第4章 画面と操作の詳細

目次

1.	メ	イン画面と共通事項		•••••••••••••••••••••••••••••••••••••••
1.	.1	画面共通事項]
1	.2	メイン画面		
2.	绀	:性検索		
2	-			
	.2			
	.3			
	.4	出典リスト画面 ・・		20
	.5			20
•	44	· h4- 471+1		0.0
3.				
	.2			24
	.3			
3.	.4	元素分析画面		30
4.	特	性予測・材料設計(且成最適化)	
4	.1 !	特性計算式による特性	予測画面	3]
4	.2			38
4	.3			····· 35
4.	.4			36
4.	.5	重回帰分析検証画面		4
4.	.6	特性予測画面		45
4.	.7	組成最適化画面 …		······48
5.	椲	: :告データベース ··		······4′
	.1			4
	.2			51
	.3			55
6	_	.ーザーデータ登録機	k	52
b.	.1 o	ユーリーナーグメー	4) 画型 1—画闻 ·········	54
			冰/ 凹山	
		データリスト画面		
				64
6.	.5	ユーサー定義 ID 画]	68

1. メイン画面と共通事項

1. 1 画面共通事項

画面の共通操作について次に説明します。

(1) メニューバー

画面上部のメニューバーには File、View、Tools、Help があり、それぞれにプルダウンメニューが付いています。

(2) ツールアイコン

画面上部のツールバーのアイコンは次のとおりです。

システム						
Ø	インターグラッド	INTERGLAD				
ファイル						
	ファイル保存	Save	c_{s}	CSV保存	CSV File	
=	ファイルを開く	Open		印刷	Print	
設定						
19	環境設定	Preference				
各画面へ	の移行					
® PROP	特性検索	Search Property Data (DB)	Σa×	特性予測	Property Prediction	
STRC	構造検索	Search Structure Data (DB)	2	ユーザーデータ登録	User Data	
PROP	特性詳細	Detail Data of Property	STRC	構造詳細	Detail Data of Structure	
	同一出典リスト	Glasses from a Data Source	A PLOT	三角図	Ternary Plot	
<mark>≟</mark> PLOT	XYプロット	XY Plot	[] PLOT	温度・特性プロット	Temperature-Property Plot	
	元素分析	Element Analysis (Distribution)	INPOL	データ補間	Interpolation	
EESET	データ補間取消し	Reset Interpolation	FIG	構造グラフ	Figure Plot	
1	重回帰分析検証	Verification of Regression Analysis	PROP	特性予測	Property Prediction	
COMP	組成最適化	Composition Optimization				
\Rightarrow	(次画面へ)進む	Forward	4	(前画面へ)戻る	Back	
•	前のレコードへ移行	Former Record	-	次のレコードへ移行	Next Record	
	データエクスポート	Data Export		データインポート	Data Import	
1	システム終了	Exit				
ヘルプ						
?	マニュアル	Manual	6	用語集	Glossary	
(3)	特性測定方法	Measurement of Property				

(3)入力操作等

画面上の入力操作には次の4通りがあります。

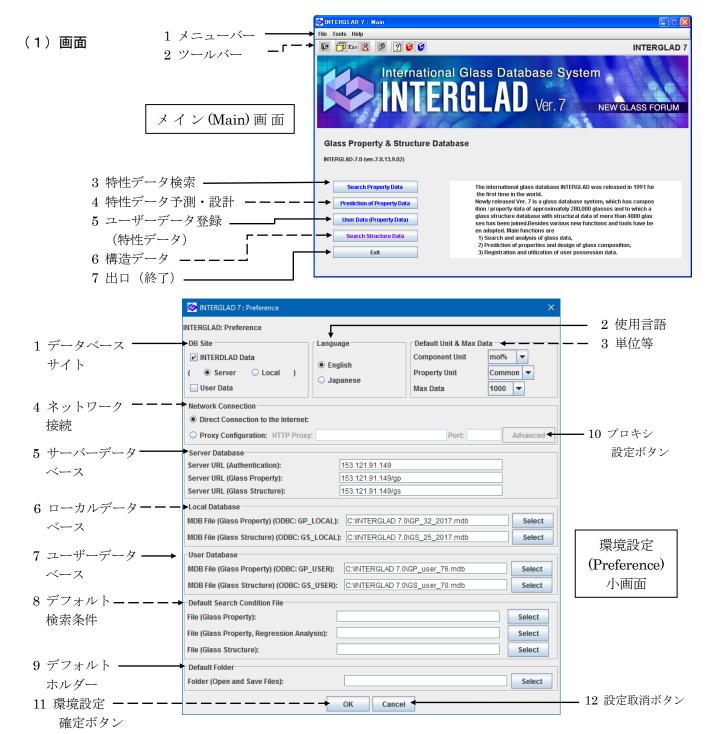
・自由入力領域(白色):数値または文字入力できます。数値は小数点または指数(E形式)入力が可能です。

小数点にはカンマ(,)を使用せず、ピリオド(.)を使用してください。 入力後 Enter キーを押して確定します。

- ・小画面選択(水色):ダブルクリックで表示される小画面からクリックして選択します。
- ・プルダウンメニュー選択:右端の[▼]をクリックすると、選択項目のリストが表示されるので、選択したい 項目をクリックします。
- ・チェックボックス選択:オン(☑) /オフ(□)を表わします。クリックによりオンオフを切替えます。 また、項目にマウスポインターを当てると項目説明が現れます(すべてではありません)。画面右上の×印 をクリックすると、画面が閉じられます。

1. 2 メイン (Main) 画面

INTERGLAD Ver.7 起動後にメイン画面が表示されます。



	INTERGLAD 7: Proxy Configuration	X	
	Proxy Configuration		
1 プロキシ IP アドレス、	HTTP Proxy: Port:		
ポート入力欄	HTTPS Proxy: Port:		
	SOCKS Proxy: Port:		
2 プロキシ認証	Proxy Authentication		
	Enable Proxy Authentication:		
ユーザーID、パスワード	User:		
入力欄	Password:		
	OK Cancel		

プロキシ設定 (Proxy Configuration)小画面

(2) 詳細説明

メイン画面の各ボタンをクリックすることにより、実施したい検索・予測等の画面が開きます。EXIT ボタンのクリックにより、INTERGLAD システムが終了します。メニューバーの Tools から Contents of Property Data、Contents of Glass-Forming Region、Contents of Structure Data をクリックすることにより、それぞれの収録データ数を知ることができます。Contents of Property Data からは、全ガラス数(組成等のデータセットの数)の他、リストを展開していくことにより、ガラス状態、外観・特徴・製法、用途、出典、成分、ガラス汎用名(系)、特性の各項目別のガラス数を知ることができます。Contents of Structure Data からも、全ガラス数の他、ガラス状態、形状、測定方法、出典、成分、ガラス汎用名(系)、構造情報の各項目別のガラス件数を知ることができます。また、Contents of Glass-Forming Region からはガラス化範囲データが収録されている 2 成分あるいは 3 成分の組成系の数を知ることができます。また、Help から Check Update をクリックすることにより、新バージョンを確認・ダウンロードできる Web ページに進むことができます。

また、ツールバー中の環境設定(Preference)アイコン をクリックすると環境設定(Preference)小画面が表示され、環境(初期条件)を設定できます。各条件を設定後、OK ボタンをクリックして画面を閉じます。 Cancel ボタンをクリックすると、設定条件はすべてその設定前に戻り、画面が閉じられます。以下、環境設定小画面につき説明します。

① データベースサイト⇔ 環境設定小画面 1

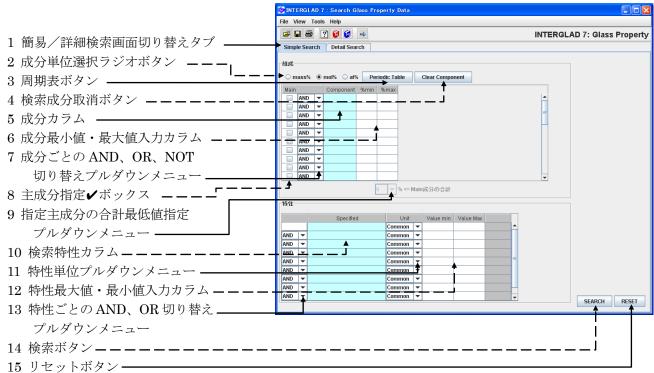
- ・INTERGLAD データ使用の場合、サーバー(Server)かローカル(Local)のラジオボタンをクリックします。サーバーDB はニューガラスフォーラムの INTERGLAD サーバー中のデータベースで、常に最新の更新 データを利用可能です。ローカル DB はプログラムのダウンロードあるいは CD よりパソコンにインストールされたデータベースです。ローカル DB は少なくとも年 1 回更新されます。
- ・INTERGLAD データおよびユーザーデータの両方を使用の場合には、ユーザーデータ (User Data) のチェックボックスもクリックして✔を入れます。ユーザーDB はユーザーにより INTERGLAD に登録されたデータのデータベースで、登録パソコンでのみ利用可能です。
- ・ユーザーデータのみを使用する場合には、ユーザーデータのチェックボックスのみに✔を入れます。
- 英語、日本語の内、使用したい言語のラジオボタンをクリックします。
- ・成分単位(Component Unit)をプルダウンメニューより選択してクリックします。
- ・特性単位(Property Unit)を選択します。デフォルトの Common はそれぞれの特性で一般的と考えられる 汎用単位です(第 6 章 5.1 特性データベース ID リスト参照)。
- ・検索データ最大数を選択します。
- ・デフォルト(初期設定)値で良い場合には、設定の必要はありません。
- ・これらの選択は検索画面でもできます。
- ④ ネットワーク接続(Network Connection) ⇔ 環境設定小画面 4, 10、プロキシ設定小画面
- ・インターネット直接接続の場合には、Direct Connection to the Internet を選択します。
- ・プロキシ使用の場合には、Proxy Configuration を選択し、プロキシ設定(Advanced)ボタンをクリックする と、プロキシ設定小画面が開きます。この小画面で、IP アドレスおよびポートをインプットします。プロ キシ認証が必要な場合には、Enable Proxy Authentication チェックボックスをチェックし、ユーザーID お よびパスワードを入力し、最後に OK ボタンをクリックします。

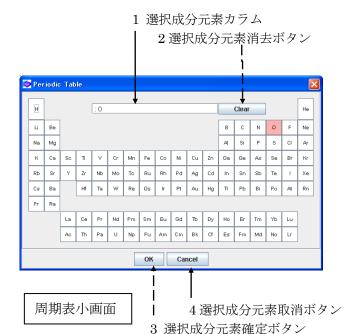
- ⑤ サーバーデータバース(Server Database) ⇔ 環境設定小画面 5
- ・検索対象となる特性および構造データベースサーバーを確認、また変更できます。通常は操作の必要はありません。
- ⑥ ローカルデータベース (Local Database) ⇔ 環境設定小画面 6
- ・検索対象となる特性および構造ローカルデータベースを確認、また変更できます。選択(Select)ボタンをクリックし、[開く]小画面を開き、通常、最新のデータベース mdb ファイルを選択し、[開く]ボタンをクリックします。通常は操作の必要はありません。ローカルデータベースとして ODBC 設定されたファイル名が表示されます。プログラムをアップグレードした際には、新たに ODBC 設定が必要になる場合があります。
- ・登録および検索対象となる特性ユーザーデータベースを確認、複数設定の場合に選択、また保管場所の変更 ができます。通常は操作の必要はありません。
- (8) デフォルト検索条件(Default Search Condition File) ⇔ 環境設定小画面 8
- ・保存された検索条件の内からデフォルト(初期設定)とする検索条件を選択できます。Select ボタンをクリックし、検索条件ファイルを選択してクリックします。
- ・特性、特性/重回帰分析、構造のいずれについても設定できます。
- ⑨ デフォルトフォルダ(Default Folder) ⇔ 環境設定小画面 9
- ・検索・解析等のデータを保存するデフォルトフォルダを選択できます。Select ボタンをクリックし、デフォルトとするファイルを選択してクリックします。

2. 特性検索

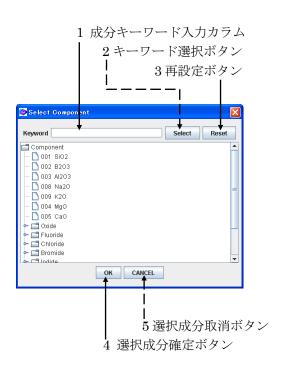
特性検索(Search Property Data)画面

(1) 画面

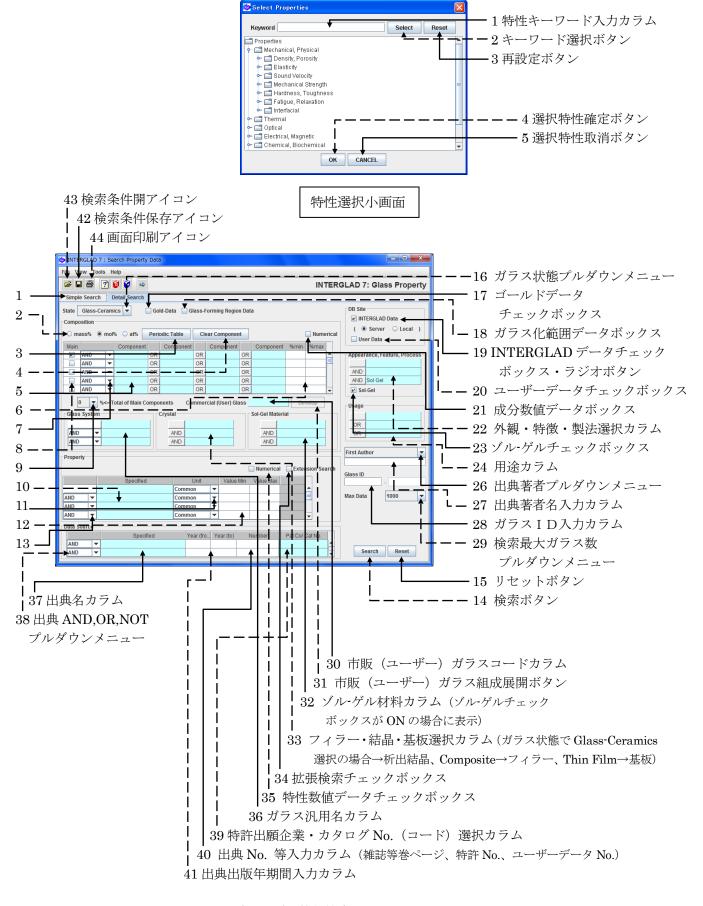




簡易検索画面



成分選択小画面



1~13 は前ページの簡易検索画面と同じ

詳細検索画面

(2) 詳細説明

(A) 簡易検索画面と詳細検索画面の切り替え ⇔ 簡易・詳細検索画面 1

検索条件が組成成分と特性のみの簡易検索画面と、ガラス状態、形状・特徴・製法、用途など様々な項目を検索条件とできる詳細検索画面をタブで切り替えられます。簡易検索画面と詳細検索画面の内容は常に一致し、一方を変更すると、他方も変更されます。メイン画面の Preference の Default Search Condition File に詳細画面で設定した検索条件を設定しておけば、システム起動後、簡易あるいは詳細検索画面を開いたときに、この検索初期条件が反映されます。

検索対象となるデータベースを、INTERGLAD データ、ユーザーデータから選択します。両方一緒に使用することもできます。また、INTERGLAD データについて、サーバー上の最新版を使用するか、利用者のパソコン内のもの(または CD-ROM)を使用するかのどちらかが選択できます。

この選択の初期状態は初期画面の Preference 小画面で設定できます。なお、インターネット版においては、サーバー以外のデータは使用できません。

(C)検索条件の指定

指定できる項目を以下に列挙します。各項目は AND の関係で結ばれて、検索演算が行われます。

ガラスの状態を限定せずに全収録データを検索対象にしたい場合は、指定なし Not Specified を選びます。ガラスの状態を限定する場合は、一般ガラス Glass General、融体 Melt および非ガラス Non-Vitrified のいずれか1つを指定します。さらに一般ガラス Glass General は、通常のガラス Glass、結晶化ガラス Glass Ceramics、複合材料 Composite、変成ガラス Modified Glass および薄膜 Thin Film の5つの中の1つを指定できます。初期状態は、指定なし Not Specified です。

② Gold-Data ⇔ 詳細検索画面 17

Gold-Data として区分けされた信頼性が特に高いガラスのみを検索対象とする時に指定します。 まだ少数のデータしか Gold-Data として登録されていませんが、今後、収録済みの個々のガラスデータに ついてデータ値等を確認しながら登録数を増やして行く予定です。利用者保有データについては、入力時 に Gold-Data として登録することができます。

Gold-Data は、ガラス番号の後ろに"R"を付けて表示します。

なお、Gold-Data は、分析値から成る組成値と5種類以上の特性データを有し、徐冷条件が明示され、 特性値が周辺組成のデータと比較して大きく異なっていないものから選んで指定しています。

- - ガラス化範囲データのみを検索対象とする時に指定します。
- ④ 組成(Composition)
 - a) 化学成分(Components) の種類、量 ⇔成分小画面、簡易・詳細検索画面 6

化学成分は、酸化物 Oxide、フッ化物 Fluoride、塩化物 Chloride、臭化物 Bromide、ヨウ化物 Iodide、元素 Element、硫化物など Sulfide etc. (S·Se·Te 化物、NH3、P·As 化物)、ガラス原料物質 Raw Material、複合材料フィラーFiller、薄膜基板 Substrate、結晶化ガラスの結晶 Crystal の 11 に分類されます。 入力方法は次項 b)、c) に記載されています。

成分量については最小値%min、最大値%max が入力できます。このどちらかに数値を入力すると、その成分値が非数値のデータ(*)は検索されません。%min に「0」を入力すると(「-1」の入力でも同)、その成分が記載されていないガラスについても抽出できます。この方法はある成分を全く含まないガラスについても一緒に検索したい場合に便利です。%max に数値を記載し、%min に数値を記載しない場合も同様にその成分を含まないガラスも抽出されます。数値は 0.01 から 100.00 までを 0.01 きざみで入力できます。E 形式の場合には最小 1E-4 (0.0001%)まで入力可能です(E の前後の数字は整数)。%min の合計が 100%を超えた場合には E Warning ダイアログ(E Total of min% exceeds E Nで見かれます。E のようなと、そのまま検索は実行されますが、通常、検索ガラス数は E となり、合計が E 100%以内となるよう再入力が必要です。

[汎用表記(イタリック)の化合物名]

成分として、汎用表記(イタリック)の化合物名を選択できます。その場合は下記に示す成分が

OR でつながっているものと解釈します。汎用表記の%min、%max は、展開された各成分の和を示 すものとします。

R2O= Li₂O, Na₂O, K₂O, Rb₂O, Cs₂O, R₂O

RO= MgO, CaO, SrO, BaO, RO $= Al_2O_3, Fe_2O_3, Cr_2O_3, R_2O_3$ R2O3RO2 $= \text{TiO}_2, \text{ZrO}_2, \text{HfO}_2, \text{RO}_2$

R2O5 $= P_2O_5, V_2O_5, Nb_2O_5, Ta_2O_5, R_2O_5$

 $= M_0O_3, WO_3, RO_3$ RO3

RE2O3 $= Ce_2O_3, Pr_2O_3, Nd_2O_3, Pm_2O_3, Sm_2O_3, Eu_2O_3,$

 Gd_2O_3 , Tb_2O_3 , Dy_2O_3 , Ho_2O_3 , Er_2O_3 , Tm_2O_3 , Yb_2O_3 ,

Lu₂O₃, Sc₂O₃, Y₂O₃, La₂O₃, Re₂O₃

AnO2 $= \text{ThO}_2$, PaO_2 , UO_2 , NpO_2 , PuO_2 , AmO_2 , CmO_2 , BkO_2 ,

CfO₂, EsO₂, FmO₂, MdO₂, NoO₂, LrO₂, AcO₂, AnO₂

注:イタリックではない汎用表記は、一般の組成と同様に扱われます(出典にまとめた値のみ が記されている場合です)。

b) 周期表よりの成分指定 ↔ 簡易・詳細検索画面 3、周期表小画面

周期表ボタンのクリックにより、周期表より組成成分を指定できます。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、[OK]ボタンをクリックします。ハロゲン化物のような非酸化 物の場合には、酸素Oをクリックして背景のピンク色を消した後、必要な陰イオン元素をクリックし ピンク色の背景とします。同時に2種以上の陰イオンを指定することもできます。周期表に指定した 元素は、再度クリックすれば削除され、[Clear Component]ボタンによりすべての指定元素を消去で きます。また周期表小画面は[Cancel]ボタンあるいは右上の×ボタンのクリックにより閉じることが できます。

指定成分は、成分セル(水色)の1列目に陽イオンの異なる成分が、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(左から右へ価数の小さい成分から大きい成分へ)。複数の陰イオンが 指定された場合には1列目の上より下に酸化物、Cl化物、Br化物、I化物の順に並びます。なお、2 列目から右のセルのみに周期表より成分指定をすることはできません。

c) 成分選択小画面のリスト、キーワードよりの成分指定 ⇔ 簡易・詳細検索画面 5、成分選択小画面 成分セルのダブルクリックにより、成分選択小画面を開いて展開し、指定成分を選択して[OK]ボタ ンをクリックします。これにより指定成分が成分カラムに設定されます。成分選択小画面の展開(中 分類、小分類を開く)には、結節点をクリックするか、文字(アイコン)をダブルクリックします。 閉じる場合も同様です。Ctrl キーを押したままクリックすると同時に複数の成分が指定できます。ま た、成分選択小画面の Keyword カラムにキーワードをローマ字で入力し、[Select]ボタンをクリック することにより、指定成分を簡単に探すことができます。キーワードを含む成分すべてが青色表示さ れます。入力したキーワードを取り消す場合には、[Reset]ボタンをクリックします。成分選択小画面 を閉じる場合には、[Cancel]ボタンあるいは右上の×ボタンをクリックします。

d) 化学成分の[AND、OR、NOT] AND (A) ⇔ 簡易・詳細検索画面 7 成分欄は各行ごとに、AND、OR または NOT のいず AND (B) れかが指定ができます。

本システムでは、成分名の左の AND、OR、NOT は、 ・AND(A): A を含む(他のAND、NOT成分との共通部分)

OR (A)



OR (B)

・OR (A) : A を含む (他の AND、NOT 成分と関わりなく)

AND (A) NOT (B)



{AND (A) AND (B)}とした場合(右図上)は、緑色部分が示す ようにAとBの両者を含むガラスが抽出されます。

を示します。

・NOT (B): Bを含まない(他のAND、NOT成分との共通部分)

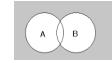
 $\{OR(A)OR(B)\}$ とした場合(右図中)は、AあるいはBを含むすべてのガラスが抽出されます。 $\{AND(A)NOT(B)\}$ とした場合(右図下)は、Aを含むガラスから Bを含むガラスが排除されて抽出 されます。

従って、AND、OR、NOT が複数ある場合の処理順序は、次のように説明することもできます。

- ・縦方向の AND、NOT、OR は、AND と NOT が先にまとめて判断され、その後 OR と結合されます。
- ・横方向のORは、カッコがついたものと判断され、優先処理されます。

なお、NOT を入れた行に 2つの成分を OR で入力した場合、次のことを意味することになります (Ver. 6 の場合と異なります)。

NOT(A or B) 右図のグレー部分を示す また、縦方向(異なる行)に NOT を 2 つ使用した場合も上記と同じ意味 となります。



NOT(A) and NOT(B) = NOT(A or B)

e) **数値データ** (Numerical) ⇔ 詳細検索画面 21

Numerical チェックボックスをオンにすると、検索条件として指定した化学成分が非数値(*マーク表示)のデータは抽出されません。

f) 単位 ⇔ 簡易・詳細検索画面 2

ラジオボタンにより mass%、mol%または at%が選択できます。単位のデフォルト状態は mol%です。デフォルト単位は、初期画面の Preference 小画面で設定できます。カルコゲナイドガラス等の場合には、at%を選択する方が多くのガラスが抽出されます。

g) 主成分の合計 (Total of Main Components) ⇔ 簡易・詳細検索画面 8,9

Main 特定 (チェックボックスがオン) の場合のみ有効となり 主成分の合計成分

Main 指定(チェックボックスがオン)の場合のみ有効となり、主成分の合計成分量が指定できます。Main 指定時はANDのみ使用可能であり、OR、NOTは使えません。横方向のORは使えます。

h) ガラス汎用名(Glass System) ⇔ 詳細検索画面 36

ダブルクリックで表示される小画面から選択できます。小画面では成分選択の場合と同様に、キーワード入力による項目検索も可能です。各行ごとに、AND または OR のいずれかが指定できます。

- i) 市販 (ユーザー) ガラス(Commercial (User) Glass) と [組成展開]ボタン ⇔ 詳細検索画面 30,31 ダブルクリックすると小画面が表示され、市販(ユーザー)ガラスコードが選択できます。小画面ではキーワード入力による検索も可能です。さらに、[組成展開]ボタンをクリックすると、その市販ガラス (ユーザーガラス) のガラス組成が、組成欄に展開されます。市販ガラスが複数のガラスデータにわたる場合は、%min に最小値が、%max に最大値が表示されます。組成欄と市販ガラスは OR の関係で検索が実行されます。
- j) フィラー/析出結晶/基板 (Filler/Crystal/Substrate) ⇔ 詳細検索画面 33 「ガラスの状態」で複合材料(Composite)を指定した場合に、Filler の指定が可能となります。「ガラスの状態」で結晶ガラス(Glass-Ceramics)を指定した場合に、析出結晶 Crystal の指定が可能となります。「ガラスの状態」で薄膜(Thin Film)を指定した場合に、Substrate の指定が可能となります。Filler 欄、Crystal 欄、あるいは Substrate 欄のセルをダブルクリックして表示される小画面からそれぞれの材料を選択できます。小画面ではキーワード入力による項目検索も可能です。
- k) ゾル-ゲル原料 (Sol-Gel Material) ⇔ 詳細検索画面 32

外観・特徴・製法欄で[Sol-Gel]ボタンをオンとした場合、あるいは SolGel を指定した場合に、ゾルーゲル原料(Sol-Gel Material)の指定が可能となります。[Sol-Gel Material]欄のセルのダブルクリックにより表示される[Select Sol-Gel Material]小画面から原料を選択できます。小画面ではキーワード入力による項目検索も可能です。

- ⑤ 特性(Property)
 - a) **特性項目選択** ⇔ 簡易・詳細検索画面 10、特性選択小画面

ダブルクリックで表示される特性選択小画面から特性項目を選択できます。組成の成分選択の場合と同様に、キーワード入力により指定したい特性項目を探すこともできます。小画面上で太字となっている特性は、指定可能な中分類特性あるいは表データです(第6章3. 表データ 参照)。中分類を指定した場合には、次画面の結果にその中分類に含まれる特性すべてが表示されます。2行目以降の特性欄は各行ごとに、1行目の特性に対しANDまたはORのいずれかが指定できます。

b) **単位** ⇔ 簡易·詳細検索画面 11

単位系は汎用単位 Common、SI 単位、CGS 単位と PSI 単位の 4 種類があり、特性ごとに指定できます。単位系のデフォルト設定は Common です。Common はそれぞれの特性で一般的と考えられる汎用単位です(第6章 5.1 特性データベースIDリスト参照)。デフォルト単位系はメイン画面 Preference 小画面でも設定できます。

単位欄の#印は、単位換算できない特定の単位等で表示されていることを表します。

c) 特性最小値、最大値
⇔ 簡易・詳細検索画面 12

特性の数値範囲として Value Min セル、Value Max セルに最小値、最大値を入力して指定できます。数値は小数点方式あるいは指数(E表示)方式で入力します。 E表示の場合には、1.5 E7 のように Eの後の数字を整数とします(マイナスの整数も可)。最小値、最大値に制限がある場合にはセルにマウスポインタをおくと、吹出しで数値が現れます。

d) 特性数値データ (Numerical) ⇔ 詳細検索画面 35

チェックボックスをオンにすると、検索条件として指定した特性が非数値(*マーク表示)のデータは抽出されません。

e) 拡張検索 (Extension Search) ⇔ 詳細検索画面 34

高温密度、粘度などの高温特性を検索する際にこのチェックボックスをオンにすると、該当する温度の特性値(あるいは粘性標準点の温度)が登録されていないガラスであっても他の温度の特性値(他の粘性標準点の温度)が存在すれば、検索対象となり取り込まれます。求めたい温度以外の複数のデータがあれば、検索結果画面でデータ補間アイコンを使用することにより、外挿あるいは内挿により該当温度での特性値を割り出すことができます。

[代表値(Typical)について]

多数の ID に分けて登録されている特性(各測定条件にて)については、代表値(Typical)で検索することもできます。代表値が設定されている特性は、以下の 6 特性です。代表値で検索を行った場合、それぞれの特性値について以下に示す ID のデータが一つでも登録されていれば、次画面(特性検索結果画面)の特性(Typical)欄に表示されます。1 ガラスに複数の ID の特性値が登録されている場合、優先度の高い特性値が表示されます。第3章 付帯資料 3.「代表値について」に ID 内容が記載されていますので参照ください。

・ビッカース硬度(0180:(代表))

優先する順序は、0174>0175>0176>0173>0170

· 線膨張係数 (1020:(代表))

優先する順序は、1022>1023>1021>1030>1031>1035>1036>1027>1028>1026>1024 >1032>1025>1033>1034>1029>1039

・ガラス転移温度(1140:(代表)

優先する順序は、1120>1121>1125

• 屈折率 (2010:(代表))

優先する順序は、2017>2018>2016>2015>2020>2013>2019>2014>2021>2012>2035

・複屈折 (2850:(代表))

優先する順序は、2851>2852>2853>2854

誘電率(3174:(代表))

優先する順序は、3170>3177>3176>3175>3178>3171>3172>3179>3181>3173>3189

[電気伝導度、交流体積抵抗率および直流体積抵抗率について]

電気伝導度、交流体積抵抗率または直流体積抵抗率のいずれかが条件に指定された場合、下表に従って他の二つの特性も一緒に検索し、検索条件に指定された特性に換算されて表示されます。換算データは赤字で表示されます。一つのガラスにつき複数の伝導度・抵抗率データが登録されている時には、次表の優先順位に従ってどれか一つだけが次の特性検索結果画面に表示されます。

条件で指定	優先順位 1	優先順位 2	優先順位3
電気伝導度	電気伝導度	交流体積抵抗率の逆数	直流体積抵抗率の逆数
交流体積抵抗率	交流体積抵抗率	電気伝導度の逆数	直流体積抵抗率
直流体積抵抗率	直流体積抵抗率	電気伝導度の逆数	交流体積抵抗率

⑥ 外観・特徴・製法 (Shape, Feature & Process) ⇔ 詳細検索画面 22

ダブルクリックで表示される小画面から選択できます。小画面ではキーワード入力による項目検索も可能です。複数の項目選択はANDで結ばれます。[外観 Appearance]等の最上位の項目以下、どの項目も検索項目とすることができます。

[Sol-Gel]チェックボックスのチェックにより[Sol-Gel Material]欄が開きます(④ k)を参照ください)。

⑦ 用途(Usage) ⇔ 詳細検索画面 24

ダブルクリックで表示される小画面から選択できます。小画面ではキーワード入力による項目検索も可能です。複数の用途を指定した場合は OR 関係です。[エネルギー、原子力、放射線 (Energy, Nuclear, Radiation)] 等の最上位の項目以下、どの項目も検索項目とすることができます。

⑧ 著者 (Author) ⇔ 詳細検索画面 26,27

著者名は自由入力です。「筆頭著者」First Author または「筆頭か否かを問わない」Any Author をプルダウンメニューより指定してください。氏名の名はイニシャル表示となっています(例:Suzuki Y.)。

ダブルクリックで表示される出典選択小画面から出典名を選択できます。小画面ではキーワード入力により指定したい出典名(カタログの場合は会社名)を探すこともできます。小画面上で太字になっている出典は、指定可能な中分類項目です。出典は4種類まで指定でき、各行ごとに、OR、AND、NOTのいずれかが指定できます。

出典内容、収録データ数については第2章(1)を参照ください。

出典名欄では出典のカテゴリ(データブック/学会誌/予稿集/特許/カタログ/利用者保有データ)またはその下層が選択できます。データブックについてはデータブック名、学会誌については学会誌名、予稿集については予稿集名、特許はヨーロッパ特許、米国特許または日本特許(特許公開公報)、カタログについては企業名が指定できます。

出典の発行年号が指定できます。年号は西暦年号の4桁の数字を入力します。日本特許の年号は西暦に直してこの欄に入力します。年号は期間で指定できます。単一年号のみに限定して検索したい場合は、左右の欄に同じ数字を入力してください。

c) **番号**(Number) ⇔ 詳細検索画面 40

番号欄はカテゴリにより、指定方法が次のように異なります。

データブック : データブック名を選択すると、データブックの巻数とページ数の指定が可能となります。この巻数は 00B、002 など 3 桁で入力します。ページ数は 6 桁です。

学会誌・予稿集:誌名を選択すると、学会誌または予稿集の巻数とページ数が指定できます。

例えば Vol. 2035ページの場合、002000035のように巻数 3 桁に続きページ数を 6 桁で入力します。なお、6 桁には最近切り替えましたので、大部分の出典のページ数は 4 桁となっています(データブックの場合も同様)。4 桁表示の場合、ページ数が 5 桁の場合には、10000ページ台は最初の 10 を t で、11000ページ台は最初の 11 を e で、12000ページ台は最初の 12 を w で、13000ページ台は最初の 13 を h で、14000ページ台は最初の 14 を f で、15000ページ台は最初の 15 を i で、16000ページ台は最初の 16 を s で、17000ページ台は最初の 17 を v で、18000ページ台は最初の 18 を g で、19000ページ台は最初の 19 を n で、20000ページ台は最初の 20 を v で表しています。v01.59&v00 などの合巻の場合は、v09 または v00 のいずれかで入力されています。

特許

: ヨーロッパ特許、米国特許または日本特許を選択すると、特許番号の指定が可能となります。自動的に入力される"A"に続いて特許番号を、日本特許(公開公報)の場合は6桁で、米国特許とヨーロッパ特許(公開)の場合は7桁で入力します。米国特許の場合、2002年以後、公開特許も登録されており、この場合にはAの次の数字が0となっています。最近の日本特許の再公表特許の場合には、Aに続いてW+6桁の番号(国際公開番号)が登録されています。なお、特許については実施例のデータが採用されています。実施例は必ずしもすべてではありません。以前は、1特許の実施例が1-100件の場合10件まで、100件を超える場合、約10%のデータの収録としていましたが、2011年より、1-20件の場合は全数、21件以上の場合は

20 件を超える数の 10%+20 件の収録としています。

BE: Belgium, CN: China, DE: Germany, FR: France, GB: Great Britain (United Kingdom), IT: Italy, J: Japan, KR: Republic of Korea, LI: Liechtenstein, NL: Netherlands, PT: Portugal, R: Russian Federation, SU: Former Soviet Union, US: United States of America

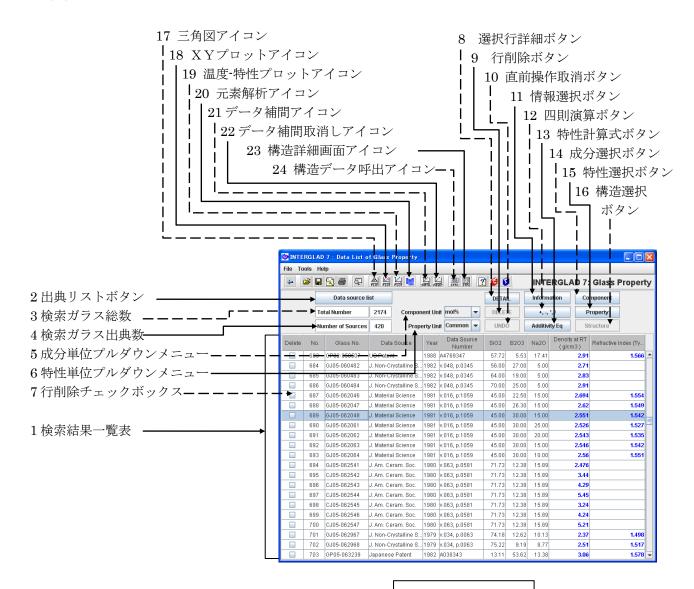
(D) その他の機能

- ① 検索ボタン ⇔ 簡易・詳細検索画面 14 検索を実行します。
- ③ 検索条件保存アイコン ⇔ 詳細検索画面 42 (簡易検索画面の場合も同様) 画面の検索条件を、名前を付けて保存します。Preference 画面の Default Folder に保存用フォルダが指定されていれば、そのフォルダがアイコンのクリックにより現れます。
- ④ 検索条件開アイコン ⇔ 詳細検索画面 43 (簡易検索画面の場合も同様) 保存してある検索条件を開いて、画面上に展開します。
- ⑤ 画面印刷アイコン ⇔ 詳細検索画面 44 (簡易検索画面の場合も同様) 表示画面をそのまま印刷します。
- ⑥ ➡ 進むアイコン

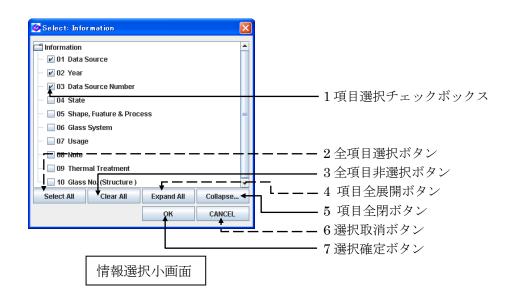
次の特性検索結果画面に進みます。前に保存した検索結果を呼び出す場合には、特性検索画面での操作は必要なく、進むアイコンから特性検索結果画面に進み、画面開アイコンから呼び出します。

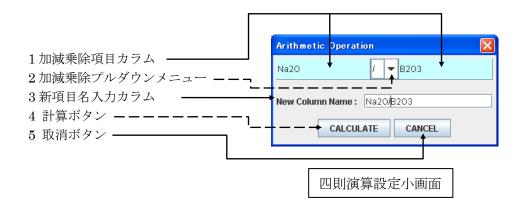
2. 2 特性検索結果 (Data List of Property) 画面

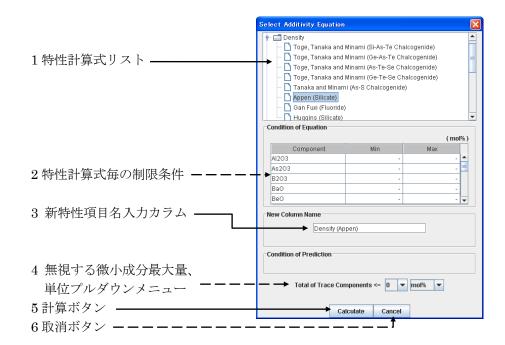
(1) 画面



特性検索結果画面







特性計算式小画面

(2) 詳細説明

- (A) ガラス数 ⇔ 検索結果画面 3.4
 - 検索ガラス数 Total Number:検索されたガラスの総数。
 - ② 検索出典数 Number of Sources:検索されたガラスの引用出典数。

(B) **一覧表** ⇔ 檢索結果画面 1

ガラス番号ごとにデータを横一行で表示します。最初に表示される項目は、ガラス番号、出典、Year、Data Source Number と組成と特性の検索指定項目のみです。

表としては次の機能を持っています。

- ・列の入れ替え: 組成あるいは特性の列のラベルをドラッグ&ドロップして列の入れ替えができます。
- ・列のソート: ラベルの「shift+クリック」によりソート(昇順・降順)が行えます。
- ・詳細画面への移行: 行のダブルクリックにより詳細画面への移行が可能です。
- 行削除チェックボックス(Delete)
 ⇔ 検索結果画面 7,9

このチェックボックスがオンのデータは、後述するデータ解析(四則演算列作成、特性計算列作成、X-Y 図表示、三角図表示)に使用されません。また、[DELETE]ボタンをクリックすると表示画面からも削除

されます。逆に、X-Yプロット画面(2.5 参照)及び三角図画面(2.6 参照)上でプロットの削除を行うとこの削除チェックボックスがオンになります。

行の選択は、削除チェックボックス以外の箇所をクリックして行って下さい。削除チェックボックスでは行の選択はできませんので、ご注意ください。

② No. 欄

出力されたデータの通し番号が表示されます。

③ ガラス番号欄

データベース収録データに付けた固有番号です。最初の1文字目はガラスの状態を表します。通常のガラス Glass は G、結晶化ガラス Glass Ceramics は X、複合材料 Composite は C、変成ガラス Modified Glass は M、膜 Thin Film は T、融体 Melt は F、非ガラス Non-Vitrified は N です。

2文字目は出典を表します。データブックは B、学会誌は J、予稿集は I、特許は P、カタログは C、ユーザーデータは U です。

 $3\sim4$ 文字目はガラス汎用名 Glass System を表します。例えばシリカガラスは 01 になります。 ハイフン以下の 6 桁の数字は、収録データの登録順に付けた通し番号(Glass ID)です。この数字の後に R がつく場合は、Gold-Data であることを示します(2.1 (2) (C) ②参照)。

ガラス番号について GC03-052224 ①23 ④

① ガラス状態 通常ガラス G, 結晶化ガラス X, 複合材料 C, 変性ガラス M, 膜 T, 融体 F, 非ガラス M

②出典 データブック B, 学術誌 J, 予稿集 I, 特許 P.

③ガラス汎用名 ID シリカガラス 01, アルカリケイ酸ガラス 02, アルカリ土類ケイ酸ガラス 03.・・・

④Glass ID 登録順の6桁通し番号

④ 出典欄(Data Source)

Data Source として出典カテゴリの1つ下の分類名(誌名など、特許の場合には日米欧の区別に加えて出願社名まで)、Year および Data Source Number が表示されます。

Data Source、Year および Data Source Number は、[Information]ボタンをクリックして表示される小画面で、チェックをはずすことにより非表示にすることができます。

⑤ ガラス状態、外観·特徴·製法、用途、ガラス汎用名、Note 欄、熱処理条件欄

これらは、[Information]ボタンをクリックして表示される小画面で表示/非表示が選択できます。外観・特徴・製法あるいは用途を表示した場合、それぞれの最下位の項目のみが表示されます。

⑥ 組成

検索画面で指定した成分があれば表示されます。他の成分についても、一覧表に表示されたガラスに含まれるすべての成分が検索できており、[Component]ボタンをクリックして表示される小画面の化学成分の表示/非表示チェックボックスをクリックすることにより表示させることができます。

組成単位の初期値は、検索画面で指定された単位です。[Component Unit]プルダウンメニューで変更することが可能です。

なお、フィラー、結晶名およびゾルゲル原料については、この画面では表示されないので、同一出典リストあるいは詳細画面を呼出して確認します。

⑦ 特性

検索画面で指定した特性があれば表示されます。他の特性についても、一覧表に表示されたガラスに含まれるすべての特性が検索できており、[Property]ボタンをクリックして表示される小画面の特性の表示/非表示チェックボックスをクリックすれば表示させることができます。特性単位の初期値は汎用単位系 Common で、検索画面で指定した単位ではありません。利用者環境設定で初期設定を変更することができます。特性値は小数点以下 3 桁までのE (指数) 形式で表示されます。例:156.3=1.563E+02 なお、E+00 の場合は単に小数点以下 3 桁の数字で表示されます。

青字で示される特性は、条件付きのデータですので、詳細画面で確認するとよいでしょう。

赤字で示される特性は、電気伝導度、交流体積抵抗率及び直流体積抵抗率で優先順位 2、3 の場合の換算された数値です (2.1(2)(C)⑤ 参照) "Figure"と表示されるのは表データ (第6章3参照) です。詳細画

面から図を表示することができます。

(C) その他の機能

① 成分単位 (Component Unit) プルダウンメニュー ⇔ 検索結果画面 5

 $mol\% \cdot mass\%$ 間の単位変換ができます。単位変換ができなかった成分の数値は赤の*となります。 R_2O 、Kaolin、Others などの分子量不明の成分を含むガラスは $mass \cdot mol$ 変換できません。元の単位に戻すと元の値が表示されます。単位変換前に含有量が*で表示されていたデータは、単位変換操作後、赤の*表示となりますが、詳細画面を見ると数値が記されている場合があります。これは組成中に分子量不明の成分が含まれる場合で、この種のガラスを詳細画面に示された単位以外で検索するとこうしたことが起こります。また、単位変換により成分合計値が 100%とならなくなった場合、成分値が赤の*表示となります(例: 72981 mol%で検索して mass%に単位変換)

- ② 特性単位(Property Unit)プルダウンメニュー ⇔ 検索結果画面 6特性単位系を変更することにより、一覧表上の特性値が変換されます。
- ③ 情報選択(Information) ボタン ⇔ 検索結果画面 11 出典、出典の Year、Data Source Number、ガラス状態、ガラス汎用名、外観・特徴・製法、用途、熱処 理条件、Note、ガラス No.(構造データベース)の表示/非表示が選択できます。
- ④ 成分選択(Component)ボタン ⇔ 検索結果画面 14 一覧表に表示されたガラスに含まれるすべての成分について表示/非表示が選択できます。
- ⑤ 特性選択(Property)ボタン ⇔ 検索結果画面 15 一覧表に表示されたガラスに含まれるすべての特性項目について表示/非表示が選択できます。
- ⑥ 構造選択(Structure)ボタン ⇔ 検索結果画面 16

一覧表に表示されたガラスに含まれるすべての構造項目について表示/非表示が選択できます。構造選択ボタンが使用できるのは、構造データベース検索アイコンあるいは情報選択ボタンから Glass No.(Structure)をクリックした後です。

⑧ 直前操作取消(Undo)ボタン ⇔ 検索結果画面 10

直前の「Delete」操作を取り消します。

⑨ 選択行詳細画面(Detail)ボタン ⇔ 検索結果画面 8
「行選択」した任意の選択ガラスの詳細データが表示できます。行選択は、削除チェックボックス以外

の箇所をクリックして行って下さい。削除チェックボックスのクリックでは、行選択はできません。Detail ボタンを押す代わりに、行をダブルクリックする方法でも詳細画面に移ります。

⑩ 四則演算(+, -, ×, /)ボタン⇔ 検索結果画面 12、四則演算設定小画面

組成・特性に関する任意の2項目間の四則演算(+、-、*、/)ができます。

クリック操作により表示される小画面上で、演算の条件を設定します。演算結果は新しい列に表示されます。

演算の条件 :

- ・演算対象として選べるのは組成・特性に関する任意の2項目です。 四則演算で新しくできた項目を選択することも可能です。
- 演算子:+、-、×、/
- ・新しい列のラベル: 演算条件設定時の小画面で名前を付けることができます。

組成と組成を+または一で演算を行った結果は組成とみなされ、Component ボタンで起動する小画面の最上行に新項目が表示されます。

組成と組成を×または÷で演算を行った結果は、組成としての数値範囲を超えることがあるので特性として扱い、Property ボタンで起動する小画面の最上行に新項目が表示されます。組成と特性、特性同士など特性が関係する演算の結果は特性とみなされます。

演算の結果できた新しい列を非表示とする場合は、[Component…]ボタンまたは[Property…]ボタンを操作することにより行うことができます。

組成についての演算を行った後は、全ての組成の単位変更はできません。

演算の結果できた新しい特性列は、単位を持ちません。

① 特性計算式(Additivity Eq)ボタン ⇔ 検索結果画面 13

クリック操作により表示される小画面上で計算式を選択することにより、一覧表のガラスについて特性 計算式による特性値の算出を行うことができます。

特性計算式選択小画面 :

特性計算式リストから式を1つ選択すると、下欄にその式の制約条件が表示されます。

必要に応じて、式の条件となる温度または粘度を入力した後、Calculate ボタンをクリックしてください。検索結果リスト画面にピンク色ラベルの列が追加され、計算結果が表示されます。新特性名入力カラムには特性計算式リストで選択した特性名(省略形)が表示されますが、特性名を自由に変更することができます。

特性値の計算は、各ガラスの全成分を対象に行われます。そのため、各特性計算式の対象成分以外の成分を含むガラスについては通常は計算できません。特性計算式の対象外の成分が微量であれば、それらを無視して計算を実行しても問題ない場合もあるため、この小画面で「Total of trace components <=」の右欄の数値を指定することにより、対象外成分を無視して計算を実行することができます。無視する成分の合計量(最大値)は、0、0.1、0.2、0.3、0.4、0.5、0.7、1.0、5.0%の9段階で選択可能です。

特性計算式の制約条件を満たさないガラス組成の行には*が表示されます。

特性計算式の詳細は「第6章1.特性計算式(Additivity Equation)」を参照してください。

なお、特性計算式が適用できるガラスは、ガラスの状態が"通常のガラス Glass"に限定されますが、そうでないガラスについても計算は実行され、数値が表示されるので注意が必要です。

① 出典リスト(Data Source List)ボタン ⇔ 検索結果画面 2

クリック操作により、1出典1行からなる出典一覧表が表示されます。出典一覧表の1行を指定してからダブルクリックすることにより、同一出典リストの表示が可能です。

三角図アイコンをクリックすると小画面が表示され、3組成と1特性を選択すると、三角図画面に移ります。

XY プロットアイコンをクリックすると、XY プロット画面に移ります。

(15) **温度 - 特性プロットアイコン** ⇔ 検索結果画面 19

検索結果リストの行を選択して、温度-特性プロットアイコンをクリックすると、検索により取り込まれた高温密度、粘度などの高温特性データを、特性値を縦軸、温度(または粘度)を横軸とした X-Y 図上にプロットします。補間データもプロットされます。補間データはピンク色で表示されます。

- ⑥ 元素解析アイコン ⇔ 検索結果画面 20
 - 元素解析アイコンをクリックすると、元素解析画面に移ります。

密度、粘度などの高温特性で、該当する温度の特性値が存在しない場合、他の温度でのデータを利用することにより該当温度での特性値を補間法で算出します(粘性標準点の場合には温度を算出)。

この機能を利用するには、検索画面において、拡張検索チェックボックスをオンにして検索するか、複数の温度データを含む中分類の特性名(太字、比熱(100-700℃)など)で検索すること等が必要です。データ補間アイコンをクリックすると、補間小画面が現れます。この小画面で補間の条件設定を行い、OK ボタンをクリックすると、一覧表に特性値の補間データがピンク色で表示されます。詳しくは「3.3 温度特性プロット画面」を参照してください。

- ⑪ 🌉 構造データ呼出アイコン ⇔ 検索結果画面 24

構造データベース呼出アイコンをクリックすると、一覧表にガラス No.(構造)欄が現れ、各行に対応する構造データベースのガラス No.が表示されます。複数の No.の場合もあります。また、対応する構造データの登録がない場合、データは表示されません。

② 構造データ詳細画面アイコン ⇔ 検索結果画面 23構造データ No が表示された行を選択して、構造データ詳細画面アイコン

構造データ No.が表示された行を選択して、構造データ詳細画面アイコンをクリックすると、構造データ詳細画面に移動します。

② 同一出典リスト画面アイコン

検索結果リストの任意の行を選択して同一出典リスト画面アイコンをクリックすると、そのデータと同じ<u>引用</u>源から抽出された全データを再検索し、同一出典リスト画面に移ります。

② **国面の保存(Save)アイコン**

検索結果画面を保存します。保存(Save)小画面で、保存フォルダを選択し、ファイル名を記入し、保存ボタンをクリックします。

② image image

保存してある検索結果画面を開きます。[開く]小画面で保存した検索結果画面ファイルを選択し、[開く] ボタンをクリックします。保存画面を開いた後に、[戻る]アイコンで前画面に戻ると、検索条件が確認できます。

② 「SV 保存(CSV File)アイコン

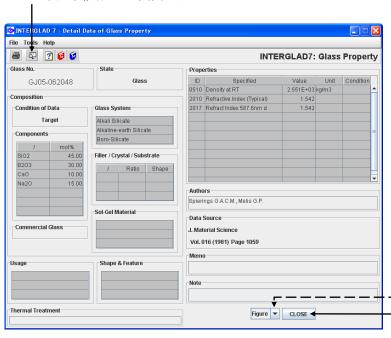
検索条件および検索結果を CSV ファイル(カンマ区切りのテキストファイル)として保存することができます。保存(Save)小画面で、保存フォルダを選択し、ファイル名を記入し、保存ボタンをクリックします。ファイル名に拡張子.csv を付けておくと、excel ソフト等で開くことができます。検索結果については、検索結果画面の内容がそのまま CSV 保存されるため、必要に応じ、Component、Property、Information 欄を追加・削除し、保存します。

- ② **印刷(Print)アイコン** データリストが印刷されます。

2. 3 特性詳細 (Detail Data of Property) 画面

(1)画面

1 同一出典リスト画面アイコン



- 2 図表示プルダウンメニュー

3 画面閉ボタン

特性詳細画面

(2) 詳細説明

(A)全般

個々のガラスに関する全収録情報を表示する画面です。この詳細画面は、検索結果画面、同一出典表、X-Y プロット図、三角図、「特性予測:検索結果画面」あるいは「特性予測:重回帰分析の検証」の中で、一つの ガラスを選択し、Detail ボタンをクリックすることにより表示されます。

組成と特性の単位はデータ入力時の単位です。

Filler/Crystal/Substrate の Ratio 欄の単位は mass%です。まれに vol%が使われることがあり Note 欄 にその旨が記載されるので確認して下さい。

Condition of Data : ガラス組成値が分析値 Analized であるのか、目標値 Target であるのか、 原料調 合値 Batch であるのかを表します。

Thermal Treatment:選択したガラスの熱処理条件が表示されます。

Authors : 全著者名が表示されます。

Memo : ガラス調製方法、特性測定方法、特許請求の範囲概要、特許社 Others の場合の特許出願者

名などが表示されます。

(B) その他の機能

① **図データ** (Figure) の表示 ⇔ 特性詳細画面 2

図データがある場合、[Figure]のプルダウンメニューの2行目以下に表示があり、表示可能な図が選択できます。

図データは以下の2種類に分かれます。

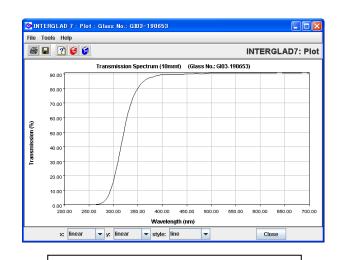
a) 特性式から求めるもの(詳細は、第6章2.特性式 を参照)

下記の特性式について、その係数が揃っている場合に図が表示できます。

- ・ 粘度 Fulcher の式
- 拡散の式
- ・ 屈折率の分散式
- ・ 電気伝導度の式
- ・ 直流体積抵抗の式
- ・ 交流体積抵抗の式
- b) 表データとして保持されているもの (詳細は、第6章3.表データ を参照) 下記の図がこれに該当します。まだ少数

のデータに限られます。

- 熱膨張曲線
- 透過スペクトル
- ・ 吸収スペクトル
- 反射スペクトル
- 放射スペクトル



図データの例: UV-IR 透過スペクトル

② 図データ画面の X 軸・Y 軸・スタイルプルダウンメニュー

図データのX軸、Y軸表示を通常(linear)、逆数(inverse)あるいはLOG(log)表示にすることができます。また、プロットを線(line)及び/または点(point)で表示することができます。

③ 図データ画面のメニューバーTools のプルダウンメニュー

Option(Axis)の選択により、XY 軸の名称(Label)、軸数値範囲(Min, Max)、軸数値形式(Format)、軸数値の小数点以下桁数(Digit Number)を設定し、グラフに反映することができます(3.2(2)(A)④参照)。また、Option(Mark)の選択により、Style が point の場合、プロット点の形および色の設定を変えることができます。初期状態は黒丸です。

④ 図データの保存

図データ画面のファイル保存アイコンのクリックにより、図を ipg 形式で保存できます。

⑤ 図データの印刷

印刷アイコンより図が印刷されます。

⑥ 🞒 画面印刷アイコン ⇔ 特性詳細画面 3

画面内容が表として印刷されます。

⑦ CSV 保存

メニューバーの File より Save Data (CSV)を選択すると、画面内容の CSV 保存ができます。

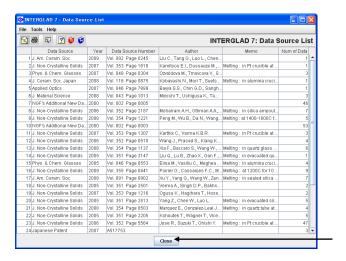
⑧ 🗗 同一出典リスト画面アイコン ⇔ 特性詳細画面 1

同一出典リスト画面アイコンをクリックすると、その詳細画面データと同じ引用源から抽出された全データを示す同一出典リスト画面に移ります。

⑨ 閉(Close)ボタン画面を閉じます。

2. 4 出典リスト (Data Source List) 画面

(1)画面



出典リスト画面

1 画面閉ボタン

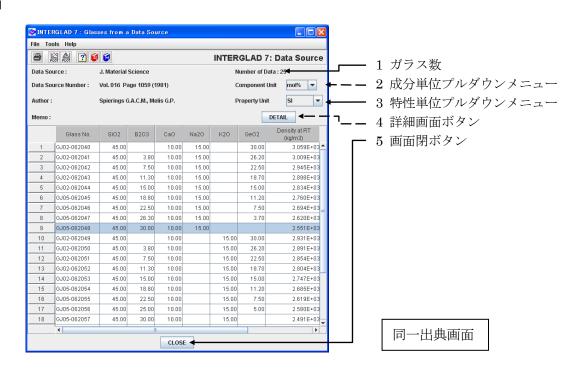
(2) 詳細説明

特性検索結果画面の $[Data\ Source\ List]$ ボタンをクリックすることにより、検索結果画面の全ガラスを 1 出 典 1 行で表した出典リスト画面が得られます。各出典のガラス数は number of data 欄に表示されます。

CSV 保存アイコンより、出典リスト画面内容の CSV 保存ができます。また印刷アイコンより本画面内容が印刷できます。項目欄(横方向列)の画面に現れていない部分は印刷されません。

2. 5 同一出典リスト (Glasses from a Data Source) 画面

(1)画面



(2) 詳細説明

検索結果画面の一覧表の中で「行選択」されたガラスと同じ出典源の全ガラスを表形式で表示します。着色されて表示されている列は検索結果画面で行選択したガラスです。この画面は、特性検索結果画面で一つのガラスを選択して同一出典アイコンをクリックする他、詳細画面で同一出典アイコンをクリックする、あるいは出典リスト画面で一つの出典行を選択し、同一出典アイコンをクリックすることによっても表示できます。

(A) 一覧表

各ガラスの主要データ(①~⑤)を1ガラス1行で表示します。

- ① ガラス番号
- 2 組成

組成の単位系の初期値は、検索結果画面で指定した単位系です。

[Component Unit]プルダウンメニューをして mol%--mass%間の単位変換をすることができます。

③ フィラー/結晶/基板(Filler/Crystal/Substrate)

フィラー、結晶および基板の単位は通常 mass%ですが、希に vol%が使用されます。vol%の場合は詳細 画面の Note 欄にその記載があるので確認できます。

- ④ ゾルーゲル原料 (Sol-Gel Raw-Material)
- ⑤ 特性

青字で示される特性値は、条件欄に記載のあるデータです。内容は詳細画面で確認できます。

"Figure"と表示されるのは、表データ(第6章3参照)または特性式の図データ(第6章2参照)の存在を意味します。

特性の単位系変更は Property unit プルダウンメニューで行うことができます。 初期状態は検索結果画面での指定単位系です。

(B) 出典固有情報

全著者名とメモ(ガラス調製方法、熱処理条件、特性測定方法など)が表示されます。

(C) その他の機能

① 成分単位(Component Unit)プルダウンメニュー ⇔ 同一出典画面 2

 $mol\% \cdot mass\%$ 間の単位変換ができます。単位変換ができなかった組成の数値は赤の*となります。 R_2O 、 $Kaolin、Others などの分子量不明の成分を含むガラスは <math>mass \cdot mol$ 変換できません。元の単位に戻すと元の値が表示されます。単位変換前に含有量が*で表示されていたデータは、単位変換操作後、赤の*表示となりますが、詳細画面を見ると数値が記されている場合があります。これは組成中に分子量不明の成分が含まれる場合で、この種のガラスを詳細画面に示された単位以外で検索するとこうしたことが起こります。

- ② 特性単位(Property Unit)プルダウンメニュー ⇔ 同一出典画面 3 特性単位系を変更することにより、一覧表の特性値が単位変換されます。
- ③ 詳細(Datail)ボタン ⇔ 同一出典画面 4

任意のガラスを選択して Detail ボタンをクリックすると、そのガラスの詳細画面が表示されます。

同一出典画面のリストにあるガラスについて三角図を作成できます(3.1三角図参照)。

⑤ 🕍 XY プロットアイコン

同一出典画面のリストにあるガラスについて XY プロットを作成できます (3.2 XY プロット参照)。

⑥ 🞒 印刷アイコン

画面内容が表として印刷されます。

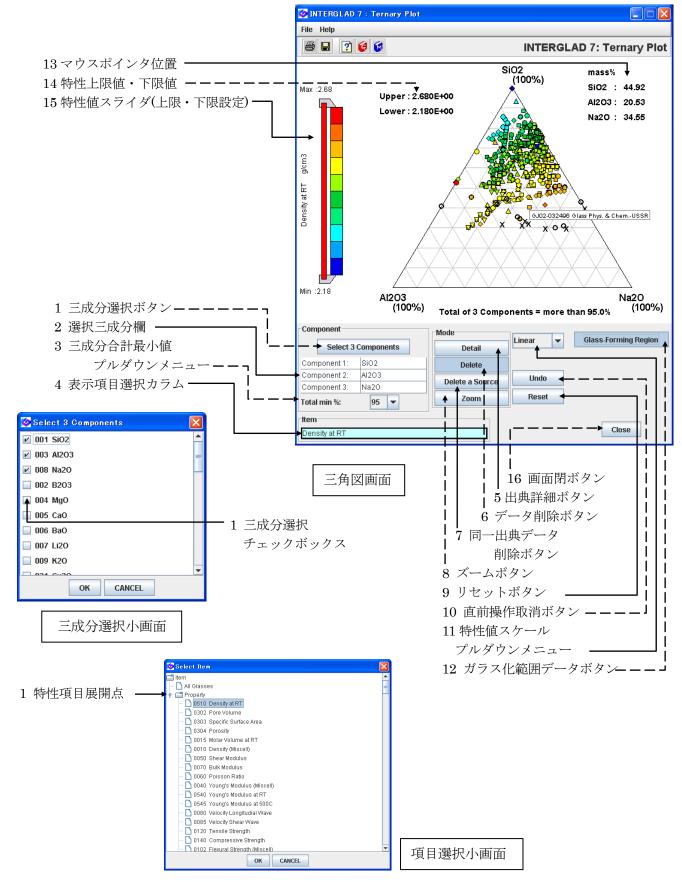
⑦ 詳細画面印刷

メニューバーの File より Print (Detail of Glass Data)を選択すると、リストのすべてのガラスの詳細画 面内容が表として印刷されます。

3. 特性解析

3.1 三角図(Ternary Plot)画面

(1) 画面



(2) 詳細説明

特性検索結果画面の一覧表の組成および特性データを、3組成を頂点とした三角図上に表示します。特性検索結果画面の三角図アイコンをクリックすると、三角図画面が現われます。まず、画面の左下部にある成分(Component)欄で、三成分選択(Select 3 Components)ボタンをクリックして三成分選択小画面を開き、成分選択チェックボックスにより三角図に表示する3成分を選択します。特性検索画面で主成分としてチェックした成分はこの小画面のチェックに反映されます。次に三成分合計最小値(Total min %)プルダウンメニューにより、3成分の和の最小値を0~100%の範囲で指定します(0、50、60、70、80、90、95、96、97、98、99、100%の12段階)。和が最小値に満たないガラスは排除され、残りのガラスについて選択した三成分の和を100%として三成分に按分してプロットされます。最小値のデフォルトは95%となっています。さらに項目(Item)カラムをダブルクリックし項目選択小画面を開き、三角図で表示したい特性、あるいは検索結果の全ガラス(All Glasses)をクリックして選択し、OK ボタンをクリックします。本画面では All Glassesがデフォルトとなっています。これらの操作により三角図が表示されます。上記の3設定条件を変更する毎に対応する三角図が表示されます。

① 特性値スライダ ⇔ 三角図画面 14, 15

画面左のスライダの上下に表示される Max 値/Min 値は、該当する特性に関する全データの最大値/最小値に対応します。特性名と単位がスライダの左に表示されます。スライダ上の上下にある台形のポインタを上下に動かすことにより、三角図上に表示されるプロットの上限値、下限値を変えることができます。上限値、下限値は特性値スライダと三角図の間の上部に Upper、Lower として表示されます。ポインタは上下別々の移動も、上下一緒の移動も可能です。ポインタの移動はポインタをドラッグすることにより、また上下一緒の移動は両ポインタを結ぶ赤色のバーのドラッグにより行います。

スライダのポインタで設定される下限値から上限値の間にある特性値データがプロットされます。 プロット点の色は、スライダの色(Max 値、Min 値の差を 10 等分して高い値より赤~青色表示)に対応し特性値の大きさを表します。マーク(形)は出典ごとに異なる表示(5 形状)がされます。プロット点にマウスポインタを合わせると、"ガラス番号、出典"が吹出しで表示されます。プロット点の位置は画面右上に 3 成分値とその単位が表示されます。メニューバーの Tools のプルダウンメニューの Option(Mark)の選択により、XY プロットオプション(Mark)小画面が開きます。この小画面で All Glasses の場合、プロット点の形と色を変えることができます。また Item に特性を選択した場合には、形のみ変えることができます(3.2(2)(A)④参照)。

ガラス化範囲データ(Glass-Forming Region)ボタンをクリックすることにより、二、三元系ガラスのガラス化範囲を表すファクトデータあるいはガラス化範囲の境界線が三角図上に表示されます。ガラス化範囲データは、2 あるいは 3 成分の合計が 100%のデータのみを登録しています。

ファクトデータに関しては、完全に透明なガラスが〇、透明なガラスが作製しにくい組成が×でプロットされ、〇と×の境界の〇側がガラス化領域となります。ファクトデータの代わりに、境界線だけで表されたガラス化範囲データもあります。このボタンを再度クリックするとガラス化範囲データが消去されます。

(B) その他の機能

詳細(Detail)ボタン
 ⇔ 三角図画面 5

このボタンがアクティブの (クリックして濃い水色表示となっている) 時、三角図上のプロット点をクリックするとそのガラスの詳細画面が表示されます。プロット点にマウスポインタを合わせ、マウスを右クリックして表示される小画面から実行することもできます。

このボタンがアクティブの時、プロット点をクリックするとそのデータが削除されます。削除結果は検索結果リストの削除チェックボックスに反映されます。プロット点にマウスポインタを合わせ、マウスを右クリックして表示される小画面から実行することもできます。またデータ削除は上限値(Upper)、下限値(Lower)に反映し、プロット点の色も変化します。

③ 同一出典データ削除(Delete a Source) ボタン ⇔ 三角図画面 7

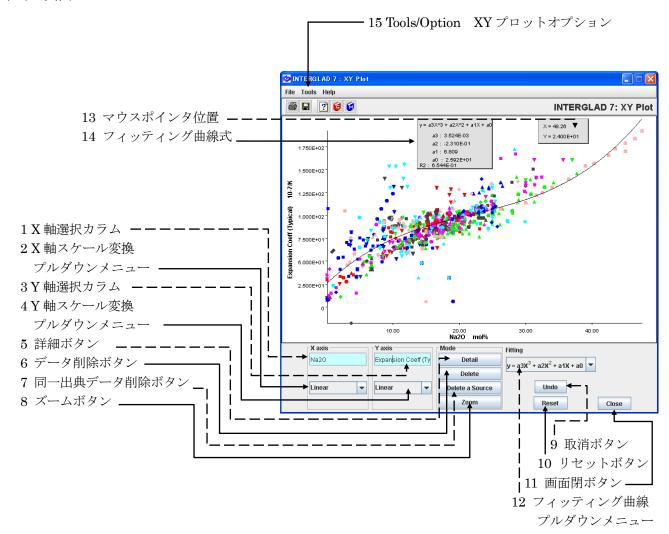
このボタンがアクティブの時、プロット点をクリックするとそのデータと同一の出典のプロット点が全

て削除されます。削除結果は検索結果リスト画面の削除チェックボックスに反映されます。プロット点にマウスポインタを合わせ、マウスを右クリックして表示される小画面から実行することもできます。また同一出典データ削除は上限値(Upper)、下限値(Lower)に反映し、プロット点の色も変化します。

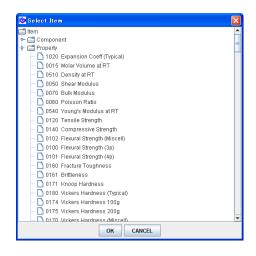
- ④ **直前操作取消(Undo)ボタン** ⇔ 三角図画面 10 直前の削除(Delete)あるいは同一出典データ削除(Delete a Source)操作を取り消すことができます。
- (5) ズーム(Zoom) ボタン ⇔ 三角図画面 8 このボタンがアクティブの時、マウスのドラッグ操作で三角図上のグリッド単位に範囲を指定すること により、その範囲が拡大表示されます。
- ⑥ リセット(Reset)ボタン ⇔ 三角図画面 9 このボタンのクリックにより、ズーム表示が解除されます。
- ⑦ 特性値スケール(Property Scale) プルダウンメニュー ⇔ 三角図画面 11 このプルダウンメニューにより特性値のスケールを変更することができます。スケールはリニア linear と対数 logarithm です。初期状態はリニアです。対数を選択した場合、log(特性値)として表示され、プロット点の色が変わり、Upper、Lower 値も変わります。ゼロ以下となる特性値のデータは表示されません。

3. 2 XY プロット (XY Plot) 画面

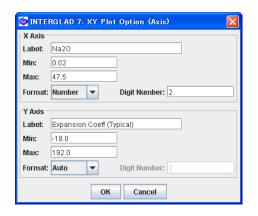
(1) 画面



XY プロット画面



項目選択小画面



XY プロットオプション (Axis) 小画面

XY プロットオプション (Mark) 小画面



(2) 詳細説明

(A) 表示

検索結果リストのデータをもとに、XY プロット図を表示します。XY プロットアイコンをクリックし、XY プロット画面を開きます。X 軸、Y 軸はこの画面の中で指定します。

X 軸と Y 軸を次の方法で指定すると、データがプロットされます。プロット点は出典ごとに別々のマーク (形と色)で表示されます。プロット点にマウスポインタを合わせると、特性検索画面の"No、ガラス番号、出典"が吹出しで表示されます。

- ① X 軸(X axis)、Y 軸(Y axis)の指定 ⇔ XYプロット画面 1,3
 - クリックにより表示される小画面中の組成または特性から項目を選択します。この小画面に特性としては数値データが登録されている項目が表示されます。
- ② スケール変換(Scale Transform)プルダウンメニュー ⇔ XYプロット画面 2,4

プルダウンメニューにより、X軸、Y軸のスケールを変更することができます。スケールはリニア linear、逆数 inverse、対数 logarithm、倒置 reverse の 4 種類があり、初期状態はリニアです。対数または逆数を選択した場合、ゼロ以下となる値のデータは表示されません。

- ③ フィッティング曲線(Fitting)プルダウンメニュー ⇔ XYプロット画面 12
 - カーブタイプを選択すると、プロットのフィッティングカーブを描きます。

カーブタイプ : 直線、2次曲線、3次曲線

左上の囲み(移動可)にフィッティング曲線の式と係数、寄与率(R2)を表示します。

④ XY プロットオプション ⇔ XY プロット画面 15、XY プロットオプション小画面(Axis)および(Mark)

メニューバーの Tools のプルダウンメニューの Option(Axis)の選択により、XY プロットオプション (Axis)小画面が開きます。この小画面で XY 軸の名称(Label)、軸数値範囲(Min, Max)、軸数値形式(Format)、軸数値の小数点以下桁数(Digit Number)を設定し、グラフに反映することができます。軸数値形式には Auto (デフォルトとなっています)、Number(小数点形式)、Scientific(E 形式)があり、プルダウンメニューにより選択できます。Number および Scientific の場合には(Scientific では E の前の数字につき)、小数点以下の表示桁数を[Digit Number]セルに指定できます。

また、プルダウンメニューの Option(Mark)の選択により、XY プロットオプション(Mark)小画面が開きます。この小画面でプロット点の形と色を変えることができます。初期状態は小画面下部の Data Sources 欄の通りであり、出典毎に5形状と7色の組み合わせで表示されています。小画面上部の All Glasses 欄での選択により、グラフ上のすべてのプロット点の形状あるいは/および色を同じものとすることができます。また Data Source Category 欄の選択により、出典の種別毎にプロット点の形状あるいは/および色を変えることができます。さらに Data Sources 欄の選択により、出典毎にプロット点の形状あるいは/および色を変えることができます。それぞれの欄の変更は、All Glasses 欄の選択が最も優先となっており、次に Data Source Category 欄の選択が優先となっています。 [Reset]ボタンをクリックして[OK]ボタンをクリックすると、初期状態に戻ります。

(B) ボタン

詳細(Detail)ボタン ⇔ XY プロット画面 5

このボタンがアクティブの時、XY プロット上のプロット点をクリックするとそのガラスの詳細データが表示されます。プロット点にマウスポインタを合わせ、マウスを右クリックして表示される小画面から実行することもできます。

② データ削除(Delete)ボタン ⇔ XY プロット画面 6

このボタンがアクティブの時、プロット点をクリックするとそのプロット点が削除されます。削除結果は検索結果画面の削除チェックボックスに反映されます。XYプロット図を閉じずに検索結果画面の削除チェックボックスを変更しても、そのXYプロット図には反映されません。特に複数のXYプロット図を同時に表示している場合はその点をご注意ください。

プロット点にマウスポインタを合わせ、マウスを右クリックして表示される小画面から実行することもできます。

③ 同一出典データ削除(Delete a Source)ボタン ⇔ XY プロット画面 7

このボタンがアクティブの時、プロット点をクリックするとそのプロット点と同一出典のプロット点が全て削除されます。削除結果は検索結果画面の同一出典データの削除チェックボックスに反映されます。 プロット点にマウスポインタを合わせ、マウスを右クリックして表示される小画面から実行することもできます。

④ 直前操作取消(Undo)ボタン ⇔ XY プロット画面 9

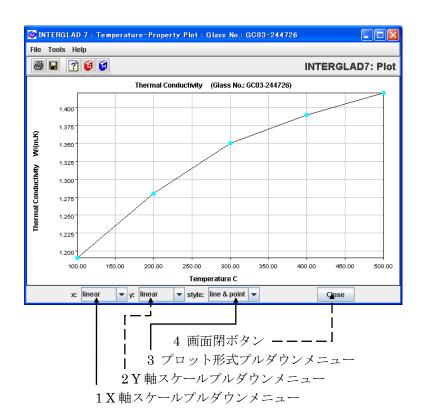
直前の削除(Delete)あるいは同一出典データ削除(Delete a Source)操作を取り消すことができます。以前に削除したデータを再表示する場合には、検索結果画面で削除チェックボックスのチェックをはずし、XYプロット画面を作成し直します。

- (5) **ズーム**(Zoom)ボタン ⇔ XY プロット画面 8
 - このボタンがアクティブの時、画面の一部をマウスのドラッグ操作で範囲指定すると、その範囲が拡大表示されます。
- ⑥ リセット(Reset)ボタン ⇔ XY プロット画面 10 このボタンをクリックすると、ズーム表示が解除されます。

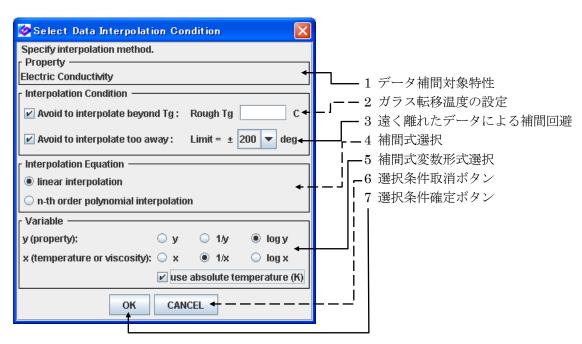
3. 3 温度-特性プロット(Temperature-Property Plot)画面

検索された特性データが密度、粘度などの高温特性データであった場合、検索結果画面の一覧表の各ガラスについて、温度を横軸、特性値を縦軸とした XY 図に温度-特性プロットを表示します(粘性標準点の場合には、粘性標準点が横軸、温度が縦軸となります)。また、データ補間も可能です。

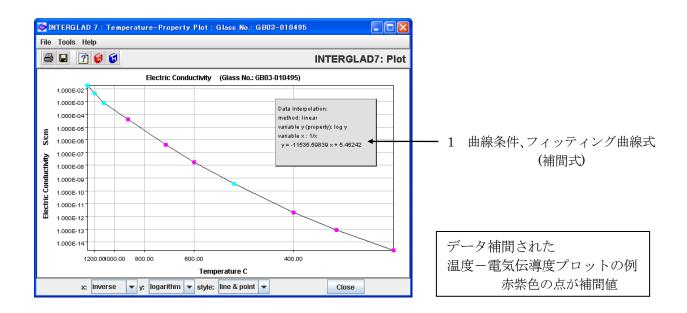
(1) 画面



温度ー特性プロット画面



データ補間条件選択小画面



(2) 詳細説明

(A) 表示

検索結果画面で一つのガラス(行)を選択し、温度特性プロットアイコンをクリックすることにより、検索された特性データおよびその他の温度での特性データがプロットされます。プロットされるデータは同一No.のガラスに限定されます。室温でのデータは表示されません。

データ補間機能により算出されたデータが存在すれば、その値もプロットされます。温度特性がプロットできる特性は、次の13特性です。第3章付帯資料2の表1を参照ください。

100℃以上の密度、ヤング率、表面張力、比熱、熱伝導度、粘度

50℃以上の電気伝導度、直流体積抵抗率、交流体積抵抗率、誘電損失(1kHz、1MHz および 1GHz) 粘性(標準点) 1×10^1 dPa·s $\sim1\times10^{14.5}$ dPa·s の温度

なお、選択したガラスに複数の種類の高温特性データが登録されている場合には、特性毎のXYプロットの画面が少しずつ重なって表示されます。

- ① スケール変換(Scale Transform) プルダウンメニュー ⇔ 温度 特性プロット画面 1,2
 - プルダウンメニューにより、X軸、Y軸のスケールを変更することができます。スケールはリニア linear、 逆数 inverse、対数 logarithm の 3 種類あり、デフォルト(初期)状態は特性により異なります。 粘度、電気伝導度、直流体積抵抗率、交流体積抵抗率(縦軸)は対数、その温度(横軸)はリニアとなっています。粘性標準点 $1\times10^1\mathrm{dPa\cdot s}\sim1\times10^{14.5}\mathrm{dPa\cdot s}$ ー温度プロットの横軸(粘度)のデフォルト状態は 対数です。その他の特性については、縦軸も横軸もデフォルト状態はリニアです。
- ② プロット形式(Style)プルダウンメニュー ⇔ 温度-特性プロット画面 3 プルダウンメニューにより、プロットの形式を変更することができます。プロットの形式は、線、点、 線および点の 3 通りあります。
- ③ メニューバーTools のプルダウンメニュー

Option(Axis)の選択により、XY 軸の名称(Label)、軸数値範囲(Min, Max)、軸数値形式(Format)、軸数値の小数点以下桁数(Digit Number)を設定し、グラフに反映することができます(3.2(2)(A)④参照)。また、Option(Mark)の選択により、Style が point の場合、プロット点の形および色の設定を変えることができます。初期状態は水色〇です。

(B) データ補間

密度、粘度などの高温特性で、検索したい温度の特性値が存在しない場合、前後の温度でのデータを利用することにより該当温度での特性値を補間法で算出できます(粘性標準点の場合には温度を算出)。

この機能を利用するには、特性検索画面あるいは重回帰分析の検索画面において、検索したい温度特性を選択し、拡張検索チェックボックスをオンにして検索する、複数の温度データを含む中分類の特性名(太字、比熱(100-700℃)など)を選択して検索する、あるいは複数の温度の特性名を選択し、ORで結び検索することが必要です。

検索結果画面あるいは重回帰分析検索結果画面でデータ補間アイコン をクリックすると、データ補間条件設定小画面が表示されます。結果画面リスト中に複数の種類の高温特性データがある場合には、特性毎の小画面が少しずつ重なって現われます。データ補間条件設定小画面で次の②③④を設定することができます。

① 特性(Property)

データ補間条件設定画面上部にデータ補間の対象となる特性が表示されます。

② 補間条件 (Interpolation Condition)

データ補間の制約条件として、次の条件を設定することができます。

a) 大まかなガラス転移温度 Rough Tg の設定 ⇔ データ補間条件画面 2

ガラス転移温度 Tg をまたぐデータを補間時に利用しないようにするために、大まかなガラス転移 温度 Rough Tg を設定することができます。チェックボックスがオンの場合に有効となります。Rough Tg を設定すると、指定温度を含む、Rough Tg をまたがない温度域で補間計算がされます。

b) **遠く離れたデータのみによる補間の回避** ⇔ データ補間条件画面 3

求めたい温度(または粘度)の近傍に特性値が存在せず、遠く離れたデータしか存在しない場合は、信頼できるデータ補間が行われない可能性があります。このような不具合を避けるために、その温度(または粘度)の前後の範囲 $\pm T$ ^{\mathbb{C}}(または $\pm \log \eta$)を指定することにより、その範囲内にデータが存在しない場合のデータ補間を回避することができます。

チェックボックスがオンの場合に有効となります。

温度範囲は ± 0 、 ± 50 、 ± 100 、 ± 150 、 ± 200 、 ± 300 および ± 400 $\mathbb C$ の 7 段階、粘度範囲は $\log \eta$ で ± 0 、 ± 1 、 ± 2 、 ± 3 および ± 4 の 5 段階で設定できます。初期状態は ± 200 $\mathbb C$ および ± 2 です。 なお、1 つのガラスの一連のデータにこの指定範囲内のデータが 1 点でも含まれれば、指定範囲外にあるデータも使用してデータ補間が実行されます。

③ 補間式 (Interpolation Equation) ⇔ データ補間条件画面 4

1次式による補間またはn次式による補間が選択できます。初期状態は1次式です。1次式の場合には内挿、外挿補間ができますが、n次式の場合には内挿補間のみとなります。n=(実データの数)-1です。

④ 変数 (Variable) ⇔ データ補間条件画面 5

補間式の補間値 y (特性値) および変数 x (温度または粘度) のそれぞれを、逆数および対数として補間式を構成することもできます。

yの初期状態は、粘度、電気伝導度、直流・交流体積抵抗率は log y、その他は y です。

x の初期状態は、粘度、電気伝導度、直流・交流体積抵抗率は 1/x (絶対温度の逆数)、その他は x です。 また、他の場合にもチェックボックスの選択により温度を絶対温度とすることができます。

(5) OK ボタン ⇔ データ補間条件画面 7

OK ボタンをクリックすることにより、画面上に設定された条件でのデータ補間が実行されます。

⑥ データ補間取消しアイコン ⇔ データ補間条件画面 6 データ補間の取消しは、検索結果画面(または特性予測のための検索結果画面)にあるデータ補間取消

⑦ 🔛 温度-特性プロットアイコン

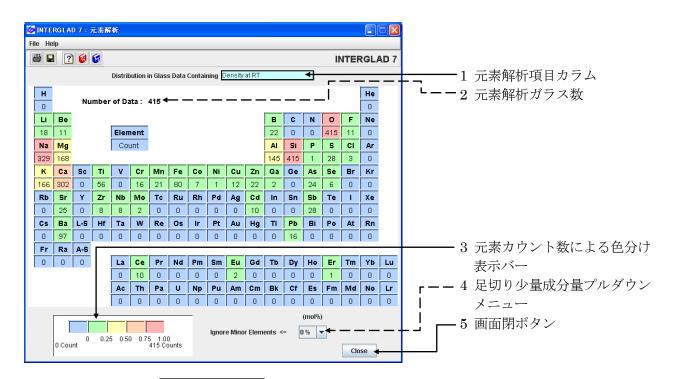
しアイコンをクリックすることにより行います。

検索結果画面(または特性予測のための検索結果画面)にある温度-特性プロットアイコンをクリックすることにより、補間データを含む一連の温度特性データが XY 図上に表示され、画面右上の囲み(移動可)に補間式が表示されます。補間式に n 次式を選択した場合には、補間式の代りに n の数値が表示されます。補間データは赤紫色のプロットで、実測データは水色のプロットで示されます。メニューバーToolsのプルダウンメニューの Option(Axis)および Option(Mark)の選択が(A)③と同様にできます。

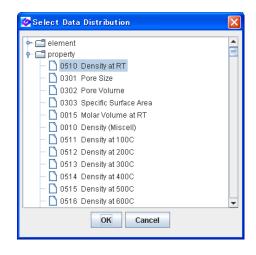
3. 4 元素解析 (Element Distribution) 画面

検索結果画面に表示された全ガラスの1特性に関する組成情報を、周期表上に元素別に利用頻度で表示します。

(1) 画面



元素解析画面



項目選択小画面

(2) 詳細説明

(A) 特性名

元素解析項目(Disribution in Glass Data Containing)カラムをダブルクリックして表示される小画面から、元素解析を実施する項目を選択します。ここでは数値データのない特性項目も選択できます。特性以外にも element の All Glasses を選択することにより、検索結果リストにあるすべてのガラスの元素分析をすることができます。

(B) 周期表

選択された項目(特性値等)のデータを有するガラスの組成を元素に分解し、対象となる全ガラスの元素別の利用頻度(出現数)を周期表形式に配列された元素名の下に表示します。例えば、あるガラスに Al_2O_3 と B_2O_3 が含まれれば、Al を 1 回、B を 1 回、O(酸素)を 1 回と数えます。特性検索結果画面および特性詳細画面で成分値が*がとなっている場合もカウントされます。

各元素は、利用頻度の数に応じて色分け表示されます。利用頻度がゼロの元素は水色で表示され、0回から最大カウント数までが5段階に分けられて色分けされます。

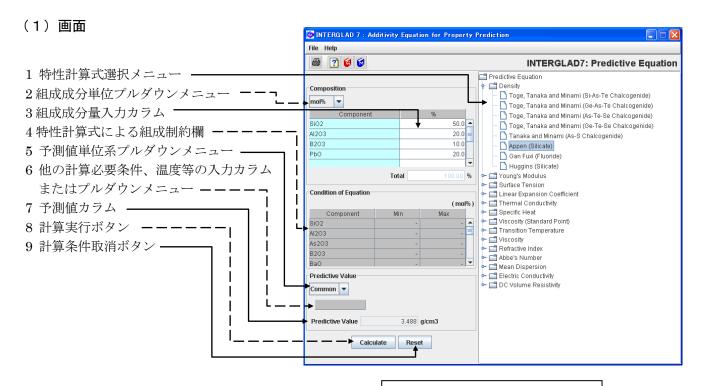
(C) **少量成分** ⇔ 元素解析画面 4

足切り少量成分量(Ignore Minor Elements <=) プルダウンメニューで、無視する少量成分量の最大値(%) を指定することにより、その成分の含有量が指定値以下となる元素をカウントから除外します。化学成分の単位は検索結果画面で使われた単位となるため、at%で検索された場合以外は、少量成分として最大値指定する含有量は元素での含有量ではなく、酸化物等の化学成分の量になります。足切り値は0、1、5、10、15、20、25、30%の8 段階で設定できます。

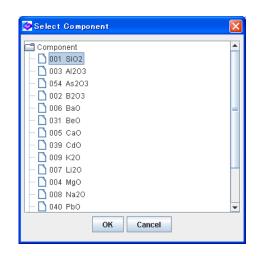
4. 特性予測・材料設計(組成最適化)

4. 1 特性計算式による特性予測(Additivity Equation for Property Prediction)画面

特性計算式(加成式)を用いた組成一特性予測を行います。メイン画面で特性予側(Property Prediction)ボタンをクリックし、次いで特性式による特性予測(Additivity Equation for Property Prediction)ボタンをクリックすると、特性計算式による特性予測画面に移ります。



特性計算式による特性予測画面



成分選択小画面

(2) 詳細説明

- (A) 特性計算式リスト (Predictive Equation 5.1 特性計算式 参照) ⇔ 特性式による特性予測画面 1 この欄には、利用できる特性計算式の一覧が物性毎にグループ分けされて右側の枠内に表示されます。式をクリックして選択すると、組成制約欄(左中央)と特性フィールド(左下)に制約条件が表示されます。
- (B) 組成制約欄 (Condition of Eq.) ⇔ 特性式による特性予測画面 4 選択した特性計算式の組成上の制約条件が表示されます。
- (C) **組成入力フィールド** ⇔ 特性式による特性予測画面 3 予測しようとするガラスの組成をこの欄に入力します。

成分名は、カラムのダブルクリックで表示される成分選択小画面で選択します。選択可能な成分だけが表示されます。

含有量は、自由入力です。組成制約欄で示された範囲で入力します。組成の単位は mass%と mol%の両方が使えますが、組成制約欄の単位に合わせた方が良いでしょう。

(D) 特性フィールド

① 特性計算の条件入力(温度/粘度) ⇔ 特性式による特性予測画面 6

特性計算式によっては、温度等の条件入力を必要とする場合があります。白色カラムまたはプルダウンメニューが表示された場合は、条件を入力または選択します。

入力条件の有無は特性計算式によります。第6章 1.特性計算式を参照してください。

- ② 予測値(Predictive Value)表示 ⇔ 特性式による特性予測画面 7 この欄の単位系は変更可能です。単位系の初期設定は汎用単位系 Common です。初期画面よりの環境 設定 Preference 小画面で初期設定を変更することができます。
- (E) **計算**(Calculate)ボタン ⇔ 特性式による特性予測画面 8

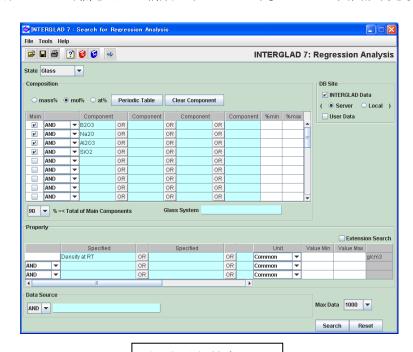
特性計算式リストより式を選択すると、予測値(Predictive Value)フィールドにその式の制約が表示されます。組成と、必要に応じて温度/粘度を入力した後、計算 Calculate ボタンをクリックすると計算を実行します。この時、組成比合計が 100%になっていない場合は、自動的に按分してよいか問い合わせがあります。指定した組成値が制約を満たしていない場合、Check equation condition の警告が出ますので、組成を修正してください。特性計算式によっては、指定した組成値が制約を満たしていても計算できない場合があり、Check special condition in manual の警告がでます。この場合は、第6章 1.特性計算式の各式の「特別条件」を参照してください。

4. 2 重回帰分析検索(Search for Regression Analysis)画面

重回帰分析による特性予測・組成設計(最適化)を行います。メイン画面で Prediction of Property Data ボタンをクリックし、次いで特性予測メニュー小画面で Multiple Regression Analysis ボタンをクリックすると、重回帰分析検索画面に移ります。重回帰分析に慣れていないユーザーは、操作指示ダイアログが現れる Multiple Regression Analysis (with Assistance)ボタンをクリックして使用することをお奨めします。

(1) 画面

この画面は、特性データベース詳細検索画面を単純化した構成、あるいは簡易検索画面に成分、特性欄を横に増やしデータベースサイト(DB Site)、ガラス状態(State)、ガラス汎用名(Glass System)、出典(Data Source)、検索最大ガラス数(Max Data)欄を加えた構成となっています。2.1の画面説明を参照下さい。



重回帰分析検索画面

(2) 詳細説明

特性予測検索画面では、予測の拠り所となるファクトデータを収集するための検索条件を設定します。

(A) データベースの切り替え

検索の対象となるデータベースを、INTERGLAD データ、ユーザーデータから選択します。両方一緒に使用することもできます。INTERGLAD データについて、サーバー上の最新版を使用するか、利用者のパソコン内のもの(または CD-ROM)を使用するかのどちらかが選択できます。選択の初期状態は初期画面の Preference 小画面でも決めることができます。

なお、INTERNET版(アプレット版)においては、サーバー以外のデータは使用できません。

(B) 検索条件の指定

① 状態(State)

予測できるガラスの状態は、State プルダウンメニューより、"通常のガラス Glass"、"通常のガラス Glass+融体 melt"、"融体 melt"のいずれかを選択できます。デフォルトは Glass となっています。

② 組成(Composition)

a) 単位プルダウンメニュー

mass%、mol%または at%が選択できます。単位の初期状態は mol%です。これは初期画面の Preference 小画面でも変更することができます。

b) 成分

ダブルクリックすると成分選択小画面が表示され、成分が選択できます。成分値が非数値データのものは検索されません。組成欄は各行ごとに、AND、OR または NOT のいずれかが指定できます。

組成のAND、OR、NOTの関係については、2.1 (2) (C) ③ d) を参照して下さい。

%min に 0 を入力すると、その成分が記載されていないガラスについても抽出でき、微量成分の影響を推定しようとする場合に便利です。%min に-1を入力しても同様です(Ver. 6 ではこの方式のみ)。周期表あるいはキーワードによる成分の指定も可能です(2.1 (2) (6) ③ a) b) 参照)。

c) 主成分の合計(Total of Main Component)

Main 指定(チェックボックスがオン)時のみ有効となり、主成分の最小合計量を指定できます。

Main 指定時は、OR、NOTは使えません。成分のmin%欄に「0」または「-1」を入力すると、その成分が記載されていないガラスも抽出対象となります。

d) ガラス汎用名(Glass System)

ダブルクリックすると小画面が表示され、小画面からガラス汎用名が選択できます。

③ 特性(Property)

ここで指定する特性が重回帰分析の対象になります。 3 特性まで同時に重回帰分析が行えます。 ダブルクリックで表示される小画面から、特性名が選択できます。単位系は汎用単位 Common、SI 単位、 CGS 単位と PSI(ヤードーポンド法)単位があり、特性ごとに指定できます。単位系は初期画面の Preference 小画面でも変更することができます。初期設定は汎用単位 Common です。

特性欄は各行ごとに、AND または OR のいずれかが指定できます。

[拡張検索 (Extension Search)]ボタン

高温密度、粘度などの高温特性を検索する際にこのチェックボックスをオンにすると、該当する温度の物性値が存在しないガラスであってもほかの温度等の物性値が存在すれば、検索対象となり取り込まれます。また、検索結果画面で補間値算出アイコンを使用することにより該当温度での物性値を割り出すことができるようになります。詳細は3.3(2)(B)を参照して下さい。

[特性の検索条件と重回帰分析について]

特性検索の方法として以下の三通りがあります。それぞれ重回帰分析での扱いが異なります。

a) 横方向の OR で指定する

横方向に複数の特性を指定できる欄がありますが、一番左の欄以外は重回帰分析に使用できません。 従って横方向の OR は指定できません。

b) 縦方向の AND 条件で指定する

縦方向のAND条件で特性を指定すると、予測の対象となる特性値を全ての抽出データが持つことになるため、各々の特性に関わる重回帰分析の母集団が同じデータ群で構成されます。従って、各特性の予測値間の関係についても高い信頼度を持つことが期待できます。しかし、収集可能なデータが限定されやすく重回帰分析が行えないケースが増えます。

c) 縦方向の OR 条件で指定する

縦方向の OR 条件で特性を指定すると、予測の対象となる特性値を全ての抽出データが持つとは限らず、重回帰分析の母集団が各々の特性ごとに全く異なるデータ群で構成されるケースもあり得ます。従って、各特性の予測値間の関連が希薄となる可能性があります。データが十分にない組成・特性の場合にこの方法を推奨します。

[電気伝導度、交流体積抵抗率及び直流体積抵抗率について]

電気伝導度、交流体積抵抗率または直流体積抵抗率のいずれかが条件に指定された場合、下表に従って他の二つの特性も検索します。このとき複数の特性値が検索された時は、次表の優先順位に従ってどれか一つだけが次画面で表示されます。

条件で指定	優先順位1	優先順位2	優先順位3
電気伝導度	電気伝導度	交流体積抵抗率の逆数	直流体積抵抗率の逆数
交流体積抵抗率	交流体積抵抗率	電気伝導度の逆数	直流体積抵抗率
直流体積抵抗率	直流体積抵抗率	電気伝導度の逆数	交流体積抵抗率

④ 出典(Data Source)

出典名称欄では出典のカテゴリ(データブック/学会誌/予稿集/特許/カタログ)またはその下層が 選択できます。特定の出典を排除する NOT 検索も可能です。

⑤ 検索ガラス数上限値(Max Data)

検索結果データ数の上限です。初期値は1000です。初期画面の環境設定(Preference)小画面でも初期値を変更することができます。

⑥ 検索(Search)ボタン

検索の実行指示をします。

⑦ リセット(Reset)ボタン

検索条件の指定欄をすべて初期化します。

⑧ ₩ 検索条件の保存アイコン

<u> 画面上の検索条件を、名前を付けて保存することができます。</u>

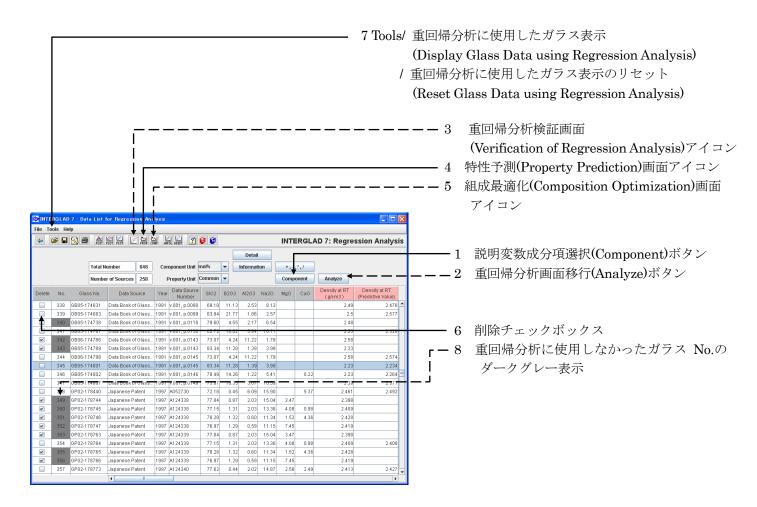
⑨ | | 検索条件を開くアイコン

保存してある検索条件を開いて、画面上に展開することができます。

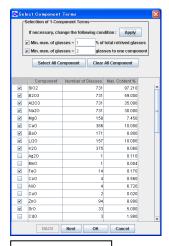
4. 3 重回帰分析検索結果(Data List for Regression Analysis)画面

(1)画面

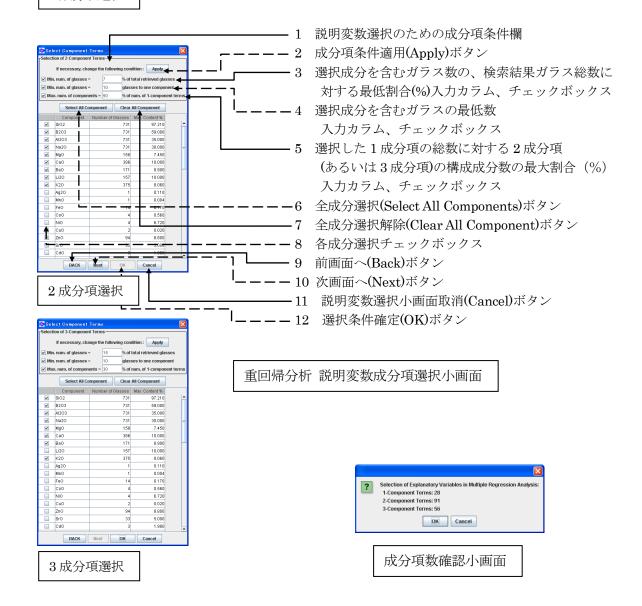
この画面は、特性データベース検索結果リストとほぼ同様な構成となっていますので、この画面説明を参照下さい。異なる項目についてのみ記します。この画面には検索結果のみでなく、重回帰分析実施後の結果(特性予測値等)も含まれます。



重回帰分析検索結果画面



1成分項選択



(2) 詳細説明

検索画面で指定した条件による検索結果が、ガラス番号の順に表示されます。このデータが重回帰分析の対象となります。

(A) ガラス数

① **ガラス総数(Total Number)**: 検索されたガラスの総数

② 出典総数(Number of Sources):検索されたガラスの引用出典数

(B) 一覧表

ガラスデータごとに横一行で表示します。最初に表示される項目は、ガラス番号、出典、出典発行年(Year)、 出典巻号ページ・特許番号等(Data Source Number)と検索指定項目(成分、特性)と特性予測値欄(数値なし)、 特性残差欄(数値なし)です。表としては次の機能を持っています。

・列の入れ替え : 組成あるいは特性の列のラベルをドラッグ&ドロップして列の入れ替えができます。

・列のソート : ラベルの「shift+クリック」によりソート(昇順・降順)が行えます。

・詳細画面への移動: 行のダブルクリックにより詳細画面への移動が可能です。

① 削除チェックボックス ⇔ 重回帰分析検索結果画面 6

このチェックボックスがオンのデータはデータ解析に使用されません。次画面の重回帰分析実行画面(4.4 参照)でエラーダイアログ等により同成分ガラス等の削除処理を行った場合、重回帰分析検証画面(4.5 参照)上でプロットの削除を行った場合も、このチェックボックスがオンになります。

2 組成

検索画面で指定した成分があれば表示されます。成分選択(Component)ボタンについては、特性検索結果画面と違いがありますので(\mathbf{C})に記します。

組成単位の初期値は、検索画面で指定された単位です。Component Unit プルダウンメニューで変更することが可能です。

③ 特性

検索画面で指定した特性が表示されます。この画面で特性項目を追加することはできません。 特性単位の初期値は、汎用単位系 Common で、検索画面で指定した単位ではありません。初期画面の Preference 小画面で初期設定を変更することができます。

各特性は次の3列からなっています。特性ごとにラベルが色分けされます。

実測値

データベースから抽出されたデータです。

青字で示される特性は、条件欄に記載のあるデータです。詳細画面で確認すると良いでしょう。赤字で示される特性は、電気伝導度、交流体積抵抗率及び直流体積抵抗率で、優先順位 2、3 の場合です。

・予測値(Predictive Value)

重回帰分析による予測式から導き出される値で、重回帰分析後に表示されます。実測値のないデータに対しても予測値は計算されます。

· 残差(Residual)

実測値と予測値の差です。重回帰分析後に表示されます。

重回帰分析画面で Excute 実行後に、成分項の選択し直しあるいは単位系の変更を行うと、それまでの分析結果は無効となるため、予測値および残差は算出し直す必要があります。

Component ボタンをクリックして、重回帰分析の説明変数指定に入ります。1成分項、2成分項、3成分項の順に選択小画面が開いていきます。

重回帰分析に使用したいガラス成分(説明変数)、すなわち、重回帰式を構成する成分の候補を1成分項の小画面リストから選びます。1成分項の小画面リストで、Next ボタンをクリックすると2成分項リストが表示され、さらにNext ボタンをクリックすると3成分項リストが表示され、多次式(2 あるいは3次式)による重回帰分析を行うことができます。1成分項の小画面リストでNext ボタンではなく0K ボタンをクリックすると、 $2\sim3$ 成分項リストは表示されずに、従来の一次式による重回帰分析となります。

 $1\sim3$ 成分項選択画面において、成分項として取り込む成分の最小データ件数を検索ガラス総数の何%とするか、また、データ件数が何件以上の成分を成分項として取り込むか、さらには、 $2\sim3$ 成分項画面では、取り込む成分の数を 1 成分項に取り込んだ成分数の何%までとするかを、画面上方の欄で設定し、成分の取捨選択をすることができます。これら 2 条件(1 成分項)あるいは 3 条件(2、3 成分項)をすべて満足する成分が各成分項選択小画面で選択されます。

取り込む成分の最小データ件数の初期値は、1成分項画面では検索ガラス総数の1%(検索ガラス総数の

1%以下最大整数、小数点以下を切り捨てた整数)と 2 件、2 成分項画面では 7%(以下最大整数)と 10 件、三成分項画面では 15%(以下最大整数)と 10 件と設定されています。取り込む成分の最大数の初期値は、2 成分項画面では一成分項の 50%(以下最大整数)、3 成分項画面では 30%(以下最大整数)と設定されています。なお、指定した%以下最大整数の成分数の成分は、データ件数の多い順に決めていき、最後に同データ件数の成分が複数あった場合、成分数が指定より増えてもいずれも選択成分となります。これらの初期値は任意に変更可能です。所定欄の数値を入力し直したのちに Apply ボタンをクリックすると、変更した条件が下欄に反映されます。また、Select All Component ボタン、Clear All Component ボタンあるいは各成分の左側の成分選択チェックボックスを用いて、任意に成分を取捨選択することもできます。

成分項選択後、成分項数確認小画面が現れますので、OK ボタンをクリックするか、Cancel ボタンをクリックして成分項を選択し直します。成分項は多くなり過ぎないよう、合計で 100 以下を推奨します。なお、それぞれの成分項選択小画面で Back ボタンをクリックすると、前画面にもどり、Cancel ボタンをクリックすると、Component ボタンをクリックする前に戻ります。選択した成分が 2、3 成分項も含め検索結果画面のリストに表示されます。

(D) **重回帰分析実行画面移行** (Analyze) ボタン ⇔ 重回帰分析検索結果画面 2

Analyze ボタンのクリックにより、重回帰分析実行画面に移行します。重回帰分析実行画面には Component ボタンで設定された成分項選択が反映されています。

(E) その他の機能

- ① **重回帰分析検証画面アイコン** ⇔ 重回帰分析検索結果画面 3 重回帰分析後にこのアイコンをクリックすると、特性毎に検証画面(4.5 参照)が現れます。
- ③ 編 組成最適化画面アイコン ⇔ 重回帰分析検索結果画面 5 重回帰分析を行った後、ガラス行の一つを選択し、このアイコンを選択すると、組成最適化画面(4.7 参照)に 移行します。
- ④ **重回帰分析に使用したガラスデータの表示** ⇔ 重回帰分析検索結果画面 7,8

重回帰分析を行った後、メニューバーの Tools をクリックし、Display Glass Data using Regression Analysis をクリックすると、重回帰分析に使用されないガラスの行の No.欄がダークグレーに変わります。従ってダークグレーとならない行が重回帰分析に使用したガラスデータとなります。削除(Delete)チェックボックスにチェックのないガラスにも、重回帰分析画面での設定条件により重回帰分析に使用されないガラスが存在することがわかります。メニューバーの Tools から Reset Glass Data using Regression Analysis をクリックすると、ダークグレー表示が消えます。複数の特性の重回帰分析を行った場合には、少なくとも一つの特性の重回帰分析に使用されなかったガラスの No.欄がダークグレーに変わります。どの特性に使用されなかったかはそれぞれの特性の予測値 (Predictive Value) 欄に数値があるかどうかでわかります。

⑤ 📓 重回帰分析結果保存アイコン

重回帰分析を行った後、このアイコンをクリックして重回帰分析結果(重回帰分析検索画面、重回帰分析 実行画面共に)を保存できます。Preference 画面の Default Folder に保存用フォルダが指定されていれ ば、そのフォルダがアイコンのクリックにより現れるため、名前を付けて保存します。

⑥ 🌽 重回帰分析結果開アイコン

任意の重回帰分析検索結果画面でこのアイコンをクリックし、パソコンに保存されている重回帰分析結果を開くことができます。保存ファイルを開くと、重回帰分析実行画面と重回帰分析検索結果画面が重なって現れます。重回帰分析検索結果画面で戻る(Back)アイコンをクリックすると、その重回帰分析の検索画面が開きます。

⑦ 「SV 保存(CSV File)アイコン

重回帰分析結果の表を CSV ファイル(カンマ区切りのテキストファイル)として保存することができます。保存(Save)小画面で、保存フォルダを選択し、ファイル名を記入し、保存ボタンをクリックします。ファイル名に拡張子.csv を付けておくと、excel ソフト等で開くことができます。表の内容がそのまま CSV 保存されるため、必要に応じ、Information 欄等を追加・削除し、保存します。

4. 4 重回帰分析実行(Execution of Regression Analysis) 画面

(1)画面





(2) 詳細説明

(A) 重回帰分析条件(Analysis Condition) ⇔ 重回帰分析実行画面 3-5

重回帰分析の方法は、定数項を使う方法($k \neq 0$)と、定数項を使わない方法(k = 0)の2通りがあり、いずれかを選択します。初期値は、定数項を使わない方法が設定されています。

特性値 y を逆数値 1/y または対数値 $\log y$ として重回帰分析を行うことも可能です。粘度、電気伝導度および抵抗率については、対数値 $\log y$ が初期設定されています。

k=0の方法を選択すると、成分項として取り込まなかった成分の合計が $1\sim10$ %以内(プルダウンメニューで取り込む成分の合計値を 9 $9\sim90$ %に指定)であることを条件に、取り込まなかった成分(other 成分)をあたかも 1 つの成分であるかのように扱って重回帰分析を行います。この場合の予測特性値 y は、取り込んだ各成分の量を x_i 、その係数を a_i 、other 成分の係数を a_x 、その合計量を x_x として、次式で与えられます。

$$y = \sum a_i x_i + a_x x_x$$

2~3成分項を含む多次式の場合は、次の式で与えられます。

$$y = \sum_{i} a_{i} x_{i} + \sum_{i} \sum_{j} b_{ij} x_{i} x_{j} + \sum_{i} \sum_{j} \sum_{k} c_{ijk} x_{i} x_{j} x_{k} + a_{k} x_{k}$$

ここで、 b_{ij} は二成分項 x_ix_j の係数、 c_{ijk} は三成分項 $x_ix_jx_k$ の係数です。

一方、定数項を使う方法($\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$)については、取り込んだ成分 \mathbf{x}_i のみについて重回帰分析が行われ、予測特性値 \mathbf{y} は次の算式で与えられます。

$$y = \sum a_i x_i + k$$

$$y = \sum_i a_i x_i + \sum_i \sum_j b_{ij} x_i x_j + \sum_i \sum_j \sum_k c_{ijk} x_i x_j x_k + k$$

注意: サンプルデータ(ガラスデータ)が最大 n 成分から成るときに、n 個の成分すべてについて重回帰分析を行いたいときは、定数項を使わない方法(k=0)を推奨します。

データ件数の少ない成分項および | t |値の小さい成分項を排除することにより、重回帰分析の精度を高めます。

初期値は、データ件数 3件以上、3成分項の|t|値が 0以上で設定されています。これらの条件を変更するには、所定欄の数値を入力し直すかプルダウンメニューの所定値を選択したのちに Apply ボタンをクリックします。

Select All Component ボタン、Clear All Component ボタンあるいは各成分項の左側のチェックボックスを用いて、任意に成分項を取捨選択することもできます。

|t|値は2以上のとき有意水準が1%以上となり、2より大きいことが理想ですが、最初の重回帰分析のすぐあとにいきなり大きな|t|値を設定すると、重要な成分項が排除されてしまうケースが多いようです。このような事態を避けるために、例えば、2、3成分項の|t|値の足切り値を0.1、0.5、1.0 と段階的に上げ、次に、一成分項の|t|値の足切り値を0.5、1.0 等と上げてゆき、最終的にすべての成分項の|t|値を1以上、できれば2以上に持って行く方法が適当を思われます。

方法としては、重回帰分析画面の一覧表で、 t の絶対値の小さい成分項のチェックをはずし、Execute ボタンをクリックして重回帰分析の再計算をします。この操作を繰り返すことにより、信頼度の低い成分項を除去できます。あるいは、成分選択の|t|の最小値設定カラムに数値を入力し、Apply ボタンをクリックすることにより、設定数値以下の成分項を削除することができます。この場合も、Execute ボタンをクリックして初めて再計算が実行されます。

(C) 一覧表

選択された各成分項(説明変数)について、回帰係数(Coefficient)、標準誤差(Std. Error)、t値(t Value)、成分項の値と特性値との1次相関係数(Component vs Property Correlation)およびデータ件数が表示されます。なお、この一覧表に数値を満たすには、Excute ボタンをクリックする必要があります。

① **重回帰分析実行** (Execute) ボタン ⇔ 重回帰分析実行画面 6

Execute ボタンをクリックすると、重回帰計算が行われ、一覧表に各成分項の重回帰係数、その標準偏差、t値(=重回帰係数/重回帰係数の標準誤差)が表示されます。また、同時に検索結果画面の一覧表にある予測値および残差の欄に算出結果が表示されます。

ガラスデータ件数が説明変数(成分項)の数+2個以下の場合は重回帰分析が出来ません。ガラスデータ件数 \geq 成分項数+3 であることが必要です。また、説明変数ごとのデータが2個以下の場合にも警告が表示されます。下記のような質問、エラー等のダイアログが現れた場合には、その指示でよければ OK ボタンをクリックします。そうでない場合には Cancel ボタンをクリックし、重回帰分析検索結果画面で不要なガラスの Delete チェックボックスにチェックを入れる、分析条件欄の Σx_i の%量を変えるなどの操作を行った後、再度 Excute ボタンをクリックします。





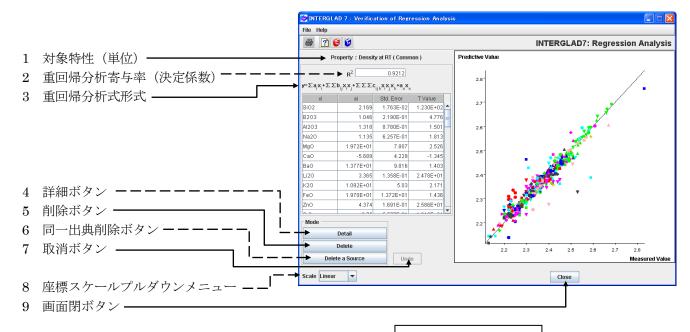


- ② 成分量ー特性プロット図 (Figure) ボタン \leftrightarrow 重回帰分析実行画面 14 Figure ボタンをクリックすると X 軸が成分量 (1,2,3 成分項の値)、Y 軸が特性値の X Y プロットが表示されます。
- ③ CSV 保存アイコン 一覧表のデータを CSV ファイル (カンマ区切りのテキストファイル) として保存することができます。

4. 5 重回帰分析検証(Verification of Regression Analysis)画面

検索結果リスト画面で行った重回帰分析の結果を図示し、予測の妥当性を検証します。

(1) 画面



重回帰分析検証画面

(2) 詳細説明

(A) グラフ表示

重回帰予測結果を、実測値 (ファクトデータ) と対比させて X-Y プロット図に表示します。 X-軸は実測値、 Y 軸は予測値を示します。 プロットは出典ごとに別々のマーク (形と色) で表示されます。 黄色の★印は Gold-Data ガラスです。 プロットにマウスポインタを合わせると、"No、ガラス番号、出典" が吹出しで表示されます。

(B) 寄与率(R2)、予測式、標準誤差

重回帰分析の結果として、寄与率、重回帰係数、標準誤差を表示します。

重回帰予測式 $y = \sum a_i x_i + \sum \sum b_{ij} x_i x_j + \sum \sum \sum c_{ijk} x_i x_j x_k + k$ または $y = \sum a_i x_i + \sum \sum b_{ij} x_i x_j + \sum \sum c_{ijk} x_i x_j x_k + a_x x_x$

 y
 : 特性値

 a_i, b_{ij}, c_{ijk}
 : 重回帰係数

 x_i, x_j, x_k
 : 成分含有量

 k
 : 定数項

ax : その他の成分の重回帰係数

[重回帰分析の評価について]

重回帰分析の結果の評価基準は多種ありますが、本システムでは以下の4項目を提示しています。

① グラフ表示

実測値をX、予測値をYとするX-Y座標上に特性値がプロットされます。もし実測値と予測値が一致すれば、全てのプロットは 45 度の線上(Y=X)に乗ります。従って 45 度の線からの離れ方で、おおよその精度を知ることができます。

② 回帰係数(ai)

回帰係数の大きさは、その成分がどれだけ予測値に影響しているかの目安になります。

③ **寄与率**(R²)

⇔ 重回帰分析検証画面 2

寄与率(決定係数)は、残差(実測値 Y_i 一予測値 \hat{Y}_i)の平方和 $Se=\Sigma(Y_i-\hat{Y}_i)^2$ と、偏差(実測値 Y_i 一実 測値の平均 Y_m)の平方和 $St=\Sigma(Y_i-Y_m)^2$ から求められ、 $R^2=1$ 一Se/St で与えられます。 分析の精度がよければ残差は小さくなり、残差平方和と偏差平方和の比がゼロに近づくので、寄与率は1

分析の相及がよりれば残差は小さくなり、残差平力和と偏差平力和の比がと口に近づくので、奇与率は に近づきます。従って、寄与率が1に近ければ近いほど予測精度が高いと言えます。

④ t値(t Value)=回帰係数/回帰係数の標準誤差

標準誤差(Standard Error)は、求めた回帰係数に含まれ得る誤差を表し、回帰係数に対する標準誤差の割合が小さければ、その成分の係数の信頼度が高いことを表します。従って各成分項のtの絶対値が1以上、できれば2以上であることが好ましいと考えられます。tの絶対値の低い成分項を除くと、一般に寄与率は多少低下します。

注: 分析対象データの各成分間の相関が高い場合、すなわち、似た組成のみでデータの母集団が構成される場合は、最適な回帰係数が算出できないことがあり、標準誤差が回帰係数に比べて非常に大きい値となるか0になります。このような場合には、回帰分析に使用する成分あるいは抽出する母集団の範囲を変更して、再度分析を行ってください。

(C) その他の機能

詳細(Detail)ボタン
 ⇔ 重回帰分析検証画面 4

このボタンがアクティブの時、プロット点をクリックするとそのガラスの詳細画面が表示されます。 プロット点にマウスポインタを合わせ、マウスの右クリックで表示される小画面から実行することもでき ます。

② 削除(Delete)ボタン ⇔ 重回帰分析検証画面 5

このボタンがアクティブの時、プロット点をクリックするとそのプロット点が削除されます。削除結果 は検索結果リストの削除チェックボックスに反映されます。検証画面を閉じずに検索結果リストの削除チェックボックスを変更しても、その検証画面には反映されません。特に、複数の検証画面を同時に表示している場合にはその点をご注意ください。プロット点にマウスポインタを合わせ、マウスの右クリックで表示される小画面から実行することもできます。

③ 同一出典削除(Delete a Source) ボタン ⇔ 重回帰分析検証画面 6

このボタンがアクティブの時、プロット点をクリックするとそのプロット点と同一の出典のものが全て 削除されます。削除結果は検索結果リスト画面の同一出典データの削除チェックボックスに反映されます。 プロット点にマウスポインタを合わせ、マウスの右クリックで表示される小画面から実行することもでき ます。

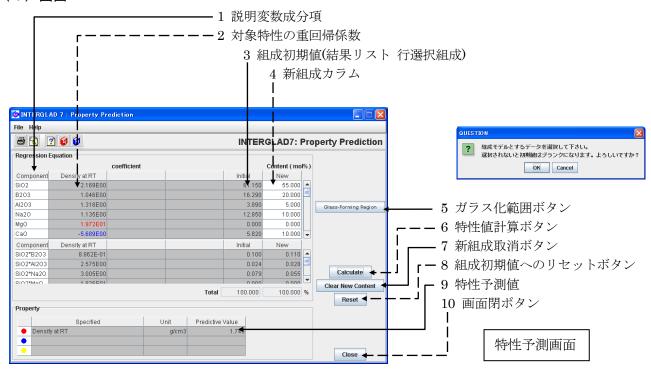
- **④** 取消 (Undo) ボタン ⇔ 重回帰分析検証画面 7
 - このボタンをクリックすることにより、直前の削除操作を取り消すことができます。
- ⑥ **座標スケール**(Scale) プルダウンメニュー ⇔ 重回帰分析検証画面 8 X-Y軸のスケールを変更することができます。スケールはリニア(linear)と対数(logarithm)です。初期状

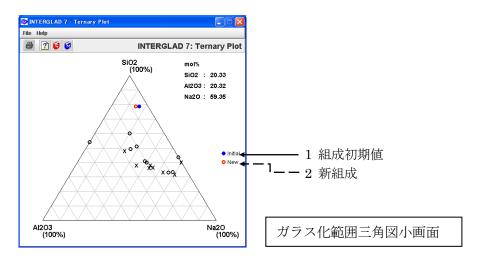
態はリニアです。対数を選択した場合、ゼロ以下となる特性値のデータは表示されません。

4. 6 特性予測 (Property Prediction) 画面

重回帰分析により得られた重回帰予測式を利用して、任意の組成に対する特性値を算出します。重回帰分析を行った後、検索結果画面に戻り、ツールバーの特性予測アイコンをクリックすると、特性予測画面が開きます。

(1) 画面





(2)詳細説明

(A) 重回帰予測式テーブル(Regression Equation) ⇔ 特性予測画面 1-4

第1列:成分項名と定数項

第2-4列: 各特性(3項目まで)についての重回帰係数

第 5 列:組成初期値 (Initial) 第 6 列:新組成値 (New)

特性列には、予測式の係数(重回帰係数)が成分項毎に表示されます。特性毎に重回帰係数の最大値より 3つまでを赤字で、最小値より3つまでを青字で表示し、新組成の検討を容易としています。

重回帰分析 検索結果リスト画面において行指定を行わない場合、質問ダイアログに対しOKボタンをクリ

ックすると、組成初期値欄は空欄となり、新組成欄はいずれのカラムも0が表示されます。行指定を行った場合には、組成初期値欄および新組成欄には、行指定により選択されたガラスの組成値が表示されます。

新組成欄には自由に入力ができますので、新しい組成値を比で入力します。合計を 100 に合わせる必要は 必ずしもありません。

(B) 特性値テーブル(Property) ⇔ 特性予測画面 9

第1列:特性ごとの色分け(特性予測では意味なし)

第2列:特性名(3項目まで)

第3列:特性単位

第4列:特性予測值(Predictive Value)

(C) 特性値計算(Calculate) ボタン ⇔ 特性予測画面 6

重回帰予測式テーブルの新組成の欄に数値を入力して、Calculate ボタンをクリックすると、数値を 100% に按分した後(合計が 100%でない場合、まず警告ダイアログが現れます)、特性予測値を算出します。算出 結果は特性値テーブルに反映されます。

(D) 新組成の取消(Clear New Glass) ボタン ⇔ 特性予測画面 7

このボタンをクリックすると、新ガラス組成カラムがすべて0となります。

(E) リセットボタン ⇔ 特性予測画面 8

このボタンをクリックすると、新ガラス組成が組成初期値に戻ります。

(F) ガラス化範囲(Glass-Forming Region)ボタン ⇔ 特性予測画面 5、特性予測三角図小画面

このボタンをクリックすると小画面が表示され、そこで3成分を指定するとガラス化範囲データが示された三角図が表示されます。この図により新組成がガラス化するかどうかを確認することができます。但し、三成分の合計が100%ではない場合は按分されるため、100%からの隔たりが大きいとガラス化範囲データは参考になりません。

三角図上に表示される Initial 点は重回帰予測式テーブルの組成初期値に対応します。

なお、ガラス化範囲はファクトデータで表示されます。「完全に透明なガラス」が○、透明なガラスが作製しにくい組成が×でプロットされ、○と×の境界の○側がガラス化領域です。ファクトデータの代わりに、境界線だけで表されたガラス化範囲データもあります。

(G) CSV 保存(CSV File)アイコン

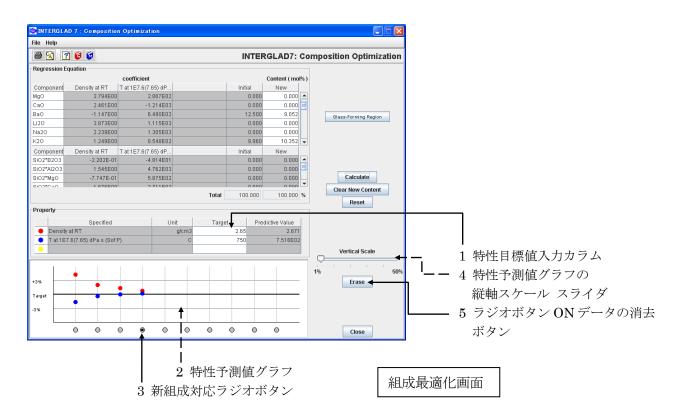
重回帰式(Regression Equation)欄および特性(Property)欄(予測値)のデータを CSV ファイル(カンマ区切りのテキストファイル)として保存することができます。

4. 7 組成最適化 (Composition Optimization) 画面

目標とする特性を得られる組成を予測・設計したい場合に、使用します。重回帰分析後に、検索結果画面のリストから設計(最適化)したい組成に近く、また目標特性に近いガラスをモデルガラスとして選択し、検索結果画面のツールバーの組成最適化(Composition Optimization)アイコンをクリックして、組成最適化画面を表示します。

特性予測画面と上半分は同じですので、特性予測画面の説明を参照下さい。異なる部分について以下、説明します。

(1) 画面



(2) 詳細説明

予測結果と目標値との関係や重回帰係数等を確認しながら、組成の最適解を試行錯誤的に求めます。近く、最小二乗法による自動計算も行うことができるようになります。

(A) 重回帰予測式テーブル 特性予測画面と同。

(B) 特性値テーブル(Property) ⇔ 組成最適化画面 1

第1列:特性ごとのプロット色分け 第2列:特性名・単位(3項目まで)

第3列:特性単位

第4列:特性目標值(Target)

第5列:特性予測値(Predictive Value)

目標値欄には目標値を入力します。Calculate ボタンをクリックすると、常に新組成欄の組成に対する予測値が計算され、予測値欄に表示されます。

(C) 特性予測値グラフ ⇔ 組成最適化画面 2.3

このグラフには、特性の予測値と目標値との差を、目標値で割った値がプロットされます。 中央の横軸は目標値のラインです。縦軸のスケールは、グラフ右側のスライダで1%から50%まで変える ことができます。 下欄のラジオボタン(\bigcirc マーク)は試行回に対応します。Calculate ボタンを 1 回クリックするたびに試行回数が累積されます。ラジオボタン ON のプロット点はその時の新組成値、特性計算値に対応します。 プロットの色分けは特性値テーブルに示されたものと同じです。

(D) 計算(Calculate)ボタン

重回帰予測式テーブルの新ガラス組成の欄に数値を入力して、Calculate ボタンをクリックすると、数値を 100%に按分した後、特性予測値を算出します。算出結果は特性値テーブルと特性予測値グラフに反映されます。特性予測値グラフに表示される試行回数は 10 回ですが、それ以上行うとグラフの列が左にシフトします。すなわち、グラフ下のラジオボタンの空きがなくなってから Calculate ボタンをクリックすると、左端の試行回が削除されます。

(E) 特性予測値グラフのラジオボタン ⇔ 組成最適化画面 3

このラジオボタンをクリックするとその試行回の組成と予測特性値が、それぞれ重回帰予測式テーブルの 新組成欄と特性値テーブルの特性予測値欄に表示されます。

(F) 消去(Erase) ボタン ⇔ 組成最適化画面 5

このボタンをクリックすると特性予測値グラフのラジオボタンがオン状態の列が消去され、その列より右側の試行回が左に詰められます。最後に残った1データは消去できません。

(G) ガラス化範囲 (Glass-Forming Region)ボタン \Leftrightarrow 特性予測画面 5、特性予測三角図小画面 特性予測画面と同様ですので、4.6(2)(F)を参照ください。

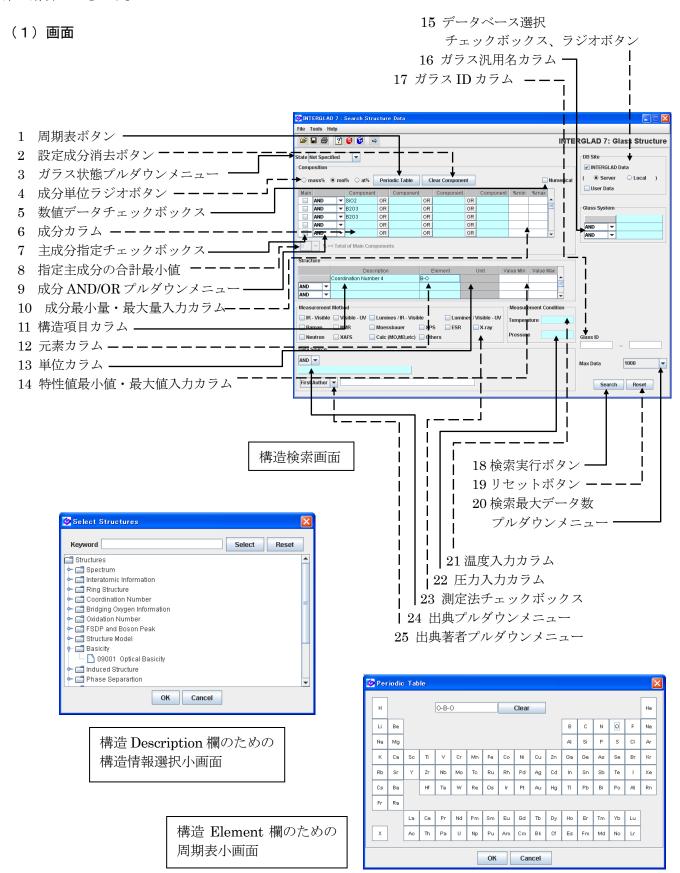
(H) CSV 保存(CSV File)アイコン

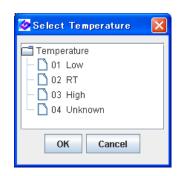
重回帰式(Regression Equation)欄および特性(Property)欄(特性目標値と予測値)のデータを CSV ファイル (カンマ区切りのテキストファイル)として保存することができます。画面下部のグラフに対応する計算経過も一緒に保存されます。

5. 構造データベース

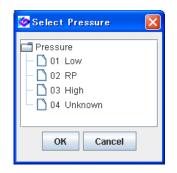
5. 1 構造検索 (Search Structure Data) 画面

メイン画面で構造検索(Search Structure Data)ボタンをクリックすると構造検索画面が開き、構造情報の検索・解析ができます。





温度(Temperature)選択小画面



圧力(Pressure)選択小画面

(2) 詳細説明

基本的に特性データベースと同様な画面構成となっています。特性データベース検索画面の説明を参照下さい。一部の条件の設定でも検索ができます。ガラス状態(State)については、特性データベースの場合のComposite、Modified、Non Vitrified がなく、Crystal が選択できます。また、外観・特徴・製法(Appearance, Features & Manufacturing Process)および用途(Usage)の設定はできません。

(A) **構造**(Structure)欄 ⇔ 構造檢索画面 11-14

構造項目(Structure 欄の Description 水色セル)欄をダブルクリックし、小画面を開き、検索したい構造情報を選択します。登録されている構造情報については下記および構造 ID リスト (第 6 章 5. 2) を参照下さい。元素(Element)欄の水色セルをダブルクリックすると周期表小画面が開き、元素記号をクリックすることにより、選択した構造情報についての元素の選択ができます。二つの元素を選択するとこれらがハイフンで結ばれます。例えば原子間距離の場合、B と O を選択すると B·O と表示され、B と O の距離を意味します。元素の選択では、Fe、Sn、Eu、B、Al、O の元素記号を右クリックすると、Fe では Fe²+、Fe³+、Snでは Sn²+、Sn⁴+、Eu では Eu²+、Eu³+(以上、メスバウアーの場合)、B では B(3)、B(4)(数字は配位数)、Al では Al(4)、Al(5)、Al(6)(数字は配位数)、O では NBO、BO、O²・、=O、O(3)(⑤架橋酸素情報参照)を選択することもできます。構造情報の最小値、最大値の Value Min および Value Max 欄白色セルへの入力はできず、検索対象となりません。

図 (スペクトル図など) については、基本的に図自体は登録されていませんが、出典中の図 No.が登録されています。また、第一原子間距離、第二原子間距離、第 n 原子間距離、結合角、員環数、配位数については、それぞれ元素の組み合わせ毎に代表値を設定しています。第3章 付帯資料3「代表値について」を参照ください。なお現在、員環数について元素の組み合わせは登録されていません。

以下、構造項目毎に説明します。

① スペクトル(Spectrum)

- ・スペクトル情報はスペクトル図(Spectral Curve)とピーク・谷(Peak or Valley)に分かれており、それぞれに IR ~Visible、Visible ~UV、発光(IR ~Visible)、発光(Visible ~UV)、Raman、NMR、メスバウアー、ESR、XPS、XAFS、X-ray、Neutron、計算化学、その他があります。
- ・スペクトル図の場合、図自体は登録されていませんが、出典中の図 No.が登録されています。
- ・ピーク・谷は、スペクトル図のピークあるいは谷の位置について、主に出典中に数値が記載されている場合、波数(波長)等(スペクトルの種類によって単位が異なる)が登録されています。
- ・ピーク・谷を選択した場合、そのピークあるいは谷に関わる元素の組み合わせ(一つ以上の元素)も選択できます。

② 原子間情報(Interatomic Information)

- 原子間情報として、原子間距離、結合角、動径分布関数(図)、干渉関数(図)、構造因子(図)等が登録されています。図自体は登録されていません。
- ・原子間(結合)距離については、注目する原子対ごとに、その原子間距離の短い順に第一原子間距離(最近接原子間距離)、第二原子間距離・・・となります。第三原子間距離以上は n-th Interatomic Information としてまとめています。
- ・検索はその対を選択して行います(例えば、Si-O)。対を逆にしても同じ結果が得られます。

- ・原子間距離には平均値とピーク値(動径分布関数のピーク値)の2種類があります。
- ・原子間距離の分布幅には、動径分布関数のピークの半値幅や Debye-Waller factor など各種あります。従って、その単位も A(A) オングストローム), A^2 ,nm, nm^2 などと表示され、比較することはできません。
- ・結合角は、3原子間の結合角について3原子の組み合わせ毎に、結合角および結合角分布幅の平均値、最 多確率、第一ピーク値、第二ピーク値等が登録されています。検索は1~3元素の選択により、あるいは 元素を選択しなくても可能です。
- ・第一原子間距離、第二原子間距離、第 n 原子間距離については、それぞれ原子の組み合わせ毎に平均値、 ピーク値の優先順で代表値を設定しています。
- ・また、結合角についても平均値、最多確率、第一ピーク、第二ピーク、分布図の優先順で代表値を設定しています。
- ・これらは X-Ray Diffraction、Neutron Diffraction、XAFS、Computational Chemistry の測定から得られた情報です。

③ リング構造(Ring Structure)

- ・Si-O、B-O などのガラス形成元素は環状構造をとります。この環が幾つのカチオン(Si や B など)によって構成されているかを表したものが員環数であり、平均値、第一ピーク員環数、第二ピーク員環数が登録されています。
- ・また 2 員環から 10 員環までの存在比(%)が登録されており、員環数分布図(出典図 No.のみ)が登録されて いる場合もあります。
- ・リング構造についても員環数(平均値)、第一ピーク員環数、第二ピーク員環数、員環数分布図の優先順で代表値を設定しています。元素の組み合わせは登録されていません。

④ 配位数(Coordination Number)

- ・ある原子あるいはイオンの周囲に配位しているイオンあるいは原子の個数が配位数です。1組の原子あるいはイオン (Si-O など) ごとに記載しますが、配位圏の元素を特定しない1原子あるいはイオンに着目した配位数もあります。
- ・中心となる原子と配位する原子の対に着目し、その原子間距離の短いものから順に第一近接配位数(最近接配位数)、第二近接配位数、第三近接配位数となります。
- ・検索はその対の元素(中心原子一配位原子)を選択して行います(例えば、 Si -O)。なお、元素を選択しない、あるいは 1 つの元素の選択でも検索できます。
- ・配位数 $1\sim12$ の存在比(%)も登録されています。配位数分布図(出典図 No.のみ)が登録されている場合もあります。
- ・配位数の場合も第一近接配位数、第二近接配位数、第三近接配位数、配位数分布図の優先順で代表値を設定しています。
- ・配位数は X-Ray Diffraction、Neutron Diffraction、XAFS、NMR の測定から得られる情報です。
- ⑤ 架橋酸素情報(Bridging Oxygen Information-(Bridging Oxygen))
- ・架橋酸素情報はBridging Oxygen と Qn Distribution (次項目⑥) の二つに分けられています。
- ・酸素原子の両端が原子 X (Si、B、Al、P など) に結合している酸素原子 (=架橋酸素 Bridging Oxygen、BO または OB) と、片端のみが原子 X に結合している酸素原子 (=非架橋酸素 Non-bridging Oxygen、NBO または TO=Terminal Oxygen) と、両端とも原子 X と結合していない酸素原子 (=孤立酸素 [O2-]、Isolated Oxygen)、三配位酸素について、全酸素原子に対する比、または、全 X 原子に対する比を算出したデータがあり、これらはガラスの網目形成酸化物の結合構造を表わしています。
- ・NBO/[total O]、BO/[total O]、[O2-]/[total O]、3 Coord O/[total O]は、全酸素に対する各 NBO、BO、O²-、3 配位 O の割合を示します。単位は%です。
- ・NBO/[total X]、BO/[total X]、[O2-]/[total X]、3 Coord O/[total X]は、X(Si,P,Al など)と O が形成する正 四面体あたりの各 NBO、BO、O²-、3 配位 O の数を示します。NBO/[total X]、BO/[total X]の値は 0-4 までの数字です(例えば 3.5 など)。
- ・NMR、Raman Scattering、XPS、Computational Chemistry の測定から得られる情報です。
- ⑥ 架橋酸素情報 Qn 分布(Bridging Oxygen Information (Qn Distribution))
- ・n 個の架橋酸素(Si-O-Si 結合)を有する SiO₄四面体を基本的に Q^n で表します(n=0~4)。 Q^n は Si 以外の ガラス形成原子 B、Al、P、Ge 等の場合にも同様に使用されます。 Q^n の存在比率はガラス形成四面体の 結合構造を表現した数値です。
- ・5項目で登録されています。単位は%です。

- Q0/totalX (架橋酸素を持たない XO4 四面体の存在比率)
- Q1/totalX (1個の架橋酸素を持つXO4四面体の存在比率)
- Q2/totalX(2個の架橋酸素を持つXO4四面体の存在比率)
- Q3/totalX (3個の架橋酸素を持つ XO4四面体の存在比率)
- Q⁴/ totalX (4 個の架橋酸素を持つ XO₄ 四面体の存在比率) X: Si, B, Al, P, Ge など
- ・NMR、Raman Scattering、XPS、XAFS、Computational Chemistry の測定から得られる情報です。
- ⑦ 酸化数(Oxidation Number)
- ・カチオン(Si、B、Al など)やアニオンの価数値が登録されています。
- ・平均価数の他、-6 価 \sim +6 価の存在比(%)が登録されています。平均価数は価数の存在比から計算されます。
- ⑧ 構造モデル(Structure Model)
- ・当該文献に提案されている構造モデルがあれば、図番号、コメントが登録されています。
- ⑨ 塩基度(Basicity)
- ・Tl, Pb, Bi 等のイオンによる UV 吸収のシフト波数から求められた光学的塩基度(Optical Basicity)が登録されています。
- ⑩ 誘起構造情報(Induced Structure)
- ・フェムト秒レーザーなどの外部場により誘起形成されたナノガラス等の微細な構造につき登録されています。
- ① 分相(Phase Separation)
- ・スピノーダル分相、バイノーダル分相、およびその組織のサイズ等が登録されています。
- 12 FSDP and Boson Peak
- ・X線・中性子線回折の低Q領域(\sim 10 \sim 20nm⁻¹)で観測される回折ピーク First Sharp Diffraction Peak (FSDP) 値(cm⁻¹等)、およびラマン散乱や中性子線非弾性散乱の低波数領域(10-100cm⁻¹)で観測される Boson Peak 値(cm⁻¹)等が登録されています。これらはガラスが中距離構造を持つ裏付けとなる因子です。
- ③ ラマン分光データ(Raman Data)
- ・偏光解消度 ρ が登録されています。等方性の不規則性をもつ固体の場合、 ρ は $0\sim0.75$ の間にあり、高度 に対称性のあるモードの場合、 ρ は 0.1 以下となります。 ρ の振動数依存性は、ガラスにおける不規則性、 局部的対称性及び非調和性についての情報となります。
- ④ ESR データ(ESR Data)
- ・g Value (g, g⊥, g∥)、Hyperfine Coupling Constant (A, A⊥, A∥) (cm¹)、Hyperfine Structure Spacing (cm¹)、Dipolar Hyperfine Coupling Parameter、Fermi Contact Interaction Parameter、ESR-FWHM が登録されています。
- ⑤ XAFS データ(XAFS Data)
- ・XAFS 吸収端位置(eV)が登録されています。
- ⑥ NMR データ(NMR Data)
- ・多くの登録項目がありますが、主な項目は化学シフト(Chemical Shift, δ (ppm))、等方性化学シフト (Isotropic Chemical Shift, δ iso(ppm))、Propotions Present(%)、Asymmetry Parameter(η 単位なし)、核四極子結合定数(Quadrupolar Coupling Constant, Qcc(MHz))です。
- ① メスバウアーデータ(Moessbauer Data)
- ・登録項目は、異性体シフト(Isomer Shift, δ (mm/s))、四極子分裂(Quadrupole Splitting, Δ (mm/s))、ピーク線半値幅(FWHM, Γ (mm/s))です。
- ® その他(Others)
- ・Si-N 結合の有無、Force constant など、上記構造情報データに該当しない項目です。
- (B) 測定法 (Measurement Method) 欄 ⇔ 構造檢索画面 23

測定(解析)方法は以下の14種類に分類していますので、この中より必要に応じ選択します。

- ·IR-Visible 分光(透過、吸収、反射)、
- ·Visible-UV 分光(透過、吸収、反射)、
- ・発光 IR-Visible

- · 発光 Visible-UV
- · Raman 分光
- · NMR
- ・メスバウアー分光
- · X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS)
- Electron Spin Resonance Spectroscopy (ESR)
- · X線回折(通常法、小角散乱、AXS、WAXS等)
- •中性子線回折(通常法、小角散乱、同位体置换等)
- · X-ray Absorption Fine Structure (XAFS)(透過法、全電子収量法、蛍光法等)
- · 計算 Calculation(非経験的分子動力学(MD-ab initio)法、経験的分子動力学(MD-empirical)法、 非経験的分子軌道(Molecular Orbital calculation-ab initio)法、 半経験的分子軌道(MO-semi-empirical)法)
- その他複数選択も可能です。

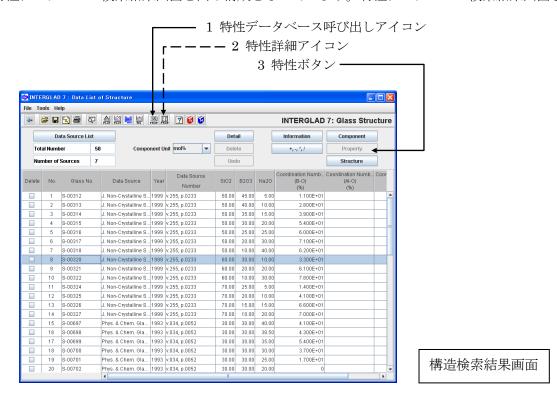
(C) 測定条件(Measurement Condition)欄 ⇔ 構造検索画面 21,22

測定温度(Temperature)、圧力(Pressure)はそれぞれの水色セルをダブルクリックすると小画面が現れ, 条件を選択できます。温度は高温(High)、室温(RT)、低温(Low)、不明(Unknown)、圧力は高圧(High)、常 圧(RP)、低圧(Low)、不明(Unknown)の大まかな分類となっています。

5. 2 構造検索結果 (Data List of Structure) 画面

(1)画面

特性データベース検索結果画面と同じ構成となっています。特性データベース検索結果画面を参照下さい。



(2) 詳細説明

特性データベースと同じ構成となっており、同様な使用ができます。特性データベース検索結果リスト画面の詳細説明を参照下さい。

(A) 構造(Structure)ボタン

この構造ボタンのクリックにより、[Select Structure]小画面を開き、検索したガラスに登録された構造データをこの画面のリストに入れたり、消したりすることができます。

ツールバーの特性データベース呼び出しアイコン のクリックにより、特性データベースが呼び出され、それぞれの行に対応する特性データベースのガラス No.が表示されます。また、行を選択した後、特性詳細アイコン をクリックすることにより、その行に対応するガラスの特性詳細データを表示することができます。

構造データベース登録開始時(2006~7年)に、特性データベースにキャラクタリゼーションの構造モデル(Structure Model)に*(何らかのデータあり)としてすでに登録されていたガラスについては、ほとんどの場合、数値等の構造データが構造データベースに登録されています。そこで、構造データに対応する特性データ(ガラス No.)がある場合も、構造データ(*)以外に特性データが登録されていない場合があります。なお、構造データベース登録開始後は、構造データのみのガラスの場合、特性データベースには登録されていません。

(C) 特性(Property)ボタン ⇔ 構造検索結果画面 3

特性データベースの呼び出し後は、特性(Property)ボタンのクリックにより、特性選択小画面より特性を選択すると、一覧表にその特性値を表示することができます。

(D) 出典リスト(Data Source List)画面

[Data Source List]ボタンのクリックにより、出典リスト(Data Source List)画面を開くことができます。 特性データベースの 2.4 を参照下さい。

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

検索結果リストの内の一つのガラス行を選択後、[Glasses from a Data Source]アイコンをクリックすることにより、同一出典リスト(Glasses from a Data Source)画面を開くことができます。特性データベースの2.5 を参照下さい。

(F) 三角図

特性データベースの場合(3.1 参照)と同様に、メニューバーの三角図アイコンから表示できます。プロットは登録のある3成分につき、リストの全組成、数値データのある構造情報、および特性データベースの呼び出し後であれば、同じく特性データにて可能です。

(G) XY プロット

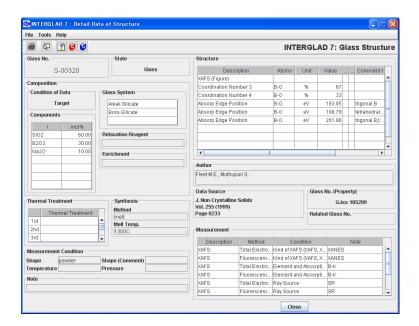
特性データベースの場合(3.2 参照)と同様に、メニューバーの XY プロットアイコンから表示できます。X および Y 軸に、登録のある成分、数値データのある構造情報、および特性データベースの呼び出し後であれば、同じく特性項目を選択することができます。

(H) 元素解析

特性データベースの場合(3.3 参照)と同様に、メニューバーの元素解析アイコンから表示できます。表示は、リストの全ガラス、登録のある構造情報、測定方法、および特性データベースの呼び出し後であれば、同じく特性項目にて可能です。

5. 3 構造詳細 (Detail Data of Structure) 画面

(1)画面



構造詳細画面

(2) 詳細説明

この画面には登録されたすべての情報が表示されます。構造情報・測定情報等で一行の記載が多い場合には 一度に全部を見ることができませんが、下部のスライドバーを使用するか、マウスポインタを該当箇所に合わ せると記載事項の全体を含む吹き出しが現れ、見ることができます。

6. ユーザーデータ登録機能

INTERGLAD 利用者が保有するガラスデータをもとに利用者独自のガラスの特性データベースを構築することができます。

ユーザーデータ登録機能において登録されたユーザーデータは、スタンダード版の検索機能および特性予測・ 材料設計(組成最適化)機能について、INTERGLADのガラスデータと一体化させて利用することができます。 登録されたユーザーデータは、利用者のパソコン内のハードディスク等に保存されます。

登録されたユーザーデータが通信回線等を介して INTERGLAD サーバー等に持ち出されることは一切ありません。

[ユーザーデータのガラス番号について]

ニューガラスフォーラムが登録・管理する INTERGLAD ガラスデータとユーザーデータとを区別するため、ガラス番号として 800001 番以降をユーザーデータ登録用として使用します。

ユーザーデータのガラス ID : 800001~

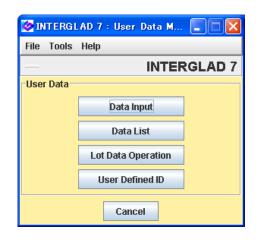
ユーザーデータのガラス番号 (例) : GU20-800001

(2桁目"U"は、ユーザー登録データを表わす。この例のガラスは、状態がガラス (1桁目 G)、ガラス 汎用名がリン酸ガラス (3、4桁目 20) であることを意味します)

6. 1 ユーザーデータメニュー (User Data Menu) 画面

(1)画面

INTERGLAD のメイン画面でユーザーデータ(User Data(Property Data))ボタンをクリックすると、次の画面が表示されます。





ユーザーデータ変換小画面

ユーザーデータメニュー画面

(2) 詳細説明

(A) 新規登録(Data Input)ボタン

ガラスデータを新しく登録する画面を起動します。

(B) データリスト(Data List)ボタン

このボタンによりデータリスト画面を起動し、収録されたユーザーデータを一覧できます。またデータを 削除することができます。新規データをまとめて入力する機能も備えています。

- (C) ロットデータ操作 (Lot Data Operation) ボタン ガラスデータのバックアップ処理、復旧処理、一括削除処理を起動します。
- (D) ユーザー定義 ID(User Defined ID) ボタン このボタンによりユーザー定義 ID 小画面が開き、新たなガラス名および特性を設定することができます。
- (E) 画面キャンセル(Cancel)ボタン ユーザーデータ登録機能を終了し、INTERGLAD のメイン画面に戻ります。
- (F) Ver. 7.5 以前の登録ユーザーデータの Ver. 7.6 への変換登録等Ver. 7.5 以前の INTERGLAD にユーザーデータを登録している場合には、Ver. 7.6 でのユーザーデータ登

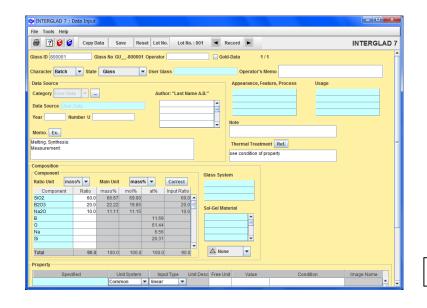
録の作業に先立ち、以下の操作を行って下さい。ユーザーデータメニュー画面のメニューバーの Tools より Convert User Data (INTERGLAD 7.6, etc. Format)を選択すると、ユーザーデータ変換 (Convert User Data) 小画面が表示されます。この小画面の MDB File (INTERGLAD Previous Version Format)に Ver. 7.5 以前 (Ver. 6 も可) の登録ユーザーデータ MDB File を選択します (Select ボタンをクリックして選択)。また、MDB File (INTERGLAD 7.6, etc. Format)に GP_user_76.mdb を選択します (Preference 画面の User Database で設定した MDB File がデフォルトとなります)。 MDB File は Windows Vista、7、8、10 では、C:\INTERGLAD 7.0 (あるいは 7.0SA) にあります。なお、新規機能は反映されませんが、GP_user_70~75.mdb の使用を続けることもできます。

また、Ver. 7の新バージョンへのアップデートの場合、INTERGLAD 7.0 (あるいは 7.0SA) プログラムをアンストールしてもユーザーデータファイル (GP_user_76.mdb 等) は保存されます。しかし安全のため、まず GP_user_76.mdb 等のファイルを INTERGLAD 7.0 フォルダより外に出して保存し、その後、プログラムのアンインストール、インストールを行うことを推奨します。

6. 2 データ入力(新規登録)(Data Input)画面

ガラスデータを新規に登録する画面です。ガラス ID 以外の項目であればデータ修正も可能です。

(1)画面





ロット No.選択小画面

データ入力画面

(2) 詳細説明

(A) ロットの切り替え

INTERGLAD 利用者が登録するガラスデータは、ロットと呼ぶグループ単位で操作します(001~)。ロットは、データバックアップ(退避)や、データリカバリ(復旧)の際に基準となる「ガラスデータの集合」です。ロット番号はガラス ID に無関係に付けることができます。ロット番号が異なっても、同じガラス ID を付けることはできません。複数の利用者で共有する時に利用者単位でロットを分けるなど、運用面での利用が可能です。

ユーザーデータメニュー画面の新規登録(Data Input)ボタンをクリックすると、データ入力画面と共に、ロット No.選択小画面が現れます。この小画面でガラスデータを既存ロット(Existing Lot No.)と新規ロット (New Lot No.)のどちらに追加するかを選択することができます。新規ロットの場合には、New Lot No.ラジオボタンをクリックして ON とし、ロット No. を入力して OK ボタンをクリックします。また、データ入力・登録後にも、Lot No.ボタンをクリックすることで、登録するロットを切り替えることができます。

(B) ユーザーデータの入力

新規登録画面は、多数の項目から構成されます。白色セルに入力できますが、全ての欄を満たす必要はありません。ガラスの状態(State)により、入力する項目が画面上で自動的に変わります。

入力が必須の項目は、次の<基本情報>として示される項目の中の④組成の性格(Character)と⑤ガラスの 状態(State)、および<出典>項目の中の② b)年(Year)と c)番号(Number)、および<組成>の中の⑧ガラス 汎用名(Glass System)です。

<基本情報>

① ガラス ID(Glass ID)

ガラスデータを一意に判別するための項目です。ユーザーデータの場合、8 で始まる 6 桁の数字となります。登録済みのユーザーデータの最新のものの番号に1 をプラスした ID を初期表示します。新規登録時のみ変更可能ですが、既にあるガラス ID を付けることはできません。

② ガラス番号(Glass No.)

ガラスの状態およびガラス汎用名を入力すれば、自動的に表示されます。

例. GU01-800001 状態(1 桁)+出典カテゴリ(1 桁)+ガラス汎用名(1 番目登録、2 桁)+ガラス ID(6 桁)

③ Gold-Data チェックボックス

オンにすることで Gold-Data は推奨データとしてランク付けされます。

④ 組成の性格(Character) プルダウンメニュー

分析値 Analyzed、目標値 Target、原料調合値 Batch、その他 Others から選択します。デフォルトは Batch です。

⑤ ガラスの状態(State) プルダウンメニュー

ガラス Glass、結晶化ガラス Glass-Ceramics、複合材料 Composite、変性ガラス Modified、薄膜 Thin Film、溶融体 Melt、非ガラス Non-Vitrified から選択します。デフォルトは Glass です。 Glass general は選択できません。

⑥ ユーザー定義ガラス(User Glass)

ユーザー定義ガラス(User Glass)欄(水色)をダブルクリックすることにより、市販ガラスおよびユーザー定義ガラス選択(Select Commercial and User Glass)小画面が開き、INTERGLAD に登録済みの市販ガラス名およびユーザー定義ガラス(User Glass)(6.5参照)が選択できます。小画面ではキーワード入力による項目検索も可能です。市販ガラスと同様に、ユーザー定義ガラス名による登録が可能になります。なお、User Glass が登録されていない場合には、この User Glass フォルダは表示されません。

⑦ 外観・特徴・製法 (Appearance, Feature & Manufacturing Process)

小画面に表示される項目から最大4つまで設定できます。小画面ではキーワード入力による項目検索も可能です。ゾルゲル原料の欄に入力があれば、"Sol-Gel"が自動的に追加されます。

⑧ 用途(Usage)

小画面に表示される項目から最大4つまで設定できます。小画面ではキーワード入力による項目検索も可能です。

9ノート(Note)

他の項目に記述できなかったことや、補足説明を記述します。200字 (bite) まで入力できます。

⑩ 熱処理条件

アニール温度・時間などの熱処理条件を記載します。特性によっては測定するガラスの熱処理条件により値が大きく左右され、熱処理条件が重要な意味を持ちます。

特性ごとに熱処理条件が異なる場合は、特性の condition 欄に記載することになるため、その場合には、Ref.ボタンをクリックして「see condition of property」を自動入力できます。200 字(bite)まで入力できます。

① 入力者氏名

データを入力した人の氏名等を記載します。この氏名は検索機能等において表示されることはありません。

① 入力者メモ(Operator's Memo)

入力者がメモを記載することができます。400 字 (bite) まで入力できます。このメモは検索機能等において表示されることはありません。

注意:テキスト入力欄へのダブルクォーテーション(")の禁止

ダブルクォーテーション (") は csv 保存時に読み取り不能となるため、テキスト入力欄への記載は避けて下さい。該当する欄は、ノート欄、熱処理条件欄、入力者氏名欄、著者名欄、出典年号番号欄、メモ欄、特性の条件欄など。

<出典(Data Source)>

① 出典カテゴリ(Data Source Category)

ユーザーデータ(User Data)が自動的に設定されます。変更できません。

② 出典名称(Data Source)

ユーザーデータ(User Data)が自動的に設定されます。変更できません。

a) […]ボタン

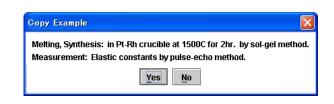
このボタンをクリックすることで、登録済みの出典情報(年、番号)が一覧表示されます。すでに 登録されているものと同じ出典であれば、その中から選択することができます。著者とメモは同一出 典毎に共有しますので、出典を選択した場合、著者、メモも同時に表示されます。

- b) 年(Year) 出典の年を記入します。
- c) 番号(Number) 出典の番号を記入します。英数、記号を含む19字(bite)まで入力できます。
- d) 著者(Author)

1行に1人ずつ、10人まで登録できます(例. Suzuki I.)。INTERGLAD での入力ルールは次のとおりです。Family Name+半角空白+First Name の頭文字+ピリオド(+ Middle Name の頭文字+ピリオド) 計 150字 (bite) まで入力できます (半角空白、行替え各 2 字分を含む)。

e) メモ(Memo)

ガラスの作製方法、測定方法等を入力します。 Ex.ボタンをクリックすると、入力例の Copy Example 小画面(右図)が開きます。 Yes ボタンをクリックすると同画面の内容を メモ欄に書き込むことができます。計 400 字 (bite) まで入力できます。



<組成(Composition)>

① 入力単位系(Ratio Unit) プルダウンメニュー

成分含有率(⑥)を入力する時の単位を指定します。デフォルトは mass%です。

② 主単位(Main Unit) プルダウンメニュー

データベースには、mass%、mol%、at%の3種類の単位で格納されますが、このうちどれを主単位にするか指定します。主単位は詳細画面で表示される組成単位となります。基本的には、①の選択時に連動して同じ単位に設定されますので、特に意識する必要はありません。①で mol%を指定すると、主単位は、mol%か at%が選択できます。主単位のデフォルトは mass%です。

③ 計算(Calc)ボタン (計算後は、訂正(Correct)ボタンになる。)

成分と比率を入力後、このボタンをクリックすると、Total を 100%に按分した後、各単位への変換処理を行います。変換不可のケース(例えば、 R_2O 、Apatite、Others などを使用した場合)は、エラーメッセージ(Unit conversion failed.)が現れ、OK ボタンをクリックすると、変換値欄は*となります。また at% 欄は空のままとなります。一番右の Input Ratio 欄には入力した Ratio 値がそのまま残ります。この値は データ保存後およびコピー後も残りますので、同系統の組成入力の際等に役立てることができます。なお、この Input Ratio の保存には、Ver. 7.3 以前のユーザーデータファイルの GP_user_74 .mdb 以降への変換登録が必要です(6.1(2)(F)参照)。

参考: 上記以外の成分の按分および変換ルールは以下のとおりです。

- a) Total が 99.99~100.01%の範囲は按分しない。
- b) 成分比率に1つでも*があれば、[Calc]時にメッセージ(Inclusion of * in value prevents system from dividing proportionally) を出して按分を中止する。 この場合、他の単位系への変換はできないため、入力した単位系のデータのみを格納。他は*となります。
- c) 原材料の中の複合酸化物などが入力されたときは、それを構成する基本化合物(Na2O、NaF など)の行が追加され、成分 含有率の欄に*が表示される。(組成振分け処理)

④ 訂正(Correct)ボタン

Calc.ボタンのクリック後(按分及び各単位への変換後)、内容を変更したい場合は、このボタンをクリックします。警告メッセージ"Converted data not with Main Unit will be cleared. OK?"が表示された後、

YES ボタンをクリックすると、入力した成分名(⑤)、Main Unit の成分比率が Ratio 欄に残りますが、それ以外の行および列がクリアされます。なお、Main Unit を mol%として入力した後に at%に換えた場合には、成分名に元素名、Ratio 欄に mol% (=at%)の成分比率のみが残ります。

⑤ 成分名(Component)

[Component]欄をダブルクリックすると現れる[Select Component]小画面から設定します。小画面ではキーワード入力による項目検索も可能です。カルコゲナイドガラス等、元素で入力する方がよい場合には、まず[Ratio Unit]欄を mol%とし、次に[MainUnit]欄を at%とします。この場合、元素のみの[Select Component]小画面が現れます。at%以外が選択されている場合は、Calc.ボタンのクリック時に、構成元素も自動的に追加されます。使用できる成分行は39です。従って、異なる元素の酸化物の場合、構成元素を考慮すると、19酸化物まで入力できます。

⑥ 成分比率(Ratio)

手入力項目です(指数入力可)。成分名を選択すると、先ず"*"が入ります。*を消去して成分比率を入力して下さい。入力した数字は確定する(Enter キーをクリックする)と、小数点以下 2 桁までの数字あるいは有効数字 4 桁の E 形式の値(例:2.630E-02)となります。

⑦ mass%、mol%、at%欄

Calc.ボタンをクリックすると、各単位に変換された値が表示されます。変換不可の場合はエラーダイアログ"Unit conversion failed"が現れ、*"が表示されます。この場合、at%欄には何も表示されません。③下の参考も参照ください。

® ガラス汎用名(Glass System)

入力必須項目です。小画面に表示される項目から最大3件まで選択できます。小画面ではキーワード入力による項目検索も可能です。1件目がガラス番号の一部を構成します。

⑨ ゾルーゲル原料(Sol-Gel Material)

小画面で、最大 10 件まで選択できます。小画面ではキーワード入力による項目検索も可能です。ゾルゲル原料を入力すると、外観・特徴・製法の欄に"Sol-Gel"が追加されます。

⑩ ガラス化範囲データ(Glass-forming Region Data)

ガラス化範囲データを 2 種類の方式で登録できます。ガラス状態が Melt 以外で、2 あるいは 3 成分の合計が $99.99\sim100.01\%$ の場合に登録できます。

a)O×表示

〇: 完全に透明なガラスが得られる2、3成分系組成

×: ガラス化しない箇所が多少なりとも存在する2、3成分系組成

2つまたは3つの成分項目および成分値を Component 欄に選択・入力後、[Δ None]プルダウンメニューの Point Data を選択すると、Select 3 Components 小画面が開きます。2 または 3 成分にチェックを入れ、OK ボタンをクリックします。右に現れる Δ Mark のプルダウンメニューより、三角図上に表示されるガラス化範囲データの記号として \bigcirc ×を選択します。この操作により、入力中のガラスが、3 成分系ガラス化範囲データの1 組成として登録されます。

b) 曲線表示

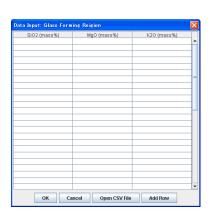
ファクトデータの代わりに曲線でガラス化範囲を示すことが できます。

組成欄に3成分を入力したのちに、 $[\triangle None]$ プルダウンメニューの Curve Data を選択すると、曲線データが入力できる表(右図)が表示されます。ガラス化範囲を表す曲線を描くための点を三角座標(x_1, x_2, x_3)で入力します。

予め別途記載(「第6章4. 曲線ガラス化範囲データ」参照) の形式で csv ファイルを作成しておき、Open CSV File ボタン をクリックして取り込むことも可能です。

① フィラー/析出結晶/基板(Filler / Crystal / Substrate)

ガラスの状態(State)で複合材料(Composite)を選択すると Filler 入力欄が表示され、結晶ガラス(Glass-Ceramics)を選択すると Crystal 入力欄、薄膜(Thin Film)を入力すると Substrate 欄がそれぞれ表示されます。



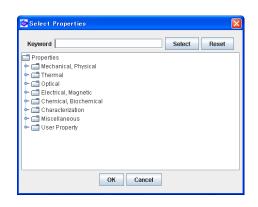
- a) フィラー/析出結晶/基板 材料 (Filler/Crystal/Substrate Material) 最左欄をダブルクリックして 表示される小画面から選択します。小画面ではキーワード入力による項目検索も可能です。複合材料 の場合には上欄に Matrix Glass の表示が現れます。
- b) フィラー/析出結晶 比率(Filler/Crystal Ratio) 手入力項目です。単位は mass%です。vol%で入力する場合は、その旨を Note 欄に記述します。
- c) フィラー/析出結晶 形状 (Filler/Crystal Shape) 入力欄をダブルクリックして表示される小画面の Appearance/Shape から選択します。

<特性(Property)>

① 特性名(Specified)

特性選択小画面で設定できます。小画面ではキーワード入力 による項目検索も可能です。1199 件まで入力できます。

6.5記載の方法で予めユーザー定義特性を登録しておくと、 特性選択小画面の最下段の User Property フォルダ に 登録され、ユーザー定義特性による登録が可能となります。 ユーザー特性が登録されていない場合には、この User Property フォルダは表示されません。



参考:拡散係数因子 D_0 は特性 ID リストに存在しますが、拡散係数 D の ID はありません。 データ D のみが存在し、 D_0 および拡散の活性化エネルギーEd のデータがない場合は、 D_0 の代わりに D の数値を入力し、condition 欄に「D, 300C」のように記載して D_0 と区別します。

② 特性単位系(Unit System) プルダウンメニュー

入力単位系を選択できます。Common/SI/CGS/PSI の 4 単位系の他、そのいずれにも属さない場合の Other があります。初期値は Common ですが、利用者環境設定画面で変更できます。(第 6 章 5.1 特性データベース ID リスト参照)

③ 入力タイプ (Input Type) プルダウンメニュー

通常の入力 linear のほか、log(常用対数)/ln(自然対数)/inverse(逆数)での入力ができます。 入力中の表示は、このプルダウンメニューに従いますが、一度確定[Save]すると、特性値を全て linear に変換して格納します。

④ 単位記述(Unit Desc)

特性単位系(②)で、4単位系 (Common/SI/CGS/PSI) を選択した場合、INTERGLAD に登録されている該当単位を自動表示します。(第6章 5.1 特性データベース ID リスト参照)

⑤ 自由単位記述(Free Unit)

特性単位系(②)で、Other を選択した場合、自由単位記述欄が入力可能になります。記入した単位が、システム内に登録された単位換算テーブルの単位と同じであれば、自動的に4単位系に換算されます。

⑥ 特性値(Value)

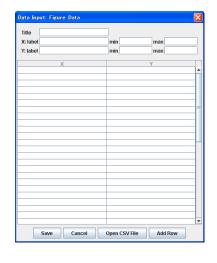
特性値を記入します。登録可能な数値は有効数字 15 桁までです。 1E-4 以下、1E7 以上の数値は E 形式で登録されます。 E 形式 (指数) 入力で指数部分が-3 から 6 の整数の場合には、小数点表記で登録されます。 指数部分が小数の場合には、指数部分が整数となるよう自動計算され、有効数字 4 桁で登録されます。 (例) 1.231E-10.56 と入力して Enter キーを押すと、3.390E -11 と計算されます。

⑦ コンディション(Condition)

特性値についての測定条件など特記事項を記述します。計 100 字 (bite) まで入力できます。

⑧ 表データファイル名 (Image Name)

図示可能な表形式のテキストデータを、この欄で入力できます。図示可能な特性は、熱膨張曲線(α -T 曲線)、UV~IR 透過スペクトル、



UV~IR 吸収スペクトル、UV~IR 反射スペクトル、放射スペクトルの 5 種類です。Specified 欄(水色)をダブルクリックし、上記の内の一特性を選択すると、その行の Image Name 欄が水色に変わります。次に、この水色欄をダブルクリックすると、[Data Input: Figure Data] 小画面(上図)が現れます。この小画面の指定欄に図のタイトル、X 軸のラベル名と最小値・最大値、Y 軸のラベル名と最小値・最大値、およびデータを入力します。予め別途記載(「第6章3. 表データ」)の形式で作成したデータを、Open CSV File ボタンをクリックして取り込むことも可能です。このデータは、データ登録後、詳細画面の Figure ボタンで図として表示されます。

参考:特性の温度範囲は、各温度域の±20℃の範囲のデータを含みます。

例)100℃の密度は、80℃ \sim 120℃の範囲のいずれかの温度での密度を意味します。 但し、100℃ではない場合は、その温度を condition 欄に記入しておきます。

参考:単位・特殊文字等の入力ルールは以下のとおりです。

- a) コード系により表現できないギリシャ文字: $\alpha \to A$ 、 $\beta \to B$ 、 $\gamma \to G$ 、 $\epsilon \to E$ 、 $\lambda \to L$ 、 $\chi \to X$
- b) コード系により表現できないローマ数字: $I \rightarrow 1$ 、 $II \rightarrow 2$ 、 $II \rightarrow 3$
- c) 下付き文字、上付き文字: $A \rightarrow A$ 、 $C \rightarrow C$ 、 $SiO_2 \rightarrow SiO_2$

(C) その他の機能

① Copy Data ボタン

入力済みの既存データの内容をコピーして新規ガラスデータを作成する場合に使用します。新 Glass ID を設定したデータ入力画面で Copy Data ボタンをクリックすると、Copy Data ダイアログが開きます。コピーする Glass ID を入力して OK ボタンをクリックすると、そのガラスのデータが赤字で現れます。組成については、成分名、Main Unit の成分比率が Ratio 欄に、また Input Ratio 欄の成分比率が現れます。データの修正を行うと、修正した文字色が赤色から黒色に変わり、Save ボタンをクリックするとすべての文字色が黒色に変わります。

② Save ボタン

入力した情報を確定保存します。

③ Reset ボタン

画面の入力データがクリアされて初期状態に戻ります。Save ボタンをクリックする前であれば有効です。 新規レコードは Glass ID 以外の全項目がクリアされ、コピーされたレコードは、コピー前の状態に戻されます。

④ Lot No.ボタン

別のロットに移る場合に使用します。

⑤ メニューバーの Tools のプルダウンメニュー中の Show/ Hyde Typical Property

登録データ中に代表値の設定のある特性がある場合、データ入力後に Hyde Typical Property をクリックし(プルダウンメニューが Show Typical Property となっている場合はそのまま)、Save ボタンをクリック、あるいは前へ/ 次へボタンをクリックします。現われる Check of Registration ダイアログ (Data will be updated. OK?) の YES ボタンをクリックした後、このガラスの入力画面に戻ると、リスト中に特性 (Typical)の行は表示されません。特性(Typical)の行を表示したい場合には、Show Typical Property をクリックした後に(プルダウンメニューが Hyde Typical Property となっている場合はそのまま)Save ボタンあるいは前へ/ 次へボタンをクリックします。一旦保存したデータの場合、本設定は前へ/ 次へボタン等で他の Glass ID に移行し、再度表示した場合に反映されます。

⑥ **【レコード移動 前へ** (Previous Record) ボタン

表示中のレコードから、同じロット内の前のレコードに移動します。ロットを超えた移動はできません。

⑦ ▶ レコード移動 次へ(Next Record)ボタン

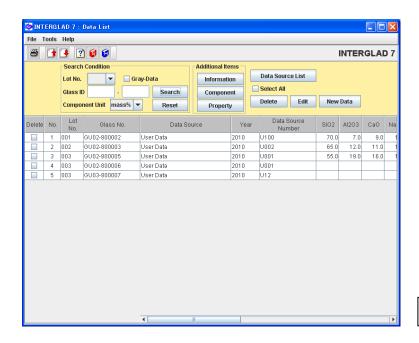
表示中のレコードから、同じロット内の次のレコードに移動します。ロットを超えた移動はできません。 表示中のレコードが最新レコードの場合、新規レコードを準備します。

6. 3 データリスト (Data List) 画面

入力されたガラスデータについて一覧表示を行います。

入力されたガラスデータを基に行う「新規ガラスデータの一括入力を補助する機能」も備えています。入力データの削除も行うことができます。

(1) 画面



データリスト画面

(2) 詳細説明

(A) 検索条件 (Search Condition)

次の①~④の検索条件を指定し実行すると、入力済みのデータを一覧表示します。

- ① ロット番号(Lot No.)プルダウンメニュー
 - 入力済みのロット番号から選択します。
- ② ガラス ID(Glass ID) 開始ガラス ID~終了ガラス ID6 桁で指定します(例. 800001)。2つの欄の一方だけを指定した場合は、1 ガラスのみが検索されます。
- ③ 成分単位(Component Unit)プルダウンメニュー

mass%、mol%、at%、Input Ratio から選択します。単位を変える場合には、単位をプルダウンメニューで選択した後、Search ボタンをクリックします。

④ 検索(Search)ボタン

Search Condition 欄に指定した条件で検索処理を実行します。

⑤ リセット(Reset)ボタン

Search Condition に指定した条件を初期状態に戻します。検索結果リストは戻りません。

(B) データリスト (Data List)

データリストには、リスト中の通し No.、Lot No.、Glass No.、出典、出典年、出典 No.、検索したガラスの成分、特性が現れます。

① 成分(Component)

検索結果に含まれるガラス組成が10成分まで表示されます。Componentボタンで項目を追加すれば、合計で最大39成分(異種酸化物の場合、19酸化物)まで表示できます。

② 特性(Property)

検索結果に含まれるガラス特性が 10 項目まで表示されます。 ラベルの 2 行目は単位です。Property ボタンで項目を追加すれば、合計で最大 199 特性まで表示できます。特性値は有効数字 11 桁までが表示

されます。

③ 削除(Delete)チェックボックス

オンにすると、そのガラスが削除対象として指定されます。

(C) 項目追加機能 (Additional Items)

検索実行後にリスト上に表示される項目は限られているため、以下の各ボタンで表示項目を追加できます。

① 情報 (Information)ボタン

ボタンをクリックすると表示される情報選択(Select Information)小画面の左端のチェックボックスをオン/オフすることにより、ガラスの状態(State)等の情報の表示/非表示を切替えます。Select All ボタンは全項目オン、Clear All ボタンは全項目オフです。

追加できる項目は次の通りです。

ガラスの状態(State)、出典(Data Source)、出典年(Data Source Year)、出典番号(Data Source Number)、著者(Author)、ガラス汎用名(Glass System)、外観・特徴・製法(Shape,Feature& Process)、用途(Usage)、ブルゲル原料(Sol-Gel Material)、熱処理条件(Heat Treatment)、 ノート(Note)。

② 成分(Component)ボタン

ボタンをクリックすると表示される成分選択(Select Component)小画面から成分を選択して、成分の列を追加します。選択は小画面の左端のチェックボックスをチェック(オン)し、OK ボタンをクリックします。 Select All ボタンは全項目オン、Clear All ボタンは全項目オフ、Expand All は全項目展開、Collapse All は全項目展開の閉です。項目の削除は、チェックボックスのチェックをはずし、OK ボタンをクリックします。

③ 特性(Property)ボタン

ボタンをクリックすると表示される小画面から特性項目を選択して、特性の列を追加します。追加小画面上で使用する特性単位系を選ぶこともできます。項目の削除は、該当項目の数値セルのいずれかをクリックした後、キーボードの Delete キーを押します。

(D) ガラスデータ削除機能

① 削除(Delete)ボタン

リストの削除(Delete)チェックボックスがオンのガラスデータをリストから削除します。削除ボタンのすぐ上の全選択(Select All)チェックボックスをクリックすると、リストの全ガラスの削除チェックボックスがオンになり、一度に全てのガラスを削除できます。一旦削除するとデータの回復はできません。リストの削除チェックボックスは、Select All チェックボックスを一旦オンにした後、オフにすると、全チェックボックスがオフとなります。

② 出典リスト(Data Source List)ボタン

登録されているガラスの出典データが出典リスト(Data Source List)小画面で表示され、データのない不要な出典データ(最右欄が0)を削除することができます。

(E) 編集への移行

更新(Edit)ボタン

リスト上で1ガラス (1行) を選択状態(背景色が水色状態)にしてから、このボタンをクリックすると、選択したガラスのデータ入力画面に移行します。選択したガラスデータの全情報を確認でき、更新できます。

② 新データ (New Data)ボタン

このボタンにより新データ入力画面に移行します。入力画面の Glass ID は最大登録 No.の次の No.となります。

(F) ガラスデータの一括入力機能

多数のガラスデータの一括入力を CSV ファイルより行うことができます。但し、この方法では全項目に わたる入力はできません。一括入力できない項目はデータリスト画面に現われない Operator、Gold Data、 Character、User Glass、Operator's Memo、Memo、特性の Condition です。一括入力後、データ入力画面の Character はデフォルトの Batch となり(モデルデータの Character は元のまま)、Memo は Data Source が同じ場合、モデルデータの記載と同じ、他は無記入となります。Author は 10 人までカンマで区切って入力することができます(カンマも入れて計 150 字(bite)まで)。この場合、入力画面では 1 行に 1

人が表示されます。成分は 39 項目まで、特性は 199 項目まで入力できます。一括入力後に必要により各データ入力画面で、不足した情報を補充あるいは修正し、確定(Save)処理を行います。

<作業の手順>

① モデルデータの入力

モデルとなるガラスデータをデータ入力(Data Input)画面で予め入力し登録しておきます。

② リスト表示

データリスト画面で、検索条件にそのガラスの ID をインプットして検索し、ガラスリスト上に表示します。一括入力する際の成分単位を Component Unit で選択し、Search ボタンをクリックし、リストの成分数値を変更します。

③ 項目の追加

項目追加機能を使って、一括入力したい項目を追加し、また代表値(Typical)等必要のない項目を削除し、項目を整えます。代表値の削除は、特性項目選択小画面で項目左のチェックをはずし、OK ボタンをクリックします。

④ CSV ファイルの作成

リスト表示された情報をエクスポートします。画面上部のエクスポートアイコン L をクリックする と、Save ダイアログボックスが開きます。ここにファイル名を入力し、保存フォルダを選択して Save ボタンをクリックします。ファイル名の初期値は userdata.csv で、ファイルタイプは CSV (comma-separated values) ファイルです。保存場所は、利用者が環境設定 Preference 小画面の Default Folder で指定しておきます。指定せずにその都度指定しても問題ありません。

⑤ 表計算ソフトの起動

表計算ソフト(例:マイクロソフト エクセル)を起動し、④で作成した CSV ファイルを開きます。

TJ_GLA	SS TJ_GLASSINF	TJ_GLASSINFO.[TJ_GLASS	TJ_GLASSINFO	TJ_COM	TJ_COI	TJ_CC	TJ_COI	TJ_PROPE	TJ_PROPI	TJ_PROPI	ERTY.PROF	P_FIG 20	17 01
Lot No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source No	SiO2	Al2O3	CaO	Na2O	Density at	Expansion	Refract Index 587.6nm d			
	2 GU02-800003	900 User Data	2010	U002	65	12	11	12	2.45	7.54	1.52			

⑥ データの入力

表計算シートの4行目以降に、登録する新規ガラスデータを入力します。3列目の出典(Data Source)欄は入力する4行目以降も3行目と同じ (900<!>User Data)とします。Usage など ID がある項目は ID No.<!> (例:210<!>) とします。モデルデータにない項目の追加はできません。入力が終了したら、ファイルを保存し、表計算ソフトを終了します。成分値は小数点以下2桁まで、特性値は有効数字11桁まで入力できます。

⑦ CSV ファイルのインポート

- ・データリスト画面でインポートアイコン をクリックします。
- ・開く(File Open)小画面で、編集保存したファイルを選択し、開く(Open)ボタンをクリックします。
- ・内容がチェックされ、Import Result 小画面(下図)で、全処理件数/成功件数/失敗件数が表示されます。



・OK ボタンをクリックすると、リスト画面上にインポートに成功 したガラスデータの内容が表示されます。(処理を中止するには、表示中のデータをすべて削除する必要があります。Select All チェックボックスをオンにして Delete ボタンをクリックします)

图 更新·確定処理

・Question ダイアログ(Register imported data?)が表示されます。リストのデータを一括して確定処理す

る場合には、OK ボタンをクリックし、続いて表示される Information ダイアログ(Processing completed)の OK ボタンをクリックします。この操作により、組成成分の 100%への按分処理および代表値の登録が行われます。代表値がある特性を含む場合にはリストに代表値が現われます。





• 1 件ずつ確定処理を行う場合には、上記の Question ダイアログで Cancel ボタンをクリックし、続いて 現われる Warning ダイアログ(Register imported data using EDIT button)の OK ボタンをクリックし ます。その後、以下の操作を行います。



- ・追加したガラスデータの1件目を選択しEditボタンをクリックします。
- ・データ入力画面に選択したガラスデータが表示されるので、データ内容を確認し、不足した情報を補完します。(F)冒頭の記載参照。
- ・Save ボタンをクリックします。これでデータが確定されます。この際に、一括処理の場合と同様に、成分の 100%への按分計算が行われ、代表値データも登録されます。
- ・後続のガラスについてもこの操作を件数分、繰り返します。1件ずつの確定処理を選択した場合には、 データを補完しない場合にも上記の操作が必須です。
- ・なお、一括確定処理を行った場合にも、必要なガラスにつき、Edit ボタンにより同様にデータ追加・修正を行うことができます。

6. 4 ロットデータ操作(Lot Data Operation)小画面

この画面で、ガラスデータのグループであるロットを単位に、INTERGLAD ユーザーデータベースよりのデータバックアップ(退避保存)、ユーザーデータベースへのデータリカバリー(復旧)、ユーザーデータベースからのデータ削除を実行できます。

(1) 詳細説明

(A) モード(Mode) プルダウンメニュー

操作モードを以下から選びます。

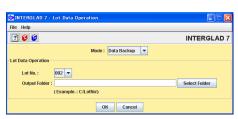
- ① データバックアップ (退避保存)
- ② データリカバリー (復旧)
- ③ データ削除

(B) 各操作

① データバックアップ(退避保存)

- ・Lot No.プルダウンメニューで、バックアップするロット番号 を選択します。Preference で選択した mdb ファイルが対象と なります。
- · Select Folder ボタンをクリックし、保存小画面の既存の

①データバックアップ(退避保存)



フォルダー覧からバックアップ先を選択し、保存ボタンを クリックします。

- ·OK ボタンをクリックします。
- ・INFORMATION ダイアログで「Processing completed」 が表示されたら、OK ボタンをクリックします。

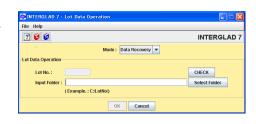
② データリカバリー(復旧)

- ・Select Folder ボタンをクリックすると、[開く]小画面に 既存のフォルダ一覧が表示されます。フォルダーを開いていき、 リカバリーするフォルダ(例:001)を選択し、[開く]ボタンを クリックします。
- ・Input Folder にバックアップフォルダ名が表示されるので、 Check ボタンをクリックすると、Lot No.にロット番号が 表示されます。
- ·OK ボタンをクリックします。
- ・システム内に同じロット番号がある場合は、Question ダイアログ「Data will be overwritten by input data」が表示されます。Preference で選択している mdb ファイルに登録されることに注意します。Yes ボタンをクリックすると、処理を実行します。
- ・INFORMATION ダイアログで「Processing completed」が表示 されたら、OK ボタンをクリックします。

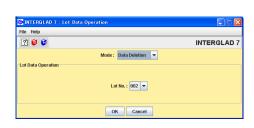
③ データ削除

- ・削除するロット番号を Lot No.プルダウンメニューから選択し、 OK ボタンをクリックします。
- ・Question ダイアログ「Deleted data are unable to recover. OK?」の表示が出ます。Yes ボタンをクリックすると、 処理を実行します。
- ・INFORMATION ダイアログで「Processing completed」が 表示されたら、OK ボタンをクリックします。

②データリカバリー (復旧)



③データ削除



6. 5 ユーザー定義 ID (User Defined ID) 画面

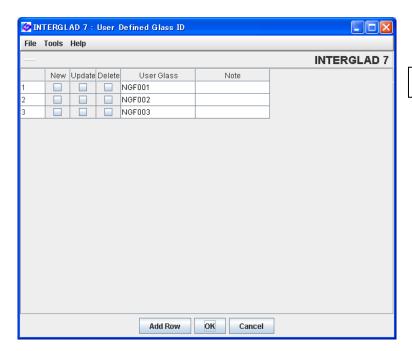
ユーザーが自由に定義するガラス ID および特性 ID を登録できる画面です。ユーザー定義ガラス ID および特性 ID を設定して登録したデータは特性検索に使用できます。三角図などの解析および特性予測・組成最適化には使用できません。

(1)画面

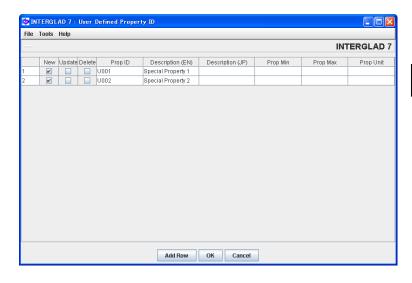
メイン画面のユーザー定義 ID(User Defined ID)ボタンをクリックすると、ユーザー定義 ID 画面が開き、さらにユーザー定義ガラス画面あるいはユーザー定義特性画面を開くことができます。



ユーザー定義ID小画面



ユーザー定義ガラス ID 小画面



ユーザー定義特性画面

(2) 詳細説明

(A) ユーザー定義ガラス画面

User 定義ガラス(User Glass)を登録・修正・削除します。

- ・User Defined Glass ID ボタンをクリックするとユーザー定義ガラス画面が表示されます。
- ・画面下の Add Row ボタンをクリックすると新しい行が追加されます。
- ・User Glass 欄に名称(ID)を英数半角 25 字以内で入力します。
- ・New にチェックを入れて OK ボタンをクリックします。
- ・INFORMATION ダイアログで「Processing completed」が表示されたら、OK ボタンをクリックします。
- ・名称を修正したいときは Update にチェック、削除したいときは Delete にチェックを入れて OK ボタンを クリックします。
- ・登録されたユーザーガラス名は、6.2 データ入力画面の User Glass 欄および 2.2 特性検索画面の Commercial(User)Glass 欄よりの Select Commercial and User Glass 小画面の User Glass リストに表示され、入力項目および特性検索条件として設定できます。

(B) ユーザー定義特性画面

- ユーザー定義特性(User Property)を登録・修正・削除します。
- ・User Defined Property ID ボタンをクリックするとユーザー定義特性画面が表示されます。
- ・画面下のAdd Row ボタンをクリックすると新しい行が追加されます。
- Prop ID 欄に U001 のように「U+数字 3 桁」を入力し、Description(EN)欄に名称を英数半角 40 字以内で入力します。
- ・必要に応じて、Description(JP)欄に日本語の名称、Prop. Min 欄に最小値、Prop. Max 欄に最大値、Prop. Unit 欄に単位を入力します。なお、最大値、最小値はデータ入力画面および特性検索画面でのデータ入力 および検索条件の設定には反映されません。
- ・New にチェックを入れて OK ボタンをクリックします。
- ・INFORMATION ダイアログで「Processing completed」が表示されたら、OK ボタンをクリックします。
- ・名称等を修正したいときは Update にチェック、削除したいときは Delete にチェックを入れて OK ボタン をクリックします。
- ・登録されたユーザー定義特性は、6.2 データ入力画面、2.2 特性検索画面あるいは 4.2 重回帰分析検索画面で、Select Properties 小画面の末尾に現われる User Property リストに表示され、特性項目として設定でき、特性検索結果画面および重回帰分析検索結果画面にデータが表示され、三角図、XY プロット、元素分析による解析および重回帰分析に利用できます。登録したユーザー定義特性を入力画面に呼び出す場合には、INTERGLAD を一度閉じ、再度開く必要があります。なお、検索画面に呼び出す場合には、INTERGLAD を一度閉じる必要はありません。