

国際ガラスデータベース INTERGLAD Ver. 7

(社)ニューガラスフォーラム

鈴木 恵一朗

International Glass Database System INTERGLAD Ver. 7

Keiichiro Suzuki

New Glass Forum

1. はじめに

INTERGLAD はガラスに関する総合的なファクトデータベースである。1991年にニューガラスフォーラムより世界で初めてリリースされて以来、新規データの登録、システムの改良、新機能の追加、機能の高度化等が継続的に行われ、国内外の多くのガラス研究者、技術者等に広く活用されてきた。図1にINTERGLADのバージョンアップおよびデータ更新の経緯を示す。また、表1に収録データ件数とその出典割合を示す。

本稿では、様々な新機能・改良が加えられ、タイトルロゴ・デザインを含めて一新された Ver.7 について紹介する（昨年10月に国内リリース）。

2. Ver.7 の特長

Ver.7 の主な新規点および改良点を以下に記す。

- 1) ガラス構造データベースを世界で初めて開発して組み込む

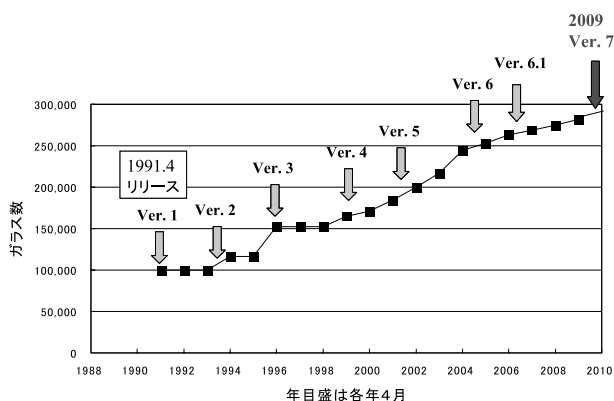


図1 INTERGLAD のデータ更新およびバージョンアップの経緯
(ガラス数：組成、製法、出典のいずれかが異なるガラスを1ガラスとしてカウント)

表1 INTERGLAD 収録データ件数および出典内訳
(2010.2現在)

特性データベース	28万7千件
<組成・特性・外観・特徴・製法・用途等>	
出典内訳(件数%)	
ハンドブック等	17
雑誌	42
会議予稿集等	3
特許	36
カタログ	2
構造データベース	4.7千件
<組成・解析方法・構造情報等>	
件数はガラス数	

IR, ラマン, NMR などの各種解析方法による原子間情報（結合距離, 結合角等）等のガラス構造情報をデータベース化…3.1) に説明

2) 特性予測・組成設計のための重回帰分析をより高度化

従来の一次式による重回帰分析に加え, 多次式重回帰分析を組み込む…3.2) に説明

3) 温度-特性プロットを可能とする…3.3) に説明

4) データ補間ツールを組み込む

データの少ない高温データにつき, 所定温度の値を補間法により算出…3.3) に説明

5) 検索をより容易にするツールを付加

- ・簡易検索画面
- ・周期表小画面
- ・キーワード検索…3.4) に説明

6) 特性計算式を補充し, 改良

熱伝導率の Ammar の式追加, 粘性標準点, 粘度および電気伝導度の計算式の適用範囲拡張

7) 画面印刷, ファイル保存機能を拡大

8) 使い易いツールバー, メニューバーを充実

9) CD-ROM フル機能版も利用可能 (別利用料金)

10) ユーザーデータ機能を強化

11) 処理速度をアップ

12) ユーザーズマニュアルを全面改訂

マニュアルは PDF として随時更新し, 常に最新のものを Web 閲覧・ダウンロード可能

13) プログラムも常に最新のものを Web よりダウンロード可能

14) 最新のコンピュータ環境 (OS, ブラウザ, JAVA 環境) に合わせて, システムを全面的にリニューアル

3. 主な特長の概要

1) ガラス構造データベース

解析方法の進歩と相俟って, ガラスの構造が活発に研究されている。ガラスの構造情報は大変複雑であるが, これらを整理して登録できる

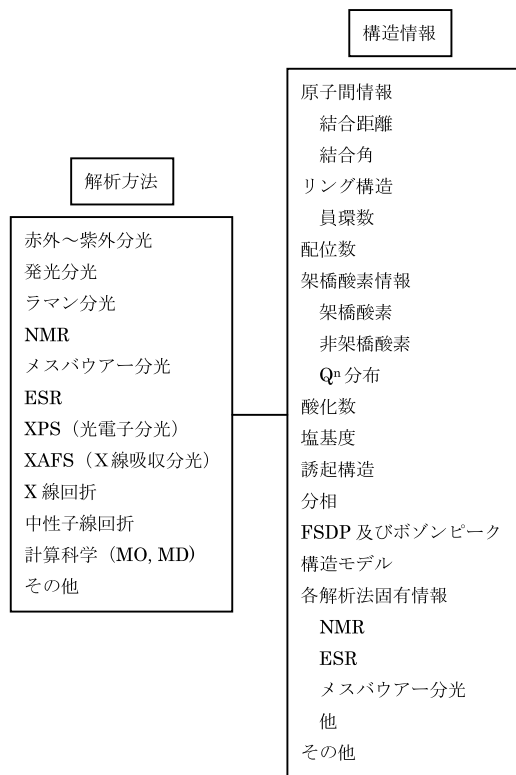
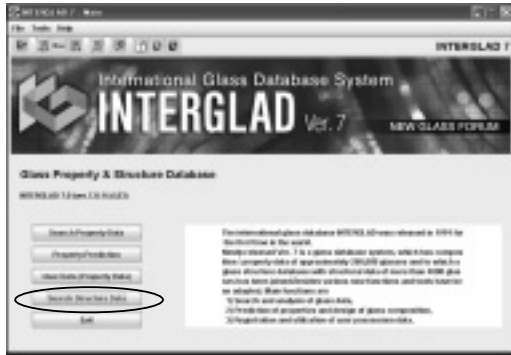


図 2 構造データベース解析方法および構造情報の分類

ように開発したガラス構造データベース¹を Ver.7 に組み込んだ。図 2 にガラス構造データベースの解析方法と構造情報の分類を示す。また, 図 3 に検索・解析フローの例を示す。本構造データベースでは, 従来からの特性データベースと同様な操作により組成, 構造情報, 解析方法, 出典等からの検索ができ, 検索結果から特性データベースの特性データ呼び出すこと, あるいはその逆も可能である。登録データはガラス数でまだ 5,000 件弱と少ないが, ガラス組成からの構造情報検索, 解析, 特性との対応付け等が可能となった。今後, 組成により構造変化が起こるガラス系をはじめとして様々なガラス材料の研究, 材料開発に役立つことが期待される。

2) 特性予測/多次式重回帰分析

INTERGLAD には, 従来より, 1 次式によ



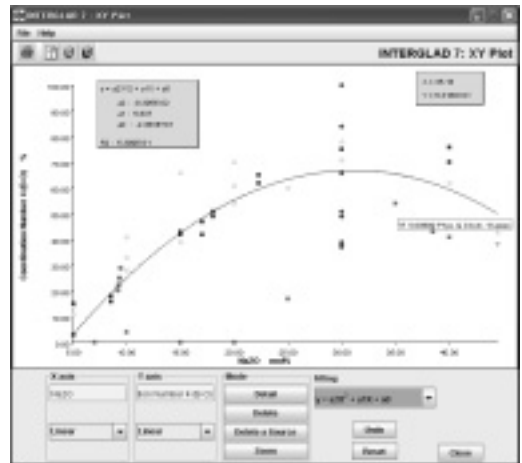
メイン画面



構造検索画面



構造検索結果画面



XY プロット画面

(SiO₂-B₂O₃-Na₂O 系ガラスの

Na₂O 量と 4 配位ホウ素の割合の関係)

図 3 構造データベース 検索・解析フロー例

る重回帰分析を用いて豊富な収録データから特性予測あるいは材料設計（組成最適化）ができる機能があった。しかし、この重回帰分析には、加成性を示さないガラス特性の場合に予測が良好にできない問題点があった。そこで、Ver.7には多項式による重回帰分析を組み込んだ。説明変数に2成分、3成分の組成割合を掛け合わせた項も使用できるようにした結果、ホウケイ酸塩ガラスのように加成性を示さない場合にも、予測精度を上げることが可能となった²。

多項式重回帰分析の式を下に示す（定数項を

検索・解析フロー例

使用しない場合）。

$$y = \sum_i a_i X_i + \sum_j a_{ij} X_i X_j + \sum_k a_{ijk} X_i X_j X_k + a_{other} X_{other}$$

$$X_{other} = 1 - \sum_i X_i$$

y：特性値, X_{i,j,k}：各成分量, a_i：1成分項係数, a_{ij}：2成分項係数, a_{ijk}：3成分項係数,

多項式重回帰分析の操作フローを図4に示す。また、図5に多項式重回帰分析の使用効果についてSiO₂-B₂O₃-Na₂O系ガラスの場合の例を示す。分析の予測精度（寄与率）が大幅に向上したことがわかる。

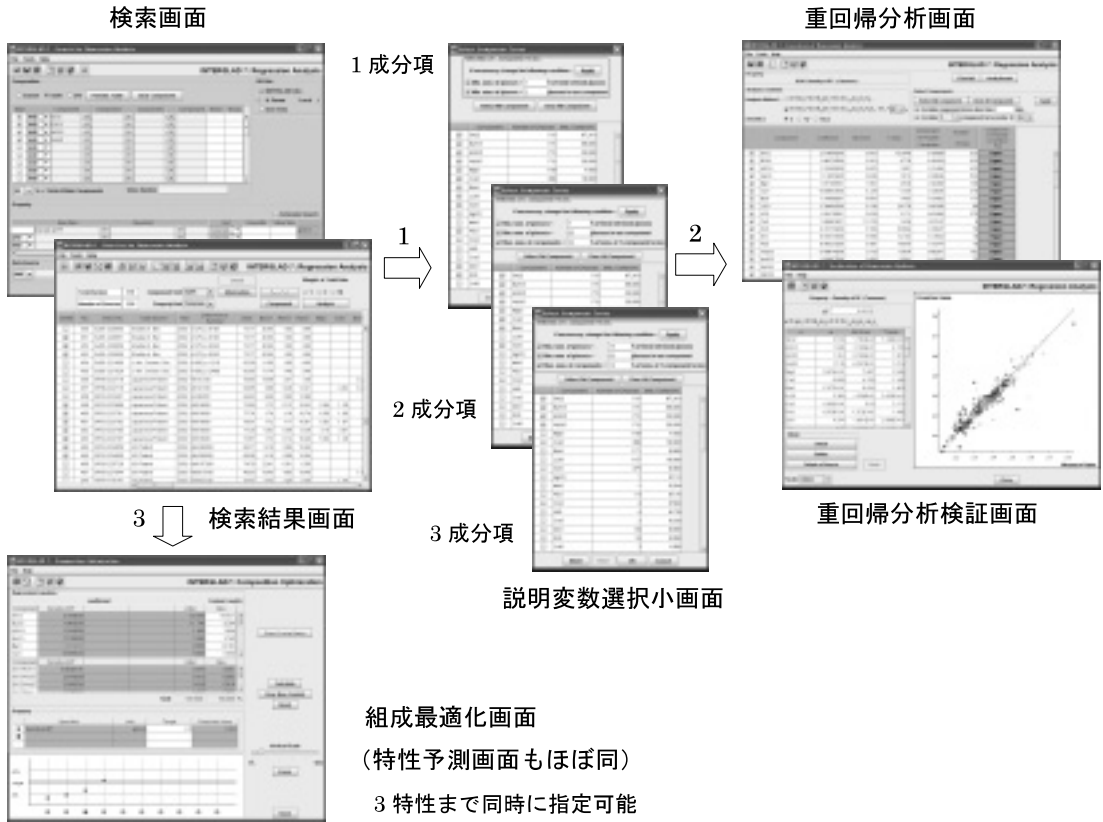


図4 多次式重回帰分析 操作フロー

(例 $\text{SiO}_2 - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Na}_2\text{O}$ 系ガラスで室温密度 2.5 g/cm^3 となる組成の設計 (最適化))

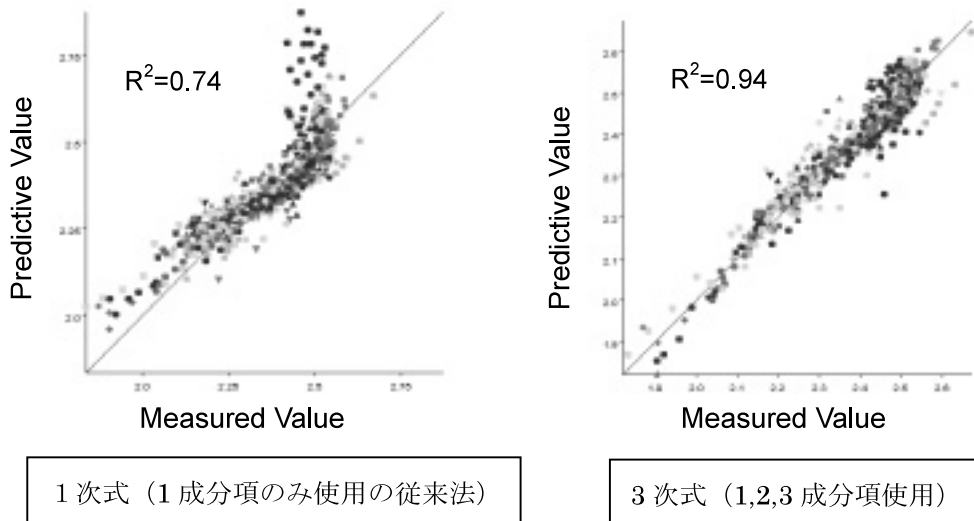


図5 多次式重回帰分析の効果の例
 $\text{SiO}_2 - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{Na}_2\text{O}$ 系ガラスの室温密度
実測値 (収録データ) と予測値の関係および寄与率 R^2

表2 温度-特性プロットが可能な特性・温度範囲

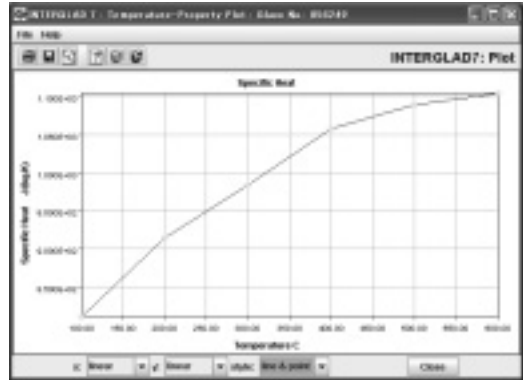
特性	温度範囲
密度	100-2000°C
ヤング率	100-1200°C
表面張力	100-2000°C
比熱	100-1500°C
熱伝導率	100-1500°C
粘度	100-2500°C
電気伝導度	50-1900°C
直流体積抵抗率	50-1900°C
交流体積抵抗率	50-1900°C
誘電損失 1kHz	50-500°C
誘電損失 1MHz	50-300°C
誘電損失 1GHz	50-300°C

また、粘性標準点 (1E1-1E14.5 dPa s) については横軸が粘度、縦軸が温度となる

3) 温度-特性プロット/データ補間ツール

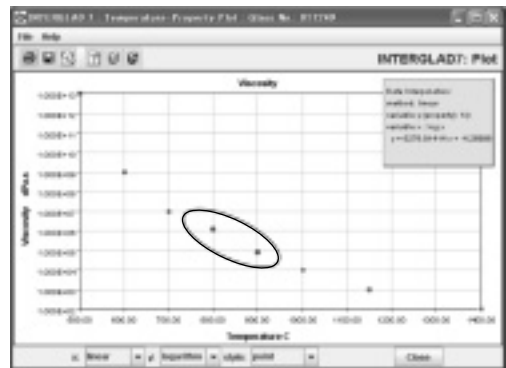
Ver.6までのINTERGLADでは、高温特性の温度によるXYプロット(温度-特性プロット)ができなかった。そこで、Ver.7では表2に示す13特性につき、温度-特性プロットを可能とした。例を図6に示す。

また、高温特性データは公表(収録)データが少ないため、所定温度の値を周辺の温度の収録データより補間法によって計算して割り出すことができるようにした。補間データは図7に例を示すように、収録データと合わせて温度-



アルカリケイ酸塩ガラス 温度-比熱プロット

図6 温度-特性プロット例



SiO₂-MgO-Na₂O系ガラスの温度-粘度プロット

○内 補間データ (赤紫色表示)

図7 データ補間例



(a)



(b)

図8 (a) 簡易検索画面と (b) フル検索画面 (従来画面)
(両画面を途中で切り替えても常に同内容となる)

特性プロットに表示することができる。得られた補間データは予測の重回帰分析にも使用できる。

4) 容易検索ツール

INTERGLADは単に検索するにも手間がかかる、とのユーザーのご意見に応え、Ver.7には検索をより容易にするツールを加えた。一つは簡易検索画面で、成分と特性の項目のみの単純な画面とした。図8に従来のフル検索画面と簡易検索画面を対比して示す。

また成分選択に周期表を使用できるようにし

た。複雑な多種の成分も周期表の元素をマウスでクリックすることにより大変容易に選択することができる。図9に周期表小画面の使用例を示す。さらに、成分および特性項目のキーワードによる選択も可能とした。キーワードを英文入力すると、キーワードを含む項目が項目ツリーにすべて青色字で表示され、選択が容易となった。例を図10に示す。

4. おわりに

以上紹介したように、INTERGLADはVer.7

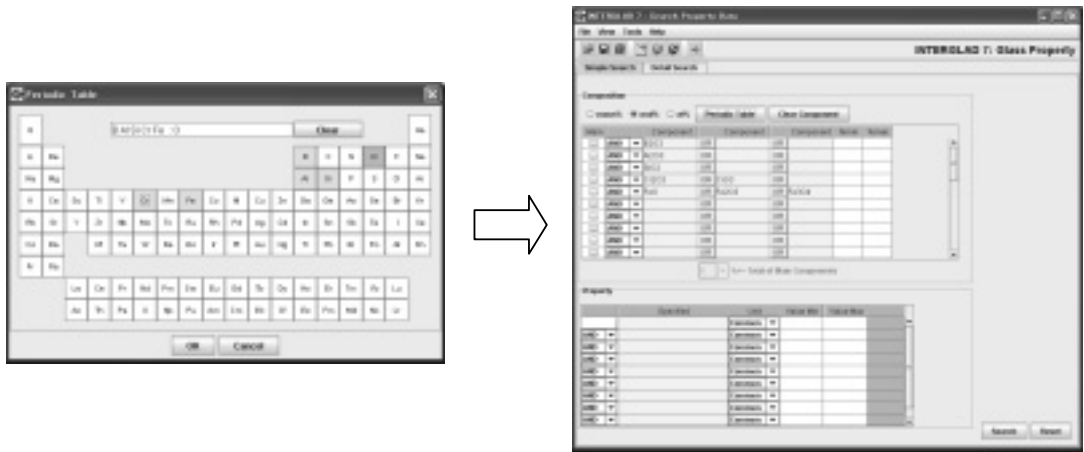
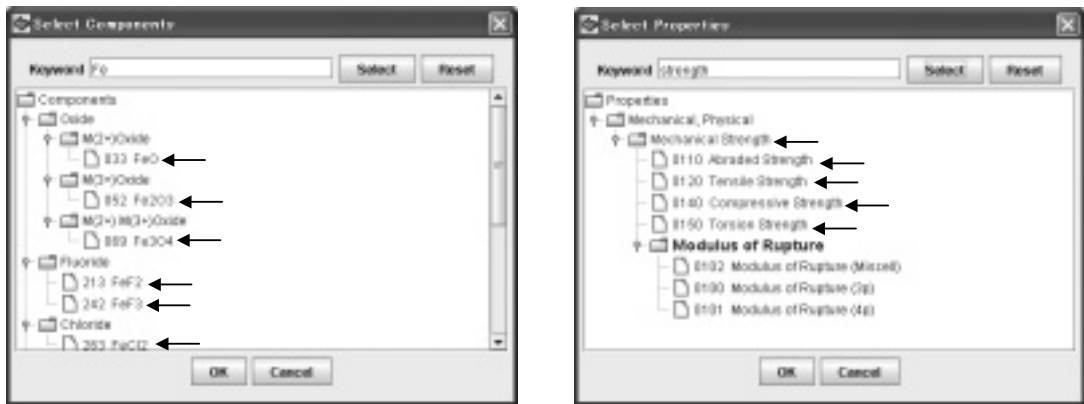


図9 成分選択のための周期表小画面と選択後の検索画面（簡易検索画面）例（周期表において選択した陽イオンは水色表示、陰イオンはピンク色表示される）



(a) (b)

図10 キーワード入力による (a) 成分選択および (b) 特性選択例（ ← キーワードを含むすべての項目が青色表示される）

でまた大きく進化し、新たにガラスの組成-特性-構造の統合データベースとしての歩を進めた。この新バージョンが多くの方々に利用され、ガラス産業および関連分野あるいは学術面の発展に寄与することを期待したい。今後も、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」の一つである2010年度末までの30万件ガラスのデータ収録を目指すと共に、ユーザーの皆様のご要望に応え、さらに改良を進めていきたい。

なお、Ver.7に組み込んだガラス構造データベース、多次式重回帰分析、データ補間ツールはNEDO「知的基盤創成・利用促進研究開発事業 ガラス構造データベース構築のための研究開発」(2005.7-2007.3 ニューガラスフォー

ラム受託)で開発されたものである。本稿の最後に、上記プロジェクトにおいてご指導・ご協力いただいた学官産委員によるガラス構造データベース委員会(委員長:井上博之東京大学教授)、その後のニューガラスフォーラムのデータベース委員会(委員長:同じく井上教授)およびシステムのプログラム制作に尽力いただいた、みずほ情報総研(株)の西川宜孝氏他の皆様に深く感謝の意を表する。

参考文献

- 1 K.Suzuki, T.Iseda and H.Inoue, ICG 2007, A 36 (2007).
- 2 K.Suzuki, T.Iseda, H.Inoue and A.Masuno, PAC-RIM 8, 575339 (2009).