

ガラス組成データベース INTERGLAD Ver.5 の紹介

——ガラス組成の設計も手軽に——

ニューガラスフォーラム事務局

伊勢田 徹

Introduction for Version 5 of International Glass Database “INTERGLAD”

—It facilitates the design of the glass composition too.—

Toru Iseda

New Glass Forum

1. はじめに

INTERGLAD Ver.5 のリリースが間近である。初版の CD-ROM が 1991 年にリリースされて以来、国際ガラスデータベース INTERGLAD はバージョンアップを重ね、国内外 19 ヶ国 182 サイト、千名近い利用者に愛用されてきた。酸化鉛を含まないクリスタルガラスの開発¹⁾を始め、新種ガラスの開発、ガラス組成特許の探索、ガラス物性の研究、新組成ガラスの研究テーマ探索、ガラスを用いた新製品の開発など幅広く利用され、世界中のガラス産業やガラス研究の発展に寄与してきた。

しかし、INTERGLAD は、Ver.4 Internet 版で 18 万組成 (2000 年秋) に及ぶガラスファクトデータを収録しているものの、データをフルに活用するための簡便な機能が備わっていなかったため、多くの人々にとっては、豊富なデータを活用し尽くすまでには至っていなかった。パソコンソフトの飛躍的な向上に伴い、

INTERGLAD は大幅な改善が必要となっていた。

そうした中、INTERGLAD の役割とニューガラスフォーラムの継続的な努力が認められ、我が国の知的基盤強化の一環として経済産業省知的基盤課より「ニューガラスの設計に資するデータベースの構築」プロジェクトが委託された。このプロジェクトの中で、INTERGLAD の発足以来初めて、国の支援を受けて新バージョンの開発に取り組むことができた。

今回完成した Ver.5 には、ガラス設計機能と利便性を高める様々な改善が盛り込まれている。Ver.5 の主要な機能は次の 3 つから成る。

- 1) 収録データの検索機能
- 2) 特性予測およびガラス組成設計機能
- 3) ユーザデータ登録機能

以下に、新バージョンで大きく改善された点を中心に内容を紹介する。

2. 特性予測とガラス組成の設計

多くのガラスは加成性 (足し算で組成から特性が計算できる性質) を有し、Appen²⁾、牧島³⁾

〒105-0012 東京都港区新橋 3-1-9
TEL 03-3595-2775
FAX 03-3595-0255
E-mail: iseda@mx7.mesh.ne.jp

らにより特性値を予測する多数の計算式が提案されてきた。また、INTERGLAD データを利用した重回帰分析による特性予測の方法が安井ら⁴⁾により提案され、富士通㈱からガラス材料設計支援システム VitRES-AG として 1994 年より発売されている。この重回帰分析による方法は、ガラスの微視的構造等を勘案して限られた範囲ごとに適用すれば、予測可能な範囲は広く、汎用性が高い方法といえる。

INTERGLAD Ver.5 では、これら 2 通りの方法で特性予測が行える。

2.1. 重回帰分析による予測

重回帰分析による予測プログラムは、VitRES-AG の経験を生かして開発された。同システムは、確度の高い予測値を算出することに力点が置かれたため、使用できるファクトデータ数の点から適用可能な範囲が限られていた。また、使いやすさの点でも十分ではなかった。そこで Ver.5 では、次の改良を行った。

1) 利用する組成・特性ファクトデータの範囲設定に自由度を持たせた。

2) 予測の確度を判断しやすくした。

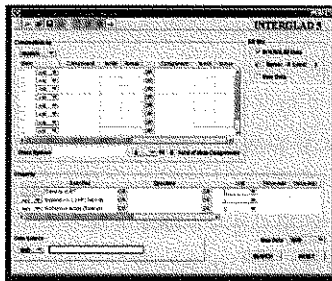
検証結果の X-Y プロット。予測式の寄与率、標準誤差の表示など。

3) 組成探索における試行錯誤の可視化。

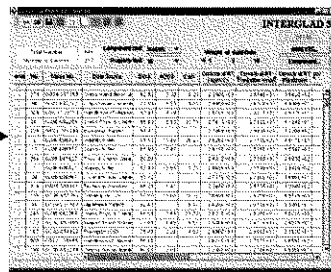
グラフによる試行過程の表示、ガラス化範囲との対比など。

以下に重回帰予測の手順を紹介する。

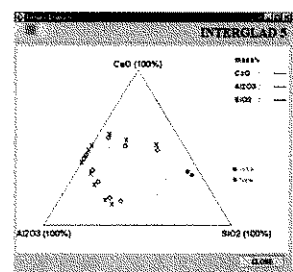
まず、予測しようとするガラス組成に近い組成の組成・特性データを、図 1(a)の検索画面で収集するところから始める。予測したい特性は、3 特性まで指定できる。各特性あるいは各成分を and で結んで指定するか、or で結ぶかは重要であり、特性の場合、and の方が特性間の相関が信頼できる反面、十分な件数のデータが集まりにくく適用範囲が制限される。一方、組成範囲の設定については、広く取れば沢山のデータが集まるが、予測しようとするガラス組



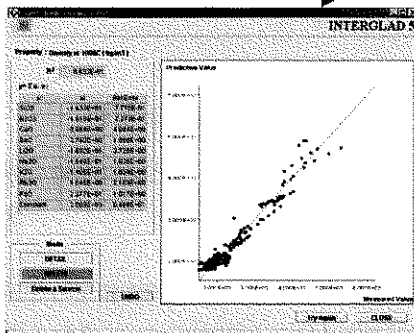
(a) Query Format



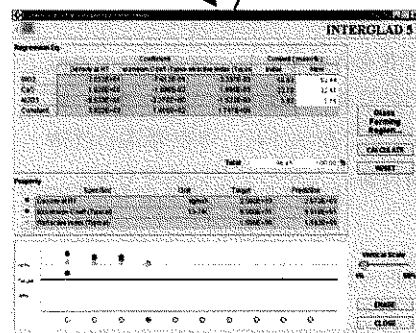
(b) Retrieved Glasses



(c) Glass-Forming Region



(d) Verification



(e) Trial for New Composition

Fig. 1 Images for Regression Analysis

成と異なるガラス構造のデータ等がその中に取り込まれて重回帰分析の精度が低下する可能性が生じやすくなる。どのようなデータの集め方をするかは利用者の判断次第である。

重回帰分析を行うガラス成分は、検索実行後に表示される図1(b)のガラスリスト画面でも指定できる。この画面で重回帰予測を実行すると、表示中の全ガラスについて各特性の予測値が算出表示される。この算出結果は図1(d)のようにX-Yプロットされ、ファクトデータとの対比で予測の善し悪しが検証できる。直線 $x=y$ の近傍にプロットされるかどうかで、選定したガラス母集団の妥当性が判断できる。

この分析結果を利用して、図1(e)の画面で新しいガラス組成を探索することができる。特性の目標値（最高3特性まで）を決め、組成値を指定して計算を実行すると、特性値が算出され、グラフ上に目標値との差がプロットされる。この差が0に近づくように、各成分の係数の大小を頭に入れながら各成分を増減させる。こうした試行を繰り返すことにより、目標組成に近い組成を選び出す。図1(c)のようにガラス化範囲データとの対比も可能である。

2.2. 計算式による予測

Ver.5に盛り込まれた計算式は密度、ヤング率など14特性45式である。各々の式はそれぞれ使用上の制約はあるが、組成値を入力して計算を実行すると、特性値が算出される。

これらの計算式は、予測機能の図2の画面からだけでなく、4のデータ検索画面からも呼び出すことができる。後者では、検索された全組成についての特性算出結果がリスト上あるいはX-Yプロット上に表示され、各計算式の評価や欠落した特性値の穴埋めなどに活用できる。

3. ユーザデータの登録

INTERGLAD愛用者が独自に保有しているユーザデータを、INTERGLADと同様の形式で登録することにより、INTERGLADデータ

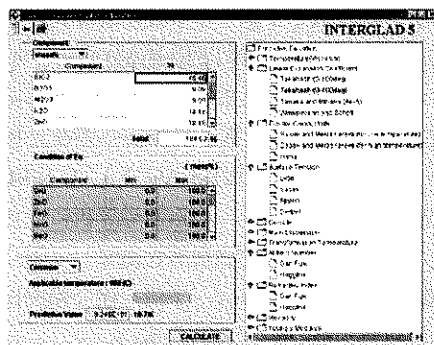


Fig. 2 Image for Calculation by an Additivity Equation

とユーザデータを一体化して活用することができる。

ユーザデータ入力画面を図3に示す。同左図は1ガラスごとに入力する場合の入力画面、右図は一括入力画面である。一括入力、エクセル等の表計算ソフトで保存中のデータをまとめて登録するときに便利である。

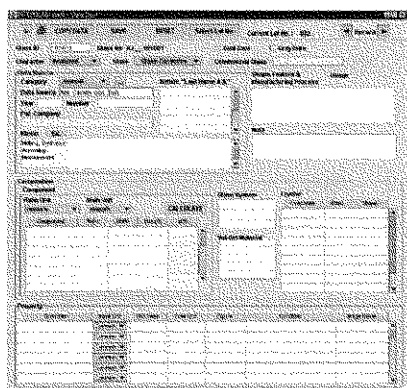
ユーザデータは、図4のINTERGLAD Ver.5のシステム構成に示されるように、各自のパソコンに保存され、各自のパソコンにインストールされたプログラムで演算が行われる。ユーザデータの登録機能と特性予測機能は、Internet経由でINTERGLADサーバに接続した状態でないと利用できない構成となっているが、データが外部に取り出されることはないため、Internetに接続されていてもセキュリティ上の心配はない。

4. ガラスデータの検索と解析

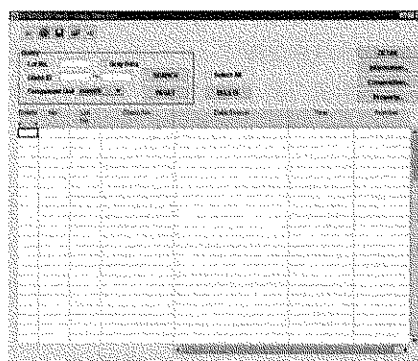
Ver.5では、抽出データの解析機能を新たに盛り込むとともに、収録データとデータ検索機能についても改善を図った。

4.1. 収録データとデータ検索機能の改善

INTERGLADの収録データはガラス組成と特性値を中心に構成され、情報源はデータブック、学術誌、特許、カタログに大別される。学



(a) Input Format on All Fields



(b) Input Format for Grouped Data

Fig. 3 Images for User's Data Input

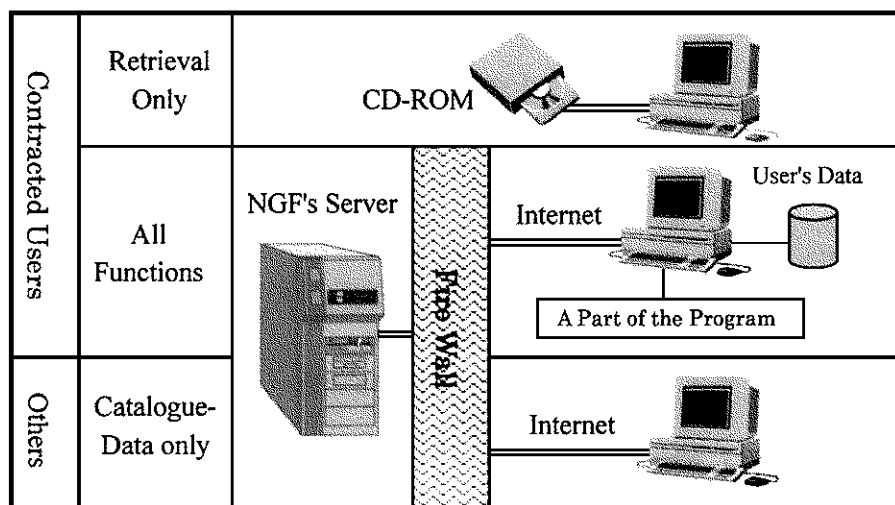


Fig. 4 System Formation of INTERGLAD Ver.5

術誌と特許に関しては、Ver.5 のリリース時点で 1999 年発行分までが収録される。1999～2001 年 3 月に実施された知的基盤整備プロジェクト⁵⁾の中で採取された NGF オリジナルデータは、リリース後の早い時期に収録する予定である。このような新データの追加補充だけでなく、今回は、次の新たな情報を加えた。

- 1) すべての学術誌データの全著者名
- 2) ガラス化範囲データ⁶⁾
- 3) 図データ (図 5(c))

スペクトル、特性式の図示など

- 4) ガラスの調製方法、熱処理条件、各特性の測定方法 (予定)
- 5) 結晶化ガラスの析出結晶、ゾルゲルガラスの出発原料 (予定)

また、今後、信頼性の高いデータを Gold-Data としてランク付けするとともに、若干残っている誤入力データや信頼性に欠けるデータを修正、削除して行く予定である。

検索機能については、主に次の変更を行った。

- 1) 市販ガラスを用いた研究成果の検索
(図 5(d)中の組成欄で「市販ガラス」を指定。その組成の組成欄展開も可能。周辺組成についても調査が可能となった)
- 2) 学術誌の全著者名の検索
- 3) 電気伝導度, 直流体積抵抗率および交流体積抵抗率の一括検索 (3 特性のうちの 1 つを指定すれば欠落部分の代替データが換算されて表示)
- 4) 雑分類扱いデータの特性細分化による救済
- 5) 各種のヘルプ画面 (吹出しヘルプ, 利用マニュアル, 用語・測定方法の解説)。
- 6) 検索条件の保存, プリントアウト

- 7) その他 (検索条件指定時の数値データ限定, 汎用成分名 (R_2O , RO 等), 結晶化ガラスの析出結晶, ゼルゲルガラスの出発原料名による検索等が可能に)

4.2. 抽出データの解析機能

階層化された検索キーワード (1500 以上) をもとに図 5(d)の Query 画面で検索を実行すると, 抽出されたデータが図 5(e)のリスト画面に表示される。このリスト画面の機能は旧バージョンと大きく異なり, 希望項目を指定すれば, はほぼすべての情報を画面上に表示させることができる。その他, 次の機能が盛り込まれている。

- 1) X-Y プロット (図 5(f))

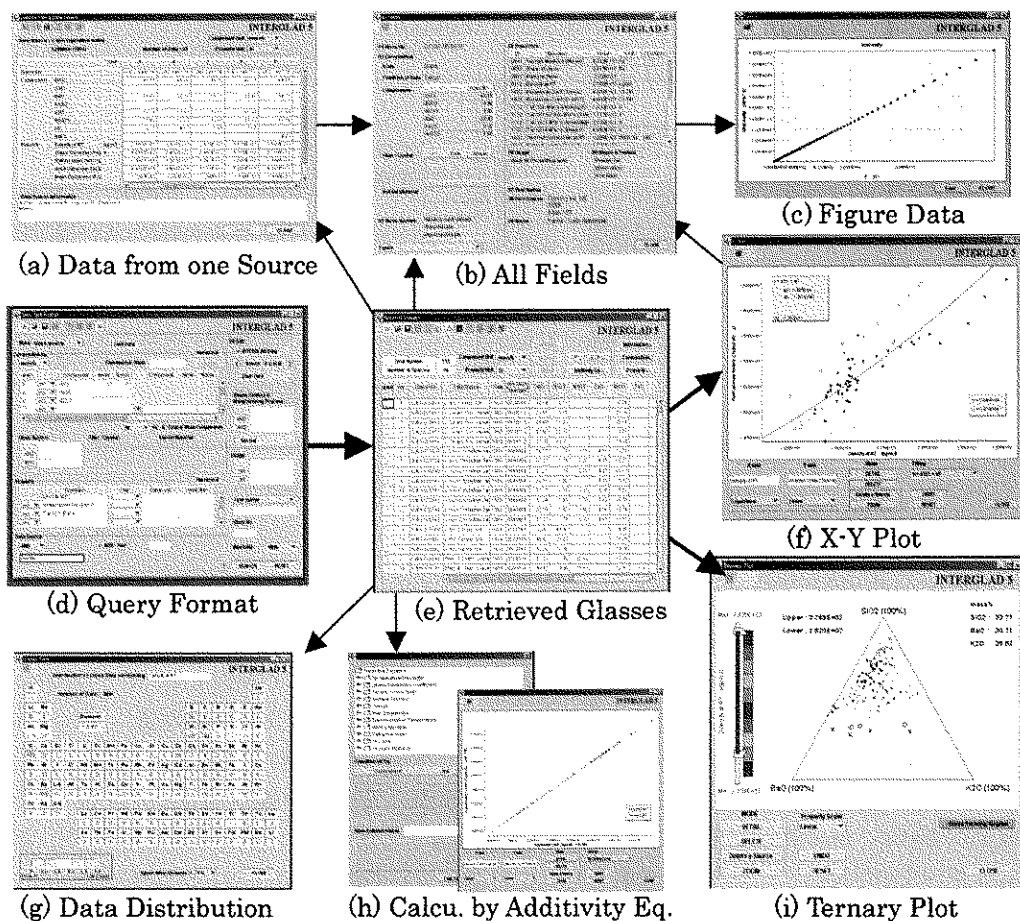


Fig. 5 Images for Retrieval and Data-Analysis

X 軸, Y 軸は, 組成・特性を任意に指定。軸のスケール変換, カーブフィッティング, 拡大表示, 各プロットの詳細データ表示も可能。

2) 三成分系の特性値プロット (図 5(i))

三角図上のプロットが特性値の大小に応じて色分け表示。プロット値範囲の限定, 拡大表示, 各プロットの詳細データ表示等も可能。ガラス化範囲データとも連動。

3) データ分布の表示 (図 5(g))

抽出したガラス群の元素別出現頻度を, 周期表上に表示。多い組成系, 微量添加成分, 少ない成分系などの把握が可能。

4) 組成・特性の列同士の四則演算

四則演算の繰り返し, 演算結果の X-Y プロット・三角図表示も可能。

5) 全抽出ガラスの計算式による特性予測 (図 5(h)) (X-Y プロット・三角図表示も可能)

6) 組成値および特性値の単位変換。

7) リスト上の列のソート, 列・行の削除

8) 条件付き特性値の識別表示

9) 同一出典リスト画面 (図 5(a)) あるいは詳細画面 (同図(b)) の呼び出し

5. INTERGLAD Ver.5 のシステム構成

図 4 に示したように, 新バージョンは旧バージョンと同様, データ更新が容易な Internet 版を主体に運営する。Ver.4 と異なる点は, 特性予測・解析機能の付加に伴う動作速度の低下を回避するために, プログラムの一部を予め各ユーザのパソコンにインストールする点がある。INTERGLAD の利用は, システムの維持更新のため登録者に限定しているが, カタログデータ (4 千件) の単なる検索については, ホームページ <http://www.ngf.or.jp> から登録者以外でもアクセスできる。

6. おわりに

以上, 格段に改善された INTERGLAD 新バージョンの諸機能について概要を紹介した。Ver.5 が, ガラスの効率的な研究開発に少しでも役立つことを期待したい。

今回の開発は, NGF 内に組織された知的基盤整備推進委員会 (委員長: 曾我直弘 京都大学名誉教授) とデータベース活用委員会 (委員長: 安井 至 東京大学教授) によって 2000 年 6 月から 2001 年 3 月にかけて推進された⁵⁾。アンケート調査やベータ版の評価テストなど INTERGLAD 愛用者の協力も得て, 各委員会の意見を反映させながら, 委託先の富士通 (株) と事務局が実作業に当たった。富士通開発陣は, 事務局側の仔細で際限のない要求に, 終始誠意を持って対応してくれた。可能な限りの内容を盛り込んだつもりであるが, 多数の積み残しもある。今後, 折を見て改善したい。

経済産業省を始め大学・企業の関係者の方々, 富士通の松崎氏, 栗田・大谷両女史らを始めとする開発陣ならびに 1 年間応援を頂いた鈴木由郎氏の諸氏に深く感謝いたします。

参考文献

- 1) H. Satha, et al., Proc. Int. Sym. Glass Problems, ICG, (1996), 193.
- 2) A. A. Appen: The Chemistry of Glass, Izd. Chimia, Leningrad, (1970).
- 3) A. Makishima and J. D. Mackenzie: J. Non-Cryst. Solids, 12 (1973), 35.
- 4) I. Yasui and F. Utsuno, Am. Ceram. Soc. Bull., 72 (1993), 65.
- 5) NGF, ニューガラスの設計に資するデータベース構築, 2000 年 3 月および 2001 年 3 月.
- 6) 今岡ほか, 東大生研報告, 6 (1957) 127; 18 (1968) 241; 19 (1969) 161 など