

分会场四：人工智能

会场召集人：穆骏驹

会场秘书：王学林

地点：能源楼 A 座一楼会议室

时间	报告题目	报告人	单位	主持人
13:30-13:55	KD: 生成式人工智能在能源化工中的应用研究	叶 茂	大连化物所	马思聪
13:55-14:20	KD: 能源系统中的先进原子催化剂设计	黄勃龙	香港理工大学	
14:20-14:30	OD: 基于谱学描述符的手性光学薄膜智能设计	冯 硕	中国科学技术大学	
14:30-14:40	OD: 高选择性氢键有机骨架材料用于电化学还原硝酸盐制氨的高通量机理研究	王 硕	大连化物所	
14:40-14:50	OD: 一种基于分子结构和分子特异性参数的 XGBoost 气体吸附预测算法	李璐君	沈阳自动化所	
14:50-15:00	OD: 基于大语言模型的自动化综述生成方法	吴仕灿	天津大学	
15:00-15:10	OD: Cu (111) 和 Cu (211) 催化甲醇水蒸气重整的理论研究	张心怡	上海科技大学	
15:10-15:35	茶 歇			
15:35-16:00	KD: 机器学习势函数在均多相催化中的应用	马思聪	上海有机所	李天宇
16:00-16:00	OD: Towards rational design of confined catalysis by machine learning assisted statistical analysis	杨晨宇	大连化物所	
16:10-16:20	OD: 材料智能体 (MatterAI): 材料科学研究的催化剂	余松林	上海硅酸盐所	
16:20-16:30	OD: 通过分子动力学和神经网络势计算的第一性原理表面反应速率	李 晨	中国科学技术大学	
16:30-16:40	OD: $\text{WO}_x/\text{CeO}_2(111)$ 催化 NH_3 选择性还原 NO 反应的理论计算研究	郭子怡	华东理工大学	
16:40-16:50	OD: 稀土基复合氧化物 $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 的结构调控和光催化反应机理研究	杨淑媛	大连大学	
16:50-17:00	OD: 基于机器学习的 PEM 电解水膜电极优化	赵 琨	华北电力大学	

分会场四：人工智能

会场召集人：穆骏驹

会场秘书：王学林

地点：能源楼 A 座一楼会议室

2023 年 12 月 24 日（周日）上午				
时间	报告题目	报告人	单位	主持人
08:30-08:55	KD: Steering from electrochemical denitrification to ammonia synthesis	肖建平	大连化物所	李小波
08:55-09:05	OD: 基于机器学习和高通量计算开发羰基氧化还原活性分子	穆晨凯	大连化物所	
09:05-09:15	OD: 使用神经网络方法基于高频振动光谱修复低频成分	杨国昆	中国科学技术大学	
09:15-09:25	OD: 基于图卷积神经网络的金属-有机框架对硝酸盐吸附的预测及构效关系评价	蔺祖弘	中南大学	
09:25-09:35	OD: 机器学习赋能的复杂催化材料表面原子结构甄别	马 欢	山西煤化所	
09:35-09:45	OD: 从电催化脱硝转向合成氨过程的必要性	李 欢	大连化物所	
09:45-09:55	OD: Three-dimensional gas-solid distribution in fluidized beds: combing the mobile electrical capacitance tomography with Fourier neural operator approach	张 橙	大连化物所	
09:55-10:25	茶 歇			
10:25-10:50	KD: 数据驱动光催化材料加速开发	李小波	浙江师范大学	穆骏驹
10:50-11:00	OD: 可扩展的 MnO-Fe ₂ C 催化剂上超高碳效率利用合成气直接生产烯烃	钱 飞	山西煤化所	
11:00-11:10	OD: Au/ α -MoC 催化剂上以水低温乙炔加氢制乙烯	夏梅涵	大连化物所	
11:10-11:20	OD: MXene/离子液体界面储能机制的分子动力学研究及机器学习力场	孙芯悦	北京过程所	
11:20-11:30	OD: Theoretical studies of electrocatalytic semi-hydrogenation of C ₂ H ₂	Kelechi Uwakwe	大连化物所	
11:30-11:40	OD: 基于因果图的非线性动态系统控制方程发现	贾冬妮	沈阳自动化所	
11:40-11:50	OD: 利用多相模型探究高温质子交换膜燃料电池中的磷酸和水传输	孙 牧	大连化物所	
11:50-12:00	OD: 表面结构和阴离子有序性对 SrTaO ₂ N 光催化分解水性能影响的密度泛函理论研究	曲 贺	大连大学	