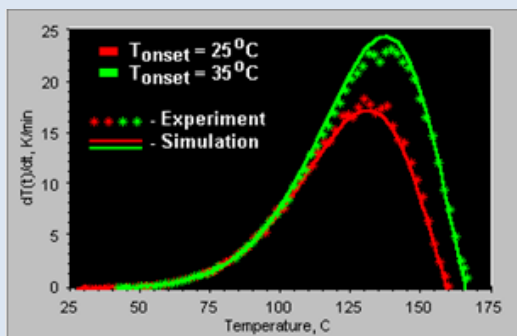


# 日本語入力対応の最新 TSS

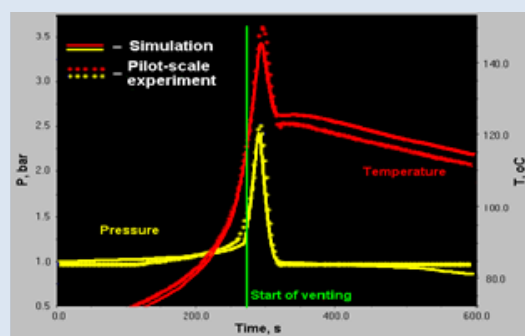
## Thermal Safety Software (TSS) series

ラボ測定した熱量データ(DSC, ARC<sup>®</sup>等)を、多目的に解析するために  
CISP社の反応危険性評価シリーズTSSは、世界で使用されている標準ツールです。

### 熱測定データ解析ソリューション



Reaction: I + PA → IP + PAC  
 Reactor: V = 312 liters; U = 270W/m<sup>2</sup>/K, S = 1.5m<sup>2</sup>



⇒ 緊急放出システム(ERS)設計



熱安定性等の実験データを用い、  
反応速度論シミュレーションから  
工業化時のプロセスハザードを評価

CISP社は、日本語入力が可能になった最新 TSS の  
10月リリースに合わせ、**20% 割引価格キャンペーン**を  
開始しました。(キャンペーン期間 2016年7月~12月)

是非、この機会に、ご検討を宜しくお願い致します。

ご不明な点は下記まで、お問い合わせくださるようお願い申し上げます

お問合せ先 株式会社 住化技術情報センター

担当者: 岡本 弘

TEL: 06-6220-3364

okamotoh5@sc.sumitomo-chem.co.jp

**STIS**  
Sumitomo Technical Information Service, Inc.

## The simulation-based methods for analysis and evaluation of thermal safety of chemical process

Lecturer - Dr. A. Kossoy (CISP 社研究部門代表/副社長)

Course of lectures for the students and post-graduates  
of the Department of Chemical Engineering of the █████ University of Science and Technology

Sub-course	Lectures Topic
Backgrounds of experimental methods and features of their application	1. Theoretical backgrounds of thermos-analytical experiments (DSC, heat-flux calorimetry, etc.)
	2. Calibration of TA instruments
	3. Simple theory of melting
	4. Specific features of applying methods of thermal analysis
	5. Theoretical backgrounds of reaction calorimetry
	6, 7. Theoretical backgrounds of adiabatic calorimetry
	8. Processing of adiabatic data
	9. Specific features of applying adiabatic calorimetry for study of reaction kinetics
	Kinetic analysis
Thermal explosion	13,14. Theoretical backgrounds of thermal explosion
Assessing reaction hazards – traditional methods versus math. simulation	15. Applying kinetics-based simulation approach for reaction hazard assessment
Inherently safer chemical processes design	16, 17. Design of inherently safer chemical processes
Classification of reactive products and traditional methods versus math. simulation	18. Introduction into methods for classification of hazardous chemical products;
	19. Overview of the methods for determination of self-accelerating decomposition temperature (SADT)
Practicum on applying kinetics-based simulation approach	20. Analysis of DSC data – 3 hours
	21. Analysis of adiabatic data – 3 hours
	22. Evaluation of kinetic models – 6 hours
	23. Thermal explosion simulation – 3 hours

## Thermal Safety Software (TSS) series

CISP 社の反応危険性評価ソフト TSS シリーズは、解析目的に合わせ各種アプリケーションを組合せて使用します。例えば、DSC 等の熱測定データを解析するには、下記に示す推奨のソリューションが準備されています。

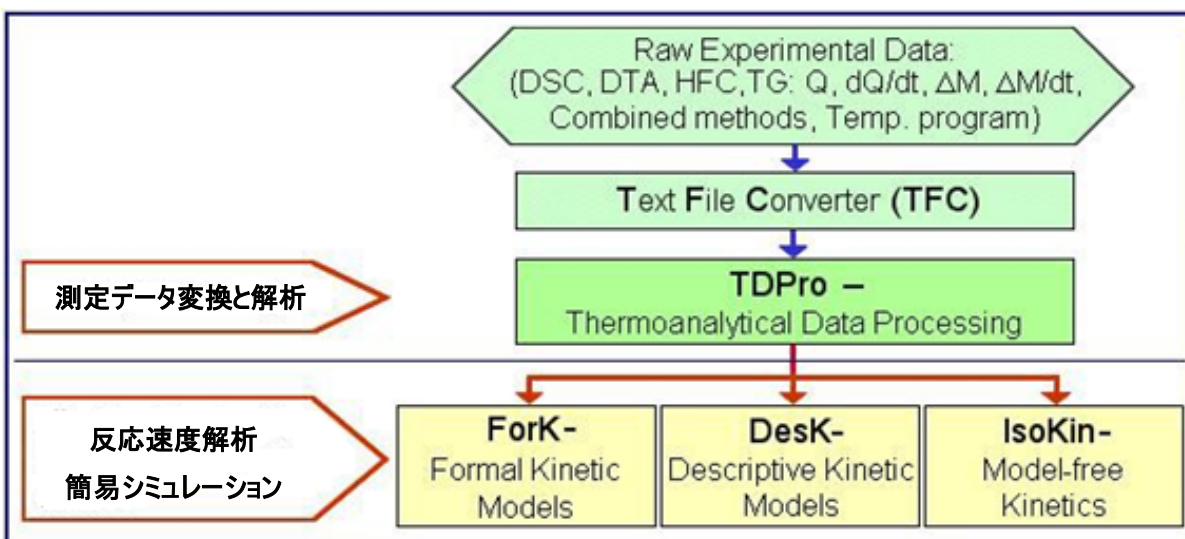
### The sub-set for thermal analysis (熱分析用ソリューション)

この汎用的な基本ソリューションは、**TDPro** と **Fork**, and/or **DesK**, and/or **IsoKin** で構成されています。

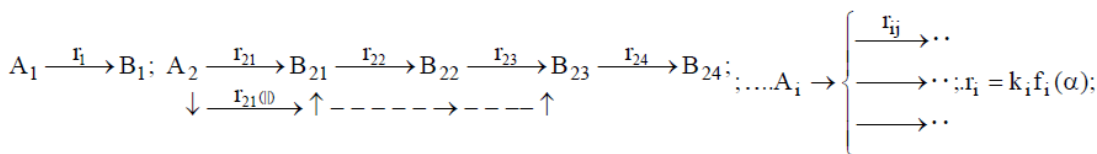
**TDPro** は、付属の TFC を用い、各種の熱測定分析機器 (**DSC**, **DTA**, **TG** および組合せ **DSC+TG**, **DTA+TG**) のオリジナルデータを、反応速度解析に移行できるように統一したデータ形式に変換します。

**TDPro** では、オリジナルのデータを総合的に処理するだけでなく、比熱、熱伝導度等を求めることが可能です。

次に、反応速度を解析するアプリケーション **Fork/DesK** は、ユーザーが設定した各種の反応モデルについて実験データを解析し反応速度パラメータを決定します。また **IsoKin** を用いると、**モデルフリーの反応速度解析**が可能です。



A complex multi-stage model may include several independent, parallel and consecutive stages, reversible stages and branched pathways are also available, as it is demonstrated by the pattern



A stage can be presented by any of the following equations:

$$f(\alpha) = \begin{cases} (1 - \alpha)^n & \text{- N - order model} \\ \alpha^{n1} (1 - \alpha)^{n2} & \text{- "proto" model} \\ (1 - \alpha)^{n1} (\alpha^{n2} + z) & \text{- autocatalytic model} \\ (1 - \alpha)(-\ln(1 - \alpha))^n & \text{- Avrami - Erofeev model} \\ (1 - \alpha)^{2/3} [1 - (1 - \alpha)^{1/3}]^{-1} & \text{- Jander model} \end{cases}$$

**Fork** では、反応スキームを、独立反応、併発反応、逐次反応を組み合わせて記述し、それぞれの反応について、N 次反応、自己触媒反応、触媒反応から選択します。ただし、反応は液相均一反応とします。

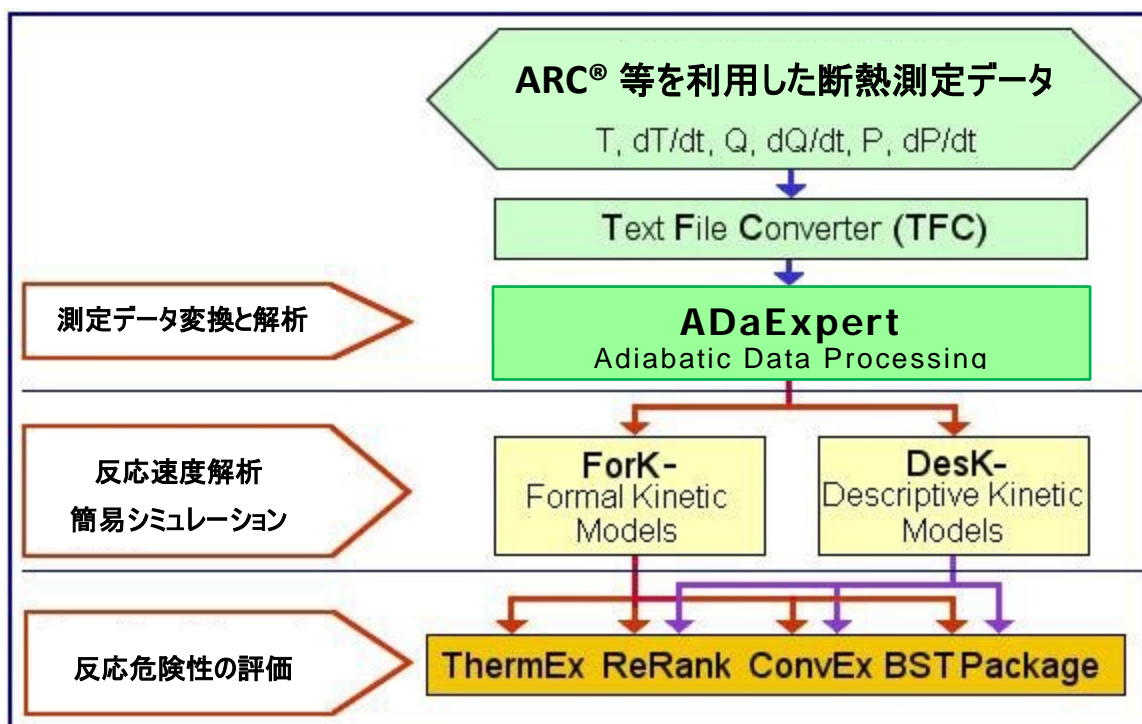
TDPro から転送された実測データに対して、非線形最適化計算を実行して反応速度パラメータを決定します。

## Thermal Safety Software (TSS) series

### The subset for adiabatic calorimetry (断熱測定データ解析ソリューション)

断熱熱量計 (ARC<sup>®</sup>、VSP、DEWAR) 等は、化学反応の熱的危険性評価に有効であることが知られています。このソリューションは、断熱下で測定した熱量データを多目的に解析するために CISP 社が提供する TSS の中から選ばれた最適組み合わせセットです。

ADaExpert, ForK および/または DesK と各種の反応危険性を評価する ThermEx, ReRank, ConvEx と BST パッケージで構成されています。



**ADaExpert** ARC<sup>®</sup>等の断熱熱量計のデータを TSS を使用して解析するための変換ソフトです。温度データ、圧力データのスムージング等の機能があります。

★ 反応速度を解析するソフトには、**ForK**と **DesK** が準備されています。

**ForK** シンプルな反応モデルを組み合わせで反応速度を解析するソフトです。変数は反応率となり物質を特定する必要はありません。ARC<sup>®</sup> 実測データと比較して最適化結果を検証できます。また、 $\phi = 1$  を入力すれば  $\phi$  補正が可能です。

**DesK** 濃度を変数として反応速度を解析するため、反応式を定義する必要があります。反応プロセス全体についての反応性を評価します。

★ 反応危険性評価パッケージは、以下のソフトで構成されています。

**ThermEx** 固相(高粘性液体)の温度分布を熱伝導シミュレーションし熱暴走に至る限界条件を計算します。

**ConvEx** 液体中の温度分布をシミュレーションし熱暴走に至る限界条件を計算します。

**ReRank** 対象化学物質の反応性指数を決定します。

**BST** このパッケージは、バッチ反応を想定して熱暴走をシミュレーションできる他、**放散口の設計**も可能です。

★ 反応危険性を評価する組み合わせパッケージは、研究目的に合わせて変更可能です。物質の反応危険性の評価・ランク付けには、基本となる **ThermEx**, **ConvEx**, **ReRank** が適していますが、これら3ソフトに加え、**BST(The Batch Stirred Tank)**も強力な評価ツールとなります。