

統計的機械学習を用いた 新規な光学ガラスの設計

滋賀大学 徳田陽明*, 藤沢美沙, 上林芽生
京都大学 ダニエル・バックウッド, 上田義勝

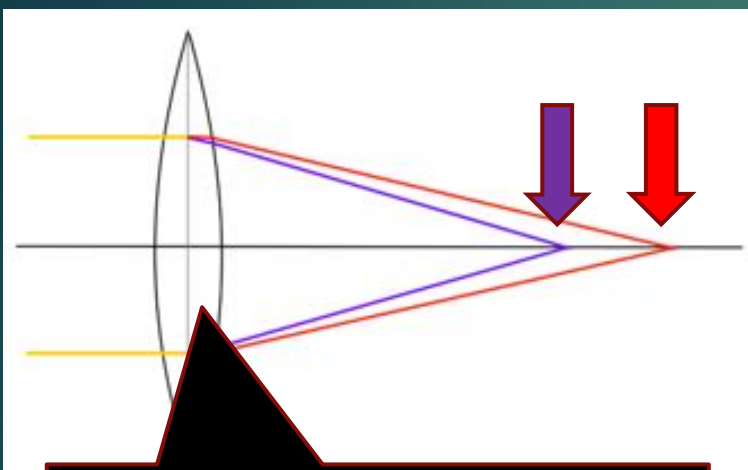
TOKUDA@EDU.SHIGA-U.AC.JP

Data-driven design of glasses with desirable optical properties using statistical regression, *Yomei Tokuda, Misa Fujisawa, Daniel M. Packwood, Mei Kambayashi, Yoshikatsu Ueda, *AIP advances*, <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/5.0022451>

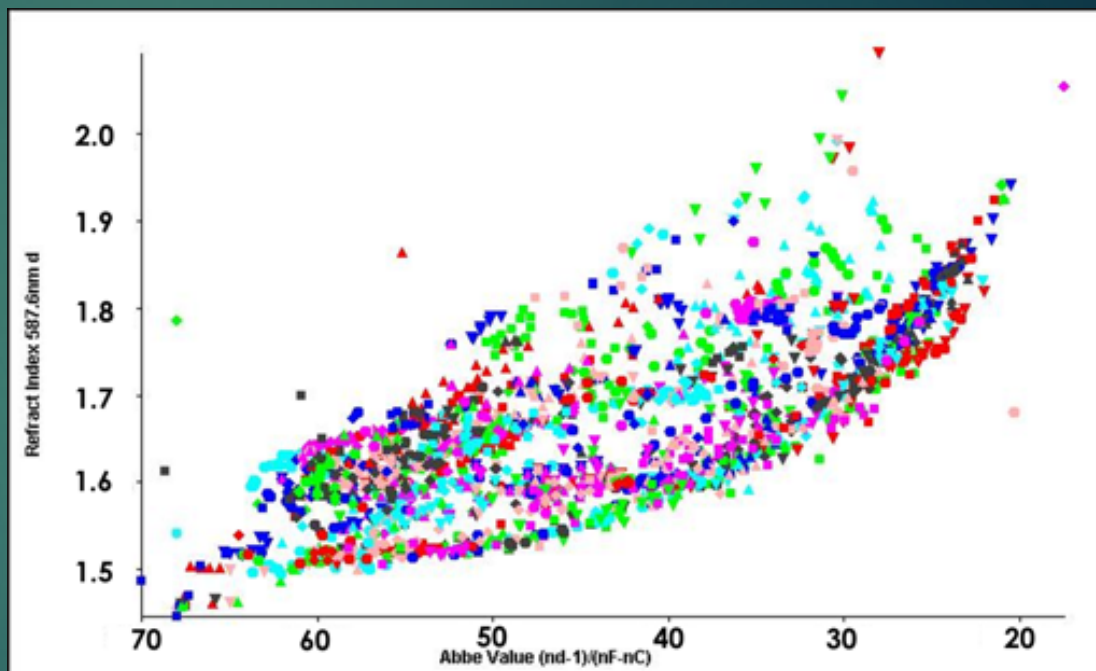
材料設計の課題

求める物性をもつ材料の組成を効率的に設計

光学ガラス 屈折率や分散は組成に依存



高屈折率・低分散が
望ましい



組成と屈折率orアッベ数の関係の予測



機械学習の手法に基づく回帰モデルの推定

機械学習の手法

MAP推定

確率モデルを導入したパラメトリック回帰

$$y = f(\mathbf{x}) = w_1 x_1 + w_2 x_1^2 + w_3 x_2 + w_4 x_2^2 + \dots$$

アッベ数

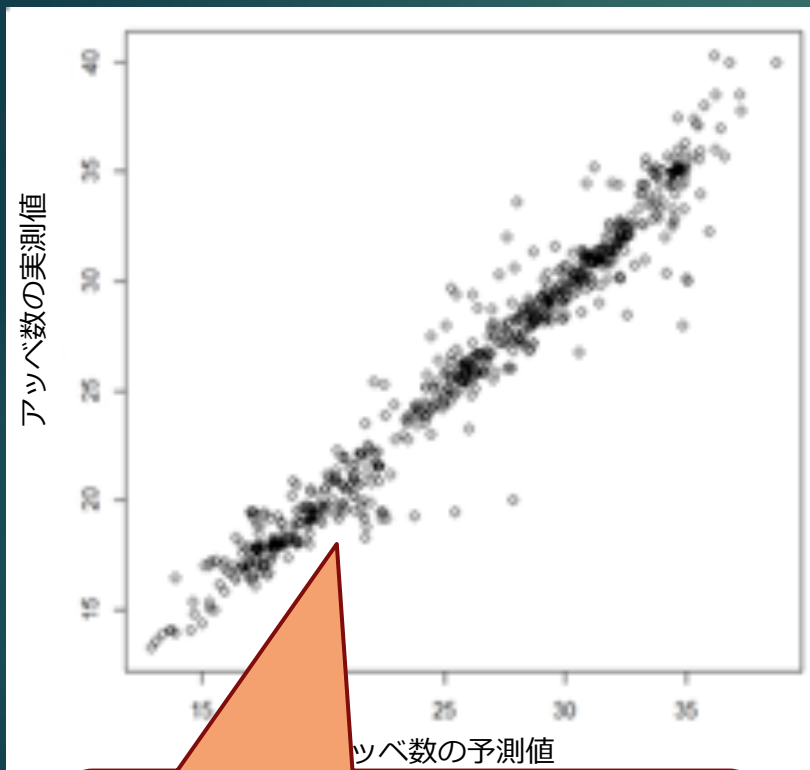
組成比

データが得られる確率を最大化する w を推定

$$\mathbf{w}_{\text{MAP}} = (\lambda \mathbf{I} + \Phi \Phi^T)^{-1} \Phi^T \mathbf{y}$$

MAP推定による結果

回帰による予測結果



MAP推定で概ね
正確に予測可能

添加成分の候補

SrO, CaO, Y₂O₃, Yb₂O₃

サンプル	屈折率	アッベ数
添加なし	1.9962	26.3
SrO(5 %)	1.9878	27.0
CaO(5 %)	1.9910	26.8
Y ₂ O ₃ (2 %)	1.9956	26.9
Yb ₂ O ₃ (2 %)	1.9960	26.9

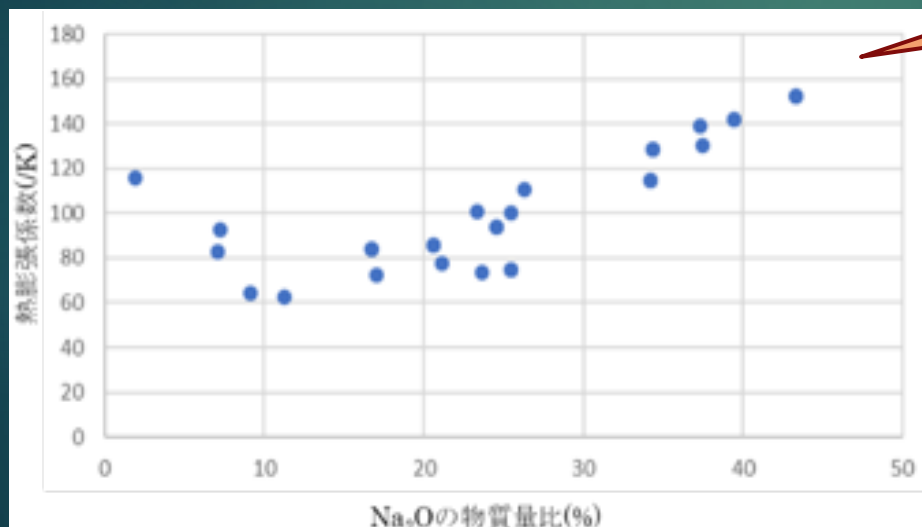
選んだ添加成分により
アッベ数が増加

回帰分析の問題点

$$y = f(x) = w_1 x_1 + w_2 x_1^2 + w_3 x_2 + w_4 x_2^2 + \dots$$

このような線形の形で描き表せない物性の予測には不適切

- 熱膨張係数



グラフが線形でない

回帰モデルの設計が困難



ガウス過程回帰は非線形な物性にも適応可能

図2 Na₂O-B₂O₃-SiO₂の3成分系ガラスのNa₂Oの物質質量比と熱膨張係数

本研究

①母ガラス・添加成分の決定

屈折率1.8～2.0のガラスのデータを抽出
(データはIntergladを使用)

ガウス過程回帰
(カーネルリッジ解析)

確率モデルを導入した
ノンパラメトリック回帰

$$y = f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_1 \varphi_1(\mathbf{x}) + \mathbf{w}_2 \varphi_2(\mathbf{x}) + \mathbf{w}_3 \varphi_3(\mathbf{x}) + \dots$$
$$= \Phi \mathbf{w}$$

アッベ数

組成比

解法

y → 予測値 μ , 共分散 K で表まる

共分散 K

$$K = E[yy^T] - E[y]E[y]^T = \Phi E[ww^T] \Phi^T \\ = \lambda^2 \Phi \Phi^T$$

行列の要素をカーネル関数で表現

$$K = \lambda^2 \Phi \Phi^T = \begin{bmatrix} k(x_1, x_1) & \cdots & k(x_1, x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_n, x_1) & \cdots & k(x_n, x_n) \end{bmatrix}$$

予測値 μ → カーネルの重み付き和で表現

$$\mu_i = \sum_i \alpha_i k(x_i, x')$$

連立方程式を解くと
 α が得られる

解法2

カーネル関数 $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \theta_1 \exp\left(\frac{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^2}{\theta^2}\right)$

➡ 2点のデータ $\mathbf{x}$ と $\mathbf{x}'$ の類似度を表現

$$\mu_i = \alpha_1 \theta_1 \exp\left(\frac{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1|^2}{\theta^2}\right) + \alpha_2 \theta_1 \exp\left(\frac{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|^2}{\theta^2}\right) + \dots$$

予測値 μ , 共分散 $\mathbf{K}$ がもとまる

→組成から直接アッベ数の予測が可能

$$\mu_{\text{new}} = \alpha_1 k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_{\text{new}}) + \alpha_2 k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_{\text{new}}) + \dots$$

アッベ数

組成

各成分を5%加えた時のアッベ数を予測

→予測値 μ の値の大きいもの

結果

①母ガラス・添加成分の決定

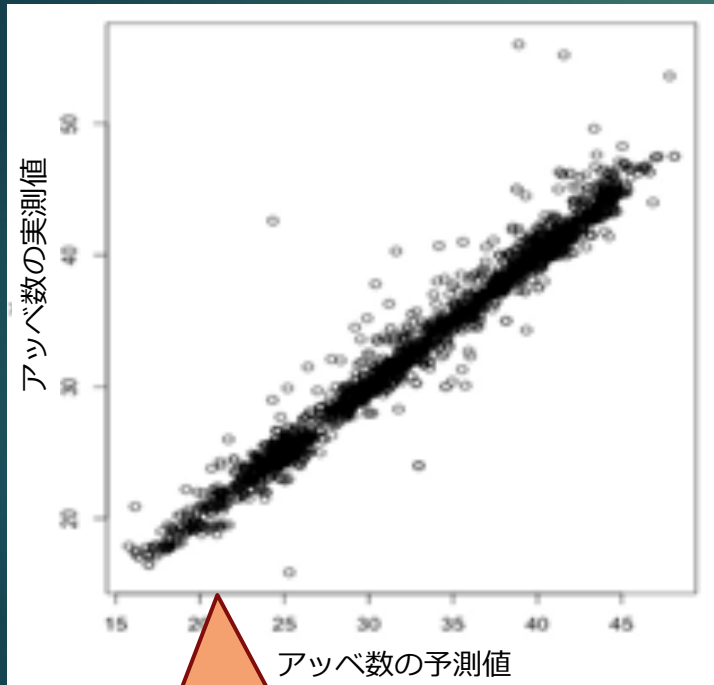
屈折率 $n_d = 1.9995$ アッベ数 $v_d = 28.6$

成分	組成比 (mol%)	成分	組成比 (mol%)
La_2O_3	21.18	ZrO_2	9.65
Nb_2O_5	16.94	Al_2O_3	5.6
Ta_2O_3	4.23	TiO_2	4.83
GeO_2	13.29	SiO_2	4.86
B_2O_3	19.36	Sb_2O_3	0.06

考察

①母ガラス・添加成分の決定

ガウス過程回帰による
予測結果



概ね正確に予測可能

添加成分の候補（全56成分）

Yb_2O_3 , La_2O_3 , SrO , Ta_2O_5 , Nb_2O_5

サンプル	順位	屈折率	アッベ数
添加なし	-	1.9978	26.2
La_2O_3 5%	4	1.9983	29.4
SrO 5%	12	1.9878	27.0
Ta_2O_5 5%	54	2.0237	25.7
Nb_2O_5 5%	56	2.0170	24.3

La_2O_3 はアッベ数が大きく増加
 Nb_2O_5 , Ta_2O_5 に増加なし

結論

Intergladのデータを用いてMAP推定とガウス過程回帰による2つの推定方法で回帰モデルを推算し、比較を行った。その結果以下の事がわかった。

- MAP推定とガウス過程による推定のいずれの方法においても組成と物性の関係を概ね適切に表現できている
- ガウス過程回帰による回帰モデルの推定により新たな添加成分の候補を得られた