



## Editorial

## 智能流程制造助力双碳目标——实现碳达峰和碳中和目标的流程制造数字化转型

钱锋

*Key Laboratory of Smart Manufacturing in Energy Chemical Process, Ministry of Education, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China*

现阶段，能源供应和流程制造行业面临产业结构重型化、能源消耗过量化、能源供应高碳化等重大问题，全球能源需求和消耗持续增长。高碳能源系统的污染排放加剧了全球气候危机，因此，相关行业亟需开展能源改革和工业转型。依靠大数据和人工智能的流程制造数字化可以有效

帮助流程制造行业提高效率和节能水平。实现碳达峰和碳中和的目标，需积极推广创新数字技术及其在制药、化工、能源、金属和聚合物材料领域的应用。

为助力流程制造行业更有效地实现绿色低碳生产，提高能源利用效率，减少环境污染，实现数字化与低碳协同发展的目标，本期智能流程制造专题聚焦运营管理、生产操作、效率、安全和信息融合等方面的瓶颈问题，旨在推进包括感知、建模、优化、溯源、自主控制和效率分析等生产过程各阶段的数字化转型。

在中国工程院的大力支持下，本期专题非常荣幸地邀请到来自比利时、英国、中国等多个国家的院士和杰出研究学者，就流程制造数字化转型的相关理念、理论和技术进行报告。经过严格且全面的同行评审程序，本期专题最终选定了六篇论文进行发表。下面对这些文章进行简要介绍。

作为最重要的制造业之一，制药行业的发展关乎人类

生命健康。然而，新药研发是一个耗时且成本高昂的过程。人工智能通过结合大量可访问数据打破技术分析瓶颈，有效提高生产力，在推动新药开发过程中起到重要作用。路明坤等对药物发现中常用的人工智能模型做了详尽概述，讨论了这些模型在靶点发现、药物设计、临床前研究、自动化药物合成以及市场影响等药物研发各阶段中的具体应用。除此之外，研究者们还对人工智能技术在减轻研发人员工作量和缩短药物研发周期方面的潜在优势进行了论述。

工业中许多重要的化学过程都是漫长且复杂的。适当的实验设计能够推动新化学工艺的开发和已有化学工艺的优化，在保证信息获取最大化的同时，促进时间和资源的高效利用。因此，将机器学习应用于高维非线性数据，有助于加速新技术的实验和开发，在整个实验周期内实现自动化研究。史云飞等重点关注机器学习技术在化学领域的成功应用案例，讨论适用于此类研究的数据、典型机器学习算法、应用场景以及未来前景。Ureel等关注主动学习在分子和催化剂设计以及反应和反应器设计等化学实验中的应用，介绍了主动学习相关原理，探索了机器学习的优势，并对该领域的未来发展方向提出了展望。

高分子材料是发展高科技和先进制造的基础。为加速材料开发，降低研究成本，目前已有大量算法和数据被用于指导高分子材料的虚拟合成、性能预测和产物筛选。这一革命性的材料研发范式现已受到了广泛关注，并被证实是有效且有价值的。高粱等概述了高分子材料基因组工程的现有研究和成果，提出利用机器学习从数据中提取潜在

规则的方法，并对相关挑战和机遇进行了阐释。

随着工业工程规模的不断扩大，通过优化决策过程和控制策略，确保工艺制造中的闭环稳定性和高精度性能是非常重要的。韦可等提出了一种多目标自适应优化模型预测控制（MAO-MPC）方法，以应对锌冶炼行业中面向绿色生产和资源效率的相关挑战。研究人员引入了一种基于能量守恒定律的氧化锌回转窑动态计算流体力学（DCFD）模型，并采用基于稀疏识别的模型还原方法，克服传统DCFD模型的高计算复杂性。此外，柴天佑等提出了一种基于端-边缘-云协作的能源密集型设备低碳运营

智能控制方法，结合机理分析和深度学习技术，实现设定点控制、自优化调整和跟踪控制。

总结来说，本期智能流程制造专题中的六篇重要论文，研讨了流程制造数字化转型在制药、化学、高分子材料、能源等多个行业的前沿进展。我们希望本期专题能够帮助学术界和工业界的相关研究学者及从业者，更好地理解流程制造数字化转型对实现中国双碳目标的重要性。最后，我们衷心感谢中国工程院及 *Engineering* 编辑部、作者、审稿人、编辑人员和客座编辑们付出的巨大努力和辛勤工作。