

ガラスデータベース INTERGLAD の利用例の紹介 (その 3)

(一社) ニューガラスフォーラム

丸山 勉, 鈴木 恵一郎

Guidance of glass database system: INTERGLAD from examples of use-3

Tsutomu Maruyama, Keiichiro Suzuki

New Glass Forum

1. はじめに

前号まで 2 回に亘りデータベースとしての検索と、検索結果を可視化しながら解析する機能を紹介した。本号からは、或るガラス組成からその特性を予測する、或る特性を実現するガラス組成を設計する、という機能について利用例を紹介しながら説明する。

これらの機能はガラスの構造が大きく変わらない範囲であれば、そのガラスの特性の多くが組成から推算できるという、加成性が前提となっている。したがって、類似組成のガラスのデータをより多く集める程精度が向上すると期待されるため、利用者の要望により開発・整備が進められ、INTERGLAD に加えられた機能で、INTERGLAD の大きな特徴となっている。関心のある方はマニュアル第 5 章に掲載している利用例も参考に、是非活用して頂きたい。

2. 特性の予測

各種ガラス系の特性を予測する特性計算式が各々の特性に対して提案されており、これらの

既成の予測式を利用する例と、データベースから対象のガラス系のデータを集めて自ら予測式を作成して予測を行う例を紹介する。また、それらの予測結果の比較にも触れる。

2-1. 特性計算式：既成の予測式を利用する

INTERGLAD で利用できる特性計算式とその適用範囲はマニュアルの第 6 章で確認できる。INTERGLAD のメイン画面の特性予測 (Property Prediction) - 特性予測式による特性予測 から入った画面の右側に特性別に分類されて表示されている。(計 14 特性 51 式)

<例> ホウケイ酸塩ガラスの特性予測。(利用例 2.1)

ケイ酸塩ガラスの特性の予測式として提案されている Appen の式を利用する。

<対象ガラス組成> ホウケイ酸塩ガラス
{SiO₂ 40%, B₂O₃ 30%, Al₂O₃ 10%, Na₂O 10%, BaO 10% (mass%)}

①密度の予測：

特性計算式選択欄で Density を展開し、Appen (Silicate) を選択して、[Composition] 欄に必要な成分を選択表示し、数値を入力する。(単位は mass%) [Calculate] ボタンをクリックすると [Predictive Value] 欄に予測値 2.458 g/cm³ が得られる。

なお、左中段の Condition of Equation に、選択した計算式の条件が現われるため、対象が

〒169-0073 東京都新宿区百人町 3-21-16

日本ガラス工業センター 2 階

TEL 03-6279-2605

FAX 03-5389-5003

E-mail: tsutomu-maruyama@ngf.or.jp

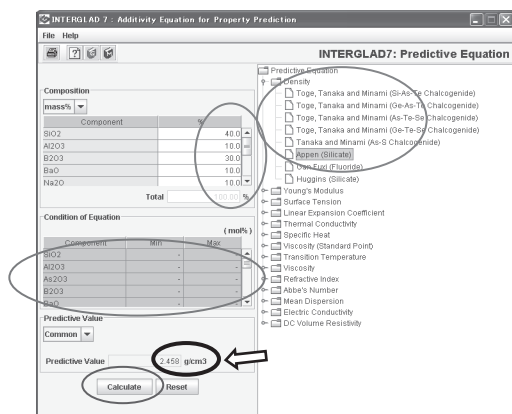


図1 特性計算式による密度の予測

ラスの組成成分をすべて含むかどうかを計算前に確認できる。また、入力した組成値が計算式の組成条件を満たしていない場合は[Calculate]操作によりアラームが表示されるので、入力値を変更して再度計算を行う。

②熱膨張係数の予測

続いてこのガラスの熱膨張係数の予測を行った結果が図2となる。

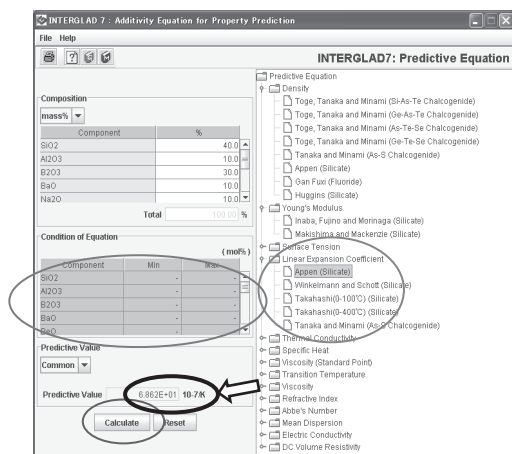


図2 特性計算式による熱膨張係数の予測

組成欄はそのままとし、特性予測式欄の Linear Expansion Coefficient を展開して Appen (Silicate) を選択, [Calculate] で予測値 $6.862 \times 10^{-6}/K$ が得られる。

このように対象となるガラス系に対応する特性計算式がある場合は、各成分比を変えた時の

特性の変化を容易に予測することが可能だが、対応する予測式が複数ある場合、異なる結果となる場合もある。実際にデータベースに収録されているファクトデータと予測値を比較した例を次に紹介する。

2-2. ファクトデータと特性計算式による予測値の比較—フッ化物ガラスの屈折率

フッ化物ガラスの屈折率を例に、データベースの実測値と特性計算式 (Gan Fuxi 式) による予測値を比較する。(利用例 2.2) 対象のガラス系のデータを集め、その中で予測式の適用条件を満たす組成のガラスについて予測値を算出する。

①データ検索と予測値算出

<検索>

検索条件：ガラス系：Fluoride, 特性：Refractive Index 589.3 nm D-line, 出典：特許を除外。(Gan Fuxi 式が D-line の屈折率の予測式のため, Refractive Index 589.3 nm D-line を選択。)

検索結果：649 件が抽出された。(図3)

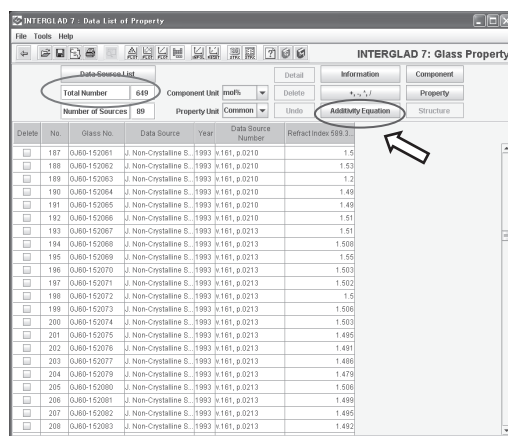


図3 Fluoride ガラスの検索結果

<特性計算式による予測値の算出>

図3の検索結果画面の[Additives Equation]ボタンから図4の特性計算式選択小画面を表示し, Refractive Index の Gan Fuxi(Fluoride) 式を選択する。(本例では) 不純物の合計最大値を 0.5 mass% に設定して, [Calcu-

late] ボタンをクリックする。

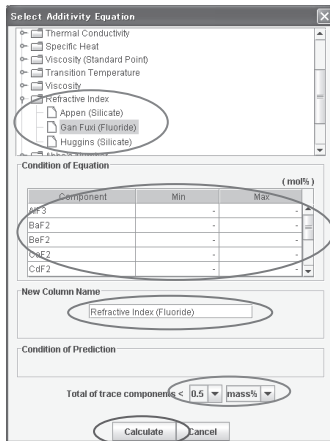


図4 特性計算式選択小画面

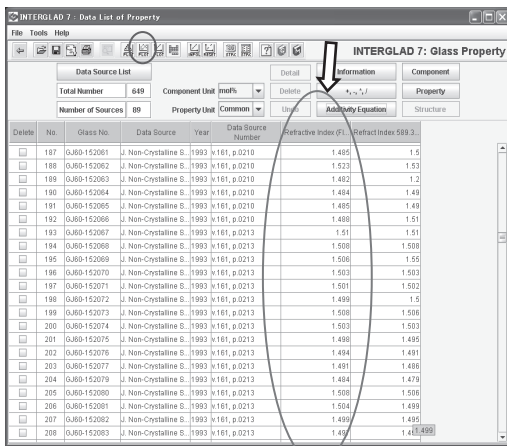


図5 特性予測値の表示

算出された予測値が図5のように検索結果画面内に現れる。画面上に組成情報などは表示されていないが、各々のガラスデータの持っている詳細情報を自動的に判断して用いた予測式の適用範囲内にあるガラスについて算出された結果が表示されている。

②ファクトデータと予測値の比較

図5内の各行で個別に比較できるが、XYプロットで、X軸を実測値の Refractive Index 589.3 nm D、Y軸を予測値の Refractive Index (Fluoride) として可視化したのが図6である。

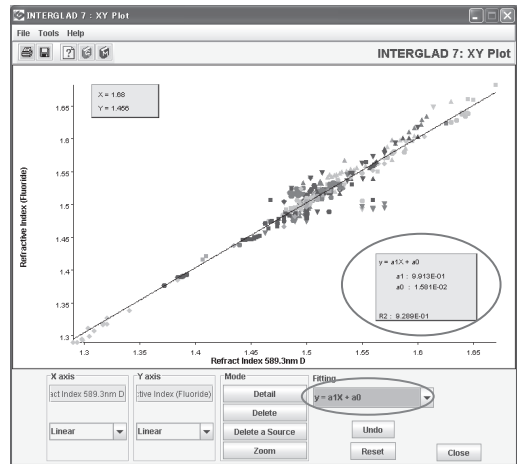


図6 実測値と予測値の比較

実測値と予測値がかなりよく一致していることがわかる。(図では [Fitting] プルダウンメニューから、Fitting カーブも表示させた。)

2-2. 予測式を作成して予測を行う。(重回帰分析による予測)

予測式を作成する基本フローは、

1. 対象のガラス系の特性データを集める。
2. 重回帰分析を行い予測式：重回帰式を求める。
3. 作成した予測式の検証を行い、必要な見直しを行う。

という3ステップとなる。

ガラス特性が組成からみて(ある範囲では)加成性があることと、特性と組成についてのファクトデータが沢山集められることを前提に、特性と組成の関係式を導き出すのに適した方法として重回帰分析を行う。実際には、INTERGLADには、加成性が見られない、構造が緩やかに変化する組成範囲にも適用できるように「多次式」重回帰分析を組込んでいる。

最初は手順がやや難しく感じられるかもしれないので、手順に従って操作ガイドが表示される設定として、重回帰分析にトライされることをお勧めする。

紙幅の関係から重回帰分析による予測と利用例(3.1以降)は次号で紹介する。