

Серия "Термическая безопасность -
Усовершенствованное моделирование на
основе кинетики реакций"
(Thermal Safety Series – Advanced Reaction Kinetics
Simulation)

Программное обеспечение

TSS-ARKS

Санкт-Петербург, 2023 год

Email: office@cisp.spb.ru; Web: <http://www.cisp.spb.ru>



Программное обеспечение Thermal Safety Series - Advanced Reaction Kinetic Simulation (TSS-ARKS)

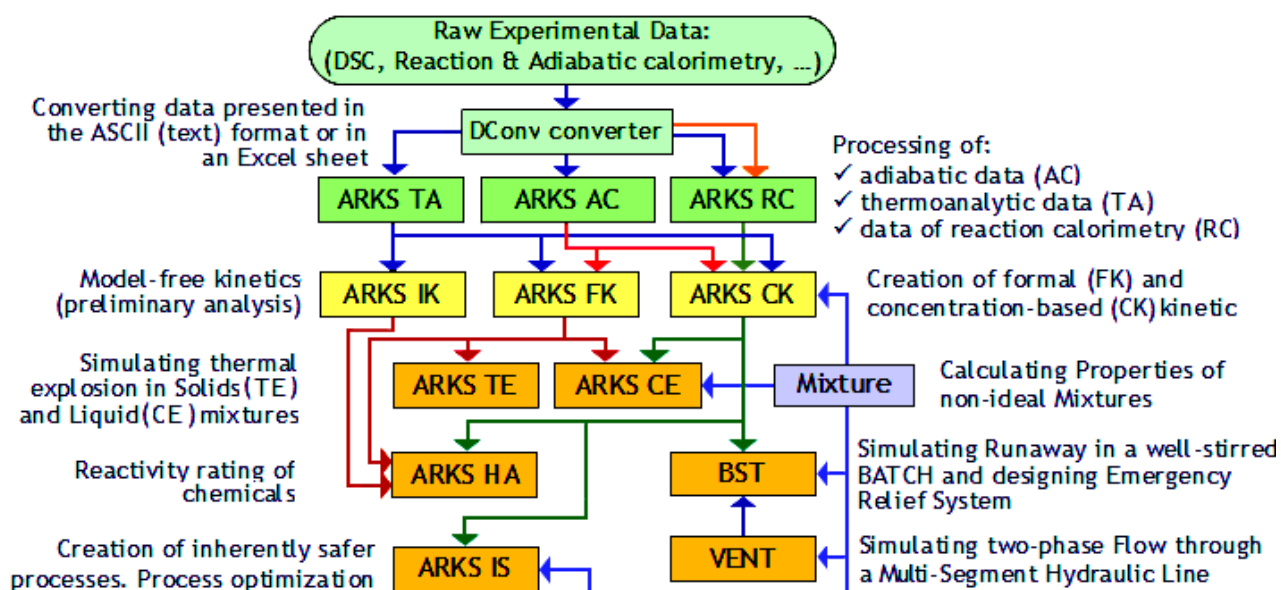
не имеющая аналогов методология и программное обеспечение для оценки реакционных опасностей химических процессов и продуктов.

В CISP мы твердо убеждены, что будущее науки о химических продуктах и химических процессах, включая такую важную область, как термическая безопасность химических процессов и продукции, в большой степени зависит от цифровых методов. Для достижения этой трансформации мы связываем методы калориметрических экспериментов, оценки кинетики и моделирования процессов с соответствующим программным обеспечением..

Чтобы поддержать вас на всех этапах ваших проектов, CISP разрабатывает синергетическую концепцию, которая включает в себя не имеющие аналогов методы, программное обеспечение TSS-ARKS и консультационные услуги.

CISP предлагает:

- Современные методы интерпретации и анализа данных, полученных с помощью различных калориметрических методов;
- Мощные методы для создания кинетических моделей реакций различных типов;
- Современную методологию, основанную на моделировании, для прогнозирования и предотвращения аварий, связанных с потерей контроля над реакциями в химических продуктах и процессах;
- Все методы поддерживаются удобным программным обеспечением TSS-ARKS, позволяющим исследователю сконцентрироваться на поставленной проблеме, а не на трудностях, связанных с математическим аппаратом, требуемым для ее решения;
- Компоненты TSS-ARKS взаимосвязаны друг с другом, обеспечивая единую не имеющую аналогов систему;
- Каждый компонент TSS-ARKS имеет уникальный набор функций, отличающий его от других коммерческих предложений. Компоненты TSS-ARKS могут успешно использоваться как самостоятельные программы.



Общие характеристики Программного обеспечения

- Система взаимосвязанных компонентов, основанная на современной тщательно проработанной методологии
- Применение самых современных математических методов
- Объединение математических методов и опыта исследователя в единую стратегию
- Управление несколькими проектами
- Использование внутренних баз данных по физическим свойствам веществ
- Гибкая графика
- Общие базы данных кинетических моделей
- Общие элементы проектно-ориентированного пользовательского интерфейса
- Манипуляционный контроль точности
- Формирование отчетов в MS Word
- Интерактивная система помощи
- [Видеоуроки](#) для каждого приложения, помогающие освоить их применение
- Полный комплект руководств пользователя
- Минимальные аппаратные требования: Pentium V, многоядерный, установленные Windows 8, 10, 11 MS Word и Excel

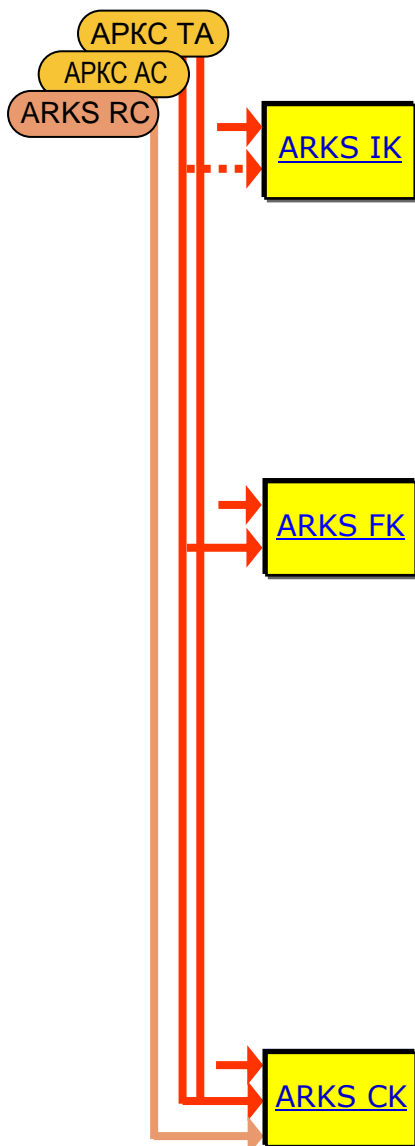
TSS-ARKS - кому адресовано?

- научно-исследовательским центрам химических и фармацевтических компаний;
- научно-исследовательским центрам производителей и пользователей энергетических материалов;
- научно-исследовательским центрам производителей и пользователей аккумуляторных батарей;
- физико-химическим лабораториям;
- научно-исследовательским центрам, занимающимся оценкой опасных грузов (UN TDG, IMO, REACH и др.), а также классификацией химических веществ (UN GHS, CLP и др.);
- консалтинговым фирмам, занимающимся химическими процессами и их термической безопасностью;
- химико-технологическим и физико-химическим факультетам университетов

TSS-ARKS - преемник известной серии TSS

TSS-ARKS унаследовал все лучшие качества TSS. Приложения TSS-ARKS имеют более современный интерфейс, улучшенные алгоритмы, новые полезные опции, полностью переработанные справки и руководства и многое другое.

Приложения для оценки кинетики



Изоконверсионная кинетика: быстрый предварительный кинетический анализ:

- Использование данных термического анализа (ДСК, ТГ, калориметрия теплового потока);
- **Использование данных адиабатической калориметрии (скоро);**
- Выявление сложности реакции;
- Генерирование начальных оценок для энергии активации;
- Статистическая оценка результирующей кинетики;
- Моделирование протекания реакции в температурном диапазоне, перекрытом экспериментами;
- Грубые оценки показателей опасности (адиабатический период индукции TMP (Time to Maximum Rate), термическая стабильность)

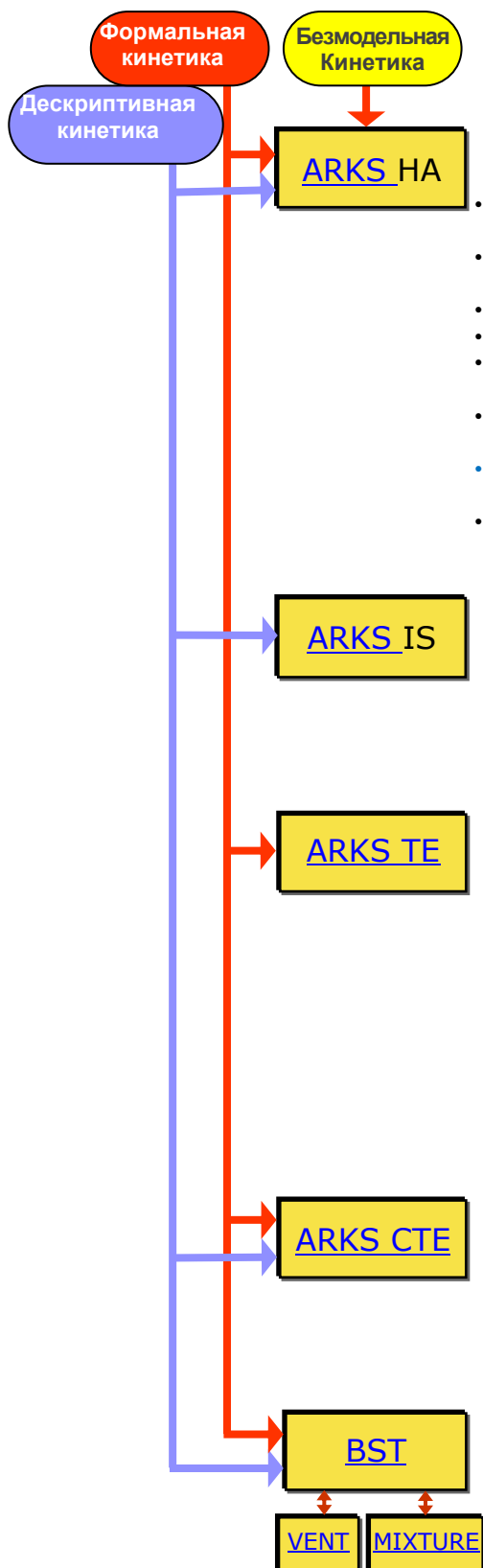
Формальные модели, основанные на конверсиях:

- Одновременное использование многооткликовых данных различных типов экспериментов, анализ данных с переменной тепловой инерцией;
- Внутренняя база данных физических свойств;
- Оценка параметров сложных формальных моделей с помощью нелинейной оптимизации;
- Модель может включать несколько независимых, параллельных и последовательных стадий:
 - Разветвленные пути; обратимые стадии,
 - Скорости стадий, зависящие от давления,
 - Модель с плавлением,
- Удобный метод создания сложной модели без программирования;
- Статистическая оценка результирующей кинетики;
- Моделирование реактора периодического действия идеального перемешивания при различных тепловых режимах;
- Расчет показателей опасности (адиабатический TMP, термическая стабильность)

Дескриптивные модели на основе концентраций:

- Одновременное использование многооткликовых данных различных типов эксперимента
- Автоматическое создание многостадийных моделей по стехиометрической схеме реакции, скорость стадии подчиняется обобщенному закону действующих масс
- Внутренняя база данных физических свойств или подключение к программе MIXTURE
- Анализ данных с переменной тепловой инерцией
- Оценка параметров сложных моделей с помощью нелинейной оптимизации;
- Статистическая оценка результирующей кинетики;
- Моделирование реакторов идеального смешения периодического, полу-периодического, проточного типа, и реакторов идеального вытеснения при различных тепловых режимах;
- Расчет показателей опасности (адиабатический TMP, термостабильность).

Приложения для оценки опасности реакций



Оценка реакционных опасностей:

- Поддержка всех типов кинетики, создаваемых программами IK, FK и СК;
- Автоматическое определение индекса реакционности NFPA - стандартный и усовершенствованный методы;
- Автоматическое определение адиабатического TMP, ADT24 и TER;
- Автоматическая оценка изотермической термостабильности (TCL);
- Автоматическая оценка теплового старения с учетом сезонных колебаний температуры;
- Автоматическое определение ТСУР для жидкостей в соответствии с TDG и GHS
- **Автоматическое определение критических параметров теплового взрыва для жидкостей (скоро)**
- Определение размеров предохранительного устройства, метод Leung Omega или ISO 4126-10

Разработка внутренне безопасных процессов:

- Обеспечение безопасности нормального рабочего режима
- Обеспечение максимально возможной безопасности в случае аварии
- Анализ чувствительности теплового режима к отклонениям в системе управления

Оценка реакционной опасности твердых продуктов:

- Автоматическое определение ТСУР (тест UN H1);
- Автоматическое определение критической температуры;
- Моделирование теплового взрыва для различных геометрий:
 - Бесконечная пластина, цилиндр, сфера
 - Частично заполненная бочка с плоскими, сферическими, эллипсоидными или коническими крышками;
 - Частично заполненный прямоугольный ящик и бункер;
 - Многослойные стенки для частично заполненных бочки с плоскими крышками и ящика;
- Оценка давления газа/паров в свободном объеме сосуда;
- **Валидация кинетики, основанная на данных взрывного эксперимента.**

Оценка реакционной опасности жидких продуктов:

- Автоматическое определение ТСУР (испытание UN H1)
- Автоматическое определение критической температуры
- Моделирование теплового взрыва для различных геометрий

Проектирование системы аварийного сброса давления:

- Моделирование теплового взрыва в реакторах периодического действия (BST)
- Расчет двухфазного потока вдоль многосекционного трубопровода (VENT)
- Расчет свойств неидеальных многокомпонентных смесей (MIXTURE)
- Определение размеров предохранительных устройств (BST)

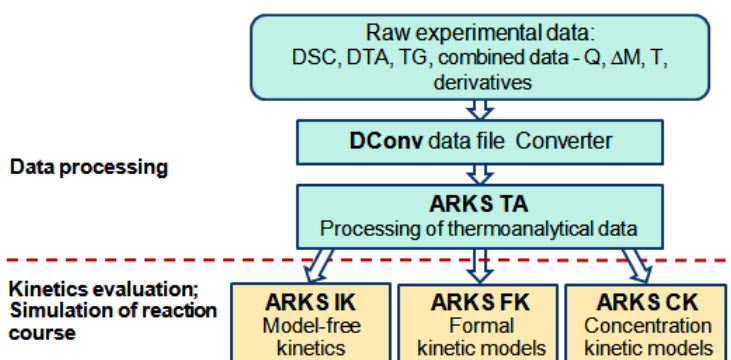
Готовые решения

Программное обеспечение TSS-ARKS включает в себя более 12 приложений. Во многих случаях нет необходимости использовать полную систему. Более того, хотя основная цель TSS-ARKS - помощь в оценке реакционных опасностей, его компоненты могут успешно использоваться в различных исследованиях, не связанных с опасностью. Мы можем предложить несколько программных подсистем, адаптированных к конкретным практическим задачам.

Здесь вы не найдете исчерпывающих характеристик программ, входящих в предлагаемые подсистемы. Мы упомянули лишь некоторые особенности, имеющие отношение к области применения. Для более подробного описания запросите спецификации TSS-ARKS.

Подсистема для термического анализа

Эта подсистема предназначена для физико-химических лабораторий, которые в основном применяют методы термического анализа.



Она состоит из программ ARKS TA, IK и/или FK и/или CK.

ARKS TA (и русифицированная версия **ARKS Tar**) - это мощная программа обработки данных, способная работать с данными различных калориметрических приборов (ДСК, калориметрия теплового потока, ДТА), данными ТГ и данными комбинированных методов (ДСК+ТГ, ДТА+ТГ).

Она позволяет не только комплексно обрабатывать исходные экспериментальные данные, но и поддерживает определение физических свойств вещества, таких как удельная теплоемкость, параметры фазового перехода, теплопроводность жидкостей.

Утилита конвертера данных **DConv** обеспечивает простой метод преобразования данных, так что ARKS TA/ ARKS Tar можно использовать в сочетании с любым термоаналитическим прибором.

Линейка программ **ARKS IK/FK/CK** позволяет создавать кинетику реакций различных типов. Выбор зависит от типа исследований, проводимых в лаборатории. Типичным выбором для термоаналитика будет либо ARKS IK, либо ARKS FK, но мы рекомендуем рассматривать их как пару взаимодополняющих программ.

Все программы имеют мощные модули для моделирования поведения реакции в различных условиях, поэтому они могут успешно использоваться для решения различных практических задач - от анализа термостабильности до оценки теплового режима реактора.

ARKS IK поддерживает создание так называемой безмодельной кинетики. Это удобный инструмент для простого и быстрого предварительного анализа данных.

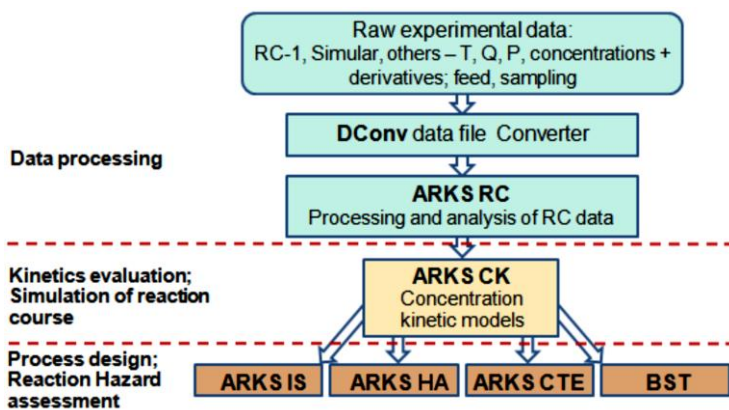
ARKS FK предназначен для создания сложных многоступенчатых формальных моделей на основе конверсии.

ARKS CK позволяет создавать более привычные для химика модели сложных реакций на основе концентрации.

Подсистема для реакционной калориметрии

Эта подсистема предназначена для химико-технологической лаборатории, в которой исследуют химические реакции, применяя реакционную калориметрию или лабораторные реакторы. Он состоит из программ ARKS RC, CK, IS и/или ARKS HA и/или CE и/или BST Package.

ARKS RC обеспечивает обработку данных, включающих тепловыделение, отклики давления и концентрации. Данные могут быть получены в ходе экспериментов, проводимых в режиме BATCH или semi-BATCH с многокомпонентными реагирующими смесями.



Утилита конвертера данных [DConv](#) обеспечивает простой метод преобразования данных, что позволяет использовать ARKS RC в сочетании с любым доступным реакционным калориметром. Последняя версия программы поддерживает оценку накопления тепла в реакторе, что позволяет предварительно оценить реакционную опасность процесса.

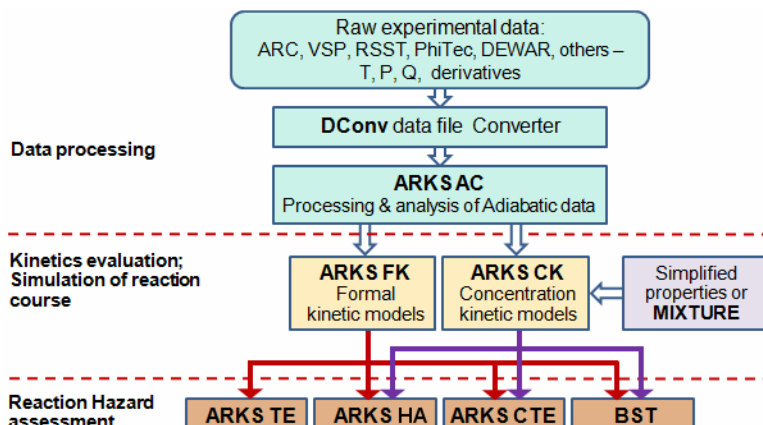
[ARKS CK](#) позволяет создавать сложные многостадийные концентрационные модели реакций. Сочетание современных математических методов численного интегрирования нелинейных моделей реакций и нелинейной оптимизации в сочетании с расчетом переменных физико-химических свойств смесей делает программу не имеющим аналогов инструментом кинетического анализа.

Линейка программ [ARKS IS/HA/CTE/BST](#) позволяет решать различные практические задачи. Выбор зависит от вида исследований, проводимых в лаборатории.

[ARKS IS](#) может помочь в проектировании процесса. Она позволяет оптимизировать процесс, включает уникальный метод проектирования изначально более безопасного процесса и имеет не имеющий аналогов модуль анализа стабильности и устойчивости технологического режима. ARKS IS можно рекомендовать всем, кто занимается химической инженерией.

Подсистема для адиабатической калориметрии

Адиабатическая калориметрия различных типов (ARC, VSP, DEWAR и т.д.) - метод, который был специально разработан для изучения реакционных опасностей. Поэтому данное подмножество адаптировано для лаборатории, основной интерес которой заключается в оценке реакционных опасностей. Подсистема включает программы ARKS AC, FK и/или CK, а также пакет, состоящий из ARKS HA, TE, CTE и BST.



[ARKS AC](#) - это уникальная программа обработки данных, способная обрабатывать данные о температуре и давлении, полученные с применением различных адиабатических приборов (ARC, VSP, Phi-Tec I и II, DEWAR и других).

Утилита конвертера данных [DConv](#) обеспечивает простой метод преобразования данных, так что ARKS AC можно использовать в сочетании с любым типом адиабатического калориметра.

Программный пакет предлагает уникальный набор передовых методов анализа данных, таких как оценка кинетики, не имеющий аналогов усовершенствованный метод коррекции данных на тепловую инерцию, расчет адиабатического TMR и расчет размеров систем аварийного сброса давления.

Для оценки кинетики используются программы ARKS FK и/или IK и/или CK. Выбор зависит от профиля лаборатории. Если основной интерес заключается в оценке опасности химически активных веществ (особенно твердых), то правильным выбором будет ARKS FK. Если лаборатория занимается исследованиями безопасности технологических процессов, то мы рекомендуем рассмотреть ARKS CK в качестве кандидата. Пара ARKS FK+CK перекрывает широкий спектр проблем и поэтому обеспечивает максимальную гибкость.

[ARKS IK](#) поддерживает создание так называемой безмодельной кинетики. Это удобный инструмент для простого и быстрого предварительного анализа данных. **Оценка безмодельной кинетики на основе адиабатических данных является уникальной особенностью программы.**

ARKS FK предназначена для создания сложных многостадийных формальных моделей на основе конверсий.

ARKS CK позволяет создавать более привычные химиче модели сложных реакций на основе концентрации.

Последняя группа программ служит для оценки опасностей реакции.

ARKS TE и **CTE** предназначены для моделирования тепловых взрывов в твердых телах и жидкостях.

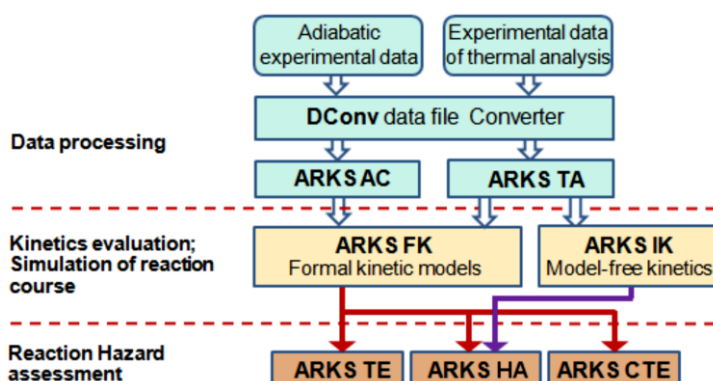
ARKS HA обеспечивает простое и быстрое определение показателей опасности химических веществ.

Пакет **BST** предназначен для проектирования систем аварийного сброса давления (САСД).

Состав последней группы также зависит от профиля лаборатории. Для тех, кто в основном занимается определением опасных характеристик химически активных веществ, можно рекомендовать триплет ARKS HA - TE - CE, в то время как для специалистов в области проектирования САСД первостепенный интерес будет представлять BST.

Подмножество для оценки опасности энергетических материалов

В настоящее время значительные усилия сосредоточены на оценке опасности энергетических материалов. Конечной целью таких исследований является правильный выбор безопасных условий использования, хранения и транспортировки этих веществ. Типичные экспериментальные методы в этой области включают термический анализ и адиабатическую калориметрию.



Учитывая особенности применяемых методов и решаемых практических задач, можно предложить подсистему, включающую программы ARKS AC, TA, FK и IK, а также ARKS HA, TE и CE.

ARKS TA и **AC** со вспомогательной утилитой конвертера данных **DConv** поддерживают все необходимые типы обработки данных термического анализа и адиабатической калориметрии.

ARKS IK - это удобный инструмент для простого и быстрого предварительного анализа данных с применением безмодельной кинетики. Результаты этого анализа полезны для создания формальных кинетических моделей, которые создаются с помощью **ARKS FK**. Эти модели являются основой для оценки опасности с помощью последней группы программ.

ARKS FK предназначена для создания сложных многостадийных формальных моделей на основе конверсии.

ARKS HA обеспечивает простое и быстрое определение показателей опасности химических веществ, в то время как

ARKS TE и **CTE** обеспечивают углубленный анализ опасности теплового взрыва твердых и жидких химических веществ, а также тепловых режимов реакторов BATCH.

ARKS TE моделирует тепловые режимы объектов, содержащих химически активные твердые вещества, на основе уравнения теплопроводности в сочетании с кинетикой; учитывает профили температуры и конверсии, возникающие в объекте. Благодаря новым возможностям последней версии ARKS-TE позволяет анализировать гораздо более широкий круг случаев, включая тепловые режимы промышленных реакторов.

ARKS CE - это CFD код, позволяющий моделировать сосуды с жидким реагирующим веществом на основе численного интегрирования модели Навье-Стокса в сочетании с кинетикой. Моделирование учитывает теплопередачу за счет теплопроводности и конвекции и конвективный массоперенос.

ООО «Химинформ» (CISP Ltd.) работает по всему миру в партнерстве с:

- Thermal Hazard Technology (ТНТ), Великобритания;
- Sumika Inc. (Служба технической информации компании Sumitomo Chemical), Япония;
- MYJA Technology Co., Ltd, Китай;
- Chemryt Informatics Pvt Ltd., Индия.

Детальное изложение концепции исследования кинетики реакций и анализа поведения различных реакционноспособных систем на основе последовательного применения методов математического моделирования можно найти в монографии

А Бенин, А Коссой, Термические опасности и термическая безопасность энергонасыщенных веществ, химических процессов и объектов их применения, 2021, Инфра-Инженерия, 728 с.
<https://infra-e.ru/products/thermalhazardsandthermalsafety>

Информационные бюллетени CISP, доступные на сайте <http://www.cisp.spb.ru/newsletters>

1. Kinetics-based simulation – how can this approach help when assessing reaction hazard?

Моделирование на основе кинетики - как этот подход может помочь при оценке опасности реакции?

Первый информационный бюллетень из этой серии направлен на лучшее ознакомление с особенностями имитационного подхода к оценке опасности реакций и программного обеспечения CISP TSS-ARKS.

2. Kinetics-based simulation – how can this approach help when assessing reaction hazard?

Examples, part 1, Моделирование на основе кинетики - как этот подход может помочь при оценке опасности реакции? Примеры, часть 1

Во многих случаях даже рутинные задачи требуют применения моделирования на основе кинетики для получения правильных результатов. Часть 1 демонстрирует несколько примеров такого рода:

- Коррекция адиабатических данных по тепловой инерции;
- Расчет времени до максимальной скорости (TMR) и оценка термической стабильности соединения;
- Определение рейтингового числа реактивности (RRN).

3. Kinetics-based simulation – When can it help while assessing reaction hazard? Examples, part 2 - Applying the approach for simulation of thermal explosions, Моделирование на основе кинетики - Когда оно может помочь при оценке опасности реакции? Примеры, часть 2 - Применение подхода для моделирования тепловых взрывов.

Сначала дается обзор известных упрощенных аналитических теорий, обсуждаются их достоинства и ограничения. Затем описывается более общий метод, основанный на моделировании, и иллюстрируется некоторыми примерами.

4. Kinetics-based simulation – When can it help while assessing reaction hazard? Examples, part 3. Моделирование на основе кинетики - Когда оно может помочь при оценке опасности реакции? Примеры, часть 3.

В нем продолжается обсуждение других примеров - проектирование системы аварийного спасения (моделирование аварийного отключения и определение размеров вентиляционных отверстий), а также проектирование изначально более безопасного процесса.

Первый пример демонстрирует, как результаты моделирования были подтверждены экспериментом на пилотной установке.

Второй пример показывает, как учитывается теплообмен в полуреакторе периодического действия с рубашкой.

5. Applying the Kinetics-based simulation approach for determination of the SADT. Examples, part 4. Применение моделирования на основе кинетики для определения SADT. Примеры, часть 4.

В этом выпуске демонстрируется применение ДСК для кинетических исследований и использование кинетики на основе ДСК для определения температуры самоускоряющегося разложения (ТСУР) численным моделированием. Пример основан на реальных данных о разложении 50%- раствора гидроксилamina в воде.

6. Kinetics-based simulation approach. Identification of Kinetic Models for the Assessment of Reaction Hazards, Подход на основе кинетического моделирования. Идентификация кинетических моделей для оценки опасности реакций.

В этом бюллетене представлен обзор современного метода оценки кинетики, применяемого в TSS-ARKS. Он позволяет создавать сложные многоступенчатые кинетические модели, способные описывать реакции, протекающие в химических продуктах и в химических реакторах (реакции синтеза).

7. Kinetics-based simulation approach. Model-free versus Model-based kinetics: Pros and Cons.

Подход к моделированию на основе кинетики. Безмодельная кинетика или кинетика на основе модели: Плюсы и минусы.

В данном выпуске приводится объективное сравнение двух альтернативных методов оценки кинетики - безмодельного и основанного на моделях. Обсуждаются достоинства и ограничения безмодельной кинетики. Показано, что оба метода дополняют друг друга, а не антагонистичны: метод без модели очень полезен для быстрой предварительной оценки, за которой должен следовать более глубокий кинетический анализ на основе модели.

8. Evaluation of reactive hazard of Li-ion battery, Оценка реакционной опасности литий-ионного аккумулятора, <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.19665.68960>

В информационном бюллетене приводится пример применения кинетического подхода к моделированию для оценки опасности литий-ионного аккумулятора - а именно, оценка кинетики на основе адиабатических данных.

9. Kinetics-based simulation approach. Advanced analysis of adiabatic data by applying ARKS AC Подход к моделированию на основе кинетики. Расширенный анализ адиабатических данных с применением ARKS AC

В этом выпуске демонстрируется техника анализа адиабатических данных с помощью программы ADaExpert, которая использует несколько уникальных методов. *Обратите внимание, что ADaExpert была заменена новой, существенно усовершенствованной программой ARKS AC*

10. Kinetics-based simulation approach. More about applying simulation for evaluating reactive hazard of Li-ion battery (see also abstract above), Подход к моделированию на основе кинетики. Подробнее о применении моделирования для оценки реакционной опасности литий-ионного аккумулятора (см. также аннотацию выше)

Это вторая часть исследования, представленного в 8-м информационном бюллетене. В ней показано использование кинетики для оценки опасности выбега. Одним из основных моментов является очень хорошее соответствие результатов CISP с симуляцией аварийного выброса, выполненной независимо Исследовательским институтом Kobelco (Япония).

11. Reaction calorimetry (RC): types, simple theory and application for kinetic study (overview) Реакционная калориметрия (PK): типы, простая теория и применение для кинетического исследования (обзор), <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.25881.36968>

Информационный бюллетень содержит описание существующих типов КР в компактной форме. Обзор может быть полезен для понимания принципов работы КР и выбора типа прибора, наиболее подходящего для изучения конкретной проблемы.

12. Do we know everything about DSC data? How to interpret DSC data when the overall heat depends on heating rate, Все ли мы знаем о данных ДСК? Как интерпретировать данные ДСК, когда общее количество теплоты зависит от скорости нагрева, <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.16033.25448>

В бюллетене обсуждается один необычный случай, когда общая теплота реакции изменяется в зависимости от скорости нагрева, и раскрывается происхождение этого явления, которое легко можно считать ошибкой эксперимента.

13 Kinetics-based simulation of thermal explosion – some examples of experimental validation, Моделирование теплового взрыва на основе кинетики - некоторые примеры экспериментальной проверки, <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.29455.02720>

В этом выпуске представлено несколько случаев, когда предсказание теплового взрыва с помощью моделирования на основе кинетики было подтверждено крупномасштабными взрывными экспериментами.

14 Simple theory of melting based on the DSC model or what we can learn from such experiments Простая теория плавления на основе модели ДСК или что мы можем узнать из подобных экспериментов, <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.35370.98245>

В данной статье описана простая модель плавления при линейном нагреве и дано несколько полезных рекомендаций.

15 Glass crucibles for calorimeters with the 3D Calvet-type sensors Стеклоянные тигли для калориметров с датчиками типа 3D Calvet

Цель этого краткого информационного бюллетеня - поделиться нашим опытом применения самодельных герметичных стеклянных тиглей в экспериментах по ДСК.

16. ARKS TE software - purpose and features, Программное обеспечение ARKS TE - назначение и особенности <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.25521.10082>

Знакомство с приложениями TSS-ARKS, которые поддерживают подход к моделированию на основе кинетики в деталях режима работы

17. Example of kinetic analysis of complex thermogravimetry data (A. Kosoy, A. Lopatin) Пример кинетического анализа сложных данных термогравиметрии) <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.16819.35364>

Демонстрация того, что может сделать метод кинетического анализа на основе модели для оценки сложной кинетики по данным ТГ.

18. Kinetics-based simulation approach. Convenient way to take a closer look at TSS-ARKS software, Подход к моделированию на основе кинетики. Удобный способ поближе познакомиться с программным обеспечением TSS-ARKS

Описание видеоуроков, которые помогают пользователю освоить программу.

19. Kinetics-based simulation - the key to solving the scaling problem

Моделирование на основе кинетики - ключ к решению проблемы масштабирования,
<http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.23578.31683>

Обсуждение преимуществ математического моделирования на основе кинетической модели реакции как наиболее универсального метода масштабирования для разработки различных химических процессов.

20. A short Guide to Calibration of DTA instruments, Краткое руководство по калибровке приборов ДТА DOI: [10.13140/RG.2.2.12029.64480](http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.12029.64480)

Калибровка приборов ДТА/ДСК - очень известная процедура, подробно обсуждаемая во многих книгах и статьях, а также в руководствах почти для каждого коммерческого прибора. Тем не менее, нас попросили объяснить, как работать с чистыми данными ДТА, когда в качестве дифференциального отклика доступна только разница между температурами образца и эталона. Этот информационный бюллетень CISP должен дать ответ.

21. Some thoughts about statistical evaluation of the results of kinetic analysis, Некоторые мысли о статистической оценке результатов кинетического анализа

<http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.31782.80962>

Из-за специфики результатов кинетических экспериментов многие из известных методов статистического анализа оказываются неприменимыми. Цель данного бюллетеня - привлечь внимание к этой серьезной проблеме и обсудить (пусть и на поверхностном уровне) возможные решения.

22. Applying DSC for Reaction Kinetics study: some thoughts about planning experiments

Применение ДСК для изучения кинетики реакций: некоторые мысли о планировании экспериментов, <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.15005.59362>

Цель этой краткой презентации - дать несколько простых рекомендаций, которые помогут вам избежать ошибок при планировании и проведении экспериментов ДСК.

23. A closer look at the ARKS HA Hazard Assessment Software, Более подробный взгляд на программное обеспечение для оценки опасности ARKS HA

<http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.15501.92643>

В этом выпуске информационного бюллетеня CISP более подробно рассказывается о последней, значительно расширенной версии программы ARKS HA (Advanced Reaction Kinetics Simulation - Hazard Assessment), которая пришла на смену программе ReRank, разработанной много лет назад.

Много дополнительных публикаций можно также найти на странице

