International Glass Database System
INTERGLAD Ver. 7
NEW GLASS FORUM

第３章　INTERGLAD Ver. 7 基本操作方法

システムインストールおよび初期設定方法 ……1
A.　スタート方法 ……10
B.　特性データベース検索方法 ……11
C.　特性データベース解析方法 ……14
C. 1　三角図解析 ……14
C. 2　XY プロット解析 ……15
C. 3　温度-特性プロット解析 ……17
C. 4　データ補間 ……17
C. 5　元素解析（データ密度解析） ……19
D.　特性データベース予測・設計方法 ……20
D. 1　特性予測（特性式利用） ……20
D. 2　特性予測（重回帰分析） ……21
D. 3　材料設計(組成最適化)（重回帰分析） ……25
E.　構造データベース検索・解析方法 ……28
F.　ユーザーデータベース登録・利用方法 ……31
F. 1　データ登録 ……31
F. 2　データ　一括登録 ……33
F. 3　ユーザーデータベース利用 ……36
付帯資料
１．多次式重回帰分析について ……39
２．データ補間について ……40
３．代表値について ……41

INTERGLAD のご使用が初めての方も、
本章の基本操作方法により一通りの利用ができます。
詳細はユーザーズマニュアル第 4 章をご覧下さい。

2018.01.18 改訂

システムインストールおよび初期設定方法

INTERGLAD 利用形態（スタンダード版、インターネット版、CD フル機能版）によりシステムインストールおよび初期設定方法が異なります。また、使用する Java のバージョンにより、利用可能な機能、設定方法が変わります（下の一覧表を参照ください)。

1．インターネット版利用

2．スタンダード版利用

3．CD フル機能版利用　（1．2．3．につき、主に Windows 10 の場合で説明)

4．スタンダード版、CD フル機能版のアップデート方法

5．新 INTERGLAD サーバーへの移行に伴う接続先変更方法

INTERGLAD Ver. 7 利用形態、利用可能機能、設定

1．インターネット版：　システムのインストール不要、最新のデータでファイル入出力およびユーザーデータ以外のフル機能が利用ができます

システムインストール	インターネット接続	認証	Java (32bit)	利用データベース[1]	利用機能						パソコン		
					検索	解析	予測設計	印刷[2]	ファイル入出力[3]	ユーザーデータ変換・登録	動作環境	バッチファイル書き換え	
												Win 32bit	Win 64bit
不要	要	サーバー (ID, PW)	Ver. 7	サーバーDB	○	○	○	○	×	－	Windows Linux Mac OS X	－	－
			Ver. 8										

2．スタンダード版：　最新のデータでフル機能が利用できます（Java Ver. 7使用の場合）
最新のデータでユーザーデータ以外のフル機能が利用できます（Java Ver. 8使用の場合）

システムインストール	インターネット接続	認証	Java (32bit)	利用データベース[1]	利用機能						パソコン		
					検索	解析	予測設計	印刷[2]	ファイル入出力[3]	ユーザーデータ変換・登録	動作環境	バッチファイル書き換え	
												Win 32bit	Win 64bit
要	要	サーバー (ID, PW)	Ver. 7	サーバーDB	○	○	○	○	○	－	Windows Linux* Mac OS X* (*サーバーDBのみ)	要[5]	要[6]
				ローカルDB	○	○	○	○	○	－			
				ユーザーDB	○	○	○	○	○	○			
			Ver. 8	サーバーDB	○	○	○	○	○	－		不要	不要
				ローカルDB	×	×	×	×	×	－			
				ユーザーDB	×	×	×	×	×	×			
暫定版[4] 解凍				サーバーDB	○	○	○	○	○	－	Windows Linux Mac OS X	不要	不要
				ローカルDB	○	○	○	○	○	－			
				ユーザーDB	○	○	○	○	○	×			

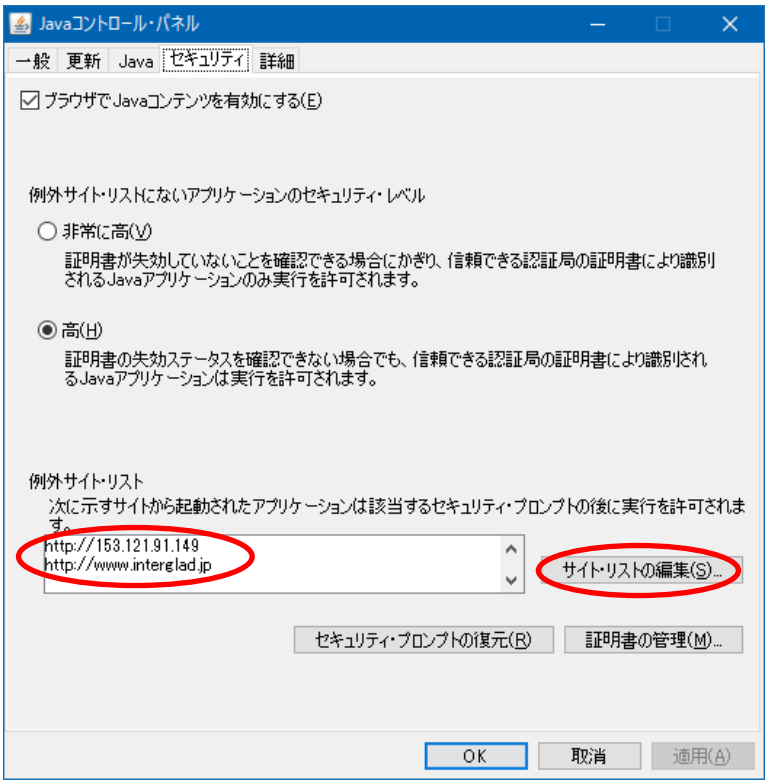
3．CDフル機能版：　インターネットに接続せず、フル機能が利用できます（Java Ver. 7使用の場合）
インターネットに接続せず、ユーザーデータ以外のフル機能が利用できます（Java Ver. 8使用の場合）

システムインストール	インターネット接続	認証	Java (32bit)	利用データベース[1]	利用機能						パソコン		
					検索	解析	予測設計	印刷[2]	ファイル入出力[3]	ユーザーデータ変換・登録	動作環境	バッチファイル書き換え	
												Win 32bit	Win 64bit
要	不要	アクセスキー	Ver. 7	ローカルDB	○	○	○	○	○	－	Windows	要[5]	要[6]
				ユーザーDB	○	○	○	○	○	○			
			Ver. 8	ローカルDB	×	×	×	×	×	－		－	－
				ユーザーDB	×	×	×	×	×	×			
暫定版[4] 解凍				ローカルDB	○	○	○	○	○	－	Windows Linux Mac OS X	不要	不要
				ユーザーDB	○	○	○	○	○	×			

(注)
1) 利用データベース
・サーバーDB：ニューガラスフォーラムのINTERGLADサーバー中のデータベース（常に最新のデータを利用可能）
・ローカルDB：ユーザーのパソコンにインストールされたINTERGLAD中のデータベース(Web上あるいはCD中のINTERGLADシステムをダウンロードして使用)、毎年更新
・ユーザーDB：ユーザーによりINTERGLADに登録されたデータのデータベース（ユーザーのパソコン中に保管）、サーバーDB、ローカルDBと一緒に検索等の使用可能
2)印刷：表全体（画面に現れていない部分も含め）、図の印刷ができます
3)ファイル入出力：検索条件、検索結果、解析結果、予測結果等のデータ保存（ユーザーのパソコン中への画面データのCSVあるいは画面保存）
4) 暫定版：Java Ver. 8で使用できるよう、JDBCおよびUCanAccessを利用した版（Java Ver.8にODBCデータソースへのアクセス機能がなくなったため暫定的に作成したもの）
5) 32bit バッチファイルの書き換え　冒頭の「java」 → 「"c:¥Program Files¥Java¥jre7¥bin¥java.exe"」　Java Ver. 7のみがインストールされている場合には書き換え不要
6) 64bit バッチファイルの書き換え　冒頭の「java」 → 「"c:¥Program Files (x86)¥Java¥jre7¥bin¥java.exe"」　Java Ver. 7のみがインストールされている場合にも書き換え要
なお、INTERGLADは特性データベースと構造データベースより構成されます。構造データベースには予測・設計機能、ユーザーデータ機能がありません。また英語版のみとなります

1．インターネット版利用

インターネット版は、Web ブラウザとして Internet Explorer（9.0 以上）を使用の場合、Java（Version 6～8）のインストールのみで使用できます（2. ②参照）。Windows 10 等の場合、以下の操作が必要になります。コントロールパネルを開き、Java を選択します。開いた Java コントロール・パネルのセキュリティタブをクリックし、「ブラウザで Java コンテンツを有効にする」にチェックを入れ、「サイトリストの編集」をクリックし、例外サイト・リストを開き、追加をクリックし、http://153.121.91.149 および http://www.interglad.jp を追加してください。インターネット版を使用する際、URL として http://153.121.91.149/interglad7/ あるいは http://www.interglad.jp/interglad7/ が使用でき、それぞれに対応した上記の Java 例外サイト追加が必要となるためです。なお、Web ブラウザの Microsoft Edge、Google Chrome は Java に対応していないため使用できません。Web ブラウザの詳細については第 2 章 4. (2) 3)をご覧ください。



Java コントロール・パネル　セキュリティ画面

インターネット版の起動は、http://153.121.91.149/interglad7/ あるいは http://www.interglad.jp/interglad7/ により INTERGLAD WEB ページを開きます。このページは、ニューガラスフォーラム Web サイトより、INTERGLAD Ver. 7 ページを開き、右欄の INTERGLAD 接続、Ver.7 インターネット版をクリックすることによっても開くことができます。画面左の User ID および Password 記入欄にそれぞれを記入し、LOGIN ボタンをクリックします。その後、Windows10 の場合、以下のようなダイアロ

グ対処が必要となる場合があります。

①「Java は最新のものではなく更新が必要なためブロックされました」⇒「今回は実行」

②「このページを再表示するには、以前送信した情報を再送信する必要があります」
⇒「再試行」

③「Java のバージョンは最新ではありません」⇒「→後で」

④「このアプリケーションを実行しますか」⇒「実行」

INTERGLAD Ver.7 のメイン画面が現れますが、INTERGLAD WEB 画面の下となりますので、メイン画面を上にして利用してください。

２．スタンダード版利用

① パソコンの OS（オペレーティングシステム）確認

パソコン OS が 64bit 版か 32bit 版かを以下により確認します。コントロールパネルのシステムとセキュリティを開き、システム画面を開くと、システムの種類が 64 ビットオペレーティングシステム、あるいは 32 ビットオペレーティングシステムと表示されます。

② Java インストール

下記 Web ページより Java をパソコンにダウンロードしてインストールします。

http://java.com/ja/download/ie_manual.jsp

この場合、通常、パソコン OS にかかわらず Java Ver. 8 の 32bit 版（最新版）が導入されます。Java Ver. 7 までには ODBC データソースへのアクセス機能がありましたが、Ver. 8 にはこの機能がありません。従って、Java Ver. 8 使用の場合、ローカル DB（データベース）およびユーザーDB の使用ができなくなりました。そこで、INTERGLAD のフル機能利用のためには下記のサイトより Ver. 7（32bit 版）をインストールすることが必要となります。なお、Ver. 7 については Oracle 社のパブリックアップデートがすでに終了しています（2015.4）。

http://www.oracle.com/technetwork/java/javase/downloads/java-archive-downloads-javase7-521261.html#jre-7u80-oth-JPR

Windows x86 Offline: jre-7u80-windows-i586.exe

なお、このダウンロードは、画面の手順に従い、無償の Oracle プロファイルを取得し、設定したユーザー名、パスワードを入力して行います（わかりにくい場合には NGF 事務局にご相談ください）。

Java Ver. 7 がすでにインストールされている場合には、Java のアップデートにより、Ver. 7 を削除しないよう注意します。なお、セキュリティ上の必要がある場合には Oracle 有償サポートを利用することもできます。

またスタンダード版の場合、ユーザーデータ機能以外のすべての機能を Ver. 8 のインストールのみで利用できます。

③　INTERGLAD システムをインストール

1)下記 Web ページを開き、User ID および Password を入力して LOGIN ボタンをクリックします。次に Download をクリックしてダウンロードページを開きます。

http://www.interglad.jp/interglad7/download/

上記 Web ページは、ニューガラスフォーラム Web サイトより、INTERGLAD Ver. 7 ページを開き、右欄の INTERGLAD 接続、スタンダード版プログラムダウンロードをクリックすることによっても開くことができます。

2) 表示される INTERGLAD Downloads 画面より、Windows 10 (7, 8 も同)の場合には、最新バージョンのインストーラー(interglad-7.*.*.*-setup-win.exe)を選択し、パソコンに保存後、インストールします。

なお、インストールのために、パソコンのセキュリティソフトを一時停止するか、セキュリティレベルを一時的に下げるなどが必要となる場合があります。例えば Windows 10 で Windows SmartScreen が有効となっている場合には、これを一時的に無効とする必要があります（コントロール・パネルのセキュリティとメンテナンス画面より、Windows SmartScreen の設定の変更を行います)。「Windows によって PC が保護されました」とのダイアログが現れた場合には、「詳細の情報」をクリックし、「実行」をクリックします。

また、使用環境により管理者等の ID、パスワードが必要となる場合もあります。

Mac OS X / Linux の場合には、Mac OS X / Linux 用の interglad-7.*.*.*.zip をダウンロード、展開します。

④ Java Ver.7 使用の場合には、[interglad7]バッチファイルの書き換え

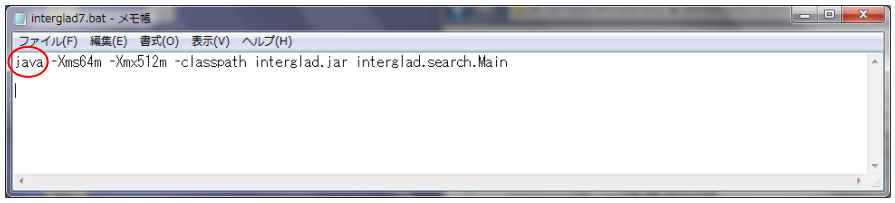
この書き換えは、パソコン OS が 32bit で Java Ver. 7 と Ver. 8 を併用している場合、また OS が 64bit の場合には、Java Ver. 7 と Ver. 8 を併用しているかどうかにかかわらず必要となります。Java Ver. 8 使用の場合には必要ありません。

1) デスクトップに表示された[INTERGLAD 7.6]アイコンを右クリックして[編集]を開きます。

2) [interglad7]バッチファイル（interglad7 - メモ帳）の記載内容を書き換えます。

システムインストール時（書き換え前、下図）

java -Xms64m -Xmx512m -classpath interglad.jar interglad.search.Main



冒頭の[java]を下記に書き換えます。

パソコン OS が 32 ビットの場合、

"c:¥Program Files¥Java¥jre7¥bin¥java.exe"　(" "も含める、スペース半角)

パソコン OS が 64 ビットの場合、

"c:¥Program Files (x86)¥Java¥jre7¥bin¥java.exe"　(" "も含める、スペース半角)

変更内容を保存します。これにより、インストール・設定が終了しました。なお、本操作にはマニュアルの pdf よりのコピー&ペーストが便利です。文字コードは ANSI とします（[ファイル]→[名前を付けて保存]より確認・変更ができます)。

⑤ INTERGLAD 起動

デスクトップに表示された[INTERGLAD7.6]アイコンをダブルクリックすると INTERGLAD システムが起動し、メイン画面が開きます。User ID、Password を要求するダイアログが現われますので、User ID、Password を入力し、[OK]ボタンをクリックします。Java Ver. 8 使用の場合には、「Cannot connect local database.・・」のダイアログが 4 回現れますので、それぞれに「OK」ボタンをクリックします。また画面上部のアイコンから Preference 画面を開き、INTERGLAD Data の Server を選択します。

以上の操作でインストール・設定が終了し、検索等の操作が実行できます。なお、Java Ver. 7 使用の場合には、上記の「Cannot connect local database.・・・」のダイアログは現れません。User ID、Password の入力は、INTERGLAD システムの起動毎に必要となります。

⑥ Java Ver. 8 対応暫定版の利用

Java Ver. 8 使用の場合にもフル機能が利用できるよう検討中であり、その暫定版を使用できます。本暫定版は、ODBC データベースへのアクセス機能を JDBC、UCanAccess により補完したもので、ユーザーデータ登録・変換以外のすべての機能が利用できます。既登録のユーザーデータはサーバーデータと一緒に検索また予測に使用することができます。

本システムを利用する場合には、まず③ 1)に記載された方法により INTERGLAD Download 画面を開き、[INTERGLAD の利用環境（Java 実行環境）]をクリックします。次に、このページの 2 (2)に記載の INTERGLAD7.5b (Zip Binary)をダウンロードします。”interglad-7.*.*.0b.zip”　セットアップ手順はそのページに記載されています。

本暫定版の立ち上げはデスクトップに作られた[interglad7]バッチファイルのショートカットアイコンをダブルクリックすることにより行います。最初の立ち上げにのみ多少時間を要します（10 分程度)。

３． CD フル機能版利用

① パソコン OS（オペレーティングシステム）確認

パソコン OS が 64bit 版か 32bit 版かを以下により確認します。コントロールパネルのシステムとセキュリティを開き、システム画面を開くと、システムの種類が 64 ビッ

トオペレーティングシステム、あるいは 32 ビットオペレーティングシステムと表示されます。

② Java インストール

下記のサイトより Java Ver. 7（32bit 版）をインストールします。

http://www.oracle.com/technetwork/java/javase/downloads/java-archive-downloads-javase7-521261.html#jre-7u80-oth-JPR

Windows x86 Offline: jre-7u80-windows-i586.exe

このダウンロードは、画面の手順に従い、無償の Oracle プロファイルを取得し、設定したユーザー名、パスワードを入力して行います（わかりにくい場合には NGF 事務局にご相談ください）。

Java Ver. 7 までには ODBC データソースへのアクセス機能がありましたが、Ver. 8 にはこの機能がありません。従って、Java Ver. 8 のみ使用の場合には、ローカル DB（データベース）が必要な通常の CD フル機能版の利用ができません。Java Ver. 8 のみの使用が必要な場合には、3. ⑥をご覧ください。なお、Java Ver. 7 については Oracle 社のパブリックアップデートがすでに終了しているため、セキュリティ上の必要がある場合には Oracle 有償サポートを利用することもできます。Java のアップデートにより、Ver. 7 を削除しないよう注意します。

③ INTERGLAD システムをインストール

CD 中の下記インストーラーを、パソコンに保存した後、インストールします。

Windows 10（7, 8 も同）の場合　　interglad-7.6.*.*-sa-setup-win.exe

なお、インストールのために、パソコンのセキュリティソフトを一時停止するか、セキュリティレベルを一時下げるなどが必要となる場合があります。例えば Windows 10 で Windows SmartScreen が有効となっている場合には、これを一時的に無効とする必要があります（コントロール・パネルのセキュリティとメンテナンス画面より、Windows SmartScreen の設定の変更を行います）。「Windows によって PC が保護されました」とのダイアログが現れた場合には、「詳細の情報」をクリックし、「実行」をクリックします。

また、使用環境により管理者等の ID、パスワードが必要となる場合もあります。

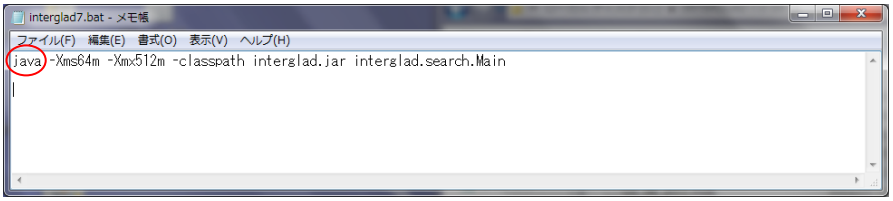
④ [interglad7]バッチファイルの書き換え

この書き換えは、パソコン OS が 32bit で Java Ver. 7 と Ver. 8 を併用している場合、また OS が 64bit の場合には、Java Ver. 7 と Ver. 8 を併用しているかどうかにかかわらず必要となります。

1) デスクトップに表示された[INTERGLAD 7.* SA]アイコンを右クリックして[編集]を開きます。

2) [interglad7]バッチファイル（interglad7 - メモ帳）の記載内容を書き換えます。
システムインストール時（書き換え前、下図）

java -Xms64m -Xmx512m -classpath interglad.jar interglad.search.Main



冒頭の[java]を下記に書き換えます。
パソコン OS が 32 ビットの場合、

"c:¥Program Files¥Java¥jre7¥bin¥java.exe"　(" "も含める、スペース半角)

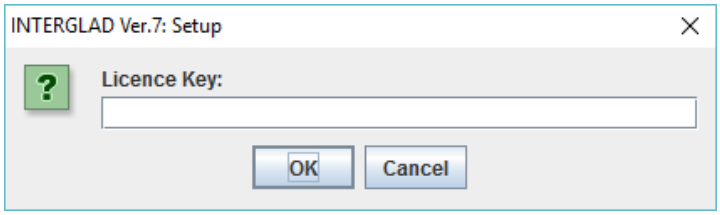
パソコン OS が 64 ビットの場合、

"c:¥Program Files (x86)¥Java¥jre7¥bin¥java.exe"　(" "も含める、スペース半角)

変更内容を保存します。これにより、インストール・設定が終了しました。なお、本操作にはマニュアルの pdf よりのコピー&ペーストが便利です。文字コードは ANSI とします（[ファイル]→[名前を付けて保存]より確認・変更ができます)。

⑤ INTERGLAD 起動

デスクトップに表示された[INTERGLAD 7.* SA]アイコンをダブルクリックすると INTERGLAD システムが起動し、メイン画面が開きます。ライセンスキーの入力を要求するダイアログ(下記)が現われますので、CD 中のライセンスキーをコピーして貼り付け、[OK]ボタンをクリックします。以上の操作によりインストール・設定が終り、検索等の処理を実行できます。



⑥ Java Ver. 8 対応暫定版の利用

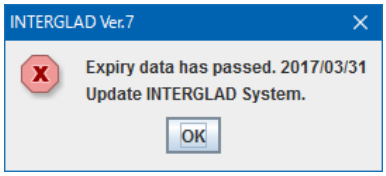
Java Ver. 8 使用の場合にもフル機能が利用できるよう検討中であり、その暫定版を使用できます。本暫定版は、ODBC データベースへのアクセス機能を JDBC、UCanAccess により補完したもので、ユーザーデータ登録・変換以外のすべての機能が利用できます。既登録のユーザーデータはサーバーデータと一緒に検索また予測に使用することができます。

本システムを利用する場合には、CD 中の”interglad-7.*.*.0b-sa.zip” をパソコン内

にダウンロード、展開し、[interglad7]バッチファイルをダブルクリックすることによりシステムを立ち上げます。最初の立ち上げにのみ多少時間を要します（10 分程度）。

４．スタンダード版、CD フル機能版のアップデート方法

スタンダード版の場合、メイン画面のメニューバーの[Help]より[Check Update]をクリックし、[INTERGLAD Downloads]ページを開き、新バージョン（7.*.*.*）がある場合にアップデートを行います（下記②～⑩の操作）。また「使用期限が過ぎています」（下図）とのダイアログが現れた場合には、下記①～⑩の操作によりアップデートを行います。



① ニューガラスフォーラムのウェブサイトより INTERGLAD ページを開き、画面右のメニューより INTERGLAD 接続の[スタンダード版システムダウンロード]をクリックします。次に User ID、Password を入力し、[LOGIN]をクリックし、さらに[Download]をクリックします。

② 開いた[INTERGLAD Downloads]ページの最新 Version の INTERGLAD 7.* Software Downloads よりパソコンの OS に合った INTERGLAD システムのインストーラー（Windows 7、8、10 の場合、interglad-7.*.*.*-setup-win.exe）を選択し、パソコンにダウンロードし、保存します。Java Ver. 8 対応暫定版を使用することもできます（２．⑥参照）。

③ ユーザーデータにデータ登録がある場合（登録がない場合には④へ）、アップデートの前に、必ずユーザーデータファイル(GP_user_7*.mdb)をバックアップします。ユーザーデータファイルは、デフォルトの場合、以下に保存されていますので、[INTERGLAD7.0]フォルダからデスクトップなどに移します。

Windows Vista、7、8、10 の場合、C:¥INTERGLAD 7.0¥GP_user_7*.mdb

（Windows XP の場合、 C:¥Program Files¥New Glass Forum¥INTERGLAD 7.0¥GP_user_7*.mdb）

④ コントロールパネルからプログラムのアンインストールまたは変更を開き、[INTERGLAD7.*]をアンインストールします。アンインストールを行わずにアップデートを行うと途中でエラーとなります。

⑤ ユーザーデータ機能を使用する場合には、Java Ver. 7 (32bit 版) が必要なため、Ver.7 がインストールされていない場合にはインストールします。ユーザーデータ機能（変換、登録、検索等での使用）以外のすべての機能は Java Ver. 8 （32bit 版)がインストールされていれば使用できます。（１．②参照）

⑥ ①で保存したインストーラーをダブルクリックし、PC へのインストールを行います。

⑦ Java Ver. 7 使用の場合には、[interglad7]バッチファイルを書き換えます（ ２．④参照)。

⑧ 新たにインストールした[INTERGLAD 7.0]フォルダ中に②で保存した GP_user_7*.mdb を入れます（Ver. 7.5 以前、＊が 5 以下の場合)。保存したファイルが GP_user_76.mdb の場合には、新たな GP_user_76.mdb をフォルダからデスクトップ等に出し、保存したファイルと差し替えます。

⑨ ユーザーデータが GP_user_7*.mdb（Ver. 7.5 以前）の場合には Ver. 7.6(76)への変換登録をします(第 4 章 6.1 (2) (F)参照)。

⑩ デスクトップの[INTERGLAD 7.*]アイコンをダブルクリックして INTERGLAD を起動します。メイン画面より環境設定(Preference)小画面を開き、Local Database および User Database の[MDB File]欄に最新のファイルを選択して入れ、[OK]ボタンをクリックします。

CD フル機能版の場合にも、新たな Version の CD を NGF より受領したとき、上記の①～⑨の操作を行います。この場合、①の INTERGLAD システムのインストーラーは、NGF より送付された新たな CD 中のインストーラー(interglad-7.*.*.*-sa-setup-win.exe)となります。②、③、⑦の[INTERGLAD 7.*]は[INTERGLAD 7.* SA]となります。⑨の[INTERGLAD 7.*]アイコンは、[INTERGLAD 7.* SA]アイコンとなります。

５．新 INTERGLAD サーバーへの移行に伴う接続先変更方法

INTERGLAD サーバーが 2017 年 5 月 23 日より新サーバーに変わりました。このため、以前よりのスタンダード版を使用の場合、接続先 IP アドレスの変更が必要となります。変更を行わないとスタンダード版の使用ができません。

① スタンダード版を立ち上げ後、ダイアログ ”Cannot Connect INTERGLAD Server. Setup Network Configuration?” が現れた場合には、ダイアログの OK ボタンをクリックし、環境設定(Preference)小画面を開きます。

② 環境設定小画面の Server Database の Server URL 3 カ所を 61.194.5.20 より 153.121.91.149 あるいは www.interglad.jp に入れ替えます（画面図参照)。

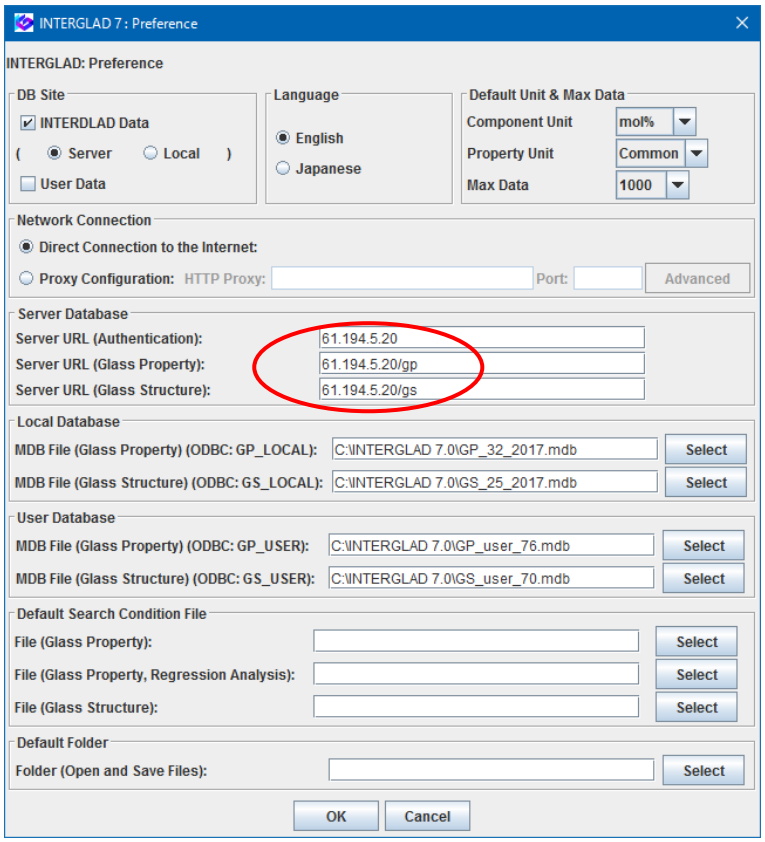
③ OK ボタンをクリックします。

上記操作は 1 回行えばよく、INTERGLAD を使用する毎に行う必要はありません。

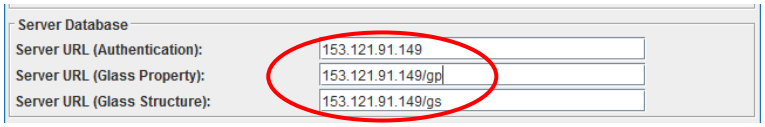
なお、インターネット版利用の場合には、java 例外サイトへの http://153.121.91.149 あるいは http://www.interglad.jp の追加が必要となります。１．を参照ください。

環境設定小画面

＜変更前＞



＜変更後＞



あるいは

INTERGLAD Ver. 7 基本操作方法

A．スタート方法

本操作方法ではインターネット版のスタート方法を説明します。
INTERGLAD プログラムをパソコンにインストールするスタンダード版および CD フル機能版では、デスクトップの INTERGLAD アイコンのダブルクリックにより 3 のメイン画面が開きます。

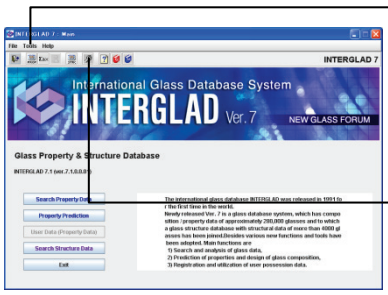
1　INTERGLAD WEB ページ

Web ブラウザとして Internet Exploler（9.0 以上）を使用する場合で説明します。
http://www.interglad.jp/interglad7　により INTERGLAD WEB ページを開きます。

2

User ID および Password をインプットし、[LOGIN]ボタンをクリックします。(本章 p.2 参照)
画面左のメニュー項目をクリックすると、それぞれの画面に進むことができます。
Manual からユーザーズマニュアルを閲覧・ダウンロードできます。

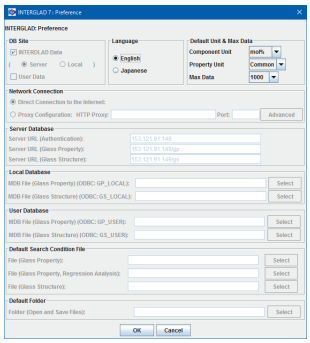
3　メイン（Main）画面



[LOGIN]ボタンのクリックにより、2 の画面より少し遅れてメイン（Main）画面が立ち上がります。メイン画面が 2 の画面の下に現れますので、この画面をクリックして上面とします。

メニューバーの Tools より Preference、あるいはツールバーのレンチ[Preference]アイコンをクリックすることにより、Preference 小画面#が開き、環境設定ができます。

4　#環境設定（Preference）小画面



[DB Site]欄で使用するデータベースの種類＊、[Language]欄で使用言語（本操作方法ではデフォルトの English 使用）、[Default Unit & Max Data]欄で成分単位(Component Unit)、特性単位系（Property Unit）と検索ガラス最大数（Max Data）を設定することができます。
また、ユーザーデータベース＊、デフォルト検索条件等＊を設定できます。(＊は左図のインターネット版では灰色表示となり選択できず)

・JVM Memory Size は、512MB がデフォルトとなっています。
・INTERGLAD が Java セキュリティ設定によりブロックされないよう、Java コントロールパネルの Java 例外サイトに http://www.interglad.jp を追加します。(本章 p.2 参照)
・メイン画面が開かない場合には、Microsoft の Firewall を無効とします。

・マニュアルはどの画面からもマニュアル?アイコンをクリックすることにより Web ページの PDF を開くことができます。

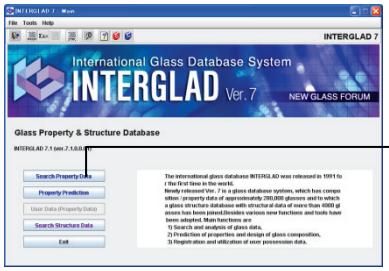
・初期画面上部メニューバーの Tools をクリックし、Contents of Property Data、Contents of Glass-Forming Region、Contents of Structure Data をクリック選択することにより、特性データ、ガラス化範囲データ、構造データの登録ガラス数を調べることができます。

・メニューバーの Help のクリックによりマニュアル（Manual）、用語集(Glossary)、特性測定法(Measurement)を調べることができます。
・本システムでは、メニューバーの表示項目の内、主なものがツールバーアイコンにもあります。

B．特性データベース 検索方法

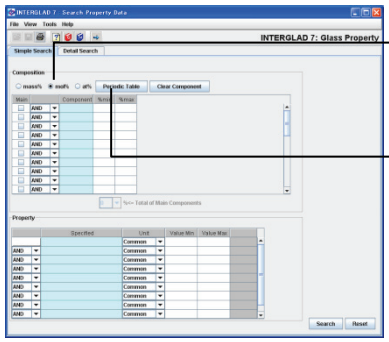
組成、特性等の検索条件を設定し、データベース中の該当ガラスを検索することができます。操作手順は以下となります。

1　メイン（Main）画面



[Search Property Data]ボタンをクリックします。

2　特性検索（Search Property Data）画面　　＜簡易検索 Simple Search の場合＞

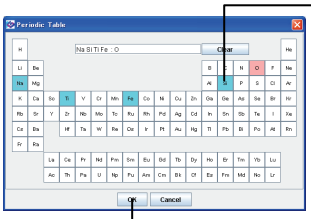


組成(Composition)検索条件設定

① 単位設定
mass, mol, at%のいずれかのラジオボタンをクリック選択します。

② 周期表[Periodic Table]ボタンをクリックします。

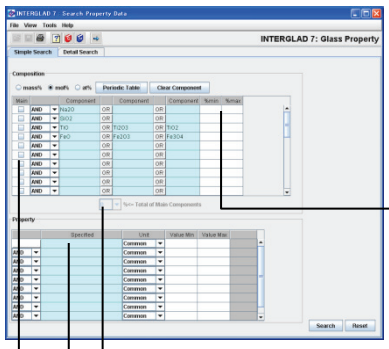
3　周期表（Periodic Table）小画面



③ 設定成分が酸化物の場合、必要な陽イオン元素記号をクリック選択します（指定元素が水色に着色）。10 個まで指定できます。
酸化物以外の場合には、酸素Oをクリックした後（ピンク色を消す）、必要な陰イオン元素をクリックします（ピンク色に着色）。

④ [OK]ボタンをクリックします。

4



成分カラムの 1 列目に陽イオンの異なる成分が並び、行（横）方向には同陽イオンの価数の異なる成分が並びます（価数の小さい成分から大きい成分に順に左から右へ）。

⑤ 成分の最大値、最小値（数値幅）を、設定セル（白色）をクリック後に入力し、Enter キーを押します（数値は入力しなくてもよい）。

特性(Property)検索条件設定

① [Property]カラムの特性名[Specified]セル（水色）をダブルクリックします。

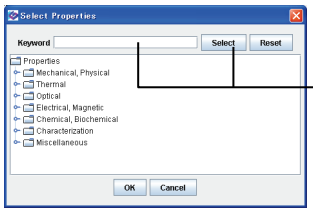
・ツールバーの下のタブのクリックにより、簡易検索[Simple Search]画面、詳細検索[Detail Search]画面を切り替えられます。両画面の内容は常に同一となります。

・周期表を使用しない場合には、組成の成分[Component]カラム（水色）をダブルクリックして組成選択（Select Components）小画面を開き、成分を選択することもできます。Ctrl キーを押しながらクリックすることにより複数同時選択もできます。
・同時に 2 種以上の陰イオンを指定することもできます。

・成分カラム左のプルダウンメニューにより「含む」(AND)を「含んでもよい」(OR)あるいは「含まない」(NOT)に変えることができます。

・また、成分合計値を指定する場合には、成分カラムの左横の Main 欄のチェックボックスをクリックして✓を入れ、[Total of Main Components]プルダウンメニューから合計最低値を設定します。

5　特性選択（Select Properties）小画面

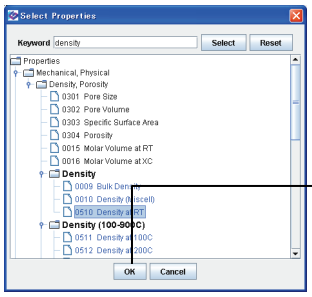


② [Keyword]カラムに検索する特性名をインプットし、[Select]ボタンをクリックします。

Keyword を含む特性名が青字で現れます。右のスライドバーを下に移動し、隠れている部分も必要により確認します。

・Keyword をインプットせず、Ver. 6 の場合と同様に、特性選択小画面の項目左の🔑 をクリックして特性ツリーを開き、さらに指定したい特性を選択することもできます。

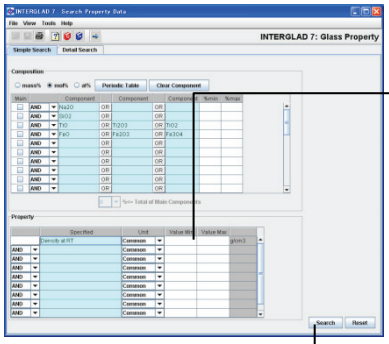
6



③ 選択する特性名をクリックし、[OK]ボタンをクリックします。

・太字の中分類の項目を選択することもできます。
・Ctrl キーを押しながらクリックすることにより複数同時選択もできます。

7



特性カラムに選択した特性名が入ります。

④ 選択した特性名の右のプルダウンメニューより単位(Unit)を選択します。特性値の最小値、最大値を、Value Min、Value Max カラム（白色）をクリック後に入力し、Enter キーを押します（数値は入力しなくてもよい）。

検索実施

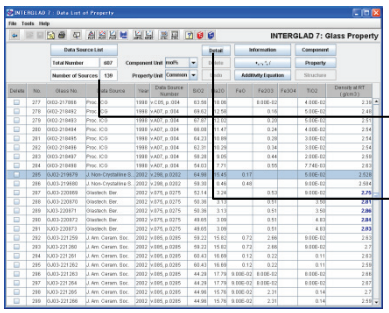
設定組成、特性等を確認し、[Search]ボタンをクリックします。

・複数の特性を指定し、それぞれの特性名左のプルダウンメニューにより[AND]を[OR]に変えることができます。

・特性の単位はデフォルトが Common(よく使用される汎用単位)となっています。第 6 章 5.1 特性データベース ID を参照ください。

・詳細検索画面を使用すれば、ガラスの状態、汎用名、外観・特徴・製法、用途、出典、著者、ガラス ID 等も検索条件として設定できます。

8　特性検索結果（Data List of Property）画面

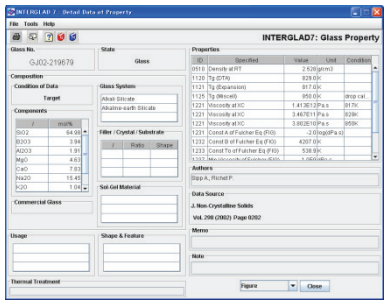


検索結果表示

検索条件に適合するガラスがすべてリスト表示されます（1 行に 1 ガラスを表示）。
ガラス数(Total Number)、出典数(Number of Sources)等も表示されます。

・詳細検索画面を使用すれば、ガラスの状態、汎用名、外観・特徴・製法、用途、出典、著者、ガラス ID 等も検索条件として設定できます。

9　特性詳細（Detail Data of Property）画面

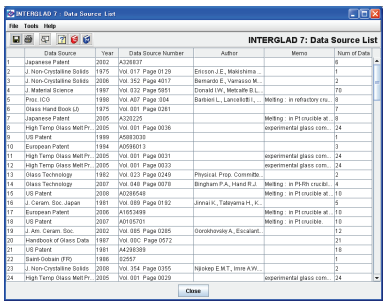


出典詳細表示

詳細を確認したいガラスの行をクリックし（水色に着色）、[Detail]ボタンをクリックします。

・選択行をダブルクリックしても特性詳細画面を開くことができます。。

１０　出典リスト（Data Source List）画面



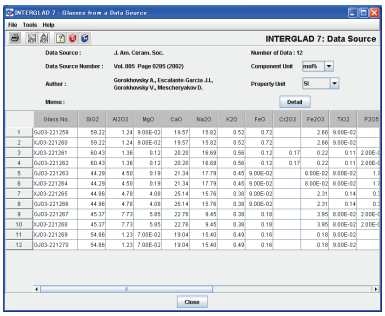
出典リスト表示

特性検索結果画面の[Data Source List]ボタンをクリックするか、メニューバーの Tools の Data Source List をクリックします。

各出典毎のガラス数(Num of Data)等も表示されます。

・Data Source、Memo などの記載の一部が読めない場合には、項目欄の右境界部分にマウスポインタを当てドラッグすることにより項目欄を広げて読むことができます。

１１　同一出典リスト（Glasses from a Data Source）画面



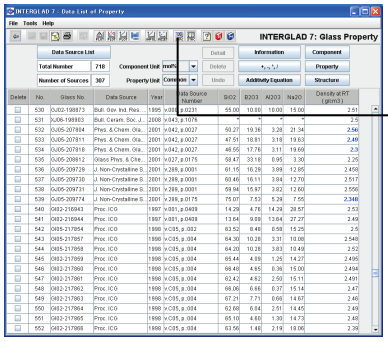
同一出典リスト表示

特性検索結果画面で同一出典リストを表示したいガラスの行をクリック選択し、ツールバーの[Glasses from a Data Source]アイコンをクリックします、あるいはメニューバーの Tools の Glasses from a Data Source をクリックします。

リストには収録されているすべての成分と特性数値データが表示されます。

・同一出典リストは、出典リスト画面の各行のダブルクリックによっても表示されます。

１２　特性検索結果リスト画面



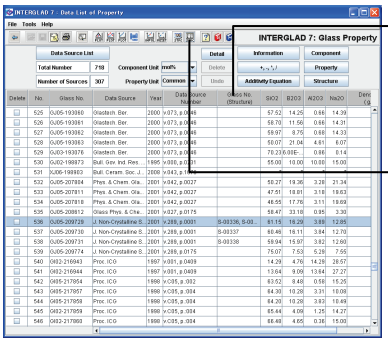
構造データ検索

特性検索結果リスト中のガラスの構造データを検索することができます。

[Search Structure DB]アイコンをクリックします。

・メニューバーの Tools の Search Structure のクリックでも同様です。

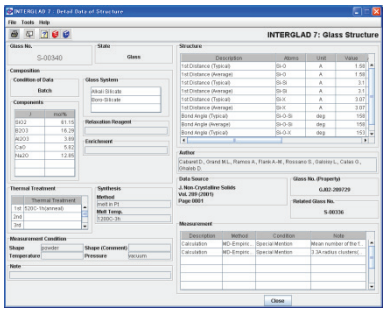
１３



ガラス構造データが登録されている場合、ガラス構造 DB の No.が表示されます。

ガラス構造データの詳細画面は、表示したいガラスの行をクリック選択し（水色に着色）、[Detail Data of Structure]アイコンをクリックすることにより表示できます。

１４　構造詳細（Detail Data of Structure）画面



画面を閉じるときには、画面右上の×を順にクリックします。最後に、初期画面は[Exit]ボタンをクリックして閉じます。

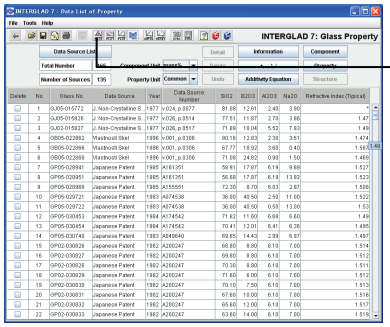
C．特性データベース 解析方法

特性データベースにより検索されたガラスにつき、3 成分による三角図表示、成分・特性よりの 2 項目のＸＹプロット表示、温度－特性のＸＹプロット表示、元素解析（各ガラスの含有元素の周期表上でのガラス数表示、Ver. 6 のデータ密度解析の呼称変更）ができます。操作手順は以下となります。

C．１　三角図解析

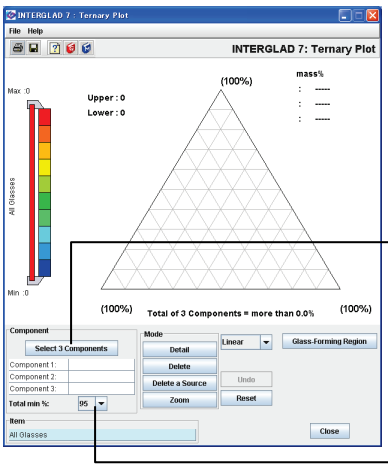
B．特性データベース検索方法の８特性検索結果画面より操作します。

１　特性検索結果画面



① [Ternary Plot]アイコンをクリックします。

２　三角図（Ternary Plot）画面



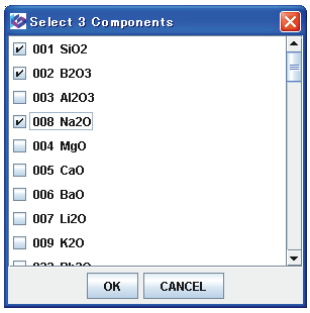
三角図条件設定

② [Select 3 Components]ボタンをクリックし、三角図三成分選択(Select 3 Components)小画面*を開き、三角図の３成分としたい成分のチェックボックスをクリックし、[OK]ボタンをクリックします。
三角図設定小画面の Component1,2,3 に設定した成分名が入ります。

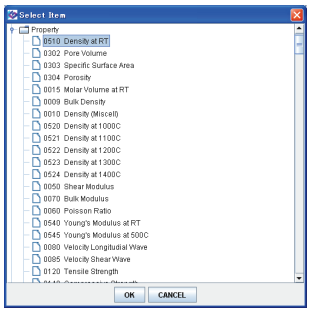
③ 選択した３成分の各ガラスにおける合計最低値(Total min%)をプルダウンメニューより選択します。

・合計最低値のデフォルトは 95%となっています。

3　*三角図三成分選択小画面

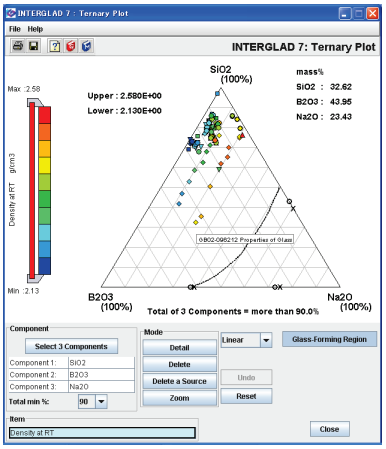


4　**項目選択（Select Item）小画面



④ [Item]カラムをダブルクリックし、項目選択[Select Item]小画面**を開き三角図に表示する項目をクリックして選択し、[OK]ボタンをクリックします。

5　三角図（Ternary Plot）画面



三角図解析結果表示

三角図上に、特性値の数値により（左側の色分けバーに従って）色分けされたガラスの分布が表示されます。

三角図三成分、合計最小値、項目選択を変える毎に、その条件に対応した三角図が表示されます。

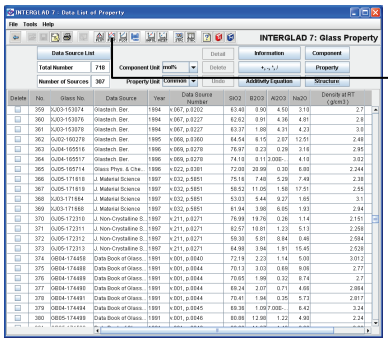
画面を閉じるときには、[Close]ボタンをクリックするか、画面右上の×をクリックします。

印刷アイコンのクリックにより画面印刷ができます（三角図以外も同様）。

C．2　XYプロット解析

B．特性データベース検索方法８より操作します。

1　特性検索結果画面



XYプロット[XY Plot]アイコンをクリックします。

・項目選択小画面で All Glasses を選択すると、検索結果リストのすべてのガラスの三角図における組成位置を表示することができます。

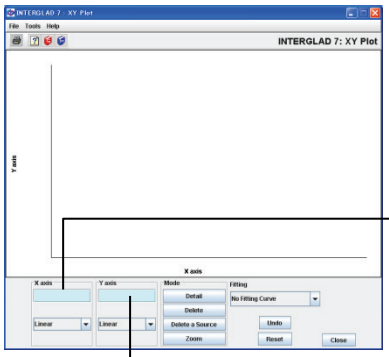
・三角図画面で [Glass-Forming Region] ボタンをクリックすると、ガラス化範囲データが○(ガラス化する)、×(ガラス化しない)および境界線で表示されます。

・[Detail]ボタンをクリック後、マウスポインタを各点に合わせてクリックすると、そのガラスの詳細画面が表示できます。

・同様な方法で、[Delete]ボタンをクリックすることにより、各点を消去すること、[Zoom]ボタンをクリックしてマウスポインタで三角図内をドラッグすることにより、三角図の部分を拡大することができます。元に戻すには[Reset]ボタンをクリックします。

・左の特性数値スライダのポインタのドラッグにより、表示数値範囲(上限・下限値)を変えることができます。

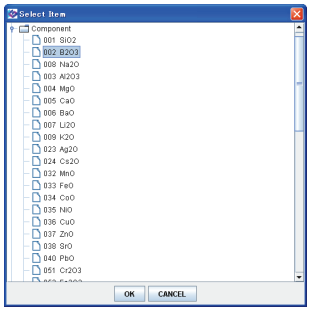
2　ＸＹプロット(XY Plot) 画面



ＸＹ図条件設定

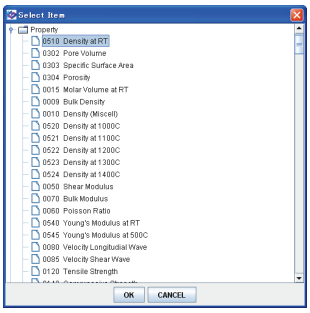
① [X axis]カラム（水色）をクリックし、X軸の項目選択(Select Item)小画面を開きます。

3　項目選択（Select Item）小画面



② Component あるいは Property の左の ⚷ をクリックして項目を展開し、X 軸としたい項目をクリック選択して(水色に着色)、[OK]ボタンをクリックします。

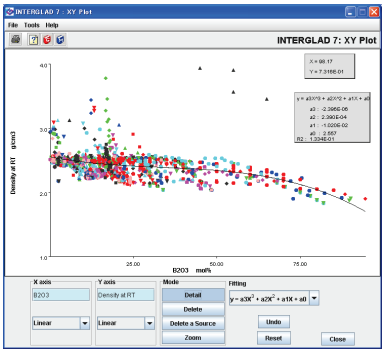
4



③ 同様にＸＹプロット画面の[Y axis]カラム（水色）をクリックし、Y 軸の項目選択(Select Item）小画面を開きます。

④ Component あるいは Property の項目から Y 軸としたい項目をクリック選択し(水色に着色)、[OK]ボタンをクリックします。

5　ＸＹプロット画面



XY プロット解析結果表示

画面を閉じるときには、[Close]ボタンをクリックするか、画面右上の×をクリックします。

・X、Y 軸には項目選択小画面に表示される項目すべてが使用できます（成分と成分、成分と特性、特性と特性の XY 表示)。

・Fitting のプルダウンメニューの選択により 1 次、2 次、3 次のフィッティング曲線およびその式を表示することができます。（図に表示)。

・X、Y 軸の数値をプルダウンメニューにより、Inverse(逆数)、Logarithm（Log)、Reverse(大小逆)表示に変換できます。

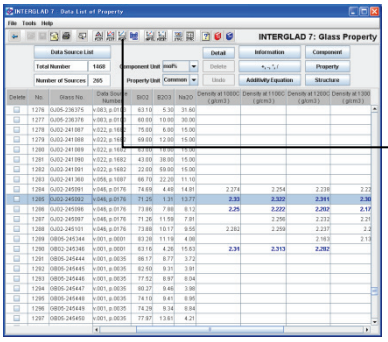
・各点の詳細データ表示、消去、グラフの拡大等が三角図表示と同様にできます。

・メニューバーの Tools／Option (Axis)から、グラフの軸名称、軸数値範囲、軸数字の形式を指定することができます。また Option (Mark)からプロット点の形、色を指定することができます。

C．３　温度－特性プロット解析

B．特性データベース検索方法８より操作します。

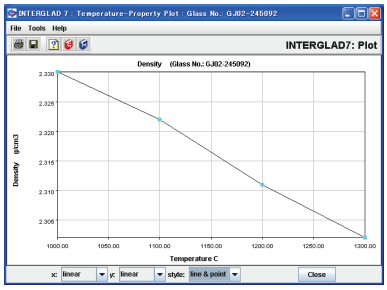
1　特性検索結果画面



特性検索結果画面のガラスに同一特性の異なる温度のデータが表示されている場合、
そのガラスの行をクリック選択し（水色に着色）、[Temperature-Property Plot]アイコンをクリックします。

・温度－特性のプロットができる特性は、付帯資料2の表1に記載されています。

2　温度－特性プロット（Temperature-Property Plot）画面



X 軸が温度、Y 軸が該当する特性のＸＹプロットが表示されます。

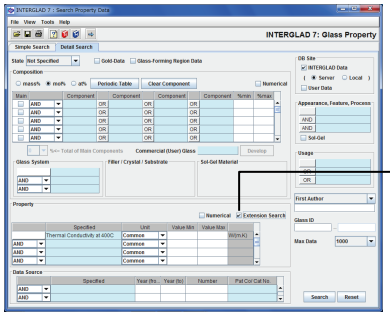
C．４　データ補間

データの少ない高温データ等を周辺のデータにより補間する場合に使用します。ここでは特性検索画面からのデータ補間につき説明しますが、重回帰分析検索画面からも同様の操作ができ、得られた補間データを重回帰分析に利用できます。

・付帯資料「2．データ補間について」を参照下さい。

B．特性データベース検索方法の２で詳細検索(Detail Search)タブをクリックします。

1　特性検索画面



① データ補間を行いたい特性*を選択します。

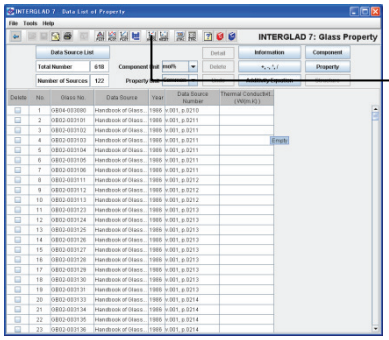
＊室温以外の高温特性（付帯資料２　表１の特性リスト項目、本例では熱伝導率 Thermal Conductivity 400℃を選択）

② [Property]欄の右端の[Extention Search]チェックボックスをクリックします（この操作により同特性の他温度のデータも検索対象となります）。

③ [Search]ボタンをクリックします。

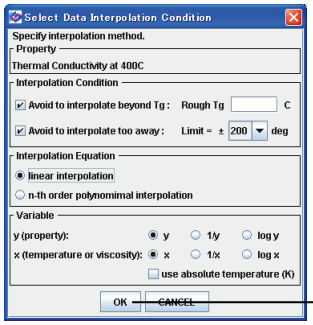
・[Extension Search]チェックボックスを使用しなくても、特性を複数[OR]選択すれば、同様にデータ補間を行うことができます。

2　特性検索結果画面



④ 補間[Data Interpolation]アイコンをクリックします。

3　データ補間条件選択（Select Data Interpolation Condition）小画面

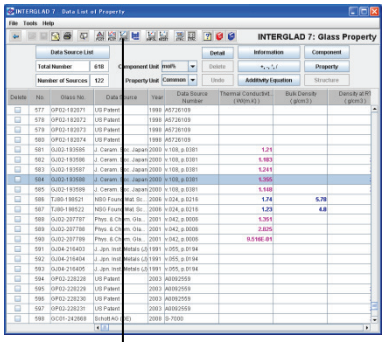


⑤ 補間の条件設定を行い、[OK]ボタンをクリックします（デフォルト値でよい場合はそのまま OK とします）。

補間する特性毎(Density, Viscosity 等の特性中分類)のデータ補間条件選択小画面が重なって現れ、特性毎に条件設定を行います。

・補間条件選択小画面では、Tg（ガラス転移点）を入力することにより、補間が Tg をまたがないようにする設定、補間に利用するデータの範囲（±温度）の設定、補間式の種類（直線式、n 次式）、また X、Y 軸の種類（通常、逆数、LOG）を選択することができます。

4



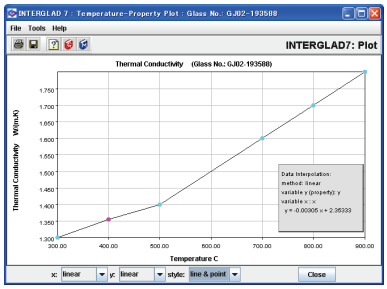
⑥ 検索結果画面に補間値が赤紫色で表示されます。

補間値データは、三角図等のデータ解析および重回帰分析のデータとしてそのまま使用できます。

⑦ 補間値を含むガラスの行をクリックし（水色に着色）、[Temperature-Property Plot]アイコンをクリックすることにより、補間値を含むXY プロット（温度－特性等）が表示されます。

・補間条件を再設定する場合には、[RESET]アイコンをクリックします。

5　温度-特性プロット（Temperature- Property Plot　Glass No:****）画面



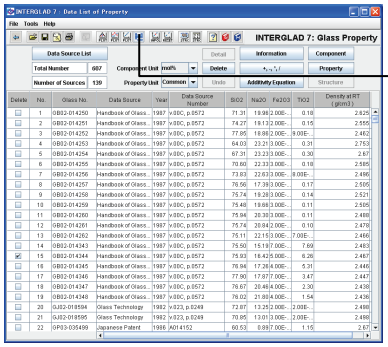
補間値は赤紫色の点で表示されます（水色は文献データ値、本例では横軸：温度、縦軸：熱伝導率）。

・本プロット画面でも X 軸、Y 軸のスケール種類（通常 linear、逆数 inverse、対数 logarithmic）、プロットの種類（点および/または線）をプルダウンメニューにより変えることができます。

C．５　元素解析

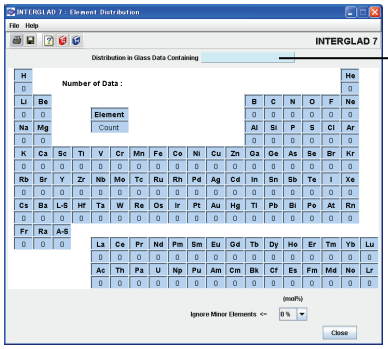
B．特性データベース検索方法８より操作します。

1　特性検索結果画面



元素解析[Element Distribution]アイコンをクリックします。

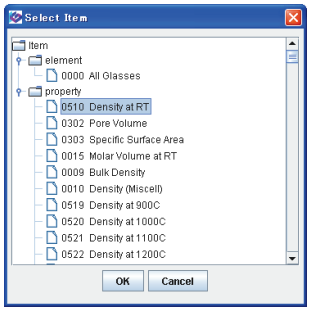
2　元素解析（Element Distribution）画面



元素解析条件設定

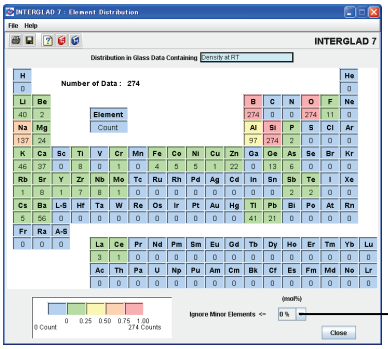
①現れた項目選択小画面の［Distribution in Glass Data Containing]カラム（水色）をダブルクリックします。

3　項目選択（Select Item）小画面



② 解析したい項目をクリック選択し（水色に着色）、[OK]ボタンをクリックします。

4



元素解析結果表示

特性検索結果画面のガラスについて、周期表の各元素の下欄にその元素を含むガラス数が表示されます。数値の大きさにより左下のバー表示の色に従い元素･数値の枠内が色別表示されます。

画面を閉じるときには、[CLOSE]ボタンをクリックするか、画面右上の×をクリックします。

・項目選択小画面でElementのAll Glassesを選択することにより、検索結果画面のすべてのガラスの元素種類を解析することができます。

・[Ignore Minor Elements]のプルダウンメニューにより、各ガラスの成分の最低含有量（表示数値%より小さい場合、カウントせず）を指定することもできます。

D．特性データベース　予測・設計方法

特性データベースでは、特性式を使用した特性予測、検索データを使用した重回帰解析による特性予測および組成設計ができます。操作手順は以下となります。

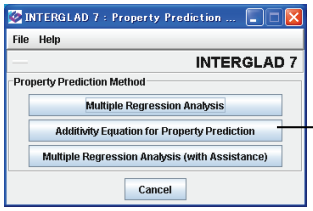
D．１　特性予測（特性式利用）

指定する組成のガラスの特性を、特性式を利用して予測する場合に使用します。

1　メイン（Main）画面

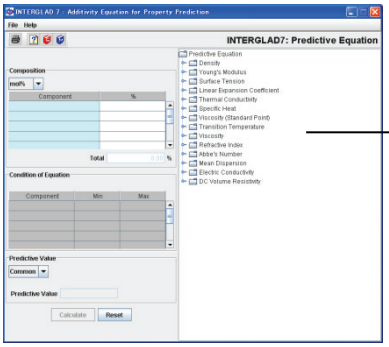
[Property Prediction]ボタンをクリックします。

2　特性予測メニュー（Property Prediction Method）小画面



[Additivity Equation for Property Prediction]ボタンをクリックします。

3　特性計算式による特性予測（Additivity Equation for Property Prediction）画面

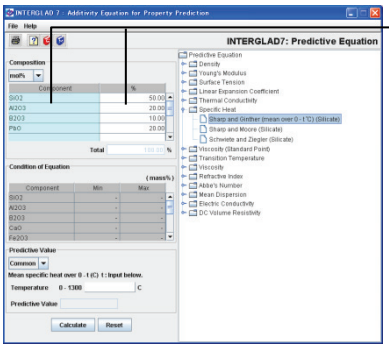


特性予測条件設定

① 特性予測式欄より、予測したい特性項目の左の🔑をクリックして小分類を表示し、使用する特性式をクリック選択します。

[Condition of Equation]欄にその特性式の組成制約条件（適用組成範囲）が表示されます。

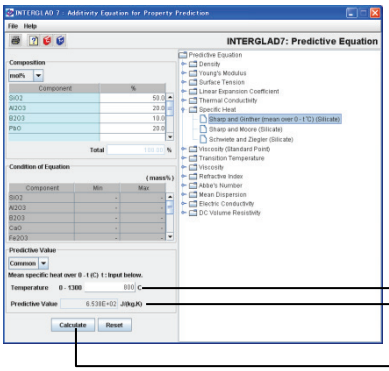
4



② 特性を予測したいガラス組成を[Composition]欄に入力します。まず、[Component]セル（水色）をダブルクリックして成分選択(Select Components)小画面を開き、必要な成分をクリック選択して[OK]ボタンをクリックします。次に単位をプルダウンメニューよりクリック選択し、成分名の右の[%]セル（白色）に成分量をインプットして、Enter キーを押します。

・成分の複数選択は Ctrl キーを押しながらクリックします。

5



計算・予測値表示

[Predictive Value]欄にインプットセル（白色）が現れた場合には、条件とする温度あるいは粘度をインプットします。

[Calculate] ボタンをクリックすると、[Predictive Value]欄に予測値が現れます。

画面を閉じるときには、画面右上の×をクリックします。

メイン画面を閉じるときには、[Exit]ボタンをクリックします。

・[Calculate]ボタンをクリックした際、成分入力欄の合計値が 100%でない場合には、[Aggregate of composition・・・](比例配分して 100%にしてよいか)との[Question]ダイアログが現れますので、[OK]ボタンをクリックします。

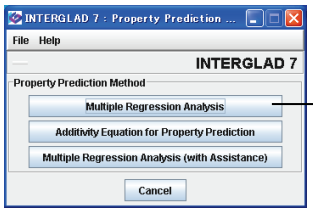
・ [Check equation conditions]との警告ダイアログが現れた場合には、入力した成分・量が Condition of Equation に合致しているかどうかを調べ、合致するように修正します。

D．２　特性予測（重回帰分析）

指定する組成のガラスの特性を重回帰分析により予測する場合に使用します。
状態(State)が Glass のデータのみが対象となります。

D.1　特性予測の２より操作します

1　特性予測メニュー（Property Prediction Method）小画面

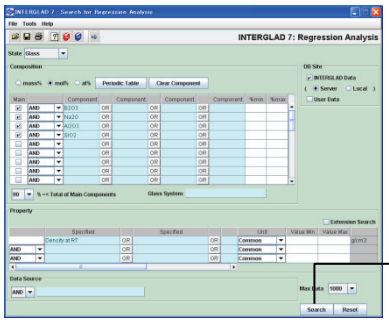


[Multiple Regression Analysis]ボタンをクリックします。

・付帯資料1.「多次式重回帰分析について」を参照下さい。

・本マニュアルでは説明していませんが、[Multiple Regression Analysis(with Assistance)]ボタンをクリックし、操作ガイドに従い予測を進めることもできます。

2　重回帰分析検索（Search for Regression Analysis）画面



予測のための検索条件設定

Ｂ．特性データベース検索方法２～７と同様の操作により、特性予測する組成の主要成分および予測する特性について、検索条件を設定します（特性項目の設定が必須です）。

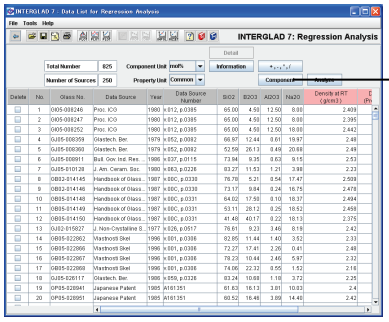
検索実施

[Search]ボタンをクリックします。

・できるだけ多くのデータを集めるために、成分検索条件は大まかなものとします。

・ガラス状態として通常は Glass を使用しますが、State プルダウンメニューにより、Glass+Melt、Melt を選択することもできます。

3　重回帰分析検索結果リスト（Data List for Regression Analysis）画面



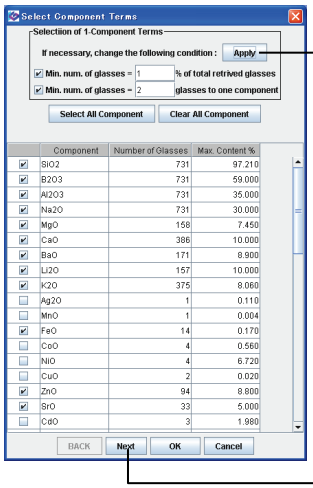
検索結果リスト表示

重回帰分析条件設定

① [Component]ボタンをクリックし、重回帰分析の説明変数成分の選択(Select Component Terms)小画面を（１成分項から順次）開きます。

・このため組成としてガラス汎用名（Glass System）のみを使う、また必須成分のみの合計最低値を入力する、成分の最小値“0”を活用する(その成分を含まないガラスも用いる)、また特性を代表値(Typical)、中分類を指定する方法が有効です。また、複数の特性は OR で指定します。

4　説明変数成分項選択（Select Component Terms）小画面　1 成分項



② 1 成分項選択[Selection of 1-Component Terms]欄の 2 つの項目のセルに下記をインプットし、チェックボックスに✓を入れます。

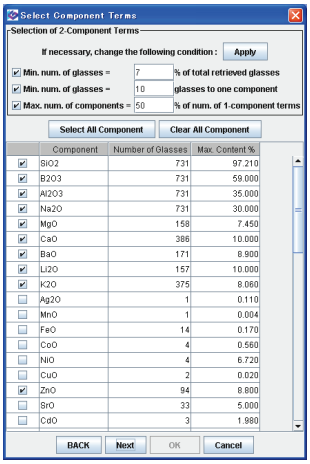
上段：1 成分項として選択する成分を含むガラス数の、検索結果ガラス総数に対する最低割合（%）

下段：1 成分項として選択する成分を含むガラスの最低数

[Apply]ボタンをクリックし（1,2 のデフォルト値でよい場合はそのまま）、[Next]ボタンをクリックします。

・1 成分項のみで重回帰分析を行う場合には、1成分項選択小画面で[OK]ボタンをクリックします。

5　説明変数成分項選択（Select Component Terms）小画面　2 成分項



③　2 成分項選択[Selection of 2-Component Terms]欄の 3 つの項目のセルに下記をインプットし、チェックボックスに✓を入れます。

上段：2 成分項の構成成分として選択する成分を含むガラス数の、検索結果ガラス総数に対する最低割合（%）

中段：同選択成分を含むガラスの最低数

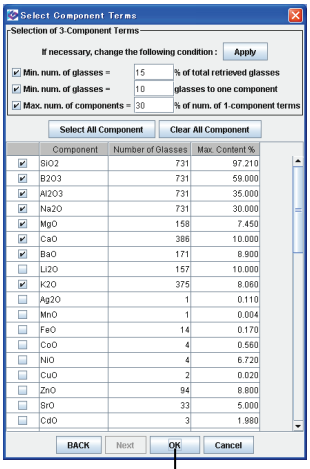
下段：選択した 1 成分項の総数に対する 2 成分項の構成成分数の最大割合（%）

[Apply]ボタンをクリックし（7,10,50 のデフォルト値でよい場合はそのまま）、[Next]ボタンをクリックします。

・1 成分項および 2 成分項で重回帰分析を行う場合には、2 成分項選択小画面で[OK]ボタンをクリックします。

・デフォルト値は一般的な目安です。選択成分数が多くなり過ぎる場合には、ガラス数の最低割合（上段）、最低数（中段）を増やし、また 1 成分項の総数に対する 2,3 成分項の成分数の最大割合（下段）を小さく設定することにより、選択成分項の数を減らすことが有効です。ガラス数等を確認しながら各成分のチェックをクリックしてはずしていくこともできます。

6　説明変数成分項選択（Select Component Terms）小画面　3 成分項



④　3 成分項選択[Selection of 3-Component Terms]欄の 3 つの項目のセルに下記をインプットし、チェックボックスに✓を入れます。

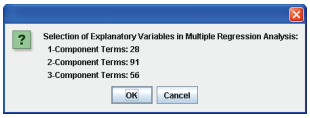
上段：3 成分項の構成成分として選択する成分を含むガラス数の、検索結果ガラス総数に対する最低割合（%）

中段：同選択成分を含むガラスの最低数、

下段：選択した 1 成分項の総数に対する 3 成分項の構成成分数の最大割合（%）

[Apply]ボタンをクリックし（15,10,30 のデフォルト値でよい場合はそのまま）、[OK]ボタンをクリックします。

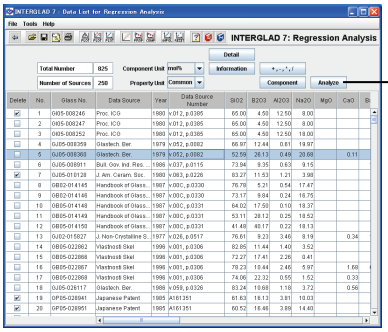
7　重回帰分析　説明変数確認ダイアログ



⑤ 選択成分項の数を確認し、[OK]ボタンをクリックします。

・成分項の数が多過ぎる場合、あるいは少な過ぎる場合には、成分項選択条件を見直します。計算を容易とするため、成分項の総数は 100 以下とすることを推奨します。

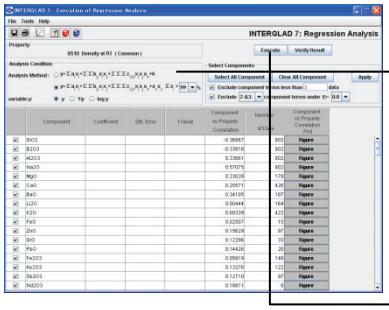
8　重回帰分析検索結果（Data List for Regression Analysis）画面



重回帰分析計算

① [Analyze]ボタンをクリックすると、重回帰分析実行画面へ移行します。

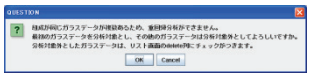
9　重回帰分析実行（Execution of Regression Analysis）画面

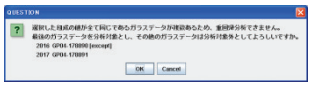


② 画面左上に表示される重回帰分析を行う特性を確認し、[Analysis Condition]欄の重回帰式([Analysis Method]欄)および y 値([Variable y]欄)の形式をラジオボタンにより選択します。
定数項のない 2 番目の式を選択した場合には、選択成分の合計値の最低%をプルダウンメニューより選択します。
それぞれにデフォルト値が設定されていますので、それでよい場合には、そのまま次に進みます。

・右端の[Figure]ボタンをクリックすることにより、その成分と特性値のXYプロットを表示することができます。

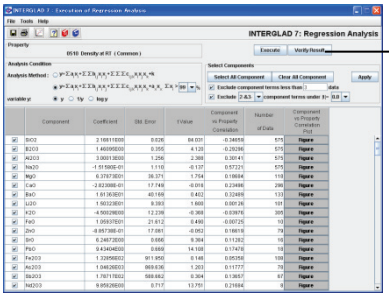
ダイアログ例





③ [Execute]ボタンをクリックします。左に示すような Question あるいは Error ダイアログが表示された場合には、[OK]ボタンをクリックし、それぞれの指示に従います。

１０

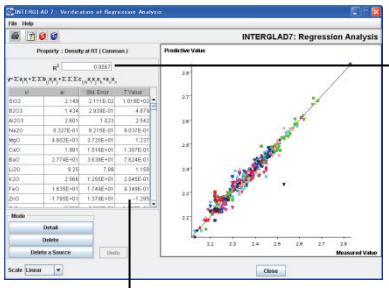


各成分の重回帰係数等が表示されます。

重回帰分析　計算結果検証

[Verify Result]ボタンをクリックします。

１１　重回帰分析検証（Verification of Regression Analysis）画面



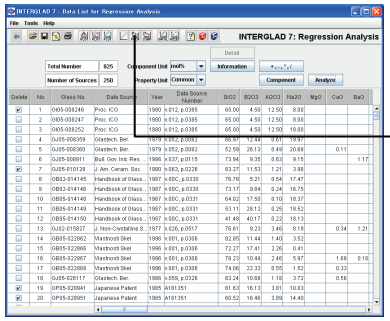
重回帰分析による予測値（縦軸）と測定値（収録データ）（横軸）の関係がプロットされます。

寄与率（決定係数）R^2 が１に近いほど予測精度が高いことを示します。R^2 が 0.8 以上となることが望ましいため、R^2 が低い場合には、２の検索条件、４－７の説明変数選択条件を見直します。

さらに、t 値（＝重回帰係数／重回帰係数標準誤差）の絶対値が１以上（できれば２以上）となることが好ましいため、重回帰分析実行画面の [Select Components] 欄の [Extrude ☆ component terms under |t|＝△]の☆および△をプルダウンメニューよりクリック選択し、[Apply]ボタンをクリックします。（例えば☆=all、△=1）
この後、9-11 の操作を行います。
|t| の最小値の設定は段階的に上げていき、この操作を繰り返します。

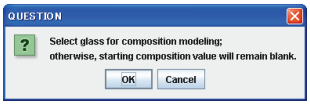
組成よりの特性値予測

１２　重回帰分析結果リスト画面



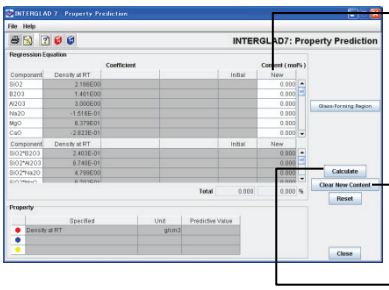
① 重回帰分析検索結果リスト画面に戻り、メニューバーの Tools の Property Prediction あるいは[Property Prediction]アイコンをクリック選択します。

１３　Question ダイアログ



② [OK]ボタンをクリックします。

１４　特性予測（Property Prediction）画面



③ [Regression Equation]欄の Content の [New]カラム(白色)に、特性を予測したい組成成分値をインプットします。このとき、[New]カラムの数字を一旦削除(すべて 0 に)したい場合には、[Clear New Content]ボタンをクリックします。

④ [Calculate]ボタンをクリックします。

・y＝x よりはずれたプロット点がいくつかある場合には、Delete ボタンをクリックした上でそれらの点をクリックして消去し、再計算することにより R^2 を上げることができます。
・t 値は重回帰分析画面の表にも表示されており、t 値とガラス数を確認しながら、成分項のチェックをはずしていくこともできます。

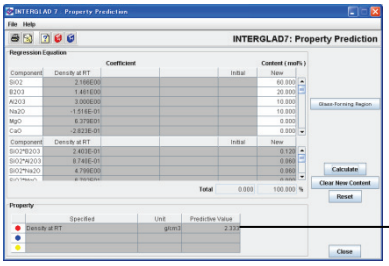
・[Select Components]欄の条件を初期状態に戻す(あるいは緩くする)場合には、まず [Select All Component]ボタンをクリックして表のすべての成分にチェックを入れ直し、その後条件設定し、[Apply]ボタンをクリックします。

・重回帰分析検索結果画面でメニューバーの Tools より Display Glass Data using Regression Analysis を選択すると、重回帰分析に使用しなかったガラスの No.欄がグレー色となり、重回帰分析に使用したガラスを判別できます。

・重回帰分析検索結果画面でガラスの行を選択した場合には、Question ダイアログは現れず、次の特性予測画面において、[Regression Equation] 欄の組成 [Initial] および [New]カラムに、検索結果画面で選択したガラスの組成が表示されます。

・[New]カラムの数値の変更は、セルを３回クリックし数値の背景を着色させてから入力する方法が便利です。
・[Calculate]ボタンをクリックした際に、[New]カラムの数値の合計が 100%でない場合には、合計が 100%となるよう按分されて計算されます。

１５



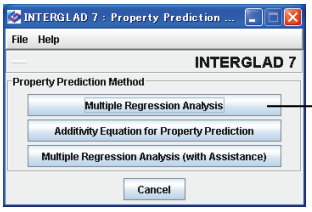
⑤ [Property]欄の[Predictive Value]カラムに特性予測値が表示されます。

D．３　材料設計(組成最適化)（重回帰分析）

指定の特性を有するガラスの組成を重回帰分析により予測・設計（最適化）したい場合に使用します。

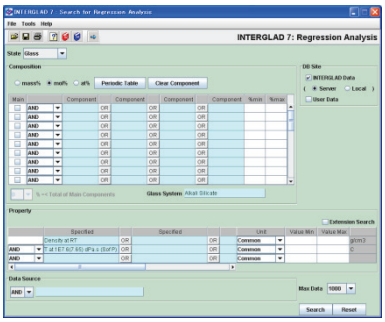
D.1　特性予測の２より操作します。

１　予測メニュー（Property Prediction Menu）小画面



[Multiple Regression Analysis]ボタンをクリックして選択します。

２　重回帰分析検索画面



予測のための検索

B．特性データベース検索方法の２～７と同様の操作により、組成予測（設計）したいガラスの特性と主要組成を検索条件として設定します（特性項目の設定が必須です）。

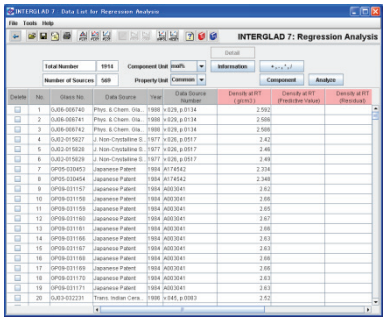
・同時に３特性まで設定できます。

・組成の検索条件設定については D.2 2 の注意書きを参照下さい。

＜例＞
密度 2.65g/cm^3、軟化点（粘度 $10^{7.6}$dPa・s の温度）750℃となるアルカリケイ酸塩ガラスの組成を設計する場合、
[Property]欄の１列１行目に密度[Density at RT]および１列２行目に軟化点温度[T at 1E7.6(7.65)dPa.s (Sof T)]を設定し、[Glass System]欄に[Alkali Silicate]を設定します。

[Search]ボタンをクリックします。

3　重回帰分析検索結果画面



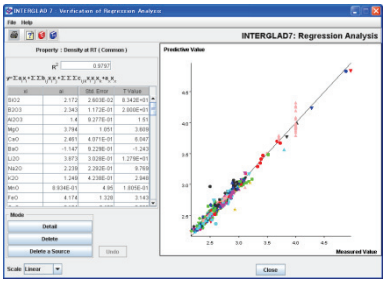
重回帰分析

表示された検索結果からD.２　特性予測３－１１の操作により重回帰分析を行います。

重回帰分析（Execution of Regression Analysis）画面では、特性毎に順に[Execute]ボタンをクリックして分析します。

・複数の特性を設定した場合には、重回帰分析画面および検証画面が特性ごとに複数現れます（画面が少しずつずれた状態で）。

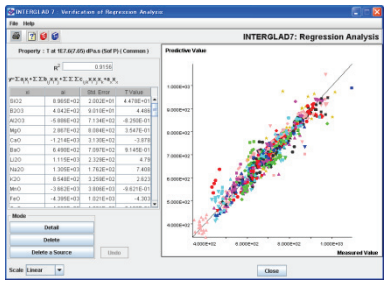
4　重回帰分析　検証画面１（例：密度）



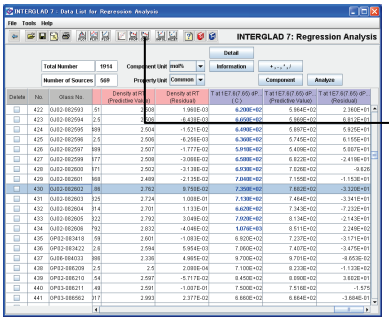
それぞれの特性の検証画面を確認します（目安として、それぞれの特性で、R^2が 0.8 以上、ｔの絶対値が２以上となるようにします）。

・R^2、t値が好ましい範囲にない場合には、D. ２　11 記載の要領に従い、重回帰分析を繰り返します。

5　重回帰分析　検証画面２（例：軟化点）



6　重回帰分析検索結果画面

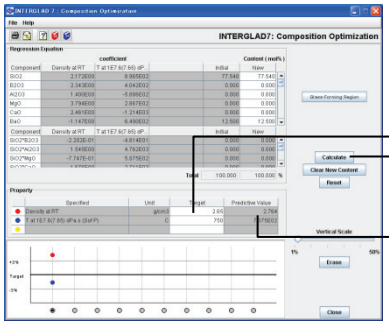


組成最適化

重回帰分析検索結果画面に戻り、目標とする組成と特性に近いガラスを選び、その行をクリックします。

メニューバーの Tools の Composition Optimization あるいは [Composition Optimization]アイコンをクリックします。

7　組成最適化（Composition Optimization）画面

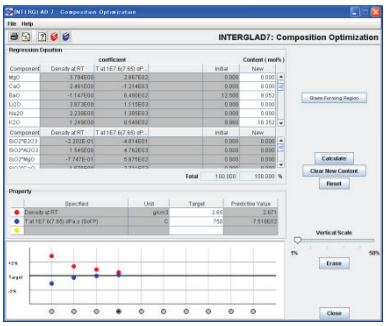


[Propert]欄の[Target]カラムに特性目標値をインプットし、Enter キーを押します。

[Calculate]ボタンをクリックすると、検索結果画面で選択したガラスの特性予測値が[Propert]欄の[Predictive Value]カラムに表示され、その予測値と目標値との差の割合（%）が特性毎に色別の点でグラフに表示されます。

・選択したガラス(New 欄組成に対応したガラス)特性値と目標値との差を表示するグラフのスケールは、右の Vertical Scale をドラッグすることにより変えられます。

8



目標特性値に近づけるべく、[Regression Equation]欄の[New]カラム(白色)に修正数値をインプットし、[Calculate]ボタンをクリックします。
[New]カラムに表示された組成の特性予測値が[Property]欄の[Predictive Value]カラムに表示され、グラフにその特性値と目標値との差の割合（%）が表示されます（試行順に左から右へ)。

上記の操作を繰り返すことにより、目標特性値に近い組成を得ることができます。
<例＞
密度 2.67g/cm^3、軟化点（粘度 $10^{7.6}$dPa・s の温度）752℃となる、目標特性値に近いアルカリケイ酸塩ガラスの組成が得られました。

なお、[Erase]ボタンのクリックにより、グラフのラジオボタン ON のデータは削除され、ラジオボタン ON のデータが右に移行します。ラジオボタン ON のデータは、[New]欄の組成値、特性予測値と常に一致します。

・[Regression Equation]欄の重回帰係数（Coefficient の数値）は特性毎に、大きい数値3つが赤色表示され、小さい数値 3 つが青色表示されます（マイナスの数値では、絶対値の大きいものから3つが青色表示)。重回帰係数がプラスで大きい成分を減らせば特性値は減少する傾向となります。

・重回帰係数は特性名をクリックすることにより、ソートができます(クリックにより、大より小へ、小より大へ、元に戻る、の順で変わります)。

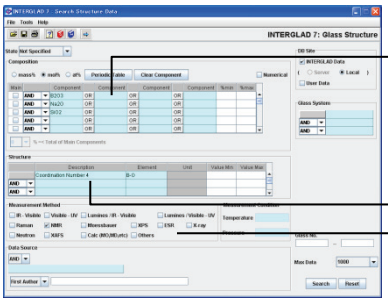
E．構造データベース 検索・解析方法

組成、構造情報等の検索条件を設定し、構造データベース中の該当ガラス（構造情報データが収録されているガラス）を検索することができます。また、これらの検索データの解析をすることができます。操作手順は以下となります。

1　メイン（Main）画面

[Search Structure Data]ボタンをクリックします。

2　構造検索（Search Structure Data）画面

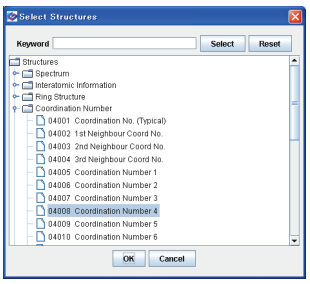


検索条件設定

① 組成条件設定　B．特性データベース検索方法の２－４と同様の操作により、組成条件を設定します。

② 構造情報設定[Structure]欄の[Description]カラムをダブルクリックします。

3　構造選択（Select Structures）小画面



③ 構造選択小画面の構造情報項目を展開し、検索したい小分類項目をクリックし、[OK]ボタンをクリックします。

④ [Structure]欄の[Element]カラムをダブルクリックすると、周期表が開きます。必要な元素をクリックして[OK]ボタンをクリックします（複数の元素を設定できます）。この操作により、その元素に関する構造情報が得られます。

⑤ [Structure]欄の[Value Min]、[Value Max]カラムに設定したい最小値、最大値をインプットすることができます。

⑥[Measurement Method]欄から解析方法を（複数）選択しラジオボタンをクリックしてON とすることにより検索条件とすることができます。おおまかな解析条件（温度・圧力）も設定できます。

検索実行

[Search]ボタンをクリックします。

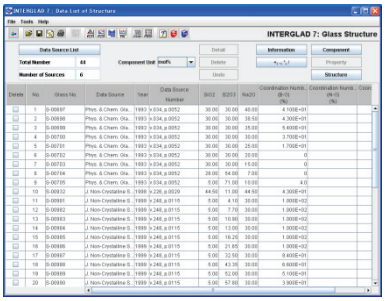
・5.2 構造データベース ID リストを参照下さい。

・[Description]カラムの項目が選択されていないと周期表は開かず、元素は選択できません。

・構造選択小画面ではキーワード入力によっても構造情報項目を選択できます。B. 特性データベース検索方法 5、6 参照。

・状態(State)、ガラス汎用名(Glass System)、出典(Data Source)、著者(Author)等を検索条件とすることもできます。

4　構造検索結果（Data List of Structure）画面

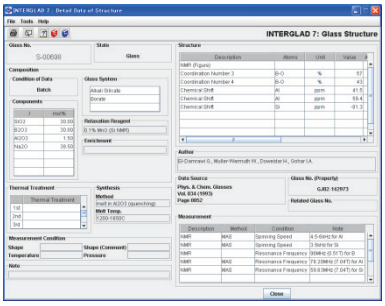


検索結果表示

検索条件に適合するガラスがすべてリスト表示されます。

・スペクトル図等の図データについては、例のみが登録されています。

5　構造詳細（Detail Data of Structure）画面

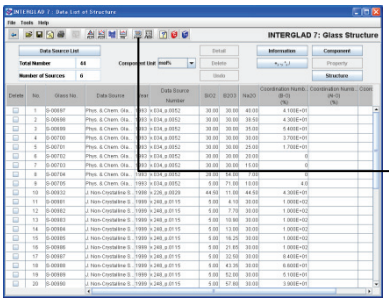


出典詳細表示

構造検索結果画面で詳細を確認したいガラスの行をクリックし（水色に着色）、[Detail]ボタンをクリックします。

・特性検索の場合と同様に、出典リスト、同一出典リストを表示できます。

6　構造検索結果画面

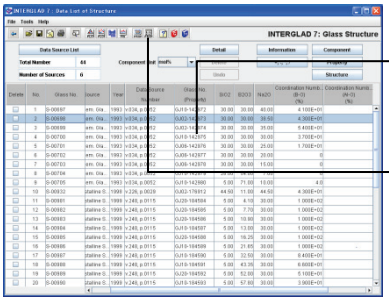


特性データ検索

構造検索結果画面中のガラスの特性データを検索することができます。

[Search Property DB]アイコンをクリック、あるいはメニューバーの Tools の Search Property DB をクリック選択します。

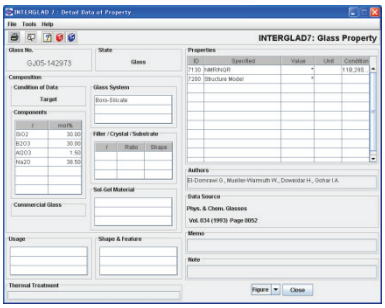
7



ガラス特性データがある場合、ガラス特性 DB の No.が表示されます。

ガラス特性データの詳細画面は、表示したいガラスの行をクリックし（水色に着色）、ツールバーの[Detail Data of Property]アイコンをクリック、あるいはメニューバーの Tools の Detail Data of Property をクリック選択することにより表示できます。

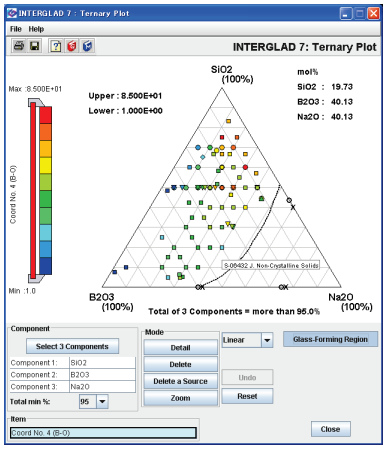
8　特性詳細画面



いずれの画面も閉じるときには、画面右上の×をクリックします。

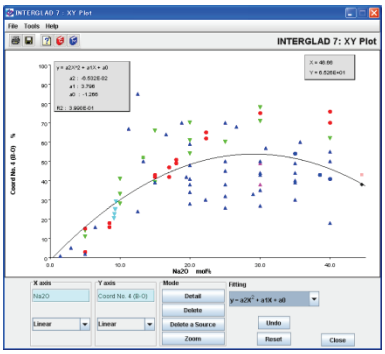
解析

9　三角図画面



C.1 特性データベース解析方法　三角図と同様な操作により、ガラス構造データの三角図表示ができます。

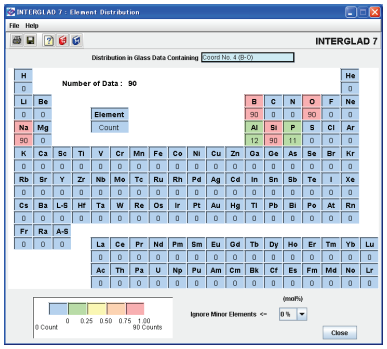
１０　ＸＹプロット画面



C.2　特性データベース解析方法　ＸＹプロットと同様な操作により、ガラス構造データのＸＹプロット表示ができます。

・構造検索結果画面で[Property]ボタンをクリックし、リストに特性データを加えれば、構造と特性のXY プロットを表示することもできます。

１１　元素解析画面



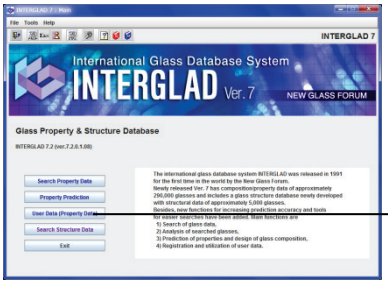
C.5　特性データベース解析方法　元素解析と同様な操作により、ガラス構造データの元素解析ができます。

F. ユーザーデータベース登録・利用方法

INTERGLAD 利用者が保有するデータをユーザーデータベースに登録し、独自のガラス特性データベースを構築することができます。登録されたデータは INTERGLAD 登録データと一緒に、検索、解析、予測に利用することができます。操作手順は以下となります。

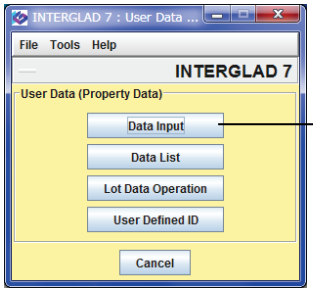
F.1 データ登録

1　メイン（Main）画面



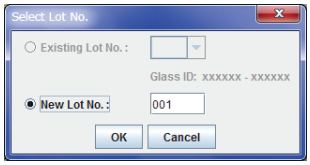
[User Data(Property Data)]ボタンをクリックします。

2　ユーザーデータ（User Data Menu）画面



[Data Input]ボタンをクリックします。

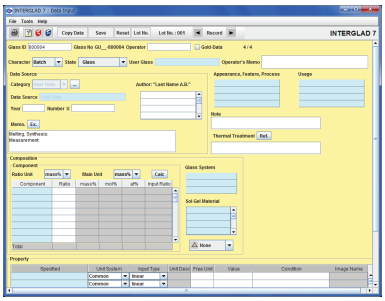
3　ロット No. 選択（Select Lot No.）小画面



[New Lot No.]に Lot. No.を入力し、[OK]ボタンをクリックします。デフォルトでは 001 となっています。

既に登録されているロット No.とする場合には、Existing Lot No. のラジオボタンを選択し、プルダウンメニューより Lot No. を選択します。

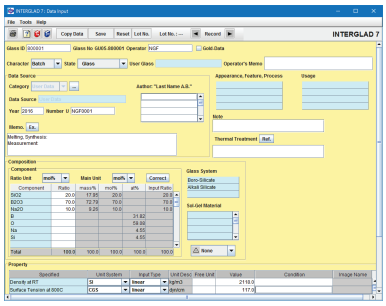
4　データ入力（Data Input）画面



必要項目を選択し、データを入力します。

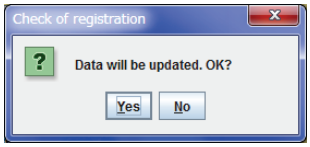
本画面では、INTERGLAD 登録データから 184111（NGF's Additional New Data）のデータの一部を使用して例を作成します。

5



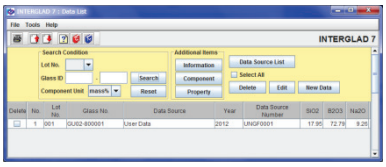
本例では以下の選択、記入を行います。
＊（③ ④ ⑤ ⑥）は必須項目です。
① Glass ID 確認 登録済データの次の ID が表示されます。登録済でない他の ID に変えることができます。例：800004
② 入力者(Operator)名記入　例：NGF
③ 組成の性格(Character)選択＊　例：Batch
④ ガラス状態(State)選択＊　例：Glass
⑤ 出典(Data Source)の Year と Number 記入
　＊　例：2016、NGF0001
⑥ ガラス系(Glass System)選択＊
　　例：Boro-Silicate, Alkali Silicate
⑦ 成分単位(Ratio Unit)選択　例：mol%
⑧ 組成(Composition)の成分(Component)選択　例：SiO2=20、B2O3=70、Na2O=10
⑨ Calc ボタンクリック
　この操作により 100%への按分、他単位への変換計算がされます。Input Ratio 欄には記入した Ratio 欄の値がそのまま残ります。
⑩ 特性名(Property の Specified)選択
　例：Density at RT、
　　Surface Tension at 800C
⑪ 単位系(Unit System)選択
　例：SI (Density at RT)、
　　CGS (Surface Tension at 800C)
⑫ 特性値(Value)記入　例：2118.0、117.0
Glass ID の右に表示される Glass No.の 1 桁目、3,4 桁目はそれぞれ上記の④、⑥で決まります。　本例：Glass No. GU05-800001

6　登録チェックダイアログボックス



[Save]ボタンをクリックすると、Check of registration ダイアログ（Data will be updated. OK? データを更新しますか？）が現れます。[Yes]ボタンをクリックします。これによりデータ入力が完了します。

7　データリスト（Data List）画面

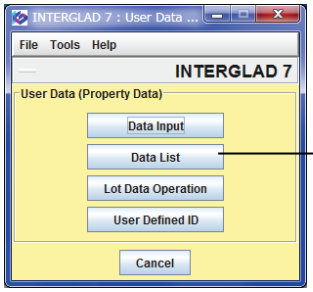


データ入力画面を閉じ、ユーザーデータメニュー画面で[Data List]ボタンをクリックします。開いたデータリスト画面で[Search]ボタンをクリックすると、登録したガラスデータがリストされ、登録の確認ができます。

F.2　データ 一括登録

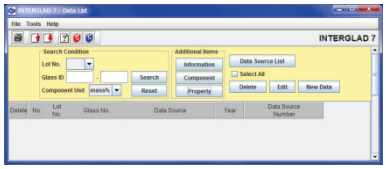
表計算ソフトのシートに記入したデータを一括登録する場合に使用します。本例では Microsoft Excel シートの場合を説明します。

1　ユーザーデータ（User Data Menu）画面

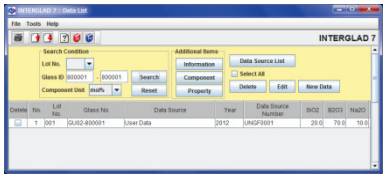


[Data List]ボタンをクリックします。

2　データリスト（Data List）画面



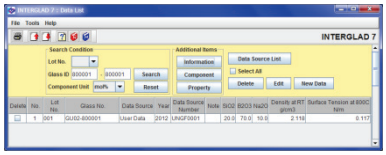
3



登録データの中から一括登録するデータと組成成分、特性項目が同じ（あるいは近い）モデルデータを選択し、Glass ID 欄（左側のセル）に ID（8*****）を記入します。本例では、F.1 で登録した 800001 とします。成分単位を必要により変更します。本例では、成分を mol%で一括登録するため、デフォルトの mass%を mol%に変えます。
その後、[Search]ボタンをクリックすると、リストにそのガラスデータが表示されます。特性は Common 単位に変換されて表示されます。

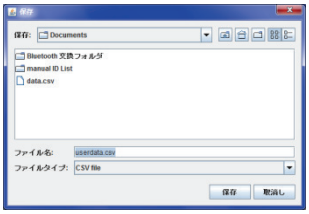
・適当なモデルデータがない場合、一括登録するデータの一つを F.1 の方法で登録し、モデルデータとするのが便利です。

4



本リストに表示されている項目のみが一括入力可能となるため、不足の項目があれば、[Information]ボタンをクリックして項目を選択します。本例では、Note 欄を追加します。

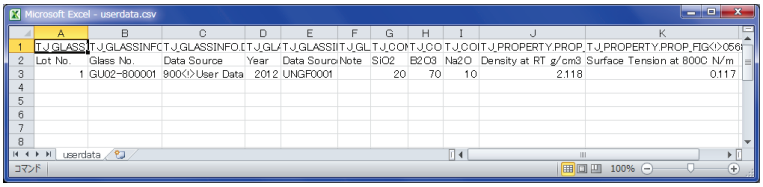
5　保存小画面



[エクスポート]（上向き矢印）アイコンをクリックすると、保存小画面が開きます。
ここでファイル名を入力し、保存フォルダを選択し、[保存]ボタンをクリックします。

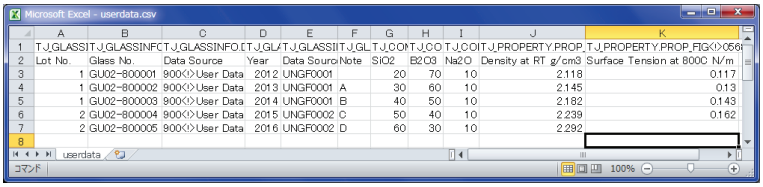
本例ではデフォルトの保存ファイルの userdata.csv のままとします。拡張子は.csv としておきます。

6　Excel 画面



Excel 画面から保存ファイル(userdata. csv)を開きます。データリスト画面は開いたままとします。モデルデータが 3 行目に表示されます。

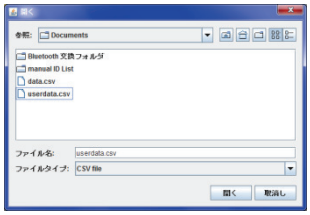
7



一括登録するデータを Excel ファイルの 4 行目以降に記入します。
Data Source は 3 行目のモデルデータと同じとします。Glass No.は 1 ガラス毎に新 No.とします。
また、2 行目までの記載を変えたり、項目数を増やしたり、あるいは項目名のない欄に数値を記入してはいけません。特性値の単位が Common となっていることに注意し、単位に合わせた数値を入力します。
エクセルファイル(userdata.csv)を保存して閉じます。

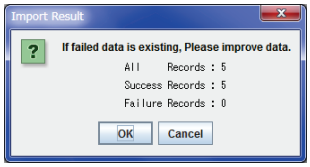
本例では、INTERGLAD 登録データから 184112～184115（NGF's Additional New Data）のデータの一部を使用して 4 例を記入します。

8　開く小画面



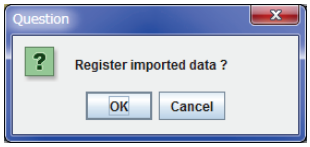
データリスト画面に戻り、[インポート]（下向き矢印）アイコンをクリックします。
開く小画面で、保存した csv ファイル(例では userdata.csv)を選択し、[開く]ボタンをクリックします。

9　インポート結果（Import Result）ダイアログボックス



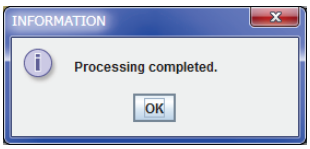
開いた Import Result 小画面で一括入力したデータ数を確認し（モデルデータも含む）、[OK]ボタンをクリックします。

１０　Question ダイアログボックス



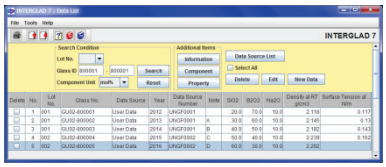
データリスト画面のリストに、一括入力したデータが表示されます。
Question ダイアログボックス（インポートしたデータを登録しますか？Register imported data?）が現れます。[OK]ボタンをクリックします。

１１　Information ダイアログボックス



次に[Information]（処理完了　Processing completed）ダイアログボックスが現れるため、[OK]ボタンをクリックします。
ここまでの操作により、一括データ入力・登録確定処理が終わります。

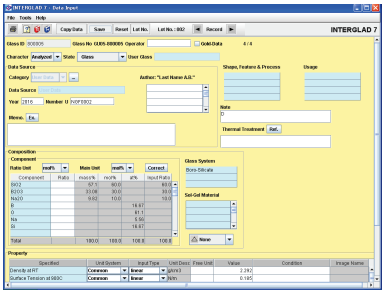
１２　データリスト（Data List）画面



登録データに、さらにデータを追加、修正したい場合には、該当するガラスの行をクリックし、アクティブにした上で[Edit]ボタンをクリックします。該当するガラスのデータが登録されたデータ入力画面が開きます。

本例では 800005 を開きます。

１３

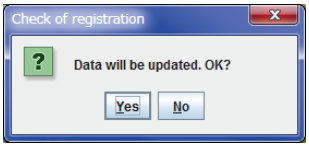


このデータ入力画面で、データの追加入力・修正を行い、[Save]ボタンをクリックします。

本例では、特性の Surface Tension at 900C を選択し、デフォルト単位の N/m で、数値を入力します。（184115 のデータ）

・モデルデータの登録特性単位がデフォルト以外の単位であった場合、エクスポート・インポート後にはデフォルト単位表示に変わることに注意が必要です。
・モデルデータの登録特性単位を変えないようにするには、excel 画面でモデルデータを削除して、一括登録データのみをインポートしてください。

１４　登録チェックダイアログ

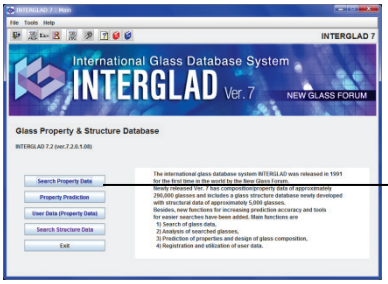


現れる Check of registration ダイアログ（Data will be updated. OK? データを更新しますか？）で[Yes]ボタンをクリックします。

F. 3　ユーザーデータベース利用

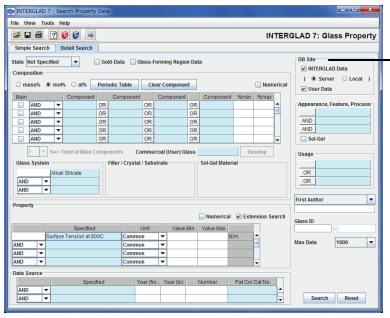
a)　INTERGLAD 特性データと登録ユーザーデータを一緒に検索する場合

1　メイン（Main）画面



[Search Property Data]ボタンをクリックします。

2　特性検索（Search Property Data）画面



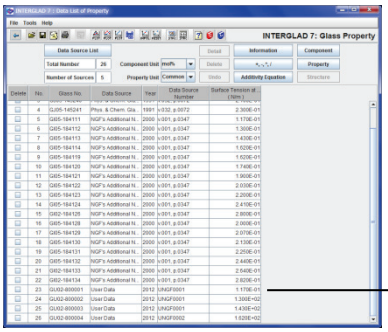
詳細検索画面を開きます

DB Site の INTERGLAD Data と User Data の両方のチェックボックスにチェックを入れます。デフォルトは INTERGLAD Data (Server)です。

本例では、F 1 、F2 で登録したユーザーデータを検索します。

Glass System として Alkali-Silicate、特性として Surface Tension at 800C を選択し、[OK]ボタンをクリックします。

3　特性検索結果（Data List of Property）画面

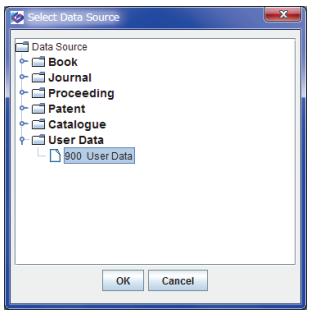


検索条件に合った User Data を含むガラスが表示されます。
User Data はリストの最後に表示されます。

本例では GU02-800001-800004 を含む 26 件が抽出されます。

b) 登録ユーザーデータのみを検索する場合

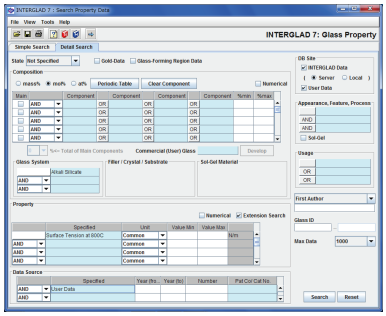
1　出典選択(Select Data Source)小画面



特性検索画面で、検索条件を a) 2 の場合と同じに設定し、さらに出典（Data Source）の出典選択小画面で小分類の User Data を選択します。

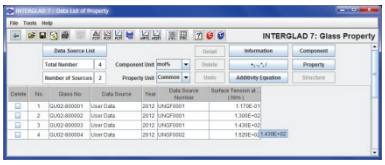
・ユーザーデータのみを検索する場合、DB Site で User Data のみにチェックを入れれば､出典での User Data 指定は必要ありません。

2　特性検索（Search Property data）画面



[Search]ボタンをクリックします。

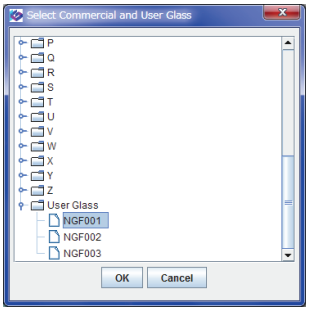
3　特性検索結果（Data List of Property）画面



ユーザーデータベース登録のデータのみが抽出され表示されます。

c) 登録したユーザー定義ガラスを検索する場合

1　市販（ユーザー）ガラス選択小画面



特性検索画面で、市販（ユーザー）ガラス欄をダブルクリックし、市販（ユーザー）ガラス選択小画面を表示し、最後にある User Data から検索条件とするガラスを選択します。

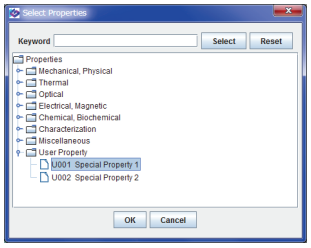
特性検索画面の[Search]ボタンをクリックし、検索を実行します。

・ユーザー定義ガラス、ユーザー定義特性についてはマニュアル第 4 章 6.5 を参照ください。

・ユーザー定義ガラス、ユーザー定義特性の登録がされていない場合には、それぞれの選択小画面に User Glass 、 User Property の表示が現れません。

d) 登録したユーザー定義特性データを含むガラスを検索する場合

1　特性選択（Select Properties）小画面



特性検索画面で、特性項目（Property の Specified）欄をダブルクリックし、特性選択小画面を表示し、最後にある User Property から検索条件とする特性を選択します。

特性検索画面の[Search]ボタンをクリックし、検索を実行します。

e) 登録ユーザーデータを重回帰分析に使用する場合

メイン画面で Property Prediction を選択し、重回帰分析検索(Search for Regression Analysis)画面を開き、a)、b)の検索の場合と同じ DB Site 等の設定で重回帰分析を行うことができます。

付帯資料　1．多次式重回帰分析について

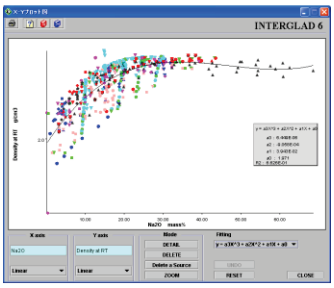
（定数項なしの式の場合）

Ver. 6 まで　$y = \sum_j a_j C_j + a_{other} C_{other}$　1 次式

Ver. 7 に新設　$y = \sum_j a_j C_j + \sum_j \sum_k a_{jk} C_j C_k + \sum_j \sum_k \sum_m a_{jkm} C_j C_k C_m + a_{other} C_{other}$　3 次式

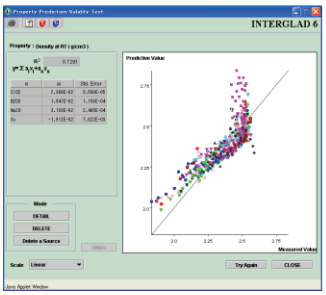
ここで, y は特性値, C_j, C_k, C_m, C_{other} は j, k, m, その他成分の含有量, a_j, a_{jk}, a_{jkm}, a_{other} は重回帰係数

多次式重回帰の適用例　・・・ガラス構造が変わる系でも緩やかならば適用可能



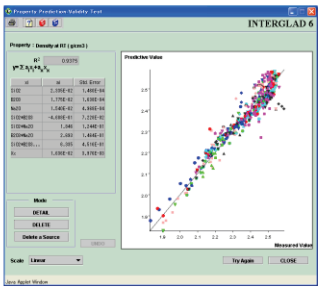
Na_2O-B_2O_3-SiO_2系ガラスの密度のNa_2O依存性

（構造が変わるためリニアではない）



一次式回帰による検証画面

（Na_2O-B_2O_3-SiO_2系ガラスの密度）



多次式回帰による検証画面

（Na_2O-B_2O_3-SiO_2系ガラスの密度）

＜3 次式　3 成分項まで使用の場合＞

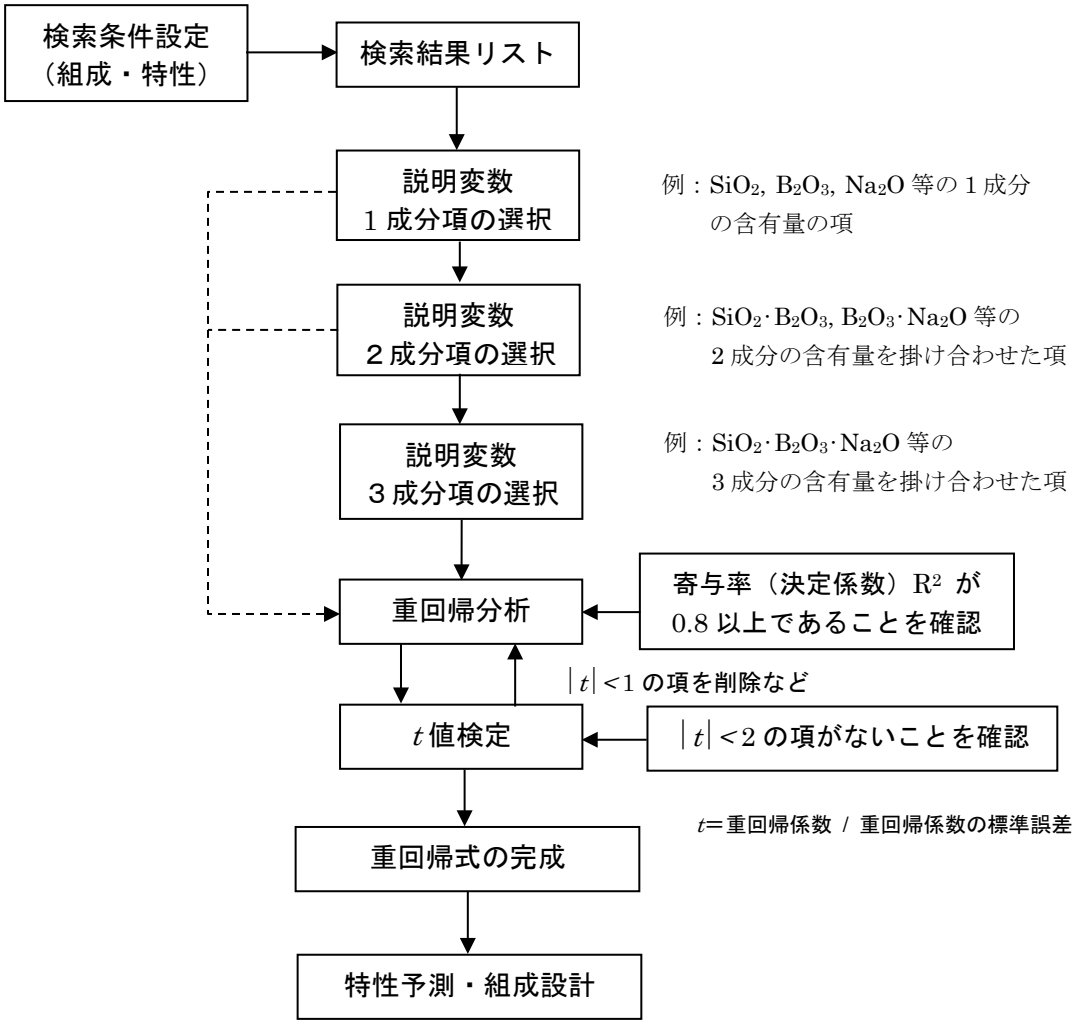


図 1　多次式重回帰分析による特性予測・組成設計のフロー

付帯資料　２．データ補間について

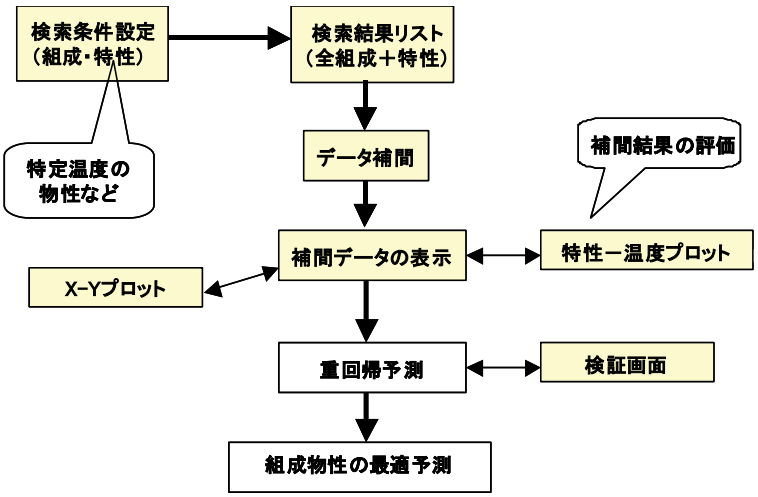


図１　データ補間を組み込んだ重回帰分析による特性予測のフロー

表１　温度-特性プロットおよびデータ補間対象の特性リスト

特性	補間パラメーター
密度	温度 100、200、300、400、500、600、700、800、900℃
	温度 1000、1100、1200、1300、1400、1500、1600、1700、1800、1900、2000℃
ヤング率	温度 100、200、300、400、500、900、1000、1100、1200℃
表面張力	温度 100、200、300、400、500、600、700、800、900℃
	温度 1000、1100、1200、1300、1400、1500、1600、1700、1800、1900、2000℃
比熱	温度 100、200、300、400、500、600、700℃ 温度 800、900、1000、1100、1200、1300、1400、1500℃
熱伝導率	温度 100、200、300、400、500、600、700℃ 温度 800、900、1000、1100、1200、1300、1400、1500℃
粘度の温度 (標準点)	粘度 1E1、1E2、1E2.5、1E3、1E4、1E5、1E6、1E7、1E7.5、1E7.6、1E8 dPa s
	粘度 1E9、1E10、1E11、1E12、1E13、1E14、1E14.5 dPa s
粘度	温度 100、200、300、400、500、600、700、800、900、1000℃
	温度 1100、1150、1200、1250、1300、1350、1400、1450、1500、1550℃
	温度 1600、1650、1700、1750、1800、1900、2000、2200、2500℃
電気伝導度	温度 50、100、150℃
	温度 200、250、300、350、400、500、600、700、800、900℃
	温度 1000、1100、1200、1300、1400、1500、1600、1700、1800、1900℃
直流体積抵抗率	温度 50、100、150℃
	温度 200、250、300、350、400、500、600、700、800、900℃
	温度 1000、1100、1200、1300、1400、1500、1600、1700、1800、1900℃
交流体積抵抗率	温度 50、100、150℃
	温度 200、250、300、350、400、500、600、700、800、900℃
	温度 1000、1100、1200、1300、1400、1500、1600、1700、1800、1900℃
誘電損失 1kHz	温度 50、100、150、200、250、300、500℃
誘電損失 1MHz	温度 50、100、150、200、250、300℃
誘電損失 1GHz	温度 50、100、150、200、250、300℃

付帯資料 3．代表値（Typical Data）について

特性、構造情報データは、各測定(解析)条件でのデータがそれぞれ別の特性名(ID)で登録されています。その内、下表のデータについては、それぞれ代表値(Typical Data)が設定されています。

- 代表値で検索した場合、下表の特性名（ID）の内、いずれかのデータが登録されていれば、代表値として結果リストに現れます。代表値での検索は、多くのデータを集めようとする場合、大変便利に使用できます。
- 一つのガラスに複数のデータがある場合、下表で優先順位の高いデータが代表値となります。

1．特性

	機械的、物理的特性	熱的特性	
	ビッカース硬度	線膨張係数	ガラス転移温度
	ID Vickers Hardness	ID Linear Expansion Coeff.	ID Glass Transition Point
代表値	0180 ビッカース硬度(代表値)	1020 線膨張係数(代表値)	1140 転移温度(代表値)
優先順位 1	0174 ビッカース硬度 100g	1022 線膨張係数(20～300℃)	1120 DTA転移温度
2	0175 ビッカース硬度 200g	1023 線膨張係数(20～100℃)	1121 TMA転移温度(膨張係数)
3	0176 ビッカース硬度 500g	1021 線膨張係数(0～300℃)	1125 転移温度(雑)
4	0173 ビッカース硬度 50g	1030 線膨張係数(0～100℃)	
5	0170 ビッカース硬度(雑)	1031 線膨張係数(20～400℃)	
6		1035 線膨張係数(20～500℃)	
7		1036 線膨張係数(30～300℃)	
8		1027 線膨張係数(20～転移点)	
9		1028 線膨張係数(30～380℃)	
10		1026 線膨張係数(-30～70℃)	
11		1024 線膨張係数(50～350℃)	
12		1032 線膨張係数(100～200℃)	
13		1025 線膨張係数(100～300℃)	
14		1033 線膨張係数(200～300℃)	
15		1034 線膨張係数(300～400℃)	
16		1029 線膨張係数(特定温度)	
17		1039 線膨張係数(雑)	

	光学的特性		電気的、磁気的特性
	可視光屈折率	複屈折	誘電率
	ID Refractive Index Visible	ID Birefringence	ID Dielectric Constant
代表値	2010 屈折率(代表値)	2850 複屈折(代表値)	3174 誘電率(代表値)
優先順位 1	2017 屈折率 波長 587.5nm d-line	2851 複屈折 0.63μm	3170 誘電率 1kHz
2	2018 屈折率 波長 589.3nm D-line	2852 複屈折 0.85μm	3177 誘電率 10kHz
3	2016 屈折率 波長 546.1nm e-line	2853 複屈折 1.30μm	3176 誘電率 100Hz
4	2015 屈折率 波長 486.1nm F-line	2854 複屈折 Xμm	3175 誘電率 60Hz
5	2020 屈折率 波長 656.3nm C-line		3178 誘電率 100kHz
6	2013 屈折率 波長 435.8nm g-line		3171 誘電率 1MHz
7	2019 屈折率 波長 643.8nm C'-line		3172 誘電率 1GHz
8	2014 屈折率 波長 480.0nm F'-line		3179 誘電率 3GHz
9	2021 屈折率 波長 706.5nm r-line		3181 誘電率 10GHz
10	2012 屈折率 波長 404.7nm h-line		3173 誘電率 その他データ
11	2035 屈折率(雑)		3189 誘電率(雑)

2．構造

以下の構造情報(員環数以外)の代表値はそれぞれ原子の組み合わせ毎に設けています

	原子間情報		
	第一原子間距離	第二原子間距離	第n原子間距離
	ID 1st Interatomic Distance	ID 2nd Interatomic Distance	ID n-th Interatomic Distance
代表値	02401 第一結合距離(代表値)	02501 第二結合距離(代表値)	02901 第n結合距離(代表値)
優先順位 1	02402 第一結合距離(平均値)	02502 第二結合距離(平均値)	02902 第n結合距離(平均値)
2	02403 第一結合距離(ピーク値)	02503 第二結合距離(ピーク値)	02903 第n結合距離(ピーク値)

	原子間情報		
	結合角	員環数	配位数
	ID Bond Angle	ID Ring Size	ID Coordination Number
代表値	02601 結合角(代表値)	03001 員環数(代表値)	04001 配位数(代表値)
優先順位 1	02602 結合角(平均値)	03002 員環数(平均値)	04002 第一近接配位数
2	02603 結合角(最多確率)	03003 第一ピーク員環数	04003 第二近接配位数
3	02605 結合角(第一ピーク)	03004 第二ピーク員環数	04004 第三近接配位数
4	02607 結合角(第二ピーク)	03014 員環数分布図	04017 配位数分布図
5	02609 結合角(分布図)		