

На правах рукописи

Шейнман Ирина Яковлевна

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАССОБМЕНА ПРИ
АНАЛИЗЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОПАСНОСТИ ХРАНЕНИЯ И
ТРАНСПОРТИРОВКИ РЕАКЦИОННОСПОСОБНЫХ
КОНДЕНСИРОВАННЫХ ВЕЩЕСТВ

Специальность 01.04.14 - Теплофизика и теоретическая теплотехника

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата
технических наук

Санкт-Петербург

2005

Работа выполнена в ФГУП «Российский научный центр Прикладная химия», Санкт-Петербург.

Научный руководитель: доктор технических наук,
Бенин Александр Исаакович

Официальные оппоненты: доктор технических наук,
Снегирев Александр Юрьевич
кандидат технических наук,
Мигров Юрий Андреевич

Ведущая организация: ГОУ ВПО Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)

Защита состоится мая 2005 г. в час. на заседании диссертационного совета Д 212.229.06 в ГОУ ВПО Санкт-Петербургский государственный политехнический университет по адресу: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 29, корпус, аудитория .

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

Автореферат разослан « » 2005 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 212.229.06

доктор технических наук, профессор Кортиков Николай Николаевич.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. Расчетно-теоретический анализ развития теплового взрыва в грузах, содержащих твердые вещества и жидкости с пониженной стабильностью, с целью определения допустимых условий их хранения и транспортировки, а также минимизации последствий аварийных ситуаций, является одной из важнейших задач при обеспечении термической безопасности в химическом производстве.

В настоящее время для этих целей в инженерной практике наибольшее распространение получили методики, основанные на результатах стационарной и нестационарной теорий теплового взрыва. В частности, именно эти методики использовались при разработке рекомендаций по экспериментальной оценке уровня термической опасности при транспортировке (Recommendations on the transport of dangerous goods. Manual of tests and criteria. Fourth revised edition. United Nations, New York and Geneva, 2003). Очевидным преимуществом таких методик является их простота и возможность получения результатов «с запасом». Однако они имеют и ряд серьезных недостатков, наиболее существенными из которых являются неприменимость теории для сложных многостадийных реакций и объектов сложной формы, при произвольных граничных условиях и в случае существенного вклада свободной конвекции в теплоперенос в веществе, а также при анализе вырожденных режимов теплового взрыва. В связи с этим, возникает необходимость использования детальных математических моделей теплообмена при хранении и транспортировке опасных грузов. Из-за разнообразия и сильной нелинейной взаимосвязи физико-химических процессов, протекающих в грузе, выбор степени детализации моделей, одновременно обеспечивающей достаточную точность расчета основных характеристик уровня опасности (в первую очередь критических условий теплового взрыва, периода индукции при нарушении условий хранения и темпа роста давления при хранении в частично заполненных сосудах) и приемлемые вычислительные затраты, представляет достаточно сложную

задачу. **Целью диссертации** является разработка математических моделей и вычислительных алгоритмов для расчета тепломассообмена в грузах, содержащих конденсированные реакционноспособные вещества, а также применение этих моделей для решения ряда методических и практических задач, возникающих при определении безопасных условий хранения (транспортировки) и прогнозировании развития аварии в случае их нарушения. Для достижения поставленной цели были **решены следующие задачи:**

- проанализированы типовые условия хранения и транспортировки реакционноспособных конденсированных веществ;
- сформулирована математическая модель для описания хранения упаковок, уложенных в штабель и содержащих твердое реакционноспособное вещество;
- разработаны математическая модель и вычислительный алгоритм для расчета тепломассообмена при хранении многокомпонентных реакционноспособных жидкостей в частично и полностью заполненных сосудах;
- проведены тестирование вычислительного алгоритма и проверка адекватности элементов моделей;
- решена задача о развитии теплового взрыва в результате превышения допустимой безопасной температуры внешней среды при хранении реакционноспособной многокомпонентной жидкости, частично заполняющей вертикальный цилиндрический бак;
- решена задача о развитии теплового взрыва в штабеле, составленном из отдельных упаковок;
- с помощью разработанных моделей и алгоритмов выполнен анализ рекомендованных ООН экспериментальных методик определения температуры самоускоряющегося разложения (ТСУР), характеризующей уровень термической опасности при транспортировке конденсированных веществ.

Научная новизна полученных результатов состоит в следующем.

- Разработана и численно реализована математическая модель сопряженного теплообмена при хранении многокомпонентной реакционноспособной жидкости, частично заполняющей вертикальный герметичный цилиндрический сосуд со стенкой конечной толщины.
- Впервые численно исследованы особенности развития теплового взрыва при хранении реакционноспособной жидкости в частично заполненном герметичном баке промышленных размеров.
- Получены обоснованные оценки погрешностей и границ применимости стандартных экспериментальных методик, используемых для определения характеристик термической опасности при транспортировке (рассмотрены сопоставимость результатов US теста и Изотермического теста; применимость Дьюар-теста для твердых веществ; определение ТСУР для составных грузов (штабель)).

Практическая ценность работы. Представленные в работе математические модели и алгоритмы были использованы при создании специализированного программного комплекса Thermal Safety Software (TSS), разрабатываемого в ФГУП «РНИИ Прикладная химия» и предназначенного для анализа термической опасности в химической промышленности. Результаты решения задач о развитии теплового взрыва в герметичном баке, частично заполненном реагирующей жидкостью и анализа экспериментальных тестов по определению ТСУР могут быть использованы при разработке методических рекомендаций по оценке термической опасности при хранении и транспортировке грузов. Работа выполнялась в рамках проекта № 1498 «System of Thermal Safety of Chemical Technologies» Международного научно-технического центра (МНТЦ).

На защиту выносятся разработанные математические модели и вычислительные алгоритмы, а также результаты решения методических задач и анализа рекомендованных методик измерения ТСУР.

Апробация работы. Основные результаты были представлены на международной научной конференции «Математические методы в технике

и технологиях» (С.-Петербург, 2000), 30 - ой конференции Северо-американского общества термического анализа (NATAS) (Pittsburgh, Pennsylvania, USA, 2002), международном семинаре МНТЦ «Наука и компьютерные технологии» (Москва, 2003), ежегодном семинаре Европейской рабочей группы Института разработки систем сброса давления (EDUG) (Institute of Safety and Security, Switzerland, Basel, 2004), международной конференции по горению и детонации «Мемориал Зельдовича-2004» (Москва, 2004), расширенном научно-техническом совете НИК 9 ФГУП «РНЦ Прикладная химия» (С.-Петербург, 2003, 2005), семинаре кафедры теоретических основ теплотехники СПбГТУ под руководством проф. С.З. Сапожникова (С.-Петербург, 2005).

Публикации. Основные результаты, полученные в диссертации, представлены в девяти научных публикациях.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы, включающего 88 наименований. Работа изложена на 156 страницах, содержит 42 рисунка и 15 таблиц.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы диссертационной работы и новизна полученных результатов, формулируются цели и задачи исследования и положения, выносимые на защиту. Приводится краткий обзор содержания работы.

Первая глава содержит краткое описание стационарной и нестационарной теорий теплового взрыва, а также основанных на них инженерных методов оценки критических условий и периода индукции и области их применимости.

Во второй главе формулируются математические модели физико-химических процессов, протекающих при хранении твердых и жидких реакционноспособных сред.

В разделе 2.1 описаны используемые кинетические модели химических реакций. Для жидкостей используются концентрационные

модели, основанные на обобщенном законе действующих масс, с константой скорости реакции, определяемой по закону Аррениуса. Для твердых веществ применяются формальные кинетические модели, в которых скорость отдельной стадии сложной реакции является функцией формальной координаты (конверсии). Температурная зависимость скорости реакции описывается законом Аррениуса, в котором в качестве предэкспонента и энергии активации используются некоторые эффективные параметры. Представленные в работе формальные модели позволяют описать реакции n -го порядка, автокаталитическую и топахимическую реакции, химические превращения, подчиняющиеся моделям Ерофеева и Яндера.

В разделе 2.2 сформулированы модели теплообмена в грузах, содержащих твердые реакционноспособные вещества. Рассматриваются следующие объекты: бочка цилиндрической формы со стенкой конечной толщины в предположении осевой симметрии полей температуры и конверсий (2-мерная задача), контейнер в форме прямоугольного параллелепипеда со стенкой конечной толщины и штабель, составленный из одинаковых контейнеров (3-х мерные задачи). Кроме того предусмотрена возможность решения задач в одномерной постановке для бесконечной пластины и цилиндра, а также сферы, содержащих химически инертные вставки и оболочку.

Для описания теплообмена в реагирующем веществе применяется модель безгазового горения, включающая в себя нестационарное уравнение теплопроводности с источником слагаемым, описывающим тепловыделение в результате химического превращения, а также систему уравнений для изменения конверсий за счет химической реакции. Теплообмен в стенках упаковок и в инертных вставках описывается нестационарным уравнением теплопроводности.

Начальное распределение температуры и конверсий принимается однородным, на внешних поверхностях грузов предусмотрены граничные условия 1-го, 2-го и 3-го рода с параметрами, в общем случае зависящими

от времени, а также учет теплообмена излучением. На границах между химически инертной стенкой (вставкой) и реагирующим веществом используются условия равенства тепловых потоков и температур. На границах между отдельными контейнерами, составленными в штабель, предусмотрено условие неидеального контакта, моделируемое с помощью введения термического сопротивления.

В разделе 2.3 приводится модель сопряженного теплообмена при хранении (транспортировке) жидкостей с пониженной стабильностью (характерный уровень опасных температур окружающей среды до $\approx 75^{\circ}\text{C}$) в частично заполненных герметично закрытых сосудах (степени заполнения 80–95% от общего объема). Одним из важнейших факторов, определяющих выбор математической модели рассматриваемых процессов, является режим течения. В связи с этим, в разделе 2.3.1 приведен обзор работ, посвященных исследованию условий перехода от ламинарного к турбулентному режиму течения при естественной конвекции жидкости в замкнутой области. Отмечается, что согласно литературным данным, в зависимости от геометрии области, вида граничных условий и свойств среды, критические значения числа Рэлея изменяются в очень широком диапазоне (от 10^9 до 10^{13}). Проведенные в диссертации оценки свидетельствуют о том, что для многих промышленных емкостей характерные числа Рэлея не выходят за границы этого диапазона. В связи с этим, а также учитывая отсутствие надежных и приемлемых с точки зрения вычислительных затрат подходов к описанию турбулентных режимов нестационарных естественно-конвективных течений в рассматриваемых условиях, в диссертации рассматриваются только ламинарные режимы течения. При этом, как в жидкости, так и в газовой подушке используется система уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости. Эффекты, связанные с выталкивающей силой, описываются с помощью модификации приближения Буссинеска, позволяющей учесть изменение во времени средних по объему значений

давления и плотности, а также зависимость теплофизических свойств смеси от температуры и состава.

В разделе 2.3.2 описываются детали модели теплообмена в свободном пространстве сосуда (газовой подушке), заполненном, в общем случае, парами жидкости и слаборастворимыми газами, и модель для расчета динамики роста давления в сосуде. В отличие от модели для многокомпонентной реагирующей жидкости, для газовой подушки используется квазиоднокомпонентное приближение, не предусматривающее учет пространственной неоднородности состава. Химическая реакция в газовой фазе не рассматривается.

При расчете давления в сосуде парциальное давление паров определяется как давление насыщенных паров при температуре, равной средней температуре поверхности раздела жидкость - газовая подушка. При расчете парциального давления слаборастворимых газов, наряду с влиянием роста температуры в газовой подушке, принимается во внимание уменьшение свободного объема в баке за счет термического расширения жидкости.

В разделе 2.3.3 приведены модель теплообмена в стенках бака, представляющая собой уравнение теплопроводности, начальные и граничные условия. На внешней поверхности стенки предусмотрены те же возможности постановки граничных условий, что и для грузов, содержащих твердые вещества. На внутренней поверхности стенок бака задаются условия прилипания и непроницаемости для уравнения движения и условие равенства нулю диффузионных потоков для уравнений переноса компонент жидкости, а также условия равенства температур и тепловых потоков. Поверхность раздела фаз жидкость-газ принимается плоской и неподвижной, влияние сил поверхностного натяжения не рассматривается. При постановке граничных условий для уравнения энергии на поверхности раздела используется среднее по площади поверхности раздела значение плотности массового потока паров.

Представленные в разделе 2.3 модели были реализованы для частично и полностью заполненного вертикального цилиндрического бака, в предположении осевой симметрии полей температуры, скорости и концентраций, а также в тестовых целях для прямоугольной полностью заполненной полости (двумерная задача).

В третьей главе приведено подробное описание конечно-разностного вычислительного алгоритма, разработанного для реализации моделей, сформулированных во второй главе диссертации. В рамках этого алгоритма при аппроксимации уравнений переноса энергии и массы по времени используется частично неявная двухслойная схема 1-го порядка точности. При этом для расчета химического превращения и процессов переноса применяется метод дробных шагов (схема неполной аппроксимации). Решение уравнений импульса и неразрывности осуществляется с помощью неявного двухшагового проекционного метода. При решении многомерных задач применяются схемы приближенной факторизации.

Пространственная аппроксимация производных в исходных дифференциальных уравнениях, описывающих тепломассообмен в жидкости (газе), выполняется на неравномерных (со сгущением вблизи твердых поверхностей и поверхности раздела фаз) сетках со смещенными узлами (MAC сетка). При этом конвективные слагаемые аппроксимируются разностями против потока со вторым порядком точности, а диффузионные члены уравнений - центральными разностями. Важным элементом алгоритма является использование автоматически корректируемого в процессе расчета шага по времени, обеспечивающего требуемую точность расчета. Кроме того, следует отметить, что решение сопряженных задач осуществляется сквозным методом, позволяющим существенно повысить устойчивость алгоритма.

Четвертая глава посвящена поэтапному тестированию алгоритма и проверке адекватности элементов математических моделей, а также оценке

оптимальных параметров численного метода, определяющих величину шага по времени при расчете нестационарных процессов.

Для проверки качества решения уравнений сохранения энергии и массы для компонент при химических превращениях, решалась задача о развитии теплового взрыва в адиабатических условиях. Рассчитанные значения адиабатической температуры и периода индукции для 7 различных химических реакций сопоставлялись с данными, полученными с помощью программы LSODA, разработанной в Sandia national laboratories (Livermore) и специально предназначенной для решения систем жестких обыкновенных дифференциальных уравнений. Расхождение результатов не превышало 2.5 %.

Для тестирования части разработанного алгоритма, связанной с решением задач теплопроводности, было проведено сравнение результатов, полученных с его помощью, с соответствующими аналитическими решениями задачи о стационарном распределении температуры в плоской многослойной стенке и о нестационарном охлаждении цилиндра конечных размеров. Наиболее тщательному тестированию была подвергнута часть алгоритма, предназначенная для расчета гидродинамики и тепломассопереноса при свободной конвекции. При этом результаты решения тестовых задач сопоставлялись, как с имеющимися опубликованными численными расчетами, так и с результатами экспериментов. Диапазон чисел Рэлея в тестовых расчетах составил 10^4 – 10^{13} , чисел Прандтля 0.7–1000, коэффициентов формы 1–20. Рассматривались нестационарные и квазистационарные режимы свободной конвекции в прямоугольной полости, вертикальной щели и вертикальных цилиндрических сосудах для граничных условий 1-го, 2-го и 3-го рода. В качестве примера на рис. 1 приведено сравнение расчетных вертикальных распределений осредненной по радиусу температуры с соответствующими экспериментальными данными (Evans L.B., Reid R.C., Drake E.M. Transient natural convection in a vertical cylinder // *AIChE Journal*. – 1968. – Vol. 14, No.2 – P. 251-259), полученными при исследовании

свободной конвекции инертной жидкости в полностью заполненном вертикальном цилиндре с теплоизолированными торцами, нагреваемом постоянным тепловым потоком, подводимым к боковой поверхности ($Ra = 10^{13}$, $Pr = 5$, $H/R = 6$). На рис.2 представлено сопоставление численно полученной в настоящей работе зависимости критического числа Франк-Каменецкого Fk_{cr} при развитии теплового взрыва в вертикальном цилиндре, полностью заполненном реагирующей жидкостью (реакция 1-го порядка, $Pr = 300$, $H/R = 2$), в случае постоянной температуры на стенках, равной начальной, с результатами расчетов по экспериментально полученной интерполяционной формуле (Э.А. Штессель. Химическая естественная конвекция. Препринт Ин.-та Химической физики. Черногловка, 1977). Значение Fk_0 соответствует критическому числу Франк-Каменецкого для той же системы, определенному в предположении отсутствия теплопереноса свободной конвекцией.

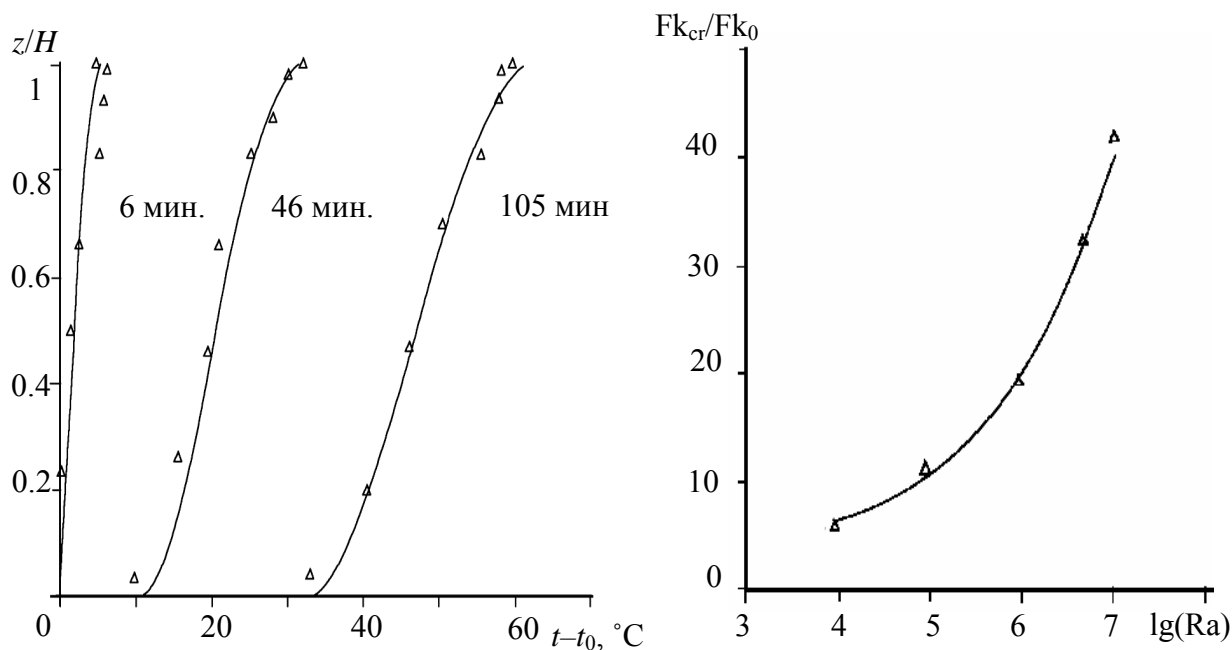


Рис.1. Средние по радиусу вертикальные профили температуры. ▲ — эксперимент, — — расчет (настоящая работа)

Рис.2. Критические условия теплового взрыва. ▲ — результаты расчета по экспериментально полученной интерполяционной формуле, — — результаты численного моделирования (настоящая работа)

В целом, тестирование показало удовлетворительное согласование результатов расчетов, полученных в рамках разработанных

математических моделей в настоящей работе, с опубликованными экспериментальными данными и результатами численного моделирования.

Пятая глава посвящена применению разработанных моделей и алгоритмов для численного решения ряда типичных задач, возникающих при оценке термической опасности хранения и транспортировки химических веществ с пониженной стабильностью. В разделе 5.1 рассмотрено развитие теплового взрыва в вертикальном герметичном баке с внутренним радиусом 0.5 м, высотой 1 м и металлической стенкой толщиной 7 мм, заполненном на 85% жидкой смесью изопропилового спирта и пропионового ангидрида. Свободное пространство заполнено парами жидкости и азотом с суммарным давлением $1.01 \cdot 10^5$ Па, начальная температура в сосуде составляла 20°C . На внешней поверхности стенок задавались граничные условия 3-го рода (температура внешней среды 70°C , коэффициент теплоотдачи $10 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$).

В ходе решения задачи рассмотрено качественное поведение полей температуры (рис. 3) и скорости, зависимость температурного расслоения от времени (рис. 4).

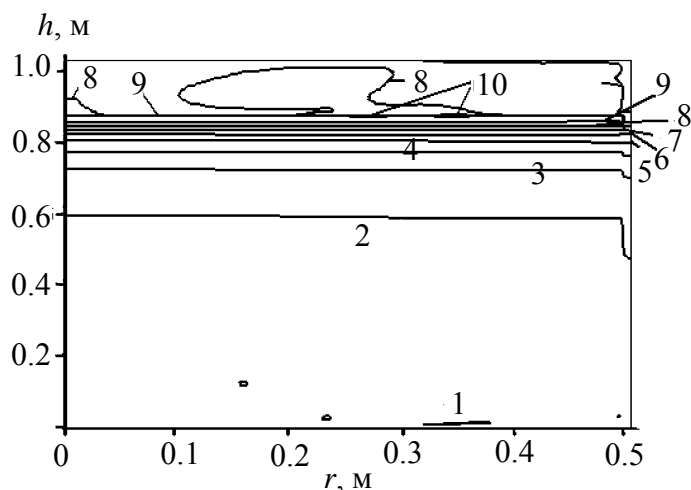


Рис.3. Изолинии температуры в баке по окончании периода индукции. 1 – 40°C , 2 – 44.7°C , 3 – 49.4°C , 4 – 54.1°C , 5 – 58.8°C , 6 – 63.5°C , 7 – 68.2°C , 8 – 72.9°C , 9 – 77.6°C , 10 – 82.3°C

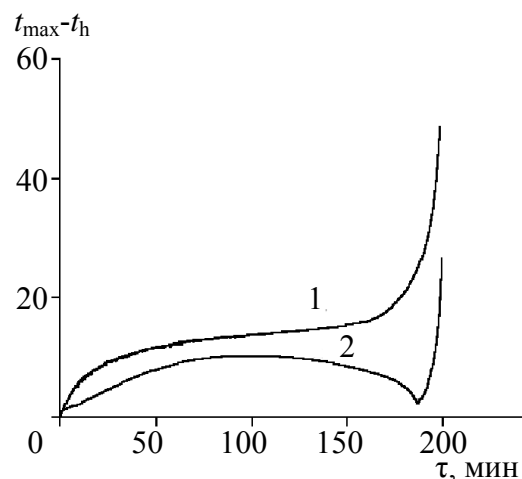


Рис. 4. Температурное расслоение в баке. 1 – жидкость, 2 – газовая подушка; t_{max} – максимальная температура, t_h – средняя объемная температура

Отмечено значительное влияние температурного расслоения в жидкости на результаты расчета периода индукции теплового взрыва. Сопоставление расчета по полной модели с расчетом по упрощенной модели, пренебрегающей температурной стратификацией, показало, что такое упрощение может приводить к существенному (в данном случае на 30 %) завышению периода индукции.

Поскольку область применимости предложенной модели ограничивается началом кипения жидкости, в ходе расчета определялась зависимость температуры кипения от времени. Установлено, что в данной задаче, для которой характерны небольшие тепловые потоки от внешней среды к стенкам бака, рост давления в газовой подушке приводит к подавлению кипения жидкости (рис.5).

Наряду с условиями слабого нагрева, была решена задача об интенсивном нагреве бака в результате излучения от высокотемпературного (1000 °С) источника (эти условия приближенно соответствуют попаданию бака в зону пожара). В этом случае, рост температуры в жидкости обусловлен, в первую очередь, внешним нагревом, а не химической реакцией. В результате за короткий промежу-

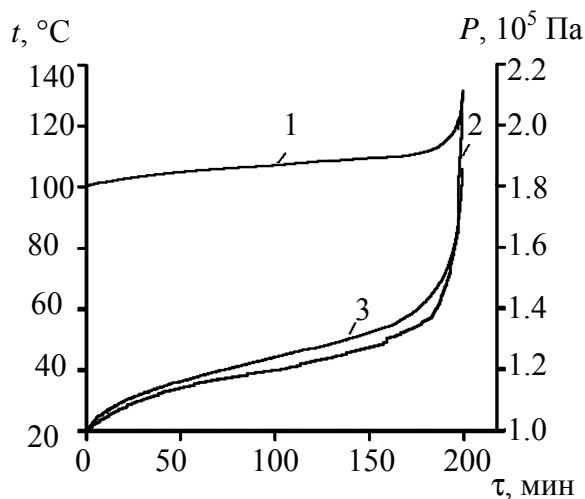


Рис.5. Зависимости температуры кипения (1), давления (2) и максимальной температуры жидкости (3) от времени

ток времени (35 секунд) температура стенки бака достигает величины 250°С, а внутри бака (как в жидкости, так и в газовой подушке) возникают большие градиенты температуры. Анализ полученных результатов свидетельствует о том, что в отличие от случая медленного нагрева бака, данный режим требует дальнейшего, более

детального рассмотрения с учетом теплообмена излучением в газовой подушке и турбулентного характера течения жидкости.

Раздел 5.2 посвящен анализу экспериментальных тестов, предлагаемых ООН для оценки ТСУР. Отмечено, что из четырех рекомендованных тестов только один позволяет провести измерение ТСУР непосредственно для промышленной упаковки, а все остальные требуют специальной интерпретации результатов лабораторных экспериментов, причем используемые при этом математические модели строго применимы лишь в случае отсутствия заметных градиентов температуры в грузе. В связи с этим в последнее время предметом интенсивного обсуждения в периодических изданиях стали результаты успешного применения Дьюар-теста для твердых веществ. С целью объяснения этих результатов в диссертации были выполнены численные расчеты, посвященные оценке погрешности применения данного теста к твердым веществам при использовании двух процедур масштабирования: условия равенства теплосъема на единицу массы для лабораторного сосуда и груза и условия равенства времен полуохлаждения. В результате было получено, что последнее условие (обычно используемое на практике) приводит к значительно меньшим погрешностям в ТСУР. В этом случае для рассмотренного в работе характерного диапазона физических свойств транспортируемых веществ и характеристик теплообмена с окружающей средой для упаковок массой 50 – 2000 кг различие результатов полномасштабного теста (US) и Дьюар теста не превышает 6 °С.

Другим важным вопросом, рассмотренным в данном разделе, является определение ТСУР для составного груза (штабеля). Методика определения ТСУР для подобных грузов не отражена в рекомендациях. Рассмотрены особенности развития теплового взрыва в штабелях, составленных из упаковок с низко- и высокотеплопроводными стенками (рис. 6). С помощью численных расчетов показано, что ТСУР для штабеля может быть значительно (в рассмотренном примере для контейнеров с полимерной стенкой на 16 °С) ниже, чем для единичного контейнера.

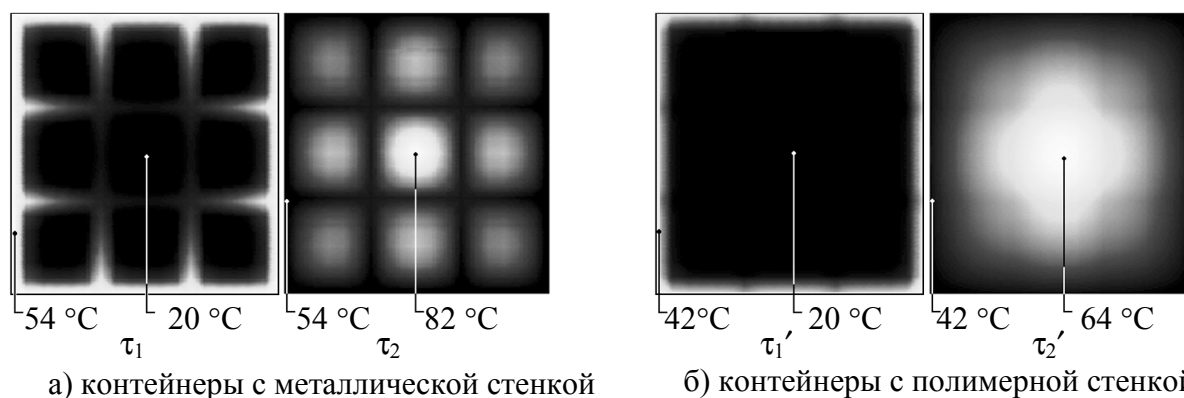


Рис. 6. Поле температуры в центральном сечении штабеля кубической формы из 27 контейнеров для двух моментов времени: τ_1, τ_1' – стадия прогрева, τ_2, τ_2' – окончание периода индукции

Кроме перечисленных вопросов в данной главе также были численно промоделированы процедуры определения ТСУР с помощью Дьюар-теста и адиабатического теста для реакции n -го порядка и автокаталитической. Получено, что данные тесты могут давать различающиеся значения искомой температуры из-за неэквивалентности определений, лежащих в их основе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Разработан комплекс математических моделей и вычислительных алгоритмов, предназначенных для расчета теплообмена при оценке термической опасности хранения и транспортировки реакционноспособных твердых веществ и жидкостей.

2. Проведены тестирование разработанного алгоритма и проверка адекватности элементов моделей путем сопоставления решения ряда тестовых задач с известными аналитическими и численными решениями, а также доступными экспериментальными данными.

3. Решена задача о развитии теплового взрыва в промышленном вертикальном цилиндрическом баке, частично заполненном реакционноспособной жидкостью, при его внешнем нагреве. Показано, что температурное расслоение в жидкости оказывает значительное влияние на период индукции теплового взрыва, пренебрежение температурной стратификацией в жидкости может приводить к завышенным на 30 % оценкам периода индукции.

4. Численно проанализированы четыре стандартные экспериментальные методики определения ТСУР, рекомендованные ООН для оценки термической опасности транспортировки грузов.

4.1 Показано, что из-за неэквивалентности определений ТСУР, лежащих в основе US теста и Изотермического теста, результаты их применения могут различаться, причем невозможно заранее предсказать, какой из тестов дает наиболее жесткую оценку.

4.2 Проанализирована применимость Дьюар-теста для твердых веществ. Показано, что используемая на практике при выполнении данного теста процедура масштабирования, основанная на равенстве времен полуохлаждения центров лабораторного и промышленного сосудов, приводит к незначительным погрешностям (не более 6 °С).

4.3. На примере штабеля, состоящего из 27 контейнеров, заполненных твердым веществом, рассмотрены особенности определения ТСУР для груза, состоящего из нескольких взаимодействующих элементов. Численные результаты получены для двух предельных случаев с очень высокой (контейнер с металлической стенкой) и очень низкой (контейнер с полимерной стенкой) теплопроводностью стенок контейнера. Показано, что различие значений ТСУР для штабеля и единичного контейнера может достигать 16 °С.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Шейнман И.Я. Математическое моделирование начальной стадии развития теплового взрыва в сосудах, полностью заполненных химически реагирующей жидкостью // Известия СПбГЭТУ «ЛЭТИ», серия «Физика. Математика. Химия». – 2001. - №1. – С. 38 - 43.
2. Шейнман И.Я. Влияние термоконцентрационной конвекции на особенности развития теплового взрыва в жидкости // Сборник трудов Международной научной конференции «Математические методы в технике и технологиях» - ММТТ-2000. Т.3. - С.-Петербург, 2000. - С.77-78.

3. Sheinman I. Ya. Numerical simulation of thermal explosion development in storage of reactive liquids // Progress in combustion and detonation /edited by A.A. Borisov, S.M. Frolov, A.L. Kuhl. - Moscow: Torus Press Ltd., 2004. - P. 237-238.
4. Шейнман И.Я., Коссой А.А. Анализ процедуры масштабирования при определении температуры самоускоряющегося разложения методом Дьюар-теста // Химическая промышленность. – 2004. - Т. 81, №11. - С. 588-593.
5. Kossoy A.A., Sheinman I.Ya.. Evaluating thermal explosion hazard by using kinetics-based simulation approach //Process Safety and Environmental Protection. – 2004. - Vol. 82, Issue B6. - P. 421-430.
6. Kossoy A.A., Sheinman I. Ya., Podlevskikh N. A. From calorimetric data via kinetics-based simulation to predicting reactivity and assessing reaction hazards (Methodology and Software) // Proceedings of the 30th NATAS Annual Conference. - Pittsburgh, Pennsylvania, USA, 23-25 September 2002. - P. 332-338.
7. Kossoy A.A., Sheinman I.Y., Shvaley E.S. Software for numerical simulation of thermal explosion in chemically reactive liquids // Proceedings of sixth ISTC Scientific Advisory Committee Seminar Science and Computing, Vol. 1 - Moscow, Russia, 15-17 Sept. 2003. - P. 61-67.
8. Шейнман И.Я., Швалев Е.С. Свидетельство об официальной регистрации программ для ЭВМ № 2001611566 «Программа моделирования теплового взрыва в жидкостях Thermal Explosion in Liquids 2.5 (LTE 2.5)»// Российское агентство по патентам и товарным знакам, 19 ноября 2001.
9. Шейнман И.Я., Швалев Е.С. Свидетельство об официальной регистрации программ для ЭВМ № 2001611561 «Программа моделирования теплового взрыва в твердых веществах Thermal Explosion in Solids 2.5 (STE 2.5)»// Российское агентство по патентам и товарным знакам, 19 ноября 2001.