

NEDO 高信頼データベース開発プロジェクトと INTERGLAD 新バージョンの開発

㈱ニューガラスフォーラム

伊 勢 田 徹

INTERGLAD Upgrade and Development of High-reliability Technology for Glass Database

Toru Iseda

New Glass Forum

平成 16 年末に完成した国際ガラスデータベース INTERGLAD 新バージョンの開発経緯と主な改善点について紹介する。

1. はじめに

多くの実用化されているガラスは、多種種類の酸化物から構成され、配合する酸化物の組み合わせと配合比を変えると、特性の異なった様々なガラスを作ることができる。周期律表のほとんどの元素がガラスとして溶かし込むことができるため、性質の異なった無数の種類のガラスが作り出せる。これらガラスの性質は構成元素の比率により連続的に変化し、予測可能な場合が多い。しかし、不連続に変化する特異点的なケースもあり、ガラス研究の興味は尽きず、ガラスデータを蓄積する意義もここにある。

ファクトデータから成るガラスデータベース

には、㈱ニューガラスフォーラムの INTERGLAD と米・露共同開発による SciGlass の 2 つがあり、いずれも 20 万種類以上のガラスを収録し、データ数と利用頻度の多さは他の材料に類を見ない。INTERGLAD の利用機関は、世界 27 ヶ国 267 サイトに及び、利用者数は 1200 名以上と推定され、新しいガラスの研究開発や特許対策等に広く活用されている。

INTERGLAD は、これまで、データの増強に力点が置かれ、個々のデータの信憑性については「多数のデータとの比較から自ずと評価されるもの」との立場をとってきた。しかし、正確なデータを求める利用者の期待は高く、データベースの高信頼化を図る時期がきていた。そこで、データベースの量的充実から質的充実への転換を促すべく、NEDO の知的基盤創成・利用促進技術開発事業（公募）の一環として H14 年度から H16 年度まで 2 年半にわたり「高信頼ニューガラスデータベース技術の開発」プロジェクトが実施された。

以下に、このプロジェクトの概要と、その研究成果をもとに開発された INTERGLAD 新バージョン Ver. 6 について述べる。

〒104-0005 東京都港区新橋 2-12-15

田中田村町ビル 8 階

㈱ニューガラスフォーラム

TEL 03-3595-2775

FAX 03-3595-0255

E-mail: iseda@ngf.or.jp

2. NEDO プロジェクトの概要

データベースが利用者から信頼されるためには、十分な量の良質なデータを、迅速・簡便・安全に利用できる必要があり、データ面とシステム面の両面からの高信頼化が不可欠である。INTERGLAD データの大半は毎年公表される学術誌や特許を出典としており、データを産み出す研究者らの資質、測定技術の完成度、データ収集時のミス回避の仕組みなどがデータの信頼度を確保する上で重要となる。また、システム面からは、データベースの使いやすさ、迅速さ、安全性などが大切となる。

このプロジェクトでは、データ面とシステム面の両面からの高信頼化をめざし、以下の6つのテーマについて、データベース推進委員会（委員長：大田陸夫 京都工芸繊維大学教授）の支援のもとに開発・調査を進めた。

(1) ガラス転移温度の光学測定

ガラスにとって重要な物性にもかかわらず測定誤差が大きいガラス転移温度の測定を取り上

げ、光学的な手法による高精度測定技術の開発に取り組んだ。

(2) 微量成分の影響度予測

データ収集源の信頼性を微量成分記載の有無から判断できるように、微量成分の物性への影

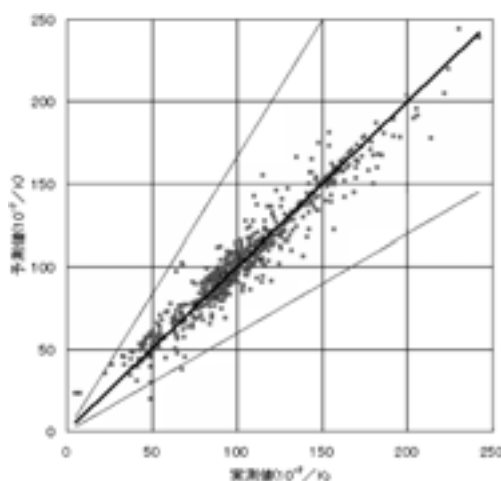


図1 関係式の開発例
(珪酸塩ガラスの線膨張係数)

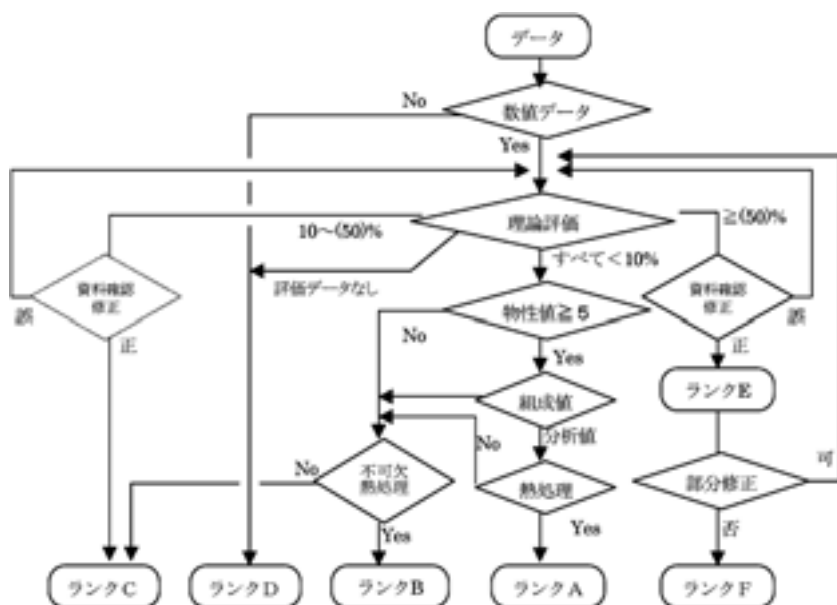


図2 信頼度別ランク分けツール

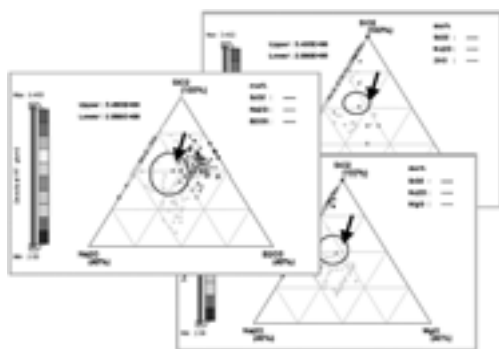


図3 三角図評価ツール

響度を理論的に解析するための実験データを基本成分系について多数収集した。

(3) 組成物性関係式の開発

組成データと物性データの信頼性評価には組成・物性関係式の使用が有効であることから、珪酸塩ガラス、硼珪酸ガラス、リン酸ガラス、テルル酸ガラス、ゲルマン酸ガラス等の酸化物ガラスについて、密度関係式を10式、転移温度関係式を8式、線膨張係数8式、軟化点4式、ヤング率4式、屈折率7式、アッベ数5式、粘度関係式を25式開発した。開発した関係式による予測値と実測値との相関関係を表すプロットの一例を図1に示す。

(4) データ信頼度のランク分けツール

25万件余の INTERGLAD データを信頼度別に半自動的にランク分けするツールを開発した。熱処理条件など所定事項の記載の有無、組成・物性関係式による計算値からの差などをもとに、データを図2のフローに従って6段階(A~F)に分類し、疑わしいデータについては出典に遡った調査、重回帰分析および三角図上(例:図3)での周辺組成ガラスとの対比評価を行う。なお、ランクの公表は当面Aランク(Gold Data)のみとした。

(5) データベースシステムの高信頼化

利用者から信頼されるシステムの構築をめざし、検索速度の高速化をはじめとする各種の改良を施し、平成16年末にプログラムインスト

ール版、平成17年夏にプログラムインストール不要版を完成させた。詳しくは次項で述べる。

(6) データ量の拡充

データ増強のため、継続的収集資料として新たに海外文献30誌を選定した。

3. INTERGLAD バージョン6

今回開発した Ver. 6 は、Ver. 5 の改良版であり、約100項目に及ぶ中～小規模の改善事項が盛り込まれている。主なものを挙げると次の通りである。

詳しくは、<http://www.ngf.or.jp/>を参照されたい。

1) プログラムインストールが不要なソフトも開発 (2005年夏より供用開始)

これまでの方式(スタンドアローン版)のほかに、プログラムインストール不要の「アプレット版」を新たに開発した(図4)。通信環境が整いセキュリティ上の障害のないユーザーならば、インターネット感覚で快適に利用できる。

2) 検索を高速化

プログラムの大幅な修正により、検索速度が2倍~10倍以上に高速化した。

3) 多成分系ガラス中の少量成分の検索が便利に

組成のmin%欄に「-1」を入力することにより、その成分の記載がないデータについても検索対象とすることができる。成分範囲が「0%以上3%以下」などの少量成分の検索に特に便利である。表にその一例を示す。

4) 汎用性のある物性予測式が導き出せる

重回帰予測機能に、定数項を用いない回帰式を新たに追加した(図5)。この式を用いることにより物性予測式の汎用性を高めることが可能。

5) 1出典1行から成る出典リスト

1出典1行から成る「出典リスト」を新たに用意。出典ごとのデータ件数が表示される。

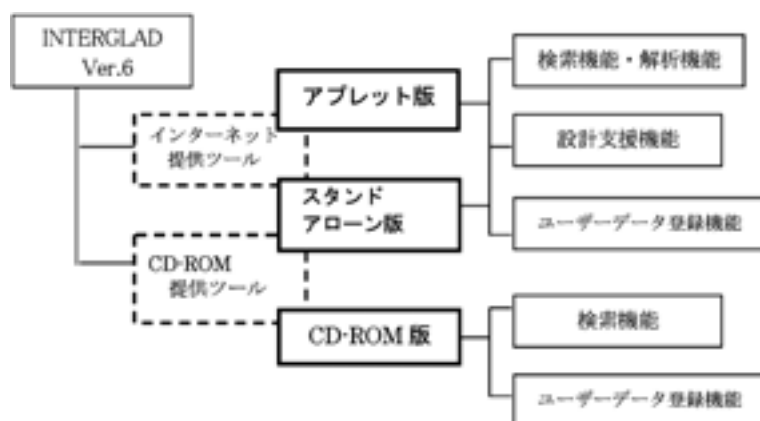


図4 INTERGLAD Ver. 6の構成

表 少量成分を含む多成分系ガラスの検索例

	検索条件 (mol%)	抽出データ数	備考
Ver. 5	$\text{SiO}_2 = 30 \sim 80 \%$ $\times \text{Na}_2\text{O} = 5 \sim 30 \%$ $\times \text{CaO} = 0 \sim 20 \%$	8 ガラス	6成分すべての情報を保有したデータのみが抽出される。
Ver. 6	$\times \text{Al}_2\text{O}_3 = 0 \sim 10 \%$ $\times \text{CeO}_2 = -1 \sim 5 \%$ $\times \text{BaO} = -1 \sim 5 \%$ $\times \text{Total} \geq 95 \%$	1,626 ガラス	CeO_2 と BaO の情報を持っていないデータも抽出できる。 BaO を含むガラス 156 件、 CeO_2 を含むガラス 82 件を抽出。

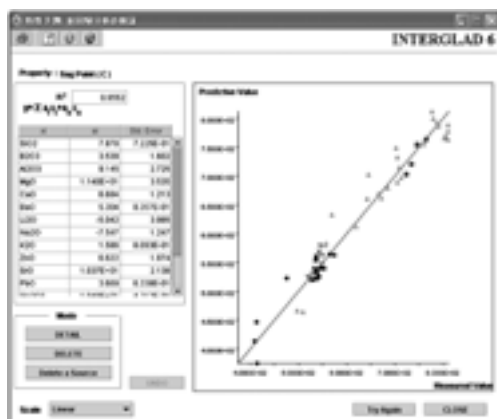


図5 定数項のない回帰式による重回帰予測の例

6) マウス操作や画面操作が改善

詳細画面や同一出典画面などへの画面遷移がダブルクリック操作ででき、画面サイズの変更

もマウス操作で可能になった。

7) 三角図・X-Y プロットのための項目選択が便利に

三角図プロット時の「三成分の選択」、X-Yプロット時の「項目指定」、三角図プロット時の「検索全ガラス」指定などの操作が簡略化。

8) 三角図プロット時の三成分合計最小値が設定可能に

指定した三成分の合計値が100%よりかなり小さいガラスも従来は三角図上にプロットしていたが、合計最小値の設定が可能になり、三成分の和が小さいデータが排除できるようになった。

9) 境界線のためのガラス化範囲データが新たに追加 (2005 年秋より)

これまでのガラスと非ガラスを表す一対のファクトデータ (○と×) によるガラス化範囲

の表示だけでなく、ファクトデータを伴わないガラス化範囲情報（境界線）も表示できるようにした。

10) プログラム上の不具合修正

物性値予測機能の加減式の一部に存在した誤り、Fulcher 式による粘性-温度曲線の表示範囲における誤りなど、旧 Ver. で見つかったプログラム上の不具合をすべて修正した。

11) プロキシ認証への対応

利用者側のセキュリティ強化に伴い、プロキシ認証対応のソフトとした。

12) データの信頼性向上

25 万ガラス (Ver. 6 リリース時) 余のデータの一部について見直しを開始し、3600 件余の誤データを発見し修正した。これらのミスのは大半は INTERGLAD データ収録時の転記ミスであった。今後も、正確な最新情報の提供とともに、信頼度別ランク分けツール使用による誤データの抽出とランク分け作業を継続し、信頼性の向上に努める。

13) INTERGLAD サーバーの更新 (2005 年 6 月より供用開始)

サーバーの高速化・高信頼化およびネットワーク環境の改善を図った。サーバーは、3.2 GHz プロセッサと HDD 2 台を備えた本機と予備機の 2 機で構成。みずほ情報総研内に設置し、1 週間サイクルで毎日バックアップを実施する。

4. ま と め

NEDO 知的基盤創成・利用促進技術開発事業「高信頼ニューガラスデータベース技術の開発」プロジェクト (H14~H16 年度) により、INTERGLAD の高信頼化への基礎が構築された。今後は、データの量的拡充とともに、開発されたツールを駆使して個々のデータの吟味とランク分けを進め、高信頼化を図ってゆく。INTERGLAD の信頼性向上により、ガラスに関係した様々な研究開発がますます効率的に進むことを期待したい。おわりに、本プロジェクトの推進に多大なご協力をいただいた関係各位に深く感謝いたします。

NGF ホームページのご案内

(株)ニューガラスフォーラムでは下記のホームページを開設しております。
<http://www.ngf.or.jp> 是非一度アクセスして下さい。

1. NGF の開催する各種研究会・研修会のご案内が出ています。
2. 機関誌「NEW GLASS」の目次及び 2 年以前は内容が PDF 化されています。
3. 「ガラス用語集」「ガラス物性測定方法集」等も纏められています。
4. NGF の定款・組織・会員等が「事務局だより」にあります。
5. 関連の学会・行事等をお知らせするイベントカレンダーが新設されました。