

ニューガラスの設計に資するデータベース構築

—知的基盤整備委託による INTERGLAD の更新—

独立行政法人 産業技術総合研究所理事

曾我 直弘

Reconstruction of Data-base for new glass design —upgrade of existing INTERGLAD—

Naohiro Soga

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

1. はじめに

(注)ニューガラスフォーラムでは平成3年にガラス組成・物性のデータベース「INTERGLAD」を独自に開発し、国内外のガラス研究者に提供してきた。しかし、このデータベースに含まれるデータは、研究文献や実用ガラスとして公表された組成・物性データから収録されたために、そのデータ数は16万件と多いものの、新規な機能を持つニューガラスの設計や開発に有用なデータは限られており、さらに収録されていないガラスの物性推定などに利用できるユーザー支援システムを装備していなかったため、新規ガラスの探索のためのデータベースとして十分に活用されてこなかった。INTERGLADと同様に公表されたデータを収録したガラス関連のデータベースとして米国の企業が出しているSciGlassがあるが、INTERGLADよりも後発であるにもかかわらず初心者でも使えるソフト面が充実しているために、世界中で

数多く使われている。

ガラスの基礎研究や応用研究において、わが国は世界のトップを走っているといつてよからう。この国際的産業競争力を維持するためにも、また科学技術における国際貢献のためにも、その知的基盤、つまりわが国として先鞭をつけたINTERGLADの充実が不可欠である。そこで、(注)ニューガラスフォーラムでは、平成10年度補正予算で即効的知的基盤整備調査の委託を受け、情報通信分野等に向けたニューガラスの開発に重要と考えられた約150組成のガラスを選び、各種物性の測定を行うとともに、大学等の研究機関にある未収録のデータの集積を行う形でINTERGLADのデータの補充、整備を行った。

INTERGLADがさらに有効に利用され、国際的にも貢献できる形とするためには、より多くの基盤的なガラスに関するデータを充実させるとともに、システムとして幅広く活用できるユーザー支援ソフトを装備する必要がある。そこで、平成10年度に引き続き平成11年度補正予算で材料関連知的基盤整備「ニューガラスの設計に資するデータベース構築」の委託を受

け、強力なデータベースの構築に取り組み、平成12年度末に初期の目標をほぼ達成できた。ここではこれらの知的基盤整備について概説することにする。

2. 調査研究実施体制と実施方法

この調査研究を適正かつ円滑に推進するために、ニューガラスフォーラム内に学識経験者とガラス専門家からなる知的基盤整備推進委員会（委員長：曾我直弘滋賀県立大学教授：当時）を設置し、その下に整備委員会、DB活用委員会、調査委員会を設けた。

整備委員会（委員長：南努大阪府立大学教授）では、データベースに取り込むガラス組成の選択と分析、物性データの測定を担当した。データベースにこれまで収録されている多くのガラスの化学組成はバッチ組成から計算されており、実際の組成からずれているものも少なくない。さらに、各種の物性の測定に使われた試料が異なるために物性の相関性が曖昧となりがちである。そこで、本調査研究では、熔融後のガラスブロックについて化学分析を行うとともに、同一のブロックから物性測定用試料を切り出して各種の測定を行うこととした。

DB活用委員会（委員長：安井至東京大学教授）では、INTERGLADのデータベースを利用するための解析・設計支援システムを立案、検討した。目標として、INTERGLADを専門家のみならずガラス研究の初心者を含めた広い層のガラス研究者が使えるようにシステム開発を行ってINTERGLADの使い勝手の向上を図ることとした。これは、SciGlassに較べてINTERGLADは検索機能のみからなり、データの解析、データ利用によるガラス組成設計、グラフ化等の応用面については利用者が各自のソフトを用いて行わなくてはならなかったことへの反省からである。

調査委員会（委員長：牧島亮男東京大学教授：当時）では、大学・研究所の未収録博士論

文の調査収集を行い、基盤データを増加させるための調査を行うこととし、平成10年度に引き続き新規なガラスデータの取得に取り組んだ。

3. 新規ガラスの調製と物性測定データの取得

これまでに公表されていない新しい組成のガラスを作製して、各種の物性を測定を行い、ガラス組成-物性データを取得した。先端産業分野のガラスとしてアルミノシリケートガラス、ボロシリケートガラス、リン酸塩系ガラス、シリカガラス、カルコゲナイドガラス、ハライドガラス、ゾルゲルガラス等が着目されているが、シリカガラス、カルコゲナイドガラス、ハライドガラス等の特殊なガラスは試料作製のために新規装置の導入が必要であったため、今回は対象から除外して2年間で450あまりの組成を選定した。

製作したガラスについて、成分分析、ガラス製作条件、ガラス化状態のデータ取得を行った後、次の物性の測定を行った。

- 機械的・物理的特性：密度、ヤング率、剛性率、ポアソン比、硬度、破壊靱性
- 電気的・磁気的特性：誘電率、誘電損失、体積抵抗率、磁化率
- 化学的・生化学的特性：耐水性、耐酸性、耐アルカリ性、生体適合性
- 熱的特性：熱膨張係数・ガラス転移温度、歪み点、徐冷点、軟化点、粘性、結晶化開始温度、熱伝導度、比熱、放射率
- 光学的特性：屈折率、分散定数、光吸収係数、紫外線吸収端、光磁気特性（ベルデ定数）、蛍光寿命
- その他：比表面積・細孔径分布（ゾルゲルガラス）、均質度

なお、ガラス作製は3社、試験片加工は3社、成分分析は3社、物性測定は5大学、1研究所、10社で実施された。得られた新規ガラスデータとしては、平成10年度は組成数で

150 件，データ数で約 8500 件，平成 11 年度は組成数で 315 件，データ数で約 15000 件である。

4. ガラスデータベース用解析・設計支援システムの開発

INTERGLAD をニューガラスの研究開発において有効に使うための解析・設計支援システム作りは，安井および牧島の支援システムをもとに富士通㈱が担当した。検索機能のみからなる従来の INTERGLAD に加えられた主な新機能は，データの重回帰分析，各種の計算式による物性予測・組成設計機能，ガラス化範囲解析・判定機能，データ密度解析機能，結晶化ガラス・ゾルゲルガラス検索機能，データカスタマイズ機能，図示等の各種可視化機能等である。

今回の解析・設計支援システムの開発により，従来に比べて格段に使いやすい新しいガラスデータベース INTERGLAD が構築された。新システムは従来と同様にインターネットを利用する方式が主体であり，ユーザーがプログラムを CD-ROM からパソコンにインストールし，ニューガラスフォーラムの INTERGLAD 用サーバに接続して利用する形である。処理速度の問題を解消するため，処理プログラムはクライアント側のパソコンにインストールし，動作するように設計されている。また，ユーザーはアップデートされたアプリケーションをサーバからダウンロードして利用できるようにした。インターネット版の他に，サーバに接続せず，CD-ROM 起動で利用する検索機能を主体とした CD-ROM 版も開発されており，今後，大学，研究所，企業のガラス専門家はもとより，幅広い層のユーザーへの INTERGLAD の普及が促進されるものと期待される。

5. 大学・研究所等所有の基盤データ収集と整備

博士論文に記載されているデータの中には報文として公表されていないものも数多くある。そこで，2 年度にわたり未収録博士論文の調査を行い，基盤データに取り込むことを試みた。その結果，平成 10 年度には，1995 年～1999 年に公表された国内のガラス関係博士論文 55 件，ガラス組成数として約 1300 件を収録したが，平成 11 年度では 1991 年～1994 年および 2000 年の論文及び 1995 年～1999 年で収録洩れの博士論文を含めて 64 件，ガラス組成数として約 940 件，データ数として約 8400 件を収録できた。これらにより，過去 10 年間の国内におけるガラス関係の博士論文の大部分を網羅することができたが，これらのデータのうち，数値データはそのまま，図データについては図から数値を読み取り数値データとして INTERGLAD に収録し，データベースとしてガラス研究者に提供する予定となっている。

6. おわりに

上述のように，本調査研究では，新しいガラスを中心としたデータの収集とシステムの開発を行ったが，本事業の特徴は産官学における研究開発においてそれぞれが持つ強みを生かす形でガラス関係者が総力を挙げて連携して取り組み，目標どおりの成果を得ることができたことにある。得られた新規ガラスデータベース INTERGLAD の有用性ととも，産官学連携の基盤が出来たことに大きな意義があり，今後のニューガラスの研究開発に大いに貢献することが期待される。

上述のように，文献から収録するデータベースでは，同じ組成で示されていても測定に供されたガラスの出所が異なるため，物性の相互関連を調べるためのデータとして適当でないものも少なくない。さらに，組成や履歴が同一の試

料について各種物性が提示されているものは極めて少ない。平成10年度および11年度の知的基盤整備事業で行ってきたように組成や履歴のわかった同一試料についての各種物性データは極めて重要で貴重であり、ニューガラスの技術開発をするためのデータ群として他と比較できない価値を有している。国際的に通用する質の高いデータベースの地位を確保するためには、このような形でのデータの収録を今後も継続して行うことが必要である。

ガラスデータベースで最も重要なものは収録するガラスデータの質と数である。新規ガラスデータの収集方法として、文献からの収録以外に、ガラス製作・物性測定及び博士論文調査を行ってきたが、さらに海外データベースとの相互協力によるデータの補充、各種プロジェクトのデータ収集等、新規データの収集方法を開拓することが必要であり、そのためにも本事業で行ったように産学官、あるいは省庁の枠を外して取り組むことが不可欠であろう。

データが揃っていても、それらを解析し利用しているシステムが整備されていない限り研究開発の助けにならない。従来のINTERGLADでは検索したデータの解析、ガラス設計、グラフ化等のデータ利用面の支援システムを含まずに、利用者のスキルに依存していたが、今回のデータ解析、設計支援システムの開発によってこれらの問題が解決し、格段に使いやすくなっ

た。データベースシステムの運用において、新規データの追加に加えてシステムの更新・バージョンアップが不可欠であり、これを怠ると直ちに陳腐化し、無用なものになってしまう。今後、継続してシステムのバージョンアップを行っていくことが必要と考えられる。信頼性の高いデータを基礎としたファクトデータベースの構築には、人的と資源的の両面の支援が極めて重要な課題である。今回のガラスデータベースの整備によって、データベースINTERGLADが大幅に改善されたことを喜ぶと共に、その継続を期待するものである。

最後に、本研究を実施するにあたり、委員会委員の他に、下記の大学、研究所、企業の多くの方々に協力を頂いた。紙面を借りてお礼を申し上げます。滋賀県立大学、東京大学（生産技術研究所および工学系研究科）、大阪府立大学、名古屋工業大学、大阪工業技術研究所、旭硝子㈱、日本電気硝子㈱、HOYA㈱、日本板硝子㈱、日本板硝子テクノリサーチ㈱、セントラル硝子㈱、㈱ニコン、日立協和エンジニアリング㈱、住友金属テクノロジー㈱、㈱東レリサーチセンター、住ベテクノリサーチ㈱、旭テクノグラス㈱、㈱赤川硬質硝子工業所、栄信工業㈱、(有)コーケン、水戸旭ファイン硝子㈱、㈱クリスタル光学、富士通㈱、富士通サポート & サービス㈱、㈱富士通システムソリューションズ。