

ガラスデータベース INTERGLAD の利用例の紹介 (その 5)

(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-5

Tsutomu Maruyama, Keiichiro Suzuki
New Glass Forum

1. はじめに

ガラス組成と特性のデータベースから重回帰分析でその特性の予測式を作成し、或る組成の特性値の予測と、逆に或る特性値を得るための組成設計を行う例を前号で紹介した。

本号ではまず所望の2つの特性を得るガラス組成の最適化の例を紹介する。

次に予測式が前提としている単調な加成性が成立せず、組成の1次関数で予測の精度が得られない場合に多次の予測式を作成して精度を上げる例を紹介する。これはガラスの構造が組成により緩やかに変化するような場合であり、そのような構造情報の報告が近年増えている。

そして最後に INTERGLAD に取込んでいる構造情報の検索と解析の例を紹介する。

2. 組成最適化-2つの特性を特定 (利用例 3.6)

熱膨張係数と屈折率が或る特定値となるソーダアルミノケイ酸塩ガラスの組成を設計する例を紹介する。各々の予測式を重回帰分析で作成し、組成最適化画面で2つの特性の目標値を入

〒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

れ、各成分の重回帰係数の大きさにより成分量を変えて組成の最適化を行う。

2-1. 特性予測式の作成

出来るだけ広く組成-特性のデータを集めるために検索条件をどう設定するかがポイントとなる。重回帰分析検索画面(図1)で、組成の成分範囲:①、特性条件の設定:②を見て頂きたい。実際には本例以外の設定も可能であり、条件を変えて試行されるのが望ましい。

検索結果画面から [Component] ボタンをクリックして成分項選択(1成分項選択)画面を開き、デフォルト条件のまま [OK] とする。成分項選択確認 [Question] ダイアログで1成分項のみであることを確認し、[OK] ボタンをクリックして重回帰分析検索結果画面に戻る。

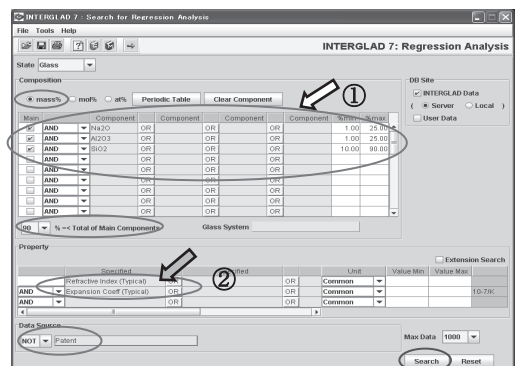


図1 重回帰分析のための検索条件

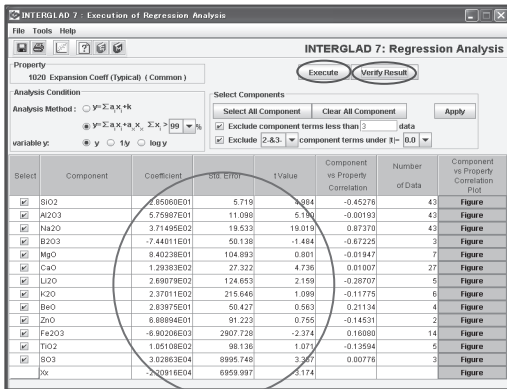


図2 重回帰分析実行の結果/屈折率

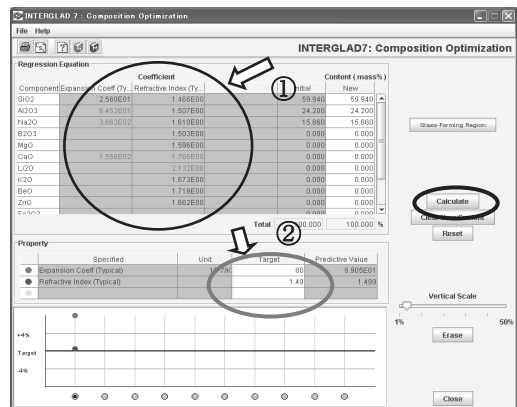


図4 組成最適化画面-2 特性

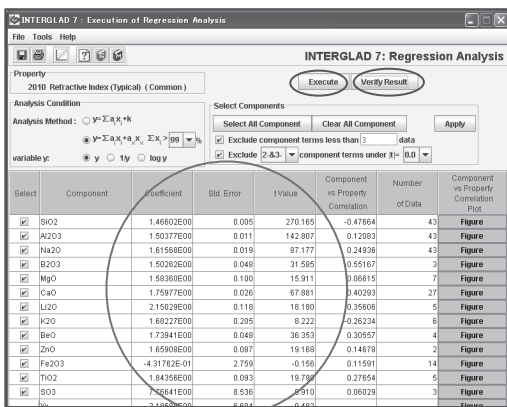


図3 重回帰分析実行の結果/熱膨張係数

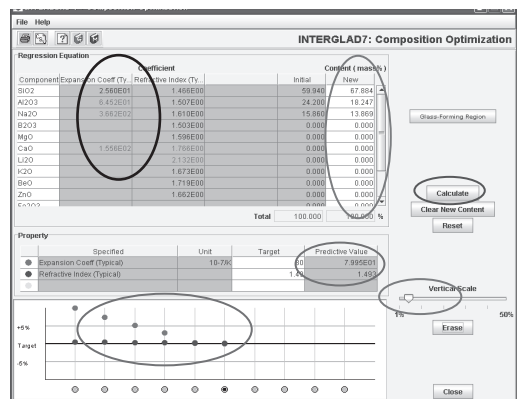


図5 組成最適化の操作と結果

次に [Analyze] ボタンをクリックすると、屈折率および熱膨張係数の重回帰分析実行画面が2つ重なって現われる。これら2つの画面から2特性の各々の予測式を個別に作成する。

作成順はいずれからでも良いが、例ではまず屈折率について重回帰を行い ([Execute])、寄与率で検証し、|t| 値により2成分を外して再度重回帰を行った結果の入った図2の重回帰分析実行画面を得ている。この結果画面をそのままにして次に熱膨張係数の重回帰分析実行画面から重回帰を行い、図3の結果画面を得る。

2-2. 組成最適化

図2, 3で得られた予測式により、組成最適化を行う。重回帰分析検索結果画面に戻り、目標特性に近いガラスを選択し、組成最適化アイコン [COMP] をクリックすると、組成最適化画面：図4が開く。図2, 3の結果である2特

性に対する各成分の重回帰係数：①と、2特性の目標値の入力欄：②が現れる。目標値を入力し、[Calculate]により現れる予測値と目標値との差を見易くした下部のグラフを見ながら、各成分の各特性への影響（係数）を考慮して成分量を少しずつ変えて目標値に近づける：図5。

本例では3成分のみで最適化を進めているが、図中のCaOを微量加えても良い。

3. 多次（3次）式による予測と設計 (利用例 3.5 及び 3.7)

重回帰分析により得られた予測式の検証を寄与率で行い、INTERGLADでは0.8以上であることを推奨しているが、1次関数(1成分項)での予測式で寄与率が0.8以下の場合、多次式で予測することにより寄与率が上がる場合がある。INTERGLADには3次式まで作成できる

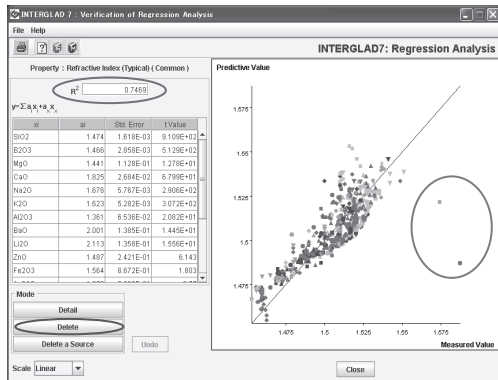


図6 1次の予測式の検証：寄与率

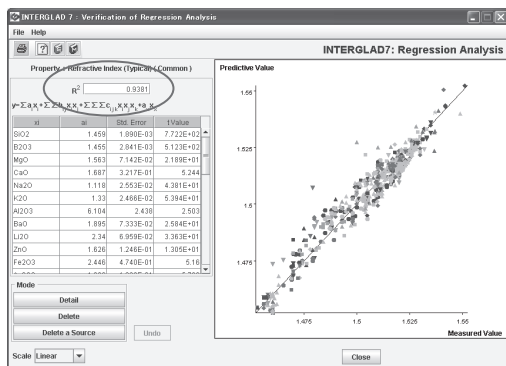


図7 3次の予測式の検証：寄与率

機能を組込んでいる。しかし、次数を上げると成分項が大きく増え、必要以上に高い次数にすると精度が落ちる場合もある。そこで、 $|t|$ 値による各成分項の評価を行って成分項を徐々に減らし、都度予測式を作成して検証しながら進めるのが望ましい。

3-1. 多次 (3次) 式による特性予測

利用例 3.5 は、ホウケイ酸塩ガラスの屈折率の予測を3次の予測式を作成して行う例である。成分項選択の画面で1成分項のみでOKとして重回帰分析を行って予測式を検証すると(図6)寄与率が0.8以下となり、式から大きく外れるデータを除去しても寄与率が上がらない。そのため、検索結果画面まで戻り、成分項選択の画面の [Next] により3成分項まで選択して重回帰分析を行った結果、図7のように寄与率が0.9以上の予測式が得られた。この時の成分項は図8のように1成分項18に2成分

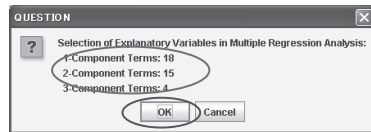


図8 予測式に使用する成分項数

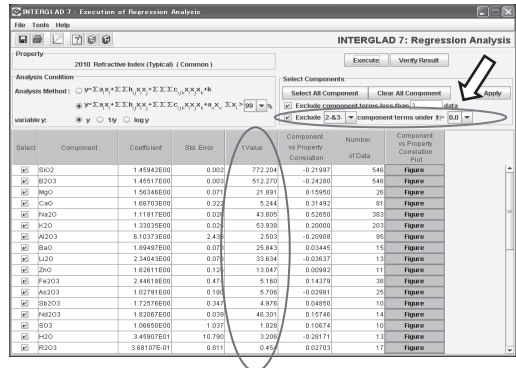


図9 3次の重回帰分析結果

項が15、3成分項が4加わり、成分項が2倍以上となっている。

次に重回帰分析実行画面：図9の右上の [Select Components] 欄内の内 $|t|$ の最小値設定欄で、 $|t|$ 値の小さい成分項の除去・重回帰分析実行を繰り返す。この際、まず2,3成分項の $|t|$ 値の小さい成分項の除去から始め、重回帰分析を都度行うと $|t|$ 値が変化する(影響度が変わる)ため、その結果画面で再び $|t|$ 値の小さい成分項の除去を行う。手順は利用例 3.6 を確認して頂きたい。全ての $|t|$ 値が2より大きくなった重回帰分析実行結果から(検索画面に戻り)、[PLOP] アイコンをクリックして特性予測を行う。

3-2. 多次 (3次) 式による組成最適化

利用例 3.7 はヤング率と屈折点が所望の値となるようなホウケイ酸塩ガラスの組成設計を、3次の重回帰分析で各々の特性の予測式を作成して行った例である。

検索条件の設定、1成分項による重回帰分析とその検証、3次式 (3成分項) による重回帰分析と検証、という一連のフローは利用例 3.6, 3.5 と同様である。

本例では成分項の数が多いため、 $|t|$ 値によ

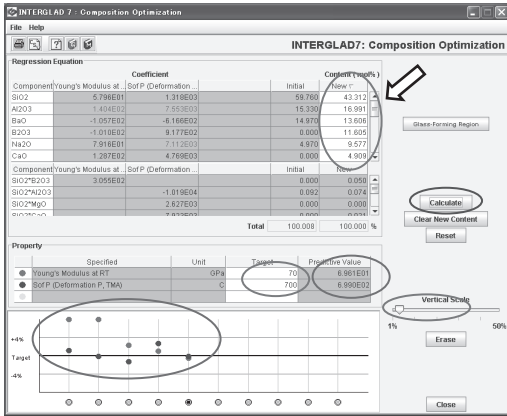


図 10 組成最適化：例 3.7

る成分項の絞り込みを例 3.5 よりも少しずつ、かつ繰り返して進め、その都度の |t| 値の変化に対応させることによって、有意な成分項を削除しない様留意して進めている。

最後の組成最適化では、成分項が多いため、図 10 のように必要な成分のみとして成分量を徐々に変えて最適化を行う。

本例では 3 次の予測式を作成したが、目標組成系が明白な場合、特性と各成分量との関係を X-Y プロット等で解析して、特性の変化する傾向が組成範囲で分けられるようであれば、その範囲内での 1 次の予測式を作成して最適化を図ることも可能である。

4. 構造データの検索と解析

分析機器・手法の進展によりガラスの構造情報の報告が増えており、INTERGLAD への収録を進めているが、特性情報に比べると収録数はまだ少なく、系統的な解析にはデータが少ない場合がある。しかし、現在、収録数も 1 万前後となり、前述のように、種々特性の解析の際に非常に有用な情報が得られる場合があるため、活用頂きたい。

利用例では構造情報の概要の紹介後、4 つの検索 - 解析例を取上げている。

4-1. 構造情報の概要 (利用例 4.1)

或るガラス系についてどのような構造情報が

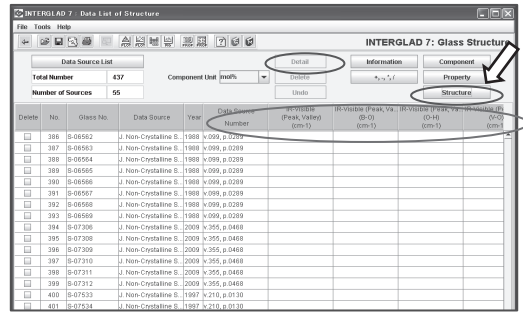


図 11 構造データ検索結果画面

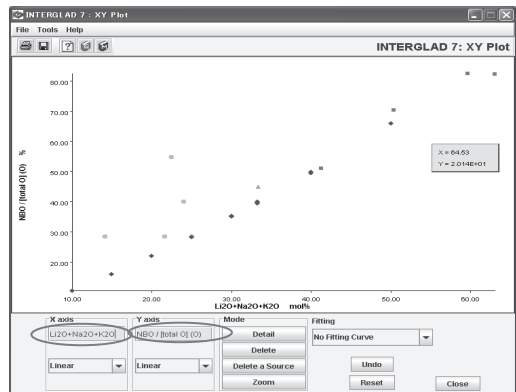


図 12 アルカリ成分量と非架橋酸素

収録されているかを調べるのが本例である。ガラス系のみを指定して検索し、検索結果画面の右上の [Structure] ボタンをクリックし、[Select Structure] 小画面の [Select All] により収録されている情報が表示される (図 11)。

個々のガラスの実際の収録データの詳細は特性検索と同様に [Detail] で確認できる。

4-2. 検索と解析 (利用例 4.2~4.5)

特性情報の場合とほぼ同様な機能・操作となっており、架橋酸素、配位数などと組成や特性との関係を検索・解析できる。各例で確認して頂きたい。図 12 は例 4.3 の解析例のアルカリ成分量と非架橋酸素の割合の相関である。

以上、今回まで 5 回に分けて利用例を概説したが、詳細は当フォーラムの HP 或いはマニュアルの第 5 章を参照して頂きたい。