

XÂY DỰNG BỘ ĐÔI SỐ CHO NHÀ MÁY SẢN XUẤT HÓA CHẤT: MỘT SỐ CA NGHIÊN CỨU

DEVELOPMENT OF DIGITAL TWINS FOR CHEMICAL PLANTS: SOME CASE STUDIES

ThS. Đoàn Thanh Xuân
Trường Cơ khí, Đại học Bách Khoa Hà Nội

TÓM TẮT

Bộ đôi số (Digital Twins) là một công nghệ mới nổi tiếng trong lĩnh vực công nghiệp 4.0. Bằng cách tạo ra bản sao kỹ thuật số của một thực thể vật lý như thiết bị, quy trình hoặc hệ thống, công nghệ này cho phép mô phỏng, theo dõi và dự đoán hoạt động của các hệ thống và quy trình theo thời gian thực. Ứng dụng của bộ đôi số rất đa dạng, từ giảm thiểu lỗi trong sản xuất, tối ưu hóa hoạt động của máy móc và thiết bị, đến cải thiện quản lý tài nguyên và dịch vụ cho khách hàng. Tính linh hoạt và tiềm năng của công nghệ này đang thu hút sự quan tâm và đầu tư từ nhiều công ty và tổ chức trên toàn cầu. Bài báo này đề cập đến xây dựng bộ đôi số trong lĩnh vực sản xuất hóa chất thông qua hai ca nghiên cứu: (i) Đánh giá sự hấp thụ đa thành phần các khí thải hữu cơ từ quá trình tổng hợp dược chất (salbutamol) và (ii) Quan sát và tối ưu hóa hoạt động dựa trên dữ liệu của một nhà máy hóa chất.

Từ khóa: Bộ đôi số; FPM; DDM; StS; Huấn luyện lăn; Dự đoán dài hạn; Nhà máy sản xuất hóa chất.

ABSTRACT

Digital Twins is a popular new technology in the Industry 4.0 sector. By creating a digital replica of a physical entity such as a device, a process, or a system, this technology allows for real-time simulation, monitoring, and prediction of the activities of systems and processes. Its applications are diverse, ranging from minimizing errors in manufacturing, optimizing the operations of machinery and equipment, to improving resource management and services for customers. The flexibility and potential of this technology have been attracting attention and investment from many companies and organizations worldwide. This article discusses the construction of Digital Twins in the chemical manufacturing sector through two case studies: (i) Evaluating the multi-component absorption of volatile organic emissions from the synthesis process of a pharmaceutical (salbutamol), and (ii) Observing and optimizing operations based on the data from a chemical plant.

Keywords: Digital Twins; FPM; DDM; StS; Rolling training; Long-term prediction; Chemical plant. 

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Bộ đôi số (Digital twins – DT) là việc áp dụng các mô phỏng toàn diện để tạo ra một bản sao ảo của các hệ thống vật lý [1]. Việc áp dụng các bản sao số có thể giúp các kỹ sư theo dõi sản xuất, đánh giá các lợi ích và an toàn của quá trình kiểm soát trong một môi trường ảo cách ly, và thực hiện các chiến lược vận hành bằng cách tương tác với mô hình bản sao trước khi triển khai thực [2-4].

Một bản sao số có thể được phát triển thông qua các mô hình nguyên tắc đầu tiên (First Principle Models – FPM) và các mô hình dựa trên dữ liệu (Data-driven Models – DDM) [5]. Các giải pháp bộ đôi số thương mại cho các nhà máy hóa chất thường dựa trên các mô hình dựa trên dữ liệu được cải thiện hoàn toàn từ dữ liệu đo lường của các nhà máy công nghiệp mục tiêu [6,7]. Bộ đôi số được xây dựng dựa theo các mô hình dựa trên dữ liệu phụ thuộc vào các mô hình hộp đen (black-box models) được tạo ra để đạt được sự tương quan giữa các đầu vào và đầu ra của nhà máy [8]. Các hệ thống này được áp dụng để tìm ra các bất thường cụ thể trong sản xuất hoặc để đạt được mục tiêu sản xuất. Tuy nhiên, chúng không thể được sử dụng để dự đoán các tình huống vận hành bất thường của nhà máy không được bao phủ bởi dữ liệu có sẵn. Hơn nữa, chúng cần sự giải thích thấu đáo và do đó việc mở rộng quy mô sẽ gặp khó khăn [3]. Tiến bộ qua việc sử dụng bộ đôi số đã được ghi nhận trong lĩnh vực Pharma 4.0 [9-11], ở tốc độ nhanh hơn đáng kể so với các lĩnh vực khác [12].

Trong lĩnh vực sản xuất hóa chất, quy trình sản xuất được chất thường phức tạp (với nhiều nguyên liệu hữu cơ, chất trung gian chính và dung môi, nhiều tương tác cụ thể không được hiểu rõ). Do vậy, xây dựng bộ đôi số dựa

vào FPM (với hàng trăm phương trình đạo hàm riêng hoặc đạo hàm thường và/hoặc phương trình đại số) là không khả thi. Việc sử dụng DDM để thu hẹp khoảng cách về độ trung thực của mô hình là bắt buộc, đặc biệt là với sản xuất công nghiệp khi dữ liệu lớn (Big Data) được lưu trữ thường xuyên. Tuy nhiên, việc triển khai DDM mà không có cơ sở FPM sẽ gặp trở ngại, đặc biệt với các quy trình được cấp phép. Ví dụ, phương pháp DDM hiện có có thể thu thập một cách đáng tin cậy hiệu suất nhà máy và các thuộc tính chất lượng đầu ra chính; nhưng nó cũng có thể bỏ lỡ hoàn toàn các đặc điểm hiệu suất phụ chỉ vì nó không được thiết kế để giải quyết chúng.

Trong bài báo này, hai ca nghiên cứu điển hình sẽ được phân tích nhằm chỉ rõ hướng phát triển hiện đại của ứng dụng bộ đôi số trong lĩnh vực sản xuất hóa chất.

2. XÂY DỰNG BỘ ĐÔI SỐ TRONG NHÀ MÁY SẢN XUẤT HÓA CHẤT

Ca nghiên cứu 1:

Gerogiorgisa và Daniel Castro-Rodriguez đã nghiên cứu xây dựng bộ đôi số để tối ưu hóa quá trình tổng hợp salbutamol (thuốc giãn phế quản) khi có mặt 4 nguyên liệu: diacetate, glyceryl, benzyl, base [13]. Trong đó, diacetate (tạo ra do chưng cất dichloromethane trong điều kiện không khí và chân không, và chưng cất toluen) và glyceryl (có nguồn gốc từ chưng cất toluen và chloroform) đã được xác định là hai hợp chất hữu cơ dễ bay hơi (VOC) chính thải ra từ quá trình tổng hợp salbutamol. Đây là những chất có độc tính và gây hại cho môi trường. Tuy nhiên, quá trình thu hồi chúng gặp phải hai vấn đề: (i) Các giường than hoạt tính (carbon bed) hấp thụ VOC có thể bị bão hòa nhanh chóng và không đều. Vật liệu giường

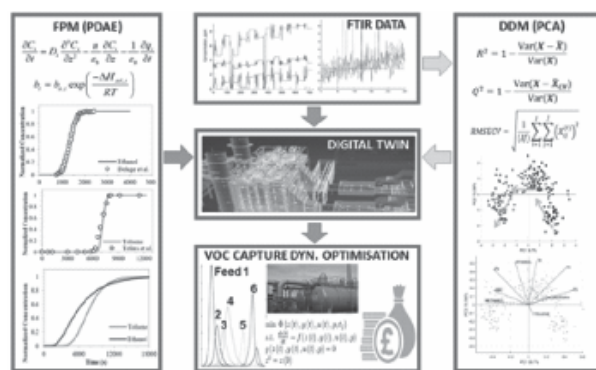
(than hoạt tính) phải tái sinh thường xuyên gây tốn kém; (ii) Thành phần luồng khí nạp không tinh khiết luôn biến đổi nhiều về dung môi hữu cơ, thể tích và lượng chứa trong khí thải, ảnh hưởng đến hiệu suất thu hồi VOC.

Các tác giả đã tập trung vào phân tích (hướng đến tối ưu hóa) quá trình hấp phụ VOC đa thành phần trên giường than hoạt tính công nghiệp thông qua kết hợp mô hình FPM (dựa trên vật lý) và DDM để tạo ra DT (hệ thống đánh giá hiệu suất tiên tiến). DT được thẩm định có thể ứng dụng để phân tích và dự đoán hiệu suất của lớp than hoạt khi có thay đổi thành phần VOC; và do đó đánh giá các cải tiến một cách tương đối (ví dụ: định tuyến khí cấp) thông qua các phương pháp tối ưu hóa kinh tế kỹ thuật (chi phí).

Các mục tiêu chính của dự án này là: (1) Sử dụng phân tích dữ liệu chính thức, phân tích cấu tử chính (Principal Component Analysis – PCA), để trích xuất đặc điểm quy trình và làm rõ xu hướng chính; điều này đã mang lại kết quả tích cực, tạo ra kết quả ban đầu quan trọng đối với DDM của hấp phụ VOC, (2) Phát triển FPM cho hấp phụ đa thành phần và nghiên cứu các hỗn hợp VOC chính, xác định được ảnh hưởng khi thay đổi VOC đến hoạt động của giường than hoạt tính, (3) Xây dựng và xác thực DT, đánh giá tiềm năng dự đoán của nó so với lịch sử hấp phụ VOC, (4) So sánh dự đoán mô phỏng của DT với dữ liệu hiệu suất nhà máy cho các lô được chất cụ thể, (5) Thực hiện tối ưu hóa động dựa trên DT để giảm chi phí vận hành thông qua định tuyến và pha trộn khí tối ưu, dưới các ràng buộc về lưu lượng và khí thải của nhà máy.

Bộ đôi số được xây dựng kết hợp các thành phần hàng đầu (hình 1): Mô tả dựa trên vật lý (FPM) dựa trên các hệ thống phương

trình chi tiết ghi lại hiện tượng vận chuyển macro- (dòng chảy) và micro- (hấp phụ), nhiệt động học khí thải/cân bằng pha, và thiết kế giường hấp phụ VOC. Dữ liệu công nghiệp về khí thải VOC so với điều kiện sản xuất đã được tổng hợp từ một trạm giám sát khí chuyên dụng cho nhà máy sản xuất salbutamol (Montrose, Scotland, UK), với sự chú ý đặc biệt đối với các giai đoạn sản xuất quan trọng của VOC (cụ thể là phân tách chưng cất). Mô tả thống kê (DDM) đã thành công sử dụng PCA, để mô tả tương quan giữa thành phần của VOC (khí thay đổi) và hoạt động của giường than hoạt (có độ chọn lọc hấp phụ).



Hình 1. Kiến trúc DT: Khung FPM và DDM và kết quả hướng tới tối ưu hóa động.

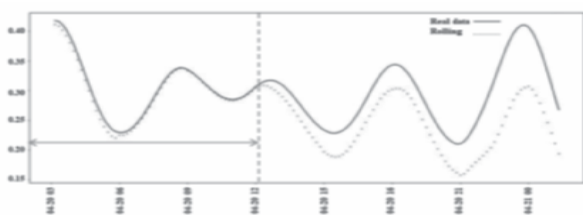
Nghiên cứu này cho thấy DT đạt hiệu quả khi được kết nối với các phép đo quy trình (thu thập cả dữ liệu đầu vào và đầu ra của giường thanh hoạt). Sự kết hợp và bổ sung lẫn nhau của FPM và DDM đã mang lại tiềm năng chưa từng có. Các sửa đổi thiết kế (cấu trúc dòng cột) và vận hành (pha trộn và/hoặc định tuyến dòng khí cấp) có thể được thử nghiệm trong mô phỏng máy tính trước khi áp dụng.

Ca nghiên cứu 2:

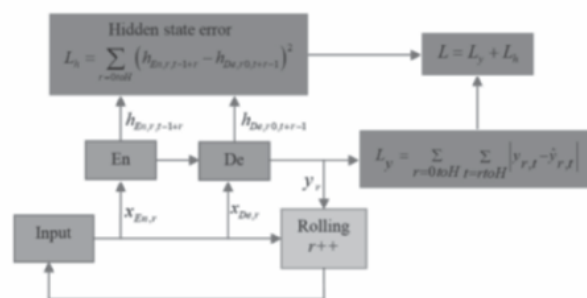
Trên thực tế, không thể đảm bảo việc DDM dự đoán ra ngoài dữ liệu hiện có vì ít thông tin về quá trình được sử dụng. Mô hình

Sequence-to-Sequence (StS) là phương pháp tiếp cận gần nhất như một DT, nhưng dự đoán không đủ dài [5]. Do vậy, Kang và cộng sự đã đề xuất một thuật toán huấn luyện mới để đảm bảo rằng mô hình StS có thể tạo ra dự đoán lặn (rolling) dài vô hạn như một DT [14]. Nhóm tác giả này đã kết hợp nghiên cứu trong mô phỏng động và dự đoán lặn để tạo ra DT ứng dụng cho kiểm soát chất lượng và quá trình của một nhà máy hóa chất.

Aspen Plus được sử dụng để mô phỏng quá trình động học của quá trình nén hơi Cột chưng cất C3 (propane-propylene) và khoảng 10^6 dữ liệu được tạo ra bằng sự xáo trộn ngẫu nhiên của các thành phần đầu vào và tốc độ dòng chảy. Dữ liệu của ba biến điều khiển như tốc độ nén, tốc độ trào ngược, van (u_i), năm biến cảm biến (sv_i) như lưu lượng, áp suất, nhiệt độ, và một biến chất lượng là đo thành phần ở vị trí đáy (q_v) được thu thập mỗi phút. 10^6 dữ liệu của các biến được thu thập bằng cách lấy trung bình mỗi 10 phút, trong vòng 2-3 năm. Các biến điều khiển đã được điều chỉnh trong quá trình, nhưng các biến cảm biến đã được đo. Mô hình StS được huấn luyện cho dự đoán lặn. Sau đó, kết quả của mô hình StS và StS với huấn luyện lặn cho biến chất lượng và biến cảm biến đã được so sánh cho một ngày và tám ngày dự đoán lặn. Hệ số xác định (R^2) của dự đoán dữ liệu thử nghiệm được sử dụng như một chỉ báo về độ chính xác của mô hình; các hệ số cao hơn là chỉ báo của độ tương quan tốt hơn cho các quan sát.



Hình 2. Dự đoán lặn StS của biến chất lượng trong một ngày



Hình 3. Kiến trúc mạng StS với huấn luyện lặn

Với dự đoán lặn StS của biến chất lượng trong một ngày (hình 2), mô hình chỉ có thể dự đoán tốt trong 9 giờ đầu trong khi sai số tăng theo sự lặn của nó. $R^2 = 0,217$ cho trường hợp này và xác nhận rằng dự đoán ngang không bằng với dự đoán lặn. Do đó, mô hình StS đã được huấn luyện cho việc lặn dựa trên thuật toán được đề cập trong Hình 3.

Kết quả nghiên cứu cho thấy dự đoán lặn của biến chất lượng trong một ngày gần đúng với dữ liệu thực tế (R^2 đã tăng thêm 0,76 so với mô hình StS). Dự đoán lặn của biến chất lượng trong tám ngày không khớp với dữ liệu thực tế cho mô hình StS; tuy nhiên, với dự đoán lặn dài hạn, StS với huấn luyện lặn có hiệu suất tốt, R^2 tăng thêm 0,80 so với StS. Đối với tất cả các biến, các sai số của StS với huấn luyện lặn ít hơn so với StS. Ngoài ra, R^2 của StS với huấn luyện lặn trong tám ngày có thể phù hợp tốt hơn với dữ liệu thực tế so với huấn luyện lặn một ngày.

3. KẾT LUẬN

Một thách thức lớn trong ngành công nghiệp hóa chất là phát triển được các quy trình sản xuất ổn định và có thể nâng cấp quy mô ngay từ đầu. Đây là điều bắt buộc để đảm bảo hóa chất được sản xuất một cách hiệu quả và đáng tin cậy. Hơn nữa, việc thực hiện các thay đổi đối với các quy trình đã được phê duyệt đòi

hỏi phải thực hiện thêm các nghiên cứu – một hoạt động kéo dài và tốn kém. Bộ đôi số có khả năng hỗ trợ phát triển các quy trình sản xuất tối ưu. Phân tích hai ca nghiên cứu trong bài báo này đã chỉ rõ những ưu điểm nổi bật khi kết hợp các mô hình FPM và DDM cũng như mô hình DDM dự đoán nhiều bước thời gian và huấn luyện lẫn trong phát triển DT cho nhà máy sản xuất hóa chất. Khi được giao tiếp với dữ liệu quá trình (đo lường), các DT này có thể liên tục cải thiện và phát triển (ví dụ: thông qua việc thay đổi thông số qua DDM và/hoặc AI), từ đó đảm bảo tính tương thích của mô hình bền vững. ❖

Ngày nhận bài: **03/4/2024**

Ngày phản biện: **08/5/2024**

Tài liệu tham khảo:

- [1]. “What is a digital twin?”, <https://unity.com/solutions/digital-twin-definition>. Accessed 25 April 2024.
- [2]. S. Boschert, R. Rosen (2016). “Digital twin-the simulation aspect”, *Mechatronic futures: Challenges and solutions for mechatronic systems and their designers*, 59-74.
- [3]. M. Eckhart, A. Ekelhart (2018). “Towards security-aware virtual environments for digital twins”, *Proceedings of the 4th ACM workshop on cyber-physical system security*, 61-72.
- [4]. R. He, G. Chen, C. Dong, S. Sun, X. Shen (2019). “Data-driven digital twin technology for optimized control in process systems”, *ISA transactions*, 95: 221-234.
- [5]. C.-H. Chou, H. Wu, J.-L. Kang, D.S.-H. Wong, Y. Yao, Y.-C. Chuang, S.-S. Jang, J. D.-Y. Ou (2019). “Physically Consistent Soft-Sensor Development Using Sequence-to-Sequence Neural Networks”, *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, 16(4): 2829-2838.
- [6]. B. Brenner, V. Hummel (2017). “Digital twin as enabler for an innovative digital shop floor management system in the ESB Logistics Learning Factory at Reutlingen-University”, *Procedia Manufacturing*, 9: 198-205.
- [7]. R. Magargle, L. Johnson, P. Mandloi, P. Davoudabadi, O. Kesarkar, S. Krishnaswamy, J. Batteh, A. Pitchaikani (2017), “A simulation-based digital twin for model-driven health monitoring and predictive maintenance of an automotive braking system”, *Proceedings of the 12th International Modelica Conference, Prague, Czech Republic*, 132: 35-46.
- [8]. C. C. Pantelides, J. Renfro (2013). “The online use of first-principles models in process operations: Review, current status and future needs”, *Computers & Chemical engineering*, 51: 136-148.
- [9]. G. Casola, C. Siegmund, M. Mattern, H. Sugiyama (2019). “Data mining algorithm for pre-processing biopharma drug product manufacturing records”, *Computers & Chemical Engineering* 124: 253-269.
- [10]. M.R. Lopes, A. Costigliola, R. Pinto, S. Vieira, J.M.C. Sousa (2020). “Pharmaceutical quality control laboratory digital twin – A novel governance model for resource planning and scheduling”, *International Journal of Production Research*, 58(21): 6553-6567.
- [11]. A. Rasheed, O. San, T. Kvamsdal (2020). “Digital twin: values, challenges and enablers from a modeling perspective”, *IEEE Access*, 8: 21980-22012.
- [12]. G. Aversano, M. Ferrarotti, A. Parente (2021). “Digital twin of a combustion furnace operating in flameless conditions: reduced-order model development from CFD simulations”, *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(4): 5373-5381.
- [13]. D.I. Gerogiorgis, D. Castro-Rodriguez (2021). “A digital twin for process optimisation in pharmaceutical manufacturing”, *Computer Aided Chemical Engineering*, 50: 253-258.
- [14]. J.-L. Kang, S. Mirzaei, Y.-C. Lee, Y.-C. Chuang, M. Frias, C.-H. Chou, S.-J. Wang, D.S.H. Wong, S.-S. Jang (2021). “Digital twin model development for chemical plants using multiple time-steps prediction data-driven model and rolling training”, *Computer Aided Chemical Engineering*, 50: 567-572.