

ニューラルネットワークを用いた酸化物  
ガラスの物性推算と遺伝的アルゴリズム  
を用いた組成決定システムの開発

資料名: 触媒討論会討論会A予稿集 巻:86th ページ:153  
発行年:2000年08月28日

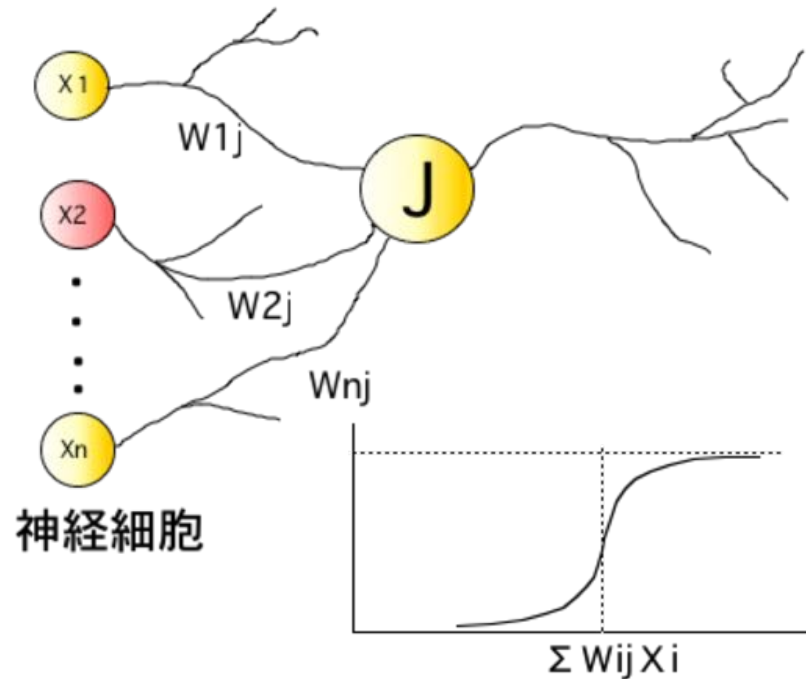
# 本日の議題

- イントロダクション  
ニューラルネットワーク(ANN)とは  
ANNの動作原理
- 酸化物ガラスの物性推算  
従来法とANN法の比較  
ガラスの異常物性と物性推算
- 遺伝的アルゴリズムによる組成決定システム  
遺伝的アルゴリズムとは  
特種ガラスの組成決定

# 脳とコンピュータの違い

	脳	コンピュータ
情報処理の特徴	低速、 <b>あいまい</b> 、並列的	高速、正確、直列的
得意な情報処理	<b>パターン認識、総合判断</b>	数値計算
情報の表現方法	アナログ	デジタル
記憶方式	<b>連想記憶（シナプス等に分散）</b>	番地による記憶
再現性	低い	高い
誕生、製作	遺伝子、発生、自己組織化	配線図、ソフトウェア
性能アップ法	<b>学習</b>	<b>ソフトの向上</b>
忘却	<b>ある</b>	ない
耐故障性	高い	低い
構成素子	ニューロン（神経細胞）	プロセッサ
素子数	約140億	～100万
動作スピード	遅い（1000/sec）	<b>速い（<math>10^9</math>/sec）</b>

# 人間の脳の構造

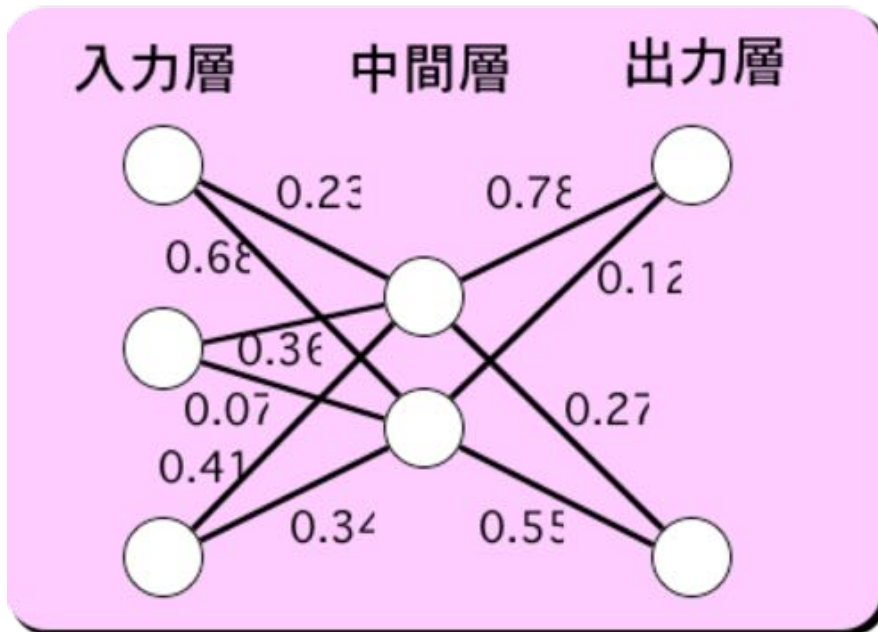
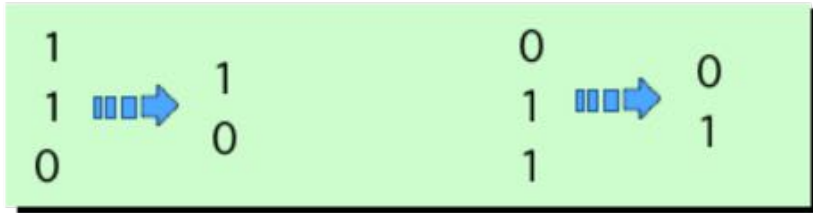


- 多数のシナプスからの刺激（情報）の総和が閾値を超えるとニューロンが興奮（発火）する。
- 様々な入力情報に対し、最適な結合強度が決まる。
- ニューロンの結合強度が認識や記憶を形成する。



コンピューター上に実現(ANN)

# ニューラルネットワークによる学習（1）

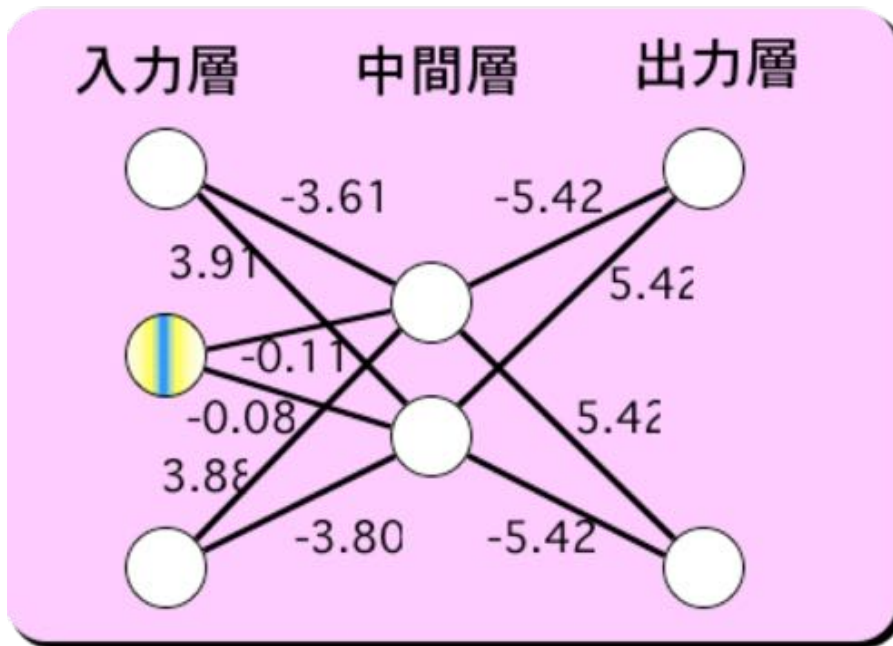


- 重みに乱数で値を入れる。
- 入力値と重みから出力値を得る。
- 出力値と本来の答えとの誤差を逆向きに修正する。（BP法）
- 何度もくり返す

# ニューラルネットワークによる学習 (2)



- 規則の発見機能  
まんな中の入力ニューロンは役に立っていないことを自動的に見い出す。



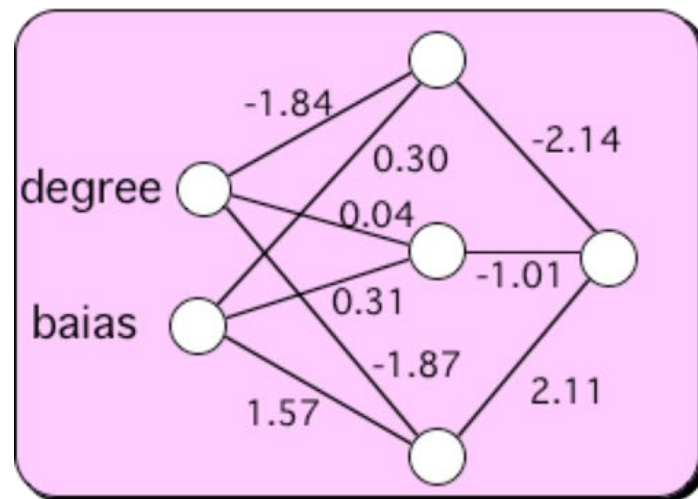
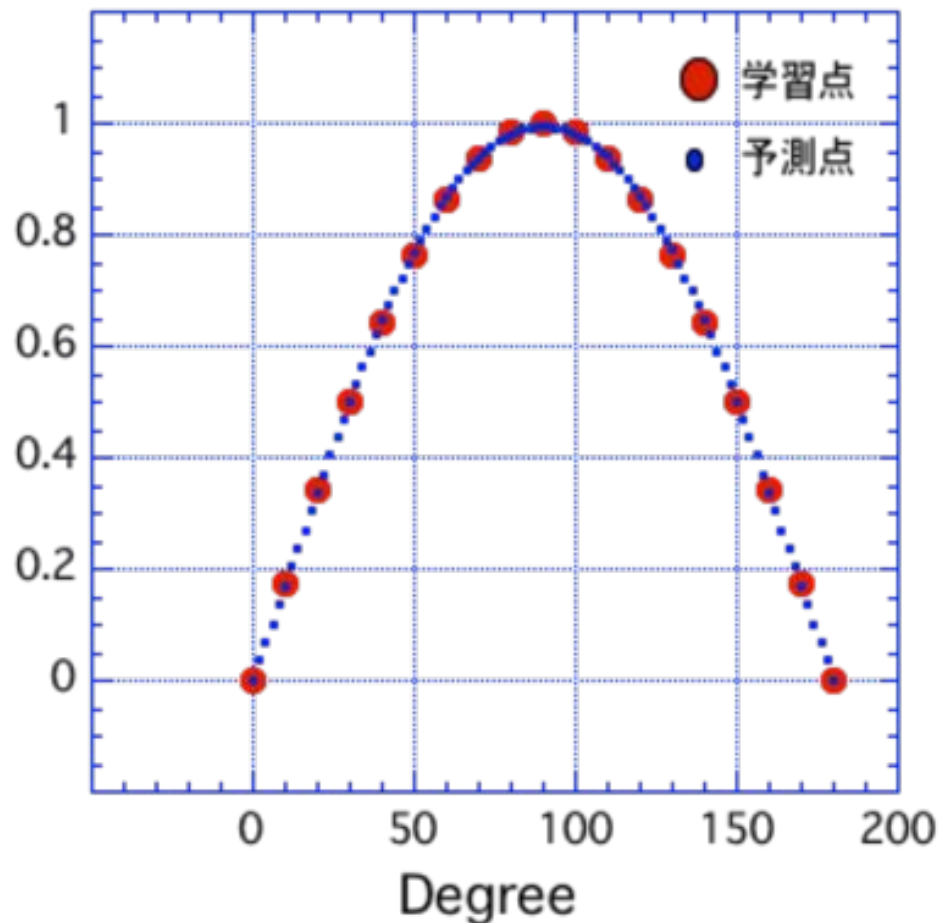
- 類推機能  
教えてはいない、100、001  
を入力すると正しい答えを返す。



## 応用分野

物性推算、スペクトル解析、  
パターン認識、生産工程制御

# Sinカーブの学習



複雑な事象に対し非常に簡単に（自動的に）ネットワークを生成

非線形性を容易に導入

物性推算には好都合

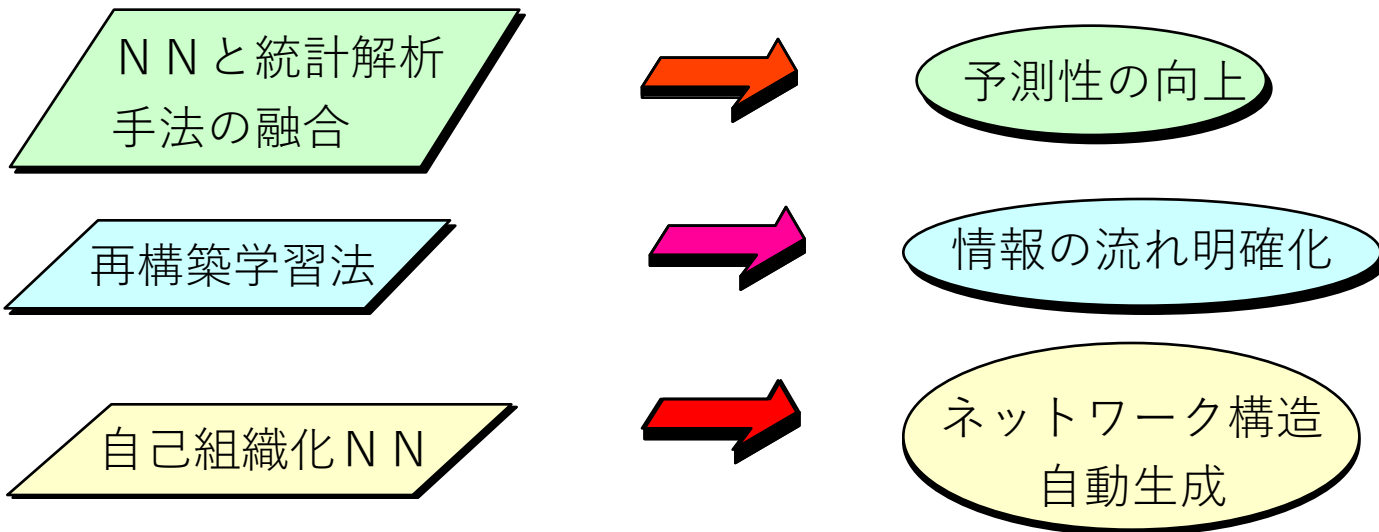
## ニューラル・ネットワークによる物性推算の特徴

### 長所

非常に記述性が高い。  
素人でも容易に推算式構築可能。  
プログラムがシンプル。

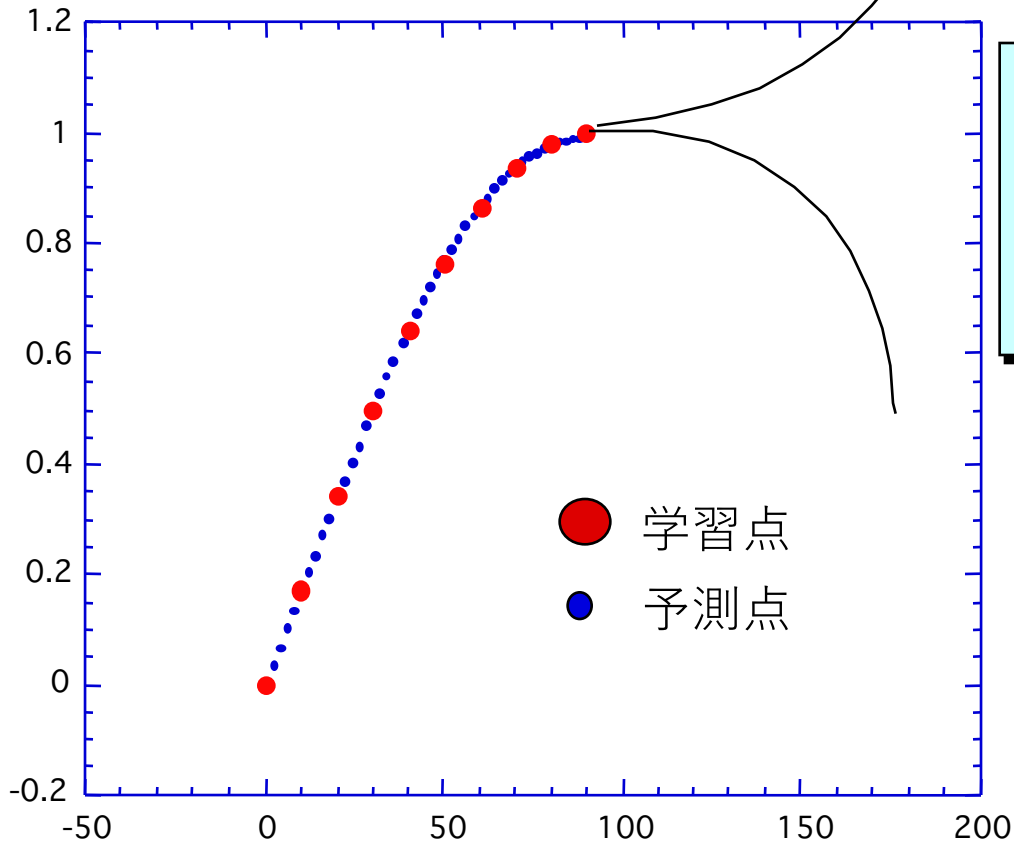
### 短所

予測性が低い。（外挿は不可）  
情報の流れが複雑。  
ネットワーク構造の最適化が困難。  
計算時間大。





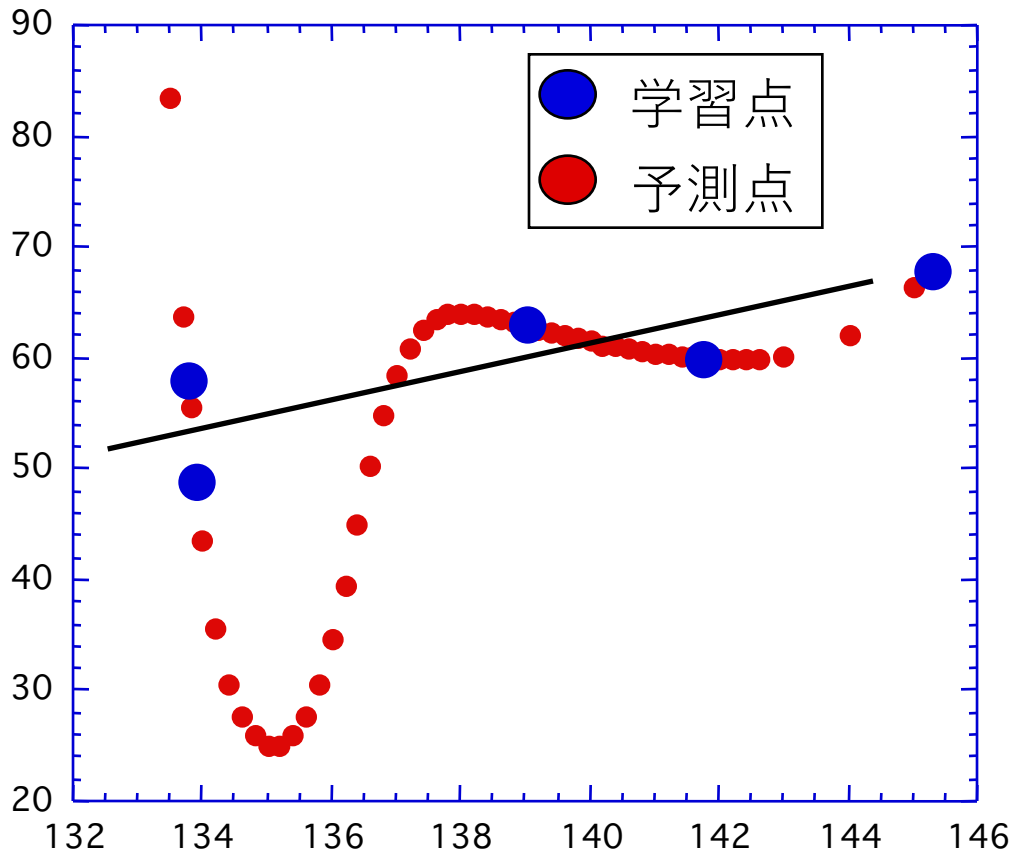
# 内挿、外挿



ニューラルネットワークは非常に高いFitting能力を持つ為、基本的には外挿性はない。

学習していないことに関して是不確

# 過学習の例



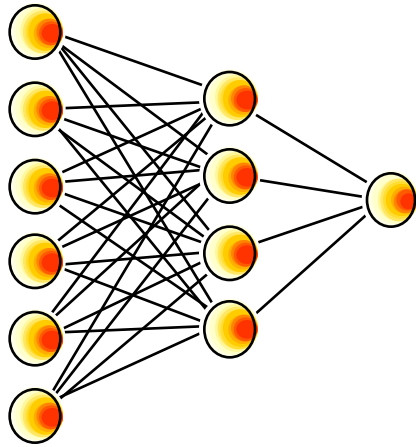
## 過学習をしやすい条件

- 中間層が多い
- 収束の閾値小さい
- 非線形性あげすぎ
- 入力データ少ない

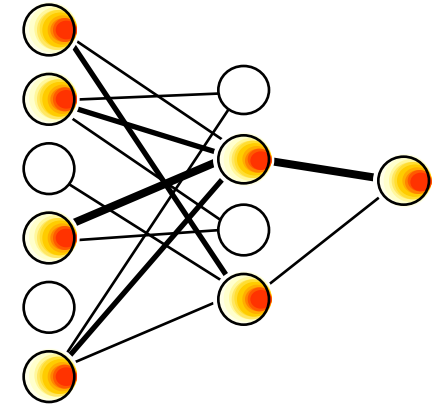
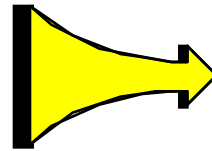


再構築学習法  
自己組織化NN

# ニューラルネットワーク、再構築学習法



500回に1回忘却  
効果を取り入れる



$$W_{ij} = W_{ij} - \text{sgn}(W_{ij}) \zeta \{ 1 - \delta (W_{ij}) \}$$

$$\delta (W_{ij}) = 1 \quad |W_{ij}| < \zeta$$

$$\delta (W_{ij}) = 0 \quad |W_{ij}| > \zeta$$

強い結合はさらに強くなる。

弱い結合はほとんど0になる。

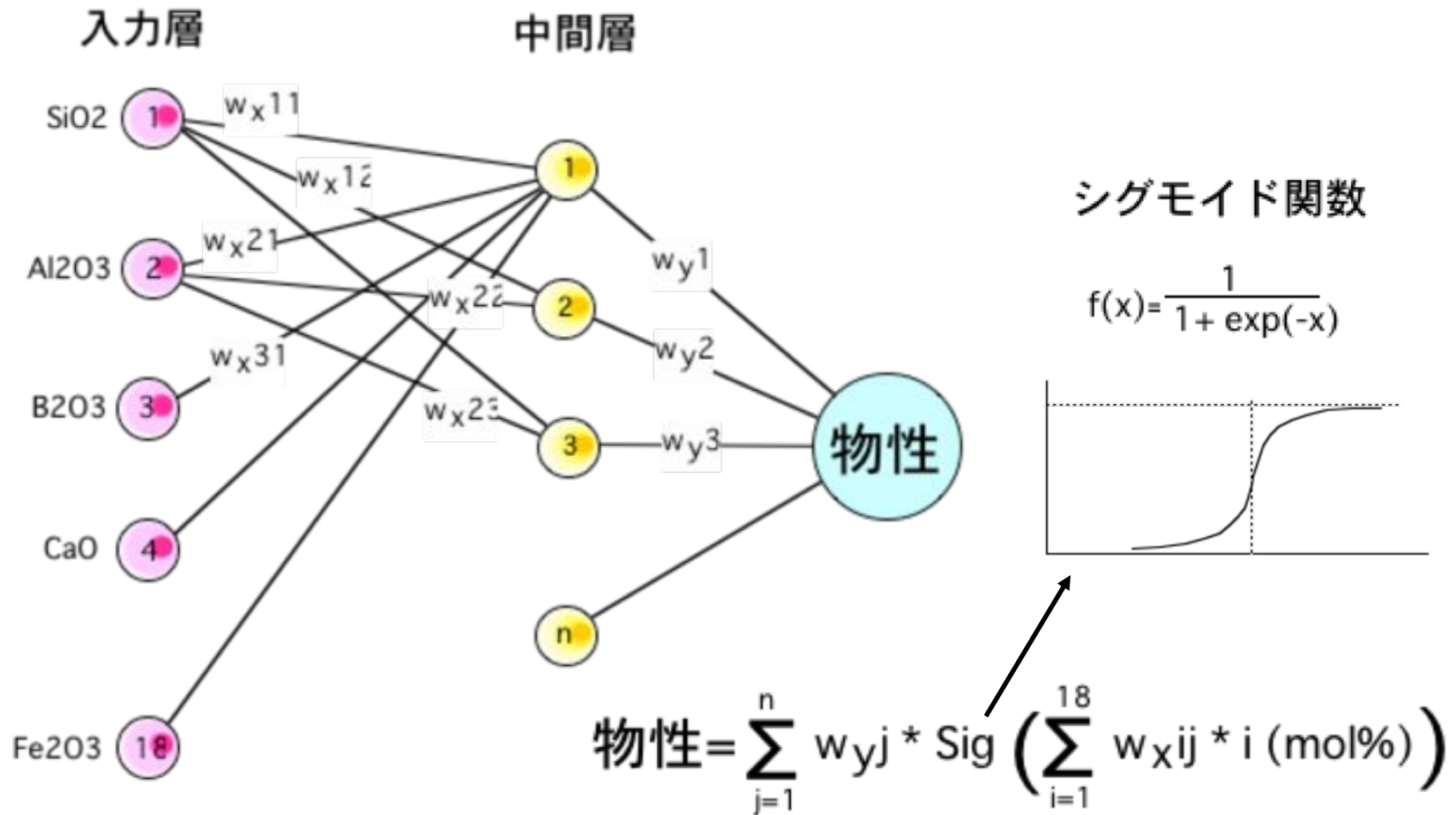
情報の通路に関係ないニューロンの孤立化。

# ニューラルネットワーク法による酸化物ガラスの物性推算

- ニューラルネットワークの動作原理
- ニューラルネットワーク法と重回帰法の対比
- ニューラルネットワーク法の記述性  
(ガラス転位温度、ヤングモジュラス、密度、熱膨張係数)
- アルカリ金属効果
- 混合アルカリ効果
- ホウ酸異常
- アルミナ異常

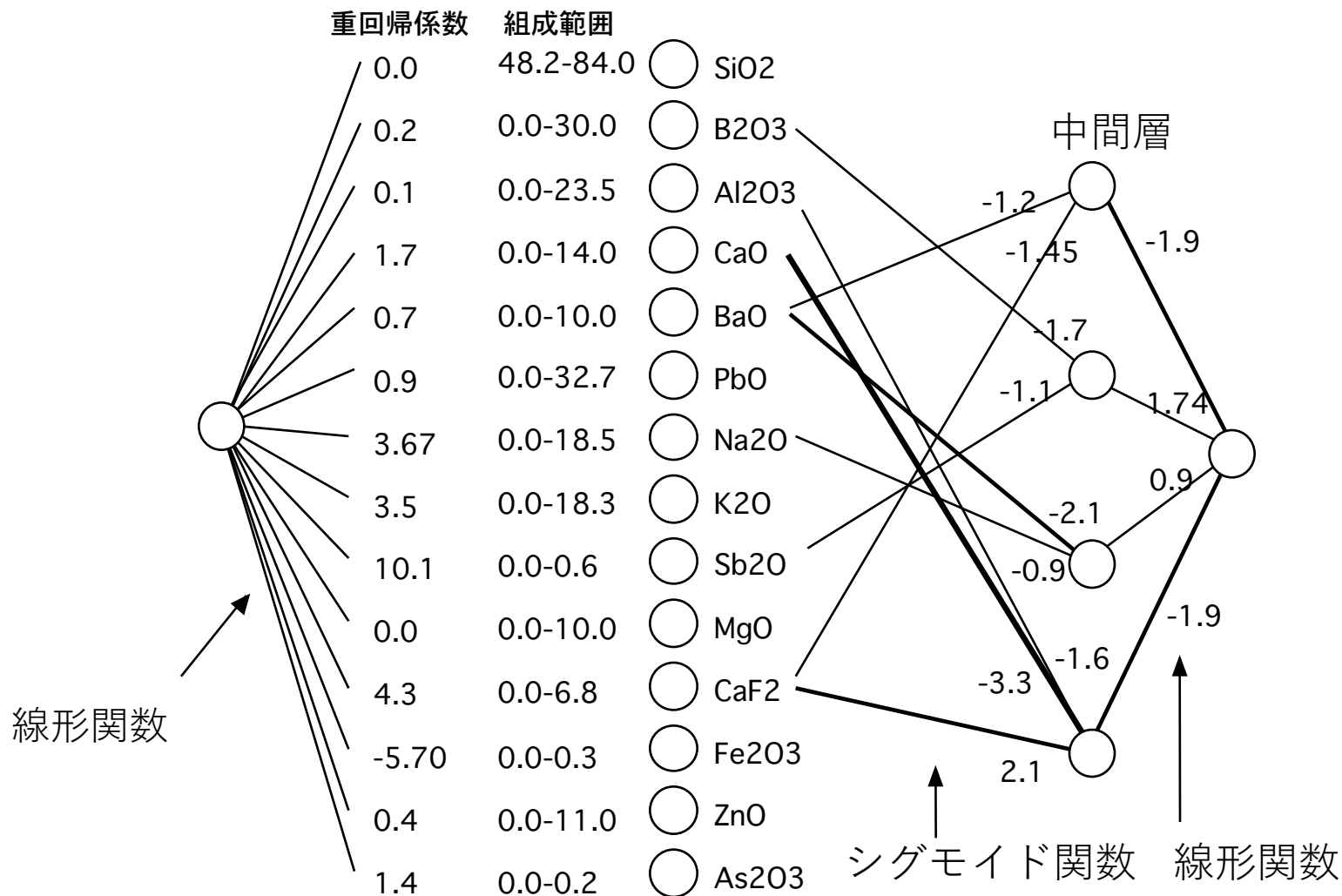
# ニューラルネットワークの動作原理

くり返し学習によって $W_x$ 、 $W_y$ の最適値を求める。

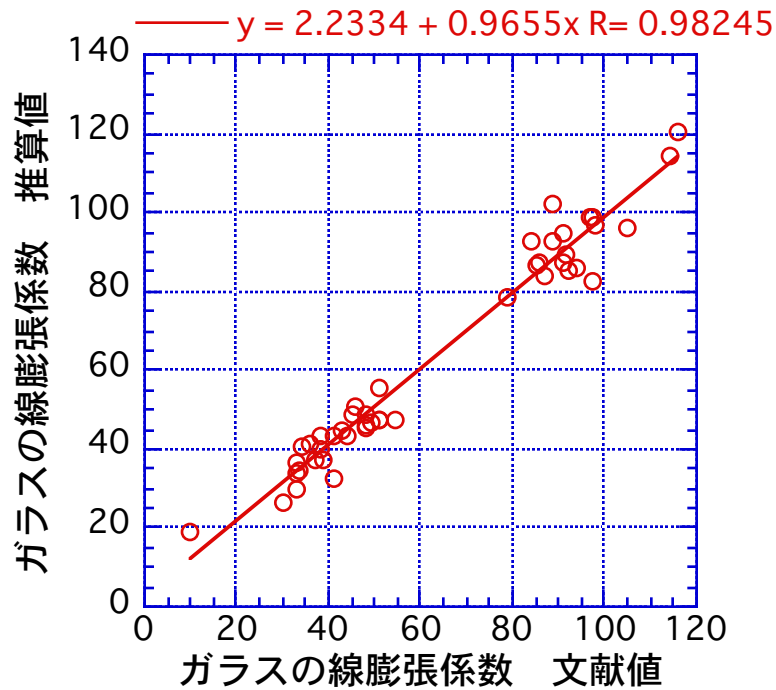


# ニューラルネットワーク法と重回帰法の対比

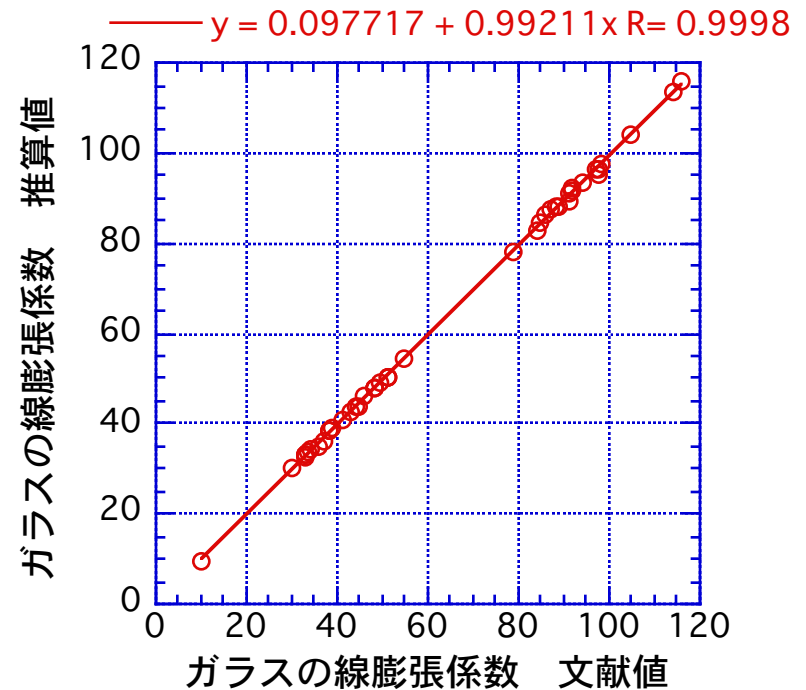
## ガラス線膨張係数推算



# ニューラルネットワーク法と重回帰法の対比 (2)



重回帰による  
線膨張係数推算



NN法による  
線膨張係数推算

Address: file:///MR280M/eyekubar/SetGlass99-10-13/CF/Set.Mfm

Li2O						B2O3				
0.0						0.0				
Na2O	MgO					Al2O3	SiO2	F2O3		
0.0	0.0					20.0	60.0	0.0		
K2O	CaO	TiO2	FeOx	ZnO			CoO			
0.0	20.0	0.0	0.0	0.0			0.0			
	SrO	ZrO2							TeO2	
	0.0	0.0							0.0	
	BaO						PbO			
	0.0						0.0			

Calc. Clear

Young Modulus = 95.20880291831101  
 Glass Transition temperature = 040.9760250959224  
 Density = 2.6236745021702363  
 Refractive Index = 1.5454356662447257  
 Abbe's Number = 60.271679204971775  
 Coefficient of Thermal Expansion = 29.629172362977734

# 物性推算画面

酸化物のmol%

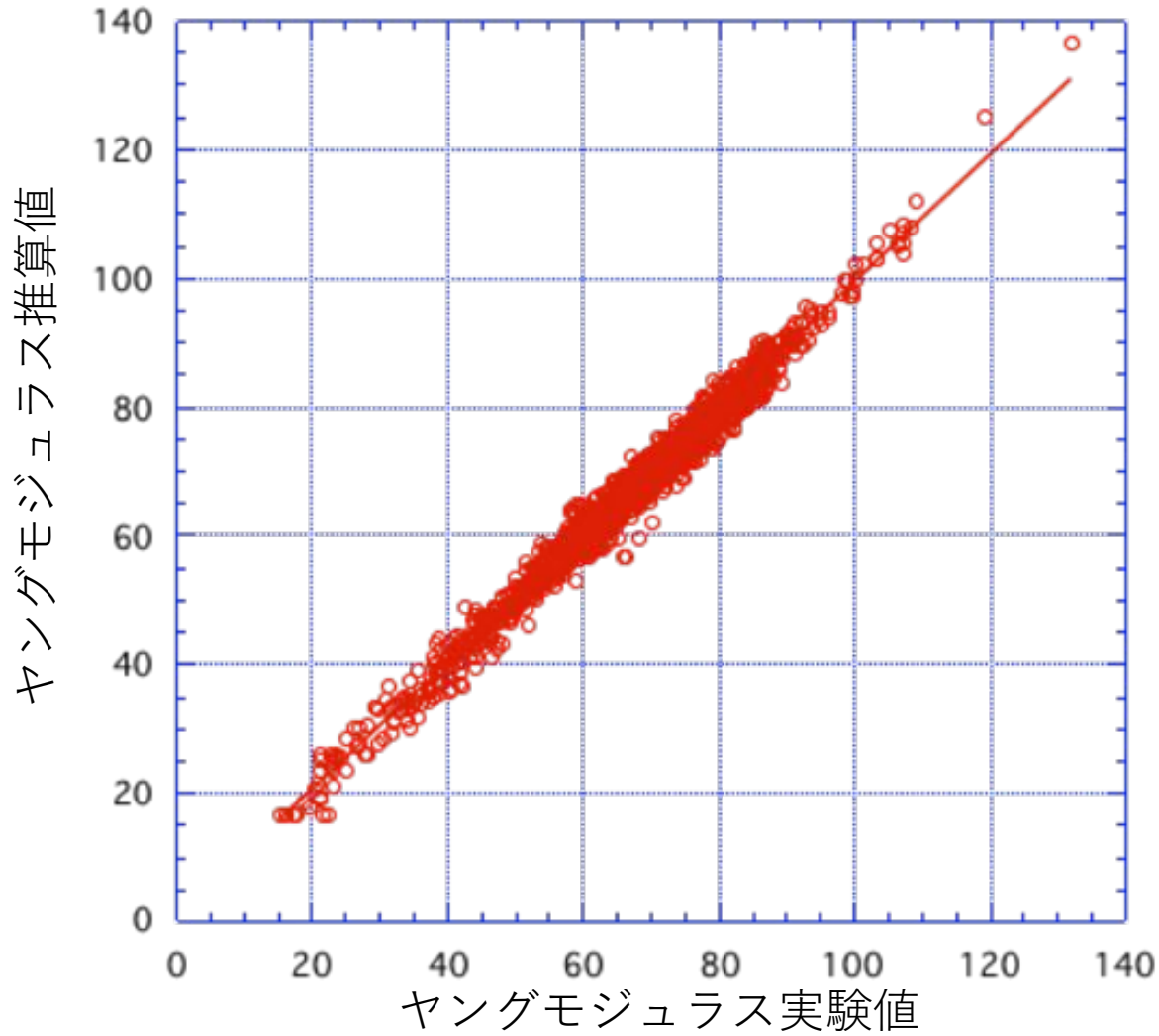


ヤングモジュラス  
 ガラス転位点  
 密度  
 屈折率  
 アッベ数  
 熱膨張率

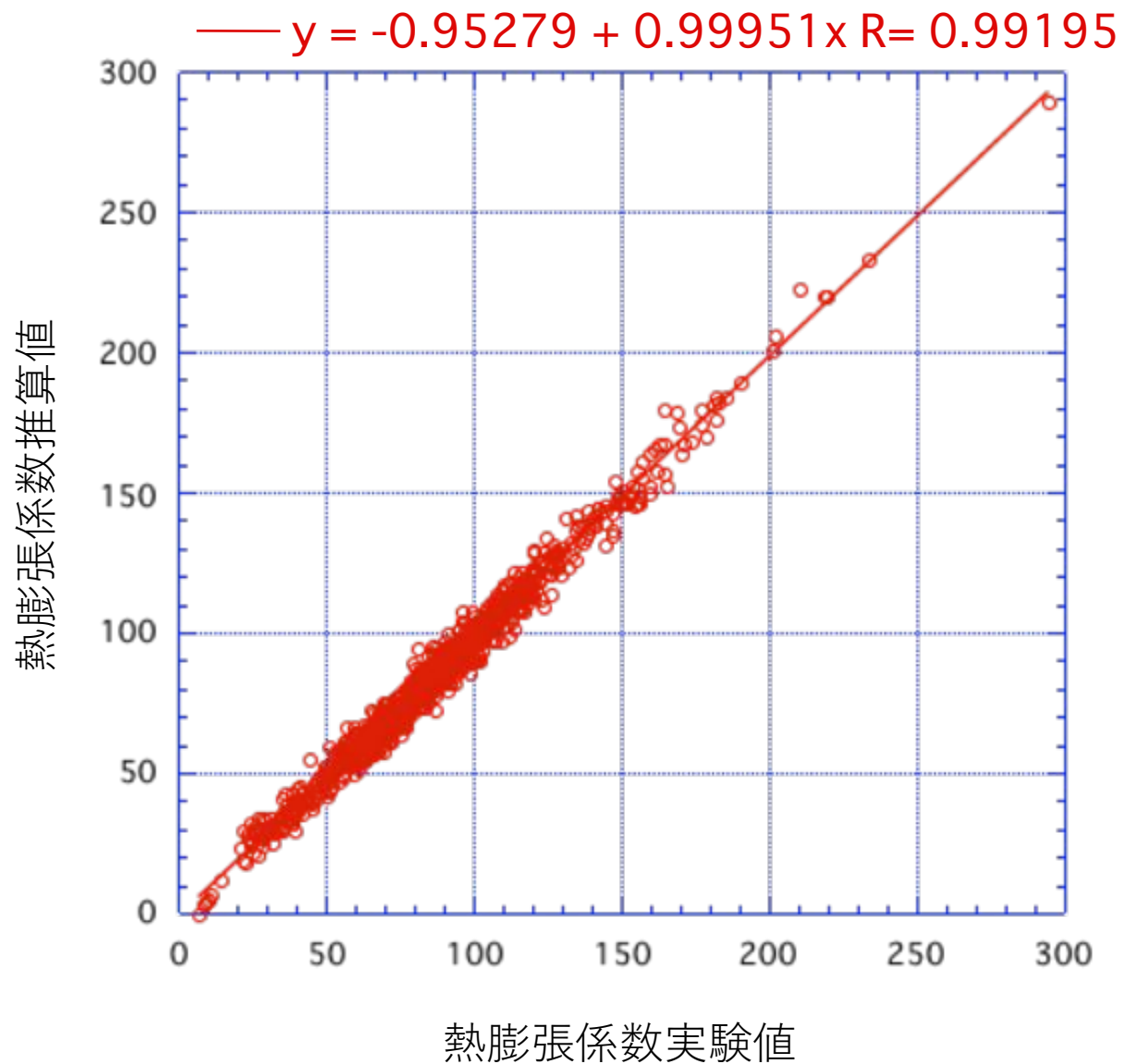


# ニューラルネットワーク法の記述性（1）

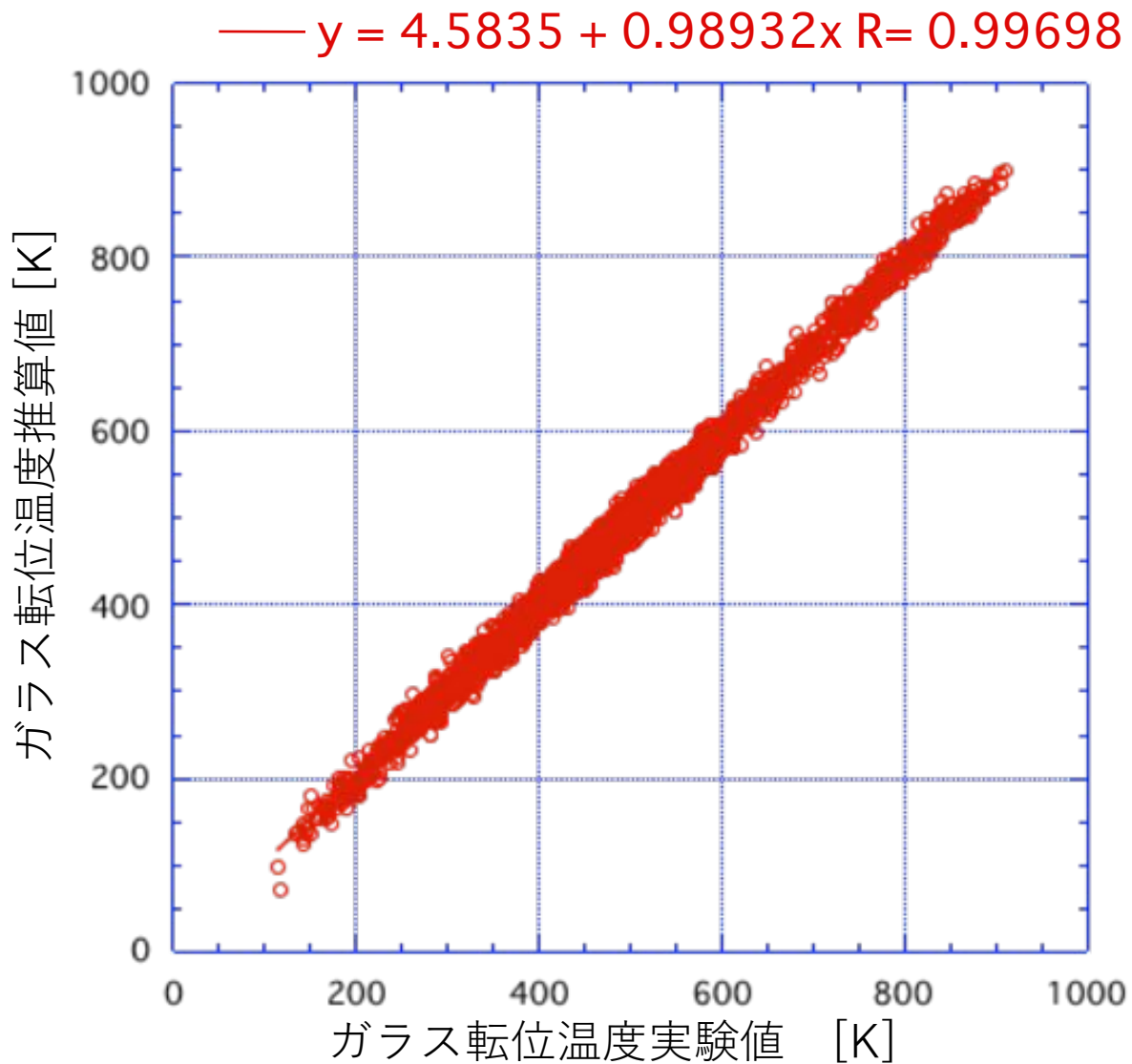
$$y = 1.3228 + 0.98206x \quad R = 0.99115$$



## ニューラルネットワーク法の記述性（2）

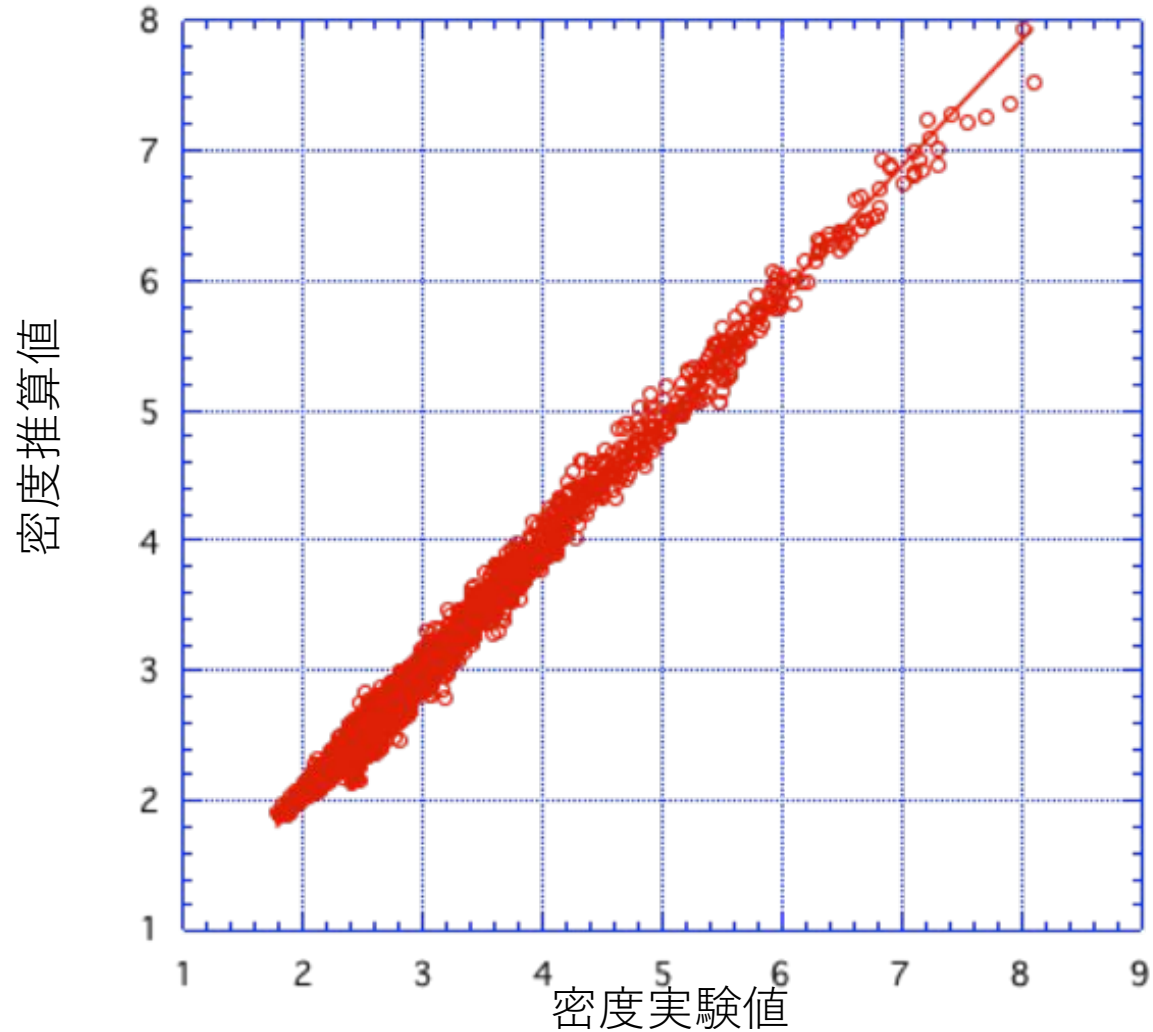


# ニューラルネットワーク法の記述性 (3)

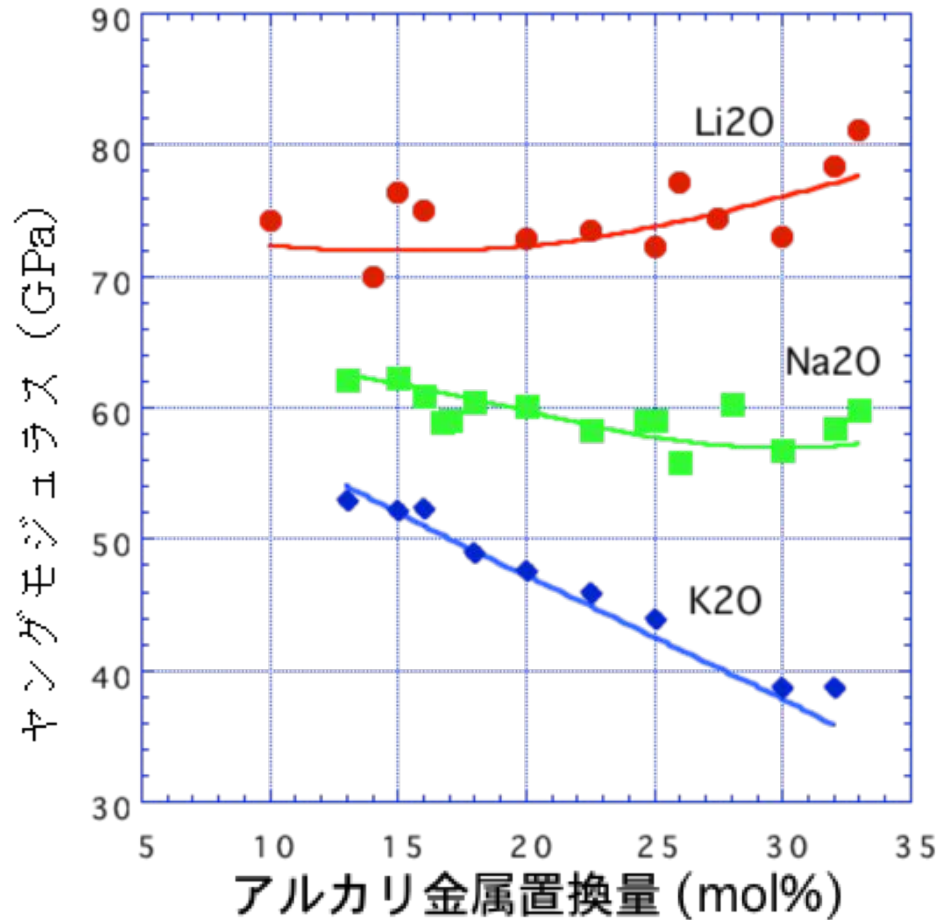


# ニューラルネットワーク法の記述性 (4)

$$y = 0.088037 + 0.96976x \quad R = 0.99555$$



# アルカリ金属効果

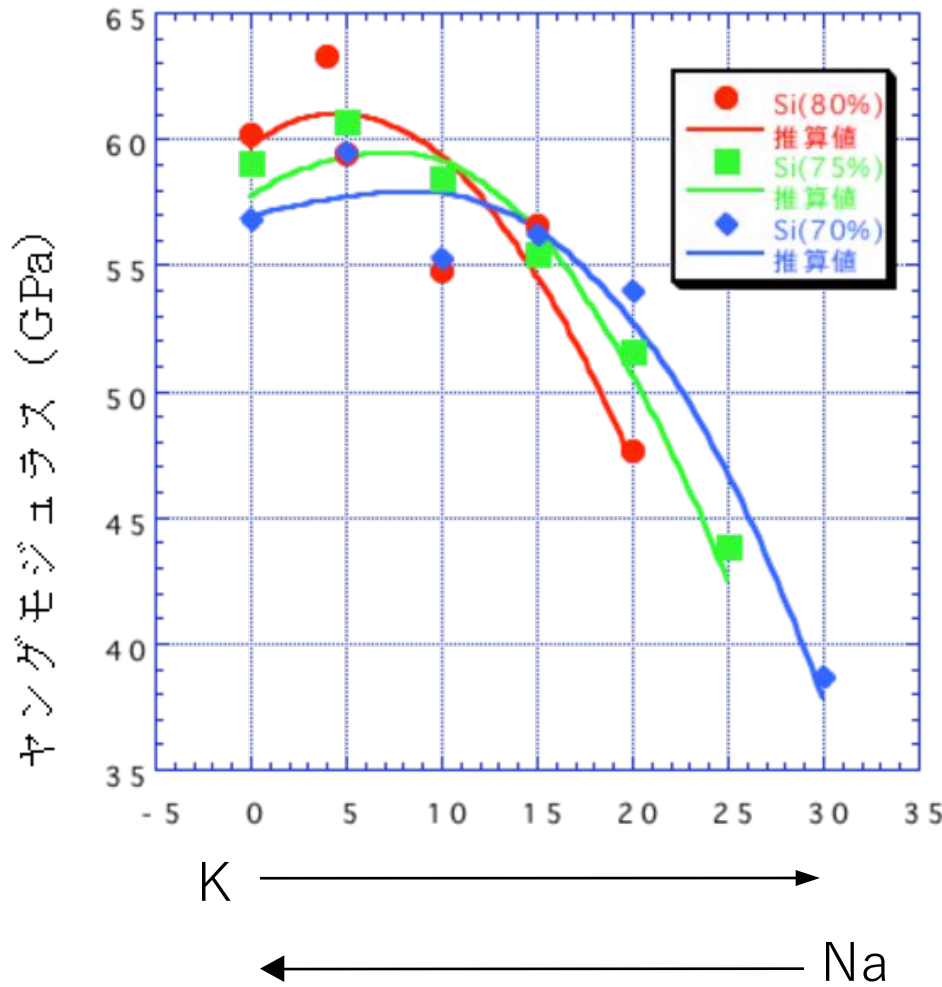


SiO<sub>2</sub>を他のアルカリ金属で置換した時のヤングモジュラスの変化

Li > Na > K  
イオン電場強度

曲線はニューラルネットワーク法による推算値

# 混合アルカリ効果



一般的にKの添加は  
ヤングモジュラスを下げる。

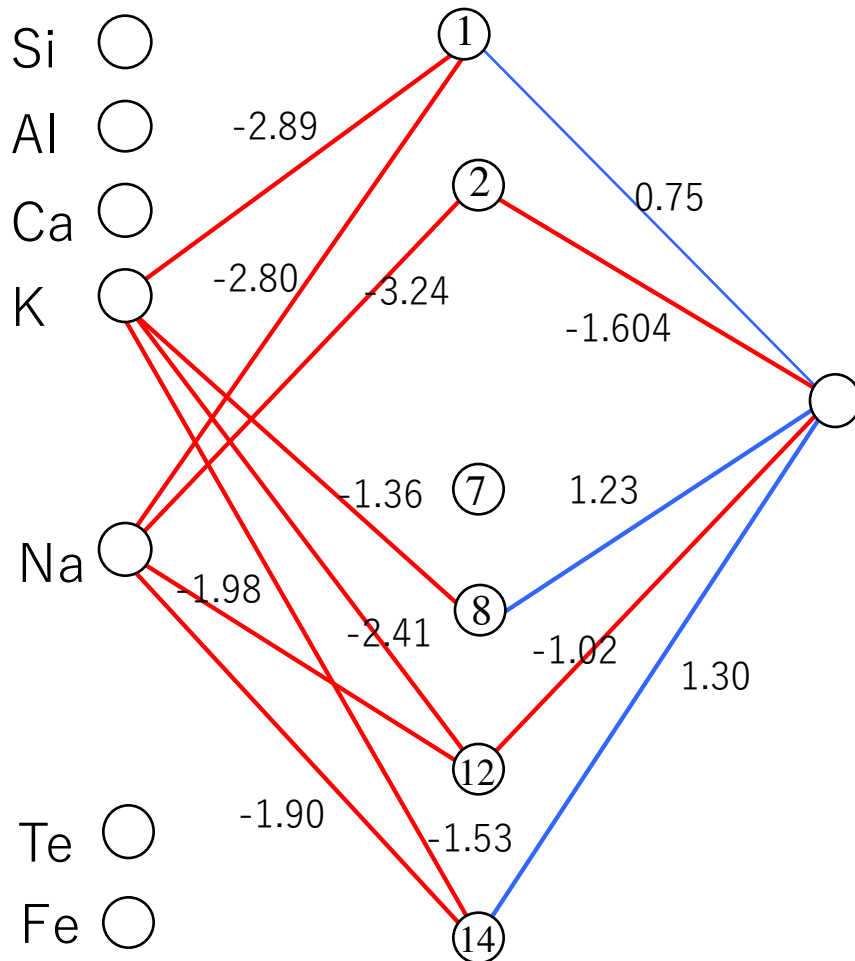
KとNaが混合されると  
ヤングモジュラスは逆に高くなる

分相説、  
緻密化説、  
独立構造説  
移動妨害説、  
弾性的双極子説、

.....○

曲線はニューラルネットワーク法による推算値

# ニューラルネットワーク上のKとNaの相互作用解析



## アルカリ金属効果

Na がYMを上げる → ②⑫

下げる → ①⑭

K がYMを上げる → ⑫

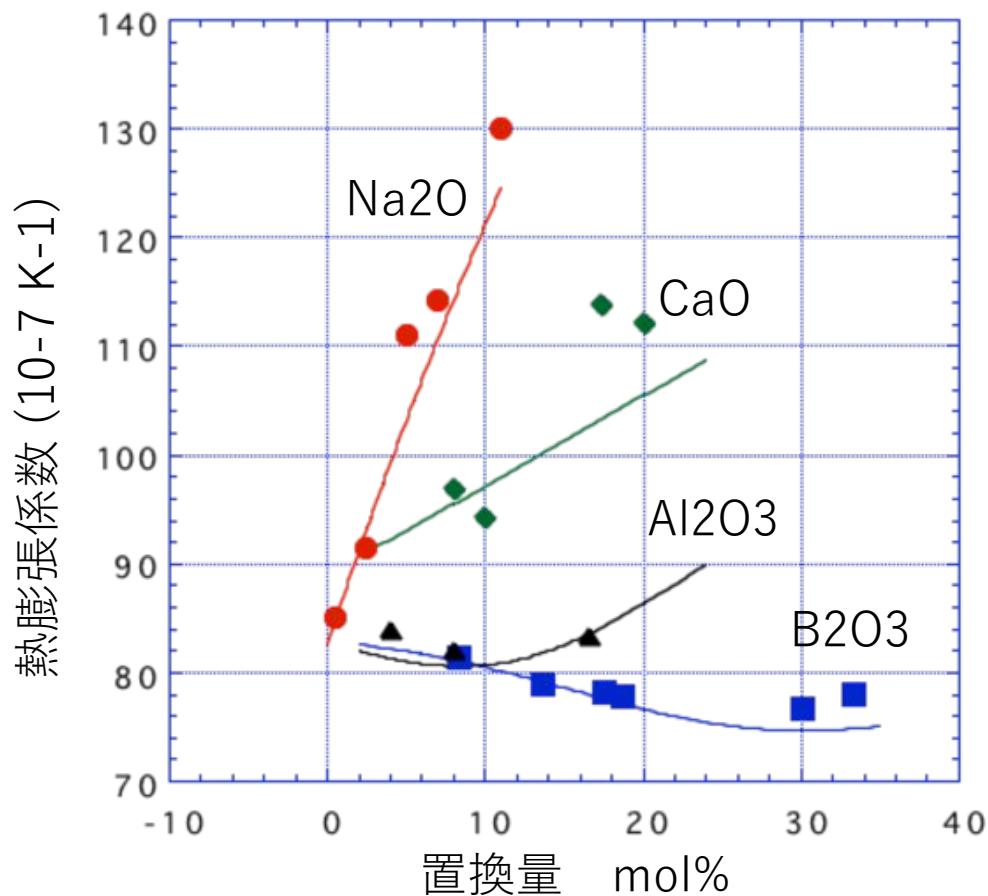
下げる → ①⑧⑭

## 混合アルカリ効果

中間層⑫ではYM上げる

中間層①⑭ではYM下げる

# ホウ酸異常



[BO<sub>4</sub>] 四面体構造



熱膨張係数下げる

[BO<sub>3</sub>] 三角形

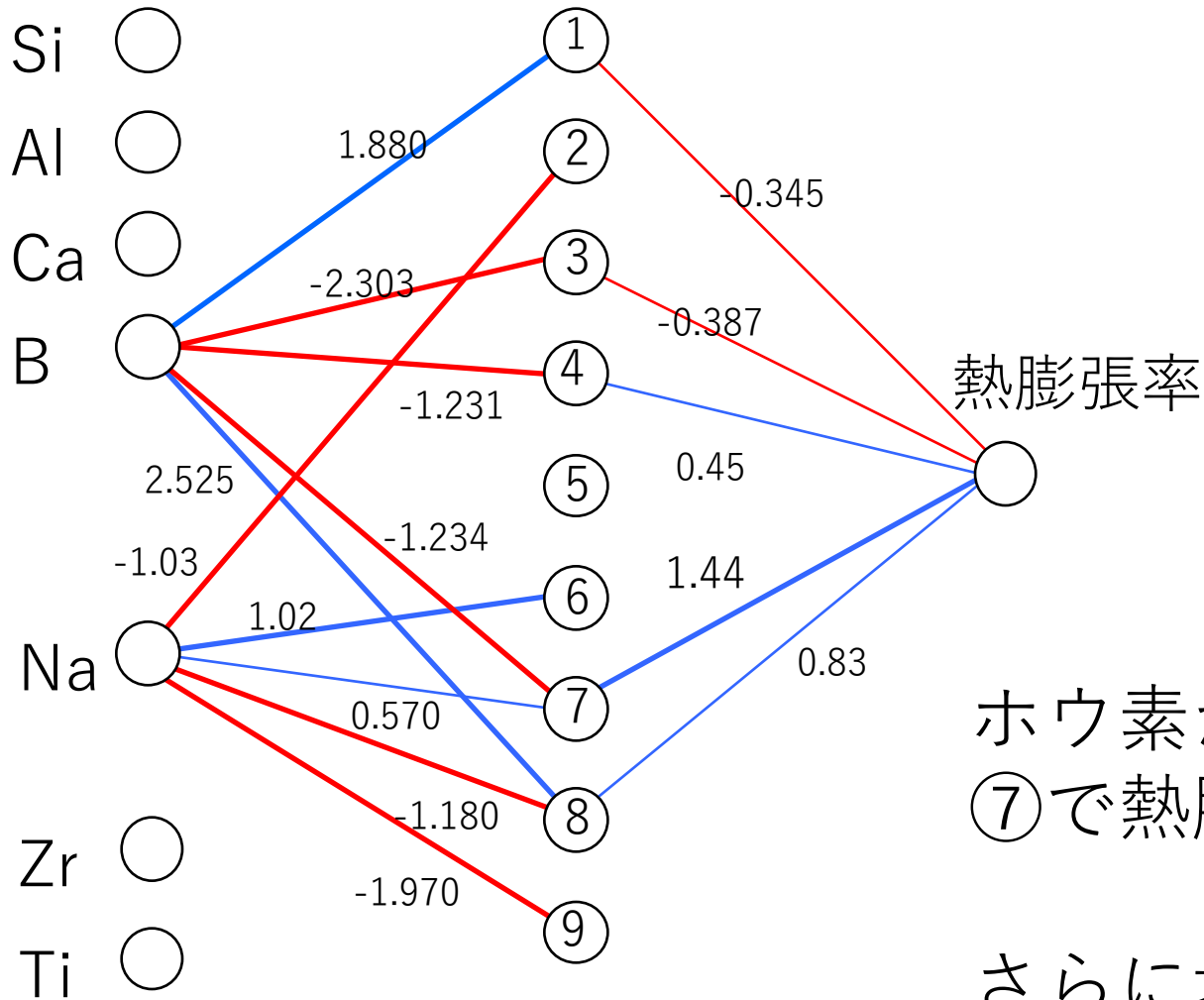


熱膨張係数上げる

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



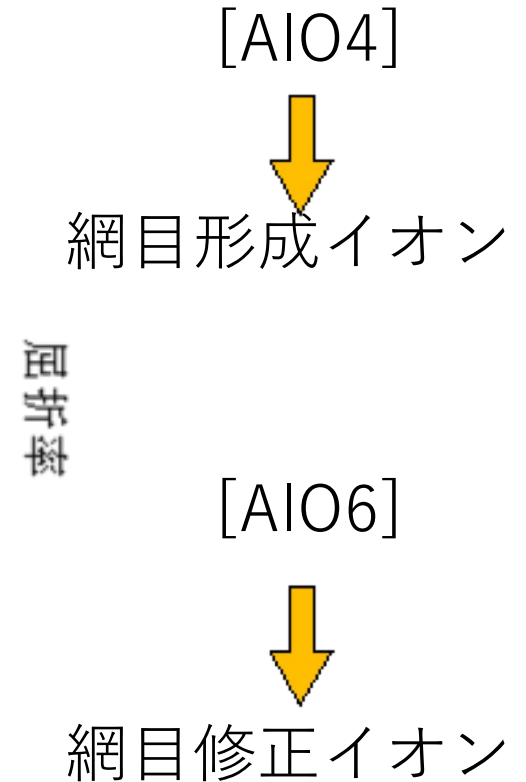
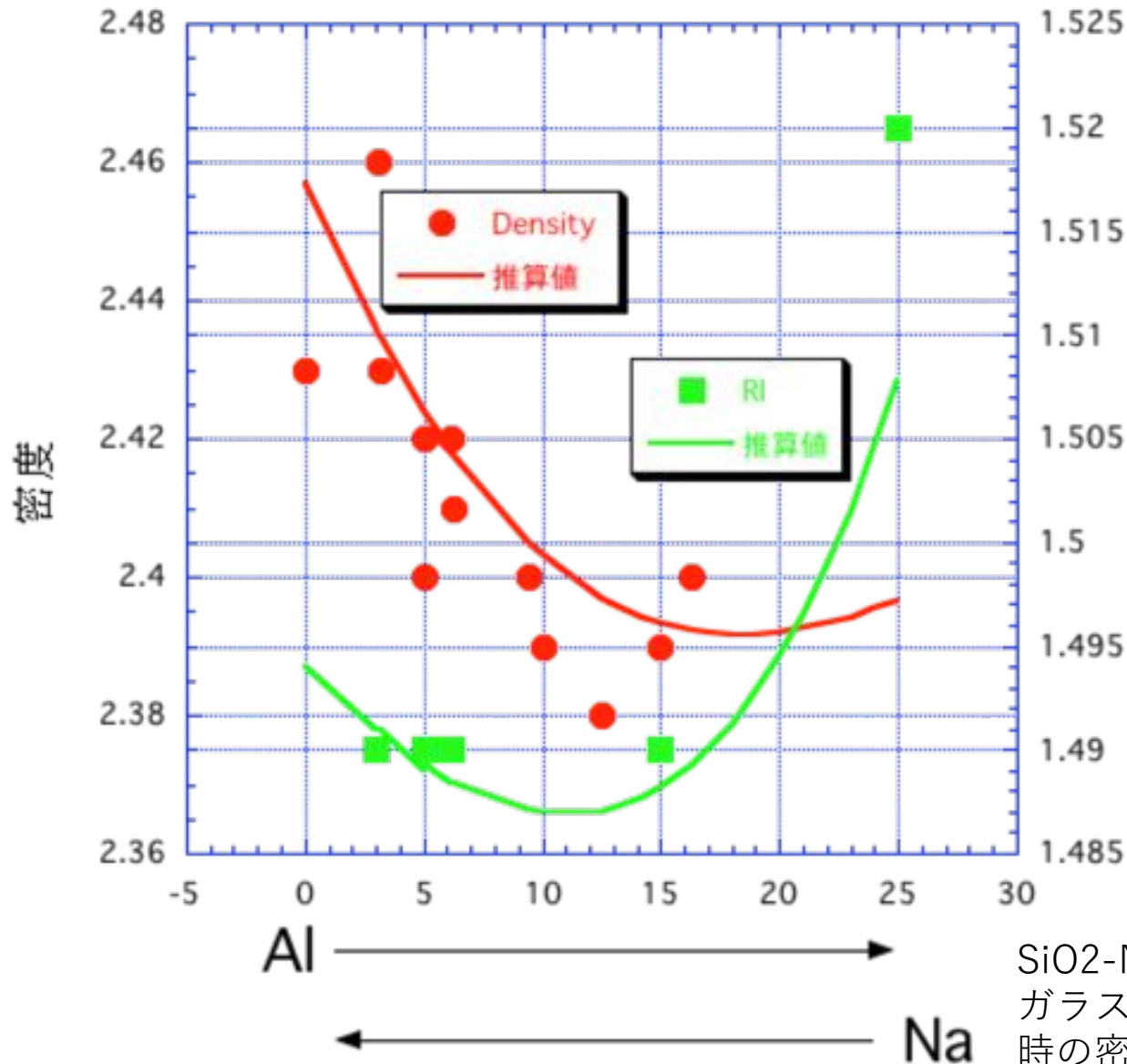
# ニューラルネットワーク上のBとNaの相互作用解析



ホウ素が増えると  
⑦で熱膨張率下がる

さらに増えると  
⑧で熱膨張率上がる

# アルミナ異常



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による組成決定システム

ガラス物性 =  $f$  (SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO, B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, . . . Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)

物性 ← 組成が決まればNNで物性は予測できる。

欲しい物性を持つガラス組成を決定するには？

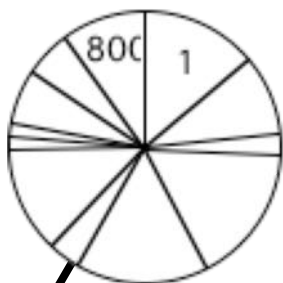
組成を0.1%刻みで18種類の酸化物。  
すべての場合を考えるなら、 $(10^3)^{17}$ の組成

1年 =  $3.1536 \times 10^7$ 秒

# 遺伝的アルゴリズム (GA)

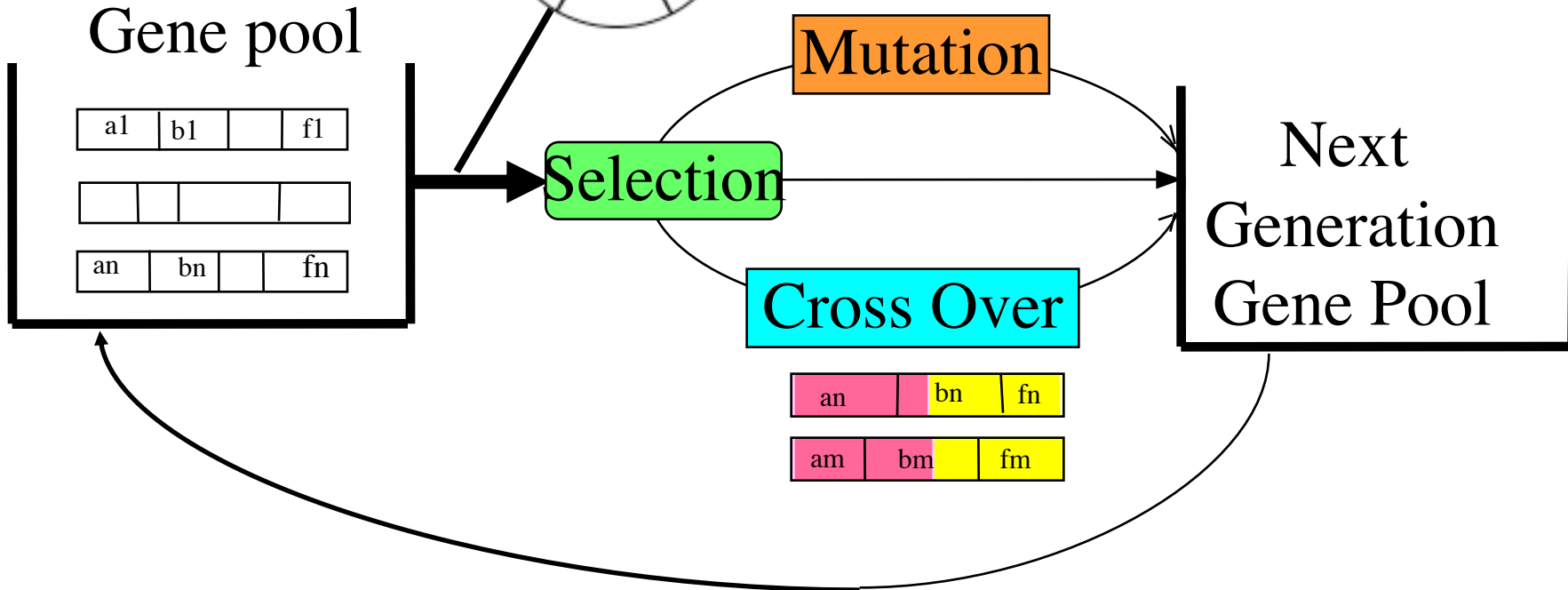
## 適者生存の法則

ガラスの組成を遺伝子に見立てる

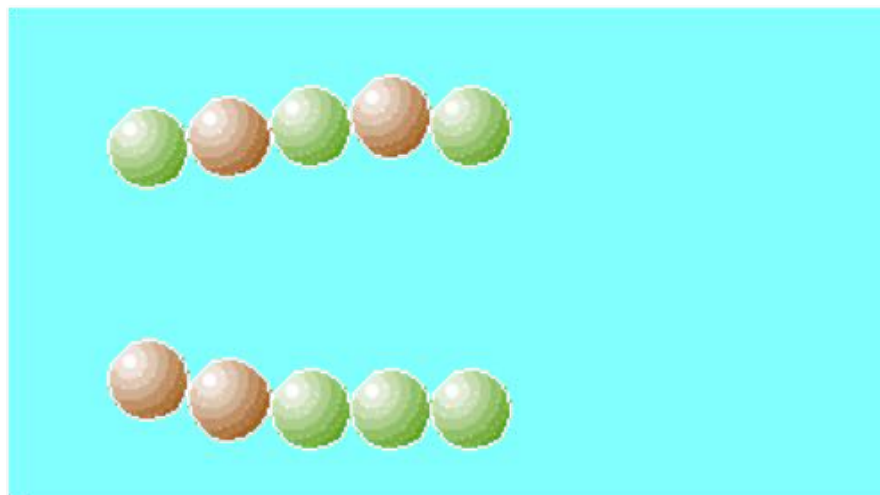


サラブレッドを育てるのと同じ。  
優秀な遺伝子ほど次世代に多く  
残るように操作する。

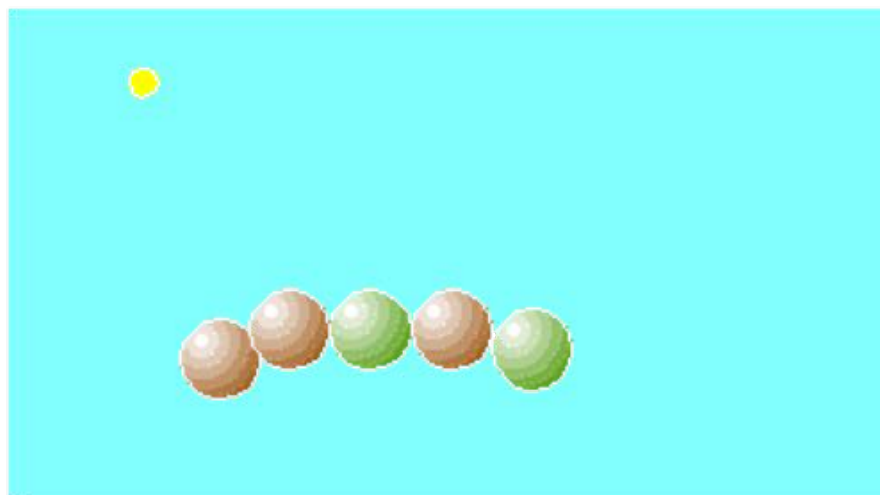
優秀な遺伝子はルーレットの  
ポケット面積が広い



Cross Over



Mutation

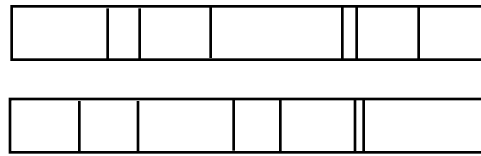


Gif アニメーション

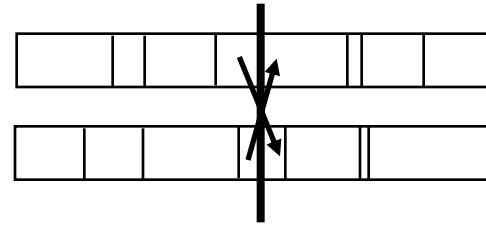
# 交叉と突然変異

親になる権利を与えられた遺伝子が全く同じ遺伝子（組成）を子孫に伝えたのでは、評価はあがらない。（クローンは駄目）

評価の高い  
組成を2つ  
ルーレットで  
選ぶ



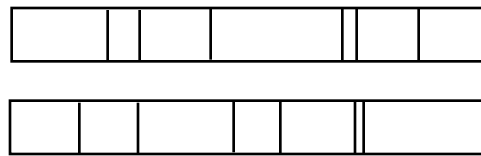
交叉



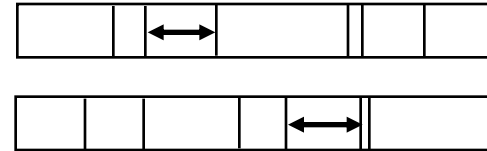
繁殖している動植物が  
雌雄を持っている理由の一つ

適当な所で  
切断し、つな  
ぎ変えてやる

評価の高い  
組成を2つ  
ルーレットで  
選ぶ



突然変異



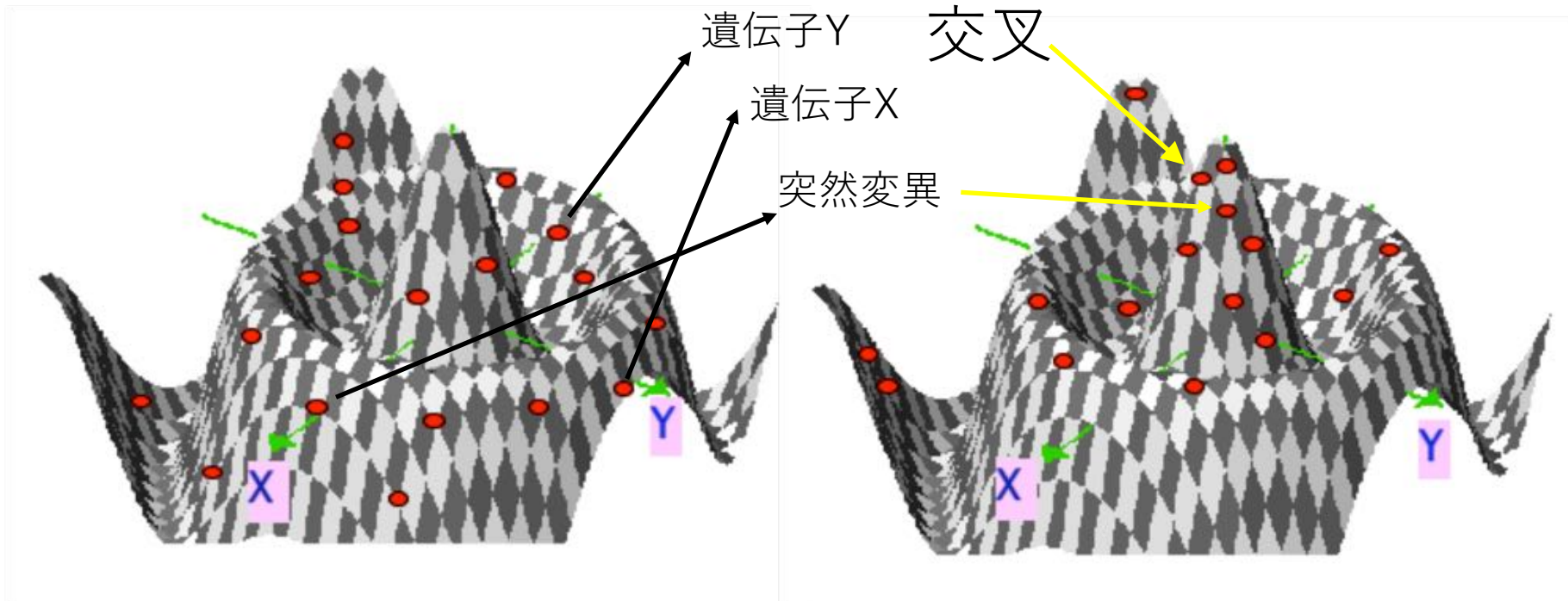
猿が人間になるには  
突然変異が必要

適当な所を広げてやる

交叉と突然変異をある確率で導入しながら子孫を作らせる。

（ただし、多くの優良遺伝子は交叉や突然変異をすると評価は下がる。）

# 遺伝的アルゴリズムのメカニズム



遺伝子はX-Y平面に  
均等にばらまかれる

数世代後にはZが大きい  
遺伝子のみが生き残る

Young Modulus  16-132

Alpha  7-294

Density  1.8-8.0

Glass Transition T.  114-908

SiO2	Al2O3	B2O3	CaO	K2O	Na2O	PbO	Li2O	MgO	SrO	B
60.50963123749099	20.001249778539705	0.0	9.9348							
60.509631237490986	20.0012497785397	0.0	9.9348							
60.50963123749099	20.001249778539705	0.0	9.9348							
60.50963123749099	20.001249778539705	0.0	9.9348							
60.50963123749099	20.001249778539705	0.0	9.9348							
60.509631237490986	20.0012497785397	0.0	9.9348							
52.53440804462246	17.365067275722975	0.0	8.625							
52.552414274093735	17.371019172732744	0.0	8.625							
62.90855279381595	17.779530024795253	0.0	10.14							
60.509631237490986	20.0012497785397	0.0	9.9348							
59.698645533214396	16.872329970396866	0.0	9.9348							
61.30881771920324	17.327404891921574	0.0	9.8861							

Number of Genes  100-2700

Number of Generation  2-500

Cross Over  0.0-1.0

Mutation  0.0-1.0

GAパラメーター部

# 逆設計画面

- ヤングモジュラス
- 熱膨張率
- 密度
- ガラス転位点

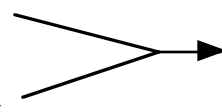


酸化物のmol%



# 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 (Tg) 750

他の物性はそのままだにガラス  
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	Tg
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	515.0
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



強度が落ちると、厚くなる。  
重くしたくない。

## 通常の組成

Si 51%  
Al 4%  
Pb 23%  
Na 6%  
K 7.5%  
Ca 8.5%

ヤングモジュラス (YM) 64  
熱膨張率 (TEC) 104  
密度 (DEN) 3.91  
ガラス転移温度 (Tg) 410

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。

SiO2	Na2O	PbO	SrO	MgO	Al2O3	B2O3	CaO	K2O	Li2O	ZnO	P2O3	TeO2	YM	TEC	Den	Tg
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

研究者の勘と経験による  
ガラスの設計

ガラスの組成と物性値が  
線形で無い

ニューラルネットワーク  
による物性推算システム

ガラス組成の自由度が  
非常に高い

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