

GDR EMILI

Atelier Machine Learning

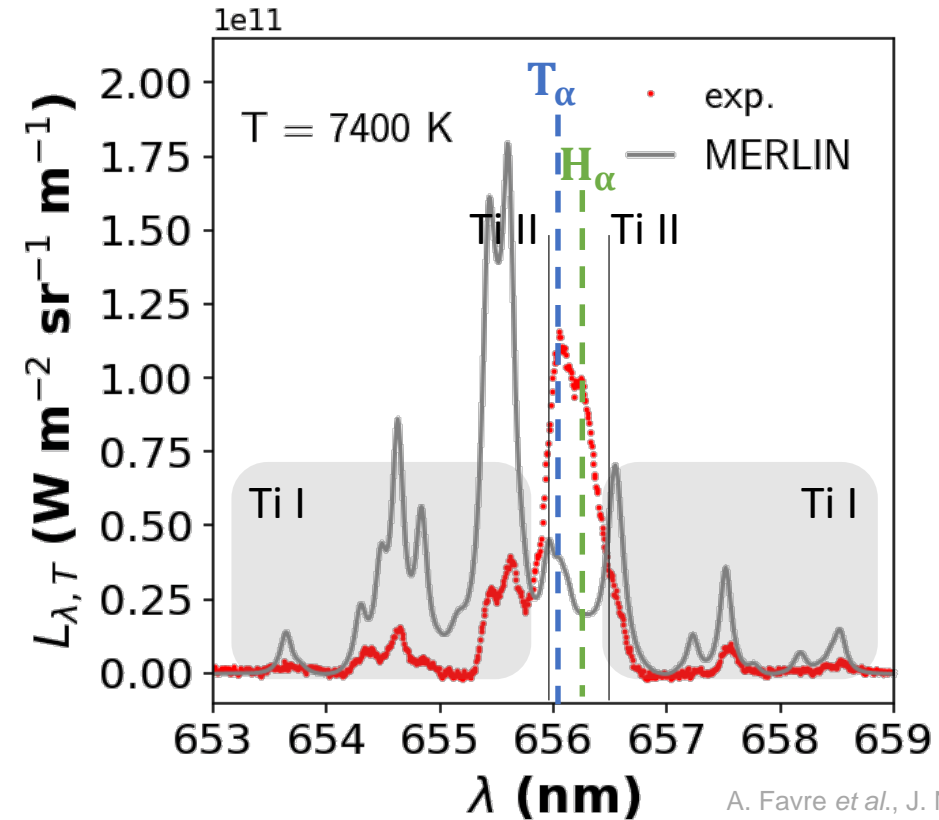
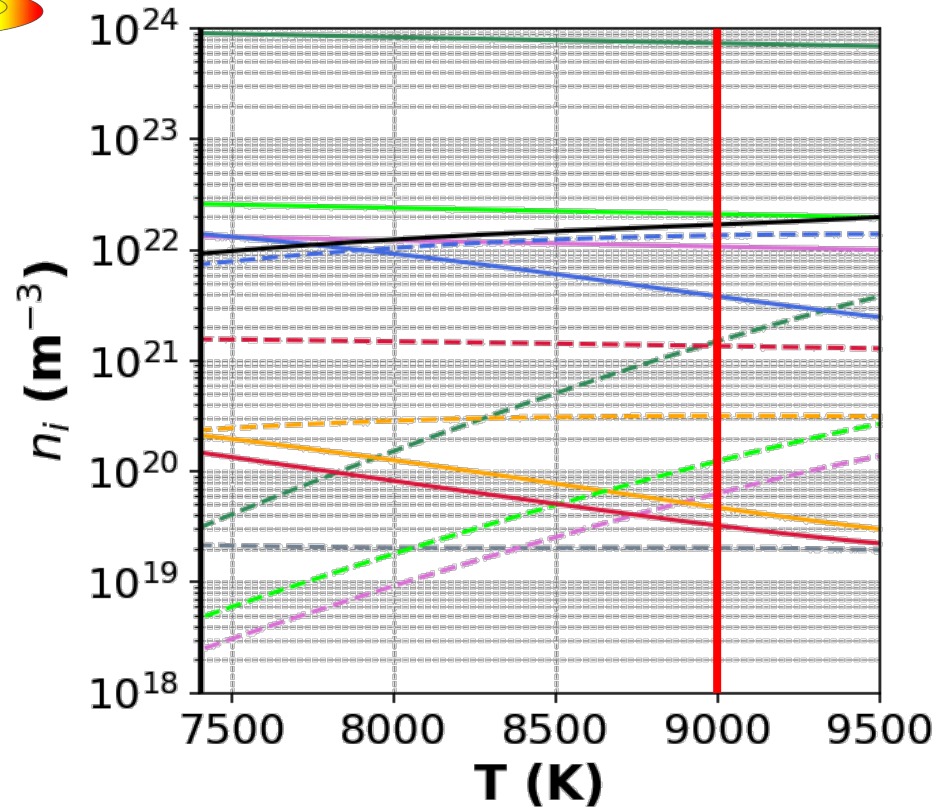
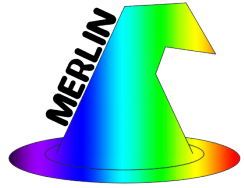
Mise en œuvre de l'IA pour la caractérisation composition-conditions thermodynamiques d'un plasma induit par laser

Vers la quantification en temps réel...

Aurélien FAVRE, **Arnaud BULTEL**, Vincent MOREL, Alexis ABAD, Alexandre POUX
CORIA, UMR 6614, Université de Rouen-Normandie

LIBS auto-calibrée : approche par reconstruction

Détermination préalable des conditions thermodynamiques (p, T) ou (n_e, T) : A_{ki}, ω_{ki} nécessaires...
 Transfert radiatif : nécessite aussi la connaissance de A_{ki} et ω_{ki} (encore k_λ)...

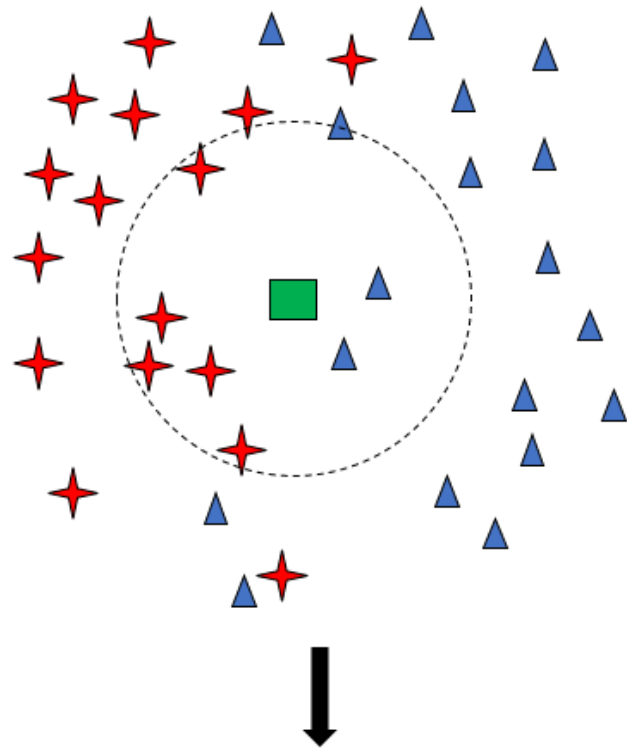


$\lambda_{las} = 532 \text{ nm}$
 $\tau_{las} = 7 \text{ ns}$
 $\varphi_{las} \sim 10^{14} \text{ W m}^{-2}$
 Pd-Ti/T-Si (p_{atm} Ar)
 $t = 10 \mu\text{s}$
 (intégré sur $2 \mu\text{s}$)

- $x_{Ar} = 0,935$
- $x_{Pd} = 4,62 \times 10^{-4}$
- $x_{Ti} = 1,76 \times 10^{-3}$
- $x_{Si} = 2,2 \times 10^{-2}$
- $x_H = 1,37 \times 10^{-2}$
- $x_T = 2,68 \times 10^{-2}$

A. Favre et al., J. Nucl. Mat., (2023) [réduction]

Machine Learning : simple classification kNN...



L'objet inconnu ■ ∈ à la classe ★

k=5 Nearest Neighbors (kNN)



Bonne corrélation en moyenne

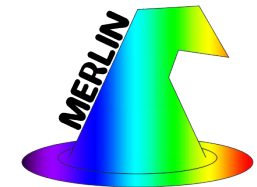
Application de cette approche sur le jeu de données (ou *dataset*) suivant :

- H / He / Ar / Al 4 espèces
- $10^{21} \text{ m}^{-3} < n_e < 10^{24} \text{ m}^{-3}$ 15 points
- $5000 \text{ K} < T_e < 25000 \text{ K}$ 15 points
- $400 \text{ nm} < \lambda < 800 \text{ nm}$ 45001 points ($\Delta\lambda = 0,009 \text{ nm} \sim \Delta\lambda \text{ exp.}$)
- $f_e = 200 \mu\text{m}$ - profil lorentzien
- $L_p = 1 \text{ mm}$

Dimensionnement :

$$4 * 15 * 15 = 900 \text{ spectres}$$

$$4 * 15 * 15 * 45001 \sim 4 \times 10^7 \text{ pixels}$$



Jeu d'entrainement

80 % randomisé du *dataset*
(720 spectres, $\sim 3 \times 10^7$ pixels)

/

Jeu de test

20 % randomisé du *dataset*
(180 spectres, $\sim 10^7$ pixels)

/

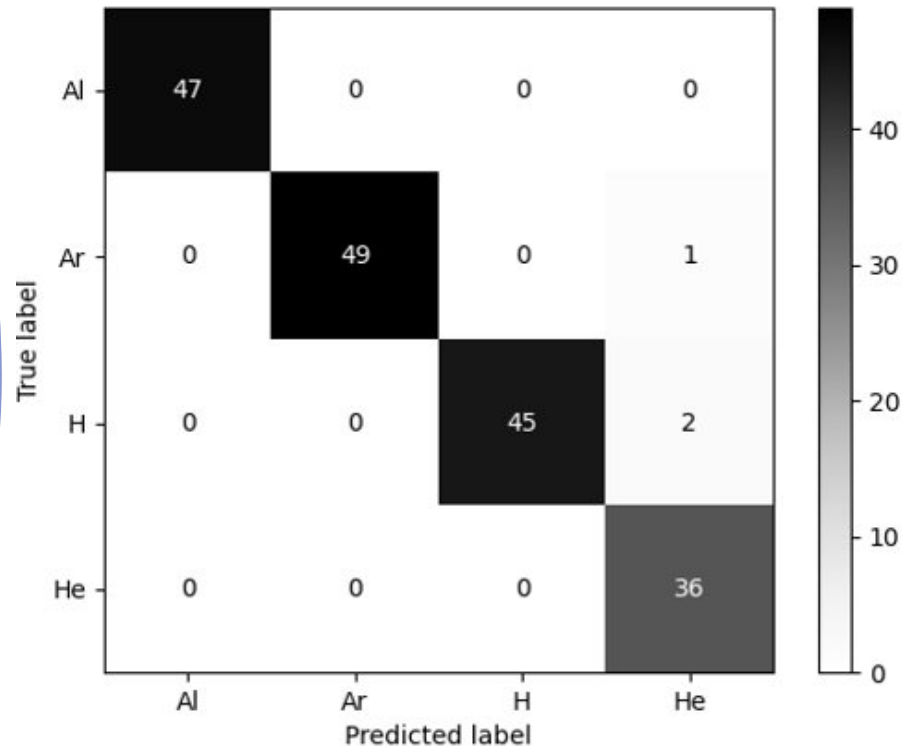
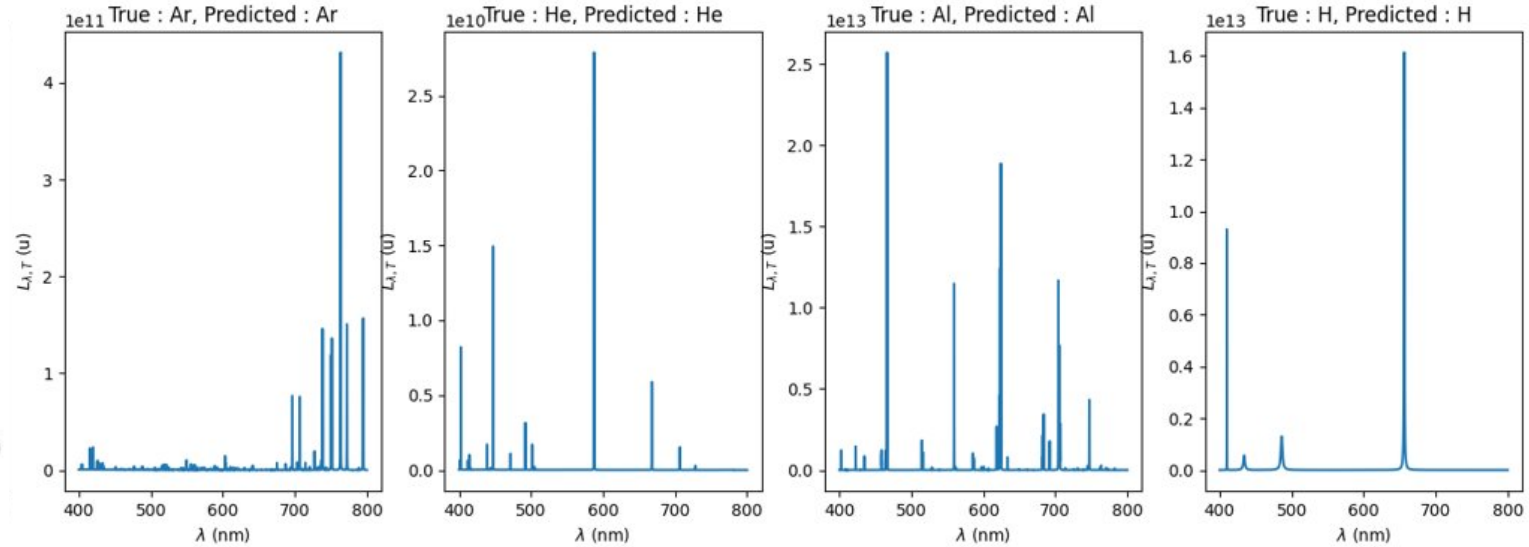


Spectres inconnus

Machine Learning : simple classification kNN...

Prenons au hasard 4 spectres dans la totalité du *dataset*...

La classification monoespèce semble fiable !



Matrice de confusion obtenue sur le jeu de test (180 spectres)
 → 98 % des prédictions sont correctes !

Deep Learning : Régression multivariée

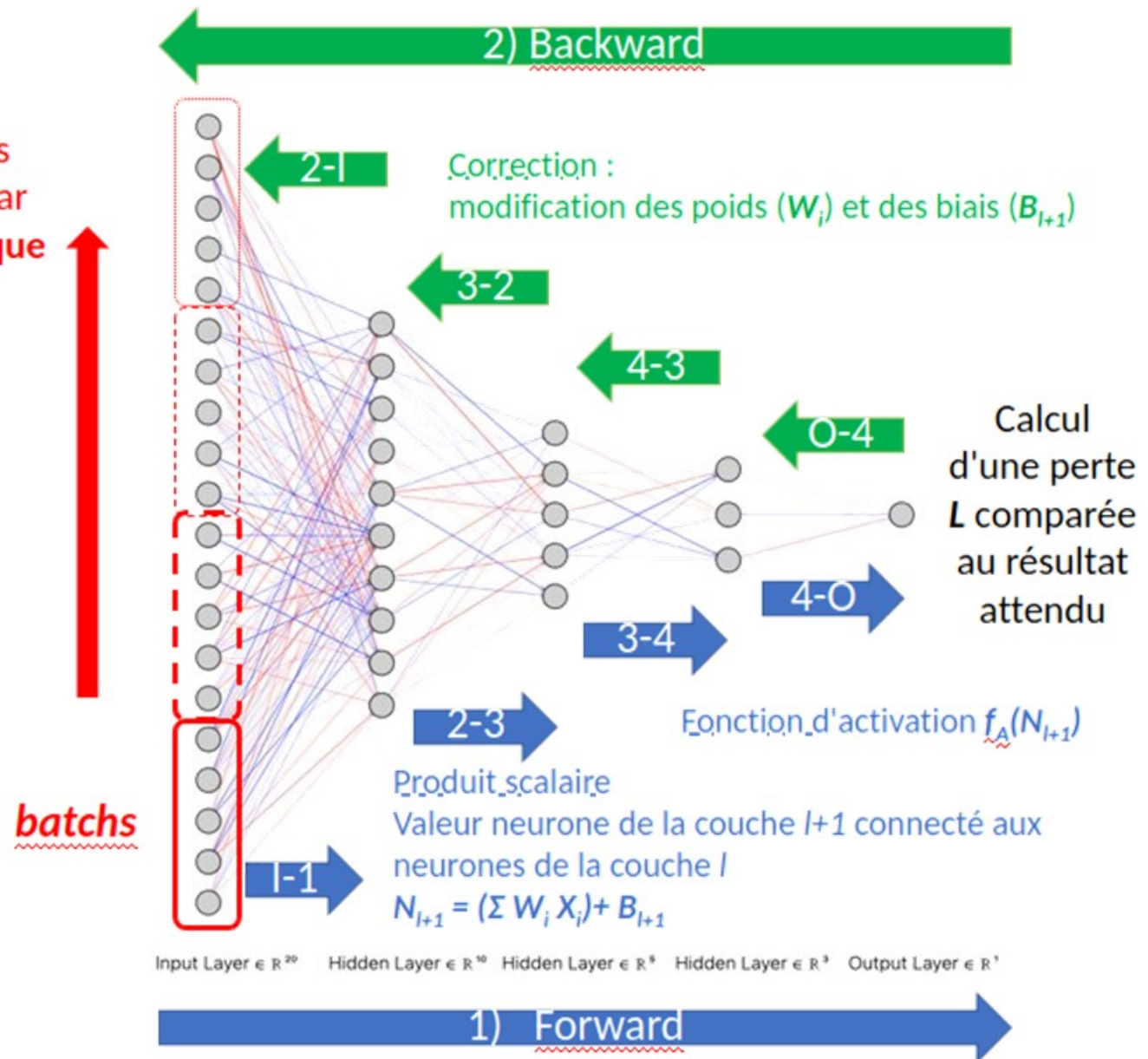
Lorsque l'entièreté des inputs a été balayée par les n *batches*, une *époque* s'est écoulée

Réseau de neurones convolutionnel = CNN

Dans ce réseau : couches profondes

Deep Learning

Correction des W_i et B_i de manière à optimiser la réponse (via fonction d'activation) des neurones à un stimulus (spectre d'entrée + composantes majoritaires – gradients)



Architecture linéaire...

Be/H

100 époques

$Learning\ rate = cste = 10^{-3}$

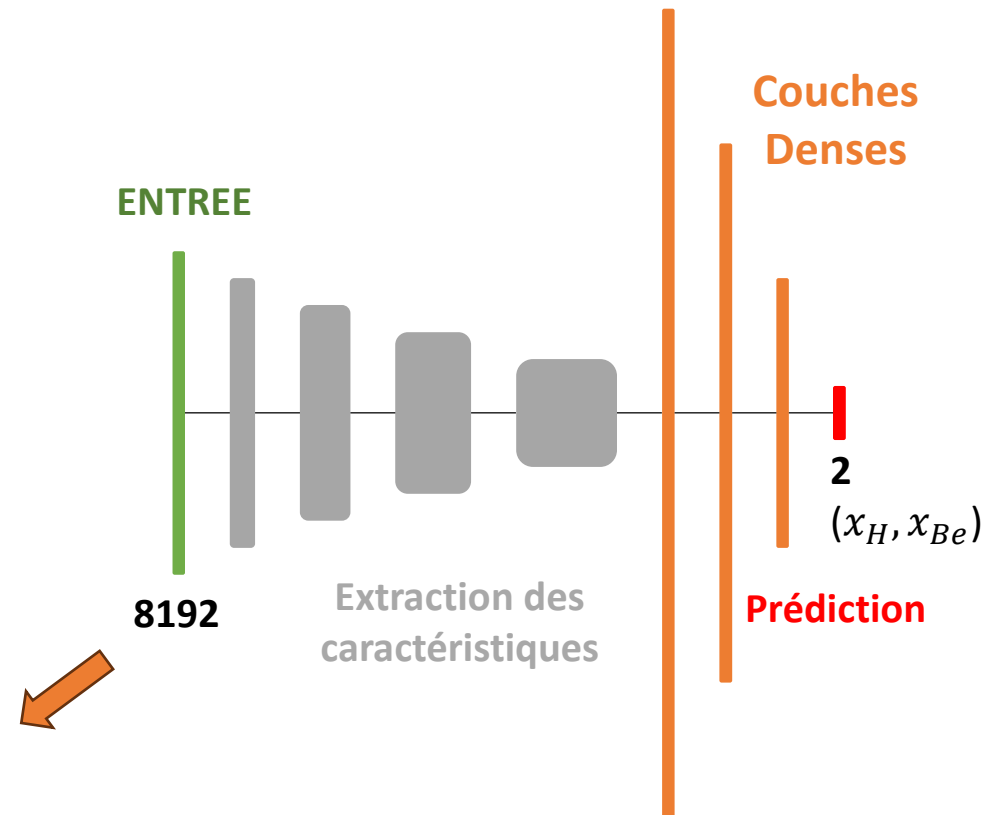
~ 129 heures (mono CPU)

~ 600 Go de mémoire RAM (batch 64)

Entraînement sur des couples (x_H, x_{Be})
sur [600, 700] nm

$$x_{Be} \in [0, 1]$$

$$x_H = 1 - x_{Be}$$



Architecture linéaire...

Be/H

100 époques

Learning rate = cste = 10^{-3}

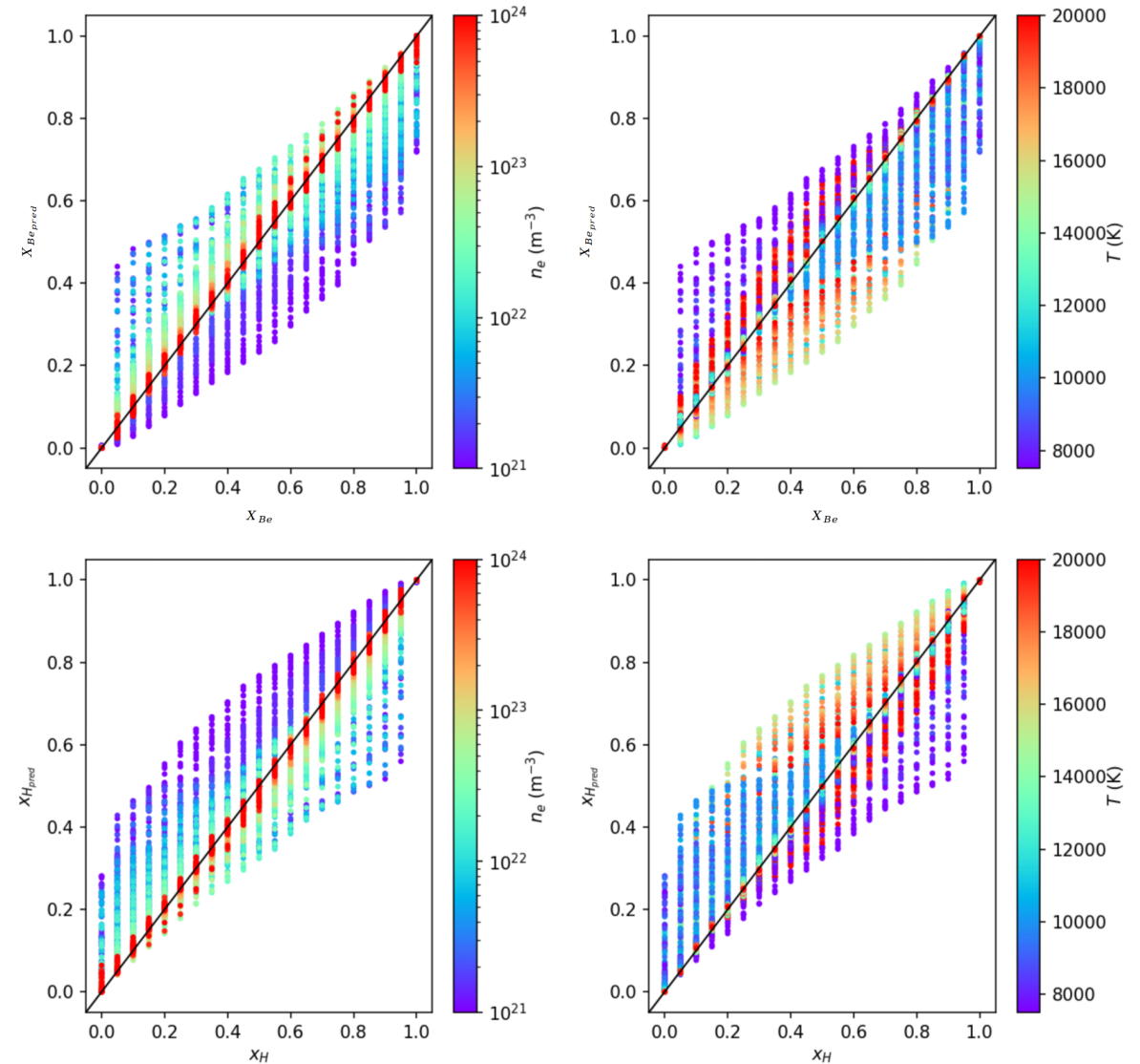
~ 129 heures (mono CPU)

~ 600 Go de mémoire RAM (batch 64)

Entraînement sur des couples (x_H, x_{Be})
sur [600, 700] nm

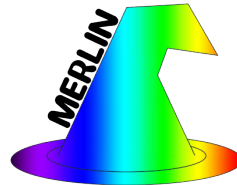
$$x_{Be} \in [0, 1]$$

$$x_H = 1 - x_{Be}$$



Architecture Inception...

AI-Ar-Be-N-O/H



100 époques

Learning rate = cste = 10^{-4}

~ 4 heures (8 GPU)

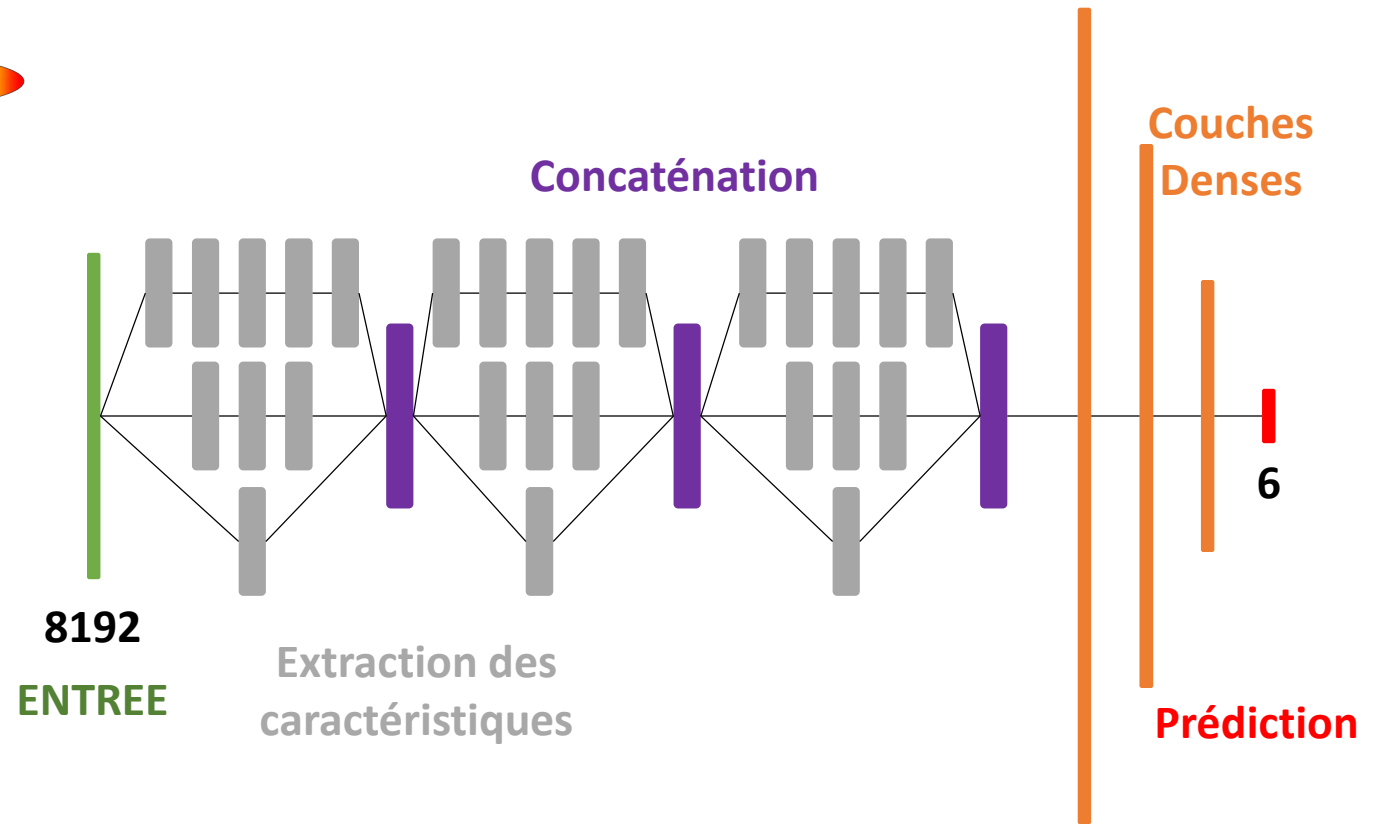
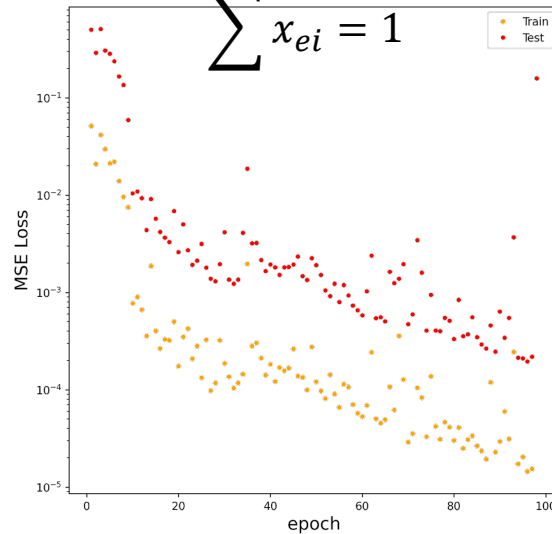
~ 400 Go de mémoire RAM (batch 64)

Entraînement sur des couples quelconques $(x_H, x_{e1}, 0, 0, 0, 0)$

$$x_{e1} \in [10^{-2}, 1]$$

$$x_H = 1 - x_{e1}$$

$$\sum x_{ei} = 1$$



Architecture Inception...

Al-Ar-Be-N-O/H

100 époques

Learning rate = cste = 10^{-4}

~ 4 heures (8 GPU)

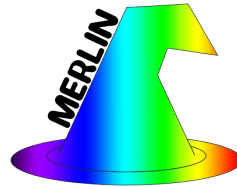
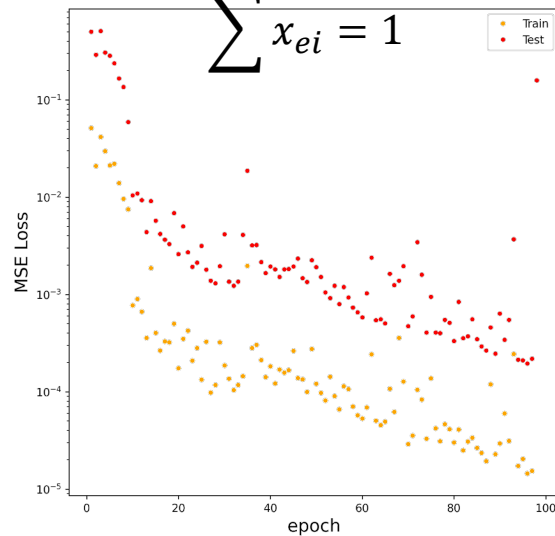
~ 400 Go de mémoire RAM (batch 64)

Entraînement sur des couples quelconques $(x_H, x_{e1}, 0, 0, 0, 0)$

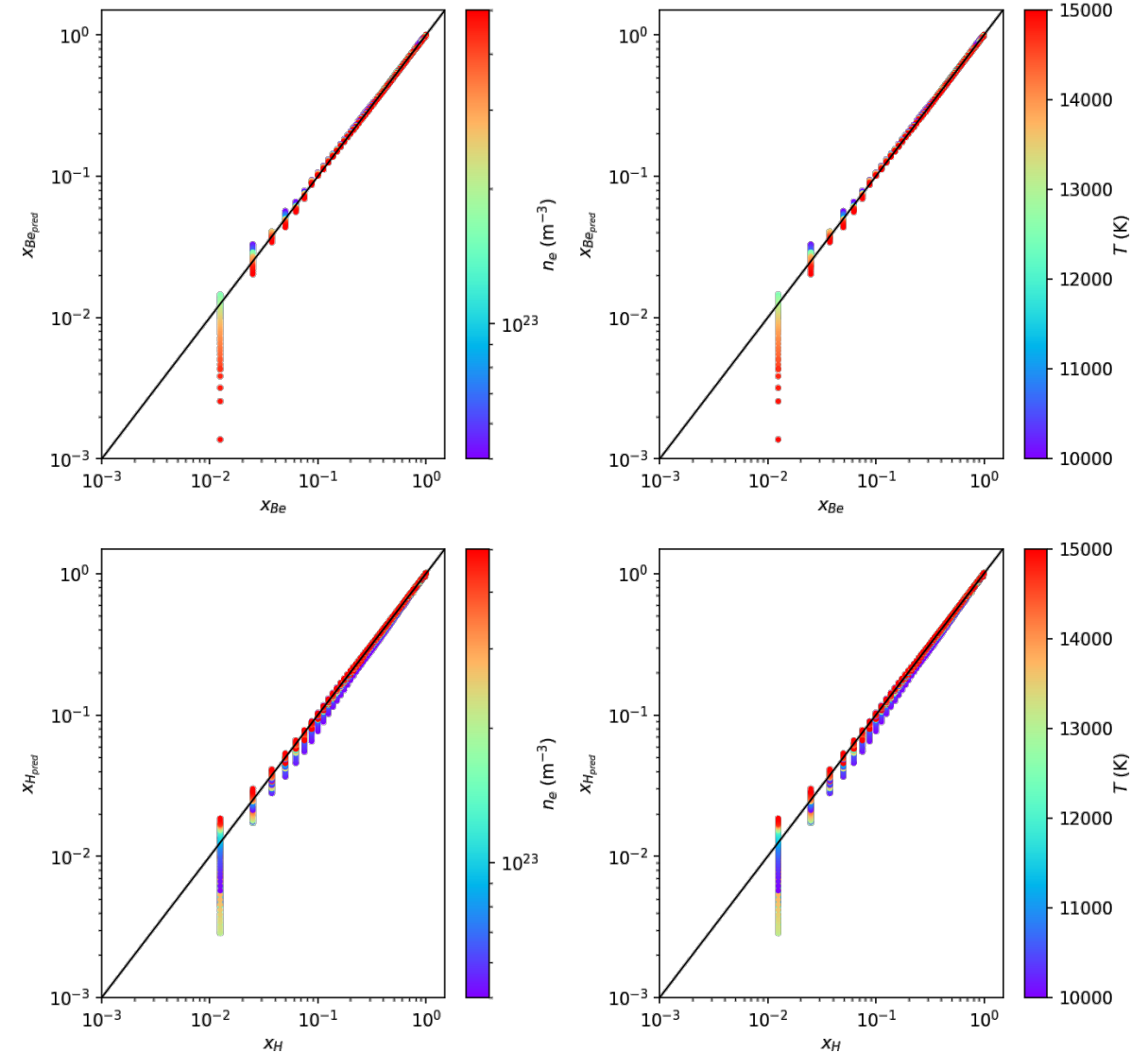
$$x_{e1} \in [10^{-2}, 1]$$

$$x_H = 1 - x_{e1}$$

$$\sum x_{ei} = 1$$

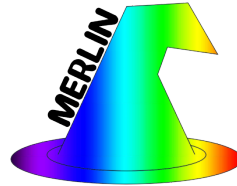


MSE loss, $L_p = 1000 \mu\text{m}$



Architecture Résiduelle...

Al-Ar-Be-N-O/H



150 époques

Learning rate = cste = 10^{-4}

~ 4 heures (8 GPU)

~ 400 Go de mémoire RAM (batch 64)

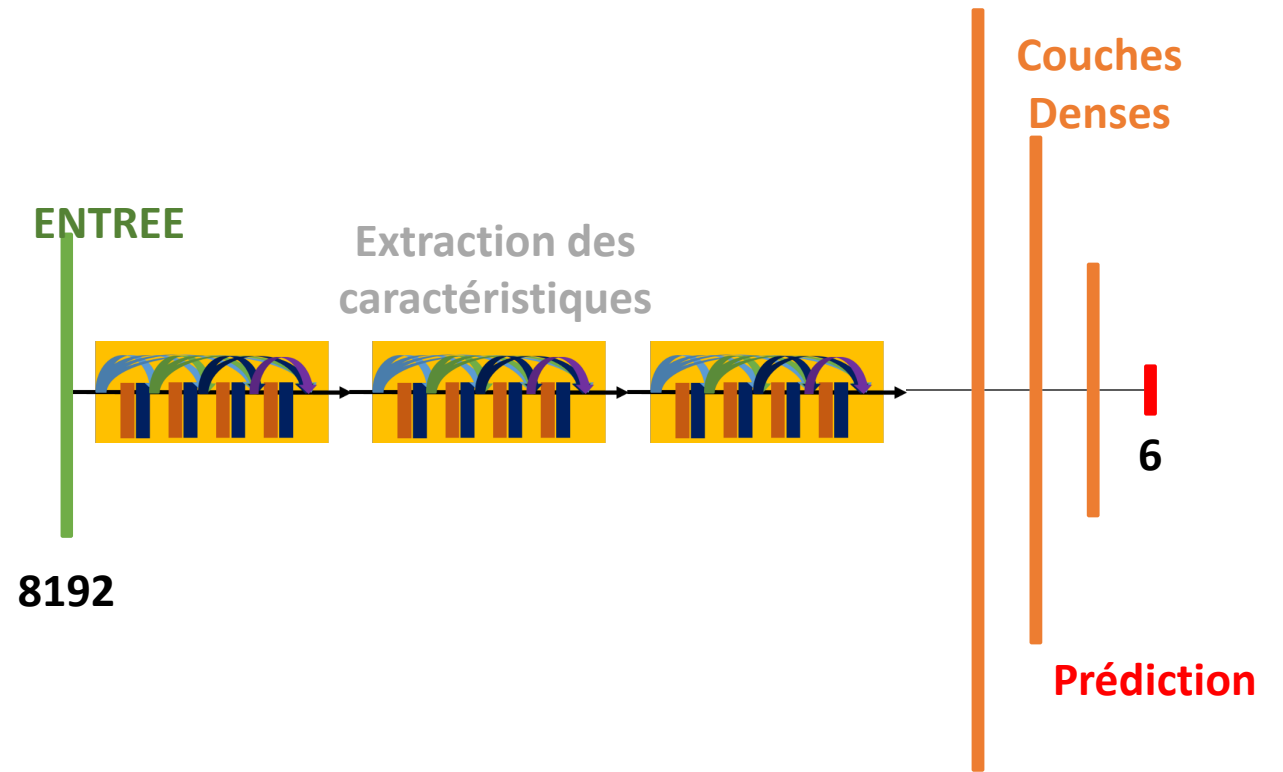
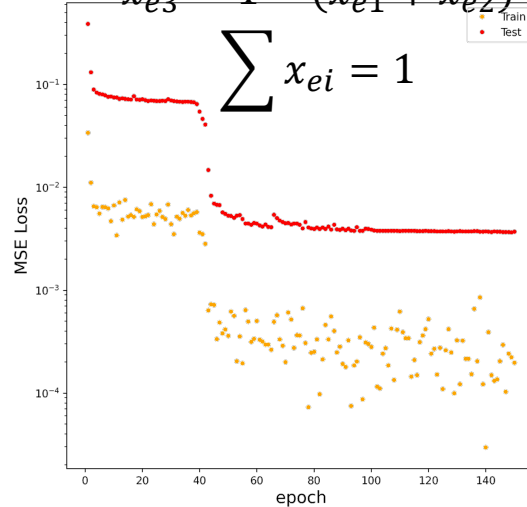
Entraînement sur des triplets quelconques $(x_{e1}, x_{e2}, x_{e3}, 0, 0, 0)$

$$x_{e1} \in [10^{-4}, 1]$$

$$x_{e2} \in [10^{-4}, 1]$$

$$x_{e3} = 1 - (x_{e1} + x_{e2})$$

$$\sum x_{ei} = 1$$



Architecture Résiduelle...

Al-Ar-Be-N-O/H

100 époques

Learning rate = cste = 10^{-4}

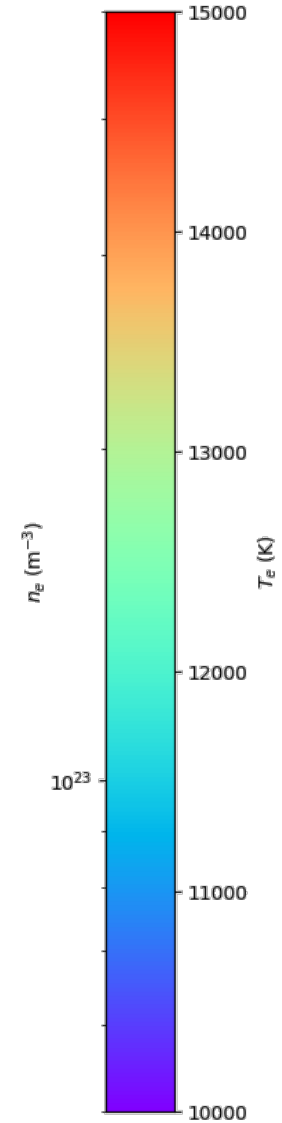
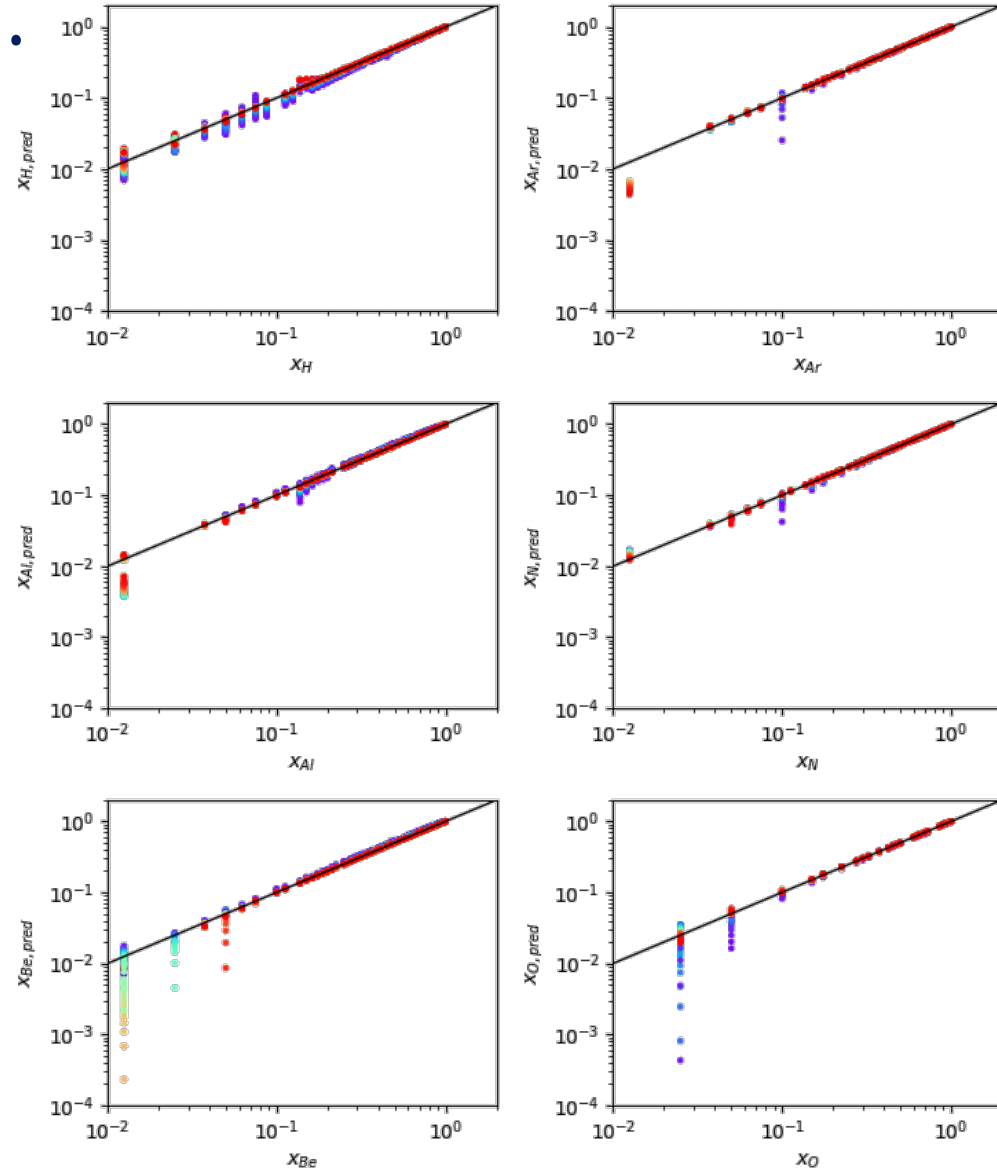
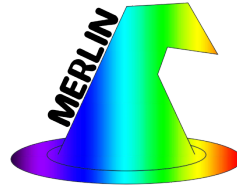
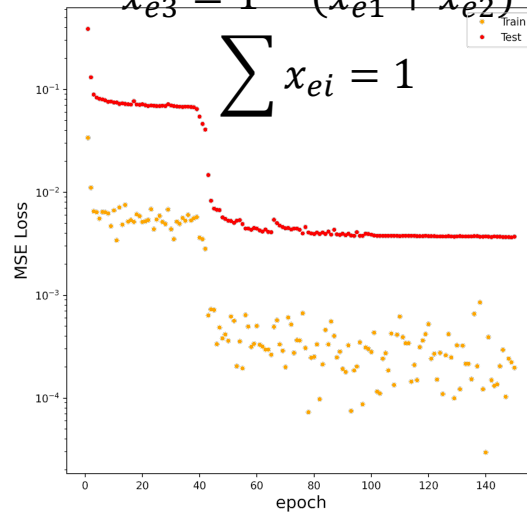
~ 4 heures (8 GPU)

~ 400 Go de mémoire RAM (batch 64)

Entraînement sur des triplets quelconques $(x_{e1}, x_{e2}, x_{e3}, 0, 0, 0)$

$$\begin{aligned} x_{e1} &\in [10^{-4}, 1] \\ x_{e2} &\in [10^{-4}, 1] \\ x_{e3} &= 1 - (x_{e1} + x_{e2}) \end{aligned}$$

$$\sum x_{ei} = 1$$



Conclusion

Tendance : plus le set de données est grand et ALÉATOIRE, meilleures sont les prédictions...

Travaux en développement

Entraînement sur des 9-uplets (somme unité) générés aléatoirement

Conditions thermodynamiques générées aléatoirement (en conservant un couplage (n_e, T_e) physique)

Intervalle spectral généré aléatoirement + Résolution spectrale voisine des conditions expérimentales

Ajout d'un bruit numérique similaire aux fluctuations expérimentales de signal

Perspectives

Détermination des conditions thermodynamiques d'un spectre donné

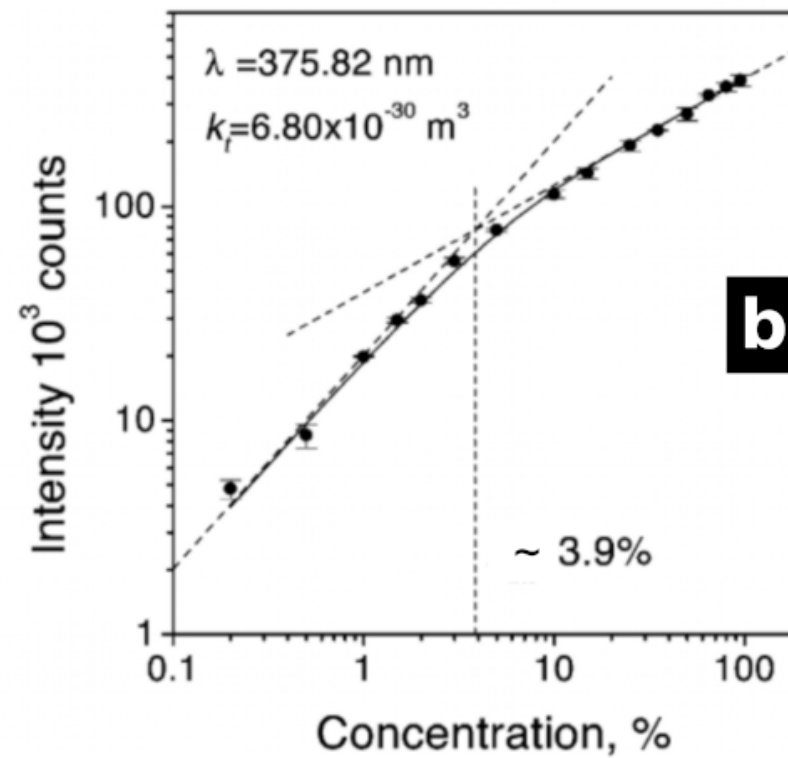
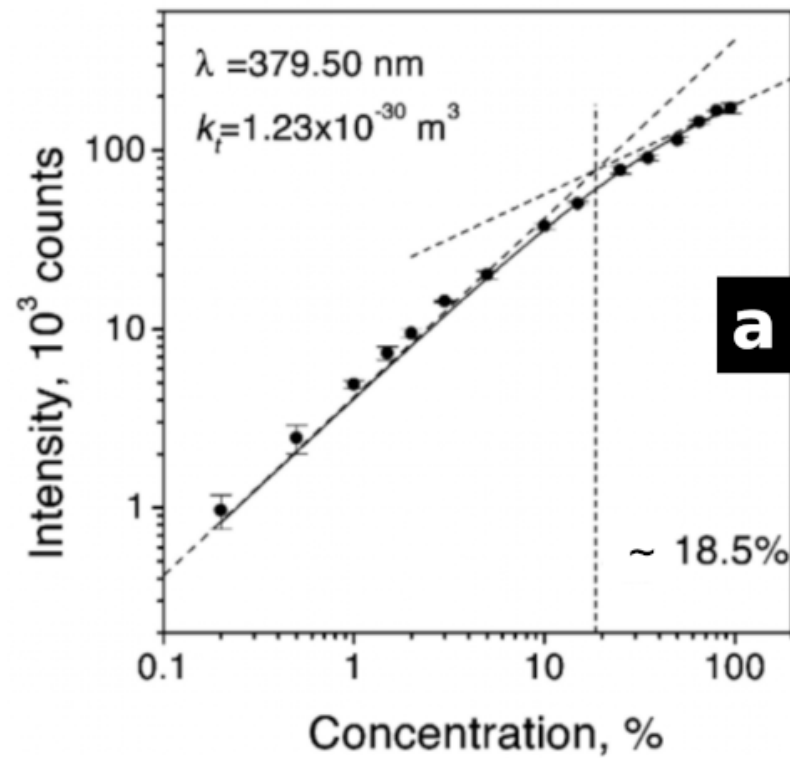
Estimation intelligente de l'écart à l'ETL d'un spectre donné

Détermination de données spectroscopiques à partir de spectres expérimentaux étalons (arcs stabilisé)

Objectif : interprétation d'un spectre quelconque en **temps réel**

LIBS calibrée : approche comparative

Etablir une correspondance entre niveau de signal et concentration élémentaire à l'aide d'étalons
Données spectrales utiles pour s'affranchir de l'auto-absorption (k_λ)...

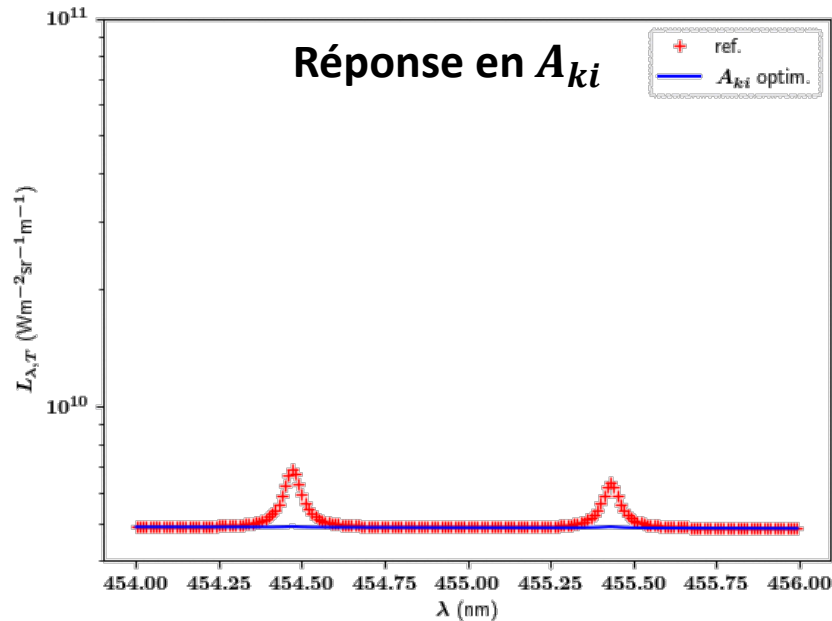


Courbes de croissance
de transitions
optiquement épaisses
de Fe I pour la
quantification du fer
dans des alliages Fe-Ni

Impulsions IR ns dans
l'air à p_{atm}

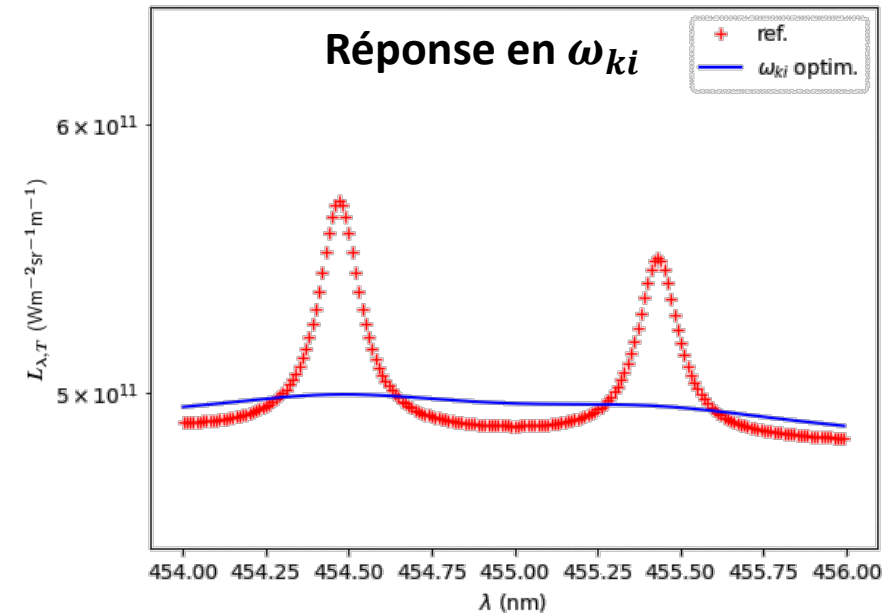
A l'avenir : détermination de données spectro ?

Minimisation de l'écart quadratique entre la référence et le spectre à paramètres flottants
 Traitement effectué sur le vecteur des N transitions d'intérêt...



(Ar, Ar⁺, e⁻) sur [454; 456] nm
 $(n_e, L_p) = (10^{22} \text{ m}^{-3}, 5 \text{ mm})$ - NIST

Ar I 454,47 nm : $A_{ki} = 8,3 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$
 Ar I 455,43 nm : $A_{ki} = 3,8 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$
 $10^3 \text{ s}^{-1} < A_{ki,test} < 10^6 \text{ s}^{-1}$



(Ar, Ar⁺, e⁻) sur [454; 456] nm
 $(n_e, L_p) = (10^{23} \text{ m}^{-3}, 5 \text{ mm})$ - NIST

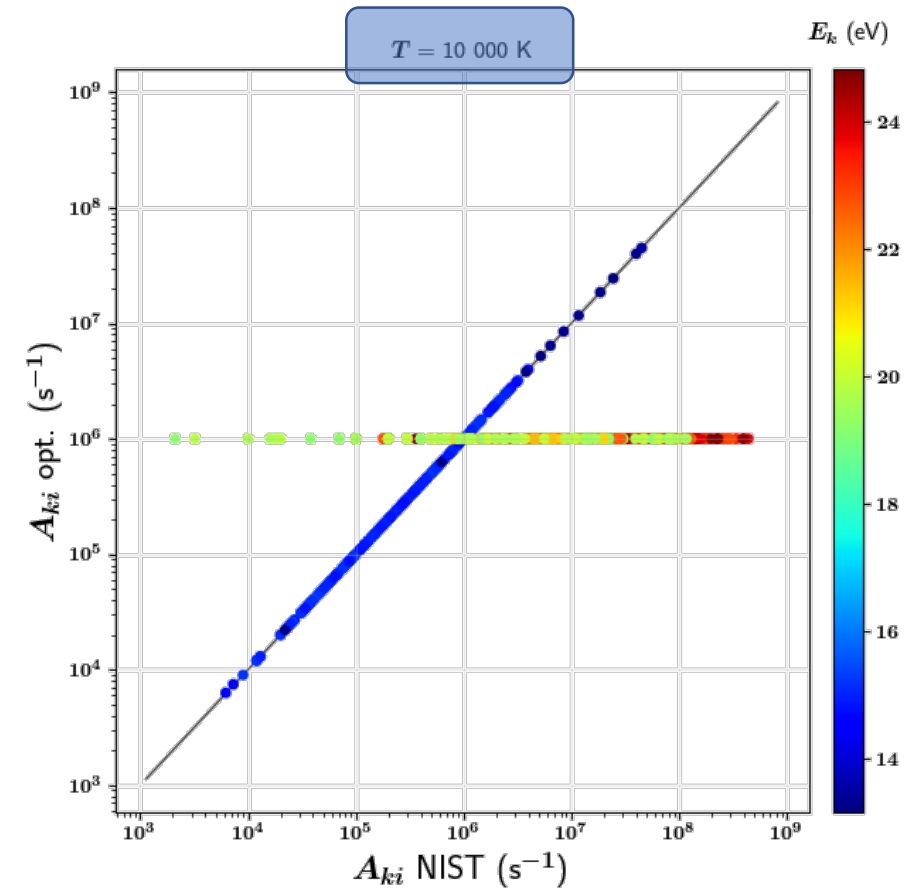
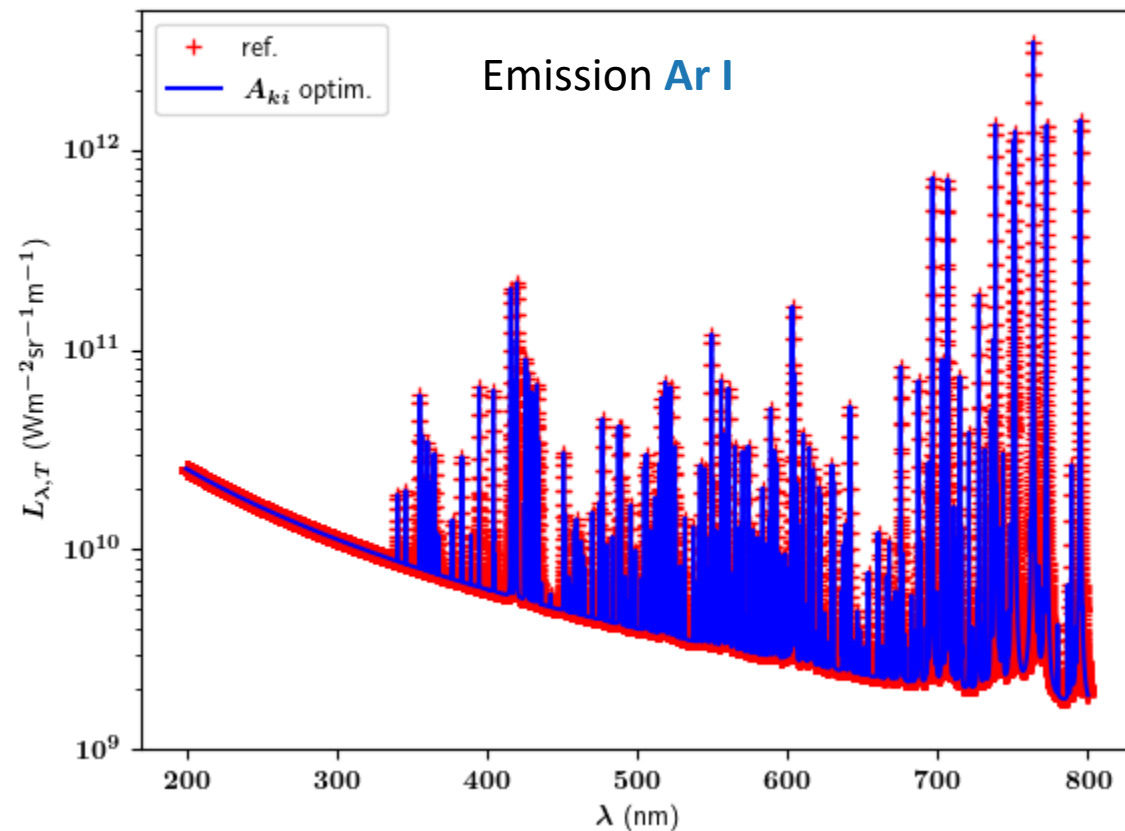
Ar I 454,47 nm : $\Delta\lambda_{1/2,L}^S = 1,28 \times 10^{-2} \text{ nm}$
 Ar I 455,43 nm : $\Delta\lambda_{1/2,L}^S = 1,28 \times 10^{-2} \text{ nm}$
 $10^{-4} \text{ nm} < \Delta\lambda_{1/2,L}^S < 5 \times 10^{-1} \text{ nm}$

Détermination des A_{ki} en connaissant les ω_{ki}

Référence : (Ar, Ar⁺, e⁻) sur [200; 800] nm avec $(n_e, L_p) = (10^{22} \text{ m}^{-3}, 5 \text{ mm})$ avec les données du NIST

Objectif : effectuer de l'optimisation raie par raie et comparer les sorties aux données du NIST

Faible n_e pour limiter le recouvrement spectral...

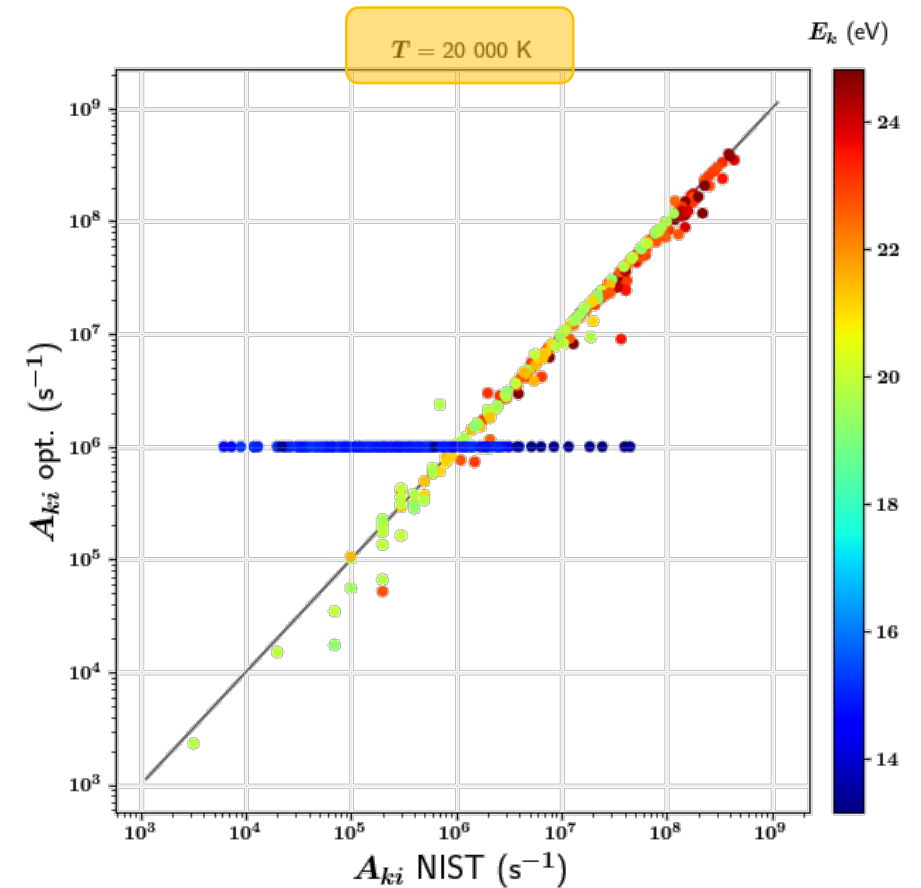
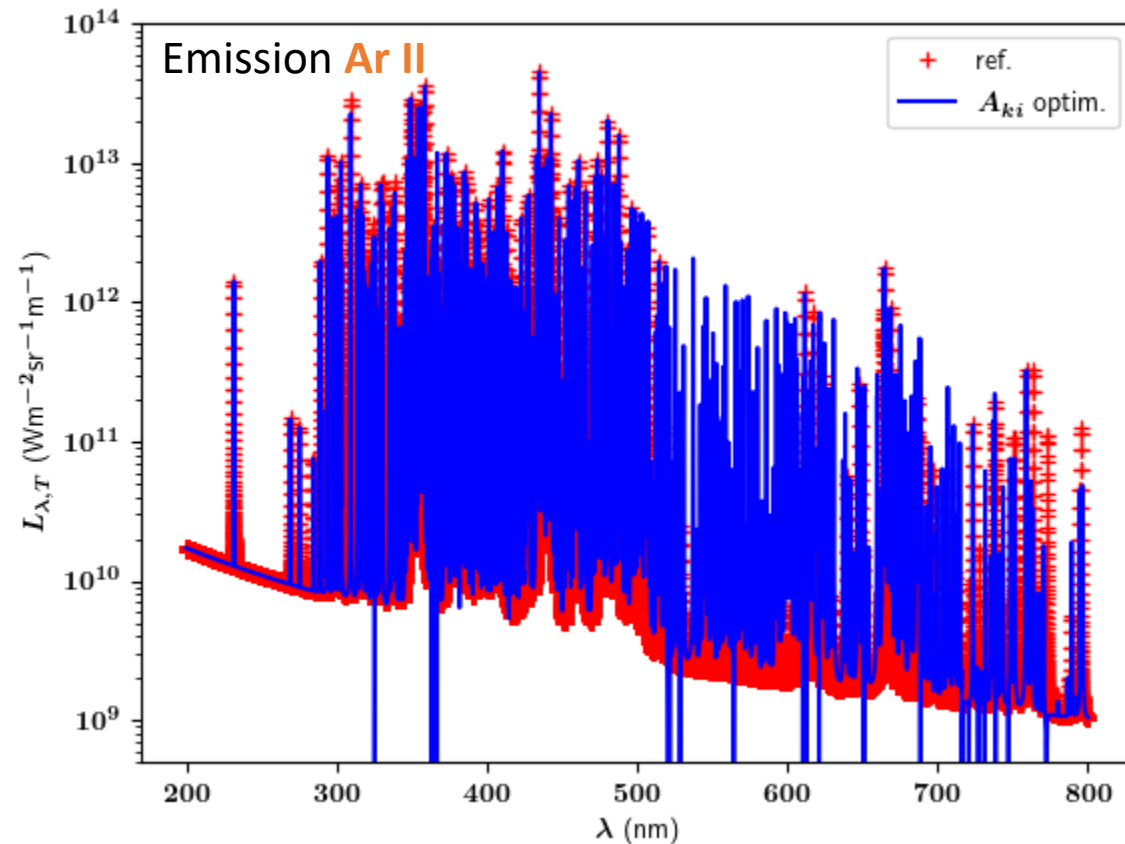


Détermination des A_{ki} en connaissant les ω_{ki}

Référence : (Ar, Ar⁺, e⁻) sur [200; 800] nm avec $(n_e, L_p) = (10^{22} \text{ m}^{-3}, 5 \text{ mm})$ avec les données du NIST

Objectif : effectuer de l'optimisation raie par raie et comparer les sorties aux données du NIST

Faible n_e pour limiter le recouvrement spectral...



Détermination des ω_{ki} en connaissant les A_{ki}

Référence : (Ar, Ar⁺, e⁻) sur [400; 500] nm avec $(n_e, L_p) = (10^{23} \text{ m}^{-3}, 5 \text{ mm})$ avec les données du NIST

Objectif : effectuer de l'optimisation raie par raie et comparer les sorties aux données de Zeng (corr. polyn.)

n_e de manière à privilégier l'élargissement Stark...

