

INTERGLAD 利用例

本項には、特性データの検索、解析、特性予測および材料設計（組成最適化）、また構造データの検索、解析の基本的な利用例を示します。

特性データの検索と解析

1. 複雑な組成条件による検索 — リン酸塩ガラスの熱膨張係数
2. 特性の三角関解析 — $\text{SiO}_2\text{-Na}_2\text{O-TiO}_2$ 系ガラスの熱膨張係数
3. 特性間の相関の XY プロット解析 — 屈折率とアッベ数
4. 高温特性補間機能を活用した検索 — ホウケイ酸塩ガラスの高温粘度
5. 商品検索 — FRP 用高強度ガラス繊維

特性予測（特性計算式）

6. 特定組成のガラスの特性予測 — ホウケイ酸塩ガラス

特性予測・組成最適化（重回帰分析）

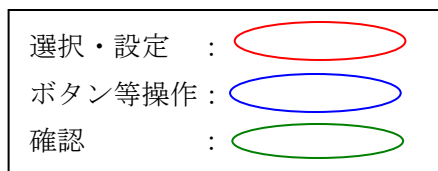
7. 特性についての予測式の導出 — 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度
8. 特性予測 — 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度
9. 組成最適化 — 特定密度の亜鉛ケイ酸塩ガラス
10. 組成最適化（自動計算） — 特定密度の亜鉛ケイ酸塩ガラス
11. 特性予測 — アルカリ土類ケイ酸塩ガラスのヤング率
12. 特性予測（3次式） — ホウケイ酸塩ガラスの密度

構造データの検索と解析

13. 組成と構造と相関調査 — SiO_2 量と架橋酸素の割合
14. 構造因子間の相関調査 — アルカリケイ酸塩ガラスの Q^2 と非架橋酸素割合

本項の記載方法について

- 1) 各画面で操作等が必要な箇所に下記の色別の囲みマークを記しています。



- 2) 操作方法の詳細については、各項目の冒頭に記したユーザーズマニュアル参照箇所に記載されています。
- 3) 検索結果のデータ件数およびデータ内容は INTERGLAD のバージョン（システム、特性データ、構造データ）により変わりますので、参考値、参考内容となります。

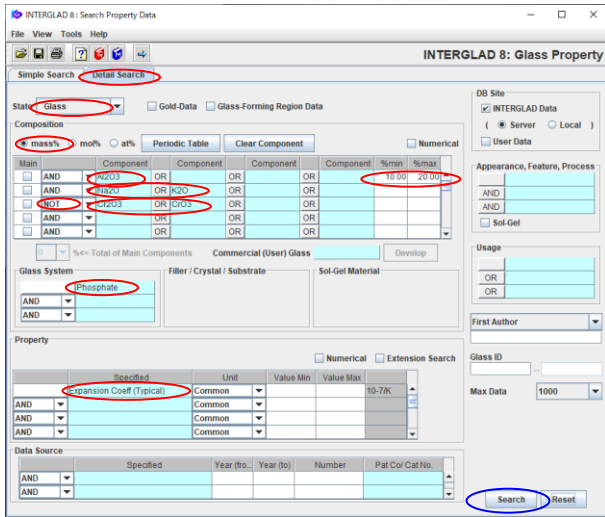
（本例では Ver.8.2.0.2、GP_42_2020.mdb、GS_37_2020.mdb を使用しています）

特性データの検索と解析

1. 複雑な組成条件による検索 — リン酸塩ガラスの熱膨張係数

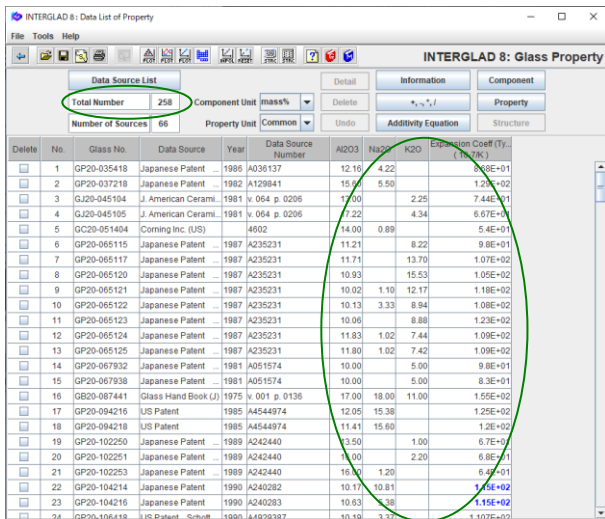
リン酸塩ガラスで Al_2O_3 を 10-20 mass% 含み、 Na_2O あるいは K_2O を含み、Cr の酸化物を含まない組成の線熱膨張係数データを検索します <マニュアル第3章B、第4章2参照>

1) 検索条件設定 (特性(詳細)検索画面) → 検索実施



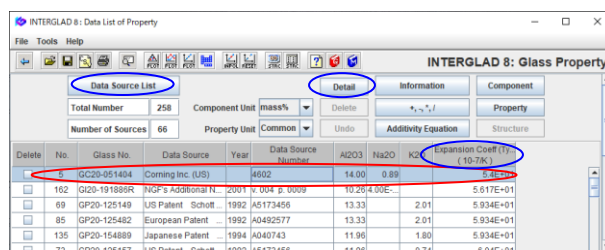
- Main 画面で[Search Property Data]ボタンをクリックして特性検索画面を開き、検索条件を設定します。
- 単位のデフォルトが mol% のため、mass% を選択します。
- Na_2O 、 K_2O は同一行に設定します。この場合、周期表で同時には設定できません。
- Cr_2O_3 、 CrO_3 は周期表での Cr 選択で一度に設定できます。
- 検索条件設定の順序は自由です。
- 検索条件が複雑になるほど検索に時間がかかります。

2) 検索結果 (特性検索結果画面)



- 検索ガラス数(Total Number)、本例では 258 件に注目します。
- 検索条件に設定した組成成分、特性データ他の表が表示されます。

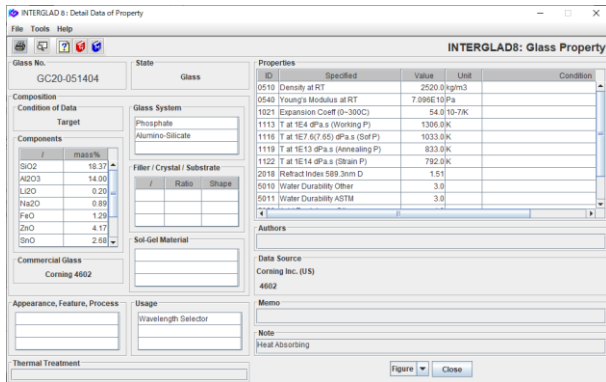
3) 検索結果の利用



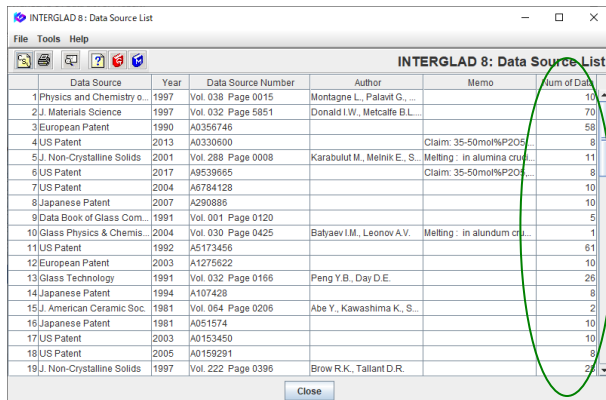
- 各項目毎にソート(並び替え)が可能です。
[Shift] キーを押しながら表の項目ラベルをクリックします。
- 本例では熱膨張係数で昇順にソートし、熱膨張係数が最小のガラスを選択し(その行をクリックして背景水

色とし)、[Detail]ボタンをクリックし、詳細データを調べます。

特性詳細画面



出典リスト画面



- また、検索結果画面より [Data Source List] ボタンをクリックし、出典リスト画面を開き、各出典毎のガラス数をチェックします。
- [Num of Data] 欄が各出典毎のガラス数です。

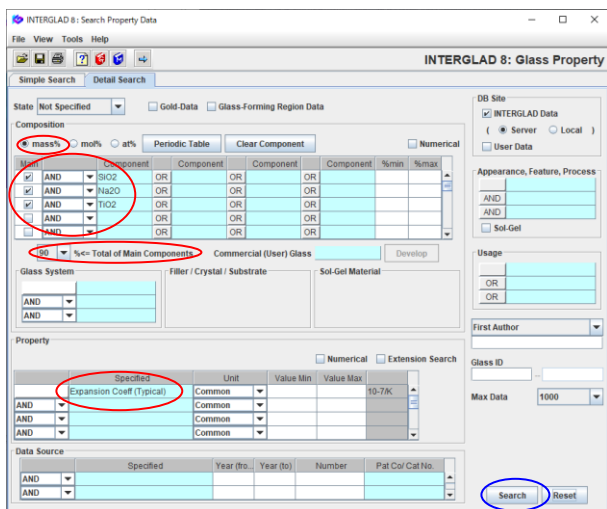
- 必要に応じて三角図、XYプロットなどの解析を行います。

2. 特性の三角図解析 – SiO₂-Na₂O-TiO₂系ガラスの熱膨張係数

SiO₂-Na₂O-TiO₂を主成分とするガラスについて、組成と熱膨張係数との関係を調べます

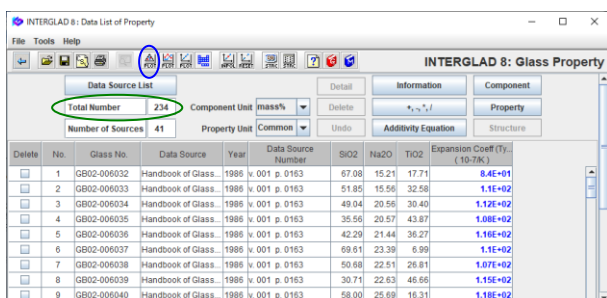
<マニュアル第3章B、C.1、第4章2、3.1参照>

1) 検索条件設定 (特性(詳細)検索画面) → 検索実施



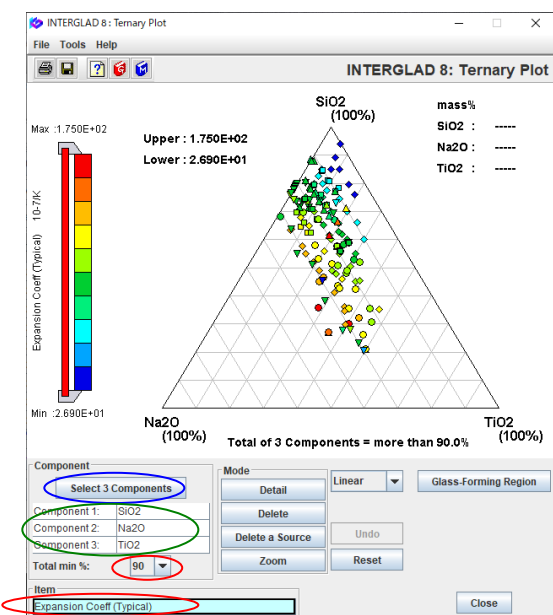
- 成分単位として mass% を選択します。
- 3成分合計を 90 mass% 以上に設定します。
- 熱膨張係数はデータが集まりやすい Expansion Coeff (Typical) を選択します。

2) 検索結果 (特性検索結果画面)

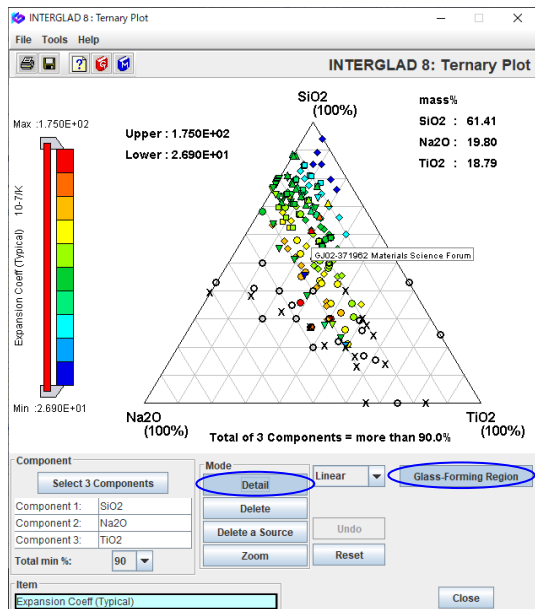


- 234件が抽出されます。
- 三角図アイコンをクリックし、三角図画面を開きます。

3) 三角図表示



- 三角図画面で、[Select 3 Component] ボタンをクリックし、SiO₂、Na₂O、TiO₂の3成分を選択し、合計量として90%、表示項目として Expansion Coeff (Typical) を選択します。
- 各プロット点の色により熱膨張係数の高低が一覧でき、三角図の中央付近の組成のガラス (赤色) が最も熱膨張係数が高く、右上方向に行く (SiO₂ 100% に近づく) ほど低くなる傾向があることがわかります。



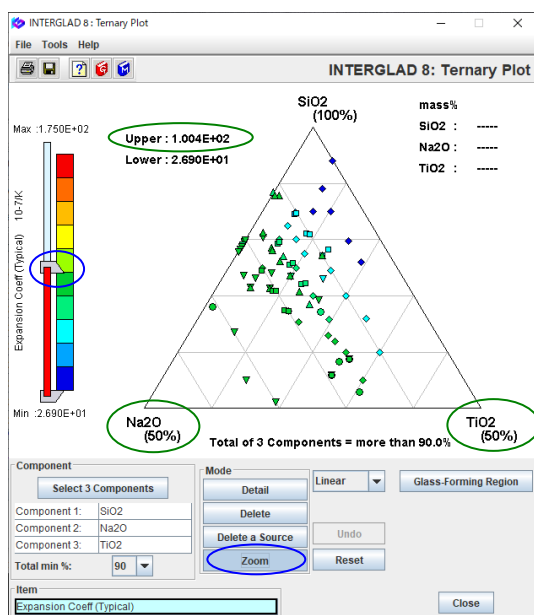
- 各点の出典は、各点にマウスを当てると吹き出しに現われます。また、各点の詳細画面は[Detail]ボタンをクリックしてボタンをアクティブにした上で、各点をクリックすることにより開き内容を確認することができます。

- [Glass-Forming Region]ボタンをクリックすることによりガラス化範囲データを表示することができます。

- ガラス化範囲データの○はガラス化する組成、×はガラス化しない組成です。このガラス化範囲データはあくまでも3成分の和が100%の場合のデータであるため、3成分の和が90%以上としてプロットされたこの例の場合、ガラス化範囲データに当てはまらないデータもあるかもしれません。

- なお、各点の組成がガラス化しているかどうかは詳細画面のStateで確認できます。

- また、ガラス化範囲データの各点の出典もプロット点と同様に[Detail]ボタンを使って確認することができます。



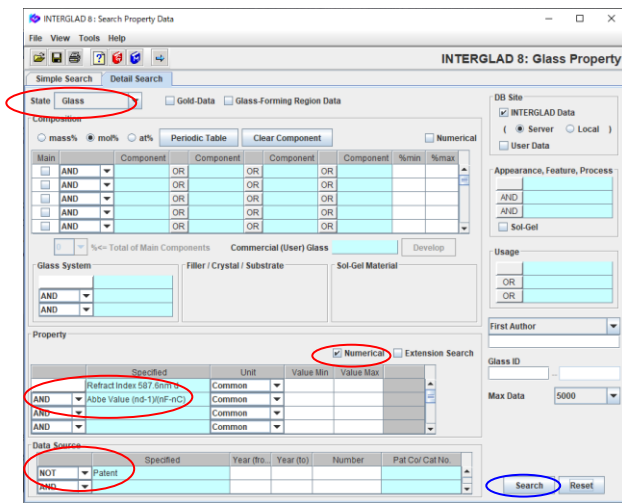
- また、画面左のスライダーを動かすことにより、三角図中の点の特性値範囲を変えることができます。左図の例は熱膨張係数を $100.4 \times 10^{-7}/K$ 以下のみとし、さらに[Zoom]ボタンにより SiO₂(100%)、Na₂O(50%)、TiO₂(50%)の三角図としたものです。

3. 特性間の相関のXYプロット解析 – 屈折率とアッペ数

ガラスの屈折率とアッペ数の関係を調査します

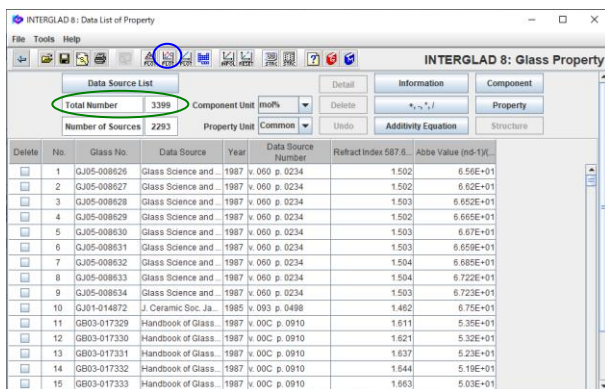
<マニュアル第3章B、C.2、第4章2、3.2参照>

1) 検索条件設定 (特性(詳細)検索画面) → 検索実施



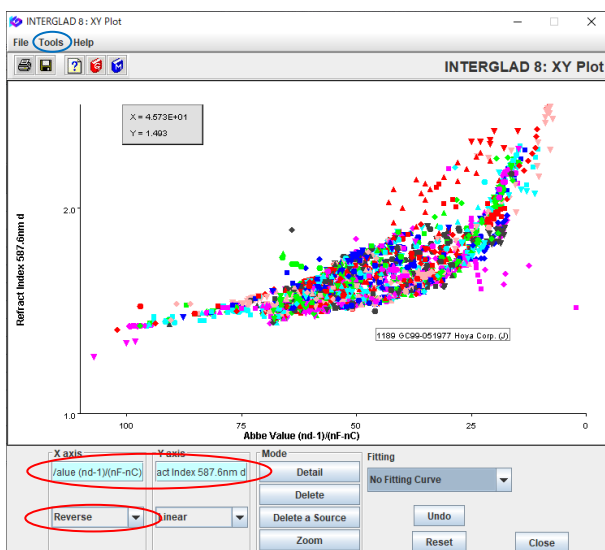
- ガラス状態として Glass を選択します。
- ガラスの屈折率には色々な波長の光によるデータがありますが、この例では代表的な He の d 線(587.6nm)のデータを抽出します。
- アッペ数の種類も複数ありますが、d 線の屈折率 n_d に対応した $(n_d-1)/(n_F-n_C)$ を選択します。
- 特性数値データのみを選択する [Numerical] チェックボックスにチェックを入れます。
- 出典としては、Patent を除きます。
- データ抽出数が多いと思われるため、Max Data を 5000 とします。

2) 検索結果 (特性検索結果画面)



- 3399 件のデータが抽出されます。

3) XYプロット解析



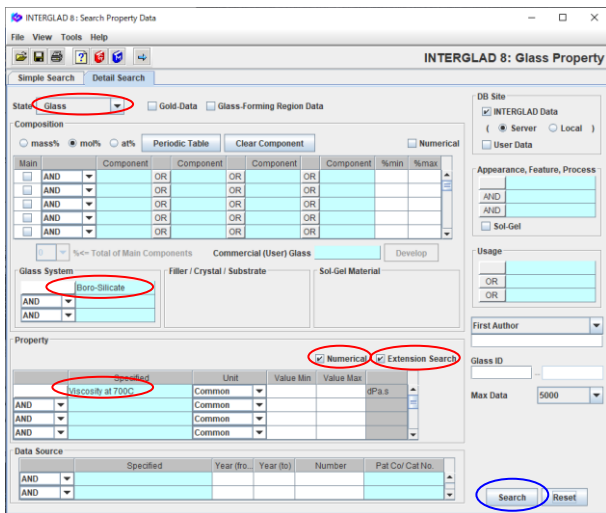
- [XY Plot]アイコンより XYプロットを作成し、3399 件の抽出されたガラスのアッペ数 $(n_d-1)/(n_F-n_C)$ と屈折率 n_d の分布を一覧できます。
- 本図では X 軸のアッペ数について、スケールをプルダウンメニューにより倒置形(Reverse)(左の方の数値が大きい)としています。また、Tools/Option(Axis)より、横軸、縦軸の範囲、軸表示をわかりやすいよう変換しています。

4. 高温特性補間機能を利用した検索 — ホウケイ酸塩ガラスの高温粘度

ホウケイ酸塩ガラスについて、700°Cの粘度データを検索します

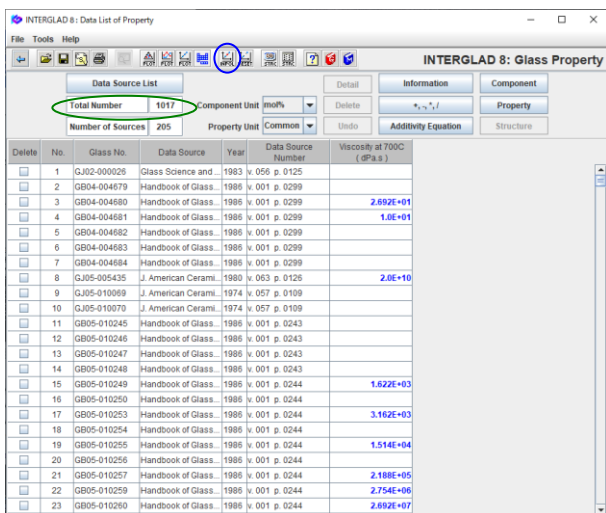
<マニュアル第3章B、C.3、第4章2、3.3参照>

1) 検索条件設定（特性(詳細)検索画面） → 検索実施



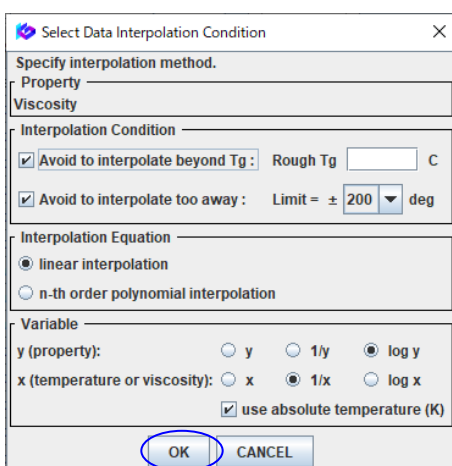
- ・ガラス状態は Glass とし、組成はガラス系の Boro-Silicate のみの選択とします。
- ・特性については、Viscosity at 700°C と設定し、数値 [Numerical] および拡張検索 [Extension Search] チェックボックスにチェックを入れます。

2) 検索結果（特性検索結果画面）



- ・検索結果として、高温粘度の数値データが登録されているすべての Boro-Silicate ガラスがリストアップされます。1017件。
- ・なお、特性中分類の Viscosity(100-1000°C) (太字) を選択することでも 700°C の粘度データを含む検索が可能となります。この場合、100~1000°C の広い温度範囲の検索となります。
- ・この場合には、100-1000°C の粘度の数値データが1つ以上登録されたガラスがすべてリストアップされます。551件。

3) データ補間

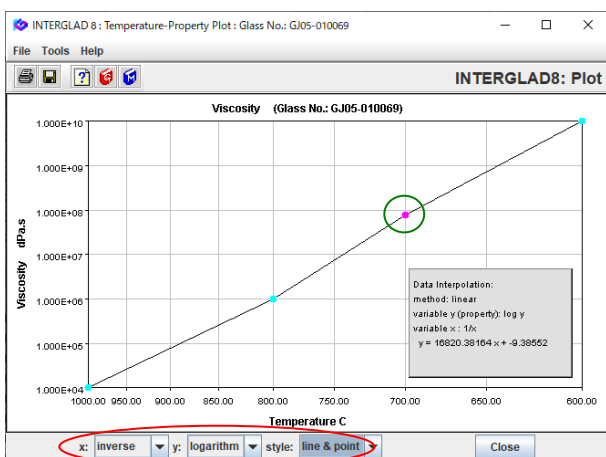


- ・データ補間 [INPOL] アイコンより開かれるデータ補間条件設定画面で、補間条件を設定します。本例ではデフォルト条件のままとし、[OK] ボタンをクリックします。

No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Viscosity at 700C (dPa.s)
1	GJ02-000026	Glass Science and	1983	v. 056 p. 0125	
2	GB04-004679	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0299	
3	GB04-004680	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0299	2.692E+01
4	GB04-004681	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0299	1.0E+01
5	GB04-004682	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0299	
6	GB04-004683	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0299	1.167E+03
7	GB04-004684	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0299	
8	GJ05-005435	J. American Ceram.	1980	v. 063 p. 0125	2.0E+10
9	GJ05-010069	J. American Ceram.	1974	v. 057 p. 0109	7.873E+07
10	GJ05-010070	J. American Ceram.	1974	v. 057 p. 0109	7.311E+09
11	GB05-010245	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0243	
12	GB05-010246	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0243	
13	GB05-010247	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0243	
14	GB05-010248	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0243	
15	GB05-010249	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0244	1.622E+03
16	GB05-010250	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0244	1.809E+03
17	GB05-010251	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0244	3.162E+03
18	GB05-010252	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0244	
19	GB05-010253	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0244	1.514E+04
20	GB05-010254	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0244	
21	GB05-010255	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0244	2.188E+05
22	GB05-010256	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0244	2.754E+06
23	GB05-010260	Handbook of Glass	1986	v. 001 p. 0244	2.692E+07

- ・内挿あるいは外挿により補間計算された 700°Cのデータが検索結果画面の表にピンク色の文字で表示されます。
- ・補間データが現れないガラスは、データが一つしかないか、補間条件のデフォルト条件である 700±200°Cの範囲に補間の元となるデータが一つもないことにより、補間計算ができないガラスです。
- ・Viscosity(100-1000°C)で検索した場合には、700°C以外の温度についても補間計算がされます。
- ・補間計算した結果はファイル保存アイコンのクリックにより使用パソコンに保存できます(スタンダード版、CDフル機能版の場合に可能、インターネット版では不可)。

4) 温度-特性プロット



- ・検索結果画面で一つのガラスを選択し、温度-特性プロット(右の PLOT)アイコンをクリックすると、温度-特性プロットが表示されます。
- ・この XY プロットでは、補間データはピンク色の点で現れます。プロット点のスタイル、軸形式も図下部のプルダウンメニューの指定により変えられます。
- ・粘度の場合、温度(X軸)は温度°Cの逆数(1/x)、粘度(Y軸)は対数(logy)スケールがデフォルトとなっています。なお、デフォルト補間条件の場合、補間は温度を絶対温度の逆数として計算します(左図)。

5. 商品検索 — FRP 用高強度ガラス繊維

FRP 用の高強度ガラス繊維の市販名とそのガラスの詳細調査を行います

<マニュアル第3章B、第4章2参照>

1) 検索条件設定(特性(詳細)検索画面) → 検索実施

INTERGLAD 8: Search Property Data

Appearance, Feature, Process: Fiber

Usage: Plastics, FRP

Data Source: Catalogue

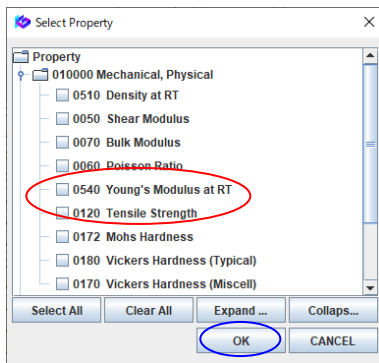
Search

- ・外観・特徴・製法欄で Appearance/Shape/Linear と展開し、Fiber を選択します。あるいは Keyword に Fiber と入力し、選択します。
- ・用途欄で Material を展開し、Plastics, FRP を選択します。あるいは Keyword に FRP と入力し、選択します。
- ・出典欄で Catalogue を選択します。

2) 検索結果 (特性検索結果画面)

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Young's Modulus at RT (GPa)	Tensile Strength (MPa)
<input type="checkbox"/>	10	GC06-052346	Nitto Boseki (J)		NITTOBO-T-GLASS	4.812E+02	4.812E+02
<input type="checkbox"/>	4	GC06-052225	Owens Corning (US)	1989	S-Glass	8.55E+01	4.585E+03
<input type="checkbox"/>	3	GC03-052224	Owens Corning (US)	1989	E-Glass	7.33E+01	1.745E+03
<input type="checkbox"/>	6	GC03-052349	Asahi Fiber Glass (J)		E-Glass	7.252E+01	3.43E+03
<input type="checkbox"/>	7	GC03-052250	Asahi Fiber Glass (J)		ECR-Glass	7.223E+01	3.43E+03
<input type="checkbox"/>	9	GC03-052344	Nitto Boseki (J)		NITTOBOE-GLASS		3.43E+03
<input type="checkbox"/>	5	GC03-052226	American Biomater. (US)	1989	C-Glass	6.89E+01	3.31E+03
<input type="checkbox"/>	12	GC03-052348	Nitto Boseki (J)		NITTOBOC-GLASS		3.087E+03
<input type="checkbox"/>	11	GC05-052348	Nitto Boseki (J)		NITTOBOB-GLASS		2.254E+03
<input type="checkbox"/>	8	GC05-052262	Central Glass (US)		E-GLASSFIBER	7.252E+01	1.96E+03
<input type="checkbox"/>	13	GC03-052753	PPG Industries (US)		FIBER GLASS		1.7E+03
<input type="checkbox"/>	2	GC03-052074	Nippon Sheet Glas. (J)		E-Glass	7.35E+01	1.47E+03
<input type="checkbox"/>	14	GC03-071205	Nippon Electric Gla. (J)	1989	EF	7.252E+01	1.47E+03
<input type="checkbox"/>	1	GC03-051554	Corning Inc. (US)		E-Glass	7.4E+01	
<input type="checkbox"/>	15	GC05-071206	Nippon Electric Gla. (J)	1989	D-40		
<input type="checkbox"/>	16	GC03-144895	Saint-Gobain (FR)	1983	032018		
<input type="checkbox"/>	17	GC06-144896	Saint-Gobain (FR)	1983	0320180		
<input type="checkbox"/>	18	GC06-144897	Saint-Gobain (FR)	1985	02509		

特性選択小画面



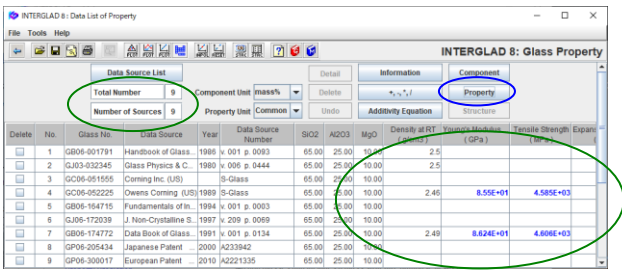
- 18件のガラスがリストアップされます。また出典欄よりこれらが10社のデータであることがわかります。
- [Property]ボタンをクリックして特性選択小画面を開きます。
- 特性項目より、高強度ガラス繊維として重要な引張強度 (Tensile Strength)とヤング率(Young's Modulus at RT)のチェックボックスにチェックを入れ選択し、これらのデータをリストに表示します。
- 引張強度でソートを行い、高低順に並べると、引張強度が高いガラスがどのようなものかがわかります (NITTOBO T-Glass、S-Glass等)。

3) 抽出ガラスの調査

Component	Component	Component	Component	Value Min	Value Max
AND	SiO2	OR	OR	65.00	65.00
AND	Al2O3	OR	OR	25.00	25.00
AND	Al2O	OR	OR	10.00	10.00

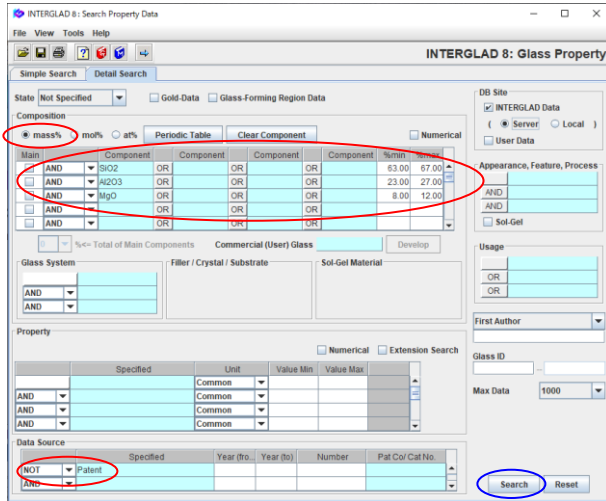
Property	Specified	Unit	Value Min	Value Max
AND		Common		
AND		Common		
AND		Common		

- 次に引張強度、ヤング率の高い S-Glass について詳しく調べます。
- 特性検索画面にもどり、[Reset]ボタンをクリックします。[Commercial(User)Glass]欄で S/ S-Glass を選択し、組成単位を mass%として組成展開[Develop]ボタンをクリックした後、検索を行います。この場合、出典欄は設定しません。
- 本例の場合、組成展開により成分の最大値、最小値が同じ値になりますが、これは S-Glass として登録されたガラス組成に幅がないためです。
- 検索結果画面に 9 ガラス(9 出典)が表示されます。組成展開をしないで検索すると 3 件のみの抽出となり、組成展開によりカタログデータ以外の雑誌等のデータも抽出されたことがわかります。

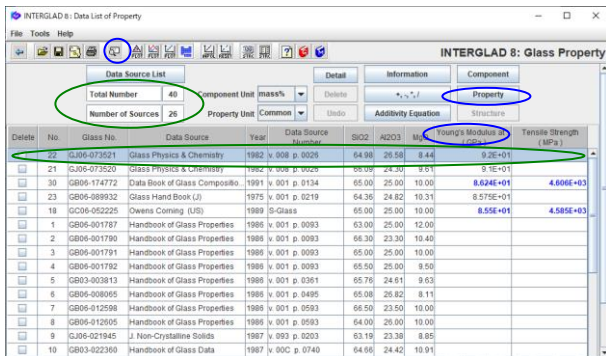


- この画面で[Property]ボタンより特性選択小画面を開き、[Select All]ボタンをクリックして[OK]ボタンをクリックすることにより、登録されているすべての特性データを表示することができます。

4) 周辺ガラスの調査

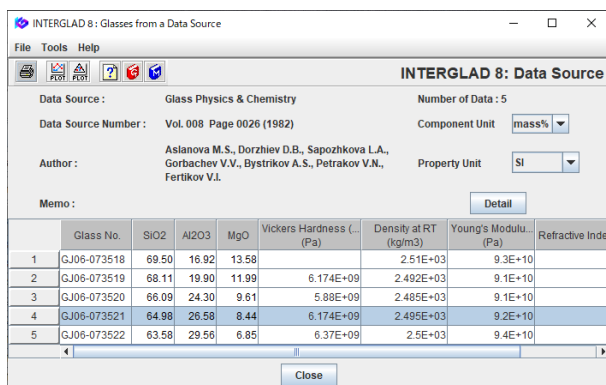


- さらに S-Glass の周辺のガラスに関する情報を集めます。
- 特性検索画面で S-Glass 組成成分のそれぞれ±2%の数値を最小値、最大値に設定します。
- [Commercial(User)Glass]欄の S-Glass を消去します。
- 出典欄を NOT Patent とします。



- 40 ガラス (26 出典) のデータが抽出されます。なお、出典に特許も含め、条件をつけない場合には 119 ガラス (57 出典) となります。
- 特性検索結果画面の [Property] ボタンより引張強度 (Tensile Strength) とヤング率 (Young's Modulus at RT) を表示し、ヤング率の値を高低順となるようソートします。これにより、S-Glass の周辺組成での機械的特性を知ることができます。

同一出典画面



- また、最もヤング率の高い GJ06-073521 ガラスの同一出典画面を表示し (該当ガラスの行をクリックした上で同一出典アイコンのクリックにより)、このガラスの出典に記載されているすべてのデータ (この場合、5 ガラス) を確認することができます。

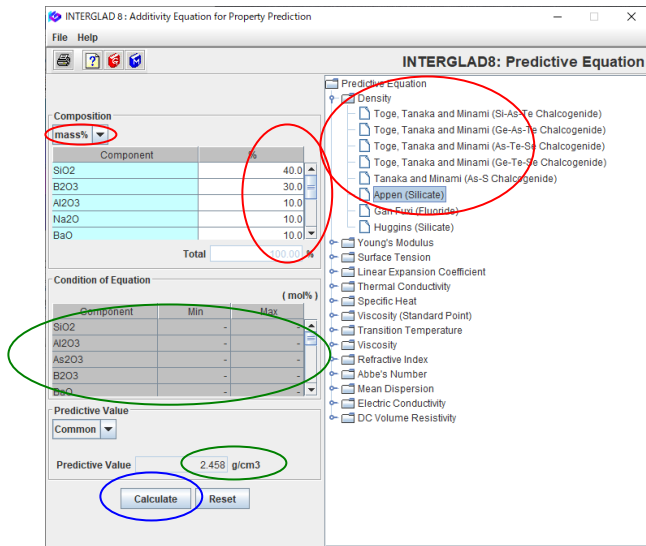
特性予測（特性計算式）

6. 特定組成のガラスの特性予測 — ホウケイ酸塩ガラス

ホウケイ酸塩ガラス（SiO₂ 40 mass%, B₂O₃ 30%, Al₂O₃ 10%, Na₂O 10%, BaO 10%）の密度、熱膨張係数、熱伝導率、屈折率を予測します

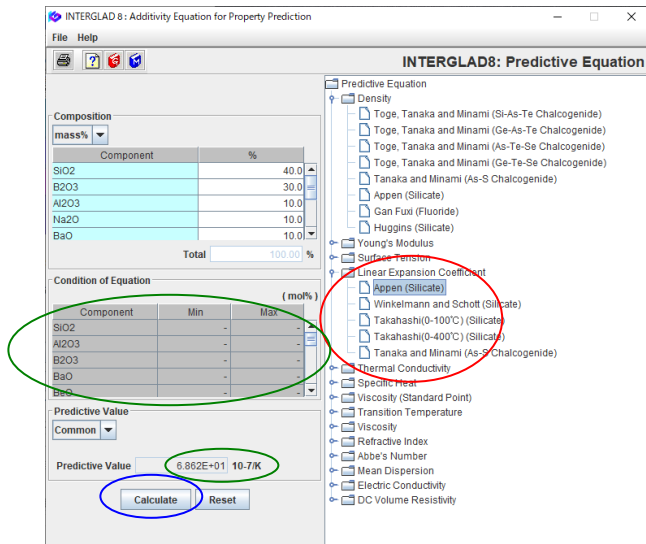
<マニュアル第3章 D.1、第4章 4.1、第6章 1参照>

1) 密度の予測（特性計算式による特性予測画面）



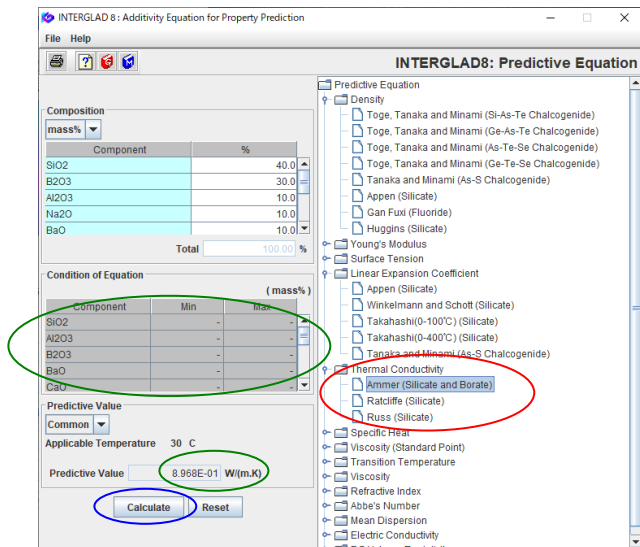
- Main画面より [Property Prediction] ボタン、[Additivity Equation for Property Prediction] ボタンをクリックして特性計算式による特性予測検索画面を開きます。
- 画面右の特性計算式選択欄で Density を展開し、Appen(Silicate)を選択します。
- 左中段の Condition of Equation に、指定した計算式の条件が現われるため、予測したい組成成分をすべて含むかどうかを確認します。
- [Composition] 欄に必要成分を選択表示し、その数値を入力します。成分名は[Ctrl]キーを押したまま成分をクリックすることにより、同時に複数の選択ができます。単位は mass% とします。
- [Calculate] ボタンをクリックすると [Predictive Value] 欄に予測値 2.458 g/cm³ が現われます。

2) 熱膨張係数の予測



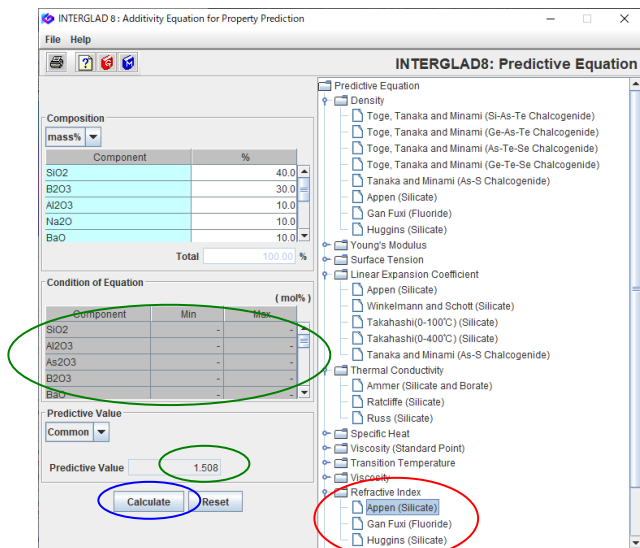
- 同組成の他特性を予測する場合、組成欄はそのままとし、特性予測式のみを変えて計算することにより、次々に特性予測ができます。
- 特性予測式欄の Linear Expansion Coefficient を展開し、Appen(Silicate)を選択します。
- [Calculate] ボタンをクリックすると 7[Predictive Value] 欄に予測値 68.62 × 10⁻⁷/K が現われます。

3) 熱伝導率の予測



- 特性予測式欄の Thermal Conductivity を展開し、Ammer(Silicate and Borate)を選択します。
- [Calculate]ボタンをクリックすると[Predictive Value]欄に予測値 0.8968 W/(mK) (30°C)が現われます。
- 本例の場合、Ratcliffe(Silicate)、Russ(Silicate)の式でも計算でき、それぞれ、0.8349 W/(mK) (0°C)、0.9256 W/(mK) (0°C)の予測値が得られ、予測計算式による値を比較することができます。

4) 屈折率の予測



- 特性予測式欄の Refractive Index を展開し、Appen(Silicate)を選択します。
- Calculate ボタンをクリックすると[Predictive Value]欄に予測値 1.508 が現われます。

- 上記のように組成を決めれば、色々な特性について予測値を計算することができますが、式により組成等の制限があり、計算ができない場合も多々あります。

(第6章 1.特性計算式参照)

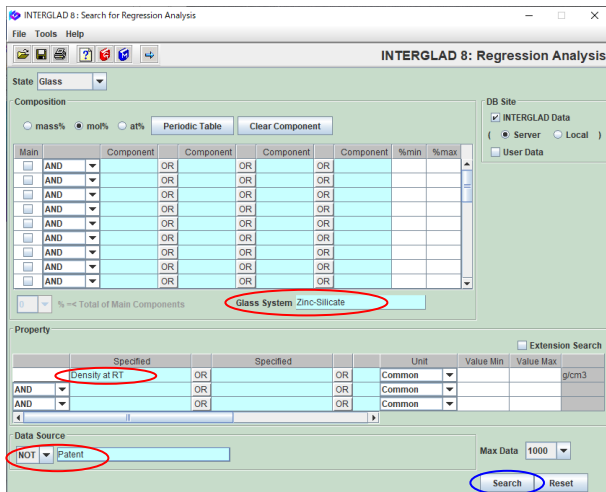
特性予測・組成最適化（重回帰分析）

7. 特性についての予測式の導出 — 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度

亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度（室温）についての予測式（加成式）を導出します

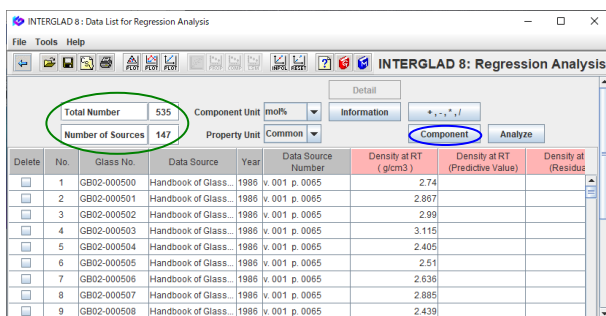
<マニュアル第3章 D.2、第4章 4.2-4.5 参照>

1) 重回帰分析のための検索条件設定（重回帰分析検索画面）→ 検索実施

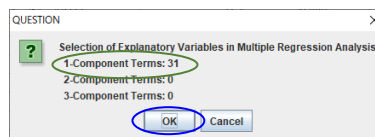
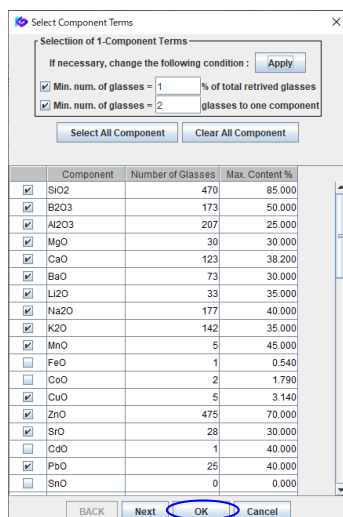


- Main画面より[Property Prediction]ボタン、[Multiple Regression Analysis]ボタンをクリックして重回帰分析検索画面を開きます。
- 状態(State)はデフォルトのGlassのままとします。
- ガラス系としてZinc-Silicate、特性としてDensity at RTを選択し、出典は特許以外(NOT Patent)とします。

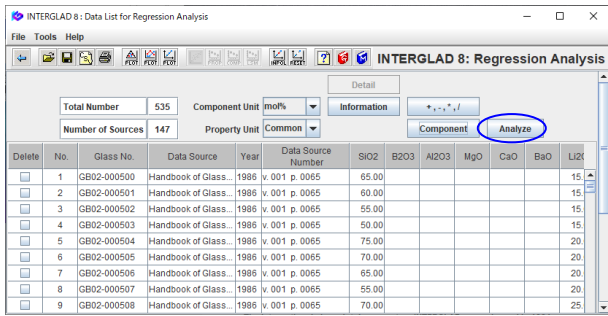
2) 検索結果（重回帰分析検索結果画面）→ 説明変数成分項選択（成分項選択小画面）



- 535件（147出典）のガラスが抽出されます。
- [Component]ボタンより説明変数成分項選択小画面を開き、重回帰式に使用する成分項を選択します。
- 本例では最初に現われる1成分項選択小画面においてデフォルト条件のままとし、[OK]ボタンをクリックします。
- これにより説明変数成分項は1成分項までとなります。現われる[Question]ダイアログで成分項数を確認し、[OK]ボタンをクリックします。

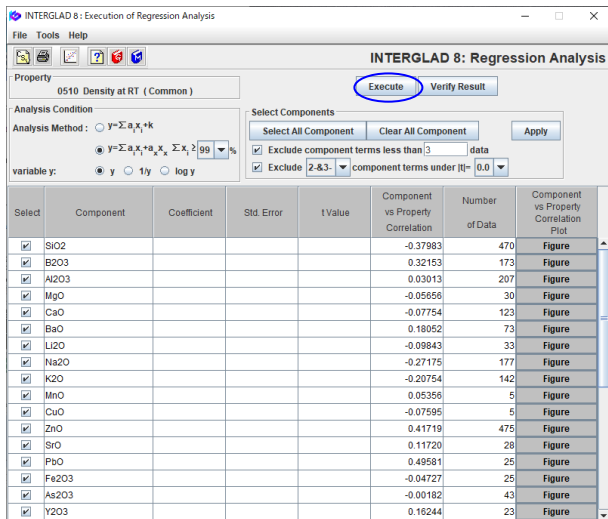


1 成分項数 : 31

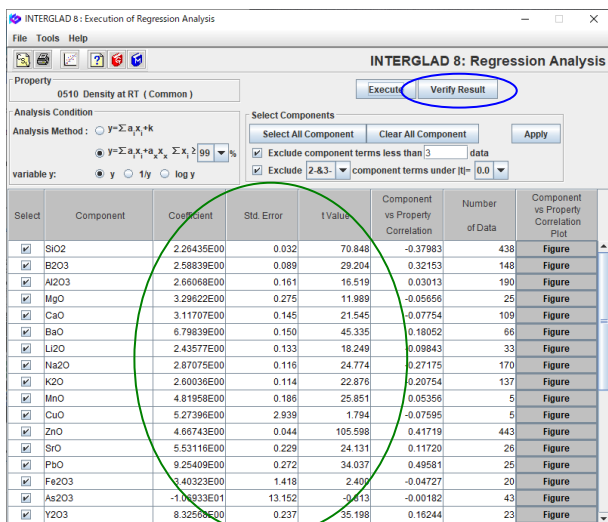
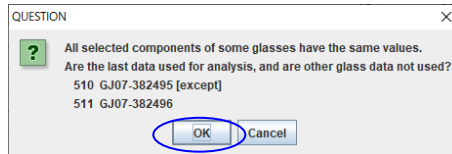
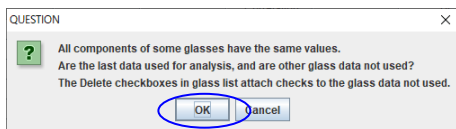


- [Analyze]ボタンをクリックし、重回帰分析実行画面へ移行します。

3) 重回帰分析実施 (重回帰分析実行画面)

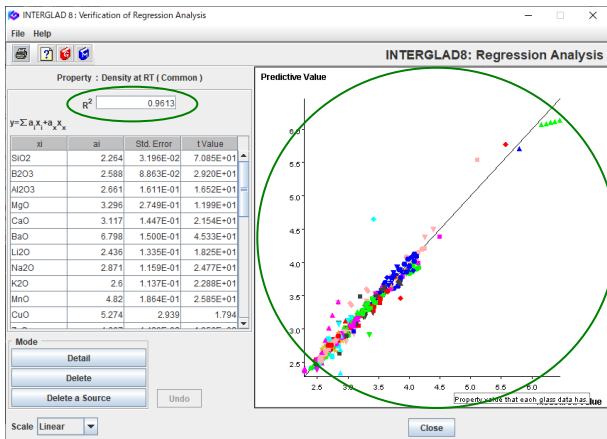


- [Execute]ボタンをクリックし、重回帰分析を実行します。
- [Question]ダイアログ「組成が同じガラスデータが複数あるため、重回帰分析ができません。最後のガラスデータを分析対象とし、その他のガラスデータは分析対象外としてよろしいですか」が現われるため、[OK]ボタンをクリックします。
- 次に[Question]ダイアログ「選択した組成の値が全て同じであるガラスデータが複数あるため、重回帰分析ができません。以下、同上」が現われるため、[OK]ボタンをクリックします。



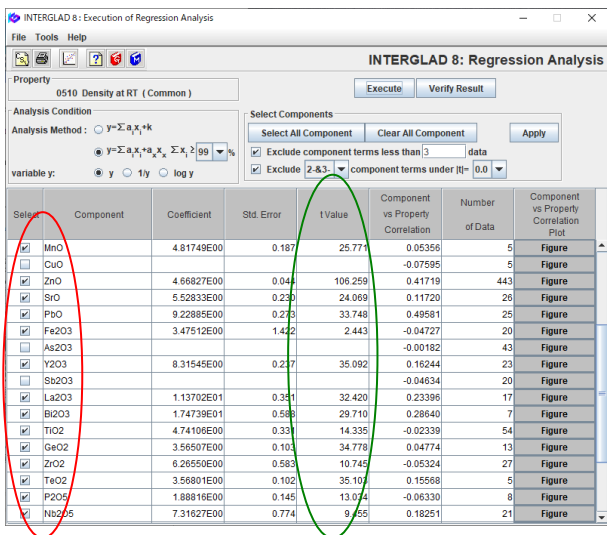
- 重回帰分析実行画面に計算結果が表示されることを確認します。
- [Verify Result]ボタンをクリックして重回帰分析検証画面に移行します。

4) 重回帰分析結果の検証 (重回帰分析検証画面)

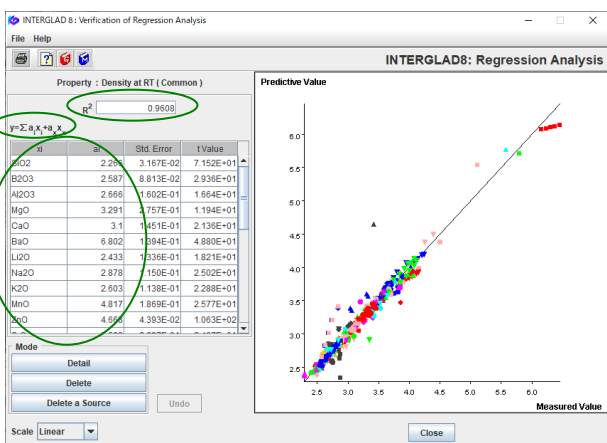


- 寄与率 R^2 が 0.9613 と高く、実測値（収録値）と予測値のプロットで $y=x$ の直線よりのばらつきが小さいことを確認します。（ R^2 を 0.8 以上とすることを推奨します）

5) t 値検定 再計算



- 重回帰実行画面に戻ってリストの t 値（絶対値）に低いもの（2 未満等）があるかどうかを調べます。
- 本例では CuO、As₂O₃、Sb₂O₃、H₂O₃ の t 値の絶対値が 2 未満となっています。まず 1 未満の As₂O₃、Sb₂O₃、H₂O₃ の [Select] チェックをはずし、[Execute] ボタンをクリックし、再計算を行います。次に 2 未満の CuO のチェックをはずし、もう一度再計算を行います。これらの操作により 2 未満の t 値（絶対値）を持つ説明変数成分項が重回帰式より除外されます。



- 再度、[Execute] ボタンをクリックして重回帰分析の検証を行います。
 R^2 がわずかに下がりましたが、依然 0.9608 と高いことを確認します。

6) 予測式 (重回帰式) 完成

重回帰分析検証画面および重回帰分析実行画面に式および各成分項の係数が表示されます。

得られた重回帰式：

$$\text{Density at RT (g/cm}^3\text{)} = 2.266 \times (\text{SiO}_2) + 2.587 \times (\text{B}_2\text{O}_3) + 2.666 \times (\text{Al}_2\text{O}_3) + \dots$$

各成分：モル比率（その他以外、27 成分）

- ・ 重回帰分析検索結果画面でファイル保存アイコンにより分析結果（重回帰式を含め）を保存します。本保存はスタンダード版、CDフル機能版の場合に可能です。インターネット版ではできません。

8. 特性予測 — 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度

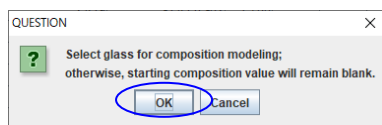
SiO₂ 60 mol%、Li₂O 20 mol%、ZnO 20 mol%のガラスの密度（室温）を予測します

＜マニュアル第3章 D.2、第4章 4.6 参照＞

亜鉛ケイ酸塩系組成であるため、7.で導出した重回帰式を利用します。

1) 重回帰分析検索結果画面から特性予測画面を開く

Delete	No.	Glass No.	Density at RT (g/cm3)	Density at RT (Predictive Value)	Density at RT (Residual)	SiO2	B2O3	Al2O3	MgO	CaO	Ba
<input type="checkbox"/>	1	GB02-000500	2.74	2.771	-3.11E-02	65.00					
<input type="checkbox"/>	2	GB02-000501	2.867	2.891	-2.43E-02	60.00					
<input type="checkbox"/>	3	GB02-000502	2.99	3.011	-2.143E-02	55.00					
<input type="checkbox"/>	4	GB02-000503	3.115	3.132	-1.657E-02	50.00					
<input type="checkbox"/>	5	GB02-000504	2.405	2.419	-1.411E-02	75.00					
<input type="checkbox"/>	6	GB02-000505	2.51	2.539	-2.925E-02	70.00					
<input type="checkbox"/>	7	GB02-000506	2.636	2.659	-2.338E-02	65.00					
<input type="checkbox"/>	8	GB02-000507	2.885	2.9	-1.465E-02	55.00					
<input type="checkbox"/>	9	GB02-000508	2.439	2.427	1.153E-02	70.00					
<input type="checkbox"/>	10	GB02-000509	2.55	2.548	2.397E-03	65.00					
<input type="checkbox"/>	11	GB02-000510	2.66	2.768	-1.083E-01	50.00					



- ・ 3.1の重回帰式が保存してある場合、任意の重回帰分析検索結果画面を開き、[Open] アイコンより、保存した検索結果画面を開きます。

- ・ 特性予測[PROP]アイコンをクリックすると、「モデル組成を選択してください。…」との[Question]ダイアログが現われます。[OK] ボタンをクリックすると特性予測画面が開きます。この画面の表でいずれかのガラスが選択された場合には{行のクリックによりその行がアクティブ(水色)となる}、[Question] ダイアログは現われず特性予測画面が開きます。

2) 特性予測画面で組成を入力し予測値を計算

Component	Density at RT	Coefficient	Initial	Content (mol%)
SiO2	2.269E00			60.000
B2O3	2.587E00			0.000
Al2O3	2.666E00			0.000
MgO	3.291E00			0.000
CaO	6.802E00			0.000
BaO	2.433E00			20.000
Li2O	2.878E00			0.000
K2O	2.603E00			0.000
MnO	4.817E00			0.000
Total	0.000			100.000 %

- ・ Content の New 欄に特性予測する組成成分値をインプットし、[Calculate] ボタンをクリックすると、特性値が計算されます。

- ・ 密度予測結果：2.780 g/cm³

- ・ なお、重回帰分析検索結果画面でいずれかのガラスが選択された場合には、[Initial] 欄および [New] 欄にそのガラスの組成が表示されます。[New] 欄を予測する組成に書き換えて計算します。

9. 組成最適化 — 特定密度の亜鉛ケイ酸塩ガラス

亜鉛ケイ酸塩ガラスで密度（室温）が 2.6 g/cm³ となる組成を設計します

SiO₂、Al₂O₃、CaO、Na₂O、K₂O、ZnO の 6 成分からなる組成とした場合

<マニュアル第 3 章 D.3、第 4 章 4.7 参照>

8.と同様に亜鉛ケイ酸塩系組成であるため、7.で導出した重回帰式を利用します。

1) 重回帰分析検索結果画面から組成最適化画面を開く

No.	Glass No.	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	Na ₂ O	K ₂ O	ZnO	Density at RT (g/cm ³)	Density at RT (Predictive Value)	Density at RT (Residual)
501	GJ03-381758	51.42	4.46	14.28	14.28	0.00	7.00	2.491		
502	GJ03-381902	51.42	4.46	14.28	14.28	0.00	7.00	2.852	2.852	-8.24E-02
503	GJ07-381993	58.84	1.37	10.32	10.26	0.81	15.55	2.63	2.926	-1.964E-01
504	GJ07-381994	58.84	1.37	10.32	10.26	0.81	15.55	2.63	2.926	-1.964E-01
505	GJ07-381995	48.67	1.06	8.16	8.14	0.64	32.98	2.75	3.207	-4.572E-01
506	GJ07-381996	40.23	0.88	7.04	7.04	0.51	42.39	2.84	3.412	-5.719E-01
507	GJ07-382492	49.99					33.99	3.835	3.7	1.348E-01
508	GJ07-382493	49.99					33.99	3.845	3.704	1.412E-01
509	GJ07-382494	50.00					33.99	3.839	3.705	1.34E-01
510	GJ07-382495	50.00					34.00	3.835	3.706	1.256E-01
511	GJ07-382496	50.00					34.00	3.832	3.706	1.256E-01
512	GJ02-382603	68.75	1.00	13.00	12.00		2.854	3.07	2.161E-01	
513	GJ07-382604	66.42	0.97	12.55	15.00		3.007	3.115	-1.094E-01	
514	GJ07-382605	64.07	0.93	12.12	18.00		3.051	3.161	-1.1E-01	
515	GJ06-383138	59.86	19.96				9.98	2.754	-2.444E-02	
516	GJ07-383155	69.84	14.97				14.97	2.68	-7.203E-02	
517	GJ07-383156	59.86	19.96				9.98	2.892	-5.189E-02	
518	GJ07-383157	54.88	9.98				34.92	3.24	2.859E-02	
519	GJ07-383158	49.89	9.98				39.91	3.42	8.87E-02	

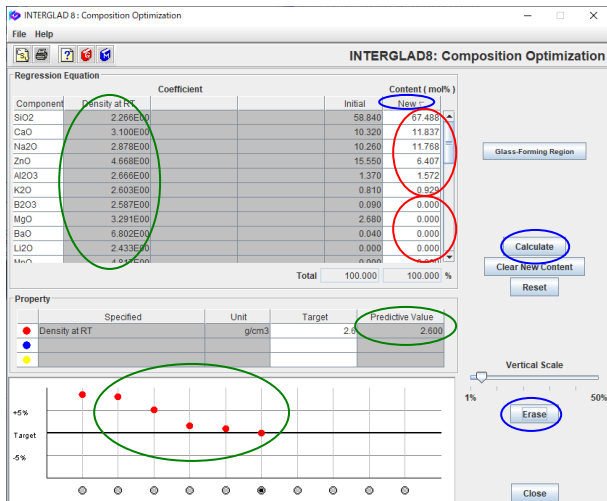
- 重回帰分析検索結果画面を開き、[Open]アイコンより、保存した 3.1 結果（検索結果画面）を開きます。
- 左図の例では、目標組成の 6 成分欄および特性値欄（文献値、予測値、その差）を左にドラッグし、見やすくしています。
- まず検索結果リストからモデル組成を選択します。モデル組成は目標成分を含み、特性値が目標値に近いものとします。本例の場合には、目標 6 成分を含み、密度 2.83 g/cm³ の No.503 (GJ07-381993)をモデル例としてクリックし、アクティブ(水色背景)とします。
- 組成最適化 [COMP] アイコンをクリックすると、組成最適化画面が開きます。

2) 組成最適化画面での組成設計（最適化）試行

Component	Density at RT	Coefficient	Initial Content (mol%)	New Content (mol%)
SiO ₂	2.266E00		58.840	58.84
B ₂ O ₃	2.587E00		0.090	0.090
Al ₂ O ₃	2.666E00		1.370	1.370
MgO	3.291E00		2.680	2.680
CaO	3.100E00		10.320	10.320
BaO	6.802E00		0.040	0.040
Li ₂ O	2.433E00		0.000	0.000
Na ₂ O	2.978E00		10.260	10.260
K ₂ O	2.803E00		0.810	0.810
MnO	4.817E00		0.000	0.000
Total			100.000	100.000 %

Property	Specified	Unit	Target	Predictive Value
Density at RT		g/cm ³	2.6	2.926

- 組成最適化画面では、Regression Equation の Content (Initial と New) 欄にモデル組成の成分値が表示されます。
- 密度目標値 2.6 を Property の [Target] 欄にインプットし、[Calculate] ボタンをクリックすると、[Predictive Value] 欄にモデル組成の計算値が現われます。また、画面の下部のグラフに、選択したモデル組成の密度と目標値との違い (%) が赤色点で現われます。グラフ右の Vertical Scale の指標を左にドラッグし(左端の 1%まで可能)、グラフの赤色点と目標値の差を拡大して確認し易くします
- 次に Content の [New] 欄を高低にソートし、目標 6 成分に含まれない B₂O₃、MgO、BaO、Fe₂O₃ の値を 0 に修正します。



- [Calculate] ボタンをクリックすると [New] 欄に記載した組成（100%に按分）の特性値が計算され、[Predictive Value] 欄に表示されます。また、グラフにも新たな赤色点が表れ、目標値との差を確認できます。
- 次に Content の [New] 欄の値を修正し、再計算します。この操作を繰り返して、特性値を目標値に近づけていきます。赤色点が目標値から逆に離れる場合には、[Erase] ボタンを押し、赤色点と New 組成を元に戻します。成分値の修正は、重回帰係数(Coefficient)の絶対値が大きい成分ほど、特性値の増減が比例して大きくなることを考慮しながら行います。本例の場合には 6 成分の中で重回帰係数の大きい ZnO を少しずつ減らしていきます。
- 最終的に本例では、下記の組成で Density at RT が 2.600 g/cm³ となります。
SiO₂ 67.49 mol%、Al₂O₃ 1.57%、CaO 11.84%、Na₂O 11.77%、K₂O 0.93%、ZnO 6.41%。
- なお、目標特性となる組成は一つではないため、ZnO のみでなく他の成分も変えて試行し、最適化します。

10. 組成最適化（自動計算）－ 特定密度の亜鉛ケイ酸塩ガラス

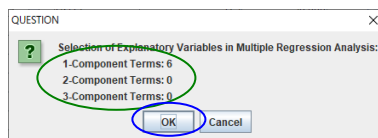
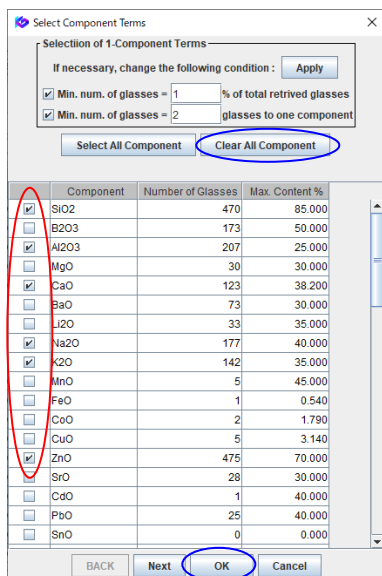
9.と同じ課題で、亜鉛ケイ酸塩ガラスで密度（室温）が 2.6 g/cm³ となる組成を自動計算により設計します
SiO₂、Al₂O₃、CaO、Na₂O、K₂O、ZnO の 6 成分からなる組成とした場合

<マニュアル第 3 章 D.4、第 4 章 4.8、4.9 参照>

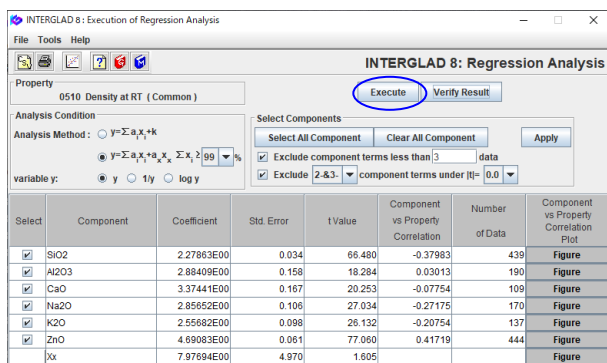
Ver. 8 より使用可能となった最小二乗法（LSM: Least Squares Method）を用いた自動計算により組成最適化を行います。7.で行った重回帰分析検索結果を利用し、新しい重回帰式を作って計算します。

1) 重回帰分析検索結果（重回帰検索結果画面） → 説明変数成分項選択（成分項選択小画面）

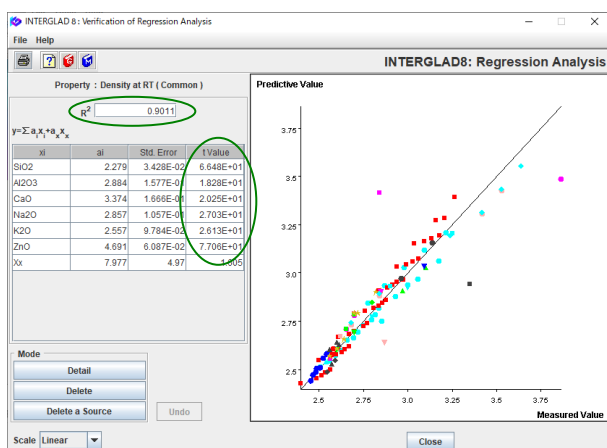
- [Component]ボタンより説明変数成分項選択小画面を開き、目標とする 6 成分のみを重回帰式に使用する成分項として選択します。
- この選択は、まず説明変数成分項選択小画面で[Clear All Component]ボタンをクリックし、その後、SiO₂、Al₂O₃、CaO、Na₂O、K₂O、ZnO の 6 成分のチェックボックスのみに✓を入れ直します。[OK]ボタンをクリックし、現れる[Question]ダイアログで 1 成分項のみが 6 となっていることを確認します。



2) 重回帰分析実施（重回帰分析実行画面）



- [Execute]ボタンをクリックし、重回帰分析を実行します。現れる[Question]ダイアログで[OK]ボタンをクリックします。

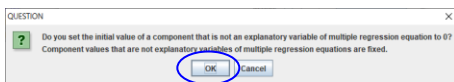


- 計算が終わり重回帰分析実行画面の重回帰係数欄に数値が表示された後、[Verify Result]ボタンをクリックし、重回帰分析検証画面を開き、R²値を確認します。本例では 0.9091 が得られ、t 値も 18.3 以上であるため、これで重回帰式の完成です。

3) 組成最適化 (自動計算) 実施 (重回帰分析検索結果画面 → 組成最適化 (LSM) 画面)

- 重回帰分析検索結果画面に戻り、[LSM]アイコンをクリックし、組成最適化 (LSM) 画面を開きます。

- Property の[Target]欄に目標値をインプットします (密度 2.6 g/cm³)。
- [All Calc (LSM)]ボタンをクリックします。



- 現れる[Question]ダイアログ (重回帰式の説明変数でない成分の初期値を 0 にしますか。重回帰式の説明変数でない成分値は固定されます) で[OK]ボタンをクリックします。

- 自動計算が終わると、組成最適化 (LSM) 結果画面が表示されます。
- 表のタイトル行のターゲット値との差 All Prop(Res.)をクリックして差の小→大順にソートします。All Prop(Res.)欄の右隣り欄を見ると、本例ではターゲット値との差が 0.1%未満の A ランクのガラス組成が 153 種類 (ガラス No.の背景が青色) 得られていることがわかります。それぞれのガラスの最適化された成分値が右に表示されます。
- 最適化例を一つ挙げると、No.388 (モデルガラス GJ02-359367) の場合、下記の組成で Density at RT が 2.602 g/cm³となります。
SiO₂ 64.58 mol%、Al₂O₃ 6.12%、CaO 6.11%、Na₂O 11.34%、K₂O 6.18%、ZnO 5.67%。

- なお、7.で求めた重回帰式を使用して自動計算を行うことも可能ですが、その場合、27成分の組成の最適化となります。

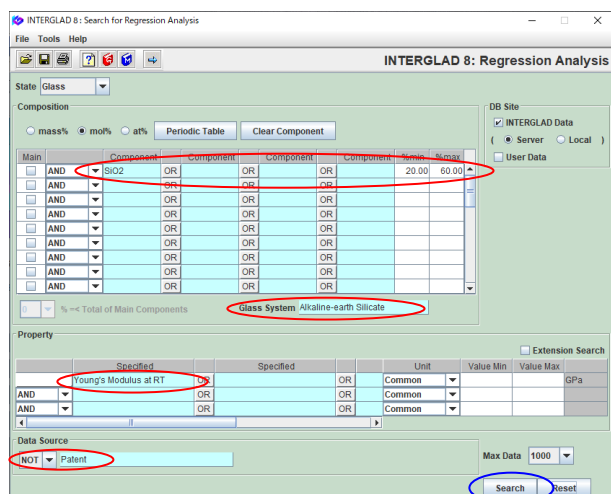
11. 特性予測 — アルカリ土類ケイ酸塩ガラスのヤング率

下記の組成のアルカリ土類ケイ酸塩ガラスのヤング率（室温）を予測します

SiO₂ 45%, Al₂O₃ 12%, MgO 13%, CaO 20%, Y₂O₃ 7%, TiO₂ 3% (mol%)

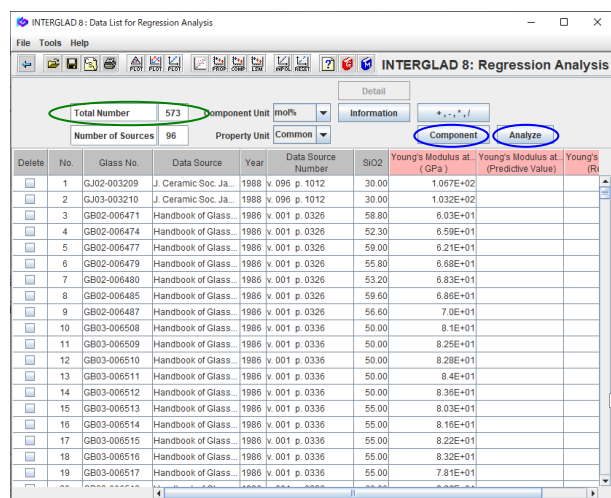
<マニュアル第3章 D.2、第4章 4.2-4.6 参照>

1) 重回帰分析のための検索条件設定（重回帰分析検索画面）→ 検索実施

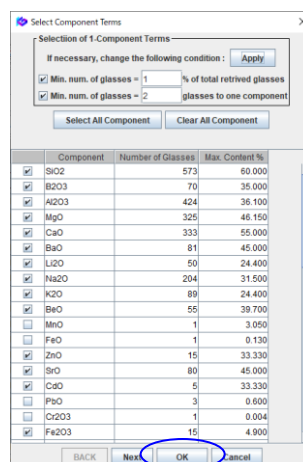
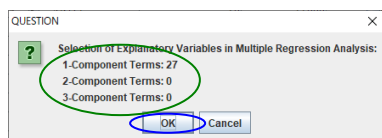


- 組成の検索条件を $20 \leq \text{SiO}_2 \leq 80$ mol%とし、Glass SystemをAlkaline-earth Silicateに指定します（組成条件の設定には色々なケースが考えられます）。
- 特性にはYoung's Modulus at RTを選択し、出典は特許以外（NOT Patent）とします。

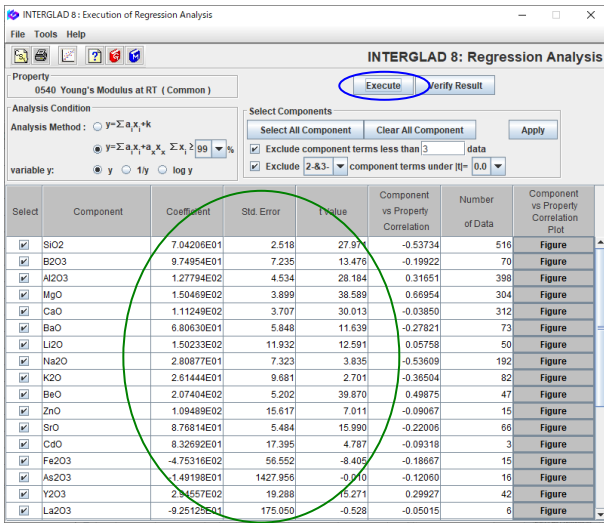
2) 検索結果（重回帰分析検索結果画面）→ 説明変数成分項選択（成分項選択小画面）



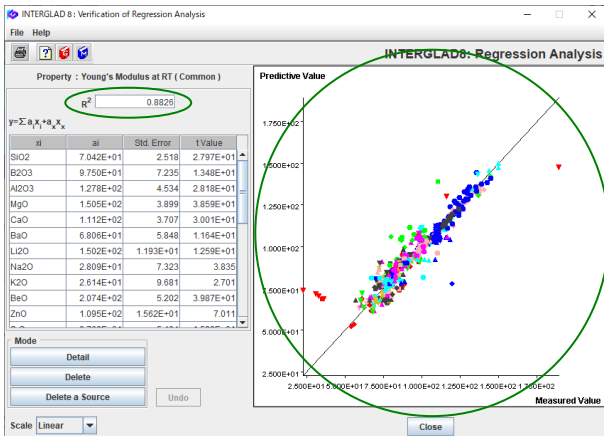
- 573件がリストアップされます。
- [Component]ボタンをクリックし、成分項選択小画面を開きます。説明変数となる成分項は、1成分項のみとします。デフォルト条件により27成分が成分項となります。



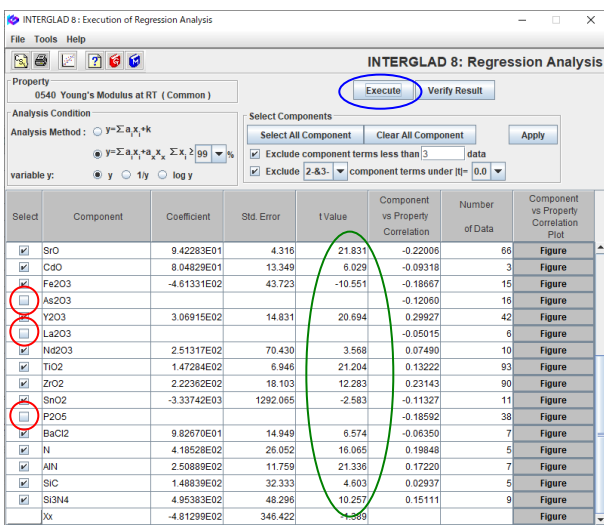
3) 重回帰分析実施（重回帰分析実行画面 → 重回帰分析検証画面）



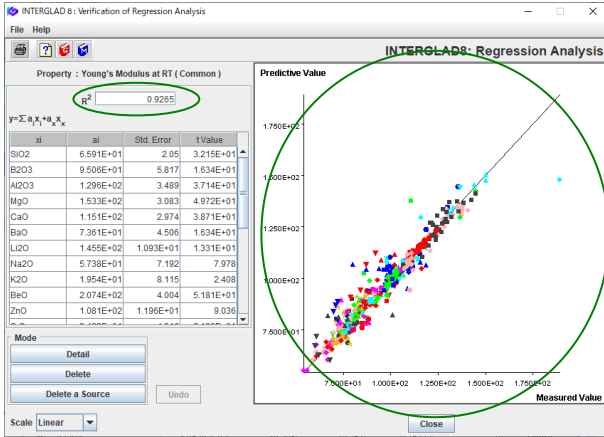
• [Analyze]ボタンをクリックすると、重回帰分析実行画面が開き、[Execute]ボタンをクリックして重回帰分析を実行します。[Question]ダイアログが現われ、[OK]ボタンをクリックすると、重回帰係数等が計算されて表示されます。



• [Verify Result]ボタンをクリックして検証画面を開きます。寄与率 R^2 は 0.8826 となります。
 • データに直線 $y=x$ より離れた点もみられますが、 R^2 が 0.8 以上となっているため、離れた点の影響は小さいと考えられます。

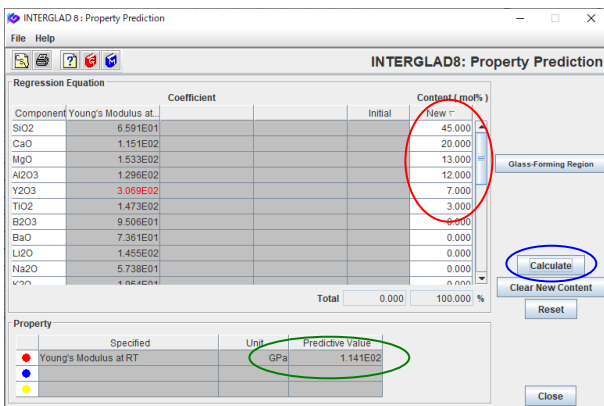


• 重回帰分析検索結果画面で t 値を調べると、As₂O₃、La₂O₃、P₂O₅で絶対値 2 より小さい値となっています。そこでこれらの成分の左の選択チェックボックスのチェックをはずし、再度[Execute]ボタンをクリックして重回帰分析を行います。この操作により、これらの成分を成分項から除き、t 値がすべて 2 以上の成分項からなる重回帰式が得られます。



- ・検証画面を開いて寄与率 R²を確認すると 0.9265 となっています。
- ・この重回帰式を使って特性を予測することとします。

4) 特性予測 (特性予測画面)



- ・重回帰分析検索結果画面に戻り、何もガラスを選択せずに特性予測の[PROP]アイコンをクリックします。現れる[Question]ダイアログの[OK]ボタンをクリックし、特性予測画面を開きます。
- ・Content の[New]欄に成分値 (SiO₂ 45%, Al₂O₃ 12%, MgO 13%, CaO 20%, Y₂O₃ 7%, TiO₂ 3%) を入力し、[Calculate]ボタンをクリックします。
- ・Property の[Predictive Value]欄にヤング率の予測値 114.1 GPa が表示されます。

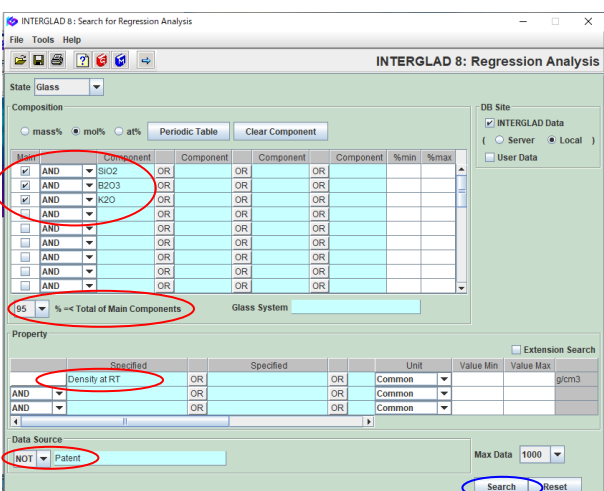
12. 特性予測 (3次式) - ホウケイ酸塩ガラスの密度

SiO₂-B₂O₃-K₂O 系組成 (下記) のガラスの密度 (常温) を予測します

SiO₂ 40%, B₂O₃ 30%, K₂O 26%, CaO 3%, Al₂O₃ 1% (mol%)

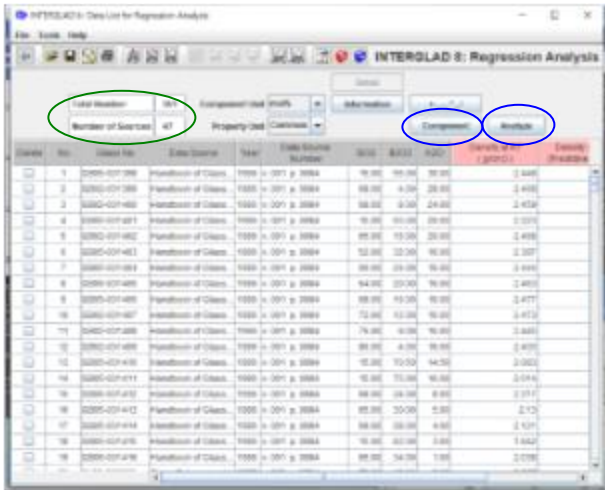
<マニュアル第3章 D.2、第4章 4.2-4.6 参照>

1) 重回帰分析のための検索条件設定 (重回帰分析検索画面) → 検索実施



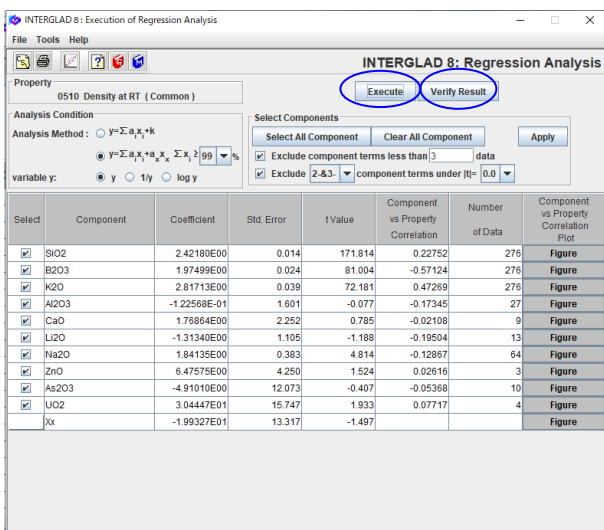
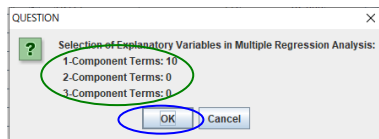
- ・組成の検索条件を以下とします。
SiO₂ + B₂O₃ + K₂O ≥ 95 mol%
- ・特性は Density at RT とします。
- ・出典は特許以外 (NOT Patent) とします。

2) 検索結果

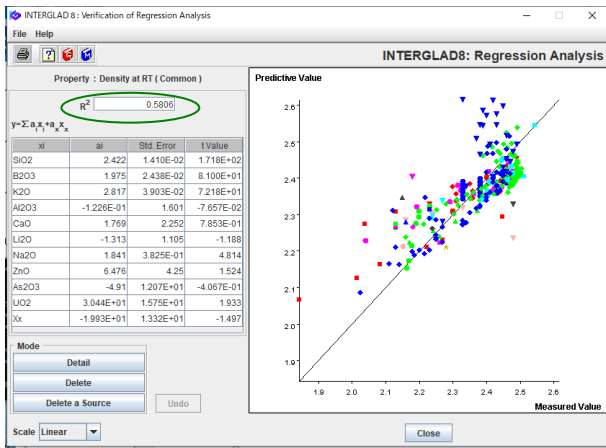


- 351件のガラスがリストアップされます。
- まず比較のために1次式による重回帰分析を行います。
- [Component]ボタンをクリックし、1成分項の選択画面で[OK]ボタンをクリックすると、10個の1成分項が選択されます。

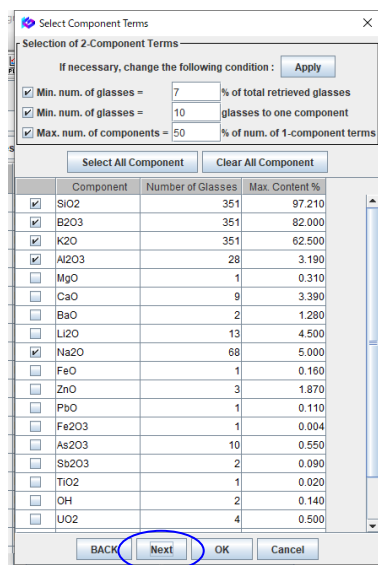
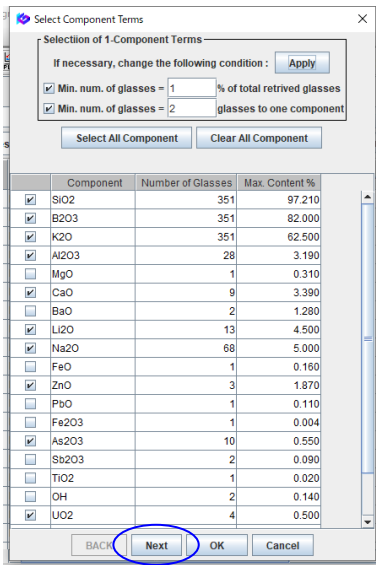
3) 重回帰分析 (1次式)



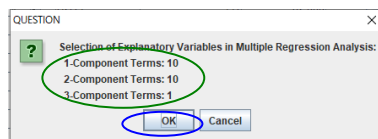
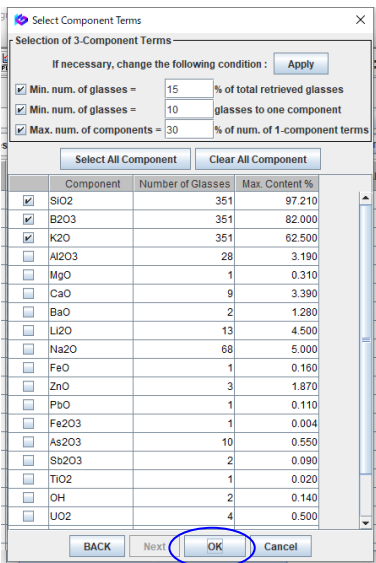
- [Analyze]ボタンをクリックして重回帰分析実行画面を開きます。
- [Execute]ボタンをクリックして重回帰分析を実行し、[Verify Result]ボタンをクリックして検証画面を開くと、寄与率 R² が 0.5806 と低いことがわかります。

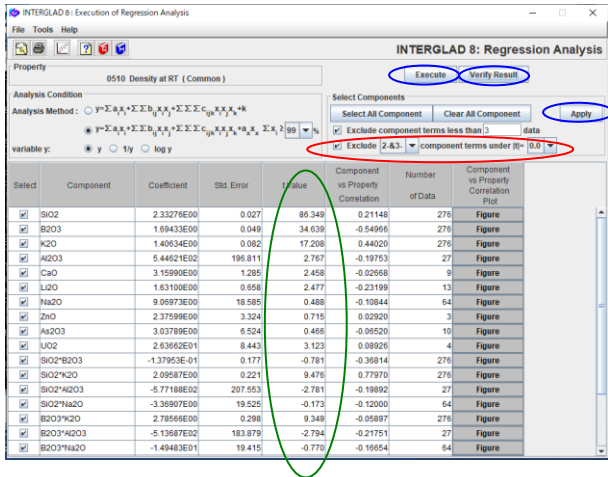


4) 重回帰分析 (3 次式)

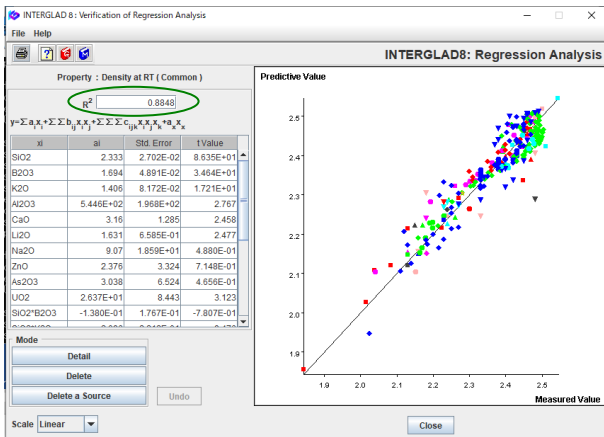


- 重回帰分析検索結果画面に戻り、成分項の選択を 3 成分項までデフォルト条件のまま選択すると、1 成分項 : 10、2 成分項 : 10、3 成分項 : 1 の成分項数となります。

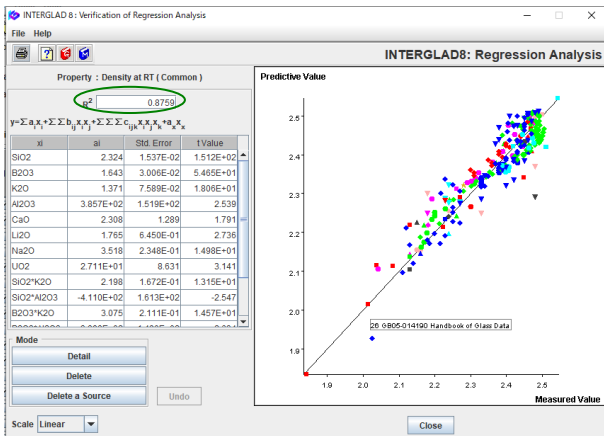




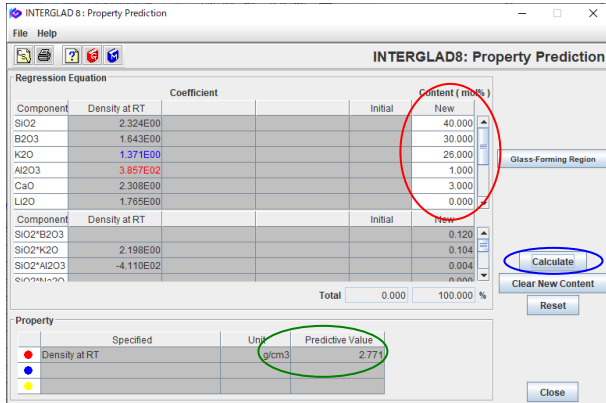
- 重回帰分析実行画面で重回帰分析を行い、検証画面を開くと R^2 が 0.8848 となっており、良好な値であることがわかります。
- しかし、重回帰分析実行画面で t 値を調べると、絶対値が 1 未満の成分項が 7 あります（1 成分項 3、2 成分項 4、3 成分項 0）。



- そこで重回帰分析画面の右上 [Select Component] 欄の 3 行目の $|t|$ の最小値設定欄で、下記の手順により、 $|t|$ の小さい成分項の除去・重回帰分析実行を繰り返します。（一度に除去せず、少しずつ行います）
- ① 2,3 成分項 $|t|=1.0$ より小を削除して計算
（'2-&3' と '1.0' を選択して [Apply] ボタンをクリックし、[Execute] ボタンをクリックします）
 - ② all 成分項 $|t|=1.0$ より小を削除して計算
 - ③ 再度、all 成分項 $|t|=1.0$ より小を削除して計算
- 以上の結果、 $|t|$ はすべて 1 以上となり、 R^2 は 0.8759 となります。これで重回帰式が完成します。



5) 特性予測 (特性予測画面)



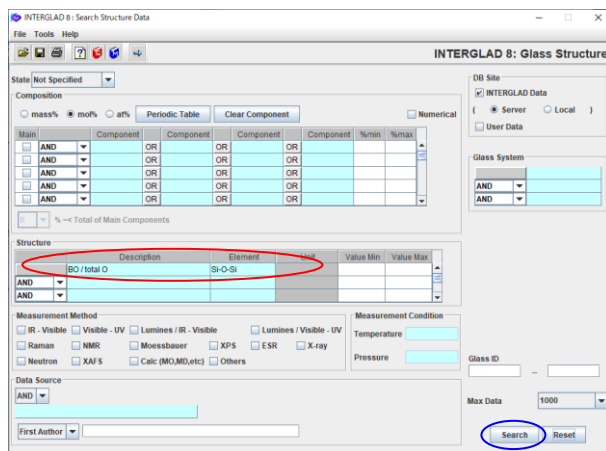
- 重回帰分析検索結果画面に戻り、特性予測[PROP]アイコンから特性予測画面を開きます。
- [Regression Equation]欄の[Content New]欄に SiO₂ 40 mol%, B₂O₃ 30%, K₂O 26%, CaO 3%, Al₂O₃ 1%を入力し、[Calculate]ボタンをクリックします。
- 特性欄の予測値に密度 2.771 g/cm³が計算されて表示されます。

構造データの検索と解析

13. 組成と構造の相関調査 - SiO₂量と架橋酸素(Bridging Oxygen)の割合

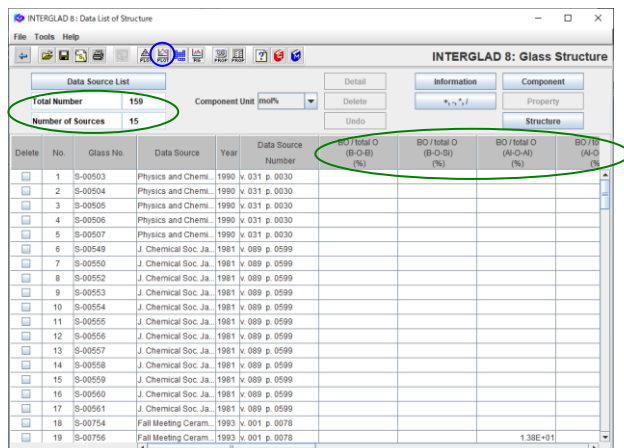
<マニュアル第3章 E、第4章 5 参照>

1) 検索条件設定 (構造検索画面) → 検索実施



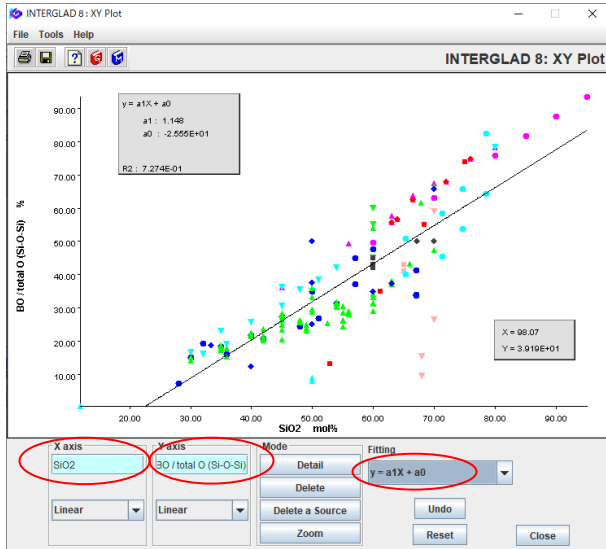
- 構造の[Description]欄に Bridging Oxygen Information の Bridging Oxygen 中の BO/[totalO]を指定し、[Element]欄に Si-O-Si を指定します。

2) 検索結果 (構造検索結果画面)



- 159件のガラス(出典15件)がリストアップされます。
- Si-O-Siのみでなく、Al-O-Al、Si-O-B、Si-O-Al等の[元素-O-元素]のデータもリストに表示されます。

3) 検索結果の利用 (XY プロット画面)

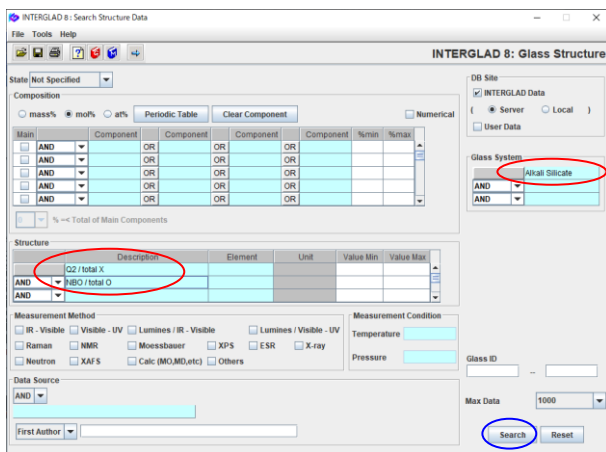


- SiO₂ 量 – BO/[total O](Si-O-Si)の XYプロットを表示します。また本例ではフィッティング曲線の一次式を選択しています。
- 組成を指定していないため、各種の成分を含みますが、SiO₂ 量の増加により、架橋酸素量が増える傾向がわかります。

14. 構造因子間の相関調査 – アルカリケイ酸塩ガラスの Q₂ と非架橋酸素(NBO)割合

<マニュアル第3章E、第4章5参照>

1) 検索条件設定 (構造検索画面) → 検索実施



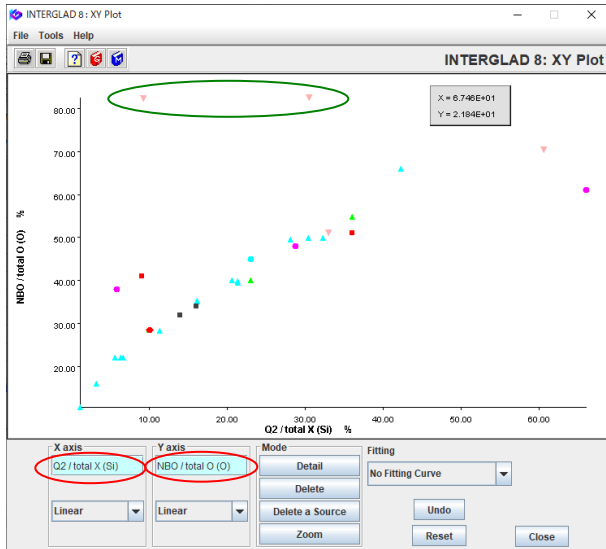
- ガラス系を Alkali Silicate に指定します。
- 構造情報として Bridging Oxygen Information の Q_n Distribution 中の Q₂/totalX、および Bridging Oxygen 中の NBO/[totalO]を指定します。

2) 検索結果 (構造検索結果画面)

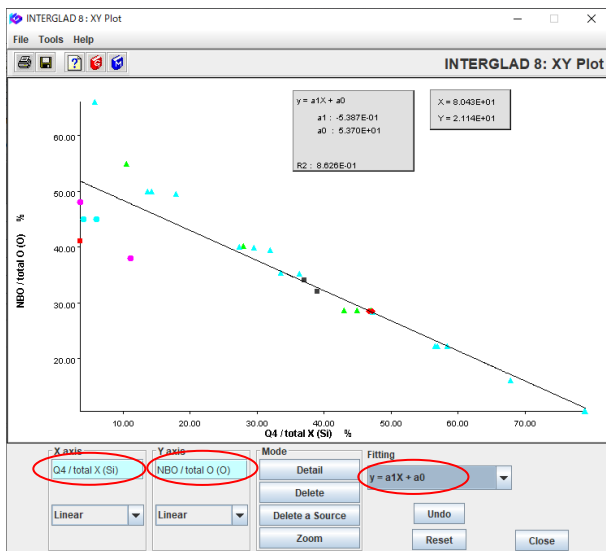
Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Glass No. (Property)	NBO/total O (%)	NBO/total O (Si-O)	Q2/total X (Si-O)
<input type="checkbox"/>	1	S-00119	J. Non-Crystalline S...	2002	v. 297 p. 0220	GJ02-219523	2.86E+01		1.0E+01
<input type="checkbox"/>	2	S-00120	J. Non-Crystalline S...	2002	v. 297 p. 0220	GJ02-219524	4.01E+01		2.3E+01
<input type="checkbox"/>	3	S-00121	J. Non-Crystalline S...	2002	v. 297 p. 0220	GJ02-219525	5.49E+01		3.6E+01
<input type="checkbox"/>	4	S-00122	J. Non-Crystalline S...	2002	v. 297 p. 0220	GJ02-219526	2.86E+01		1.0E+01
<input type="checkbox"/>	5	S-00123	J. Non-Crystalline S...	2002	v. 297 p. 0220	GJ02-219527	2.86E+01		1.0E+01
<input type="checkbox"/>	6	S-00962	J. Materials Science	1993	v. 028 p. 3473	GJ02-141512	8.22E+01		3.3
<input type="checkbox"/>	7	S-00963	J. Materials Science	1993	v. 028 p. 3473	GJ02-141513	8.22E+01		3.05E+01
<input type="checkbox"/>	8	S-00964	J. Materials Science	1993	v. 028 p. 3473	GJ02-141514	7.03E+01		6.06E+01
<input type="checkbox"/>	9	S-00965	J. Materials Science	1993	v. 028 p. 3473	GJ02-141515	5.11E+01		3.3E+01
<input type="checkbox"/>	10	S-01150	J. Jpn. Inst. Metals	1983	v. 047 p. 0382	GJ02-21650	4.5E+01		2.3E+01

- 42 件のガラス (出典 9 件) がリストアップされます。
- [Search Property DB]アイコンをクリックして対応する特性データの Glass No.を表示します。

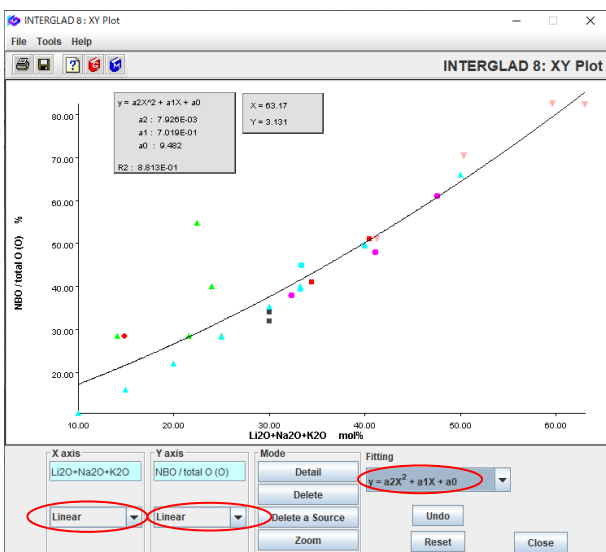
3) Q² と NBO の相関 (XY プロット画面)



- Q²/totalX(Si)–NBO/ [totalO](O)の XYプロットを表示します。
- Q²の増加と共に NBO 割合も増加しており、ほぼ比例関係にあることがわかります。なお、この関係からは離れた位置にある 2 点のガラスは特性詳細画面を調べると (構造検索画面で該当するガラス行をクリックし、[Detail Data of Property]アイコンをクリックして詳細画面を開く)、いずれも急冷したガラスであることがわかり、これが他のガラスと同じカーブに乗らない原因と考えられます。



- 比較として Q⁴/totalX(Si)–NBO/ [totalO](O) の XYプロットを表示します。
- この図より、Q² の場合とは異なり、Q⁴が増加すると当然ですが NBO 割合が減少する様子が示されます。



- また、本例で抽出されたガラスはいずれもアルカリを含むため、Li₂O、Na₂O、K₂O の合計量(mol%)と NBO 割合との関係を調べると、左図のようになります。これにより、アルカリ量と NBO 割合がほぼ比例し、アルカリ量の増加により非架橋酸素が増加することが示されます。
- なお、Li₂O+Na₂O+K₂O 合計量は構造検索結果画面で [+,* ,/]ボタンを使用して表示します。