



AI赋能碳中和：加速能源化工材料的高效开发



报告人：王笑楠 副教授

报告时间：2022年11月25日 15:20-16:55

报告地点：工物馆324A

腾讯会议：781-491-273

内容简介：

开发具有自主知识产权的高效化学品和新材料对我国国民经济发展和实现碳达峰、碳中和目标至关重要，然而，传统的基于专家经验和直觉的研究方式严重限制了开发效率，大量复杂问题有望通过数据驱动的智能新范式得到有效解决。人工智能（AI）尤其是深度学习的快速发展为加速化工、材料的传统实验和工程设计带来了新的机遇。通过融合高通量计算（理论）和高通量实验（制备和表征）等关键技术，结合机械自动化平台，突破“经验指导实验”的传统材料研发模式，化工、新材料的研发效率可以得到显著提高。

本报告将介绍多尺度智慧系统工程如何利用深度学习、主动学习、数据增强和自动化技术实现高效、有序的材料合成、表征、筛选和性能优化，设计经济、环境最优的能源、化工、环境系统。基于微观层面的理论计算和机理理解，结合宏观表征和反应动力学，通过跨尺度迁移学习，机器学习可以建立高精度的混合模型，加速分子设计与反应动力学研究。以高性能催化剂、膜材料和新能源关键材料等的筛选、设计与合成优化为例，分享关键数据库和前沿算法进展，探讨适用于有机和无机分子的高效率，多模态、跨任务的通用化学化工AI模型与主动学习方法。最后展望未来AI赋能碳中和关键材料和技术研发的发展趋势和面临的挑战。

报告人简介：

王笑楠，清华大学化工系副教授、博士生导师、国家高层次人才计划入选者。新加坡国立大学荣誉副教授、博士生导师，创建了智慧系统工程研究中心，兼任环太平洋大学联盟项目的联合负责人。围绕碳中和与未来智能研发等新兴交叉学科，开展新能源、低碳技术及人工智能应用的研究。2011年本科毕业于清华大学化学工程系，2015年获加州大学戴维斯分校化学工程和控制科学博士，赴英国伦敦帝国理工学院任博士后研究员、未来能源实验室硕士生导师和讲师。2017年起担任新加坡国立大学化工与生物分子工程助理教授，作为项目负责人领导新加坡最大的AI加速材料开发计划。在Nature子刊、JACS等期刊发表学术论文120余篇，参与撰写3部专著。担任Applied Energy, Advanced Intelligent Systems等十本国际期刊副主编和编委，获世界前2%顶尖科学家、福布斯中国科技女性、新加坡最佳青年首席研究员奖、英国皇家学会国际交流奖、应用能源最佳编委奖和国际能源高被引论文奖等奖项。