

化工过程仿真技术发展及应用

潘贵杰（北京华康达计算机应用技术有限公司，北京 710065）

摘要：80年代至今，伴随化工行业和计算机技术的发展，我国化工过程仿真技术取得巨大成就，在国际市场有着重要地位。化工过程仿真技术从机理模型系统、工艺模型、DCS 等人机交互界面等基本要素发展到今天虚拟现实系统、半实物虚拟工厂等新型技术及其应用。广泛应用于化工企业及教育单位工艺操作培训、技能考核、工艺研究，实习、实训等，为我国化工及其教育行业发展起到重要作用。本文综述国内化工过程仿真技术发展里程，以及化工过程仿真的应用、意义、发展趋势，为从事化工过程仿真行业人员及各化工企业、教学单位提供参考。

关键词：化工仿真；过程模拟；虚拟现实；半实物工厂；虚拟仿真教学

化工行业是国民经济重要支柱产业，大型石油化工基地、新型煤化工基地遍布全国各地。随着我国改革开放和现代化建设的飞速发展，化工企业的规模迅速扩大，大量先进的生产装置投入生产，这些新投产的装置具有很高的自动化和信息化水平以及先进的工艺。企业需要解决的一个首要问题是如何训练大批新上岗的操作人员、技术人员和管理人员，使他们尽快地熟悉自己的工作岗位，增加他们的实践经验、协作能力和技能水平。Aspen、Pro II 等化工专业计算软件解决了化工设计以及稳态计算的问题，但是无法实现过程动态响应、连续模拟以及 DCS 自动控制系统的模拟。早期，西方发达国家运用仿真器进行化工技能培训并取得重大成功。以中石化为首的国内石化企业首先接受了这一新的概念和方法，并且向国内科技单位提出了研制国产仿真培训系统的迫切需求，80、90 年代，国内主要化工院校、及其国家化工部门参与到化工动态仿真开发研发中，其中中国化工信息中心、北京化工大学化工动态仿真系统应运而生，奠定了我国化工过程仿真技术基础。化工过程仿真技术主要是有两个应用领域，第一领域为生产企业，应用于企业员工培训、生产操作研究，工艺优化；第二个领域为教学领域，应用于学生实训、实习等实践教学。本文首先将化工仿真发展过程以及应用领域进行深度论述，探讨未来化工过程仿真发展趋势以及应用方向。

1 国内仿真技术发展过程

仿真就是通过建立实际系统模型并利用所见模型对实际系统进行实验研究的过程。最初，仿真技术主要用于航空、航天、原子反应堆等价格昂贵、周期长、危险性大、实际系统试验难以实现的少数领域，后来逐步发展到电力、石油、化工、冶金、机械等一些主要工业部门。上世纪七十年代末期的兴起的流程模拟技术，开始主要是用于化工过程的设计。ASPEN 公司的 AspenPlus、Simsci 公司 ProII，Hyprotech 公司的 Hysim 等一些优秀的过程稳态模拟软件在化工过程设计中得以广泛的应用。上世纪 80 年代 DCS 的出现，对化工过程的模拟软件提出新的市场需求——OTS（Operator Training System），大大的促进化工过程动态仿真模拟软件的发展。当时由于国外化工仿真软件高昂的价格，国内化工

企业对仿真的特殊需求以及国家化工相关部门的高度重视，国产化化工过程仿真软件开始发展。OTS 开发设计多方面技术，包含界面开发、系统工程、化工设备算法开发、仪表自控等，当时国内很多化工院校及其化工部相关单位都参与其中，并在小型机基础上开发出第一代化工过程仿真软件。

一般而言，一个典型化工工厂包含生产装置、控制系统、操作人员，相应的化工过程仿真有生产装置工艺过程模型、控制系统模型、仿 DCS 操作系统（内操）、现场操作系统（外操）。通过一个完整的化工过程仿真系统，可以模拟整个工厂生产过程、控制过程、以及操作处理过程。为企业培训、员工学习提供一个良好的感官学习、实验软件。同样也可以应用于化工类院校，为学校提供一个实训、实习教学平台。

我国化工过程模拟事业发展是以企业、学校需求为推动力的。这促使我国在专用过程模拟系统和解决工程问题方面得到迅速发展，国内仿真模拟软件起步虽晚，但不比国外落后。近些年，国内很多学者以及企业以实时动态模拟技术为突破口，完善了动态模拟软件的计算功能，同时加强过程模拟软件界面开发，进一步推广过程模拟软件商品化、产业化及其应用。2010 年前后，化工过程仿真软件企业不断出现，推动我国过程仿真技术不断向前发展。

2 一般化工过程仿真软件组成

2.1 化工过程模型

化工过程及其复杂，没有一个绝对的数学模型表达方法，化工过程理论知识也是基于实验、实践总结的经验数据以及机理模型。相应地，化工过程仿真也有两个方向，目前普遍采用的方法有经验建模和机理建模。经验建模时根据系统输入、输出数据建立数学模型。比如，人工神经网络、最小二乘法、模糊模型等等。机理建模时根据过程本身内在原理，利用能量守恒、物料守恒、动量守恒、反应动力学等基本原理，采用严格的化工热力学方程及其严谨物性数据建模。就精度而言，机理模型可以做到无限接近真实装置，具有现场指导作用。

2.2 人机交互界面

过程仿真软件需要提供一个人机交互界面，实现

人与模型的交互操作。仿真人机交互界面以真实工厂 DCS、SIS、CCS 等操作系统界面及其功能为依据,开发仿真系统人机交互操作界面,实现对底层过程模型的监测及其操作。仿真操作界面与底层模型通过数据传输实现实时动态连接。

3 虚拟现实技术

虚拟现实是一项新兴的技术,它将计算机图形学、计算机仿真技术、多媒体技术等应用到化工生产过程的仿真系统中,通过三维技术将生产过程以及装置形象的还原到计算机上,提高了仿真系统环境的逼真性,沉浸感。这种新型大人机交互方式将化工过程仿真发展提升到一个新的高度。

4 半实物虚拟工厂

半实物仿真工厂是一种采用完全冷模结构的设计方式,不走实际物料,工艺数据来自仿真软件,支持在装置上的操作,结合 DCS 软件操作,可以实现接近真实的内、外操互动训练的培训装置。半实物仿真工厂通常由 4 部分组成:实物装置、仿真仪表、仿 DCS 软件、工艺模型软件。

5 基于虚拟现实化工仿真安全演练系统

运用化工过程动态模型技术,虚拟现实技术和事故过程(泄露、火灾、爆炸)动态模型技术等现代计算机技术,构建一个基于现实(VR)的可以进行危化品安全事故应急预案演练的仿真平台,系统实现以人机交互逼真的模拟危险化学品的生产、储运过程中的各种状态和安全事故。动态表现为有毒有害气体泄漏、扩散蔓延、火灾、爆炸等事故现象,同时可以进行人工操作以控制和解除事故的应急预案。

系统具有逼真的三维场景,漫游其中给人以身临其境的感觉。系统的可交互性,可在虚拟场景下对设备进行实时操作。场景、模型和人员的互动可以实时动态更新灾害场景,使参与人员有很强的真实感和沉浸感。体会不同的决策和动作所产生的响应。

6 化工过程仿真应用

6.1 生产操作培训

采用过程仿真技术辅助培训,就好像是建立了一个虚拟的人工操作环境。用计算机运行数学模型及程序来代替实际的生产装置,同时模拟 DCS、SIS 等操作界面,这样就能起到非常逼真的操作技能训练。应用于企业检查并优化工艺设计、装置操作法以及工艺条件研究等,可以取得较好的经济效益;应用工艺流程模拟技术进行人员操作培训,技能鉴定,对职工岗位培训起到十分重要的作用。据统计,化工仿真软件在化工行业培训使用超过百万人次。

6.2 辅助设计

仿真技术应用于工程设计已不是新鲜事儿,例如化工工艺设计中常用的过程模拟技术就是一种稳态仿真。稳态仿真的结果是系统处于相对稳定工况的数据集,用于试验和核算单元设备或过程系统的生产能力与几何尺

寸。另外一种为动态仿真技术,又称为非稳态仿真,其结果主要描述当系统受到扰动后,变量随时间的响应过程。因此,不管是稳态还是动态仿真在工程设计中都不可或缺。

6.3 辅助研究

过程模拟是从反应的基本规律出发采用实验与计算相结合的方法,从宏观层面描述物理与化学现象,研究影响化学反应的各个因素,因而在工艺开发与创新中发挥着至关重要的作用。

6.4 教学领域的应用

利用仿真平台开发适用于教学领域的仿真产品,这类仿真产品具有以下功能:一是通过使用可以提高学生对实际生产情况的了解,增加生产知识;二是学生在化工仿真系统做实习操作可以增强实际生产的感受,了解工艺过程、控制系统、设备运行等多方面的理论和实际;三是培养学生理论联系实际和解决实际问题的能力,同时减少学校实验、实习成本,减少事故发生。虚拟仿真教学是一门绿色、安全、使用方便、理论学习、动手实践的新型教学手段。

7 结语

综上所述,化工仿真不仅提供高精度的工艺模型、控制模型,还可以通过虚拟现实手段再现设备、工厂生产环境。将化工仿真软件应用到企业的工艺研究、生产培训,安全培训、院校实训教学当中是十分有必要的。在工艺研究领域,利用仿真技术可以科学且合理地模拟化工生产过程,能够对结果进行预测,让相应流程中出现的各项问题得到有效地改善,为企业生产优化调整提供理论转为实践的依据。在生产操作培训领域,仿真软件可以提供一套完整工艺培训方案,包含工艺流程的学习、生产操作演练、事故预案演练,仪表控制测试、技能考核鉴定等,为员工技能成长提供有力支持。在教学实践领域,仿真教学产品充分体现了虚实结合、优势互补的原则,实现学校不具备或难以完成的教学实践功能。在安全培训领域,涉及高危或极端的环境,不可及或不可逆的操作,高成本、高消耗、大型或综合训练等情况时,仿真软件可提供可靠、安全和经济的实践项目。目前,化工仿真作为虚拟教学、工艺研究的重要组成部分在企业、教学系统里已广泛普及。随着仿真产品深化应用,化工仿真将继续向着工业化产品、教学产品两个方向发展,高精度的机理模型、增强用户体验的虚拟现实、半实物虚拟工厂将是未来发展方向。

参考文献:

- [1] 许正宇. 化工仿真发展的技术趋向 [J]. 中国化工信息中心, 2013.
- [2] 易涛. 基于安全应急预案虚拟现实仿真演练系统开发探讨 [J]. 系统建模与仿真技术, 2007.

作者简介:

潘贵杰(1985-), 男, 广西河池人, 中级职称, 本科, 研究方向: 化工仿真。