

技术

责任编辑:季佳欣 雷蕾
电话:59963261
邮箱:
jijx@sinopec.com
审校:张春燕
版式设计:王强



周“油”列国
油事精英

AI重塑能源化工工业态

人工智能正推动科学研究从“观察-假设-验证”的传统范式,迈向“数据密集-智能涌现-人机协同”的智能化新范式。2024年诺贝尔授予AI相关研究,标志着这一范式转型获得全球科学共同体认可。在能源化工领域,人工智能驱动的科学研究(AI for Science)已从理念走入工程实践,成为驱动产业创新的关键变量。

本版文字由 上海石油化工研究院高级专家 李欣 图片由 周梦瑾 提供

阅读提示

当前,人工智能技术加速迭代演进,正从试验探索迈向价值创造阶段,引发经济社会各行业各领域深刻变革。2025年8月,国务院印发《关于深入实施“人工智能+”行动的意见》,推动人工智能与经济社会各行业各领域广泛深度融合。国务院国资委召开专题推进会,强调要高度重视人工智能在科研领域的应用,从政策支持、人才培养、标准规范等方面协同发力,完善支持人工智能引领科研范式变革的制度机制;要注重运用人工智能强大的数据分析、模拟与预测、跨学科融合等能力赋能科研工作,探索推动从传统的“观察-假设-验证”研究逻辑向“数据密集-智能涌现-人机协同”研究逻辑转变,形成由海量数据和庞大算力驱动的智能科研范式。

前沿突破

—AI驱动新材料研发与基础机理创新

石科院攻关地球物理、测井解释等基础算法,构建物理可解释的智能识别工具,打造勘探开发智能算法生态;石科院借助AI研究Beckmann重排反应催化机理,揭示活性位点作用;北化院开发聚酰亚胺材料智能设计平台,实现新结构定向筛选与性能预测,大幅提升研发效率;上海院构建分子筛材料智能合成系统,集成文献理解与自动化操作,实现逆向生成与性能优化

战略引领

—中国石化“AI+”专项行动的系统布局

中国石化深入开展“AI+”专项行动,围绕科技研发、生产制造、工程设计、经营管理四大领域全面推进高价值场景建设

上海院科研人员实时监测人工智能实验室运行情况。

AI应用的挑战与建议

尽管AI技术在能源化工研发领域前景广阔,但在实际应用中仍面临诸多挑战。

挑战一:

构建跨学科知识体系以培养AI材料研发的复合型人才

当前AI材料研发需要同时掌握材料科学、化学工程、计算机技术和人工智能等多领域知识。如何设计新型教育课程体系?企业应建立怎样的内部培训机制?学术界与产业界如何协同培养具备“材料+AI”双轨能力的研发人员?

建议:一是教育体系改革,高校应建立“材料智能计算”交叉学科,设置材料基因组学、AI化学等前沿课程,比如采用“3+1+X(3年基础学科+1年交叉学科+X年产业实践)”培养模式;二是企业培训机制改革,化工龙头企业可建立AI材料实验室,通过“师带徒”模式培养复合型人才;三是产学研协同,推广“双导师制”,由高校教授和企业专家联合指导培养复合型人才。

挑战二:

在数据驱动与机理模型之间实现最优平衡

当机器学习模型出现与物理化学规律相悖的预测结果时,研发人员应如何取舍?如何开发既能利用海量实验数据又能融合先验知识的混合建模方法?不同材料类型(如聚合物/合金/催化剂)是否需要差异化的建模策略?

建议:将物理规律、化学原理等有效嵌入人工智能模型,使模型的预测结果具有科学依据且可解释。同时,加强对模型的验证与评估,确保其可靠性和准确性。人机融合智能中的数据驱动和知识驱动模式代表了人工智能发展的新范式,核心在于整合数据驱动与知识驱动两种范式的优势,形成更智能、可解释系统,比如将第一性原理计算与深度神经网络结合,构建深度势能,在保证量子化学精度的同时,实现计算速度数量级提升。

挑战三:

人工智能研发成果的产业化落地

实验室成功的AI材料模型在放大生产时常出现性能衰减,如何建立更可靠的跨尺度预测方法?现有化工生产设备的数字化改造成本高昂,中小企业该如何破局?行业标准与监管体系应如何适应AI研发的新范式?

建议:一是开发跨尺度预测技术,耦合“微观-介观-宏观”尺度,以催化剂为例,从微观尺度上的催化剂筛选设计扩展到介观、宏观层面的时空尺度,覆盖催化材料的次级筛选与工业放大;二是采用“云平台+轻量化AI”模式,参与产业联盟共享算力资源,如中国石化打造“石化智云平台”,建立呼和浩特算力中心;三是制定AI材料研发的“数字身份证”标准,记录材料全生命周期数据,建立“算法透明度”评估机制。

人工智能(AI)是研究开发用于模拟、延伸和扩展人的智能的理论、方法、技术及应用系统的一门新的技术科学。人工智能驱动的科学研究(AI for Science,亦称AI4S)作为一种将人工智能和科学研究深度融合的新兴科技形态,依托人工智能技术,结合人类社会的各种现象和规律(原理、经典公式等),解决各种科研问题,从而推动科学发现和创新。近年来,人工智能的强大众所周知,但其“黑箱”属性也向来被学界诟病,即能知其然却不能知其所以然,将科学研究与人工智能融合,为人工智能提供了绝佳的验证步骤,让人工智能在特定领域内能产出可解释的成果。现今,AI4S在生命科学、材料科学、能源、半导体、地球与环境等众多领域开展研究实践,其中,在材料科学领域,AI4S的应用主要是从第一性原理出发,预测材料成分分布和微观结构的多尺度特征,并整合现有材料的数据库、专家知识和人工智能方法,将计算和实验结合,缩小材料创新的搜索空间,加快材料创新进程。2024年诺贝尔化学奖与物理学奖均花落人工智能相关研究项目。这一标志性事件不仅彰显了人工智能技术的成熟度,更预示着它正以革新之势重塑科学研究的固有

范式。当前在能源化工研发领域,有不少企业已敏锐捕捉到这一技术变革的浪潮,纷纷借助人工智能技术赋能科研开发,力求推动行业从传统模式向“预测性设计和精准定制”的智能化工方向迈进。

石油化工行业具有系统规模大、覆盖专业多、工艺复杂、产品多元化、控制难度大、耦合度高等特点,与人工智能的结合能够促使石化企业跳出传统流程行业的范畴,推动精细化生产和运营。同时,人工智能在能源化工材料开发、关键点识别、获取新的科学规律、促进化学信息学的发展方面将发挥重要作用。

中国石化深入开展“AI+”专项行动,以创新驱动赋能产业升级,围绕科技研发、生产制造、工程设计、经营管理等四个领域,全面推进一批高价值场景建设。中国石化建成7000亿和700亿参数的长城大模型,显著提升行业理解、知识推理和生成能力,成功通过工信部高通院、中国泰尔实验室权威测评,成为首个通过测评的MoE(混合专家)架构国产化行业大模型。投入使用以来,用户数累计超10万个,日均token(词元)用量达到1.5亿次,赋能200余个信息系统,支撑了审计、钻井、地热、设备等专业级(L2)模型训练和各应用场景建设。

场景深耕

—从地下油藏到地上工厂的智能实践

胜利油田推进透明盆地与数字油藏智能决策,推动勘探开发范式变革;镇海炼化建成设备健康管理中心,实现外操无人化、内操智能化,为流程制造业智能化升级提供示范样本;炼化工程集团布局智能设计、工艺寻优与知识库建设,全面覆盖工程业务

胜利油田推进基于透明盆地和数字油藏的勘探开发智能决策,基于油气生产物联网的智能生产运营两个智能化场景建设,2023年申报的国家能源智能油气田研发中心成功入选“赛马争先”创新平台名单。应用地质大模型构建以“透明盆地、透明油藏”为核心的多学科协同工作模式,在利津等区域井位部署中应用东营北带勘探大模型,建立五大陆陷页岩油地质模型,推进“所想即见、地下能透明”综合研究范式变革。在油气勘探方面,形成断层层解释、储层预测等多个智能化应用场景,断层解释效率提高10倍以上;在油气开发方面,实现开发指标预测、方案智能优化等场景智能化应用,效率提高5倍以上。

镇海炼化不断升级建设“智能工厂”,深度融合人工智能技术与石化生产场景,在设备安全、生产优化、质量管控、仓储物流等领域取得一定进展,为流程制造业的智能化升级提供了示范样本。镇海炼化以安全平稳与提质增效为核心,深化机理模型、专家模型、数学模型等运用。该公司建设了设备健康管理中心,整合各种智能模块,实现100余套装置52万台设备全方位、多维度的智能展示和预警,在此基础上,通过基于AI的数据回归模型,开展以可靠性为中心的维修(RCM),建立包含46种不同转动设备类型的自有知识库,为后续可靠性分析、维修业务提效夯实基础。该公司还运用S-GROMS、SKI、COILSIM等国产化人工智能工业软件,提升劣质原油加工能力,优化装置生产安排。2024年,该公司进行了时序大模型与生产实际结合的验证,证实大模型在预

警预测方面是可行的,接下来将进一步推动应用落地。镇海炼化通过人工智能技术与工业场景的深度融合,努力向“外操无人化、内操智能化”目标迈进。在外操层面,通过智能装备替代人工,实现“无人巡检、无人仓储”。应用物联网传感、智能机器人等,建设了无人值守变电所、无人泵站、无人行车、无人吊磅等无人化场景;应用飞索智能巡检机器人,实现1.2万平方米球罐区全方位、全覆盖、全天候智能巡检;应用RGV环穿小车与仓储策略优化模型协同运作,建成无人聚烯烃立体库。在内操层面,努力提升装置优化控制水平,在乙烯、重整等装置实现在线实时优化,在4号常减压等7套装置建设全流程智能优化,通过“RTO-APC/IPC/AIPC-DCS”全过程闭环实现装置效益最大化。

炼化工程集团已初步完成人工智能应用领域的布局,在炼化工程领域完成多个高价值应用场景的顶层规划设计,相关技术研发与场景落地已形成阶段性实践成果。在避免重复劳动、解放生产力方面,大力开发智能构筑物设计、智能静设备设计等场景。在发挥人工智能大算力、大数据优势,解决复杂性、系统性工程设计难题及决策方面,加速推进智能工艺寻优、智能工艺安全分析等场景。在健全、筑牢知识底座方面,同步推进炼化工程知识库的搭建工作,将其广泛应用于智能设计审查、炼化工艺问答助手等场景,全面覆盖炼化工程业务,实现智能化、高效化发展。此外,炼化工程集团还在智能焊接、项目现场智能安全监管、智能运维等领域取得显著进展,彰显在工程智能化领域的技术实力和创新能力。

石科院牵头组建中国石化勘探开发数智技术重点实验室,并做锐捕捉到这一技术变革的浪潮,形成“人工智能+油气业务”百余人跨学科攻坚团队,具备较强的人工智能技术研发与应用能力。石科院聚焦油气勘探开发核心业务场景,围绕“数据治理-算法研发-软件生态”技术布局开展基础研究与关键技术攻关。利用人工智能技术在处理大规模复杂数据方面的显著优势,重点攻关地球物理、测井解释、基础实验地质等领域的基础算法,已在地球物理“甜点”智能识别与解释、测井特征曲线特征识别、岩芯图像智能识别、生产预测与优化等方面取得积极进展,形成多项人工智能特色技术,构建了“物理可解释、场景高适配”的专用工具,为上游数字化转型提供了重要支撑。同时,积极推动人工智能基础算法共享生态建设,相关算法已在长城大模型应用社区向全集团开源,践行共享共建理念,打造勘探开发智能算法生态。

石科院与深势科技公司深入合作攻关,借助目前先进的AI技术来认识环己酮脒气相Beckmann重排反应过程的关键科学问题,在国际材料与化工顶刊杂志《Nano Research(纳米研究)》和《ACS Applied Materials&Interface(ACS应用材料与界面)》上报道了重要工作进展,相关基础研究课题获得国家自然科学基金委员会项目支持。石科院团队采用AI技术系统地研究了催化剂组成、硅醇类型,以及溶剂效应对反应的影响。这项工作首次系统地研究了S-1分子筛催化剂在气相Beckmann重排反应中的作用,不仅揭示了硅醇式活性位点的催化机理,也展示了AI辅助模拟在预测和指导催化剂设计中的强大能力,为工业生产绿色己内酰胺提供了可行的新方法。这项研究展示了计算机模拟在催化剂设计中的必要性,可以事先预测最佳的催化剂和反应条件,对于将基础研究成果快速转化为应用并实现产业化具有重要意义。这项创新不仅有望推动绿色尼龙6单体的生产,也将对纤维、塑料等行业产生深远的影响。

北化院利用人工智能赋能聚酰亚胺研发,实现“筛得快且筛得好”。氮气是一种重要的

战略物资,在科研、国防和经济建设中具有不可替代的作用。聚酰亚胺是提取高纯度氮气的膜材料里的关键原料,北京化工研究院通过智能模型训练,自主开发出聚酰亚胺材料智能设计平台。该平台可以定向生成新型分子结构设计方案,准确预测新材料的气体分离性能等参数,使科研人员能够定向筛选最优方案进行实验验证,大幅提升研发效率。经实验验证,该平台对气体分离性能的预测平均准确率超过90%;新设计开发的聚酰亚胺膜,其气体分离性能较现有商用材料提升30%,聚酰亚胺新结构的筛选和设计时间缩短80%。2025世界人工智能大会举办期间,国务院国资委在“AI焕新产业共赢”企业人工智能产业发展分论坛上发布了40项“中央企业人工智能战略性高价值场景优秀建设成果”,中国石化“AI辅助聚酰亚胺气体分离材料开发”成功入选。

上海院利用人工智能赋能分子筛材料研发。分子筛是重要的催化材料,广泛应用于石油化工生产过程和环保领域。上海院针对化工高温高压严苛工况,开发了集成机器学习、实验预测、全流程自动化功能的分子筛材料合成系统。该系统通过构建文献语义理解模型,驱动设备自动完成实验操作;依托大语言模型智能体,实现材料的逆向生成与性能优化;结合第一性原理计算和机器学习算法,运用可解释性AI模型挖掘数据中的隐藏规律和构效关系,赋能分子筛理性设计与定向合成,显著加快高性能分子筛材料的研发进程。中国石化分子筛材料智能研发平台入选2025世界人工智能大会中国人工智能产业创新成果展。



中国石化绿色化工分子筛材料人工智能重点实验室。

行业案例

巴斯夫超级计算机Curiosity是目前世界上最大的用于工业化学研究的超级计算机。巴斯夫将人工智能融入分子与化合物模拟计算流程。在Curiosity的帮助下,巴斯夫能够在短短几个小时内计算模拟超过40万种相关复杂环境场景,而不是通过几年的时间来完成。这一举措大幅提升了计算效率,能快速筛选聚合物结构,加速新型分子和化合物的开发进程,而且还能挖掘出传统方法难以察觉的潜在关联性,为研发开辟新思路。

陶氏化学与微软达成合作,采用微软Azure机器学习平台进行研发,将其机器学习平台和人工智能技术整合到自身的预测分析系统中。陶氏化学能够将材料科学、反应动力学和流变学知识与人工智能进行有机结合,并通过历史数据、预测模型、自动化工作流程和扩展应用程序来预测产品趋势、配方特性,以及模拟客户制造

流程。万华化学利用人工智能技术加速化学反应条件的优化,相比传统正交实验方法,人工智能技术将研发周期缩短了3个月。在催化剂研发方面,面对14000多种备选方案,万华化学利用人工智能快速筛选出156种具有潜力的选项,随后进一步优化至4种,精准推荐分子合成实验,让科研效率得到质的飞跃。

宁德时代搭建了电池材料智能化设计平台,拥有超1.8亿条分子数据和100万条晶体数据,还有正极、负极、电解液等专题研发数据库10余个,将材料机理、大数据分析、AI算法有机结合,可以在90天内完成材料筛选和闭环验证,从而加速电解液、正极、包覆等电池材料的开发。通过这种新模式,不仅研发周期缩短了30%,研发成本也降低了30%,在提升产品性能的同时,有效提升了企业的经济效益。