

# AI 驱动的生物质平台分子定向高值转化：光催化剂智能创制与化工过程集成设计

白林鹭

黑龙江大学化学化工与材料学院，黑龙江 哈尔滨 150080

DOI: 10.61369/ETR.2026200004

**摘 要：**在绿色发展与可持续能源转型的时代背景下，生物质平台分子定向高值转化成为研究热点。AI 技术凭借其强大的数据处理与模拟能力，为该领域带来创新变革。在光催化剂智能创制方面，AI 可深度挖掘数据，精准预测催化剂性能，实现高效催化剂的理性设计，突破传统开发模式局限。在化工过程集成设计上，AI 能综合考虑多尺度、多物理性质参数，平衡反应条件、传质传热与产物选择性等矛盾，构建全生命周期集成框架。本研究聚焦 AI 驱动下光催化剂智能创制与化工过程集成设计，探索二者协同作用，为生物质平台分子定向高值转化提供新思路与技术支持。

**关 键 词：**生物质平台分子定向转化；化工前沿研究与教育；高校教学研究

## AI-Driven Targeted High-Value Conversion of Biomass Platform Molecules: Intelligent Creation of Photocatalysts and Integrated Design of Chemical Processes

Bai Linlu

School of Chemistry, Chemical Engineering and Materials, Harbin, Heilongjiang 150080

**Abstract：**Against the background of green development and sustainable energy transition, the targeted high-value conversion of biomass platform molecules has become a research hotspot. With powerful data processing and simulation capabilities, artificial intelligence (AI) technology brings innovative transformations to this field. In terms of the intelligent creation of photocatalysts, AI enables in-depth data mining and accurate prediction of catalyst performance, realizing the rational design of high-efficiency catalysts and breaking through the limitations of traditional development modes. In the integrated design of chemical processes, AI can comprehensively take multi-scale and multi-physical parameters into account, balance the contradictions among reaction conditions, mass and heat transfer, product selectivity, and establish a full-life-cycle integrated framework. Focusing on AI-enabled intelligent development of photocatalysts and integrated design of chemical processes, this study explores their synergistic effects, aiming to provide new ideas and technical support for the targeted high-value conversion of biomass platform molecules.

**Keywords：**directed conversion of biomass platform molecules; cutting-edge research and education in chemical engineering; Teaching research in universities

### 引言

在全球向可持续发展转型的今天，生物质资源的利用开发成为驱动全球经济社会绿色转型的重要动力。生物质平台分子是生物质转化过程中的重要产物，生物质平台分子的定向高值转化对于整体构建高效、绿色的生物质产业至关重要。光催化具有绿色、循环、可再生的特质，是实现生物质平台分子转化的重要工具。但由于光催化剂创新往往依赖于经验和不断尝试，这导致效率低、成本高、难以精确调控等问题。此外，化工过程集成设计是沟通实验室和工业化生产的重要环节，是实现工业化、绿色化的关键，但不同尺度反应条件的迥异要求、传质传热与产物选择性的矛盾也一直困扰着生物质转化过程的高效化、规模化、绿色化<sup>[1]</sup>。人工智能力量的加入，将助力解决上述问题。通过人工智能强大的仿真及数据优化能力，实现光催化剂的智能创制，精准预测及优化设计性能；通过人工智能强大的数据优化及仿真能力，实现化工过程的智能集成设计，平衡多目标的矛盾，构建全生命周期的集成框架，推动生物质平台分子的定向高值转化再上一层楼<sup>[2]</sup>。

## 一、生物质平台分子高值转化的战略意义

### （一）能源结构转型与化石资源替代的必然选择

在全球化石资源储量不足和能源需求快速增长的驱动下，能源结构转型是实现可持续发展的重大国策<sup>[3]</sup>。生物质是唯一可再生的有机碳源，通过定向转化生产燃料、化学品及材料，形成向化石资源无法提供的碳原子区间补充的碳循环体系，从根本上减少对石油、煤炭等不可再生碳资源的依赖，并通过生物质固碳实现碳的负排放，支撑国家实现碳中和的战略目标。与传统化石资源加工不同，生物质转化具有原料可再生、反应条件温和、产物环境友好等优势，是实现绿色低碳能源体系的关键<sup>[4]</sup>。

### （二）循环经济构建与废弃物资源化的核心环节

生物资源包括农业废弃物、林业废弃物和城市有机垃圾，这些资源来源广泛、数量巨大。高质高效利用生物资源，对于解决“垃圾围城”、浪费资源的问题至关重要<sup>[5]</sup>。通过化学或生物催化等方式，实现定向转化成平台分子（如多官能团有机分子），进而合成高附加值的产品（如生物塑料、医药中间体等），形成“资源-产品-再生资源”的循环经济体。采用分子经济的方式，将过去需填埋、焚烧的有机垃圾转化为有用的产品，不仅减少了传统方式对环境的污染，还体现出发展循环经济的指导思想，实现了资源的高效利用。以整个社会为观察体系，将生物资源转化成平台分子进而合成高附加值产品，可降低整个产业链的能耗和碳排放，实现零废弃、全循环的零碳社会<sup>[6]</sup>。

## 二、光催化剂智能创制：从分子设计到性能预测

利用催化剂结构和反应条件（如光照度、溶剂极性等）的物理模型能够建立反应产率、选择性和稳定性的预测模型，通过催化剂优化实现反应前的产率预测，大幅提高实验效率。物理模型与数据驱动模型（例如随机森林）的集成应用是该任务的主要挑战：催化剂性能受多因素制约，高维非线性关系的建模是关键；高噪声、稀疏的实验数据易造成过拟合，需要通过迁移学习、积极学习等方法提高训练数据利用率。为解决上述挑战，研究者常采用集成学习的方法，物理模型（例如密度泛函理论）与数据驱动模型相互补充，通过物理约束提升模型的可解释性和泛化能力<sup>[7]</sup>。生成对抗网络（GAN）等生成模型能够模拟催化剂的老化过程，预测催化剂长期稳定性，为工业应用提供支持。通过智能创制与预测的循环设计，可以大幅提高光催化剂的设计效率，为生物质转化等多分子体系复杂反应提供高效催化剂<sup>[8]</sup>。

## 三、化工过程集成设计：从实验室到工业化的桥梁

化工过程的集成设计是连接实验室发现与工业化应用的枢纽，通过优化反应、分离、换热等单元操作，实现资源深度利用与过程经济性提升<sup>[9]</sup>。对于生物质转化，过程面对着三对主要矛盾：一是实验室规模的低温低压条件与工业化需求的高温高压条件的矛盾；二是小规模下追求高选择性与放大生产中传质传热难

以兼顾的矛盾；三是单个产物的优化与全链条能量集成的矛盾。从而建立从分子到工厂多尺度、多物理性质参数匹配的涵盖全生命周期的集成设计框架，将反应动力学方程、过程模拟软件与多目标优化算法相结合，是其关键科学问题<sup>[10]</sup>。

## 四、AI 驱动的生物质转化生态体系构建

### （一）多模态数据融合驱动的智能决策平台

基于 AI 的生物质转化生态体系需要构建一个融合多源异构数据（实验数据、科学论文、转化过程参数、市场供需）的涵盖整个链条的多模态数据融合体系，通过自然语言处理科学文献，发现隐含反应规则，利用计算机视觉技术从实验图像中挖掘微观结构信息，形成知识图谱；通过物联网技术获取反应器内的温度、压力、流速等多维过程参数，并基于区块链技术确保数据的不可篡改性和可追溯性，在上述数据和信息的基础上，利用强化学习构建智能决策模块，根据实时数据动态调整反应条件和工艺路线，实现从原料预处理到产物分离的全流程自主优化<sup>[11]</sup>。通过数据-知识-决策的循环迭代，打破传统生物质转化中对经验的依赖，大幅提高转化效率和产物选择性。

### （二）跨尺度催化机理建模与虚拟筛选

生物质平台分子的定向转化，需要依赖催化剂的设计原理；而智能计算则可以实现多尺度（从原子到反应器）的仿真模拟<sup>[12]</sup>。在分子尺度上，通过 DFT 计算联合机器学习可以建立催化剂活性中心与反应中间物的定量构效关系，开展分子结构修饰等改性策略的能带工程设计，预测不同改性对吸附能、反应活化能等关键催化参数的影响。在反应器尺度上，通过计算流体力学联合深度学习可以模拟多相复杂体系中的传质传热规律，实现反应器结构参数与操作条件的优化<sup>[13]</sup>。基于上述模型构建虚拟筛选平台，可以高效评价数万催化剂体系的催化性能，挖掘出活性高、稳定性好的候选体系。通过计算与实验相结合，催化材料的发现周期将由数年缩短至数月，为生物质转化提供高效的催化剂支撑<sup>[14]</sup>。

### （三）过程强化与能量集成的智能优化

生物质转化过程的工业化取决于其集成设计，而智能优化是实现过程强化与能量集成的基础。对于反应单元，采用强化学习优化反应温度、压力和停留时间等参数，在提高反应速率的同时，尽可能保持或提高选择性；对于分离单元，采用生成对抗网络（GAN）设计膜材料或吸附剂，获得高分离效能的产物；对于换热网络，结合图神经网络（GNN）和混合整数线性规划（MILP），获得合理的物流匹配，降低公用工程消耗；建立数字孪生系统，采用虚拟工厂模拟不同工况下过程性能，指导工厂改变参数和排除故障。这些智能优化策略可大幅提高生物质转化过程能量利用效率，降低生产成本<sup>[15]</sup>。

### （四）全生命周期可持续性评估与闭环反馈

构建面向绿色转型的智能生物质转化生态体系，对生物质原料获取、利用不同区域原料的碳、水足迹以及转化过程和产品应用的全链条环境、经济影响进行量化。采用生命周期评估

(LCA)模型,结合地理信息系统(GIS),评价各地原料的碳、水足迹;采用多目标优化算法,平衡产物产率、能耗、废物排放等多目标,获得最优工艺路线;并建立闭环反馈模块,接收市场对生物基产品的需求信号,反向驱动生产端动态调整转化目标和产能布局,如生物降解塑料需求增加,系统可自动优化平台分子向乳酸或PHA的转化路径。实现需求拉动、供给优化的智能匹配,促进生物质转化产业向循环经济、绿色制造演进,实现经济发展和生态保护双重目标。

## 五、结束语

人工智能驱动的生物质平台分子定向高值转化是实现生物质产业绿色、高效、智能转型的重要途径。通过人工智能,从经验驱动转变为数据智能驱动,显著提高了光催化剂的开发效率和性能。通过人工智能消除了多尺度、多目标间的矛盾,实现了资源深度利用和过程强化。尽管目前面临数据质量、模型精度等方面的挑战,但随着人工智能技术进步和多学科深度融合,未来必能实现人工智能驱动的生物质平台分子定向高值转化,实现生物质平台分子的大规模利用,服务全球可持续发展。

## 参考文献

- [1] 胡涛,李先锋,陶胜洋,等.人工智能革命——重塑化学化工前沿研究与教育的新范式[J].大学化学,2025,40(12):112-118.
- [2] 孙然,闫毅,郭永强,等.化学化工领域学术型与专业型学位研究生分类培养机制改革与实践——以西北工业大学化学与化工学院为例[J].高教学刊,2025,11(30):19-24.
- [3] 葛秋华,李京臣,陈宁.推动传统化工产业转型升级的对策研究——基于濮阳市化工产业实践的思考[J].产业创新研究,2025,(17):52-54.
- [4] 黄河生态环境科学研究所、中南大学化学化工学院、卓锦股份三方开展战略合作[J].中国环保产业,2025,(08):36.
- [5] 李显杰.负载型金基催化剂在生物质基平台分子氧化酯化反应中的性能研究[D].青岛科技大学,2025.
- [6] 周健龙.草酸二甲酯制乙醇酸甲酯工艺评价与催化剂智能设计[D].合肥工业大学,2025.
- [7] 郭泓佑,陈才友. $\alpha$ -羟基羧酸类生物质平台分子C—O键活化转化[J].中国基础科学,2025,27(03):1-9.
- [8] 晋爱苹.负载型铂基纳米金属催化剂的构筑及其生物质平台分子选择性氧化的催化机制研究[D].江苏大学,2025.
- [9] 杨雪.石河子大学化学化工学院应用化学系副教授柯振刚缘起绿色化学筑梦化工新材料[J].中国高新科技,2025,(11):8-9+162.
- [10] 刘凯文,王延涛,林琳,等.一种基于生物质平台分子缓蚀剂的合成及其缓蚀作用机制研究[J].全面腐蚀控制,2025,39(05):11-17.
- [11] 黄嘉欣.农林废弃生物质基呋喃类平台分子加氢脱氧反应研究和高效催化剂设计[D].南昌大学,2025.
- [12] 罗菊香,李奇勇,林明穗.新工科背景下地方应用型本科高校实验教学示范中心可持续发展研究——以三明学院省级化学化工类实验教学示范中心为例[J].中国教育技术装备,2025,(06):5-8.
- [13] 汪洋,周亦宁.复合材料光电化学性能的数学分析——评《化工问题的建模与数学分析方法》[J].应用化学,2025,42(02):299.
- [14] 翟秀云,人工智能助力高效可见光光催化剂Bi<sub>2</sub>WO<sub>6</sub>/MIL-53(Al)的研发.四川省,攀枝花学院,2024-06-28.
- [15] 刘栋.亚纳米钨催化剂结构与构效关系的同步辐射研究[D].中国科学技术大学,2024.