

知的統合型プロセスデータベースの構築 (I)

1 L - 2

-異なるデータベース・システムの統合設計-

徳田昌則¹⁾, 工藤純一²⁾, 野口正一²⁾*¹⁾ 東北大学選鉱製錬研究所*²⁾ 東北大学応用情報学研究センター

1. はじめに

金属工学, 材料科学などの分野では, 材料化合物の特性を評価する方法として熱力学計算を行い, その結果として, 自由エネルギーの算出あるいは状態図を作成して, 製錬プロセスの設計ならびに新材料の設計を行っている. このような分野では, 各化合物を計算する基礎となる各元素の諸データをデータベース化し, 目的に応じた熱力学計算を行えるシステムがいくつか存在している.

例えば, 日本熱測定学会で提案しているMALT¹⁾は, 主に無機物を中心としたデータベースである. これはBASIC プログラムで記述されておりパソコンでのみ稼働する. フィンランドで考案された Solgasmix²⁾は一般的な熱力学計算を主体としてヨーロッパを中心し普及しており, その改良版SAGE³⁾が注目されている. これはFORTRAN で記述されておりパソコンから大型計算機まで幅広く使用できる.

このようなデータベースは, データを十分吟味したものであり, それ自体の評価は高いが, 各データ形式およびその評価方法が異なるために, データの互換使用ができない. さらに, データベース構築まで5~20年という長い期間を費やしているため, その間のコンピュータの進歩に追従できず, 現在のコンピュータの性能を活かしたヒューマン・マシン・インタフェース機能や結果の表示方法について大きな進展が見られない. そこで, 情報工学と金属工学の融合的な観点から, 各種熱力学データベースを統合して新プロセスデータベース・システムへ発展させる方法を提案する.

2. システム構築の基本方針

システム構築においては, 以下の点に重点を置いた.

- ① 異なるOS上でのデータ転送方法の確立
- ② データ形式の統一
- ③ データ評価方法の確立

④ 結果のビジュアライゼーション方法の提案

⑤ ユーザ・フレンドリーなインタフェースの開発

①はMALTとSAGEの結合を有機的に行い, かつ操作性に優れた転送方法の確立である. ②は新プロセスデータベース・システムで扱うデータ形式であり, ここでは, 世界的に広く使用されているSGTE形式を採用した. ③は個々のデータベース・システムで, 独自のデータ評価方法を行っており, これによって信頼性のあるシステムを確立している. このような各データベース・システムのデータを互換使用するためには, 単にデータの移動ではなく, そのデータ評価方法も一緒に取り入れる必要がある. 本システムではこれを知識として獲得し, 知識ベースとして付加する方法を開発中である. ④は最終的な表示方法の提案, データ評価支援として利用者が直観的に理解しやすい表示方法を開発中である. ⑤は表示結果を次の解析にフィードバックしたり, 解析操作を容易にするためのヒューマン・マシン・インタフェースを開発中である. 本システムでは計算機に不慣れな利用者を対象とした操作性に優れたインタフェースをウインドウシステム, マウス機能を利用して開発中である.

今回は①と②について報告する.

3. 異なるOS上でのデータ転送方法の確立

図1にはシステムの概略図を示す. 本システムはハードウェアとしては, unixベースのエンジニアリング・ワークステーション(以下EWS)を中心とする構成を採用した. これは, 計算機の性能, ウインドウ環境, ネットワーク環境, システム開発効率を重視したためである. ソフトウェアとしては, 一般的な熱力学解析とunixシステムへの移植性を考慮してSAGEをベースとした.

A Building of Knowledge Integrated Process Data Base (I)

Masanori TOKUDA¹⁾, Jun-ichi KUDOH²⁾, Shoichi NOGUCHI²⁾

¹⁾ Research Institute of Mineral Dressing and Metallurgy, Tohoku University

²⁾ Research Center for Applied Information Sciences, Tohoku University

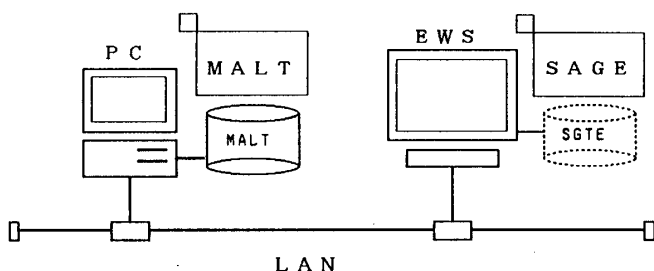


図1 システムの概略図

3.1 MALTのデータ転送

MALTはパソコンのBASICシステム上で稼働するので、unixには移植できない。そこで、MALTで作成もしくは評価したデータを確実にunixへ転送する手段を考えた。これは、パソコンでMALTを起動し、必要なデータを作成した後、データをMS-DOSのアスキー形式に変換して、kermitを用いてLAN(TAINS)経由でunixに転送する方法である。この手順を表1に示す。表1から分かるように、データがunixに到達するまでの操作が煩雑なので、MALT自体をunixに移植する方法を今後は検討する必要がある。

表1 MALTデータのSGTE形式変換手順

コンピュータ	OS	内容
①PC	N88BASIC	(MALT起動, 結果出力)
②PC	N88BASIC	(MS-DOS形式に変換)
③PC	MS-DOS	(kermitでunixへ転送)
④EWS	unix	(SGTEデータ形式に変換)

3.2 SAGEの移植

SAGEはFORTRAN 言語で記述されており、従来から大型計算機でも稼働していたことからunixへの移植は容易である。しかし、第2章の④⑤の機能を満足させるためには、unix上で標準になっているC言語に変換しておくことが後のシステム構築上は有利と考えられる。そこで、FORTRANをC言語に変換する作業を行い unix上に移植した。

これには、パブリックドメインで提供しているF2Cを用いた。C言語変換後の信頼性は、テストデータを用いて確認した。

4. データ形式の統一

MALTは独自のデータ形式を採用しているのに対して、SAGEはSGTE形式とよばれるデータ形式を採用している。この形式は、ヨーロッパ、オーストラリアを中心に種

々の熱力学データベースで採用されている形式なので、今後の発展性を考えて、本システムのデータ形式はSGTE形式を採用することにした。したがって、MALTのデータ形式をSGTE形式に変換する必要がある。

MALTとSAGEではデータの処理形態が異なるので、単にMALTで作成したデータをSGTE形式に変換することはできない。ここでの問題点としては、①データ処理形態の違い、②データ評価方法の2つが重要である。後者については、第2章の③項目の内容に関連する。

4.1 変換における問題点(1)

熱力学の計算において、MALTは(1)式のように5項から成り立っており、これは比熱を表している。これに対して、SAGEの場合は、生成自由エネルギーを用いている。Gibbsの自由エネルギーと比熱の間には(2)式の関係があり、結局SAGEで用いられている ΔG は、(3)式のように7項から成り立っている。

$$C_p = A + Bx10^{-3}T + Cx10^5/T^2 + Dx10^{-6}T^2 + Ex10^8/T^3 \quad (1)$$

$$\Delta G_i = \Delta H_{298} + \int_{298}^T \Delta C_p dt - T \Delta S_{298} - T \int_{298}^T \Delta C_p / T dt \quad (2)$$

$$G = a + bxT + cxT \ln T + dxT^2 + e/T + fxT^3 + g/T^2 \quad (3)$$

ここで、Tは絶対温度、A~E、a~gは係数、 ΔH_{298} 、 S_{298} は各々標準エンタルピー及びエントロピーである。

したがって、(1)式を(3)式の形式に変換するためには、(2)式の関係を用いて積分しなければならない。

4.2 変換における問題点(2)

(1)式と(3)式は式を構成している項の数が異なるので、その結果は同一にならないが、(3)式を用いた計算結果が(1)式を用いた計算結果に近づくための工夫が必要である。

5. おわりに

現在、MALTから作成したデータをSAGEで解析した場合、その計算誤差が最小になるための知識を獲得中である。

参考文献

- 1) 日本熱測定学会；パソコン用熱力学データベース MALT, 1985. 11.
- 2) G.Eriksson, Chem. Scr., 8, p.100, 1975.
- 3) G.Eriksson, K.Hack; CALPHAD, 8 No. 1, P. 15, 1984.