



## 新機能及び拡張機能

- ・ よりロバストな目的関数の入力、計算の改善、多目的最適化、パレート最適表示、グローバル最適解の信頼性の向上、等の追加によって CHEMCAD の最適化機能をアップグレードしました。
- ・ CHEMCAD NXT では、マルチコアプロセッサを使用して計算速度を向上できるようになりました。
- ・ CHEMCAD の計算エンジンコードのリライトにより、計算速度の向上、収束性の安定、熱力学計算の安定、が実現しました。
- ・ 物質移動塔のサイジング、レーティングに Raschig 2009 充填物法を導入しました。
- ・ 開始 ID の機能でアルファベット/数字の接頭字が入力できるようになりました。
- ・ 感度分析のレポートとグラフに未収束点のフィルタ機能を追加しました。
- ・ OPC クライアントから選択単位操作のラン、単位操作グループのラン、リサイクルループのランができるようになりました。
- ・ サブフローシート(META)単位操作で参照する子シミュレーションを相対パスで指定できるようになりました。
- ・ 多数の出入口を持つ単位操作に接続できるストリーム数の制限をなくしました。
- ・ データマップの出力オプションを追加しました。
- ・ 最適化/データリコンシリエーションの目的関数の倍率オプションを簡単に使用できるようにしました。
- ・ Chemstations ディレクトリにあるすべてのユーザー追加モジュール(UAM)のドキュメント、ライブラリ、ファイルに簡単にアクセスできるようにしました。
- ・ UAM 環境に CHEMCAD ソルバーを公開しました。
- ・ Billet & Schultes と Raschig 2009 の充填物サイジング法の物質移動レポートを改善しました。
- ・ フローシートオブジェクトの表示/非表示を選択できるレイヤー機能を実装しました。
- ・ TPXY グラフに共沸点(あれば)を計算して表示する機能を追加しました。
- ・ グラフに任意のデータ系列を追加できるユーザー系列機能を追加しました。
- ・ 感度分析のストリーム物性オプションに凝固点や API 比重などの複数の物性を追加しました。
- ・ VBA にダイナミックランタイムを取得/設定する関数を追加しました。
- ・ File タブのコマンドに Chemstations YouTube チャンネルへのリンクを追加しました。
- ・ TPXY 線図の設定画面を改善しました。
- ・ 同じ TPXY 線図の画面に複数の  $T_{xy}/P_{xy}$  線図を表示できるように機能を拡張しました。
- ・ 1 つの TPXY 線図の画面で複数の熱力学モデルや BIP セットを比較できるように改善しました。
- ・ TPXY レポートに共沸点が追加されました。
- ・ 第 3 成分のモル分率を TPXY 線図のグラフとレポートに追加しました。
- ・ 水の密度、粘度、熱伝導度を計算する IAPWS-IF97 法を改善しました。
- ・ 温度の上限と下限を必須の入力項目とし推奨される範囲を表示するように、ストリーム物性プロットのダイアログを改善しました。
- ・ 成分選択画面での読み込みが早くなるよう改善しました。また、成分の検索プロセスが簡素化され CAS 登録番号でソートできるようになりました。
- ・ ラン後の保存操作が早くなり、大きいシミュレーションのパフォーマンスが向上しました。



## 新機能及び拡張機能(続き)

- ・ グループデータへのアクセスと表示を改善しました。
- ・ 振動が検出された際にユーザーに警告する CC-THERM の自動のチェック機能を追加しました。
- ・ 感度分析/最適化のツールにフガシティー、K 値、活量係数 ( $\gamma$  値) を有効な物性として追加しました。
- ・ 熱力学レポートに VTPR の  $\tau$ 、 $\alpha$  パラメータが推定された場合の記述を追加しました。
- ・ COSMO-RS および COSMO-SAC から生成された UNIFAC グループ相互作用パラメータを、欠落しているグループ間相互作用のために実装しました (Ind. Eng. Chem. Res. 2020, 59, 1693–1701)。

## CHEMCAD ユーザーインターフェース

- ・ 新しくリボンインターフェースを導入しました。
- ・ ストリーム名の文字数の制限を半角 100 文字に増やしました。
- ・ 参照しているストリーム/単位操作の ID が変更された際、単位操作の設定が自動的に更新されるようになりました。
- ・ RAMP 単位操作のテーブルの入力を 5000 まで増やしました。また、テーブルのデータは Excel とコピー & ペーストでやり取りできるようになりました。
- ・ 「工学単位」ダイアログを使いやすく改良しました。
- ・ 感度分析に結果を 3 次元グラフで表示する機能を追加しました。
- ・ コントロールバルブ単位操作の計算モードを使いやすく改良しました。
- ・ フローシートで選択したすべてのテキストボックス/データボックスに、1 回のクリックでフォントの変更を適用できるようにしました。
- ・ すべてのデータボックスにデフォルトフォントを指定できるようにしました。
- ・ シミュレーションの結果が収束していることを示すステータスバーメッセージを追加しました。
- ・ 自動パン機能の動作をユーザーがオフにするまで有効な状態を維持するように変更しました。
- ・ E-mail シミュレーション機能のパフォーマンスを改善しました。
- ・ フローシートオブジェクトを新しい位置に移動した後に、画面フィット機能が正常に動作しない問題を修正しました。
- ・ 分流器、ストリーム参照、ベッセル、タンクの流量固定モードを時間の単位に依存せず整合するようになりました。
- ・ デフォルトのフローシート描画の設定を中心にスナップするようになりました。
- ・ CHEMCAD ワークスペースと UnitOp Designer で使用できる多数の描画ツールを追加しました。
- ・ 「収束パラメータ」ダイアログにあったダイナミックシミュレーションの「1 タイムステップをラン」の機能を、ホームタブのコマンドに置いてアクセスしやすくしました。
- ・ 感度分析で結果グラフにプロットする変数の選択機能を改善しました。
- ・ CHEMCAD の更新中にユーザーパレット設定を保存するようレジストリキー設定を追加しました。
- ・ コマンドボタンの重なった表示を防ぐため、「ストリームの編集」ダイアログを調整しました。



## CC-THERM

- ・ 温側も冷側も相変化しない場合にゾーン分析計算を追加しました。

## CC-DYNAMICS

- ・ 完了したランタイムグラフでフルズーム機能を使用できるようになりました。
- ・ ダイナミックシミュレーション中に閉じたランタイムグラフが再び開くことを防止するようにしました。
- ・ ダイナミックシミュレーションでサブフローシート(META)単位操作が使用できるようになりました。
- ・ ダイナミック反応器のランタイムプロットが行われている場合に CHEMCAD が突然終了する問題を修正しました。

## CHEMCAD 物性データ

- ・ DIPPR Lite May 2019 / May 2020 データベースより、CHEMCAD に新規成分を追加しました。
- ・ CHEMCAD データベースの他の物性の式から誤って計算されていたデータの入力を再計算しました。
- ・ いくつかの成分の比重データの誤りを修正しました。
- ・ 3M 社の「Novoc 649」を CHEMCAD 成分データベースに追加しました。
- ・ Eastman Chemical 社の熱媒体サーミノール(Therminol)を CHEMCAD 成分データベースに追加しました。
- ・ 三塩化ホウ素(boron trichloride、BCl<sub>3</sub>)と複数の成分の生成ギブスエネルギーを修正しました。
- ・ 塩化アンモニウム(Ammonium Chloride、成分 ID: 932)の成分データを修正しました。
- ・ 1,3-ジアミノプロパン(1,3-Diaminopropane、CAS 登録番号: 109-76-2、成分 ID: 1875)の DIPPR 蒸気圧データを修正しました。
- ・ 2-フェニル-2-プロパノール(2-Phenyl-2-Propanol、CAS 登録番号: 617-94-7、成分 ID: 1440)の DIPPR 生成エンタルピーを修正しました。
- ・ 成分の化学式が変更された時にユーザー成分の分子量が必要に応じて更新されない問題を修正しました。
- ・ ユーザー追加成分の入力で、成分の CAS 登録番号の検証を実装しました。

## ユーザー追加モジュール(UAM)の更新

- ・ UAM をバージョン 8.0.1 に更新しました。
- ・ UAM を利用されている方は、今回の更新で提供される改善についてご相談ください。UAM を再コンパイルする必要はありませんが、再コンパイルすると改善された機能を使用できるようになります。
- ・ UAM の CP\_RECORD に CAS 登録番号を追加しました。
- ・ UAM 環境に 計算活量係数を公開しました。



## メンテナンス

- ・ 速度論反応器単位操作の向流プラグフロー反応器のユーティリティの温度計算に新しいオプションを追加しました。
- ・ ユーザー成分レポートでユーザー追加成分のアントワン蒸気圧係数の一部が含まれていなかった問題を修正しました。
- ・ 充填塔で「ラン終了ごとに塔サイズを変更」オプションが動作しない問題を修正しました。
- ・ Excel データマップ機能がセル範囲をデータリコンシリエーションに渡せない問題を修正しました。
- ・ Maurer 熱力学モデルが窒素と酸素の混合物で無効なエンタルピー値を予測する問題を修正しました。
- ・ ストリーム参照単位操作が自身へのフィードストリームを変更できない問題を修正しました。
- ・ サブフローシート(META)単位操作で参照している子シミュレーションが異なる熱力学設定の場合、正常に動作しない問題を修正しました。
- ・ 正三角形グラフの表示で CHEMCAD が Windows コンポーネントを再インストールする問題を修正しました。
- ・ ローカル熱力学モデルとして Wilson 活量係数モデルを使用している場合、ストリームのフラッシュが正常に為されない問題を修正しました。
- ・ 「Maurer」K 値モデルが無効な活量係数を予測する問題を修正しました。
- ・ 蒸気/液の輸送物性計算に固体成分が含まれる問題を修正しました。
- ・ コンプレッサ/エキスパンダ単位操作でユーザーが入力した場合のみ、実際の動力と効率を確認するように修正しました。
- ・ 充填物サイジングで Excel インターフェースオプションが選択された場合に起こる問題を修正しました。
- ・ 充填物サイジングの Excel インターフェースファイルで表示される NTS データを修正しました。
- ・ ノードネットワークのフローシートで、稀に起こるコントロールバルブが閉じていてもフローが表示される問題を修正しました。
- ・ ダイナミック反応器の物質収支の問題を修正しました。
- ・ 溶解度曲線の日本語表示の問題を修正しました。
- ・ 水/炭化水素の溶解性オプションで、「混和性なし」が設定されている場合に VTPR の平衡計算で起こる問題を修正しました。
- ・ VTPR 式による物性推定のパラメータ  $c_i$  の基準密度を変更しました。
- ・ ローカル熱力学で VTPR が使用されているシミュレーションを開くと、CHEMCAD が予期せず終了する問題を修正しました。
- ・ フローシートの実行終了時ではなく、対応する単位操作と同時にサイジング計算とコスト計算が実行されるようにしました。
- ・ トレイ組成レポートで質量分率が表示される問題を修正しました。
- ・ 「単位操作を選択」または「ストリームを選択」が開いている間は、単位操作シンボルの出入口を無効にして、フローシートをクリックする際に誤って接続しないようにしました。
- ・ 工学単位換算機能の比熱(kJ/gmol)の換算を修正しました。
- ・ 熱交換器単位操作のコスト計算でロングチューブ/流下膜式の蒸発装置のアルゴリズムを改訂しました。
- ・ レポートの液体体積パーセントの表示が液体体積分率になっていた問題を修正しました。
- ・ ループ単位操作にローカル熱力学設定が反映されない問題を修正しました。



## メンテナンス(続き)

- ・ 質量移動サイジングレポートの dP/m の工学単位を変更できるようにしました。
- ・ パイプ単位操作で特定の条件において Baker グラフに関する警告メッセージが表示される問題を修正しました。
- ・ 二相状態になるパイプ単位操作で、Beggs and Brill の方法をデフォルトで使用するように変更しました(元のデフォルトは Baker 法)。
- ・ 伝熱を考慮し、かつ、高さの変化が指定されているパイプ単位操作で無効な流出ストリームの値が計算される問題を修正しました。
- ・ パイプサイジングレポートの計算速度がフローシートの値と一致しない問題を修正しました。
- ・ SPEAD モデルのサポートを終了しました。
- ・ ダイナミック反応器単位操作が固液平衡を無視する問題を修正しました。
- ・ 三相フラッシュ単位操作で軽液相の固液平衡が無視される問題を修正しました。
- ・ 旧式の流量単位がユーザー物性セットの選択を上書きしてしまう問題を修正しました。
- ・ RAMP 単位操作の外挿の仕様を変更しました。
- ・ 反応蒸留を指定している SCDS 塔の単位操作レポートで、実際の反応体積の値を表示する問題を修正しました。
- ・ メッセージペインでリアルタイムにレポートされる単位操作のエラーと警告を拡張しました。
- ・ 等エントロピーフラッシュを実行したフラッシュ単位操作で計算されたエントロピーが変化する問題を修正しました。
- ・ いくつかの固体に関する単位操作と固液平衡の熱力学設定が正しく相互作用しない問題を修正しました。
- ・ TPXY グラフの X 軸オプションで質量分率が選択されている場合の分圧計算の問題を修正しました。
- ・ 安全装置単位操作の「ノンフラッシュ」オプションでの問題を修正しました。
- ・ UNIFAC 相関を使用して作成した成分で起こる成分データレポートの表示の問題を修正しました。
- ・ ツールにある TOC/COD 機能のインターフェースの問題を修正しました。
- ・ ユーザー追加の輸送物性の式を作成する場合に、より分かりやすくなるように UsrEqn1001.sf ファイルを更新しました。
- ・ 名前がないカスタム物性セットが原因で CHEMCAD が突然終了する問題を修正しました。
- ・ ユーザー成分レポートの Excel への出力で複数のデータ行が飛ばされる問題を修正しました。
- ・ 複数のゾーンを持つ熱交換器で、コスト計算がゾーン分析の面積ではなく計算面積に基づいていた問題を修正しました。
- ・ コストインデックスを 2020 年 5 月に公開された値に更新しました。
- ・ 熱力学モデル「SRK」と「Peng-Robinson」の超臨界流体における収束性を改善しました。
- ・ 「名前を付けて保存」コマンドでシミュレーションの名前を変えずに保存した場合、変更が保存されない問題を修正しました。
- ・ グループ化されたフローシートオブジェクトの ID 番号割り当ての問題を修正しました。
- ・ シミュレーションで 200 以上の成分を使用している場合に起こる BIP 選択の問題を修正しました。
- ・ 感度分析グラフでの「Excel CSV 形式で出力」機能の問題を修正しました。
- ・ 固体が存在する系のフラッシュ計算で活量係数が極端に小さくなる問題を修正しました。
- ・ 固体を含んだ系で「気-液-液-固」相オプションを使用する際、ストリームの液相が 1 つになると、ストリーム描画の問題を修正しました。



## メンテナンス(続き)

- ・ RAMP 単位操作の時間ゼロのデータ点と最初の非ゼロ時間データ点の間での補間が正しくなかった問題を修正しました。
- ・ CHEMCAD NXT 1.0 および 8.0 で、DVSL と安全装置サイジングが楕円型ヘッドの鏡板比率を無視する問題を修正しました。
- ・ 指定されたケトル管束を使用しない CC-THERM の問題を修正しました。
- ・ ローカル熱力学モデルのフガシティー係数が正しくレポートされない問題(内部計算とフローシートの収束には影響しません)を修正しました。
- ・ 感度分析の実行中にデータマップが正しく実行されない問題を修正しました。
- ・ 純成分のストリームで固体の形成を正しく計算していなかった問題を修正しました。
- ・ ストリーム参照単位操作を塔の段からポンプアラウンドに切り替えた時に稀に発生する問題を修正しました。
- ・ Billet & Schultes の充填物物質移動について、蒸気/液ロードを計算する際のパラメーターを修正し、公開されている相関関係をより正確に反映できるようになりました。
- ・ 多数のシミュレーションをロードする場合、自動実行が予期せず停止する問題を修正しました。