

Verre & Optique, Ecole Thématique USTV, 5-10 Oct. 2025

Prédiction des propriétés des verres d'oxydes par des techniques d'apprentissage profond.
IAbbe ou l'IA appliquée aux propriétés optiques

Franck Pigeonneau
Mines-Paris PSL Univ. - CEMEF, Sophia Antipolis



Sommaire

1. Intelligence Artificielle
2. Bases de données
3. Modèle de réseau de neurones
4. Prédiction des propriétés optiques
 - 4.1 Indice de réfraction n_d
 - 4.2 Indice de réfraction n_F
 - 4.3 Indice de réfraction n_C
 - 4.4 Nombre d'Abbe
5. Prédiction de composition
 - 5.1 Algorithme génétique
 - 5.2 « Nouvelles » compositions
6. Synthèse

1. Intelligence Artificielle

- ▶ McCulloch et Pitts¹ développent le premier réseau de neurones artificiel.
- ▶ A. Turing² propose un test pour vérifier si une machine « pense ».
- ▶ Conférence de Dartmouth (1956), J. McCarthy parle pour la première fois d'« intelligence artificielle ».
- ▶ F. Rosenblatt³ introduit le **perceptron**, le neurone artificiel.
- ▶ Après plusieurs « hivers », l'IA a pris un essor important depuis les années 2000 grâce aux capacités de calcul (CPU, GPU).
- ▶ En 2017, Vaswani *et al.*⁴ ont introduit le **transformeur** utilisé en IA générative.

1. W. S. McCulloch/W. Pitts : A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity, in : *The Bulletin of Mathematical Biophysics* 5.4 (1943), p. 115-133.

2. A. M. Turing : Computing machinery and intelligence, in : *Mind* LIX.236 (1950), p. 433-460.

3. F. Rosenblatt : The perceptron : A probabilistic model for information storage and organization in the brain. In : *Psychol. Rev.* 65.6 (1958), p. 386-408.

4. A. Vaswani et al. : Attention is All you Need, in : I. Guyon et al. (éd.) : *Advances in Neural Information Processing Systems*, t. 30, 2017, url : https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2017/file/3f5ee243547dee91fbd053c1c4a845aa-Paper.pdf.

1. Intelligence Artificielle

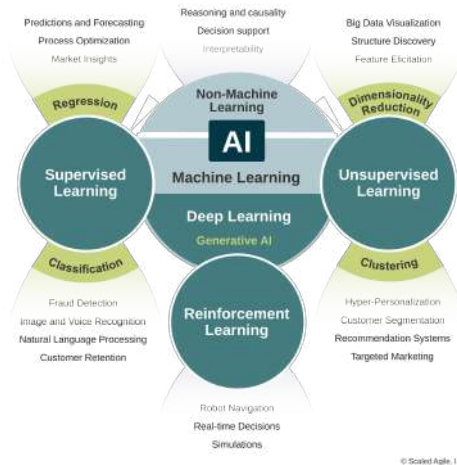
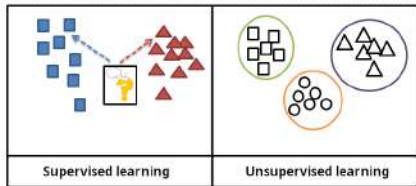


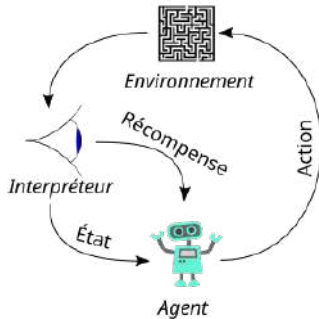
Figure 1 – Les différents types d'intelligence artificielle.

1. Intelligence Artificielle



- ▶ Apprentissage **supervisé** :
 - ▶ Données labellisées (étiquetées) ;
 - ▶ Optimisation sur une fonction coût ;
 - ▶ Régression, classification, détection d'objets, segmentation.
- ▶ Apprentissage **non supervisé** :
 - ▶ Appliquer sur des données non labellisées ;
 - ▶ Visualisation, débruitage, compression de données ;
 - ▶ Réduction de dimensions et partitionnement de données.

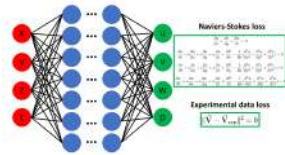
1. Intelligence Artificielle



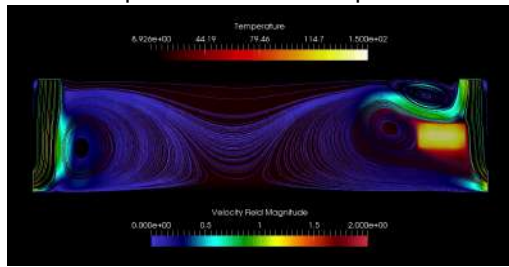
- ▶ Apprentissage par **renforcement** :
 - ▶ théorie des jeux, contrôle et optimisation
 - ▶ Google DeepMind⁵.

5. Y. Wang et al. : Discovery of Unstable Singularities, in : arXiv 2025, url : <https://arxiv.org/abs/2509.14185>.

1. Intelligence Artificielle



Optimisation thermique⁶



6. M. Renault et al. : Investigating gas furnace control practices with reinforcement learning, in : *Int. J. Heat Mass Transfer* 209 (2023), p. 124147.

1. Intelligence Artificielle

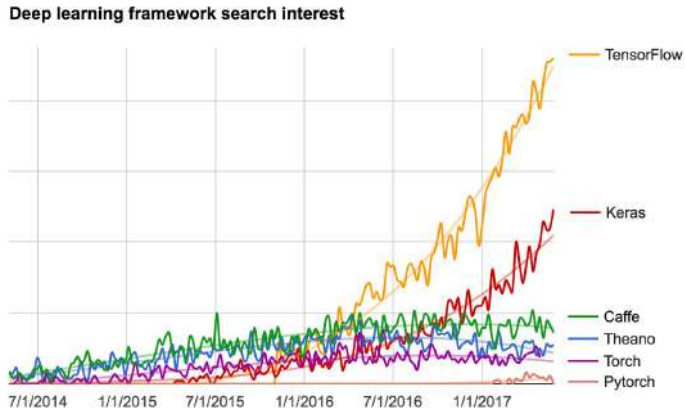


Figure 2 – Les plateformes de programmation IA sous python selon Chollet⁷.

7. F. Chollet : Deep Learning with Python, 2018.

1. Intelligence Artificielle

- ▶ Tandia *et al.*⁸ :

33. Machine Learning for Glass Modeling

Adama Tandia, Mehmet C. Onbasli, John C. Mauro

8. A. Tandia/M. C. Onbasli/J. C. Mauro : Machine Learning for Glass Modeling, in : Springer Handbook of Glass, 2019, chap. 33, p. 1155-1190.

1. Intelligence Artificielle

- Ravinder *et al.*⁹ :

Materials
Horizons



COMMUNICATION

View Article Online
View Journal



Deep learning aided rational design of oxide glasses†

Cite this: DOI: 10.1039/d0mh00162g

Received 31st January 2020,
Accepted 9th April 2020

R. Ravinder,^a Karthikeya H. Sridhara,^a Suresh Bishnoi,^a Hargun Singh Grover,^d
Mathieu Bauchy,^b Jayadeva,^c Hariprasad Kodamana*^d and
N. M. Anoop Krishnan

9. R. Ravinder *et al.* : Deep learning aided rational design of oxide glasses, in : *Mater. Horiz.* 7 (7 2020), p. 1819-1827.

1. Intelligence Artificielle



► Zaki *et al.*¹⁰ :

DOI: 10.1111/jace.18345

RESEARCH ARTICLE

Journal
The American Ceramic Society

Interpreting the optical properties of oxide glasses with machine learning and Shapely additive explanations

Mohd Zaki¹ | Vineeth Venugopal¹ | Ravinder Bhattoo¹ | Suresh Bishnoi¹ |
Sourabh Kumar Singh¹ | Amarnath R. Allu²  | Jayadeva³ |
N. M. Anoop Krishnan^{1,4} 

10. M. Zaki *et al.* : Interpreting the optical properties of oxide glasses with machine learning and Shapely additive explanations, in : J. Am. Ceram. Soc. 105.6 (2022), p. 4046-4057.

1. Intelligence Artificielle

- ▶ Pour ce cours, uniquement l'apprentissage supervisé est abordé :
 - ▶ Bases de données :



- ▶ Apprentissage profond : utilisation de réseaux de neurones.

1. Intelligence Artificielle

- ▶ Tous les développements numériques sont réalisés sous python :

`https://github.com/franck-pigeonneau/glassoptics`

- ▶ Pour cloner : `git clone https://github.com/franck-pigeonneau/glassoptics`.
- ▶ Pour python : Utiliser de préférence un environnement virtuel.
- ▶ Deux classes ont été créées :
 - ▶ `GlassData` : Gestion des bases de données ;
 - ▶ `NeuralNetwork` : Définition et optimisation des modèles de réseaux de neurones.
- ▶ Des bases de données issues d'Intergrad V8 sont sauvegardées.
- ▶ Des scripts python sont donnés pour :
 - ▶ nettoyer une base de données provenant d'Intergrad V8 ;
 - ▶ entraîner un réseau de neurones sur une propriétés à choisir ;
 - ▶ prédire des propriétés à partir de compositions de verre.

2. Bases de données

- ▶ Les oxydes sont classés¹¹ :
 - i) **Formateurs de réseaux** : SiO_2 , B_2O_3 , P_2O_5 , GeO_2 et V_2O_5 ;
 - ii) **Modificateurs de réseaux** : Na_2O , K_2O , Li_2O , CaO , MgO , SrO , BaO , Fe_2O_3 , Y_2O_3 , La_2O_3 , ... ;
 - iii) **Compensateurs de charges** : Al_2O_3 , TiO_2 , ZrO_2 , ZnO , PbO ,
- ▶ D'après le principe d'additivité¹², pour une propriété générique p :

$$p = \sum_{i=1}^N P_i x_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N P_{ij} x_i x_j, \quad (1)$$

- ▶ Approche développée par Fluegel *et al.*¹³ et utiliser dans Interglad V8.
- ▶ Vérifier dans une région restreinte de compositions et autour de familles de verres.
- ▶ L'utilisation des modèles par apprentissage profond (Deep Learning) accroît le domaine d'application.

11. H. Scholze : Glass. Nature, Structures and Properties, Berlin 1990.

12. A. K. Varshneya/J. C. Mauro : Fundamentals of Inorganic Glasses, Third, 2019.

13. A. Fluegel *et al.* : Density and thermal expansion calculation of silicate glass melts from 1000°C to 1400°C, in : Phys. Chem. Glasses : Eur. J. Glass Sci. Technol. B 49.5 (2008), p. 245-257.

2. Bases de données

- ▶ Création d'un fichier csv depuis InterGlad V8 pour une propriété donnée ;
- ▶ Script python utilisant le module pandas pour :
 - ▶ Suppression des lignes d'entête ;
 - ▶ Transformation des chaînes de caractères alphanumériques en nombres ;
 - ▶ Suppression des doublons ;
 - ▶ Vérification que la composition des verres est définie à 100 % à un fraction près (`xtotal`) ;
 - ▶ Mise à zéro des fractions molaires trop faibles, `xminor` ;
 - ▶ Suppression des oxydes sous-représentés, `minoxidefraction` ;
 - ▶ Suppression des valeurs extrêmes par le calcul de la fonction de densité de probabilité, `probamin` et `probamax`.
- ▶ Création d'un fichier csv donnant la composition en fraction molaire (x) et la valeur de la propriété (y) prêt à l'usage pour l'entraînement d'un réseau de neurones.
- ▶ Cf. jupyter notebook.

3. Modèle de réseau de neurones

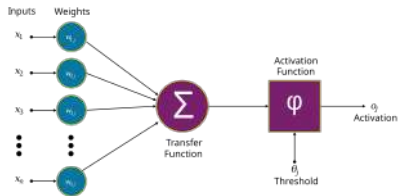


Figure 3 – Perceptron selon Rosenblatt ¹⁴.

Definition 1

Le **perceptron** est défini par la fonction de transfert :

$$y = \varphi(\omega_{10} + \sum_{i=1}^n \omega_{1i} x_i), \tag{2}$$

avec ω_{10} , le biais et ω_{1i} les poids et φ **fonction d'activation**.

14. Rosenblatt : The perceptron : A probabilistic model for information storage and organization in the brain. (cf. note 3).

3. Modèle de réseau de neurones

- ▶ Pourquoi une fonction d'activation ?
 - ▶ Sans fonction d'activation, seule la transformation linéaire est possible.
 - ▶ Pour enrichir les relations entre les arguments et la solution, des fonctions non-linéaires sont nécessaires.

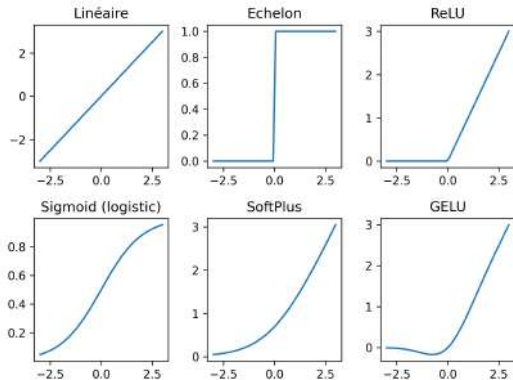


Figure 4 – Fonctions d'activation couramment utilisées.

3. Modèle de réseau de neurones

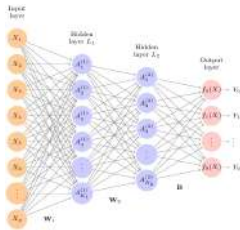


Figure 5 – Réseaux de neurones artificiels¹⁵.

- ▶ **Couche d'entrée** : « input » ou « feature » ;
- ▶ **Couches cachées** avec chacune leur nombre de neurones ;
- ▶ **Fonction objectif** : détermination la meilleure solution au problème d'optimisation ;
- ▶ **Optimiseur** : algorithme de descente de gradient (taux de descente) ;
- ▶ **Hyperparamètres** : Nombre de couches, de neurones, du taux de descente, \dots .

15. G. James et al. : An Introduction to Statistical Learning, With Applications in Python, 2023.

3. Modèle de réseau de neurones

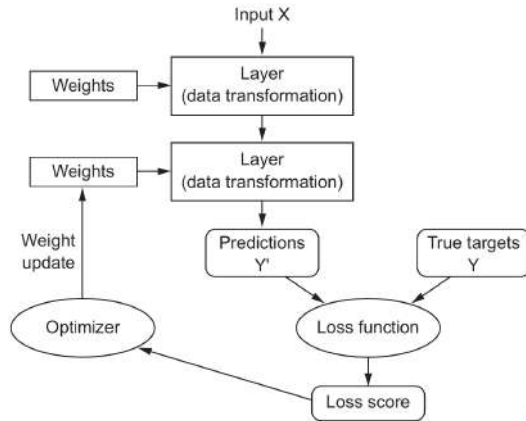


Figure 6 – Vue générale de l’optimisation d’un modèle de réseaux de neurones¹⁶.

16. Chollet : Deep Learning with Python (cf. note 7).

3. Modèle de réseau de neurones

- ▶ Nos entrées sont les fractions molaires x_i .
- ▶ Les propriétés sont systématiquement normalisées :

$$\bar{y} = \frac{y - \langle y \rangle}{\sigma(y)}. \quad (3)$$

- ▶ Chaque neurone a sa fonction définie par

$$h_i^{(k)}(\mathbf{x}) = g^{(k)} \left(\omega_{i0}^{(k)} + \sum_{j=1}^{N^{(k-1)}} \omega_{ij}^{(k)} h_j^{(k-1)} \right), \text{ pour } i \in [1, N^{(k)}], \quad (4)$$

- ▶ $g^{(k)}$ est la fonction d'activation de la couche cachée k .
- ▶ Pour la couche de sortie, une fonction linéaire est utilisée :

$$\bar{y}_j^{\text{ANN}}(\mathbf{x}) = \beta_0 + \sum_{j=1}^{N^{(K)}} \beta_j h_j^{(K)}. \quad (5)$$

3. Modèle de réseau de neurones

- ▶ L'ensemble des données est décomposé en 3 sous-ensembles : entraînement, validation et test.
- ▶ L'entraînement consiste à déterminer $\omega_{ij}^{(k)}$ and β_j par une méthode de descente de gradient (algorithme d'Adam).
- ▶ La fonction coût est :

$$MSE(\bar{y}) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M (\bar{y}_j - \bar{y}_j^{\text{ANN}})^2, \quad (6)$$

- ▶ L'évaluation de la précision est faite par le calcul de

$$R^2(\bar{y}) = 1 - \frac{\sum_{j=1}^M (\bar{y}_j - \bar{y}_j^{\text{ANN}})^2}{\sum_{j=1}^M \bar{y}_j^2}. \quad (7)$$

3. Modèle de réseau de neurones

- ▶ Exemple d'un réseau de neurones apprenant la fonction $\sin(x)$ pour $x \in [0, 2\pi]$.
- ▶ Développement fait sur python avec tensorflow et keras.
- ▶ L'entrée est juste x .
- ▶ cf. jupyter-notebook `firstann.ipynb`

4. Prédictions des propriétés optiques

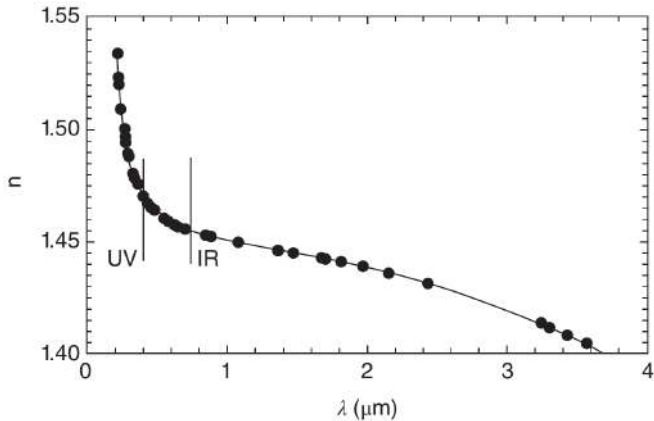


Figure 7 – Indice de réfraction d'un verre de SiO_2 selon¹⁷.

17. A. Clare : Optical Glasses, in : Encyclopedia of Glass Science, Technology, History, and Culture, 2021, chap. 6.1, p. 665-675.

4. Prédiction des propriétés optiques

La dispersion lumineuse se caractérise par la constringence ou nombre d'Abbe¹⁸ :

$$V = \frac{n_d - 1}{n_F - n_C}, \quad (8)$$

avec

- ▶ n_d : Indice de la raie jaune, $\lambda_d=587,56$ nm ;
- ▶ n_F : Indice de la raie bleue, $\lambda_F=486,13$ nm ;
- ▶ n_C : Indice de la raie rouge, $\lambda_C=656,27$ nm ;

18. J. Barton/C. Guillemet : Le Verre, Science et Technologie, Paris 2005.

4. Prédictions des propriétés optiques

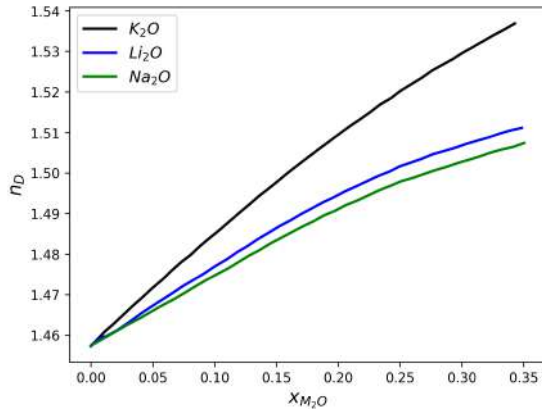


Figure 8 – n_d vs. x_{M_2O} dans 3 systèmes binaires SiO_2-M_2O selon Scholze¹⁹.

19. Scholze : Glass. Nature, Structures and Properties (cf. note 11).

4. Prédictions des propriétés optiques

- ▶ Huggins & Sun²⁰ ont proposé un modèle pour calculer la masse volumique et les indices optiques de verres composés de N oxides $M_{m_i}O_{n_i}$ avec $i \in [1, \dots, N]$:

$$\rho^{-1} = \sum_{i=1}^N [(k + b_{Si})n_i + m_i c_i] \frac{y_i}{\mathcal{M}_{M_{m_i}O_{n_i}}}, \quad (9)$$

$$n_d = 1 + \rho \sum_{i=1}^N r_{i,D} y_i. \quad (10)$$

- ▶ Difficile à appliquer de façon générale à une large gamme de verres.
- ▶ Par contre, ce modèle donne une forme générale à utiliser dans les modèles d'apprentissage automatique²¹ :

$$\mathcal{V} = \sum_{i=1}^N [(k + b_{Si})n_i + m_i c_i] x_i. \quad (11)$$

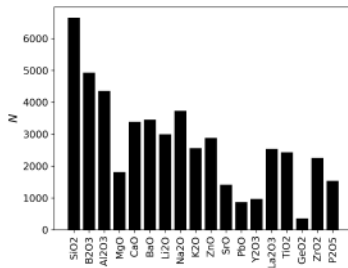
20. M. L. Huggins/K.-H. Sun : Calculation of density and optical constants of a glass from its composition in weight percentage, in : J. Am. Ceram. Soc. 26.1 (1943), p. 4-11.

21. F. Pigeonneau et al. : Physical-informed deep learning prediction of solid and fluid mechanical properties of oxide glasses, in : J. Non-Cryst. Solids 657 (2025), p. 123476.

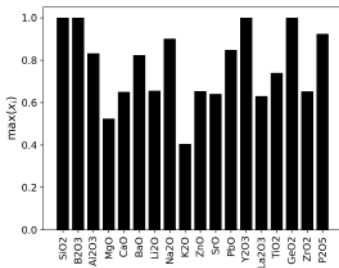
4. Prédictions des propriétés optiques

4.1 Indice de réfraction n_d

(a) Occurrences de chaque oxyde



(b) $\max(x_i)$



(c) PDF

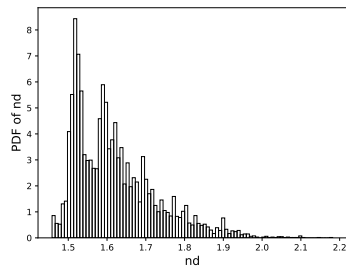


Figure 9 – Data-set sur n_d composé de 8364 verres pour 18 oxydes.

4. Prédictions des propriétés optiques

4.1 Indice de réfraction n_d

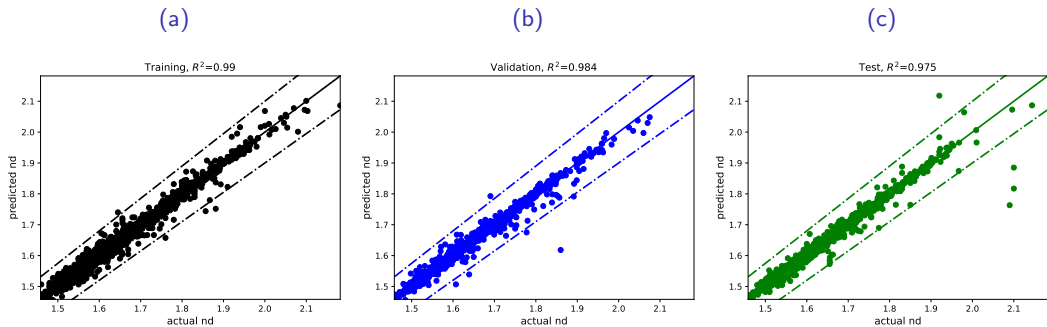


Figure 10 – Prédiction vs. data-set de n_d .

4. Prédictions des propriétés optiques

4.1 Indice de réfraction n_d

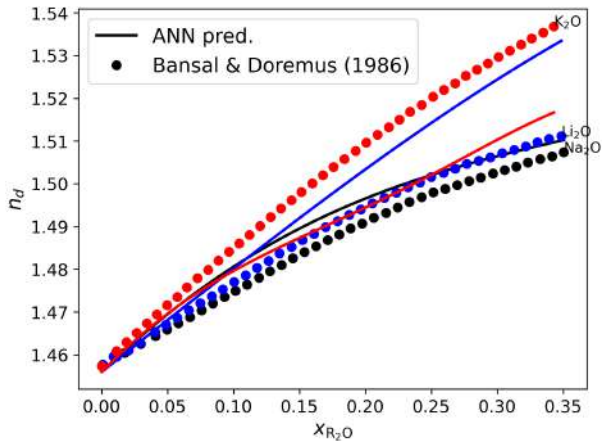


Figure 11 – n_d vs X_{R_2O} .

4. Prédictions des propriétés optiques

4.1 Indice de réfraction n_d

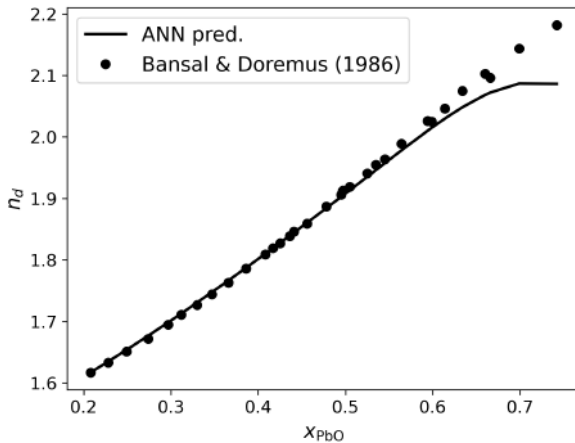


Figure 12 – n_d VS X_{PbO} .

4. Prédictions des propriétés optiques

4.1 Indice de réfraction n_d

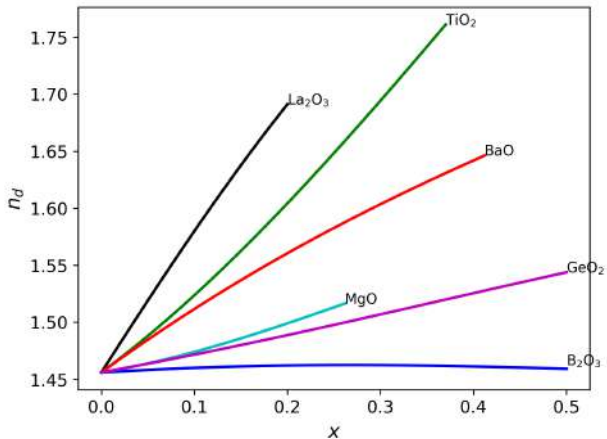
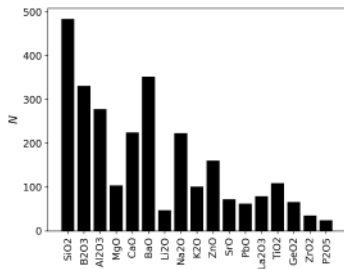


Figure 13 – n_d vs $x_{\text{R}_m\text{O}_n}$.

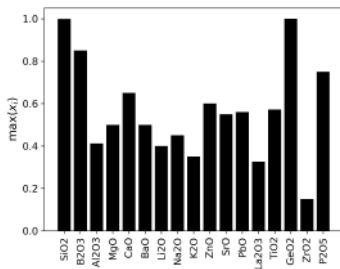
4. Prédictions des propriétés optiques

4.2 Indice de réfraction n_F

(a) Occurrences de chaque oxyde



(b) $\max(x_i)$



(c) PDF

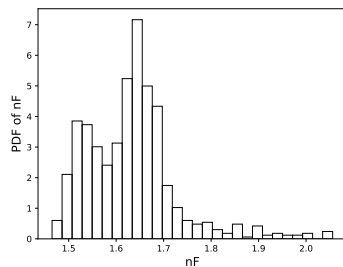


Figure 14 – Data-set sur n_F composé de 787 verres pour 17 oxydes.

4. Prédications des propriétés optiques

4.2 Indice de réfraction n_F

- ▶ Pour les ensembles à faibles données :
 - ▶ Ajout artificiel de données ;
 - ▶ Algorithme de décomposition des sous-ensembles d'entraînement et de validation (K-fold).

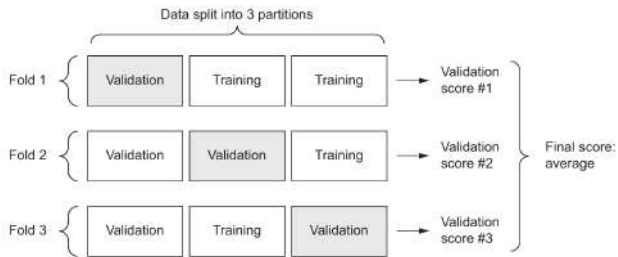


Figure 15 – Principe de l'algorithme K-fold²².

22. Chollet : Deep Learning with Python (cf. note 7).

4. Prédiction des propriétés optiques

4.2 Indice de réfraction n_F

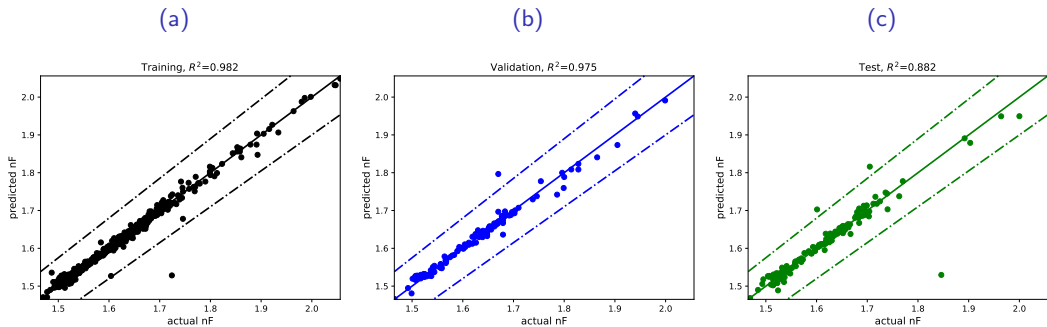
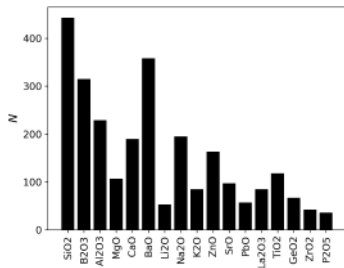


Figure 16 – Prédiction vs. data-set de n_F .

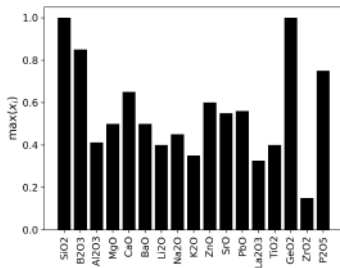
4. Prédictions des propriétés optiques

4.3 Indice de réfraction n_C

(a) Occurrences de chaque oxyde



(b) $\max(x_i)$



(c) PDF

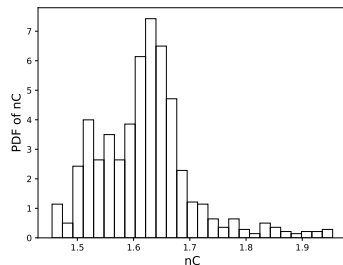


Figure 17 – Data-set sur n_C composé de 758 verres pour 17 oxydes.

4. Prédictions des propriétés optiques

4.3 Indice de réfraction n_C

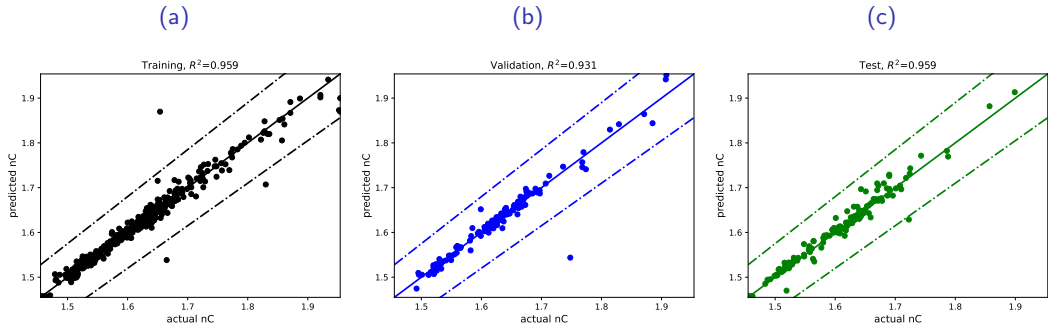
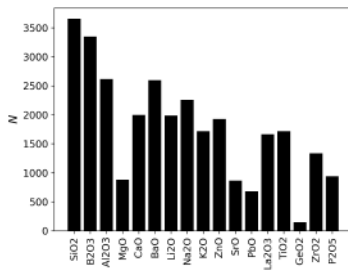


Figure 18 – Prédiction vs. data-set de n_C .

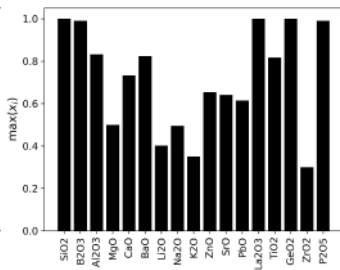
4. Prédications des propriétés optiques

4.4 Nombre d'Abbe

(a) Occurrences de chaque oxyde



(b) $\max(x_i)$



(c) PDF

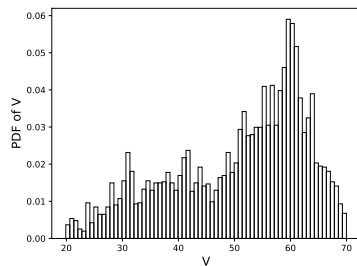


Figure 19 – Data-set sur V composé de 4950 verres pour 17 oxydes.

4. Prédictions des propriétés optiques

4.4 Nombre d'Abbe

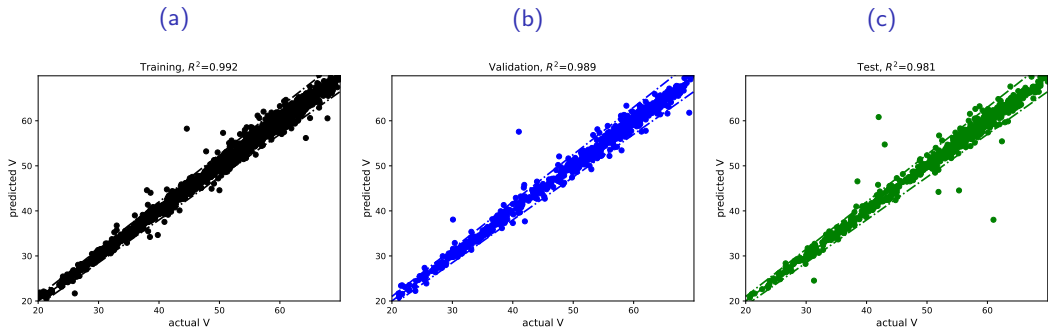


Figure 20 – Prédiction vs. data-set de V .

4. Prédictions des propriétés optiques

4.4 Nombre d'Abbe

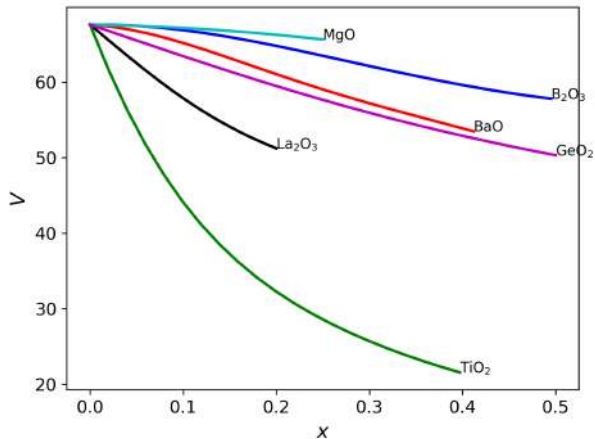


Figure 21 – V vs $x_{R_m O_n}$.

5. Prédictions de composition

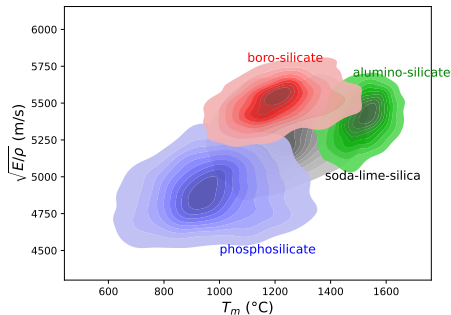


Figure 22 – $\sqrt{E/\rho}$ (m s^{-1}) vs. T_m ($^{\circ}\text{C}$) pour 4 familles de verre : noir : silico-sodo-calciq'ue, rouge : boro-silicate, vert : alumino-silicate & bleu : phospho-silicate.

**Recherche de compositions ayant des propriétés ciblées ➔
algorithme génétique**

5. Prédictions de composition

5.1 Algorithme génétique

- ▶ Critères sur les propriétés physiques :

$$1000 < T_m < 1300 \text{ °C}, \quad (12)$$

$$2300 < \rho < 2800 \text{ kg/m}^3, \quad (13)$$

$$400 < T_g < 600 \text{ °C}, \quad (14)$$

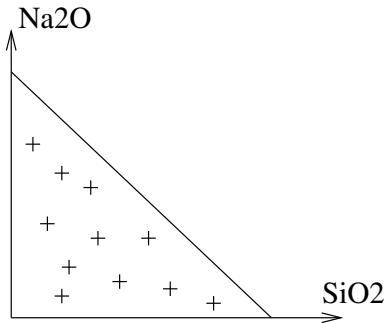
$$70 < E < 90 \text{ GPa}. \quad (15)$$

- ▶ Calcul d'une fonction de forme $F \in]0, 1[$.
- ▶ Contraintes sur les compositions liées à l'étendue des ensembles de données ➡ Éviter les extrapolations.

5. Prédications de composition

5.1 Algorithme génétique

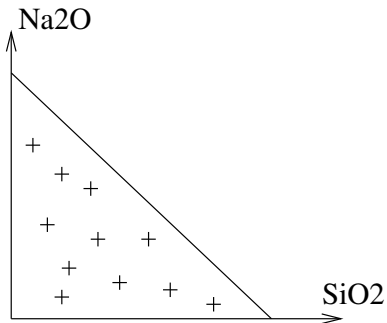
1. Tirage aléatoire des compositions



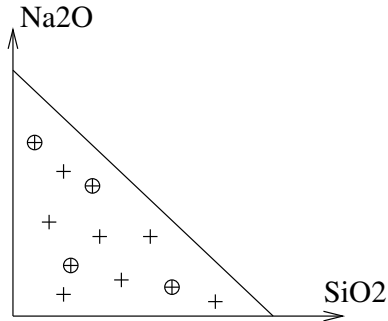
5. Prédications de composition

5.1 Algorithme génétique

1. Tirage aléatoire des compositions



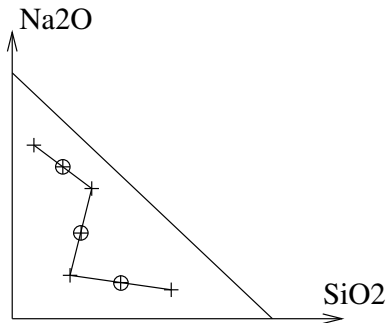
2. Sélection des élites à l'aide de F



5. Prédications de composition

5.1 Algorithme génétique

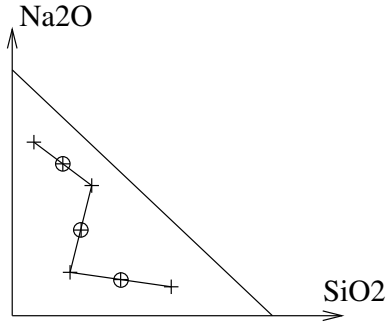
3. Fusions élités (enfants)



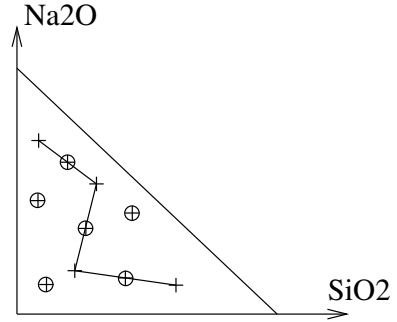
5. Prédications de composition

5.1 Algorithme génétique

3. Fusions élités (enfants)



4. Ajout de nouvelles compositions



5. Prédications de composition

5.1 Algorithme génétique

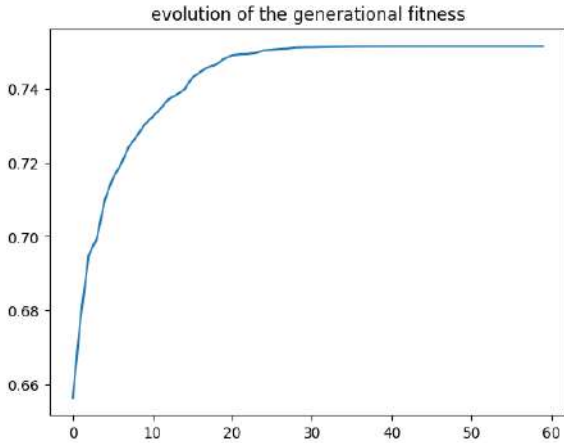


Figure 23 – F vs. nombre de génération.

5. Prédictions de composition

5.2 « Nouvelles » compositions

Table 1 – Compositions de verres à bas T_m (mol %).

Verre	SiO ₂	Al ₂ O ₃	MgO	CaO	Na ₂ O	K ₂ O	ZnO	TiO ₂
0	65,4	0	0	11,3	23,3	0	0	0
1	53,4	2,13	2,75	3,51	18,7	0,48	9,44	9,59

Table 2 – ρ , T_g , T_m , E & H_v

Verre	ρ (kg/m ³)	T_g (°C)	T_m (°C)	E (GPa)	H_v (GPa)
Prédications					
0	2571,3	502,1	1257,86	73,58	-
1	2817,6	563,05	1154,76	81,18	-
Mesures					
0	2540	526	-	-	5,26
1	2730	574	-	-	7,55

6. Synthèse

- ▶ Modèles de réseaux de neurones artificiels ➔ Prédiction de propriétés :

$$y(\mathbf{x}) = f_{\text{ANN}}(\mathbf{x}). \quad (16)$$

- ▶ Détermination de compositions à l'aide de l'algorithme génétique :

$$\mathbf{x} = f_{\text{ANN}}^{-1}(y). \quad (17)$$

- ▶ Unicité des solutions non garantie.
- ▶ Vérification des propriétés par élaboration des verres :
 - ▶ Enrichissement des bases de données ;
 - ▶ Amélioration des modèles de prédiction.