

A machine learning approach to the prediction of the dispersion property of oxide glass

深層学習を用いた ガラスの分散特性の予測

滋賀大学 徳田研究室

卒業生の小川稔斗君が作ってくれたものがベースとなっています。

光学ガラスについて



<https://gopro.com/ja/jp/shop/cameras>

屈折率

分散

透過率



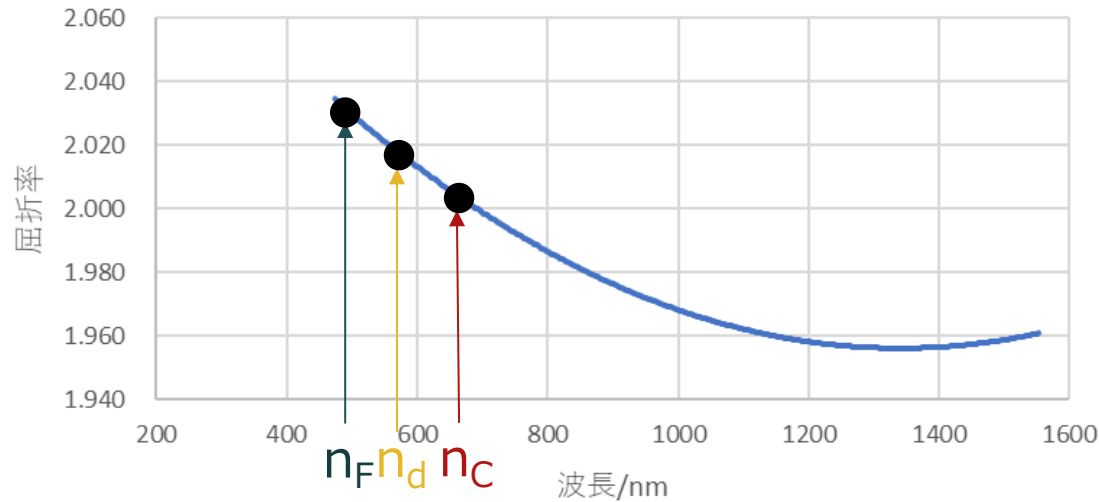
分散の小さなガラスが望ましい



<https://www.apple.com/v/product-red/k/meta/og.png?201812070014>

屈折率の波長依存性

屈折率の波長依存性

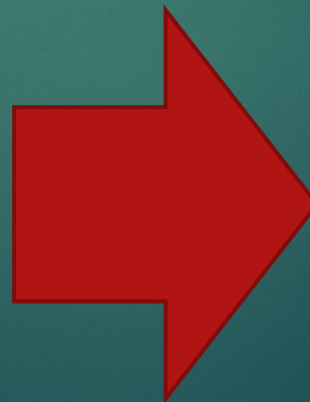


Li₂Oを添加したガラスサンプル

アッベ数の式

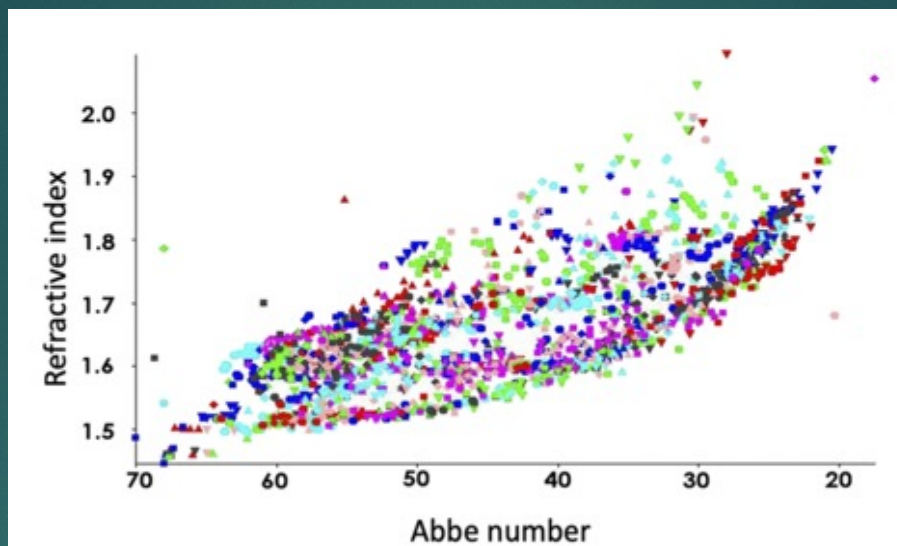
$$v = \frac{n_d - 1}{n_F - n_C}$$

(n_F , n_d , n_C はそれぞれフラウンホーファーのd線, F線, C線の屈折率)



アッベ数 大
分散 小

本研究の目的



屈折率とアッベ数の関係

- ▶ 分散を小さくするための予測は線形回帰 (LM) とガウス過程回帰 (GPR) を使って行われてきた

(Tokuda Y and Fujisawa Metal., AIP Advances(2020))

分散の予測において最も予測性能の高い機械学習は何か？



- ▶ 様々な機械学習 (ニューラルネットワーク (NN), ランダムフォレスト (RF), GPR, LM) を比較

研究方法

母ガラスの決定

高屈折率かつ高アッベ数のガラス組成を探す

添加成分の決定

各機械学習で高屈折率低分散ガラスになるものを予測

サンプルの作製

原料の調合，溶融と成形，研磨を行う

アッベ数の算出

屈折率測定を行い，アッベ数を算出

予測性能の比較

得られたデータから予測性能を比較

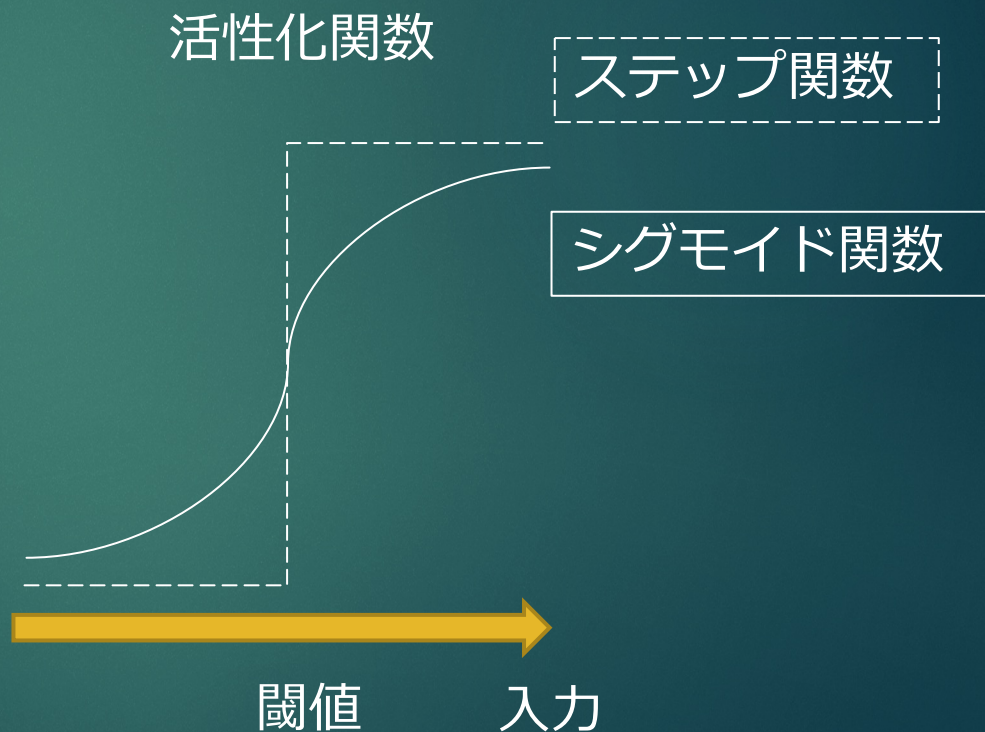
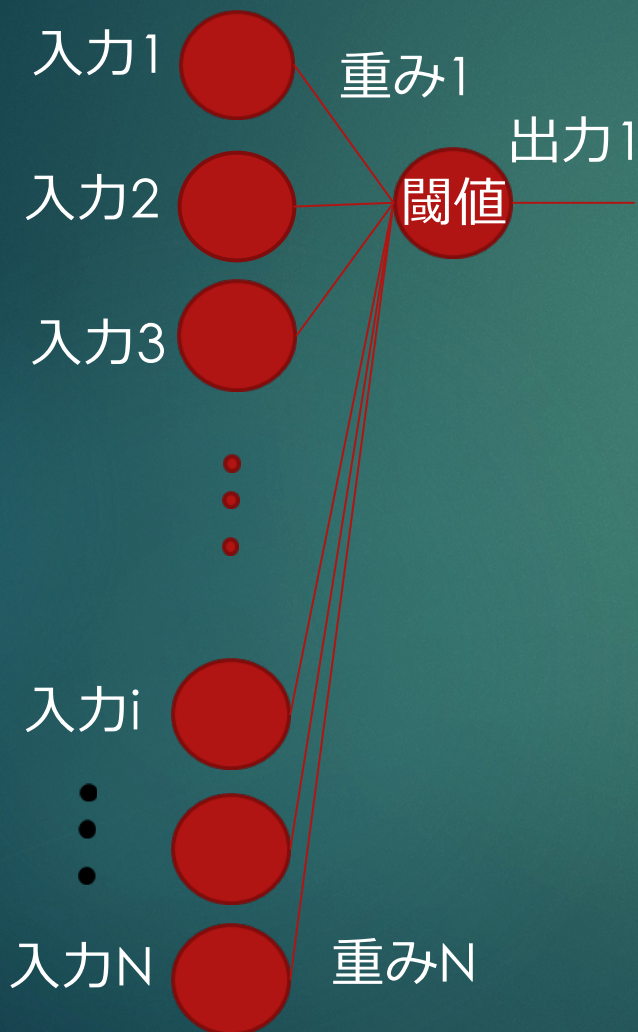
母ガラスの決定

ガラスデータベースINTERGLADから屈折率2.0
かつ高アッベ数のガラス組成を選択

成分	物質質量比 (mol%)	成分	物質質量比 (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

データの解析方法～NN～

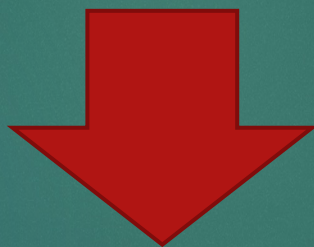
■単純パーセプトロン：最も基本的なニューラルネットワークのモデル



NNの具体的な式

$$h_j(x) = \sigma(b + \sum_{i=1}^N w_{ji}x_i)$$

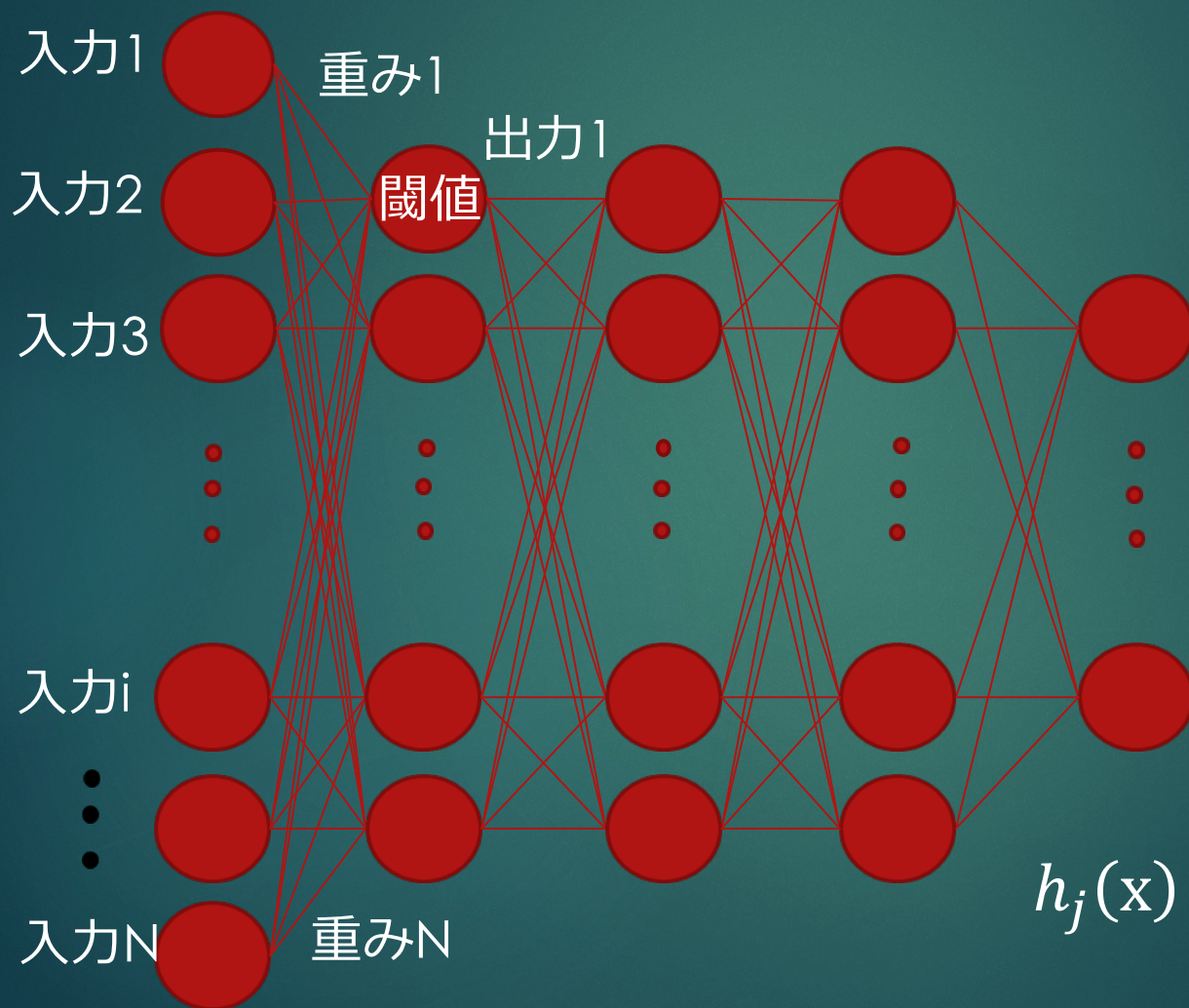
($h_j(x)$ は出力, $\sigma(\cdot)$ 閾値関数, b はバイアス項,
 w_{ji} は重み, x_i は入力)



$\left\{ \begin{array}{l} \sigma \text{の引数が閾値より大きい場合, } \underline{h_j(x) \text{を出力する}} \\ \sigma \text{の引数が閾値より小さい場合, } \underline{\text{出力されない}} \end{array} \right.$

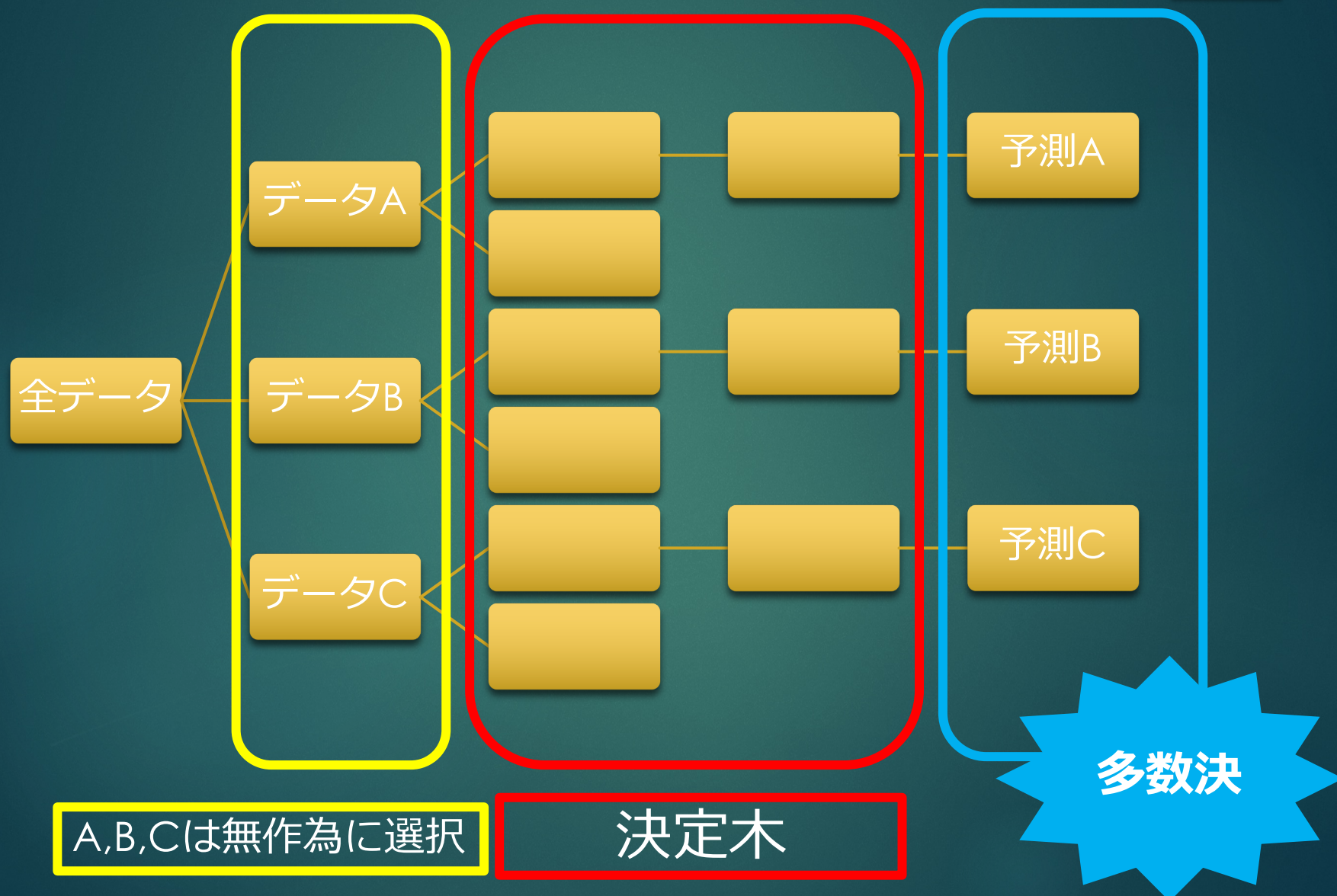
NNモデルと式の関係

■多層パーセプトロン：単純パーセプトロンを組み合わせたモデル

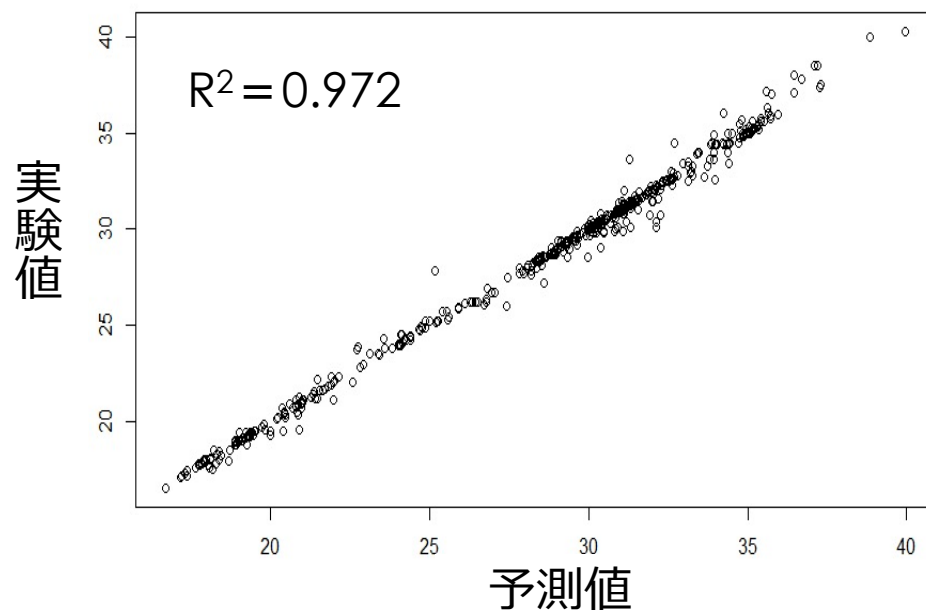
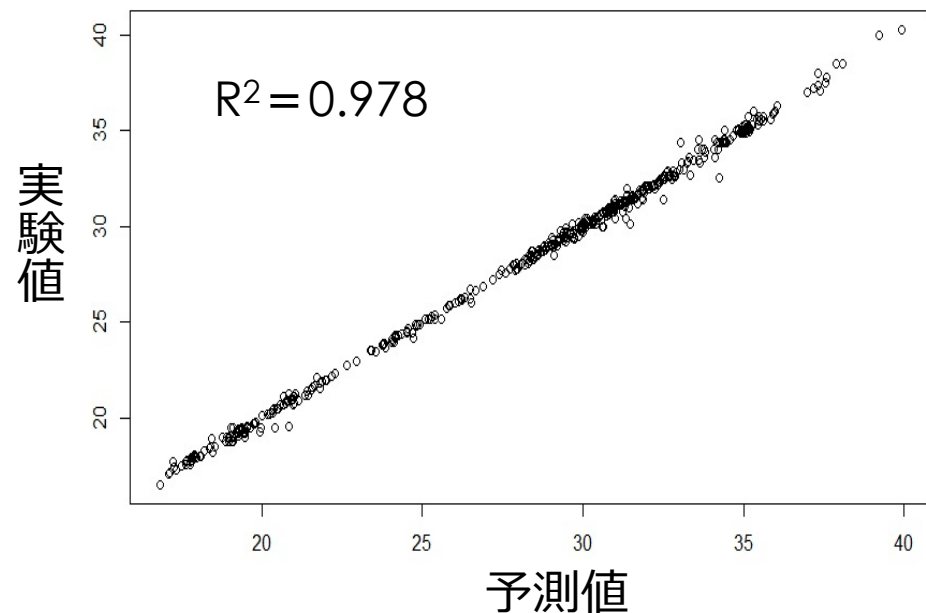


$$h_j(\mathbf{x}) = \sigma\left(b + \sum_{i=1}^N w_{ji}x_i\right)$$

データの解析方法～RF～



既知データの予測性能



NNでアッベ数を予測したデータ

RFでアッベ数を予測したデータ

NNのデータ：点が一直線上になっている
RFのデータ：点が散らばっている

結果

- ▶ 決定係数は値が大きい（1に近い値）ほど予測性能が優れている

機械学習の手法	決定係数 (R^2)
GPR	0.998
NN	0.978
RF	0.972
LM	0.944

サンプル作製



原料の調合



熔融と成形



ガラスの研磨

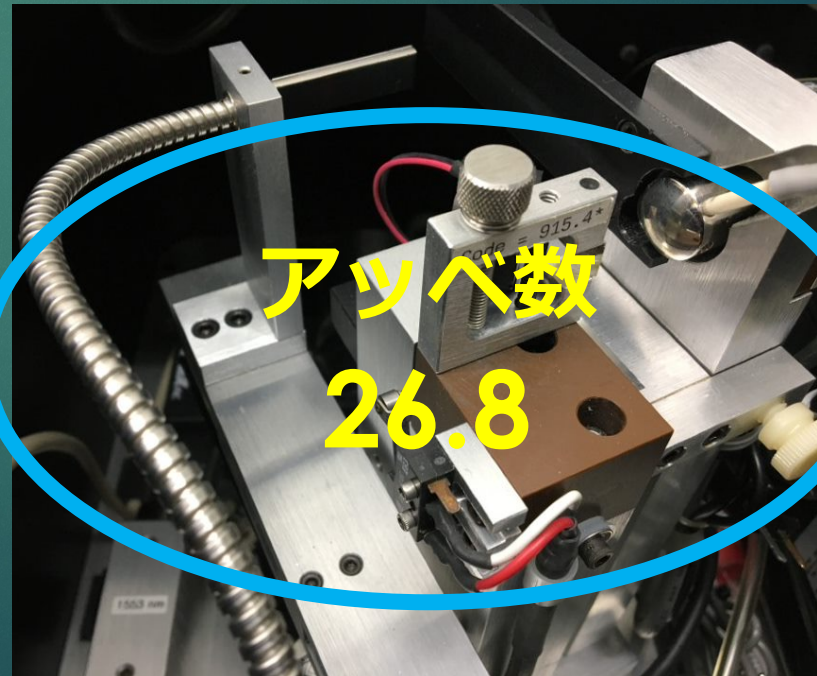
アッベ数の算出

- TiO_2 を外モル3%で添加したガラスサンプル

$$n = A + \frac{B}{L^2} + \frac{C}{L^4} \quad \text{コーシーの分散式}$$

(Lはサンプルに照射する波長, nは各波長に対する屈折率)

波長/nm	屈折率
473	2.04
633	2.00
1319	1.96
1553	1.96
587.56	2.01
486.13	2.03
656.27	2.00



予測性能の比較方法

- ① INTERGLADから既知の高屈折率低分散ガラスの組成とアッベ数のデータを統計言語Rを使って、学習させる

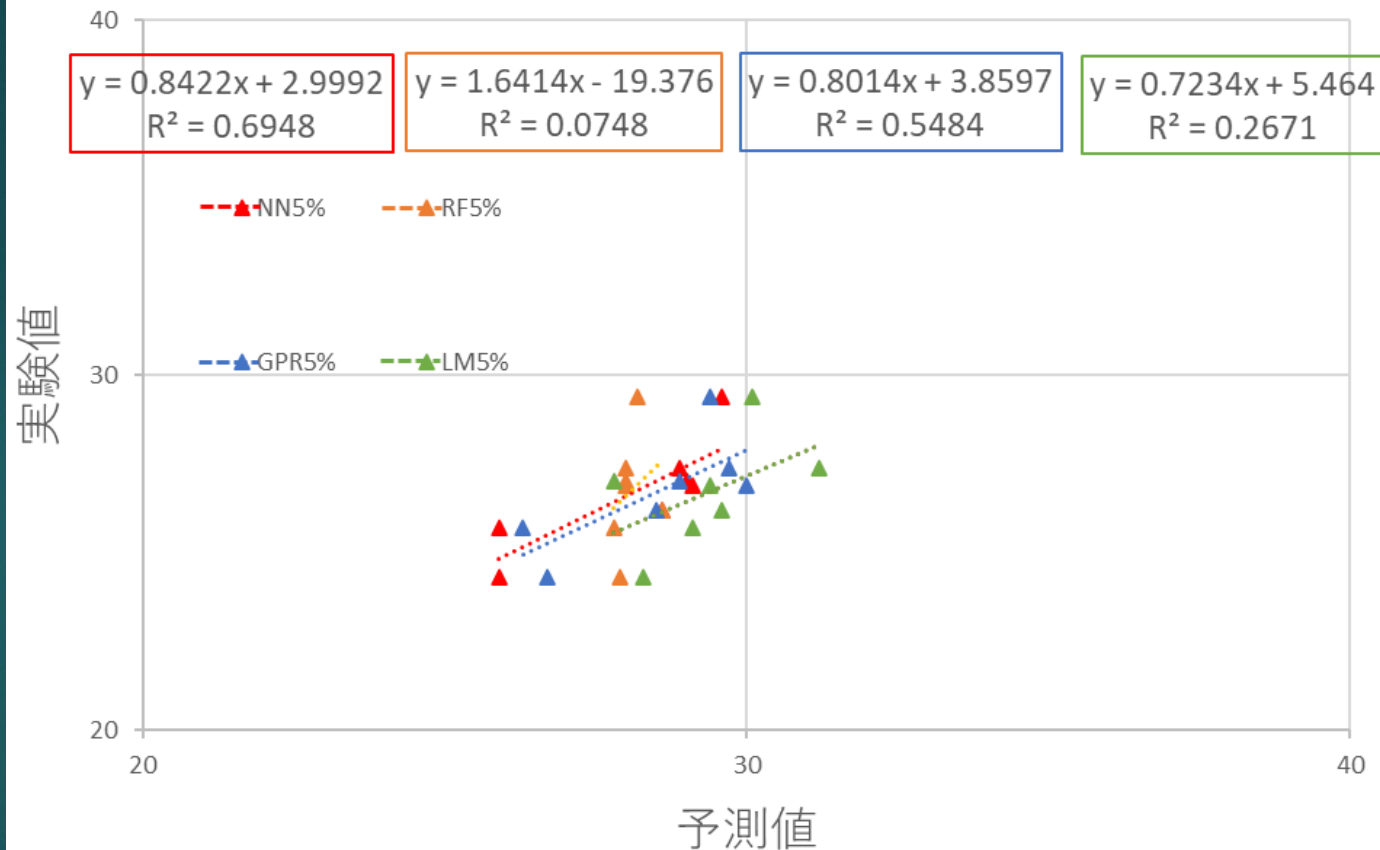
```
y.nn <- train(AbbeValue~SiO2+B2O3+Al2O3+ . . . +MoO2,  
data=interglad_sub, method = "nnet", linout=TRUE, maxit=1000,  
tuneGrid = expand.grid(size=c(10:30), decay=seq(0.1, 1,  
0.1)),preProcess = c("center","scale"))
```

(NNから一部抜粋)

- ② 機械学習のコードを入力し、得た決定係数を各手法で比較

実測値と予測値の比較

機械学習における予測値と実験値



- NNとGPRの決定係数から、分散を予測できることが分かった

結論

INTERGLADから母ガラスを決め、低分散化への寄与率が高い成分を機械学習で予測し、予測値と実験値を比較した結果、以下のことが分かった。

- RFは決定係数が小さいため、分散の予測性能が低かった
- 5%で添加した場合、NN, GPR, LMの順番で予測性能が優れていた

謝辞：屈折率測定を行うにあたって、大阪府立大学の高橋雅英先生にお世話になりました。