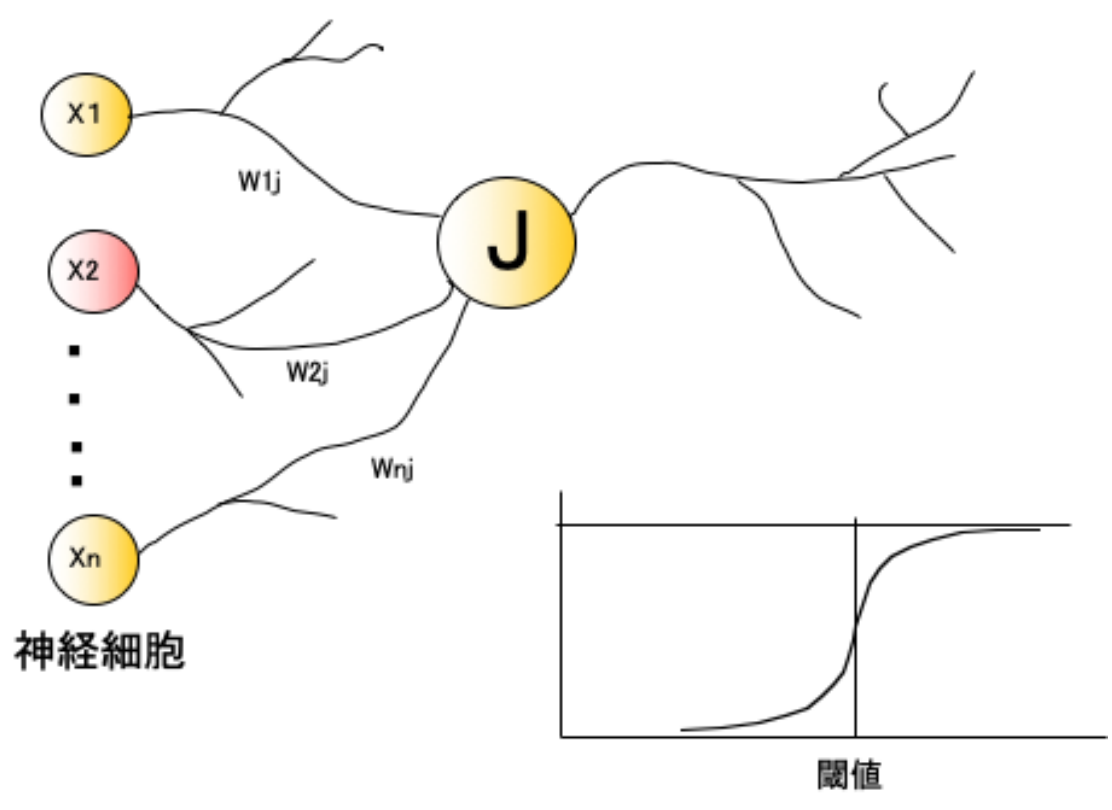


2p21 ニューラルネットワーク法に

よるガラス物性の推算とその応用

旭硝子中央研究所 山本博志

# 人間の脳の構造



多数のシナプスからの刺激(情報)の総和が閾値を超えるとニューロンが興奮(発火)する。

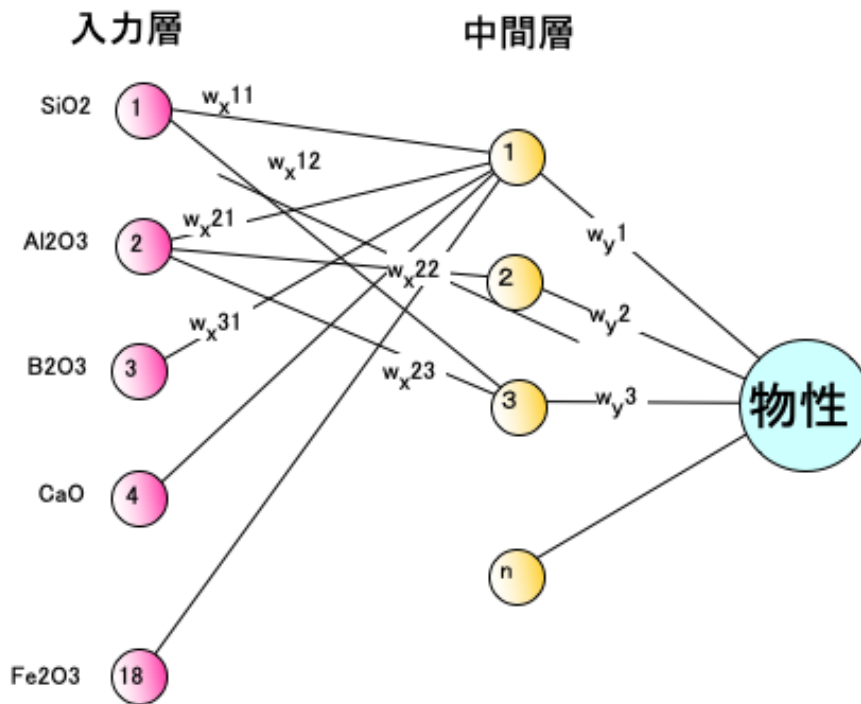


様々な入力情報に対し、最適な結合強度が決まる。



ニューロンの結合強度が認識や記憶を形成する。

## ニューラルネットワークの動作原理



$$\text{物性} = \sum_{j=1}^n w_{y,j} * \text{Sigmoid} \left( \sum_{i=1}^{18} w_{x,ij} * i\text{番目の酸化物mol\%} \right)$$

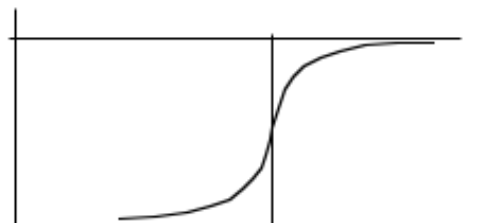
くり返し学習によって  $w_x$ 、 $w_y$  の最適値を求める。

➡ 誤差逆伝播アルゴリズム

シグモイド関数

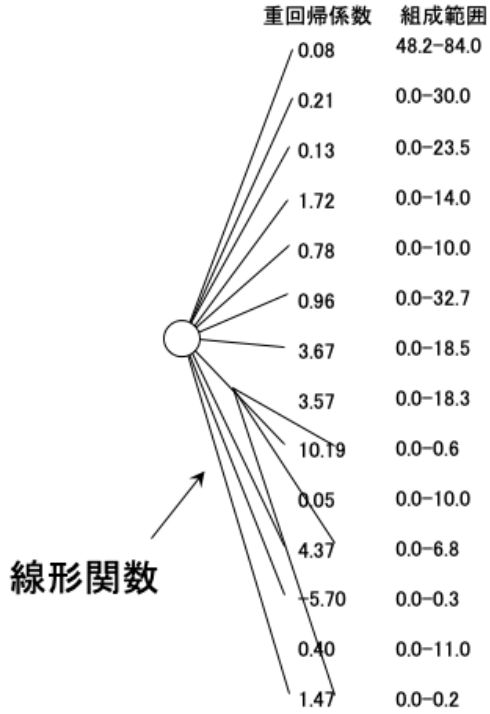
$$f(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}$$

$$\sum_{i=1}^{18} w_{x,ij} * i\text{番目の酸化物mol\%}$$

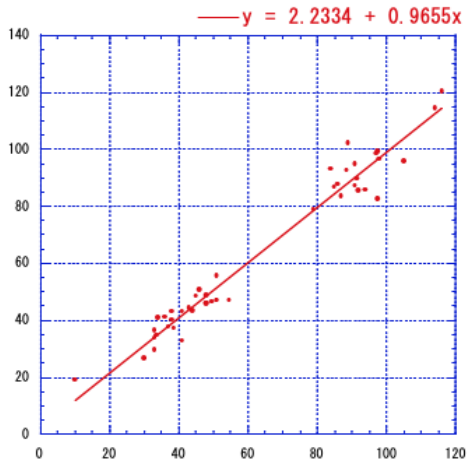
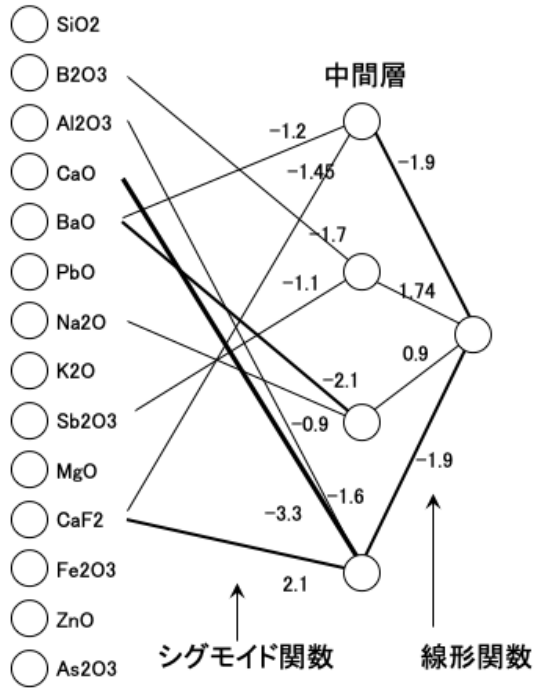


(j番目の中間層)

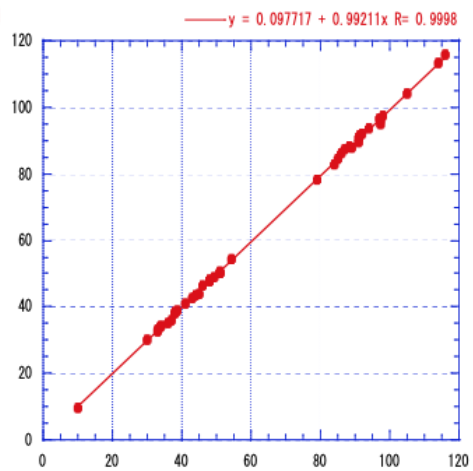
## 重回帰による ガラス線膨張係数推算



## ニューラルネットワークによる ガラス線膨張係数推算



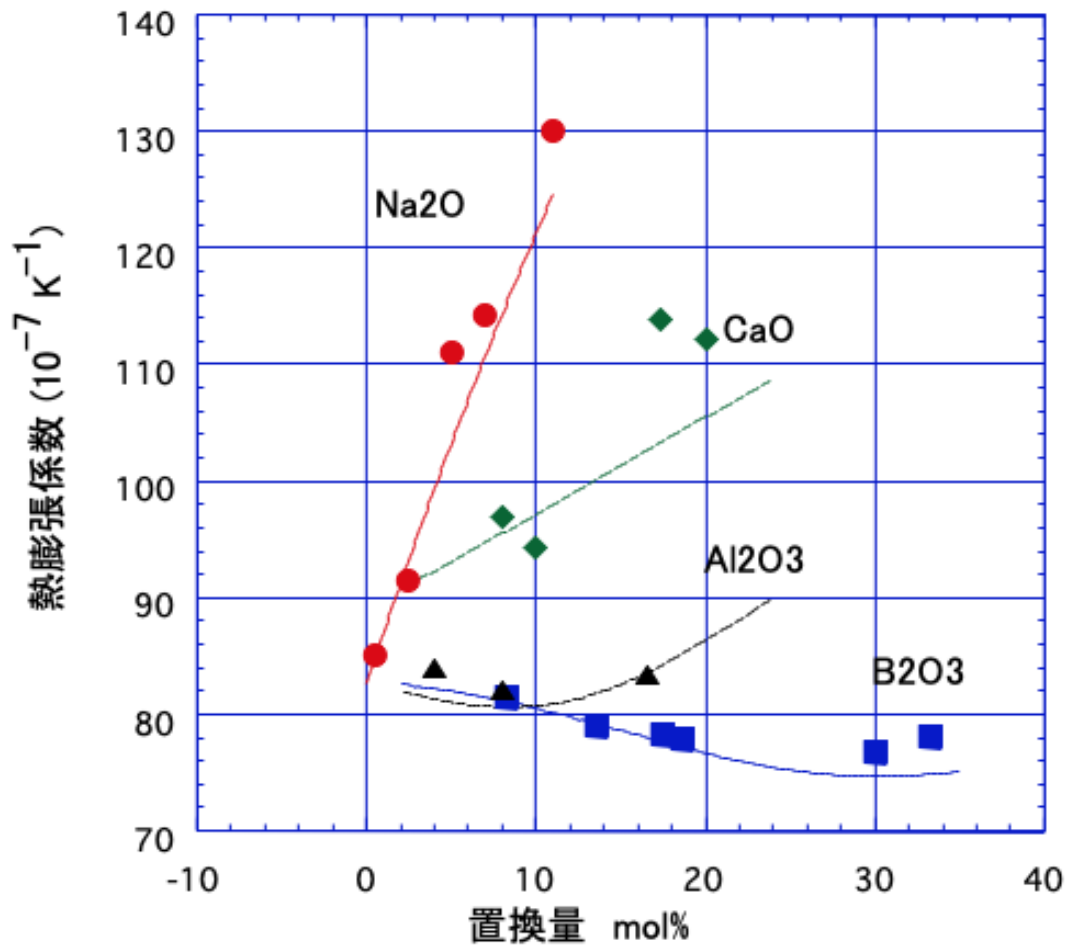
重回帰による  
ガラス線膨張係数推算



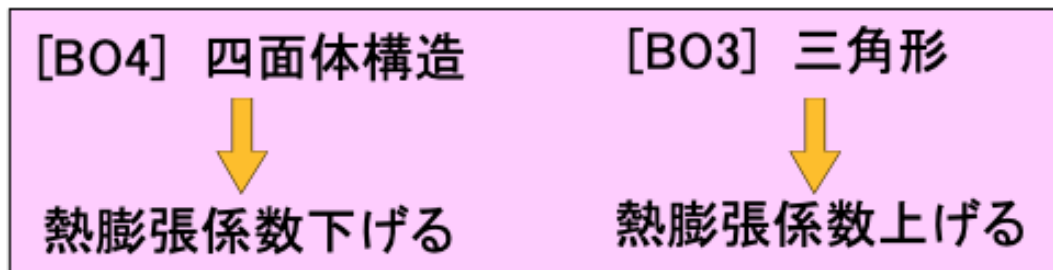
ニューラルネットワークによる  
ガラス線膨張係数推算

## ホウ酸異常

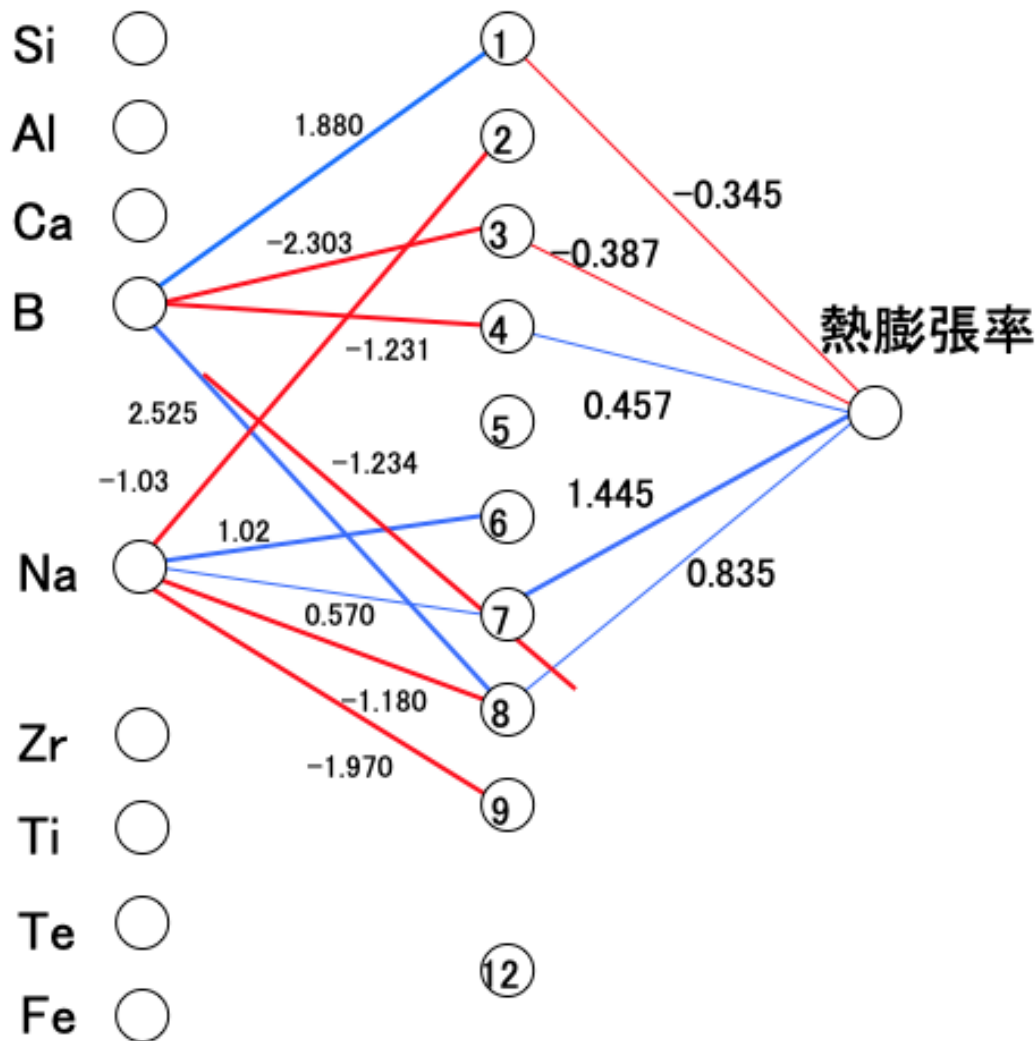
曲線はニューラルネットワーク法による推算値



Na<sub>2</sub>O-SiO<sub>2</sub>(17-83mol%)のSiO<sub>2</sub>を他の酸化物で置換した時の熱膨張係数の変化



ニューラルネットワーク上のホウ素とナトリウムの相互作用解析

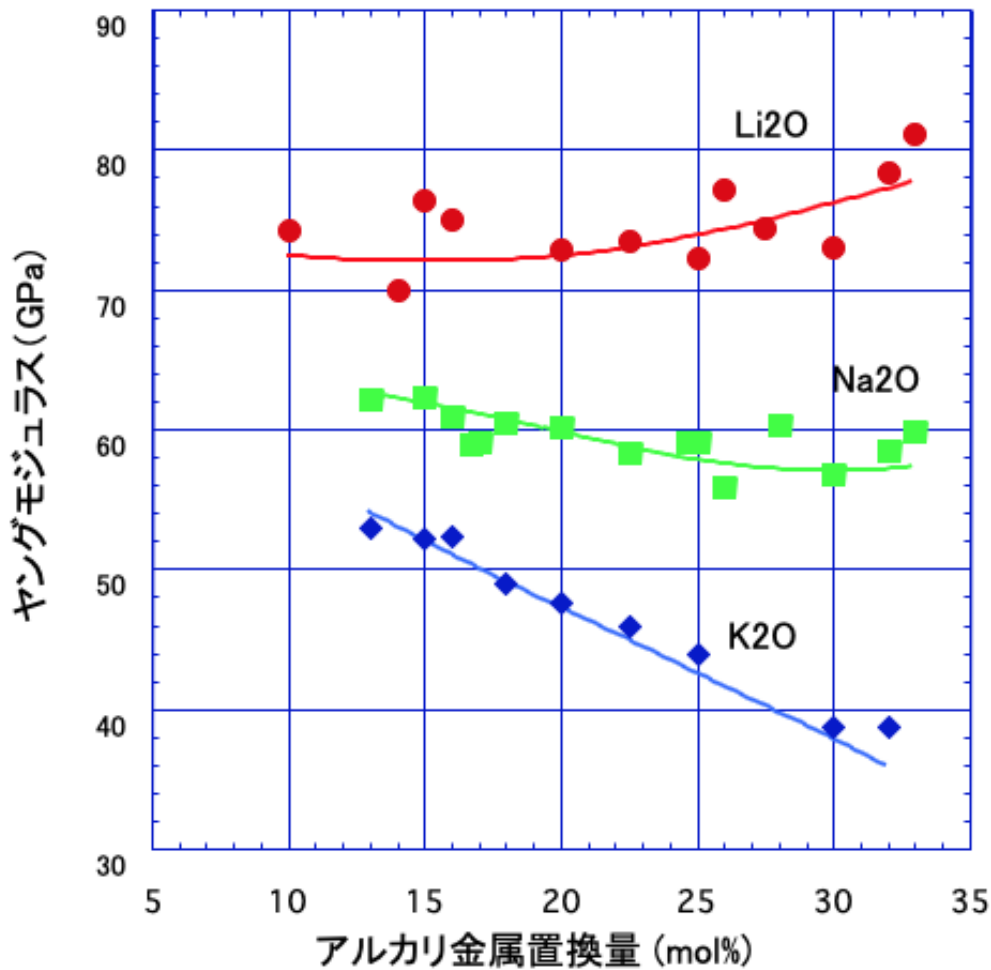


中間層の7でホウ素の係数は-1.234であるのに対しナトリウムは0.570である。中間層から出力層への係数は1.445とプラスであるので、ホウ素が増えるに従い熱膨張率は下がる。

中間層の8でナトリウムのマイナス分をキャンセルすると、逆に熱膨張率は上がり始める。

## アルカリ金属効果

曲線はニューラルネットワーク法による推算値

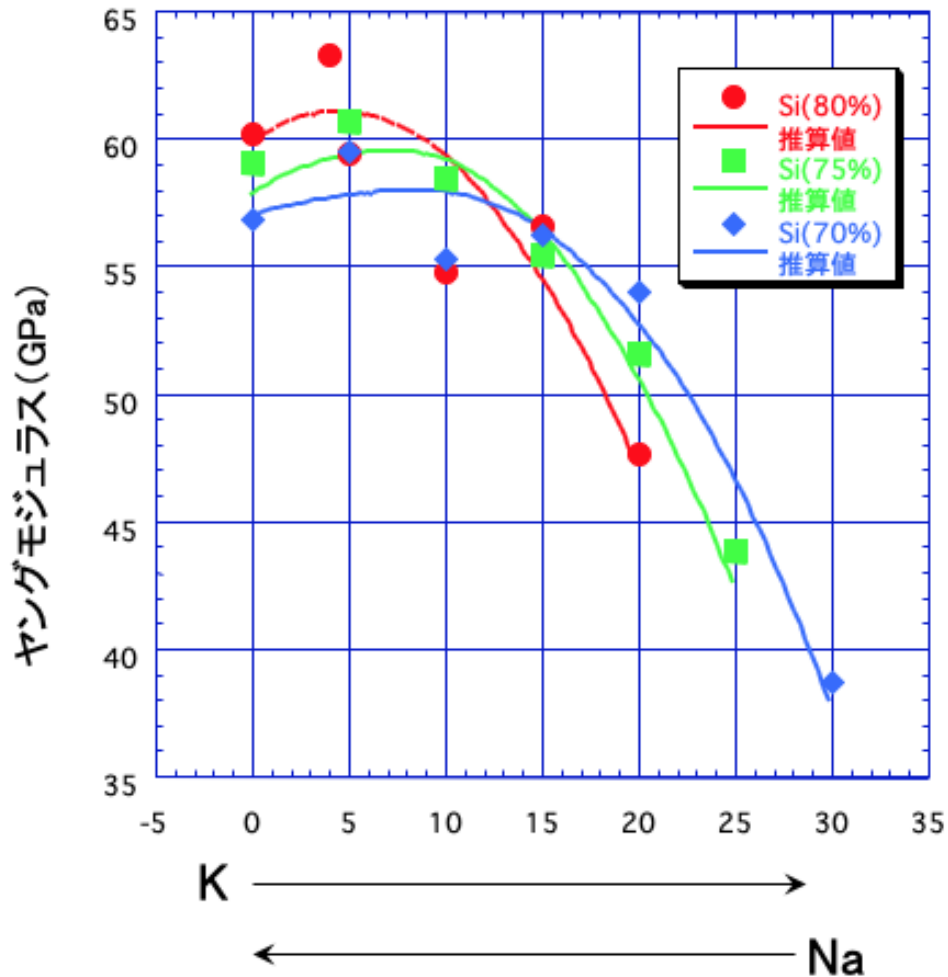


SiO<sub>2</sub>を他のアルカリ金属で置換した時のヤングモジュラスの変化

Li > Na > K      イオン電場強度

## 混合アルカリ効果

曲線はニューラルネットワーク法による推算値

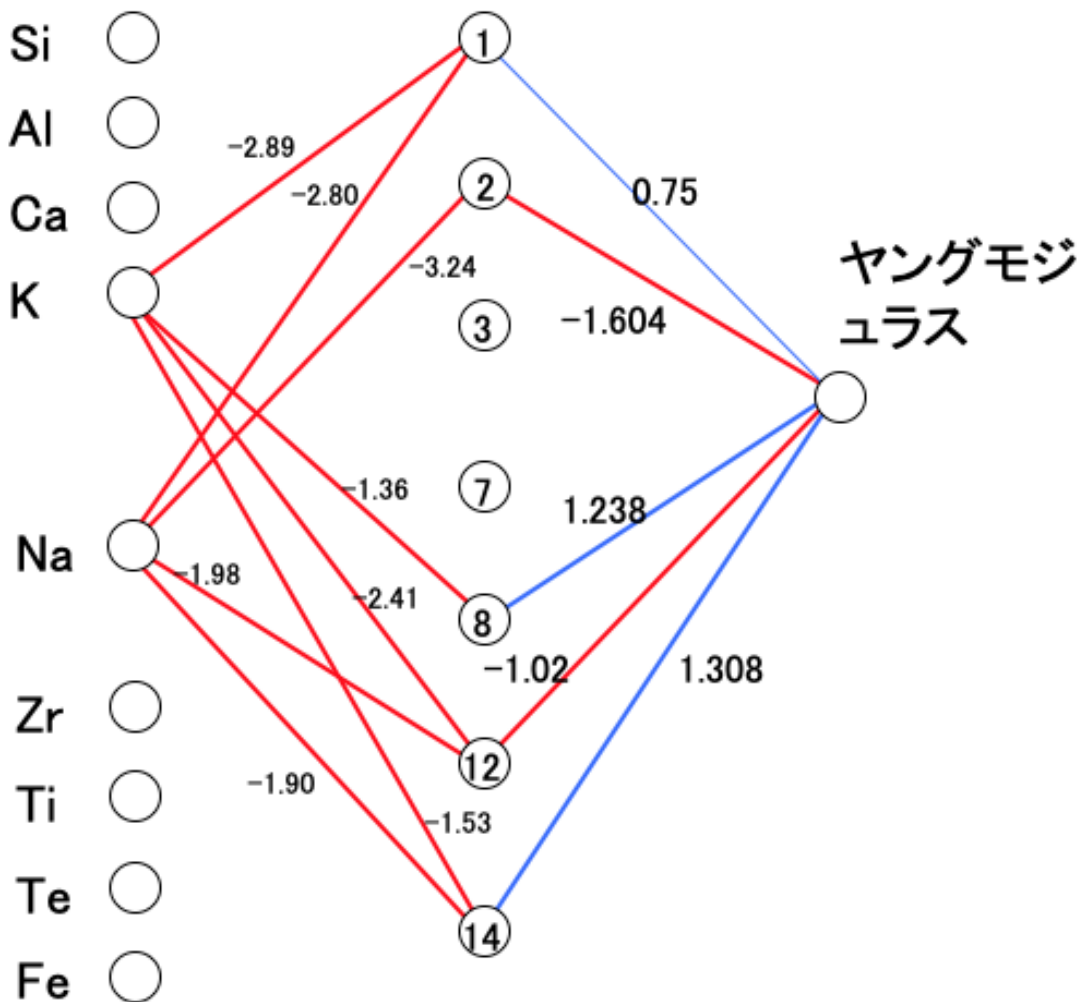


一般的にKの添加はヤングモジュラスを下げる。  
KとNaが混合されるとヤングモジュラスは逆に高くなる

分相説、緻密化説、独立構造説  
移動妨害説、弾性的双極子説.....。



ニューラルネットワーク上のカリウムとナトリウムの相互作用解析

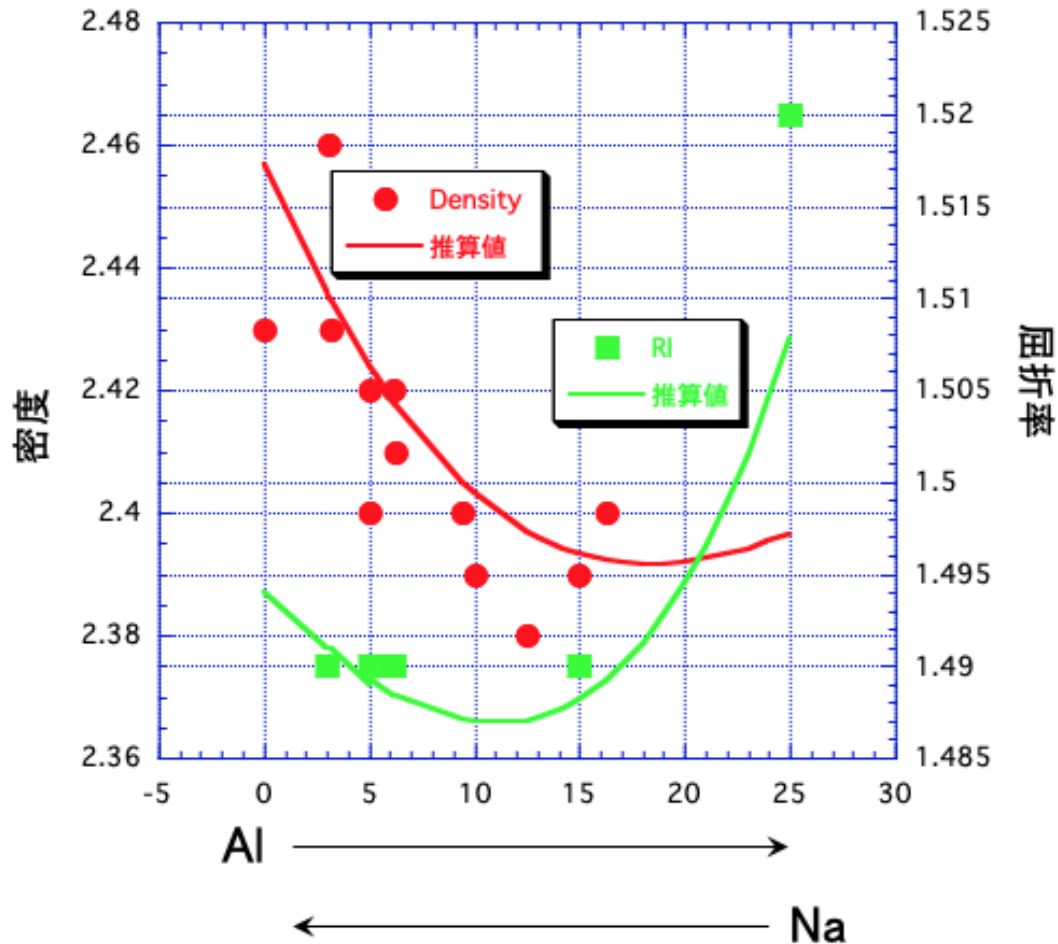


中間層の2でNaはヤングモジュラス(YM)を上げる。 中間層の8でKはYMを下げる。

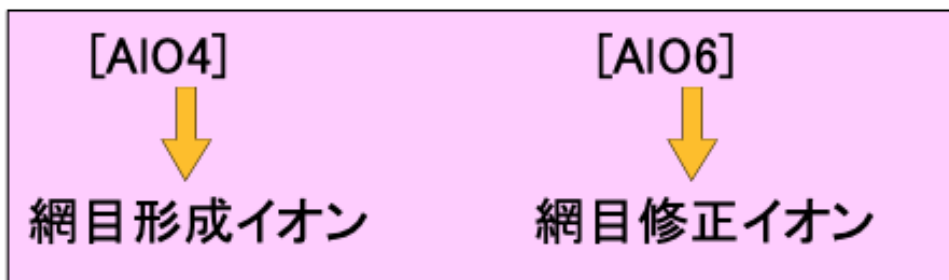
中間層の12ではYMを上げ(マイナス\*マイナス)、 1と14ではYMを下げる(マイナス\*プラス)。

## アルミナ異常

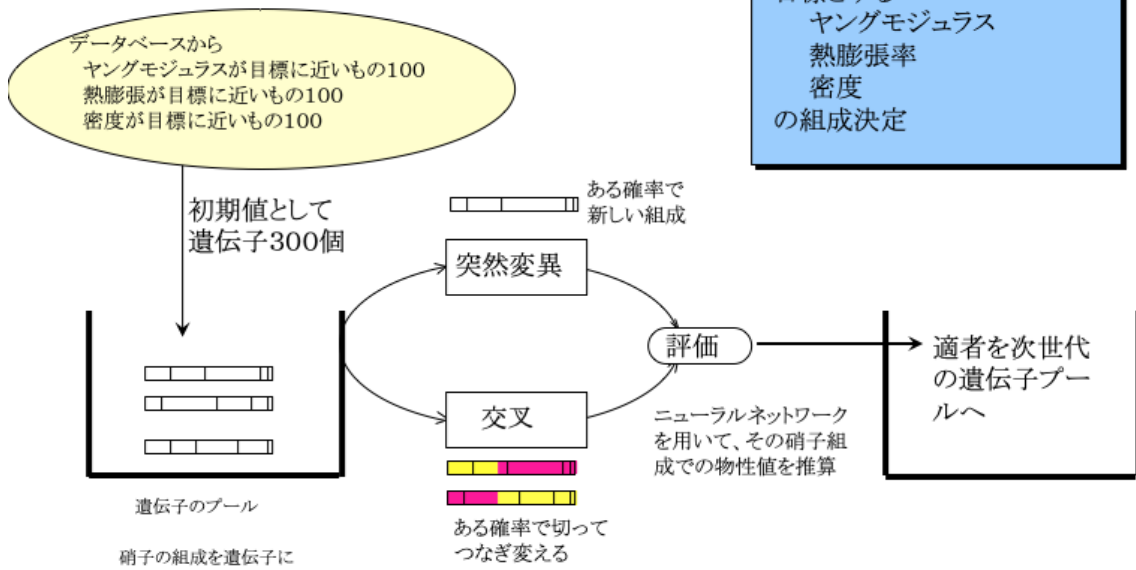
曲線はニューラルネットワーク法による推算値



SiO<sub>2</sub>-Na<sub>2</sub>O(75mol%-25mol%)のガラスのNa<sub>2</sub>OをAl<sub>2</sub>O<sub>3</sub>で置換した時の密度変化と屈折率変化。



# 遺伝的アルゴリズム



$$\text{評価関数} = \frac{100}{(|\text{YM誤差}| + |\text{熱膨張誤差}| + |\text{密度誤差}|)}$$

## 低熱膨張率ガラスの設計

ハッブル宇宙望遠鏡の反射鏡  
スペースシャトル耐熱タイル

→ 低熱膨張率を要求される

Si-Ti 系ガラスは非常に低膨張率である  
が難溶性

ヤングモジュラス (YM) 65  
熱膨張率 (TEC) 10  
密度 (DEN) 2.3  
ガラス転移温度 (T<sub>g</sub>) 750

他の物性はそのままにガラス転移  
温度を150°C下げる組成候補をスクリーニング

ニューラルネットによる推算値

SiO2	Al2O3	B2O3	K2O	Li2O	MgO	ZnO	P2O3	GeO2	TeO2	Fe2O3	YM	TEC	DEN	T <sub>g</sub>
90.82	0	0	0	2.64	0	0	0	6.54	0	0	66.22	8.43	2.29	607.1
86.98	2.5	0	0	3.03	0	0	0	7.49	0	0	66.99	9.45	2.31	629.1
87.14	0	0	0	3.05	0	2.28	0	7.53	0	0	67.8	11.3	2.37	581.9
87.58	0	0	0	3.05	1.83	0	0	7.54	0	0	66.7	11.99	2.33	601
87.33	0	0	0	3.04	0	0	2.11	7.52	0	0	64.61	12.14	2.32	579.5
88.76	0	0	0.51	3.09	0	0	0	7.64	0	0	65.77	12.5	2.31	580.2
79.75	10.61	0	0	2.78	0	0	0	6.86	0	0	70.69	12.82	2.34	779.9
84.91	0	0	0	2.96	0	0	0	7.31	0	4.82	69.05	13.01	2.47	515.11
86.33	0	0	0	3.02	0	0	0	7.46	3.18	0	64.75	13.57	2.44	537.6
85.02	0	4.7	0	2.96	0	0	0	7.32	0	0	64.01	13.86	2.31	582.7

## 鉛ガラスの軽量化

TV用ブラウン管、ファンネル部分

通常の組成

Si 51%      ヤングモジュラス (YM) 64  
Al 4%      熱膨張率 (TEC) 104  
Pb 23%      密度 (DEN) 3.91  
Na 6%      ガラス転移温度 (T<sub>g</sub>) 410  
K 7.5%  
Ca 8.5%

強度が落ちると、厚くなる。  
重くしたくない。

パネルやネックと接合する。  
TEC変わると困る。

1割軽量化したい。  
3.50へ

ガラスの溶解条件、変更し  
たくない。

ニューラルネットによる推算値

SiO2	Na2O	PbO	SrO	MgO	Al2O3	B2O3	CaO	K2O	Li2O	ZnO	P2O3	TeO2	YM	TEC	Den	T <sub>g</sub>
57.47	15.85	17.79	8.89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	63.61	100.23	3.56	417.1
56.59	14.2	17.66	9.44	0	0	0	0	1.7	0.41	0	0	0	65.14	104.31	3.55	406.4
53.88	17.4	17.34	9.76	0	0	0	0	0	0	1.61	0	0	64.18	103.86	3.59	415.3
57.94	14.53	16.31	8.15	1.33	0	0	0	1.74	0	0	0	0	64.69	103.94	3.47	412.3
50.25	16.23	17.92	8.96	1.46	0	0	0	0	0	0	5.18	0	61.39	98.1	3.58	402.2
55.03	16.15	18.12	9.24	1.47	0	0	0	0	0	0	0	0	64.52	101.04	3.58	416.1
54.61	17.64	15.35	10.19	1.66	0	0.56	0	0	0	0	0	0	66.48	103.75	3.46	418.1
40.83	17.19	16.33	0	0	12.52	4.96	0	0	0	8.17	0	0	65.14	102.54	3.5	409.1
45.25	18.26	18.26	0	0	13.88	0	1.84	0	0	0	0	2.51	62.08	103.17	3.5	419.4

まとめ

研究者のカンと経験による  
ガラスの設計

ガラスの組成と物性値が  
線形でない

ガラス組成の自由度が  
非常に高い

ニューラルネットワークによる  
物性推算システム

遺伝的アルゴリズムによる  
組成決定システム

情報化学を駆使した  
ガラスの設計

→ 応用

低熱膨張ガラスの設計  
鉛ガラスの軽量化