

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 GYÖRGY



Raport 2: Recenzie sistematică a aplicațiilor învățării automate în prelucrarea difractogramelor de raze X









applied sciences



Open Access

Review

X-ray Diffraction Data Analysis by Machine Learning Methods—A Review

by  Vasile-Adrian Surdu ^{1,2}   and  Romuald György ^{2,3,*}  

¹ Department of Science and Engineering of Oxide Materials and Nanomaterials, Faculty of Chemical Engineering and Biotechnologies, National University of Science and Technology Politehnica Bucharest, Gheorghe Polizu 1-7, 011061 Bucharest, Romania

² Academy of Romanian Scientists, Ilfov 3, 050044 Bucharest, Romania

³ Department of Chemical and Biochemical Engineering, Faculty of Chemical Engineering and Biotechnologies, National University of Science and Technology Politehnica Bucharest, Gheorghe Polizu 1-7, 011061 Bucharest, Romania

* Author to whom correspondence should be addressed.

Appl. Sci. **2023**, *13*(17), 9992; <https://doi.org/10.3390/app13179992>

Received: 4 August 2023 / Revised: 1 September 2023 / Accepted: 1 September 2023 /

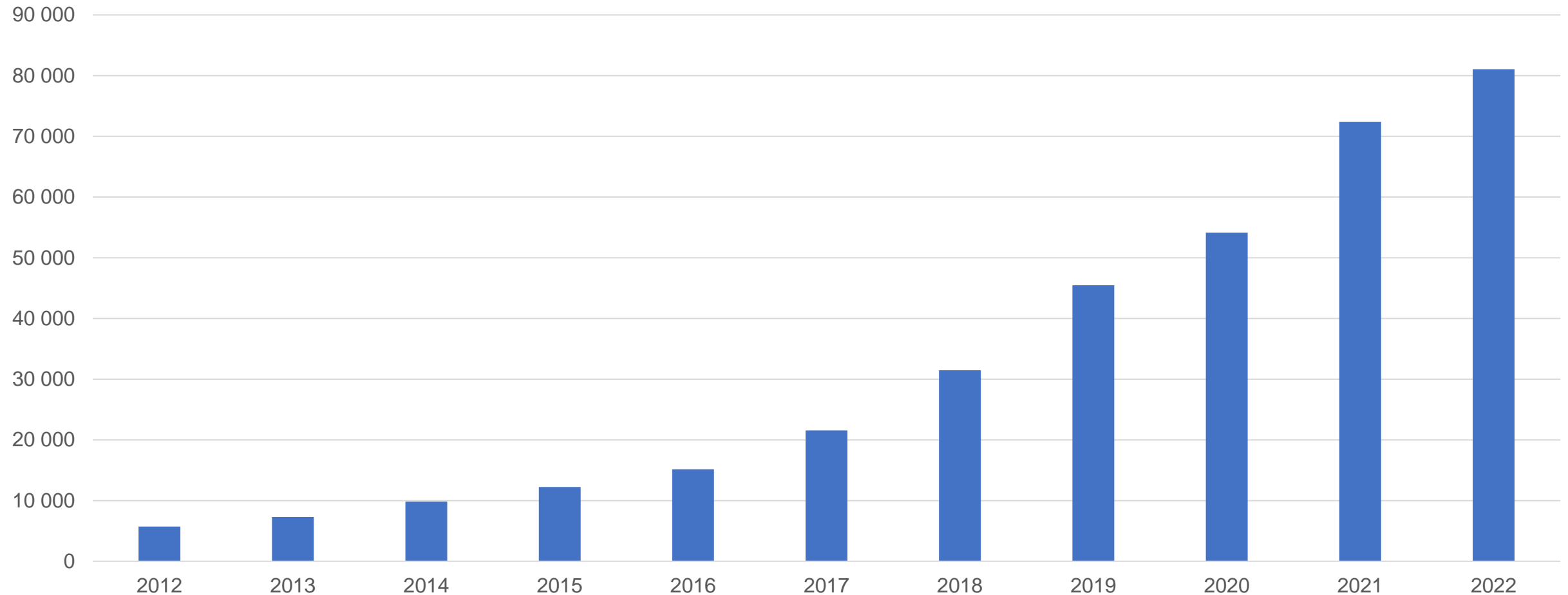
Published: 4 September 2023

Calendarul activităților

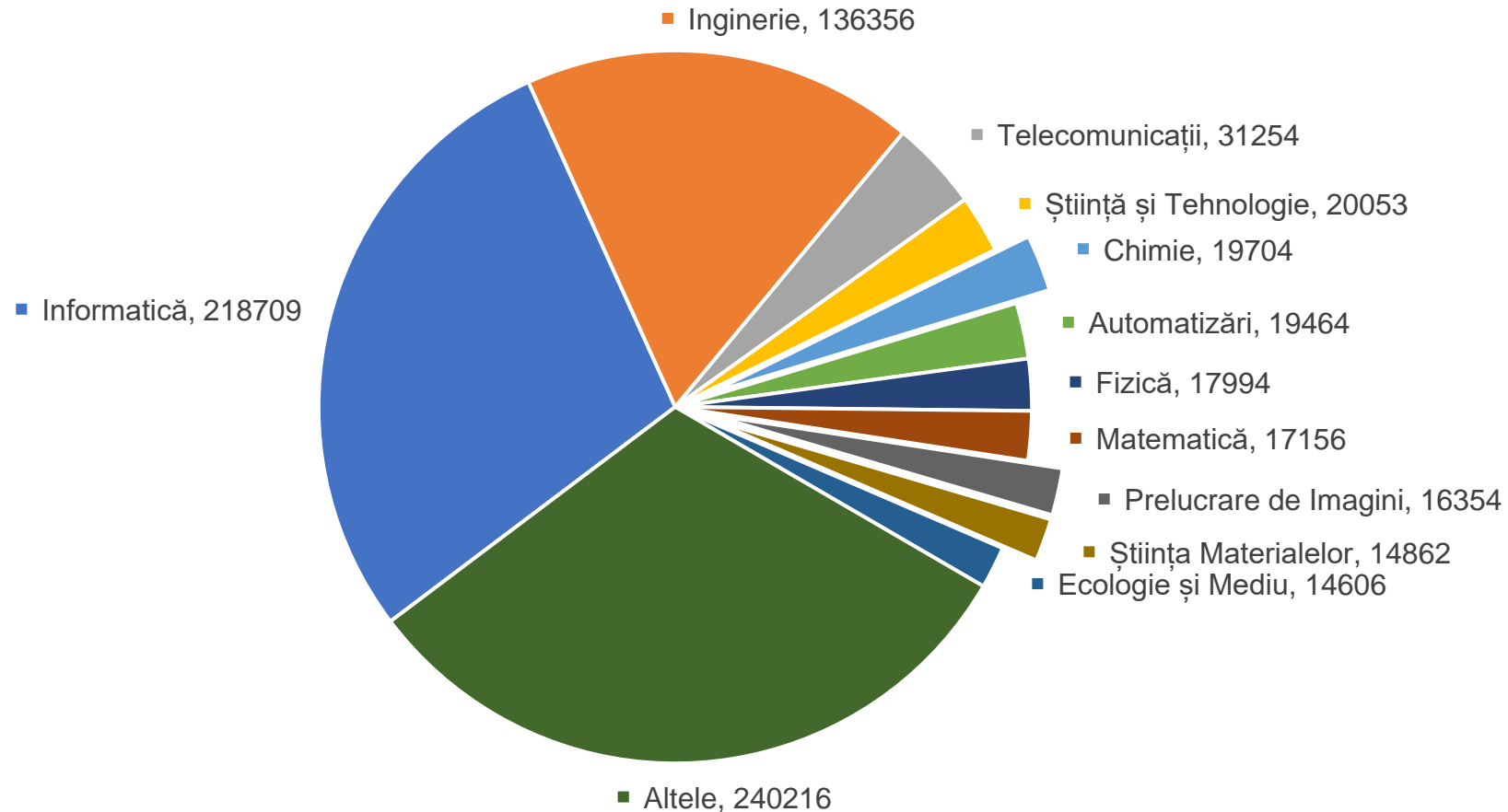
Plan de lucru	Luna																			
Activități	1	2	3	4	R1				R2				R3				R4			
	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	L2			
A1	■																			
A2	■																			
A3	■																			
A4		■	■																	
A5																				
A6																				
A7																				
A8																				
A9				■	■	■	■	■					■	■			■	■	■	■

O. I.
 O. II.

Importanța algoritmilor de învățare automată este confirmată prin numărul de publicații

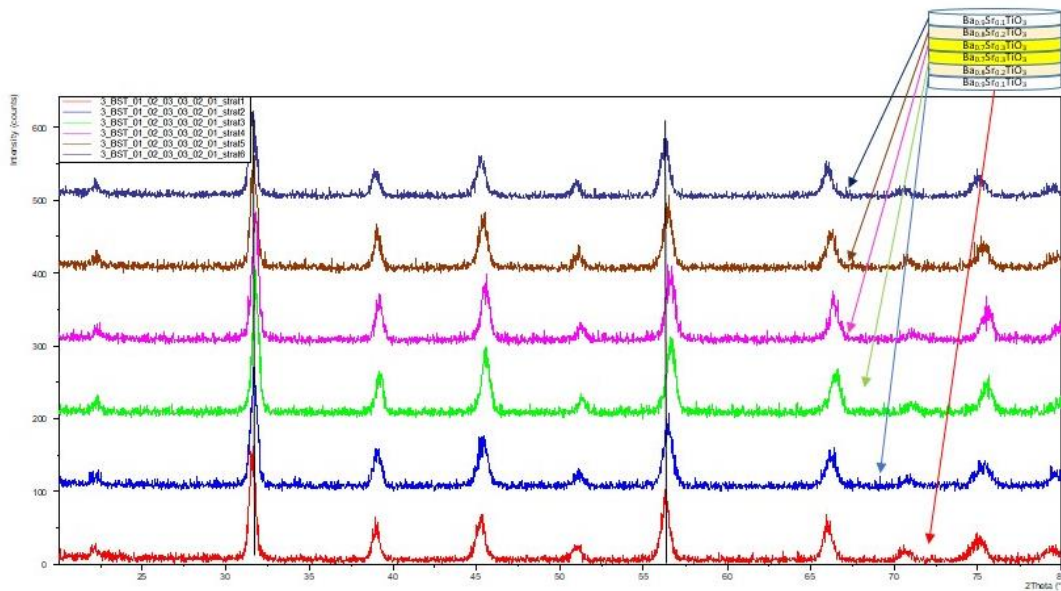


Învățarea automată a fost utilizată în practic toate domeniile de activitate în ultimii 10 ani

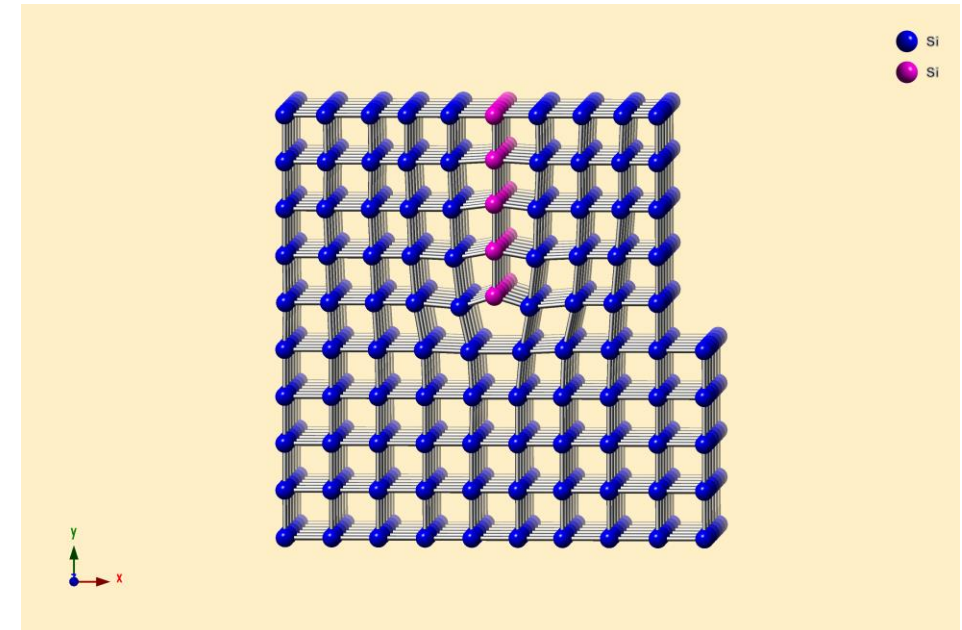


Prezentare generală a tehnicii de difracție cu raze X

- După mai mult de 100 de ani de la descoperire, difracția cu raze X este în continuare una dintre cele mai versatile tehnici utilizate în înțelegerea materialelor cristaline



Identificarea și cuantificarea fazelor



Determinarea caracteristicilor microstructurale

Rolul algoritmilor de învățare automată în prelucrarea difractogramelor de raze X

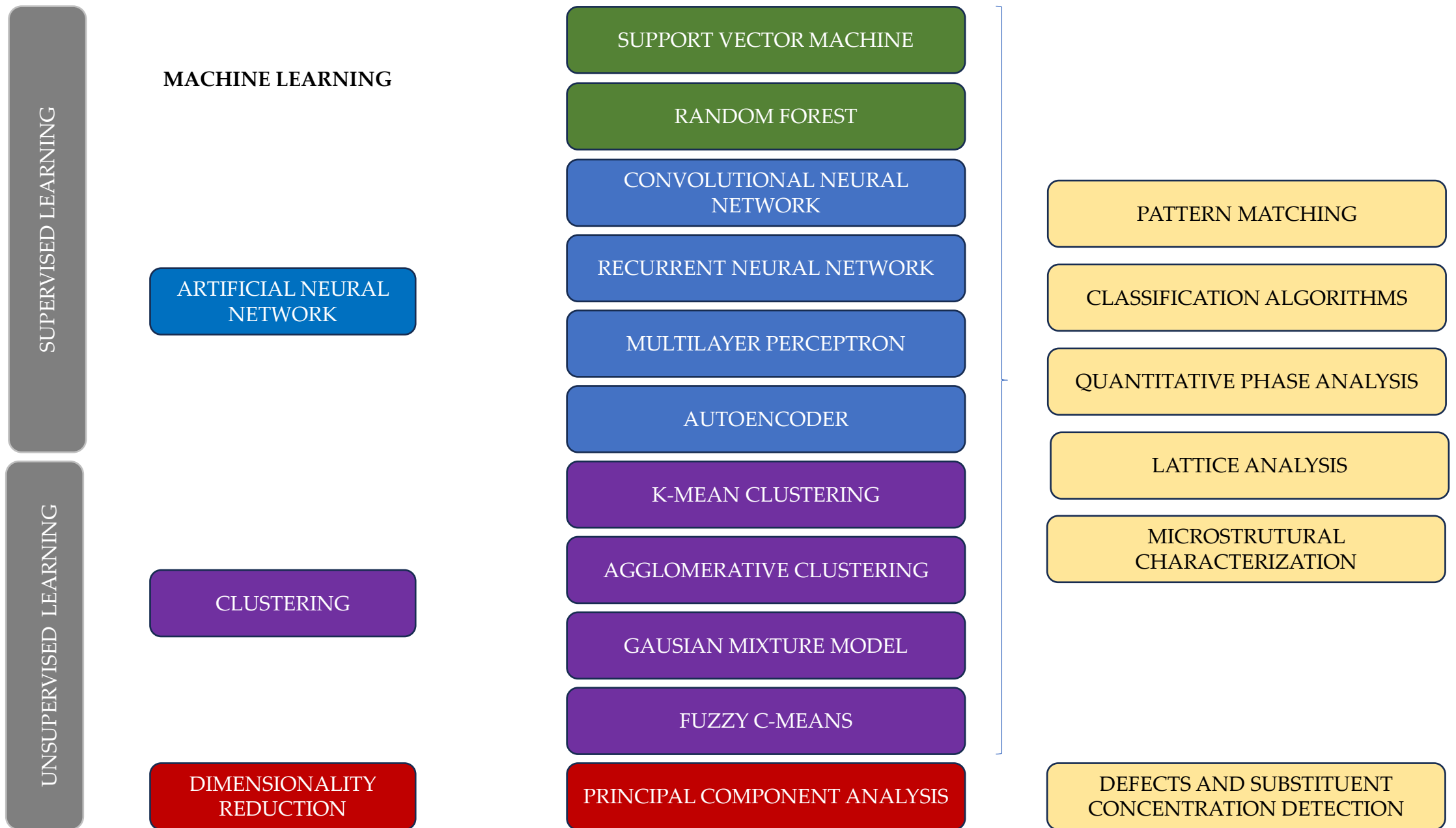
- **Interpretarea unui număr mare de diagrame (“big data”)**
 - Echipamentele de tip sincrotron pot analiza rapid un număr ridicat de probe
 - Este imperativă prelucrarea difractogramelor obținute, cu aceeași viteză
- **Identificarea automată a fazelor**
 - Identificarea manuală a fazelor este un proces consumator de timp
 - Învățarea automată reduce timpul necesar identificării fazelor și poate fi utilizată și de operatori care nu sunt experți în tehnica de difracție de raze X
- **Analiză cantitativă a fazelor**
 - Metodele tradiționale sunt consumatoare de timp și necesită expertiză
 - Învățarea automată poate estima proporțiile fazelor rapid și precis, în urma etapei de instruire pe baza unui set de date adecvat

Provocări și limitări ale tehnicii tradiționale de analiză a difractogramelor de raze X

- **Pregătirea datelor**, prin îndepărtarea zgomotului de fond și a altor perturbații care pot conduce la interpretarea incorectă a difractogramelor
- **Identificarea fazelor și analiza cristalografică** este îngreunată în cazul amestecurilor multifazice în care maximele de difracție se suprapun
- **Analiza cantitativă a fazelor** implică determinarea proporțiilor relative ale fazelor coexistente, cu un efort de calcul semnificativ
- **Caracterizarea micro-structurală** necesită modele matematice sofisticate și expertiză în utilizarea acestora pentru determinarea dimensiunilor cristalitelor, eforturilor mecanice statice, sau a texturii

Tipuri de instruire a algoritmilor de învățare automată

- **Supervised learning** – învățare ghidată prin exemple de perechi de date intrare și ieșire pe care algoritmul învață să le reproducă
- **Unsupervised learning** – tip de învățare autonomă (fără exemple) prin care algoritmul descoperă structura existentă în setul de date
- **Deep learning** – folosește rețele neurale cu mai multe rânduri de neuroni (cu „adâncime” *mai mare*)
- **Reinforcement learning** – algoritmul rafinează un proces de luare a deciziilor prin interacțiuni repetată cu un mediu de învățare
- **Transfer learning** – construcția algoritmului pornește de la un algoritm existent, utilizat pentru o sarcină cu elemente asemănătoare



Exemple de utilizare a învățării automate în literatura de specialitate

- **Identificarea sistemului de cristalizare** (monoclinic, triclinic, ortorombic, tetragonal, hexagonal, romboedral sau cubic)
- **Analiza cantitativă a fazelor**
- **Analiza structurii rețelei cristaline**, inclusiv pentru materiale multifazice
- **Detecția de defecte ale rețelei și estimarea concentrației substituenților**
- **Caracterizarea microstructurii materialelor** (eforturi mecanice la nivelul structurii materiei)

Provocări și limitări în aplicarea învățării automate

- **Calitatea datelor** – rezultatele algoritmilor de învățare automată sunt limitate de calitatea datelor utilizate pentru instruirea lor.
 - **Cantitatea datelor** – algoritmi de învățare necesită multe exemple în timpul fazei de instruire; lipsa datelor poate fi ameliorată prin generarea de date sintetice suplimentare
- **Interpretare** – parametrii algoritmilor de învățare automată sunt deseori lipsiți de semnificație fizică
- **Generalizare** – puterea predictivă a algoritmilor de învățare uneori nu se păstrează la exemple diferite de cele întâlnite în faza de instruire
- **Robustețe** – capacitatea predictivă a algoritmilor nu este garantată pentru un domeniu vast de condiții de operare și calitate a datelor supuse analizei difractometrice

Tendențe în analiza difractogramelor de raze X prin algoritmi de învățare automată

- **Încorporarea expertizei și a legilor fizicii** în modelele matematice ale algoritmilor de învățare automată
- **Îmbinarea** cu metode de analiză ale **fizicii cuantice**, cum ar fi **DFT** (density functional theory)
- **Integrarea** algoritmilor în **proceduri** de analiză a difractogramelor, pentru **evaluarea** acestora în **timp real**
- Momentan, învățarea automată nu este utilizabilă ca unic instrument de analiză, însă are potențialul de a îmbunătăți prelucrarea datelor XRD în combinație cu tehnicile de analiză consacrate

Vă mulțumesc pentru
atenție!