

Exploring the practical path of digital simulation technology in chemical process optimization

Liangliang Yang

Shanxi Linxin Coal Coking Co., Ltd., Linfen, Shanxi, 042509, China

Abstract

With the chemical industry's increasing demands for production efficiency and product quality, process optimization has become crucial for enhancing corporate competitiveness. Digital simulation technology, as an efficient technical approach, is widely applied in optimizing and improving chemical processes. Through digital simulation, mathematical models of chemical processes can be established on computers to simulate operations under various conditions, thereby optimizing production workflows, improving resource utilization efficiency, reducing costs, and ensuring product quality stability. This paper first introduces the fundamental principles and current applications of digital simulation technology in chemical processes, then explores practical implementation paths including model construction, parameter optimization, and process flow refinement. Research findings demonstrate that digital simulation technology effectively enhances process optimization outcomes and provides robust support for industrial applications.

Keywords

chemical process optimization; digital simulation; process optimization path; simulation technology; production efficiency

化工工艺优化中数字化模拟技术的实践路径探索

杨亮亮

山西瀚鑫煤焦化有限责任公司, 中国·山西·临汾, 042509

摘要

随着化工行业对生产效率和产品质量要求的不断提高, 化工工艺优化成为提升企业竞争力的关键。数字化模拟技术作为一种高效的技术手段, 广泛应用于化工工艺的优化与改进过程中。通过数字化模拟, 可以在计算机上建立化工过程的数学模型, 模拟不同操作条件下的工艺过程, 从而优化生产过程、提高资源利用效率、降低成本, 并保证产品质量的稳定性。本文首先介绍了数字化模拟技术在化工工艺中的基本原理与应用现状, 接着探讨了数字化模拟在化工工艺优化中的实践路径, 包括模拟模型的构建、参数优化、工艺流程的优化等方面。研究表明, 数字化模拟技术能够有效提高化工工艺的优化效果, 并为工业化应用提供强有力的支持。

关键词

化工工艺优化; 数字化模拟; 工艺优化路径; 模拟技术; 生产效率

1 引言

化工行业作为基础工业之一, 涉及原料加工、能源利用、产品制造等多个环节。在化工生产过程中, 工艺的优化和改进是提高生产效率、降低生产成本、提升产品质量的关键。随着传统优化手段的局限性逐渐显现, 数字化模拟技术作为一种先进的工具, 已经在化工工艺的优化中取得了显著的成果。数字化模拟技术通过建立数学模型, 模拟化工过程的运行情况, 能够在虚拟环境中进行多次试验, 评估不同参数对工艺结果的影响, 从而为工艺优化提供数据支持和决策依据。然而, 在实际应用中, 如何将数字化模拟技术高效、准确地应用于化工工艺的优化中, 仍然是一个亟待解决的问题^[1]。

【作者简介】杨亮亮(1987-), 男, 中国山西临汾人, 本科, 工程师, 从事化工工艺研究。

尤其是在面对复杂的化工反应、传递过程、设备参数时, 模拟模型的准确性和计算效率如何提升, 成为学术界和工业界共同关注的重点。本文将探讨数字化模拟技术在化工工艺优化中的应用现状及其发展前景, 分析其在化工生产过程中的实践路径, 为推动化工行业的数字化转型提供思路。

2 数字化模拟技术的基本原理与应用现状

2.1 数字化模拟技术的基本原理

数字化模拟技术是指通过计算机对化工工艺过程进行建模与仿真, 通过数值计算方法模拟化工反应、物质传递、热力学过程等多方面的内容。这些模拟通常依赖于数学方程, 如质量、能量和动量平衡方程等, 通过计算机进行求解, 从而得到整个工艺过程的模拟结果^[2]。在化工工艺优化中, 数字化模拟技术的核心是构建精确的工艺模型, 并通过模拟不同操作条件和参数设定来评估工艺性能, 以实现过

程优化。

数字化模拟的应用主要包括以下几个方面：首先，在工艺设计阶段，通过模拟不同的工艺流程和反应条件，评估最优工艺方案，减少了实际操作中的试错过程；其次，在生产过程控制中，数字化模拟技术可以实时监控生产过程中的各种变化，为操作人员提供操作建议和决策支持；最后，在设备选型和改造过程中，数字化模拟技术可以对设备的运行情况进行预测，帮助企业做出合理的投资决策。

2.2 数字化模拟技术在化工工艺优化中的应用现状

近年来，随着计算机硬件和软件技术的飞速发展，数字化模拟技术在化工行业的应用逐渐深入，成为优化生产工艺、提高效率、降低成本的关键工具。数字化模拟技术能够通过构建精确的数学模型和计算机程序，模拟化工生产过程中的各个环节，从化学反应、分离过程到传热与传质等方面，进行详细分析与优化。通过应用数字化模拟，许多企业成功实现了生产工艺的优化与改进，显著提高了产品的产率和质量，同时减少了能耗和原材料的浪费^[3]。例如，在石油化工、精细化学品生产和天然气处理等领域，数字化模拟技术已经成为工艺过程优化和控制的重要工具，能够帮助企业在保障安全和产品质量的前提下，提高生产效率和降低生产成本。

尽管数字化模拟技术在化工行业的应用取得了显著的进展，但在实际应用过程中，仍然面临一些亟待解决的挑战。首先，如何提升模型的准确性和计算效率仍是一个核心问题。许多化工过程涉及复杂的物理和化学反应，如何确保模型能够精准地反映实际工况，并且在高效计算的同时保持足够的精度，是当前研究的重点。其次，许多化工反应涉及非线性反应和多组分体系，处理这些复杂反应的数学模型仍然存在一定的技术难度，特别是在反应动力学和传质过程的建模中，需要更为精确的算法和方法来描述这些复杂的现象^[4]。此外，实时监控数据的处理和与生产过程的实时对接也是一个重要问题，如何将实时数据流与已有的数字化模型结合起来，确保模拟结果能够实时反馈并指导生产调整，是实现工艺过程实时优化和控制的关键。

总的来说，尽管数字化模拟技术在化工行业的应用前景广阔，但要解决这些技术挑战，还需要进一步深化相关理论研究，改进计算方法，并增强数据处理与实时反馈的能力，才能更好地推动数字化模拟技术的应用和发展。

2.3 数字化模拟技术的技术发展方向

随着化工行业对生产效率、资源利用率、环境保护等方面要求的不断提高，数字化模拟技术正朝着更加精准、高效和智能化的方向发展。随着新兴技术的快速进步，尤其是人工智能（AI）和机器学习技术的应用，数字化模拟技术的潜力得到进一步扩展，尤其在复杂化工工艺的优化和预测方面展现出了巨大的优势。传统的数字化模拟模型虽然在许多领域中已被广泛应用，但面对复杂的化学反应和多组分体系时，模型的准确性和适用性往往受到限制^[5]。AI算法通

过深度学习技术，能够从大量数据中提取潜在的规律和关系，揭示传统模型难以识别的复杂模式。这使得模拟技术不仅能够更准确地反映实际工况，还能够更广泛的工艺过程中提供优化建议。

通过将AI技术与数字化模拟模型结合，化工企业可以更好地应对复杂的工艺问题，例如非线性反应、动态过程优化，以及多变量条件下的优化决策等。机器学习模型通过不断从实际运行数据中学习，可以在模拟过程中自我改进，提供更加精准的预测与优化结果。此外，AI技术还能在工艺控制中发挥重要作用，实现实时监控和调整，从而进一步提高生产效率和产品质量，降低能源消耗和物料浪费。同时，随着云计算和大数据技术的不断发展，数字化模拟技术的应用正在变得更加广泛和深入。云计算使得大量计算资源能够按需共享，降低了企业在数字化模拟过程中对硬件设施的依赖，大大提高了计算效率和模拟的灵活性。大数据技术则可以帮助收集和分析更多的生产数据，支持更为精准的模型训练和决策支持。结合这两者，数字化模拟技术将能够在全球范围内实现更广泛的工业化应用，推动化工行业向数字化、智能化转型。数字化模拟技术的进步，不仅有助于提高生产效率，还能显著提升资源利用率，减少环境污染，助力实现绿色可持续发展。

3 数字化模拟在化工工艺优化中的实践路径

3.1 工艺模型的构建与优化

工艺模型的构建是数字化模拟技术应用的核心。为了提高工艺优化的精度，首先需要根据具体的化工工艺流程，建立合适的数学模型。这个模型应该能够描述工艺中各个环节的物质传递、能量转化、反应动力学等方面的过程，并且能够反映不同操作条件下的工艺表现。在实际应用中，常见的模型包括反应器模型、分离装置模型、热交换器模型等。模型的准确性直接影响到模拟结果的可靠性，因此，优化模型的精度是工艺优化的关键步骤。

在工艺模型的构建过程中，可以利用已有的实验数据进行模型验证和校正。例如，通过将实验数据与模拟结果进行对比，调整模型中的相关参数，确保模型与实际工艺过程的吻合度。随着模型的不断优化，模拟结果的精度和可靠性得到了逐步提高，为工艺优化提供了更为准确的理论依据。

3.2 参数优化与工艺流程改进

数字化模拟技术的另一个重要应用领域是工艺参数的优化。通过在数字化模型中输入不同的操作参数，如温度、压力、反应物浓度等，模拟工艺过程在不同条件下的表现，从而找到最优的操作条件。参数优化不仅能够提高产品的产量和质量，还能有效降低能耗和原料浪费，减少生产成本。

在化工工艺流程的优化中，数字化模拟技术可以帮助企业识别瓶颈环节，进行工艺改进。例如，在化学反应过程中，调整反应温度和压力可以显著提高反应速率和产率；在分离过程中，通过模拟不同的分离工艺和设备组合，可以找

到最经济的分离方案。通过数字化模拟技术,企业能够在不需要进行大量实际实验的情况下,快速评估不同优化方案的效果,从而提高工艺优化的效率和精度。

3.3 实时监控与闭环控制系统

数字化模拟技术的一个重要发展方向是与生产过程的实时监控和控制系统结合,实现闭环控制。通过在生产过程中实时采集各类数据,并将这些数据输入到数字化模型中,能够实时监测工艺参数的变化,并对工艺过程进行动态调整。通过与自动化控制系统的结合,数字化模拟技术可以实现对工艺的实时优化,从而保证生产过程的稳定性和安全性。

例如,在精细化学品的生产过程中,通过实时监测反应温度、压力、浓度等参数,并通过模拟系统计算出最佳操作条件,能够自动调整反应器中的温度和压力,实现生产过程的自动化和优化。实时监控与闭环控制系统的结合,不仅提高了生产效率,还增强了工艺的安全性和稳定性。

4 数字化模拟技术应用中的挑战与优化策略

4.1 数据处理与模型验证的挑战

数字化模拟技术的应用面临的一个主要挑战是如何处理和分析大量的数据。在化工生产过程中,涉及的变量多、数据量大,如何高效地处理这些数据,并将其转化为有用的信息,是提高模拟精度的关键。此外,模拟模型的准确性和实用性在一定程度上依赖于大量实验数据的支持。如何通过实验数据对模型进行验证和优化,是提升数字化模拟技术可靠性的关键。

为此,可以通过引入大数据分析技术和机器学习算法,帮助处理和分析复杂的数据集,从中提取有价值的信息。此外,采用先进的实验设计方法,进行系统的实验数据采集与分析,以确保模型的准确性和适用性,是提高数字化模拟效果的重要途径。

4.2 技术集成与系统协同的挑战

数字化模拟技术的应用需要与现有的生产设备、控制

系统和工艺流程紧密集成,如何实现不同技术和系统之间的协同,仍然是技术应用中的一个难点。尤其是在大规模的化工生产中,涉及多个环节和多个系统的集成,如何确保数据的无缝传输和技术的高效协同,是提高系统性能的关键。

为了应对这一挑战,可以采用标准化的技术接口和平台,确保不同系统之间的数据兼容性和流畅地交互。同时,加强各环节之间的沟通与协作,促进数字化模拟技术与现有系统的有机融合,提高整体系统的运行效率。

5 结语

数字化模拟技术在化工工艺优化中的应用,能够有效提高工艺流程的效率、降低成本、提升产品质量。通过优化工艺模型、调整参数、改进工艺流程,数字化模拟技术为化工企业提供了更加高效和精准的优化手段。然而,技术的应用过程中仍然面临着数据处理、模型验证、系统集成等挑战,需要依靠先进的技术手段和持续的研究创新,进一步提升数字化模拟的精度和效率。未来,随着大数据、人工智能等新兴技术的发展,数字化模拟技术将在化工行业中发挥更加重要的作用,为化工企业的持续发展提供强有力的支持。

参考文献

- [1] 陈琦,朱军伟,米鹏,等.试论国内首次使用的化工工艺安全可靠论证[J].山东化工,2024,53(24):98-100.
- [2] 李良.节能降耗技术在化工工艺中的应用研究[J].当代化工研究,2024,(17):161-163.
- [3] 张海峰,燕飞,王娜.化工工艺中节能降耗技术应用与优化策略[C]//广西网络安全和信息化联合会.第二届工程技术管理与数字化转型学术交流会论文集.陕西榆能化学材料有限公司;陕西榆能建设工程有限公司;陕西延长石油延安能源化工有限责任公司;2024:112-114.
- [4] 卢奕先.提升化工工艺节能降耗的途径探析[J].当代化工研究,2024,(16):167-169.
- [5] 祖燕霞.节能降耗技术在化工工艺中的应用分析[J].中国石油和化工标准与质量,2024,44(15):172-174.