

# Fonctions

**entrainement** (*Database, Type, Outputnet, nbentrainement, path*)

Permet d'entraîner le réseau de neurones pour un paramètre donné.

## **Paramètres**

- **database** - fichier qui contient les données expérimentales
- **type** - nom du paramètre que l'on souhaite entraîner (Young, Hardness, XRD ou EBSD)
- **Outputnet** - nom du fichier où l'on souhaite stocker les données d'entraînement
- **nbentrainement** - nombre de boucles par paquet de 5 folds.
- **path** - chemin pour accéder au dossier

## **Sortie**

2 fichiers : Un fichier .mat qui stocke les paramètres du réseau de neurones et un fichier .csv qui stocke la RMSE pour chaque test.

**RMSE\_trace** (*path, Young, Hardness, XRD, EBSD*)

Permet de tracer l'ensemble des RMSE obtenu pour chacun des réseaux de neurones sous forme d'histogramme. Cette fonction est utile lorsqu'un grand nombre d'entraînement est réalisé.

## **Paramètres**

- **Path** – chemin pour accéder au dossier
- **Young, Hardness, XRD, EBSD** – nom des réseaux de neurones pour l'ouverture des tableurs contenant les RMSE.

## **Sortie**

Affiche 4 histogrammes sur une seule figure

**Comparaison\_exp\_IA** (*Filename, path*)

Trace pour chacun des réseaux de neurones les valeurs prédites en fonction des valeurs expérimentales. Si les valeurs prédites sont correctes, le résultat devrait être une droite de coefficient 1.

## **Paramètres**

- **Filename** – contient le nom sous lequel les valeurs prédites vont être enregistré
- **Path** - chemin pour accéder au dossier

## **Sortie**

Affiche sur une figure les graphiques des valeurs prédites en fonction des valeurs expérimentales.

**prediction\_exp** (*Filename, File1, File2, File3, File4, path*)

Cette fonction permet de prédire les valeurs des paramètres pour les compositions utilisées expérimentalement. Cela sera utile par la prochaine fonction « comparaison\_exp\_IA ».

#### Paramètres

- **Filename** – contient le nom du fichier dans lequel les valeurs prédites vont être enregistré
- **File** – nom du fichier .mat qui contient les informations d'un réseau de neurones. 4 files car 4 réseaux de neurones différents.
- **Path** - chemin pour accéder au dossier

#### Sortie

Un fichier .csv qui contient les valeurs prédites pour les 4 grandeurs.

**connectionprediction** (*pourcentage, path*)

Cette fonction crée un fichier `matrice_connection{pourcentage}.csv` dans le dossier "matrix\_connection" contenant le nombre de voisins de chaque point et qui est utilisé pour réaliser la représentation de Delaunay lors de l'appel de la fonction **Representationpredictions**(*Filename,pourcentage,point\_size,path*).

Elle crée également un fichier `composition_prediction{pourcentage}.csv` dans le dossier "compo\_prediction" qui contient 5 colonnes correspondant aux pourcentages atomiques des 5 éléments. Les compositions varient en fonction du pourcentage choisi.

#### Paramètres

- **pourcentage** – pourcentage souhaité pour le calcul des valeurs prédites et pour les différentes représentations
- **Path** - chemin pour accéder au dossier

#### Sortie

Fichiers .csv : `matrice_connection{pourcentage}.csv` et `composition_prediction{pourcentage}.csv`

**prediction** (*Filename, pourcentage, File1, File2, File3, File4, path*)

Cette fonction permet de prédire les valeurs des paramètres pour les compositions correspondant au pourcentage choisi. Les prédictions sont enregistrés dans un fichier .csv

#### Paramètres

- **Filename** – contient le nom du fichier dans lequel les valeurs prédites vont être enregistré.

- **File 1**– nom du fichier .mat qui contient les informations du réseau de neurone utilisé pour la prédiction du module de dureté.
- **File 2**– nom du fichier .mat qui contient les informations du réseau de neurone utilisé pour la prédiction du module d'Young.
- **File 3**– nom du fichier .mat qui contient les informations du réseau de neurone utilisé pour la prédiction de la phase selon la méthode XRD.
- **File 4**– nom du fichier .mat qui contient les informations du réseau de neurone utilisé pour la prédiction de la phase selon la méthode EBSD.
- **Path** - chemin pour accéder au dossier.

#### Sortie

Un fichier .csv qui contient les valeurs prédites pour les 4 grandeurs.

#### **deltaH** (*Filename, path*)

Cette fonction permet de calculer l'indice de ductilité pour chaque composition à partir du modèle de Galanov.

#### Paramètres

- **Filename** – le nom du fichier contenant les valeurs du module d'Young et du module de dureté à partir desquels on souhaite calculer l'indice de ductilité.
- **Path** - chemin pour accéder au dossier.

#### Sortie

Ajoute une colonne au fichier .csv créé lors de l'appel de la fonction  
**prediction**

#### **OptimisationPareto**(*Filename, tolerance, path*)

Cette fonction permet de déterminer le front de Pareto d'une part pour les phases amorphes et d'autre part pour les phases cristallines. Elle crée un fichier finissant part \_opt.csv qui contient uniquement les compositions correspondant au front de Pareto ou alors à celles proches du front de Pareto selon la tolérance souhaitée. La fonction trie les points du plus grand module de dureté au plus petit et détermine la valeur maximale de l'indice de ductilité pour chaque module. Les compositions correspondant au front de Pareto (optimales) sont codées par des "1" et les compositions transitoires sont codées par des "0".

#### Paramètres

- **FilenameInput** – le nom du fichier contenant les compositions, le module de dureté et l'indice de ductilité à partir desquels on souhaite déterminer le front de Pareto et les points transitoires.
- **tolerance** - tolerance choisie pour déterminer les points transitoires.
- **Path** - chemin pour accéder au dossier.

#### Sortie

Crée un fichier {FilenameInput}\_opt.csv contenant les compositions optimales et transitoires.

#### **Representationprediction**(*Filename, pourcentage, point\_size, path*)

Affiche deux plots, l'un correspondant au module d'Young et l'autre module de dureté en fonction de la composition en utilisant la triangulation de Delaunay.

##### **Paramètres**

- **FilenameInput** – le nom du fichier contenant les compositions, le module de dureté et l'indice de ductilité à partir desquels on souhaite déterminer le front de Pareto et les points transitoires.
- **pourcentage** - pourcentage que l'on a utilisé pour écrire le fichier correspondant à FilenameInput
- **point\_size** - Taille des points que l'on souhaite utiliser.
- **Path** - chemin pour accéder au dossier.

##### **Sortie**

Plots du module d'Young et du module de dureté en fonction de la composition.

#### **Representationdonneesexp**(*Filename\_exp, path*)

Cette fonction prend en entrée le fichier contenant les valeurs expérimentales du module d'Young et de dureté et les trace en fonction de la composition

##### **Paramètres**

- **Filename** – le nom du fichier contenant les compositions, le module de dureté et l'indice de ductilité à partir desquels on souhaite déterminer le front de Pareto et les points transitoires.
- **Path** - chemin pour accéder au dossier.

##### **Sortie**

Plot des valeurs expérimentales du module d'Young et de la dureté en fonction de la composition.

#### **Representationphase**(*Filename, path*)

Cette fonction prend en entrée le fichier contenant les compositions et les prédictions, en particulier les prédictions du type de phase et trace le type de phase dans la représentation de Delaunay.

##### **Paramètres**

- **Filename** – le nom du fichier contenant les compositions, le module de dureté et l'indice de ductilité à partir desquels on souhaite déterminer le front de Pareto et les points transitoires.
- **Path** - chemin pour accéder au dossier.

##### **Sortie**

Plot du type de phase (amorphe ou cristalline) en fonction de la composition.

#### **Representationpareto**(*Filename, path*)

Cette fonction prend en entrée le fichier contenant les compositions, les prédictions et l'indice de ductilité afin de tracer le module de dureté en fonction de l'indice de ductilité. Pour tracer les compositions optimales et transitoires, la fonction retrouve le fichier \_opt.csv correspondant à Filename.

#### **Paramètres**

- **Filename** – le nom du fichier contenant les compositions, le module de dureté et l'indice de ductilité à partir desquels on souhaite déterminer le front de Pareto et les points transitoires.
- **Path** - chemin pour accéder au dossier.

#### **Sortie**

Plots du module de dureté en fonction de l'indice de ductilité pour les compositions normales, les compositions optimales (front de pareto) et les compositions transitoires pour les phases amorphes d'une part et cristalline d'autre part.