

科学技術におけるデータベースの役割(17)

Role of Databases for Science and Technology (17)

馬場 哲也*

Tetsuya Baba

1. はじめに

本連載「科学技術におけるデータベースの役割」は2013年の第1回から13年にわたって継続してきた。今回の第17回では、これまで重ねてきた議論を踏まえ、熱物性研究・熱工学におけるデータベースの役割について改めて整理し、具体的な提案を述べる。

本稿の核心をなす提案は、「インパルス応答関数ベクトル」を固体の熱・エネルギー輸送現象を記述する共有データとしてデータベース化することである。その意義を、データの普遍性・構造・演算可能性という観点から段階的に論じたい。

2. 科学・技術分野の情報共有とデータベース

データベースは、それが属する科学・技術分野における研究・開発・取引に必要な情報の交換形態を規定し、それに対応したデータを蓄積・共有・交換するためのインフラストラクチャーの役割を果たしている[1]。従って、データベースの形態や実装方法は、その科学・技術分野の論理構造、研究水準、研究形態、習慣などによって定まってくる。

一例として、流体物性は熱力学関数や状態方程式として表されることが一般的であり、体系化・構造化されたデータが共有されている。これに対し、固体の輸送性質はスカラー量あるいはxyz方向の3次元ベクトル間の変換を記述する2階のテンソル(3行3列の行列で表される)として、個別の測定値に対応する数値の集合として収録されることが多く、流体物性より各論的な段階にある。特に固体中のナノスケールの熱物性については各論的傾向が顕著である。固体の熱力学

物性(平衡性質)はその中間的位置づけにある(本連載第13回[2])。

すなわち、データを熱力学関数や状態方程式のような表式により構造化することができれば、より普遍性の高いデータベースへと進化させ、研究開発・技術開発手法の発展を促進できる可能性がある。

3. ベクトル・行列演算によるデータの活用

近年、情報処理技術の飛躍的な進歩により「データ科学」の自然科学への活用が注目されている。最も基本的な例としては、スカラー同士の演算と同等の容易さで、ベクトルや行列の演算が実行できることが挙げられる。FFT(高速フーリエ変換)、逆行列の計算、行列式の算出などがその典型例であり、RやPythonを用いれば即座に実行できる。

このような状況においては、データを個別のスカラー値として保持するだけでなく、ベクトルやテンソル(数値化すると行列となる)の形で保持することが極めて重要である。固体の輸送物性の場合には、インパルス応答関数が普遍情報としてのベクトル情報であることを、これまでの議論において述べた(本連載第16回[3])。

インパルス応答関数は、フラッシュ法および周期パルス加熱サーモリフレクタンス法によって観測される信号と直接対応している(本連載第15回・第16回[4, 3])。また、非平衡統計力学の熱量密度/熱量密度2位置2時間相関関数、あるいはエネルギー密度/エネルギー密度2位置2時間相関関数とも直接対応している(第13回～第15回[2, 5, 4])。

4. インパルス応答関数とGreen関数

4.1 インパルス応答関数とGreen関数の関係

インパルス応答関数はGreen関数の境界における値であり、試料が均質または対称性の良い場合には境界の数か所の測定によって、その領域内のGreen関数

* 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 計量標準総合センター 名誉リサーチャー, 〒305-8563 茨城県つくば市梅園 1-1-1 中央第3, Emeritus researcher, Metrology Institute of Japan, AIST Tsukuba Central 3, 1-1-1, Umezono, Tsukuba, Ibaraki 305-8563, JAPAN, E-mail: t2baba@ck9.so-net.ne.jp

を求めるか推定することができる（第 15 回 [4]）。

インパルス応答関数や Green 関数は因果律を満たすので、それらのフーリエ変換（複素アドミッタンスあるいは伝達関数、そのベクトルはフーリエ級数展開の係数が各成分となる）はクラマース・クロニッヒの関係式を満たす。すなわち、複素アドミッタンスベクトルおよび応答関数ベクトルの各成分は独立ではなく、物理的数学的な制約を満たす構造を有している。

4.2 四端子行列とユニタリ群

境界での Green 関数の値（インパルス応答関数）が既知であるコンポーネントを複数組み合わせた「複合体」全体の「境界での Green 関数の値（インパルス応答関数）」は、一般に応答関数を積分核とした積分方程式、あるいは境界要素法（境界積分方程式法）により求めることができる [6]。

その最も単純な例が、多層材料の膜厚方向の一次元熱拡散である。この場合、境界は各層の両面であり、複合体の場合は多層試料の両面となる。多層の応答は各層の四端子行列のカスケード接続（縦続接続）により算出できる。

なお、四端子行列は行列式の値が 1 のユニタリ行列（一般のユニタリ行列は行列式の絶対値が 1）であり、群を構成しており、インパルス応答関数ベクトルが数学的構造を有していることと対応している。

5. ノンパラメトリック情報の普遍性

以上のように、実験で直接求まる「境界での Green

関数の値（インパルス応答関数）」ベクトルにより、対象の性質が単純な場合にのみ定義可能な熱物性値に依存する（このような表記法は「パラメトリック表示」と呼ばれる）ことなく情報の記述が可能である。

なお、ナノスケールでのエネルギー移動においては、寸法に依存しない普遍的な熱物性値は存在しないことが普通であり、インパルス応答関数ベクトルによる記述の普遍性が本質的な役割をはたす。

このようなデータ間の演算に基づく理論的枠組みは、拡散方程式の特定のモデル（熱物性値を式中のパラメータとする）に基づく解析式を必要とせず、一般の場合にも適用できる。これは「ノンパラメトリック」なアプローチと呼ばれる [7]。

一方、対象の系が有限の数の熱物性値パラメータにより解析的に表される単純な系であれば、図 1 の上段に示されるように「境界での Green 関数の値（インパルス応答関数）」は熱物性値の組をパラメーターとする解析式で正確に再現できる。この場合、普遍的な値として熱物性値が定義でき、正確に求めることができ、パラメトリックな取り扱いが可能となる。

一方、図 1 の下段に示されるように、観測された応答関数に対する「熱物性値の組をパラメーターとする解析式」による回帰が良くない状態で無理に熱物性値を算出すると、熱物性値の組から元の応答関数を再現できない。これは情報が失われたことを意味し、無理に算出した熱物性値は正確ではない [8]。

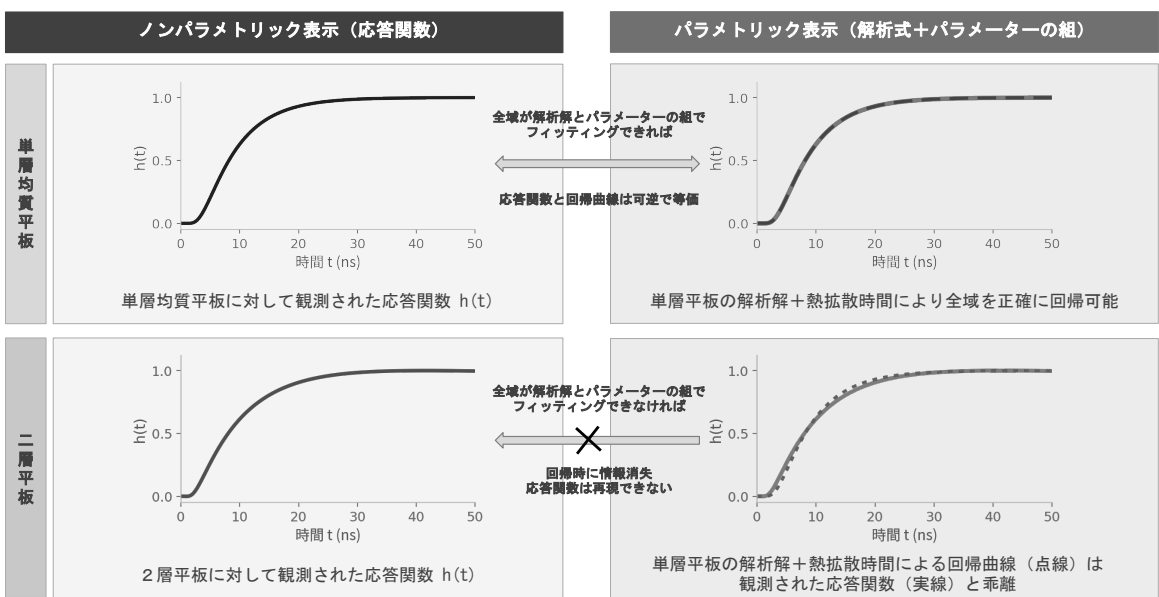


図 1 応答関数（ノンパラメトリック表示）と解析式+パラメーターによる回帰曲線（パラメトリック表示）との関係。全域わたって偏差の無い回帰ができた場合には、回帰により求めた解析式とパラメーターの組は正確ではない。（情報が失われている。）

6. 観測量間の関係とハイゼンベルグ行列力学

以上の関係は図2のように示すことができる。

左から右に (a) 非平衡統計力学の熱量密度/熱量密度 2 位置 2 時間相関関数, あるいはエネルギー密度/エネルギー密度 2 位置 2 時間相関関数; (b) フラッシュ法および周期パルス加熱サーモオプティクス法により観測される信号; (c) 境界での Green 関数の値 (インパルス応答関数) に対応している。

上段のパラメトリックアプローチでは, この応答関数を (d) 熱物性値をパラメーターとした熱拡散方程式の解析解, により回帰して求め; (e)このようにして求めた熱物性値を有限要素法のパラメーターとして入力して, 複合体の温度応答を求める。

一方, 下段のノンパラメトリックアプローチでは, 観測される量である応答関数 (およびそのフーリエ変換である複素アドミッタンス) 間の演算を直接行うことにより, 「解析式と熱物性値の組」による表現を介さずとも, 複合材料の温度応答が求められる。

このアプローチは量子現象におけるハイゼンベルグの行列力学と観測される量との関係を記述するという点で共通性がある [9]。行列力学においても, 波動関数を介さずに観測可能なスペクトル (エネルギー準位の差の情報など) の関係を直接記述できる。

7. インパルス応答関数データベース

7.1 収録対象の提案

以上の議論をふまえ, フラッシュ法および周期パルス加熱サーモオプティクス法の観測信号, ならびにそれらを正規化したインパルス応答関数を, 固体中の熱・エネルギーの輸送現象を記述する共有情報として

データベース化することを提案する。

収録対象は, バルク材料・薄膜・微小領域・複合材料など固体全般の熱・エネルギー拡散であり, 熱拡散率と熱伝導率に加えて体積熱容量に関わる量も対象に含まれる。特に熱拡散方程式から乖離が顕著な低温やナノスケールの試料に対しては, インパルス応答関数そのものが最も普遍的な情報となる。

7.2 データの形式と完備条件

収録データは時刻列とサーモオプティクス信号列の 2 列, サンプルング数を行とする行列として記述される。サンプルング時刻が固定されている場合にはサンプルング数次元のベクトルとして表すことができる。このデータはサンプルング数次元のヒルベルト空間の元をなし, FFT により周波数表示のデータ (複素アドミッタンス) に相互変換できる。

このとき, 周期パルス加熱後の応答関数 $\chi(t)$ と, そのフーリエ変換である複素アドミッタンス $\hat{\chi}(\omega)$ は共に同じヒルベルト空間の元となり, 両者のノルムは等しい。また因果律 ($t < 0$ で $\chi(t) = 0$) により, $\hat{\chi}(\omega)$ は上半複素平面において解析的となり, クラマース・クロニッヒ関係式) が成立する。

フーリエ変換はユニタリ作用素であり, 時間表示と周波数表示は同一ヒルベルト空間における異なる基底表示である。この等長同型性が, 時間領域と周波数領域のデータが同等の情報量を持つことの数学的根拠となっている。

さらに, ヒルベルト空間の元である応答関数ベクトルを相互に変換する作用素は, ユニタリ群をなす。第 4.2 節で述べた四端子行列の行列式が 1 であるという性質は, このユニタリ群の構造が熱拡散の多層系に

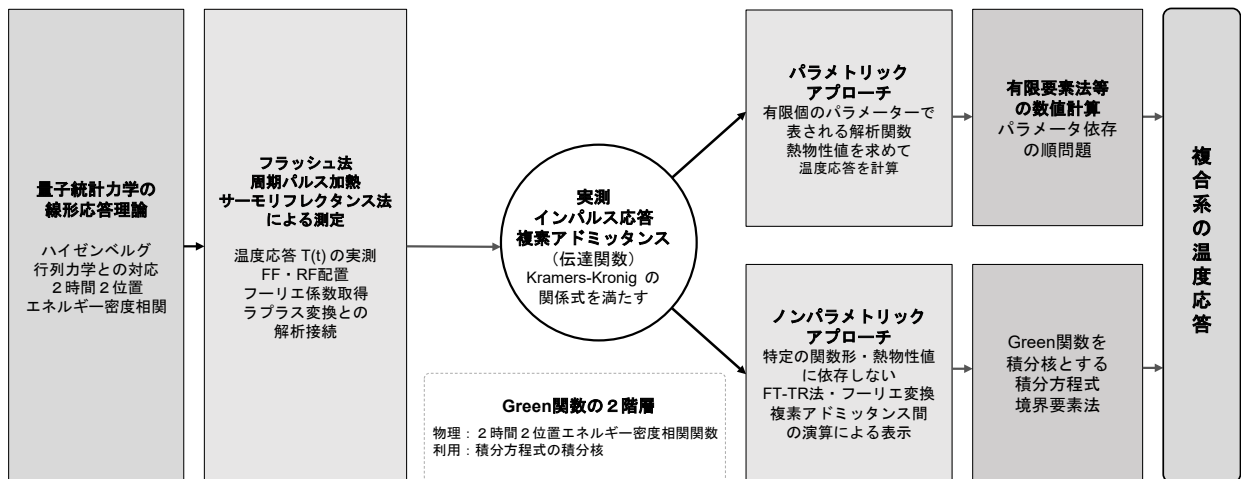


図2 固体中のエネルギー移動・熱移動のインパルス応答関数・伝達関数による記述とパラメトリックまたはノンパラメトリックアプローチによる複合系の応答の導出

おける具体的表現として現れたものと理解できる。すなわち、観測量である応答関数ベクトル間の変換の群構造（ユニタリ群）は、物理的要請（エネルギー保存・因果律）と数学的構造（ヒルベルト空間）が整合した必然的帰結である。

完備なデータの条件として、(i) パルス周期の全域にわたり等間隔で取得される、(ii) サーモリフレクタンス光の変化に比例した値である、(iii) 試料を構成する薄膜の膜厚より十分大きい（典型的には 100 倍以上）径のレーザビームでの加熱により熱拡散の一次元性を確保する、ことが求められる [3]。

なおデータには、試料の種類・構成・形状・寸法、測定装置とその応答特性、測定温度・測定条件などのメタデータが添付されることが必要である。光学遅延方式の装置や集光ビームを用いた装置など、完備条件の一部が満たされない場合は、その詳細をメタデータとして記録する。

7.3 分散型データベースの実装

データベースは必ずしも単一のサーバー上に構築する必要はなく、データフォーマットを標準化してウェブ上で共有する分散型が現実的かつ発展的であると考えられる [10]。産業技術総合研究所と日本熱物性学会が連携して開発してきた分散型熱物性データベース（第2回 [1]）にも収録可能である。

信号のデジタルデータが保存されていれば、解析法の進歩や標準化の進展により、より普遍的な情報が将来にわたって導出可能であるという点でも、応答関数の生データを共有する意義は大きい [3]。

8. おわりに

本稿では、これまでの連載（第1回～第16回）の議論を総括し、固体中の熱・エネルギー輸送現象に関する共有情報としてのインパルス応答関数データベースの構築を提案した。

インパルス応答関数（境界での Green 関数の値）は、熱拡散方程式が成立する巨視的バルク材料から、熱拡散方程式が成立しないナノスケール材料・低温金属薄膜に至るまで、普遍的に定義・観測可能である。また Green 関数を積分核とする積分方程式により、データ間の演算により複合体全体の応答関数が計算可能である。データ科学的手法と親和性の高いベクトル・行列形式のデータとして整備されることにより、今後の材料インフォマティクスや非平衡統計物理学

との連携が進展すると思われる。

日本熱物性学会は発足時より、文章の情報のみならず、数値データ自体の流通を重視し、当初は講演論文集を破格に長い4ページとしていた。近年のデータ科学の顕著な進展により、上記の趣旨を反映したデータベースを提供することが現実化し、科学技術の基盤情報として重要な役割を果たすものと期待される。

本研究は、国立研究開発法人科学技術振興機構の未来社会創造事業大規模プロジェクト型「センサ用独立電源として活用可能な革新的熱電変換技術」において実施された。

9. 参考文献

- [1] 馬場哲也；「科学技術におけるデータベースの役割(2)」，熱物性 27 (2013) 169-172.
- [2] 同 (13)回，熱物性 (2022).
- [3] 同 (16)回，熱物性 (2024).
- [4] 同 (15)回，熱物性 (2024).
- [5] 同 (14)回，熱物性 (2023).
- [6] ミカエル D. グリーンベルグ著，関口壮訳；「応用グリーン関数，境界要素法の基礎」，(1983)，ブレイン図書出版，発売元：丸善.
- [7] T. Baba; "Analysis of one-dimensional heat diffusion after light pulse heating by the response function method", Japanese J. Applied Physics 48 (5S2), 05EB04.
- [8] T. Baba, T. Baba, T. Mori, "Fourier Transform Thermoreflectance Method Under Front-Heat Front-Detect Configuration", Int. J. Thermophys. 45, 61 (2024).
- [9] 小出昭一郎；「量子力学（1）改訂版」，(1990)，裳華房，pp.135-194.
- [10] T. Baba, Y. Yamashita, A. Nagashima: "Function Sharing and Systematic Collaboration between a Networking Database System and Printed Media on Thermophysical Properties Data", J. Chem. Eng. Data, 54, 2745-57 (2009).
- [11] T. Baba: "Measurements and Data of Thermophysical Properties Traceable to a Metrological Standard", Metrologia, 47, S143-S155 (2010).
- [12] T. Baba, T. Baba, K. Ishikawa, T. Mori; "Determination of thermal diffusivity of thin films by applying Fourier expansion analysis to thermoreflectance signal after periodic pulse heating", Journal of Applied Physics 130 (2021), 225107.
- [13] T. Baba, T. Baba, T. Mori, "Development of Fourier Transform Ultrafast Laser Flash Method for Simultaneous Measurement of Thermal Diffusivity and Interfacial Thermal Resistance", Int. J. Thermophys. 45, 27 (2024).
- [14] H. S. Carslaw, J. C. Jaeger; "Conduction of heat in solids 2nd edition", Clarendon Press, 1986.
- [15] 今村勉；「物理とグリーン関数」，物理数学シリーズ，(2016)，岩波書店.