

TK



THERMOKINETICS Software (TK)

Evaluation of Kinetic Parameters
from Conventional Thermoanalytical Data

CONTENT

AKTS E-Learning

www.akts.com/tk/e-learning

Palmetrics

2023_07_01

TABLE OF CONTENTS

General information.....2

概略

Time-to-maximum rate under adiabatic conditions (TMRad) / Adiabatic thermal safety diagram.....2

断熱条件下における Time-to-maximum rate / 断熱熱安全性ダイアグラム

Adiabatic runaway and self-heating rate curves.....2

断熱熱暴走と自己加熱速度曲線

Thermal Safety Diagram for non-adiabatic conditions2

非断熱条件下における熱安全性ダイアグラム

Simulation of the Self-Accelerating-Decomposition Temperature (SADT).....2

自己加速熱分解温度 (SADT) のシミュレーション

Simulations of the spatial distribution of temperature and reaction progress2

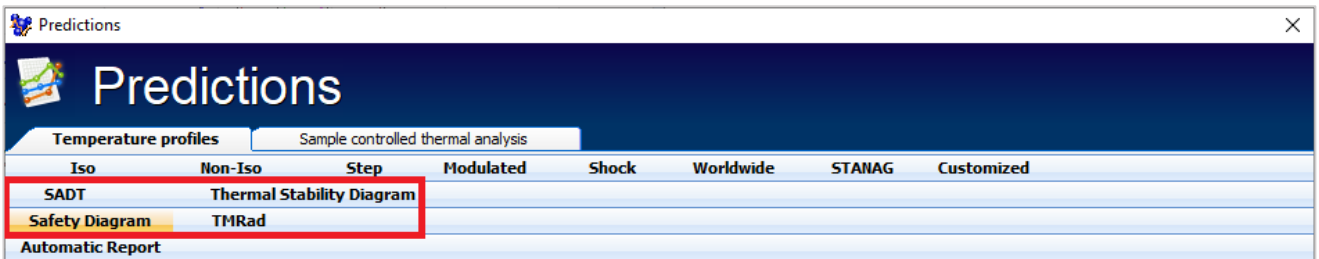
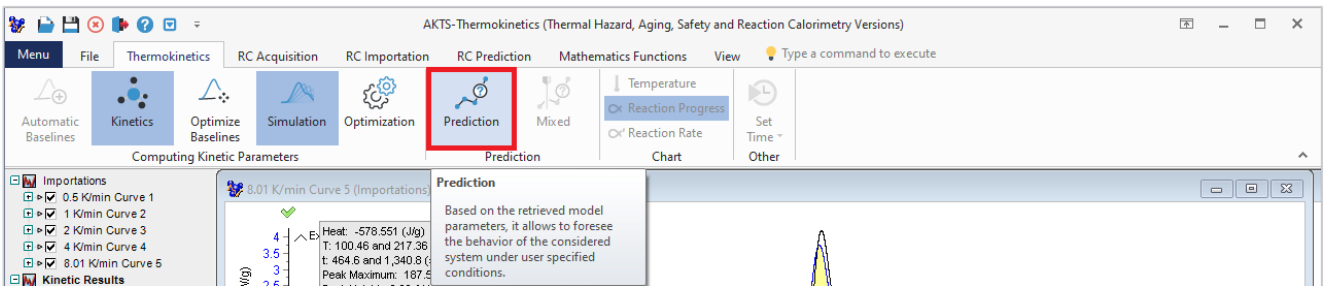
温度と反応進行の空間分布 (3D) シミュレーション

AKTS E-LEARNING

GENERAL INFORMATION

For the prediction of the thermal behaviour in kg-scale, in semi-adiabatic and ton-scale under adiabatic conditions under any temperature mode click the icon “Prediction”.

kg スケールのセミ断熱条件、および **ton** スケールの断熱条件における熱挙動の予測に対して **Prediction** をクリックし、最下段の赤線枠の温度モードのいずれかをクリックします。

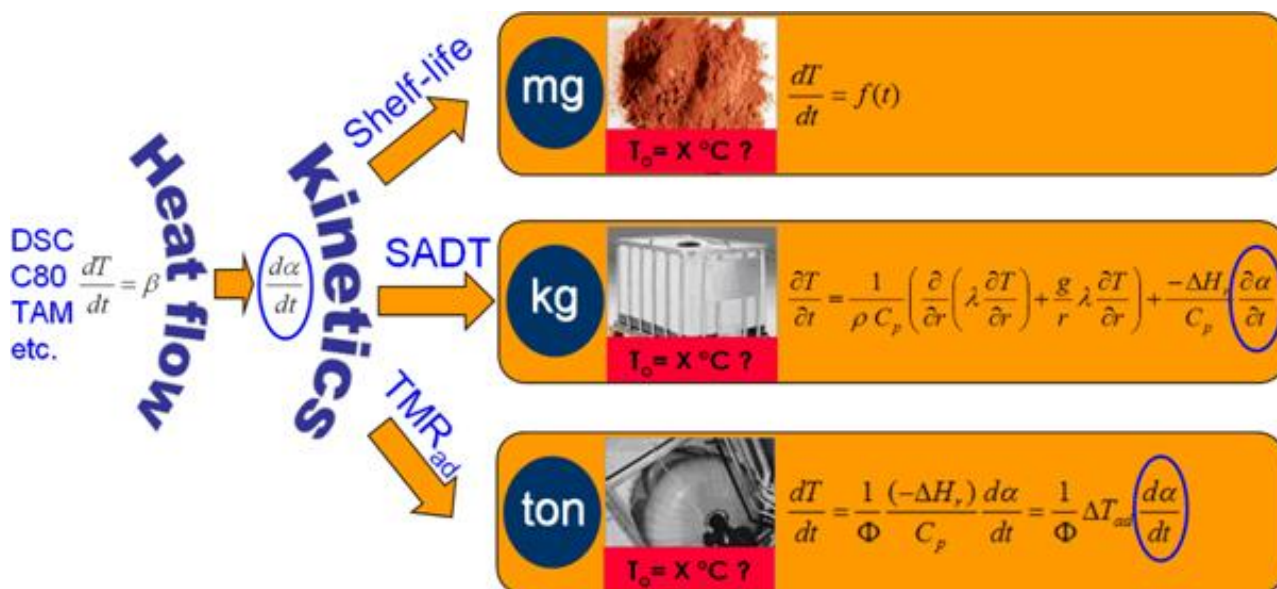


In all large-scale experiments dT/dt and $T(t)$ are determined by applying appropriate heat balance equations (see figure below). In kg-scale the change of the sample temperature rate dT/dt depends among others, on the reaction rate da/dt and on the container radius r as well. The temperature of the sample will not be the same in the centre and at the surface of a package and, in addition, it will depend on its size, i.e. r value. In order to determine thermal behaviour in kg-scale, the convective heat transfer from the package (the boundary conditions) and the conductive heat transfer within the package are introduced into the calculating procedure.

すべての大規模実験において、 dT/dt および $T(t)$ は、適切な熱収支方程式を適用することによって決定されます（下図を参照）。kg スケールでは、サンプル温度速度 dT/dt の変化は、とりわけ、反応速度 da/dt と、容器の半径 r にも依存します。

サンプルの温度は、パッケージの中央と表面で同じではなく、サンプルのサイズ、つまり r 値に依存します。

kg スケールで熱挙動を決定するために、パッケージからの対流熱伝達（境界条件）とパッケージ内の熱伝達係数が計算手順に導入されます。



— TIME-TO-MAXIMUM RATE UNDER ADIABATIC CONDITIONS (TMRAD) / ADIABATIC THERMAL SAFETY DIAGRAM —

断熱条件下における最大反応速度到達時間(TMRad)

および 断熱熱安全ダイアグラム

Determination of
Time to Maximum Rate under adiabatic conditions (TMR_{ad})
 Key parameters for adiabatic conditions

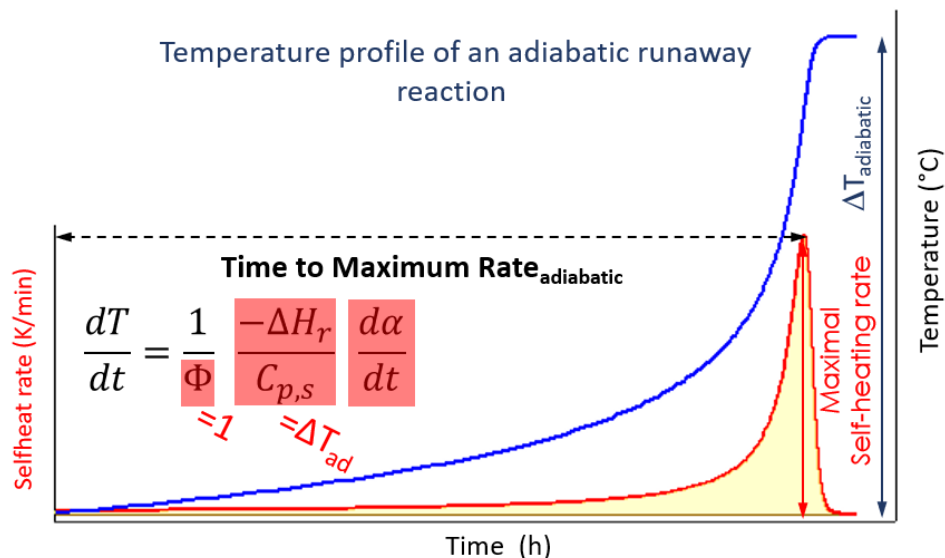


FIG. 1 - The plot presents the temperature profile of an adiabatic reaction and depicts the meaning of its key parameters: ΔT_{ad} the adiabatic temperature rise, TMR_{ad}: Time to Maximum Rate and maximum Self-Heating Rate.

このプロットは断熱反応の温度プロファイルを示し、それぞれパラメータの意味は

ΔT_{ad} : 断熱温度上昇、

TMR_{ad} : 最大速度および最大自己発熱速度までの時間。

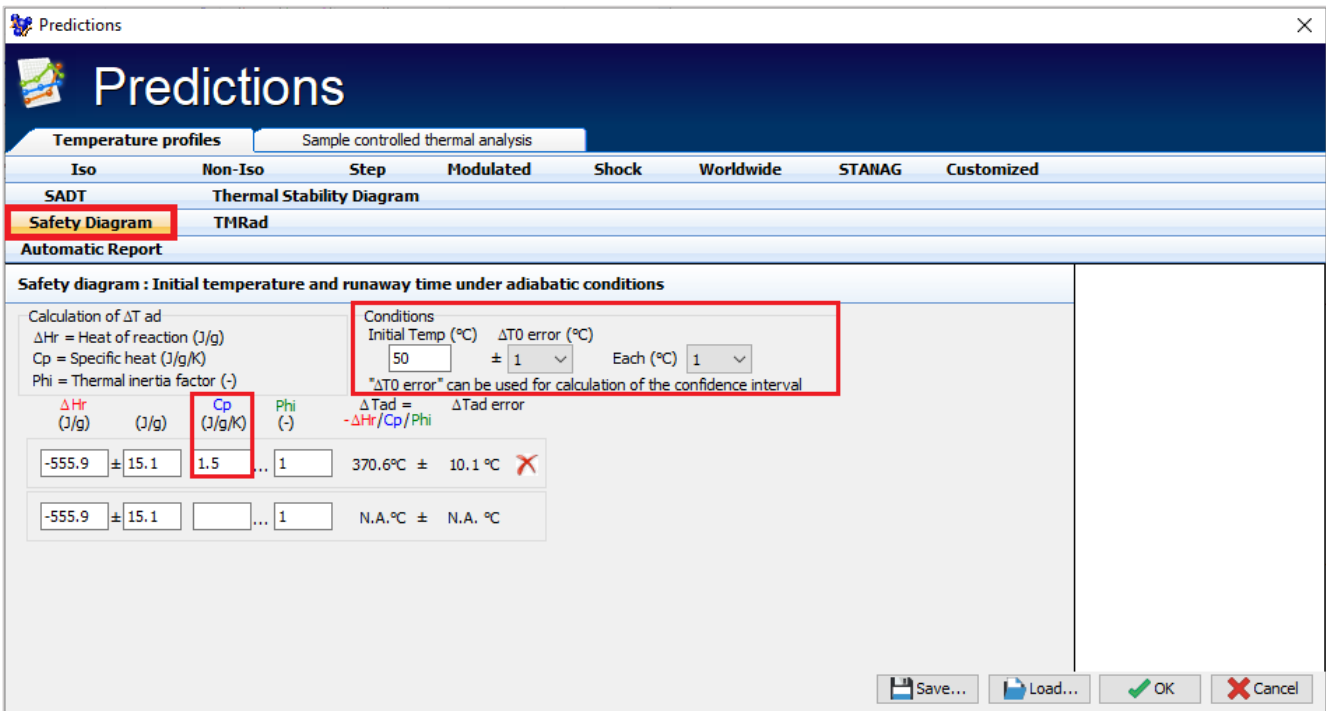


FIG. 2 - Click on the tab “Adiabatic Safety Diagram” to calculate the “Time to Maximum Rate” under adiabatic conditions for any arbitrarily starting temperature. Introduce the lowest required initial temperature (in presented example 50°C) and the heat capacity value (here 1.5 J/g/K) of the substance.

「断熱安全図」タブをクリックして、「最大速度までの時間」を計算します。任意の開始温度の断熱条件下で最も低い温度を算出します。

計算に必要な条件は 初期温度 (提示された例では 50° C) と熱容量値 (ここでは 1.5 J / g / K) の物質です。

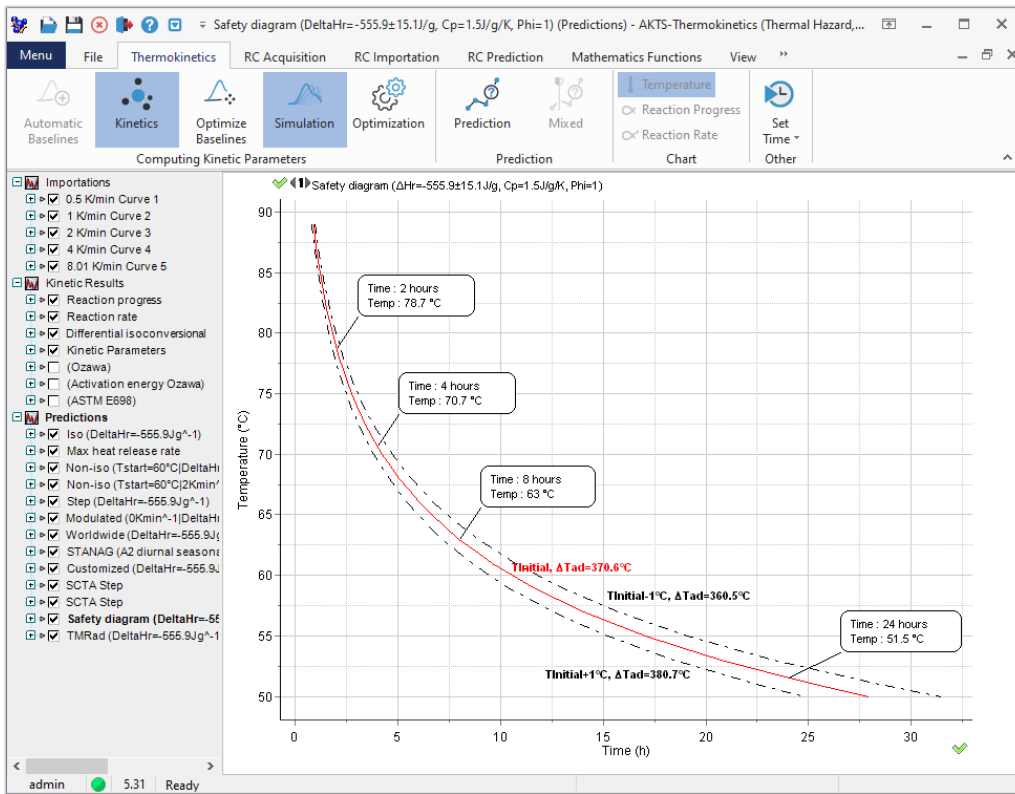


FIG. 3 - Adiabatic safety diagram - Influence of the initial temperature on the corresponding adiabatic induction time TMRad for following conditions: $\Delta H_r = -555.9 \pm 15.1 \text{ J/g}$ and $\Delta T_{ad} = (-\Delta H_r) / C_p = 370.6 \pm 10.1^\circ \text{C}$ for $\Phi = 1$ and $C_p = 1.5 \text{ J/g/K}$.

断熱安全図-対応する初期温度の影響 以下の条件での断熱誘導時間 TMRad: $\Delta H_r = -555.9 \pm 15.1 \text{ J/g}$ および $\Delta T_{ad} = (-\Delta H_r) / C_p = 370.6 \pm 10.1^\circ \text{C}$ ($\Phi = 1$ および $C_p = 1.5 \text{ J/g/K}$ の場合)。

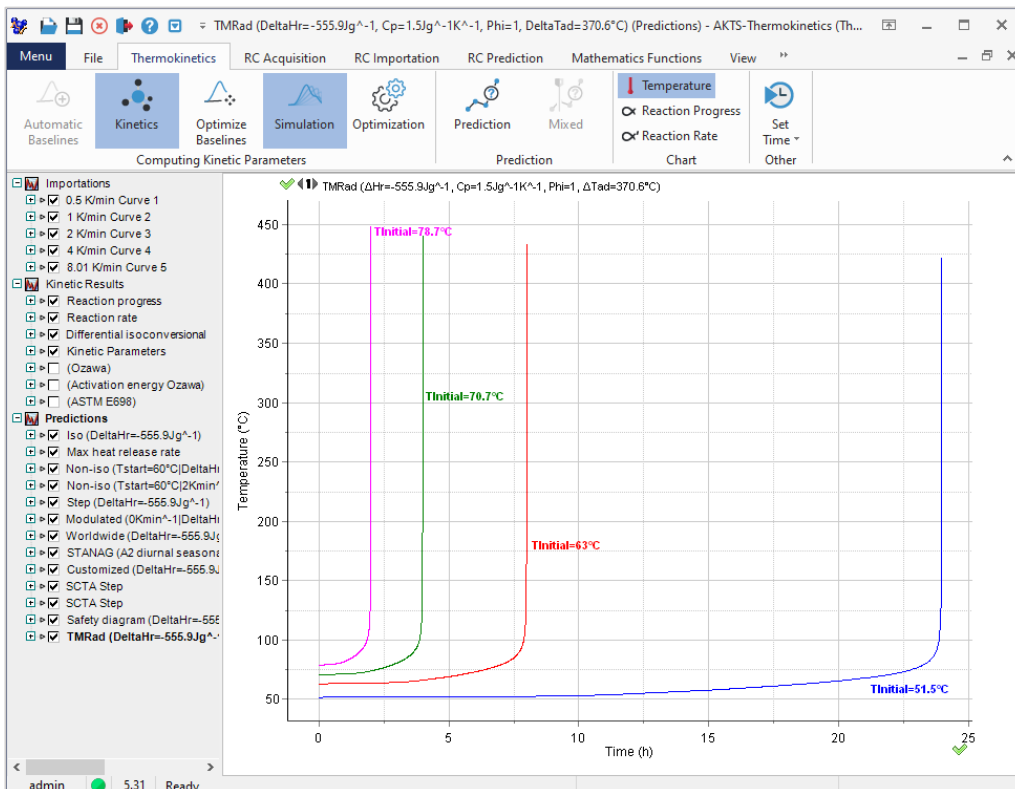


FIG. 4 - The simulation of T-time relationships under adiabatic conditions. For an initial temperature of 51.5°C TMRad amounts to 24 h.

-断熱条件下での T 時間関係のシミュレーション。 51.5°C の初期温度の場合、TMRad は 24 時間になります

Safety data for following input parameters: $\Delta H_r = -555.9 \pm 15.1 \text{ J/g}$, $C_p = 1.5 \text{ J/g/K}$, $\Phi = 1$

TStart °C	TMRad (mean value) (TInitial, DeltaTad=370.6°C)	TMRad (lower value) (TInitial+1°C, DeltaTad=380.7°C)	Confidence interval %
89	52.27 min	47.64 min	8.87
88	56.55 min	51.51 min	8.92
87	61.21 min	55.72 min	8.97
86	66.28 min	60.31 min	9.02
85	71.82 min	65.30 min	9.07
84	77.85 min	70.75 min	9.12
83	84.43 min	76.69 min	9.17
82	91.61 min	83.17 min	9.22
81	99.45 min	90.24 min	9.27
80	108.03 min	97.96 min	9.32
79	117.4 min	106.39 min	9.37
78	127.65 min	115.62 min	9.43
77	138.87 min	125.7 min	9.48
76	151.15 min	136.74 min	9.53
75	164.61 min	148.83 min	9.59
74	179.37 min	162.08 min	9.64
73	195.55 min	176.59 min	9.70
72	213.31 min	192.51 min	9.75
71	232.82 min	209.98 min	9.81
70	254.25 min	229.17 min	9.86
69	277.8 min	250.24 min	9.92
68	5.06 hours	273.41 min	9.98
67	5.54 hours	298.89 min	10.04
66	6.06 hours	5.45 hours	10.10
65	6.64 hours	5.96 hours	10.16
64	7.27 hours	6.53 hours	10.22
(*)63	(*) 7.98 hours	(*) 7.16 hours	10.28
(*)Means that determined TMRad is about 8 hours (7.98 h) for an initial temperature of about 63°C, (a more conservative value is 7.16 h)			
62	8.75 hours	7.85 hours	10.34
61	9.61 hours	8.61 hours	10.40
60	10.55 hours	9.45 hours	10.46
59	11.6 hours	10.38 hours	10.52
58	12.75 hours	11.4 hours	10.59
57	14.04 hours	12.54 hours	10.65
56	15.46 hours	13.8 hours	10.71
55	17.03 hours	15.2 hours	10.78
54	18.78 hours	16.74 hours	10.84
53	20.72 hours	18.46 hours	10.91
(**)52	(**)22.87 hours	(**)20.36 hours	10.97
(**) Means that determined TMRad is about 24 hours (22.87 h) for an initial temperature of about 52°C, (a more conservative value is 20.36 h)			
51	25.27 hours	22.48 hours	11.04
50	27.94 hours	24.83 hours	11.11

TABLE. 1 - Thermal safety table: Dependence of TMRad on initial temperatures under adiabatic conditions.

熱安全性表：断熱条件下での TMRad の初期温度への依存性。

ADIABATIC RUNAWAY AND SELF-HEATING RATE CURVES

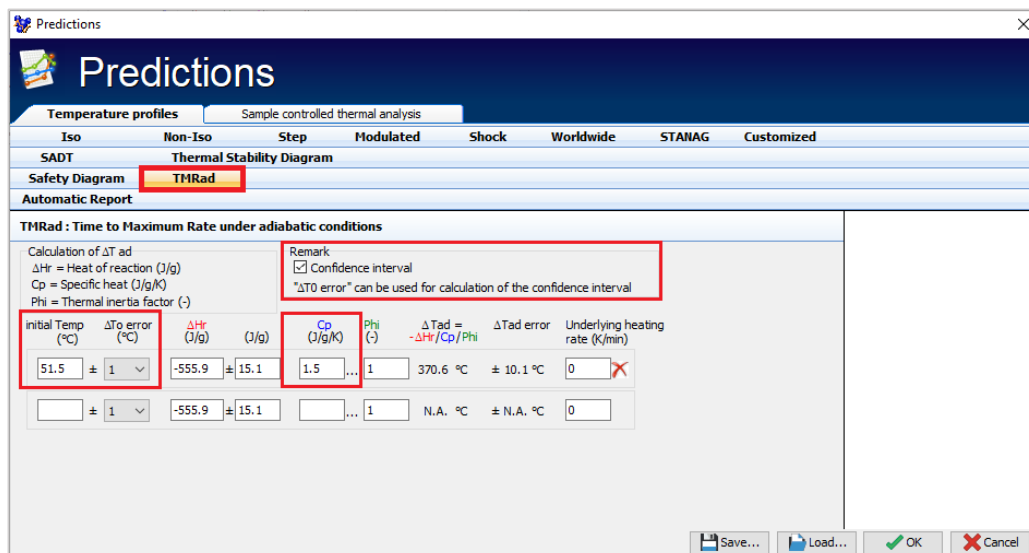


FIG. 1 - Click on the tab “TMRad” to calculate the “Time to Maximum Rate” with or without confidence interval for any arbitrarily chosen initial temperature.

Specify the values of initial temperature (in this example 51.5°C) and heat capacity (here 1.5 J/g/K).

「TMRad」タブをクリックして、「最大レートまでの時間」を計算します。または任意に選択した初期温度の信頼区間なし。初期温度(この例では 51.5° C)と熱容量(ここでは 1.5 J / g / K)の値を指定します。

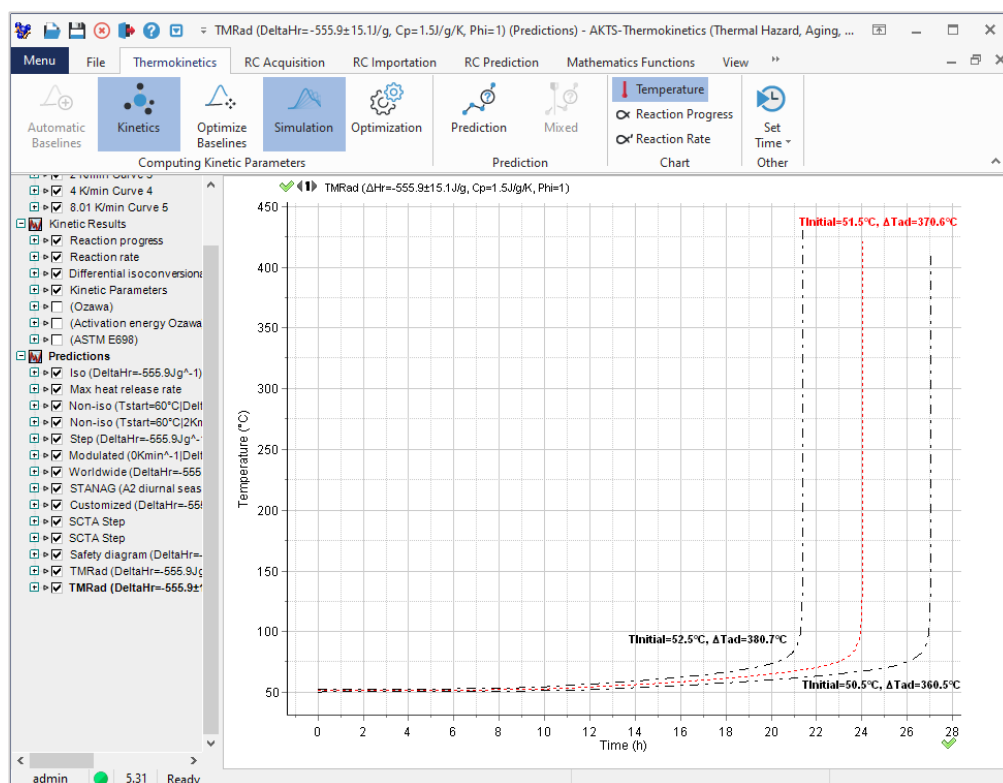


FIG. 2 - Adiabatic runaway curve for the reaction with $\Delta H_r = -555.9 \pm 15.1$ J/g and $C_p = 1.5$ J/g/K with the confidence interval for the prediction: $T_{\text{initial}} = 51.5 \pm 1^\circ\text{C}$. $\Delta T_{\text{ad}} = (-\Delta H_r)/C_p = 370.6 \pm 10.1^\circ\text{C}$ for $\Phi = 1$.
 $\Delta H_r = -555.9 \pm 15.1$ J / g の断熱暴走曲線 $C_p = 1.5$ J / g / K、予測の信頼区間: $T_{\text{initial}} = 51.5 \pm 1^\circ\text{C}$.
 $\Delta T_{\text{ad}} = (-\Delta H_r) / C_p = 370.6 \pm 10.1^\circ\text{C}$ ($\Phi = 1$ の場合)。

The TS software also allows the calculation of self-heating rate curves in adiabatic conditions (see below):

TS ソフトウェアでは、断熱状態での自己発熱率曲線の計算も可能です。(下記参照) :

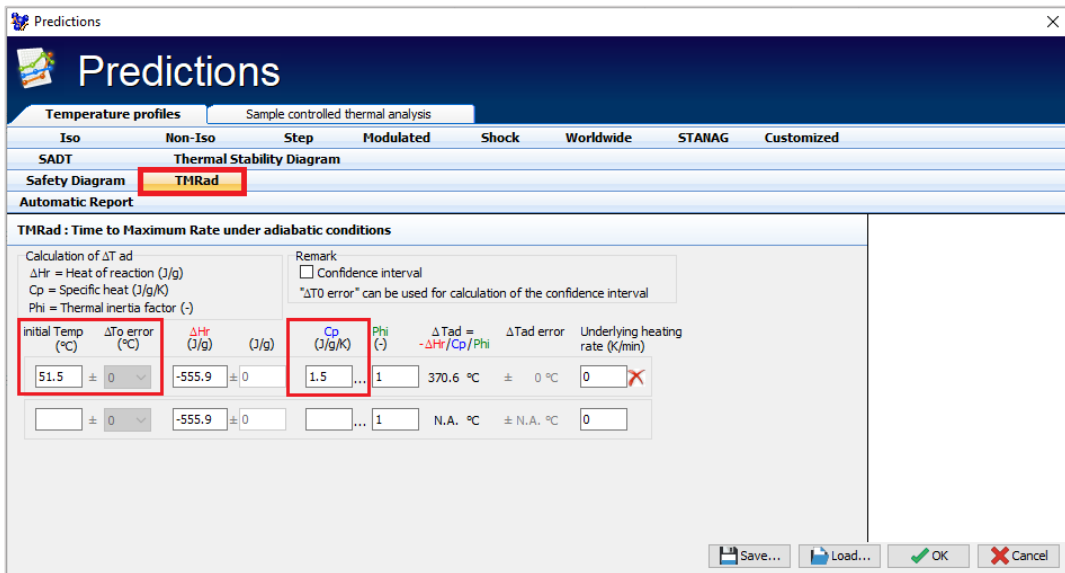


FIG. 3 - Click on the tab “TMRad” to calculate the “Time to Maximum Rate” for any arbitrarily chosen initial temperature. Specify the values of initial temperature (in this example 51.5°C) and heat capacity (here 1.5 J/g/K).

「TMRad」タブをクリックして、任意に選択した初期温度の「最大速度までの時間」を計算します。
初期温度(この例では 51.5° C)と熱容量(ここでは 1.5 J / g / K)の値を指定します。

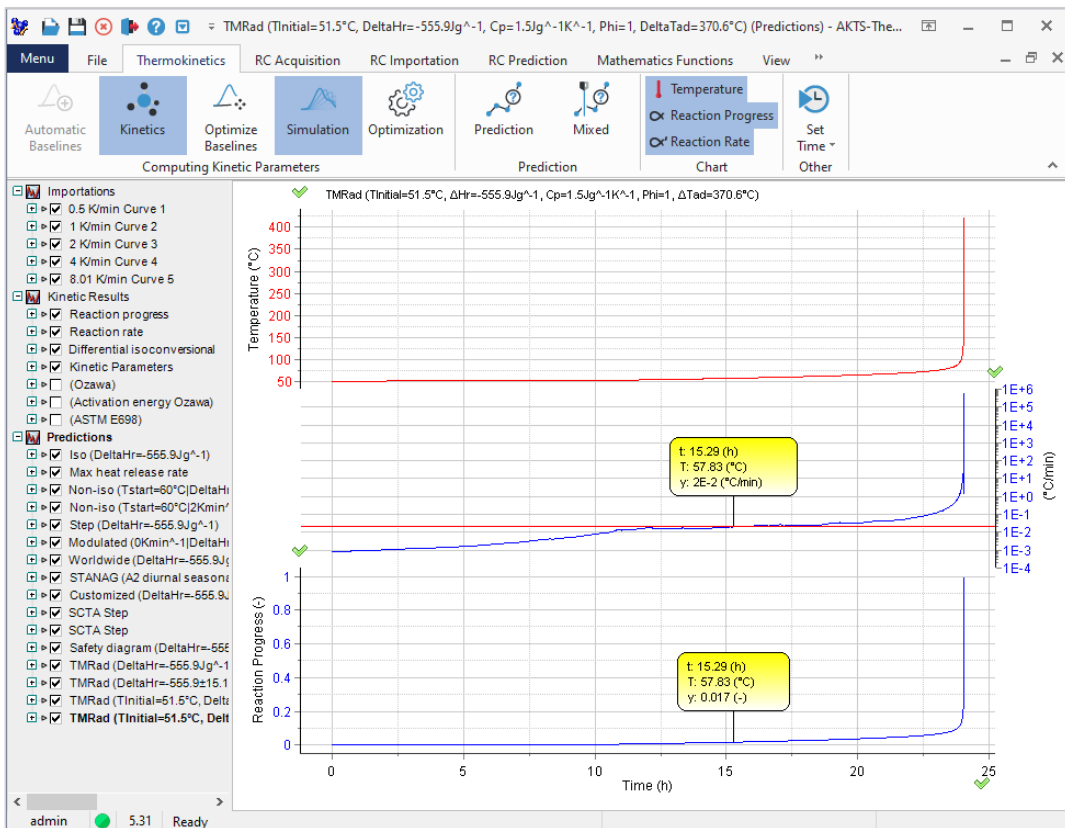


FIG. 4 - Adiabatic runaway curve with TMRad = 24h as a function of time for following conditions: $\Delta H_r = -555.9 \pm 15.1 \text{ J/g}$, $\Delta T_{ad} = (-\Delta H_r)/C_p = 370.6 \pm 10.1^\circ\text{C}$, $\Phi = 1$ and $C_p = 1.5 \text{ J/g/K}$. The graph displays the time-dependence of the temperature (top), self-heating rate (middle) and reaction extent (bottom).

次の条件の時間の関数としての TMRad = 24h の断熱暴走曲線: $\Delta H_r = -555.9 \pm 15.1 \text{ J/g}$ 、 $\Delta T_{ad} = (-\Delta H_r) / C_p = 370.6 \pm 10.1^\circ\text{C}$ 、 $\Phi = 1$ および $C_p = 1.5 \text{ J/g/K}$ 。
グラフには、温度(上)、自己発熱速度(中央)、反応度(下)の時間依存性が表示されます。

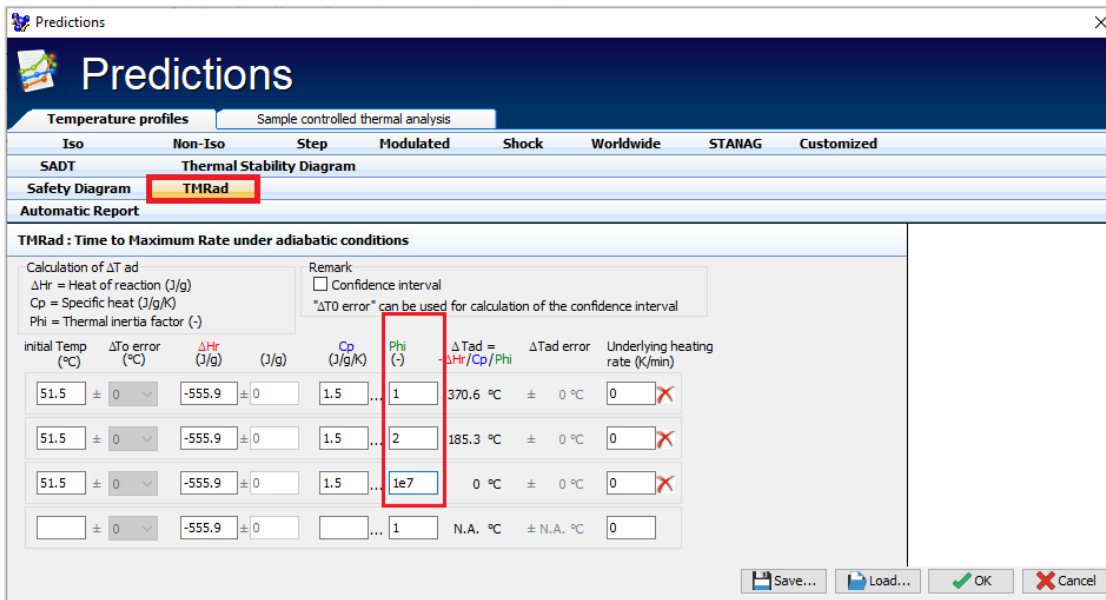


FIG. 5 - Heat exchange properties of the system characterized by Phi factor are significantly influence the TMRad, ΔTad and the temperature dependence of the reaction progress.

熱慣性係数 φ ファクターによって特徴付けられるシステムの熱交換特性は、TMRad、ΔTad、および反応進行の温度依存性に大きく影響します。

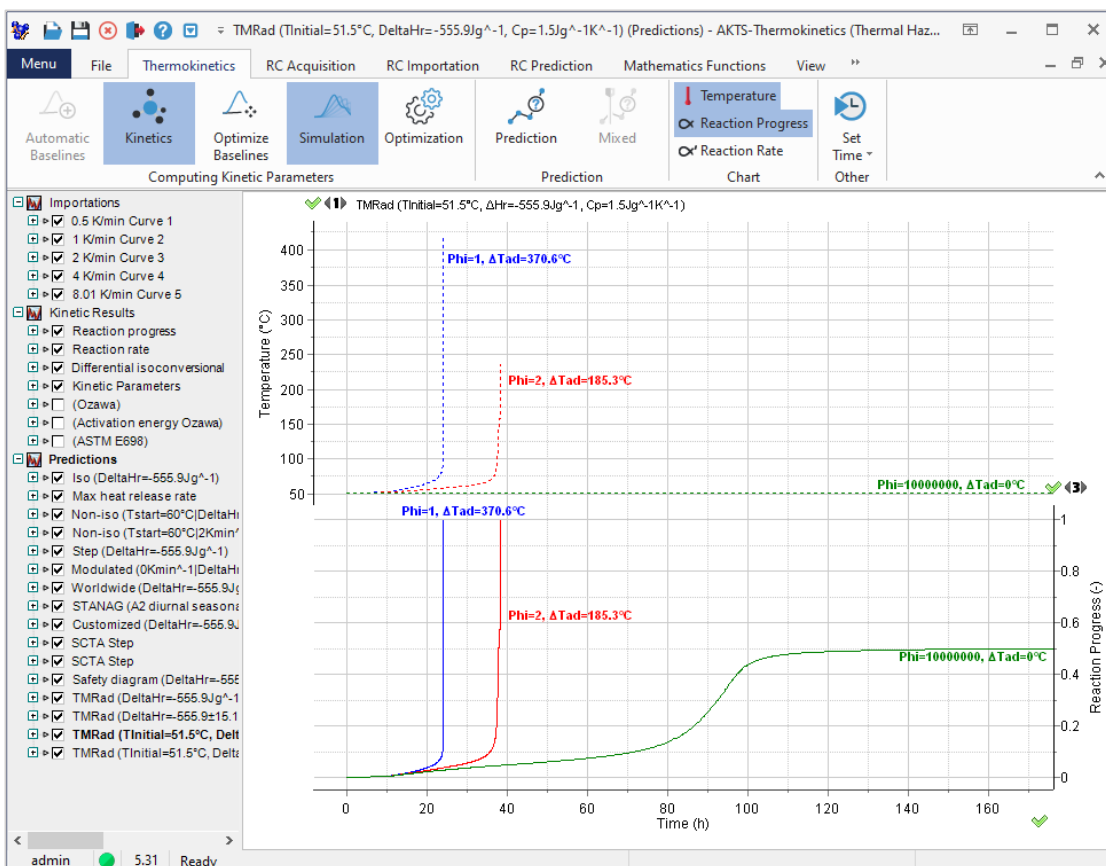


FIG. 6 - (Top) Dependence of TMRad and ΔTad on the values of phi-factor marked on curves. (Bottom) Influence of the phi-factor on the reaction progress at 51.5°C under isothermal conditions (Φ = 1e+7) and the adiabatic runaway curves for an initial temperature of 51.5°C with Φ = 2 and 1 (for Φ = 1 TMRad amounts to 24h), respectively. ΔHr = -555.9±15.1 J/g and Cp = 1.5 J/g/K.

(上)曲線上にマークされたファイファクターの値に対する TMRad および ΔTad の依存性。(下)等温条件下(Φ = 1e+7)での 51.5° C での反応進行に対するファイファクターの影響 また、初期温度 51.5° C、Φ = 2 および 1(Φ = 1 の場合 TMRad は 24 時間)の断熱暴走曲線。ΔHr = -555.9 ± 15.1 J / g および Cp = 1.5 J / g / K。

The blue curve in the graph above presents the simulation of the reaction course in ton-scale (fully adiabatic conditions, $\Phi=1$), the green curve in mg-scale (total exchange of the reaction heat with surrounding, Φ taken as $1e+7$). The red curve displays the reaction behaviour in semi-adiabatic conditions for $\Phi=2$. For checking the influence of the thermal inertia (Φ factor) on TMRad introduce required values of Φ -factor in respective fields as shown below:

上のグラフの青色曲線は、トンスケール(完全断熱状態、 $\Phi = 1$)での反応過程のシミュレーション、mg スケール(周囲との反応熱の全交換、 Φ を $1e +$ と見なした)の場合を緑色曲線で示しています。

赤い曲線は、 $\Phi = 2$ の半断熱条件での反応挙動を示しています。TMRad に対する熱慣性(ファイファクター)の影響を確認するために、以下に示すように、それぞれのフィールドにファイファクターの必要な値を導入します。

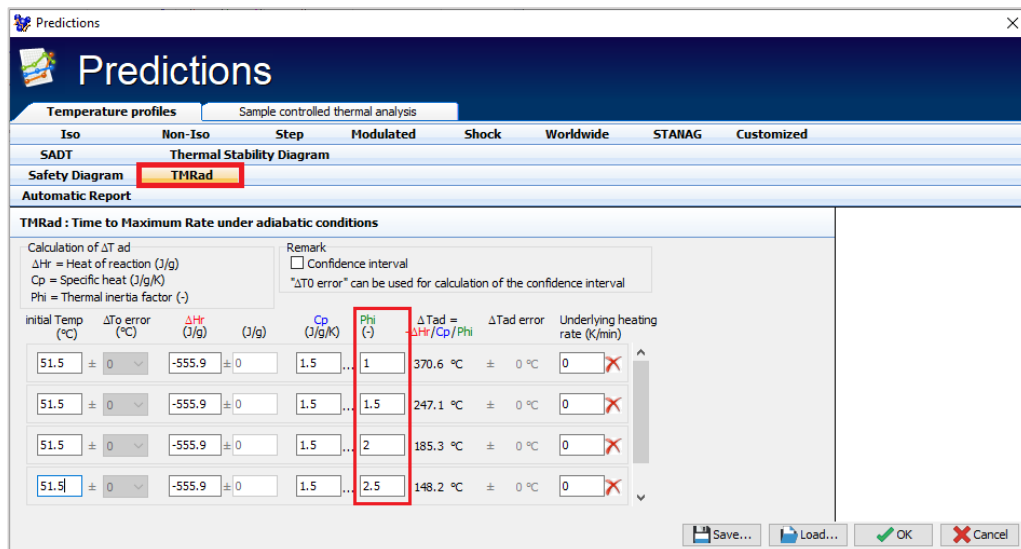


FIG. 7 - Heat exchange properties of the system characterized by Φ factor significantly influence the TMRad, ΔT_{ad} and the temperature dependence of the reaction progress.

The graph displays the input of specific Φ factor values.

ファイファクターによって特徴付けられるシステムの熱交換特性は、TMRad、 ΔT_{ad} 、および反応進行の温度依存性に大きく影響します。グラフには、特定の Φ ファクター値の入力が表示されます。

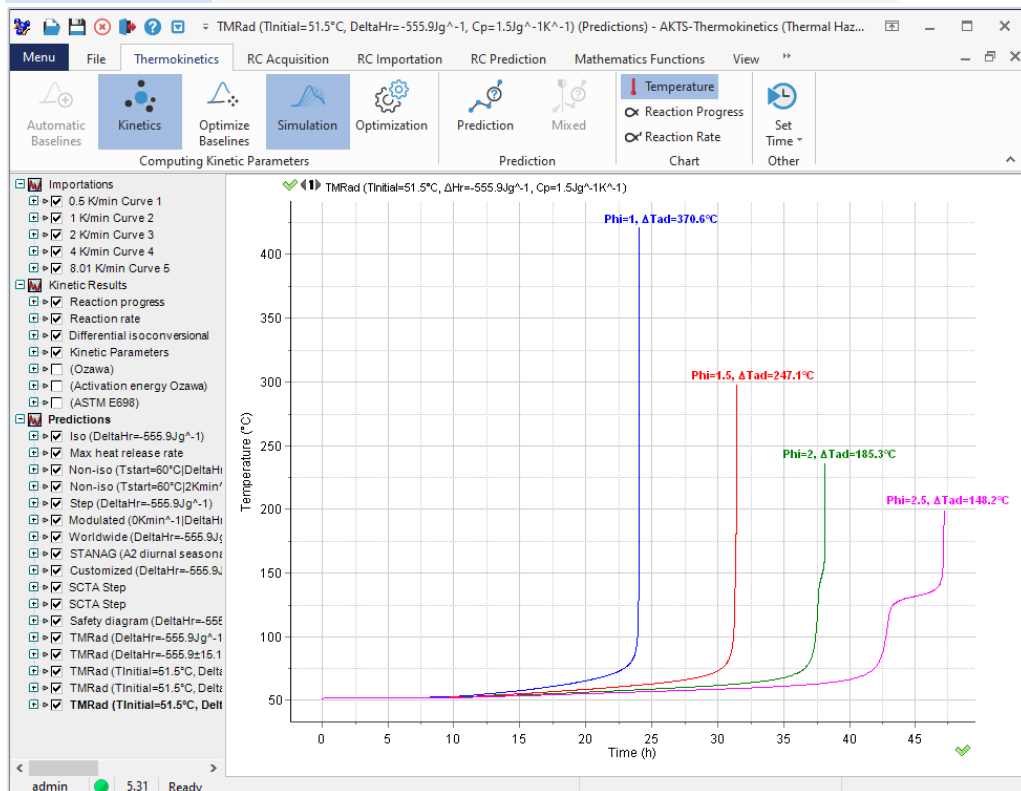


FIG. 8 – Adiabatic runaway curves for different Φ factors.

さまざまな Φ 係数の断熱暴走曲線。

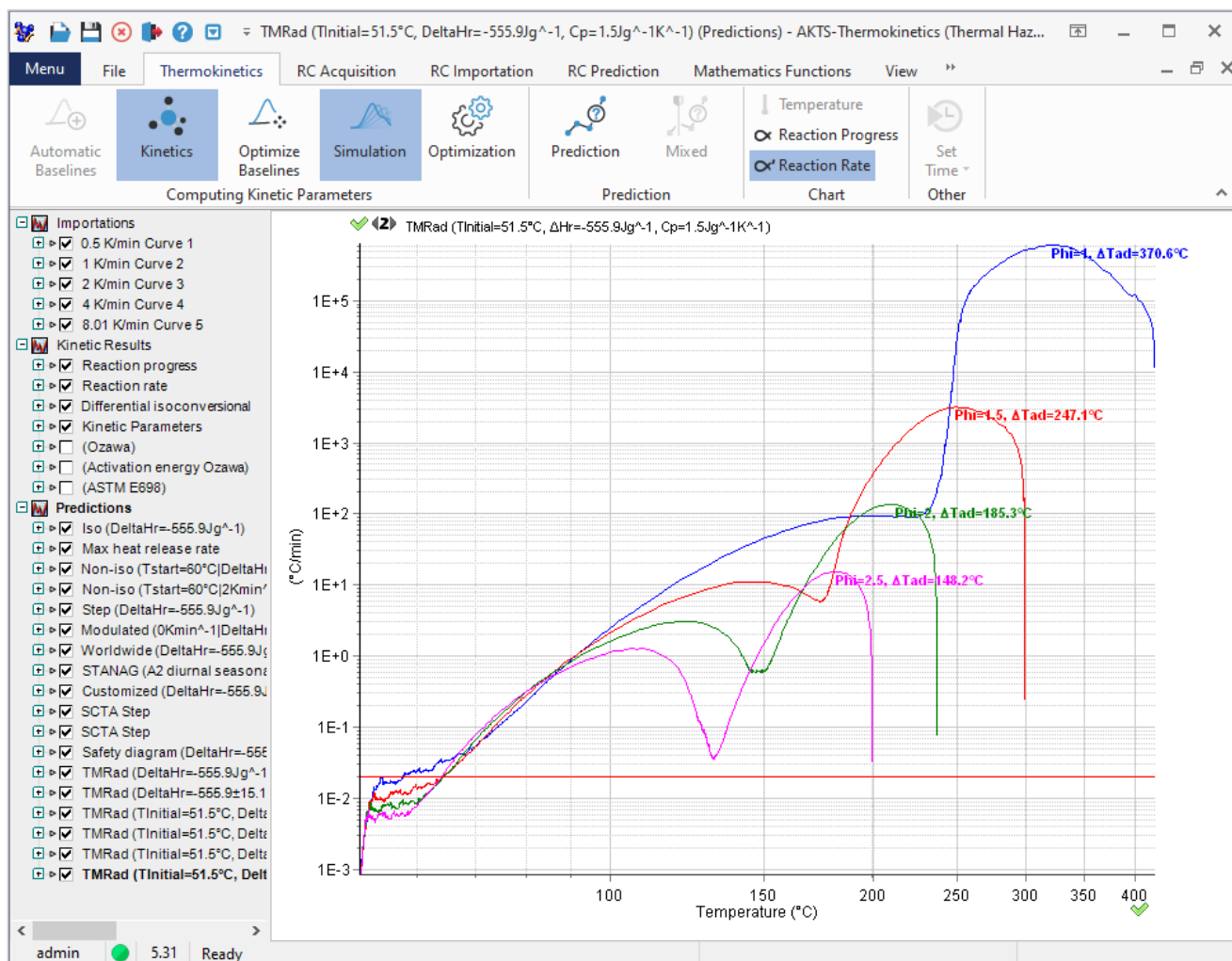


FIG. 9 – Self-heating rate curves for different Phi factors.

さまざまな Phi 係数の自己発熱率曲線

Φ	$\Delta T_{ad} / K$
1	370.6
1.5	247.1
2	185.3
2.5	148.2

TABLE. 1 - Influence of the Phi factor on the ΔT_{ad} at following conditions: $T_{initial} = 51.5^{\circ}C$, $\Delta H_r = -555.9 \pm 15.1 J/g$ and $C_p = 1.5 J/g/K$

次の条件での ΔT_{ad} に対する Phi 係数の影響: $T_{initial} = 51.5^{\circ}C$ 、
 $\Delta H_r = -555.9 \pm 15.1 J/g$ および $C_p = 1.5 J/g/K$

THERMAL SAFETY DIAGRAM FOR NON-ADIABATIC CONDITIONS

Click on the tab “Thermal Stability Diagram” to calculate the Time to the Maximum Rate under non-adiabatic conditions as a function of the external conditions and the sample properties.

「熱安定性図」タブをクリックして、非断熱条件下での最大速度までの時間を外部条件とサンプル特性の関数として計算します。

The Thermal Stability Diagram allows evaluating the dependence of the Time to Maximum Rate under any, non-adiabatic conditions, as a function of the external- (temperature, size and geometry of the container) and internal parameters, specific to the sample (such as density, specific heat, thermal conductivity, etc).

熱安定性図を使用すると、非断熱条件下での時間の最大速度への依存性を、サンプルに固有の外部（温度、サイズ、および形状）および内部パラメーター（など）の関数として評価できます。密度、比熱、熱伝導率など。

The screenshot shows the 'Predictions' software interface. The main window is titled 'Predictions' and has a tab for 'Thermal Stability Diagram'. The interface is divided into several sections:

- Temperature profiles:** Iso, Non-Iso, Step, Modulated, Shock, Worldwide, STANAG, Customized.
- Safety Diagram:** SADT, Thermal Stability Diagram (highlighted), TMRad.
- Automatic Report:** Safety Diagram, TMRad.
- Thermal Stability Diagram:**
 - Internal properties:** Initial temp. (°C) 20, Density (kg/m³) 1000, Cp (J/g/K) 1.5, Lambda (W/m/K) 0.1, ΔHr (J/g) -555.9.
 - External properties:** U (W/m²/K) 5, External temp. Load Profile.
 - General properties:** Time 7 day, Maximum time step (s) 1000, Keep all graphics (checkbox).
 - Variation of parameters:** Surrounding temperature (Iso, °C) (dropdown menu).
 - Surrounding temperature (iso) dialog box:** From 50 (°C), To 100 (°C), Additional step = + 5 (°C) (selected), Multiplicative step = * 10.

FIG. 1 - Input of the surrounding temperature during the evaluation of the dependence of the time to maximum rate under non-adiabatic conditions.

非断熱条件下での最大速度への時間依存性の評価中の周囲温度の入力

The diagram shown below displays two zones: safe and unsafe and transparently presents the time in which the operations with the material are safe. The plot depicted below shows the impact of the surrounding temperature on the time of reaching the maximal rate of the reaction for parameters introduced by user.

以下の図は、安全と危険の 2 つのゾーンを示し、材料を使用した操作が安全である時間を透過的に示しています。以下に示すプロットは、ユーザーが導入したパラメータの反応の最大速度に到達する時間に対する周囲温度の影響を示しています。

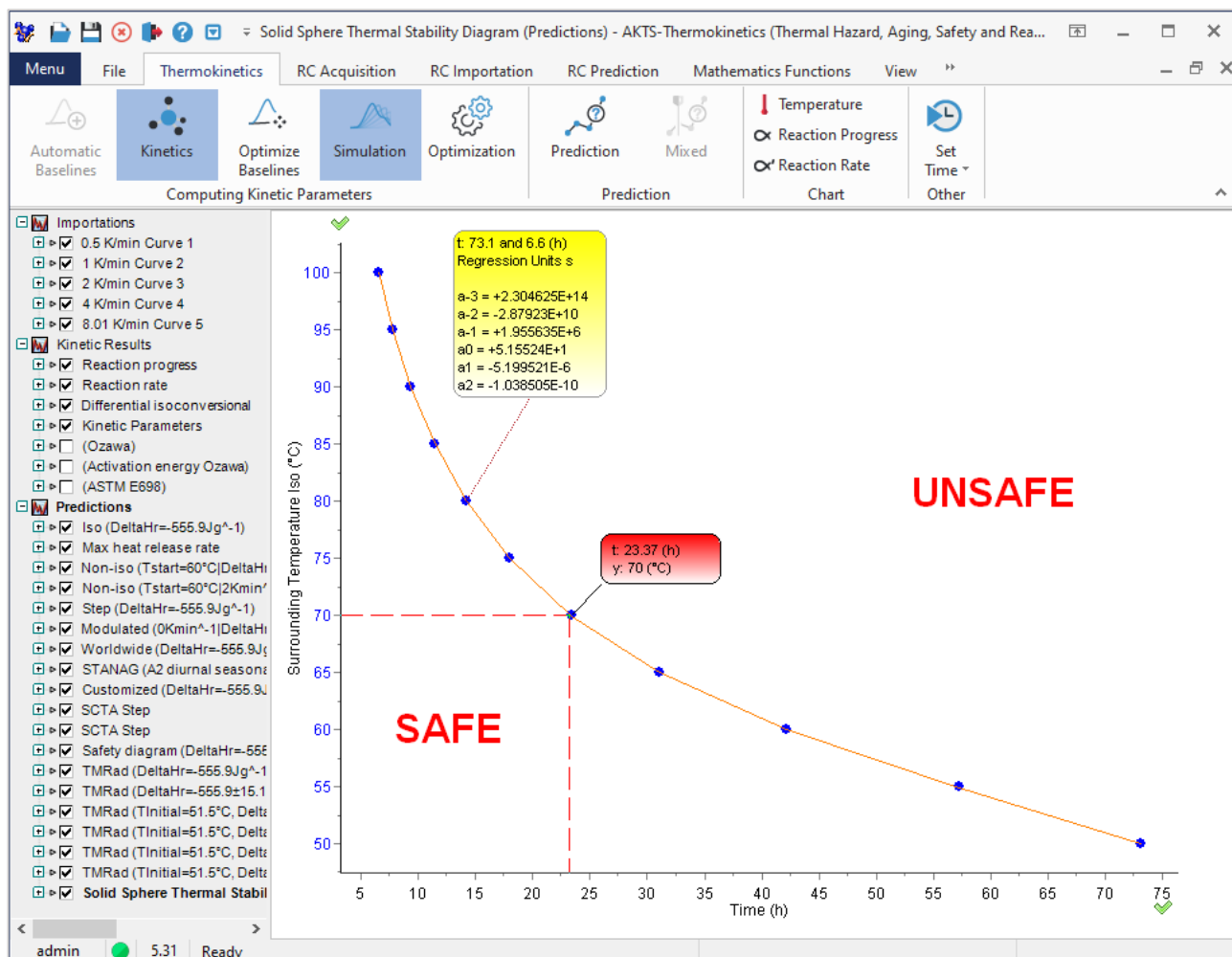


FIG. 2 - Influence of the surrounding temperature on time to maximum rate (TMR) under non-adiabatic conditions for a sample mass $m = 50\text{kg}$ and initial sample temperature $T_s = 20^\circ\text{C}$. The time to explosion is increasing, if the surrounding temperature T_e is decreasing. At $T_e = 70^\circ\text{C}$ the TMR amounts to 23.37 hrs.

サンプル質量 $m = 50\text{kg}$ および初期サンプル温度 $T_s = 20^\circ\text{C}$ の非断熱条件下での最大速度 (TMR) までの時間に対する周囲温度の影響。周囲温度 T_e が低下している場合、爆発までの時間は増加しています。
 $T_e = 70^\circ\text{C}$ では、TMR は 23.37 時間になります。

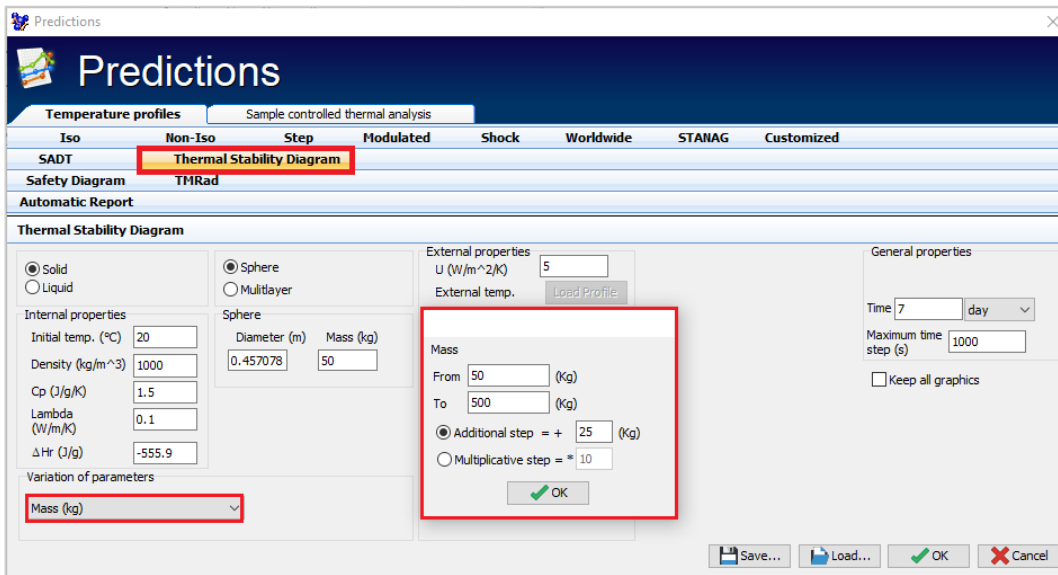


FIG. 3 - Input of the mass required for the evaluation of the dependence of the time to maximum rate under non-adiabatic conditions.

非断熱条件下における最大速度への時間依存性の評価に必要な質量の入力

測定試料の質量が大きくなると最大発熱速度に達する時間が短くなります。

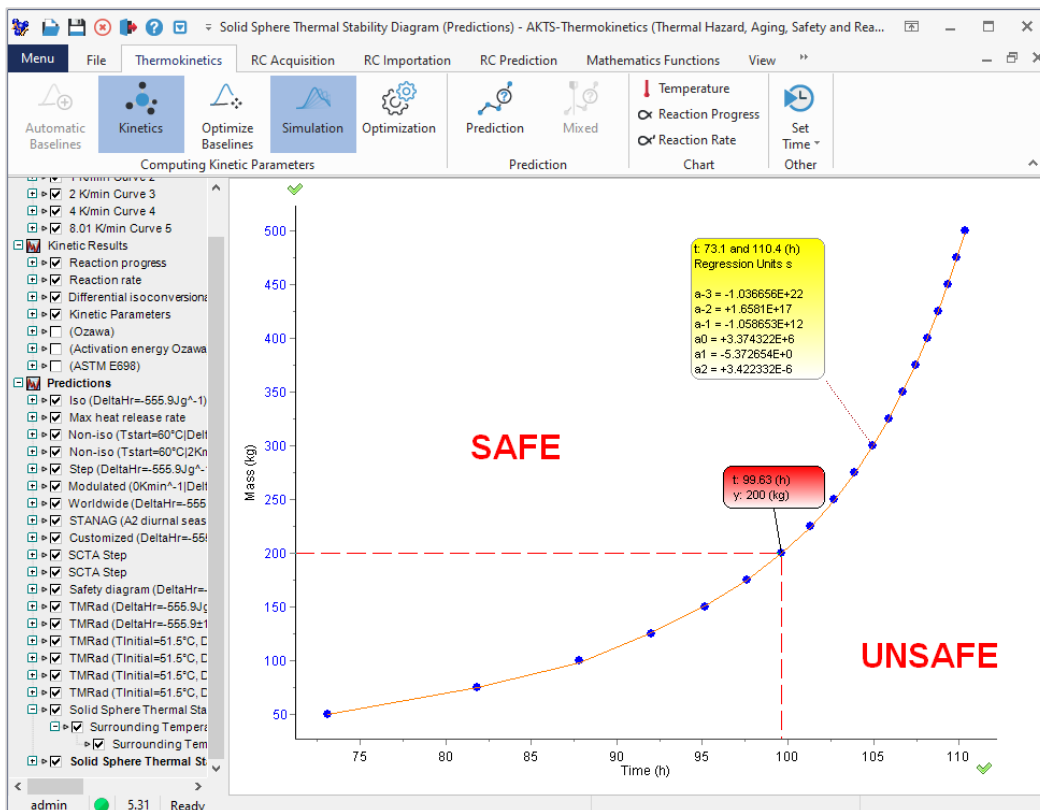


FIG. 4 - Influence of the sample mass on time to maximum rate under non-adiabatic conditions for an initial sample temperature $T_s=20^\circ\text{C}$ and external temperature $T_e = 50^\circ\text{C}$.

The time to maximum rate under non-adiabatic conditions is increasing, if the sample mass is increasing. For the sample mass of 200kg duration of the safe zone amounts to 99.63 hrs.

初期サンプル温度 $T_s = 20^\circ\text{C}$ および外部温度 $T_e = 50^\circ\text{C}$ の非断熱条件下での最大速度までの時間に対するサンプル質量の影響。サンプルの質量が増加している場合、非断熱条件下での最大速度までの時間は増加しています。セーフゾーンの持続時間が 200kg のサンプル質量の場合、99.63 時間になります。

— SIMULATION OF THE SELF-ACCELERATING-DECOMPOSITION TEMPERATURE (SADT) —

The prediction of the thermal behaviour in kg-scale is illustrated by the determination of the Self-Accelerating Decomposition Temperature (SADT) according to the recommendations of Manual of Tests and Criteria of the United Nations on the transport of dangerous goods (the so-called “Orange Books”). One can find few different definitions of SADT, however in our Software we apply the definition given in the 'Orange Books'.

kg スケールでの熱的挙動の予測は、危険物輸送に関する国連勧告の試験および基準マニュアル(いわゆる「オレンジブック」)があります。SADT についてはいくつかの異なる定義を見つけることができますが、私たちのソフトウェアでは、「オレンジブック」で与えられた定義を適用しています。

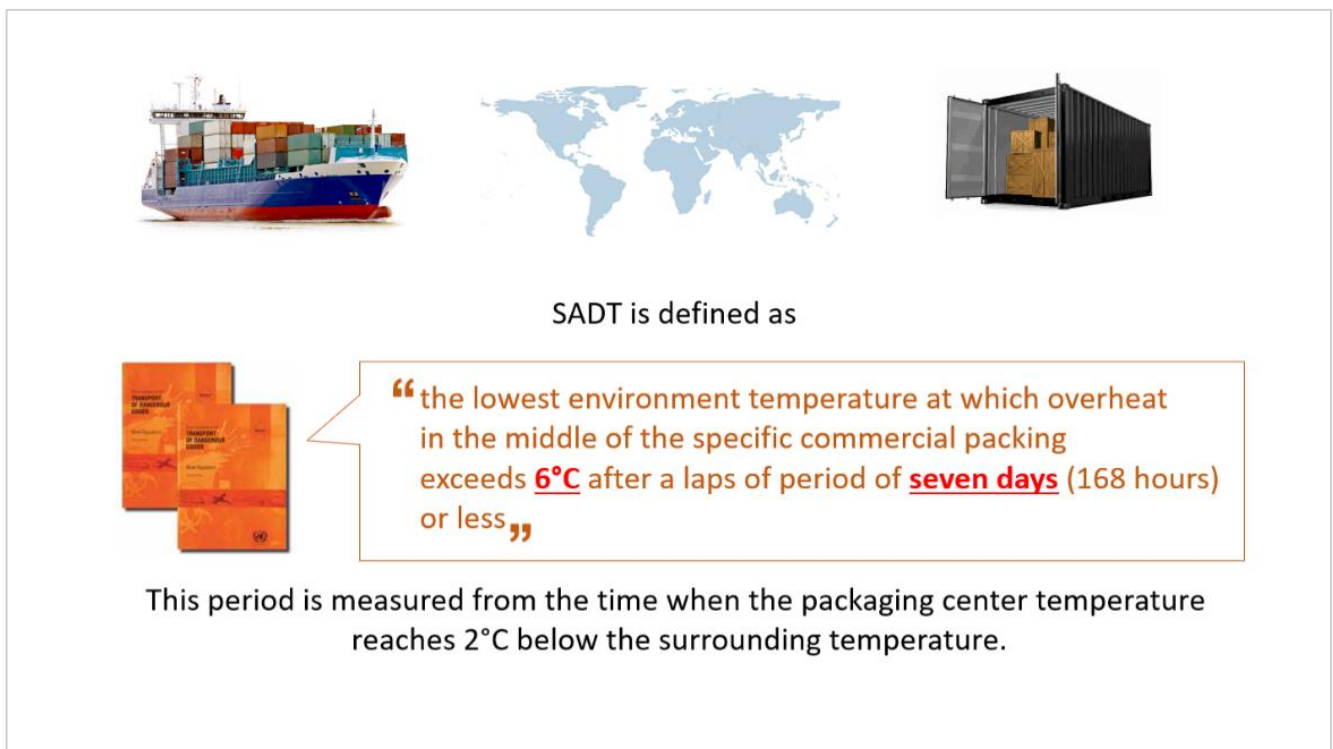


FIG. 1 - Definition of the Self-Accelerating-Decomposition Temperature (SADT) given in the Orange Book.

オレンジブックに記載されている自己加速分解温度 (SADT) の定義。

Click on the tab SADT to proceed with calculations.

[SADT]タブをクリックして、計算を続行します。

SADT calculation requires specifying:

- ▶ The physico-chemical properties of the examined material such as its density, specific heat capacity, heat of reaction and thermal conductivity (solids)
- ▶ Container's geometry and size
- ▶ Sample mass

SADT 計算では、以下を指定する必要があります。

- 密度、比熱容量、反応熱、熱伝導率(固体)など、検査対象の材料の物理化学的特性
- コンテナの形状とサイズ
- サンプル質量

Thermal Saftey Software allows to determine the effect of properties of containers on the reaction progress and heat accumulation conditions. The user can evaluate the critical container parameters such as its critical radius, the necessary thickness of insulation, and the influence of the surrounding temperature on storage and transport safety.

Thermal Saftey Software を使用すると、反応の進行と熱の蓄積条件に対するコンテナの特性の影響を判断できます。ユーザーは、重要な半径、必要な断熱材の厚さ、保管と輸送の安全性に対する周囲温度の影響など、重要なコンテナパラメータを評価できます。

The screenshot shows the 'Predictions' software window with the 'SADT' tab selected. The 'Internal properties' section is highlighted with a red dashed box, showing radio buttons for 'Solid' (selected) and 'Liquid'. Other sections include 'External properties' (Side U, Top U, Bottom U), 'Temperature Conditions SADT' (Te, Tc, search parameters), and 'General properties' (Determine SADT, Calculate cooling coefficient, Time, Mesh precision, Data storage, Stop calculation if T > 130 °C).

FIG. 2 - Input of parameters required for SADT calculation.

SADT 計算に必要なパラメータの入力。

とくに下段赤枠内の赤破線枠の solid、liquid (固相、液相) の選択は重要です。

SADT 相当温度が固相であり、熱分解発熱反応も固相の場合、予測される SADT 値は妥当な値です。

SADT 相当温度が液相であり、熱分解発熱反応も液相の場合、予測される SADT 値は妥当な値です。

SADT 相当温度が固相であり、熱分解発熱反応が液相の場合、**予測される SADT 値は過剰に安全側となります。**

(液相の熱分解反応データから固相の物質の熱安全性を評価すると SADT 値は非常に低い温度になります。)

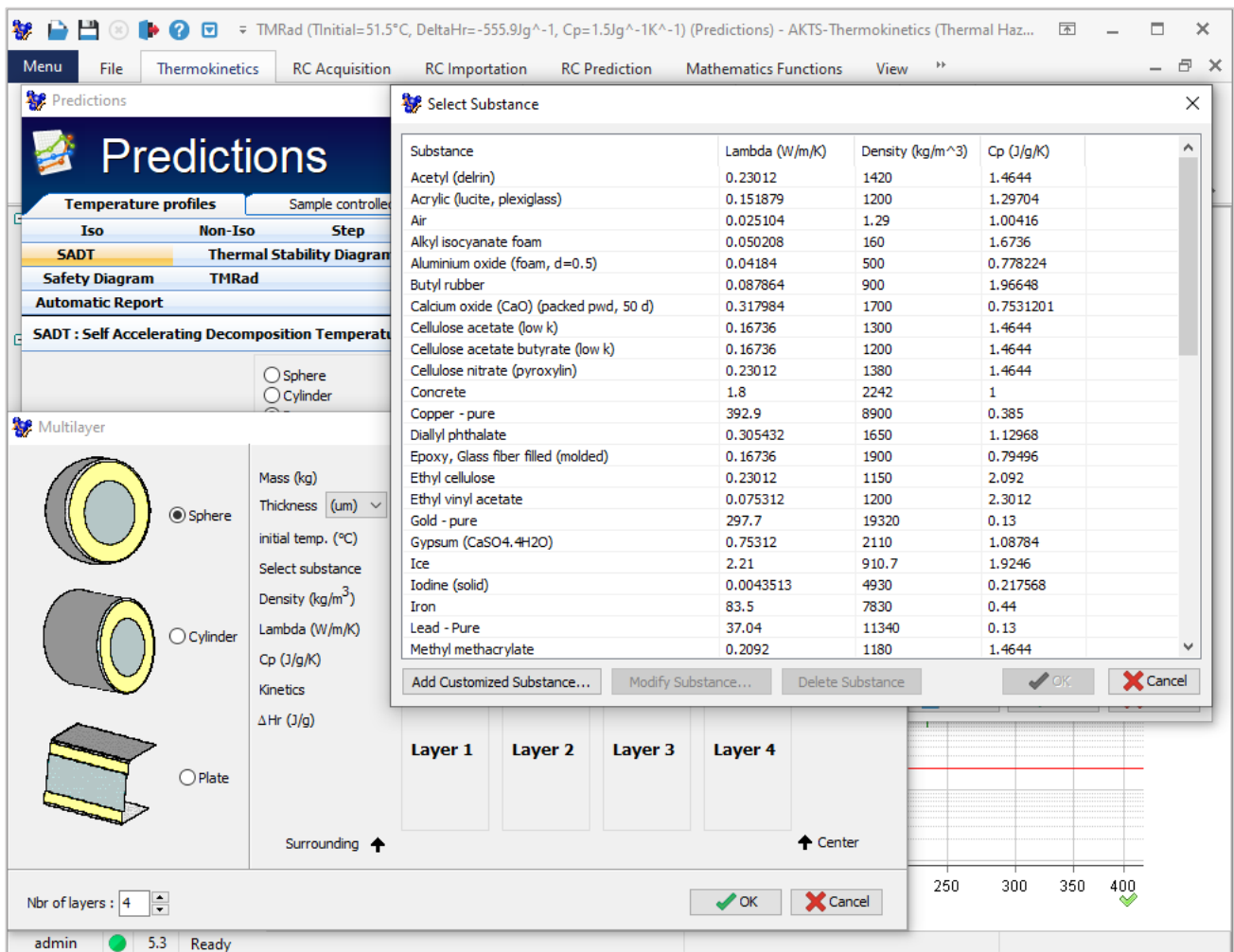


FIG. 3 - Input of parameters (placed in scrolled table) required for SADT calculation.
 SADT 計算に必要なパラメータの入力(スクロールテーブルに配置)。

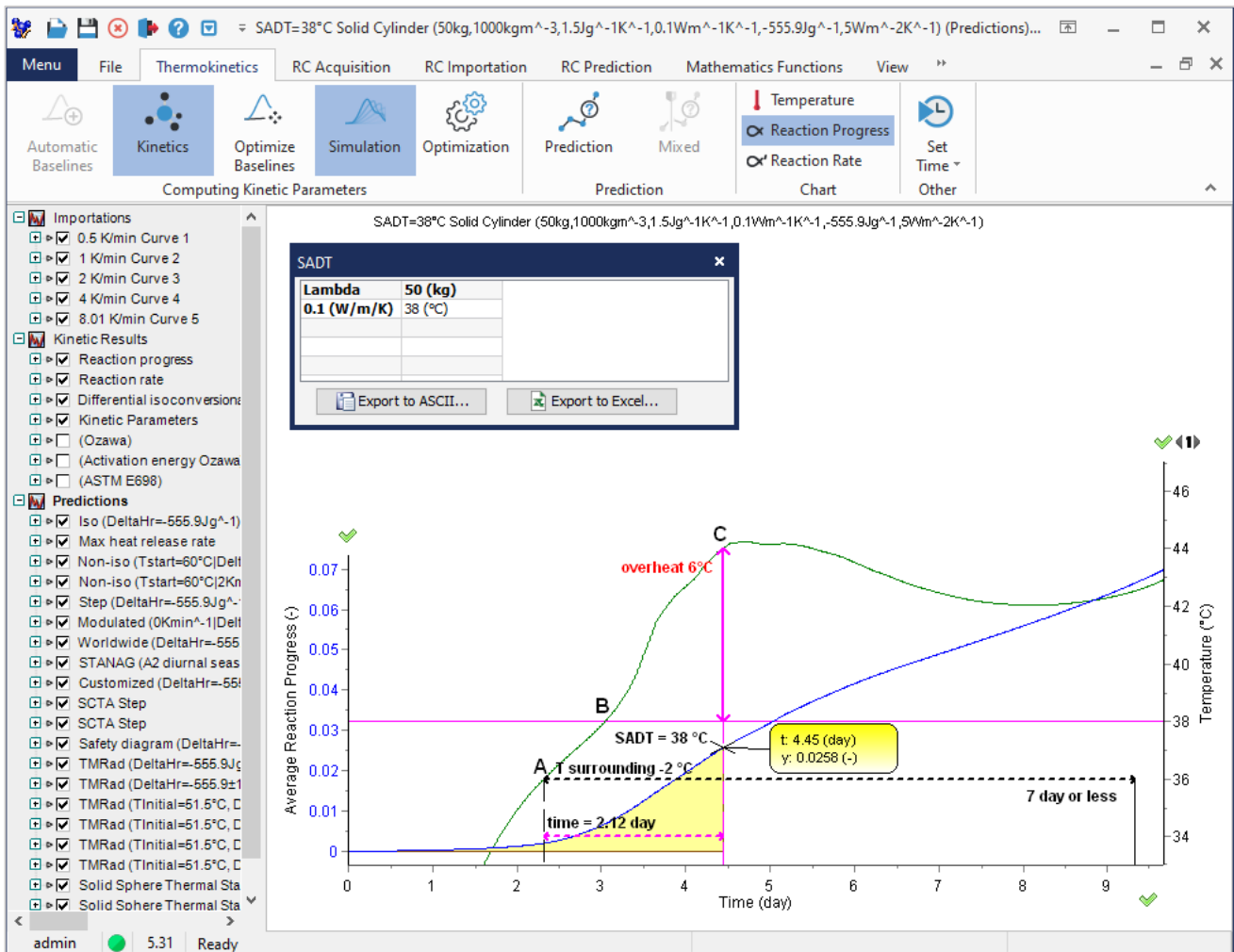


FIG. 4 - Simulation of the SADT for 50 kg sample placed in a drum with filling height $H = 63.4$ cm and diameter $D = 31.7$ cm. (pink: surrounding temperature $T_e = 38^\circ\text{C}$, green: sample temperature in the centre of the drum T_c , blue: reaction extent α).

Point A indicates the time when the packaging centre temperature reaches 2°C below the surrounding temperature.

The overheat of 6°C in the centre of the container (point C) is reached after 4.45 days. 38°C is the lowest surrounding temperature fulfilling the SADT criterion.

充填高さ $H = 63.4$ cm、直径 $D = 31.7$ cm のドラムに配置された 50kg のサンプルの SADT のシミュレーション。

(ピンク: 周囲温度 $T_e = 38^\circ\text{C}$ 、緑: ドラム中心のサンプル温度 T_c 、青: 反応進行度 α)。

ポイント A は、パッケージセンターの温度が周囲温度より 2°C 低くなるまでの時間を示します。

コンテナの中心(ポイント C)で 6°C の過熱は、4.45 日後に到達します。

38°C は、SADT 基準を満たす最低周囲温度です。

SIMULATIONS OF THE SPATIAL DISTRIBUTION OF TEMPERATURE AND REACTION PROGRESS

Software allows the SADT determination and the simulation of the thermal behaviour of the material in the container at any temperature (e.g. at points A, B and C in the plot above).

Uncheck “Determine SADT” and introduce in “External properties” any requested temperature profiles.

ソフトウェアにより、SADT の決定と、任意温度でのコンテナ内の材料の熱的挙動のシミュレーションが可能になります。(たとえば、上記のプロットのポイント A、B、C)。

「SADT の決定」のチェックを外し、「外部プロパティ」に要求された温度プロファイルを導入します。

The screenshot shows the 'Predictions' software interface. The main window is titled 'Predictions' and has a tab for 'Sample controlled thermal analysis'. Underneath, there are several tabs: 'Iso', 'Non-Iso', 'Step', 'Modulated', 'Shock', 'Worldwide', 'STANAG', and 'Customized'. The 'SADT' tab is selected, and it is highlighted with a red box. Below the tabs, there are sub-tabs: 'Thermal Stability Diagram', 'Safety Diagram', and 'Automatic Report'. The main content area is titled 'SADT : Self Accelerating Decomposition Temperature'. It contains several sections: 'Internal properties' with fields for Initial temp (20), Density (1000), Cp (1.5), ΔHr (-555.9), and Lambda (0.1); 'Geometry' with radio buttons for Sphere, Cylinder (selected), Box, and Multilayer, and fields for Diameter (0.31692028), Height (0.63384057), Ratio H/D (2), and Mass (kg); 'External properties' with fields for Side U (5), Top U (5), and Bottom U (5), and buttons for 'Load Profile' and 'Clear'; and 'General properties' with checkboxes for 'Determine SADT' (unchecked) and 'Calculate cooling coefficient', a 'Time' field (7 days), 'Mesh precision', 'Data storage', and 'Stop calculation if T >' (130 °C). A red box highlights the 'External properties' section, and a red arrow points to the 'Iso (36°C)' option. At the bottom, there are 'Save...', 'Load...', 'OK', and 'Cancel' buttons.

FIG. 1 - Input of parameters for simulation of the thermal behaviour of the material in the container at any temperature (here at point A = 36°C, marked by an arrow).

材料の熱的挙動をシミュレーションするためのパラメータの入力

任意の温度における容器内(ここでは点 A = 36° C、矢印でマーク)温度を予測します。

右中段の赤破線の選択 Solid_Liquid の選択は重要です。

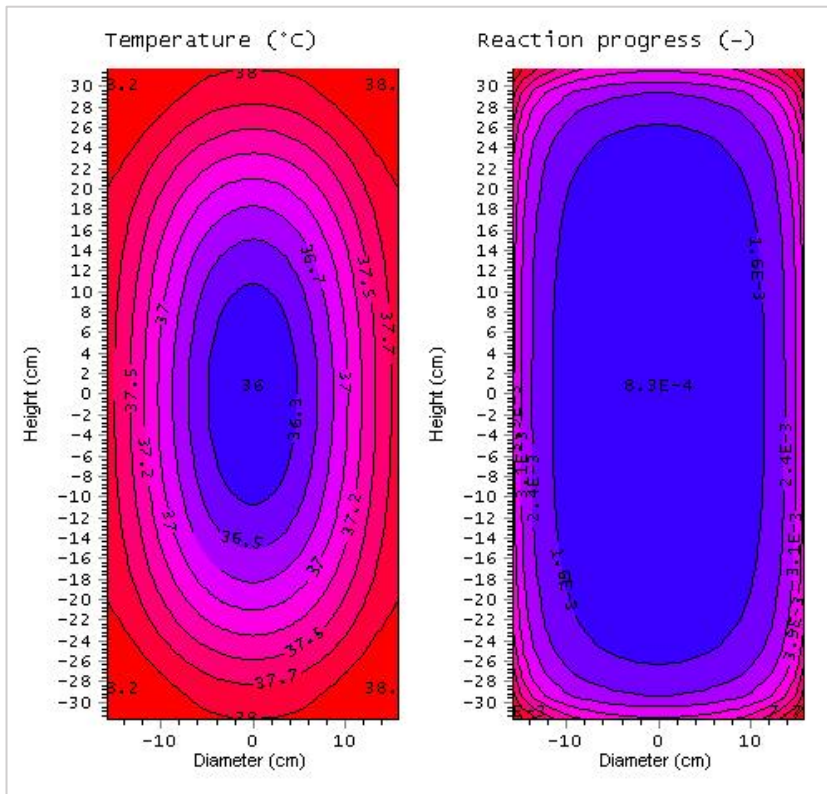


FIG. 2 - Simulations of the spatial distribution of temperature (left) and reaction progress α (right) for a mass of 50 kg in a drum with ratio $H/D = 2$ after period at which the point A (36°C) was reached – see Fig.4 in the previous section.

点 A (36°C) に達した後の比率 $H/D = 2$ のドラム内の質量 50kg の温度 (左) と反応進行 α (右) の空間分布のシミュレーション – 前のセクションの図 4 を参照してください。

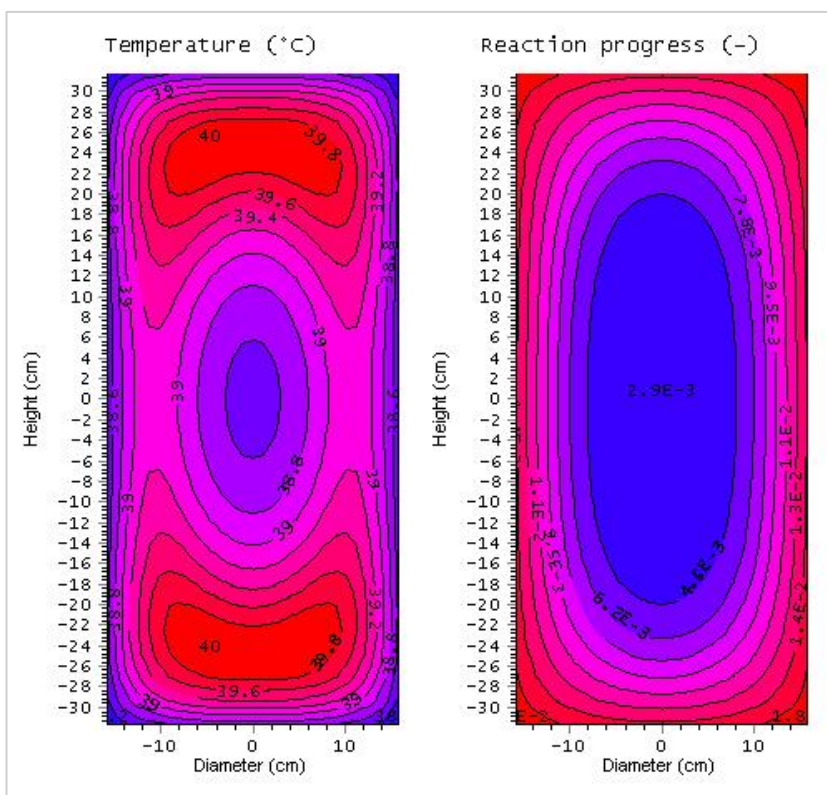


FIG. 3 - Simulations of the spatial distribution of temperature (left) and reaction progress α (right) for a mass of 50 kg in a drum with ratio $H/D = 2$ after period at which the point B (38°C) was reached – see Fig.4 in the previous section.

点 B (38°C) に達した後の比率 $H/D = 2$ のドラム内の質量 50kg の温度 (左) と反応進行 α (右) の空間分布のシミュレーション – 前のセクションの図 4 を参照してください。

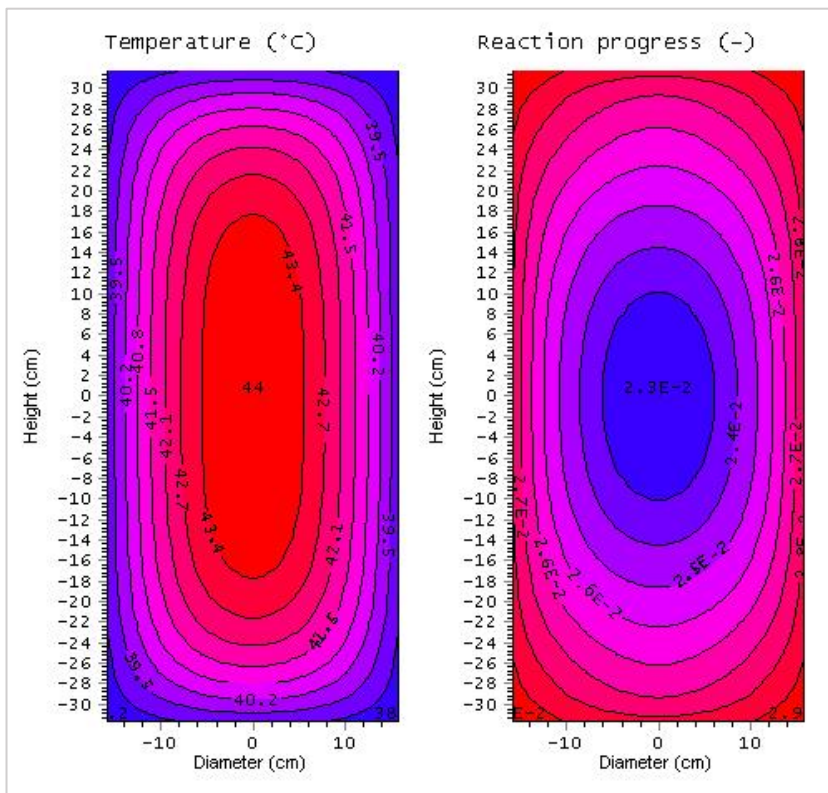


FIG. 4 - Simulations of the spatial distribution of temperature (left) and reaction progress α (right) for a mass of 50 kg in a drum with ratio $H/D = 2$ after period at which the point C (44°C) was reached – see Fig.4 in the previous section.

点A(44°C)に達した後の比率 $H/D = 2$ のドラム内の質量 50kg の温度(左)と反応進行 α (右)の空間分布のシミュレーション – 前のセクションの図 4 を参照してください。

COMMENTS