

- [1] A. Q. Li, Y. Yao, X. Y. Tang, P. Q. Liu, Q. Zhang, Q. Li, P. Li, F. Zhang, Y. D. Wang, C. Y. Tao, Z. H. Liu. Experimental and computational investigation of chaotic advection mixing in laminar rectangular stirred tanks. *Chem. Eng. J.* 2024, 485: 149956.

报告人简介:



李安琪, 于 2019 年 6 月获得武汉轻工大学化学工程与工艺专业工学学士学位, 2022 年 6 月获得中国科学院大学化学工程专业工学硕士学位, 导师为中国科学院大连化学物理研究所叶茂研究员。主要研究方向为多相流测量与模拟。现为重庆大学 2022 级化学工程与技术专业在读学术博士研究生, 导师为刘作华教授。研究方向为 AI 赋能化工过程强化。截至目前, 以第一作者身份已发表中科院一区论文 2 篇, 申请国家发明专利 5 件 (导师第一), 参与国内外会议 10 余次, 曾荣获第三届国际化工过程强化大会卓越学生奖 (IPIC3 Excellence Student Award)。**报告人: 学生 (在读博士研究生)**

非线性强化搅拌技术在二次高含钢物料回收中的应用

刘乾坤¹, 徐建新^{1,*}

¹昆明理工大学, 冶金与能源工程学院, 昆明, 650000

^{1,*} 昆明理工大学, 冶金与能源工程学院, 昆明, 650000

Email: qiankun.liu17@foxmail.com, xujianxina@163.com

摘要: 在固废资源循环利用领域, 反应釜及其配套搅拌技术是多数回收工艺流程的核心环节, 其直接关系到目标产物回收效率和成本。针对二次高含钢物料浸出过程中控制手段单一、输入不可调及评价手段少的问题, 当前工作提出了一种基于RBF-PID的混沌搅拌技术。该技术精准逼近输入与输出之间复杂的非线性关系, 控制响应速度更快, 对搅拌速度具有自适应和自学习能力。此外, 初步完成了混沌混合陀螺仪实时诊断系统, 以无序超均匀算法为评价手段, 实现多维度混合效果量化。最后, 以DEM-VOF耦合模型对多相混合过程进行计算, 混合指数提升20.3%, 有效促进多相间混合传质。本研究实现了多相流的动态输入控制及效果评价, 为多相非均质体系混合的工艺流程提供技术支持和实际生产指导。

关键词: 混合性能; 反应釜; 多相流

图智均衡——智能图像处理技术在气液两相流混合度检测应用

王明建¹, 徐建新^{1,*}

¹昆明理工大学, 云南省昆明市一二一大街文昌路 68 号, 650093

*Email: xujianxina@163.com

摘要正文: 在火法冶金过程中, 气液两相流混合均匀度的评价具有至关重要的作用。均匀的气液混合能够显著提升反应效率, 确保反应物质与介质充分接触, 促进快速且完整的反应, 提高冶炼过程的效率和生产率。在此过程中, 喷枪的角度、结构、气体流速等多种因素会对气泡在空间中的分布产生影响。在实验室条件下、搭建水模型实验平台, 采用图像处理与统计数学的方法(平均距离法、贝蒂数方法)对气液两相流中的气泡在空间的分布状况进行了量化处理, 并采用严格的数值与实验的方法验证了我们评价指标的正确性。并且我们开发了一套能够神经网络捕捉单个气泡运动轨迹的模型。通过该模型可以深入了解单个气泡在液相中的运动状态。气液两相流混合度评价指标、单个气泡估计捕捉模型能够为强化冶金过程提供指导。

关键词: 图像处理; 气液两相流; 气泡

参考文献

- [1] Ascanio, G., 2015. Chinese Journal of Chemical Engineering Mixing time in stirred vessels: a review of experimental techniques q. CICHE. 23, 1065–1076
- [2] Y. Hyun, J. Hyun, W. Chun, Y. Kang, An experimental investigation into the operation of a direct contact heat exchanger for solar exploitation, Int. Commun. Heat Mass Transfer 32 (3) (2005) 425–434.
- [3] Zhang Yiling, Yang Yan, Zhou Wei, Wang Hao, Ouyang Xiaocao. Multi-city traffic flow forecasting via multi-task learning[J]. Applied Intelligence: The International Journal of Artificial Intelligence, Neural Networks, and Complex Problem-Solving Technologies, 2021, 51(10): 6895–6913
- [4] R.F. van Schalkwyk, J.J. Eksteen, J. Petersen, E.L. Thyse, G. Akdogan. An experimental evaluation of the leaching kinetics of PGM-containing Ni–Cu–Fe–S Peirce Smith converter matte, under atmospheric leach conditions, [J] Minerals Engineering, 2011, 24(6): 524–534,
- [5] A. K. Kylo & G. G. Richards. A kinetic model of the peirce-smith converter: Part I. Model formulation and validation. [J]. Metallurgical and Materials Transactions B 1998, 29: 239–249.
- [6] H. Azarkish, S. Arslan, A. Behzadmehr, T.F. Sheikholeslami, S.M.H. Sarvari, L. G. Frechette, Experimental and numerical investigation of a shaped microchannel evaporator for a micro Rankine cycle application, Int. J. Therm. Sci. 96 (2015) 191–200,

报告人/墙报展示人简介:

徐建新：教授，博士生导师，现任昆明理工大学矿冶数智技术研究院院长，致力于冶金炉窑热过程非线性强化、冶金过程数字化、智能化等研究。英国曼彻斯特大学访问学者。兼任中国化工学会混合与搅拌专业委员会副主任委员，中国工程热物理学会多相流分会委员，中国计量测试学会热物性专委会委员，中国有色金属学会节能减排专委会委员，云南省质量工程专业正高级专业技术资格评审委员会专家等。、发表论文 100 余篇，其中 SCI 论文 40 余篇。专著 4 部；授权发明专利 25 项，获云南省研究生教学成果二等奖 1 项、中国发明协会发明二等奖 1 项、云南省自然科学一等奖 1 项、中国有色金属工业技术发明一等奖 2 项、首届冶金优秀青年支撑计划二等奖、云南省科技进步特等奖 1 项、中国有色金属工业科技进步一等奖 1 项、中国有色金属出版物奖图书二等奖、云南省优博、第七届中国国际“互联网+”大学生创新创业大赛银奖、第一届全国博士后创新创业大赛铜奖。



BDAIPE 2024



官方网站



照片直播

鲸跃(北京)科技有限公司提供会议服务
王丛, 13810305058