

## 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. Prédictions 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. Prédictions de composition
  - 5.1 Algorithme génétique
  - 5.2 « Nouvelles » compositions
6. Synthèse

# 1. Intelligence Artificielle

- ▶ McCulloch et Pitts<sup>1</sup> développent le premier réseau de neurones artificiel.
- ▶ A. Turing<sup>2</sup> propose un test pour vérifier si une machine « pense ».
- ▶ Conférence de Dartmouth (1956), J. McCarthy parle pour la première fois d'« intelligence artificielle ».
- ▶ F. Rosenblatt<sup>3</sup> 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.*<sup>4</sup> 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/3f5ee243547dee91fdbd053c1c4a845aa-Paper.pdf](https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2017/file/3f5ee243547dee91fdbd053c1c4a845aa-Paper.pdf).

# 1. Intelligence Artificielle

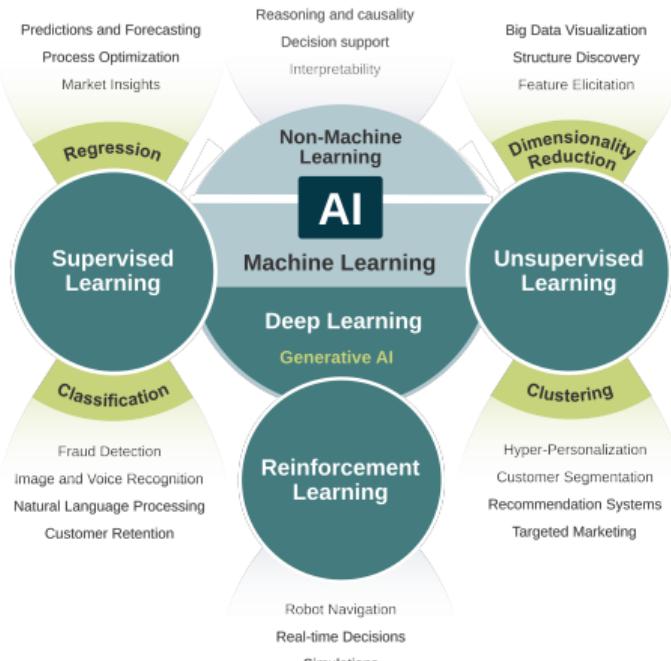
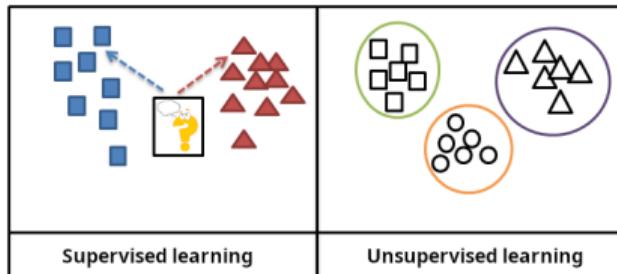


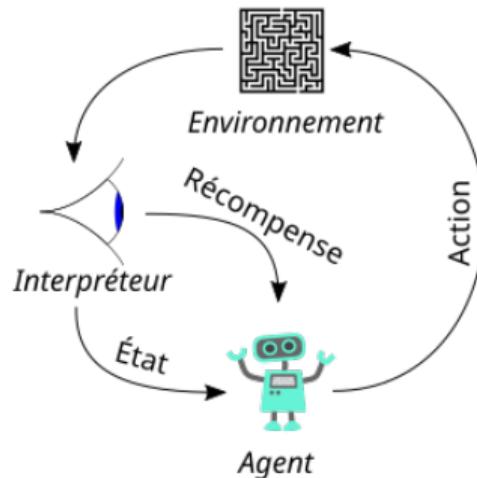
Figure 1 – Les différentes types d'intelligence artificielle.

# 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

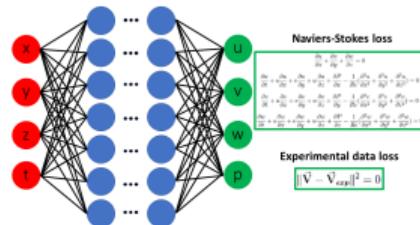


- ▶ Apprentissage par **renforcement** :
  - ▶ théorie des jeux, contrôle et optimisation
  - ▶ Google DeepMind<sup>5</sup>.

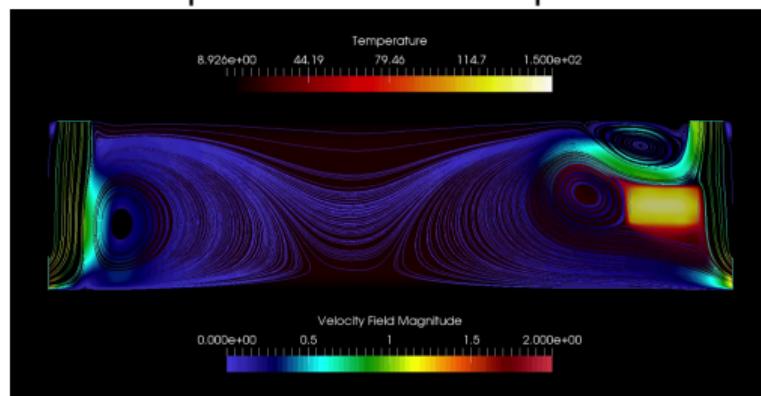
---

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

# 1. Intelligence Artificielle



Optimisation thermique<sup>6</sup>



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

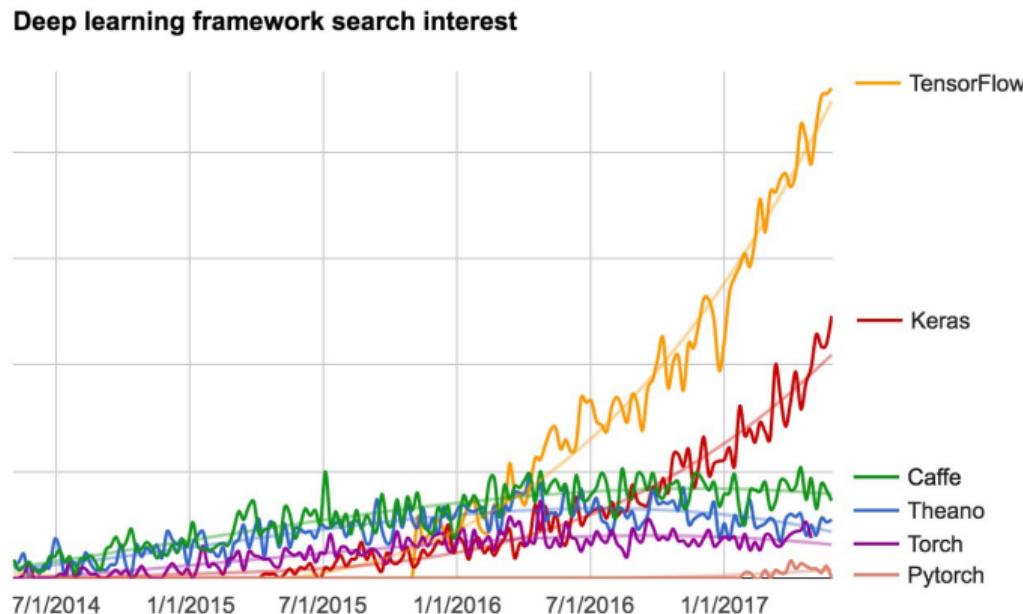


Figure 2 – Les plateformes de programmation IA sous python selon Chollet<sup>7</sup>.

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

# 1. Intelligence Artificielle

- ▶ Tandia *et al.*<sup>8</sup> :

## 33. Machine Learning for Glass Modeling Machine Le~~ar~~

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.*<sup>9</sup> :

Materials  
Horizons

COMMUNICATION



[View Article Online](#)

[View Journal](#)



[Check for updates](#)

Cite this: DOI: 10.1039/d0mh00162g

Received 31st January 2020,  
Accepted 9th April 2020

## Deep learning aided rational design of oxide glasses†

R. Ravinder,<sup>a</sup> Karthikeya H. Sridhara,<sup>a</sup> Suresh Bishnoi,<sup>a</sup> Hargun Singh Grover,<sup>a</sup> Mathieu Bauchy,<sup>b</sup> Jayadeva,<sup>c</sup> Hariprasad Kodamana<sup>\*d</sup> and N. M. Anoop Krishnan  <sup>ae</sup>

- 
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.<sup>10</sup> :

DOI: 10.1111/jace.18345

RESEARCH ARTICLE

Journal  
of American Ceramic Society

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

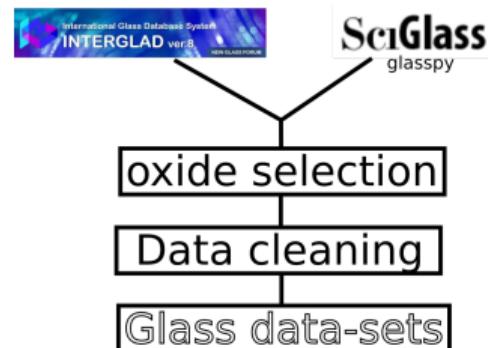
Mohd Zaki<sup>1</sup> | Vineeth Venugopal<sup>1</sup> | Ravinder Bhattoo<sup>1</sup> | Suresh Bishnoi<sup>1</sup> |  
Sourabh Kumar Singh<sup>1</sup> | Amarnath R. Allu<sup>2</sup>  | Jayadeva<sup>3</sup> |  
N. M. Anoop Krishnan<sup>1,4</sup> 

---

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'Interglad V8 sont sauvegardées.
- ▶ Des scripts python sont donnés pour :
  - ▶ nettoyer une base de données provenant d'Interglad 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 classés<sup>11</sup> :
  - i) **Formateurs de réseaux** : SiO<sub>2</sub>, B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, GeO<sub>2</sub> et V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>;
  - ii) **Modificateurs de réseaux** : Na<sub>2</sub>O, K<sub>2</sub>O, Li<sub>2</sub>O, CaO, MgO, SrO, BaO, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ... ;
  - iii) **Compensateurs de charges** : Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, ZnO, PbO, ... .
- ▶ D'après le principe d'additivité<sup>12</sup>, 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.*<sup>13</sup> 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

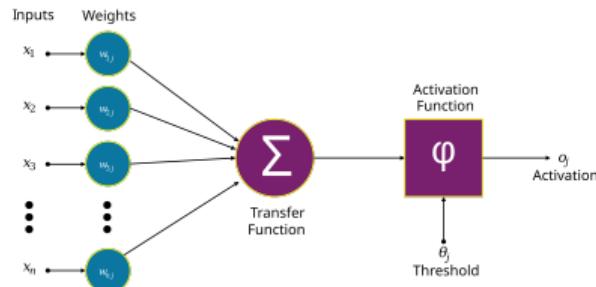


Figure 3 – Perceptron selon Rosenblatt<sup>14</sup>.

#### Definition 1

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

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

avec  $\omega_{10}$ , le biais et  $\omega_{1i}$  les poids et  $\varphi$  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.

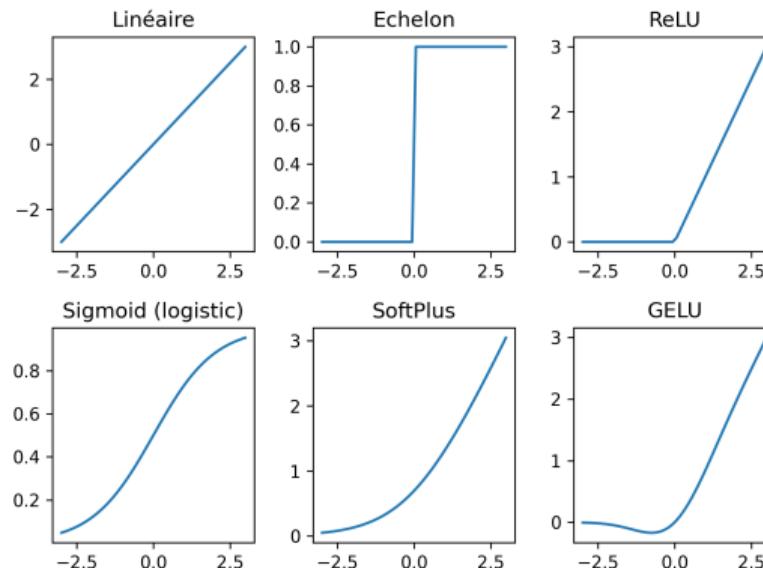


Figure 4 – Fonctions d'activation couramment utilisées.

### 3. Modèle de réseau de neurones

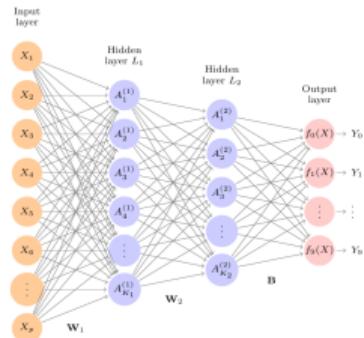


Figure 5 – Réseaux de neurones artificiels<sup>15</sup>.

- ▶ **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, . . . .

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

### 3. Modèle de réseau de neurones

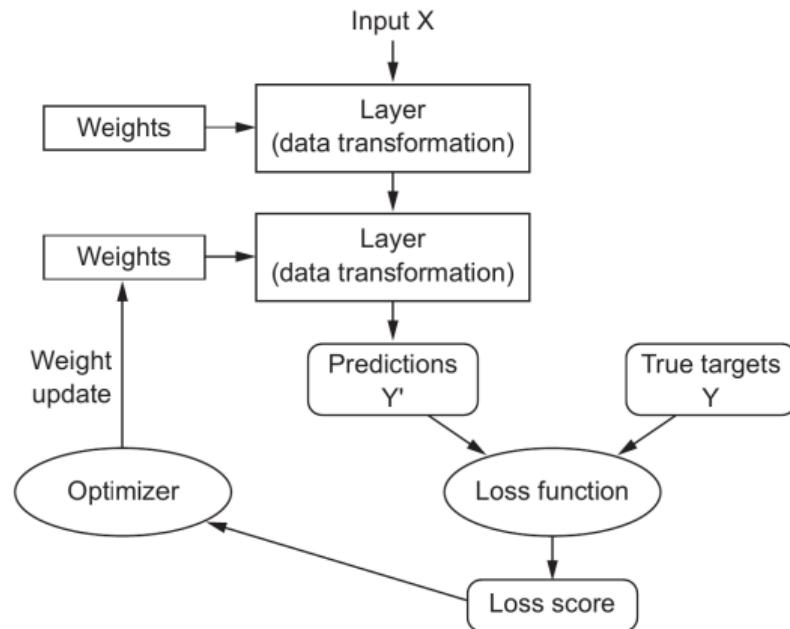


Figure 6 – Vue générale de l'optimisation d'un modèle de réseaux de neurones<sup>16</sup>.

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  $\beta_j$  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

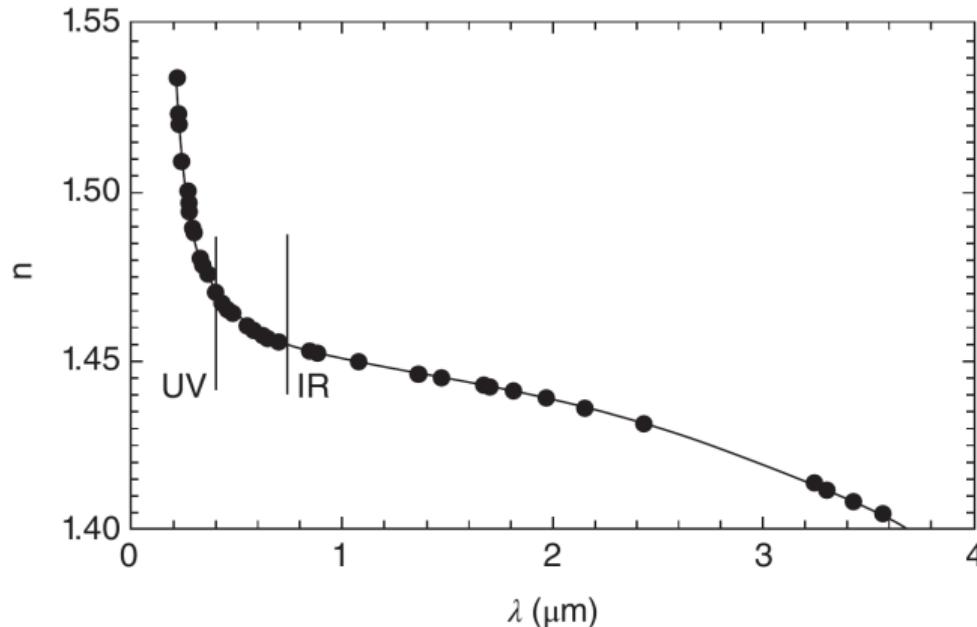


Figure 7 – Indice de réfraction d'un verre de  $\text{SiO}_2$  selon<sup>17</sup>.

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

## 4. Prédictions des propriétés optiques

La dispersion lumineuse se caractérise par la constringence ou nombre d'Abbe<sup>18</sup> :

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

avec

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

---

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

## 4. Prédictions des propriétés optiques

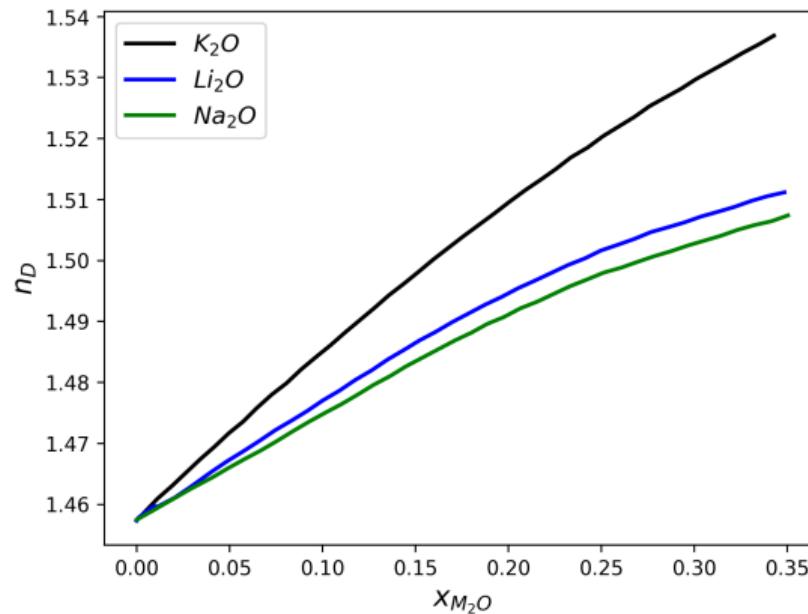


Figure 8 –  $n_d$  vs.  $x_{M_2O}$  dans 3 systèmes binaires  $SiO_2-M_2O$  selon Scholze<sup>19</sup>.

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

## 4. Prédictions des propriétés optiques

- ▶ Huggins & Sun<sup>20</sup> ont proposé un modèle pour calculer la masse volumique et les indices optiques de verres composés de  $N$  oxydes  $M_{m_i}O_{n_i}$  avec  $i \in [1, \dots, N]$  :

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

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

- ▶ 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 automatique<sup>21</sup> :

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

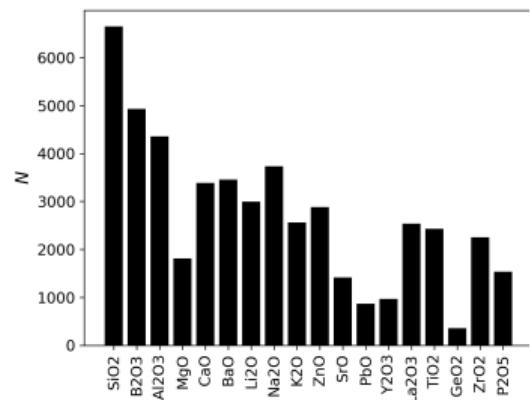
20. M. L. Huggins/K.-H. Sun : Calculation of density and optical constants of a glass from its composition in weight percentage, in : J. Am. Ceram. Soc. 26.1 (1943), p. 4-11.

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.

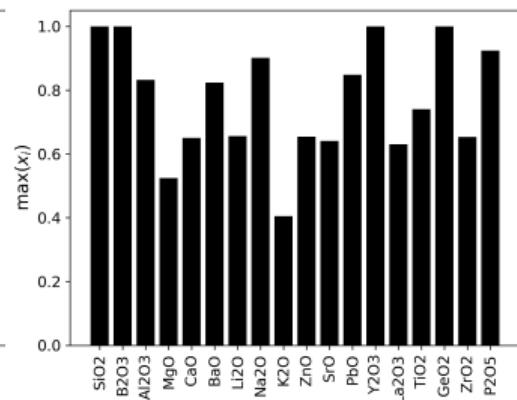
## 4. Prédictions des propriétés optiques

### 4.1 Indice de réfraction $n_d$

(a) Occurrences de chaque oxyde



(b)  $\max(x_i)$



(c) PDF

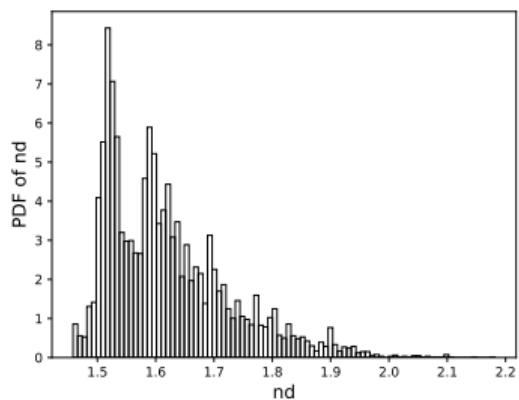


Figure 9 – Data-set sur  $n_d$  composé de 8364 verres pour 18 oxydes.

## 4. Prédictions des propriétés optiques

### 4.1 Indice de réfraction $n_d$

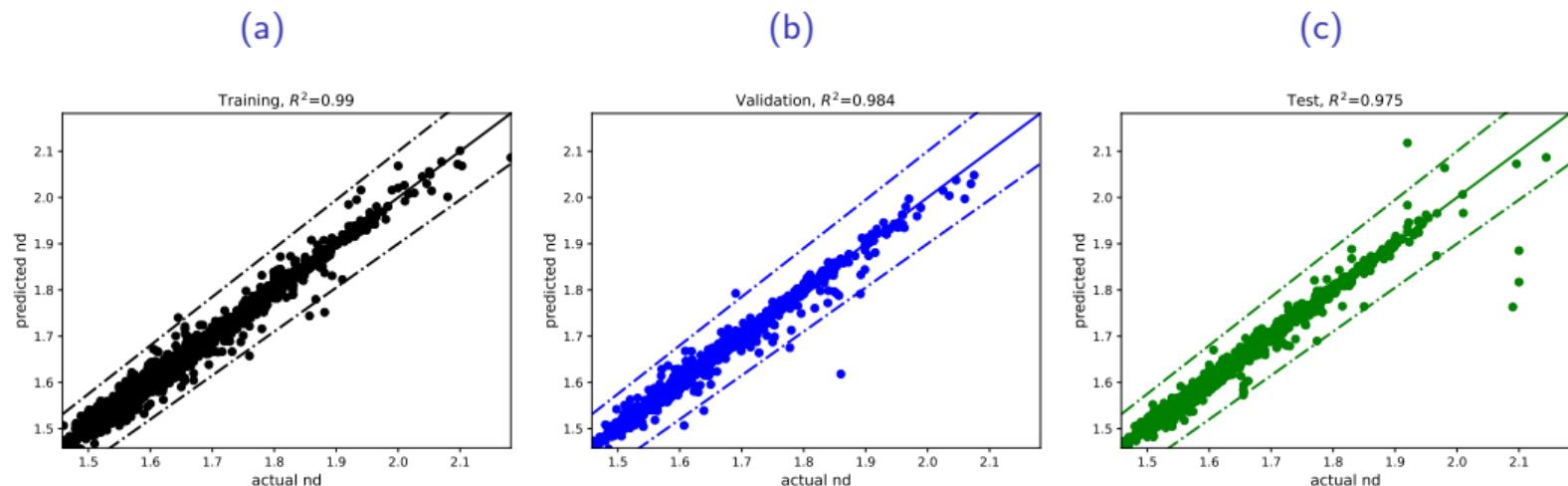


Figure 10 – Prédiction vs. data-set de  $n_d$ .

## 4. Prédictions des propriétés optiques

### 4.1 Indice de réfraction $n_d$

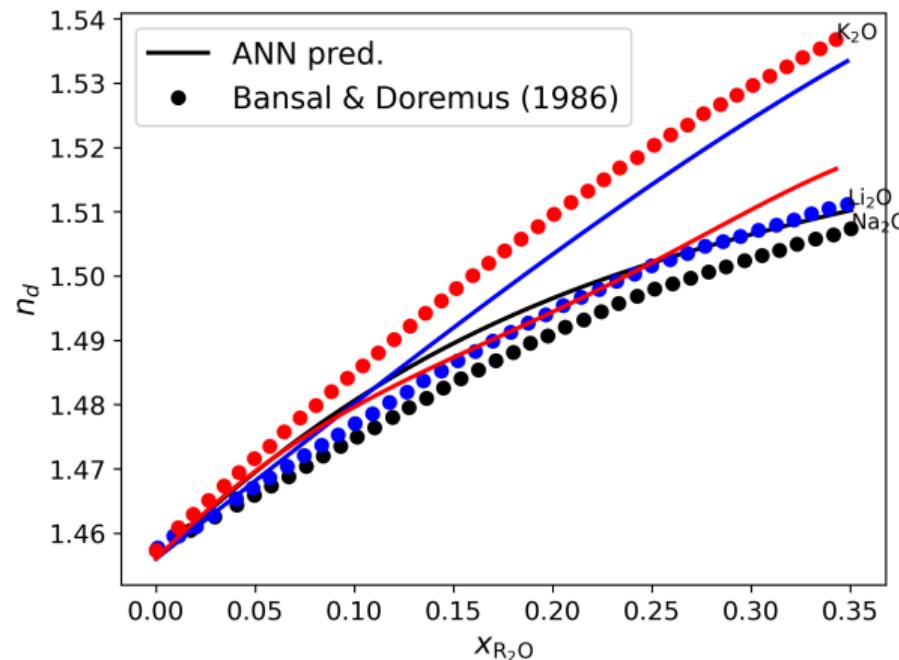


Figure 11 –  $n_d$  vs  $X_{R_2O}$ .

## 4. Prédictions des propriétés optiques

### 4.1 Indice de réfraction $n_d$

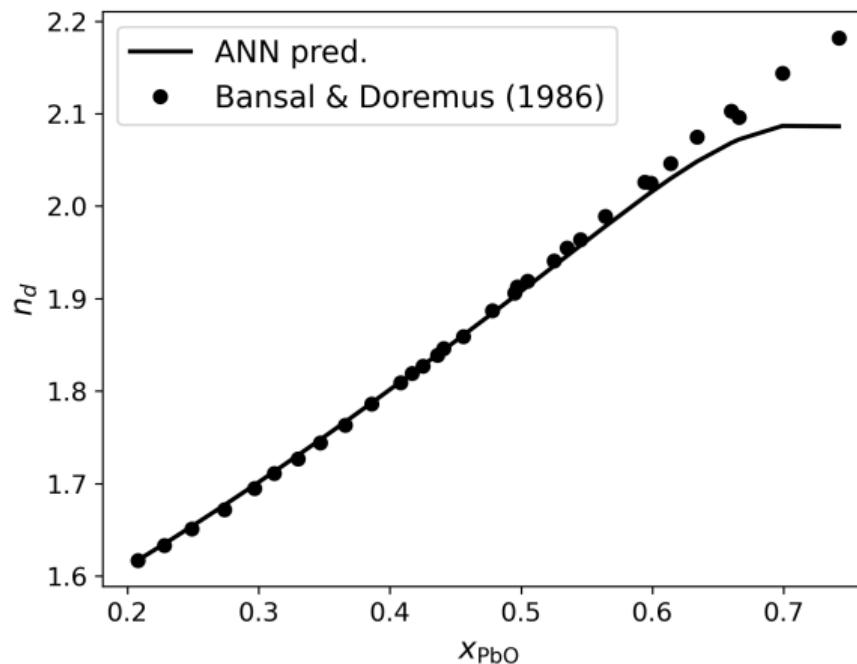


Figure 12 –  $n_d$  vs  $X_{\text{PbO}}$ .

## 4. Prédictions des propriétés optiques

### 4.1 Indice de réfraction $n_d$

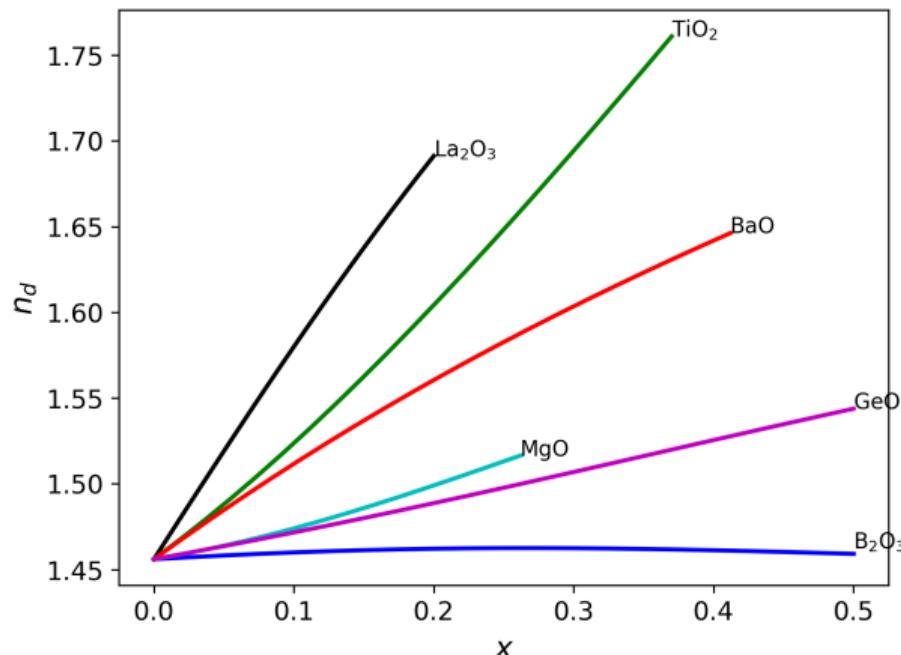
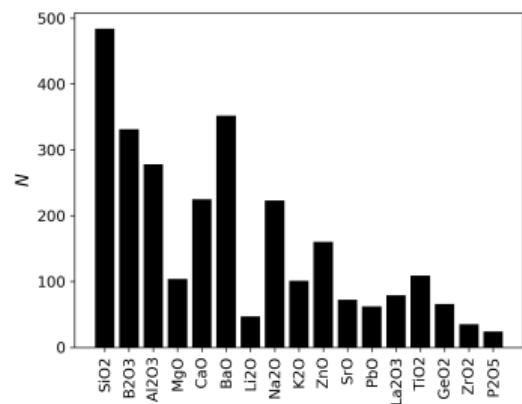


Figure 13 –  $n_d$  vs  $x_{\text{R}_m \text{O}_n}$ .

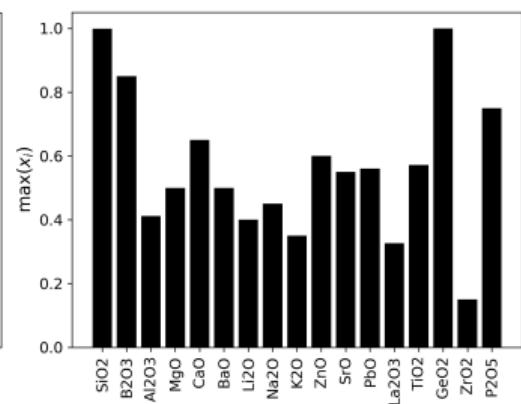
## 4. Prédictions des propriétés optiques

### 4.2 Indice de réfraction $n_F$

(a) Occurrences de chaque oxyde



(b)  $\max(x_i)$



(c) PDF

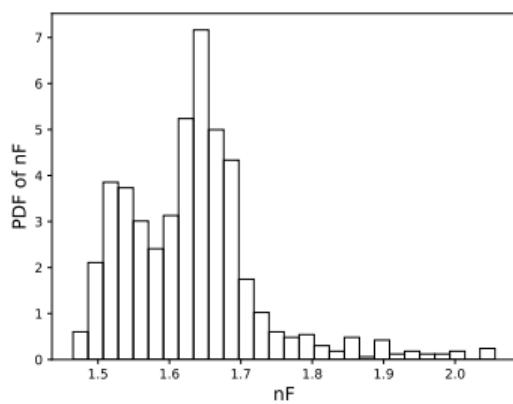


Figure 14 – Data-set sur  $n_F$  composé de 787 verres pour 17 oxydes.

## 4. Prédictions 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).

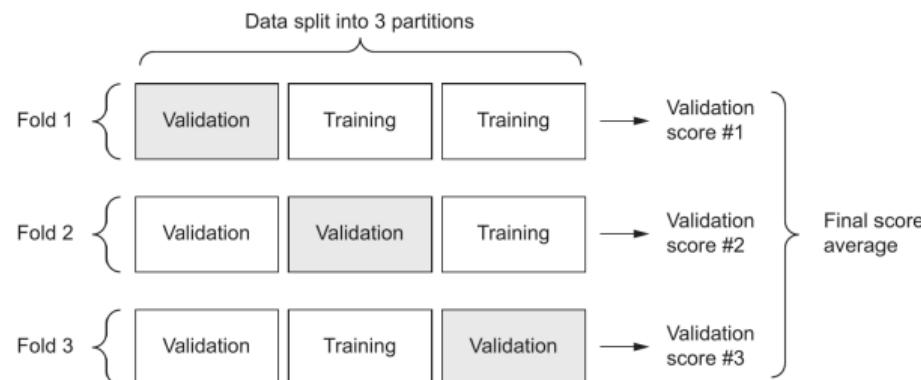


Figure 15 – Principe de l'algorithme K-fold<sup>22</sup>.

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

# 4. Prédictions des propriétés optiques

## 4.2 Indice de réfraction $n_F$

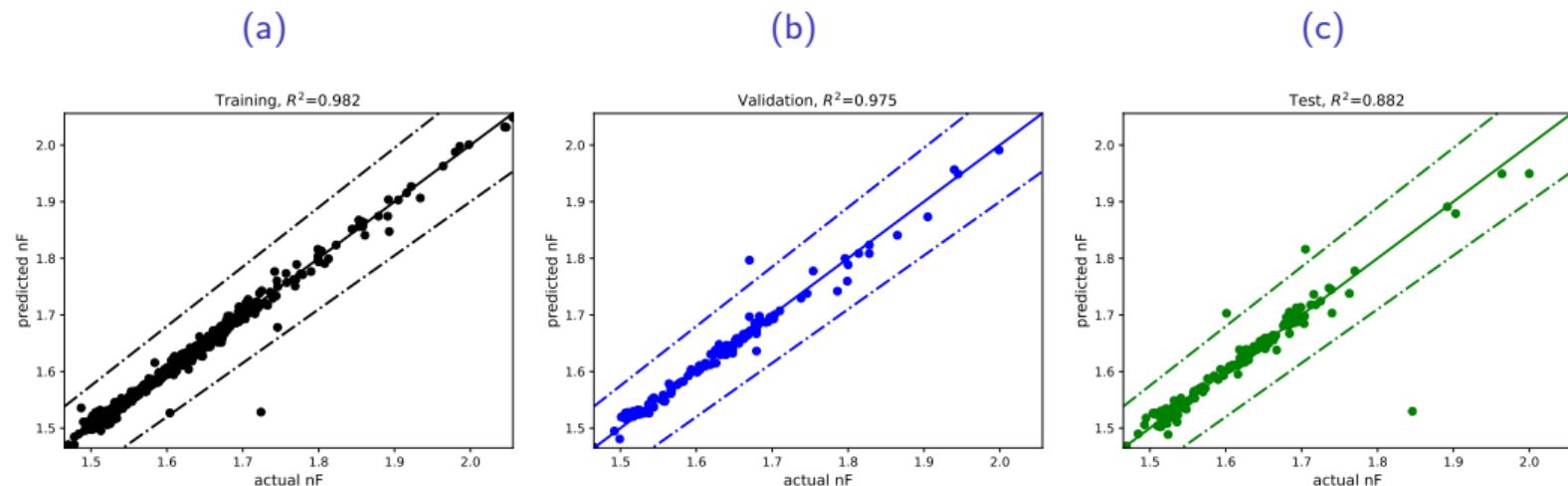
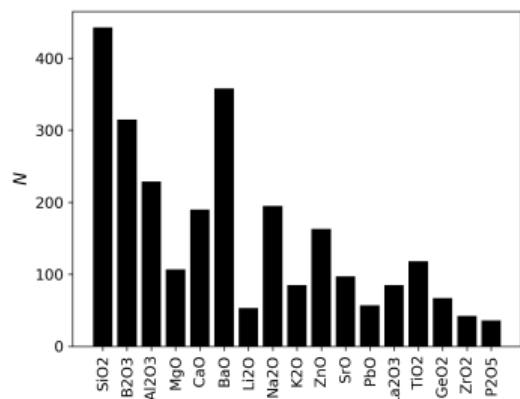


Figure 16 – Prédiction vs. data-set de  $n_F$ .

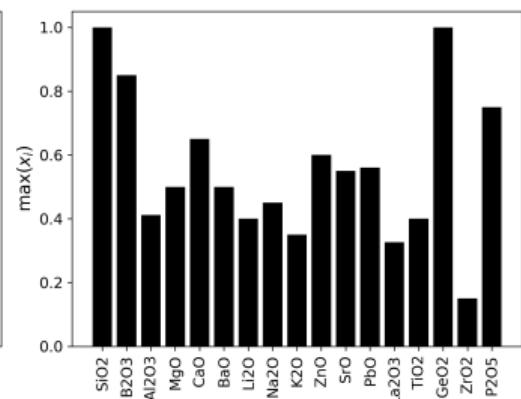
## 4. Prédictions des propriétés optiques

### 4.3 Indice de réfraction $n_C$

(a) Occurrences de chaque oxyde



(b)  $\max(x_i)$



(c) PDF

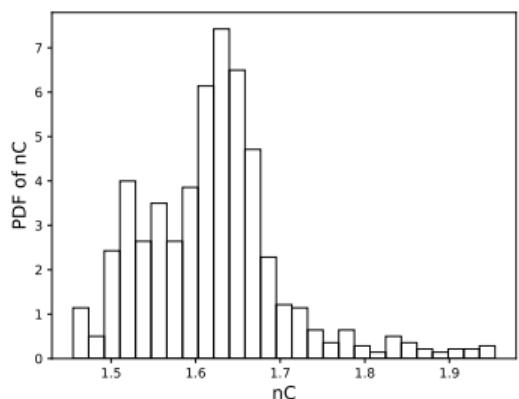


Figure 17 – Data-set sur  $n_C$  composé de 758 verres pour 17 oxydes.

# 4. Prédictions des propriétés optiques

## 4.3 Indice de réfraction $n_C$

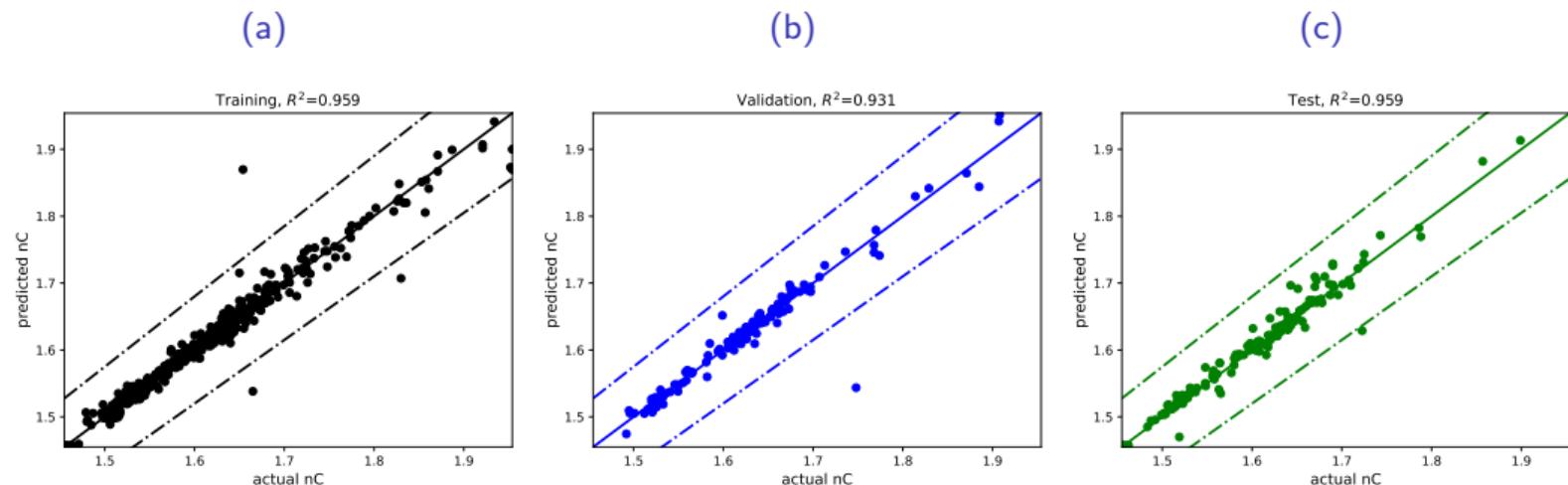
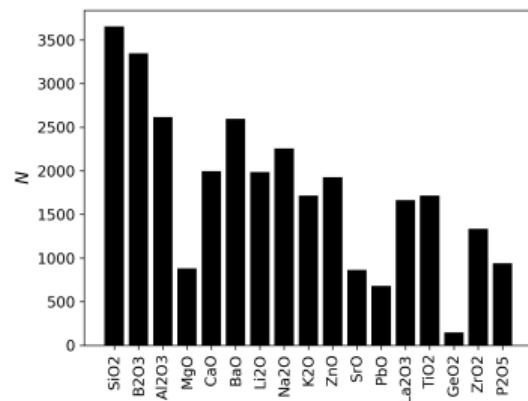


Figure 18 – Prédiction vs. data-set de  $n_C$ .

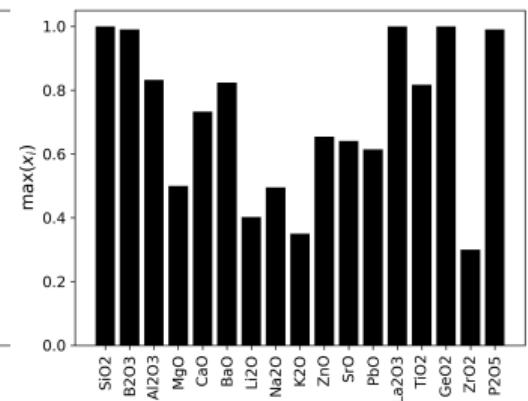
## 4. Prédictions des propriétés optiques

### 4.4 Nombre d'Abbe

(a) Occurrences de chaque oxyde



(b)  $\max(x_i)$



(c) PDF

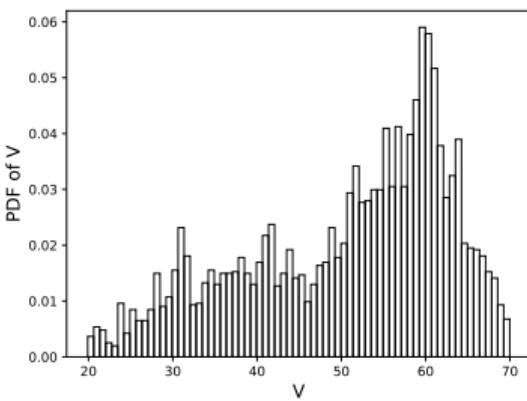


Figure 19 – Data-set sur  $V$  composé de 4950 verres pour 17 oxydes.

# 4. Prédictions des propriétés optiques

## 4.4 Nombre d'Abbe

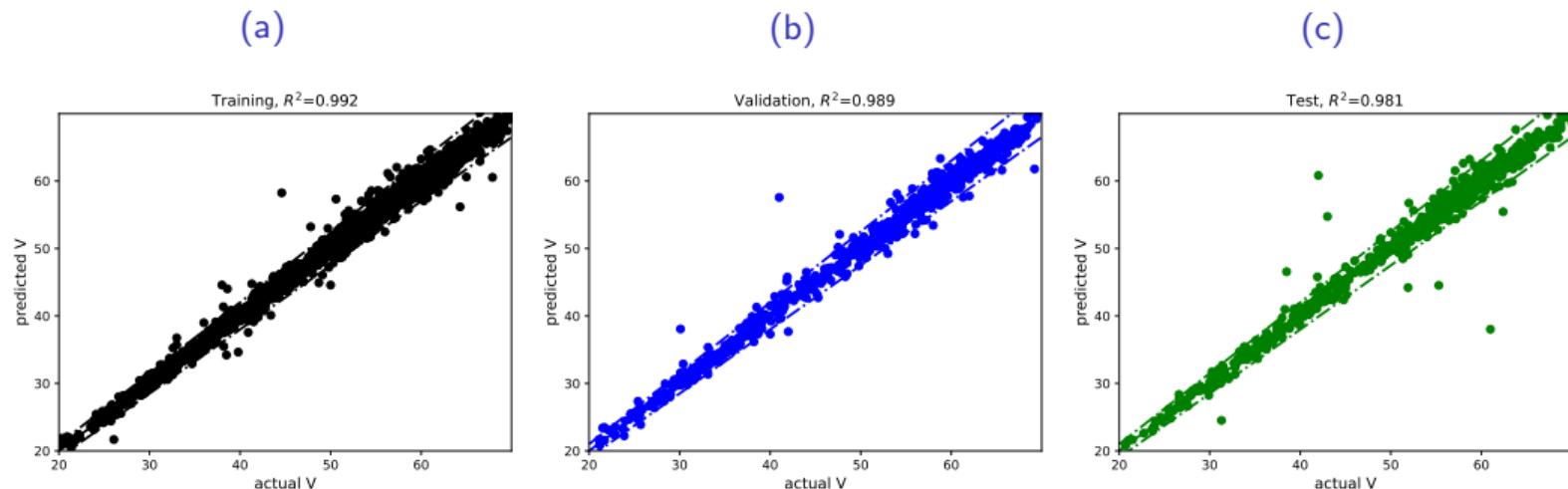


Figure 20 – Prédiction vs. data-set de  $V$ .

## 4. Prédictions des propriétés optiques

### 4.4 Nombre d'Abbe

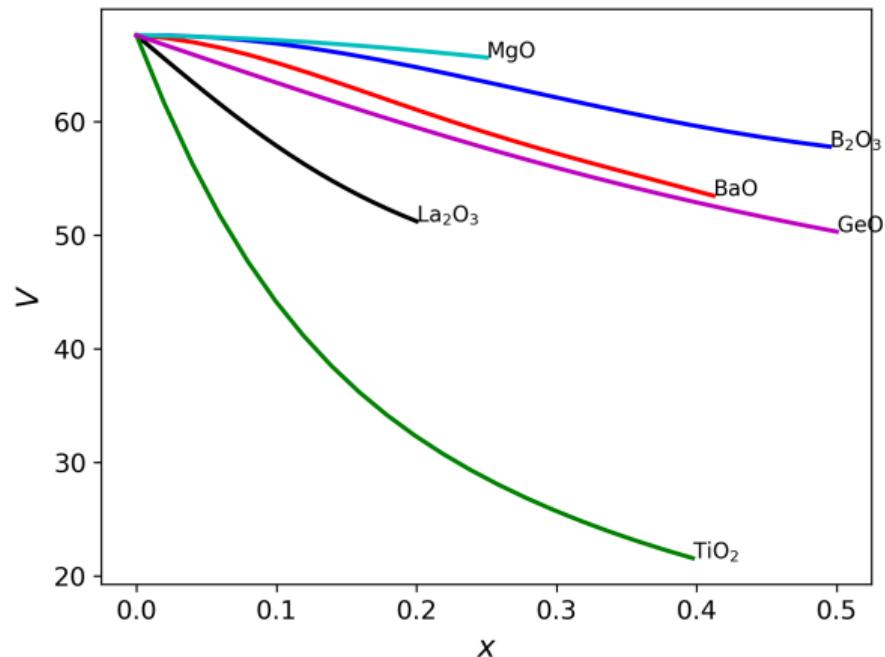


Figure 21 –  $V$  vs  $x_{\text{R}_m\text{O}_n}$ .

## 5. Prédictions de composition

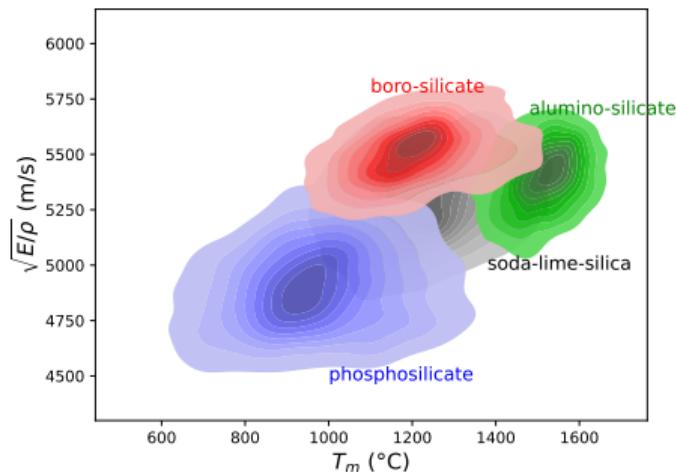


Figure 22 –  $\sqrt{E/\rho}$  ( $\text{m s}^{-1}$ ) vs.  $T_m$  ( $^{\circ}\text{C}$ ) pour 4 familles de verre : noir : silico-sodo-calcique, rouge : boro-silicate, vert : alumino-silicate & bleu : phospho-silicate.

Recherche de compositions ayant des propriétés ciblées ➔  
algorithme génétique

## 5. Prédictions de composition

### 5.1 Algorithme génétique

- ▶ Critères sur les propriétés physiques :

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

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

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

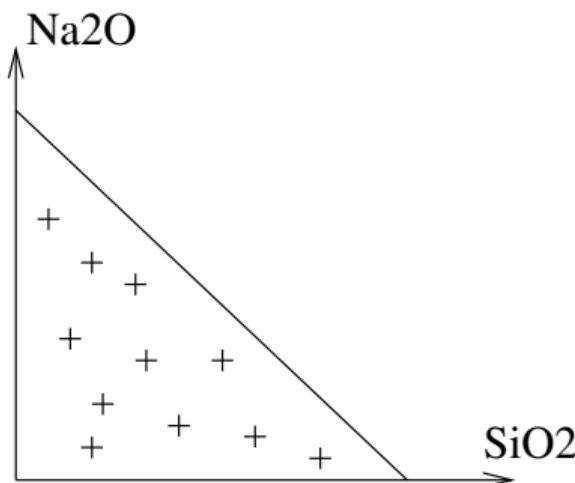
$$70 < E < 90 \text{ GPa}. \quad (15)$$

- ▶ 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. Prédictions de composition

### 5.1 Algorithme génétique

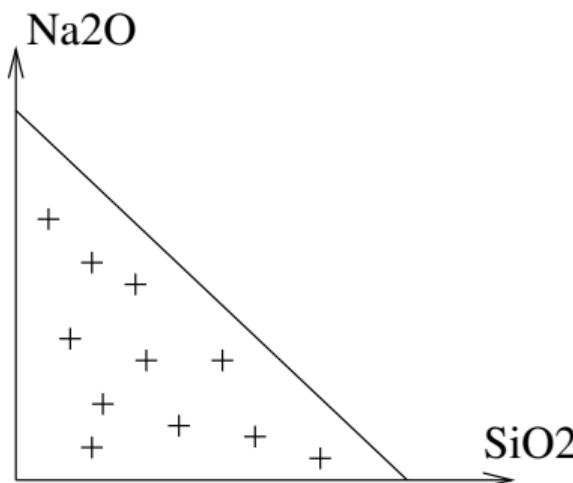
#### 1. Tirage aléatoire des compositions



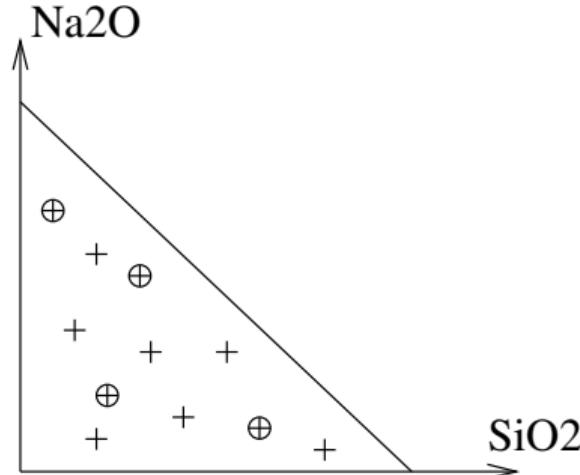
## 5. Prédictions de composition

### 5.1 Algorithme génétique

1. Tirage aléatoire des compositions



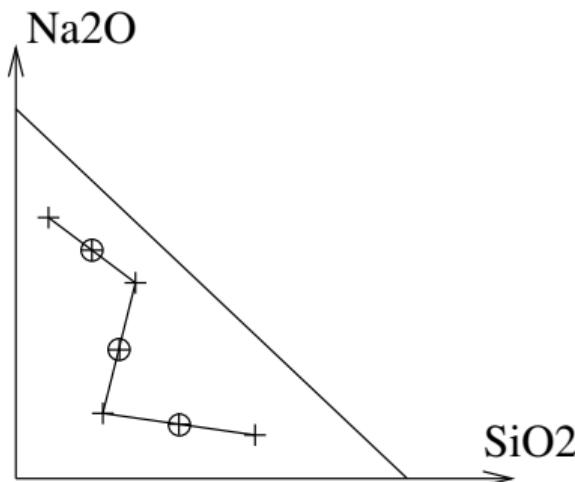
2. Sélection des élites à l'aide de  $F$



## 5. Prédictions de composition

### 5.1 Algorithme génétique

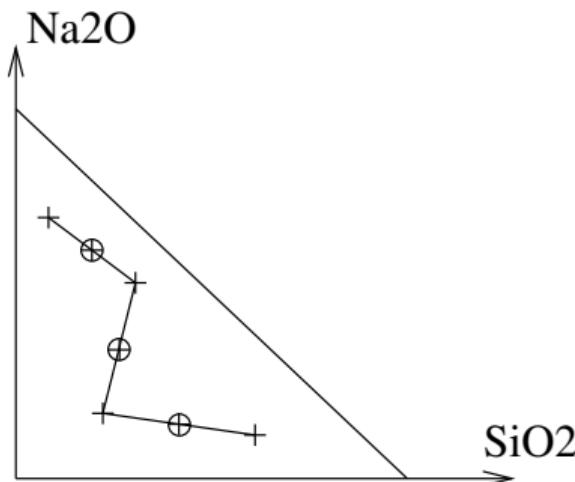
#### 3. Fusions élites (enfants)



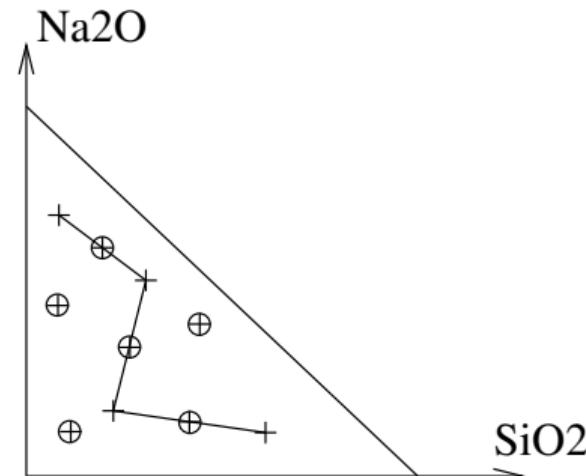
## 5. Prédictions de composition

### 5.1 Algorithme génétique

3. Fusions élites (enfants)



4. Ajout de nouvelles compositions



## 5. Prédictions de composition

### 5.1 Algorithme génétique

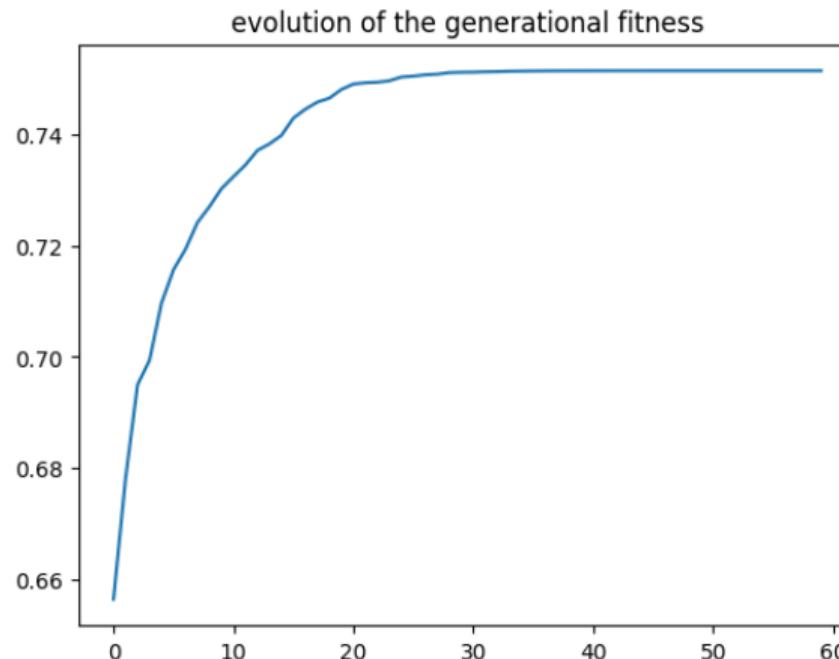


Figure 23 –  $F$  vs. nombre de génération.

# 5. Prédictions de composition

## 5.2 « Nouvelles » compositions

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

| Verre | SiO <sub>2</sub> | Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | MgO  | CaO  | Na <sub>2</sub> O | K <sub>2</sub> O | ZnO  | TiO <sub>2</sub> |
|-------|------------------|--------------------------------|------|------|-------------------|------------------|------|------------------|
| 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 –  $\rho$ ,  $T_g$ ,  $T_m$ ,  $E$  &  $H_v$

| Verre       | $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> ) | $T_g$ (°C) | $T_m$ (°C) | $E$ (GPa) | $H_v$ (GPa) |
|-------------|-----------------------------|------------|------------|-----------|-------------|
| Prédictions |                             |            |            |           |             |
| 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.