

平成 21 年 6 月 8 日現在

研究種目：基盤研究（C）
 研究期間：2007～2008 年度
 課題番号：19560218
 研究課題名（和文） 次世代のエネルギー有効利用に貢献する熱物性データベースの開発
 研究課題名（英文） Development of a Thermophysical Property Database for Energy Utilization in the Next Generation
 研究代表者
 赤坂 亮（AKASAKA RYO）
 九州ルーテル学院大学・人文学部・教授
 研究者番号：60369121

研究成果の概要：

熱力学的特性に優れ、オゾン層破壊や地球温暖化に与える影響が皆無である（もしくは極めて小さい）ことから、次世代における冷凍機やヒートポンプの作動媒体として期待されている物質を対象とし、公表されている状態方程式の収集・評価・コード化を行った。対象とした物質は以下の通りである：アンモニア、ノルマルブタン、イソブタン、プロパン、二酸化炭素、n-水素、p-水素、メタノール、エタノール、ジメチルエーテル、HFC 系冷媒（R-125、R-134a、R-143a、R-152a、R-23、R-32、R-41）。

さらに、開発したコードを再利用可能な計算ライブラリ形式にまとめ、「熱物性プログラム・パッケージ PROPATH 第 13.1 版」として一般公開した。2009 年 4 月現在、PROPATH 第 13.1 版は、九州大学情報基盤センターを通して無償で入手することができる。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2007 年度	500,000	150,000	650,000
2008 年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
年度			
総計	1,000,000	300,000	1,300,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・熱工学

キーワード：熱物性，自然冷媒，HFC 冷媒，データベース，数値計算

1. 研究開始当初の背景

先進の作動流体を採用した動力サイクルや冷凍機的设计には、その作動流体の状態方程式等を用いて熱物性が機械的に計算できるデータベースが必要不可欠である。

米国やドイツではデータベース開発が組織的・精力的に進められており、米国 NIST の REFPROP に代表されるように、新しい状態式が発表されると比較的早期にデータベ

ス上で利用できる仕組みが整っている。

一方、国産のデータベースとしては、PROPATH、KITS、TPDS などがある。これらのデータベースの開発は主に大学に籍を置く研究者によって進められているが、人的・資金的制約から、状態式が公表されてからデータベース上で利用可能になるまでにかかなりの期間を要している。わが国の熱物性データベース開発は、欧米の研究機関に大きく遅れ

を取っている状況である。

2. 研究の目的

科学研究費の交付を希望する2年間においては、HFC系冷媒、プロパン、イソブタン、アンモニア、二酸化炭素等の状態式や相関式を開発、収集、検討し、精度を明らかにしたうえで、種々の熱物性値を計算するコードを集中的に開発する。開発したコードは「熱物性プログラム・パッケージ PROPATH」の次期バージョンとして一般公開する。

この研究の学術的な特色は、わが国独自の熱物性データベースを開発してゆく点にある。本研究課題の特に独創的な点は、開発したデータベースを世界中で利用実績のある PROPATH の一部として公開することで、広く産業界の便益に供することを最終目的としていることである。単に新しい状態式を採用したデータベースを作成し、専門知識のある研究者が研究室レベルで利用できるようにするだけではない。

3. 研究の方法

(1) 状態方程式の収集・評価

対象とする物質に関する実測値、状態方程式および相関式の情報を収集し、気液平衡、液相、気相および輸送性質等に分類する。各物質について実測値の分布図を作成し、式の精度を検証する。実測値のみが公表され、式系が整備されていないものについては、適宜相関式等を作成する。状態方程式の精度が検証されているもの(R-125, R-134a, アンモニアなど)はコード開発を開始し、プロトタイプを PROPATH プロジェクトのメンバーに配布してテストを行う。

(2) 混合則の作成

最近では HFC 系 + 自然系の混合物の実測値(主に気液平衡)が報告されている。これらの混合則を作成し、国内外の学会で公表すると共に、国際誌に投稿する。

(3) データベース開発

精度の検証が完了した状態方程式から順にコード化を行い、プロトタイプを PROPATH プロジェクトのメンバーに配布してテストを行う。また、Excel 用ライブラリ(Windows 用 DLL)の開発も併せて行う。さらに、開発したデータベースおよび Excel 用ライブラリのマニュアルを作成し、PROPATH の新バージョンとして公表する。新バージョンで新たに追加された機能等を国内外の学会で公表する。

4. 研究成果

(1)以下の物質のライブラリを開発した。

- R-23 (Penoncello, Lemmon, Jacobsen, and Shan)
- R-32 (Tillner-Roth and Yokozeki)

- R-125 (Sunaga, Tillner-Roth, Sato, and Watanabe)
- R-125 (Lemmon and Jacobsen)
- R-134a (Tillner-Roth and Baehr)
- R-143a (Li, Tillner-Roth, Sato, and Watanabe)
- R-143a (Lemmon and Jacobsen)
- R-152a (Astina and Sato)
- メタン (Setzmann and Wagner)
- エタン (Bücker and Wagner)
- プロパン (Miyamoto and Watanabe)
- n-ブタン (Bücker and Wagner)
- イソブタン (Miyamoto and Watanabe)
- イソブタン (Bücker and Wagner)
- エチレン (Smukala, Span, and Wagner)
- アンモニア (Tillner-Roth and Watzenberg)
- アルゴン (Tegeler, Span, and Wagner)
- 窒素 (Span, Lemmon, Jacobsen, Wagner, and Yokozeki)
- メタノール (de Reuck and Craven)
- エタノール (Dillon and Penoncello)
- 二酸化炭素 (Span and Wagner)
- 水 (IAPWS95) (Wagner and Prüss)

これらのコードを再利用可能な計算ライブラリ形式にまとめ、「熱物性プログラム・パッケージ PROPATH 第 13.1 版」として一般公開した。2009 年 4 月現在、PROPATH 第 13.1 版は、九州大学情報基盤センターを通して無償で入手することができる。

(2)データベースのコード化において、数値的安定性の問題を解決するために、純物質の飽和状態や混合物の臨界点を求める新たなアルゴリズムを開発した。

特に、混合物の臨界点推算においては、ル・シャンドル変換を用いて数値的不安定性等の問題を回避した新しい条件式を提案した。また、この条件式を 2 成分混合物に適用し、その有用性を証明した 図 1 および 2 に、この手法を既存状態方程式に適用して計算した R-32+R-290 系の臨界温度および臨界比体積を示す。

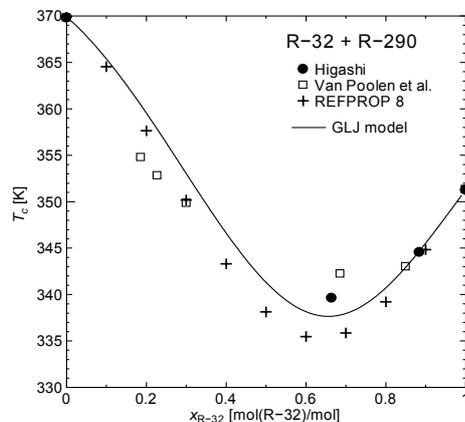


図 1: R-32+R-290 (プロパン) 系の臨界温度

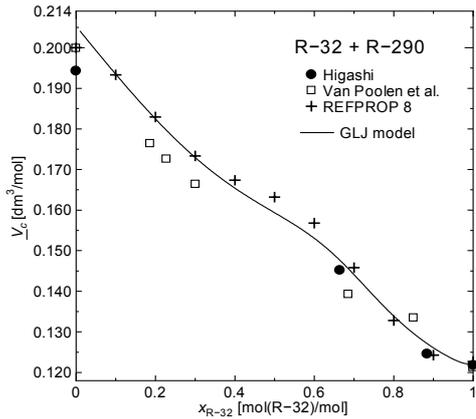


図 2: R-32+R-290 (プロパン) 系の臨界比体積

また、図 3 は同手法を水+アンモニア系に適用して臨界温度を求めた例である。

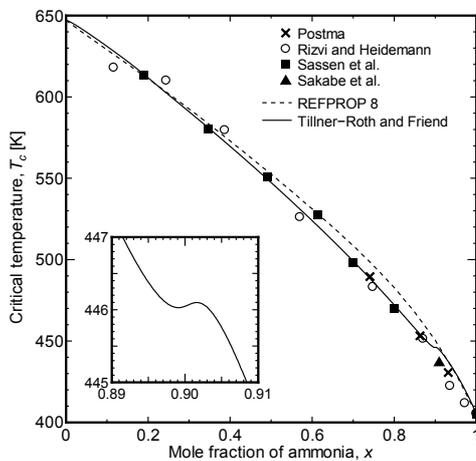


図 3: 水+アンモニア系の臨界温度

いずれの例においても、計算値と実測値は良好に一致していることがわかる。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 7 件)

K. Tanaka, Y. Higashi, R. Akasaka, Y. Kayukawa, and K. Fujii, Measurements of the Vapor-Liquid Equilibrium for the CO₂ + R290 Mixture, *Journal of Chemical and Engineering Data*, 54(3), pp.1029-1033, (2009). (査読あり)

赤坂亮, HFC 冷媒および自然冷媒に対する Helmholtz 型状態方程式と熱力学的性質の計算方法, *日本冷凍空調学会論文集*, 26(1), pp.1-15, (2009). (査読あり)

R. Akasaka, A Rigorous Calculation of the Critical Point from the Fundamental

Equation of State for the Water + Ammonia Mixture, *International Journal of Refrigeration*, 32, pp.95-101, (2009) (査読あり)

R. Akasaka, An Assessment of Thermodynamic Models for HFC Refrigerant Mixtures through the Critical Point Calculation, *International Journal of Thermophysics*. 29(4), pp.1328-1341, (2008). (査読あり)

R. Akasaka, A Reliable and Useful Method to Determine the Saturation State from Helmholtz Energy Equations of State, *Journal of Thermal Science and Technology*, 3(3), pp.442-451, (2008). (査読あり)

R. Akasaka, Calculation of the Critical Point for Mixtures using Mixture Models based on Helmholtz Energy Equations of State, *Fluid Phase Equilibria*, 263, pp.102-108, (2007). (査読あり)

R. Akasaka, Y. Higashi, K. Tanaka, Y. Kayukawa, and K. Fujii, Vapor-liquid Equilibrium Measurements and Correlations for the Binary Mixture of Difluoromethane + Isobutane and the Ternary Mixture of Propane + Isobutane + Difluoromethane, *Fluid Phase Equilibria*, 261, pp.286-291, (2007). (査読あり)

〔学会発表〕(計 6 件)

R. Akasaka, Modeling of the Vapor-Liquid Equilibrium of the Carbon Dioxide + Dimethyl Ether Mixture by Three Different Approaches AICHE Annual Meeting, Philadelphia, PA, USA, November 16 - 21, (2008).

赤坂亮, Helmholtz 型状態式を用いた CO₂ + DME 混合物の気液平衡モデル, 2008 年度日本冷凍空調学会年次大会, 大阪, 10 月, (2008).

R. Akasaka, S. Momoki, T. Yamaguchi, and Y. Takata, PROPATH - A Program Package for Thermophysical Properties of Fluids, 8th IIR Gustav Lorentzen Conference on Natural Working Fluids, Copenhagen, Denmark, September 7 - 10, (2008).

赤坂亮, 3 成分混合冷媒の臨界点計算による Helmholtz 型混合モデルの評価第 29 回日本熱物性シンポジウム, 東京, 10 月, (2008).

赤坂亮, Helmholtz 型状態式を用いた混合冷媒の臨界点の計算, 2007 年度日本冷凍空調学会年次大会, 東京, 10 月, (2007).

T. Yamaguchi, S. Momoki, R. Akasaka, T. Honda, Y. Takata, and T. Ito, Program Package for Thermophysical Properties of Fluids: PROPATH - A New Implementation of the VTPR Equation of State -, The 8th Asian Thermophysical Properties Conference,

Fukuoka, Japan, August 21 - 24, (2007).

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

〔その他〕

流体の熱物性値プログラム・パッケージ
PROPATH 第13.1版, (2008).

<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/system/library/PROPATH/PROPATH.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

赤坂 亮 (AKASAKA RYO)

九州ルーテル学院大学・人文学部・教授

研究者番号: 60369121

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者