

· 科学论坛 ·

化学品智能制造的科学基础^{*}

王 凯¹ 袁志宏¹ 王笑楠¹ 骆广生^{1**} 周 晨² 张国俊^{2**}

1. 清华大学 化学工程系, 北京 100084

2. 国家自然科学基金委员会 化学科学部, 北京 100085

[摘 要] 基于第 318 期“双清论坛”, 面向通过人工智能技术促进化工基础理论发展和指导产业化实践的目标, 本文介绍了化学品智能制造的科学背景, 凝练了人工智能方法与化工基础研究和产业化实践深度融合的关键科学问题, 展示了近年来化学品制造工艺变革、技术和装备创新、系统集成和优化控制等方面的研究进展, 对化工过程智能化研究提出建议, 推动我国在化学品智能制造原理和方法上的重大创新。

[关键词] 智能制造; 化工过程智能化; 智能分子设计; 技术和装备创新; 系统集成; 优化控制

化学工业为服务我国经济社会发展发挥了重要作用, 面对目前在安全、环保、资源等领域的全球性挑战, 提升我国化工行业的基础研究能力及科技水平, 实现化学品制造过程绿色、安全、环保是国家的重大战略需求。在计算机和电子信息技术的引领下, 近年来化工行业不断向数字化、智能化转型升级, 人工智能已融入化工基础研究和化工生产过程。面向化工核心技术和产品的重大需求, 国家自然科学基金委员会化学科学部联合信息科学部、工程与材料科学部、计划与政策局组织召开了第 318 期“双清论坛”。该论坛聚焦数字驱动的化工过程转型升级, 深入研讨了化学品制造工艺、技术和装备、系统集成和优化控制等方面的关键科学问题, 总结了化工智能化发展过程中亟待建立的理论基础和亟需解决的关键难题。

1 研究基础和科学意义

化学工程学科的任务是研究物质化学转化过程的科学原理, 揭示转化过程的效率和产品性能的影响机制与规律, 建立物质转化的经济性方法, 发展与工业化相适应的新工艺、新技术和新装备。近年来, 面向国家重大需求和科学前沿, 在经典的化工“三传一反”理论基础上, 化工基础研究进一步聚焦于新过



骆广生 清华大学教授, 教育部长江学者特聘教授, 国家杰出青年科学基金获得者, 化学工程联合国家重点实验室主任。主要从事微化工技术、分离科学与技术、化工过程智能化等方面的研究工作。发表 SCI 论文 500 余篇, 授权发明专利 100 余项, 获国家技术发明奖二等奖和国家科技进步奖二等奖各 1 项、省部委科技奖励 9 项。



张国俊 博士, 研究员, 国家自然科学基金委员会化学科学部化学五处处长兼化学工程项目主任。自 2012 年起在国家自然科学基金委员会化学科学部工作, 历任工业化学项目主任、能源化学项目主任、化学工程项目主任。



王凯 清华大学副教授。主要从事微尺度多相流和微反应器研究, 近年来发展了基于深度学习的微分散实验和建模方法, 在微化工领域发表 SCI 论文 150 余篇, 授权发明专利 50 余项, 以第一完成人获得中国化工学会基础研究成果奖一等奖, 入选国家级青年人才计划。

程、新材料、新装备、新系统等前沿方向。随着数据科学的快速发展, 化工基础研究范式正在悄然发生变革, 传统的“实验—理论—实践”正向“数据—模

收稿日期: 2023-02-26; 修回日期: 2023-04-22

^{*} 本文根据第 318 期“双清论坛”讨论的内容整理。

^{**} 通信作者, Email: gsluo@tsinghua.edu.cn; zhanggj@nsfc.gov.cn

型—实践”的模式转变,数据驱动的物质转化过程推动化工过程向“智能化”方向发展^[1]。

化工过程智能化的主要目的是在化工基础研究、技术开发、生产实践等环节引入人工智能方法,以大数据和机器学习等方式总结以往研究成果和生产经验,在人工智能模型的辅助下变革化工生产过程,实现人工智能与化学工程的深度融合。总体上讲,化工过程智能化可以分为化工基础研究智能化和化学品工业制造智能化两部分^[2],如图1所示。在基础研究中,化工过程的智能化依托化学、化工大数据库,深度挖掘化工数据背后的科学逻辑和科学规律,深化人工智能方法在化学品合成路线创新和化工装备开发中的促进与强化作用,实现化工研究平台的自主优化和调控,提升化工基础研究能力和化工新技术的开发效率。在工业制造方面,化工过程的智能化使人工智能程序对化工供应链、生产系统、可持续发展因素等进行系统性控制、调度和优化,完善化工原料和能源供给、装备运行、优化管控和环保单元等的全生命周期管理,形成人、机、物相结合的智能决策,促进化学品安全、可控生产,实现化工过程从自动化、数字化到智能化的飞跃。

化工基础研究智能化和工业制造智能化相辅相成,前者能够更为高效、精准地建立化学品制造的理论与方法,为后者提供决策与调控的规律和依据;后者所积累的操作、运维、管控等实践知识能够反哺前者理论、方法与模型的完善和提升。当前,面向化工过程智能化的科学研究主要集中在工艺、装备、系统三个层次,核心要素包括融合知识的基础数据库建

设、化学品构效关系的建立和预测、理化性质的精确调控、反应/合成路线的智能设计、生产装备的智能化开发、工业流程智能运转和优化等。通过化工过程的智能化之路,有望切实提升我国化工学科基础研究水平,强化化学品研发、制造和绿色安全生产的能力,引领学科发展和产业变革,使我国化学工程学科引领国际前沿科学的发展。

2 科学目标与关键科学问题

2.1 化学品智能制造的科学目标

随着大数据、云计算等信息技术的快速发展,以机器学习为代表的人工智能技术带动了整个制造业向智能化方向的发展。在化学工程领域,为了实现化学品的智能制造,需要达成以下科学目标:

(1) 构建面向人工智能的化学、化工基础大数据:基于文献数据挖掘、自动化高通量实验、计算机模拟等先进手段,建立和完善知识融合的化学、化工大数据库,形成大数据标记、存储、共享等环节的系统性方法,为人工智能模型的准确建立提供数据基础。

(2) 形成数据驱动和机理驱动相融合的科学规律认知:围绕功能小分子、高性能聚合物、先进催化剂、生物医药材料等产业前沿,建立准确反映分子或材料构效关系的机器学习模型,开发机器学习模型指导的化学品合成路线,利用人工智能方法深化科学规律的认识,促进化工过程模型化的发展,指导先进化工装备的研制、开发和运用,形成化工过程智能化的软硬件基础。

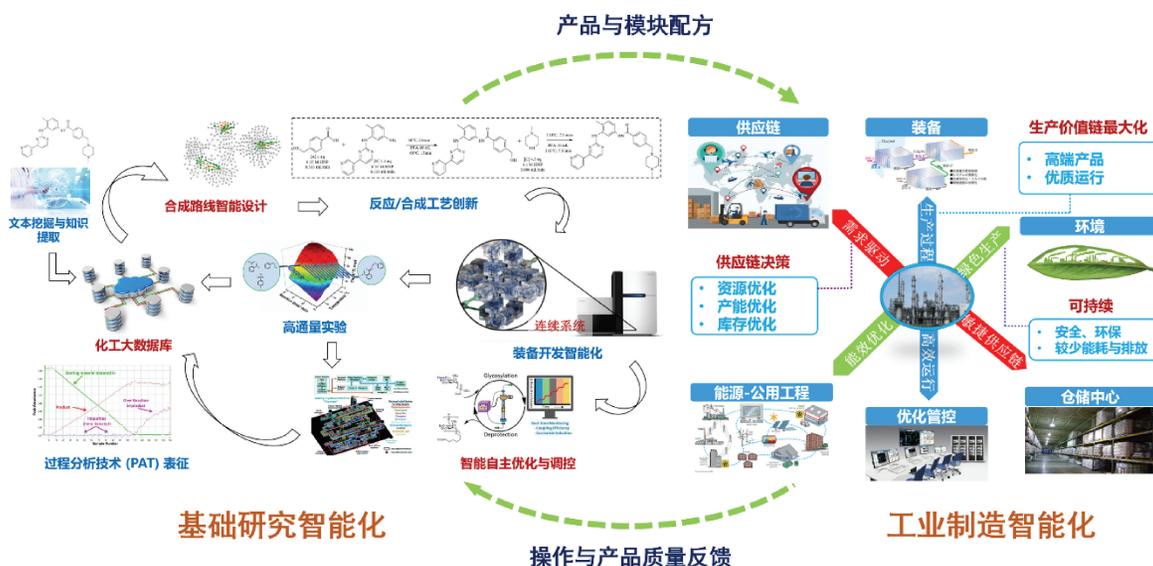


图1 化工过程智能化及化学品智能制造核心要素

(3) 实现化学品生产系统的智能控制、优化、运行；通过化学、化工大数据和机器学习模型打通化工生产系统快速感知、准确建模、合理决策之间的技术壁垒，创新化工过程数字化和信息化控制机制，建立化工智能安全监测和报警系统，实现化工生产系统的高度智能化，保障智能化工系统的可靠运行。

2.2 化学品智能制造的关键科学问题

为了实现人工智能与化工过程的深度结合，化学工程学科需要在化工基础理论研究和实践中有效运用人工智能方法，针对化工产品种类多、过程复杂程度高、生产流程长等特殊开发人工智能算法和模型。为此，在实现化学品智能制造的过程中需要深入探讨如下四项关键科学问题：

(1) 分子/材料构效关系和化工大数据的构建策略。分子或材料构效关系的可靠预测及其合成路线设计是人工智能助力化学品制造的重要途径，如何通过文献挖掘、理论计算、高通量实验等方法建立关键、可信、统一的构效关系数据集及其指导的机器学习模型是分子和材料合成工艺智能化的关键问题。以此为基础，进一步发展分子和材料关键基础数据的标记、存储和共享方法，建立数据驱动下高端化学品基因组学是有待深入研究的重要方向。

(2) 数据驱动和机理驱动在化工过程模型化中的互补机制。基于大数据的机器学习模型为化工过程的模型化提供了新方法，但其复杂程度高、可解释性差、泛化能力弱等问题也在一定程度上限制了模型的拓展和应用，与化工机理模型的有机结合是强化人工智能方法的重要途径。针对化工过程多尺度、跨层次的特点，如何将机理表达式或模型融合到人工智能模型中，是实现数据驱动和科学机制驱动深度融合的关键科学问题，也是化工过程模型化的重要发展方向。

(3) 基于人工智能的化工“三传一反”基础研究与应用。以机器学习为代表的人工智能模型一方面为指导化工工艺设计和建立化工模型奠定基础，另一方面也为揭示未知科学原理和科学规律提供了新手段。面向化工基础科学规律的深入探索，如何建立智能化研究手段，揭示化工过程的介尺度结构特点，阐明复杂体系的热力学和动力学特征，指导高效、安全、环保的化工装备和技术开发是重要的科学问题，也是进行化工新认知和探索化工新理论的重要途径。

(4) 面向化工系统工程的人工智能原理和方法。化工过程的数字化、智能化是化工技术发展的必然趋势，化工系统工程方向已成为化学工程领域应用人工智能技术的先驱，围绕复杂化学转化、多目标优化协同、复杂系统协作等科学难题，在系统工程层面，如何对化工全流程行为特性进行精准表征与实时监控，认识跨层级、多目标的自主协同优化决策与调控机制，形成智能安全预警和预测性维护理论等是化工系统工程智能化的关键科学问题与重要研究方向。

3 化学品智能制造的研究进展

3.1 数据驱动的化学品制造工艺变革

化学品制造过程的本质是将原料分子转化为产品分子并完成分离纯化的过程，其智能化首先体现在分子设计和制造工艺上^[3,4]。随着我国化学工业的不断进步，应用于精准医疗、光电显示、智能传感、芯片制造、能源催化等领域的高端化学品成为了化学工业发展的关键方向，而数据驱动的智能制造是进行功能分子理性设计、化学品绿色合成路线开发、化学品制造工艺构建及优化的重要手段，是化工产业链高值化延伸的关键性策略^[5]。

人工智能主导的智能分子工程是从分子水平出发，构建具有特定功能的化学品生产体系的工程思想，是高端化学品制造发展的必然趋势。系统掌握分子结构和性能之间的定量关系是人工智能助力化学品制造的关键核心，但这类关系也具有参数信息量大、难以进行简单数学描述、机制关系错综复杂等特点。机器学习模型是对复杂信息进行综合辨析的有效方法，它通过非常规的逻辑和回归运算解析分子结构和性能之间的概率关系，指导特定分子合成路线的优化筛选^[6]。在医药合成领域，文献报道表明深度神经网络模型可以帮助开发人员搜寻低成本、高收率的原料药或中间体合成路线，加速新药的研发过程^[7]。

人工智能对化学品制造技术的影响不仅体现在合成方法和路线上，还体现在对分子热力学和动力学性质的认知方面，对于复杂分子体系具有重要意义。例如，以生物大分子为代表的复杂分子结构具有特定的热力学和动力学性质，但经典的热力学参数回归难以对这类分子的性质进行准确预测，导致其复杂结构难以被认知。机器学习模型的引入能为认识复杂分子的构效关系提供新方法和新手段。研

究结果表明,单纯的热力学方法和基于人工智能的经验回归都不能很好地解决分子性质的认知问题,只有将人工智能方法与分子热力学参数相结合才能实现数据驱动的认识创新^[8]。兼具分子特性和结构特征的介观结构单元描述符是机器学习模型构建的基础,明辨介观结构的熵贡献是实现数据和机理驱动深度耦合的关键。这种“基础数据—模型方法—系统优化”相结合的研究策略是精准构建性能与结构间定量关系的核心。

除了助力合成路线开发和促进分子认知水平的提升,人工智能方法同样助力高端催化材料的设计、开发和可控制造^[9]。近年来,计算化学方法极大促进了催化反应工程的进步,但量子化学模型的巨大计算量仍然制约着基于第一性原理的计算方法在较大规模范围内的应用。机器学习模型与计算化学的结合有望突破传统模拟尺度的限制,发展快速预测催化剂活性、选择性和稳定性的新工具,实现新型催化材料的高通量筛选,突破高性能催化剂设计开发的技术瓶颈。在此基础上,进一步以化学反应网络为核心,整合反应中间体、催化剂、谱学表征、理论计算、反应器设计等多模态化学信息和数据,将数据驱动的方法深度引入催化反应工程技术的开发和应用领域具有重大意义^[10, 11],加速化学品和新催化材料的设计和应用,深刻影响材料化学品制造工艺的变革。

3.2 面向化学品智能制造的技术与装备创新

围绕化工安全与绿色发展的国家战略,聚焦能源安全、高端化学品精准制造、战略资源绿色利用等关键核心问题,开展人工智能辅助的化工技术和装备创新具有重要的战略意义。化学品的智能制造一方面需要依靠先进的人工智能技术引导新型反应工艺和路线的开发;另一方面人工智能指导的化学品制造过程也需要依托高效、绿色、安全的化工装备来实施。围绕化学品的智能制造,化工装备和技术创新的意义还在于有效服务化学、化工数据库的建立和运行,以及新型反应和分离装备的开发与应用^[12, 13]。

在当今世界,数据已成为最重要的生产资源和要素之一,信息化、数字化转型升级尤其需要重视数据挖掘和管理工作。对于数据驱动的化学品智能制造,构建符合机器学习建模思路的化学、化工数据库至关重要,然而以往的化学数据库主要以热力学数据和化学合成收率、选择性参数为主,面向化

工流体力学、反应动力学、界表面科学、传递科学的数据库则少有报道。化工自动化技术的快速发展为化工大数据的快速获取提供了基础^[14],云计算等信息化技术的发展也为打造网络实验室提供了可能,通过网络信息化技术可对化工数据库进行补充、整理和高效互联应用。研究报道表明,自动化和机器学习的结合可以极大地提升科学实验效率,发挥人工智能在高通量筛选、合成及放大等方面的效能^[15]。

面向化工装备和过程创新,人工智能方法在化学反应器开发方面发挥了重要作用。基于神经网络模型的图像识别方法是复杂多相反应器研发的重要工具,此类机器学习模型技术的应用可以大幅提升反应器内液滴、气泡的识别效率,进而分析流体颗粒的球形度、相含率、运动速度等关键数据,对于反应器结构的优化和反应器操作性能的改善具有重要指导意义^[16]。基于贝叶斯优化的人工智能方法是化学反应工艺条件优化的重要手段,可在有限的条件下将反应参数优化和工艺实验深入融合,从而大幅减少反应装置和工艺的研发时间^[17]。除了常规反应器以外,近年来微反应器和人工智能的结合成为了化工智能化领域的前沿方向,利用深度学习技术可以对微尺度多相流的流型识别和划分做出判断,从而提升微反应过程控制的可靠性^[18]。针对微反应器结构复杂,流体混合状态难以用数学模型统一描述的问题,人工智能方法也为微化工技术的模型化提供了新思路。

3.3 智能化工过程的系统集成和优化控制

除了工艺和装备两个维度,系统工程维度更是化工过程智能化理论与方法应用的重要舞台。目前在化学品制造和能源供给系统的集成优化设计、泛在信息实时感知、智能优化决策与调控、安环监控与溯源、供需体系协同优化等方面均出现了人工智能方法的身影^[19]。

化学品制造过程中,“能质转化”的优化调控是国内外共同关注的前沿难题,成功解决这一难题需要攻克众多关键科学与技术挑战,例如:构建融合多源数据和复杂物质转化机制的人工智能方法,实现化学品制造过程的准确表征与认识;发展人、机、物三元协同策略,驱动多尺度智能决策的实现;耦合数字模型和机理模型,实现化学品制造过程多目标协同优化;产学研深度协同,发展自主工业软件以缓解和解决“卡脖子”风险等。因此,探索多源异构数据

精准解析、全流程实时自主智能调控、跨层级智能优化决策、跨区域资源能源协同等理论与方法是化工系统工程智能化发展的重要方向^[4]。

随着化工能源供给和生产模式的变革,柔性制造技术近年来成为化工智能化发展的一个趋势和方向。在这一领域,化工单元操作的动态集成和协调优化是实现化学品柔性制造的核心要义之一,能量系统的集成优化是实现系统能源最优配置的重要途径。研究表明,深入发掘机器学习与运筹学双引擎下的系统优化配置方法并建立可靠模型是建立化学品柔性制造技术的有效方案^[20]。

除了化学品的生产制造,人工智能方法还是构建安全预警等先进生产保障手段的途径之一。当前我国化工行业安全生产形势相对严峻,安全治理模式也正在向事故前预防转变,化学品制造全厂级风险超早期预警系统的开发具有必要性和紧迫性。相对于依靠操作人员的早期预警模式,基于人工智能图像识别方法与报警系统联动的新型预警模式具有更快速的响应时间,是未来无人工厂安全生产的重要技术基础^[21]。

4 结论和发展建议

随着信息技术的快速发展,化学品制造领域进入了智能化转变的关键时期,深化基础科学原理认识、创新软硬件条件是实现化学品智能制造的关键。人工智能方法是推动化学品智能制造的有力工具,化学品的智能制造亟需发展面向化工过程的人工智能理论、方法、模型、技术,建立基于构效关系的分子设计机制与数据库构建策略,深入挖掘化工科学规律和人工智能方法的有力结合点,建立复杂转化、多目标协同、多系统协作的科学原理和软硬件技术,从工艺、装备、数据、系统等多个层面认识化学品智能制造的科学内涵。

近年来,人工智能方法在推进精细化工、材料化工、能源化工等前沿技术的发展上发挥了重要作用,初步的研究结果表明机器学习算法是化学合成路线创新的重要工具,基于分子和材料构效关系大数据的人工模型是指导功能分子设计、发展高性能催化材料、制备新型功能高分子材料的有效手段^[22-25]。人工智能方法正在为加速化工“三传一反”基础研究和创制新型化工装备提供了数据驱动的新范式,高效率、多模态、跨任务的人工智能模型将会深刻影响化学化学品制造技术和装备的变革。人工智能模型

在化工系统工程里面的可靠应用已经引起了化工过程控制、运行、优化的重大变革,充分体现了多学科交叉融合发展的前瞻性,为化学品智能制造的最终实现奠定了基础。

化工过程的智能化虽然已经取得了良好开端,但是与航空航天、机械制造、海洋船舶等装备制造业相比,由于起步较晚,在智能化原理、方法、技术等环节的认知和运用方面仍相对落后,主要的技术不足和障碍包括面向化工过程的专有模型和系统性算法严重不足,在知识融合与多尺度模型耦合方面尤其欠缺。目前常用的算法大多为纯数据驱动模型,对数据的依赖性大、利用率低,难以融合现有的化工知识。常见的深度学习算法面临着可解释性差的问题,难以从中得到具有领域普适性的知识与工程经验。此外,典型的化工制造包含多尺度过程,从原子、分子尺度到反应器尺度的设计,再到流程控制与优化,均涉及多尺度、多模态数据,如何将数据进行耦合用于智能制造仍然存在挑战。化工基础研究的历史数据难以挖掘,便于共享、访问和系统分析的大型化工材料与工艺数据库尚未建立,阻碍了数据驱动模型的应用,基于人工智能的自主决策和优化尚未得到充分体现^[26-28]。

针对化学品智能制造在算法、数据、验证等领域的诸多挑战,深入开展基于人工智能的高端化学品、催化剂等合成路线设计,构建高通量化学、化工基础数据存储和共享机制,建立数据驱动和机理驱动并存的化工过程认知策略,实现化学品生产全流程智能制造的产业化示范是化工领域未来的重要研究方向。以化学工程为代表的流程工业智能制造技术是未来国民经济主战场和国际科技竞争的重要战略高地。

致谢 衷心感谢杜文莉、樊江莉、吉远辉、王或斐、陈东、孔焜焜等对论坛研讨内容的记录、整理和总结工作。

参 考 文 献

- [1] Venkatasubramanian V. The promise of artificial intelligence in chemical engineering: is it here, finally?. *AIChE Journal*, 2019, 65(2): 466—478.
- [2] 钱锋, 杜文莉, 钟伟民, 等. 石油和化工行业智能优化制造若干问题及挑战. *自动化学报*, 2017, 43(6): 893—901.

- [3] Butler KT, Davies DW, Cartwright H, et al. Machine learning for molecular and materials science. *Nature*, 2018, 559(7715): 547—555.
- [4] 钱锋. 人工智能赋能流程制造. *Engineering*, 2021, 7(9): 5—8.
- [5] 周兴贵, 李伯耿, 袁希钢, 等. 化学产品工程再认识. *化工学报*, 2018, 69(11): 4497—4504.
- [6] Szymkuc S, Gajewska E, Klucznik T, et al. Computer-assisted synthetic planning: The end of the beginning. *Angewandte Chemie International Edition*, 2016, 55: 5904—5937.
- [7] Coley CW, Thomas DA, Lummiss JAM, et al. A robotic platform for flow synthesis of organic compounds informed by AI planning. *Science*, 2019, 365(6453): eaax1566.
- [8] Ge K, Ji YH. A thermodynamic approach for predicting thermodynamic phase behaviors of pharmaceuticals in biorelevant media. *Chemical Engineering Science*, 2022, 261: 117973.
- [9] Goldsmith BR, Esterhuizen J, Liu JX, et al. Machine learning for heterogeneous catalyst design and discovery. *AIChE Journal*, 2018, 64(7): 2311—2323.
- [10] Chen WY, Qian G, Wan Y, et al. Mesokinetcs as a tool bridging the microscopic-to-macroscopic transition to rationalize catalyst design. *Accounts of Chemical Research*, 2022, 55(22): 3230—3241.
- [11] Jiang CG, Song HB, Sun GD, et al. Data-driven interpretable descriptors for the structure-activity relationship of surface lattice oxygen on doped vanadium oxides. *Angewandte Chemie International Edition*, 2022, 61(35): e202206758.
- [12] Kearnes SM, Maser MR, Wleklinski M, et al. The open reaction database. *Journal of the American Chemical Society*, 2021, 143(45): 18820—18826.
- [13] Wang HL, Zhang BY, Li XY, et al. Modeling total drag force exerted on particles in dense swarm from experimental measurements using an inline image-based method. *Chemical Engineering Journal*, 2022, 431: 133485.
- [14] Burger B, Maffettone PM, Gusev VV, et al. A mobile robotic chemist. *Nature*, 2020, 583(7815): 237—241.
- [15] Hippalgaonkar K, Li QX, Wang XN, et al. Knowledge-integrated machine learning for materials: lessons from gameplaying and robotics. *Nature Reviews Materials*, 2023, 8(4): 241—260.
- [16] Zhang SY, Liang X, Huang XY, et al. Precise and fast microdroplet size distribution measurement using deep learning. *Chemical Engineering Science*, 2022, 247: 116926.
- [17] Liang RZ, Duan XN, Zhang JS, et al. Bayesian based reaction optimization for complex continuous gas-liquid-solid reactions. *Reaction Chemistry & Engineering*, 2022, 7(3): 590—598.
- [18] Shen C, Zheng QB, Shang MJ, et al. Using deep learning to recognize liquid-liquid flow patterns in microchannels. *AIChE Journal*, 2020, 66(8): e16260.
- [19] Qian F, Zhong WM, Du WL. Fundamental theories and key technologies for smart and optimal manufacturing in the process industry. *Engineering*, 2017, 3(2): 154—160.
- [20] Yuan ZH, Qin WZ, Zhao JS. Smart manufacturing for the oil refining and petrochemical industry. *Engineering*, 2017, 3(2): 179—182.
- [21] Wang J, Kang LX, Liu YZ. Optimal design of a cooperated energy storage system to balance intermittent renewable energy and fluctuating demands of hydrogen and oxygen in refineries. *Computers & Chemical Engineering*, 2021, 155: 107543.
- [22] Zheng SD, Zhao JS. A self-adaptive temporal-spatial self-training algorithm for semisupervised fault diagnosis of industrial processes. *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, 2022, 18(10): 6700—6711.
- [23] Singh AK, Montoya JH, Gregoire JM, et al. Robust and synthesizable photocatalysts for CO₂ reduction: a data-driven materials discovery. *Nature Communications*, 2019, 10: 443.
- [24] Zhong M, Tran K, Min YM, et al. Accelerated discovery of CO₂ electrocatalysts using active machine learning. *Nature*, 2020, 581(7807): 178—183.
- [25] Barnett JW, Bilchak CR, Wang YW, et al. Designing exceptional gas-separation polymer membranes using machine learning. *Science Advances*, 2020, 6(20): eaaz4301.
- [26] Li JL, Lim K, Yang HT, et al. AI applications through the whole life cycle of material discovery. *Matter*, 2020, 3(2): 393—432.
- [27] Alam G, Ihsanullah I, Naushad M, et al. Applications of artificial intelligence in water treatment for optimization and automation of adsorption processes: recent advances and prospects. *Chemical Engineering Journal*, 2022, 427: 130011.
- [28] Yan YL, Borhani TN, Subraveti SG, et al. Harnessing the power of machine learning for carbon capture, utilisation, and storage (CCUS)—a state-of-the-art review. *Energy & Environmental Science*, 2021, 14(12): 6122—6157.

Scientific Fundamentals of Artificial Intelligence Involved Chemical Manufacturing

Kai Wang¹ Zhihong Yuan¹ Xiaonan Wang¹ Guangsheng Luo^{1*} Chen Zhou² Guojun Zhang^{2*}

1. *Department of Chemical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084*

2. *Department of Chemical Sciences, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085*

Abstract Based on the 318th *Shuangqing Forum* and commitment of promoting the basic theory development of chemical engineering to guide the industrialization process through artificial intelligence technology, this article introduces the scientific significance of intelligence manufacturing, and shows recent research progress of process, technology, and equipment innovations in chemical manufacturing, system integration, and optimization control. After analysis, the article provides suggestions to the key scientific issues confronted by the deep integration of artificial intelligence methods with basic research of chemical engineering and industrialization process. It is anticipated that these suggestions would bring a great breakthrough in principles and methods for boosting intelligence manufacturing development in China.

Keywords intelligent manufacturing; intelligent chemical engineering process; intelligent molecular design; technology and equipment innovation; system integration; optimization and control

(责任编辑 姜钧译)

* Corresponding Authors, Email: gsluo@tsinghua.edu.cn; zhanggj@nsfc.gov.cn