

化工行业 AI 赋能仿 真白皮书

迈向安全、绿色、智能的流程工业新范式

蓝图科技计算技术研究中心

蓝皮书广州智能技术研究有限公司 | 广州市天河区高科路 32, 34 号 B1

目录

一、引言与行业范畴.....	2
二、政策背景与战略导向.....	3
三、化工行业关键技术难点.....	5
3.1 石油化工.....	5
3.2 煤化工.....	6
3.3 精细化工.....	7
3.4 高分子材料.....	8
3.5 基础化工与安全环保.....	9
四、AI 赋能仿真解决方案.....	10
五、系统级融合趋势.....	13
六、未来展望.....	14
6.1 技术趋势.....	14
6.2 产业价值.....	15
结语.....	15

一、引言与行业范畴

化工行业是以石油、天然气、煤炭、生物质等为原料，通过化学、物理过程生产化学品、材料、能源的基础工业。根据国家《战略性新兴产业分类》，化工行业与新材料、新能源、生物产业等深度交叉，涵盖以下核心领域：

领域	细分方向	战略定位
石油化工	炼油、烯烃/芳烃、合成树脂/橡胶	能源与基础材料支柱
煤化工	煤制油/气/烯烃、煤制化学品	能源多元化和清洁利用
精细化工	医药中间体、农药、染料、涂料、电子化学品	高附加值、技术密集型
高分子材料	工程塑料、特种橡胶、高性能纤维	战略新兴材料
基础化工	三酸两碱、化肥、无机盐	国民经济基石

二、政策背景与战略导向

政策文件	发布机构	核心内容	AI 仿真战略导向
《“十四五”原材料工业发展规划》	工信部	推动原材料工业高端化、绿色化、智能化，突破智能制造关键共性技术	鼓励数字孪生、智能控制技术在流程工业的应用
《关于“人工智能+”原材料工业的行动方案（2024-2026）》	工信部	打造一批“人工智能+”原材料工业标杆场景，推动工艺优化、设备预测维护、安全风险预警	明确 AI 与化工工艺深度融合，培育智能工厂
《原材料工业数字化转型工作方案（2024-2026 年）》	工信部等九部门	到 2026 年，原材料工业数字化转型取得重要进展，打造 120 个以上数字化转型典型场景	支持流程模拟、在线优化、数字孪生等技术
《化工园区安全风险智能化管控平台建设指南（试行）》	应急管理部	推动化工园区安全风险智能化管控，实现安全风险动态监测预警	强化安全风险仿真与预警能力
《工业重点领域能效标	国家发改委	明确炼油、乙烯、合成氨等领域的能效	为能效优化仿真提供目标基准

<p>杆水平和基准水平 (2023 年版)》</p>		<p>标杆水平，推动节能降碳改造</p>	
<p>《新产业标准化领航工程实施方案 (2023-2025 年)》</p>	<p>工信部</p>	<p>前瞻布局未来产业标准研究，包括化工新材料、高端专用化学品</p>	<p>推动 AI 仿真在化工新材料研发中的应用</p>
<p>《关于“十五五”推进新型工业化的行动方案 (征求意见稿)》</p>	<p>工信部</p>	<p>加快流程工业数字化转型，建设一批“黑灯工厂”、智慧化工园区</p>	<p>明确数字孪生、智能控制为关键技术路径</p>

三、化工行业关键技术难点

3.1 石油化工

技术难点	具体表现
炼油过程产率优化难	原油成分波动、催化剂失活、产品需求变化，难以实时优化切割和操作参数
裂解炉深度控制难	裂解反应复杂，炉管结焦、温度不均，导致烯烃收率波动
催化裂化催化剂失活预测难	催化剂循环再生过程复杂，活性衰减机理不清，影响转化率
分离序列能耗高	精馏、吸收等分离过程能耗占比较大，传统优化难以突破能效瓶颈
装置间热集成优化难	全厂能量系统耦合复杂，夹点分析依赖人工，优化空间受限

3.2 煤化工

技术难点	具体表现
煤气化炉温度场控制难	气化炉内高温高压，温度分布不均，易导致结渣、堵渣
合成气组分波动大	煤质变化、气化条件波动导致合成气组分不稳定，影响下游合成
甲醇合成塔热点迁移	催化剂床层热点位置迁移，难以实时调控，影响催化剂寿命
煤制油费托合成产物分布宽	产物分布受催化剂、工艺条件影响大，目标产品选择性优化难
废水处理难度大	煤气化废水成分复杂，含酚、氨氮、油类，处理成本高

3.3 精细化工

技术难点	具体表现
间歇反应过程重现性差	加料、温度、搅拌等波动导致批间差异，影响产品质量一致性
反应终点判断难	复杂有机反应缺少在线监测手段，易出现过反应或反应不完全
结晶过程晶型/粒度控制难	晶型转变、粒度分布宽泛，影响后续过滤、干燥及产品性能
危险工艺安全风险高	硝化、氯化、重氮化等强放热反应，易发生热失控
多步反应收率低	中间体分离、纯化步骤多，累积损失大，总收率偏低

3.4 高分子材料

技术难点	具体表现
聚合反应分子量分布控制难	链转移、链终止等副反应导致分子量分布宽，影响材料性能
共聚物组成均匀性差	不同单体竞聚率差异导致共聚物组成漂移，性能不稳定
聚合釜撤热困难	聚合反应强放热，传热不及时易导致局部过热、爆聚
挤出/纺丝过程流动不稳定性	熔体破裂、纺丝断头等问题影响连续生产
材料老化机理复杂	光、热、氧、湿等多因素耦合，寿命预测难

3.5 基础化工与安全环保

技术难点	具体表现
合成氨/甲醇等大型装置能效提升难	传统工艺接近理论极限，进一步降耗需突破性技术
化学反应热失控预警难	缺少早期预警手段，事故频发
有毒有害气体泄漏风险	泄漏扩散路径、影响范围难以快速准确预测
废水/废气处理过程优化难	生化反应、吸附/脱附过程动态建模难，运行成本高
过程数据利用率低	海量历史数据沉睡，未能转化为工艺优化知识

四、AI 赋能仿真解决方案

技术难点	AI 赋能仿真解决方案	核心价值
石油化工		
炼油过程产率优化难	炼油过程产率智能优化与实时调优	收率提升 0.5-1.5%， 能耗降低 3-5%
裂解炉深度控制难	裂解深度神经网络预测与结焦趋势仿真	乙烯收率提升 1-2%， 运行周期延长
催化裂化催化剂失活预测难	催化剂循环衰减模型与失活预警	转化率稳定性提升， 非计划停工减少
分离序列能耗高	精馏塔能效 AI 优化与热集成重构	分离能耗降低 10-15%
装置间热集成优化难	全厂能量系统夹点分析与 AI 重构	综合能耗降低 5-10%
煤化工		
煤气化炉温度场控制难	气化炉温度场 PINN 实时仿真	温度预测误差 <3%， 结渣风险预警
合成气组分波动大	煤质-气化条件-组分 AI 关联模型	组分预测准确率 >95%， 下游波动减少
甲醇合成塔热点迁移	催化剂床层热点迁移预测与预警	催化剂寿命延长 20%， 合成效率提升
煤制油费托合成产物分布宽	费托合成产物选择性 AI 优化	目标产品选择性提升 5-10%
废水处理难度	煤气化废水处理工艺 AI 仿	处理成本降低 15%，

技术难点	AI 赋能仿真解决方案	核心价值
大	真	达标率提升
精细化工		
间歇反应过程重现性差	间歇反应过程数字孪生与批次控制优化	批间差异降低 50%，合格率提升
反应终点判断难	反应进程 AI 软测量与终点预测	减少过反应，收率提升 2-5%
结晶过程晶型/粒度控制难	结晶过程多尺度仿真与智能调控	粒度分布 CV 值降低 30%，过滤效率提升
危险工艺安全风险高	强放热反应热失控边界 AI 预测	预警提前量 >10 分钟，事故风险降低
多步反应收率低	全流程收率瓶颈分析与工艺优化	总收率提升 5-15%，废料减少
高分子材料		
聚合反应分子量分布控制难	聚合过程分子量分布 AI 预测与调控	分子量分布 PDI 降低 20%，性能提升
共聚物组成均匀性差	共聚组成漂移动态补偿模型	组成均匀性提升，批次稳定性提高
聚合釜撤热困难	聚合釜传热性能数字孪生与优化	撤热效率提升，爆聚风险降低
挤出/纺丝过程流动不稳定性	熔体流动稳定性 AI 仿真与工艺优化	断头率降低 30%，连续运行时间延长
材料老化机理复杂	多因素耦合老化寿命 AI 预测模型	寿命预测精度 >90%，质保成本降低

技术难点	AI 赋能仿真解决方案	核心价值
基础化工与安全环保		
合成氨/甲醇能效提升难	大型合成装置能效瓶颈 AI 诊断与优化	能耗降低 2-3%，逼近理论极限
化学反应热失控预警难	反应安全边界量化与实时预警系统	预警准确率>95%，安全事故减少
有毒有害气体泄漏风险	泄漏扩散快速预测与应急响应优化	扩散路径预测精度提升，应急时间缩短
废水/废气处理过程优化难	生化/吸附过程 AI 代理模型与优化	处理成本降低 10-20%，排放稳定达标
过程数据利用率低	工业知识图谱与工艺智能推荐系统	数据复用率提升，工艺优化周期缩短

五、系统级融合趋势

融合方向	核心内涵	AI 赋能价值
炼化一体化优化	炼油-化工深度耦合, 实现物料/能量/价值最大化	全厂计划-调度-优化一体化 AI 平台, 边际效益提升
智慧化工园区	园区安全、环保、应急、物流一体化管控	风险动态量化、应急仿真推演, 本质安全提升
黑灯工厂/无人车间	全流程自动化、智能化, 少人/无人值守	设备预测维护、工艺自主优化, 劳动生产率提升
数字孪生工厂	物理工厂与虚拟工厂实时映射、闭环优化	实时数据校正、软测量、操作优化, 降低试错成本
碳-能-化耦合	绿氢/绿电与化工过程耦合, 实现低碳化	碳足迹动态核算, 绿氢替代路径优化

六、未来展望

6.1 技术趋势

技术方向	发展趋势	AI 仿真作用
原子经济性最大化	从分子水平设计反应路径, 减少副产物	反应路径高通量筛选, 催化剂虚拟设计
过程强化与微型化	微反应器、膜反应器等新型装备应用	微尺度多物理场仿真, 放大效应预测
绿氢/绿电化工	可再生能源驱动的化学品生产	波动性电源下过程动态优化, 柔性调度
循环化工	废塑料/生物质化学回收, CO ₂ 转化利用	新反应路径探索, 经济性-碳足迹多目标优化
安全可量化	从定性 HAZOP 走向定量动态风险评估	实时风险量化、早期预警、应急推演

6.2 产业价值

AI 赋能仿真正在推动化工行业从“经验放大”向“数字放大”转型，核心价值体现在：

提质增效：关键产品收率提升 1-3%，能耗降低 5-15%，研发周期缩短 30-50%

安全可靠：热失控预警提前量 >10 分钟，泄漏扩散预测精度提升，事故风险降低

绿色低碳：碳足迹动态核算，绿氢替代路径优化，单位产值碳排放降低

资产价值：设备寿命延长 20-30%，非计划停工减少 50%，维护成本降低

结语

化工行业正处于从“规模扩张”向“质量效益”转型的关键期。AI 赋能仿真作为连接分子尺度到工厂尺度的桥梁，正在破解长期存在的安全、效率、质量等核心难题。随着炼化一体化、智慧园区、碳-能-化耦合等融合趋势深化，AI 仿真将从辅助工具升级为流程工业不可或缺的“智能大脑”，为构建安全、绿色、高效的现代化工体系提供核心支撑。