

T/CASME

团 体 标 准

T/CASME XXX—2025

化工行业流程模拟计算规范

Specification for process simulation calculation in chemical industry

(征求意见稿)

在提交反馈意见时，请将您知道的专利连同支持性文件一并附上。

2025 - XX - XX 发布

2025 - XX - XX 实施

中国中小商业企业协会 发布

目 次

前言	II
1 范围	1
2 规范性引用文件	1
3 术语和定义	1
4 基本规定	2
5 流程模拟	3
5.1 过程建模	3
5.2 热力学模型选择和验证	4
5.3 物性分析	4
5.4 参数估算	4
5.5 参数回归	4
5.6 参数优化	4
5.7 计算结果分析	5
5.8 模拟验证	5
6 故障排除	5
6.1 模型选择不当	5
6.2 数据质量问题	5
6.3 数值稳定性问题	6
6.4 模型参数估计不准确	6
6.5 计算资源不足	6
6.6 边界条件设置不合理	7
6.7 结果不符	7
6.8 软件或程序错误	7
6.9 模型假设不合理	7
6.10 人为操作失误	8
6.11 调试流程	8
7 数据资料管理	8
7.1 建立数据库	8
7.2 数据备份	8
7.3 安全存储	8
7.4 版本控制	9
7.5 权限管理	9
7.6 数据文档化	9
7.7 数据安全	9
7.8 数据共享和交流	9
7.9 定期审查和更新	10
附录 A (规范性) 化工模拟热力学方程选择流程图	11
附录 B (资料性) 模拟结果表	13

前 言

本文件按照GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由南京佳华科技股份有限公司提出。

本文件由中国中小商业企业协会归口。

本文件起草单位：南京佳华科技股份有限公司……

本文件主要起草人：……

化工行业流程模拟计算规范

1 范围

本文件规定了化工行业流程模拟（以下简称“流程模拟”）计算基本规定、流程模拟、故障排除、数据资料管理。

本文件适用于对新工艺、新技术进行科学研究、对新项目进行参数设计、对老装置进行生产调优和故障诊断的化工行业流程模拟计算。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

- GB 3100 国际单位制及其应用
- GB 3101 有关量、单位和符号的一般原则

3 术语和定义

GB 3100、GB 3101界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

3.1

流程模拟 process simulation

包括组分定义、热力学模型选择和处理、模型构建或处理、初始参数输入、边界条件定义和优化、输出结果等步骤。

3.2

热力学模型 thermodynamic model

化学组分在不同温度、压力下的物性、混合规则的数学描述，包括物态方程、热力学函数、热力学定律等。

3.3

灵敏度分析 sensitivity analysis

在给定分析边界范围内，操作自变量的改变对设计变量产生影响的关系。

3.4

物性分析 physical property analysis

用于分析纯物质或混合物的各种物性在不同温度压力下的变化曲线。

3.5

物性数据库 physical property database

收集和保存化学组分的各种物性参数，包括传递性质和传质性质，例如：密度、粘度、比热容、表面张力、导热系数、偶极矩、分子量、凝固点、临界温度、临界压力、压缩因子等参数。

3.6

设计规定 design specification

在给定唯一设计变量的条件下，求解唯一操作变量的过程。

3.7

数据拟合回归 data fitting and regression

采用一套或多套测量数据，对物性数据、模型数据、反应动力学参数等信息进行数据拟合，可以调整或估算输入参数以便使被回归参数与数据最吻合，也可以整合输入变量的测量数据来匹配被拟合的模型。数据拟合实际是进行普通最小平方或最大值似然（变量误差）估算。

3.8

物性数据估算 estimation of physical property data

通过采用官能团估算法或其他估算算法对缺失的物性数据进行估算处理。

3.9

真实组分和虚拟组分 real component and virtual component

物质在化学领域中能用唯一分子式表达的物质为真实组分，与在数据库中能否搜索到无关。某些混合物，例如矿物质、生物质、石油、煤炭等，是由N种纯物质构成，而这些纯物质在不同品质混合物中组分差别很大，无法定量用纯物质表达，则可采用元素组成或D86曲线等表征手段模拟这类混合物的，称为虚拟组分。

3.10

热力学交互参数 thermodynamic interaction parameter

化合物之间为了描述两两纯物质之间的作用力关系，可以采用某些热力学方程回归的交互作用参数表示。

4 基本规定

流程模拟计算过程见图1。

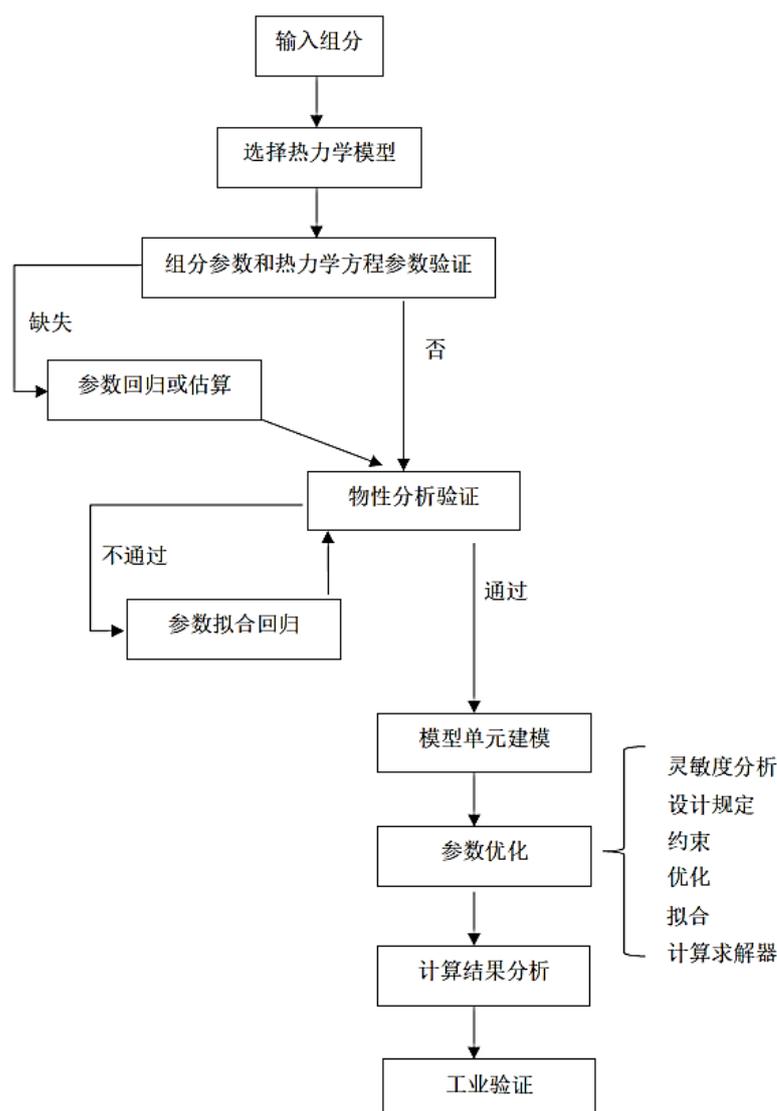


图1 流程模拟过程示意图

5 流程模拟

5.1 过程建模

5.1.1 计算方法

常用的建模求解方法包括序贯模块法、联立方程法、组合方程法等。对于简单流程推荐采用按照单元模块顺序求解的序贯模块法；对于有多种循环和多个设计规定、复杂换热网络等问题时宜采用联立方程法；前两种方法均不能解决问题宜采用组合方程法。

5.1.2 稳态计算

建模过程的稳态计算是系统任何设备、流股的温度、压力、流量、组成、物性等数据不随时间变化。稳态过程不应考虑设备尺寸、停留时间、各种干扰因素的影响。稳态模拟计算输出的结果可为工艺流程图提供物料、热量衡算数据并为设备选型提供依据。

5.1.3 动态计算

建模过程的动态计算是根据不同时间下的干扰、设备尺寸、停留时间来计算系统任何设备、流股的温度、压力、流量、组成、物性等数据随时间变化的趋势。可用于评估系统的最大操作性、安全性、控制灵敏性等。

5.2 热力学模型选择和验证

5.2.1 热力学模型的选择

5.2.1.1 根据化工过程的特点和研究目的选择合适的模型，并通过实验数据或现有案例验证模型。

5.2.1.2 流程模拟化工热力学方程的选择流程参见附录 A 中的图 A.1 和 A.2。化工热力学方程的选择应符合以下要求：

- a) 热力学模型的选择取决于系统非理想行为程度和操作条件；
- b) 气液平衡数据的可用性与模型复杂程度；
- c) 是否有现场开车数据论证。

5.2.2 热力学模型的验证

5.2.2.1 模型验证需通过实验数据或现场实际操作数据对比，确保模型预测的可靠性。常用方法包括：

- a) 实验数据对比（直接验证）：将模型预测结果与实验数据（如相平衡数据、密度、比热容、粘度等）进行对比；
- b) 误差分析：计算平均绝对偏差（AAD）、均方根误差（RMSE）等统计量，判断模型是否满足工程精度要求（通常对于 VLE 体系是 $RMSE < 10$ ，而对于 LLE 体系则应 < 100 为可接受）；
- c) 交叉验证：将模型用于同类但未参与参数拟合的体系，验证其准确能力；
- d) 热力学一致性检验：Herington 检验法、Van Ness 检验法、点检验法、EOS 检验法、端点检验法、无限稀释检验法等，检验值靠近 1 为宜；
- e) 相图对称性：检查模型预测值与实验值的共沸点、沸点、临界点等是否符合物理规律。

5.2.2.2 敏感性分析：分析模型对输入参数（如不同压力、温度下相图的预测值与实验值）的敏感度，评估不确定性。特别是操作压力大于 1 MPa 以上活度热力学方程系统。

5.3 物性分析

完成热力学方程选型后，可通过物性分析来验证热力学方程准确性，也可通过物性分析产生物性数值表和数值图，查看和分析分离方法可行性。如纯物质物性、二元系统物性、三元系统物性、物流物性等。

5.4 参数估算

完成物质输入后，物质在数据库中无法获取或部分物质物性在数据库中缺失，且无实验数据支撑，可以通过参数估算来获得信息。例如：纯物质物性、二元交互参数。

注：该方法慎重使用，与实测数据会有一定误差。

5.5 参数回归

完成物质输入和热力学方程选择后，数据库中给出的纯物质物性或二元、多元交互参数，相平衡数据与实测数据偏差较大，可通过参数回归进行校正。如纯物质物性、气液平衡数据、液液平衡数据等。

5.6 参数优化

在模拟计算过程中，应优化各种变量数据，可通过灵敏度分析、设计规定、参数拟合、参数优化来实现。

5.7 计算结果分析

这包括对物质质量衡算、热量衡算、反应动力学、设备性能、压力降、热量耦合、三废减少、操作费用较低、工程可实施性等方面的分析。输出结果参见附录B，若有特殊物性数据或参数需要输出的另加。

5.8 模拟验证

将模拟计算得到的结果与实验数据或工厂实际运行数据进行比较和验证。

5.9 应用和推广

本文件可用于自我开发计算软件或现有商业化软件，包括国外软件Aspen Plus、Hysys、PRO/II、Promax、gPROMS、VGMSim、ChemCAD等；国产软件SimTech Simulator、APEX、CSLAB、奥秘仿真等。

5.10 输出报告

5.10.1 报告格式如下：

- a) 表格形式：流股数据表（组成、流量、温度、压力等），参见附录B；
- b) 图形展示：塔内温度与组成分布曲线或水力学结果；
- c) 设备参数说明：关键操作参数（回流比、理论板数、能耗、进料位置等）。

5.10.2 数据单位与精度如下：

- a) 组成：质量流量（kg/h）、质量分数（%wt）、摩尔流量（kmol/h）、摩尔浓度（%mol）保留两位小数；
- b) 温度：℃（保留一位小数）；
- c) 计算结果表：参见附录B的要求。

6 故障排除

6.1 模型选择不当

6.1.1 现象

简化模型无法描述实际情况（如非理想汽液平衡与实际不一致、反应动力学计算转化率等不一致、计算模型不考虑三传一反等）。

6.1.2 解决方案

按以下规定进行：

- a) 进行模型敏感性分析（如相平衡数据验证、反应转化率收率温升等验证），验证简化假设是否成立；
- b) 更换不同热力学模型或局部调整热力学模型参数来匹配实际体系；
- c) 对复杂反应过程使用严格单元操作模型或Fortran、Python等语言编程计算。

6.2 数据质量问题

6.2.1 现象

物性参数（如活度系数、溶解度）误差会逐级放大。

6.2.2 解决方案

按以下规定进行：

- a) 通过试验或文献补充缺失数据，可使用 DETHERM 数据库、DDBST 数据库、NIST 数据库、商用软件内置物性库或实测数据；
- b) 对关键参数进行参数回归；
- c) 采用交叉验证：对比不同来源数据的模拟结果差异。

6.3 数值稳定性问题

6.3.1 现象

收敛迭代过程数值减少但是计算缓慢、迭代发散、迭代震荡。

6.3.2 解决方案

按以下规定进行：

- a) 调整不同收敛算法 Wegstein\Direct\Broyden\Newton 等（如 Newton 改为 Wegstein 或 Broyden）或降低迭代步长；
- b) 检查物性计算中是否存在不连续点（如相变边界）；
- c) 启用撕裂流股分割循环系统，分步收敛；
- d) 重新定义撕裂流股；
- e) 适当流程给定合适初始值；
- f) 检查输入原始条件是否有误；
- g) 尝试把输入条件简单化；
- h) 增大迭代次数。

6.4 模型参数估计不准确

6.4.1 关键参数

物性基础数据、汽液平衡数据、反应速率常数、传热系数、效率因子等。

6.4.2 解决方案

按以下规定进行：

- a) 利用尽可能多的实验数据通过参数估计工具优化；
- b) 可采用统计法如蒙特卡洛分析评估参数不确定性对结果的影响。

6.5 计算资源不足

6.5.1 现象

如果计算资源不足，可能导致计算时间过长或者无法完成计算任务。

6.5.2 解决方案

按以下规定进行：

- a) 对大型流程进行模块化拆分，采用序贯求解；
- b) 关闭非必要的物性计算选项（如严格电解质模型）；

- c) 使用分布式计算或云计算资源。

6.6 边界条件设置不合理

6.6.1 现象

- 6.6.1.1 进料流量/组成与实际工况偏离。
- 6.6.1.2 压力设定忽略管路压降。
- 6.6.1.3 热力学条件（如绝热/等温）与设备类型冲突。

6.6.2 解决方案

按以下规定进行：

- a) 核对物料平衡与能量平衡是否闭合；
- b) 使用灵敏度分析、设计规定等功能反向验证边界条件合理性。

6.7 结果不符

6.7.1 现象

模拟计算结果与实际情况不符。

6.7.2 解决方案

按以下规定进行：

- a) 通过生成相图对比实测值检查物性方法是否适用；
- b) 对比单元操作模型的设计规范（如塔板效率是否合理）；
- c) 逐步关闭次要模块，定位偏差来源（分块排除法）。

6.8 软件或程序错误

6.8.1 现象

使用的模拟计算软件或程序可能存在bug或者版本兼容性问题。

6.8.2 解决方案

按以下规定进行：

- a) 更新至最新版本；
- b) 检查 Fortran、Python 等用户子程序是否与当前版本兼容；
- c) 查阅官方技术支持文档。

6.9 模型假设不合理

6.9.1 现象

忽略重要的物理、化学过程，导致计算结果的误差。

6.9.2 解决方案

按以下规定进行：

- a) 显示考虑被忽略的机制（如微量副反应、轴向扩散效应等）；
- b) 对简化模型添加修正因子（如塔效率补偿、热损失补偿）；

- c) 采用动态模拟验证稳态假设的有效性。

6.10 人为操作失误

6.10.1 现象

人为操作失误导致模拟计算结果的误差。

6.10.2 解决方案

按以下规定进行：

- a) 使用模板文件标准化输入流程；
- b) 启用输入校验工具；
- c) 关键步骤实施双人复核（如物性包选择、进料定义）。

6.11 调试流程

按以下步骤进行：

- a) 缩小问题范围：通过简化流程（如移除热集成）定位故障模块；
- b) 分步验证：先确保物性计算正确，再验证单元操作模型；
- c) 日志分析：利用软件生成的警告/错误信息追溯根源；
- d) 基准测试：对比经典案例（如二元蒸馏塔）验证模型基础逻辑；
- e) 通过系统性排查，可显著提升模拟结果的可靠性和计算效率。对于复杂问题，建议采用层次化建模（从简单模型逐步增加细节）。

7 数据资料管理

7.1 建立数据库

7.1.1 数据存储方案

应符合以下规定：

- a) 数据库选型：
 - 1) 关系型数据库：存储结构化数据（物性参数、设备规格、收敛日志）；
 - 2) 文档数据库：管理非结构化数据（模拟案例文件.bkp/.prz/.hsc/.xls等）；
 - 3) 时序数据库：记录动态模拟的实时数据流。
- b) 数据分类。

7.1.2 数据库功能强化

- 7.1.2.1 应具有良好的数据管理功能，包括数据的存储、检索、更新和删除等操作。
- 7.1.2.2 应具有自动化接口：通过 Python 脚本实现 Aspen COM 接口与数据库的交互。

7.2 数据备份

应定期对数据库进行备份，防止数据丢失或损坏。

7.3 安全存储

备份数据应存储在安全的位置，并定期进行检查和更新。

7.4 版本控制

7.4.1 版本管理工具

应对模拟计算的数据进行版本控制，确保每次修改都有记录，并能够追溯到原始数据和计算过程。

7.4.2 变更追溯

应使用专业的版本控制软件或者简单的命名规则进行管理。

7.5 权限管理

7.5.1 RBAC 模型

7.5.1.1 应对数据资料的访问权限进行管理，经授权的人员方能访问和修改数据。

7.5.1.2 角色定义应符合表 1 的规定。

表1 角色定义

角色	权限范围
工程师	读写自有项目，查看公共数据
审核员	只读所有数据，添加批注
管理员	全权限+用户管理

7.5.1.3 实现方式：使用 Microsoft Active Directory 集成权限系统完成。

7.5.2 敏感数据保护

应设置更严格的权限控制，未经授权的访问应采取审核措施。主要包括以下：

- a) 动态脱敏：对物性专利参数、气液平衡数据、反应动力学参数、催化剂配方等实施字段级加密；
- b) 审计日志：记录所有数据访问事件，保留 180 d。

7.6 数据文档化

应对模拟计算的数据进行文档化，应包括数据说明、数据格式、数据处理方法等内容。

7.7 数据安全

7.7.1 应采取必要的措施保护数据的安全性，包括加密、防火墙、访问控制等。主要包括以下：

- a) 网络隔离：模拟服务器部署在 DMZ 区，仅开放 VPN+双因素认证访问；
- b) 进程级防护：使用 Windows SRP 禁止未授权进程读取模拟源文件。

7.7.2 敏感数据应确保不被未经授权的人员访问和泄露并采取更严格的安全措施。主要包括以下：

- a) 硬件加密：对物性专利参数、气液平衡数据、反应动力学参数、催化剂配方等数据使用 HSM（硬件安全模块）存储；
- b) 水印追踪：在导出报告中嵌入隐形数字水印（如 PDF Metadata）。

7.8 数据共享和交流

7.8.1 应鼓励团队合作的数据共享和交流。方式包括以下：

- a) 私有化部署：文件共享及任务协同；
- b) 云原生方案：如 Azure DevOps，支持 HYSYS 文件在线预览与批注。

7.8.2 通过内部网络、云存储或者专门的数据共享平台应能进行数据共享和交流。方式包括以下：

- a) 中间格式：导出为 CAPE-OPEN 标准格式（.xml）实现跨软件兼容；
- b) API 网关：通过 REST API 提供数据访问服务（OAuth2.0 鉴权）。

7.9 定期审查和更新

7.9.1 应定期审查数据资料，及时更新和清理过期或无用的数据。

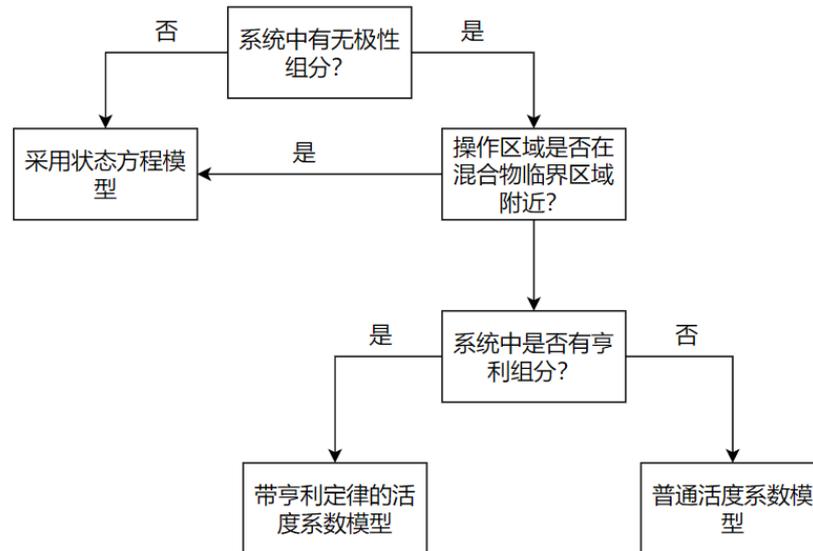
7.9.2 建议的生命周期策略应符合表 2 的规定。

表2 建议的生命周期策略

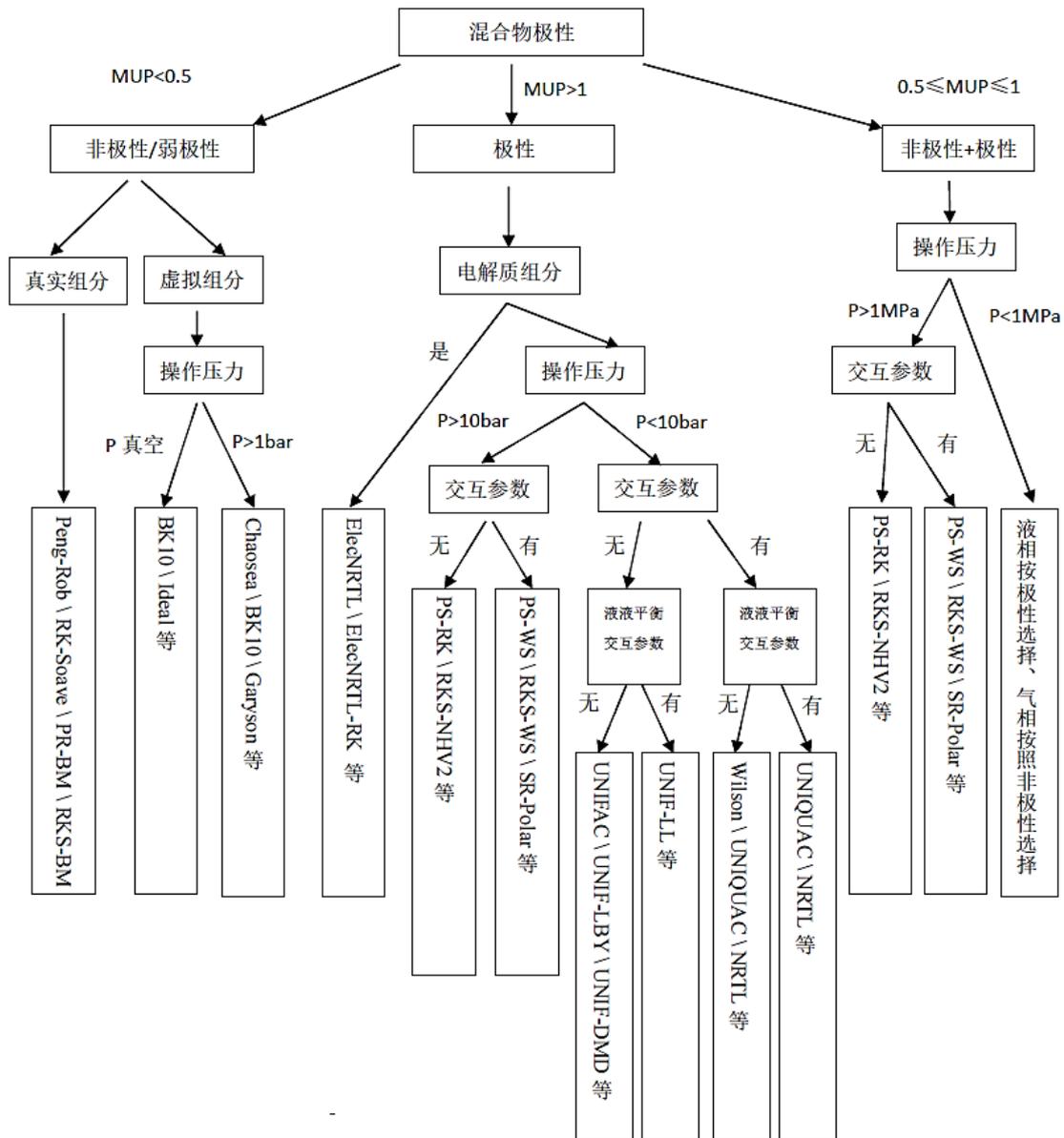
数据类型	保留期限	处置方式
原始输入文件	永久	归档至蓝光存储
临时收敛文件	30 d	自动删除
实验验证数据	10年	迁移至冷存储

7.9.3 应保持数据库的清洁和整洁。

附录 A
(规范性)
化工模拟热力学方程选择流程图



图A.1 化工模拟热力学方程选择流程图



图A. 2 化工模拟热力学方程选择流程细节图

附录 B
(资料性)
模拟结果表

表B.1 模拟结果表

项目	单位	流股编号			
		1	2	3	4
说明	/				
温度	°C				
压力	bar(a)				
质量气化分率	/				
体积流量	m ³ /h				
质量流量	组成1	kg/h			
	组成2				
	组成3				
质量分率	组成1	/			
	组成2				
	组成3				
摩尔流量	组成1	kmol/h			
	组成2				
	组成3				
摩尔分率	组成1	/			
	组成2				
	组成3				
泡点温度	°C				
露点温度	°C				
气相物性数据	密度	kg/m ³			
	比热容	kJ/kg·K			
	导热系数	W/m·K			
	粘度	cP			
	临界压力	bar			
	绝热因子	/			
液相物性数据	密度	kg/m ³			
	比热容	kJ/kg·K			
	导热系数	W/m·K			
	粘度	cP			
	表面张力	dyne/cm			
	压缩因子	/			
	绝热因子	/			