

ガラス化範囲画像情報データベースの作成

—ガラスの材料設計支援システムの一環として—

Production of the Database System of Graphical Glass-formation Data
—As a Part of a Support System of Material Design of Glass—

長谷川 洋*・青木 能理顕**・安井 至*
Hiroshi HASEGAWA, Nouriaki AOKI and Itaru YASUI

1. 緒 言

筆者らは、ガラス、セラミックスの材料設計プログラムを構築することを目標として、いくつかの研究を進めてきたが、ガラスは粒界を持たず、組成を連続的に変えることができ、作製条件により物性がほとんど変わらないという特徴を持っており、ガラスの材料設計は組成設計に置き換えられる。そういう事情からガラスでは材料設計が比較的容易に行える可能性を持っており、すでに筆者の一人は、シリカ系についての物性予測システムを作製したり。

しかしこのシステムでは、適用できる組成範囲が限られており、ガラス全般にわたって物性を予測することは難しい。また予測された物性値の精度もかなりまちまちである。そこで筆者らは、ファクトデータとガラスの物性に関する理論を組み合わせて新しいガラスの材料設計プログラムを構築することを考えている。

近々ニューガラスフォーラムからガラスの物性データベースが発刊される予定となっている。これは「INTERGLAD」と呼ばれ、ガラスの学術論文、データブック、特許などから収録した約90,000件のファクトデータから構成されており、CD-ROMの形で提供されるものである。

この「INTERGLAD」は、ファクトデータに簡単な検索ができるソフトが付いているが、材料設計の立場から高度の利用をもくろむユーザーはその目的に適したシステムを作成していくことになる。このファクトデータは多くの組成点のデータであり、点からはずれた組成が無数に存在するわけで、そうした組成の物性値を推定したり、所定の仕様を満たすガラス組成の予測などできることが、材料設計の立場から求められよう。またこの「INTERGLAD」は、数値データおよび文字データのみから構成されており、画像情報のデータは持っていない。ガラスの一番基本的なデータであるガラス化範囲のデー

タも、一般的には画像情報となるため持っていない。したがって所定の組成が入力されたとき、それがファクトデータのいずれかの組成点に一致すれば、ガラス化範囲内であることはわかるが、組成点をはずれた場合の判定はできない。

こうしたことからガラスの材料設計システムを構築しようとするれば、まずこうしたガラス化範囲の画像情報を組み込むことが必要となる。この研究はそうしたガラスの材料設計システムの一部をなすガラス化範囲の画像情報データベースの試作である。

ガラスの材料設計支援システムが完成した場合、ガラスの組成を入力することによって種々の物性値の一覧が示されると共に画面の一部にこのガラス化範囲図とその組成点が表示されることになる。

2. ガラス化範囲ファクトデータ

ガラス化範囲については、多くのデータが蓄積されている。ある組成のガラス化範囲は、①融液の冷却速度(冷却条件) ②試料の量 ③原料 ④雰囲気 ⑤るつぼの種類 などにより変化する量ではある。冷却速度をあげるとガラス化範囲は広がり、試料の量が増えればせまる傾向にあるが、その変化はそれほど大きくなく、試薬級の原料を用いて、反応性でないつぼ中で、空気中で熔融し、空気中で放冷する場合は、大体同じガラス化範囲を示す。今岡らが多数の3成分系でガラス化範囲を調べており、今回は主としてそれを集録した。その場合の条件は、試料の量としては、1/80モル、るつぼは融液と反応性の少ない金、金-パラジウム、白金、白金-ロジウムなどを用い、バーナーまたは電気炉で加熱し、空気中で放冷するというものである。

現在3成分系のデータがシリカ系について300件入力されているが、ほう酸塩系、ゲルマネート系、テルル酸塩系など650件を追加入力する予定である。今後特殊な条件で調べられたガラス化範囲もデータベースに含めていく予定であるが、その場合はガラス化範囲を示す際に、

*東京大学生産技術研究所 第4部

**元東京大学大学院学生(現セントラル硝子K.K)

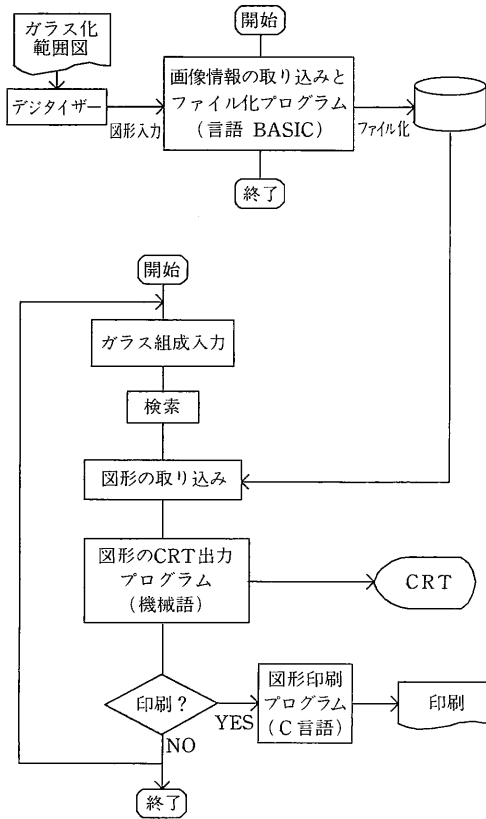


図1 ガラス化範囲データベース・プログラムのフローチャート

条件の違う場合が区別されて表示できるようにする予定である。

3. システム構成

ハードウェアとしては、最も普及している16ビットまたは32ビットパソコンであるNEC PC-9800シリーズを対象としており、高解像度ディスプレイ、できればハードディスクを備えていることが望ましい。

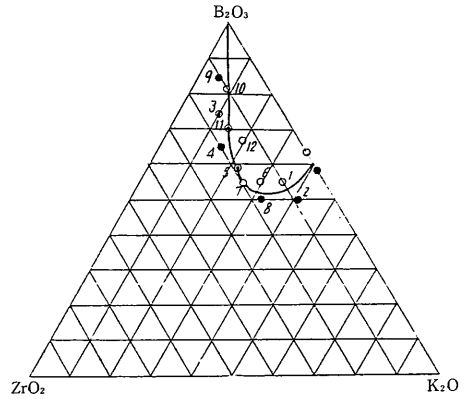
このシステムの構成は、ガラス化範囲データを集録し、それをデータベースの形に整理し、検索が可能な形にする。キーボードから組成を入力すると、データベースプログラムによりガラス化範囲を検索し、ディスプレイおよびプリンターに出力するプログラムから構成される。

1. ガラス化範囲のデータの集録

デジタイザによる3成分系のデータの入力

2. 組成の入力とデータ検索システム

これをフローチャートとして図1に示す。



第3・56図 B₂O₃-ZrO₂-K₂O系

No.	B ₂ O ₃	ZrO ₂	K ₂ O	状 態	透 明	備 考
1	55.0	10.0	35.0	ガラス	透 明	無 色
2	50.0	9.1	40.9	結 晶	不 透 明	無 色
3	72.7	17.1	10.2	ガラス	半透明	半乳白
4	65.0	20.0	15.0	結 晶	不 透 明	白 色
5	59.1	18.2	22.7	ガラス	一部透明	白 色
6	54.1	16.7	29.2	ガラス	透 明	無 色
7	55.0	20.0	25.0	ガラス	透 明	無 色
8	50.0	18.2	31.8	結 晶	不 透 明	無 色
9	83.7	10.9	5.4	結 晶	不 透 明	帯 黄
10	80.3	10.4	9.3	ガラス	透 明	無 色
11	70.0	15.0	15.0	一部ガラス	透 明	無 色
12	65.8	14.2	20.0	ガラス	透 明	無 色

図2 三成分系ガラス化範囲データの一例³⁾

3. ガラス化範囲画像情報のディスプレイおよびプリンター出力

4. ガラス化範囲画像情報の集録

今岡らの3成分系ガラス化範囲のデータは、図2のような形のデータとして、主として生産技術研究所報告に記載されている。このガラス化範囲を示す曲線をデジタイザを用いて入力した。入力のためのプログラムは、BASICで組まれている。入力データはX、Y座標の数値データの羅列となっており、1つのファイルとして保存される。組成とこのガラス化範囲データファイルの対応表が作られており、検索はそれに基づいて行われる。

今回はシリカ系を中心に、約300件を入力した。

5. データ検索プログラム

検索のため、ガラス成分とガラス化範囲画像情報データのファイル名をフィールドにもつ検索用データベースを作成するが、その検索ロジックはいろいろ考えられる。

今回は次のような方法を採用した。まず個々のフィールドに入っている3成分名をアルファベット順に並べて接

研究速報

合したものを、新しいフィールドに入れた検索用データベースを作った。検索を行うときは、入力された成分名を同じようにアルファベット順に並べ替え、接合して1つの文字列を作り、検索用データベースのフィールドと一致するものを検索する形とした。その結果、検索を瞬時で行うことができた。

6. 出力プログラム

検索プログラムはdBASE IIIで組まれているので、このプログラムの中からガラス化範囲図を描かなければならない。一つの方法として[EGR98]のような常駐型ソフトをdBASE IIIコマンドから用いる方法があるが、dBASE IIIがインタープリターであるため、(たとえコンパイルしても)出力が遅くなってしまう。したがって画像出力部分については機械語のプログラムを作成し、dBASE IIIから起動して描画することにした。

7. 考察

ガラス材料設計支援システムの一環として、ガラス化範囲画像情報データベースシステムを作成したわけであるが、ガラス化範囲の図は十分高速で検索され、描画も1~2秒で終了する。また3成分系をメインとしているが、2成分系も検索可能となっている。つまり2成分を含む最もレコード番号の若いものが表示されるようになっている。

成分を入力してその系のガラス化範囲を表示するだけでなく、ガラス組成を入力するとその組成がガラス化するかどうかの判定をするプログラムにすべきかも知れない。しかしガラス化範囲の情報はまだ完全とはいいがたく、必ずしも閉曲線とはなっていないので、ガラス化の

判定が出来ない場合が少なくない。したがって今回はガラス組成が入力されたときは、ガラス化範囲の図にその組成点を示し、ガラス化するかどうかの判定はオペレーターが判断する形とした。

実際のガラス材料設計支援システムでは3成分以上の系が取り扱われる可能性が高い。こうした多成分のガラス化範囲の情報はほとんどないし、今後発表される可能性も小さい。そこで4成分以上の多成分系の場合は、その中で最も割合が多い3成分を選び出して、そのガラス化範囲を表示することにした。

8. まとめ

既報の3成分系ガラス化範囲画像情報(約300件)をデータベース化し、成分を入力すると、その系のガラス化範囲の図が表示されるシステムを作成した。高速の検索が可能で、ガラス化範囲の図も高速で描画され、十分実用に耐えるものとなっている。これは著者らが構築しようとしているガラス材料設計支援システムの一部を構成するものである。

今後ほう酸塩系、ゲルマネート系、テルル酸塩系のガラス化範囲データを入力した後、酸化物系ガラス化範囲データベースとして一般に公開する予定である。

(1991年1月29日受理)

参考文献

- 1) 牧島亮男他, 人工知能学会全国大会論文集, 267(1987)
- 2) ニューガラスフォーラム, 国際ガラスデータ・ベース [INTERGLAD] CD-ROM作成—大日本印刷(株) (1991)
- 3) 今岡稔, 山崎敏子, 生産技術研究所報告, Vol. 6, No. 4, Vol. 18 No. 4, Vol. 19 No. 3, Vol. 22 No. 3, Vol. 24 No. 2, Vol. 26 No. 1, Vol. 31 No. 2, No. 3