

Algorithmes d'apprentissage profond pour le traitement haut débit de données de diffraction des rayons X

Alexandre BOULLE

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

Lundi 18 mai 2026 – 14h00
Amphithéâtre SOLEIL

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, bien que dans une moindre mesure, les instruments de laboratoire. Ce type d'expériences entraîne 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 quelques cas d'études :

- le développement pas-à-pas de l'architecture d'un réseau de neurones, l'optimisation des hyperparamètres, le rôle de la qualité des données et la stratégie d'apprentissage ;
- l'application de ce réseau de neurones à 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 (fraction de phase, taille de cristallites 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].

Références

[1] A. Boule, 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). <https://doi.org/10.1088/2632-2153/acab4c>

[2] A. Souesme, R. Guinebretière, O. Castelnaud, A. Boule, "High-throughput determination of crystallite size and microstrain from X-ray diffraction data with deep neural networks", Machine Learning: Sci. Tech. 7, 025054 (2026). <https://doi.org/10.1088/2632-2153/ae55f9>



Pause café

Formalités d'entrée : accès libre dans l'amphi du pavillon d'Accueil.

Si la manifestation a lieu dans le Grand Amphi SOLEIL du Bâtiment Central merci de vous munir d'une pièce d'identité (à échanger à l'accueil contre un badge d'accès).

SYNCHROTRON SOLEIL
Route départementale 128 - 91190 SAINT AUBIN
<https://www.synchrotron-soleil.fr/fr/evenements>
CONTACT : sandrine.vasseur@synchrotron-soleil.fr

SEMINAIRE