陈宇翔

152-6117-9823, chenyuxiang@mail.ecust.edu.cn, chenyuxiang0425.github.io

教育经历

华东理工大学 中国上海

硕士 (2018-2021), **博士** (2021-2023), 化学工艺 2018.09 – 2023.12

GPA: 3.0/4.0 (84.5/100) 导师: 孙辉, 曹发海

相关课程: 化学过程数学建模**,** 化学产品多尺度模拟**,** 高等反应工程**,** 组合最优化

常州大学 中国江苏

本科, 油气储运工程 2014.09 – 2018.06

GPA: 3.1/4.0 (85/100)

相关课程: 工程流体力学，工程热力学

研究经历

华东理工大学 2018.09 - 2023.12

天然气脱硫溶剂分子组成智能化设计

• 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、异丙硫醇等共计 13 种有机硫化物。

• 开发了 1 种智能溶剂组成设计策略，可以动态响应原料有机硫的分布情况，一步法去除天然气中的有机硫成分。

溶剂-溶质间协同竞争的物理化学耦合作用机制研究

• 提出了一种物理化学耦合的机器学习方法，可以很好地预测 COS 在反应和非反应溶剂中的溶解度。

• 开发了一种基于分子描述符的分子生成方法，确定了可用于捕获 COS 的潜在溶剂。

基于机器学习构建的化学反应动力学模型确定羰基硫反应机理

• 计算了超过 500 组分子的化学反应速率常数，构建了机器学习模型来预测 COS 的反应动力学模型。

• 揭示了溶剂分子的电荷分布和位阻效应是决定反应动力学的关键因素，并设计了 2 个分子描述符来提高动力学预测性能，将模型的预测误差减低了 38.7%。

高硫含量天然气脱硫复合溶剂开发

• 开发了“分子主动学习”计算框架，通过集成分子相似性搜索和主动学习加速溶剂筛选过程。

• 找到了 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。

常州大学 2018.01 - 2018.06

• 设计并制造了 1 种自动化吸附实验装置，使用电动阀门控制气体进流量、树莓派控制电动阀门、压力传感器来记录装置中的压力数据。

工作经历

助理研究员, 华东理工大学 2019.01 – 2023.12

• 带领 1 个由 5 名成员组成的团队，为新疆塔河、四川元坝等气田中的高硫天然气开发了高性能脱硫溶剂。

• 为新入学的研究生提供了计算化学和数学建模方面的培训。

班主任助理, 常州大学 2016.09 - 2018.06

• 协助班主任管理 1 个由 29 名大学新生的班集体，协助开展班级文体活动和公益活动。

荣誉和竞赛

荣誉

• 优秀学生, 华东理工大学 2022.12

• 中石油奖学金, 中国石油天然气集团有限公司 2022.12
• 泰坦阿达玛斯奖学金, 上海泰坦科技股份有限公司 2021.12
• 优秀毕业生, 常州大学 2018.06

竞赛

• 全国三等奖, 第 18 届中国研究生数学建模竞赛 2021.12
• 全国三等奖, 第 17 届中国研究生数学建模竞赛 2020.12
• 全国二等奖, 第 16 届中国研究生数学建模竞赛 2019.12
• 全国二等奖, 第 1 届全国大学生油气储运工程设计大赛 2016.12

发表论文及专利

期刊论文

Energy & Fuels (第一作者, IF = 4.654, DOI: 10.1021/acs.energyfuels.3c01525) 2023.07
• "Intelligent Molecular Identification Approach to High-efficiency Solvent for Organosulfide Capture Using Active Machine Learning Framework"

Chemical Engineering Science (第一作者, TOP, IF = 4.889, DOI: 10.1016/j.ces.2023.118984) 2023.06
• "Physical–chemical Coupling Machine Learning Approach to Exploring Reactive Solvents for Absorption Capture of Carbonyl Sulfide"

Industrial & Engineering Chemistry Research (共同第一作者(2), IF = 4.326, DOI: 10.1021/acs.iecr.2c04559) 2023.03
• "Interpretable Machine Learning Model for Predicting Interaction Energies between Dimethyl Sulfide and Potential Absorbing Solvents"

Chemical Engineering Journal (第一作者, TOP, IF = 16.744, DOI: 10.1016/j.cej.2022.136662) 2022.12
• "Machine-learning-guided Reaction Kinetics Prediction towards Solvent Identification for Chemical Absorption of Carbonyl Sulfide"

Industrial & Engineering Chemistry Research (共同第一作者(2), IF = 4.326, DOI: 10.1021/acs.iecr.2c00321) 2022.04
• "Revealing the Structure–Interaction–Dissolubility Relationships through Computational Investigation Coupled with Solubility Measurement: Toward Solvent Design for Organosulfide Capture"

Industrial & Engineering Chemistry Research (第一作者, IF = 4.326, DOI: 10.1021/acs.iecr.0c05483) 2021.01
• "Structure–Property–Energetics Relationship of Organosulfide Capture Using Cu (I)/Cu (II)-BTC Edited by Valence Engineering"

会议论文

Mathematics in (bio)Chemical Kinetics and Engineering (第一作者, 口头汇报) 2021.10
• "Intelligent Molecule Design to Explore Potential Solvents for Carbonyl Sulfur (COS) Absorption Based on Reaction Kinetics Prediction"

专利

• 一种烷氧基丙胺类化合物及其在有机硫吸收脱除中的应用 (第三发明人, 发明专利公开, CN202310106624.0) 2023.05

• 高效吸收脱除有机硫化合物的醚胺类化合物及其设计方法和应用 (第四发明人, 发明专利公开, CN202210236109.X) 2022.07

• 一种胺类化合物在脱除有机硫化物的应用 (第三发明人, 发明专利授权, ZL202110640696.4) 2022.07

• 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, 发明专利授权, ZL202110640678.6) 2022.07

• 一种催化剂反应装置 (第一发明人, 发明专利授权, ZL201910583467.6) 2021.12