

# 2024 年度国家自然科学基金专项项目“面向典型低碳化工新过程的人工智能与机制融合建模”项目指南

低碳化工新过程是助力双碳目标实现的重要措施，其放大涉及多个单元的系统集成，是多尺度、多维度的复杂问题。人工智能与化工过程机制的深度融合有望打破逐级放大的传统模式，实现跨尺度建模和快速放大的突破。当前关键挑战是放大过程中数据缺失及建模难度大。面向典型低碳化工新过程，围绕人工智能与化工过程放大的理论创新和关键技术进行布局，引领基础化工数据增强和跨尺度建模领域的原创性基础研究，推动化工新过程快速放大及规模化应用。

## 一、科学目标

以典型规模化低碳化工新过程为对象，探索融合人工智能的化工基础数据高效获取新方法，实现化工基础数据的增强与扩容，构建基础数据库；发展人工智能与“三传一反”机理融合的跨尺度建模方法，建立围绕化工新过程的人工智能与机制融合模型，形成具有自主知识产权的设计软件及工艺基础数据包，支撑典型低碳新过程从实验室到工厂的快速放大。

## 二、关键科学问题

- (一) 化工基础数据的人工智能增强方法。
- (二) 化工过程跨尺度的人工智能建模方法。

## 三、拟资助研究方向和研究内容

#### （一）人工智能+石油化工过程。

以焦耳热驱动的低碳催化裂解为主要对象，重点研究人工智能辅助的石脑油复杂分子裂解反应网络及模型生成，建立融合人工智能与机理的反应/分离全流程计算软件及工艺基础数据包。

#### （二）人工智能+微化工过程。

以微化工电化学强化低碳过程为主要对象，重点研究人工智能辅助的催化剂和电极的可靠设计，发展微反应器内氧化还原反应的跨尺度人工智能建模和强化方法，开发工艺基础数据包。

#### （三）人工智能+绿氢化工过程。

以电解水制氢耦合氧化过程为主要对象，重点研究高通量电极筛选与过程智能评价系统搭建，发展基础数据增强新方法，建立跨尺度过程放大与强化的智能化机制，开发工业级工艺基础数据包。

#### （四）人工智能+医药化工过程。

以电驱动医药化学品制备过程为主要对象，重点发展基础数据的机器学习增强方法，建立跨尺度耦合模型，揭示过程放大规律，形成相关工艺基础数据包。

### 四、资助计划

本专项项目资助期限为4年，项目研究期限应填写“2025年1月1日—2028年12月31日”，拟资助项目4-5项，计划资助强度约为230万元/项。

## 五、申请要求及注意事项

### （一）申请资格。

1. 具有高级专业技术职务（职称），45周岁以下（1979年1月1日以后出生）。

2. 具有承担基础研究课题的经历

在站博士后研究人员、正在攻读研究生学位以及无工作单位或者所在单位不是依托单位的人员不得作为申请人进行申请。

### （二）限项申请规定。

1. 本专项项目申请时不计入申请和承担总数范围，正式接收申请到自然科学基金委做出资助与否决定之前，以及获资助后，计入申请和承担总数范围。

2. 申请人同年只能申请1项专项项目中的研究项目。

3. 其他限项申请要求按照《2024年度国家自然科学基金项目指南》“限项申请规定”执行。

### （三）申请注意事项。

1. 申请书报送日期为2024年9月2日—9月9日16时。

2. 本专项项目申请书采用在线方式撰写。对申请人具体要求如下：

（1）申请人在填报申请书前，应当认真阅读本申请须知、本项目指南和《2024年度国家自然科学基金项目指南》的相关内容，不符合项目指南和相关要求的申请项目不予受理。

(3) 申请书研究内容应紧密围绕科学目标，根据项目指南中的关键科学问题，自行拟定项目名称、研究内容、技术路线和相应的研究经费等。

(4) 申请人登录科学基金网络信息系统 <http://grants.nsf.gov.cn/>，按照撰写提纲及相关要求撰写申请书。

(5) 申请书中的资助类别选择“专项项目”，亚类说明选择“研究项目”，附注说明选择“科学部综合研究项目”，(申请代码 1 应根据“三、拟资助研究方向和研究内容”的要求选择化学科学部 B08 下属代码。以上选择不准确或未选择的项目申请将不予受理。

(6) 请按照“专项项目-研究项目申请书撰写提纲”撰写申请书，请在申请书正文开头注明“面向典型低碳化工新过程的人工智能与机制融合建模：XXX（填写拟资助的 4 个研究方向之一）”。

申请书应突出有限目标和重点突破，明确对实现本专项项目总体科学目标和解决核心科学问题的贡献。

如果申请人已经承担与本专项项目相关的其他科技计划项目，应当在申请书正文的“研究基础与工作条件”部分论述申请项目与其他相关项目的区别与联系。

3. 申请人应当严格按照《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》等相关规定和《国家自然科学基金项目资金预算表编制说明》的具体要求，按照“目标相关性、政策相符性、经济合理性”的基本原则，认真编制《国家自然科学基金项目预算表》。

4. 本专项项目采用无纸化申请，申请人完成申请书撰写后，在线提交电子申请书及附件材料。

5. 本专项项目咨询方式：

国家自然科学基金委员会化学科学部

联系人：张国俊

联系电话：010-62327111。

## 六、其他注意事项

1. 为实现专项项目总体科学目标，获得资助的项目负责人应当在项目执行过程中关注与本专项其他项目之间的相互支撑关系。

2. 为加强项目之间的学术交流，本专项项目群将设专项项目管理协调组，并将不定期地组织相关领域的学术研讨会。获资助项目负责人必须参加上述学术交流活动，并认真开展学术交流。