

基于数字孪生技术的化工流程实时监控与仿真系统构建

刘 航

山西阳光卓越工程有限公司 山西 太原 030032

摘要：随着工业4.0和智能制造的深入推进，数字孪生（Digital Twin, DT）技术作为连接物理世界与信息空间的关键桥梁，在流程工业中展现出巨大潜力。化工行业因其工艺复杂、安全风险高、能耗大等特点，对生产过程的实时监控、故障预警与优化决策提出了更高要求。本文围绕数字孪生技术在化工流程中的应用，系统阐述了基于数字孪生的化工流程实时监控与仿真系统的构建方法。首先，分析了化工流程的特点及传统监控系统的局限性；其次，提出了面向化工流程的数字孪生系统架构，包括物理层、数据层、模型层、服务层与应用层；接着，详细论述了多源异构数据融合、高保真动态模型构建、虚实同步机制以及智能仿真与优化等关键技术。构建数字孪生系统能够显著提升化工流程的智能化水平、运行安全性与能效表现，为化工企业数字化转型提供有效支撑。

关键词：数字孪生；化工流程；实时监控；过程仿真；数据融合；智能优化

引言

化工行业作为国民经济重要支柱，生产过程具连续、强耦合、非线性及潜在危险性等特点。传统监控系统依赖DCS、PLC和历史数据库，面对复杂工况、设备老化、突发故障时，存在响应滞后、预测弱、缺乏全局优化等问题。数字孪生技术集成物联网、大数据、AI、云计算与机理建模，广泛应用于多领域。它构建物理实体虚拟映射，能全生命周期感知状态、仿真、预测分析与决策。在化工领域，有望突破传统监控瓶颈，实现从“被动响应”到“主动预测”、从“局部控制”到“全局协同”的转变。但化工流程数字孪生系统构建面临诸多挑战，如多源异构数据融合与质量保证、强非线性动态模型构建、虚实同步实时性与一致性保障、仿真结果指导实际操作优化等。本文旨在构建化工流程数字孪生实时监控与仿真系统，探索其智能化升级的可行路径与技术范式。

1 化工流程监控现状与挑战

1.1 化工流程特点

化工生产流程通常包含反应、分离、传热、传质等多个单元操作，具有以下典型特征：（1）强耦合性：各单元之间相互影响，一个参数的变化可能引发连锁反应；（2）非线性动态：化学反应速率、相平衡关系等常呈现非线性；（3）高风险性：高温高压、易燃易爆、有毒有害介质的存在使得安全至关重要；（4）能效敏感：能源消耗占生产成本比重高，节能潜力大；（5）数据密集：现代化工厂部署大量传感器，产生海量实时数据。

1.2 传统监控系统的局限性

当前主流的化工监控系统主要基于DCS/SCADA平

台，其局限性体现在：（1）静态监控为主：侧重于阈值报警，缺乏对趋势演变与潜在风险的预测能力；（2）模型缺失或简化：多数系统未集成过程机理模型，难以进行深度仿真与反演；（3）信息孤岛现象：设备层、控制层、管理层数据未有效打通，难以形成统一视图；（4）人机交互滞后：操作员依赖经验判断，缺乏智能辅助决策支持；（5）维护成本高：系统扩展性差，难以适应工艺变更或新设备接入。因此，亟需一种能够融合物理模型与数据驱动、支持实时交互与智能优化的新一代监控体系。

2 数字孪生系统总体架构设计

为应对上述挑战，本文提出一种五层架构的化工流程数字孪生系统，旨在实现物理世界与虚拟空间的深度融合与双向互动。

2.1 物理层

物理层是整个数字孪生系统的现实基础，涵盖实际运行的化工装置本体及其附属传感与执行网络。具体包括反应器、精馏塔、换热器、泵、阀门、管道等工艺设备，以及部署于其上的各类传感器——如热电偶、压力变送器、质量流量计、在线气相色谱仪、红外热像仪乃至声发射传感器等。这些设备不仅构成物质转化与能量传递的载体，同时也是数字孪生体所需原始数据的来源^[1]。同时，执行机构如调节阀、变频电机等则接收来自上层系统的控制指令，完成对物理过程的干预。物理层的完整性、可靠性与数据质量直接决定了数字孪生系统的上限。

2.2 数据层

数据层承担着从物理层到信息空间的数据桥梁作用，其核心任务是对多源、异构、高并发的过程数据进

行采集、清洗、融合、存储与管理。考虑到化工现场数据类型繁杂、采样频率差异大（如温度每秒采集，而成分分析可能每分钟一次），系统需引入边缘计算节点，在靠近数据源头处进行初步滤波、压缩与特征提取，以减轻中心服务器负担并降低传输延迟。对于海量时序数据，采用专用的时序数据库（如InfluxDB或TDengine）进行高效存储，支持快速查询与回溯。更重要的是，数据层需建立统一的数据治理规范，定义元数据标准，确保不同来源数据在语义和时间尺度上的一致性。在此基础上，通过数据融合算法（如卡尔曼滤波或深度学习模型）整合冗余或互补信息，提升整体数据的可信度与代表性，为上层模型提供高质量输入。

2.3 模型层

模型层是数字孪生系统的“大脑”，负责构建对物理过程的虚拟表征。本文主张采用机理模型与数据驱动模型相结合的混合建模范式。机理模型基于质量、能量、动量守恒定律及化学反应动力学原理，通过微分代数方程组精确描述过程内在规律，具有良好的外推能力和物理解释性。例如，精馏塔可采用经典的MESH方程体系进行建模。然而，由于实际装置存在设备老化、结垢、仪表偏差等不确定性，纯机理模型往往难以完全匹配真实行为^[2]。为此，引入数据驱动模型（如LSTM、Transformer等深度学习）学习历史数据中隐含的输入-输出映射关系，并用于补偿机理模型的残差。这种“白盒+黑盒”的混合结构既能保留物理可解释性，又能适应实际工况的复杂性，从而构建出高保真、自适应的数字孪生体。

2.4 服务层

服务层是连接模型与应用的中间枢纽，提供模型运行、仿真调度、虚实同步及接口开放等核心能力。该层部署有高性能的实时仿真引擎，能够以毫秒或秒级步长驱动数字孪生模型运行，并与物理系统保持时间同步。为确保虚拟模型始终反映物理实体的真实状态，系统设计了动态校正机制：定期将物理装置的关键状态变量注入仿真模型作为初始条件，并利用扩展卡尔曼滤波等算法在线估计并更新模型参数（如传质效率、热损失系数）。同时，服务层采用事件驱动架构，当数据层检测到异常信号或用户发起“what-if”分析请求时，自动触发特定仿真场景。为提升系统可维护性与扩展性，服务层以微服务形式部署于容器化平台（如Kubernetes），实现模块解耦与弹性伸缩。

2.5 应用层

应用层面向最终用户，将数字孪生的能力转化为直

观、实用的功能。通过WebGL或Unity等技术构建工厂三维可视化界面，操作员可在浏览器中漫游虚拟工厂，实时查看设备状态、物流走向与关键参数分布。系统集成智能诊断模块，结合统计过程控制与图神经网络，不仅能识别异常，还能追溯根因，辅助决策。在优化方面，基于数字孪生体开展操作参数寻优，以能耗最低或产品质量最优为目标，生成可执行的控制建议。此外，系统还支持虚拟培训功能，模拟开停车、紧急停车、泄漏处置等高风险场景，使操作员在无风险环境中积累经验，显著提升应急处置能力与操作熟练度。

3 关键技术实现

3.1 多源异构数据融合

化工现场的数据来源广泛，既有来自DCS的常规过程变量，也有来自在线分析仪的成分数据，甚至包括视频、振动等非结构化信息。这些数据在精度、频率、单位和语义上均存在差异，直接使用易导致模型失真。为此，本文采用分层融合策略。在底层，对同一物理量的多个传感器读数进行加权平均或鲁棒滤波，抑制随机噪声；在特征层面，提取具有工程意义的衍生变量（如温度梯度、压力波动率、组分变化速率），作为融合模型的输入；在决策层面，结合专家知识与机器学习模型，对融合结果进行综合评估^[3]。例如，当精馏塔顶温度异常升高时，系统会同步分析回流比、进料组成、再沸器蒸汽流量等关联变量，通过贝叶斯推理判断该现象是由进料轻组分增多引起，还是冷凝器效率下降所致，从而避免误报。

3.2 高保真动态模型构建

以苯-甲苯连续精馏塔为例，其动态行为可通过一组微分代数方程精确刻画，包括各塔板的物料平衡、组分平衡、相平衡及热量平衡方程。其机理模型可表示为：

$$\begin{cases} \frac{dM_i}{dt} = L_{i-1} + V_{i+1} - L_i - V_i \\ \frac{d(M_i x_{i,j})}{dt} = L_{i-1} x_{i-1,j} + V_{i+1} y_{i+1,j} - L_i x_{i,j} - V_i y_{i,j} + F_j \delta_{i,f} \\ V_i = K_i(T_i, P_i)(L_i - V_{i+1}) \\ y_{i,j} = K_{i,j}(T_i, P_i)x_{i,j} \end{cases}$$

其中 M_i 为第 i 板持液量， $x_{i,j}$ 、 $y_{i,j}$ 分别为液相与气相中组分 j 的摩尔分数， K 为相平衡常数。

为提升模型精度，引入数据驱动残差补偿项：

$$\hat{y}_{real} = y_{mech} + f_{NN}(u, t)$$

其中 f_{NN} 为神经网络，学习机理模型与实际输出的偏差。

3.3 虚实同步与模型在线更新

数字孪生的生命力在于其与物理实体的实时一致性。为实现这一目标,系统建立了多层次的同步机制。首先,在时间维度上,采用精确时间协议(PTP)确保数据采集、模型仿真与控制指令执行在统一时钟下进行,避免因时钟漂移导致的逻辑混乱。其次,在状态维度上,每5秒将物理装置的关键状态(如塔釜液位、塔顶压力)作为边界条件注入仿真模型,强制模型“重置”至真实起点,防止误差累积^[4]。再次,在参数维度上,利用扩展卡尔曼滤波算法,根据实时测量数据不断修正模型中的不确定参数,使模型持续逼近真实系统。最后,系统设置漂移检测模块,当仿真输出与实测值的偏差持续超过预设阈值时,自动触发告警,提示可能需要人工介入或模型重构,从而保障系统的长期可靠性。

3.4 智能仿真与优化

依托高保真的数字孪生体,系统可开展多种智能仿真与优化任务。操作人员可发起“what-if”分析,模拟改变某一操作参数(如提高进料温度)对产品纯度、能耗及塔压的影响,辅助制定调整策略。在安全方面,系统支持故障注入测试,例如人为关闭冷凝器冷却水,观察塔压上升速率及安全阀动作时机,评估现有保护措施的有效性。更进一步,系统集成了基于模型的强化学习(MBRL)优化器,以单位产品能耗最小化为目标函数,综合考虑产品质量约束(如塔顶苯纯度 $\geq 99.5\%$),自动搜索最优的回流比与再沸器蒸汽负荷组合。该优化策略在数字空间中反复试错,无需扰动实际生产,最终输出的安全、经济操作方案可直接推送至DCS系统执行,实现闭环优化。

强化学习(MBRL)框架如下:

$$\pi^* = \arg \min_{\pi} \mathbb{E} \left[\sum_{t=0}^T \gamma^t C(x_t, u_t) \right]$$

其中 C 为成本函数(含能耗、产品质量惩罚项), π 为控制策略。

4 讨论与展望

尽管数字孪生系统可以取得良好效果,但其推广仍面临若干挑战。当前模型高度依赖特定装置的先验知识,跨装置迁移能力有限;大规模工厂部署需更高效的边缘-云协同架构以保障实时性;工业数据的安全传输与模型知识产权保护机制尚不完善;人机交互设计也需进一步优化以增强操作员信任。未来工作将聚焦于构建化工知识图谱以支持语义化建模,探索联邦学习在多工厂协同优化中的应用,集成碳足迹追踪功能以支撑绿色化工,并积极参与数字孪生标准体系建设,推动技术规模化落地。

结语

本文系统研究了基于数字孪生技术的化工流程实时监控与仿真系统构建方法。通过设计五层架构,融合机理模型与数据驱动方法,实现了物理装置与虚拟模型的高保真映射与实时交互。该系统在状态感知、故障预警、能效优化与人员培训等方面具有显著优势,可有效提升化工生产的智能化、安全化与绿色化水平。数字孪生不仅是技术工具,更是推动化工行业数字化转型的战略支点。随着相关技术的持续演进,其在复杂流程工业中的应用前景将更加广阔。

参考文献

- [1]朱琳怡,王康,吕佳龙.数字孪生在化工行业中的研究及应用进展[J].中国石油和化工标准与质量,2025,45(10):126-128.
- [2]邱东海.基于数字孪生的化工装备运行状态预测模型研究[C]//河南省豫商经济文化交流协会.2025中国建筑经济研讨会论文集(下册).湖南省雪天盐碱新材料有限公司,2025:196-197.
- [3]杨亮.数字孪生技术在化工企业数字化管网建设上的应用[J].石化技术,2024,31(11):208-210+182.
- [4]李泽军,都腾飞,李仲树.基于柔性遗传算法的化工产线数字孪生仿真研究与优化[J].制造业自动化,2023,45(11):142-146+184.