

熱力学物性推算ソフトウェア

COSMOtherm 新バージョンリリース

本年4月に熱力学物性推算ソフトウェアCOSMOthermの新バージョン18がリリースされました。本稿では、新バージョンに搭載された新機能や改善された機能について紹介します。

■バージョンアップのトピックス

今回のバージョンアップのトピックスは次のとおりです。

- ・グラフィカルユーザーインターフェースCOSMOthermXのバッチジョブ機能とリモートジョブ機能
- ・構造物性相関の予測モデルの追加と改良：拡散係数、熱伝導率、密度、粘度
- ・状態方程式を用いた気相関連物性の予測

このほかにも、既存機能の改善や改良が図られ、推算精度と計算速度が向上しています。以降では、上述の3つのトピックスについて紹介します。また、COSMOtherm関連製品TURBOMOLEのユーザーミーティングが、本年9月に開催されることが決まりましたのでご案内いたします。

■COSMOthermXのバッチジョブ機能とリモートジョブ機能

従来のCOSMOthermXは、バッチジョブに未対応でした。そのため、化合物セットに対してまとめて物性推算を行うことができず、都度化合物の入れ替えが必要でした。新バージョンでは、化合物セットに対してまとめて計算を行うためのバッチジョブ機能が追加されました。本機能では、あらかじめ用意した化合物リストを指定して、各種物性を計算することが可能です(図1)。例えば、水とある化合物群を指定し、水-化合物間のすべての組み合わせの2成分液液平衡組成を一度に設定して計算が行えます。本機能はスクリーニングの際に便利です。

次に、COSMOthermXに追加されたりリモートジョブ機能について紹介します。従来、COSMOthermの物性推算は、計算設定を行ったローカルPCでのみ実行可能でした。新バージョンから、COSMOthermがインストールされたりリモートのLinuxサーバーに対してジョブ投入ができるようになりました。これにより、時間が掛かる物性推算を処理能力の高い計算サーバーで実行することが可能になり、計算負荷を分散することができます。

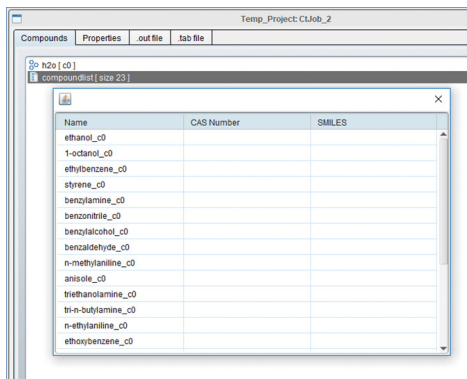


図1. 化合物リスト定義の操作画面イメージ

■構造物性相関の予測モデルの追加と改良：拡散係数、熱伝導率、密度、粘度

これまでCOSMOthermには、構造物性相関の予測モデルとして、25℃における純物質の液体の密度・粘度の予測モデルが搭載されていました。新バージョンでは、このモデルを改良し、任意の温度における純物質・混合物の液体の密度、ならびに純物質の粘度を予測できるようになりました。また、任意の温度における純溶媒・混合溶媒中の溶質分子の拡散係数や純物質液体の熱伝導率の予測モデルが新たに追加されました。

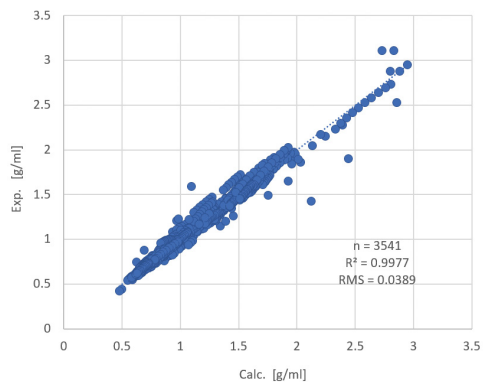


図2. 純物質・混合物の液体密度の計算値と実測値の相関性

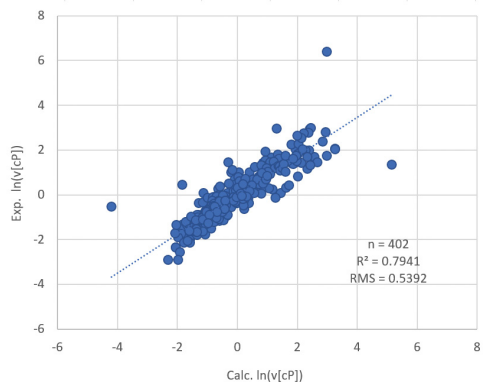


図3. 純物質の液体粘度の計算値と実測値の相関性

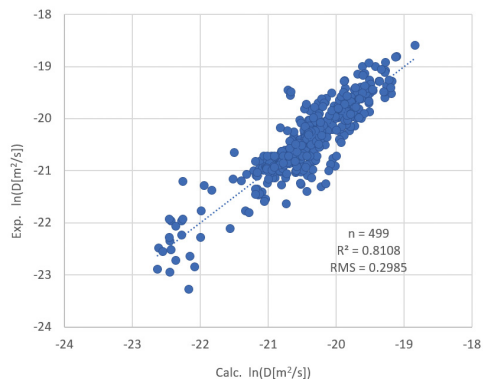


図4. 溶液中の溶質分子の拡散係数の計算値と実測値の相関性

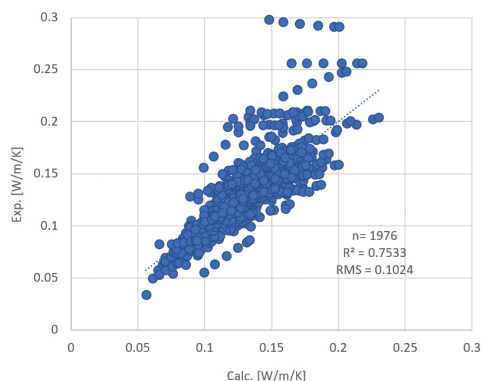


図5. 純物質液体の熱伝導率の計算値と実測値の相関性

各予測モデル構築時の計算値と実測値の相関性を図2～5に示します。図2～4の密度、粘度、拡散係数の予測モデルでは、 R^2 が0.8程度以上あり、RMSも比較的小さく、精度が高いことが期待されます。一方、図5の熱伝導率のモデルでは、 R^2 がやや小さく、また、RMSもいくらか大きな値であるため、他のモデルに比べて、精度が劣る可能性があります。この原因は、熱伝導率が粘度の推算値を一つの記述子として利用するため、その誤差が影響していると考えられます。これらの予測モデルの詳細については、近くCOSMOlogic社から論文が発表される予定です。新たに拡散係数や熱伝導率などの輸送物性が計算できるようになり、COSMOthermの適用範囲が広がりました。

■状態方程式を用いた気相関連物性の予測

COSMO-RS法は、液相を非圧縮液体と仮定した方法であり、またCOSMOthermは、気相を理想系と仮定して取り扱うため、圧力変化に伴う液相の密度変化や気相の非理想性を無視していました。前バージョンでは、この問題を解決するために状態方程式(EOS)とCOSMO-RS法を組み合わせた物性予測機能を搭載しました。しかしながら、気液・液液平衡のみの対応でした。新バージョンでは、蒸気圧、沸点、蒸発熱、ヘンリー定数などの気相関連物性の予測においてもEOSを利用できるように改良しました。これにより、これらの物性値を臨界状態まで精度良く予測できるようになりました。

一例として、プロパンの蒸気圧と蒸発熱の計算値と実測値の比較を図6に示します。EOSを用いない場合、計算値と実測値に差が見られますが、EOSを用いることで実測値と非常によく一致した結果が得られます。このように、EOSを用いることで高圧領域の物性値を精度良く求めることができます。

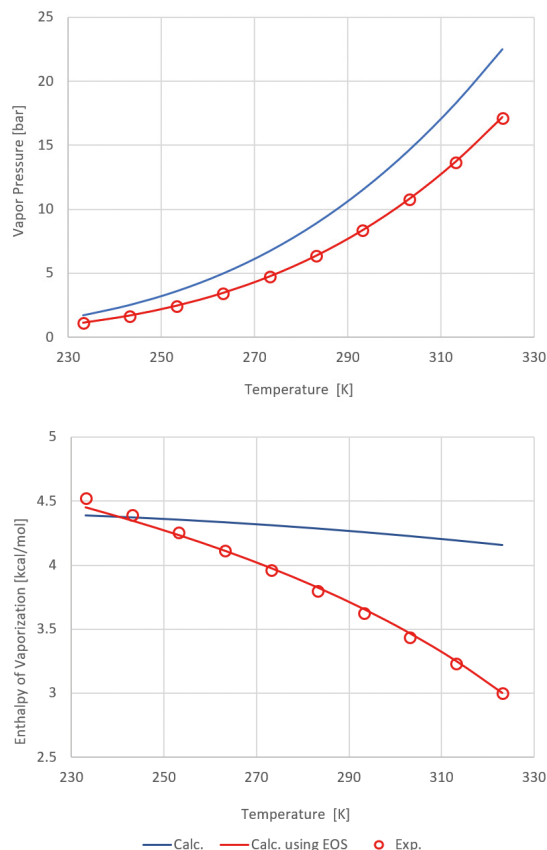


図6. プロパンの蒸気圧曲線(上)と蒸発熱(下)

■TURBOMOLEユーザーミーティング開催のご案内

「TURBOMOLE Users Meet Developers」と題してTURBOMOLEユーザーミーティングが2018年9月20～22日にドイツ・フリードリヒ・シラー大学イェーナで開催されます。ユーザーミーティングでは、以下の5名の主要開発者からの発表や参加者からの15件の口頭発表、および多数のポスター発表が予定されています。また、半日程度のハンズオンセッションも予定されています。

- Dr. Asbjörn Burow (Ludwig-Maximilians-Universität München, Germany)
- Prof. Dr. Filipp Furche (University of California, Irvine, USA)
- Prof. Dr. Christof Hättig (Ruhr-Universität Bochum, Germany)
- Prof. Dr. Willem M. Klopper (Karlsruhe Institute of Technology, Germany)
- Dr. Florian Weigend (Karlsruhe Institute of Technology, Germany)

詳細ならびに参加登録方法については以下のウェブサイトをご参照ください。

<http://www.meeting2018.sierkalab.com/>