

Программное обеспечение ARKS TE – назначение и особенности

Предисловие

Обычно наши информационные бюллетени направлены на обсуждение различных методических аспектов применения кинетического моделирования для оценки реакционной опасности и подобных задач. Теперь пришло время подробно рассказать о приложениях [TSS-ARKS , поддерживающих этот подход](#). Такова цель этого и некоторых последующих информационных бюллетеней.

Первый выпуск посвящен программному обеспечению ARKS TE - новому мощному члену семейства TSS-ARKS.

Назначение ARKS TE

ARKS TE представляет собой мощный, не имеющий аналогов, инструмент для моделирования теплового взрыва в твердых телах и высоковязких жидкостях, когда теплопроводность определяет внутренний теплообмен, а конвекцию и диффузию можно не учитывать. Это один из ключевых компонентов программного обеспечения TSS-ARKS. **ARKS TE** работает с формальными кинетическими моделями химических реакций. Во избежание возможной путаницы следует отметить, что под термином «тепловой взрыв» здесь подразумевается то же самое физическое явление, которое часто называют «slow cook-off». Ничего общего с детонацией это не имеет.

Проектно-ориентированный пользовательский интерфейс визуализирует структуру моделируемого проекта и обеспечивает легкий доступ к каждому компоненту проекта. Таким образом, интерфейс проведет вас по всем этапам решения проблемы.

ARKS TE унаследовал лучшие черты своего предшественника ThermEx Standard и имеет множество новых качеств, включая расширенный набор объектов, которые можно моделировать, новый интерфейс, существенно переработанные расчетные модули на основе улучшенных алгоритмов, видеоуроки, помогающие в освоении программного обеспечения.

С физико-математической точки зрения моделирование теплового режима твердого объекта (и его частного случая - теплового взрыва) сводится к численному интегрированию дифференциального уравнения теплопроводности в частных производных с экзотермической реакцией как внутренним источником энергии [1]. Существование критических условий, разделяющих взрывоопасные и невзрывоопасные области, возможные резкие градиенты температуры и степеней превращения и некоторые другие факторы усложняют расчеты; поэтому особое внимание уделялось тщательному выбору и корректировке математических методов.

Пакет состоит из двух автономных модулей – ARKS TE-Standard и ARKS TE-Pro.

Кинетика

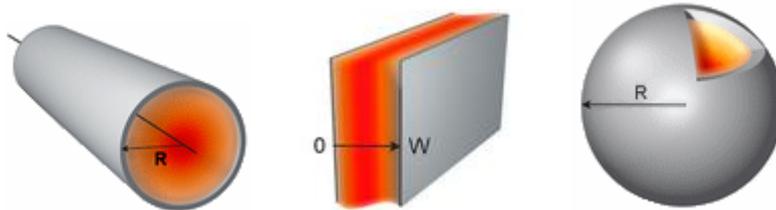
ARKS TE использует формальные кинетические модели. Их можно создать с помощью программы **ARKS FK** и импортировать в проект. Для этой цели **ARKS TE** обеспечивает прямой доступ к базе данных **ARKS FK**, что позволяет легко импортировать кинетические модели. Кинетика также может быть определена пользователем вручную.

Формальная модель основана на степенях конверсии как переменных состояния и может представлять собой сложную многостадийную реакцию, включающую обратимые стадии, стадии, зависящие от давления, реакции с разветвленными путями и т. д. (подробнее см. [2, 3]).

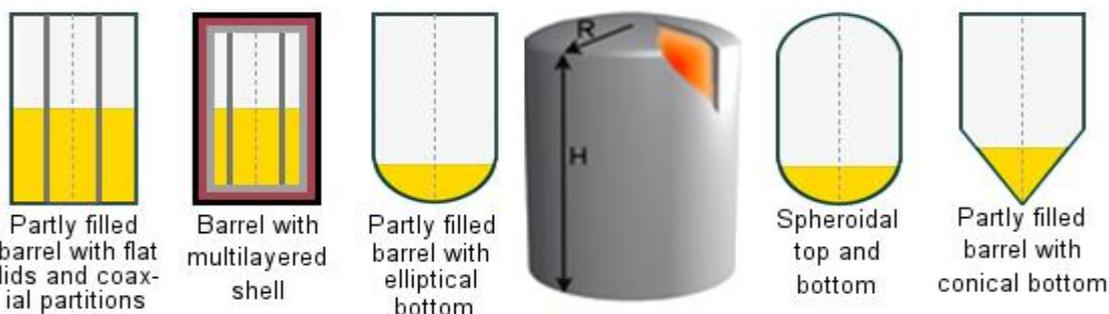
Геометрии, поддерживаемые TE-Standard

Модуль поддерживает объекты predetermined геометрии. Можно моделировать три класса объектов.

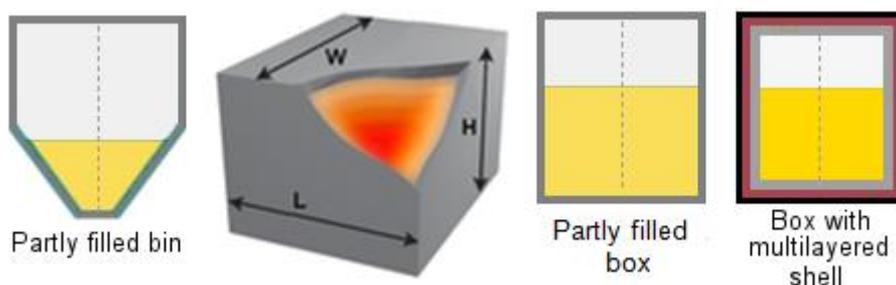
1. **Одномерные объекты:** бесконечный цилиндр, бесконечная пластина, сфера; Доступны инертные перегородки и инертная оболочка. Цилиндр может иметь соосную цилиндрическую полость; аналогично Сфера может иметь симметрично расположенную сферическую полость.



2. **Двумерные объекты:** частично или полностью заполненный цилиндрический сосуд с инертной оболочкой и коаксиальными перегородками. Возможно моделирование реакции и оценка повышения давления (суммы давления инертного газа, давления пара (при его наличии) и давления газообразных продуктов) в свободном объеме сосуда. Предусмотрена возможность моделирования частично заполненных бочек с оболочкой и со сферическими, эллиптическими или коническими крышками. Многослойные оболочки доступны для сосуда с плоской крышкой и скоро будут доступны для сосудов с неплоскими крышками.



3. **Трехмерные объекты:** частично заполненный прямоугольный ящик или контейнер(бункер) с оболочкой. Предусмотрено моделирование реакции и оценка повышения давления в свободных объемах объектов. Для ящика возможно задание многослойной оболочки.



Классической задачей моделирования теплового взрыва является прогнозирование опасностей, возникающих при обращении с изделиями и упаковками, содержащими энергетические материалы или самореактивные продукты. Моделирование может помочь в выборе безопасных условий использования, транспортировки или хранения таких объектов. Типичным примером является определение температуры самоускоряющегося разложения (ТСУР).

Возможность моделирования частично заполненных сосудов различной геометрии в сочетании с прогнозированием повышения давления в сосуде, предлагаемая **ARKS TE**, существенно расширяет сферу его применения до анализа различных сценариев химических процессов, протекающих с экзотермическими реакциями. Это еще одна уникальная особенность программы.

Режимы моделирования

Для упрощения использования ARKS TE предлагаются три специализированных режима моделирования:

- **Runaway** – моделирование развития теплового взрыва, оценка индукционного периода взрыва;

- **Critical search** – автоматическое определение критической температуры и индукционного периода для объекта заданной геометрии и размера;
- **SADT** – автоматизированное определение температуры самоускоряющегося разложения (SADT) и температуры самоускоряющейся полимеризации (SAPT) в соответствии с Рекомендациями ООН по перевозке опасных грузов – см. [4, 5];

Уникальной особенностью последней версии **ARKS TE** является режим **Validation**, цель которого заключается в выборе более адекватной кинетической модели при наличии нескольких конкурирующих моделей. Моделирование проводится последовательно для нескольких кинетических моделей.

Валидация выполняется по одному из критериев, основанному на данных взрывного эксперимента:

- **Критический индукционный период** определяется как время достижения перегрева либо в максимальной точке – *Критерий 1*, либо в заданной точке – *Критерий 2*;
- **Время достижения определенной температуры** либо в максимуме – *Критерий 3*, либо в определенной точке – *Критерий 4*.

Некоторые практические примеры применения **ARKS TE** приведены в [6 – 8].

Граничные условия

ARKS TE -Standard позволяет моделировать объект при граничных условиях (ГУ) следующих типов:

- ГУ первого рода – определяется температура на внешней поверхности;
- ГУ второго рода – определяется тепловой поток на внешней поверхности;
- ГУ третьего рода - конвективный теплообмен в соответствии с законом Ньютона.
- ГУ общего вида является расширением ГУ 3-го рода, так как включает в себя член, учитывающий лучистый теплообмен. Этот тип ГУ доступен для 2- и 3Д-объектов.

Параметры ГУ могут быть как постоянными, так и определяться как табличные функции времени. Более того, отдельные ГУ могут быть определены на каждой поверхности двух- или трехмерного объекта.

Подготовка данных

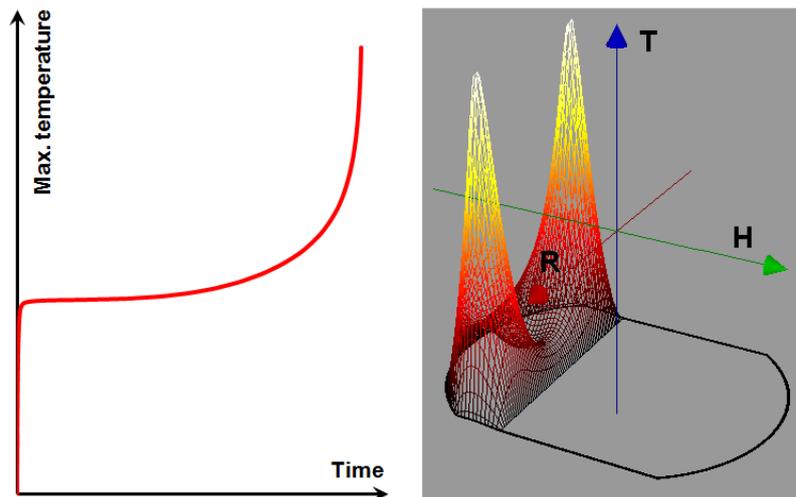
ARKS TE основан на концепции проекта. Проект объединяет все необходимые для моделирования данные – кинетическую модель, описание объекта (геометрия, размеры, граничные условия), физические свойства реагирующего вещества и конструкционных материалов, тип моделирования, параметры численного метода.

Проекты хранятся во внутренней базе данных. База данных состоит из томов данных. Каждый объем данных включает в себя количество проектов.

Помимо базы данных проектов **ARKS TE** использует отдельную базу данных для хранения свойств веществ: теплоемкости, плотности, теплопроводности и давления паров. Ее может пополнить Пользователь. База данных свойств позволяет задавать постоянные и зависящие от температуры свойства. В последнем случае имеется возможность аппроксимировать свойство соответствующей аналитической функцией, если это свойство задано в табличной форме.

Удобный способ представления результатов

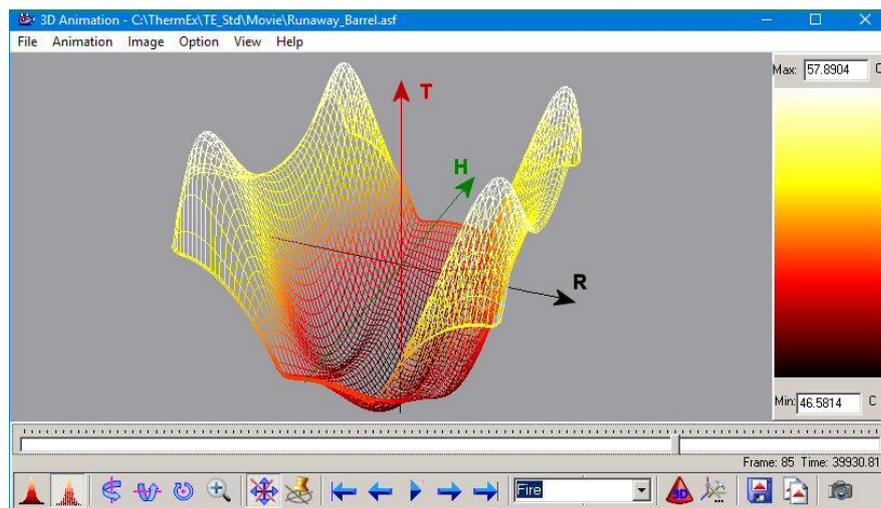
Результаты моделирования представляются в графической форме в виде эволюционных кривых (зависящие от времени температуры, давления, конверсии) и в виде цветового градиента распределения температуры в процессе моделирования (3-Д график для 2- и 3-мерных объектов), а также в виде изолиний температуры и концентраций.



Результаты в табличном и графическом форматах можно скопировать в буфер обмена и затем перенести во внешнюю программу, например MS Excel (табличные данные) или графический редактор (графики).

Аниматор

При запуске моделирования вы можете запросить запись текущих результатов и, таким образом, создать фильм для подробного анализа результатов после завершения моделирования. Затем фильм можно воспроизвести с помощью вспомогательного модуля Animator.



ARKS TE-Pro

Этот уникальный модуль предназначен для моделирования созданных пользователем объектов сложной геометрии. Можно создать два класса объектов:

- Пользовательский набор бесконечных стержней (прямоугольных, треугольных, круглых или эллиптических); допускаются перекрытие и взаимное проникновение; каждый стержень может иметь свои уникальные свойства, включая кинетику;
- Пользовательский набор осесимметричных твердых объектов, полученных вращением вокруг вертикальной оси; допускаются перекрытие и взаимное проникновение; каждая часть может иметь свои уникальные свойства, включая кинетику.

ARKS TE- Pro использует оригинальный метод создания нерегулярной пространственной сетки на основе треугольников или ячеек Вороного. Численное моделирование реализовано путем применения метода, основанного на концепции контрольных объемов.

Полезные ссылки

1. A. Kossoy, I Sheinman, Evaluating thermal explosion hazard by using kinetics-based simulation approach, Process Safety and Envir. Protection. Trans IchemE, V. 82, Issue B6, (2004), p.421-430. (B6 Special Issue: Risk Management)
2. 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
3. [CISP Newsletter](#) N6 Kinetics-based simulation approach. Identification of Kinetic Models for the Assessment of Reaction Hazards.
4. A. Kossoy, I. Sheinman. "Comparative Analysis of the Methods for SADT Determination", Journal of Hazardous Materials, Vol 142, 2007, pp. 626-638
5. [CISP Newsletter](#) N5. Applying the Kinetics-based simulation approach for determination of the SADT.
6. [CISP Newsletter](#) N10. Kinetics-based simulation approach. More about applying simulation for evaluating reactive hazard of Li-ion battery
7. [CISP Newsletter](#) N13. Kinetics-based simulation of thermal explosion – some examples of experimental validation
8. A. Kossoy, V. M. Belokhvostov, E. Yu. Koludarova, Thermal decomposition of AIBN: Part D: Verification of simulation method for SADT determination based on AIBN benchmark, Thermochimica Acta, (2015), 2015, Volume 621, pp. 36-43