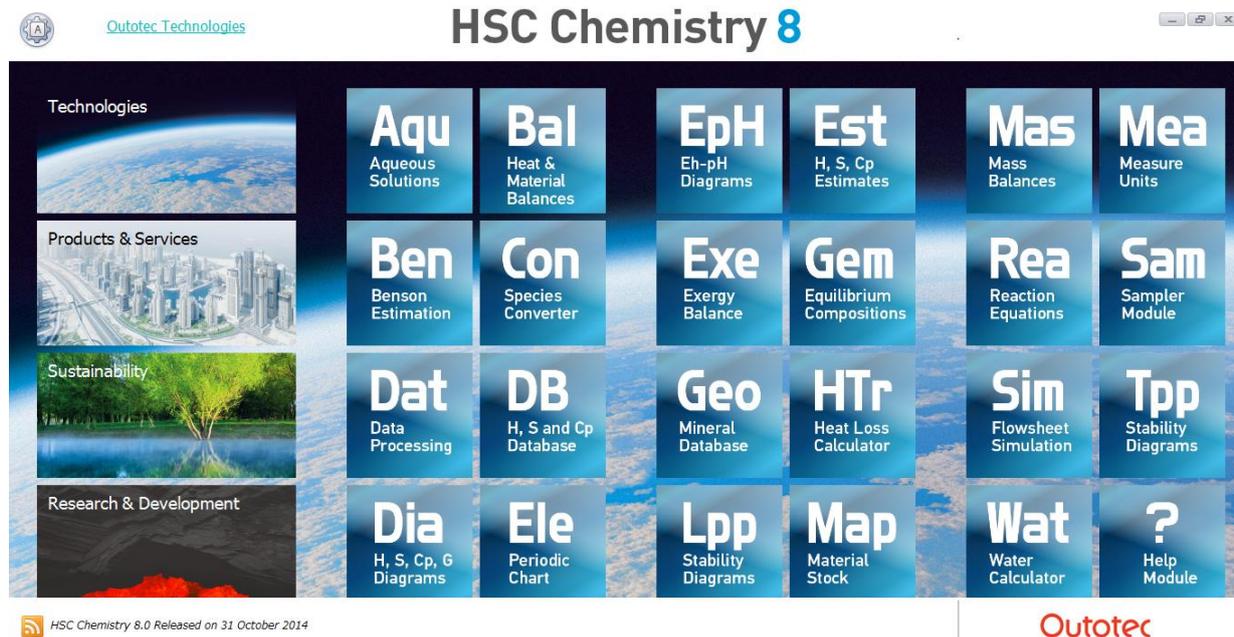


# HSC 8 の新機能

## HSC メインメニュー



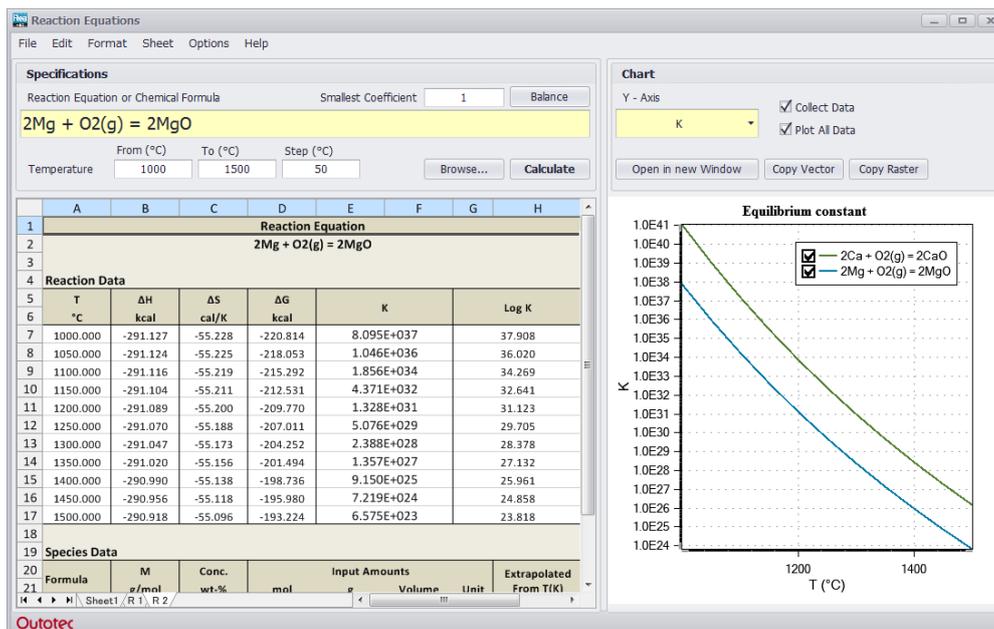
### HSC 8 のおもな新機能

- 最新の Microsoft.NET 4.5 環境を使って、HSC 7 の計算モジュールの大部分が書き直されました。これは最新のウィンドウズの下で HSC の開発を続行できることとなります。
- アップデートされた HSC モジュールに多くの新機能が付け加えられました。
- 計算ルーチンの精度が改良されました。
- データベースは 25,000 化学種から 28,000 種に拡張されました。1,300 種のデータもアップデートされました。
- 新規のユーザーインターフェイスはより人間工学的、直観的で、ユーザーフレンドリーです。
- すべてのモジュールに同じチャート化ツールを使い、すべてのチャートを作成できます。
- 新規のチャート化ツールは 3D チャート(x-, y-, z-軸)も可能です。
- 新規の Exergy モジュールはユニット操作と完全な系の物質とエネルギー循環のエクサルギー計算を可能にします。
- 新規の Sim 8.0 モジュールの LCA はサードパーティ LCA ソフトウェアにアクセス可能なフォーマットでデータをエクスポートすることにより、プロセスのエコバランスを推定できます。つまり一貫したプロセスの物質収支とエネルギー収支とシステムモデルを基に LAC 分析を実行できます。
- 新規の Converter モジュールは実験による元素分析を化合物分析または鉱物分析への変換のクラシックな問題を解決します。
- 新規の Benson Estimation モジュールはグラフィックインターフェイスを使って、分子構造を基に有機化合物の H, S, Cp 値を推定できます。
- 予測式の入力には種の指定/選択におけるアシスタントを与えます。
- 新規の HSC 8 は .NET アーキテクチャで 32 ビット、64 ビットの Windows 7、8 用に作成されました。HSC 7 は 32 ビットの Windows 2000、Xp、Vista 用に作成されていました。
- 多くの HSC モジュールはビルドインの HSC Excel エミュレータを活用します。新規の Excel エミュレータはバージョン 2010 までの Excel をサポートします。これはより大きなスプレッドシート、より多くの関数、xlsx ファイルのサポートなどを意味します。
- 新規の Excel エミュレータはマルチスレッド再計算により、計算をより高速に実行します。
- アップデートされた Help モジュールはバージョン 2010 までのワードファイルをサポートします。
- チャート化オプションが大部分のモジュールに付け加えられました。
- いくつかのモジュールの作成結果の評価と視覚化を強調する複数の図を異なるページに作成できます。
- HSC メインメニューは動的です。ユーザーの必要性、ユニットその他の特定の選択に従って、変更が可能です。

- HSC 7は異なるコンポーネントで構成され、これらのコンポーネント間を移動するためにそれぞれの保存ステップが必要とされてきました。新しいバージョンでは、これらのコンポーネントが1つのプラットフォームに統合されました。
- 高度な計算、統合されたセル計算、生成物の除去、3D状態図、Cp-フィルター、DLLベースの解法モデルなど新規の機能がEquilibriumモジュールに付け加えられました。
- HSC 7のExcel形式のモデルと一緒に新規のDLL形式のユニット操作モデルをSim 8モジュールで使用できます。これは自在性を大きく増やします。

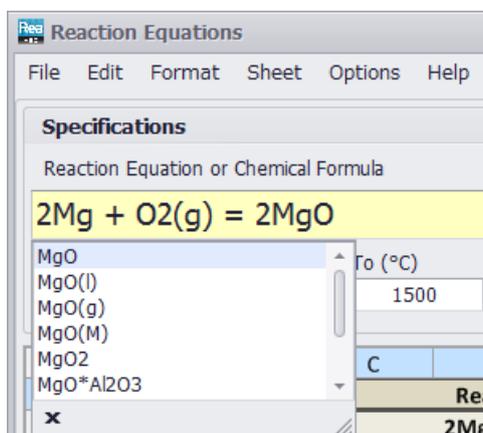


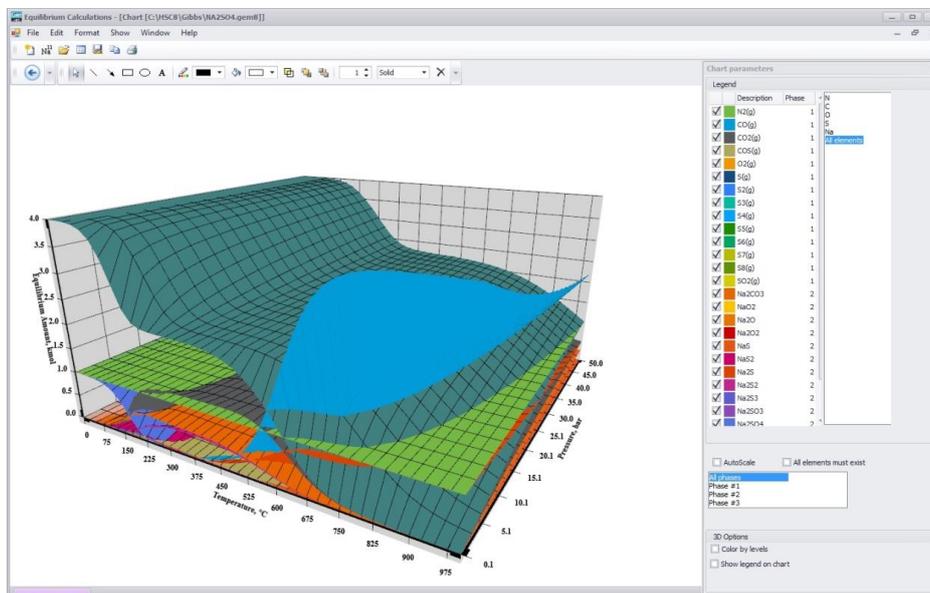
## Reaction (反応) モジュール



Reaction (反応) モジュールを使って化学反応平衡と必要なエネルギー量を解析できます。反応モジュールの溶解熱と蒸気化の計算も可能です。アップデートされたモジュールは魅力的なユーザーインターフェイスと新規のチャート化ツールを持ちます。その結果を複数のシートに収集できます。シートはチャート化とデータ入力にリンクされます。シートはいくつかの重ね合わせのチャートと、曲線交差の作成も可能です。

これまでの研究者は反応式を書き、そして標準の熱化学データから平衡定数と反応熱を計算することによって自分の考え方をテストしてきました。HSC はこれらすべてを効率的に行います。入力フィールドに反応式を書き込むと、HSC はいかなる温度での反応熱と平衡定数、そして種の量を与え、そしてこれらの図を与えます。HSC は元素収支をチェックし、そして電気化学反応の電圧対標準水素電極を与えます。



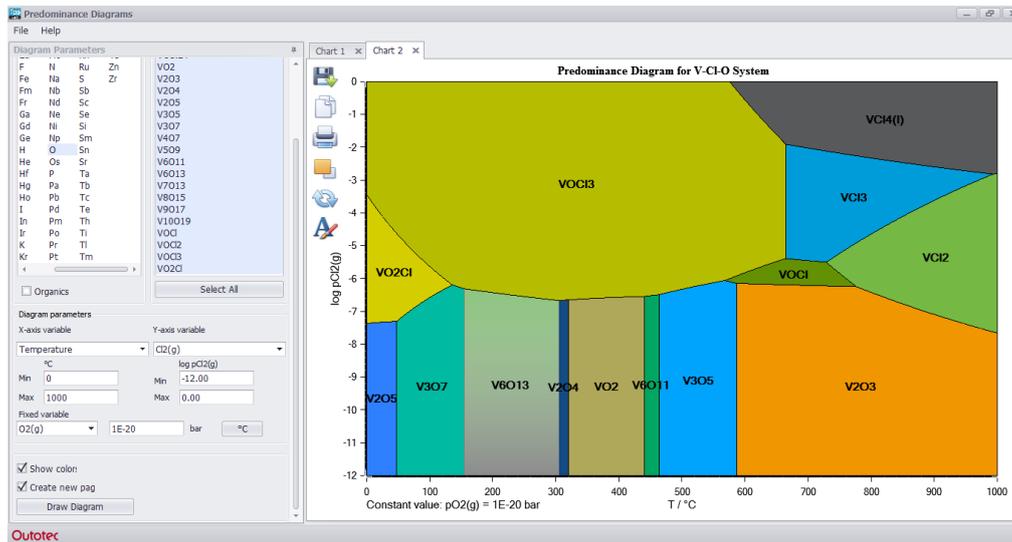


Gibbs 平衡計算はサステナビリティの化学反応器と化学系の生成物における原材料とプロセス変数を調査し研究し、サステナビリティの再利用、機会、限界を推定する実用的な方法を提供します。Gibbs Energy Minimization(Gem)法が計算で使われます。

この HSC モジュールで、どのような反応器での平衡組成と優勢な相の量の計算が容易になります。必要な情報は原材料量、温度、系の種だけです。系の元素を選択することにより、HSC のデータベースから選択された化合物を与えることにより、または古いファイルを編集することにより、これらを指定できます。

新規の Gibbs 8.0 モジュールは以下のように新規の機能と重要な機能がリストされます；

- 新規のチャート化ツールと 3D グラフィックが 2 つの独立変数計算モードに付け加えられました。
- 新規の Gibbs 8.0 が使いやすくなり、すべての別々であった Gibbs 7 コンポーネントが 1 つのモジュールに統合されました。
- Constant 体積と Adiabatic (断熱) 計算のようなより高度な計算オプションが付け加えられました。標的計算は必要とされる種の濃度に繋がる条件を探すことができます。
- Removal of Products オプションは、例えば、transitory evaporation を計算できます。新規の Open Atmosphere/Fixed Activity 計算オプションは開かれた系のモデル化を許容します。
- 制限された Cp 外挿は Cp 推定誤差を減らします。

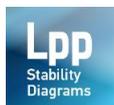


Thpp Diagram モジュールは両方の軸に分圧、または x 軸に温度と y 軸に分圧を使って相安定図を計算します。このモジュールは最小の Gibbs エネルギーを基にして状態図を計算します。しかし、計算時間を減らすために、各 x と y ポイントをチェックしません。相の境界のグラフを構築するプリセットの解像度と特定のアルゴリズムを使って計算が行われます。

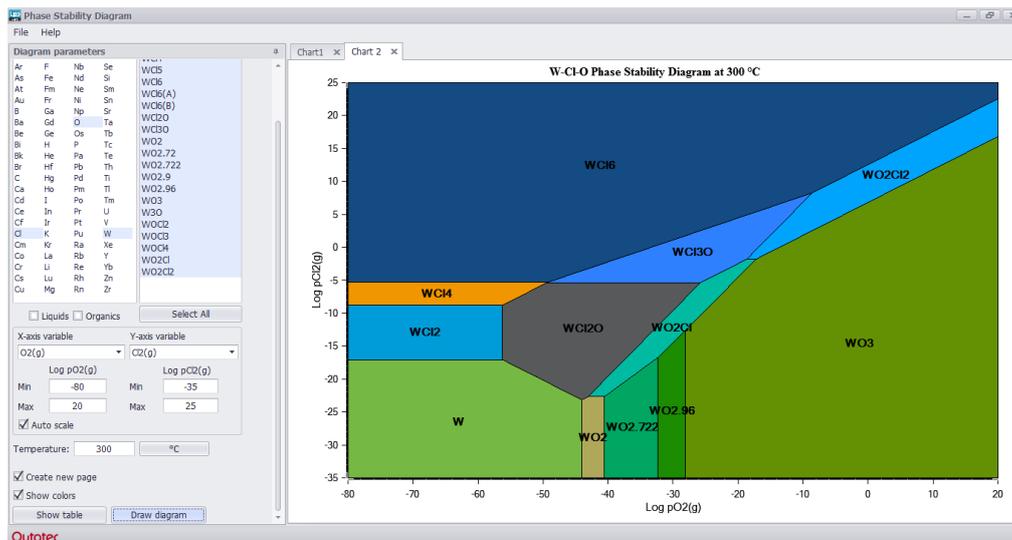
これらの状態図を使って、例えば、プロセス条件と温度に変化があるとき、プロセスガスのラインに存在する化学種の種類をレビューできます。状態図は焙焼条件または高温腐食条件問題を推定するときにも役立ちます。

新規の Thpp 8 モジュールは古い Thpp 7 の入力と計算モジュールを統合し、異なる系のテストを前の Thpp モジュールよりも使い易くしました。人間工学と視覚的な品質を改良しました。Chart ページオプションは詳細な分析に異なる状態図を容易に比較できます。

計算ルーチンが書き直され、ルーチンはより頑強で、正確で、高速になりました。



## Lpp モジュール



Lpp 相安定状態図は制約条件を軸に、等温条件下での 3 元系における固体相の安定領域(支配性)を示します。Lpp Diagram モジュールは 3 個の元素系の等温の相安定性状態図を描きます。この状態図は支配領域状態図、または Kellogg(ケロッグ)状態図としても知られます。

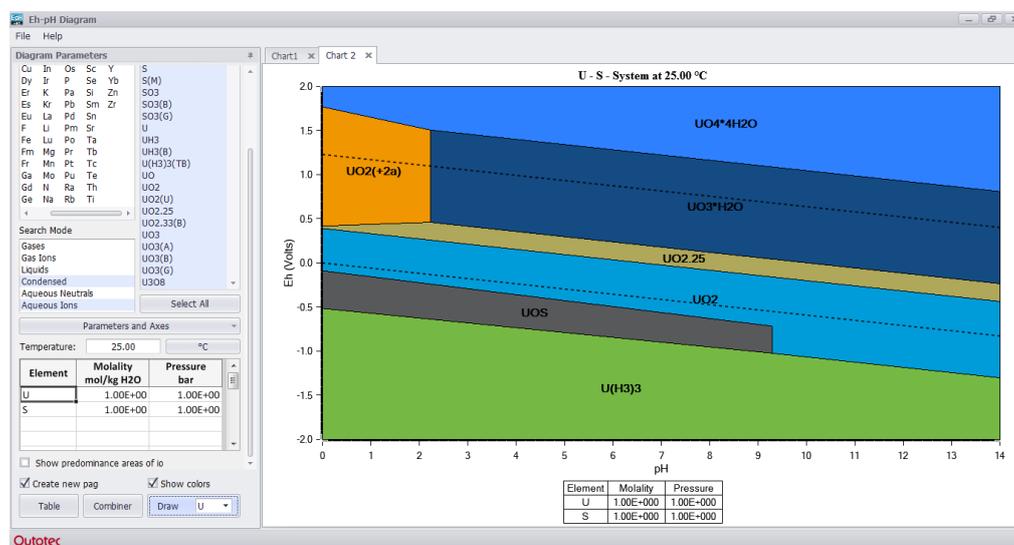
この状態図優勢な相の推定がすぐに必要なときに役立ちます。混合物の相は基本的な相安定性状態図では考慮されません。Lpp 状態図は、例えば、どの種がプロセスガスラインにおける酸素と硫黄圧の関数として安定であるかを推定するのに使用できます。

新規の Lpp モジュールは前の Lpp 7 の入力と計算モジュールを統合しました。これは異なる系をより容易にテストできることを示します。

人間工学と視覚的な表現が大きく改良されました。新規のチャート化ツールは結果の視覚的な質を改良します。Chart Page オプションは詳細な分析に異なる状態図の比較を容易にします。



## EpH モジュール



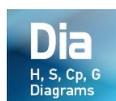
Pourbaix (プールベ) 状態図としても知られる Eh-pH 状態図は水溶液での異なる種の熱力学的安定領域を示します。安定領域は pH と電気化学の電圧の関数として表現されます。通常、水の上側と下側の安定限界も点線によって状態図に示されます。従来、この状態図はいくつかのハンドブックから引用されてきました。しかし、大部分のハンドブックで、状態図は限られた温度、濃度、元素の組み合わせしか得られませんでした。

選択された温度と濃度で状態図を正確に描けるので、HSC Chemistry の Ep-pH モジュールは高度に自在であり、高速な方法で状態図を作成できます。

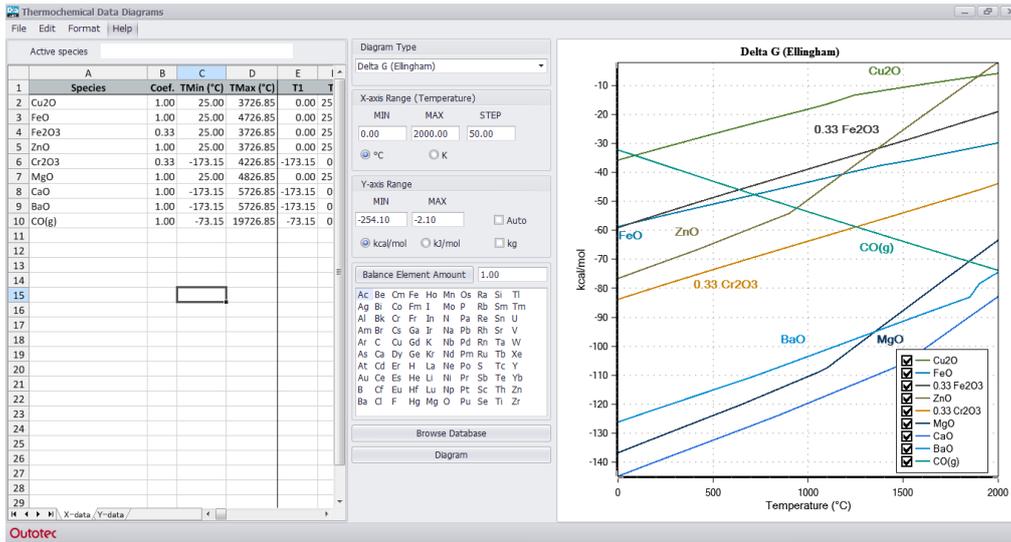
浸出沈殿、腐食の研究にこの状態図を広く応用できます。状態図は pH と電圧の関数として水溶液中での元素と種の動作のクイックビューを与られます。

新規の EpH 8 モジュールは EpH 7 の入力と計算モジュールを統合しました。

人間工学と視覚的な表現が大きく改良されました。新規のチャート化ツールは結果の視覚的な品質を改良しました。Chart page オプションは詳細な分析用に異なる状態図の比較を容易にします。



## Diagram (状態図) モジュール



**Diagram** モジュールは与えられた種の基本的な熱化学データをグラフィックフォーマットで表現します。8 種類の状態図形式を温度の関数として描くことができます。最も役に立つ状態図の 1 つは DG 状態図 (Ellingham-エリಂಗム状態図) です。モジュールはいろいろな酸化物、硫化物、塩化物などの相対的な安定性を温度の関数として示します。

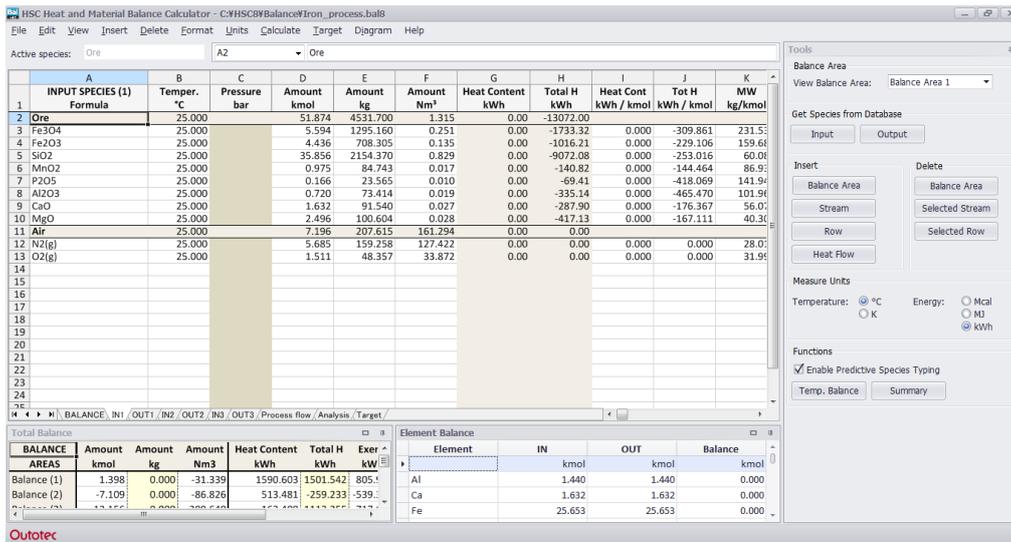
ユーザーインターフェイスとグラフィックの品質は前の **Diagram 7** モジュールと比較して大きく改良されました。新規の **Thp**、**Lpp**、**EpH** モジュールと同じチャート化ツールが使われています。

予測的な式の入力は種の指定に大きな助けになります。

**Diagram** モジュールは **HSC Database** モジュールを活用して、例えば、温度の関数として **H**、**S**、**Cp**、**G** の状態図を描きます。



## Balance(収支)モジュール



**Balance (収支)** モジュールを使って必要な数のリンクされたユニットプロセスへの熱と物質収支を推定できます。この新規のモジュールは新規の予測化学式の入力はもちろん改良されたユーザーインターフェイスとチャート化ツールを持ちます。

熱収支計算は通常新規の化学プロセスを開発し、そして古いプロセスを改良するときに行われます。このモジュールは境界条件として与えられた物質収支で、平衡条件での理論収支ではなく現実または制約条件のある熱収支を計算します。

このツールはサステナビリティを定量化するので物質とエネルギー収支の教育にも適しています。



## Heat Transfer(熱伝導)モジュール

| Layer Type                  | 1            | 2           | 3           | 4                      | 5                    | 6     | 7 | 8 | 9 | 10 |
|-----------------------------|--------------|-------------|-------------|------------------------|----------------------|-------|---|---|---|----|
| Layer Number                | 1            | 2           | 3           | 4                      | 5                    | 6     | 7 | 8 | 9 | 10 |
| Layer Type                  | Surface      | Solid Layer | Solid Layer | Solid Layer            | Surface              |       |   |   |   |    |
| Layer Material              | Molten metal | Ankrom-B 65 | CARBLOX B5E | Carbon steel: (0.2% C) | Water, Spray cooling |       |   |   |   |    |
| Surface Material            |              |             |             |                        |                      |       |   |   |   |    |
| <b>Layer Specifications</b> |              |             |             |                        |                      |       |   |   |   |    |
| Temperature (left edge)     | 1200         | 970         | 447         | 89                     | 53                   |       |   |   |   |    |
| Temperature (right edge)    | 970          | 447         | 89          | 53                     | 15                   |       |   |   |   |    |
| Thickness                   |              | 0.021       | 0.110       | 0.040                  |                      |       |   |   |   |    |
| Calculation Grid            |              | 10          | 10          | 10                     |                      |       |   |   |   |    |
| Average conductivity (k)    | W/(mK)       | 1.809       | 13.835      | 50.000                 |                      |       |   |   |   |    |
| Convection coefficient (hc) | W/(m²K)      | 196.000     |             |                        | 1200.000             |       |   |   |   |    |
| Radiation coefficient (hr)  | W/(m²K)      | 0.000       |             |                        | 0.000                |       |   |   |   |    |
| Thermal Resistance          | °C/kW        | 5.102       | 11.613      | 7.953                  | 0.800                | 0.833 |   |   |   |    |
| <b>Results</b>              |              |             |             |                        |                      |       |   |   |   |    |
| Total Heat Flow: 45.054 kW  |              |             |             |                        |                      |       |   |   |   |    |

さまざまな形状の反応器、反応器の壁面、ライニングの熱損失と熱伝導を推定するので(それゆえ反応器の熱設計のアシスタントである) Heat Transfer モジュールは Heat Loss モジュールとも呼ばれます。ユーザーインターフェイスのこのモジュールのおもな目的は全熱損失を推定、または壁面または反応器の温度プロファイルを描くことです。しかし、異なる物質と異なる設定を比較するためにも、例えば物質が臨界の最高温度を持つとき、または外気が一定温度を超えることができないとき、使用できます。Conduction (伝導)、Convection (対流)、Radiation (放射) データベースも物質プロパティの単純な基準テーブルのようなリソースも備えています。これは熱伝導と反応器からの損失を教える優れたツールになります。



## Aqua モジュール

| Water Phase  | Temp. | Amount    | Amount | Amount    | H Ideal  | H Estimate  | Cp Ideal    | Cp Estimate | H Ideal | H Estimate | Cp Ideal    | Cp Estimate | Osmotic    | H2O Vapour | Sol. Vapour | Ionic    |
|--------------|-------|-----------|--------|-----------|----------|-------------|-------------|-------------|---------|------------|-------------|-------------|------------|------------|-------------|----------|
| Data         | °C    | kmol      | mol-%  | g         | kcal/mol | cal/(mol*K) | cal/(mol*K) | cal/(mol*K) | kcal/kg | cal/(kg*K) | kcal/(kg*K) | cal/(kg*K)  | cal/(kg*K) | Pa         | Pa          | Strength |
| 7 H2O        | 40    | 5.55E+01  | 93.77  | 1.00E+06  | -68.05   | -68.05      | 18.01       | 17.88       | 1.01    | 1.01       | 5.55E+01    | 18.02       | 2.00       |            | 1.00        |          |
| 8 H(+)       | 40    | 4.05E-08  | 0.00   | 4.08E-05  | 0.00     | 0.00        | 0.00        | 0.31        | 0.29    | 4.05E-08   | 1.01        | 1.00        |            |            |             |          |
| 9 HS(-a)     | 40    | 5.28E-126 | 0.00   | 1.74E-121 | -4.16    | -4.33       | -19.57      | -14.52      | 0.73    | 0.69       | 5.28E-126   | 33.07       | 1.00       |            |             | 1.00     |
| 10 HS2(-a)   | 40    | 3.34E-221 | 0.00   | 2.17E-216 | -64.75   | -64.40      | -48.98      | -43.93      | 0.43    | 0.41       | 3.34E-221   | 65.14       | 1.00       |            |             | 2.00     |
| 11 HSO3(-a)  | 40    | 1.49E-42  | 0.00   | 1.21E-37  | -149.68  | -151.02     | -0.06       | 5.00        | 1.02    | 0.96       | 1.49E-42    | 81.07       | 1.00       |            | 3.00        | 1.00     |
| 12 HSO4(-a)  | 40    | 7.29E-07  | 0.00   | 7.07E-02  | -211.89  | -211.69     | 5.72        | 10.56       | 0.67    | 0.63       | 7.29E-07    | 97.07       | 1.00       |            | 4.00        | 1.00     |
| 13 HSO5(-a)  | 40    | 1.37E-28  | 0.00   | 1.55E-23  | -184.86  | -184.51     | 33.37       | 38.42       | 0.43    | 0.41       | 1.37E-28    | 113.07      | 1.00       |            | 5.00        | 1.00     |
| 14 HS2O3(-a) | 40    | 3.76E-135 | 0.00   | 4.25E-130 | -153.84  | -153.49     | 4.16        | 9.22        | 0.43    | 0.41       | 3.76E-135   | 113.14      | 1.00       |            | 3.00        | 2.00     |
| 15 Na(+)     | 40    | 1.92E+00  | 3.24   | 4.40E+04  | -57.28   | -57.06      | 10.77       | 16.23       | 0.47    | 0.44       | 1.92E+00    | 22.99       |            | 1.00       |             |          |
| 16 NaSO4(-a) | 40    | 1.63E+00  | 2.75   | 1.94E+05  | -274.54  | -274.19     | -63.08      | -58.03      | 0.43    | 0.41       | 1.63E+00    | 119.05      |            | 1.00       | 4.00        | 1.00     |
| 17 OH(-a)    | 40    | 7.69E-07  | 0.00   | 1.31E-02  | -55.42   | -55.47      | -27.29      | -5.52       | 0.76    | 0.71       | 7.69E-07    | 17.01       | 1.00       |            | 1.00        |          |
| 18 Si(-2a)   | 40    | 4.67E-131 | 0.00   | 1.50E-126 | 7.36     | 8.74        | -40.65      | -20.22      | 0.03    | 0.03       | 4.67E-131   | 32.07       |            |            |             | 1.00     |
| 19 SO3(-2a)  | 40    | 2.01E-42  | 0.00   | 1.61E-37  | -152.83  | -153.85     | -59.00      | -38.58      | 0.11    | 0.10       | 2.01E-42    | 80.06       |            |            | 3.00        | 1.00     |
| 20 SO4(-2a)  | 40    | 1.44E-01  | 0.24   | 1.38E+04  | -218.27  | -218.58     | -54.51      | -28.66      | 0.08    | 0.07       | 1.44E-01    | 96.06       |            |            | 4.00        | 1.00     |
| 21 SO3(-2a)  | 40    | 3.79E-130 | 0.00   | 4.25E-125 | -155.79  | -154.41     | -49.90      | -29.47      | 0.09    | 0.09       | 3.79E-130   | 112.13      |            |            | 3.00        | 2.00     |

Aqua モジュールには非理想系の Aqueous 電極モデルと標準状態データベースがあります。このモジュールもまた、多数の中性化合物とイオン化種の標準状態データを持っています。Aqua モジュールは水溶液プロパティを計算する標準ツールとして働きますが、水溶液の平衡モジュール上で直接活用もできます。

Aqua モジュールはイオン活量、平均活量係数、浸透係数、溶液エンタルピー、熱容量などを計算します。Davies モデル(拡張 Debye-Huckel)、半経験的な Pitzer モデル(2 元系反応のみ)、Pitzer モデルの Harvie's 変形(2 元系 3 元系パラメータ)の 3 種類の水溶液モデルを使用できます。Pitzer パラメータデータベースを多成分系溶液にはもちろん、2 元の電極系にも使用できます。

温度依存の Pitzer の 2 元と 3 元のイオン反応パラメータを含む拡張されたデータベースが収集されています。HSC Aqua データベースにおける Pitzer パラメータの総数は現在 1,031 件です。これは 425 件のカチオン-アニオンペア、114 件のカチオン-カチオンとアニオン-アニオンペア、199 件の 3 元係数、293 件のイオン-中性ペアを含みます。



## HSC Database(データベース)モジュール

| Range                      | 1       | 2       | 3         | 4        | 5       | 6       | 7       | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|----------------------------|---------|---------|-----------|----------|---------|---------|---------|---|---|----|----|----|
| Tmin (K)                   | 100.00  | 298.15  | 450.00    | 631.00   | 700.00  | 1200.00 | 1728.00 |   |   |    |    |    |
| Tmax (K)                   | 298.15  | 450.00  | 631.00    | 700.00   | 1200.00 | 1728.00 | 6000.00 |   |   |    |    |    |
| Phase                      | s       | s       | s         | s        | s       | s       | l       |   |   |    |    |    |
| H kJ / mol                 | 0.000   | 0.000   | 0.000     | 0.000    | 0.000   | 0.000   | 17.480  |   |   |    |    |    |
| S J / (mol * K)            | 29.796  | 0.000   | 0.000     | 0.000    | 0.000   | 0.000   | 10.114  |   |   |    |    |    |
| Cp coefficient A J/(mol*K) | 15.485  | 16.270  | 1042.743  | -131.961 | 12.613  | 20.980  | 43.100  |   |   |    |    |    |
| Cp coefficient B           | 53.411  | 36.758  | -2642.175 | 961.390  | 21.991  | 8.806   | 0.000   |   |   |    |    |    |
| Cp coefficient C           | -0.667  | 0.167   | -442.412  | 200.020  | 25.457  | 18.789  | 0.000   |   |   |    |    |    |
| Cp coefficient D           | -52.811 | -16.154 | 1946.962  | -267.439 | -4.929  | 0.577   | 0.000   |   |   |    |    |    |
| Density kg/l               | 8.900   | 0.000   | 0.000     | 0.000    | 0.000   | 0.000   | 0.000   |   |   |    |    |    |
| Color                      | 7       | 7       | 7         | 7        | 7       | 0       | 0       |   |   |    |    |    |
| Solubility in H2O g/l      | 0.000   | 0.000   | 0.000     | 0.000    | 0.000   | 0.000   | 0.000   |   |   |    |    |    |

HSC Database の検索と編集ダイアログは全く新しく作り直されました。HSC 7 のダイアログは強力な検索ダイアログに統合され、多くの新規の検索オプションがこのダイアログに付け加えられました。

**HSC** データベースのアーキテクチャもアップデートされました。新しいデータベースには文字数制限のないコメントと参照のフィールドがあります。