

Réseaux de neurones profonds pour l'analyse de données de diffraction des rayons X: principes et applications

A. Boulle¹

¹Institut de Recherche sur les Céramiques, CNRS UMR 7315, Limoges, France

*Corresponding author: alexandre.boulle@cnrs.fr

Les avancées technologiques constantes, dont bénéficient les instruments de mesure de diffraction des rayons X (DRX), ouvrent de nouvelles perspectives fascinantes pour l'analyse *in situ* ou *operando* de processus dynamiques dans les matériaux (transitions de phases, endommagement, etc.) sous l'action de stimuli externes (température, champs électriques, contraintes mécaniques, etc.). Ces avancées concernent tout particulièrement les sources de rayonnement synchrotron mais également, dans une bien moindre mesure, les instruments de laboratoire. Ce type de mesure entraîne cependant une explosion de la quantité de données, de l'ordre de plusieurs To par expérience, rendant inopérantes les approches usuelles de traitement de données. C'est dans ce contexte que les algorithmes d'apprentissage automatique (« Machine Learning »), et notamment ceux basés sur des réseaux de neurones profonds (« Deep Learning »), s'avèrent particulièrement intéressants.

Après avoir rappelé les fondements sur lesquels se basent les algorithmes d'apprentissage profond et leur application au traitement de données scientifiques, je présenterai deux cas d'étude :

- la détermination des profils de déformation dans des monocristaux irradiés, présentant une zone endommagée et déformée de quelques dizaines de nanomètres sous la surface [1],
- la détermination des caractéristiques nanostructurales (taille de cristallite et microdéformations) d'une phase (MgAl_2O_4) en cours de formation par réaction entre MgO et Al_2O_3 , lors d'une mesure *in situ* à 1200°C [2].

Les architectures des réseaux de neurones et leur condition d'entraînement seront présentées, et leurs performances théoriques seront discutées en détail.

[1] A. Boulle, A. Debelle, “Convolutional neural network analysis of x-ray diffraction data: strain profile retrieval in ion beam modified materials”, *Machine Learning: Sci. Tech.* **4**, 015002 (2023).

[2] A. Souesme, R. Guinebretière, O. Castelnau, A. Boulle, “Neural network determination of crystallite size and microstrain from X-ray powder diffraction data”, *J. Appl. Cryst.*, *submitted*.

