目　次

1　緒　言 …… **1**

1.1　分子反応モデリング技術開発の意義 …… 1
1.2　背　景 …… 2
1.3　モデリング手法 …… 4
1.4　分子反応モデリングのストラテジー …… 5
1.5　化学工学の意義と本書の構成 …… 7
引用文献 …… 9

第1部　分子反応モデリングの基礎　11

2　複雑な原料油の分子構造と組成のモデリング …… **15**

2.1　緒　言 …… 15
2.2　複雑な原料の分析 …… 16
2.3　分子構造モデリング：確率論的アプローチ …… 17
2.3.1　確率密度関数(PDF) …… 19
a.　複雑混合系を記述するための PDF　19
b.　分子構造属性　20
c.　適切な PDF の形　21
d.　離散化，切り詰め，および再正規化　22
e.　条件付確率　23
2.3.2　確率論的サンプリング …… 24
a.　モンテカルロ・サンプリングのプロトコル　24
b.　分子組成モデルの最適化　24
c.　分子組成モデルのサイズ　26
2.3.3　求積分子サンプリング …… 27
a.　求積サンプリングのプロトコル　27
b.　求積分子組成モデルの詳細チューニング　29
2.4　ケーススタディー：軽油 …… 30

2.5 考察とまとめ …… 31
引用文献 …… 34

3 複雑なプロセス化学の反応ネットワーク自動構築 …… 35
3.1 緒 言 …… 35
3.2 反応ネットワークの構築とそのコントロール技術 …… 39
3.2.1 プレ・プロセッシング手法 …… 39
a. ルールに基づく反応ネットワーク構築 39
b. シーディングとデシーディング 42
3.2.2 *in situ* プロセッシング手法 …… 45
a. 同形性に基づく動的ランピング 45
b. 反応サイトの確率論的サンプリング 47
3.2.3 ポスト・プロセッシング手法 …… 48
a. 同形性に基づく事後ランピング 48
b. 分子構造と反応速度に基づくモデルの縮小 49
3.3 反応ネットワークの特性 …… 52
3.3.1 分子の物性 …… 52
3.3.2 反応の特性 …… 54
3.3.3 反応ネットワークの特性 …… 55
3.4 まとめと結論 …… 55
引用文献 …… 56

4 速度パラメータの系統的整理 …… 59
4.1 緒 言 …… 59
4.2 複雑な反応ネットワークの速度式 …… 61
4.2.1 均一系の反応速度式 …… 61
4.2.2 不均一系の反応速度式 …… 62
4.3 線形自由エネルギー関係(LFER)の概要 …… 67
4.4 接触水素化分解における LFER の代表的な結果 …… 71
4.5 まとめと結論 …… 75
引用文献 …… 76

5 反応モデルのタイプに応じた方程式ソルバーの選択 …… 79
5.1 緒 言 …… 79

5.2 数学的な基礎 …… 80
5.2.1 分子反応モデルを実行するための数学的手法 …… 80
5.2.2 分子反応モデルの硬さ …… 81
5.2.3 分子反応モデルの薄さ …… 82
5.3 実 験 …… 83
5.3.1 検討に用いた分子反応モデル …… 83
5.3.2 ソルバー …… 83
5.3.3 実験の設定 …… 84
5.4 結果と考察 …… 85
5.4.1 経路レベルの分子反応モデル …… 85
5.4.2 機構レベルの分子反応モデル …… 86
5.4.3 分子反応モデル実行のガイドライン …… 88
5.5 まとめと結論 …… 88
引用文献 …… 89

6 総合的な分子反応モデリング用ツール …… 91
6.1 緒 言 …… 91
6.2 分子反応モデリング用ツール(KMT)の開発 …… 92
6.2.1 分子ジェネレータ(MolGen) …… 92
6.2.2 反応ネットワークジェネレータ(NetGen) …… 94
6.2.3 方程式ジェネレータ(EqnGen) …… 95
6.2.4 実行解ジェネレータ(SolGen) …… 95
6.3 パラメータの最適化と性状予測 …… 97
6.3.1 パラメータ最適化機能(ParOpt) …… 97
6.3.2 最適化アルゴリズム …… 97
6.3.3 目的関数 …… 98
6.3.4 混合物の性状推算 …… 99
6.3.5 包括的最適化戦略 …… 100
6.4 まとめと結論 …… 100
引用文献 …… 101