

# 陈宇翔

电话: 15261179823 | 邮箱: chenluxiang@mail.ecust.edu.cn | 现居城市: 上海

年龄: 26岁 | 性别: 男

当前状态: 应届生 | 意向城市: 上海



## 教育经历

华东理工大学 - 化学工艺 博士

2018.08 - 2023.06

专业成绩: GPA 3.36 / 4.0

荣誉奖项: “华为杯”第十六届中国研究生数学建模竞赛二等奖, 泰坦阿达玛斯企业奖学金

常州大学 - 油气储运工程 本科

2014.08 - 2018.06

专业成绩: 3.44 / 4.0

荣誉奖项: 全国大学生油气储运工程设计大赛二等奖, 校二等奖学金 (2014-2017)

## 研究经历

基于主动学习智能识别高效脱甲硫醇的溶剂分子

2019.07 - 2021.07

天然气中的硫化物有毒且对环境有害, 目前脱除天然气中的甲硫醇杂质的溶剂性能有限, 传统的实验研发方法成本高、耗时长, 机器学习方法由于初始数据集通常不能覆盖感兴趣的化学空间对化学科学不够有效。

整合分子相似性搜索和主动学习方法设计了一个新的计算框架, 即分子主动选择模型, 来优化训练数据集, 大大改善了化学空间的范围; 在初始的 126,068 化合物中, 找到 3 种高效脱甲硫醇的溶剂分子, 其中效果最好的分子实验效果比甲基二乙醇胺 (MDEA, 生产常用脱硫溶剂) 高89.4%, 该分子已进入工业中试阶段。

SCI 一作在审 1 篇 (Chemical Engineering Science, 三大顶级化工期刊之一); SCI 二作 1 篇 (Industrial & Engineering Chemistry Research, 三大顶级化工期刊之一); 申请专利 4 项, 其中已公开发明专利 2 项 (CN20211064067, 一种胺类化合物在提高有机硫溶解和吸收脱除中的应用, 第三发明人; CN202110640696, 一种胺类化合物在脱除有机硫化物的应用, 第三发明人)。

机器学习驱动的高效脱除羰基硫的溶剂分子设计

2021.07 - 2022.02

目前的溶剂筛选依赖于实验数据, 但羰基硫的吸收动力学实验复杂且耗时。同时计算化学方法基于初猜结构, 是一个繁琐的试错过程。种种因素的限制下, 溶剂所能达到的羰基硫的吸收效率非常有限。

计算了超过500组结构的化学反应速率常数, 构建了机器学习模型来预测羰基硫与溶剂的反应动力学; 确定了电荷分布和空间位阻是影响反应速率的主要因素; 使用机器学习方法引导分子描述符的设计, 设计了 4 个分别表示空间位阻效应和电负性的描述符, 将模型的预测误差减低了38.7%; 设计的模型与实验结果呈良好的相关性。

发表 SCI 一作 1 篇, 发表在Chemical Engineering Journal (影响因子 16.744 / 中科院一区); 发表会议论文 1 篇, 并在 2021年化学动力学与化学工程数学方法国际会议中进行全英文口头报告及答辩。

溶剂-溶质间协同竞争的物理化学耦合作用机制研究

2022.02 - 至今

目前开发的溶剂仅从物理或化学两方面中的任一方面进行研究, 然而物理和化学作用耦合通常会有协同或竞争机制, 在这些模型中考虑多种因素仍然是一个尚未解决的问题。

以羰基硫为典型组成, 构建了模拟实际溶解过程的数学模型, 并以该数学模型为基准得到羰基硫模拟溶解量, 构建了机器学习模型将分子结构与模拟溶解量相关联。

阐明复合溶剂与天然气组分间物理和化学作用耦合的协同和竞争机制, 构建的物理化学耦合模型已通过实验验证, 撰写英文论文一作 1 篇, 二作 1 篇。

依据天然气组成智能化设计溶剂配方组成

2022.02 - 至今

目前的脱硫溶剂的溶剂配方无法能应对原料有机硫组成变化, 基于特定原料天然气组成开发的配方型溶剂往往只能应对一定含量范围内的特定类型硫化物的有效脱除, 当原料气有机硫分布大幅波动时, 可能导致净化效果达不到设计要求, 精细化控制产品质量存在风险。

基于构建的模型和阐明的作用机理, 将模型拓展到乙硫醇、正丙硫醇、异丙硫醇、正丁硫醇等共计13种有机硫化物, 使用多目标规划的数学方法制定能响应原料硫化物分布特征的智能化溶剂组成设计策略, 开发出一种可以根据天然气气体的变化而变化的新型高效配方组分设计方案。

开发了可以能响应天然气组成的脱硫溶剂配方软件, 目前正在撰写软件著作权。

## 项目经历

中石化新疆西北石油局三号联轻烃站原料气脱硫工艺模拟与优化

2021.06 - 至今

使用 Aspen Plus 和 HYSYS 建立三号联轻烃站的工艺流程, 通过参数调整和灵敏度分析等手段来实现工艺最优, 通过模拟结果来为对三号联轻烃站液化气总硫超标提出可行对策。

根据三号轻烃站工艺流程在 Aspen HYSYS 中建立模拟流程, 分为溶剂吸收工段、分子筛脱水工段和产品分离工段这三个工段, 提出了 3 种改造方案, 并对这 3 种改造方案的效果进行了模拟。

提出在主吸收塔后串联小吸收塔的改造方案，使用一半再生贫液进入吸收小塔进行吸收，形成的半贫液与另一半再生贫液混合进入主吸收塔。最终使得初始有机硫含量下降了 47%，同时吸收小塔水力操作点在合理水力操作范围内，且具有较大操作弹性。

### 一种自动化反应装置

2020.12

设计制造了一种自动化吸附脱除装置，安装电动阀门进行进气量的控制，并通过树莓派控制阀门的开启与关闭，通过传感器记录装置内的压力数据，从而实现静态吸附实验的自动化。

发表了发明专利 1 篇（CN201910583467.6, 一种催化剂反应装置，第一发明人）。

### 基于太阳能、天然气和空气能的多能源供暖系统的多目标优化

2020.09

目前在可持续能源利用系统的优化设计中，只考虑了成本最小化，而没有考虑能耗、碳排放这两方面的问题，不足以确保可持续能源的发展。

选择了最优经济成本、碳排放和节能这三个角度，考虑了三个目标：成本最小化、碳排放最小化和节能最大化，用于能源系统的多目标优化；提出了具有经济成本、碳排放和节能三个目标的优化模型；使用三种不同类型的人工智能算法用于求解优化模型。

优化后的供暖系统经济成本降低13.94%，二氧化碳排放量降低20.67%，能耗降低3.25%，更符合能源可持续利用的发展需要；使用自然启发的 CRO 算法，与SBO群智能优化算法相比，计算时间缩短约1.6倍，优化精度提高0.19%；与类人 BSO 算法相比，计算时间减少了一半，优化精度提高了 9.61%。确定了最佳集热面积和空气源热泵额定功率，优化后的系统动态结果满足供暖期间的所有供暖要求，动态优化节省一次能源约2.57%，热泵平均COP提高约7.17%，系统COP提高约40.26%，热损失降低约44.44%。

### “华为杯”第十六届中国研究生数学建模竞赛

2019.08

从历史数据中挖掘加拿大地区温度的时空变化趋势，建立一个对未来 25 年气候变化的预测模型，构建模型分析极端气象与气候变化的关系。

从加拿大气象局收集 26 个城市的 80 年的气候数据，通过高斯噪声对数据进行清洗，以温度、降雨量、降雪量等影响因素为依据应用系统聚类分析将城市分为 3 类，使用线性回归法分析这 3 类区域气候随时间的变化趋势；运用神经网络模型和多元线性回归模型构建 2 种预测模型，分别对未来 25 年温度进行预测。

撰写了 40 页的竞赛论文，最终获得全国二等奖。

## 专业技能

泛编程语言：Python / Matlab / R / Java

计算化学：Gaussian / Material Studio / Aspen

机器学习：Scikit-learn / PyTorch / pandas / NumPy

工具：Linux / Flask / Git / MySQL

英语：CET-6（494）/ 写作（SCI 一作 3 篇）/ 博士英语口语（96）/ 学术会议全英文口头汇报

## 社团和组织经历

### "读书散疫" 疫情线上读书分享会

2022.06 - 至今

疫情期间隔离在宿舍，组织各个区域的同学线上举办分享读书会。每周会进行一次线上视频交流，共同讨论近期读书心得。除此之外，大家也会分享每日生活，交流抢菜做饭经验。

设计了包括漫话、研讨会、主题演讲和互动测试这 4 种交流方式，对超过 7 个主题，超过 20 本书进行了共同研读活动，目前已有13个同学加入小组。

### 计算机学习经验分享

2020.03 - 2020.12

撰写了 2 篇伯克利大学计算机课程的经验分享文章，发表了超过 100 篇计算机课程学习笔记。

知乎获得 331 人关注、463 次赞同、79 次喜欢和 923 次收藏，GitHub 获得 130 stars 和 79 followers。

## 发表论文及专利

[1] **CHEN Y**, LIU C, GUO G, et al. Machine-learning-guided reaction kinetics prediction towards solvent identification for chemical absorption of carbonyl sulfide[J]. Chemical Engineering Journal, 2022, 444: 136662.

[2] **CHEN Y**, WANG D, JIANG H, et al. Structure-Property-Energetics Relationship of Organosulfide Capture Using Cu (I)/Cu (II)-BTC Edited by Valence Engineering[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2020, 60: 371-377.

[3] **CHEN Y**, LIU C, AN Y, et al. Intelligent Molecular Identification for High Performance Organosulfide Capture Using Active Machine Learning Algorithm[J]. 2021.

[4] LIU C, **CHEN Y**, JIANG H, et al. Revealing the Structure-Interaction-Dissolubility Relationships through Computational Investigation Coupled with Solubility Measurement: Toward Solvent Design for Organosulfide Capture[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2022.

[5] LOU Y, **CHEN Y**, ZHAO Y, et al. Hosting AlCl<sub>3</sub> on ternary metal oxide composites for catalytic oligomerization of 1-decene: Revealing the role of supports via performance evaluation and DFT calculation[J].

Microporous and Mesoporous Materials, 2022, 333: 111665.

[6] ZHAO Y, **CHEN Y**, QIAN C, et al. Constructing AgY@ Cu-BTC hybrid composite for enhanced sulfides capture and moisture resistance[J]. Microporous and Mesoporous Materials, 2022: 112043.

[7] 孙辉, 沈本贤, **陈宇翔**,等. 一种胺类化合物在提高有机硫溶解和吸收脱除中的应用.

[8] 孙辉, 沈本贤, **陈宇翔**,等. 一种胺类化合物在脱除有机硫化物的应用.

[9] **陈宇翔**, 孙辉. 一种催化剂反应装置.

## 作品集

---



[个人作品集](#)