

ガラス設計とエキスパートシステム

東京大学工学部材料学科 牧島 亮男

Materials design of glass and expert system

Akio Makishima

Department of Materials Science, Faculty of Engineering, The University of Tokyo

1. はじめに

窓ガラス、ピンガラスとは異なった新しい機能を持つニューガラスが開発されはじめ、その一部は、ハイテク用新素材として役立っている。例えば、光ファイバー用ガラスはその一例であり、情報化社会をささえる重要な材料である。この光ファイバーのほかに、種々の新機能のニューガラスが開発されつつあるが、ニューガラスの組成と物性を従来のガラスよりも精密に制御し、所望の複数の精密な物性を持つものが必要となってきた。

新素材として注目されているセラミックスについての材料設計的研究は、経験に基づくデータを蓄積、利用する程度であり、セラミックス系新物質の創製には、材料設計的手法の確立が望まれている。ニューガラスの開発においても例外ではなく、経験とある程度ガラス組成の絞り込みの後に数多くの試行錯誤のうえにガラスの開発がおこなわれているのが実状であろう。このために、多くの労力と時間が必要であった。また、多くのいわゆるニューガラスは、複数のしかも高精度の物性値を持つものが要求される。このことは、所望のガラスを得るために、溶融条件などの設定と絡み合わせて考えると、問題の解決をより複雑にしている。

ニューガラスの開発に役立つように、(社)ニューガラスフォーラムが中心となり、DB (Data

Base) を構築し、CD-ROM 化して一般化した¹⁾。ガラスの場合に、数多くの組成とその性質が報告されており、国内外の特許、製品パンフレット、学術論文誌、本、より主に組成-物性データを中心に集積して整理して、入力したものである。約9万件データが入っており、1991年4月よりリリースされ始めた。国際性を考慮して、全て英文で画面表示され、“INTERGLAD”と命名された²⁾。ニューガラスの材料設計支援の際に使用される²⁾。このDBは、省力化、時間の節約等には寄与し、新材料の創製には直接結びつき難いと思われるが、ニューガラス開発の有力な支援となるであろう。

一方筆者らは、人工知能(AI, Artificial Intelligence)を利用したニューガラスの設計支援となるエキスパートシステム(ES, Expert System)を構築することを試みた。ここで言うAIとは、“人間の知能あるいは思考過程の分析を通して、それと類似の機能を機械的に実現することを目的とするもの”であり、エキスパートシステムとは、“その分野の専門家から獲得された専門知識を利用して推論を行い、十分に複雑な問題を専門家(エキスパート)と同程度の能力で解決を目標とする知的プログラム”を言う。このためには、問題領域における、信頼性の高い、大量の知識ベースとデータベースの構築が必要であり、また、AI言語のLISPで知的プログラムをおこなう専門家の協

力が不可欠である。ガラスの研究においては、各国においても数多くの経験則や新しい特性のガラスが報告されている。これらを集大成し、知識ベース化し、さらに知識表現化によりシステム化した³⁾。

本稿においてこれらのシステムを紹介する。ニューガラスの開発に有効利用され、重要な支援手法となることを期待する。

2. ガラスの材料設計と知識ベースのシステム化

一般にガラスは数多くの組成の酸化物から構成されており、構造は非晶質である。第一近似として、これら酸化物が均質に混ざり合った「巨大分子」と考えると、その性質は構成酸化物の加成により求められる。すなわち、ガラスの性質 P は次式で計算できる。

$$P = \sum P_i \times X_i$$

P_i : i 成分酸化物の性質の係数,

X_i : i 成分酸化物のモル分率,

この式により計算される性質の値は、経験によって求められた P_i の値を使用するので、あくまで第一近似の値であり、一般的な記述である。光学ガラスの性質の材料設計には、かなりこの式が使われている。著者らは、この加性式を始め、種々のガラスの性質のより複雑な計算式を集めて⁴⁻⁶⁾ 知識ベースとし、また、計算を実行するうえで必要な各酸化物についての数値をデータベース化した。これらのガラスに関する知識ベースとデータ

ベースを使い、AI(人工知能)ソフトのKBMSおよびESHELL(いずれも言語はLISP)を利用し、ニューガラスの開発(支援)のためのエキスパートシステムを作成した。実際にこのシステムを動かし、ディスプレイに表示した画面例をFig. 1~9に示す。

2.1 ガラス組成から物性の推論

ガラスの成分としては、周期律表にある約90種類の元素が関係するが、ここでは、酸化物ガラスにおいてよく使用される60種類の酸化物に注目し、Fig. 1に示すように表にしてある。これらの酸化物をマウスで任意に選択し、ガラスの成分を入力する。すると、選択した成分で高弾性率ガラスの成分比を計算し(Fig. 2)、算出したガラスについて、他の性質、例えばFig. 3に示すように、体積弾性率、剛性率、ポアソン比、密度、比弾性、原子充填度、熱膨張係数、屈折率、平均分散率、誘電率、1gあたりの価格(円、ドル)を計算し表示させる。また、この成分のガラスで成分比を別に入力すると、これらの10種類の物性と2種類の価格を再計算し、対話方式でガラスの組成の調整ができる。この際に、ガラス化の限界も知識ベースとして入れており、ガラスにならない成分割合を入力するとFig. 4のように、性質は計算されない。

2.2 物性から組成の推論

以上例とは逆に、複数の物性値、価格の値を有するガラス組成を選び出し、表示させることもで

右表の中から、ガラス材料として使う成分をマウスで選択してください。

Al ₂ O ₃	Y ₂ O ₃	SnO ₂	In ₂ O ₃
BeO	Ga ₂ O ₃	Ce ₂ O ₃	As ₂ O ₃
UO ₂	CrO ₃	SrO	Fe ₃ O ₄
WO ₃	La ₂ O ₃	GeO ₂	Co ₃ O ₄
MoO ₂	FeO	Nd ₂ O ₃	K ₂ O
ZrO ₂	NiO	Cr ₂ O ₃	Sb ₂ O ₅
MoO ₃	CaO	ZnO	Mn ₃ O ₄
MnO ₂	CuO	Fe ₂ O ₃	Sb ₂ O ₃
TiO ₂	SiO ₂	BaO	BiO
Sc ₂ O ₃	CoO	PbO ₂	Pb ₂ O
MgO	P ₂ O ₅	RuO ₂	PbO
ThO ₂	MnO	Na ₂ O	Bi ₂ O ₃
Li ₂ O	SeO ₂	Mn ₂ O ₃	Cu ₂ O
B ₂ O ₃	Nb ₂ O ₅	CdO	Cs ₂ O
Ta ₂ O ₅	As ₂ O ₅	TeO	Ag ₂ O

Fig. 1 A view illustrating examples of display of the present system. Components to Properties, Selection of Oxides.

きるシステムである。これが、大部分の読者が想像しているいわゆる材料設計であろう。Fig. 5のように物性値の推定をして、これを満足するガラス成分とその比率を Fig. 6 のように表示する。

2.3 限定成分条件での物性から組成の推論

これはより専門家の思考に近づけた推論例である。例えば、よく使用する成分をまず規定してしまい、この成分で所望の物性を持つ成分比を表示

<< ガラス材料設計支援エキスパートシステム >> Expert System for Materials Design of Glass

YOUNG率の最高値は
Youngs Modulus is :
1129.94 Kbar
YOUNG率は高いと思われます。

A l 2 O 3	28.725
Z r O 2	18.625
T i O 2	17.425
L i 2 O	15.125
S i O 2	20.1

モル比は右表のようになります

次の処理を指示して下さい。

モル比 重量比

再計算を行う 各物性値の表示 モル比を表示する 処理を終了する

Fig. 2 A view illustrating examples of display of the present system. Components to Properties, Determination of ratio of oxides by the speculation of the highest Young's modulus Value.

<< ガラス材料設計支援エキスパートシステム >> Expert System for Materials Design of Glass

YOUNG率の最高値は	体積弾性率	Bulk Modulus[Kbar]	784.024
Youngs Modulus is :	剛性率	Shear Modulus[Kbar]	476.141
1129.94 Kbar	ポアソン比	Poissons Ratio	2.61499F-01
YOUNG率は高いと思われます。	密度	Density[g/cm3]	3.10312
	比弾性	Specific Young Modulus[Kbar/g/cm3]	362.711
各物性値は右のようになります	原子充填度	Packing Density	0.58234
Other properties and costs are :	熱膨張係数	Thermal Exp. Coeff.[*10D-7/C]	15.9885
	屈折率	Refractive Index[nd]	1.76876
次の処理を指示して下さい。	平均分散率	Mean Dispersion[1/γ]	2018.27
	誘電率	Dielectric Constant[ε]	算出不可
	価格	Cost [¥/g]	2.7522
	価格	Cost [\$/g]	2.2935F-02

再計算を行う 各物性値の表示 モル比を表示する 処理を終了する

Fig. 3 A view illustrating examples of display of the present system. Components to Properties, Determination of other properties of glass composition of Fig. 2.

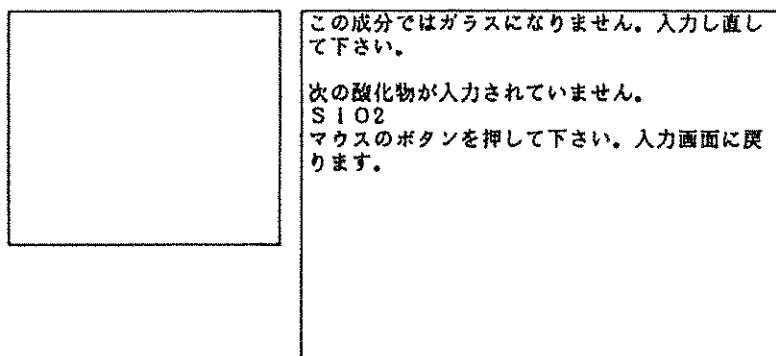


Fig. 4 A view illustrating examples of display of the present system. Components to Properties, Unsuitable selection of oxides in Fig.1. The combination of the selected oxides will not form a glass.

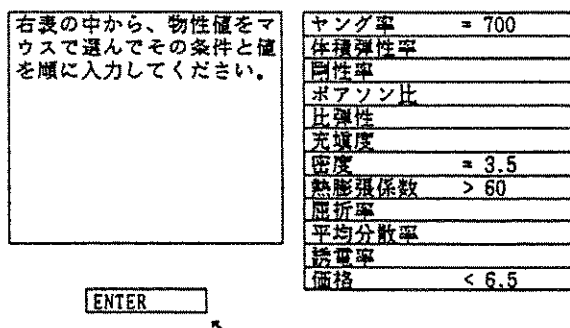
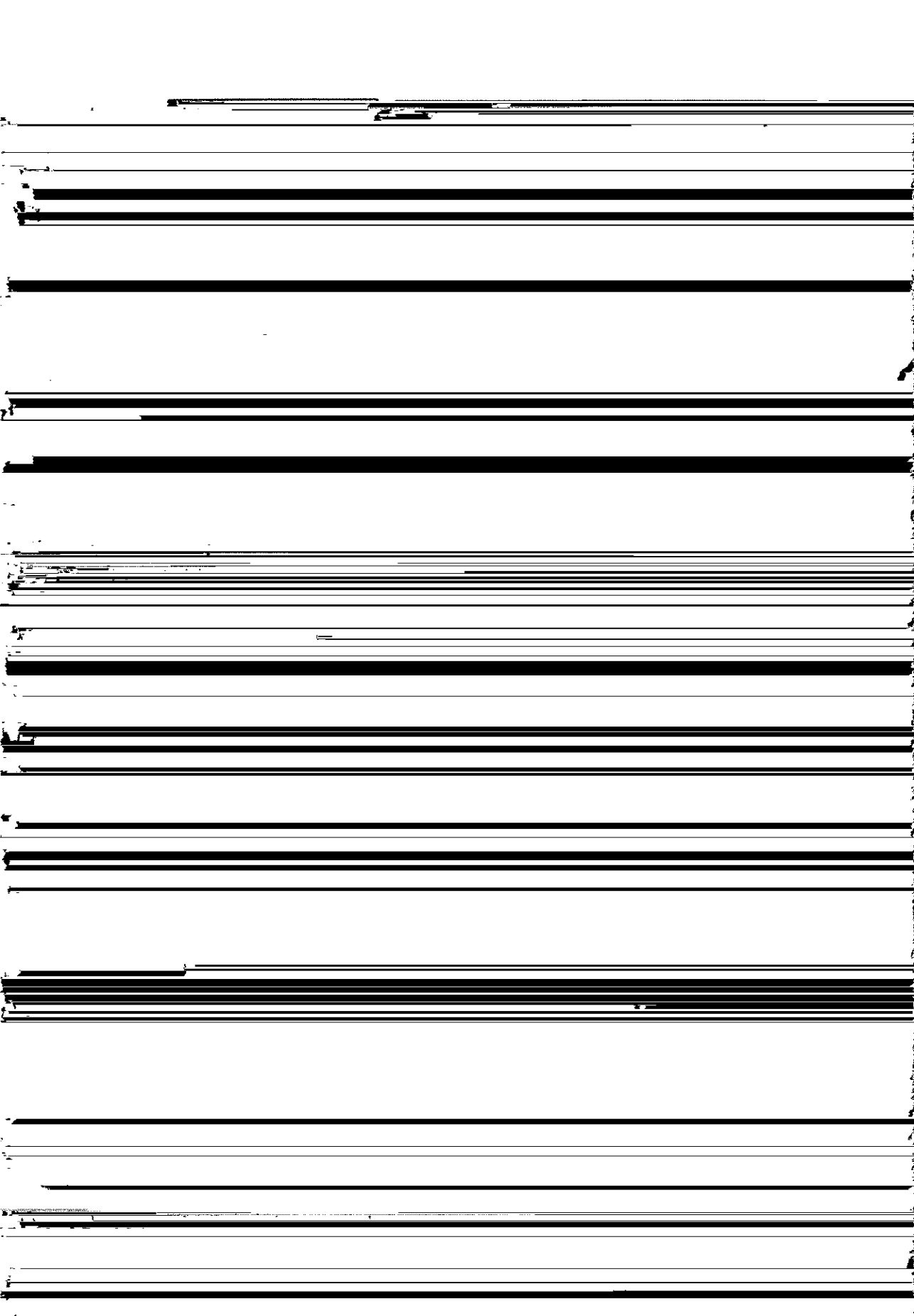


Fig. 5 A view illustrating examples of Display of the present system. Properties to glass composition, Input of desired properties values and ranges.

各モル比が以下の場合		ヤング率		688.614	-11.3863
SiO ₂	57.2929	体積弾性率		442.419	
Al ₂ O ₃	10.6281	剛性率		296.359	
BaO	32.0791	ポアソン比		2.41415F-01	
各物性値は右のようになります		密度		3.5	-4.76837F-07
次の処理を指示して下さい		比弾性		196.747	
		原子充填度		5.37112F-01	
		熱膨張係数		72.4698	12.4698
		屈折率		1.60512	
		平均分散率		1083.36	
		誘電率		9.73112	
		価格		2.48884	-4.01116

再入力を行う 別組成の計算 モル比指定計算 処理を終了する

Fig. 6 A view illustrating examples of display of the present system. Properties to glass composition, Results of Input of Fig. 5.



するもので、いわば、2.2の例のように、60種類の成分より推論するものではなく、成分限定に専門家の経験と知識が必要である。7成分選択限定した場合Fig.7について、その出力表示の例をFigs.8, 9に示す。

3. 考察

このガラスのエキスパートシステムにおいて、種々の制限が入れてある。まず、実用材料としてケイ酸塩素ガラスが大部分であるので、ガラスの成分選択の際に SiO_2 を必ず選ばなければならない。 SiO_2 成分を除くと、「 SiO_2 が入力されていません」という出力画面となる。また、任意のガラス成分を選択し、次に、その成分から構成されるガラスのうちで、最も高いヤング率を持つ成分比(mol%)を計算表示し、次に、他のmol%の値を任意に入力すると、そのガラス組成について各種物性値を再計算して表示してくれる。この際にmol%の値の制限があり、例えば、 ZrO_2 は20mol%以下としてある。この制限を超える値を入力すると、指定した制限範囲を表示し、成分の入力が不適当であることを表示する。

このように、ケイ酸塩ガラスに対してのエキスパートシステムであり、ホウ酸塩ガラス、リン酸塩ガラス、カルコゲン系ガラスなどには適用できない。ガラス化範囲は、成分数によって、同じ成分についても異なり、最も困難なデータベースである。これらについても二成分系、三成分系、四成分系、それ以上について入力してあるが、不確定なものや、拡大したガラス化範囲が入力されている場合もあり、今後、改良を加える必要がある。

このようにガラスの材料設計を行う際の支援システムとして、エキスパートシステムを構築した。任意に選択した成分から構成されるガラスの機械的、熱的、光学的、電気的性質を計算し、表示するものである。また、これら表示されたガラス組成と物性を、対話方式で、組成、物性が調整できるものであり、今後、所望の複数の精密な物性値を持つガラス組成の材料設計に、有効利用されるものと思われる。

以上ここに例示した、ガラスの設計支援エキスパートシステムは、はじめての例であり、それま

で不可能と思われていたものが、画面上で動き、ニューガラスの材料設計の支援に應用され始めた。これらは、完全なものではなく、完成度を高めるために今後、計算に必要な各種のデータを変えながら、より高精度のシステムにして、その結果を実験にフィードバックする必要がある。計算精度の向上、データベース、知識ベースデータベース拡充、充実等をしていく必要がある。システムへの追加や部分修正が容易に行えるのも、AI利用のシステムの利点であるからである。

また、ニューガラスの合成プロセス、微構造制御等についてのエキスパートシステム化は難しく、今後の課題である。

最後に知識ベースとデータベースのシステム構築に討論いただいた各機関の先生方々、システム化のプログラミング作業を行ったSE (System Engineer)の方々に御礼申しあげる。

参考文献

- 1) Y. Suzuki, "A Glass Database System for Compact Disk", *Ceramic Bulletin*, **70** (2) 219 (1991).
- 2) I. Yasui, "Materials Design of Ceramics and Glasses-Glass Database and Ceramic Design System", *Computer Aided Innovation of New Materials* (ed. by M. Doyama et al., Elsevier, 1991) p 897-902.
- 3) A. Makishima et al., "Materials Design of Glass and Development of Improved Expert System", *ibid.*, p 891-896.
- 4) M. B. Volf, *Mathematical Approach to Glass* (Elsevier, 1988).
- 5) A. Makishima and J. D. Mackenzie, *J. Non-Cryst. Solids* **12** 35 (1973).
- 6) A. Makishima and J. D. Mackenzie, *J. Non-Cryst. Solids* **17** 147 (1975).

〔筆者紹介〕



牧島 亮男 (まさしま あきお)
昭和46年 東京工業大学大学院博士課程修了, 工学博士
同 年 東京工業大学助手 (工学部無機材料工学科)
昭和52年 科学技術庁無機材質研究所研究員
昭和53年 同所主任研究官
昭和62年 同所総合研究官
昭和63年 東京大学工学部教授 (ガラス材料学講座担当)
昭和46年-49年 米国カリフォルニア大学ロスアンゼルス校博士研究員
平成1年 米国セラミックス協会フェロー
平成3年 国際セラミックスアカデミー会員

〔連絡先〕

〒113 東京都文京区本郷7-3-1
東京大学工学部材料学科
TEL 03-3812-2111

Abstract

In order to support to develop new glasses we studied expert system for materials design of glass which uses AI softwares ESHELL or KBMS. By using the expert system we can obtain various kinds of properties of glass by a dialogue method with a personal computer. Glass composition which has desired properties can be calculated and selected from data base, knowledge base and table of 60 oxides. Knowledge base on glass formation ranges tells us the possibility of vitrification of the designed glass.