

# 熱物性データベースの整備と利用促進



## 山下 雄一郎

やました ゆういちろう  
yuichiro-yamashita@aist.  
go.jp

計測標準研究部門  
材料物性科  
熱物性標準研究室  
主任研究員  
(つくばセンター)

2007年に産総研入所。以来、分散型熱物性データベースの整備に取り組んでいます。マークアップ言語(XML、RDFなど)を利用して、熱物性データの意味記述も可能なデータフォーマットに関する研究も進めています。また日本熱物性学会の熱物性値サービス委員会メンバーとして、同学会の熱物性データベースと講演論文集リポジトリの開発・運営にも参画しています。

## 関連情報:

### ● 参考情報

分散型熱物性データベースポータル, <http://tpds.db.aist.go.jp/>

分散型熱物性データベース閲覧システム, <http://tpds.db.aist.go.jp/TPDS-web/>

### ● 共同研究者

馬場 哲也 (産総研)、芦野 俊宏 (東洋大学)

### ● 参考文献

Y. Yamashita *et al.*: *Jpn. J. Appl. Phys.*, 50-11S, 11RH03 (2011).

T. Baba *et al.*: *J. Chem. Eng. Data*, 54, 2745 (2009).

T. Ashino *et al.*: *Data Sci. J.*, 11, ASMD17 (2012).

分散型熱物性データベースは、熱設計・熱マネジメントを支える信頼性の高い熱物性データ11,300件をインターネットを介して無償で提供しています。熱物性データの中でも数式で表現されるデータはマークアップ言語を利用して機械可読な形式で記述し、ユーザー環境の数式処理ソフトなどで利用しやすい形式で提供する機能を開発しました。

## 熱物性データベースの整備

分散型熱物性データベースは1997年の開発開始以来、17年間継続して整備が進められ、約3,600物質・材料にわたり、合計11,300件の熱物性データを提供しています。特に産総研第3期中期計画期間(平成22年度~26年度)においては、計測標準研究部門 材料物性科 熱物性標準研究室にて測定された信頼性の高い固体材料熱物性データセット114件を重点的に整備しました。これらは全て産総研で開発されたWeb閲覧システム(名称: TPDS-web、利用画面は図1)において、誰でも無料で閲覧できます。TPDS-webは物性データ(式・表)および物質・材料情報の表示、物性データのグラフ化、物質・材料情報の検索などの熱物性データの閲覧に必要な機能をひと通り備えており、熱物性データは実測データとの比較や熱設計シミュレーションの入力値としてご利用いただけます。

## データ利用促進に向けた取り組み

分散型熱物性データベースでは、これまで数式で表現されるデータを特定のアプリケーション言語(Fortranなど)に依存した形式で記述していましたが、ユーザーの利便性を考えた場合、そうしたデータ提供方法は必ずしも好ましくありませんでした。そこでOpenMathとMathMLという数式記述用に規格化されたマークアップ言語を利用し、数式処理ソフトや文書作成ソフトでも利用しやすい機械可読な形式でデータを提供するシステムを開発しました(図2)。技術的な内容は割愛しますが、数式データはOpenMath式辞書(式の構造データ)と式の係数データに分解してデータベースに収録し、表示の際にMathML形式のデータとして再構築してTPDS-webで表示しています。

今後、熱設計・熱マネジメントを支える基盤として、より多くの材料における信頼性の高い熱物性データ整備と各種アプリケーション向けのデータ連携機能の提供に努める予定です。

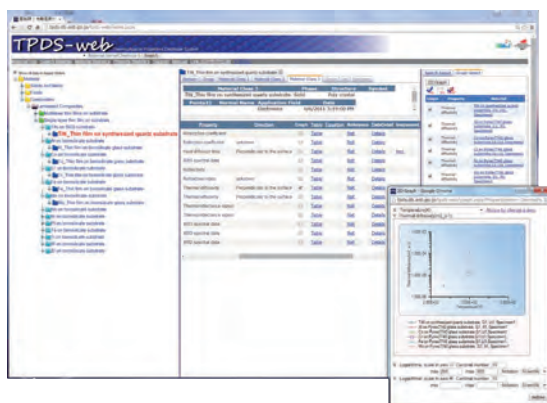


図1 TPDS-web メイン利用画面

薄膜熱物性データの例。右下のグラフはTiN、Al、Mo、Co、Cr、Feの熱拡散率を重ねてプロットしたもの。

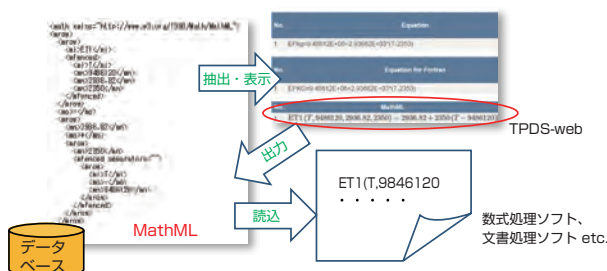


図2 数式データの提供フロー

データベースから抽出されたMathML形式のデータはTPDS-web上で数式として表示。TPDS-webではMathML形式で出力でき、各種ソフトで読み込んで数式として表示できる。