基于数字孪生的高分子配方变更质量风险预测研究

温海军，区楚达，李煦田，彭圣龙，杜壮，高洁
（广州鹿山新材料股份有限公司，广东　广州　510530）

摘要：高分子材料配方变更会引发质量风险，存在难以量化预测、跨阶段传播机制不明确等情况。为此提出一种基于数字孪生的全生命周期质量风险预测模型。此模型融合高分子物理机理及数据驱动算法，建立“机理引导－数据驱动”混合框架，打通PLM与QMS数据链路，达成配方变更的实时映射、动态风险推演。运用动态贝叶斯网络来刻画风险跨阶段传播，借助物理信息融合网络XGBoost-LSTM实施性能残差补偿。以聚丙烯填料变更和PVC稳定剂替换案例做验证，该模型能把配方变更试错成本降低约32%，审批周期缩短28%，跨配方泛化能力显著优于纯数据模型。

关键词：数字孪生；高分子配方；质量风险预测；全生命周期；物理信息融合
引用论文：温海军，区楚达，李煦田，等．基于数字孪生的高分子配方变更质量风险预测研究[J]. 橡塑技术与装备，2026,52(11):31-34.
中图分类号：TQ330.46　　**文章编号**：1009-797X(2026)11-0031-04
文献标识码：B　　DOI:10.13520/j.cnki.rpte.2026.11.006

1　绪论

高分子材料在新能源汽车、电子封装等领域有着广泛应用，不过配方微调经常出现。到2025年，因配方变更导致的质量异常在行业总投诉里占比为31.2%，废品率提高8%~15%。传统的试错法和经验评估很难应对“配方－工艺－结构－性能”这种复杂的耦合情况，且缺少对风险跨阶段传播的量化认识。工业4.0、数字孪生技术带来了新的契机，但针对配方变更的全生命周期数字孪生框架仍不存在。

在现有的研究里，Lee等人[1]对数字孪生在智能制造中的使能技术做了综述，Smith和Johnson[2]借助机器学习来预测聚氨酯力学性能，但这依赖固定配方。国内的王伟等人[3]、张华[4]、陈静[5]围绕胶黏剂智能制造开展了研究，大多针对稳态生产。Jiang和Webb[6]关注物理信息神经网络在共聚物预测里的应用，目前仍处于起步阶段。现有工作存在“生命周期断层”“配方变更特异性缺失”“机理－数据融合不深”这三大不足。本文围绕配方变更，提出了面向高分子全生命周期的数字孪生架构，建立了动态贝叶斯风险传播模型，并且开发了物理约束与XGBoost–LSTM融合的预测算法，想要达成风险量化预判与闭环管控。

2　理论与方法基础

数字孪生通过建立物理实体的高保真虚拟镜像，实现“以虚映实”的效果。Rehmer等人[7]研发了注塑成型数字孪生用于零件质量预测，吴晓[8]对数字孪生在化工过程模拟中的应用做了综述，但这些工作均未将配方组成作为核心变量。高分子的“结构－组成－加工－性能”关系非常复杂，传统机理模型像Kamal–Sourour方程对于工业多组分模式的误差比较大，机器学习虽然已被用于预测环氧树脂T_g等（刘洋等人[9]，林峰[10]），但纯数据模型在配方发生变更时泛化能力会迅速下降。物理信息融合成为新的发展趋势，通过嵌入守恒律或者本构方程来约束网络训练，能够提高分布外泛化性能。

全生命周期质量风险传播理论表明，配方变更风险并非孤立存在，而是沿着“设计→中试放大→量产→客户”这样的链式结构进行传播并放大。比如说在中试阶段出现的微小黏度偏差，有可能在量产的时候因为剪切热积累从而引发降解，最终致使客户现场出现失效的情况。动态贝叶斯网络（DBN）因其能表

作者简介：温海军（1981–），男，本科，中级工程师，高级人工智能训练师（三级），主要从事高分子材料质量管理工作。

达时序因果关系和不确定性，适用于风险传播建模。本文采用“机理先验 + 数据残差补偿”混合策略，由机理模型给出基准预测，XGBoost–LSTM 网络学习机理无法解释的偏差，并通过迁移学习克服小样本限制。

3 模型框架与算法设计

技术路线采用 4 层 2 通道架构（见图 1），包括物理实体层、虚拟实体层、孪生数据层、服务应用层。利用数字线程打通 PLM、MES、QMS 数据，将配方组成、工艺参数、在线检测、离线质检、设备状态和客户投诉这六类数据整合。运用基于注意力机制的多模态融合方法，把分子描述符如官能度、氢键供体数等和工艺变量联合编码。

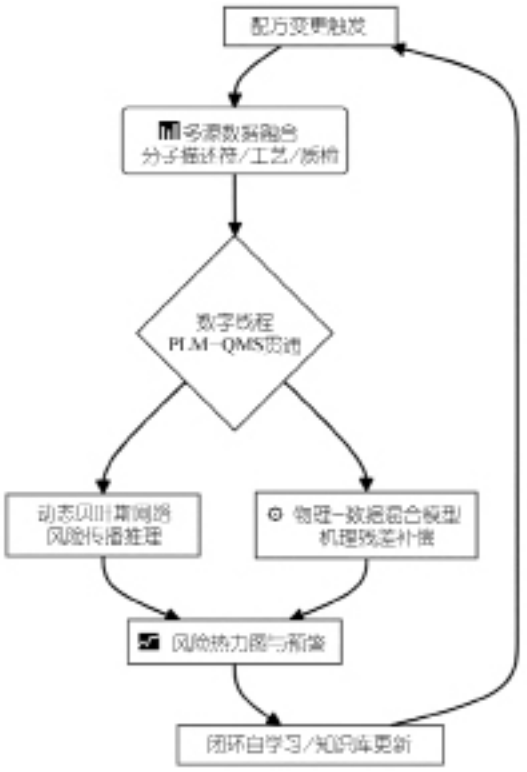


图 1 基于数字孪生的高分子配方变更质量风险预测技术路线

动态贝叶斯风险传播模型确定了 4 个阶段的风险节点，即设计阶段的相容性风险（R_1）、中试放大效应风险（R_2）、量产工艺漂移风险（R_3）、客户失效风险（R_4）。条件概率表是基于专家知识和历史数据，通过 EM 算法学习得到的。在输入配方变更参数之后，该模型能够推断出各个阶段的风险概率、关键传播路径。物理 – 数据融合预测运用的是残差学习架构 $\hat{y}$= fmech(X) + gNN(X, ε)，其中 fmech 是基于 Flory–Huggins 判据、Arrhenius 动力学来计算基准性能的，gNN 是 XGBoost–LSTM 混合网络，损失函数增加了质量守恒、热力学一致性等物理约束，并且引入迁移学习来处理新配方数据稀疏的问题。

4 实证分析与应用案例

4.1 数据与实验设置

此次实验所采用的数据源自华南地区一家从事高分子材料生产的企业，该企业设有改性聚丙烯（PP）生产线、环氧树脂胶黏剂中试基地。在 2022~2025 年这将近 4 年的时间里，研究者收集了 300 多个配方变更案例，这些案例存在多种典型场景，如填料替换、比例的细微调整、新批次树脂的引入等。收集而来的数据按照 7:1:2 的比例被划分成训练集、验证集、测试集这 3 个部分，并且还专门设置了 12 组跨配方测试集，以此来检验模型的泛化能力。所有数据均经过了标准化处理、脱敏操作，处理过程中并未涉及具体的配方成分、工艺参数边界。

4.2 风险传播仿真 ——PP 填料变更

选取了一个典型案例，即 PP 填料从碳酸钙变更为滑石粉。通过动态贝叶斯网络推理可知，相容性风险 R_1 的初始概率是 0.21，进入中试阶段后，由于螺杆组合不匹配，分散风险有所增加，R_2 的概率上升至 0.47，在量产阶段，熔指出现波动，使得 R_3 达到了 0.63，最终客户投诉风险 R_4 为 0.38。该模型成功识别出了“黏度升高 → 剪切热积聚 → 热降解 → 冲击下降”这样的连锁路径，这与实际故障树是相符的。这一传播链为企业能够提前对螺杆组合、工艺窗口进行调整提供了定量的依据，避免了在传统试错过程中至少 3 次的无效调整。

4.3 预测性能对比

把本文所提出的物理融合混合模型，即 Physics–informed Hybrid，与纯 XGBoost、LSTM、MLP 进行对比。在跨配方测试集当中，本文模型的 R^2 达到了 0.891，然而 XGBoost 下降到 0.653，LSTM 是 0.612，MLP 仅仅只有 0.587。拉伸强度预测的 RMSE 从纯数据模型的 1.82 MPa 降低到 1.15 MPa（见表 1），这证实了物理约束能够抑制过拟合，并且让模型在分布外配方上维持稳定。

4.4 PVC 稳定剂替换 —— 工业验证

在某硬质 PVC 管材配方里面，将钙锌稳定剂换成

表 1　不同模型在跨配方测试集上的性能对比

模型	R^2	RMSE/MPa	MAPE/%
纯 XGBoost	0.653	1.82	12.7
LSTM	0.612	1.96	14.1
MLP	0.587	2.04	15.3
本文模型（物理融合）	0.891	1.15	8.2

了有机锡稳定剂。数字孪生系统提前对热稳定性窗口收窄情况进行预测，收窄幅度大约为 18%，还自动给出建议，要把机筒温度降低 5 ℃。实际进行试产的时候，首次合格率从以往平均的 71% 提高到 93%，过渡时间从 4.2 h 缩短为 1.5 h。系统在试产结束后，自动将本次变更的工艺调整策略、风险路径存入知识库。后续类似变更的仿真预演时间又进一步减少了大约 40%。这个案例完整反映了从事先预测、事中控制再到事后自学习的整个闭环。

4.5　稳健性检验

采用 Bootstrap 重采样办法，借助不一样的随机种子重复进行实验，结果表明模型性能的波动幅度在 3% 之内，这表明该模型拥有比较不错的稳健性。

5　应用启示与推广路径

企业方面，建议把数字孪生模块嵌入现有的 PLM 系统当中，在变更申请这个阶段便启动虚拟预演，进而生成风险热力图，对于高风险变更要强制进行仿真验证。要建立起跨部门数据治理委员会，以此来保障配方 BOM、工艺参数、质量数据的完整性。实践已经表明，这样的模式能够让试错批次减少大概 32%，变更审批周期平均缩短 28%，1 年下来可以节省超过百万元的试错成本。

在行业方面，行业协会能够发挥带头作用，着手制定《高分子材料数字孪生建模指南》，以此来规范数据接口、模型评价标准。鼓励规模较大且处于领先地位的企业开放经过脱敏处理的配方数据，共同建立高分子性能预测基准数据集，进而加快中小企业向智能化方向转变的进程。

在技术方面，未来可将轻量化模型部署到边缘网关那里，实现产线级别的实时风险预警，融合粗粒化分子模拟以提高机理精度，并集成大语言模型辅助解读风险报告，从而降低一线工程师的使用难度。

6　结论

本文所提出的全生命周期数字孪生框架成功达成了 PLM-QMS 数据链路的打通，达成了对配方变更风险从事前预测到事中控制再到事后追溯的完整流程。动态贝叶斯网络能够有效揭示风险跨阶段传播的机制，物理－数据融合模型在小样本变更场景下 R^2 相比纯数据模型有超过 20% 的提高。工业案例证明试错成本降低了 32%，变更周期缩短了 28%。后续工作会扩展到反应性加工如聚氨酯发泡的多物理场耦合方面，并且融合在线拉曼光谱等实时数据，以此推动模型实现在线进化。

参考文献：

[1] Lee J, et al.Digital twin for smart manufacturing: A review[J].Engineering Applications of Artificial Intelligence, 2023, 118:105 678.
[2] Smith A, Johnson B. Machine learning approaches for predicting mechanical properties of polyurethanes[J]. Polymer Testing, 2022,108:107 456.
[3] 王伟，李强 . 数字化转型背景下胶黏剂企业智能制造发展路径研究 [J]. 中国胶黏剂，2023,32(5):58–62.
[4] 张华 . 基于工业互联网的胶黏剂生产过程质量监控系统设计 [J]. 粘接，2023,44(3):112–116.
[5] 陈静 . 聚氨酯胶粘剂力学性能的 BP 神经网络优化 [J]. 粘接，2022, 43(7):88–92.
[6] Jiang S, Webb M A. Physics-Guided Neural Networks for Transferable Property Prediction in Copolymers[J]. Macromolecules, 2025.
[7] Rehmer A, et al. A Digital Twin for part quality prediction in plastic injection molding[J]. Elsevier, 2024.
[8] 吴晓 . 数字孪生技术在化工过程模拟中的应用进展 [J]. 粘接，2024,45(2):120–125.
[9] 刘洋，等 . 环氧树脂固化动力学的机器学习预测模型比较研究 [J]. 中国胶黏剂，2022,31(8):1–6.
[10] 林峰 . 基于机器学习的聚氨酯泡沫密度预测模型 [J]. 化工进展，2022, 41(6):3 000–3 006.

Research on predicting quality risks associated with changes in polymer formulations based on digital twin

Wen Haijun, Qu Chuda, Li Xutian, Peng Shenglong, Du Zhuang, Gao Jie

(Guangzhou Lushan New Material Co. LTD., Guangzhou 510530, Guangdong, China)

Abstract: Changes in polymer material formulations can pose quality risks, which are difficult to quantify and predict, and the cross-stage propagation mechanism remains unclear. In response, this paper proposes a digital twin-based full lifecycle quality risk prediction model. This model integrates polymer physical mechanisms and data-driven algorithms to establish a "mechanism-guided - data-driven" hybrid framework, connecting the PLM and QMS data links to achieve real-time mapping and dynamic risk deduction of formulation changes. A dynamic Bayesian network is employed to depict the cross-stage propagation of risks, and a physical information fusion network, XGBoost-LSTM, is utilized for performance residual compensation. Validated through cases involving changes in polypropylene filler and substitution of PVC stabilizer, the model can reduce the cost of trial and error for formulation changes by approximately 32%, shorten the approval cycle by 28%, and exhibit significantly superior cross-formulation generalization capabilities compared to pure data models.

Key words: digital twin; polymer formula; quality risk prediction; full life cycle; physical information fusion

(R-03)

全球轮胎橡胶助剂龙头，敲钟上市

The global leader in tire rubber chemicals rings the bell for its IPO

2026 年 9 月 29 日，轮胎用橡胶助剂龙头彤程新材料集团股份有限公司（H 股代码 09607）在港交所主板挂牌。

开盘报 40 港元，较 44 港元的发行价下跌 9.09%；按每手 100 股、不计费用计算，中签一手账面浮亏 400 港元。同日港交所另有 3 只新股挂牌，4 只新股中 3 只破发。

发行价定在招股区间 39 至 44 港元的上限。全球发售 6 811.87 万股 H 股，募资总额 29.97 亿港元，扣除 9 593 万港元上市开支后，净额约 29.01 亿港元。香港公开发售获认购 3.39 倍，国际发售获认购 2.75 倍，未设超额配股权。八名基石投资者合计认购约 1.26 亿美元，其中浦林成山（香港）认购 100 万股。

招股书显示，2023 至 2025 年，彤程新材收入 29.37 亿、32.63 亿、34.21 亿元，期内利润 4.04 亿、5.34 亿、5.77 亿元。2026 年上半年收入 21.33 亿元，同比增长 29.2%；期内利润 3.89 亿元，同比增长 8.6%—— 利润增速明显慢于收入。

2026 年上半年，橡胶助剂及其他化工产品占 61.9%，电子材料占 32.5%。2025 财年橡胶助剂板块收入 23.21 亿元，占比 67.9%，同比下滑 4.78%，毛利率从 25.6% 降至 22.6%，公司归因于产品价格竞争；电子材料毛利率同期 28.3%。

2025 财年，彤程新材在全球及中国轮胎用酚醛树脂橡胶助剂市场的销售收入均排第一，份额 41.4% 和 45.9%；客户覆盖全球前 20 大轮胎制造商，这些厂商合计占 2025 年全球轮胎市场七成以上。

轮胎主业的出海，彤程新材已经先落了一子。2025 年当年 12 月 1 日，彤程（泰国）有限公司在罗勇府奠基，成为集团首个海外实体生产基地，规划年产橡胶助剂超 3 万 t，计划 2027 年第二季度投产。

值得注意的是，公司 2025 年应占联营公司利润 3.82 亿元，相当于集团净利润的 66.2%，其中持有港股上市轮胎企业浦林成山约 5.12% 股权 —— 轮胎企业的经营收益，仍是这家 " 材料公司 " 利润表的重要来源。

摘编自“中国轮胎商务网”

(R-03)