



# MACHINE LEARNING PER LA PROGETTAZIONE E LA MODELLAZIONE DI VETRI OSSIDICI

*I materiali vetrosi ossidici sono fondamentali in molte applicazioni tecnologiche grazie alle loro proprietà uniche. In questo articolo mostreremo alcuni esempi di come il machine learning migliori la progettazione di nuovi vetri e la loro simulazione atomistica, combinando dati sperimentali e modellazione per ottimizzare composizioni e prestazioni in tempi ridotti.*

I vetri ossidici, grazie alle loro proprietà uniche, sono fondamentali in molti ambiti tecnologici, dall'energia alle comunicazioni e alla salute. Essi trovano applicazione in finestre architettoniche avanzate, fibre ottiche, lenti per dispositivi elettronici e packaging farmaceutico [1]. Vetri fotocromatici ed elettrocromatici migliorano l'efficienza energetica regolando la trasmissione luminosa in base alle condizioni ambientali [2], mentre le fibre ottiche a bassa perdita hanno rivoluzionato le comunicazioni globali [3]. Vetri per lenti ottiche e schermi HD hanno elevato gli standard visivi nei dispositivi elettronici [4] e i vetri bioattivi trovano impiego in medicina rigenerativa per riparare ossa e tessuti [5]. Altre applicazioni includono vetri per turbine eoliche per aumentare l'efficienza energetica [6] e vetri ultraleggeri rinforzati chimicamente nei veicoli, migliorando consumi e sicurezza [7]. Infine, i vetri borosilicati sono essenziali per lo stoccaggio dei rifiuti radioattivi, grazie alla loro durabilità in condizioni estreme [8].

Il mercato globale e le sfide contemporanee in campo energetico, tecnologico e ambientale richiedono lo sviluppo di materiali sempre più innovativi, con proprietà ottimizzate per specifiche applicazioni in tempi limitati.

La progettazione di vetri multicomponente è complessa a causa della loro struttura non cristallina,

la quale, eliminando i vincoli stechiometrici dei sistemi cristallini, permette di incorporare quasi tutti gli elementi della tavola periodica, generando un'infinita varietà di proprietà chimiche. Tuttavia, identificare composizioni ottimali è arduo, necessitando di un equilibrio tra le proprietà richieste dal prodotto (meccaniche, termiche, ottiche) e quelle essenziali alla produzione (viscosità, temperatura di *liquidus*<sup>a</sup>, compatibilità con materiali refrattari). Per affrontare queste sfide, sono fondamentali strumenti predittivi per il design di nuovi materiali. Recentemente, l'uso del machine learning (ML) ha rivoluzionato questo campo, accelerando la progettazione di vetri e migliorando la precisione delle simulazioni atomistiche. Questo articolo discute le applicazioni del ML in questo ambito, evidenziando i progressi e le opportunità future.

Il machine learning è particolarmente utile per predire le proprietà dei vetri sulla base della loro composizione chimica. Tradizionalmente, la progettazione dei vetri si basava su approcci empirici, come il metodo "cook-and-look" o "trial-and-error", che comporta la sintesi di numerosi campioni e la successiva caratterizzazione sperimentale. Il tutto ovviamente guidato dalla conoscenza acquisita negli anni, dall'intuizione chimica e da dati e informazioni disponibili in letteratura. Questo processo è lento, costoso e spesso incapace di identificare la com-

<sup>a</sup>Temperatura più bassa alla quale il materiale è completamente in stato liquido.

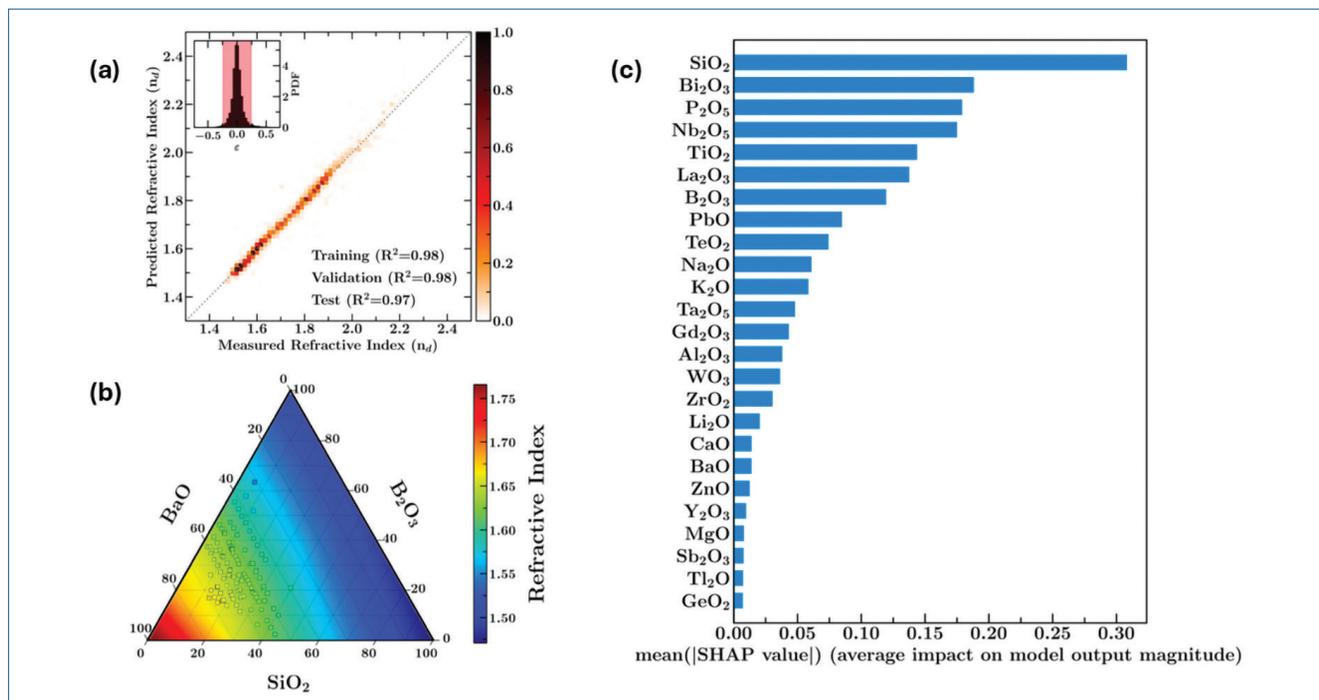


Fig. 1 - a) Confronto tra gli indici di rifrazione misurati e quelli predetti da un modello di rete neurale per una lunghezza d'onda di 587,6 nm. Figure estratte da Zaki *et al.* [10]. I dati sono suddivisi in set di addestramento, validazione e test, mostrando rispettivamente coefficienti di correlazione di 0,98, 0,98 e 0,97. L'inserto mostra la distribuzione degli errori con un picco vicino a zero, evidenziando l'elevata accuratezza del modello; b) diagramma ternario rappresentante l'indice di rifrazione in funzione delle proporzioni dei componenti principali ( $SiO_2$ ,  $B_2O_3$ , e  $BaO$ ) per vetri ottici di tipo crown<sup>b</sup>. La mappa cromatica riflette la variazione dell'indice di rifrazione, con valori più alti associati a maggiori concentrazioni di  $BaO$ ; c) impatto medio degli ossidi sull'indice di rifrazione, espresso in termini di valori medi di SHAP (Shapley Additive Explanations). Si osserva che  $SiO_2$ ,  $Bi_2O_3$ , e  $P_2O_5$  hanno l'effetto più significativo, suggerendo il loro ruolo predominante nella determinazione delle proprietà ottiche dei vetri

posizione ottimale. Inoltre, lo spazio delle possibilità è solo moderatamente esplorato a causa del bias “umano” nella selezione delle possibili composizioni. Gli algoritmi di ML, invece, possono analizzare grandi dataset contenenti informazioni su composizioni e proprietà misurate, apprendendo modelli predittivi in grado di stimare con elevata precisione proprietà come densità, resistenza meccanica, temperatura di transizione vetrosa e viscosità. Ad esempio, Mauro *et al.* hanno dimostrato come l'utilizzo di approcci basati su reti neurali e modelli Random Forest possa ottimizzare la resistenza meccanica e le proprietà ottiche di vetri per display e applicazioni ottiche avanzate [9].

Zaki *et al.* hanno esplorato l'utilizzo di modelli di machine learning interpretabili per prevedere le proprietà ottiche dei vetri, come l'indice di rifrazione e il numero di Abbe, utilizzando il metodo SHAP (Shapley Additive exPlanations), una tecnica di interpretabilità dei modelli di machine learning che at-

tribuisce a ciascun input (caratteristica) un “punteggio di importanza” basato sul contributo di quella caratteristica alla previsione del modello stesso, per identificare i contributi composizionali [10] (Fig. 1). Gli stessi autori hanno sviluppato modelli ML per prevedere proprietà come il punto di annealing, durezza Vickers, temperatura di transizione vetrosa e indice di rifrazione, utilizzando un dataset di 24.000 composizioni sperimentali [11]. Hu *et al.* hanno combinato Gradient Boosting Machine (GBM) e LASSO per predire densità e moduli elastici di vetri a base di  $SiO_2$  attraverso simulazioni molecolari e apprendimento statistico [12]. GlassNet, un modello basato su reti neurali profonde, predice fino a 85 proprietà di vetri da composizioni chimiche, eccellendo nei compiti multitasking grazie a vantaggi in accuratezza, scalabilità ed efficienza [13].

Il modelling computazionale offre un'alternativa ai dataset sperimentali, usando dinamica molecolare (MD) e Monte Carlo (MC) per studiare vetri multi-

<sup>b</sup>Il vetro crown è un tipo di vetro ottico caratterizzato da un basso indice di rifrazione e una bassa dispersione cromatica, con numeri di Abbe generalmente superiori a 50. È comunemente utilizzato nella produzione di lenti per occhiali, telescopi e obiettivi fotografici. La sua composizione tipica include silicati di calcio-alcali, spesso con l'aggiunta di ossido di potassio (10% moli).

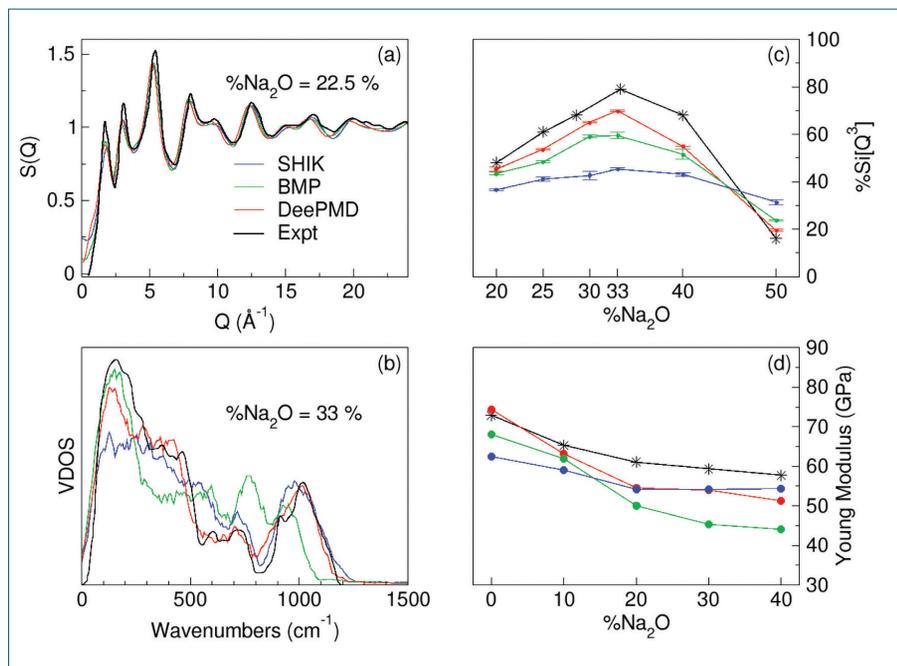


Fig. 2 - a) Confronto dei fattori di struttura  $S(Q)$  simulati utilizzando campi di forza empirici (BMP e SHIK) e un potenziale di machine learning (allenato nel framework DeePMD) con i dati sperimentali per un vetro sodio-silicatico contenente il 22,5% di  $\text{Na}_2\text{O}$ ; b) Vibrational Density of States (VDOS) per il vetro con il 33% di  $\text{Na}_2\text{O}$ ; c) variazione della frazione di specie  $Q^3$  (unità tetraedriche di silicio collegate a tre ossigeni ponte) in funzione della percentuale di  $\text{Na}_2\text{O}$ , confrontando campi di forza empirici, DeePMD e dati sperimentali; d) andamento del modulo di Young al variare della percentuale di  $\text{Na}_2\text{O}$

componente. MD classica, economica e adatta a sistemi complessi, è limitata dalla precisione dei potenziali empirici, che spesso non descrivono adeguatamente la formazione o rottura di legami chimici. Al contrario, la dinamica molecolare *ab initio* (AIMD) fornisce interazioni atomiche precise ma è computazionalmente costosa, limitando dimensioni e tempi di simulazione.

Potenziali ML, come DeePMD [14], GAP [15] e Message-Passing NNs [16-18], colmano il divario tra precisione e scalabilità, combinando accuratezza dei metodi *ab initio* con l'efficienza dei metodi classici. Questi approcci emergenti sono fondamentali per descrivere proprietà chimiche e fisiche complesse dei vetri, ampliando le capacità previsionali delle simulazioni atomistiche.

Questi modelli apprendono energie e forze direttamente dai calcoli *ab initio* e offrono una combinazione unica di accuratezza e scalabilità, rendendoli strumenti potenti per studiare sistemi complessi e indagare le proprietà strutturali e dinamiche di vetri, ceramici ed elettroliti solidi come discusso in

una nostra review recente [19]. In un nostro lavoro recente [20], è stato sviluppato un potenziale ML capace di descrivere con elevata precisione le proprietà termodinamiche, meccaniche, dinamiche e strutturali di vetri sodio-silicatici, mostrando risultati paragonabili ai calcoli *ab initio* ma con un'efficienza computazionale significativamente maggiore. Questo approccio ha permesso di esplorare dettagli atomistici, come le dinamiche di coordinazione e i cambiamenti strutturali su larga scala, con applicazioni su vetri complessi a base di ossidi (Fig. 2). Il machine learning permette inoltre la predizione di parametri spettroscopici, inclusi quelli della risonanza magnetica nucleare (NMR) [20]. Le simulazioni NMR offrono dettagli sulla struttura locale dei vetri, consentendo un confronto rigoroso

con i dati sperimentali per validare modelli strutturali ed estrarre distribuzioni di parametri strutturali come angoli di legame e numeri di coordinazione [21, 22]. Tuttavia, i calcoli quantomeccanici necessari per parametri come chemical shifts e costanti quadrupolari sono onerosi, limitandosi a poche configurazioni e piccoli sistemi. Modelli ML addestrati su dataset DFT consentono la simulazione di spettri NMR per sistemi con decine di migliaia di atomi in pochi minuti, aumentando la rappresentatività del modello [23]. Questi metodi permettono di calcolare parametri NMR per configurazioni campionate durante la dinamica molecolare, includendo effetti termici [24]. La Fig. 3 mostra l'eccellente accordo tra spettri simulati e sperimentali, un risultato reso possibile grazie al ML.

L'applicazione di algoritmi di classificazione ML ci ha permesso di predire la cristallizzazione della nefelina da vetri alluminio-boro-fosfo-silicatici, codificando la similarità tra la struttura vetrosa simulata e quella cristallina [25]. La Fig. 4a illustra come l'indice MCD (Mean Cumulative Displacement), com-

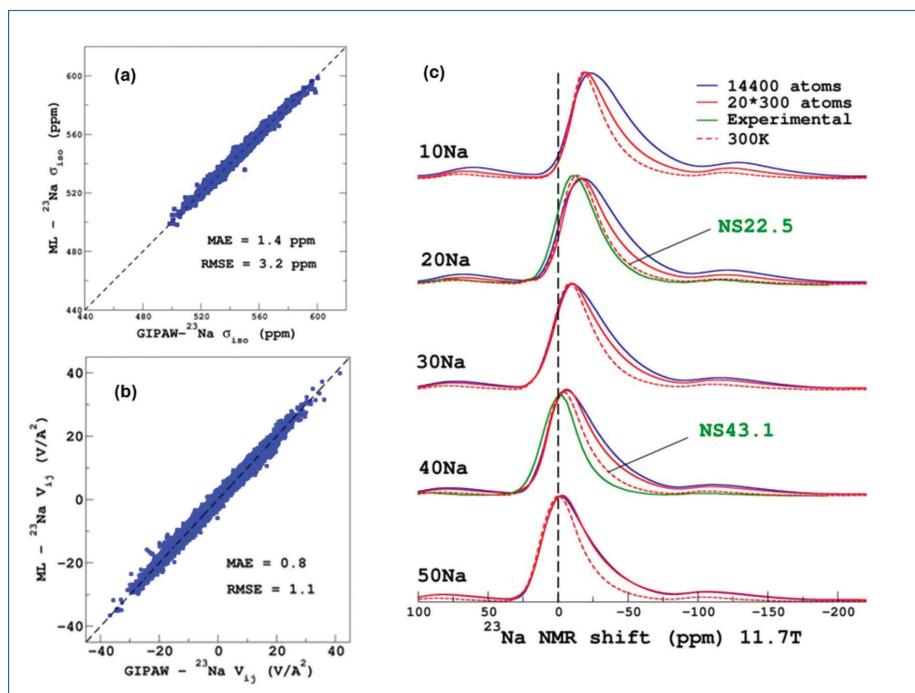


Fig. 3 - Confronto tra (a) gli shieldings e (b) electric field gradients del sodio calcolati a livello DFT con quelli predetti da un modello ML basato su Support Vector Regression usando un Kernel Gaussiano; c) confronto degli spettri NMR Magic Angle Spinning del Sodio di vetri sodio silicati (10Na si riferisce a un vetro con il 10% di ossido di sodio) simulati calcolando i parametri NMR su una struttura ottenuta dalla dinamica molecolare con 14.400 atomi (blue), dalla media di 20 strutture da 300 atomi ottimizzate a livello DFT (linea continua rossa) e mediando sulla traiettoria di dinamica a 300 K del modello da 14.400 atomi (linea rossa tratteggiata). Quest'ultima curva mostra un migliore accordo con i dati sperimentali riportati per i vetri con il 22,5 e 43,1% di ossido di sodio (linee verdi). Dati estratti da [24]

binato con la basicità ottica del vetro (OB, un parametro che indica la capacità dei leganti ossigeno nel vetro di donare densità elettronica agli ioni presenti) e metodi SVM, predice quali composizioni favoriscono la cristallizzazione della nefelina dopo trattamento termico. Arendt *et al.* [26] hanno combinato descrittori *ab initio* (energia di atomizzazione, proprietà meccaniche, raggio atomico medio) con descrittori composizionali e metodi ML (SVM, RF, NN, GPR) per prevedere densità, Tg, durezza, modulo di Young, modulo di taglio e sensibilità alla velocità di deformazione per vetri ossidi, polianionici, calcogenuri e metallici. La Fig. 4b mostra gli errori relativi su queste proprietà con diversi metodi ML, evidenziando la versatilità del ML nella modellazione di proprietà vetrose complesse.

Il successo del machine learning (ML) dipende dalla qualità dei dati di addestramento, che devono essere ampi, diversificati e accurati, rappresentando una vasta gamma di composizioni e con-

dizioni. L'integrazione di dati sperimentali e simulazioni può generare modelli più robusti. Mauro *et al.* [27] hanno sviluppato un approccio ibrido che combina modelli fisici con tecniche ML per predire la viscosità di liquidi ossidi multicomponenti, offrendo previsioni accurate anche in regioni composizionali inesplorate. Guardando al futuro, i modelli ibridi ML-fisici promettono previsioni più affidabili, esplorando nuovi spazi composizionali e progettando vetri "intelligenti", come quelli autoriparanti o adattivi [28]. Inoltre, l'integrazione di ML con modellazione atomistica, spettroscopica e predizione di proprietà consente un'analisi multiscala, accelerando lo sviluppo di materiali innovativi e affrontando sfide globali come efficienza energetica e sostenibilità [29].

## BIBLIOGRAFIA

- [1] J.C. Mauro, *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 2018, **22**, 58.
- [2] N.F. Borrelli, N.T. Lonroth *et al.*, WO2017044606A1, 2017, <https://patents.google.com/patent/WO2017044606A1/en>
- [3] R.D. Maurer, *Proceedings of the IEEE*, 1973, **61**, 452.
- [4] A. Ellison, I.A. Cornejo, *International Journal of Applied Glass Science*, 2010, **1**, 87.
- [5] G. Kaur, *Bioactive Glasses: Potential Biomaterials for Future Therapy*, Springer International Publishing, 2017.
- [6] M. Arbab, J.J. Finley, *International Journal of Applied Glass Science*, 2010, **1**, 118.
- [7] T. Leonhard, T. Cleary *et al.*, *SAE Int. J. Passeng. Cars - Mech. Syst.*, 2015, **8**, 95.
- [8] R.K. Pilia, C.L. Dube, *Front. Mater.*, 2023, **10**, 1236470.
- [9] J.C. Mauro, A. Tandia *et al.*, *Chem. Mater.*,

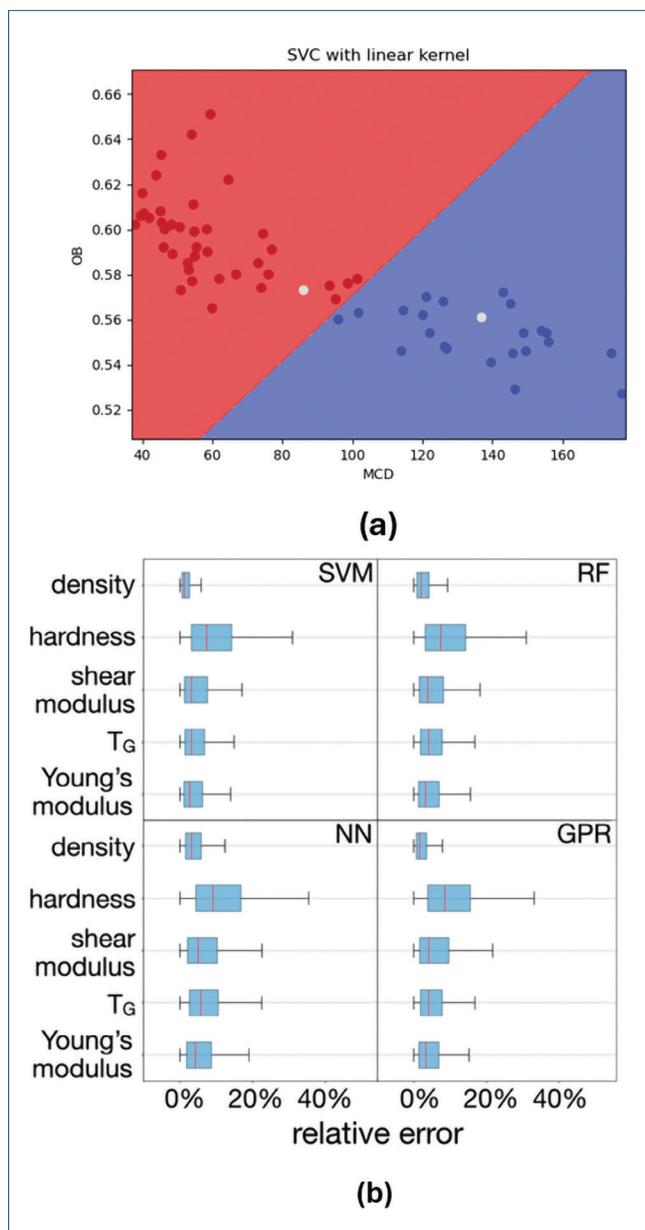


Fig. 4 - a) Modello SVM per la predizione di composizioni vetrose dalle quali è possibile cristallizzare la nefelina dopo trattamento termico. Le composizioni che ricadono nella zona rossa vedono la cristallizzazione della nefelina. I punti bianchi rappresentano vetri non classificati correttamente; b) errore percentuale sulla densità, modulo di taglio, temperatura di transizione vetrosa, e modulo di Young dei metodi SVM, RF, NN e GPR

2016, **28**, 4267.

- [10] M. Zaki, V. Venugopal *et al.*, 2021, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2103.03633>
- [11] S. Singla, S. Mannan *et al.*, *J. Phys. Mater.*, 2023, **6**, 024003.
- [12] Y.-J. Hu, G. Zhao *et al.*, *Npj Comput. Mater.*,

2020, **6**, 1.

- [13] D.R. Cassar, *Ceramics International*, 2023, **49**, 36013.
- [14] H. Wang, L. Zhang *et al.*, *Computer Physics Communications*, 2018, **228**, 178.
- [15] T. Wen, L. Zhang *et al.*, *Mater. Futures*, 2022, **1**, 022601.
- [16] I. Batatia, D.P. Kovács *et al.*, 2023, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2206.07697>
- [17] O.T. Unke, S. Chmiela *et al.*, *Chem. Rev.*, 2021, **121**, 10142.
- [18] S. Batzner, A. Musaelian *et al.*, *Nat. Commun.*, 2022, **13**, 2453.
- [19] S. Urata, M. Bertani, A. Pedone, *JACS*, 2024, **107**, 7665.
- [20] M. Bertani, T. Charpentier *et al.*, *J. Chem. Theory Comput.*, 2024, **20**, 1358.
- [21] E. Gambuzzi, A. Pedone *et al.*, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 2014, **125**, 170.
- [22] T. Charpentier, M.C. Menziani, A. Pedone, *RSC Adv.* 2013, **3**, 10550.
- [23] M. Bertani, A. Pedone *et al.*, *ChemPhysChem*, 2024, **25**, e202300782.
- [24] T. Charpentier, *Faraday Discussions*, 2025, **255**, 370.
- [25] Y. Zhang, M. Bertani *et al.*, *Acta Materialia*, 2024, **268**, 119784.
- [26] F. Arendt, R. Limbach *et al.*, *Journal of the American Ceramic Society*, 2024, **107**, 5841.
- [27] J.C. Mauro, A.J. Ellison *et al.*, *International Journal of Applied Glass Science*, 2013, **4**, 408.
- [28] M. Micoulaut, Y. Yue, *MRS Bulletin*, 2017, **42**, 18.
- [29] J.C. Mauro, E.D. Zanotto, *Int. J. Appl. Glass Sci.*, 2014, **5**, 313.

### Machine Learning for Oxide Glass Design and Modelling

Oxide glasses are essential for various technological applications due to their unique properties. In this article, we present examples of how machine learning enhances the design of new glasses and their atomistic simulations, integrating experimental data and modeling to optimize compositions and performance in reduced timeframes.