



# *Utilizarea învățării automate pentru generarea computerizată a diagramelor de echilibru termic fazal din date de difractometrie de raze X*

---

AOSR-TEAMS 2023-2024

VASILE-ADRIAN SURDU

ROMUALD GYÓRGY

# Introducere

În ultimii ani, **inteligența artificială (IA)** a devenit o componentă importantă a **cercetării științifice** și tehnologiei.

Instrumentele utilizate de **inteligența artificială** includ algoritmi de căutare, grafice de cunoștințe, procesarea limbajelor naturale, sisteme expert, algoritmi de evoluție, **învățare automată (machine learning)**, învățare profundă, rețele neurale și altele [1].

În știința materialelor este esențială determinarea aranjamentelor de ioni sau atomi din structuri cristaline se obține din prelucrarea datelor de difracție de raze X (XRD), neutroni sau electroni.

Interpretarea fiecărei difractograme de raze X presupune efectuarea uneia sau mai multor secvențe de etape pentru prelucrarea graficelor 2D și include adesea **reducerea datelor**, compararea cu **baze de date**, **identificare** și **utilizarea unor metode de analiză multivariată** pentru extragerea informațiilor cantitative de tip: proporția fazelor, parametrii celulelor elementare, dimensiuni de cristalit, micro-tensiuni interne și cristalinitate.

# Introducere

---

Algoritmii de învățare automată pot fi utili în astfel de cazuri, ținând cont în special de faptul că majoritatea materialelor potențial a fi studiate conțin trei sau mai multe faze.

Având în vedere specificul unei astfel de sarcini, cei mai potriviți algoritmi pentru a fi utilizați sunt algoritmii de învățare nesupervizată de tipul **analizei cluster** [2], **analizei componentelor principale** [3] sau **analizei Fuzzy** [4].

În bazele de date internaționale am identificat un singur studiu referitor la determinarea relațiilor de echilibru termic fazal din date de difractometrie de raze X prin utilizarea algoritmilor de învățare automată, realizat de Jha și colaboratorii pentru sistemele de aliaje Co Ni Ta și Co Ti Ta [5].

# Obiective

---

**Strategia de cercetare** urmărește să aducă contribuții în **automatizarea analizei** de difracție de raze X de la achiziția datelor la generarea unei diagrame de echilibru termic fazal în sisteme oxidice.

---

**Obiectivul principal al proiectului de cercetare este utilizarea învățării automate pentru generarea computerizată a diagramelor de echilibru termic fazal din date de difractometrie de raze X.**

---

Obiective specifice:

---

**O.I. Realizarea unei recenzii privind aplicarea metodelor de învățare automată pentru prelucrarea difractogramelor de raze X până în luna a 7-a proiectului**

---

**O.II. Stabilirea relațiilor de echilibru termic fazal în sistemul  $\text{BiFeO}_3$ - $\text{EuFeO}_3$  până în luna a 20-a a proiectului**

---

# Obiective

Plan de lucru	Luna																									
	1	2	3	4		5	6	7		8	9	10	12	13	14		15	16	17	18	19	20				
Activități																										
A1	■				R1				R2 L1							R3							R4 L2			
A2	■																									
A3	■																									
A4		■	■																							
A5												■														
A6												■	■	■	■											
A7																				■	■					
A8																				■	■	■		■		
A9				■			■	■		■							■	■			■	■		■	■	■



O.I.



O.II

# Activități realizate

Pentru îndeplinirea obiectivului specific O.I. au fost realizate următoarele activități de cercetare strategică și aplicată, conform metodologiei propuse:

## **A1. Stabilirea criteriilor de includere și excludere a resurselor bibliografice în recenzie**

Dintre criteriile de includere utilizate, menționăm:

- Includerea resurselor bibliografice care se referă la utilizarea metodelor de învățare automată pentru prelucrarea difractogramelor;
- Includerea articolelor scrise în limba engleză;
- Includerea articolelor și lucrărilor de conferință publicate în jurnale evaluate inter pares (peer review), cărți editate.

Dintre criteriile de excludere utilizate, menționăm:

- Excluderea articolelor care prezintă generalități despre utilizarea inteligenței artificiale în cercetarea științifică;
- Excluderea articolelor scrise în alte limbi în afară de limba engleză;
- Excluderea prezentărilor PowerPoint, discursurilor.

# Activități realizate

---

## A2. Stabilirea surselor de informare: specificarea bazelor de date, registrelor, website-urilor sau altor surse utilizate sau consultate pentru identificarea resurselor bibliografice

- S-au utilizat bazele de date ISI Web of Science și Scopus.



## A3. Stabilirea strategiei de căutare: prezentarea strategiei de căutare pentru fiecare bază de date, registru sau website, incluzând filtrele și limitele utilizate pentru căutare

- Căutările s-au realizat în perioada aprilie – mai 2023
- Cuvintele cheie utilizate au fost: machine learning x-ray diffraction
- Limitările căutărilor: articole publicate în perioada 1970 - 2023

## Activități realizate

### A4. Proces de selecție: prezentarea procesului de selectare a studiilor, numărul de examinatori care au verificat fiecare înregistrare și rapoartele realizate

În urma căutărilor au fost identificate **441 documente** în baza de date **Scopus** și **313 documente** în baza de date **ISI Web of Science**, care conțineau cuvintele cheie „machine learning X-ray diffraction”.

Pentru procesul de selecție de tip blind-on a fost utilizată platforma **rayyan.ai**, cu 2 examinatori și au fost eliminate documentele duplicat, astfel încât au rămas în baza de date **513 documente unice**.

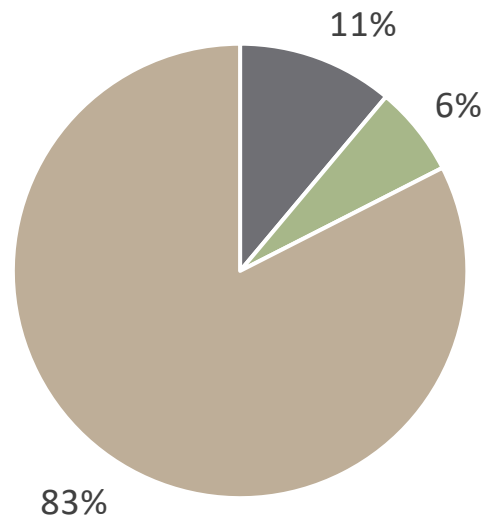
Pentru redactarea recenziei aferente O.I., documentele selectate au fost analizate după consultarea titlurilor și a rezumatelor de către examinatori.



# Activități realizate

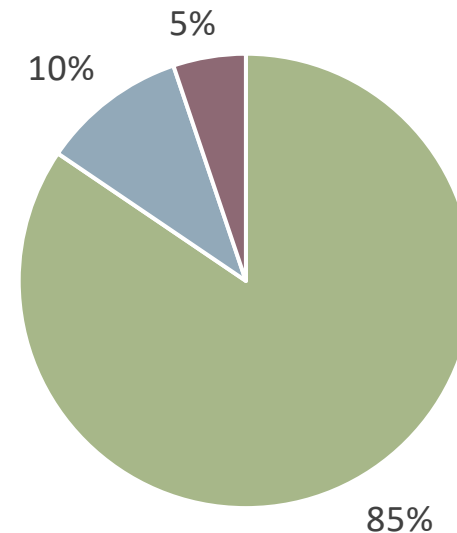
---

## Analiza documentelor



- Incluse în recenzie
- Posibil a fi incluse în recenzie
- Exclude din recenzie

## Motivele excluderii



- Aplicații diferite a machine learning
- Nu conțin cuvântul cheie „machine learning”
- Nu conțin cuvântul cheie X-ray diffraction

# Referințe bibliografice

---

- [1] Y. Xu et al., “Artificial intelligence: A powerful paradigm for scientific research,” *Innov.*, vol. 2, no. 4, 2021, doi: 10.1016/j.xinn.2021.100179.
- [2] E. O. Pyzer-Knapp et al., “Accelerating materials discovery using artificial intelligence, high performance computing and robotics,” *npj Comput. Mater.*, vol. 8, no. 1, 2022, doi: 10.1038/s41524-022-00765-z.
- [3] Z. J. Baum, X. Yu, P. Y. Ayala, Y. Zhao, S. P. Watkins, and Q. Zhou, “Artificial Intelligence in Chemistry: Current Trends and Future Directions,” *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 61, no. 7, pp. 3197–3212, 2021, doi: 10.1021/acs.jcim.1c00619.
- [4] M. Using and M. Learning, “Membranes Using Machine Learning,” pp. 1–17, 2022.
- [5] M. A. Alam et al., “Artificial Neural Network Modeling to Predict the Effect of Milling Time and TiC Content on the Crystallite Size and Lattice Strain of Al7075-TiC Composites Fabricated by Powder Metallurgy,” *Crystals*, vol. 12, no. 3, 2022, doi: 10.3390/cryst12030372.