

# 国際ガラスデータベース INTERGLAD の使い方

(社)ニューガラスフォーラム

鈴木 恵 一 朗

## Utilization of International Glass Database INTERGLAD

Keiichiro Suzuki

New Glass Forum

### 1. はじめに

国際ガラスデータベース INTERGLAD は 1991 年に世界初のガラス組成・特性のファクトデータベースとしてニューガラスフォーラムによりリリースされた。以後、データの補充、システムの改良が継続的に進められ、今や INTERGLAD は 27.4 万余件のガラス<sup>注1</sup>の 90 万を超える特性データを収録する大変大きなデータベースとなっている。材料に関するデータベースは数多くあるが、このようにしっかり維持管理がなされ進化してきたデータベースは少ない。

ガラスには特性の異なるガラスとなる非常に多くの組成が知られている。多くのガラスの場合、特性には組成の加成性があるため、データベースを使用して解析することにより、特性予測、材料設計がし易く、セラミックス材料等に比べるとデータベースの利用価値がより大きいと考えられる。INTERGLAD はバージョンアップを重ね、2001 年には多くの機能を追加した Ver.5 がリリースされ、2004 年末には NEDO より受託した「ニューガラスの設計に

資するデータベース構築 - 高信頼ニューガラスデータベース技術の開発」(平成 14-16 年度)の成果<sup>1)2)</sup>を盛り込んだ Ver.6 がリリースされた。Ver.6 にはその後、ソフトのインストールなしでも使用できるアプレット版も加えられ、初期バージョンに比べると機能、速度、信頼性、使い易さが格段に高いシステムとなっている。INTERGLAD Ver.6 の初期画面を図 1 に示す。

INTERGLAD の年間利用契約ユーザー数には毎年増減があるが、現在 95 である。CD ユーザーを合わせると利用ユーザー数は約 300 に達



図 1 INTERGLAD Ver.6 初期画面

〒104-0005 港区新橋 2-12-15

TEL 03-3595-2775

FAX 03-3595-0255

E-mail: k-suzuki@ngf.or.jp

注 1 ガラス組成、製法、出典のいずれかが異なれば別ガラスとする

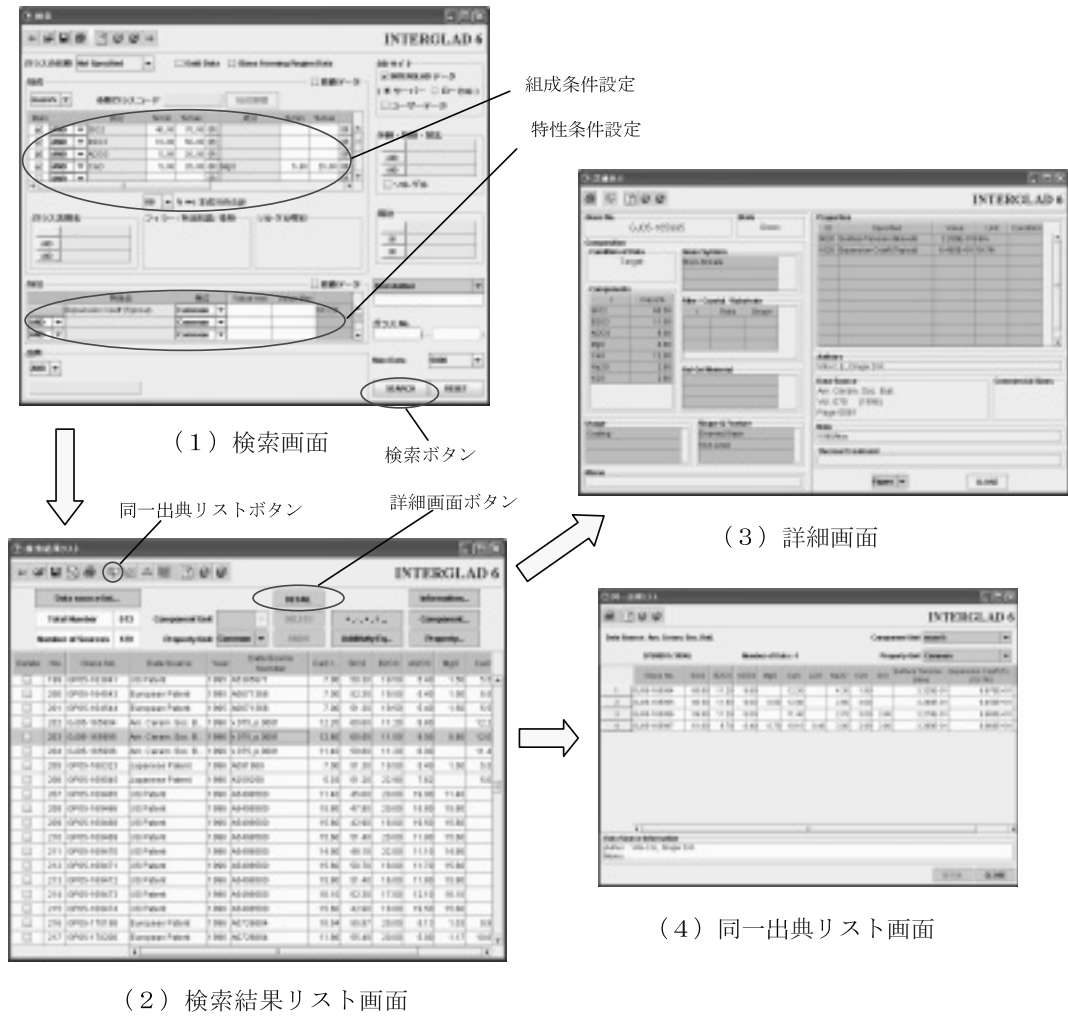


図2 検索フロー (主な画面)

し、国内を中心に世界中で広く使用されている。なお、INTERGLADの競合データベースとしてはロシア・米国の研究者が協力して制作したSciGlass<sup>3)4)</sup>があり、INTERGLADより遅れてスタートした。ロシア(旧ソ連)に蓄積されていた基礎的データを初期に精力的に取り込むなどして、30万件のガラスデータを収録しているが、実質的な規模はINTERGLADとほぼ同等とみられる。

INTERGLADの使い方については、利用会員に配布のマニュアル<sup>5)</sup>に詳しく記載されているが、ニューガラスフォーラムのホームページ

<http://www.newglass.jp>にもその大部分の内容が掲載されている。また、ここには操作方法をわかりやすく示す動画デモも入れられている。また、本年2月には利用会員の皆様よりの要望に応え、参加者が実際にパソコンを使用しながら使い方を習得できる「INTERGLAD活用講習会」を初めて開催した。皆様のご意見を伺いながら今後もこのような講習会を継続して開いていきたいと考えている。

本稿では、INTERGLADの使い方の詳細を系統的に説明するのではなく、「このような使い方ができる」といった利用法の概要と使用す

る上での注意点につき、簡単に紹介することとしたい。INTERGLADをまだあまり使用しておられないユーザーの方々、またINTERGLADの導入を検討されている方々の参考としていただければ幸いである。

## 2. 検索

INTERGLADの検索画面にはガラスの状態(ガラス、結晶化ガラスなど)、ガラス汎用名(シリカガラスなど)、組成(種類と量など)、特性、外観・特徴・製法、用途、出典、著者名、市販ガラスコード、ガラスNo.等の選択ボタン、入力カラムがあり、これらのいずれか、あるいは組み合わせによる検索が自由にできる。図2に検索のフローを検索画面、検索結果リスト画面等の主な画面の例で示す。

1) 文献検索 INTERGLADにはガラスに関するほとんどすべての学術誌(72誌他より概ね1970年代以降、発行後1.5年以内に収録、現時点で11.7万件のガラスについての特性データ収録)、データブック、講演予稿集等よりのデータが収録されている(合計17.4万件ガラス)。そこでガラス組成・特性情報の文献検索に有効に活用できる。検索後に表示される「出典リスト」により出典毎のガラス件数の表示も可能。組成の検索により、公表データの無い組成を探すこともできる。

2) 特許検索 特許についても、1979年以降の日本、米国、欧州の公開・公告特許がほぼすべて収録されている(現時点で2007年前半分までの9.5万件、公開後1年以内に収録)。ただし、特許のガラスデータとしては特許実施例のデータを採用しており、必ずしも特許請求の範囲のすべてを網羅しているわけではないため注意が必要である。開発を行おうとするガラスの特許調査、開発したガラスの出願時の調査等がガラスの組成範囲を細かく限定して容易に実施できる。出典を特許のみ、さらに社名・年号を絞って検索することも、特許と他の文献とを合わせて検索することもできる。

3) 市販ガラス検索 ガラス各社のカタログデータの収録も71社で約4500件に達する。そこで用途あるいは特性の面から、どのような市販ガラスがあるかを調べたり、ある商品名のガラスの組成の推定等も場合によっては可能となる。

4) 様々な組成条件設定が可能 検索画面で10行、4列40種類までの化合物とその最低量、最高量を検索条件として設定できる。各列は( )と同じでorで結ばれ、各行はand、or、notで条件設定ができる。「Main」に✓を入れると主成分としてその合計値を0.50-100%以上(12段階)に設定できる。また、min%欄に「-1」を入れると、その成分の記載のないデータも検索対象に含めることができる。この方法により、収録件数が限られている多成分系ガラスのデータを効果的に収集することも可能となる。ただし、「-1」を含む組成を多くすると検索に非常に時間がかかることとなり、注意を要する。

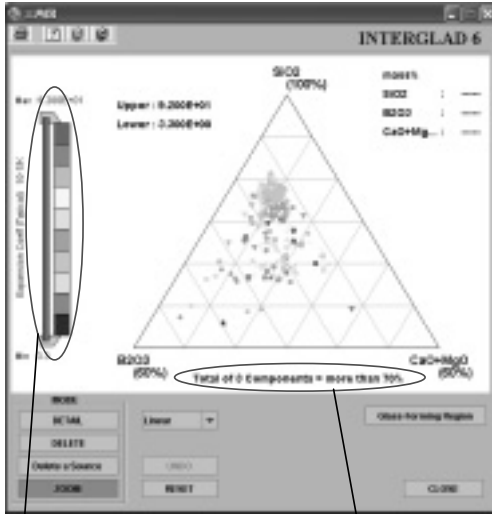
## 3. 解析

検索により得られたデータから三角図、X-Yプロット図による解析、元素解析(データ密度解析)等を行うことができる。

1) 三角図での特性データ数値の色分け表示 特性の数値範囲も画面左のスライダ付きバーで自由に変更して表示できる。また該当全ガラスの組成位置の確認も可能。

2) 三角図での3成分の選択自由度大 3成分より多い成分からなるガラスデータの解析のために、指定した3成分の合計最低値を設定できる。これにより必要に応じて、3成分の合計量が少ない組成を除くことができる。また、成分を $\text{Na}_2\text{O}+\text{K}_2\text{O}$ などのように、成分の和とした擬似三元系の表示も可能。例を図3に示す。

3) ガラス化範囲図示も可能 三角図画面で「ガラス化範囲」ボタンを押すと、ガラス化可否が○×、境界線で図示される(図4)。1,600件余のガラス化範囲データを登録済。



3成分合計最低値

特性数値範囲設定スライダ付きバー

図3 擬似3成分三角図の例  
 $\text{SiO}_2 - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{RO}$ 系の熱膨張係数に関する  
 $\text{SiO}_2 - \text{B}_2\text{O}_3 - (\text{CaO} + \text{MgO})$ 三角図

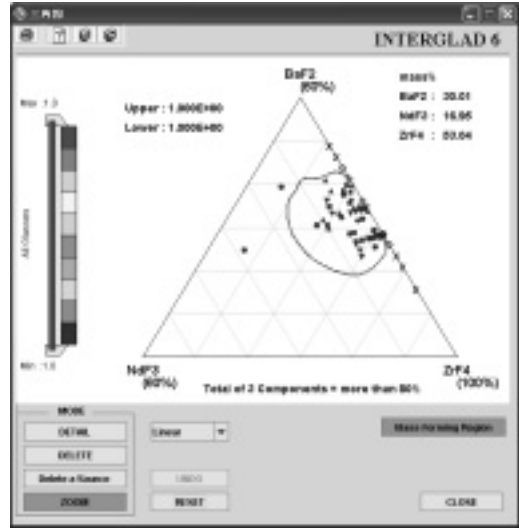


図4 三角図におけるガラス化範囲の図示例  
 $\text{BaF}_2 - \text{NdF}_3 - \text{ZrF}_4$ 系の場合

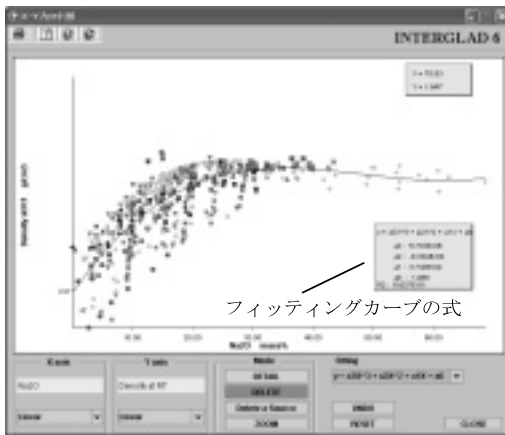


図5 X-Yプロット図例1 (組成と特性)  
 $\text{SiO}_2 - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{Na}_2\text{O}$ 系ガラスの $\text{Na}_2\text{O}$ 量と密度の関係  
 $(\text{SiO}_2 + \text{B}_2\text{O}_3 + \text{Na}_2\text{O} \geq 98 \text{ mass}\%)$

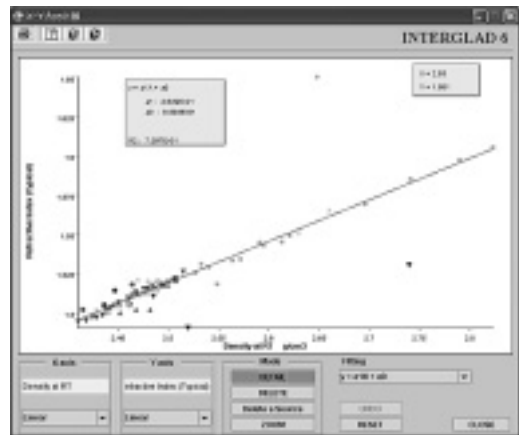


図6 X-Yプロット図例2 (特性間)  
 $\text{SiO}_2 - \text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Na}_2\text{O}$ 系ガラスの密度と屈折率の関係  
 $(\text{SiO}_2 + \text{CaO} + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Na}_2\text{O} \geq 95 \text{ mass}\%)$

4) 特性・組成間、異なる特性間のX-Yプロット解析可能 表示する特性、組成をそれぞれ加減乗除したものをX・Y軸それぞれの数値として解析することも可能。X-Yプロットの例を図5、6に示す。

5) 元素種類の解析機能(データ密度解析)も

有 検索結果リストに表示されたガラスの組成につき、特性を指定すると、周期律表上に元素ごとの利用ガラス数(各ガラスに含まれる元素の出現数)が表示される(図7)。元素は数に応じて色分けされる。また少量成分を数値設定(8段階)により除くこともできる。

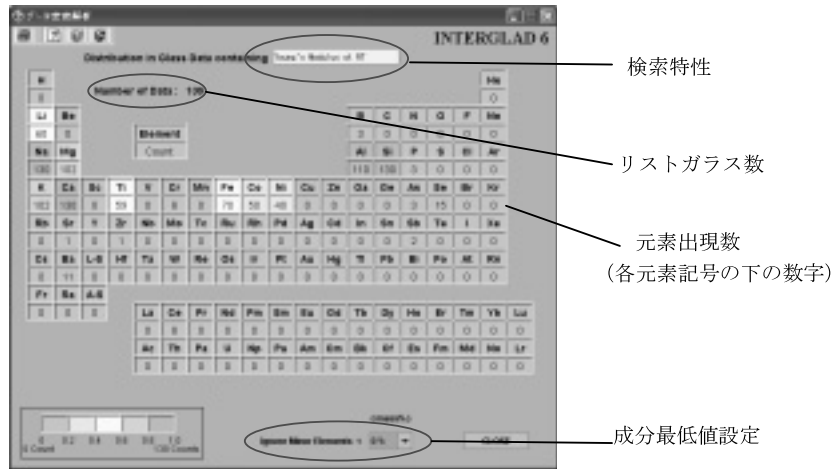


図7 元素種類解析 (データ密度解析) 図例  
SiO<sub>2</sub>-CaO-Na<sub>2</sub>O系のヤング率についての解析  
3成分合計値 90 mass%以上の場合

#### 4. 予測・設計

INTERGLADでは、収録データの重回帰分析あるいは特性計算式により組成から特性の予測、あるいは新ガラスの開発のための組成の設計を行うことができる。

1) 重回帰分析による特性予測 ある組成のガラスの特性を予測したい場合、目的とする成分系についておおまかに検索条件を設定し、3種類までの特性を設定し、検索する。得られたガラスにつき、重回帰分析を行い、実測値(x)と予測値(y)の検証を行う。プロットが直線 $y=x$ のほぼ近傍に集まり、寄与率 $R^2$ が0.8以上となれば、ほぼ信頼できる予測ができると考えて良い。なお、分析に使用したそれぞれの成分のT値(回帰係数/標準誤差)の絶対値が2以上であることが望ましい。「特性予測:最適予測」画面を開き、予測したいガラスの組成を入力することにより、特性欄に予測値が表示される。例を図8に示す。この場合、目的とするガラス組成の目的とする特性データが多く存在することが必要であり、また特性に組成加成性が見られない領域では、寄与率 $R^2$ が低くなり本解析は活用できない。汎用性のある特性予測式を導き出すこともできる。

2) 特性計算式による特性予測 INTERGLADには14特性につき47式の予測式が登録されている。これらの予測式を利用して必要な組成の特性値を予測することができる。密度(8式)、ヤング率(2式)、表面張力(4式)、線膨張係数(5式)など。それぞれの予測式により組成の制限等があることに注意が必要となる。例を図9に示す。予測値と実際のデータの比較、異なる予測式による予測値の比較も容易にできる。

3) 重回帰分析によるガラス組成の設計 目標とする特性を有するガラス組成を得たい場合、必要な特性の種類と大まかな組成を入力して、特性予測の場合と同様な操作により重回帰分析を行い、目標に近いガラス組成を計算することができる。3特性までを指定することができる。予測値と目標値との関係や成分毎の回帰係数等を確認しながら試行錯誤的に目標に最も近い組成を探索・予測する。例を図10に示す。

#### 5. その他

1) アプレット版の使用 INTERGLADはインターネットに接続できJAVA(1.4以降)がインストールされているパソコンであれば、ソフトのインストールなしでも使用できる。検

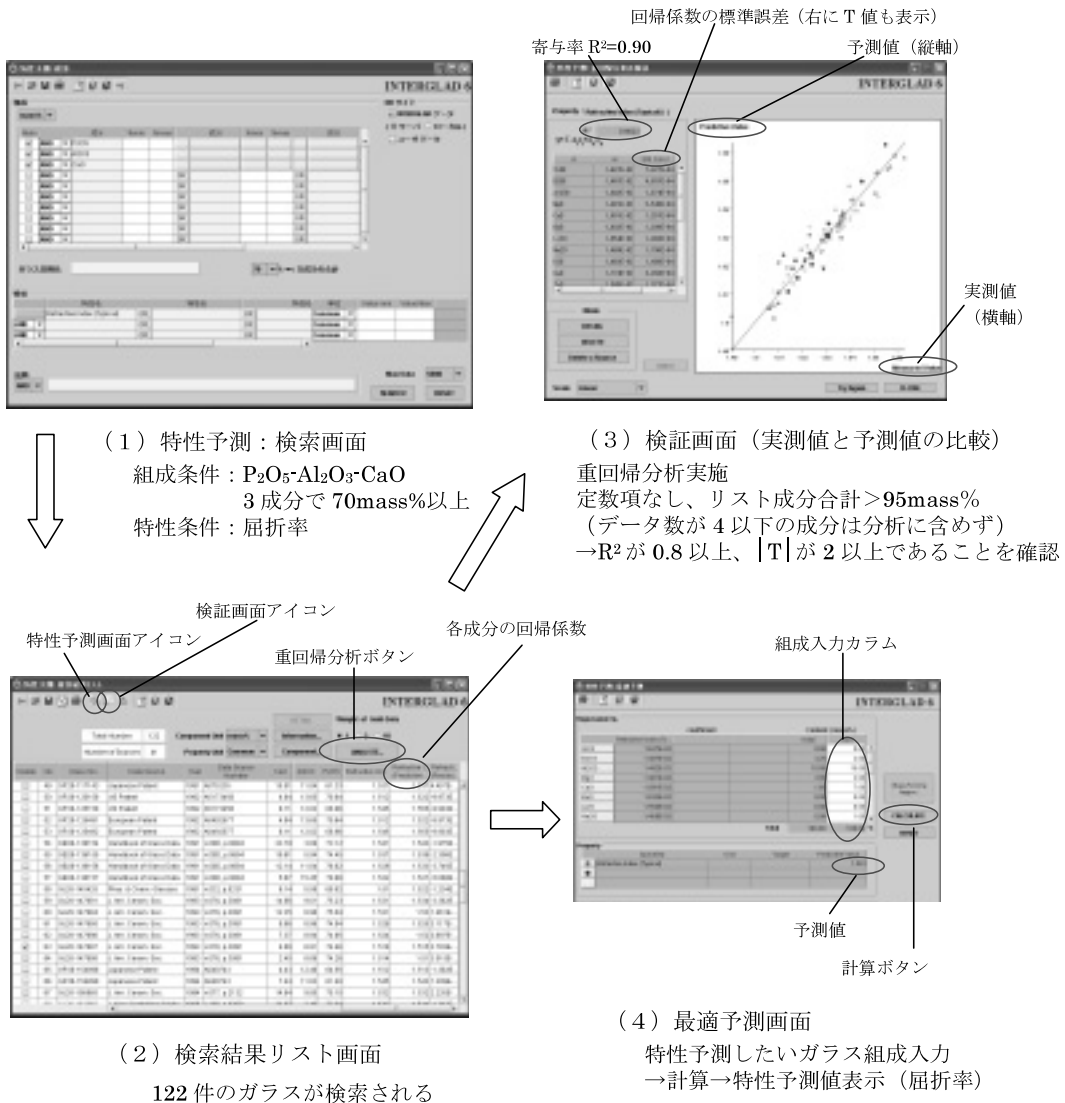


図8 重回帰分析による特性予測例  
P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> - CaO系ガラスの場合に屈折率を予測

索・解析・予測などのフル機能（下記のユーザーデータ登録・使用以外）をソフト使用の場合と同様な速度で利用でき便利である。年間利用会員であれば、どこでもいつでもINTERGLADを活用できるメリットがある。

2) ユーザーデータの活用 INTERGLAD利用者が保有するガラスデータをユーザー登録機能により登録し、利用者独自のガラスデータベースを作成することができる。登録されたデータはINTERGLADのデータと合わせて、

検索、解析、予測設計などに利用することが可能となる。本機能はCDよりソフトをインストールし、インターネットに接続したパソコンによってのみ使用できる。登録データは利用者のパソコンのハードディスクに保存され、サーバー上のINTERGLADデータと一緒に検索してもサーバーに取り込まれることはなく、データが外部に流出する恐れはない。図11に入力画面を示す。

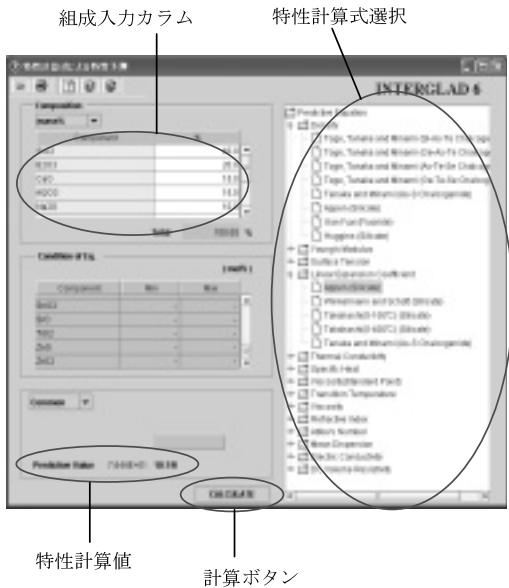


図9 特性計算式による特性予測例  
式選択(例:熱膨張係数 Appen の式) →組成入力  
→計算→特性計算値表示

## 6. おわりに

以上、INTERGLAD Ver.6 の利用法について大変大雑把にはあるが述べてきた。ニューガラスフォーラムでは、INTERGLAD につき収録データの拡充・更新のみでなく、システム改良、機能の改良、誤データの修正に日々取り組んでいる。最後に INTERGLAD の課題、今後について触れたい。

まずデータ更新については、経済産業省の「知的基盤整備特別委員会とりまとめの知的基盤整備目標」の中にガラス組成物性データベースの整備目標としても掲げられているように、2010年までにガラス数で30万件以上のデータ収録数とするよう、着実に進めていく予定である。また、2で述べたように複雑な検索に時間がかかる等の問題があるため、ユーザーの方々の要

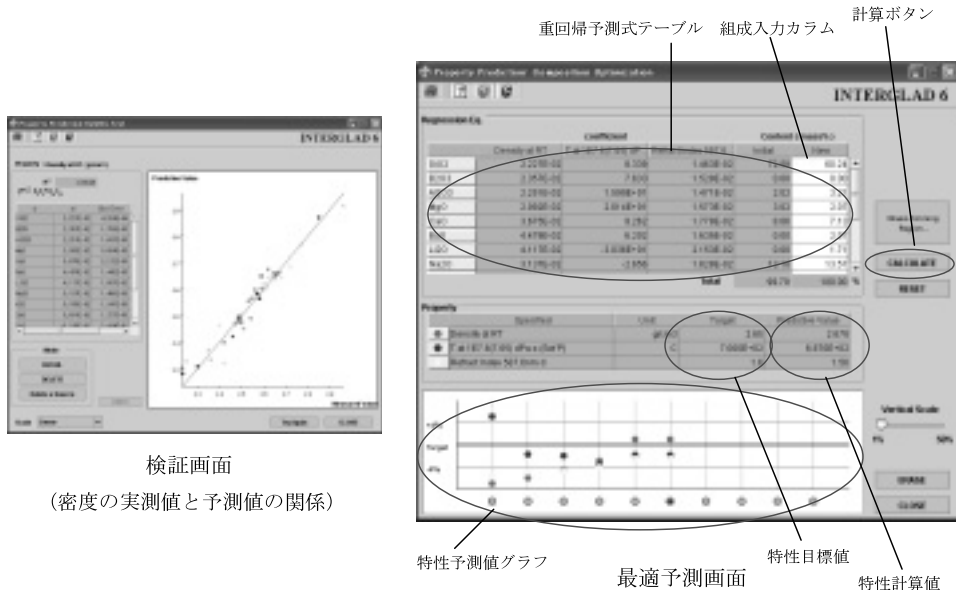


図10 重回帰分析によるガラス組成の設計例

<密度 2.65 g/cm<sup>3</sup>、軟化点(粘度 10<sup>7.6</sup> dPa・s の温度) 700℃、屈折率(波長 587.6 nm d-line)

1.6 の特性を有するアルカリケイ酸ガラスを設計>

1. 検索 検索条件:組成 SiO<sub>2</sub> (20~80%) + Na<sub>2</sub>O (1~30%) >70% (%は mass%)  
特性 上記の密度、軟化点、屈折率
2. 重回帰分析 成分: Si, B, Al, Ca, Mg, Ba, Sr, Na, Li, K, Zn, Pb, Ti, Zr の酸化物、成分合計 >95%
3. 検証 それぞれの特性についての R<sup>2</sup> が 0.8 以上であることを確認
4. 組成計算 先ず比較的目標に近いリスト組成を選択し、特性目標値を入力し、最適予測画面にて組成入力、計算を繰り返して目標に近い組成を得る



図11 ユーザーデータ入力画面

望に沿って、システムの改善を順次進めていきたい。

平成17、18年度にニューガラスフォーラムではNEDOの知的基盤創成・利用促進開発事業として「ガラス構造データベース構築に関する研究開発」を受託実施した。現在、この成果<sup>6)</sup>を活用してINTERGLADにガラス構造データ

ベースを組み込み、ガラスの組成、特性、構造の統合データベースとすべく、開発を進めている。また、このNEDOプロジェクトでは多次式重回帰分析、データ補間ツールの開発も行った。これらにより、構造変化等により加成性がないガラス系、またデータが少ない高温物性についても、より精度のある予測、材料設計ができる見通しが立ってきた。今後はこれらの改良をできるだけ含めたINTERGLAD Ver.7の早期のリリースに向け、注力していくこととしたい。

#### 参考文献

- 1) T. Iseda, Y. Iwasa, S. Yoshida and T. Kawasaki, ICG 2004, P-07-009.
- 2) 伊勢田徹, NEW GLASS, Vol. 20, No. 3, 51 (2005).
- 3) A. Priven and O. Mazurin, ICG 2007, I 44.
- 4) <http://www.scienceserve.de/Software/SciGlass/>
- 5) International Glass Database System INTERGLAD Ver. 6 ユーザーズマニュアル, (社)ニューガラスフォーラム (2005).
- 6) K. Suzuki, T. Iseda and H. Inoue, ICG 2007, A 36.