

第1章 はじめに

国際ガラスデータベース INTERGLAD は社団法人ニューガラスフォーラム（2011 年より一般社団法人）によって開発され、1991 年に世界で初めてリリースされたガラスの組成・特性データを中心とするガラス情報システムです。約 34 万種のガラスに関するファクトデータが収録されるとともに、それらの情報を目的に応じて迅速に引き出し、自在に活用できる工夫がなされています。

2009 年 10 月には、この INTERGLAD に世界初のガラス構造データベースが組み込まれ、特性予測・材料設計のための重回帰分析もさらに高度化されました。また種々の使い易いツールが付加され、バージョン 7 として国内にリリースされました。2010 年 10 月には、さらに種々の改良が加えられたバージョン 7.1 が世界にリリースされました。

一般社団法人ニューガラスフォーラムは、このバージョン 7 が多くの方々に大いに利用され、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ます。

1. INTERGLAD 開発の経緯

国際ガラスデータベース INTERGLAD の具体化に向けた取組みが、国際貢献事業の一環として開始されたのは、ニューガラスフォーラムが社団法人化された 1987 年のことでした。その後、安井至 東京大学教授（現、(独)製品評価技術基盤機構 理事長）を中心に、国内企業・大学の多数のガラス研究者らの手により、システム設計からデータ収集まで 3 年の歳月をかけて開発が進められました。海外の有力ガラス企業の協力も得ました。検索プログラムの開発は外注先である大日本印刷(株)が担当しました。そして、1991 年 4 月に世界に先駆けて最初の CD-ROM がリリースされました¹⁾。収録データは 10 万組成にのぼり、その後、1993 年リリースの Ver.2 では 12 万組成、1996 年の Ver.3 では 15 万組成とデータが追加されてきました。

この Ver.3 までは OS（オペレーションシステム）に MS-DOS が使われ CD-ROM で供給されていましたが、1998 年末にリリースされた Ver.4 からは Internet 経由でも CD-ROM でも、また、Windows、Macintosh、Unix などどのような OS 上でも利用できるようになりました²⁾。この開発には凸版印刷(株)があたりました。Internet 版には半年毎にデータが追加され、2000 年秋の時点で 18 万組成に至りました。

2001 年 9 月にリリースされた Ver.5 は、機能面が大幅に強化されました。検索機能の改善をはじめ、データ解析機能、組成特性予測機能（重回帰分析³⁾および特性予測式利用）、利用者保有データの登録機能など、様々な機能が追加され、利便性の大幅な向上が図られました。この開発は、経済産業省の支援のもとに富士通(株)の協力を得て進められました。

Ver.6 は、2002 年 11 月から 2004 年にかけて NEDO プロジェクトの一環として、ニューガラスフォーラム内に組織された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（当時））とソフト実用化ワーキンググループ（主査：吉田智 滋賀県立大学）の支援のもとに、みずほ情報総研(株)の協力を得て作成されました。Ver. 6 ではシステム面での様々な改良、重回帰予測機能で定数項を用いない回帰式⁴⁾が選択できる等の新機能の追加と共に、データ面の高信頼化も重視され⁵⁾、以後データの見直しが精力的に行われてきました。また、2005 年 11 月からはプログラムインストール不要の「アプレット」版も使用できるようになり、さらに利便性の向上が図られました。

2005 年 7 月から 2007 年 3 月には NEDO の「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の構築のための研究開発」をニューガラスフォーラムが受託し、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）の支援の下、原子間情報、リング構造、配位数等のガラス構造に関するデータを収録するガラス構造データベースのプロトタイプを世界で初めて開発しました⁶⁾。今回リリースした Ver. 7 には、このガラス構造データベースが組み込まれ、INTERGLAD は、ガラスの組成・特性・構造の統合的なデータベースとしてリニューアルされました。また、多次式重回帰分析ツール⁷⁾、データの少ない高温データを補間できるようにしたデータ補間ツール等の新機能、検索を容易にする周期表の利用等、使い易さを追求した改良も種々加えられました。なお、Ver. 7 もみずほ情報総研(株)の協力を得て作成されました。

INTERGLAD には図 1 に示すように新規データが年々定常的に追加され、2018 年 5 月時点での収録ガラス数は合計 34 万種となっています。

INTERGLAD は Ver. 1 のリリース以来、低分散光学ガラス⁸⁾、酸化鉛を含まないクリスタルガラス⁹⁾をはじめとした各種の新種ガラスの開発、ガラス組成特許の探索、ガラス物性の研究、新組成ガラスの研究テーマ探索、ガラスを用いた新製品の開発、特許出願などに幅広く利用され、大変有用なガラスの研究開発支援ツールとして、世界のガラス産業やガラス研究の発展に少なからぬ役割を演じています。

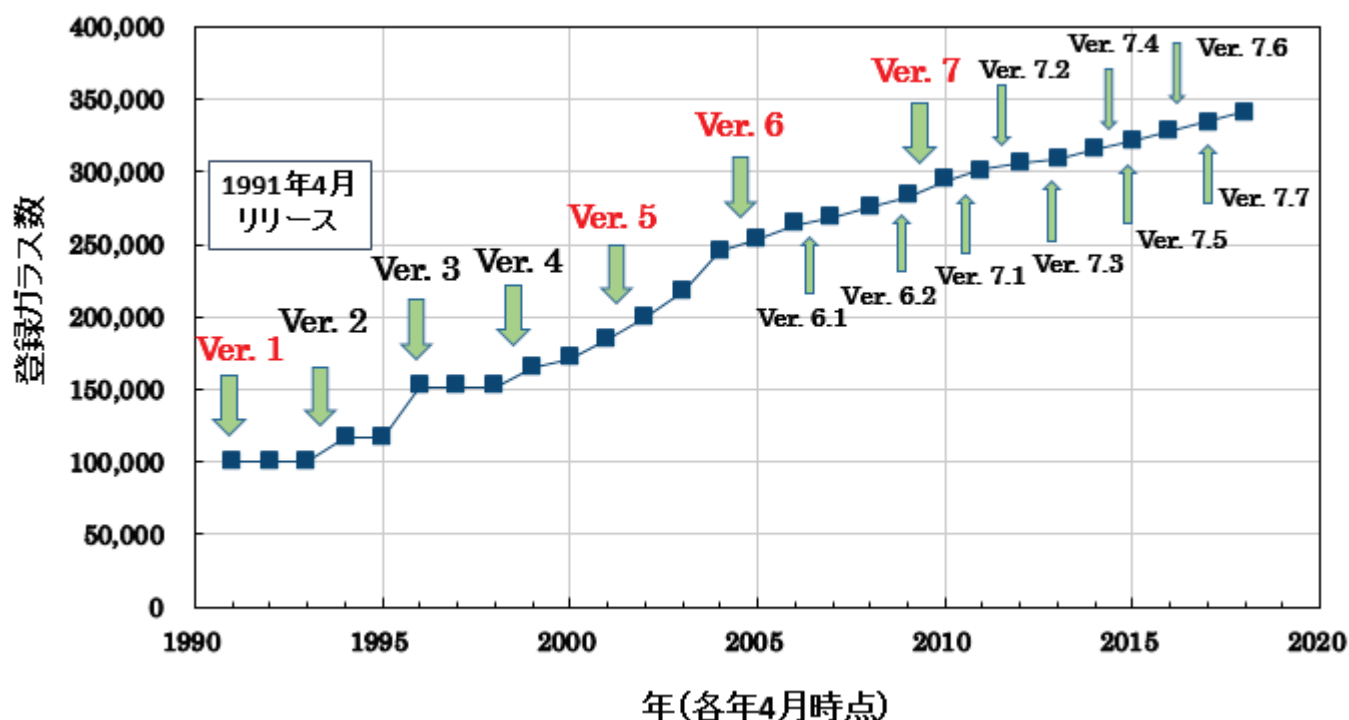


図 1 INTERGLAD のバージョンアップおよびデータ更新の経緯

2. INTERGLAD Ver. 7 の特長（Ver. 6 に対する改良点、新規点等）

- 1) ガラス構造データベースを世界で初めて開発し、組み込みました。
 - ・IR、ラマン、NMR、メスバウアー、ESR、X 線回折、XAFS、中性子回折、MD 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）、リング構造、架橋酸素情報、配位数、酸化数等のガラス構造情報をデータベース化しました。
 - ・登録データはまだ少数（約 1 万件 2018.5）ですが、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り、ガラスの材料開発等に役立ちます。
 - ・Ver. 7 は、特性データベースと構造データベースの 2 つの構成としてシステムの入口から分けました。特性データベースは Ver. 6 までの INTERGLAD を意味します。特性データベースと構造データベースはそれぞれの検索結果から相互呼び出し、解析ができます。なお、構造データベースは英語版のみとなっています。
- 2) 特性予測・組成設計のための重回帰分析をより高度化しました。
 - ・従来の一次式による重回帰分析に加え、加成性を示さない組成範囲の特性も良好に予測できる多次式重回帰分析（説明変数に 2 成分、3 成分の割合を掛け合わせた項も使用できる）を組み込みました。
 - ・使用が容易となるアシスタンス ダイアログを組み込みました。
 - ・操作中のクエスチョン、エラー処理を半自動的に行えるようにし、より簡易に重回帰分析ができるようになりました（Ver. 7.2 より）。
- 3) 温度－特性プロットができるようになりました。
 - ・密度、表面張力、熱伝導率など各温度でのデータが 1 つのガラスシートの中に収録されている場合、それら

のデータを温度－特性の X Y 図で示すことができるようになりました。

4) 三角図の表示条件設定がすべて三角図画面でできるようになりました (Ver. 7.2 より)。

- ・従来は三成分選択等の表示条件を変える際、特性検索画面に戻り、三角図条件設定小画面で再設定する必要がありましたが、すべての条件設定を三角図画面で行うことができるようになりました。

5) 図表示の軸表示条件、プロット点のマーカ形状、色を選択できるようになりました。

- ・各種の X Y 図の軸の数値範囲、数値の表示形式 (E 形式等)、小数点以下桁数、プロット点のマーカ形状、色選択ができます。三角図の場合 (一部) も、プロット点のマーカ形状、色を選択できます (形状、色: Ver. 7.4 より)。

6) 出典の複数選択ができるようになりました (Ver. 7.3 より)。

- ・出典を 4 種類まで選択でき、それぞれに AND、OR、NOT のいずれかが指定できるようになりました。

7) データ補間ツールを組み込みました。

- ・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・表示できるようになりました。得られた補間データを重回帰分析にも使用できます。
- ・補間対象のデータには、密度、ヤング率、表面張力、比熱、熱伝導率、粘度、粘度標準点、電気伝導度、電気抵抗率、誘電損失の高温データ等があります。

8) 検索をより容易にするツールを付加しました。

- ・簡易検索画面: 従来のフル検索画面に加え、組成と特性のみの検索欄からなる簡易検索画面を付加しました。
- ・周期表小画面: 組成成分を周期表により大変容易に選択できます。もちろん従来の成分小画面からも選択できます。
- ・キーワード検索: 組成成分、特性、外観・特徴・製法、用途、出典等をキーワードのインプットにより容易に選択することができます。
- ・外観・特徴・製法、用途については、すべてのカテゴリでの (どの項目でも) 検索ができます (Ver. 7.5 より)。

9) 特性計算式を補充し、改良を加えました。

- ・熱伝導率の特性計算式に Ammar の式¹⁰⁾を加えました。
- ・9 つの式につき計算可能な組成範囲を広げました (1 つの式については狭めました)。
- ・粘度 (標準点) の特性計算式に Fluegel の式、3 式を加えました (Ver. 7.3 より)。
- ・電気伝導率の特性計算式に Fluegel の式を加えました (Ver. 7.3 より)。

10) 画面印刷、ファイル保存機能を拡大しました。

- ・同一出典画面の印刷、重回帰分析画面のファイル保存、解析・予測結果の画像保存等が可能となりました。

11) 使い易いツールバー、メニューバーを充実しました。

- ・すべての機能を上部のメニューバーにまとめ、よく使用する項目はツールバーにアイコンで表示しました。

12) CD フル機能版も利用可能となりました (別利用料金)。

- ・WEB 接続しないパソコンでもフル機能が使用できます。インターネット回線による第三者の不法侵入等の心配がなくなり、ユーザーデータベース管理におけるセキュリティ保持強化に役立ちます。

13) ユーザーデータ機能を強化しました。

- ・ユーザー定義のガラスコード名および特性名が自由に設定できるようになりました。

14) 処理速度がアップしました。

- ・複雑な検索 (NOT 検索、主成分指定検索など) も高速処理できます。

1 5) 新規データの収録、データの信頼性向上に継続的に努めています。

- ・年間 6000-8000 件の新規ガラスの特性データ収録、また気付いた誤データの修正を行っています。構造データについても収録数を徐々に増やしていきます。

1 6) ユーザーズマニュアルを全面改訂しました。

- ・使用目的毎に画面を追って操作方法がわかる基本操作マニュアルを作成しました（第3章）。
- ・追加修正された各種検索キーワード（ID）も改めて整備しました（日本語／英語対応）。
- ・利用例を全面改訂し、全部で 26 例に増やしました（2012 年度）。
- ・マニュアルは基本的に PDF として随時更新し、WEB ページで常に最新のものを閲覧・ダウンロードできるようにしました（年間利用契約の利用者対象）。

1 7) 最新の INTERGLAD システムが WEB ページよりダウンロードできるようになりました。

1 8) 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しました。

参考文献

- 1) Y. Suzuki, Am. Ceram. Soc. Bull., 70 (1991) 219.
- 2) 斉藤友明、小黒久史、深見拓史、伊勢田徹、情報知識学会研究報告会予稿集、1999 年 5 月, p.63.
- 3) I. Yasui, F. Utsuno, Am. Ceram. Soc. Bull., 72 (1993) 65.
- 4) T. Iseda, Y. Iwasa, S. Yoshida, T. Kawasaki, Proc. XX-ICG (ICG, Sept. 2004) 07-029.
- 5) F. Utsuno, H. Inoue, I. Yasui, S. Tsuboi, T. Iseda, Proc. XX-ICG (ICG, Sept. 2004) 07-030.
- 6) K. Suzuki, T. Iseda, H. Inoue, ICG2007, A36.
- 7) K. Suzuki, T. Iseda, H. Inoue, A. Masuno, PACRIM8-S23-P179-2009.
- 8) 福岡荘尚、木下博章、野田聡、森田祐子、J. Ceram. Soc. Jap., 110(2002), 1073.
- 9) H. Satha, M. Remram, J. Simons, Proc. Int. Sym. Glass Problems (ICG, Sept.1996) 193.
- 10) M. M. Ammer, S.A. Garib, M. M. Halawa, H. A. El-Batal, K. El-Badry, Communications of Am. Ceram. Soc., May 1983, C-76.