**Предисловие от автора**

Предлагаемая читателям книга имеет своей целью изложить научные основы, методологию и технологию использования программного комплекса "Тепловой взрыв" (далее – комплекс TSS) –- мощного отечественного инструмента для решения проблем анализа реакционных опасностей и термической безопасности на базе применения методологии математического моделирования. Аббревиатура TSS соответствует английскому термину Thermal Safety System — система термической безопасности. Именно под таким названием этот программный комплекс известен и распространяется за рубежом. Аббревиатура TSS используется в настоящей книге для его сокращенного названия. Однако в настоящей монографии комплекс выступает под названием "Тепловой взрыв", поскольку оно в большей мере отражает его целевую направленность, чем название "Термическая безопасность".

Термическая безопасность – раздел химической безопасности, изучающий закономерности возникновения и развития теплового взрыва, методы его прогнозирования, способы предотвращения и эффективной защиты от его последствий в объектах промышленности, транспорта и специальной техники, в которых используются термически опасные химические вещества и имеют место термически опасные химические процессы. Тепловой взрыв – причина широко известных аварий и катастроф, о чем подробно будет рассказано далее. Именно этим определяется большая практическая важность проблемы теплового взрыва, рассматриваемая в настоящей книге.

Научную основу комплекса TSS составляет система научных знаний, образующих теоретический фундамент постановки и способов решения задач, возникающих при проведении исследований реакционных опасностей и термической безопасности с использованием математического моделирования.

Вряд ли нужно сегодня доказывать важность и перспективность применения методологии математического моделирования в исследованиях теплового взрыва, где реальный эксперимент затруднен, а, во многих случаях, вообще невозможен. В этой сфере деятельности математическое моделирование как методология решения существующих здесь проблем находится вне конкуренции. Однако до сих пор эта методология используется в исследованиях термической безопасности весьма ограниченно, что связано с ее сложностью, необходимостью использования специальных технологий, средств и методов исследований и, конечно, катастрофической нехваткой кадров, профессионально готовых к такой деятельности, практически полным отсутствием соответствующей литературы на русском языке.

Предлагаемая книга является обобщением многолетних работ автора в области разработки методологии, средств, методов и практического применения математического моделирования в области анализа реакционных опасностей и термической безопасности высокоэнергетических веществ и химических процессов. Работы проводились под его научным руководством и непосредственном участии в Федеральном государственном унитарном предприятии "Российский научный центр "Прикладная химия", ранее широко известным как Государственный институт прикладной химии (сокращенно ГИПХ) и закрытом акционерном обществе (ЗАО) "Химинформ", созданном на базе ГИПХ в 1992 г. и действующим под руководством автора монографии. Работы по проблематике теплового взрыва были поставлены в ГИПХ еще в начале шестидесятых годов прошлого века в связи с необходимостью решения практических проблем новой техники по инициативе академика В.  С.  Шпака и научном руководстве выдающихся ученых Б.  И.  Бронштейна, И.  И.  Палеева, О.  М.  Тодеса параллельно с работами, проводимыми в Институте Химической Физики АН СССР (точнее, его филиале в Черноголовке) под руководством Ф.  И.  Дубовицкого, А.  Г.  Мержанова, Г.  Б.  Манелиса, а также в ряде других организаций оборонно — промышленной отрасли. В течение ряда лет проводимая нами работа постоянно обсуждалась с профессором А.  С.  Штейнбергом.

Мне посчастливилось начать и проводить свою научную и практическую деятельность в области проблем термической безопасности и теплового взрыва в период максимального размаха таких исследований в Советском Союзе. В этот период в эти работы были вовлечены не только лучшие научные кадры, но и огромные государственные средства. Встречи и научные контакты с А.  Г.  Мержановым, Г.  Б.  Манелисом, многими другими сотрудниками предприятий и организаций нашей страны, наличие в России всемирно признанной научной школы теории теплового взрыва, созданной Н.  Н.  Семеновым, Д.  А.  Франк-Каменецким, О.  М.  Тодесом, А.  Г.  Мержановым оказали определяющее влияние на формирование моих научных интересов.

Огромное значение в постановке, развитии и реализации идей, составляющих основу комплекса TSS, имели многолетние тесные контакты с ведущими зарубежными экспертами в этой сфере, которые сформировались в ходе выполнения под руководством автора нескольких крупных международных научных проектов с участием крупнейших мировых фирм и ведущих мировых экспертов в этой сфере. В ходе выполнения этих проектов российские ученые, принимавшие участие в них и выполняющие в них основную работу, получили редкую возможность детально ознакомиться с деятельностью лучших зарубежных центров и лабораторий США, Франции, Германии, других стран, работающих в области термической безопасности.

В книге впервые излагаются научные основы, методология и технология использования, разработанного под научным руководством автора программного комплекса "Тепловой взрыв", мощного современного инструмента для решения проблем теплового взрыва с использованием математического моделирования. Именно наличие такого инструмента и методологии его использования позволяет говорить о создании технологии проведения исследований термической безопасности с применением математического моделирования.

Когда мы говорим о технологии исследования, то этим подчеркиваем определенную аналогию между организацией процесса научного исследования и процесса промышленного производства. Технология научного исследования – это совокупность методов и инструментов его выполнения, используемых в определенной схеме организации процесса исследования. Любое научное исследование, как и любая производственная деятельность, должны иметь свой инструментарий и технологию. Эта мысль, сегодня уже достаточно тривиальная, фиксирует ту точку зрения, что научное исследование, несомненно сохраняя свою интеллектуальность и творческий характер, нуждается в определенной организации и регламентации, наборе соглашений и правил, стандартизации. Пример практической реализации такого подхода – создание автоматизированных систем научных исследований (АСНИ), систем, предназначенных для построения математических моделей объектов и процессов и проведения научных исследований с использованием этих моделей. Проблема АСНИ имела в СССР статус важной государственной программы и существенную финансовую и материальную поддержку государства. Именно в рамках этой программы под руководством автора была создана одна из первых версий комплекса TSS и на ее основе первая в мировой практике АСНИ теплового взрыва [1–4]. Эта система демонстрировалась как крупное достижение отечественной науки на мировой химической выставке ACHEMA в Германии в 2006 г.

На разных этапах работу по созданию TSS, постоянно проводимых под научным руководством автора, выполнял широкий круг исполнителей. Многие из них, в ходе нашей совместной работы, выросли в высококлассных научных работников и специалистов, защитили кандидатские диссертации и сегодня с успехом работают в различных организациях. Особо хочу отметить А.  А.  Коссого, который многие годы был моим бессменным коллегой и соруководителем этих исследований. Сегодня А.  А.  Коссой признанный мировой эксперт в области проблематики термической безопасности. Все результаты, приведенные в монографии, являются в полной мере результатом совместной многолетней работы автора и его коллег. И в этом смысле, все, кто в разные годы в той или иной мере работал совместно с автором над TSS, выполнял экспериментальные исследования являются соавторами монографии и могут свободно использовать ее материалы. К моему большому сожалению, А.  А.  Коссой отказался выступить одним из соавторов настоящей книги, считая, что он не принимал технического участия в ее написании.

Монография написана полностью ее автором и отражает его взгляды на эту сферу деятельности. Монография соответствует текущему состоянию комплекса TSS.

TSS — интеллектуальная собственность ЗАО "Химинформ", генеральным директором которого с момента его образования является автор монографии. В соответствии с действующим законодательством Российской Федерации все компоненты комплекса TSS имеют официальную регистрацию Российского агентства по патентам и товарным знаком на территории Российской Федерации (свидетельства № 2001611558–2001611568). Это определяет правовую основу использования в монографии любых материалов, входящих в TSS.

Материалы, вошедшие в настоящую монографию, в определенной мере отражены в публикациях, приводимый список которых далеко не полон [1–27]. В части из них автор монографии отсутствует среди авторов публикаций. Однако во всех случаях эти публикации сделаны по результатам работ, выполненных под его научным руководством, что отражено в соответствующих отчетных материалах. Часть материалов, представленных в монографии, вообще ранее не публиковалась.

Предлагаемая вниманию читателя книга имеет двоякий жанр. С одной стороны, по содержанию – это монография, научный труд, посвященный исследованию одной темы. Такой темой является методология исследований термической безопасности с применением математического моделирования. С другой стороны – это учебно-методическое пособие для научных работников, инженеров, технологов и т.д., для которых исследование термической безопасности химических веществ, химической продукции и химических процессов входит в круг их профессиональной деятельности. Автор надеется, что эта книга будет также полезна преподавателям ВУЗов и институтов повышения квалификации, а также студентам, аспирантам и докторантам. при подготовке к чтению учебных курсов и изучению основ по безопасности жизнедеятельности, теории и технологии взрывчатых веществ, порохов и ракетных топлив, процессов химической технологии и т.д. Книга может представлять интерес для исследователей, работающих в области термического анализа, в первую очередь, использующих методы термического анализа при проведении кинетических исследований химических реакций. И, конечно, она может представлять интерес всем, кто использует, или собирается использовать комплекс TSS в своей работе.

В предлагаемой книге речь идет о методологии исследования термической опасности химических веществ, химической продукции и химических процессов. Задача книги в том, чтобы с единых позиций системного анализа описать методы, методики, способы и средства исследования термической опасности химических веществ, химической продукции и химических процессов с применением комплекса TSS. Как автор сумел справиться с этой задачей пусть оценит читатель.

Следует предупредить читателя, что в этой книге нет систематического обзора публикаций по различным аспектам проблемы термической безопасности. Дело в том, что количество монографий, книг и журнальных статей по различным аспектам термической безопасности огромно. Достаточно упомянуть только многотомную серию руководств Центра безопасности химических процессов при Американском институте химиков-технологов (CCPS of AIChE), постоянно издаваемые журналы "Journal of Hazardous Materials", "Loss Prevention in the Process Industries", "Process Safety and Environmental Protection", "Process Safety Progress" и другие, затрагивающие различные аспекты реакционных опасностей и термической безопасности. В связи с этим автор даже не ставил перед собой такой задачи. Необходимые ссылки по обсуждаемым вопросам приводятся в конце каждой главы.

Комплекс TSS имеет широкое международное признание и активно используется ведущими мировыми химическими фирмами США, Европы, Японии, других стран.

Проблематика предлагаемой книги охватывает широкий спектр вопросов из разных областей науки: теории горения и взрыва, химической кинетики, системного анализа, вычислительной математики, моделирования и т.д. Применение комплекса TSS – программного инструмента, основного средства решения задач, рассматриваемых в книге, переносит основную тяжесть исследования проблем термической безопасности с использованием методологии математического моделирования, с разработки, отладки алгоритмов и программ на содержательную часть исследования. Благодаря использованию TSS исследователь имеет возможность применять сложные современные вычислительные методы и решать задачи, далеко выходящие за задачи, рассматриваемые в классических теориях теплового взрыва. Однако появившаяся при этом относительная простота и возможность решения весьма сложных задач, в которых используются сложные вычислительные методы, возможность быстрого получения конечных результатов не только не снимают с исследователя необходимость хорошего понимания смысла результатов, способов и методов, с которыми они получены, но и резко повышают необходимость этого. Спасительная особенность нашей жизни — наша способность делать множество вещей, не понимая до конца всех их деталей. Именно так мы сегодня работаем с самой разнообразной техникой. TSS делает это применительно к исследованиям термической безопасности с применением математического моделирования. Цель книги — дать основы понимания того, как TSS выполняет это.

Предлагаемая вниманию читателей монография не является руководством по работе с программами комплекса TSS. Каждая такая программа имеет подробное руководство для их пользователей (к нашему большому сожалению, только на английском языке), находящееся в свободном доступе в Интернет на сайте ЗАО "Химинформ" [27]. Предполагается, что читатель этой книги при работе с TSS будет пользоваться этими документами. Для первичного информирования читателей о комплексе TSS в целом в качестве введения к основному содержанию книга содержит в своей первой главе обзор комплекса TSS.

То, чего нет в этой книге. В нее не вошли (кроме краткой справочной информации) материалы о трех компонентах комплекса TSS: программах расчета систем аварийного сброса давления BST и VENT и программе расчета физико – химических свойств смесей MIXTURE. Дело в том, что изложение научных основ проблем, с которыми связаны задачи, решаемые с их применением, самостоятельный большой вопрос, изложение которого неминуемо привело бы к существенному увеличению объема книги. Кроме того, эти вопросы хорошо освещены во множестве публикаций, в первую очередь, в работах и симпозиумах DIERS. Ограничимся только указанием на новую фундаментальную работу [28], содержащую систематическое изложение проблем систем аварийной защиты от теплового взрыва.

В книге используется иллюстративный материал, заимствованный из общедоступных ресурсов интернета, не содержащих указаний на авторов этих материалов и каких-либо ограничений для их заимствования.

Книга, в первую очередь, ориентирована на российского читателя. И если она каким-то образом будет способствовать продвижению в России новых методов решения проблем термической безопасности и теплового взрыва, то автор будет считать цель ее написания достигнутой.

Пусть больше не будет таких катастроф как гибель "Курска" и не повторится Кыштым!

Тепловой взрыв можно и нужно прогнозировать! TSS – мощный современный отечественный инструмент для этого.