

数字孪生在先进同步辐射光源部署应用的评估与展望

徐德庭^{1,2}, 叶芬³, 郑雷¹, 马陈燕¹, 沈治邦^{1,4}, 陈昭¹, 赵丽娜^{1,4*}

1. 中国科学院高能物理研究所多学科研究中心, 北京 100049;

2. 散裂中子源科学中心加速器技术部, 东莞 523803;

3. 中央民族大学信息工程学院, 北京 100081;

4. 中国科学院大学, 北京 101408

* 联系人, E-mail: linazhao@ihep.ac.cn

2024-09-06 收稿, 2024-11-15 修回, 2024-11-15 接受, 2024-11-19 网络版发表

国家重点研发计划(2021YFA1200904, 2022YFA1207600)、国家自然科学基金(12375326)、高能物理研究所创新计划(E35457U210)和博士后创新人才支持计划(BX20240205)资助

摘要 为了满足多基础科学领域对先进同步辐射光源的持续需求, 亟须推进第四代同步辐射光源向过程标准化和智能化的光源设备升级. 近年来, 数字孪生成为数字化转型和智能化升级的新兴重要技术. 大科学装置的数字孪生成为提升装置利用效率、降低运行成本、加速材料发现的新途径, 并使设备的管理运行、材料的射线表征过程等整个大装置系统生命周期走向智能化. 本文面向数字孪生在先进同步辐射光源中的部署应用, 总结介绍了同步辐射光源发展及运行现状, 梳理了数字孪生的基本概念及发展现状, 探讨了数字孪生在同步辐射中的关键技术, 概述了数字孪生在能源、催化及医疗等同步辐射重要应用出口的现状, 结合先进同步辐射线站硬件特点, 重点评估了在先进同步辐射科学发现中数字孪生的部署要点, 并提出多尺度模拟数字孪生在先进同步辐射光源未来发展中的赋能展望, 为推动数字孪生在未来同步辐射领域中的部署应用、助力科学突破提供科学参考.

关键词 数字孪生, 同步辐射, 智能化, 多尺度模拟

同步辐射光源是20世纪应用最广泛的高性能X射线源, 已成为能源环境、生物医学、先进材料等现代前沿科学技术研究的重要工具^[1]. 在基础科学与工程技术的持续革新下, 同步辐射光源已经进入第四代同步辐射光源的时代. 为了满足各学科领域对先进光源的持续需求, 世界各主要国家均在积极开展第四代同步辐射光源的物理设计和工程建设向过程标准化和智能化的光源设备升级. 新的测量技术、探测器的技术进步、多模态数据利用和数据分析算法的进步在推动同步辐射智能化升级的同时, 其数据分析、光束线控制、设备利用效率等方面也面临着挑战. 得益于计算机科学和理论的迅速发展, 包括分子模拟、机器学习(machine learning, ML)及数字孪生等在内的先进方法

逐步成为应对高能物理装置运行以及数据处理挑战的有效工具, 进一步提升装置利用效率、降低运行成本、加速材料发现、有效发挥大科学装置射线表征实验的解析效能^[2]. 由数据和物理组成的同步辐射光源, 以人工智能(artificial intelligence, AI)、ML、数字孪生为代表的基础设施终将成为整个光源不可或缺的一部分, 以提升同步辐射的数据分析软件、光束线控制和计算基础设施^[3].

数字孪生技术综合利用大数据和AI等通用技术, 借助信息技术, 刻画一个跟物理实体高度逼真的数字孪生模型, 通过连接与数据实现数字孪生体与物理实体的交互共生^[4]. 数字孪生的概念最早在2003年被提出^[5]. 起初, 数字孪生主要用于飞机的寿命预测和健康

引用格式: 徐德庭, 叶芬, 郑雷, 等. 数字孪生在先进同步辐射光源部署应用的评估与展望. 科学通报, 2024, 69: 5225–5241

Xu D T, Ye F, Zheng L, et al. Assessment and prospect of digital twin deployment and application in advanced synchrotron radiation light sources (in Chinese). Chin Sci Bull, 2024, 69: 5225–5241, doi: [10.1360/TB-2024-0955](https://doi.org/10.1360/TB-2024-0955)

管理(航空航天领域),希望通过数字模型模拟飞行器在太空环境中的运行情况,为实际操作提供预测和指导^[6]。后来,企业开始使用数字孪生模型来模拟产品的生产过程、优化制造流程,提高生产效率和产品质量。随着越来越多的行业采用该技术,数字孪生市场正在并将继续增长,因为它具有降低运营成本和时、提高现有系统的生产力、改善维护、简化可访问性、创造更安全的工作环境等潜力。2010~2020年,数字孪生的发展进入集成和创新阶段。事实证明,数字孪生在电池管理系统、智慧城市、环境、工业等各个领域具有广泛的应用前景和巨大的应用价值^[4]。在数据和模型的驱动下,数字孪生可以进行监控、仿真、预测、优化等。如大数据分析、AI、ML等先进技术,与数字孪生相结合,拓展了其应用范围和能力。数字孪生作为一项前沿技术,正在不断地演化和拓展其应用领域。

目前,国内外同步辐射光源的数字孪生落地应用研究较少。一些国际大型光源利用数字孪生为光源设备提供优化调控数据分析软件及光束线控制的解决方案,从而改善光源的设施大型、结构复杂、管理困难等特性,进一步提升装置利用效率。数字孪生逐步成为同步辐射装置数字化转型和智能化升级的新兴重要技术。

大科学装置全生命周期的数字化、智能化,提升装备研制的自主创新能力,是实现我国“制造强国”战略的关键。融合理论模拟、ML和新一代信息技术的数字孪生,已成为支持大科学装置全生命周期活动的重要使能技术^[7]。综上,本文基于数字孪生在同步辐射中的部署应用,梳理了同步辐射及数字孪生的基本概念和发展现状,探讨了数字孪生在同步辐射的全生命周期管理、加速器调优、光束线优化、科学发现中的关键应用及潜在结合,重点评估了在先进同步辐射科学发现中数字孪生的部署要点,并提出多尺度模拟数字孪生在先进同步辐射光源未来发展中的赋能展望,最后阐述了数字孪生在同步辐射领域中发展面临的挑战及展望,有望为数字孪生在同步辐射中的研究和应用提供科学参考。

1 同步辐射光源运行及发展现状

同步辐射是一种“光”,是速度接近光速的带电粒子在做曲线运动时沿轨道切线方向发出的电磁辐射(也叫同步光),具有高亮度、高准直性、宽波段(覆盖红外、可见、紫外和X光波段)、光连续可调、偏振性

等特性,可以用于研究材料结构、表面形貌、功能机制、反应动力学、电子结构、光谱、结构解析,为各相关科学研究物质的微观动态结构和各种瞬态过程提供前所未有的机会,是物理学、化学、材料科学、生命科学、医学等领域最先进又不可替代的工具^[7]。

自1947年首次在同步加速器上观测到同步辐射以来,同步辐射光源经历了几代的发展,并在科学研究和工业应用中发挥着重要作用(表1)。中国建立了第四代光源,也是世界上最大的同步辐射装置之一,旨在面向国际科学技术前沿,为国家经济建设和社会发展做出战略性、基础性和前瞻性贡献。作为国之重器,大科学装置是抢占高新、关键技术制高点的重要手段,是支撑基础科学前沿研究和多学科交叉前沿研究的公共平台,可以为我国高新技术研发和关键核心技术的突破提供重要的平台和关键的手段。

依托大装置的方法学有近百种,如X-射线衍射(X-ray diffraction, XRD)、小角X-射线散射(small angle X-ray scattering, SAXS)、X-射线生物大分子结构分析、X-射线吸收谱精细结构(X-ray absorption fine structure, XAFS)、X射线磁圆二色(X-ray magnetic circular dichroism, XMCD)技术、X-射线荧光分析(X-ray fluorescence, XRF)、X-射线成像技术、真空紫外光电离质谱技术、光电发射技术和角分辨光电子能谱(angle resolved photoemission spectroscopy, ARPES)等。随着性能的提升,同步辐射光源在材料科学、生命科学、环境科学等领域的应用将进一步拓展,特别是在纳米科技、生物大分子结构解析、能源材料研究等方面。

然而,这些装置本身的高水平建设却面临实验终端投入不够、开发不足的严峻问题,这严重阻碍了原始创新科学成果的发现与产出。随着同步辐射光源的更新迭代,对加速器的亮度、发射度、脉冲特性、稳定性、灵活性设计等进一步提出了更高的优化需求。另外,为了充分利用同步辐射的特性并提高其性能,对于同步辐射助力科学发现和实验方法优化方面,也提出了多学科交叉、原位和实时分析、高分辨率成像、高通量实验、数据处理能力等方面的需求。

为了进一步满足加速器优化设计部分、科学发现实验方法优化方面的需求,同步辐射光源的设计和建设需要集成多项先进技术,如小孔径、高梯度磁铁技术、新型真空获得技术、先进的束流校正及反馈方法等,同步辐射光源的发展和优化是一个持续的过程,需要不断的技术进步和创新。随着技术的进步,包括数字

表 1 同步辐射光源的发展历程
Table 1 The development history of Synchrotron Radiation Sources

光源	特点	代表性光源
第一代	以高能物理实验为主的兼用光源	美国康奈尔大学CHESS光源; 北京同步辐射装置BSRF
第二代	同步辐射专用光源, 典型设计为利用弯转磁铁产生同步辐射, 都是电子储存环, 通常能量较低	美国布鲁克海文国家实验室NSLS光源(800 MeV); 巴西国家同步辐射实验室LNLS光源(1.37 GeV); 合肥国家同步辐射实验室NSRL光源(800 MeV)
第三代	能量更高的同步辐射专用光源	美国阿贡国家实验室APS光源(7 GeV); 劳伦斯伯克利国家实验室ALS光源(1.9 GeV); 欧洲同步辐射装置ESRF(6 GeV); 德国BESSY II 光源(1.7 GeV); 英国Diamond光源(3 GeV); 法国SOLEIL光源; 日本SPring-8光源(8 GeV); 上海同步辐射装置SSRF(3.5 GeV)
第四代	衍射极限存储环同步辐射光源	瑞士MAX-IV光源; 欧洲ESRF-BES光源; 美国APS-U光源; 巴西SIRIUS3光源; 北京高能同步辐射光源HEPS; 合肥先进光源HALF

孪生、AI等在内的计算机科学的迅速发展, 逐步成为应对同步辐射装置运行以及数据处理挑战的有效工具, 能有效发挥大科学装置实验解析效能。

2 数字孪生发展现状

数字孪生的发展经历了三个阶段: 初生、探索及增长阶段(图1)。2003~2011年是数字孪生概念形成与初步探索阶段。数字孪生的概念最早在2003年被提出。Grieves教授在2003年的一堂产品生命周期管理课程上提出了镜像空间模型的概念, 他将数字孪生定义为“一个物理产品的虚拟表示, 可以用来理解、预测和优化产品性能”, 主要应用于工业领域^[5]。后来, Grieves在2006年提出的概念模型的名称从“镜像空间模型”更改为“信息镜像模型”, 该模型强调两个空间之间的链接机制是双向的, 并且对于一个可以探索替代想法或设计的单一现实空间, 存在多个虚拟空间^[8~10]。在提出概念后的几年里, 数字孪生主要停留在学术研究和概念验证阶段。学术界和工业界开始认识到其潜力, 并在产品设计和制造领域进行了初步的应用探索。然而, 受限于当时的技术条件, 特别是传感技术和数据处理能力, 数字孪生的应用范围和深度都相对有限。

2011~2014年是技术进步与应用扩展阶段。2010年, 美国国家航空航天局(National Aeronautics and Space Administration, NASA)在其技术报告中正式提出数字孪生的概念, 并定义为“集成了多物理量、多尺度、多

概率的系统或飞行器仿真过程”^[11]。2011年, NASA在飞机结构设计及寿命预测研究中应用了数字孪生技术, 并详细探讨了实施数字孪生的技术挑战。NASA将数字孪生定义为一种高集成多物理场、多尺度、多概率的仿真模型, 用于反映实体的功能、实时状态和演变趋势。NASA将数字孪生应用到飞机结构设计及寿命预测研究中, 通过数字孪生, 各种类型的物理场模型(如热力学模型、流体力学模型、结构力学模型等)及材料状态演化模型将被集成到一个统一的结构模型中, 将使飞机在其整个使用寿命期间能够得到更好的管理和维护^[12]。2012年, NASA与美国空军研究实验室(Air Force Research Laboratory, AFRL)联合发表了关于数字孪生的论文, 提出了“建模、仿真、信息技术和处理”路线图, 指出数字孪生是驱动未来飞行器发展的关键技术之一^[13,14]。在接下来的几年中, 越来越多的研究将数字孪生应用于航空航天领域, 包括机身设计与维修、飞行器能力评估、飞行器故障预测等。随着物联网(internet of things, IoT)、大数据和云计算技术的快速发展, 数字孪生技术迎来了重要的发展机遇。传感器技术的进步使得实时数据采集成为可能, 大数据和云计算的结合提供了强大的数据处理和存储能力。这一时期, 工业界开始广泛关注并投资于数字孪生技术, 特别是在制造业、能源和航空航天等领域。通用电气(General Electric Company, GE)在2015年推出了Predix平台, 标志着数字孪生技术在工业互联网领域的重要应用。

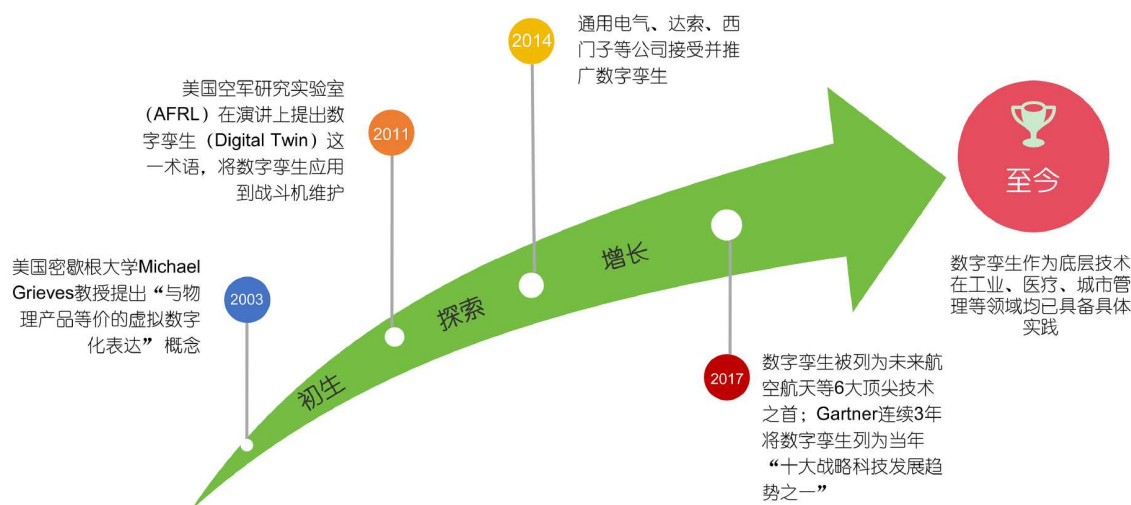


图1 数字孪生发展三阶段

Figure 1 Three stages of digital twin development

2014~2017年是增长阶段。之后,数字孪生的概念迅速受到高度关注。达索、GE、西门子等公司将其纳入工业软件产品的构建理念加以大力推广,而且其被Gartner公司连续三年列为十大战略科技发展趋势之一。西门子、国际商业机器公司(International Business Machines Corporation, IBM)、美国参数技术公司(Parametric Technology Corporation, PTC)等工业巨头纷纷推出自己的数字孪生解决方案,并在各自领域内进行了广泛应用。2015年左右,中国开始跟进数字孪生的研究。当时包括工业4.0研究院在内的多家国内研究机构和企业,纷纷启动了数字孪生相关的研究课题。陶飞等人^[15]是国内数字孪生领域主要研究人。其研究领域涵盖了数字孪生的多个关键技术,包括建模与仿真、数据融合、通信与服务等^[16]。每个研究领域都解决了物理设备或概念思想面临的特定挑战,并允许物理和数字世界以及各自环境之间的互连^[17]。与此同时,行业标准化进程也开始加快,工业互联网联盟(Industrial Internet Consortium, IIC)和工业4.0等组织开始制定相关标准,推动技术的互操作性和普及应用。数字孪生在智能制造、智慧城市和个性化医疗等新兴领域开始崭露头角。

2017年至今是数字孪生的广泛应用与技术融合阶段、集成和创新阶段。2019年,崔一辉等人^[18]根据不同概念进行归纳总结,定义数字孪生是“充分利用物理模型、传感器更新、运行历史等数据,集成多学科、多物理量、多尺度、多概率的仿真过程,在虚拟空间完

成映射,从而反映相对应的实体装备全生命周期过程的技术”。表2总结了依托航空航天、机械、工业制造、医疗、城市管理、地球、能源等不同领域对数字孪生的定义。表3则是不同学者提出的数字孪生模型及其特征。数字孪生在不同领域的概念有着广泛且多样化的发展。数字孪生的核心概念是通过创建物理对象或系统的虚拟模型,实时反映其状态、行为和性能,从而实现优化设计、预测维护和改进性能。这个概念在各个领域中的应用因具体需求和技术实现而有所不同,但其基本要素和目标是一致的(实时数据整合、精确建模、仿真和预测、决策支持)。数字孪生的实际应用还处于初步阶段,因此,很多领域的数字孪生定义还不清晰,需要进一步地研究和发展。通过不断的技术进步和标准化努力,数字孪生有望在更多领域得到广泛应用。

由于具有降本、增效的潜力,越来越多的行业采用数字孪生,数字孪生市场正在并将继续增长。近几年,随着AI和边缘计算技术的快速发展,数字孪生技术得到了进一步提升和广泛应用。现阶段,除了航空航天领域,数字孪生还被应用于电力、船舶、城市管理、农业、建筑、制造、石油天然气、健康医疗、环境保护等行业。数字孪生作为一项前沿技术,正在不断地演化和拓展其应用领域(图2)。

3 同步辐射运行中的数字孪生

随着大科学装置不断走向智能化,数字孪生逐渐

表 2 不同领域对数字孪生的定义

Table 2 Definition of digital twin in different fields

领域	机构/作者	年份	定义
航空航天	NASA ^[12]	2011	一种面向飞行器或系统的高集成多物理场、多尺度、多概率的仿真模型,能够利用物理模型、传感器数据和历史数据等反映该模型对实体的功能、实时状态和演变趋势
机械	西门子 ^[19]	2015	以数字化方式为物理对象创建虚拟模型,模拟其在现实中的行为特征,应用于整个产品生命周期的数据、模型及分析工具的集成系统
工业制造	Tao等人 ^[20]	2019	通过生产设备的虚拟实体清楚地观测所制造的产品在当前阶段所处的状态,并通过虚拟实体对物理实体进行实时智能控制,进一步实现物理实体和虚拟实体之间的控制与反馈
医疗	Boulos等人 ^[21]	2021	没有统一的定义,总结起来,是一个高保真度的虚拟模型,评估创建人类动态模型和模拟的可行性,以改善医学诊断和预后、治疗和患者的整体健康状况
城市管理	Biljecki等人 ^[22]	2023	基于对城市对象的语义和地理空间属性进行编码,有6个阶段: (1) 收集异构数据, (2) 处理数据转换和集成, (3) 生成物理资产和信息流, (4) 管理质量和状态, (5) 模拟城市场景, (6) 更新动态变化, 研究数字孪生在城市能源管理各个方面(包括交通系统、电网和微电网)发展中的不同应用
地球	Li等人 ^[23]	2023	将大地球数据与基于物理的模型融合在一个交互式计算框架中,从而能够监测和预测环境和社会扰动,以用于可持续治理
能源	Wu等人 ^[24]	2020	没有统一的定义,但被广泛应用于电池管理、发电、配电以及能源管理系统等多个方面. 数字孪生在能源领域的定义通常是指将实时传感器数据与模型融合在一起的信息物理系统,可做出准确的、特定于资产的预测和最佳决策

表 3 不同学者提出的数字孪生模型

Table 3 Digital twin models proposed by different scholars

机构/作者	年份	定义
Grieves ^[25]	2011	三维模型, 包含物理实体、物理实体的映射及连接
陶飞等人 ^[26]	2019	五维模型, 包含物理实体、虚拟空间、服务、孪生数据及连接
Zheng等人 ^[27]	2019	包含物理实体、虚拟空间和数据处理层
Madni等人 ^[28]	2019	定义了虚拟映射的4个层次, 即: 前数字孪生、数字孪生、自适应数字孪生和智能数字孪生
Ullah等人 ^[29]	2019	提出了3种类型的数字双胞胎: 物体双胞胎、过程双胞胎和现象双胞胎
Bao等人 ^[30]	2019	定义了3种类型的数字孪生模型, 即: 产品数字孪生、过程数字孪生和操作数字孪生
Stark等人 ^[31]	2019	开发了一个“数字孪生八维模型”
Natis等人 ^[32]	2017	提出了数字孪生体四元素, 即: 模型、数据、监测和独特性
ISO ^[32]	2021	提出参考框架, 包含数据、设备、数字孪生和用户

应用在同步辐射中, 成为连接传统装置和智能装置的关键纽带, 是同步辐射迈向智能升级战略目标的关键技术. 国际大型光源通过数字孪生为设备提供优化调控和数据分析方案, 展现了数字孪生在提升装置利用效率和促进设施数字化转型方面的巨大潜力. 目前, 同步辐射运行中的数字孪生实际应用有限(表4). 下面将详细介绍数字孪生在同步辐射运行中的研究现状, 包括加速器调优、光束线优化等方面的应用.

3.1 加速器调优

Nurbina等人^[3]在ICCS(International Conference on Comprehensible Science)会议上讨论了大型科学设施的利用现状, 强调了目前大型科学设施侧重于过程的最

大标准化和自动化, 揭示了数字孪生的构建是独特科学设施的重要组成部分. 同时, 数字孪生的创建是解决远程接入方式维护和保障、为科学和教育领域的大量专家提供远程工作格式的机会. 在实践中, 大型科学设施将始终拥有其数字孪生.

为了保持BESSY II的竞争力, 同时与第四代光源BESSY III衔接, 柏林亥姆霍兹中心(Helmholtz-Zentrum Berlin, HZB)制定了一项2023~2033年10年的设施战略升级计划, 其中包括维护和现代化措施, 以及提供新的研究机会, 重点是能源研究和技术开发的新操作能力^[43]. BESSY III强调了符合科学重点领域具体要求的数字化工具对于光源实现可靠的远程、自动和自主实验, 从而加速材料发现的重要性, 尤其强调了基于ML

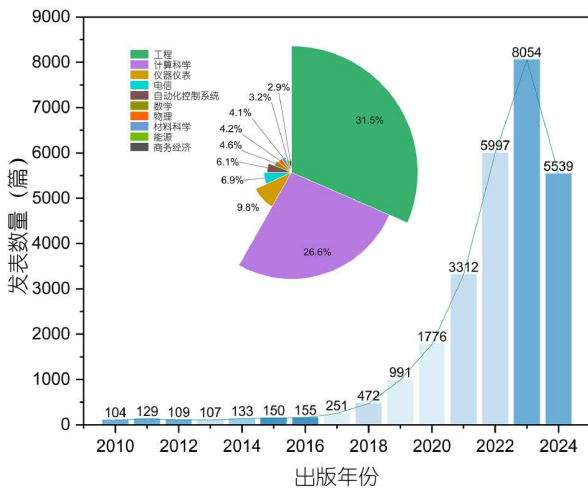


图 2 数字孪生的发文量及在各领域的广泛应用
Figure 2 The number of publications and widespread applications of digital twin in various fields

分析的数字孪生的各种形式(训练数据、模拟、硬件替代)和功能(完整性检查、流程调整、教学、准备和培训)对于BESSY III软件库存和稳健运营的重要性. 获取完整的定量验证元数据, 描述从X射线能量、强度和偏振到仪器设置, 再到样品生命周期(从合成、制备到定位、环境和操作条件)的实验设置, 将有助于实现装置可持续运行, 并保证必要的数据真实性. 最终, BESSY III的数字环境需要具备持续整理基础实验数据的能力, 提供一个独特、有价值和可靠的FAIR数据库, 并做出反馈. 另外, BESSY III目前正在对所有光束线方面(设计/仿真、施工、设置、调试、操作和维护)的AI方法进行深入研究, 以涵盖BESSY III光束线的两个“数字孪生”方面: (a) 通过弥合基于理论

际行为之间的差距来提高理解能力, 提供能够进行真实预测的替代模型; (b) 通过智能化重新对齐程序和良好的虚拟光束线表示来支持运行, 这也为用户提供了远程培训和实验能力^[36].

Balyakin等人^[40]在ICITS(International Conference on Information Technology & Systems)会议中强调了作为支持科学研究的工具, 数字孪生对基于PIK高通量研究堆的国际中子研究中心的运行和远程访问形式的先决位置. 数字基础设施是电子基础设施的一个组成部分, 不会复制或取代“物理”基础设施. 数字孪生作为支持科学研究的工具, 在不久的将来, 会消除超科学的独特性, 并形成新的超基础设施, 导致动态的数字基础设施发展. Benmore等人^[41]在APS-U(the Advanced Photon Source Upgrade)光源科技报告中推进先进光源的AI/ML应用, 提到了数字孪生用于基于实验收集的数据进行仿真和调试, 可以提高稳定性和鲁棒性以供粒子加速器的长期使用. 另外, 在他们的OASYS(OrAnge SYnchrotron Suite)复杂光学系统控制中, 数字孪生用于模拟控制真实组件, 例如可弯曲的镜子. 欧洲加速器光源联盟(the League of European Accelerator-based Photon Sources, LEAPS)在2022年制定了欧洲基于加速器的光源战略——ESAPS(European Strategy on Accelerator-based Photon Sources), 以应对研究和创新新时代的未来挑战和需求, 其中就包括: 同步辐射设施的升级, 实现颠覆性的高亮度电子晶格, 通过实施新的数字技术(包括数字孪生和AI工具)来加强设施运营等. DIGITAL LEAPS计划旨在通过数字孪生、AI和ML、虚拟诊断、用于远程访问的机器人以及用于远程访问的光子仪器和全自动用户光束线标准的设计, 开发一个数

表 4 数字孪生在同步辐射领域的应用
Table 4 The application of digital twin in the field of synchrotron radiation

序号	研究领域	机构/会议	文献
1	大型科学设施的数字化工具	ICCS会议	
2	时空实验的数字孪生	阿贡纳米材料中心	[33]
3	自动光束线对准技术	NSLS-II/ALS用户会议	[34,35]
4	光源的全生命周期	BESSY III	[36]
5	X射线断层扫描实时控制	ICIP会议	[37]
6	高温电化学的原位X射线μ-CT	Science Advances	[38]
7	同步辐射源建模仿真	OASYS 10周年科学报告	[39]
8	装置运行和远程访问	ICITS会议	[40]
9	粒子加速器稳定性提升	APS-U	[41]
10	同步辐射设施运营加强	欧洲加速器光源联盟(LEAPS)	[42]

字接口系统,以访问和自主操作绿色设施^[42]。

3.2 光束线优化

有了数字孪生的辅助,新一代光束线将使X射线束和样品之间能够更精细地相互作用。2022、2023年连续2年的先进光源(Advanced Light Source, ALS)用户会议见证了数字孪生在同步辐射光束线优化中扮演的重要角色。在2022年的ALS用户会议上,来自NSLS-II(National Synchrotron Light Source II)的Rakitin和Morris^[33~35]展示了他们和Nash等人在自动光束线对准方面的最新结果,其中光束线的数字孪生是在Sirepo-Bluesky的软件框架中实现的(使用基于网络浏览器的Sirepo界面,用SRW计算机代码进行波面传播模拟),用于训练神经网络以预测最佳对准程序,并利用Bluesky用户界面来控制光学元件的位置并优化光通量和光束尺寸,以解决手动且耗时的同步辐射光束线对准、样品的重要属性难以测量这两个问题。希望将其应用于NSLS-II和世界各地其他同步加速器设施的更多光束线。同时,他们的合作者Sankaranarayanan^[39]描述了在阿贡纳米材料中心进行的关于时空实验的数字孪生的工作,其中数字孪生是样本本身的模型。OASYS是专用于同步辐射源和光束线进行建模和仿真的软件包,起初是为数据挖掘、ML用户和开发人员设计的,该界面允许用户通过拖放各种元件、配置光束参数以及以视觉直观的方式分析仿真结果来构建光学系统。10周年科学报告中指出,新版的OASYS将可视化模拟转换为完全编码和即用型数字孪生,并插入AI代理和优化器,以应对当前同步辐射光束线设计的挑战。

4 同步辐射科学发现的数字孪生

4.1 数字孪生在同步辐射科学发现中的应用

除了在同步辐射运行中加速器调优、光束线优化等的实际应用,数字孪生在同步辐射科学发现中也具有前瞻性优势。

时间分辨或原位X射线断层扫描的实时控制需要在连续数据采集过程中捕获样品中形态描述符的变化(如孔隙率、粒径和裂纹宽度)。为了解决在时间分辨或原位X射线断层扫描中传统的图像分割成本高昂、时间长的问题,Tekawade等人^[37]提出了一种更快且无监督的替代方案,即使用卷积自编码器的特征提取方法,其中编码器的潜在空间响应形态的相对变化,而无需

事先了解形态描述符。使用用于显微CT(micro computed tomography)的数字孪生来生成多孔材料的真实数据集,用于在参数化实验中测试。结果表明,新方法可以在灰度断层扫描数据中提取特征,比分割加上孔隙分析的工作流程快4倍以上。Fang等人^[38]开发了一种用于高温电化学的原位X射线 μ -CT技术,将传统电化学与数字孪生技术深度结合,探测了钛电解精炼过程中的3D形貌和成分的动态演变,做到了多尺度可视化和高效率的数据提取。

Polybot(<https://www.anl.gov/partnerships/polybot-an-aiintegrated-robotic-software-environment-anlsf21142>)是由阿贡国家实验室开发的先进AI集成机器人平台,旨在自动化和加速材料发现过程。它作为一个自动化实验室,通过将机器人技术的力量与高性能计算和AI/ML相结合,在几乎不需要人工干预的情况下推动科学发现。Polybot能够进行材料合成和制造、样品转移、表征、测试和数据分析自动化。这种自主材料发现框架将添加用于不同应用程序的计算和机器人方法库、自动化工作流程和数据集,以不断重新定义自主材料发现的前沿。Polybot可以被用于加速电子薄膜优化。它由5个紧密集成的组件组成,分别是模块化实验室自动化、数据提取工具、数据库和云服务、培训软件和主动学习库。Polybot的主要平台如下。(1) 机器人解决方案处理平台:包括封闭框架(受控实验环境)、移液系统(用于溶液转移)、液体处理系统、基材处理系统、叶片涂布站(用于薄膜沉积)、加热阶段(薄膜退火)和样品储存板,主要基于Python的软件控制自动化并对工作流程进行编程;(2) Chemspeed合成机器人平台:包括封闭框架(受控实验环境)、液体和粉末处理系统、反应器阵列、过滤系统和化学品储存系统,可访问Python的软件控制自动化并对工作流程进行编程;(3) 移动机器人:包括MIR200轮式机器人、UR5e机械臂以及手指和真空夹具,运动可以由Python控制和编程;(4) 自动表征工具:光学成像、紫外可见光光谱、电性能表征、机械测试和电化学分析系统。通过利用AI和高通量能力,Polybot旨在显著减少材料研究的时间和成本,将通常需要数月的项目转变为仅需数周的过程。该平台还设计用于与其他高性能设施(如先进光子源)集成,以在分子水平上进行增强材料分析。

利用Polybot自动化实验室,Xu等人^[44]进行了聚合物电子学的开发研究。由于电子聚合物的化学多能性和黏弹性,聚合物电子学在类皮肤电子学、大面积印

刷能量器件和神经形态计算器件等许多新兴应用中显示出独特的进展,但它们的发展周期长达数年.自动化、机器人和学习算法的最新进展导致越来越多的自动化实验室开始彻底改变材料的开发和加速发现.因此,他们对自主实验室的现状进行介绍,分析了为什么由自动化实验室进行聚合物电子学研究具有挑战性,并强调了需求,进一步讨论了在建立一个自动化实验室(即Polybot)方面所做的努力,该实验室用于电子聚合物的自动合成和表征,并将其加工和制造成电子设备.目前,同步辐射科学发现的数字孪生实际应用却很少.在国际上,基于AI/ML的数字孪生初步被用于优化加速器的性能和提高同步辐射光源的稳定性.例如,欧洲的多个同步辐射设施正在探索数字孪生技术的应用,通过实时模拟和监控加速器的运行状态,来预防故障并提高设备的利用效率.此外,研究人员利用数字孪生来增强射线表征实验的精度和速度,通过整合多模态数据和先进的算法,来更好地解析材料的微观结构和动态演变过程.在中国,上海同步辐射光源和北京高能同步辐射光源等设施也正在积极开发和应用数字孪生技术,以提高实验数据的处理效率和设备的运行稳定性.这些技术应用不仅提高了射线表征实验的解析能力,还促进了跨学科的研究合作和技术创新.这些初步的研究成果为同步辐射的数字孪生领域发展奠定了基础.然而,不论是硬件的控制,还是软件的现代化,数字孪生在先进同步辐射光源中的应用还方兴未艾,尤其是同步辐射的数据分析软件和计算基础设施.

4.2 数字孪生在同步辐射应用出口的潜在结合

先进同步辐射光源在能源、催化、医疗等领域扮演重要角色,同步辐射的数字孪生与各领域的潜在结合将在各领域的发展中起到重要作用.目前,数字孪生在能源(尤其是电池领域)、催化、医疗等领域已有各种应用.

4.2.1 能源

电池技术实质性进步对于新能源转型至关重要^[45].同步辐射等先进技术为电池和电化学材料科学中关键过程的理解提供了新的见解.然而,在全固态电池充放电过程中,电池会发生复杂快速的动态反应,常规的射线表征对于通常分子功能运动的动态信息却难以捕捉,这很大程度上限制了对全固态电池的复杂充放电循环过程、电池界面上大时空尺度的动态演变的实时监控,阻碍了全固态电池的进一步开发和应用.

因此,需要最先进的技术,开发和采用高分辨率、无损方法来实时无损地捕获这些动态过程^[46].

分子模拟驱动的固态电池射线表征的数字孪生,可以深入了解固态电池微观结构的分子机制和多时空尺度上界面演变的动态过程,从而揭示影响固态电池性能的关键因素,进一步调控固态电池的射线表征过程,有望为发现新的可持续材料、优化固态电池性能提供新途径.将真实电极转换为数字电极模型可以通过揭示实际的电池架构来解决问题,这可以驱动高分辨率和多尺度电化学模拟,从而直观地了解电化学和物理现象的耦合方式^[47~49].当与模型驱动的控制、ML方法和大数据集相结合时,数字孪生模型驱动的仿真为确定电极反应和电池故障提供有价值的见解变得越来越重要^[50].

Wu等人^[24]率先提出了关于集成最先进的电池建模、车载诊断工具、数据驱动的建模方法和新兴的ML方法以创建电池数字孪生的观点.Song等人^[51]使用聚焦离子束/扫描电子显微镜形成了单个二次粒子的数字孪生结构.利用数字孪生,建立了数字孪生电化学机械模型,通过将电压曲线与单粒子测量技术的结果进行比较,确保了99%以上的精度.他们使用匹配良好的模型对电化学性质(锂化状态、过电位、电位和浓度)和力学性质(冯米塞斯应力和应变能量密度)进行了操作分析.结果发现,应变能密度可以作为确定裂纹形成的标准,通过与断裂韧性进行比较,断裂韧性是断裂发生时的应变能密度.

目前,用于能源领域的数字孪生大多数集中在电池尤其是电池管理领域.用于其他能源材料的制造和性能的数字孪生在很大程度上仍然缺席,因此它们的发展前景广阔.基于数字孪生和数据驱动方法的自主优化算法尚未被充分利用,用于优化从材料制造到设备运行的整个系统.

4.2.2 催化

虽然催化界可以使用各种工具来协助数据组织和管理,但创建催化开发和测试过程的数字孪生的所有必要功能通常尚未集成到单个产品中,因此需要不同的工作流程和数据存储要求.此外,现有的产品似乎都没有创建实验系统的数字孪生,也没有强调特定设备(即具有唯一序列号的设备)和数据之间的可追溯性.最后,并非所有用于催化的研究数据管理系统(research data management, RDM)解决方案都是商业化的,因此可以广泛使用.样品、设备和数据之间的可追溯性对

催化界非常重要。Adacta是一种新的RDM,旨在创建测试环境的可追溯数字孪生,不仅可以存储数据,还可以创建用于测量催化剂性能的关键组件的易于检索的时间准确记录。未来的发展包括扩展Adacta,使其与电子实验室笔记本进行交互,并直接使用存储在数据库中的数据 and 测量结果进行模拟^[52]。

催化反应器的精心设计可以降低与新设计相关的成本和风险,并且可以通过提高运行性能来显著降低拥有成本。Spatenka等人^[53]基于高保真预测模型的数字设计技术提供了一种快速有效地做到这一点的方法。通过将高保真模型与基于模型的实验相结合,这些技术可以对多管式反应器进行详细设计,同时考虑到从催化剂孔隙到工业反应器的多尺度效应。通过在线实施详细模型进行监控、预测和优化,可以实现更多的好处。他们介绍了固定床催化反应器设计、优化和在线实施的数字化设计方法,并举例了在数字孪生框架内实施乙炔转换器的反应器监测和优化系统,可用于优化当前操作,同时考虑当前的催化剂状态。其基本方法包括:①捕获与感兴趣问题相关的所有物理场,理想情况下使用模块化库模型,允许用户在没有数学建模背景的情况下构建各种配置的反应堆模型;②评估模型参数(如催化剂床的传热和流动阻力特性、实验数据中的反应动力学参数、装置实验集);③执行基于优化的反应堆设计;④基于混合模型对反应器设计进行最终调整,该模型包括复杂反应器几何形状的计算流体动力学表示;⑤必要时,在数字应用框架内在线实施详细模型,用于运营监控、预测和优化。

Örs等人^[54]从运营角度定义了化工过程中数字孪生开发的通用框架。他们介绍了运营数字孪生的主要构建模块,即数据管理、流程建模、流程优化、生产调度和流程控制以及部署,重点放在先进的过程控制层次结构上;还介绍了AI在流程工业中运营数字孪生的开发和部署中的作用,特别是在代理建模、预测建模和AI支持的优化和控制方面;此外,讨论了数字化引发的新商业模式的潜力,并提供了前瞻性研究课题的展望。

在磷酸盐工业中,硫酸是磷酸和肥料生产中的关键化合物, SO_2 向 SO_3 的催化转化被认为是影响气体排放和工艺性能的关键反应。Mounaam等人^[55]以五氧化二钒为催化剂,模拟了4个催化床反应器和3个换热器的工业 SO_2 转化装置。该模型基于传热、能量和质量平衡方程,利用实验装置数据提出了 SO_2 催化转化的动

力学反应并进行了校准。他们使用Unisim Design R451仿真器在稳态和动态模式下对4个催化床进行了仿真;对提出的模型进行了测试和验证,模型的准确率超过97%。另外,他们集成了 SO_2 转换单元的图形界面,使其适用于工业用途和操作员培训。最后,基于分布式控制系统(distributed control system, DCS)开发了研究转换单元的数字孪生,集成了工厂、虚拟系统和通信部分,可以实时模拟 SO_2 转换单元,预测工艺性能,优化单元效率。

CO_2 的电化学还原为可持续碳循环提供了一条途径,允许生产对化学工业和交通至关重要的碳氢化合物。为了了解电极的关键结构特性,使优化过程合理化,有必要获得电极的完全分辨的多尺度模型。Thiele等人^[56]通过桥接尺度并采用多种成像方法产生数字孪生,可以对电极结构进行数字化研究、仿真和修改,用于模拟对电极功能至关重要的传输过程,还探讨了结构的变化如何影响预测的传输特性。但他们所呈现的数字孪生还有待补充。

4.2.3 医疗

数字孪生的概念自提出以来,经过近年的迅速发展和广泛应用,不仅在多个领域取得了巨大的成就,也为医学领域带来了更为广阔的发展前景。个性化医疗面临的一个基本挑战是充分了解个体患者的复杂性,以确定保持健康或恢复健康的最佳方法。这将需要具有足够分辨率和足够机理信息的个性化计算模型,以便为临床医生提供可操作的信息。这种个性化模型越来越多地被称为医疗数字孪生。医疗数字孪生技术通过实时采集计算医疗设备数据及医疗信息系统等真实多维度多样化数据,基于AI建模,将医院物理空间转化为医院模型,通过预测、分析等功能完成医务管理、门诊管理、设备管理等精细化管理工作。此外,还可以基于重建技术,构建高精度人体模型,对手术流程、治疗方案等进行孪生。医疗数字孪生的应用对经济、社会具有积极意义,但当前医疗领域数字孪生技术还未成熟,仍面临数据安全及隐私、道德伦理等挑战(<https://www.36kr.com/p/2221519061467271>)。

医疗数字孪生有3种主要的应用类型:保持健康患者的健康、恢复病患的健康以及开发新的治疗方法,如药物和医疗设备^[57,58]。目前医疗数字孪生相关研究有免疫数字孪生^[59,60]、生物系统数字孪生^[61]、制药数字孪生^[62]等。一些学者也致力于建立通用的医疗数字孪生平台,如成立于2022年8月的数字孪生创新中心、

迈向重症监护病房肺炎患者的医疗数字孪生、乳腺癌数字孪生、白血病数字孪生、美国国家癌症研究所和芬兰科学院支持的急性髓系白血病数字孪生项目等。数字孪生医院作为当前医疗行业的一个重要趋势,通过连接实体医院与虚拟医院场景发挥多重作用,惠利患者、医务工作人员、医院管理者三方,凸显出数字孪生技术在智慧医院的应用前景不可估量^[63]。

综上,数字孪生在能源、催化及医疗等不同领域的应用展示了其强大的潜力和广泛的适用性。从制造业到医疗、从能源到智慧城市,各个领域的数字孪生应用都致力于通过虚拟模型实现物理系统的优化和改进。然而,尽管数字孪生带来了许多创新和优势,但这些重要的同步辐射应用出口的数字孪生尚未有部署。未来,同步辐射应用出口的数字孪生应用实施与部署无疑会进一步促进同步辐射在能源、催化及医疗等领域的科学发现,实现实验数据的实时处理和分析,大幅提升实验效率和精度,促进多学科研究和技术创新,提升设备利用率和稳定性。进一步,提高同步辐射光源的智能化和自动化水平,使我国在国际科学研究中占据有利地位,推动国家科技竞争力的提升。

4.3 多尺度模拟驱动的数字孪生在同步辐射中的部署评估

现有的针对先进同步辐射光源科学发现本身的现有数字孪生大多是基于AI/ML等方法学,解决偏向于海量数据处理问题。针对微观尺度的动态解析及调控,现提出多尺度分子模拟驱动的数字孪生在BSRF-4B7A和BSRF-1W1A漫散射光束线站进行部署及对其可行性进行评估。

为了完全了解物质的物理机理,从而更好地调控其反应过程,我们需要同时刻画其结构、相互作用与构象运动动力学。同步辐射相关实验虽然能提供高分辨原子位置等静态结构信息,但通常分子功能运动的动态信息却难以捕捉,这些实验上的困难和局限性很大程度上限制了人们对分子机理的深入理解^[64]。以能源中很重要的钙钛矿前驱体溶液为例,其吸收谱的动态解析存在困难。钙钛矿电池由于具有制备原料丰富、成本低、效率性能高、制备工艺简单等优点,近年来受到广泛关注。但是受环境因素等影响,钙钛矿电池也存在稳定性差等致命性缺点。实验获取吸收谱,探究其动态变化过程,解决稳定性难题成为必要。然而,钙钛矿前驱体溶液的吸收谱解析仍然困难,这严重阻

碍了钙钛矿电池稳定性的提高。

多尺度分子模拟是有效推动同步辐射研究能源的重要手段,基于多尺度分子模拟的数字孪生系统将成为中子源、同步辐射等数据处理的新突破口。包括密度泛函理论、分子动力学等在内的多尺度分子模拟理论方法由于其能够同时提供结构和动力学等信息,分子模拟在化学、生物、材料科学等领域都有广泛的应用,可以为实验提供理论指导,帮助解释实验结果,甚至提前预测物质的性质和行为,从而推动科学研究和应用的发展,被认为是联系结构生物学方法与生物物理/单分子技术的重要桥梁。基于计算机技术的高速发展,已经有一些研究将分子模拟和同步辐射实验结合用于能源等各个领域。分子模拟已经被广泛应用于生物、化学、材料科学、能源、纳米酶科学等许多领域。利用同步辐射实验技术(掠入射X射线衍射和XAFS等)结合多尺度分子模拟对钙钛矿的微观结构、光电性能、结晶性以及形貌等方面进行研究,从多维度揭示添加剂的作用机制,为今后的钙钛矿电池器件的优化提供新的思路,并为钙钛矿的实际应用提供科学依据。目前,大多分子模拟方法只是应用到了对同步辐射实验数据的验证,或是共同说明物质结构,或是理论模拟预测新物种,实验加以验证等,但是还没有将多尺度分子模拟驱动的数字孪生应用在同步辐射中,即将实验数据和分子模拟结合,实现实时动态、双向的数字孪生交互系统。

利用基于第一性原理、分子动力学等在内的多尺度分子模拟的数字孪生技术在线解析射线表征实验数据,能够从原子或分子水平探索钙钛矿前驱体的微观结构及相互作用的基本原理,为解决钙钛矿前驱体溶液实验吸收谱解析难题带来新的机遇^[13]。目前已有文献表明了分子模拟结合射线表征实验在不同领域的广泛应用前景,如:射线表征结合第一性原理方法进行化合物结构和电子特性分析^[65],结合分子动力学模拟可以研究纳米生物界面相互作用分析^[66,67],ML方法被用于同步加速器光源的控制和优化、同步加速器实验的制定和执行以及最终科学研究产生的大数据集的解释等^[68~70]。

这些分子模拟结合射线表征实验研究只是停留在对射线表征实验数据的验证、物质结构的静态表征、理论模拟新物种的预测等,真正将分子模拟与射线表征实验结合的动态实时交互的数字孪生技术的研究实际很少。Lundell等人^[71]将基于X射线散射的数字孪生

技术用于揭示生物纳米原纤维组装过程中的复杂和瞬态流动情况下的完整颗粒取向。近期, Zuo等人^[72]与BSRF吸收谱线站合作, 提出了一种基于X射线吸收精细结构和分子动力学模拟结合的数字孪生方法, 研究了恒定湿度环境下钙钛矿前驱体溶液中碘代复合物的结构演变与储存时间的关系。这项工作开拓了分子模拟驱动数字孪生动态解析大装置射线吸收谱实验的相关研究。

以BSRF-4B7A和BSRF-1W1A漫散射光束线站为例, 可以为多尺度分子模拟驱动的数字孪生实际部署提供可靠平台。BSRF-4B7A中能X射线(能量范围: 2.1~6 keV)吸收谱线站覆盖了多种元素的K和部分元素的L吸收边, 为电池等能源材料领域提供了必要的基础设施, 满足用户原位实验需求, 可以间接得到元素的价态、配位数等重要信息。BSRF-1W1A漫散射光束线站是用于研究晶体材料结构的同步辐射线站。该线站可针对钙钛矿材料开展各种缺陷的分布、组态及其变化的研究, 还可进行结构与应力的测量分析, 以及新实验技术方法的探索性研究。为获得足够的钙钛矿晶体点缺陷漫散射强度, 线站目前能够提供常规条件、变温环境和电场环境下的X射线散射(黄昆漫散射、热漫散射、掠入射小角散射)、高分辨X射线衍射(掠入射X射线衍射、高角X射线衍射、倒空间的强度绘制)和反射(低角X射线反射、扩展X射线反射)实验技术。该线站作为公共大科学平台的一部分, 对全国用户和国际用户开放运行, 支撑用户开展材料的结构研究。BSRF-4B7A中能吸收谱线站、BSRF-1W1A漫散射光束线站

等为钙钛矿等能源材料的研究提供了强大的实验平台, 有助于推动钙钛矿太阳能电池技术的发展和应。

经典的多尺度模拟方法(如分子动力学和密度泛函理论), 往往有模拟效率或尺度的限制(密度泛函理论计算精度高但往往只能模拟数百原子且计算速度较慢; 分子动力学方法能模拟数千数万的原子体系但精度有限; 传统的第一性原理分子动力学计算精度高, 但局限于原子数目少、速度慢; 经典的分子动力学模拟在计算速度和模拟原子数上有所提升, 但是计算精度低), 这与数字孪生部署所要求的实时相悖。DeePMD-kit、DeePKS等深度势能方法用深度神经网络代替薛定谔方程, 能与常见的分子动力学软件包无缝集成(图3)。此外, 分子动力学的并行算法多种多样, 针对短程的分子动力学的快速并行算法主要可以分为3类: 原子分解算法、力分解算法以及区域分解算法^[73]。其中, 原子分解算法操作简易, 可以灵活修改; 力分解算法针对力矩阵进行块分解, 在通信上的时间代价大大减小; 空间分解算法则是将计算划分为若干个小的3D区域, 然后分配个处理器进行并行计算, 采用局部通讯, 运算速度最快。目前, 很多分子动力学软件已经配有并行算法。GROMACS 4包括了最小通信域的分解算法、全动态负载均衡、最先进的并行约束求解器等并行算法, 适用于研究化学和生物分子的系统^[74]。LAMMPS具有大规模原子/分子并行模拟器, 还具有一些灵活启用的算法, 如动态负载均衡、实时可视化、量子精度机器学习原子间势等, 适用于物理、化学、材料等领域的研究^[75]。密度泛函理论的并行化算法主要针对Kohn-

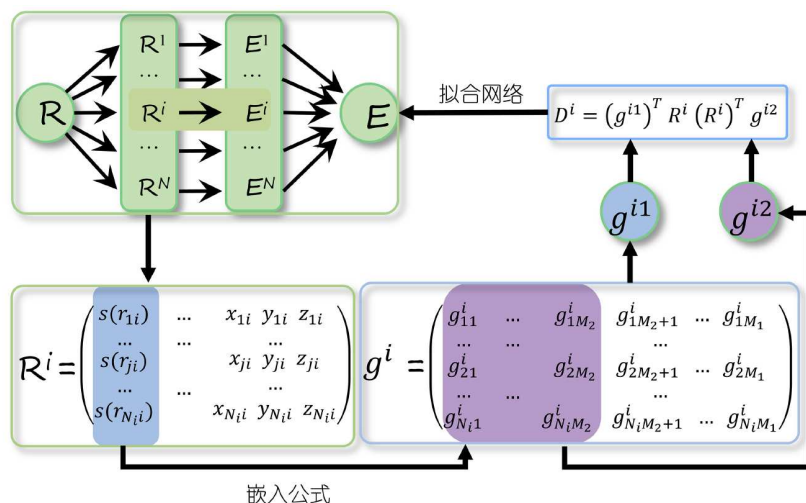


图3 深度神经网络用作机器学习势模型示意图

Figure 3 Schematic diagram of deep neural networks used as the machine learning potential model

Sham方程的并行求解(例如区域分解算法等)和针对双电子积分的并行计算(并行积分算法)进行加速。

我们提出通过DeePMD-kit、DeePKS等开源软件构建势函数,在分子动力学或密度泛函理论中融入并行算法等方法进行数字孪生数字空间的加速,在保持量子力学的精确性和准确性的基础上,将分子动力学的计算速度提高几个数量级,加速多尺度分子模拟效率,实时匹配BSRF-4B7A及1W1A射线表征实验结果,解决多尺度分子模拟驱动的同步辐射数字孪生系统中数字空间与物理空间效率匹配问题,实现同步辐射数字孪生的实时交互与反馈调控。基于以上先进射线表征实验的物理空间和高模拟效率的分子模拟数字空间,代码实现物理空间与数字空间实时多次迭代交互。实时获取实验数据,并将其存入列表。后处理分析得到物理空间结果(配位数、晶格参数等),通过MDW接口传输至数字空间,多尺度分子模拟初步结果通过后处理得到某一系综下电池结构、相变等信息,通过SFTP协议动态获取数字空间结果,并将该结果传入处理函数中进行相应的分析处理,通过计算原子坐标的均方根偏差,确定系统是否已达到平衡状态。将物理空间与数字空间的结构、相变等重要信息实时交互匹配,在操作系统的控制台打印出相应的匹配结果,若不匹配,则对数字空间的初始结构进一步微调,更新数字空间的模型,多次迭代,直至与实验数据相匹配。在每轮实验中,如发现不同实验周期的结果存在显著差异,可能表明实验过程中元素间发生了相互作用。此时,通过同步辐射采集的实时信息对该现象进行分析,确定元素相互作用的关键时间段,对物理空间中即将发生反应(发生相变或结构变化剧烈)的时刻实施系统反馈控制,调整其采集频率,实现跨越时间、空间尺度的高分辨钙钛矿电池全生命周期动态过程的反馈控制。

面向先进同步辐射光源实际应用,基于数字孪生方法,针对钙钛矿电池放电过程动态演变的射线表征解析及调控方面面临的问题,在BSRF-4B7A及1W1A线站构建多尺度分子模拟驱动的钙钛矿电池的射线表征数字孪生在线平台。基于训练过程高度自动化和高效的DeePMD-kit、DeePKS等开源软件提速数字空间模拟效率,通过对钙钛矿电池微观结构的分子机制和多时空尺度上界面演变的动态过程研究,找到影响钙钛矿电池性能的关键因素,进一步调控其射线表征在线解析过程,为发现新的可持续材料、提高大装置射线表征实验解析效能提供新途径,有望在BSRF-4B7A

及1W1A线站在线部署多尺度分子模拟驱动的同步辐射数字孪生平台,开展满足线站射线表征实时预测需求的研究,推动同步辐射光源智能化升级。

5 同步辐射的数字孪生面临的挑战及展望

随着数字化技术的不断发展和应用,数字孪生已经成为工业、能源、医疗等各个领域的热点技术之一。同步辐射的数字孪生有望在设备状态监测、实验设计优化和数据分析处理等方面发挥重要作用,已经成为同步辐射走向智能化和标准化的必然趋势(图4)。

然而,同步辐射的数字孪生发展还面临着以下的挑战。

(1) 实际应用任重道远:虽然数字孪生当前处于增长期,但是在同步辐射领域的应用仍处于初步研究阶段,实际应用尚未普及;需要更多的研究和实验验证,以推动其在实际中的应用。当前针对同步辐射的数字孪生软件和工具仍然较少,难以满足复杂的同步辐射光源设备和实验的需求;开发专门的软件工具是未来的一个重要方向。目前,数字孪生技术的应用领域还相对有限,需要进一步扩展其应用范围。

(2) 系统架构需要搭建:数字孪生通过构建数字孪生体并对其全生命周期进行模拟分析,为优化决策提供依据,这需要数据能力与建模能力作为底层支持。数字孪生通过传感器等媒介采集物理实体的数据,通过IoT技术传输实时状态数据,最终在内部进行数据标记与管理,构成底层数据池。具有底层数据做支撑后,数字孪生将基于现实世界建模,构建一个与现实世界基本一致的数字世界,再通过仿真等技术模拟物理世界的规律,实现状态预测、问题诊断等功能,反馈现实世界决策。

(3) 标准化:数字孪生标准体系的建立将促进数字孪生技术的发展和應用,为数字化转型提供支持和保障。根据前文讨论,数字孪生标准体系建立应覆盖数据标准、安全标准、可信标准、互操作标准以及管理标准5个方面,标准建立是一个长期的过程,需要各个领域的专家共同参与和合作。总的来看,数字孪生是一个反映物理实体行为规律,并在整个生命周期中不断更新的数字实体。数字孪生还在蓬勃发展,目前关于数字孪生模型还没有一个被广泛接受的定式,将来还会有更多新的模型被开发出来。

(4) 安全性:在数据时代,数字孪生技术的安全性和数据保护尤为重要。确保同步辐射数字孪生中的数

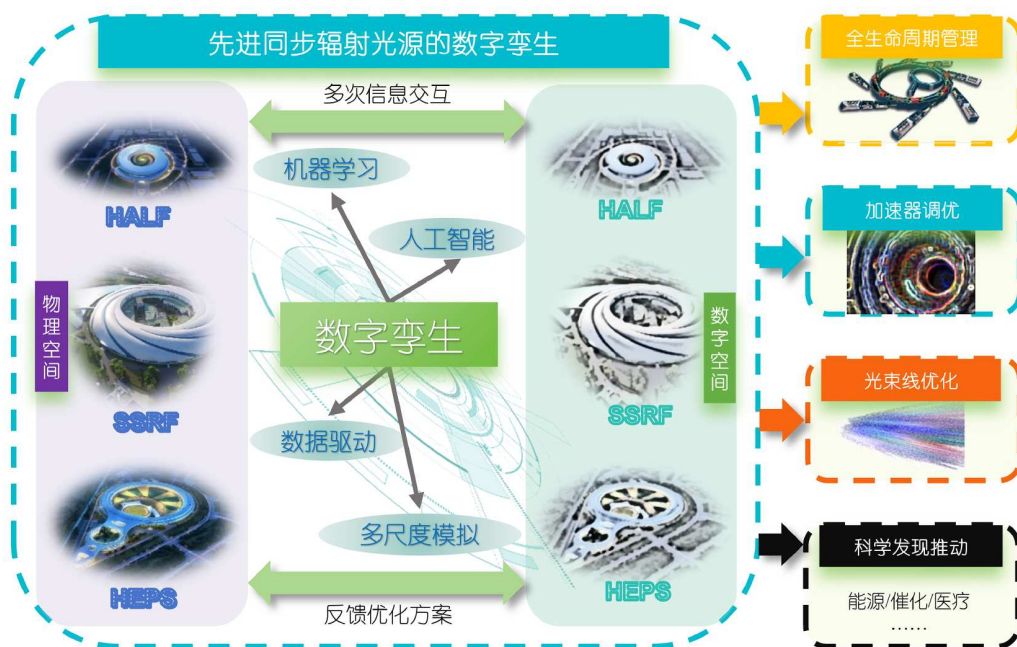


图4 数字孪生在先进同步辐射光源部署应用的评估与展望

Figure 4 Evaluation and prospect of digital twin in the deployment and application of advanced synchrotron radiation photon sources

据安全性和隐私保护，是数字孪生技术在先进同步辐射光源中广泛应用的前提。

(5) 应用出口：同步辐射在能源、催化、医疗等重要科学发现领域具有关键作用，如何将同步辐射数字孪生与实际应用有机结合，拓展其应用场景，是一个亟待解决的问题。

(6) 多尺度模拟驱动的数字孪生在同步辐射中的部署：基于AI/ML等方法的数字孪生在同步辐射光源的加速器调优、光束线优化等方面有前瞻性优势，利用基于第一性原理、分子动力学等在内的多尺度分子模拟的数字孪生技术在线解析射线表征实验数据，能够从原子/分子水平探索材料的微观结构及相互作用的基本原理，为解决材料实验吸收谱解析难题带来新的机遇，为同步辐射科学发现、能源、催化、医疗等重要应用出口的数字孪生部署带来新的视角。针对多尺度模拟驱动的数字空间，量子计算、并行技术、机器学习势等科学方法可以弥合数字空间与物理空间效率匹配的问题，进而实现多尺度模拟驱动的数字孪生在先进同步辐射光源的科学发现中的部署与应用。

数字孪生是一个涉及多环节、多领域、跨部门的复杂系统工程。在先进同步辐射光源建设中，需要各行业协同创新，提供广泛的技术与数据支持。许多数字孪

生所需的关键技术目前正在相关的多尺度和多物理建模、结构健康管理、高性能计算等愿景下进行开发。通过构建协同共赢、开源创新的同步辐射数字孪生，促进物理世界和数字世界的深度融合，驱动更多数字孪生的科学应用，助力同步辐射加速向数字化、智能化转型。

6 总结

同步辐射大科学装置面临着装置标准化和智能化问题的基本挑战。本文结合同步辐射及数字孪生国内外研究发展现状，提出了同步辐射的数字孪生，综述了数字孪生在加速器调优、光束线调控、全生命周期管理及预测等同步辐射运行方面的国内外研究现状，进一步综述了在同步辐射科学发现中的数字孪生研究进展，以及未来在能源、催化、医疗等同步辐射应用出口中数字孪生的潜在结合。在此基础上，对多尺度分子模拟驱动的数字孪生在同步辐射中的应用部署进行了可行性评估。最后，对同步辐射的数字孪生研究及在实践方面的发展趋势和挑战进行了总结和探讨，为将来数字孪生在先进同步辐射光源的进一步应用提供了理论和方法参考。

可以预见，在智能大环境的推动和发展作用下，数

字孪生将是推动同步辐射智能化发展的关键技术。数字孪生与同步辐射全生命周期的结合成为同步辐射发展的必然趋势,在未来同步辐射智能化方面有着极大应用前景。未来, AI大模型赋能数字孪生体, 自主性、

自适应同步辐射光源将成为可能。同时, 同步辐射运行体系多模块化, 复杂同步辐射系统数字孪生将成为建设重点, 不久, 同步辐射数字孪生将达到高智慧化状态。

参考文献

- Jiao Y, Bai Z H, Li X. Accelerator physics and technology of the fourth generation synchrotron radiation light source (in Chinese). *Physics*, 2024, 53: 71–79 [焦毅, 白正贺, 李晓. 第四代同步辐射光源加速器物理与技术. *物理*, 2024, 53: 71–79]
- Qi F Z, Li G, Li C, et al. Big data and AI for high energy physics (in Chinese). *Front Data Comput*, 2023, 5: 50–59 [齐法制, 李刚, 李纯, 等. 基于人工智能的高能物理大数据技术与应用. *数据与计算发展前沿*, 2023, 5: 50–59]
- Balyakin A, Nurakhov N, Nurbina M. Current trends of megascience facilities utilization. In: Antipova T, ed. *Comprehensible Science*. Cham: Springer, 2021. 400–409, https://doi.org/10.1007/978-3-030-66093-2_39
- Jones D, Snider C, Nassehi A, et al. Characterising the digital twin: A systematic literature review. *CIRP J Manuf Sci Tech*, 2020, 29: 36–52
- Grieves M. Digital twin: Manufacturing excellence through virtual factory replication, White paper, 2014, 1: 1–7. https://www.researchgate.net/publication/275211047_Digital_Twin_Manufacturing_Excellence_through_Virtual_Factory_Replication
- Tao F, Zhang H, Liu A, et al. Digital twin in industry: State-of-the-art. *IEEE Trans Ind Inf*, 2018, 15: 2405–2415
- Lu H, Zhang L, Wang K Y, et al. A framework on equipment digital twin credibility assessment (in Chinese). *J Syst Simul*, 2023, 35: 1455–1471 [陆涵, 张霖, 王昆玉, 等. 装备数字孪生可信评估框架研究. *系统仿真学报*, 2023, 35: 1455–1471]
- Singh M, Fuenmayor E, Hinchy E, et al. Digital twin: Origin to future. *ASI*, 2021, 4: 36
- Grieves M W. Product lifecycle management: The new paradigm for enterprises. *IJPD*, 2005, 2: 71–84
- Grieves M W. Back to the future: Product lifecycle management and the virtualization of product information. In: Tomovic M, Wang S, eds. *Product Realization: A Comprehensive Approach*. Boston: Springer, 2009. 1–13. https://doi.org/10.1007/978-0-387-09482-3_3
- Shafto M, Conroy M, Doyle R, et al. Draft modeling, simulation, information technology & processing roadmap. *Technol Area*, 2010, 11: 1–32
- Tuegel E J, Ingrassia A R, Eason T G, et al. Reengineering aircraft structural life prediction using a digital twin. *Int J Aerospace Eng*, 2011, 2011: 1–14
- Glaessgen E, Stargel D. The digital twin paradigm for future NASA and US air force vehicles. In: 53rd AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics and Materials Conference 20th AIAA/ASME/AHS Adaptive Structures Conference 14th AIAA, 2012. 1818
- Mike S, Mike C, Rich D, et al. Modeling, simulation, information technology & processing roadmap. Technical Report, National Aeronautics and Space Administration, 2012, 32: 1–38
- Tao F, Zhang M, Cheng J F, et al. Digital twin workshop: A new paradigm for future workshop (in Chinese). *Comput Integr Manuf Syst*, 2017, 23: 1–9 [陶飞, 张萌, 程江峰, 等. 数字孪生车间——一种未来车间运行新模式. *计算机集成制造系统*, 2017, 23: 1–9]
- Tao F, Qi Q. Make more digital twins. *Nature*, 2019, 573: 490–491
- Tao F, Zhang H, Zhang C. Advancements and challenges of digital twins in industry. *Nat Comput Sci*, 2024, 4: 169–177
- Cui Y H, Yang B T, Fang Y, et al. Application of digital twin technology in aeroengine smart production line (in Chinese). *Aeroengine*, 2019, 45: 93–96 [崔一辉, 杨滨涛, 方义, 等. 数字孪生技术在航空发动机智能生产线中的应用. *航空发动机*, 2019, 45: 93–96]
- Liang N M, Fang Z G, Li R Y, et al. Digital Twin Practice: Model-based Digital Enterprises (MBE) (in Chinese). Beijing: China Machine Press, 2020. 44–57 [梁乃明, 方志刚, 李荣跃, 等. 数字孪生实战: 基于模型的数字化企业(MBE). 北京: 机械工业出版社, 2020. 44–57]
- Tao F, Zhang Y, Cheng Y, et al. Digital twin and blockchain enhanced smart manufacturing service collaboration and management. *J Manufacturing Syst*, 2022, 62: 903–914
- Boulos M N K, Zhang P. Digital twins: From personalised medicine to precision public health. *JPM*, 2021, 11: 745
- Lei B, Janssen P, Stoter J, et al. Challenges of urban digital twins: A systematic review and a Delphi expert survey. *Automation Construction*, 2023, 147: 104716
- Li X, Feng M, Ran Y, et al. Big Data in Earth system science and progress towards a digital twin. *Nat Rev Earth Environ*, 2023, 4: 319–332
- Wu B, Widanage W D, Yang S, et al. Battery digital twins: Perspectives on the fusion of models, data and artificial intelligence for smart battery management systems. *Energy AI*, 2020, 1: 100016
- Grieves M. *Virtually Perfect: Driving Innovative and Lean Products through Product Lifecycle Management*. Melbourne: Space Coast Press Cocoa Beach, 2011
- Tao F, Liu W R, Zhang M, et al. Five-dimension digital twin model and its ten applications (in Chinese). *Comput Integr Manuf Syst*, 2019, 25: 1–18 [陶飞, 刘蔚然, 张萌, 等. 数字孪生五维模型及十大领域应用. *计算机集成制造系统*, 2019, 25: 1–18]

- 27 Zheng P, Lin Y, Chen C H, et al. Smart, connected open architecture product: An IT-driven co-creation paradigm with lifecycle personalization concerns. *Int J Production Res*, 2019, 57: 2571–2584
- 28 Madni A M, Madni C C, Lucero S D. Leveraging digital twin technology in model-based systems engineering. *Systems*, 2019, 7: 7
- 29 Ullah A S. Modeling and simulation of complex manufacturing phenomena using sensor signals from the perspective of Industry 4.0. *Adv Eng Inform*, 2019, 39: 1–13, doi: 10.1016/j.aei.2018.11.003
- 30 Bao J, Guo D, Li J, et al. The modelling and operations for the digital twin in the context of manufacturing. *Enterprise Inf Syst*, 2019, 13: 534–556
- 31 Stark R, Freseman C, Lindow K. Development and operation of digital twins for technical systems and services. *CIRP Ann*, 2019, 68: 129–132
- 32 Natis Y, Jacobson S, Reynolds M, et al. Innovation insight for digital twins-driving better IoT-fueled decisions. 2017, <https://www.gartner.com/en/documents/3645341>
- 33 Rongpipi S. ALS user meeting and workshops 2022 ALS user meeting highlights. *Synchrotron Radiat News*, 2022, 35: 20–23
- 34 Curtis E, Joshua, Abell D, et al. Online models for X-ray beamlines using Sirepo-Bluesky. In: International Conference on Accelerator and Large Experimental Physics Control Systems (19th), 2023. 165–170
- 35 Morris T, Rakitin M, Islegen-Wojdyla A, et al. A general bayesian algorithm for the autonomous alignment of beamlines. 2024, arXiv: 2402.16716
- 36 Vollmer A, Goslawski P, Jankowiak A, et al. Materials discovery at BESSY. *Synchrotron Radiat News*, 2024, 37: 12–17
- 37 Tekawade A, Liu Z, Kenesei P, et al. 3D autoencoders for feature extraction in X-ray tomography. In: 2021 IEEE International Conference on Image Processing (ICIP), 2021. 3477–3481
- 38 Jiao H, Qu Z, Jiao S, et al. A 4D x-ray computer microtomography for high-temperature electrochemistry. *Sci Adv*, 2022, 8: eabm5678
- 39 Rebuffi L, Sánchez del Río M. 10-year anniversary of OASYS, a software suite for X-ray optical simulations. *Synchrotron Radiat News*, 2023, 36: 4–5
- 40 Balyakin A A, Nurakhov N N, Nurbina M V. Digital twins vs digital trace in megascience projects. In: Rocha Á, Ferrás C, López-López P C, et al., eds. Information Technology and Systems. Cham: Springer, 2021, 1330, https://doi.org/10.1007/978-3-030-68285-9_50
- 41 Benmore C, Bicer T, Chan M K Y, et al. Advancing AI/ML at the advanced photon source. *Synchrotron Radiat News*, 2022, 35: 28–35
- 42 Abela R, Biscari C, Daillant J, et al. The European strategy for accelerator-based photon science. *Eur Phys J Plus*, 2023, 138: 355
- 43 Schwarzkopf O, Jankowiak A, Vollmer A. Materials discovery at BESSY. *Eur Phys J Plus*, 2023, 138: 348
- 44 Vriza A, Chan H, Xu J. Self-driving laboratory for polymer electronics. *Chem Mater*, 2023, 35: 3046–3056
- 45 Grant A, O'Dwyer C. Real-time nondestructive methods for examining battery electrode materials. *Appl Phys Rev*, 2023, 10: 011312
- 46 Thelen A, Zhang X, Fink O, et al. A comprehensive review of digital twin—Part 2: Roles of uncertainty quantification and optimization, a battery digital twin, and perspectives. *Struct Multidisc Optim*, 2023, 66: 1
- 47 Qiang Z, Li X, Ning Y, et al. Digital modeling-assisted mesoscale visualization lights up materials science from liquid- to solid-state batteries. *Energy Storage Mater*, 2023, 63: 102960
- 48 Wiedemann A H, Goldin G M, Barnett S A, et al. Effects of three-dimensional cathode microstructure on the performance of lithium-ion battery cathodes. *Electrochim Acta*, 2013, 88: 580–588
- 49 Yan B, Lim C, Yin L, et al. Three dimensional simulation of galvanostatic discharge of LiCoO₂ cathode based on X-ray nano-CT images. *J Electrochem Soc*, 2012, 159: A1604–A1614
- 50 Liu X, Zhang L, Yu H, et al. Bridging multiscale characterization technologies and digital modeling to evaluate lithium battery full lifecycle. *Adv Energy Mater*, 2022, 12: 2200889
- 51 Song J, Lee H, Kim S, et al. Estimation of crack formation by digital-twin structure of a single secondary particle. ECS Meeting Abstracts, 2023, MA2023-01: 669, <https://iopscience.iop.org/article/10.1149/MA2023-012669mtgabs/meta>
- 52 Gossler H, Riedel J, Daymo E, et al. A new approach to research data management with a focus on traceability: Adacta. *Chem Ingenieur Technik*, 2022, 94: 1798–1807
- 53 Spatenka S, Matzopoulos M, Urban Z, et al. From laboratory to industrial operation: Model-based digital design and optimization of fixed-bed catalytic reactors. *Ind Eng Chem Res*, 2019, 58: 12571–12585
- 54 Örs E, Schmidt R, Mighani M, et al. A conceptual framework for AI-based operational digital twin in chemical process engineering. In: 2020 IEEE International Conference on Engineering, Technology and Innovation (ICE/ITMC), 2020. 1–8
- 55 Mounaam A, Oulhiq R, Souissi A, et al. A model-driven digital twin framework development for sulfur dioxide conversion units simulation. *Adv Sci Technol Eng Syst J*, 2021, 6: 122–131
- 56 McLaughlin D, Bierling M, Mayerhöfer B, et al. Digital twin of a hierarchical CO₂ electrolyzer gas diffusion electrode. *Adv Funct Mater*, 2023, 33: 2212462
- 57 Laubenbacher R, Adler F, An G, et al. Toward mechanistic medical digital twins: Some use cases in immunology. *Front Digit Health*, 2024, 6: 1349595
- 58 Laubenbacher R, Mehrad B, Shmulevich I, et al. Digital twins in medicine. *Nat Comput Sci*, 2024, 4: 184–191

- 59 Laubenbacher R, Adler F, An G, et al. Forum on immune digital twins: A meeting report. [npj Syst Biol Appl](#), 2024, 10: 19
- 60 Laubenbacher R, Niarakis A, Helikar T, et al. Building digital twins of the human immune system: Toward a roadmap. [npj Digit Med](#), 2022, 5: 64
- 61 Sigawi T, Ilan Y. Using constrained-disorder principle-based systems to improve the performance of digital twins in biological systems. [Biomimetics](#), 2023, 8: 359
- 62 Fischer R P, Volpert A, Antonino P, et al. Digital patient twins for personalized therapeutics and pharmaceutical manufacturing. [Front Digit Health](#), 2024, 5: 1302338
- 63 Currie G M, Rohren E M. Radiation dosimetry, artificial intelligence and digital twins: Old dog, new tricks. [Semin Nucl Med](#), 2023, 53: 457–466
- 64 Li W F, Zhang J, Wang J, et al. Multiscale theory and computational method for biomolecule simulations (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2015, 64: 98701 [李文飞, 张建, 王骏, 等. 生物大分子多尺度理论和计算方法. *物理学报*, 2015, 64: 98701]
- 65 Chantelle L, Menezes de Oliveira A L, Kennedy B J, et al. Probing the site-selective doping in $\text{SrSnO}_3\text{:Eu}$ oxides and its impact on the crystal and electronic structures using synchrotron radiation and DFT simulations. [Inorg Chem](#), 2020, 59: 7666–7680
- 66 Hameed S, Baimanov D, Li X, et al. Synchrotron radiation-based analysis of interactions at the nano–bio interface. [Environ Sci-Nano](#), 2022, 9: 3152–3167
- 67 Tietjen G T, Gong Z, Chen C H, et al. A molecular mechanism for differential recognition of membrane phosphatidylserine by the immune regulatory receptor Tim4. [Biophys J](#), 2014, 106: 17a
- 68 Li J, Huang X, Pianetta P, et al. Machine-and-data intelligence for synchrotron science. [Nat Rev Phys](#), 2021, 3: 766–768
- 69 Leemann S C, Liu S, Hexemer A, et al. Demonstration of machine learning-based model-independent stabilization of source properties in synchrotron light sources. [Phys Rev Lett](#), 2019, 123: 194801
- 70 Zhou Z, Li C, Bi X, et al. A machine learning model for textured X-ray scattering and diffraction image denoising. [npj Comput Mater](#), 2023, 9: 58
- 71 Gowda V K, Rosén T, Roth S V, et al. Nanofibril alignment during assembly revealed by an X-ray scattering-based digital twin. [ACS Nano](#), 2022, 16: 2120–2132
- 72 Zuo S, Niu W, Chu S, et al. Water-regulated lead halide perovskites precursor solution: Perovskite structure making and breaking. [J Phys Chem Lett](#), 2023, 14: 4876–4885
- 73 Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. [J Comput Phys](#), 1995, 117: 1–19
- 74 Hess B, Kutzner C, van der Spoel D, et al. GROMACS 4: Algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation. [J Chem Theor Comput](#), 2008, 4: 435–447
- 75 Thompson A P, Aktulga H M, Berger R, et al. LAMMPS—A flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. [Comput Phys Commun](#), 2022, 271: 108171

Summary for “数字孪生在先进同步辐射光源部署应用的评估与展望”

Assessment and prospect of digital twin deployment and application in advanced synchrotron radiation light sources

Deting Xu^{1,2}, Fen Ye³, Lei Zheng¹, Chenyan Ma¹, Zhibang Shen^{1,4}, Zhao Chen¹ & Lina Zhao^{1,4*}

¹ Multi-Disciplinary Research Division, Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

² Division of Accelerator Technology, Spallation Neutron Source Science Center, Dongguan 523803, China;

³ School of Information Engineering, Minzu University of China, Beijing 100081, China;

⁴ University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 101408, China

* Corresponding author, E-mail: linazhao@ihep.ac.cn

With the continuous innovation in fundamental science and engineering technology, we have entered the era of the fourth-generation synchrotron radiation photon sources. To meet the growing demand for advanced synchrotron radiation light sources in multiple foundational scientific fields, there is an urgent need to advance the physical design and engineering development of the fourth-generation synchrotron radiation photon sources towards the standardization and intelligent upgrade of photon source equipment.

New measurement technologies, advances in detector technology, and advancements in multimodal data utilization and data analysis algorithms are driving the intelligent upgrading of synchrotron radiation. However, challenges also arise in data analysis, beamline control, and equipment utilization efficiency. In recent years, digital twin has emerged as a crucial innovation in digital transformation and intelligent upgrading. Driven by data and models, digital twin enables monitoring, simulation, prediction and optimization. Digital twin has the potential to reduce operating and time costs, improve the productivity of existing systems, enhance maintenance, simplify accessibility, and create a safer working environment. Digital twin of mega-science facilities has become a new way to improve facilities utilization efficiency, reduce operating costs, accelerate material discovery, and make the entire lifecycle of mega-science facilities intelligent, such as equipment management and operation, material radiographic characterization processes.

We leverage digital twin technology to create highly realistic digital models of real-world entities using big data and artificial intelligence. This technology facilitates the interaction and symbiosis between digital twin and physical entities through connections and data exchange. Driven by data and models, we enable digital twin to perform monitoring, simulation, prediction, and optimization. By integrating advanced technologies such as big data analytics, artificial intelligence, and machine learning with digital twin, we expand their application scope and capabilities. As a cutting-edge technology, we see digital twin continually evolving and expanding their applications, emerging as a vital tool for the digital transformation and intelligent upgrading of synchrotron facilities.

This review focuses on the deployment and application of digital twin in advanced synchrotron radiation facilities. First, we summarize and introduce the development and operation of synchrotron radiation photon sources, followed by a detailed introduction to the fundamental concepts and current status of digital twin. Next, we explore the critical applications of digital twin in advanced synchrotron radiation photon sources such as the lifecycle management, accelerator tuning and beamline optimization. Furthermore, we summarize the potential integration of digital twin in important synchrotron radiation application exports such as energy, catalysis, and medicine.

Moreover, using BSRF-4B7A and 1W1A beamlines as case studies, we assess the key deployment aspects of digital twin in advanced synchrotron radiation scientific discoveries based on the hardware characteristics of beamline stations. We also propose the empowerment prospects of multi-scale simulation-driven digital twin in the future development of advanced synchrotron radiation photon sources.

Finally, we address the challenges and prospects faced by digital twin in advanced synchrotron radiation photon sources mainly concerning practical applications, system architecture, standardization, safety, and deployment.

To sum up, this review provides a comprehensive summary of the current applications of digital twin in advanced synchrotron radiation photon sources and showcasing its significant potential for future applications. It aims to provide scientific references for promoting the deployment and application of digital twin in synchrotron radiation and assisting scientific breakthroughs in the future.

digital twin, synchrotron radiation, intelligence, multi-scale simulation

doi: [10.1360/TB-2024-0955](https://doi.org/10.1360/TB-2024-0955)