

1 エタノール換算表

平成21年10月20日、JIS B 7548 : 2009「酒精度浮ひょう」が制定された。この規格は、酒精度浮ひょうが計量法の特定制量器として要求される要件のうち、構造及び性能に係る技術上の基準及び試験方法を規定するために作成された工業規格である。この規格は、酒精度浮ひょうのうち、温度15℃での酒精と水との混合液中の酒精の濃度が0 vol%から100 vol%で一定の範囲の濃度をvol%で表す目盛りが付されたものである。JIS B 7548 : 2009の「酒精度浮ひょう」には、国際法定計量機関(OIML)が採択している「International alcoholometric tables」に準じた「国際アルコール表」(OIML R 22 : 1975に記載されている勧告式を使用して作成した国際アルコール表)の「表A.1-アルコール表(15℃における体積密度と酒精度との対応)」が添付されている。

平成23年12月、国税庁より、「計量法関係法令の改正により、酒精度浮ひょうの規格の一部が変更された」との通知が酒類製造者に出された。JIS B 7548 : 2009「酒精度浮ひょう」は、計量法上の特定計量器に指定されており、製造後に検定を受けて、器差や構造等について一定の基準を満たしていることが確認されたものを使用する必要がある。この検定の方法等を定めた特定計量器検定検査規則(以下「検則」という。)が平成23年3月14日に改正され、酒精度浮ひょうの規格の一部が変更され、改正された内容については、平成24年3月1日から施行されている。施行日以降、改正された検則に基づく酒精度浮ひょうが市場に順次供給されてきており、これまでは日本独自の「アルコール分と密度の対応表」に基づき検定が行われていたが、改正後の検則においてはOIMLが採択している「国際アルコール表」が用いられることとなった。

日本薬局方の4各条(エタノール、無水エタノール、消毒用エタノール及びブドウ酒)においても国際アルコール表に基づく比重から換算される体積百分率(vol%)の改正が必要になった。そのため、JIS B 7548 : 2009「酒精度浮ひょう」を参考に比重(d_{15}^{15})と体積百分率(vol%)、質量百分率(%)及び100 mL中のアルコールの質量(g)からなる「エタノール換算表」を作成した。検討した近似式の内容を次に示した。平成24年2月2日、国税庁所定分析法の一部を改正する訓令が改正され、平成24

年3月1日から施行されていることから、「エタノール換算表」の作成に当たっては、この改正された訓令で設定された「第2表 アルコール分と密度(15℃)及び比重(15/15℃)換算表」(国税庁訓令の第2表)も参考の資料として用いられた。

1. 近似式1

1.1. 計算誤差の設定

検討開始に当たってエタノールのvol%の表示桁数は2桁を想定しており近似式での計算誤差を $(-0.005 < (\text{元データ} - \text{近似値}) \leq 0.005)$ とした。

1.2. 近似の次数の検討

近似式の次数は、次数を上げても、元データとの誤差は縮小しなかったこと及び高次式にすると近似式の連続性が低下し、折れ線グラフ様になる懸念があり3次式を限度とした。

予備検討では、0~5 vol%における近似式の計算結果と元データの誤差は、次のとおりであった。

- (i) 1次式での誤差
-0.060~0.039 判定 誤差範囲外のため不適
- (ii) 2次式での誤差
-0.0037~0.0037 判定 誤差範囲内であり適
- (iii) 3次式での誤差
-0.0060~0.0060 判定 誤差範囲外のため不適

2次式だけが誤差の設定条件を満足するため、2次式を採用することとした。

計算式は統計プログラムに収載されている近似式では、誤差がプラス側又はマイナス側に偏ってしまうことから統計プログラムの式を平行移動して近似式を作成した。その結果を表1に示した。

1.3. 近似範囲の検討

検討当初は5 vol%刻みの近似範囲を念頭に置いたが、エタノール同士の分子間相互作用の変化の著しい領域では誤差条件を満足せず、1 vol%刻みの状態となった。

近似範囲が狭いということは、次数の検討で問題とした近似式の連続性が低下する恐れもあるが、誤差条件を優先させた。

1.4. 誤差発生の原因の検討

誤差発生の要因は、誤差の状況をグラフ化するとノコギリ型になる。国際アルコール表の数値の処理が切り捨てのような方法で処理されたことによるのではないかと推測した。

表1 近似式, 適用範囲及び誤差

近似式	適用範囲	誤差
$Y=7233.9X^2-15115X+7880.8+0.19776$	0~5 vol%	-0.0039~0.0039
$Y=8671X^2-17967X+9296+0.08491$	5~10 vol%	-0.0041~0.0041
$Y=8971.3X^2-18562X+9591-0.19356$	10~15 vol%	-0.0046~0.0046
$Y=20685X^2-41528X+20848-0.3541$	15~16 vol%	-0.0046~0.0036
$Y=5279.6X^2-11320X+6039.4-0.2481$	16~17.5 vol%	-0.0047~0.0047
$Y=5119.7X^2-11002X+5881+0.0924$	17.5~20 vol%	-0.0042~0.0048
$Y=-1542.9X^2+2009.8X-471.76-0.0266$	20~22.4 vol%	-0.0016~0.0016
$Y=-7721X^2+14034X-6321.9-0.453$	22.5~25 vol%	-0.0047~0.0046
$Y=-10162X^2+18767X-8617.3+0.6803$	25~26 vol%	-0.0041~0.0040
$Y=-9902.6X^2+18262X-8370.4-0.4417$	26~30 vol%	-0.0049~0.0049
$Y=-9305.1X^2+17109X-7814.5-0.1003$	30~35 vol%	-0.0040~0.0042
$Y=-6883.7X^2+12465X-5587.8-0.1166$	35~40 vol%	-0.0044~0.0045
$Y=-4551.6X^2+8023.9X-3473.5-0.0758$	40~45 vol%	-0.0035~0.0036
$Y=-2935.7X^2+4972.5X-2033.1+0.06321$	45~50 vol%	-0.0038~0.0038
$Y=-1896.5X^2+3028.8X-1124.2+0.0307$	50~55 vol%	-0.0028~0.0028
$Y=-1300.1X^2+1925.4X-613.81-0.00706$	55~60 vol%	-0.0025~0.0025
$Y=-1029.7X^2+1431.3X-388.09-0.01004$	60~65 vol%	-0.0027~0.0027
$Y=-955.62X^2+1297.4X-327.59-0.00371$	65~70 vol%	-0.0019~0.0019
$Y=-875.19X^2+1153.8X-263.54+0.042565$	70~75 vol%	-0.0020~0.0020
$Y=-817.7X^2+1053X-219.32+0.00783$	75~80 vol%	-0.0019~0.0019
$Y=-857.57X^2+1121.8X-249+0.00721$	85~90 vol%	-0.0017~0.0017
$Y=-1256.5X^2+1792.8X-531.2+0.02724$	90~95 vol%	-0.0017~0.0017
$Y=-1519.1X^2+2221X-705.72-0.023005$	95~100 vol%	-0.0026~0.0026

74 2. 近似式2

75 2.1. 計算誤差の設定

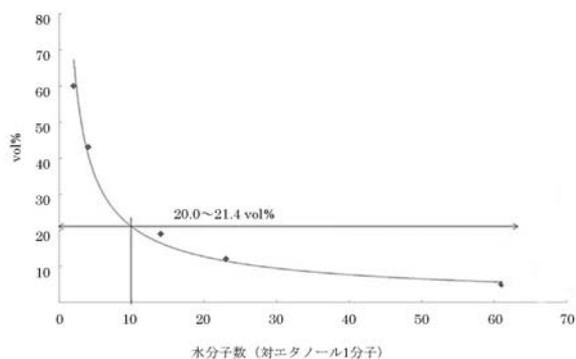
76 検討開始に当たってエタノールのvol%の表示桁数は2桁を想
77 定して行った。しかし、比重の範囲が広くなると近似式での計
78 算誤差が大きくなることから、計算誤差を $-0.05 < (\text{元データ}$
79 $- \text{近似値}) \leq 0.05$ とした。

80 2.2. 近似範囲の検討(エタノール(水)溶液の含有率と溶液の
81 相変化の推定)

82 エタノール溶液には、エタノール分子が水分子にほぼ均質に
83 混和している状態と、水分子同士の集合とエタノール分子同士の
84 集合のそれぞれの相互作用の強い状態の2つの状態があると
85 考えられている。

86 エタノール溶液におけるこの2つの状態の濃度領域を推定す
87 るために、エタノール濃度と水分子の数(エタノール1分子に
88 対する)の関係性を求めた。図1の近似式から、水分子/エタ
89 ノール分子=10:1になるエタノール溶液の濃度を推定したと
90 ころ、21.0~21.4 vol%であった。

91 そこで、エタノール濃度が21 vol%付近で分割し(2領域を作
92 成)、近似式は、それぞれの濃度領域に対して行うこととした。



93 図1 エタノール溶液におけるエタノールの体積百分率と水
94 /エタノール分子数比との関係
95

96 2.3. 近似式の作成方法

97 (i) 統計プログラムを用い、計算は15桁で実施した。

98 (ii) 前提条件として、比重に対応するエタノールの濃度は正
99 規分布(母集団)をしていること、近似式のモデルは多項式であ
100 ることとした(国際アルコール表から、密度と濃度は12乗の多
101 項式で示されている。)

102 (iii) モデルの測定値(又はデータ)に対するあてはめのよさ(尤
103 度)は、赤池情報量基準(AIC)によった。赤池情報量基準(AIC)
104 とは、期待尤度(適合度)からパラメータ数(複雑度)を引いた値
105 で示され、値の小さいほうがよりよいモデル(測定値に対する
106 尤度が高い)と推定される。

107 (iv) 結果は、エタノール濃度のデータと近似式から算出した
108 値を小数点1位に四捨五入し、その差が0の場合のみ採用した。

109 2.4. 結果

110 エタノールの濃度が0~21 vol%の領域では、差はなかった。
111 20~100 vol%の領域では、20.6 vol%以上で差はなかった。得
112 られた近似式は以下のとおり[y: エタノールの体積百分率,
113 x: 比重(d_{15}^{15})].

114 (i) 0~21 vol%の領域: (AIC: -1828)

$$115 \quad y = (-6411739278.9281) + (36352320721.0043)x +$$

$$116 \quad (-83750873187.3913)x^2 + (98485699181.7292)x^3 +$$

$$117 \quad (-59561205873.8307)x^4 + (15008758746.2650)x^5 +$$

$$118 \quad (-122960308.8521)x^9$$

119 (ii) 20~100 vol%の領域: (AIC: -4519)

$$120 \quad y = (-5148527719.179) + (52837314689.458)x +$$

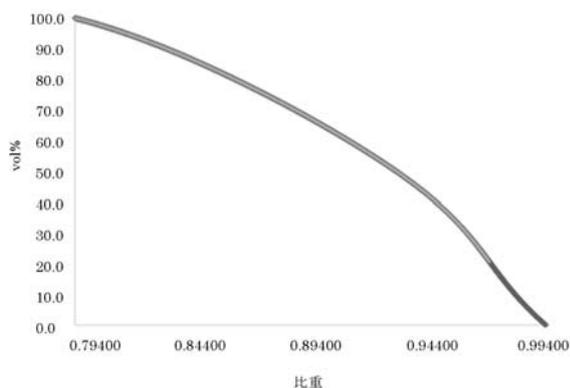
$$121 \quad (-240838375318.858)x^2 + (639933983106.208)x^3 +$$

$$122 \quad (-1092357542483.801)x^4 + (1242243657736.325)x^5 +$$

$$123 \quad (-941150282830.722)x^6 + (458062690955.586)x^7 +$$

$$124 \quad (-129958490635.260)x^8 + (16375572493.626)x^9$$

- 125 上記の近似式から下記に従って計算値を採用した(図2).
 126 (i) エタノールの濃度が0~21 vol%の領域では, その領域の
 127 近似式の計算値
 128 (ii) 21~100 vol%の領域では, 20~100 vol%の領域の近似
 129 式の計算値



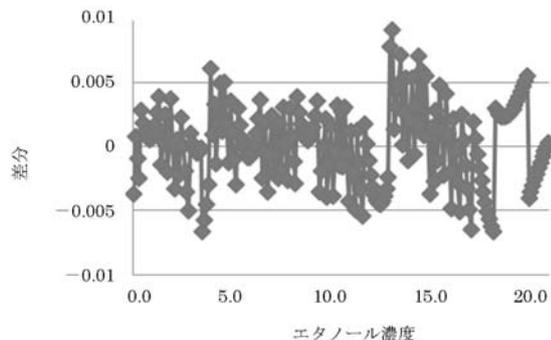
130
 131 図2 エタノール溶液と比重のデータと計算値の比較

132 2.5. 誤差発生の原因の検討

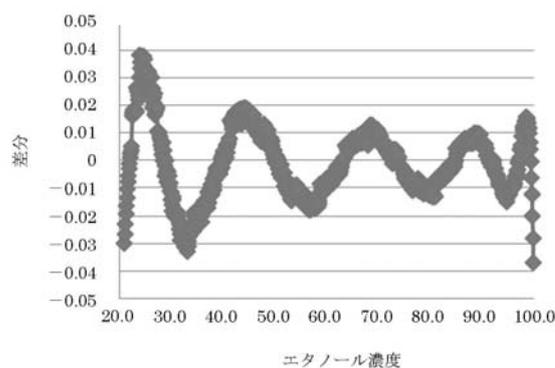
133 誤差の状況をグラフ化すると, 0~21 vol%の領域ではノコ
 134 り型になる.

135 一方, 21~100 vol%の領域では, 減衰するサイン曲線様で,
 136 21~24 vol%と99.8~100 vol%で誤差が大きくなっている.

137 誤差の要因は, 領域が小さければ, 国際アルコール表の数値
 138 の処理が切り捨てのような方法で処理されたことによるのでは
 139 ないかと推察した. 領域を大きく取ると, 近似式がデータに対
 140 して最少の差分になるため, 一定の領域ごとに差分が正の領域
 141 又は負の領域を取りながら近似していると考えられた. 特に,
 142 両末端領域には, 次に補正がかかる値がないため(100 vol%以
 143 上の値を取らないため), 大きな誤差がでていた(図3, 図4).



144
 145 図3 0~21 vol%の領域



146
 147 図4 21~100 vol%の領域

148 3. エタノール換算表作成に当たっての留意事項

149 国際アルコール表「表A.1-アルコール表(15℃における体
 150 積密度と酒精度との対応)」をもとに2つの近似方法で, 小数点
 151 以下3桁で示された比重のエタノール溶液のエタノールvol%を
 152 小数点以下1桁で求めた. 2つの近似方法においてエタノール
 153 のvol%値はかなり一致し, 国税庁訓令の第2表とも整合性が取
 154 れた.

155 (i) 近似式1及び2を使って作成したエタノール換算表は, 国
 156 税庁訓令の第2表と, 矛盾が生じないように考慮した.

157 (ii) エタノール換算表の場合, エタノールのvol%を小数点
 158 以下1桁までの表示とすることにより近似式1及び2は非常に近
 159 い値となったが, 四捨五入によっては0.1 vol%の差が生じる場
 160 合があった. その場合は, 国税庁訓令の第2表の数値と近い値
 161 を選択した.

162 (iii) 比重の値について, 小数点以下3桁までの表示とした場
 163 合, 国税庁訓令の第2表では, 有効数字の関係から, 他の体積
 164 百分率を選択することが可能となる. 例えば, 比重0.816と記
 165 載された場合には, 有効数字の関係から実際には0.81550~
 166 0.81649まで許容されることになり, 国税庁訓令の第2表では
 167 95.0~95.2 vol%まで幅を持つことになる. そのため, エタノ
 168 ール換算表の比重の値は, 小数点以下3桁しか記載していない
 169 が, 小数点以下4桁まで取り扱い, 小数点以下第4位は「0」が
 170 あるものとして取り扱った.

171 4. エタノール換算表

172 エタノール換算表を下記に示す.

173 換算表は比重, エタノールの体積百分率(vol%), エタノー
 174 ルの質量百分率(%)及び100 mL中のエタノール(g)量で示した.
 175 また, エタノールのvol%から%を計算する際には, 15℃にお
 176 ける100.0 vol%の比重を0.79422として計算した. なお, 質量
 177 百分率(%)は次の式より求めた.

$$178 \quad \% = \frac{\text{vol}\% \times 0.79422}{d}$$

179 d : 比重

180 0.79422: 15℃における100%エタノールの比重

比重とエタノールの換算表

比重	vol%	%	100 mL中の エタノール (g)量	比重	vol%	%	100 mL中の エタノール (g)量	比重	vol%	%	100 mL中の エタノール (g)量	比重	vol%	%	100 mL中の エタノール (g)量
1.000	0.0	0.0	0.0	0.940	47.1	39.8	37.4	0.880	74.1	66.9	58.8	0.820	94.1	91.1	74.7
0.999	0.7	0.6	0.6	0.939	47.7	40.3	37.9	0.879	74.5	67.3	59.1	0.819	94.3	91.4	74.8
0.998	1.3	1.0	1.0	0.938	48.2	40.8	38.3	0.878	74.9	67.8	59.4	0.818	94.6	91.8	75.1
0.997	2.0	1.6	1.6	0.937	48.7	41.3	38.6	0.877	75.3	68.2	59.8	0.817	94.8	92.2	75.2
0.996	2.7	2.2	2.1	0.936	49.3	41.8	39.1	0.876	75.6	68.5	60.0	0.816	95.1	92.6	75.5
0.995	3.4	2.7	2.7	0.935	49.8	42.3	39.5	0.875	76.0	69.0	60.3	0.815	95.4	93.0	75.7
0.994	4.1	3.3	3.3	0.934	50.3	42.8	39.9	0.874	76.4	69.4	60.6	0.814	95.6	93.3	75.9
0.993	4.9	3.9	3.9	0.933	50.8	43.2	40.3	0.873	76.8	69.9	60.9	0.813	95.9	93.7	76.1
0.992	5.6	4.5	4.4	0.932	51.3	43.7	40.7	0.872	77.1	70.2	61.2	0.812	96.1	94.0	76.3
0.991	6.4	5.1	5.1	0.931	51.8	44.2	41.1	0.871	77.5	70.7	61.5	0.811	96.4	94.4	76.5
0.990	7.2	5.8	5.7	0.930	52.3	44.7	41.5	0.870	77.9	71.1	61.8	0.810	96.6	94.7	76.7
0.989	8.0	6.4	6.3	0.929	52.8	45.1	41.9	0.869	78.2	71.5	62.1	0.809	96.8	95.0	76.8
0.988	8.8	7.1	7.0	0.928	53.3	45.6	42.3	0.868	78.6	71.9	62.4	0.808	97.1	95.4	77.1
0.987	9.7	7.8	7.7	0.927	53.8	46.1	42.7	0.867	79.0	72.4	62.7	0.807	97.3	95.8	77.2
0.986	10.5	8.5	8.3	0.926	54.3	46.6	43.1	0.866	79.3	72.7	62.9	0.806	97.5	96.1	77.4
0.985	11.4	9.2	9.0	0.925	54.8	47.1	43.5	0.865	79.7	73.2	63.3	0.805	97.8	96.5	77.6
0.984	12.3	9.9	9.8	0.924	55.3	47.5	43.9	0.864	80.1	73.6	63.6	0.804	98.0	96.8	77.8
0.983	13.2	10.7	10.5	0.923	55.7	47.9	44.2	0.863	80.4	74.0	63.8	0.803	98.2	97.1	77.9
0.982	14.2	11.5	11.3	0.922	56.2	48.4	44.6	0.862	80.8	74.4	64.1	0.802	98.4	97.4	78.1
0.981	15.1	12.2	12.0	0.921	56.7	48.9	45.0	0.861	81.1	74.8	64.4	0.801	98.6	97.8	78.2
0.980	16.1	13.0	12.8	0.920	57.1	49.3	45.3	0.860	81.5	75.3	64.7	0.800	98.8	98.1	78.4
0.979	17.1	13.9	13.6	0.919	57.6	49.8	45.7	0.859	81.8	75.6	64.9	0.799	99.1	98.5	78.6
0.978	18.1	14.7	14.4	0.918	58.1	50.3	46.1	0.858	82.2	76.1	65.2	0.798	99.3	98.8	78.8
0.977	19.0	15.4	15.1	0.917	58.5	50.7	46.4	0.857	82.5	76.5	65.5	0.797	99.5	99.2	79.0
0.976	20.1	16.4	16.0	0.916	59.0	51.2	46.8	0.856	82.9	76.9	65.8	0.796	99.7	99.5	79.1
0.975	21.1	17.2	16.7	0.915	59.4	51.6	47.1	0.855	83.2	77.3	66.0	0.795	99.9	99.8	79.3
0.974	22.1	18.0	17.5	0.914	59.9	52.1	47.5	0.854	83.6	77.7	66.3	0.794	100.0	100.0	79.4
0.973	23.0	18.8	18.3	0.913	60.4	52.5	47.9	0.853	83.9	78.1	66.6				
0.972	24.0	19.6	19.0	0.912	60.8	52.9	48.3	0.852	84.3	78.6	66.9				
0.971	25.0	20.4	19.8	0.911	61.2	53.4	48.6	0.851	84.6	79.0	67.1				
0.970	25.9	21.2	20.6	0.910	61.7	53.8	49.0	0.850	84.9	79.3	67.4				
0.969	26.9	22.0	21.3	0.909	62.1	54.3	49.3	0.849	85.3	79.8	67.7				
0.968	27.8	22.8	22.1	0.908	62.6	54.8	49.7	0.848	85.6	80.2	67.9				
0.967	28.7	23.6	22.8	0.907	63.0	55.2	50.0	0.847	85.9	80.5	68.2				
0.966	29.6	24.3	23.5	0.906	63.4	55.6	50.3	0.846	86.3	81.0	68.5				
0.965	30.4	25.0	24.1	0.905	63.9	56.1	50.7	0.845	86.6	81.4	68.7				
0.964	31.3	25.8	24.8	0.904	64.3	56.5	51.0	0.844	86.9	81.8	69.0				
0.963	32.1	26.5	25.5	0.903	64.7	56.9	51.3	0.843	87.2	82.2	69.2				
0.962	32.9	27.2	26.1	0.902	65.2	57.4	51.7	0.842	87.6	82.6	69.5				
0.961	33.7	27.9	26.7	0.901	65.6	57.8	52.1	0.841	87.9	83.0	69.8				
0.960	34.5	28.5	27.4	0.900	66.0	58.2	52.4	0.840	88.2	83.4	70.0				
0.959	35.2	29.2	27.9	0.899	66.4	58.7	52.7	0.839	88.5	83.8	70.2				
0.958	35.9	29.8	28.5	0.898	66.9	59.2	53.1	0.838	88.8	84.2	70.5				
0.957	36.7	30.5	29.1	0.897	67.3	59.6	53.4	0.837	89.1	84.5	70.7				
0.956	37.4	31.1	29.7	0.896	67.7	60.0	53.7	0.836	89.4	84.9	70.9				
0.955	38.1	31.7	30.2	0.895	68.1	60.4	54.0	0.835	89.8	85.4	71.3				
0.954	38.7	32.2	30.7	0.894	68.5	60.9	54.4	0.834	90.1	85.8	71.5				
0.953	39.4	32.8	31.3	0.893	68.9	61.3	54.7	0.833	90.4	86.2	71.7				
0.952	40.0	33.4	31.7	0.892	69.3	61.7	55.0	0.832	90.7	86.6	72.0				
0.951	40.7	34.0	32.3	0.891	69.7	62.1	55.3	0.831	91.0	87.0	72.2				
0.950	41.3	34.5	32.8	0.890	70.1	62.6	55.6	0.830	91.2	87.3	72.4				
0.949	41.9	35.1	33.3	0.889	70.6	63.1	56.0	0.829	91.5	87.7	72.6				
0.948	42.5	35.6	33.7	0.888	71.0	63.5	56.3	0.828	91.8	88.1	72.9				
0.947	43.1	36.1	34.2	0.887	71.4	63.9	56.7	0.827	92.1	88.4	73.1				
0.946	43.7	36.7	34.7	0.886	71.8	64.4	57.0	0.826	92.4	88.8	73.3				
0.945	44.3	37.2	35.2	0.885	72.1	64.7	57.2	0.825	92.7	89.2	73.6				
0.944	44.9	37.8	35.6	0.884	72.5	65.1	57.5	0.824	93.0	89.6	73.8				
0.943	45.5	38.3	36.1	0.883	72.9	65.6	57.9	0.823	93.2	89.9	74.0				
0.942	46.0	38.8	36.5	0.882	73.3	66.0	58.2	0.822	93.5	90.3	74.2				
0.941	46.6	39.3	37.0	0.881	73.7	66.4	58.5	0.821	93.8	90.7	74.4				