

Применение концепции цифрового двойника на этапах проектирования, моделирования и управления химическим процессом

М.И. Кузьмин^{1,2}✉, Д.И. Кушнирук¹, А.В. Аникин¹,
С.В. Верба¹, Д.В. Зубов²

¹ Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» имени Н.П. Сагина, г. Москва, 111524, Россия

² Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, г. Москва, 125047, Россия

Ссылка для цитирования

Кузьмин М.И., Кушнирук Д.И., Аникин А.В., Верба С.В., Зубов Д.В. Применение концепции цифрового двойника на этапах проектирования, моделирования и управления химическим процессом // Программные продукты и системы. 2024. Т. 37. № 4. С. 629–637. doi: 10.15827/0236-235X.148.629-637

Информация о статье

Группа специальностей ВАК: 1.2.2

Поступила в редакцию: 25.03.2024

После доработки: 15.05.2024

Принята к публикации: 03.06.2024

Аннотация. В настоящей работе рассмотрено развитие актуальной концепции цифрового двойника, сопряженной с интенсивным развитием информационно-коммуникационных технологий и с формированием цифрового производства. Приведены некоторые варианты классификации по различным признакам. Непосредственная практическая реализация концепции цифрового двойника продемонстрирована на примере установки, в которой протекает химический процесс, контролируемый изменением температуры. Рассмотрен жизненный цикл изделия от этапа проектирования обособленной виртуальной копии до получения физической копии, связанной с виртуальной двухсторонним обменом данными посредством промежуточного программного обеспечения. Предложен вариант структурно-организационного исполнения цифровой модели с использованием информации о химической кинетике процесса в качестве взаимозаменяемого ядра. Описана внутренняя логика работы цифровой модели в формате конечного автомата. Логика направлена на оптимальное управление в контексте достижения максимального уровня конверсии по полупродукту на каждой промежуточной стадии и в результате по целевому продукту на конечной стадии. Применение концепции цифрового двойника на этапе проектирования изделия показано с позиции проведения виртуальных испытаний для нивелирования конструкторских изъянов и проверки проектных решений. По итогам работы сформулированы основные достоинства использования концепции цифрового двойника по сравнению с традиционным подходом. Результаты настоящей работы могут быть использованы как отправная точка при проектировании и построении аналогичных систем в области химических процессов, управление которыми осуществляется изменением какого-либо технологического параметра. Правообладателем результатов интеллектуальной деятельности является частное учреждение «Наука и инновации».

Ключевые слова: цифровой двойник, оптимальное управление, проектирование, математическое моделирование, химический процесс

Благодарности. Работа выполнена в рамках проекта ЕОТП-МТ-454 (договор от 14.12.2021 № 774/409-Д)

Введение. Стремительный прогресс в области информационно-коммуникационных технологий за последние десятилетия ознаменовал собой переход различных промышленных отраслей к новому технологическому укладу – цифровому производству. Такие автоматизированные средства, как CAD, CAE, CAM, PDM и другие классы систем прочно вошли в обиход и фактически являются стандартом при разработке нового продукта либо процесса. Большой потенциал также представляет использование технологий Big Data, IoT (*Internet of Things*), AI (*Artificial Intelligent*), облачных и граничных вычислений, высокоскоростных беспроводных сетей. Все перечисленные средства и технологии предоставляют огромные возможности для интеграции физического и цифрового мира.

Подобная интеграция позволяет бизнесу оперативно решать возникающие задачи и своевременно подстраиваться под динамично меняющиеся требования рынка, тем самым повышая свою конкурентоспособность. Таким образом, говоря о цифровом производстве, чаще всего подразумевают использование некоторой киберфизической системы, интегрированной в производственные процессы предприятия.

Ярким примером подобной системы может являться цифровой двойник некоторого процесса либо изделия. Концепция была сформулирована исследователями в начале 2000-х (например, [1]) и впоследствии значительно развита к концу 2010-х годов (например, [2]).

Данная область продолжает динамично развиваться и охватывать различные смежные

сферы, что подтверждает постоянно растущая публикационная активность. Несмотря на это наблюдается отсутствие единой системы определений и общепринятой классификации. В литературных источниках можно обнаружить множество ее различных вариантов с соответствующей аргументацией. Например, предлагается подразделять цифровые двойники, в частности, по таким признакам: используемая технология [2], выполняемые функции [3], уровень интеграции данных [4], уровень сложности применяемых решений [5]. Такое многообразие нередко приводит к различной интерпретации и своему пониманию возможностей применения концепции на практике многими исследователями.

Применительно к химическим процессам следует отметить широко используемые варианты реализации: построение цифрового двойника постфактум для уже спроектированного и введенного в эксплуатацию объекта исходя из исследовательских целей [6], построение цифрового двойника как отдельной трехмерной копии объекта с целью визуализации течения процесса и отображения телеметрии [7], создание полноценных связей объекта и цифровой копии для достижения оптимального качества выпускаемой продукции [8, 9]. В целом детальная специфика построения подобных систем для химических процессов в общем плане рассматривается в достаточно малом количестве работ [10, 11], и зачастую авторы сфокусированы на тонкостях конкретного технологического процесса. Основным же недостатком является применение концепции цифрового двойника вне контекста жизненного цикла изделия. Таким образом, многими авторами обозревается только стадия эксплуатации и не затрагиваются этапы проектирования, виртуальных испытаний, автоматизации, обслуживания и другие, что не позволяет задействовать потенциал концепции в полной мере.

Научная значимость настоящей работы заключается в описании систематизированного подхода, полученного на основе компиляции совокупного практического опыта авторов в области создания автоматизированных установок для проведения химических процессов различной природы и знаний, представленных в актуальных литературных источниках.

Практическая значимость исследования обосновывается возможностью использования как отправной точки предложенного подхода специалистами, работающими в сфере проектирования и построения систем эффективного

управления процессами и оборудованием химической промышленности.

Цифровой двойник на этапе эксплуатации

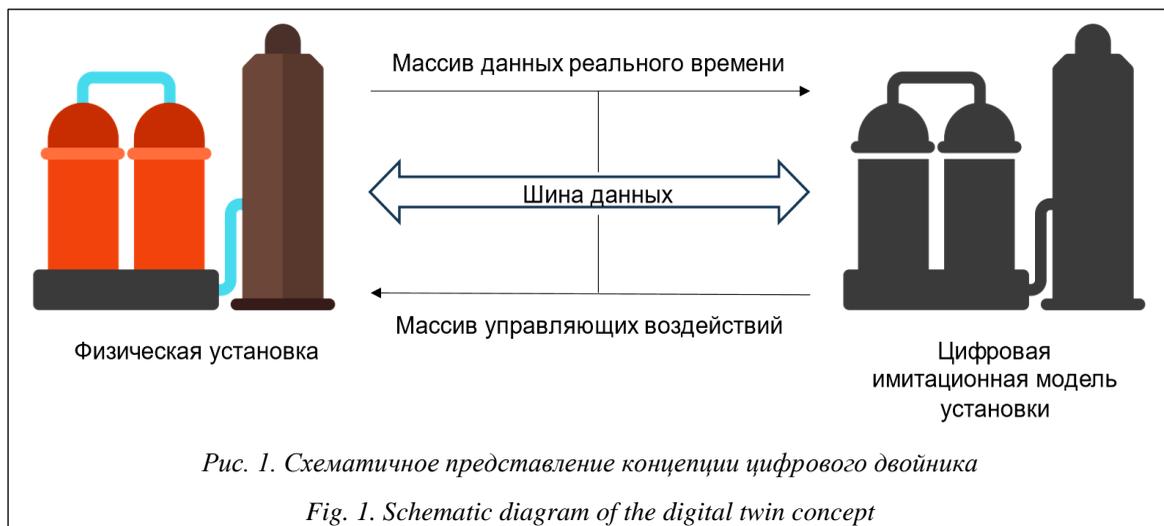
Интенсивное развитие концепции цифрового двойника, как и любой относительно новой области знания, не обходится без разночтений и спорных аспектов. Для их нивелирования начиная с 1 января 2022 года в Российской Федерации введен в действие новый государственный стандарт для цифровых двойников изделий (ГОСТ Р 57700.37–2021), целью которого является определение общих положений и создание единого унифицированного теоретического базиса. В настоящее время этот стандарт применяется преимущественно в области машиностроения, где он регламентирует создание цифровых двойников изделий на всех стадиях их жизненного цикла.

Основываясь на описании концепции и деталях стандарта, реализация цифрового двойника некой установки, в которой протекает химический процесс, может быть представлена схематично (рис. 1).

В качестве физической установки на рисунке 1 может выступать, например, емкостный либо трубчатый реактор, снабженный обогреваемой внешней частью в виде рубашки или печи с резистивным нагревом соответственно. Совместно с контуром автоматизации, состоящим из различных справочных датчиков, управляющих устройств, контроллеров и других средств, установка представляет собой так называемую физическую копию.

Задача реализации цифрового двойника подразумевает создание виртуальной копии, способной с некоторой точностью эмулировать протекание процессов, происходящих в различных частях физической установки. В данном случае в виде виртуальной копии может выступать имитационная цифровая модель или соответствующая модель машинного обучения. При этом возможен последовательный переход с первой на вторую по мере накопления архивных данных о проводимом процессе и формировании обучающей выборки. В обоих случаях основным условием является функционирование в режиме реального времени.

В настоящей работе в качестве виртуальной копии рассматривается имитационная цифровая модель. Ядром модели применительно к единичному химическому процессу являются



кинетическая модель и триплет (или же несколько триплетов, если процесс протекает через ряд стадий различного характера: параллельных, конкурирующих, последовательных, автокаталитических и проч.), определяющие химизм процесса в локальной точке пространства.

Кинетическая модель и соответствующие триплеты могут быть получены путем исследования химического процесса с помощью методов физико-химического анализа. В зависимости от фазового состояния исходных реагентов применяемый подход к изучению несколько различается, но сохраняется основная суть – исследование природы конкретной стадии химического процесса абстрагировано от конструктивных особенностей установки.

Типовой вид кинетической модели может быть продемонстрирован на примере процесса сублимации кристаллического хлорида аммония, который широко применяется для его очистки:

$$\frac{dm_A}{dT} = -\frac{A_1}{\beta} e^{-\frac{E_{a1}}{RT}} f_1(m_A, m_B), \quad (1)$$

$$\frac{dm_B}{dT} = \frac{A_1}{\beta} e^{-\frac{E_{a1}}{RT}} f_1(m_A, m_B) - \frac{A_2}{\beta} e^{-\frac{E_{a2}}{RT}} f_2(m_B, m_C), \quad (2)$$

$$\frac{dm_C}{dT} = \frac{A_2}{\beta} e^{-\frac{E_{a2}}{RT}} f_2(m_B, m_C) - \frac{A_3}{\beta} e^{-\frac{E_{a3}}{RT}} f_3(m_C, m_D), \quad (3)$$

$$m_D = 1 - m_A - m_B - m_C, \quad (4)$$

$$\Delta m = \Delta m_0 - \delta m \left[c_1(1 - m_A) + c_2(m_C + m_D) + (1 - c_1 - c_2)m_D \right], \quad (5)$$

где m_A, m_B, m_C, m_D – массовые доли соответствующих псевдокомпонентов; $f_1(m_A, m_B), f_2(m_B, m_C), f_3(m_C, m_D)$ – модели реакций, описывающие превращение исходного соединения в продукт; A_1, A_2, A_3 – предэкспоненциальные множители, c^{-1} ; E_{a1}, E_{a2}, E_{a3} – энергии активации, Дж/моль; β – скорость линейного нагрева, К/с; T – температура, К; R – универсальная газовая постоянная, равная 8.314 Дж/(моль·К); Δm – остаточная массовая доля образца относительно начальной, %; Δm_0 – начальная массовая доля образца (обычно принимаемая за 100 %), %; δm – изменение массовой доли образца, %; c_1, c_2 – вклады соответствующих стадий в общее изменение массовой доли образца.

Система уравнений (1)–(5) описывает изменение массовой доли образца хлорида аммония при произвольном температурном режиме. Совокупность предэкспоненциального множителя A_i , модели $f_i(m_k, m_j)$ и энергии активации E_{a_i} представляет собой кинетический триплет, описывающий отдельную стадию многостадийного процесса.

Кинетическая модель в дальнейшем встраивается в общую математическую обертку цифровой модели. Математическая обертка может содержать внутри отдельные системы дифференциальных уравнений, обособленные математические выражения для описания конкретных частей установки (например, материальный баланс участка абсорбции или тепловой баланс конденсатора), и вспомогательные численные методы, применяемые для нахождения решений. В кинетической модели (1)–(5) на уровне математической обертки требуется реализация какого-либо численного метода для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений, например, метода Дорманда–

Принса [12]. На данном этапе также может быть реализован ряд моделей, позволяющих прогнозировать естественное старение и износ деталей конструкции [13–15]. Это дает возможность планировать ремонтные работы и осуществлять профилактическое обслуживание установки.

Дальнейшая имплементация совокупности математических конструкций с использованием технологий программной разработки и конкретного языка программирования позволяет получить подключаемый модуль, представляющий собой цифровую имитационную модель.

Следует отметить, что полученная виртуальная копия установки обладает некоторыми особенностями. Во-первых, она применима только к соответствующей ей физической копии, что следует из использования в процессе построения сопряжения информации о химизме процесса с особенностями конструктивной реализации. Во-вторых, использование кинетической модели в ядре виртуальной копии дает возможность создавать серии цифровых моделей для однотипных химических процессов, в которых, например, варьируется один из двух реагентов, а другой остается неизменным. При этом заменяется только кинетическая модель, а остальная часть цифровой модели сохраняется.

Как следует из рисунка 1, основной задачей цифровой модели является генерация массива управляющих воздействий в ответ на входящий массив данных реального времени, содержащий информацию о текущих значениях технологических параметров химического процесса. Глобальной целью в данном случае является оптимальное управление в контексте достижения максимального уровня конверсии исходных реагентов в целевой продукт и по возможности минимизация протекания побочных реакций.

Внутренняя логика работы цифровой модели строится по принципу конечного автомата. На примере многостадийного химического процесса, контролируемого изменением температуры и состоящего из n стадий, можно записать:

$$S \rightarrow A_1 \rightarrow B_1 \rightarrow C_1 \rightarrow \dots \rightarrow A_n \rightarrow B_n \rightarrow C_n \rightarrow E, \quad (6)$$

где S – начальное состояние цифровой модели; E – конечное состояние цифровой модели; $A_1 \dots A_n$ – состояния инициализации процесса на отдельных стадиях; $B_1 \dots B_n$ – состояния контроля текущего протекания процесса на отдельных стадиях; $C_1 \dots C_n$ – состояния завершения процесса на отдельных стадиях.

Задачей цифровой модели является достижение конечного состояния E из начального S путем последовательного перехода через промежуточные состояния $A_1 \dots A_n, B_1 \dots B_n, C_1 \dots C_n$.

Переход $S \rightarrow A_1$ осуществляется только после задания пользователем запрашиваемых начальных параметров (например, скорости желаемого линейного нагрева шихты).

Переход $A_1 \rightarrow B_1$ следует после предварительного расчета траектории химической реакции на первой стадии химического процесса и выработки стартового массива управляющих воздействий. Для этого цифровая модель определяет оптимальную температуру протекания реакции, при которой скорость химического превращения максимальна. Далее следует выработка такого управляющего воздействия, которое позволит достичь рассчитанного значения с учетом инертности системы и необходимости избегания возникновения больших температурных градиентов внутри содержимого реактора.

Переход $B_1 \rightarrow C_1$ становится возможен только после того, как на текущей стадии будет достигнуто значение конверсии по промежуточному продукту, близкое к 1. В остальное время цифровая модель, находясь в состоянии B_1 , осуществляет контроль и выработку корректирующих воздействий в случае необходимости, основываясь на предварительном расчете, сделанном в состоянии A_1 . Перейдя в состояние C_1 , цифровая модель контролирует корректное завершение работы и ожидает разрешения пользователя на переход к следующей стадии химического процесса.

Немаловажным звеном в структуре цифрового двойника является ПО. Его роль заключается в обеспечении взаимосвязанной работы физической установки с ее виртуальной копией путем непрерывного двухстороннего обмена данными. Со стороны физической копии они представлены массивом технологических параметров, агрегируемых с датчиков, расположенных на установке и связанных в единый контур. Со стороны виртуальной копии – массивом параметров, характеризующих управляющее воздействие. Таким образом, ПО должно, во-первых, реализовывать общий интерфейс для приема и отправки данных в соответствии с общепринятыми протоколами (семейство Modbus, OPC DA, OPC UA и др.). Во-вторых, оно должно предоставлять единый контракт для подключения цифровых моделей или моделей машинного обучения. Дополнительно в нем может быть реализован различный функцио-

нал для удобства пользователя: отслеживание и предотвращение аварийных ситуаций, уведомления различного характера, агрегация, задача, визуализация данных и т.д.

Общий вид главного окна подобной системы, разработанной на языке программирования C# с использованием платформы .NET, приведен на рисунке 2. В целом данное ПО можно отнести к классу систем SCADA с некоторыми модификациями, позволяющими гибко интегрироваться в современные технологии. Его функционал включает в себя менеджер проектов, позволяющий настраивать параметры автоматизации под конкретные установку и процесс, модуль подключения и взаимодействия с БД посредством ORM-технологии Entity Framework Core, модуль логирования событий и отслеживания аварийных случаев. Разработанное ПО позволяет взаимодействовать с подключаемыми устройствами с помощью единого интерфейса, поддерживающего наиболее распространенные протоколы промышленной связи. Главной особенностью является возможность управления химическим процессом в одном из двух режимов – технологический или цифровой двойник. Технологический режим предоставляет пользователю возможность самому определять последовательность операций и их параметры в масштабе времени, формируя связанную структуру, аналогичную диаграмме Ганта. Далее в соответствии с ней ПО

осуществляет планирование операций с использованием фреймворка Quartz.NET. Исполнение распланированной последовательности осуществляется с учетом того, что единичная операция может не иметь четких временных отметок начала, продолжительности и конца. В таком случае моменты начала и конца единичной операции заменяются триггерами по событию (например, операция подачи газа в реактор начнется только после завершения операции его нагрева до определенной температуры). Управление в режиме цифрового двойника обеспечивается путем выбора пользователем модуля цифровой имитационной модели, представленной в виде заранее созданного динамически подгружаемого DLL-файла. В таком случае от пользователя при необходимости требуется только задать значения параметров, постоянных на протяжении всего процесса и обеспечить корректное связывание массивов входных и выходных параметров с соответствующими подключенными устройствами. Подключение моделей машинного обучения взамен цифровых имитационных моделей осуществляется посредством библиотеки ML.NET. Таким образом, модель машинного обучения может быть построена с использованием возможностей Python, основываясь на накопленном массиве данных о процессе в формате вход-выход за некоторый промежуток времени, и подключена к разработанному ПО.

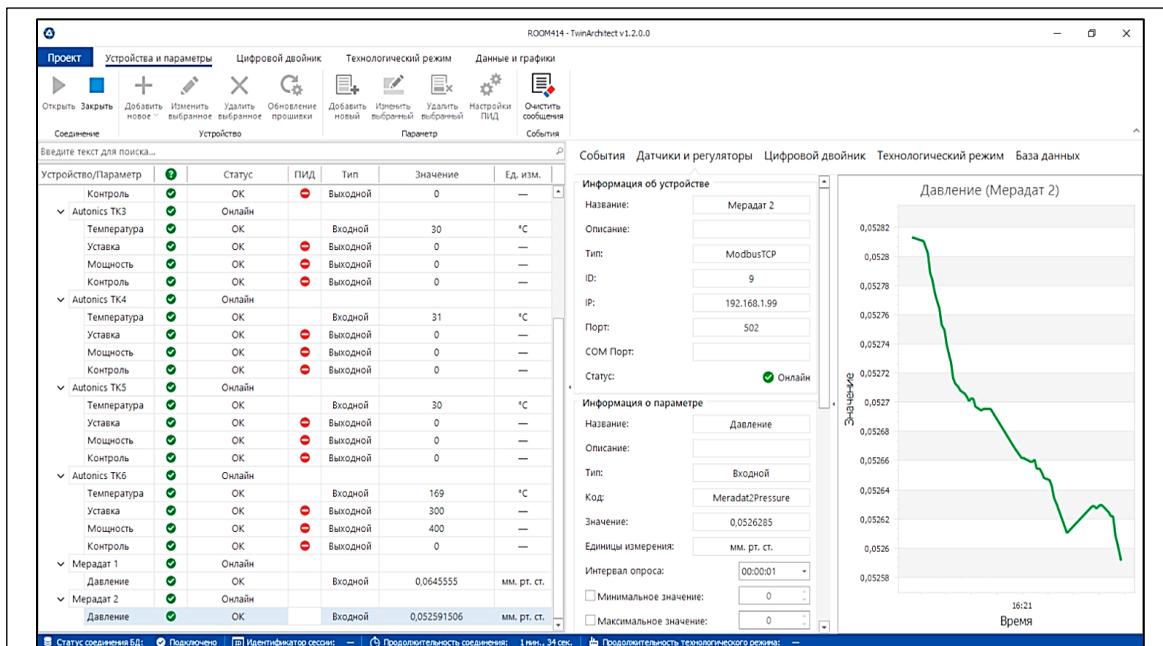


Рис. 2. Главное окно системы связывания физической и виртуальной копии установки

Fig. 2. Main window of the system for linking physical and virtual installation copy

Предцифровой двойник на этапе проектирования

Исходя из сути концепции цифрового двойника, а также одного из вариантов классификации [5] можно выделить отдельную стадию жизненного цикла изделия – предцифровой двойник. Его главной особенностью является полное отсутствие физической копии. В данном случае построение виртуальной копии предваряет ее непосредственную физическую реализацию. Основной задачей этого этапа применительно к рассматриваемой в настоящей работе установке является проектирование с акцентом на технологию проводимого химического процесса, на выявление различных технических и конструкционных рисков. Для этого с помощью разработанной в САД-системе 3D-модель в упрощенной форме осуществляют постановку и решение сопряженной тепло-гидродинамической задачи в САЕ-системе с учетом химической кинетики и особенностей проведения целевого процесса.

Процесс моделирования проводился в программном комплексе конечно-элементного анализа COMSOL Multiphysics. Использовался функционал модулей гидродинамики и теплопередачи в сопряженном расчете с кинетической моделью, аналогичной системе (1)–(5), для описания поведения химической системы. Полученные результаты (<http://www.swsys.ru/uploaded/image/2024-4/2.jpg>) позволяют проанализировать с некоторой точностью, как будет протекать процесс с учетом текущей конфигурации экспериментальной установки. Например, рассматривая распределение конверсии в объеме шихты внутри реактора, можно сказать, что из-за возникших в результате конструкционных решений больших температурных гра-

диентов наблюдается сильная неравномерность протекания реакции по продольному профилю реактора. Таким образом, реакция на концах реактора имеет значительно меньшую скорость по сравнению с его центром из-за повышенного теплорассеяния и недостатка теплоизоляции. Аналогично могут быть выявлены множественные критические конструкторские изъяны, проверена эффективность тех или иных проектных решений без проведения множества натуральных испытаний.

Заключение

Таким образом, концепция цифрового двойника предоставляет бизнесу и различным отраслям производства мощный и современный инструментарий для реализации своих потребностей и решения возникающих задач. В целом можно выделить следующие основные достоинства по сравнению с традиционным подходом применительно к рассматриваемой в настоящей работе предметной области.

Большое число натуральных испытаний может быть заменено с некоторой точностью проведением моделирования в виртуальной среде при условии использования корректных данных о химической кинетике процесса. Снижение числа натуральных испытаний ведет к уменьшению материальных и временных затрат. Агрегация и последующий анализ массива данных позволяют проводить предиктивную аналитику и впоследствии разрабатывать модели машинного обучения взамен имитационных.

Кроме того, оптимальное управление процессом на каждой стадии многостадийного химического процесса обосновано теоретически, что исключает влияние человеческого фактора.

Список литературы

1. Grieves M.W. Product lifecycle management: the new paradigm for enterprises. *IJPD*, 2005, vol. 2, no. 1-2, pp. 71–84. doi: 10.1504/IJPD.2005.006669.
2. Wong C.Y., McFarlane D., Zaharudin A.A., Agarwal V. The intelligent product driven supply chain. *Proc. IEEE Int. Conf. SMC*, 2002, vol. 4, pp. 6. doi: 10.1109/ICSMC.2002.1173319.
3. Hribernik K.A., Rabe L., Thoben K.-D., Schumacher J. The product avatar as a product-instance-centric information management concept. *IJPLM*, 2006, vol. 1, no. 4, pp. 367–379. doi: 10.1504/IJPLM.2006.011055.
4. Grieves M., Vickers J. Digital twin: Mitigating unpredictable, undesirable emergent behavior in complex systems. In: *Transdisciplinary Perspectives on Complex Systems*, 2017, pp. 85–113. doi: 10.1007/978-3-319-38756-7_4.
5. Grieves M.W. Digital twins: Past, present, and future. In: *The Digital Twin*, 2023, pp. 97–121. doi: 10.1007/978-3-031-21343-4_4.
6. Kosacka-Olejnik M., Kostrzewski M., Marczevska M., Mrówczyńska B., Pawlewski P. How digital twin concept supports internal transport systems? – Literature review. *Energies*, 2021, vol. 14, no. 16, art. 4919. doi: 10.3390/en14164919.
7. Feasibility of an immersive digital twin: The definition of a digital twin and discussions around the benefit of immersion. *HVM Catapult*, 2018. URL: https://www.amrc.co.uk/files/document/219/1536919984_HVM_CATAPULT_DIGITAL_TWIN_DL.pdf (дата обращения: 10.03.2024).

8. Kritzinger W., Karner M., Traar G., Henjes J., Sihn W. Digital Twin in manufacturing: A categorical literature review and classification. *Ifac-PapersOnline*, 2018, vol. 51, no. 11, pp. 1016–1022. doi: 10.1016/j.ifacol.2018.08.474.
9. Madni A.M., Madni C.C., Lucero S.D. Leveraging digital twin technology in model-based systems engineering. *Systems*, 2019, vol. 7, no. 1, art. 7. doi: 10.3390/systems7010007.
10. Yu W., Patros P., Young B., Klinac E., Walmsley T.G. Energy digital twin technology for industrial energy management: Classification, challenges and future. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2022, vol. 161, art. 112407. doi: 10.1016/j.rser.2022.112407.
11. Kichatov K.G., Prosochkina T.R., Vorobyova I.S. Principles of creating a digital twin prototype for the process of alkylation of benzene with propylene based on a neural network. *Fine Chemical Tech.*, 2023, vol. 18, no. 5, pp. 482–497. doi: 10.32362/2410-6593-2023-18-5-482-497.
12. Dli M.I., Vlasova E.A., Sokolov A.M., Morgunova E.V. Creation of a chemical-technological system digital twin using the Python language. *J. of Applied Inform.*, 2021, vol. 16, no. 1, pp. 22–31. doi: 10.37791/2687-0649-2021-16-1-22-31.
13. Gerogiorgis D.I., Castro-Rodriguez D. A digital twin for process optimisation in pharmaceutical manufacturing. In: *Computer Aided Chemical Engineering*, 2021, vol. 50, pp. 253–258. doi: 10.1016/B978-0-323-88506-5.50041-3.
14. Zhu X., Ji Y. A digital twin-driven method for online quality control in process industry. *The Int. J. of Advanced Manufacturing Tech.*, 2022, vol. 119, pp. 3045–3064. doi: 10.1007/s00170-021-08369-5.
15. Gao L., Jia M., Liu D. Process digital twin and its application in petrochemical industry. *JSEA*, 2022, vol. 15, no. 8, pp. 308–324. doi: 10.4236/jsea.2022.158018.
16. Oliveira L.M., Dias R., Rebello C.M., Martins M.A., Rodrigues A.E., Ribeiro A.M., Nogueira I.B. Artificial intelligence and cyber-physical systems: A review and perspectives for the future in the chemical industry. *AI*, 2021, vol. 2, no. 3, pp. 429–443. doi: 10.3390/ai2030027.
17. Dormand J.R., Prince P.J. A family of embedded Runge–Kutta formulae. *J. of Computational and Applied Math.*, 1980, vol. 6, no. 1, pp. 19–26. doi: 10.1016/0771-050X(80)90013-3.
18. Бутов А.А., Самохвалов М.В. Математические модели многостадийного износа продуктивных систем // Ученые записки УлГУ. Сер.: Математика и информационные технологии. 2020. № 1. С. 17–24.
19. Поляков Д.А., Холмов М.А., Плотников Д.И., Никитин К.И., Полякова У.В. Математическое моделирование срока службы полимерной изоляции кабелей // Омский науч. вестн. 2020. № 6. С. 69–73. doi: 10.25206/1813-8225-2020-174-69-73.
20. Острейковский В.А., Сорочкин А.В. Физико-математические модели закономерностей процессов естественного старения конструкционных материалов в задачах долговечности оборудования структурно и функционально сложных критически важных систем с длительными сроками активного существования // Вестн. кибернетики. 2021. № 4. С. 22–27.

Software & Systems

doi: 10.15827/0236-235X.148.629-637

2024, 37(4), pp. 629–637

Applying the digital twin concept to chemical process design, modeling and control

Maksim I. Kuzmin ^{1,2}✉, David I. Kushniruk ¹, Andrey V. Anikin ¹,
Sergey V. Verba ¹, Dmitry V. Zubov ²

¹ N. Sazhin State Research and Design Institute of Rare Metal Industry “Giredmet”,
Moscow, 111524, Russian Federation

² D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russian Federation,
Moscow, 125047, Russian Federation

For citation

Kuzmin, M.I., Kushniruk, D.I., Anikin, A.V., Verba, S.V., Zubov, D.V. (2024) ‘Applying the digital twin concept to chemical process design, modeling and control’, *Software & Systems*, 37(4), pp. 629–637 (in Russ.). doi: 10.15827/0236-235X.148.629-637

Article info

Received: 25.03.2024

After revision: 15.05.2024

Accepted: 03.06.2024

Abstract. The paper considers the development and increasing relevance of the digital twin concept. It is relevant due to the intensive development of information and communication technologies, as well as and the digital production. The

authors give some classification options according to various features. They demonstrate the practical realization of the digital twin concept on the example of an installation in which a chemical process controlled by temperature change takes place. The authors consider the product life cycle from the design stage of a stand-alone virtual copy to the physical copy, which is associated with the virtual twin by means of middleware. They propose the structural and organizational design version of a digital model using information about the process chemical kinetics as an interchangeable core. There is a description of the internal logic of the numerical model in the finite automaton format. The logic aims at optimal control in terms of achieving the maximum level of conversion by a semi-product at each intermediate stage and by the target product at the final stage. The authors apply the digital twin concept at the product design stage in terms of conducting virtual tests to level design flaws and verify design solutions. Based on the results of the work, the authors state the main advantages of using the digital twin concept in comparison with the traditional approach. The results can be used as a starting point when designing and constructing similar systems in the field of chemical processes, which are controlled by changing any technological parameter. The copyright holder for the project results of the is a private enterprise "Science and Innovations".

Keywords: digital twin, chemical process, optimal control, design, mathematical modeling; chemical process

Acknowledgements. The work was carried out as part of the EOTP-MT454 project (contract no. 774/409-D, dated 12/14/2021)

References

1. Grieves, M.W. (2005) 'Product lifecycle management: the new paradigm for enterprises', *IJPD*, 2(1-2), pp. 71–84. doi: 10.1504/IJPD.2005.006669.
2. Wong, C.Y., McFarlane, D., Zaharudin, A.A., Agarwal, V. (2002) 'The intelligent product driven supply chain', *Proc. IEEE Int. Conf. SMC*, 4, pp. 6. doi: 10.1109/ICSMC.2002.1173319.
3. Hribernik, K.A., Rabe, L., Thoben, K.-D., Schumacher, J. (2006) 'The product avatar as a product-instance-centric information management concept', *IJPLM*, 1(4), pp. 367–379. doi: 10.1504/IJPLM.2006.011055.
4. Grieves, M., Vickers, J. (2017) 'Digital twin: Mitigating unpredictable, undesirable emergent behavior in complex systems', in *Transdisciplinary Perspectives on Complex Systems*, pp. 85–113. doi: 10.1007/978-3-319-38756-7_4.
5. Grieves, M.W. (2023) 'Digital twins: Past, present, and future', in *The Digital Twin*, pp. 97–121. doi: 10.1007/978-3-031-21343-4_4.
6. Kosacka-Olejnik, M., Kostrzewski, M., Marczevska, M., Mrówczyńska, B., Pawlewski, P. (2021) 'How digital twin concept supports internal transport systems? – Literature review', *Energies*, 14(16), art. 4919. doi: 10.3390/en14164919.
7. (2018) 'Feasibility of an immersive digital twin: The definition of a digital twin and discussions around the benefit of immersion', *HVM Catapult*, available at: https://www.amrc.co.uk/files/document/219/1536919984_HVM_CATAPULT_DIGITAL_TWIN_DL.pdf (accessed March 10, 2024).
8. Kritzinger, W., Karner, M., Traar, G., Henjes, J., Sihm, W. (2018) 'Digital Twin in manufacturing: A categorical literature review and classification', *Ifac-PapersOnline*, 51(11), pp. 1016–1022. doi: 10.1016/j.ifacol.2018.08.474.
9. Madni, A.M., Madni, C.C., Lucero, S.D. (2019) 'Leveraging digital twin technology in model-based systems engineering', *Systems*, 7(1), art. 7. doi: 10.3390/systems7010007.
10. Yu, W., Patros, P., Young, B., Klinac, E., Walmsley, T.G. (2022) 'Energy digital twin technology for industrial energy management: Classification, challenges and future', *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 161, art. 112407. doi: 10.1016/j.rser.2022.112407.
11. Kichatov, K.G., Prosochkina, T.R., Vorobyova, I.S. (2023) 'Principles of creating a digital twin prototype for the process of alkylation of benzene with propylene based on a neural network', *Fine Chemical Tech.*, 18(5), pp. 482–497. doi: 10.32362/2410-6593-2023-18-5-482-497.
12. Dli, M.I., Vlasova, E.A., Sokolov, A.M., Morgunova, E.V. (2021) 'Creation of a chemical-technological system digital twin using the Python language', *J. of Applied Inform.*, 16(1), pp. 22–31. doi: 10.37791/2687-0649-2021-16-1-22-31.
13. Gerogiorgis, D.I., Castro-Rodriguez, D. (2021) 'A digital twin for process optimisation in pharmaceutical manufacturing', in *Computer Aided Chemical Engineering*, 50, pp. 253–258. doi: 10.1016/B978-0-323-88506-5.50041-3.
14. Zhu, X., Ji, Y. (2022) 'A digital twin-driven method for online quality control in process industry', *The Int. J. of Advanced Manufacturing Tech.*, 119, pp. 3045–3064. doi: 10.1007/s00170-021-08369-5.
15. Gao, L., Jia, M., Liu, D. (2022) 'Process digital twin and its application in petrochemical industry', *JSEA*, 15(8), pp. 308–324. doi: 10.4236/jsea.2022.158018.
16. Oliveira, L.M., Dias, R., Rebello, C.M., Martins, M.A., Rodrigues, A.E., Ribeiro, A.M., Nogueira, I.B. (2021) 'Artificial intelligence and cyber-physical systems: A review and perspectives for the future in the chemical industry', *AI*, 2(3), pp. 429–443. doi: 10.3390/ai2030027.
17. Dormand, J.R., Prince, P.J. (1980) 'A family of embedded Runge–Kutta formulae', *J. of Computational and Applied Math.*, 6(1), pp. 19–26. doi: 10.1016/0771-050X(80)90013-3.
18. Butov, A.A., Samokhvalov, M.V. (2020) 'Mathematical models of multistage wear of productive systems', *Sci. Notes of UIGU. Ser.: Math. and Inform. Tech.*, (1), pp. 17–24 (in Russ.).
19. Polyakov, D.A., Kholmov, M.A., Plotnikov, D.I., Nikitin, K.I., Polyakova, U.V. (2020) 'Mathematical modeling of service life of cables polymer insulation', *Omsk Sci. Bull.*, (6), pp. 69–73 (in Russ.). doi: 10.25206/1813-8225-2020-174-69-73.

20. Ostreikovskiy, V.A., Sorochkin, A.V. (2021) 'Physico-mathematical models of the regularities of the processes of natural aging of structural materials in the problems of durability of equipment of structurally and functionally complex critical systems with long periods of active existence', *Bull. of Cybernetics*, (4), pp. 22–27 (in Russ.).

Авторы

Кузьмин Максим Игоревич^{1,2}, научный сотрудник, аспирант, mimikatz@mail.ru

Кушнирук Давид Ильич¹, начальник группы, DIKushniruk@rosatom.ru

Аникин Андрей Витальевич¹, младший научный сотрудник, anikinwk@gmail.com

Верба Сергей Владимирович¹, главный конструктор, SVVerba@rosatom.ru

Зубов Дмитрий Владимирович², к.т.н., доцент, dvzubov@gmail.com

¹ Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» имени Н.П. Сажина, г. Москва, 111524, Россия

² Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, г. Москва, 125047, Россия

Authors

Maksim I. Kuzmin^{1,2}, Associate Research, Postgraduate Student, mimikatz@mail.ru

David I. Kushniruk¹, Head of Group, DIKushniruk@rosatom.ru

Andrey V. Anikin¹, Junior Researcher, anikinwk@gmail.com

Sergey V. Verba¹, Chief Designer, SVVerba@rosatom.ru

Dmitry V. Zubov², Cand. of Sci. (Engineering), Associate Professor, dvzubov@gmail.com

¹ N. Sazhin State Research and Design Institute of Rare Metal Industry "Giredmet", Moscow, 111524, Russian Federation

² D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russian Federation, Moscow, 125047, Russian Federation