統合システムを有する分散型熱物性データベースの展開

Development of Network Database System for Thermophysical Properties Data Equipped with Integrated System

山下 雄一郎*, 馬場 哲也

Yuichiro YAMASHITA, Tetsuya BABA

*産業技術総合研究所

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

〒305-8563 茨城県つくば市梅園 1-1-1 つくば中央第3

E-mail: yuichiro-yamashita@aist.go.jp

産業技術総合研究所ではコンテンツとシステムの所有権を分離して管理する分散型熱物性データベースが開発され、一般に公開中である。日本熱物性学会においても、同システムを利用した熱物性データベースが公開中である。これらのデータベースは、専用の閲覧ソフトウェア InetDBGV と Web ブラウザからの閲覧システム(TPDS-web/full)から利用可能である。分散型熱物性データベースプログラム 3.0.6 版からは複数のデータベースを横断的に閲覧・検索する機能が実装され、データベースを統合して操作するシステム“統合システム”として、InetDBGV を利用可能となった。本報では分散型熱物性データベースの統合システムの全容について報告する。

National institute of advanced science and technology (AIST) has developed network database system for thermophysical properties data (TPDB) and opened it on internet. In addition, Japan society for thermophysical properties launched thermophysical properties database whose system is same as AIST one. These database systems are available through installation database software “InetDBGV” and TPDS-web/full program running on web browser. From TPDB version 3.0.6, multiple concurrent connection and cross searching function were equipped with InetDBGV. Because of these functions, InetDBGV comes to play a role of integrated system.

キーワード: 分散型熱物性データベース, 標準データ, 統合システム, network database system for thermophysical properties data, standard reference data, integrated system

1. 緒言

産業技術総合研究所(以降、産総研) 計測標準研究部門(NMIJ)では、前身の計量研究所の時代から、知的基盤の構築を目的として高精度・高信頼性のデータを体

系的に収録した権利分散型の熱物性データベースを開発してきた^{[1]-[4]}。権利分散型の意味はシステムの所有権とデータの所有権を分離して管理することにある。現在、産総研分散型熱物性データベースはポータルサイト^[5]より利用可能である。

図1 分散型熱物性データベースの連携概念

また分散型熱物性データベースのデータベースプログラムは産総研のみならず、外部機関においても利用可能である。同プログラムを利用して、日本熱物性学会(JSTP)が2009年3月より熱物性データベースを公開・運営している^[6]。

分散型熱物性データベースは各研究機関と連携し、強固なデータインフラを構築することを念頭に展開されてきた。図1に分散型熱物性データベースの連携図を示す。Key station、運営委員会、データ生産者、データ利用者から構成される。ここでKey Stationは概念であり、実際には同じプログラムで動作するデータベースサーバー群を想定している。Key Station中のサーバー群はそれぞれが得意とする分野の熱物性データの収集・管理を行う。例えば産総研では、国家標準である熱物性計測装置で生産される標準データや、評価済みの文献データを蓄積し、

データ評価のためのデータを提供することを目的としている。一方JSTP熱物性データベースは、学会で承認されたコンテンツ(例えば、新編熱物性ハンドブック)を収録し、学会員専用サービスとして広く熱物性データを提供する。分散型熱物性データベースの運営委員会には、JSTP熱物性値サービス委員会が位置付けられる。そこではデータの収集・生産計画、熱物性標準フォーマット、データ評価手法の確立といった項目に関して取り決めがなされる。データ生産者は運営委員会の決定に従って、実測データを蓄積し、データ評価ガイドラインに従ってデータを評価し、Key station中のサーバーにデータを登録する。こうした明確な役割分担の下に、サーバー毎に特色のあるコンテンツを拡充する計画である。

分散型熱物性データベース閲覧はインストール版閲覧ソフトウェア InetDBGV

Property Statistics

Property	Number of data	List of Materials
Surface tension	3719	View
Vapor pressure	2119	View
Thermal conductivity	636	View
Specific heat capacity at constant pressure	516	View
Density	488	View
Thermal diffusivity	298	View
Sound velocity	264	View
Spectral emissivity	232	View
Specific heat capacity at constant pressure per mol	193	View
Specific volume	156	View
Viscosity	144	View
Enthalpy per kg	143	View
Entropy per kg	132	View
Enthalpy per mol	116	View
•		
•		
•		
•		
Transmissivity	3	View
Yield stress	3	View
Saturated liquid density	2	View
Bubble pressure x	1	View
Extinction coefficient	1	View
Totals:	9815

図2 物性データ統計

ないし、Web 版閲覧ソフトウェア TPDS-web/full^[7]より行う。InetDBGV は分散型熱物性データベースのポータルサイトからユーザー登録を行うことで利用可能となる。InetDBGV では大量のデータを一度に処理する機能が搭載されており、ある物質グループに対する物性データの変化を視覚的に捉えるといった使用ができる。一方、TPDS-web/full の利用にはユーザー登録は不要であり、さらに直観的で使いやすいユーザーインターフェースとなっている。こちらは特定の物質・物性をピンポイントに求めるユーザーに適している。

産総研分散型熱物性データベースプログラムバージョン 3.0.6 では、新たに 1. 複数接続機能、2. 文献検索機能、3. 画像収録・表示機能が追加された。特に複数

接続機能によって、複数データベースに同時にアクセスし、複数のサーバーに存在するデータを一つのクライアントソフトで処理することが可能となった。これより、データベースを統合して操作するシステム(以降、統合システム)として InetDBGV を位置付け、本報では統合システムとしての InetDBGV とその新機能、活用法について報告する。

2.分散型熱物性データベース

分散型熱物性データベースはインターネットを利用したサーバー・クライアント型のデータベースである。2009 年 4 月 10 日現在、産総研分散型熱物性データベースではデータベース登録ユーザーに 9815 件の物性データを公開している。物

図3 統合システム InetDBGV スクリーンショット

性データ毎の内訳を図2に示す。JSTが所管していたKelvinデータベースが産総研に移管された経緯もあり、表面張力、蒸気圧のデータが多く、次いで熱伝導率、比熱容量となっている。産総研ではデータの収録に継続的に取り組んでおり、今後さらに充実する見込みである。

分散型熱物性データベースでは、物質データ、物性データは分離して管理し、リンクテーブルを用いてそれらを結びつけている。物質データは細かく分類され、データベースに体系的に整備されて収録される。分類の基準として、大分類では学協会や産業分野、中分類では材料の特性や構造、小分類では計測時の試料情報となっている。大分類から小分類にしたがって、物質が同定されていく仕組みである。詳しくは参考文献[3]を参照されたい。一方、物性データには、物性名(Property)、物性の方向(Direction)、表データ(Table)と式データ(Equation)の有無、データ取得情報(Type)、トレーサビリティの状態(Traceability)、認証状態(Authorization)、データ登録者(Registrant)、データ取得プロジェクト(Project)、データ

更新日(Update date)が基本情報として備わる。これらの他に、文献情報、不確かさ情報、実測データ解析手法、装置情報、計測規格が追加情報として記述可能である。

3.統合システム InetDBGV と新機能

インストール版閲覧ソフトウェア InetDBGV の基本画面を図3に示す。基本画面は画面左の物質ツリーと画面右の物性データリストから構成される。InetDBGV では階層構造を利用することで分類された物質データを表現する。一方、物性データリストには物性データ基本情報のみが表示され、物性データ追加情報は右クリックメニューから閲覧することができる。右クリックメニューからは物性データのグラフ化なども行える。

3.1 複数接続機能

緒言で述べたように、分散型熱物性データベースは同じプログラムで動作するサーバー群でKey stationを構成する。この時、サーバー間のインターネットを介した通信は発生しない。分散型熱物性デ

図4 複数接続機能と同一グラフ上への描画

データベースでは、これらのサーバーに収録されたコンテンツを有機的に結び付けるために、クライアントソフトウェアである InetDBGV から複数サーバーに対して同時かつ横断的にアクセスすることで対応している。各サーバーへのアクセスとデータ閲覧許可のコントロールは、InetDBGV が備えるユーザー名とパスワードによるログイン機能を利用する。この為、ユーザーは初期設定で Key station 中のサーバー群に自由にログインできるのではなく、事前にサーバー管理者にログインアカウントの申請を行い、アカウントとサーバー接続先 URL を取得する必要がある。複数接続機能を開発したことで、図4のように産総研と JSTP の2つのサーバーからデータを取得し、1つのグラフ上に描画することが可能となった。

3.2 検索機能

3.2.1 文献検索

分散型熱物性データベースは物性データを収録したファクトデータベースである一方で、物性データには文献情報を付帯させており、文献データベースとしての側面も持つ。バージョン 3.0.6 からは、文献タイトル(論文名、雑誌名、書籍名)、巻、出版年、開始ページ、終了ページ、著者での検索が可能となった。ここで、文献タイトルに関しては、部分一致検索である。また、文献検索機能は、物性検索(物性名、物性値範囲、変数値範囲)、物質名検索、付帯情報検索(CAS No.、化学式、材料形状、RM/CRM コード、結晶構造、材料応用分野)などと組み合わせて AND 検索を行うことができる。

3.2.2 横断検索

複数サーバーに接続した場合、任意のサーバーに対して横断的に検索をかけることができる。図5に横断検索を行った

図5 横断検索結果

結果のスクリーンショットを示す。図4中①の部分で検索対象サーバーを選択することができる。現状で5つのサーバーまで同時に検索可能である。検索項目は②に表示され、図の例では、文献タイトルに「Properties」が含まれ、かつ物質名がCopperで終わるものを対象としている。検索結果は図4中の③部分に表示され、検索対象サーバーごとに検索結果が分かるようになっている。検索結果の表示部分はツリー表示、リスト表示の両方から選択可能である。

4.統合システムの活用

3.1節で述べた複数接続機能の具体的な活用方法としては、標準データを利用したデータ評価が挙げられる。従来であれば、標準データをテキスト論文の表をタイプし直したり、グラフから値を読み取ったりしていたが、そうした作業は手間がかかる上に、人的ミスが混入する可能性を含む。分散型熱物性データベースでは、標準データを集中的に収録したデータ評価用サーバーを準備すれば、ユーザーは同サーバーからデジタル情報で

Search Condition for Property						
Property	Condition	Minimum value of Property	Maximum value of Property	Variable	Minimum value of Variable	Data category a variable range
Specific heat capacity at constant pressure	and	500	2000	Temperature	300	500
Thermal conductivity	and	50	1000	Pressure		
				Temperature	300	500
				Pressure		
				Magnetic flux density		
				Thickness		
				Matrix volume ratio		

Search Condition for Material Folder	
Item	Value
Phase	Solid

Material

AIST

Solids and Melts

Metals

Mg Magnesium

Magnesium_Poly crystal

Transition Metal Elements

Fe Iron

Iron

図 6 物性値範囲指定検索

標準データを受け取ることができる。ユーザーはデータ評価用サーバーと収録先サーバーの両方にアクセスすることで、InetDBGV 上でデータ比較を行することができる。その際、グラフの重ね描き機能を利用すれば、視覚的にデータ評価を行える。もう一つの活用例として、新規材料の特性評価が挙げられる。新規材料の有効性は特性データを過去のデータと比較して、初めて評価される。InetDBGV では複数のサーバーから網羅的にデータを取得し、大量のデータを一度にグラフ化する機能に優れており、新規材料がどういった特徴を有し、どういった材料と競合するかなど、客観的に材料特性が理解できる。こうした大量データに裏付けられた情報は、新規材料の開発方針へとフィードバックでき、材料製作から特性評価を経て、次の材料試作方針を決定するサイクルの迅速化に貢献できる。

3.2 節の検索機能については、ファクトデータと文献データの両方を備えることで、それぞれの特徴を融合した検索サービスが提供可能である。例えば、特定の物性・温度領域・材料について計測実績があるかどうか、計測実績があれば、そ

の文献情報まで知りたい場合がそうである。今日の Google 等の検索エンジンはキーワード検索が主体であり、物性範囲・材料を指定した検索には対応していない。そうした場合、検索結果に表示されたリンク先を丁寧に調査するほかない。一方 InetDBGV では、物性検索と物質検索を同時に利用することで物性データの絞り込みが可能であり、その物性データから引用文献を逆引きすることができる。例として、図 6 に物性範囲指定検索の結果を示す。図 6 は、熱伝導率が 50~2000W/mK の範囲かつ定圧比熱容量が 1000~2000J/kgK の範囲にあり、温度が 300~500K の範囲で範囲指定を行い、さらに固体状態に限って検索を行った結果である。検索結果として、多結晶マグネシウムと鉄がヒットしている。検索結果のツリーに表示される物質名部分をダブルクリックすることで、物性データウィンドウに遷移し、該当物性データの文献情報を閲覧することができる。さらに分散型熱物性データベースでは、図 7 のように物性データにオンラインジャーナルの URL も付帯しており、ユーザーが該当のオンラインジャーナルへのアクセス権を

図 7 物性データに付帯する文献情報

持っていれば、ワンクリックで該当文献の PDF までたどり着くことが可能である。

5. 結言

本報告では、分散型熱物性データベースにおいて統合システムとして InetDBGV を位置づけ、その新機能と活用法について述べた。今後、各機関と提携しコンテンツに独自色を持ったサーバーを増やすことで、情報利用の利便性が高まり、最終的にユーザーによりよいサービスを提供できると考えられる。また、この統合システムは完成されたものでなく、今後ユーザーのニーズを受けて数々のアップデートを行っていく計画である。

参考文献

[1] A.Ono, T.Baba, K.Fujii: “Traceable measurements and data of thermophysical properties for solid materials: a review”, Meas. Sci. Tech.

12, pp.2023-2030, 2001.

- [2] 馬場哲也:「科学技術を支える知的基盤:熱物性データベース」, 第 25 回日本熱物性シンポジウム予稿集, 長野市, pp.89-91, 2004 年.
- [3] 馬場哲也:「分散型熱物性データベースの開発」, 熱物性, 18, pp.136-142, 2004.
- [4] 馬場哲也:「物性データベースの本格研究 熱物性データの生産から供給へのハブ構築」, AIST Today, 7, pp.18-19, 2007.
- [5] 分散型熱物性データベース: <http://riodb.ibase.aist.go.jp/TPDB/DBGVsupport/>.
- [6] 日本熱物性学会熱物性データベース: <http://jstp.mech.nagasaki-u.ac.jp/TPDS-web/>.
- [7] TPDS-web/full: <http://riodb.ibase.aist.go.jp/TPDB/AJAX/>.