

流体の熱物性値に関するデータベースシステム†

鷹岡 康夫^{††} 高 森 年^{†††}
 蒔 田 董^{††††} 田 中 嘉 之^{††††}

流体の熱物性に関する鑑定・評価を受けた選定値は多分野の研究者・技術者に必要とされる基礎的な学術情報であり、これをデータベースに蓄積し、広く一般研究者に情報サービスを行うことは、今日の情報化時代において意義深い試みであり、学術的・社会的に寄与するところはきわめて大きい。本研究では、神戸大学計算センターのシステムを利用して、340余種の純物質の10種の熱物性に関する物性値情報を気・液両相7種の物理状態についてデータベースに蓄積し、TSSおよびバッチ処理方式の検索のみならず、サブルーチン形式の検索ルーチンを利用することにより利用者プログラムの中で直接物性値を検索することも可能とするデータベースシステムの開発を行った。本論文ではシステム開発のためになされた入力データの選定と入力形態の検討、データベースの設計、利用形態の考察と検索システムの作成などについて述べる。

1. はじめに

流体の熱物性値データを必要とする分野は、物理・化学の研究分野はもちろん、熱工学・流体工学・エネルギー変換工学・冷凍工学・機械加工学・化学プロセス工学・化学プラント設計など広い領域にわたっている。物性値データは毎年数多くの研究者が測定し発表しているが、現実には同一物質の同一条件下での物性値であっても、研究者や測定法のちがいに著しい差異が見られる。したがって、たまたま発見した物性値をそのまま利用することは危険が大きい。このような状況から、1950年代以後、物性値に関する情報処理センターが世界各地に設立され、文献の収集・分類・評価・選定値作成などの活動が行われてきた¹⁾。活動の結果は叢書または単行本として出版されているが²⁾⁻⁷⁾、普及の度合からいっても、また、費用的な面からいっても、一般の研究者が必要となときに必要な物質の物性値を入手することは容易とはいえない。

アメリカのPurdue大学付属の熱物性研究所TPRC* (Thermophysical Properties Research Centerの略)では物性データの収集・整理・評価活動を行うかたわら、これらの文献情報を計算機システムに記憶し、世

界各国の研究者の要求に応じて該当文献を検索し、マイクロフィッシュに納めた一次情報を頒布するサービスを行っている⁸⁾。しかし、頒布される情報は測定されたままの物性値データであり、評価された選定値ではない。このような現状から見て、物性に関する鑑定・評価をうけた選定値をデータベースに蓄積し、一般研究者を対象とした広域的な情報サービスを行うことはきわめて有意義なことである。

一方、大学における学術情報データベースの作成と情報サービスの実施という観点から見ると、文献情報のサービスに関してはすでに我が国でも数多く行われているが、数値情報を中心とする科学技術情報のサービスはとくに我が国では未だ数少ない⁹⁾⁻¹²⁾。このような状況の下で、熱物性値に関するデータベースシステムを構築することは、システム技術的な面でも、また、大学における情報サービスのあり方の追求という立場からも、きわめて興味深い試みである。神戸大学においては、1978年に工学部関係学科の有志の教官および計算センタ教官が集まって研究グループを結成し、データベースの設計、データの選定と入力方法の検討、利用形態の検討と検索方式の考察等を重ね、昭和53年度特定研究費、昭和54・55年度文部省科学研究費補助金の援助をうけてデータベースシステムの構築作業を行い¹³⁾、ようやく、初期の目標としたシステムがほぼ完成したので、以下にその結果を報告する**。

† Database System on the Thermophysical Properties of Fluids by YASUO TAKAOKA (Kobe University Computation Center), TOSHI TAKAMORI (Department of Instrumentation Engineering, Kobe University), TADASHI MAKITA and YOSHIYUKI TANAKA (Department of Chemical Engineering, Kobe University).

†† 神戸大学計算センター

††† 神戸大学工学部計測工学科

†††† 神戸大学工学部化学工学科

* 1975年にPurdue大学付属の他の三つの情報センタと統合され、以後CINDASと総称されている。

** なお、本システムに関しては、そのプロトタイプ作成時にその概要を報告している^{14),15)}。

2. データベースの作成方針

2.1 入力データの選定

データベースに入力する熱物性値データは実測値や推算値のような文献に報告されたままのデータではなく、厳密な鑑定・評価を受けた“選定値”に限定し、入力する数値データにはデータの信頼性を表すグレードを付加し、データの出典を明確にすることを基本方針とした。したがって、国際的に認められた鑑定・評価を受けたデータはその評価結果に基づいて8段階のグレードをつけて入力データとしたが、まだ評価が行われていないデータについては、本学および他大学の研究者よりなる研究組織において評価を行い、作出した選定値を入力データとすることにした。

入力の対象となる物質は純物質に限定し、工学的重要性を考慮して選定した。現在、データベースに登録されている物質は元素・無機化合物・有機化合物を合わせて343種であるが、今後、利用者の要求およびデータの生成により、随時追加していく方針である。データベースに登録する物質は化学的に分類し、数字4桁のコードを付加した。データ入力の対象とする熱物性は工学的重要性を考慮し、表1に示される10種類の性質を選定した。一般に、流体の熱物性と総称される性質は、物質系の静的すなわち平衡状態で現れる性質と、動的すなわち系内に何らかのポテンシャル勾配が存在するときのみ現れる性質とに大別される。前者はPVT関係を基礎として熱力学的に誘導されるので、“熱力学性質”と呼ばれ、後者は勾配による物理量の輸送を伴うので、“輸送性質”と呼ばれる。本研究で採用した10種類の物性は、熱力学性質としては分子論的に重要な基本的性質、輸送性質としては熱お

表1 データ入力の対象とする熱物性

Table 1 Selected properties for data input.

分類	物性	コード	単位	
熱力学性質	PVT関係	—密度	D	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
		—比容積	V	$\text{m}^3\cdot\text{kg}^{-1}$
		—圧縮係数	Z	—
	蒸気圧	P	$\text{bar}(=10^5\text{Pa})$	
	定圧比熱	C	$\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	
輸送性質	比エンタルピー	H	$\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$	
	比エントロピー	S	$\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	
その他	粘性率	R	$\text{Pa}\cdot\text{s}$	
	熱伝導率	K	$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	
	表面張力	G	$\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$	
	屈折率	N	—	
	誘電率	E	—	

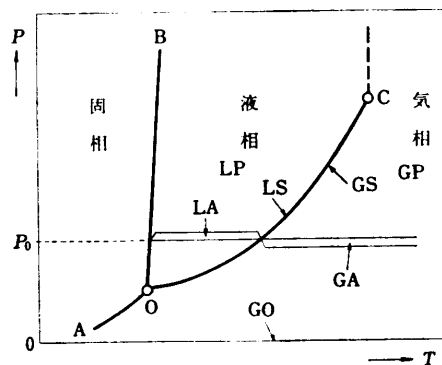


Fig. 1 Selected physical states of substances (shown by two English letters).
 P₀: 大気圧, C点: 臨界点, O点: 3重点, AO線: 昇華曲線, BO線: 融解曲線, CO線: 蒸発曲線, GO: 理想気体, GA: 常圧気体, GS: 飽和気体, GP: 高圧気体, LA: 常圧液体, LS: 飽和液体, LP: 高圧液体

図1 物質の物理状態

Fig. 1 Selected physical states of substances (shown by two English letters).

よび物質移動を含む各種の操作の設計に不可欠の基礎物性に限定し、その他の性質として同定や設計に要望の多い3種類の性質を含めることにした。

物質の物理状態については、流体すなわち気体と液体に限定することにした。一般に、流体の物理状態は気相と液相に分離され、各相につき温度および圧力(または物質の密度)を定めると、物質の状態が一意的に定まる2変数系であるが、これに、実用上の便宜を考え、特定の物理状態として大気圧すなわち圧力1.01325 barでの状態(常圧状態)と飽和蒸気圧下での状態(飽和状態)を温度のみの関数として扱う1変数系状態として加え、また、熱力学的計算の基礎とされることの多い理想気体状態を同じく温度のみの1変数系状態としてつけ加えることにした。図1は物質の気・液・固の3相とデータ入力の対象とする7種類の物理状態との関係を温度Tおよび圧力Pを変数として図示したものである。

2.2 入力データの形態

前述のように、データベースに入力する物性値は選定値であり、これは“相関式”と呼ばれる経験式あるいは半経験式の未定係数を多くの実測値を最も正確に再現するように決定して作成されるものである。物性値データはほとんどが式によって与えられるといえる。しかし、相関式は一般に複雑な形で表現されていて、しかも、2変数系の場合には温度と物質の密度の関数として表現されることが多い*。

* 一般に、相関式は理論的に温度と密度の関数として表現するのが自然であり気・液両相にわたって適用できるので、適用範囲も広くなる。たとえば、熱力学性質についていえば温度と密度の関数として表される Helmholtz の特性関数の微係数として誘導される¹⁰⁾。

一方、データベース利用者の立場からいえば、2変数系の物理状態においては温度と圧力を指定して物性値を要求するのが普通である。この場合、上述の相関式を用いて物性値を計算するためには、温度と密度の関数として与えられる圧力(蒸気圧)に関する相関式により、指定された温度と圧力から逆に陰関数として与えられる密度を反復計算して求めた上で、上述の相関式を用いなければならないので、相関式により物性値を計算する方法は実用的でない。データベースの作成に当たっては利用者の便宜を優先し、温度と圧力の指定により物性値をとり出せる形をとることにしたので、上述のような場合は数値表の形で物性値データを入力し、必要に応じて補間計算を行って物性値を求めることにした。ただし、主として1変数系物理状態 GA, GS および LS の特定の物性に関しては比較的簡単な形の相関式が用いられているので、これらに関しては相関式を利用して物性値を計算することにした。入力された物性値データのなかで相関式で与えられているものの数は比較的少なく、全データの20%弱である。

3. データベースの設計

3.1 DBMS の選定

熱物性データベースはデータおよび利用形態に関して次のような性格をもつ。

- (1) データ量、データ項目数などから見てデータベースは比較的小規模であり、データ構造も比較的簡単な形に表現できる。
- (2) データベースの更新はデータベース管理者に限定され、その頻度は少なく、オンライン更新の必要はない。
- (3) データベースの利用目的から考えて、科学技術計算ジョブとの密接な結合を必要とし、効率のよい数値検索が要求される。

本学計算センタに設置されている計算機 ACOS シリーズ 77 NEAC システム 700 S ではインバーテッド・ファイル型 DBMS である INQ^{17), 18)}のほか、CODASYL 型 DBMS である ADBS および IDS が利用できるが、両者を比較した場合、INQ の長所として次のような点が挙げられる。

(1) INQ は関係型 DBMS に属するので、データ間の関係を“表”という自然な形で表現することができ、データベースの設計が容易になる。

(2) 初期の設計後、データ項目の追加・変更の必要が生じても個々の INQ ファイルは独立しているの

で、該当ファイルのみの変更で対応できる。また、検索パターンの追加・変更に対しては、ファイル間結合を記述する INQ セクションの変更だけで対応できる。

(3) 数値処理を伴う応用プログラムとの結合の必要性を考えた場合、INQ がホスト言語として、FORTRAN をもつことは重要な利点である。

一方、短所としては

(1) インバーテッド・ファイル型の欠点としてキー項目のデータ更新に対するパフォーマンスが悪い¹⁹⁾。

(2) 複雑なネットワーク型のデータ構造をもつデータベースに対しては検索効率が低下する(この場合、INQ では検索時に複数の INQ セクションの切換えを行わねばならない)。

が考えられるが、上に述べたように本データベースはデータ更新の頻度は少なく、データ構造も階層構造で表現できる形であるので、これらの短所は問題にならない。このような理由で DBMS として INQ を採用するのが適当であると判断した。

3.2 データ構造

熱物性データベースは図2に示す4個の INQ ファイルにより構成される。おのおののファイルは□で囲んで示すデータ項目により結合される。4個の INQ ファイル内のデータ構造は図3に示すような COBOL のデータ記述形式に類似したファイル記述言語(FDL)によって表現される。図中のデータ属性の表示方式は COBOL におけると同様に9が数字型(アンパックド・デシマル)、Xが文字型を意味し、FBは2進浮動小数点実数を意味する。また、データタイプにおける PKY は主キーを、DSP は表示項目を意味する。DSP と宣言されていない項目は検索項目となり、その項目についてのインバーテッド・インデックスが作成されるので、その項目を検索キーとして用いることができる。本データベースではデータローディング時の

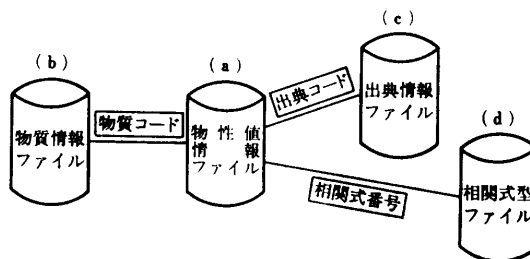


図2 熱物性データベースの構成

Fig. 2 Composition of the thermophysical property database.

レベル番号	データ項目	データ属性	データタイプ
(a) 02	物質コード	PIC X(4).	
02	物性コード	PIC X(1).	
02	物理状態コード	PIC X(2).	
02	出典コード	PIC X(5).	
02	グレード	PIC 9(1)	DSP.
02	テーブル値 (N).		
03	圧力値	PIC FB	DSP.
03	部分値 (N).		
04	温度値	PIC FB	DSP.
04	物性値	PIC FB	DSP.
02	相関式情報 (N).		
03	適用温度下限	PIC FB	DSP.
03	適用温度上限	PIC FB	DSP.
03	適用圧力下限	PIC FB	DSP.
03	適用圧力上限	PIC FB	DSP.
03	相関式番号	PIC 9(2)	DSP.
03	Tの最小ベキ	PIC 9(2)	DSP.
03	Tの最大ベキ	PIC 9(2)	DSP.
03	Pの最小ベキ	PIC 9(2)	DSP.
03	Pの最大ベキ	PIC 9(2)	DSP.
03	相関式適用条件	PIC 9(1)	DSP.
03	相関式係数 (N).		
04	係数値	PIC FB	DSP.
(b) 02	物質コード	PIC X(4)	PKY.
02	分子記号シソーラス (N).		
03	分子記号	PIC X(20).	
02	物質代表名	PIC X(40)	DSP.
02	物質名シソーラス (N).		
03	物質名	PIC X(40).	
02	Chem. Ab. 登録番号	PIC X(20).	
02	分子量	PIC X(7)	DSP.
02	融点	PIC X(9)	DSP.
02	沸点	PIC X(9)	DSP.
02	臨界点圧力	PIC X(8)	DSP.
02	臨界点温度	PIC X(8)	DSP.
02	臨界点体積	PIC X(8)	DSP.
02	臨界点密度	PIC X(7)	DSP.
(c) 02	出典コード	PIC X(5)	PKY.
02	第1著者名	PIC X(20).	
02	第2著者名	PIC X(20).	
02	第3著者名	PIC X(20).	
02	第4著者名	PIC X(20).	
02	標 題	PIC X(160)	DSP.
02	雑誌名または出版元	PIC X(100)	DSP.
02	発行年	PIC 9(4)	DSP.
(d) 02	相関式番号	PIC 9(2)	PKY.
02	相関式の形	PIC X(130)	DSP.

図 3 INQ ファイルのファイル記述

Fig. 3 File Descriptions of INQ files. (a): Property data information file, (b): Substance information file, (c): Source information file, (d): Formula type information file. In the data attribute, X, 9 and FB denote characters, figures (unpacked decimal) and a floating binary respectively. In the data type, PKY and DSP denote a primary key and a display item respectively. An indefinite repeating group is denoted by (N).

DBMS の負担を軽減するため、検索項目は必要最小限にとどめている。

物性値情報ファイル (図 3 (a)) では、1 個のテーブル型または相関式型物性値情報が 1 レコードを形成している。各レコードはデータ項目として“テーブル値”と“相関式情報”の両方をもっているが、実際にはそのどちらか一方にしかデータは存在しない。これらのデータ項目名の右に記されている (N) の表示は“不定回繰返し項目 (0 回を含む)”を意味する。INQ ファイルがレコード内構造として不定繰返し項目をもつことは、階層型 DBMS と等価な表現法をもつことであり、平坦な表によるデータ構造の表現しか許さない通常の関係型 DBMS とは異なる一つの大きな特徴である²⁰⁾。2 変数系物理状態における物性値テーブルは温度と圧力に関する 2 次元テーブルの形をとるが、この不定繰返し項目を用いると自然な形でデータの冗長性を増すことなく、データ構造を表現できて都合である。1 変数系物理状態における物性値テーブルは温度のみに関する 1 次元テーブルであるが、ファイル記述を同一にするため“圧力値”の項目にはダミーデータとして -1.0 を入力することにより補っている。一方、相関式型の物性値情報は不定繰返し項目“相関式情報”以下に入力される。ここでは相関式番号とその係数のみが入力され、式型は相関式型ファイル (図 3 (d)) に入力される。相関式を用いた物性値計算は次節に述べる検索システム中のサブルーチンによって行われる。

データベースの検索を行うためには、これら 4 個の INQ ファイルをもとにして“INQ セクション”を作成することが必要である。INQ セクションはユーザビューを提供するための仮想的なファイルであり、INQ ファイル内の必要なデータ項目だけを抜き出して検索効率を高める機能と、2 個以上の INQ ファイル間を共通したデータ項目によって結合する機能をもつ²⁰⁾。本データベース検索システムでは 7 種類の INQ セクションを作成し、目的別に使い分けている。

なお、現在データベースに格納されているレコード数は物性値情報ファイルに約 2100 レコード、物質情報ファイルに 343 レコード、出典情報ファイルに 75 レコード、相関式型ファイルに 6 レコードである。これらのデータを格納するに要するファイル容量および時間はそのほとんどが物性値情報の格納のために費されるが、ファイル容量は約 6 MB、所要時間は処理時間で約 33 分、CPU 時間では約 9 分である。

表 2 検索ルーチン

Table 2 Retrieve routines.

分類	ルーチン名	機能	利用形態	入力情報	出力情報
登録情報検索ルーチン	REGI	登録物質の検索	TSS/ バッチ(A)	物質コード(P)/分子記号(P)/CA 登録番号(P)/物質名(P)	物質コード, 分子記号, CA 登録番号, 物質名 (シ ソーラスを含む)
	COMB	登録物性-物理状態組 合せテーブルの出力	TSS/ バッチ(A)	物質コード/ALL	物質コード, 分子記号, 物質名, 物性-物理状態 組合せテーブル
	INDI	各物性・物理状態につ いての登録情報の検索	TSS/ バッチ(A)	物性コード/ALL, 物理状態コード/ALL	物性コード, 物理状態コード, 物質コード, 分子 記号
	DATA	各物質について登録さ れている物性値情報の 検索	TSS/ バッチ(A)	物質コード/ALL, 物性コード/ALL	物質コード, 分子記号, 物質名, 物性コード, 物 理状態コード, 物性値登録範囲, データ型 (相関 式/テーブル), グレード, 出典コード, 発行年
補助検索ルーチン	BIBL	著書の検索	TSS/ バッチ	著者名(P)	著者名, 著書の出典コード, 雑誌名・巻・号・ペ ージ/出版年・所在地, 発行年
	LITE	出典情報の検索	TSS/ バッチ(A)	出典コード/ALL	出典コード, 著者, 標題, 雑誌名・巻・号・ペ ージ/出版年・所在地, 発行年 (出典に基づく物性 値情報の物質・物性・物理状態コードも出力可)
	ADDI	付加情報 (物質の基本 的性質) の検索	TSS/ バッチ(A)	物質コード/ALL	物質コード, 分子記号, 物質名, 分子量, 融点, 沸点, 臨界点情報
主検索ルーチン	PROPER	サブルーチン形式の物 性値検索	バッチ	物質コード, 物性コード, 物理状 態コード, 温度, [圧力]	物性値 (補間あり), 物理状態, 用いたデータおよ び補間計算に関する情報, エラーステータス
	PROP	物性値の検索	TSS	物質コード, 物性コード, 物理状 態コード, 温度, [圧力]	入力情報, 分子記号, 物質名, 物性値 (補間あり), 物理状態, 用いたデータおよび補間計算に関する 情報, エラーステータス
	TABL	物性値テーブルの出力	TSS/ バッチ	物質コード, 物性コード, 物理状 態コード, 温度範囲, 温度間隔, [圧力範囲, 圧力間隔]	物質コード, 分子記号, 物質名, 付加情報, 物性 コード, 物理状態コード, グレード, 物性値テー ブル (補間なし), [相関式情報], 出典情報
	SUBS	物質の検索	TSS/ バッチ	物質コード, 物理状態コード, 温 度, [圧力], 物性値範囲, [検索物 質個数]	入力情報, 物質コード, 分子記号, 物質名, 物性 値, 物理状態

(注) 利用形態の欄で(A)の表示は全レコードに関する情報の出力が可能であることを示す。
入力情報の欄で(P)の表示は部分入力による部分一致検索が可能であることを示す。

4. 検索システム

4.1 データベースシステムの利用形態

冒頭にも述べたように、熱物性データベース作成の最終の目標は研究者・技術者に広く熱物性に関する情報サービスを行うことである。このためには、単に熱物性に関する情報をデータベースに蓄積しておくだけでは不十分であり、その情報をいかに有効に便利よく取り出し、提供するかに十分な考慮を払わなければならない。この意味で“熱物性データベースシステム”は熱物性データベースと一体化した独自の検索シス

テムをもつべきであるという思想に基づいて、検索システムの設計を行った。

検索システムは次項に述べる検索ルーチンにより構成されるが、その利用形態は図4に示すようになる。通常の検索は TSS 端末からなされるが、とくに大量の情報を出力する場合はバッチ処理方式でラインプリンタによりページ制御を行って出力するのがデータの整理・保存の上で好都合であり、また、利用者の応用プログラム中からの検索も考えられるので、バッチまたはリモートバッチ方式での検索も可能にしている。

4.2 検索ルーチン

検索システムは表2に示すような TSS およびバッチ処理で利用するそれぞれ10個の検索ルーチンにより構成される。検索ルーチンはその機能により次の3種に分類できる。

4.2.1 登録情報検索ルーチン

データベースの検索を円滑に行うためには、目的とする情報の検索に先立って、その情報がデータベースに登録されているかどうか、登録されている場合にはどのような形で登録されているかを知ることが必要である。しかも、登録情報は固定的なものではなく、時間

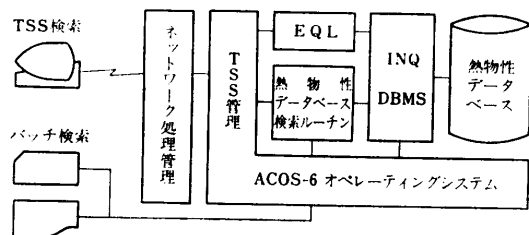


図4 データベースシステムの利用形態

Fig. 4 Configuration for utilization of the database system.

の経過とともに変わりうるものであるので、データベース検索の都度それに先立って検索されるのが望ましい。このような理由で登録物質や物性値情報などに関する4種類の登録情報検索ルーチンを用意して、データベース検索に対する便宜を図っている。

4.2.2 補助検索ルーチン

物性値情報を検索する上で補助的な役割を果たす検索ルーチンとして、利用者の便宜を考え、表2の3種類を用意している。

4.2.3 主検索ルーチン

熱物性値は、たとえばプラントの設計・制御など、利用者の工学的応用プログラムのなかで直接に必要なとされる場合が多いので、FORTRAN サブルーチン形式の物性値検索ルーチン PROPER を用意している。TSS 方式でこのサブルーチンを利用して物性値を検索することも可能である (PROP)。そのほかに、物性値テーブルの出力を行うルーチン TABL がある。このルーチンでは検索効率を重視して、テーブル型物性値情報の場合は補間計算を行わず、データベース中の情報をそのまま出力している。また、工学的応用面での利用形態として、ある用途のために“特定の性質をもつ物質”を見いだすことが必要になる場合が考えられる。この要求に応えるために、一定の外的条件のもとで要求する範囲内の物性値をもつ物質を検索するルーチン SUBS を備えている。

これらのルーチンを利用した TSS 端末からの検索の一例を図5に示す。図ではまず REGI ルーチンによりメタノールの物質コードを見だし、PROP ルーチンによって1気圧、385Kでの熱伝導率を求めた後、メタノールの代替物質を SUBS ルーチンによって検索している。図に示されるように、TSS 検索システムにおいては、入力情報として必要なコード類、検索モードの略号、単位換算に関する情報などが不明であれば、検索システムの呼出し時または RETRIEVE MODE? の問合せに E(XPL) と答えたときに必要な情報を取り出せるように工夫し、検索システム TPPER の呼出し手順さえ知っていればとくにマニュアル類はもたなくても検索できるように配慮している。

上述の定型的な検索以外の特殊な検索が必要な場合や検索した情報に特別な処理を行いたい場合には、INQ がもつエンドユーザ言語 EQL を利用することができる。そのために本システムでは4個の INQ ファイルそれぞれ単独の INQ セクションと4個のファイルすべてを結合した INQ セクションを用意している。

```

SYSTEM TPPER
LINE LENGTH (88/132) ?
NEED THE EXPLANATION ON THE FOLLOWING ITEMS ?
INPUT          INPUT
DIGIT          DIGIT
1 : PROPERTY CODE          5 : RETRIEVE MODE
2 : PHYSICAL STATE CODE    6 : USED UNITS IN "SI"
3 : SUBSTANCE CODE CLASSIFICATION  7 : UNIT CONVERSION FACTOR
4 : GRADE CODE             8 : AUTHOR'S NAME EXPRESSION
INPUT A DIGIT, IF YOU NEED.
RETRIEVE MODE ? R

-- THERMOPHYSICAL PROPERTIES --          10/2
***** REGISTERED SUBSTANCE RETRIEVAL *****
RETRIEVING KEY (CODE/FORMULA/NAME/REG.NO.) ? M
SUBSTANCE NAME (*:STRING* FORM PERMISSIBLE) ? METHANOL
CODE   CA REG.NO.   FORMULA   NAME
1101   67-56-1      CH3OH // CH4O   METHANOL // METHYLALCOHOL
// METHYL ALCOHOL // CARBIN
SUBSTANCE NAME (*:STRING* FORM PERMISSIBLE) ?
RETRIEVING KEY (CODE/FORMULA/NAME/REG.NO.) ?
RETRIEVE MODE ? P

-- THERMOPHYSICAL PROPERTIES --          10/2
***** PROPERTY DATA RETRIEVAL *****
SUBSTANCE CODE ? 1101
PROPERTY CODE ? K
PHYSICAL STATE CODE ? GA
TEMPERATURE (IN K) ? 385
** RETRIEVAL CONDITIONS **
SUBSTANCE CODE : 1101
FORMULA : CH3OH
NAME : METHANOL
PROPERTY CODE : K ( THERMAL CONDUCTIVITY )
PHYSICAL STATE CODE : GA ( GAS AT 1 ATM. )
TEMPERATURE : 385.00 ( K )
** RESULTS OF RETRIEVAL **
PROPERTY DATA ( THERMAL CONDUCTIVITY ) : 0.233000E-01 ( W/M.K )
PHYSICAL STATE OF THE SUBSTANCE : GAS
ERROR STATUS : 0 ( NO ERROR IN CALCULATION )
** USED DATA **
DATA TYPE : TABLE
PHYSICAL STATE CODE OF DATA : GA ( GAS AT 1 ATM. )
GRADE OF DATA : 3 ( 0.1 -- 0.5 % IN ERROR )
SOURCE CODE OF DATA : 00002
NO. OF DATA POINTS USED FOR INTERPOL. : 4 POINTS
TEMP. INTERVAL BETWEEN 2 DATA POINTS : 10.00 ( K )
SUBSTANCE CODE ?
RETRIEVE MODE ? S

-- THERMOPHYSICAL PROPERTIES --          10/2
***** SUBSTANCE RETRIEVAL *****
PROPERTY CODE ? K
PHYSICAL STATE CODE ? GA
TEMPERATURE (IN K) ? 385
PROPERTY DATA RANGE (IN SI) ? .0231, .0235
NUMBER OF RETRIEIVING SUBSTANCES ?
** RETRIEVAL CONDITIONS **
PROPERTY: K ( THERMAL CONDUCTIVITY )
PHYSICAL STATE: GA ( GAS AT 1 ATM. )
TEMPERATURE: 385.00 ( K )
PROPERTY DATA: 0.231000E-01 -- 0.235000E-01 ( W/M.K )
NO. OF RETR. SUBS.: ALL
** RETRIEVED SUBSTANCES **
SUBSTANCE          PROP. DATA          PHYS
CODE   FORMULA   NAME          K ( W/M.K )          STAT
0302   CO2        CARBON DIOXIDE  0.232294E-01         GA
1101   CH3OH       METHANOL        0.233000E-01         GA
1810   C5H12       N-PENTANE       0.234500E-01         GA
1783   C2H5/2O     DIETHYL ETHER  0.235225E-01         GA
1102   C2H5OH      ETHANOL         0.231500E-01         GA
PROPERTY CODE ?
RETRIEVE MODE ?
SYSTEM ?BYE

```

図5 データベースの検索例

Fig. 5 An example of retrieving the database.

また、エンドユーザが新たな INQ セクションを定義したうえで検索を行うことも可能である。

図6はサブルーチン PROPER の利用例であり、水の粘性率 R に関する情報を高圧気体および高圧液体において温度 T と圧力 P を適当な間隔で変えて検索し、3次元透視図としてグラフィックディスプレイに表示したものである。図では合計201点の物性値を計算しているが、処理に要したCPU時間は62秒であった。

4.3 物性値の計算方法

検索システムにおける数値処理のうち主要なものは物性値の計算に関するものである。物性値が相関式で

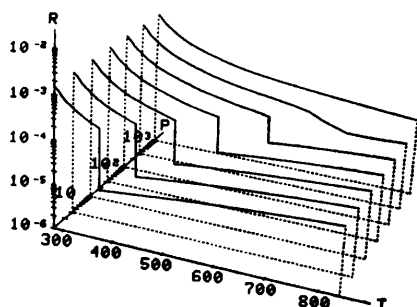


図 6 水の粘性率の変化曲線

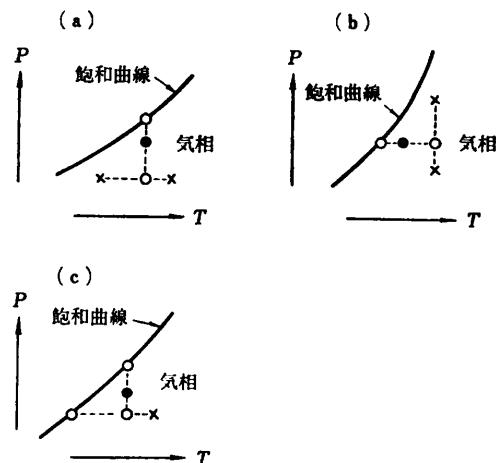
Fig. 6 Curves on the viscosity of water.

与えられる場合、その処理は比較的容易であり、相関式処理ルーチンにおいて一括して行っている。このルーチンでは使用する相関式をその番号によって選択し、相関式の適用範囲、係数、また、相関式が多項式を含む場合はそのベキに関する情報をデータベースから取り出して処理を行う。ただし、2変数系状態においては温度および圧力に関する矩形形の適用範囲内に気・液両相が含まれる場合があるが、相関式は気相または液相のどちらか一方にしか適用できないので注意を要する。この場合、処理ルーチンでは飽和蒸気圧のデータにより物理状態のチェックが行われるが、チェックが必要かどうかの判断は“相関式適用条件”(図3(a)参照)の項目により行われる。

テーブル型物性値情報の場合、物性値を計算するためには一般に補間計算を行う必要がある。1次元テーブルにおける補間計算はラグランジュの補間公式を用いて原則として4点補間を行うことにしている。2次元テーブルの場合は最も簡単な4点補間と1次元4点補間の2次元拡張形である16点補間が考えられるが、次の理由により4点補間を採用することにした。

(1) 代表的な2次元物性値テーブルを数例選んで、4点補間と16点補間の両方の場合の補間誤差を試算してみた結果、一般には4点補間の場合でもその誤差は0.1%以下になり、選定値自体に示されている誤差の範囲内に収まる。気相と液相の境界付近、とくに臨界点近傍では物性値の変化率が高くなり、4点補間では最大5~6%の誤差が認められたが、このような場合は物性値を計算すべき点を中心としてそのまわりに16点のデータを見いだすことのできない場合があるので、16点補間を適用できない。

(2) 誤差の試算に用いた16点補間の公式は16点が格子状に並んでいる場合を選んで、ラグランジュの補間公式の2次元拡張形を用いたが、補間式は非常に



●: 物性値計算を指定された点, ×: 物性値データの存在する点, ○: 計算途中で補間計算を行う点

図 7 高压気体と飽和気体のデータ間の補間計算法

Fig. 7 Interpolation method between the property data in the gas under high pressure and in the gas at saturation.

複雑な形になる。16点が格子状に並んでいない場合はさらに複雑な補間式が必要になる。また、補間計算に必要なデータ数も4点補間に比べて多いので、データの取出しに要する時間も増大する。これらを考え合わせると、16点補間を採用した場合は処理をいたずらに複雑化し、処理能率を大幅に低下させる恐れがある。なお、2次元テーブルにおける4点補間の方法は直線補間を縦横2方向に2度繰り返す方法を用いているが、この方法は4点が格子状に並んでいる場合にはラグランジュの2次元4点補間の方法と等価である。

各物理状態ごとに登録されている物性値テーブルの登録範囲外への補外計算は通常は行わないことにしているが、気相と液相の境界付近では次のような特別な方法によって物性値を計算している。図6に示されるように物性値は気相と液相の境界で不連続的に変化するので、気相と液相の物性値データを混合して補間計算することは無意味であり、たとえば、高压気体(2変数系気相)のデータに関しては飽和気体のデータとの間で補間計算を行わなければならない。その方法は高压気体、飽和気体、飽和蒸気圧の3種のデータを併用して図7に示すような手順を用いている。補間計算に利用できる高压気体でのデータ点の数とその配置により(a), (b), (c)の三つの手順に分かれる(高压気体におけるデータ点が3点存在する場合はその中の2点を使用して(a)の手順で計算を行う)。液相に関する補間計算も同様な方法で行っている。

5. おわりに

熱物性値に関するデータベースシステムの開発に着手してから3年が経過し、ようやく初期の目標である“誰でもが簡単に利用できるデータベースシステム”の構築はほぼ達成されたと考えている。昭和56年4月より学内の利用者を対象として本システムの試験的公開を開始したが、今後は広く全国的に公開することを目標としている。本システムは今後とも本学計算センターにおいて運用していく方針であり、そのためにはシステム完成後もこれを固定化することなく、利用者の意見・要望に応じて改良を加えていく努力を怠ってはならないと考える。とくに、熱物性値データに関しては過去2年間にわたって徐々にデータベースに蓄積しているが、蓄積量はまだ2000件程度であり、登録物質、物性、物理状態の種類から見て不十分で、今後も追加していく必要がある。熱物性に関する選定値は現在世界各地において徐々に作出されつつある段階であり、一度に大量のデータを追加することは望めない。また、すでに登録済みのデータであっても、より信頼性の高い選定値が新しく発表された場合はこれを古いデータと取り替える必要がある。ともあれ、本システムは始動したばかりであるので、その運用に関わる研究課題は今後に待つところが多い。なお、現在のシステムでは純物質のみの物性値に限定しているが、今後の開発計画としては物質の混合系に関する物性値情報の取扱いを検討している。

謝辞 本システムの構築にあたっては、前神戸大学長須田勇先生ならびに筑波大学中山和彦教授にご援助とご教示をいただいた。また、神戸大学計算センター田中素由技官にはプログラム作成などに関してご助力いただいた。厚く御礼申し上げます。

参 考 文 献

- 1) 蒔田 董: 粘度と熱伝導率—データの検索と計算法, p. 252, 培風館, 東京 (1975).
- 2) Touloukian, Y. S. (ed.): *Thermophysical Properties of Matter*, Vol. 1-Vol. 13, IFI/Plenum Data Corp., New York (1971-1977).
- 3) Touloukian, Y. S. and Ho, C. Y. (ed.): *McGraw-Hill/CINDAS Data Series on Material Properties* Vol. 1-, McGraw-Hill, New York (1981-).
- 4) Zwolinski, B. J. (ed.): *Selected Values of Properties of Hydrocarbons and Related Compounds* Vol. 1-Vol. 8, Thermodynamic Research Center, Texas (1968-1977).
- 5) Angus, S., Armstrong, B. and de Reuck, K.

M.: *International Thermodynamic Tables of the Fluid State 5—Methane*, Pergamon Press., Oxford (1978).

- 6) Angus, S., de Reuck, K. M., Armstrong, B., Jacobsen, R. T. and Stewart, R. B.: *International Thermodynamic Tables of the Fluid State 6—Nitrogen*, Pergamon Press., Oxford (1979).
- 7) Angus, S., Armstrong, B. and de Reuck, K. M.: *International Thermodynamic Tables of the Fluid State 7—Propylene (Propene)*, Pergamon Press., Oxford (1980).
- 8) 田中嘉之: Purdue 大学熱物性研究所の活動, 材料, Vol. 23, No. 249, pp. 470-478 (1974).
- 9) 磯本征雄, 安岡則武, 田中信夫, 松浦良樹, 角戸正夫: 学術研究用たんぱく質データベース PROTEIN-DB, 情報処理学会論文誌, Vol. 21, No. 1, pp. 15-22 (1980).
- 10) 弘原海清, 升本真二, 福間敏夫: GEODAS: 地球学データベース・システム, 情報処理, Vol. 21, No. 12, pp. 1250-1258 (1980).
- 11) 富樫雅文: 原子核物理における学術情報システム, 北海道大学大型計算機センターニュース, Vol. 11, No. 2, pp. 41-57 (1979).
- 12) 島峰徹郎: 日本病理剖検報掲載症例の検索システムの実現に関する研究, 昭和55年度科学研究費補助金(試験研究)研究成果報告書(1981).
- 13) 蒔田 董: 流体の熱物性値に関するデータベースの作成, 昭和54・55年度文部省科学研究費補助金試験研究(1)研究成果報告書, p. 84 (1981).
- 14) 蒔田 董, 田中嘉之, 高森 年, 鷹岡康夫: 流体の熱物性値に関するデータベースの試作, 化学工学協会第14回秋季大会研究発表講演要旨集(第1分冊), pp. 335-336 (1980).
- 15) Glaeser, P. S. (ed.): *Data for Science and Technology* (Proc. 7th International CODATA Conf., Kyoto, Jpn., 8-11 Oct. 1980), pp. 403-406, Pergamon Press, Oxford (1981).
- 16) Keenan, J. H., Keyes, F. G., Hill, P. G. and Moore, J. G.: *Thermodynamic Properties of Water Including Vapor, Liquid, and Solid Phases*, p. 156, A Wiley-Interscience Publication, New York (1978).
- 17) 橋本昌幸, 後藤龍男, 竹内 憲: データベース・マネジメント・システム INQ について, 情報管理, Vol. 20, No. 2, pp. 127-135 (1977).
- 18) 日本電気株式会社: ACOS-6 データ管理 INQ 概説書, p. 71 (1979).
- 19) 穂鷹良介: 商用リレーショナル DBMS—その利点, 欠点, 将来性そして選定のポイント, *COMPUTOPIA*, Vol. 13, No. 158, pp. 48-55 (1979).
- 20) 後藤龍男, 土居嗣典: INQ (Information Query) について, 情報処理学会データベース管理システム研究会資料, 3-3 (1977).

(昭和56年10月29日受付)
(昭和57年1月20日採録)