

中国化工学会团体标准

《热分析获取反应动力学参数方法的评价标准》

编制说明

一、任务来源

任务由中国化工学会下达，团体标准立项号为 T/CIESC 0003-2018。由中国石油化工股份有限公司青岛安全研究院化工过程安全研究所、国家应急管理部化学品登记中心鉴别分类部及南京理工大学组织人员制定。

二、目的和意义

化工工艺从工艺开发、设计、优化到开车运行，均遵循“三传一反”的基本规律，其中工艺热安全是基于此衍生出的分支领域，其从反应热力学、反应动力学、传热学、传质学等方面研究、评估化工工艺中化学反应的热失控风险，包括后果严重度和后果发生的可能性，并进一步基于研究、评估结果进行工艺优化、风险识别及事故预防等工作。

近年来，在化工生产、危险品储运等过程中，严重事故频发，均造成较大的人员伤亡及财产损失，事故原因多为对热风险的识别、本质安全化设计、管控以及预防不到位。因此，行业内无论从监管层面、企业运营层面、学术研究层面或是第三方评估咨询层面均越来越重视工艺热安全，相关的法规逐步出台、学术理论及研究成果得到应用、各保护层的相关失控预防技术也逐步得到推广。但由于起步较晚，行业内工艺热安全的相关标准缺口较大，在热风险识别评估、失控预防

技术应用等方面存在不规范、不准确、门槛低的情况，可能对行业安全水平的提高造成阻碍，因此亟待推进工艺热安全领域系列标准的订立、完善工作。

目前，通过热分析手段获取反应动力学的方法繁多，每种方法采用的仪器设备、方法标准或商业软件各有不同，从而导致反应动力学的计算结果存在差异。本标准的制定旨在提供评价上述动力学获取方法准确性的标尺，以供各方法的校准优化以及方法间的结果比对。

三、起草工作的简要过程

（一）成立标准编制小组

《热分析获取反应动力学参数方法的评价标准》由中国石油化工股份有限公司青岛安全研究院化工过程安全研究所主要负责。根据项目任务书，成立了《热分析获取反应动力学参数方法的评价标准》编制小组，化工过程安全研究所所长徐伟担任总负责人，工艺安全工程师费轶担任执行负责人，成员由化工过程安全研究所姜杰、张帆等高级工程师、国家应急管理部化学品登记中心黄飞高级工程师以及南京理工大学陈利平副教授组成。通过组织机构的成立，一方面加强标准编制过程中的协调和领导，另一方面保证编制标准的规范性和科学性。

（二）编制标准初稿

2018年8月项目组完成了化工学会团体标准的立项，化工学会专家听取了本规程的立项论证报告，认为立项依据充分，标准内容、技术路线、实施方案和编制提纲可行，并确立了规程的主要内容。

根据化工学会下达的立项意见，编制小组修改完善了规范的结构和相关内容，在此基础上开始了规范的编制工作。本标准制定严格按GB/T1.1《标准化工作导则第1部分：标准的结构和编写规则》，

GB/T1.2《标准化工作导则第2部分标准中规范性技术要素内容的确定方法》。

从接到标准的编制任务开始，参加编写的人员就开始收集国内外有关反应热测试、反应动力学计算、工艺热风险特征参数计算等方面的相关资料，主要包括 GB/T 6425《热分析术语》，GB/T 29174《物质恒温稳定性的热分析试验方法》，GB/T 13464《物质热稳定性的热分析试验方法》，GB/T 17802《动力学常数的热分析试验方法》，NB/SH/T 0859《化学物质热稳定性的测定 热分析法》，NB/SH/T 0632《比热容的测定 差示扫描量热法》，ASTM E2781《Standard Practice for Evaluation of Methods for Determination of Kinetic Parameters by Thermal Analysis》，ASTM E1231《Standard Practice for Calculation of Hazard Potential Figures of Merit for Thermally Unstable Materials》，ASTM E2046《Standard Test Method for Reaction Induction Time by Thermal Analysis》，ASTM E659《Standard Test Method for Autoignition Temperature of Chemicals》，ASTM E680《Standard Test Method for Drop Weight Impact Sensitivity of Solid-Phase Hazardous Materials》，ASTM E2890《Standard Test Method for Kinetic Parameters for Thermally Unstable Materials by Differential Scanning Calorimetry Using the Kissinger Method》，ASTM E967《Standard Test Method for Temperature Calibration of Differential Scanning Calorimeters and Differential Thermal Analyzers》等标准的内容，在广泛征求各方专家

和生产企业的意见和建议后，与 2019 年 5 月完成了《热分析获取反应动力学参数方法的评价标准》标准初稿。

四、编写原则和确定标准主要内容的依据

根据立项报告和立项意见，确定本规范主要内容。说明如下：

（一）遵循的原则及内容确定依据

编制本规范遵守以下原则及依据：

1. 标准编制遵循“科学性、实用性、统一性、规范性”的原则。
2. 由于本标准等标采用 ASTM E2781 《Standard Practice for Evaluation of Methods for Determination of Kinetic Parameters by Thermal Analysis》，并且为首次制定，因此对源标准基本未做修改。
3. 本标准中试验及计算过程中采用的数学模型或近似假设，符合基本化工规律，其对结果的影响在可接受范围内。
4. 本标准的编写参考了化工工艺反应风险评估的工程实践经验。

（二）结构层次说明

本标准在常规标准要素的基础上，首先阐明了化学反应速率随物质浓度和温度变化的基本规律形式，进一步提供了五种典型的符合该规律的参考物质以及其动力学三因子包括活化能、指前因子和反应级数。最后，通过待评估方法体系测试上述某几种合适物质的动力学参数，对比参考物质的数值，从而评价该方法体系的准确性。

（三）主要内容

前言

- 1 范围
- 2 规范性引用文件
- 3 术语和定义
- 4 总则
- 5 风险
- 6 实施流程
- 7 计算
- 8 结果局限性

五、技术经济分析论证和预期的经济效益

由于国内外基于热分析手段获取反应动力学的方法体系较多，每一套方法体系分别可以涉及不同的试验设备、试验方法、数学模型以及数据处理方法等等，而每种途径或方法的组合又具有各自的适用范围，无法强制限定使用某种途径作为唯一标准；同时，由于国内关于反应动力学获取方法的规范标准缺口较大，实践过程中，技术人员往往基于简化计算方法或基于仪器设备数据处理软件或者商业软件的

“黑箱模式”获取反应动力学，由于未充分考虑方法的适用性和特异性，造成误差甚至错误。因此本标准通过提供标准参考物质的优选文献值，作为实践过程中动力学获取途径准确度及适用性的评价标尺，试验人员可以基于此标准，比照、优化或修正试验方法、数学模型或数据处理方法，从而提高所获取的反应动力学的准确性，也即进一步提高工艺热风险的识别、管控、预防水平。

六、执行本规程的建议

推荐热安全实验室在构建或变更热风险评估方法体系时，在明确了试验设备、试验方法、数据处理方法、数学模型或商业软件等要素之后，对本标准中适用于待考察方法体系的参考物质进行全流程测试，得到动力学数据后根据本标准中的参考值对待考察方法的准确性进行评价，进一步进行方法体系的优化。

七、与有关的现行法律、法规和强制性国家标准的关系

国内现有的相关国标和行标如下，所列五个标准均在本标准中被引用且与本标准无冲突。

GB/T 6425 热分析术语

GB/T 13464 物质热稳定性的热分析试验方法

GB/T 29174 物质恒温稳定性的热分析试验方法

SN/T 3078.1 化学品热稳定性的评价指南 第1部分：加速量热仪
法

GB/T 17802 热不稳定性物质动力学常数的热分析试验方法

编写组

2019 年 06 月 05 日