

## Программное обеспечение ARKS FK – назначение и особенности

### Предисловие

Продолжаем подробно рассказать о приложениях TSS-ARKS, поддерживающих подход, использующий моделирование на основе кинетики. Этот выпуск посвящен программному обеспечению ARKS FK - мощному члену семейства TSS-ARKS, служащему для создания кинетических моделей.

### Назначение ARKS FK

**ARKS FK** (Формальная кинетика) является одним из ключевых компонентов **программного обеспечения TSS-ARKS**. Он предназначен для создания сложных многостадийных формальных, основанных на конверсиях, кинетических моделей на базе имеющихся наборов экспериментальных данных, полученных методами термического анализа, адиабатической калориметрии, манометрии и т.д. Кроме того, **ARKS FK** обеспечивает быстрое и надежное моделирование процессов в периодических реакторах идеального перемешивания. Оценка кинетики осуществляется с использованием современного метода нелинейной оптимизации. Используемые областные методы численного интегрирования обеспечивают точное численное решение жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений, представляющих модель.

Программное обеспечение **ARKS FK** унаследовало лучшие качества своего предшественника **ForK** и имеет множество новых функций - новый интерфейс, расширенный набор допустимых структур моделей, переработанные и улучшенные алгоритмы, полностью переработанную документацию и т.д. **ARKS FK** поддерживается видеоуроками, которые помогают в освоении программного обеспечения:

- **FK Урок 1 - создание кинетической модели;**
- **FK Урок 2 – определение адиабатического периода индукции (TMR);**
- **FK урок 3: определение критической температуры.**

Удобный проектно-ориентированный интерфейс облегчает применение **ARKS FK**. Все это делает **ARKS FK** очень полезным инструментом для всех, кто занимается исследованием кинетики реакций, оценкой термической опасности химических продуктов и т.д.

**ARKS FK** состоит из двух основных модулей – «Simulation» и «Estimation». Доступ к этим модулям обеспечивает оболочка пакета **ARKS FK**, что делает использование пакета более удобным и наглядным.

### Работа с данными

#### Загрузка данных

**ARKS FK** позволяет обрабатывать данные с несколькими откликами, содержащие интегральные и/или производные отклики: тепло, газообразование, давление и потерю массы.

**ARKS FK** обеспечивает прямой доступ к экспериментальным данным, хранящимся в **ARKS AC** или **ARKS TA** (или русифицированный аналог **ARKS TA<sub>r</sub>**) для импорта данных. Предусмотрена также возможность вставки откликов из буфера обмена.

#### Хранение данных

**ARKS FK** сохраняет исходные и обработанные данные во внутренней базе данных. База данных состоит из томов данных. Каждый том данных включает в себя несколько наборов данных; каждый набор данных может содержать результаты отдельного опыта, результаты моделирования, условия эксперимента и созданную кинетическую модель.

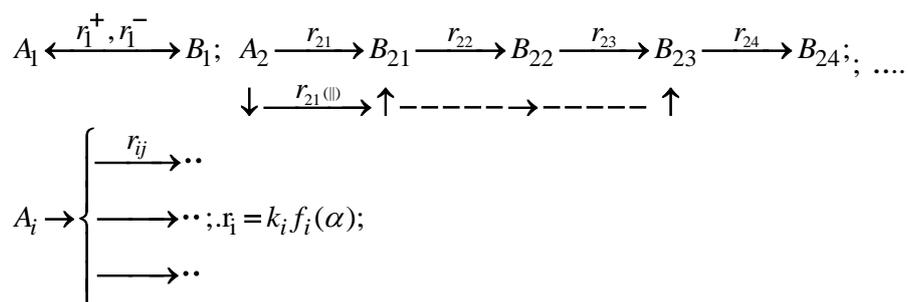
**ARKS FK** позволяет сохранять проекты с данными для создания модели. Каждый проект включает в себя всю информацию, подготовленную для оценки кинетических параметров - кинетическую модель, первоначальное предположение о параметрах и их пределах, ссылки на наборы экспериментальных данных и т. д.

### Физические свойства веществ

Могут быть определены вручную или загружены из встроенной базы данных свойств, которая может пополняться пользователем.

### Типы кинетических моделей

**ARKS FK** поддерживает применение сложных многостадийных формальных кинетических моделей, основанных на степенях превращения (конверсий) в качестве переменных состояния. Модель может включать несколько последовательных или параллельных стадий, несколько независимых реакций, обратимые стадии, реакции, зависящие от давления, реакции с разветвленными путями, реакции с плавлением:



Модель представляется системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}
 d\alpha_i / dt &= \sum_{(j)} r_{ij}; \quad r_{ij} = k_{ij}(T) \cdot f_j(\alpha_i); \\
 k_{ij}(T) &= k_{ij0} \exp(-E_{ij} / R / T)
 \end{aligned}$$

Которая дополняется соответствующими начальными условиями и уравнениями, связывающими конверсии с измеряемыми откликами:

$$dQ / dt = \sum_{(i)} \sum_{(j)} Q_{ij}^{\infty} r_{ij}; \quad dG / dt = \sum_{(i)} \sum_{(j)} G_{ij}^{\infty} r_{ij}; \dots$$

Функция  $f(\alpha)$  - это математическая модель стадии, которая выбирается из библиотеки моделей. Библиотека содержит обширный набор моделей, таких как модели N-порядка и автокаталитические модели, наборы топочимических моделей (например, модели Авраами-Ерофеева, Праута-Томпкинса), модели с диффузионно-контролируемыми стадиями модели Гинстлинга-Броунштейна, Яндера), модель с плавлением и т. д.

Создание модели осуществляется просто и удобно – необходимо создать схему реакции и задать соответствующие уравнения для скоростей стадий из списка доступных «элементарных» моделей. Никакого программирования не требуется.

формальные модели очень гибкие и удобные в использовании. Например, именно этот класс моделей применяется в области термического анализа и адиабатической калориметрии. При оценке опасности реакции формальные модели могут быть успешно использованы для:

- Анализа термической стабильности продукта и определения индикаторов реакционной опасности.
- Моделирования аварийного сценария потери контроля в реакторе периодического действия.
- Моделирования теплового взрыва в твердых телах для оценки опасности, связанной с их хранением и транспортировкой.

Более того, с некоторыми предосторожностями формальные модели могут также использоваться для моделирования теплового взрыва в жидкостях или для моделирования аварии в сочетании с определением размеров предохранительных клапанов, когда свойства смеси не сильно зависят от ее состава или когда это касается газообразных систем и т. д.

**Полезные ссылки**

1. A. Kossoy, Yu. Akhmetshin, Identification of kinetic models for the assessment of reaction hazards, Process Safety Progress, 2007, V. 26, N3 September 2007, pp. 209-220
2. [CISP Newsletter](#) N6 Kinetics-based simulation approach. Identification of Kinetic Models for the Assessment of Reaction Hazards.
3. [CISP Newsletter](#) N7 Kinetics-based simulation approach. Model-free versus Model-based kinetics: Pros and Cons. DOI: 10.13140/RG.2.2.32592.25602
4. [CISP Newsletter](#) N17 Example of kinetic analysis of complex thermogravimetry data (A. Kossoy, A. Lopatin). DOI: 10.13140/RG.2.2.16819.35364
5. [CISP Newsletter](#) N19 Kinetics-based simulation - the key to solving the scaling problem DOI: 10.13140/RG.2.2.23578.31683
6. А Бенин, А Коссой, Термические опасности и термическая безопасность энергонасыщенных веществ, химических процессов и объектов их применения, 2021 г., Инфра-Инженерия, 728 с. <https://infra-e.ru/products/thermalhazardsandthermalsafety>