

UNIVERZITET U BEOGRADU  
FIZIČKI FAKULTET



PRIMENA VEŠTAČKE INTELIGENCIJE I  
MAŠINSKOG UČENJA U SPEKTROSKOPIJI  
PLAZME

Ivan R. Traparić

Doktorska disertacija

Beograd, 2024

UNIVERSITY OF BELGRADE  
FACULTY OF PHYSICS



**APPLICATION OF MACHINE LEARNING AND  
ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN PLASMA  
SPECTROSCOPY**

Ivan R. Traparić

Doctoral dissertation

Belgrade, 2024

Mentor:

Doc. dr Marijana Gavrilović Božović,  
Fakultet inženjerskih nauka Univerziteta u Kragujevcu

dr Milivoje Ivković,  
Naučni savetnik Instituta za fiziku u Beogradu

Komisija za odbranu doktorske disertacije:

Prof. dr Bratislav Obradović,  
Fizički fakultet Univerziteta u Beogradu

Prof. dr Ivan Dojčinović,  
Fizički fakultet Univerziteta u Beogradu

dr Vladimir Srećković,  
naučni savetnik Instituta za fiziku u Beogradu

Datum odbrane: \_\_\_\_\_

*Ova disertacija urađena je u potpunosti u Laboratoriji za spektroskopiju plazme i lasere. Stoga bih se mnogo zahvalio svom mentoru dr Milivoju Ivkoviću za podršku, savete i svom znanju koje je nesebično podelio sa mnom tokom izrade ove teze. Takođe, zahvaljujem se i mentoru doc. dr Marijani Gavrilović Božović na vođenju teze i korisnim sugestijama vezanim za njen konačan izgled i koncepciju.*

*Mnogo sam zahvalan i kolegama iz laboratorije dr Biljani Stankov, dr Milici Vinić i Stanku Milanoviću na ogromnoj pomoći u eksperimentalnom delu ove teze, te za sve prijateljske razgovore i diskusije koje smo imali.*

*Veliku zahvalnost dugujem i svojoj porodici, koji su izdržali ovaj put dugačak četiri godine i za svu podršku koju su mi dali i strpljenje koje su imali za mene. Bez toga ne bi bilo ni ovog rada.*

*Mojoj supruzi Mariji i ćerci Lari...*

**Rezime:** U ovoj doktorskoj disertaciji ispitana je mogućnost primene mašinskog učenja i veštačke inteligencije za rešavanje nekih problema u oblasti optičke i ekstremne ultraljubičaste emisije spektroskopije plazme.

Model slučajne šume, obučen je za modelovanje Stark-ove poluširine emitovane spektralne linije jer se za tu namenu pokazao kao najbolji od svih razmatranih modela. Napravljeni model uspešno je predvideo kvantnu prirodu atomske emisije i regularnosti duž izoelektronskog niza i spektralnih serija neutralnog atoma litijuma. Pokazano je da se ovaj model može koristiti za predviđanje novih Stark-ovih poluširina sa tačnošću od oko 20 %.

Zatim, pokazano je da se u slučaju kvantitativne analize korištenjem spektroskopije laserski indukovanog proboja za obučavanje modela mašinskog učenja mogu iskoristiti baze koje nisu snimljene na vlastitoj aparaturi ponavljanjem istih eksperimentalnih uslova. Ovo je značajan rezultat jer dosta laboratorija nema sredstava da priušti dovoljan broj standardnih uzoraka za potrebe ovakvih analiza, i pruža mogućnost standardizacije snimanja ovih baza.

Konačno, primenom varijacionog autoenkodera modelovan je UTA (eng. Unresolved Transition Array) struktura emitovanog spektra volframa u ekstremnoj ultraljubičastoj oblasti spektra za tipične uslove u jezgru plazme heliotrona LHD u Japanu. Model je pokazao zadovoljavajuće poklapanje sa eksperimentalnim merenjima, i tačno predvideo temperaturne zavisnosti oblika emitovanog spektra. Model je pokazao i dodatni napredak u modelovanju, omogućava brzo predviđanje oblika emitovanog spektra za zadate uslove plazme u svega nekoliko stotina milisekundi, za razliku od trenutnih kolizono - radijativnih modela kojima za istu svrhu treba po nekoliko nedelja za račun.

**Ključne reči:** mašinsko učenje, veštačka inteligencija, fizika plazme, spektroskopija plazme, fuzija, LIBS.

**Naučna oblast:** Fizika

**Uža naučna oblast:** Fizika jonizovanog gasa i plazme

**UDK broj:**

**Resume:** In this doctoral thesis the possibility of application of machine learning and artificial intelligence for solving of some particular problems connected with plasma optical and extreme ultraviolet emission spectroscopy was investigated.

Random Forest model was trained for prediction of spectral line width due to Stark effect as it showed best performance of all considered models. Created model successfully predicted quantum nature of atomic emission and regularities along isoelectric sequence and spectral series of neutral lithium atom. It was also shown that the model can be used for prediction of new spectral line widths with the uncertainty of around 20 %.

Furthermore, it was shown that databases that weren't recorded inside one's own laboratory can be used for training of machine learning algorithms for the quantitative LIBS analysis by repeating the same experimental conditions. This is significant result, as many laboratories don't have the funds for enough standard samples for this kind of analysis, while at the same time this result provides the opportunity for standardisation of database recording process.

Finally, using the variational autoencoder the UTA (Unresolved Transition Array) structure of tungsten spectra in the extreme ultraviolet part of the spectrum for typical plasma parameters inside the plasma core of heliotron LHD was modeled. Model showed good agreement with experimental measurements, while also correctly modeling the temperature dependence of the shape of the emitted spectra. This model provides the opportunity for quick and accurate generation of new spectra for given plasma parameters in several hundreds of milliseconds, contrary to the developed collisional - radiative models for the same purpose, which need few weeks of computational time for same calculations.

**Key words:** machine learning, artificial intelligence, plasma physics, plasma spectroscopy, fusion, LIBS.

**Scientific field:** Physics

**Research area:** Physics of Ionised Gases and Plasma

**UDC number:**

# Sadržaj

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Uvod u fiziku plazme i veštačku inteligenciju</b>	<b>4</b>
2.1	Teorijske osnove fizike plazme . . . . .	4
2.1.1	Kolektivne interakcije u plazmi . . . . .	4
2.1.2	Sudarni procesi u plazmama . . . . .	7
2.1.3	Kriterijum važenja plazmenog stanja . . . . .	9
2.2	Dijagnostika plazme . . . . .	9
2.2.1	Optička emisiona spektroskopija . . . . .	9
2.2.1.1	Doppler-ovo širenje spektralne linije . . . . .	10
2.2.1.2	Stark-ovo širenje spektralnih linija . . . . .	10
2.2.1.3	Kvazistatičko širenje spektralnih linija . . . . .	11
2.2.1.4	Sudarna aproksimacija . . . . .	14
2.2.1.5	Semiklasična perturbaciona aproksimacija (SCP) . . . . .	16
2.2.1.6	Regularnosti Stark-ovog širenja spektralnih linija . . . . .	17
2.2.2	EUV spektroskopija plazme . . . . .	18
2.3	Laserski indukovana plazma . . . . .	19
2.3.1	Proces formiranja laserski indukovane plazme . . . . .	20
2.3.2	Tipične vrednosti parametara laserski indukovanih plazmi . . . . .	22
2.3.3	Spektroskopija laserski indukovanog proboja (LIBS) kao analitička metoda . . . . .	23
2.4	Visokotemperaturne plazme (fuzione plazme) . . . . .	25
2.4.1	Načini konfiniranja visokotemperaturne plazme . . . . .	27
2.4.2	Interakcija plazme sa zidom reaktora . . . . .	32
2.4.2.1	Fizičko spaterovanje . . . . .	32
2.4.2.2	Hemijsko spaterovanje . . . . .	33
2.4.2.3	Termalno isparavanje . . . . .	34
2.4.2.4	Pojava balončića (Blistering) . . . . .	34
2.4.3	Problem akumulacije nečistoća sa velikim atomskim brojem $Z$ . . . . .	34
2.5	Mašinsko učenje i veštačka inteligencija . . . . .	36
2.5.1	Ansamblerski nelinearni modeli . . . . .	36
2.5.1.1	Prosta agregacija ( <i>Bootstrap aggregation</i> ili <i>Bagging</i> ) . . . . .	37
2.5.1.2	CART (Classification and Regression Trees) algoritmi . . . . .	37
2.5.1.3	Slučajna šuma . . . . .	39
2.5.2	Neuronske mreže . . . . .	39
2.5.2.1	Potpuno povezane neuronske mreže . . . . .	39
2.5.2.2	Konvolucione neuronske mreže . . . . .	42
2.5.3	Autoenkoderi . . . . .	44
2.5.4	Varijacioni autoenkoder . . . . .	45
2.5.5	Prevenција prilagođavanja modela veštačke inteligencije . . . . .	46
2.5.5.1	Regularizacija . . . . .	46
2.5.5.2	Rano zaustavljanje . . . . .	49



<b>3</b>	<b>Primena mašinskog učenja za određivanje Stark-ovih poluširina linija</b>	<b>50</b>
3.1	Pravljenje baze za obučavanje modela . . . . .	50
3.2	Predpriprema podataka i izbor najboljeg modela . . . . .	51
3.3	Analiza regularnosti Stark-ovog efekta za spektralne serije Li I . . . . .	53
3.4	Procena važnosti atributa . . . . .	56
3.5	Poređenje predikcija modela slučajne šume sa eksperimentalnim podacima . . . . .	58
<b>4</b>	<b>Primena mašinskog učenja u LIBS kvantitativnoj analizi</b>	<b>63</b>
4.1	Opis eksperimenta . . . . .	64
4.2	Predpriprema podataka . . . . .	65
4.3	Rezultati . . . . .	67
<b>5</b>	<b>Primena veštačke inteligencije za modelovanje EUV spektra volframa</b>	<b>70</b>
5.1	Opis eksperimenta . . . . .	71
5.1.1	Thomson-ovo rasejanje . . . . .	72
5.1.2	Tracer-Encapsulated Solid Pellet (TESPEL) sistem za ubacivanje čestica u plazmu . . . . .	72
5.1.3	Soft X-Ray Multichannel Spectrometer (SOXMOS) EUV spektrometar . . . . .	73
5.2	Predpriprema podataka za obučavanje modela . . . . .	74
5.3	Pravljenje modela . . . . .	75
5.4	Rezultati . . . . .	79
<b>6</b>	<b>Zaključak</b>	<b>84</b>

# 1 Uvod

U ovom poglavlju dat je kratki uvod u mašinsko učenje i veštačku inteligenciju, te mogućnosti koje oni pružaju u savremenoj nauci. Nakon uvodnog dela, izložena su osnovna postignuća ove teze i data objašnjenja metoda veštačke inteligencije primenjenih u spektroskopiji plazme. U završnom delu poglavlja i dati su pregled strukture i organizacija teze.

Mašinsko učenje i veštačka inteligencija se odavno primenjuju u nauci, a ovde će biti navedene samo neke od primena i mogućnosti koje oni pružaju. Na primer, algoritmi veštačke inteligencije se uspešno koriste u molekularnoj biologiji za sekvenciranje DNA [1], ili u farmaciji gde se pomoću veštačke inteligencije otkrivaju novi lekovi [2]. Algoritmi veštačke inteligencije i mašinskog učenja našli su primenu u skoro svim granama fizike. U astrofizici se koristi za jako bitan zadatak klasifikacije zvezda [3–5], koji omogućava dalje precizno izučavanje ovih objekata; u fizici čvrstog stanja veštačka inteligencija i mašinsko učenje se koriste u cilju predviđanja osobina novih materijala [6–8]; u kvantnoj mehanici, mogu se koristiti za rešavanje problema više tela [9, 10], pa i za pravljenje novih kvantnih eksperimenata [11, 12]. Veštačka inteligencija uspešno je primenjena i na računanje i modelovanje laserskog ubrzavanja jona [13], a često se koristi i u različitim vrstama spektroskopije: u kombinaciji sa Ramanovom spektroskopijom za identifikaciju različitih virusnih i bakteriološka oboljenja, klasifikaciju tumora itd [14]; u teraherznoj spektroskopiji u svrhu karakterizacije raznih bioloških uzoraka [15], kao i za određivanje izotopskog odnosa u divertoru tokamaka [16]. U spektroskopiji laserski indukovanih plazmi se najčešće koristi kao alat za kvantitativnu analizu [17, 18], ali ima dosta primene i klasifikacionih algoritama [19, 20]. U analizi visokotemperaturnih plazmi (ili obično fuzionih plazmi) veštačka inteligencija je primenjena za predviđanja upadnog toplotnog fluksa na divertor tokamaka [21], kao i za predviđanje profila temperature i gustine elektrona [22]. Piccione i saradnici su u svom radu [23] koristili mašinsko učenje kako bi predvideli ravnotežne parametre fuzione plazme, dok su Li i saradnici [24] koristili neuronske mreže u kombinaciji sa fluidnim modelima kako bi predvideli dominantan tip turbulencije i transportne parametre. Dakle, uočljiv je jedan bogat spektar primena veštačke inteligencije u raznim oblastima fizike, unutar koje i ova teza treba da ostvari svoj doprinos.

Ova doktorska disertacija u potpunosti je urađena u laboratoriji za spektroskopiju plazme i lasere u Institutu za fiziku u Beogradu. Laboratorija ima višedecenijsku tradiciju u oblasti spektroskopije niskotemperaturnih plazmi i naširoko je poznata po merenju Stark-ovih parametara spektralnih linija emitovanih iz najrazličitijih izvora plazme za gustine elektrona u opsegu  $10^{14} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Zbog svega ovoga, u svetu je poznata i kao deo Beogradske škole spektroskopije [25, 26]. Imajući u vidu dokazanu ekspertizu u polju emisije spektroskopije, i globalni trend primene novih metodologija veštačke inteligencije i mašinskog učenja u najrazličitijim oblastima nauke, oni su u ovoj tezi primenjeni kao poslednji alat tehnologije na analiziranje i obradu spektralnih linija emitovanih iz različitih vrsta plazme.

Različiti pravci istraživanja u laboratoriji za spektroskopiju plazme i lasere su umnogome usmeravali i pravac istraživanja ove teze, koja posledično ima tri veće celine. Za sva tri dela ili celine je zajedničko da predstavljaju primenu novih tehnologija veštačke inteligencije i mašinskog učenja na dobro poznate oblasti spektroskopije plazme. Prvi deo teze bavi se primenom modela mašinskog učenja u cilju određivanja širine emitovane spektralne linije na

polovini njene visine<sup>1</sup>. U tu svrhu napravljena je specijalna baza za trening modela mašinskog učenja nastala spajanjem Stark B i NIST baze atomskih podataka. U prvoj bazi sadržane su izračunate poluširine emitovanih spektralnih linija za razne jonske i neutralne emitere dobijene po semiklasičnoj perturbativnoj teoriji Sachal - Brechaut i Dimitrijevića [27, 28] i parametri plazme za koje je data poluširina izračunata. NIST baza atomskih parametara upotrebljena je kako bismo za svaku izračunatu poluširinu spektralne linije u Stark B bazi, našli atomske parametre od interesa za dati prelaz. Dobijena baza podataka korištena je za trening različitih modela mašinskog učenja. Trenirani model potom je iskorišten za analizu regularnosti Stark-ovog efekta duž spektralnih serija neutralnog litijuma, te su date predikcije poluširina linije usled Stark-ovog efekta za neke emitere. Pored ovoga, ispitana je i eksperimentalno uočena regularnost Stark-ovog efekta za naelektrisanje emitera, tj. regularnosti duž izoelektronskog niza. Na kraju, predikcije modela su upoređene sa eksperimentalno merenim poluširinama kako bi se proverila pouzdanost modela prilikom predikcije još neizračunatih Stark-ovih parametara.

Laboratorija za spektroskopiju plazme i lasere je dugo godina bila i centar razvoja lasera i laserskih sistema. Uporedo sa razvojem lasera, isti su korišteni i za stvaranje i spektroskopsko ispitivanje laserski indukovanih plazmi, kao prirodan spoj dve aktivnosti u kojima je laboratorija dala i daje veliki doprinos. U skladu sa ovim pravcem istraživanja, drugi deo teze fokusira se na primenu algoritama veštačke inteligencije za analizu spektra emitovanog iz plazme nastale interakcijom laserskog zračenja sa metom od čelika u cilju određivanja procentualnog sastava elemenata. Po prvi put u ovoj tezi testirana je mogućnost da se obučavanja modela na već snimljenoj bazi podataka, pri čemu se u drugoj laboratoriji snimaju samo test spektri. Uobičajena praksa jeste da se napravi baza podataka od velikog broja standardnih uzoraka (tipično 50 uzoraka) čiji se spektri snime sa dostupnom aparaturom pod strogo kontrolisanim i reproducibilnim eksperimentalnim uslovima. Ovaj postupak je spor i naporan, te zahteva veliku koncentraciju eksperimentatora. Dodatno, većini laboratorija najčešće nije ni dostupan ovoliki broj standardnih uzoraka, a ni njihova cena nije zanemarljiva, te bi dokaz mogućnosti primene ovde predloženog pristupa bio značajan uspeh i pomak u oblasti. Baza za trening bila je ona snimljena za potrebe *benchmarking* takmičenja na konferenciji LIBS 2022 koja je javno dostupna online. U laboratoriji su snimljeni samo spektri trenutno dostupnih test uzoraka standarda i analizirana je uspešnost modela prilikom predikcije koncentracije nepoznatih uzoraka.

Treći deo ove teze je u tesnoj vezi sa trenutnim pravcem razvoja laboratorije, koja se u poslednje vreme bavi istraživanjima koja su relevantna za nuklearnu fuziju. Kako je krajem 2019. godine uspostavljena saradnja između Nacionalnog instituta za fuziona istraživanja (NIFS) u Japanu i Univerziteta u Beogradu, to je dalo priliku da se laboratorija dodatno približi ovoj tematici. Treći deo ove teze bavi se primenom veštačke inteligencije za potrebe generisanja spektra volframa u ekstremno ultraljubičastoj oblasti, a u svrhu analize zračenja emitovanog iz plazme u heliotronu LHD u Japanu. Glavna ideja iza generisanja spektra jeste poređenje sa razvijenim koliziono - radijativnim modelima, te njihovo dalje usavršavanje za potrebe izučavanja akumulacije nečistoća sa velikim atomskim brojem  $Z$  u centru plazme, te ispitivanja transportnih osobina i vremena zadržavanja volframa prilikom ulaska u plazmu. Trenutno upotrebljeni model zasniva se na upotrebi varijacionog enkodera, koji se koristi za

---

<sup>1</sup>još nazivano i poluširina linije, termin koji će se u nastavku ove teze intenzivno koristiti

generisanje nepoznatog spektra za zadatu temperaturu plazme  $T_e$ .

Teza je organizovana na sledeći način. U uvodu je dat pregled oblasti primena veštačke inteligencije u nauci generalno, ne samo u fizici, a zatim je u kratkim crtama opisan radni zadatak i ostvareni rezultati svakodog delova teze.

U poglavlju Uvod u fiziku plazme i veštačku inteligenciju uvedeni su osnovni pojmovi bitni za suštinsko razumevanje problematike koja se obrađuje u tezi, počevši od same fizike plazme, zatim metoda za spektroskopsku dijagnostiku primenjenu na različitim vrstama plazme koje su proučavane u tezi, zaključno sa modernim alatima i tehnikama veštačke inteligencije i mašinskog učenja koji su na inovativan način po prvi put upotrebljeni za rešavanje određenih problema objašnjenih u tezi. Pre svega, definisane su glavne veličine i teorijski koncepti koji se koriste u opisivanju i modelovanju plazme, nakon čega je opisana dijagnostika plazme metodom optičke emisije spektroskopije, gde su predstavljene teorije širenja spektralnih linija od značaja za ovu disertaciju (kvazistatička teorija širenja spektralnih linija i semiklasična perturbativna teorija). Dodatno, opisana je i teorija konkavne rešetke i opis rada EUV spektrometra koji je korišten za merenje spektara u trećem delu ove doktorske disertacije. Posle toga, opisana je teorija interakcije nanosekundnog laserskog impulsa sa materijalom i tehnika spektroskopije laserski indukovano probija. Dalje, dat je kratak uvod u fiziku visokotemperaturnih plazmi, gde su opisani načini konfiniranja visokotemperaturne plazme i glavni procesi prilikom interakcije plazme sa zidom reaktora. Na kraju ovog poglavlja detaljno su opisani algoritmi veštačke inteligencije korišteni prilikom izrade ove teze, što uključuje nelinearne asamblerske modele poput slučajne šume i klasične neuronske mreže, a na kraju kao najnoviji pravac razvoja u veštačkoj inteligenciji, ukratko je objašnjen varijacioni autoenkoder kao jedan od generativnih modela koji se danas široko primenjuje.

U trećem poglavlju predstavljene su rezultati dobijeni prilikom primene mašinskog učenja na određivanje Stark-ove poluširine emitovane spektralne linije, na izučavanje regularnosti Stark-ovog efekta i poređenje predviđenih i eksperimentalno merenih Stark-ovih poluširina. Detaljno je opisan postupak pravljenja baze za obučavanje, trening i optimizacija modela, kao i sam izbor najboljeg modela.

U četvrtom poglavlju izložena je primena mašinskog učenja u kvantitativnoj LIBS analizi. Prvo je dat opis eksperimenta korištenog za snimanje spektra laserski indukovane plazme. Potom sledi opis predpripreme ulaznih podataka i opis selekcije najbitnijih atributa, te redukcija dimenzionalnosti ulaznog skupa podataka. Dalje, opisani su dobijeni rezultati i dati su predlozi za moguće unapređenje modela.

Potom, u petom poglavlju izloženi su rezultati primene veštačke inteligencije u svrhu generisanja EUV spektra volframa. Poglavlje započinje opisom svih relevantnih sistema koji su korišteni prilikom prikupljanja eksperimentalnih podataka. Tu spadaju SOXMOS spektrometar za merenje u EUV oblasti spektra, TESPEL sistem za ubacivanje peleta sa nečistoćama u plazmu i na kraju sistem za Thomson-ovo rasejanje koji je korišten za merenje temperature elektrona. Zatim sledi opis modela kao i opis procedure predpripreme ulaznih podataka za obučavanje modela, nakon čega su dati ostvareni rezultati u ovom delu istraživanja.

Na kraju, u zaključku ove teze još jednom su predstavljene svi rezultati dobijeni prilikom izrade ove doktorske disertacije i kako se do njih došlo. Takođe, u ovom delu su opisani u mogući pravci nastavka ovog istraživanja za svaki od tri dela doktorske disertacije.

## 2 Uvod u fiziku plazme i veštačku inteligenciju

U ovom poglavlju biće prvo izložene osnove teorije plazme koje su od značaja za ovu tezu, a koje se koriste u kasnijem delu rada. Posle teorijskih osnova, pažnja će potom biti usmerena na dijagnostiku plazme putem optičke emisije spektroskopije, te uz to objašnjena teorija širenja spektralnih linija u sudarnoj aproksimaciji, pošto se primenjeni model u ovoj tezi u velikoj meri oslanja na tu aproksimaciju. Posle objašnjenja osnovnih principa dijagnostike plazme spektroskopskim putem, biće objašnjeni osnove interakcije nanosekundnog laserskog impulsa sa materijalom, proces formiranja plazme, te metoda spektroskopije laserski indukovanog proboja (eng. LIBS - *Laser Induced Breakdown Spectroscopy*) kao analitička metoda. Zatim će biti reči o visokotemperaturnim plazmama i procesu njihovog konfiniranja u laboratorijskim uslovima, da bi potom bila izložena teorija i osnovni procesi prilikom interakcije plazme sa materijalima zida reaktora. Posebno, biće reči o procesu akumulacije teških čestica u jezgru plazme kao procesu koji će biti analiziran u ovoj tezi. Na kraju, biće objašnjeni svi algoritmi veštačke inteligencije i mašinskog učenja korišteni prilikom izrade ove teze.

### 2.1 Teorijske osnove fizike plazme

Plazma kao stanje materije predstavlja četvrto agregatno stanje. U prirodi, plazma postoji u galaktičim objektima (zvezde, solarne oluje, korona, jonosfera), a na Zemlji tipičan primer je npr. munja. Munje i laboratorijske plazme (lukovi, fluorescentne lampe, industrijske plazme za obradu materijala itd.) su uglavnom niskotemperaturne, što znači da je temperatura elektrona reda veličine nekoliko elektron volti, dok su jonske temperature čak niže, reda veličine sobne temperature [29]. Za galaktičke objekte u stanju plazme, sem zvezda, temperature su reda veličine 1 - 100 eV i te plazme su često potpuno jonizovane. Kod zvezda, u jezgru temperature elektrona dostižu vrednosti od nekoliko keV, pa stoga te plazme zovemo visokotemperaturnim.

#### 2.1.1 Kolektivne interakcije u plazmi

Tri osnovne osobine plazme koje proističu iz elektromagnetnih kolektivnih interakcija između čestica jesu kvazineutralnost plazme, plazmene oscilacije i ekraniranje. Pod pojmom kvazineutralnosti, podrazumeva se da je ukupna zapreminska gustina naelektrisanja plazme jednaka nuli. Ovo se može objasniti činjenicom da je svako lokalno nastajanje viška naelektrisanih čestica usled termalnog kretanja unutar plazme praćeno uspostavljanjem veoma intenzivnih elektrostatičkih polja koja sprečavaju bilo kakvo dalje kretanje naelektrisanih čestica [30]. Uslov makroskopske elektroneutralnosti plazme je ispunjen samo ako posmatramo dovoljno velika rastojanja. Ovo se može ilustrovati jednostavnim izračunavanjem potencijala na površini sfere radiusa 1 cm uočenoj unutar plazme koja ima gustinu naelektrisanih čestica  $10^{19} \text{ m}^{-3}$  i termalnu energiju kretanja od 6 eV po čestici. Uz pretpostavku da je 0.1 % elektrona napustilo uočenu sfernu zareminu, dobija se [30]:

$$\varphi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{R} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e(n_i - n_e)\frac{4}{3}R^3\pi}{R} = \frac{R^2}{3\epsilon_0} e\Delta n = 6000 \text{ V} \quad (1)$$

Dakle, da bi elektroni napustili ovu zapreminu, moraju imati srednju kinetičku energiju od 6 keV, a pri čemu oni imaju samo 6 eV. Međutim, ako bi posmatrana zapremina bila 0.01

mm, svi elektroni bi mogli napustiti uočenu zapreminu i uslov kvazineutralnosti više ne bi važio. Ovaj uslov može se kvantifikovati i drugačije, ukoliko se izračuna rad izvršen od strane elektrona da napuste posmatranu sferu [29]. Zbog sferne simetrije, električno polje preostalih jona mora imati radijalni pravac. Ovo polje, kada svi elektroni napuste sferu ima oblik [29]:

$$E_r = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{en_i \frac{4}{3}r^3\pi}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{n_i e r}{3\epsilon_0} \quad (2)$$

Energija elektrostatičkog polja unutar ove sfere je onda [29]:

$$W = \int \frac{\epsilon_0 E^2}{2} dV = \int_0^{r_{max}} \frac{\epsilon_0 E_r^2}{2} 4\pi r^2 dr = \pi r_{max}^5 \frac{2n_i^2 e^2}{45\epsilon_0} \quad (3)$$

Ukoliko ovu energiju izjednačimo sa termalnom energijom kretanja elektrona, dobićemo<sup>2</sup>:

$$\pi r_{max}^5 \frac{2n_e^2 e^2}{45\epsilon_0} = \frac{3}{2} n_e k T_e \times \frac{4}{3} \pi r_{max}^3 \quad (4)$$

Odakle dobijamo [29]:

$$r_{max}^2 = 45 \frac{\epsilon_0 k T_e}{n_e e^2} \Rightarrow r_{max} \simeq 7r_D \quad (5)$$

Ovde je uvedena jedna karakteristična plazmena dužina koja se naziva Debye-ev radius, i data je izrazom:

$$r_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T}{n e^2}} \quad (6)$$

Tako da se konačno može tvrditi da će plazma biti makroskopski elektroneutralna na rastojanjima koja su mnogo veća od Debye-evog radiusa.

Plazmene oscilacije javljaju se kao posledica jakih elektrostatičkih polja prilikom izlaska elektrona iz Debye-eve sfere [30]. Jako elektrostatičko polje koje se tada javlja, zaustavlja elektrone i usmerava ih nazad ka centru sfere gde se nalazi višak pozitivnih naelektrisanja. Prilikom dolaska na površinu sfere, usled akumulirane kinetičke energije, elektron se neće zaustaviti na površini sfere već će nastaviti da se kreće ka centru. Zbog jakih odbojnih elektrostatičkih sila koje se javljaju usled viška negativnog naelektrisanja, dolazi do ponovnog izlaska elektrona iz posmatrane sfere, pri čemu nastaju plazmene oscilacije [30]. Plazmene oscilacije elektrona imaju frekvenciju [30]:

$$\omega_e = \sqrt{\frac{e^2 n_e}{m_e \epsilon_0}} \quad (7)$$

Primećuje se da elektronske plazmene oscilacije zavise samo od gustine elektrona u plazmi i reda su veličine od nekoliko MHz do nekoliko THz. Plazmene oscilacije mogu se definisati za sve vrste čestica prisutnih u plazmi. One predstavljaju brzinu reakcije plazme na promenu sopstvenog električnog mikropolja, a takođe i brzinu reakcije na pobudu spoljašnjim vremenski promenljivim električnim poljem. Ovako definisana veličina omogućava formulisanje još

<sup>2</sup>Indeks  $i$  zamenjen je indeksom  $e$  jer pretpostavljamo da su gustine elektrona i jona jednake

jednog uslova važenja kvazineutralnosti plazme. Može se reći da će makroskopska elektroneutralnost biti narušena i na većim rastojanjima od Debye-evog radiusa, ali samo u vremenskom intervalu koji odgovara periodu elektronskih plazmenih oscilacija koji je reda veličine  $10^{-9}$  s. Zbog toga kažemo da uslov elektroneutralnosti ispoljava samo na vremenskim skalama koje su mnogo veće od perioda plazmenih oscilacija [30].

Konačno, poslednja analizirana osobina plazme kao posledica kolektivnih interakcija u plazmi jeste Debye-evo ekraniranje plazme. Naime, zbog elektrostatičkog privlačenja jona i elektrona, svaki jon u plazmi biva okružen oblakom negativnog naelektrisanja. Ovaj oblak ne može imati dimenzije veće od Debye-evog radiusa, jer je jedino unutar Debye-eve sfere elektroneutralnost plazme narušena [30]. Da bi se našao oblik potencijala jona okruženog oblakom elektrona, polazi se od pretpostavke da joni imaju uniformnu raspodelu i da postoji mala perturbacija elektronske gustine  $n_e$ . Sledeća pretpostavka jeste da su elektroni u termodinamičkoj ravnoteži, pa je njihova koncentracija data sa [31]:

$$n_e = n_0 e^{-\frac{q_e \varphi}{kT_e}} = n_0 e^{\frac{e\varphi}{kT_e}} \quad (8)$$

U stanju termodinamičke ravnoteže srednja termalna energija elektrona je mnogo veća od elektrostatičke energije  $kT_e \gg e\varphi$ , pa možemo pisati [31]:

$$n_0 e^{\frac{e\varphi}{kT_e}} = n_0 \left(1 + \frac{e\varphi}{kT_e}\right) \quad (9)$$

Poisson-ova jednačina ima oblik [31]:

$$\nabla^2 \varphi(r) = -\frac{1}{\varepsilon_0} e(n_e - n_0) \quad (10)$$

Zbog pretpostavljene sferne simetrije, operator  $\nabla^2$  ima oblik  $\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\partial}{\partial r} r \right)$  te ubacivanjem (9) u (10) dobija se [31]:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\varphi(r)) - \frac{1}{r_D^2} r\varphi(r) = 0 \quad (11)$$

Rešavanjem ove diferencijalne jednačine dobijamo [30]:

$$\varphi(r) = C_1 \frac{e^{-\frac{r}{r_D}}}{r} + C_2 \frac{e^{\frac{r}{r_D}}}{r} \quad (12)$$

Zbog fizičkog smisla konačnog rešenja, odbacuje se drugi član, tj.  $C_2 = 0$  jer potencijal ne može eksponencijalno da raste sa udaljavanjem od naelektrisane čestice. Konstanta  $C_1$  određuje se tako da pri malim rastojanjima od jona, potencijal ima oblik Coulomb-ovog potencijala, tj za  $r \rightarrow 0$  [30]:

$$\varphi(r \rightarrow 0) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e}{r} \Rightarrow C_1 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \quad (13)$$

Stoga je konačan oblik ekraniranog potencijala jona:

$$\varphi(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^{-\frac{r}{r_D}}}{r} \quad (14)$$

Ovaj rezultat nam govori da svaka naelektrisana čestica u plazmi može da interaguje samo sa drugim naelektrisanim česticama koje se nalaze unutar Debye-eve sfere opisane oko te čestice, jer su na većim rastojanjima od Debye-vog radiusa, polja naelektrisanih ekranirana i plazma se smatra makroskopski elektroneutralnom [30].

### 2.1.2 Sudarni procesi u plazmama

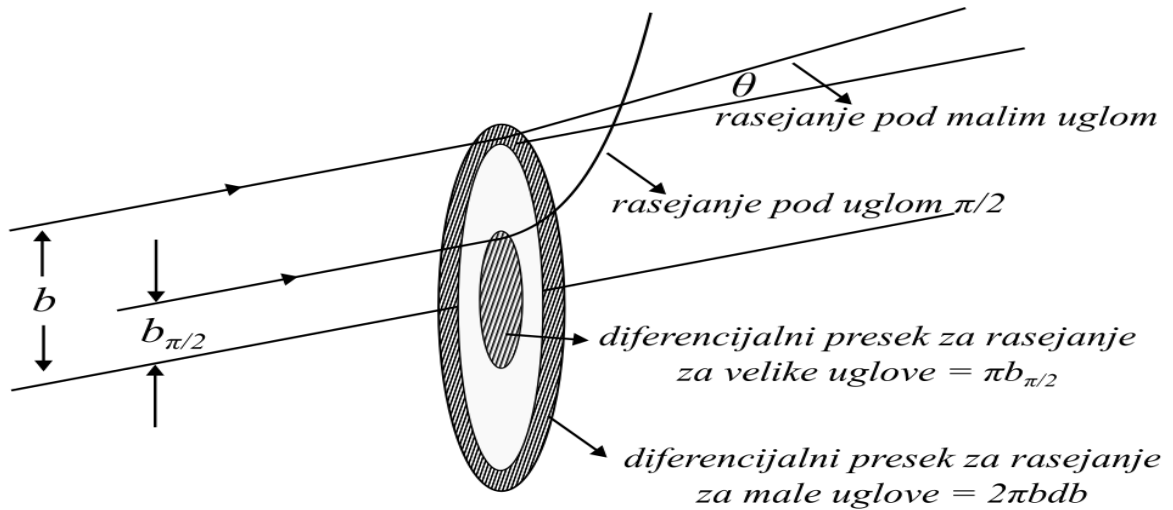
Sudarni procesi u plazmi biće razmatrani samo u binarnoj aproksimaciji. Pod pojmom sudar podrazumeva se rasejanje čestice vrste  $\alpha$  na česticama vrste  $\beta$  pod nekim uglom rasejanja  $\theta$ . Svako rasejanje se definiše veličinom koja se naziva diferencijalni presek za rasejanje. Prema definiciji, diferencijalni presek za rasejanje predstavlja verovatnoću da se čestica vrste  $\alpha$  raseje nad česticom vrste  $\beta$  u jedinični prostorni ugao oko pravca određenim uglom  $\theta$  [30]. Ugao rasejanja  $\theta$  se u najopštijem slučaju može izračunati pomoću [30]:

$$\theta = \pi - 2 \int_{\rho_{min}}^{+\infty} \frac{b}{\rho^2} \frac{d\rho}{\sqrt{1 - \frac{b^2}{\rho^2} - 2\frac{U(\rho)}{\mu v_r^2}}} \quad (15)$$

U gornjoj formuli  $b$  predstavlja parametar sudara,  $v_r$  relativnu brzinu čestice vrste  $\alpha$  u odnosu na česticu vrste  $\beta$ ,  $\mu$  predstavlja relativnu masu ovih čestica a  $U(\rho)$  pretpostavljeni potencijal interakcije ovih čestica. Donja granica integracije  $\rho_{min}$  predstavlja najbliže rastojanje do kojeg čestica vrste  $\alpha$  prilazi čestici vrste  $\beta$ . Ako pretpostavimo da je oblik potencijala dat Coulomb-ovim potencijalom, dolazimo do čuvene Rutherford-ove formule za ugao rasejanja dve naelektrisane čestice [29]:

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{q_\alpha q_\beta}{4\pi\epsilon_0 b \mu v_r^2} \quad (16)$$

Moguća rasejanja dve čestice prikazani su na slici 1.



Slika 1: Rasejanje čestice vrste  $\alpha$  na čestici vrste  $\beta$ . Moguća rasejanja predstavljaju rasejanja pod malim uglom, gde je  $\theta \ll \frac{\pi}{2}$  i rasejanja pod velikim uglom gde je  $\theta > \frac{\pi}{2}$ .

Najčešći tipovi rasejanja u plazmama jesu rasejanja pod malim uglom. Ako označimo sa  $b_{\frac{\pi}{2}}$  parametar sudara za rasejanje pod uglom od 90 stepeni, dobija se da je [29]:

$$b_{\frac{\pi}{2}} = \frac{q_\alpha q_\beta}{4\pi\epsilon_0 \mu v_r^2} \quad (17)$$



Totalni presek za rasejanje pod velikim uglovima onda predstavlja površinu kruga označenu na slici 1 i dat je sa [29]:

$$\sigma_v = \pi b_{\frac{\pi}{2}}^2 = \pi \left( \frac{q_\alpha q_\beta}{4\pi \epsilon_0 \mu v_r^2} \right)^2 \quad (18)$$

Sa druge strane, rasejanja pod malim uglom data su za sve parametre sudara koji su van šrafranog kruga, što znači da se oni javljaju dosta češće. Pošto rasejanja pod malim uglom zavise od parametra sudara, ova površina se deli na prstenove radiusa  $b$  i debljine  $db$ . Tako se dobija diferencijalni presek za rasejanje pod malim uglom, koji je jednak  $2\pi b db$  i ova površina predstavlja verovatnoću da čestica vrste  $\alpha$  bude rasejana pod uglom  $\theta$ ,  $\theta + d\theta$  nakon interakcije sa česticom vrste  $\beta$  [29]. Pošto su ovi sudari jako česti, mora se razmotriti kumulativni efekat ovih sudara. Može se pokazati da je presek za rasejanje koji odgovara tome da kumulativni efekat rasejanja pod malim uglom bude ekvivalentan jednom sudaru sa velikim uglom rasejanja dat sa [29]:

$$\sigma^* = 8 \ln \left( \frac{r_D}{b_{\frac{\pi}{2}}} \right) \sigma_v \quad (19)$$

Ubacivanjem (18) u (19) dobijamo [29]:

$$\sigma^* = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{q_\alpha q_\beta}{\epsilon_0 \mu v_r^2} \right)^2 \ln \left( \frac{r_D}{b_{\frac{\pi}{2}}} \right) = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{q_\alpha q_\beta}{\epsilon_0 \mu v_r^2} \right)^2 \ln \Lambda_{\alpha\beta} \quad (20)$$

Pošto presek za rasejanje opada kao  $\sigma^* \sim v_r^{-4}$  zaključak je se da će za visokotemperaturne plazme Coulomb-ovi sudari biti zanemarljivi u odnosu na druge fenomene [29].

Kada je poznat totalni presek za dati sudar, može se definisati i koliziona frekvencija za sudare čestica vrste  $\alpha$  sa česticama vrste  $\beta$ . Ona predstavlja broj sudara u jedinici vremena koje pretrpi jedna čestica vrste  $\alpha$  sa česticama vrste  $\beta$  [30]. Definiše se kao [30]:

$$\nu_{\alpha\beta} = n_\beta \int \sigma_{\alpha\beta}(v_r) v_r dP_r^{\alpha\beta} = n_\beta \langle \sigma(v_r) v_r \rangle \quad (21)$$

U gornjoj formuli,  $\sigma_{\alpha\beta}(v_r)$  predstavlja totalni presek za rasejanje,  $v_r$  je relativna brzina čestica, a  $P_r^{\alpha\beta}$  predstavlja verovatnoću da jedan par čestica ima relativnu brzinu u intervalu  $v_r, v_r + dv_r$ . Ova raspodela može biti Maxwell-ova, ali ne i nužno. Ako se ipak pretpostavi da ima oblik Maxwell-ove raspodele, onda se dobijaju tzv. Spitzer - Härm-ove formule za sudarne frekvencije. Totalna sudarna frekvencija za elektrone  $\nu_e = \nu_{ee} + \nu_{ei} \simeq 2\nu_{ei}$ , što daje [30]:

$$\nu_e = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2\pi}{m_e}} \left( \frac{ee_i}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{n_e}{(kT_e)^{\frac{3}{2}}} \ln \Lambda_{ei} \quad (22)$$

Sudarna frekvencija za sudare elektron - elektron i elektron - jon je približno ista jer srednji slobodni put elektrona najviše zavisi od njegove energije. Totalna sudarna frekvencija za jone predstavlja ustvari kolizionu frekvenciju za sudare jon - jon jer joni sudare sa elektronima slabo osećaju zbog dosta veće mase. Ova frekvencija je [30]:

$$\nu_i = \nu_{ii} + \nu_{ie} \simeq \nu_{ii} = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\pi}{m_i}} \left( \frac{e_i^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{n_i}{(kT_i)^{\frac{3}{2}}} \ln \Lambda_{ii} \quad (23)$$

Pošto kolizione frekvencije opadaju sa porastom temperature elektrona i jona, sudari su sve manje verovatni kako kinetička energija čestica raste. Ovo predstavlja veliko ograničenje omskog zagrevanja plazmi koji se koristi kod grejanja fuzionih plazmi.

### 2.1.3 Kriterijum važenja plazmenog stanja

Dakle, kao posledica gore navedenih kolektivnih interakcija u plazmi, sada se može formulisati i kvantitativni uslov važenja plazmenog stanja, odnosno kada se za materiju može reći da se nalazi u stanju plazme. Da bi materija bila u stanju plazme, moraju da budu zadovoljena dva uslova:

1. Da je zadovoljen uslov makroskopske elektroneutralnosti. Da bi ovaj uslov bio zadovoljen, dimenzije prostora koji zauzima plazma moraju biti mnogo veće od Debyeve sfere plazme. Ovaj uslov piše se tako da važi:

$$r_D^3 \ll V \quad (24)$$

2. Da bi se razvile oscilacije u plazmi, potrebno je da je uticaj sudara dosta mali. Iz ovoga proizilazi da mora da važi uslov:

$$\omega_{p\alpha} \gg \nu_\alpha \quad (25)$$

Gde je  $\nu_\alpha = \sum_\beta \nu_{\alpha\beta}$  ukupna koliziona frekvencija čestica vrste  $\alpha$  a  $\omega_{p\alpha}$  je plazmena frekvencija za tu vrstu čestica.

Ukoliko gas na nekoj temperaturi ispunjava oba gornja uslova, taj gas se može zvati plazmom.

## 2.2 Dijagnostika plazme

Za proučavanje i merenje parametara u plazmi razvijene su razne metode do danas. Prve metode uključuju sonde, a neki primeri su Langmuir-ove sonde za merenje temperature i koncentracije elektrona u plazmi, te za merenje električnog polja u plazmi [32]. Kalem Rogovskog se koristi za merenje struje koja prolazi kroz plazmu [32], dok se Mirnov-ovi kalemovi koriste za merenje fluktuacija magnetnog polja u plazmi. Potom imamo laserske tehnike dijagnostike plazme koje uključuju Thomson-ovo rasejanje za merenje gustine elektrona i temperature elektrona, lasersku interferometriju za merenje gustine elektrona, lasersku reflektometriju za merenje profila koncentracije elektrona i fluktuacije gustine elektrona itd [32]. Pored lasera, u plazmu se mogu ubacivati i neutralne čestice koje služe kao probe za praćenje različitih procesa u plazmi. Konačno, jedna od najrasprostranjenijih tehnika za merenje parametara plazme jeste spektroskopija plazme. Spektroskopija se radi u skoro svim oblastima elektromagnetnog spektra (tvrđi i meki X - zraci, UV spektroskopija, optička emisiona spektroskopija) u zavisnosti od procesa koji se posmatra [32]. U ovoj tezi, akcenat je na optičkoj emisionoj spektroskopiji plazme i na spektroskopiju u ekstremnoj ultraljubičastoj (eng Extreme Ultraviolet - EUV) oblasti spektra. U daljem tekstu biće reči o optičkoj emisionoj spektroskopiji plazme, širenju spektralnih linija i o EUV spektroskopiji plazme. Za ostale dijagnostičke metode čitalac se upućuje na odgovarajuću literaturu [32, 33].

### 2.2.1 Optička emisiona spektroskopija

Kao posledica različitih procesa u plazmi, u svakom trenutku postoje pobuđene čestice plazme (jona ili neutrala) koje emituju zračenje iz optičkog dela spektra. Ovo zračenje se

putem sistema ogledala i sočiva dovodi na ulazni slit spektrometra i pomoću odgovarajućeg detektora na njegovom izlazu se ovo zračenje snima. Rezultujuće emitovane spektralne linije nisu beskonačno uske, nego su proširene usled različitih efekata vezanih za plazmu kao i sam instrument kojim se ovo zračenje posmatra. Na prvom mestu, postoji prirodno širenje spektralne linije kao posledica Heisenberg-ove relacije neodređenosti za energiju i vreme, ali o ovom širenju u ovoj tezi neće biti reči, ali se detalji mogu naći u odgovarajućoj literaturi (npr. [34]). Pored toga, sam instrument takođe uzrokuje određeno širenje linije, koje se naziva instrumentalno širenje i obično je opisano Gauss-ovom funkcijom.

### 2.2.1.1 Doppler-ovo širenje spektralne linije

Zbog relativnog kretanja emitera u odnosu na posmatrača (u našem slučaju merni instrument), dolazi do Doppler-ovog širenja spektralne linije. Doppler-ovo širenje ustvari predstavlja kumulativni efekat Doppler-ovog pomeraja pojedinačnih emisija svakog emitera usled Doppler-ovog efekta. Relativno jednostavno može se pokazati da ovaj profil spektralne linije ima Gauss-ovu raspodelu koja je oblika [34]:

$$I(\omega) = I_0 \exp \left[ - \left( \frac{c(\omega - \omega_0)}{\omega_0 v_p} \right)^2 \right] \quad (26)$$

Gde je  $\omega_0$  centralna frekvencija na kojoj se emisija dešava, a  $v_p = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$  predstavlja najverovatniju brzinu emitera. Ukoliko se zamene sve konstante, može se doći do poznatog izraza za poluširinu spektralne linije izazvane Doppler-ovim efektom:

$$\Delta\lambda = 7.16 \cdot 10^{-7} \lambda_0 \sqrt{\frac{T}{M}} \quad (27)$$

Pri čemu je  $M$  molarna masa emitera, a  $\lambda_0$  centralna talasna dužina izražena u angstromima.

### 2.2.1.2 Stark-ovo širenje spektralnih linija

Još jedan mehanizam širenja spektralnih linija u plazmi predstavlja širenje usled pritiska. Ovo znači da zbog interakcije emitera sa okolnim česticama u plazmi dolazi do širenja i pomeranja spektralnih linija. Po tipu interakcije, može se govoriti o dva efekta. Ukoliko govorimo o interakciji emitera i električnog polja generisanog od strane slobodnih neelektrisanih čestica, onda se radi o Stark-ovom efektu [35]. Ako se radi o dipol - dipol interakciju između emitera i perturbera, onda je to van der Waals-ovo širenje spektralnih linija. U daljem toku teze, biće reči samo o Stark-ovom širenju spektralnih linija.

Stark-ovo širenje spektralne linije potiče od slobodnih naelektrisanja koja okružuju emiter, koja svojim mikropoljima modifikuju proces emisije, što rezultira pomeranjem ili širenjem spektralne linije [35]. Pionirski radovi iz teorije Stark-ovog širenja potiču od Griem-a [36–38] i Baranger-a [39–41], a kasnije su razvijene različite teorije i matematički formalizmi od kojih se većina može naći u referenci [35]. U zavisnosti od toga da li su slobodna naelektrisanja elektroni ili joni, razlikuje se matematički tretman. Elektroni se tretiraju u tzv. *sudarnoj* aproksimaciji (eng. *impact approximation*) u kojoj sudari elektrona sa emiterom uzrokuju promene u fazi emitovanog talasa što daje Lorentz-ov oblik spektralne linije [35]. Sa druge

strane, joni se tretiraju kvazistatički i njihov efekat se opisuje preko raspodele lokalnog mikropolja koju su dali Holtsmark [42], Mozer i Baranger [43], odnosno Hooper [44–46]. Uopšteno, profil linije se dobija iz Fourier-ovog transformata autokorelacione funkcije operatora dipolnog momenta  $C(t)$  [35]:

$$I(\omega) = \text{Re} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dt \exp(-i\omega t) \{C(t)\} \quad (28)$$

Vitičaste zagrade predstavljaju usrednjavanje po svim mogućim konfiguracijama mikropolja. Ova funkcija ima oblik:

$$C(t) = \text{tr}[D(0) \cdot D(t) \rho] \quad (29)$$

Gde je  $\rho$  matrica gustine, a  $D(t)$  operator dipolnog momenta u Heisenberg-ovoj slici:

$$\mathbf{D}(t) = U^\dagger(t) \mathbf{D}(0) U(t) \quad (30)$$

A  $U(t)$  predstavlja evolucionni operator koji zadovoljava Schrödinger-ovu jednačinu [35]:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = H(t) U(t) = (H_0 + q\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{R}) U(t) \quad (31)$$

Pri čemu je  $H_0$  neperturbovani hamiltonijan, a član  $q\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{R}$  predstavlja perturbaciju u dipolnoj aproksimaciji. U ovom izrazu,  $\mathbf{E}(t)$  predstavlja vremensku zavisnost mikropolja koje generišu naelektrisane čestice u plazmi.

### 2.2.1.3 Kvazistatičko širenje spektralnih linija

Ukoliko je polje statičko, onda evolucionni operator ima oblik:

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (H_0 + q\mathbf{E} \cdot \mathbf{R}) t\right) \quad (32)$$

Pri čemu je  $\mathbf{E}$  konstantan vektor električnog polja. Ukoliko napišemo da je  $\varepsilon$  svojstvena vrednost operatora  $H$ , onda u svojstvenom bazu operatora  $H$  možemo pisati da je dipolni operator oblika [35]:

$$D_{ji}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \varepsilon_j t\right) D_{ji}(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_i t\right) \quad (33)$$

Autokorelaciona funkcija se onda može napisati u obliku [35]:

$$C(t) = \sum_{ij} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_i - \varepsilon_j) t\right) \mathbf{D}_{ij} \mathbf{D}_{ji} \rho_{ii} \quad (34)$$

Svojstvene vrednosti operatora  $H$  mogu se izraziti kao suma neperturbovanog dela koji potiče od operatora  $H_0$  i interakcionog dela koji potiče od interakcije emitera sa poljem perturbera. Tako se dolazi to izraza [35]:

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k^{(0)} + \Delta\varepsilon_k \quad (35)$$

Koristeći ovaj izraz, i uvodeći notaciju da je  $\omega_{ij} = \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_i - \varepsilon_j)$  iz jednačine (34) dobijamo [35]:

$$C(t) = \sum_{ij} \exp(-i(\omega_{ij} + \Delta\omega_{ij})) \mathbf{D}_{ij} \mathbf{D}_{ji} \rho_{ii} = \sum_{ij} I_{ij} \exp(-i\omega_{ij} t) \quad (36)$$

Gde je  $I_{ij}$  intenzitet odgovarajuće spektralne komponente. Usrednjeno po svim konfiguracijama mikropolja, prema izrazu (28) dobićemo na kraju [35]:

$$I(\omega) = \sum_{ij} \{I_{ij} \operatorname{Re} \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dt \exp(-i(\omega - \omega_{ij})t)\} = \sum_{ij} \{I_{ij} \delta(\omega - \omega_{ij})\} \quad (37)$$

Ovo usrednjavanje se može obaviti na sledeći način [35]:

$$I(\omega) = \sum_{ij} \int d^3\mathbf{E} W(\mathbf{E}) I_{ij}(\mathbf{E}) \delta(\omega - \omega_{ij}(\mathbf{E})) \quad (38)$$

U gornjem izrazu,  $W(\mathbf{E})$  predstavlja verovatnoću da perturbujuće polje ima vrednost  $\mathbf{E}$ . Dakle, kako bi se izračunao konačan profil spektralne linije, moraju biti poznate svojstvene vrednosti i stanja operatora  $H$ , kao i raspodela verovatnoće mikropolja u plazmi. Prvu raspodelu verovatnoće mikropolja u plazmi je dobio Holtsmark [42], pod pretpostavkom da je plazma sastavljena od slobodnih i statistički nezavisnih čestica. Uz ovu pretpostavku, može se pokazati da je karakteristična funkcija funkcije raspodele oblika [35]:

$$A(\mathbf{k}) = \langle \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) \rangle^n \quad (39)$$

Dodatno, Holtsmark je u [42] pretpostavio da je plazma homogena i izotropna, pa je funkcija raspodele onda  $P(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \frac{d^3r}{V}$ . Ovde je  $V$  zapremina plazme, te se dobija konačan oblik karakteristične funkcije funkcije raspodele mikropolja [35]:

$$A(\mathbf{k}) = \left[ \frac{4\pi}{V} \int_V dr r^2 \frac{\sin(kE(r))}{kE(r)} \right]^n \quad (40)$$

Ukoliko se dodatno pretpostavi da je polje dato kao Coulomb-ovo polje i uvede smena  $x = \frac{kq}{4\pi\epsilon_0 r^2}$ , nakon rešavanja integrala dobija se [35]:

$$A(\mathbf{k}) = \left[ 1 - \frac{2\pi}{V} \left| \frac{qk}{4\pi\epsilon_0} \right|^{3/2} \int_0^{+\infty} \frac{dx}{x^{5/2}} \left( 1 - \frac{\sin x}{x} \right) \right]^n \quad (41)$$

U graničnom slučaju kada  $n \rightarrow \infty$ , pri čemu se gustina plazme drži konstantnom ( $V \rightarrow \infty$  kada  $n \rightarrow \infty$  tako da  $N = \frac{n}{V}$  bude konstantno) dobija se na kraju [35]:

$$A(k) = \exp[-(kF_0)^{3/2}] \quad (42)$$

Pri čemu je  $F_0$  tzv. Holtsmark-ovo polje dato sa [35]:

$$F_0 = \left( \frac{2}{5} \sqrt{2\pi} \right)^{2/3} \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \quad (43)$$

A  $r_0 = \left( \frac{3}{4\pi N} \right)^{1/3}$  predstavlja karakteristično rastojanje između dve čestice unutar plazme. Pošto  $A(\mathbf{k})$  zavisi samo od intenziteta vektora  $\mathbf{k}$ , inverznom Fourier-ovom transformacijom dobija se funkcija raspodele mikropolja unutar plazme [35]:

$$W(\mathbf{E}) = \frac{1}{8\pi^3} \int d^3\mathbf{k} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) A(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{+\infty} dk k^2 A(k) \frac{\sin(kE)}{kE} \quad (44)$$

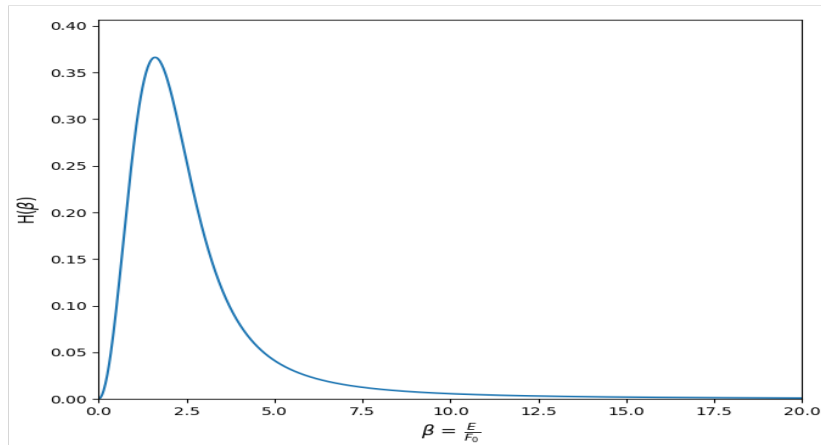
Korištenjem jednačina (42) i (44) dobijamo da je gustina verovatnoće  $P(E)$  koja zavisi samo od intenziteta mikropolja, data sa [35]:

$$P(E) = 4\pi E^2 W(E) = \frac{2}{\pi} E \int_0^{\infty} dk k \exp[-(kF_0)^{3/2}] \sin(kE) \quad (45)$$

Konačno, ako se uvede normalizovano polje  $\beta = \frac{E}{F_0}$  i  $x = kF_0$  dobijamo konačan oblik Holtsmark-ove raspodele [35]:

$$H(\beta) = \frac{2}{\pi} \beta \int_0^{+\infty} dx \exp(-x^{3/2}) x \sin(\beta x) \quad (46)$$

Ova raspodela prikazana je na slici 2. Pošto je polazna pretpostavka Holtsmark-a o plazmi kao skupu slobodnih i statistički nezavisnih čestica bila jako gruba, kasnije su Ecker i Müller [47], Baranger i Mozer [43], kao i Hooper [44–46] razvili teoriju za kvazistatičko širenje koje uzima u obzir korelacije između naelektrisanih čestica u plazmi.



Slika 2: Holtsmark-ova raspodela za različito normalizovano polje  $\beta$

Prilaz koji su koristili Baranger i Mozer jeste klaster razvoj karakteristične funkcije raspodele koristeći Mayer - Ursell-ove fnkcije [35], kao i uvođenje razlike u proračunu za visoko frekventna polja i nisko frekventna polja. Ova razlika je napravljena pomoću pretpostavke o različitim uzrocima postojanja niskofrekvenith i visokofrekvenitnih komponenti polja, gde se smatra da visoko frekventna komponenta električnog polja potiče od elektrona, a nisko frekventna komponenta polja potiče od superpozicije polja generisanog od strane jona i efekta ekraniranja od strane elektrona [35]. Autori su rezultate dali u obliku tabela za nekoliko vrednosti gustine elektrona  $N_e$  i temperature elektrona  $T_e$ . Hooper-ov pristup ima sličan matematički tretman kao kod Baranger-a i Mozer-a, ali uvodi dodatni parametar kako bi smanjio grešku odsecanja u Mayer - Ursnell-ovom razvoju karakteristične funkcije [35]. Ovaj pristup, iako formalno drugačiji od Mozer-a i Baranger-a, daje poklapanje sa Holtsmark-ovim rezultatima. [35].

### 2.2.1.4 Sudarna aproksimacija

Sudarna aproksimacija je razvijena od strane Baranger-a u seriji radova [39–41]. Ukoliko nije drugačije naglašeno, u paragrafima 2.2.1.4 i 2.2.1.5 koristiće se CGS sistem jedinica. Sudarna aproksimacija predstavlja aproksimaciju gde emiter interaguje samo sa jednim perturbirerom u analiziranom vremenskom intervalu. Drugim rečima, vreme interakcije  $\tau$  je mnogo manje od srednjeg vremena između dva sudara  $\Delta T$  [48]:

$$\tau \ll \Delta T \quad (47)$$

Autokorelaciona funkcija ima oblik [48]:

$$C(t) = tr_E[\rho_E tr_P[\mathbf{D}U^\dagger(t)\mathbf{D}U(t)]] \quad (48)$$

Pri čemu je  $tr_E$  trag u prostoru stanja emitera,  $tr_P$  je trag po svim stanjima perturbirera, dok je  $\rho_E$  je matrica gustine stanja emitera. Ukoliko je pretpostavka da se perturbireri kreću po klasičnim putanjama, trag po stanjima perturbirera može da se zameni statističkim usrednjavanjem po ansamblu, pa se dobija:

$$C(t) = tr_E[\rho_E \{\mathbf{D}U^\dagger(t)\mathbf{D}U(t)\}] \quad (49)$$

Još jedna aproksimacija koja se na ovom mestu uvodi jeste aproksimacija kompletnog sudara [48]. Pod kompletnim sudarom podrazumeva da se čitav proces interakcije završi pre emisije fotona. U tom slučaju, oblik spektralne linije može se izračunati primenom teorije atomskih sudara, tj. problem se svodi na traženje i izračunavanje matrica rasejanja  $S$ . Poslednja pretpostavka je da je spektralna linija izolovana, a to znači da nema degeneracije nivoa, odnosno nema preklapanja susednih atomskih nivoa. Tada, oblik spektralne linije  $F(\omega)$  emitovane pri prelasku elektrona sa nivoa  $i$  ( $\alpha_i J_i$ ) i  $f$  ( $\alpha_f J_f$ ) opisan je Lorentz-ovom funkcijom i može se pisati [48]:

$$I(\omega) = \rho_E(\alpha_i J_i) \frac{4\omega^4}{3c^3} F(\omega) \quad (50)$$

$$F(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} dt e^{i(\omega - \omega_{if})t} C(t) \quad (51)$$

$$C(t) = e^{-(\omega + id)t} \quad (52)$$

Što na kraju daje:

$$F(\omega) = \frac{\omega}{\pi[(\omega - \omega_{if} - d)^2 + \omega^2]} \quad (53)$$

U slučaju lokalne termodinamičke ravnoteže, gustina stanja predstavljena je Boltzmann-ovim faktorom:

$$\rho_E(\alpha_i J_i) = g_i \frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{E_i}{k_B T}} \quad (54)$$

Gde je  $g_i$  statistička težina nivoa ( $\alpha_i J_i$ ),  $E_i$  njegova energija, a  $Z(T)$  particiona funkcija na temperaturi  $T$ . Poluširina na polovini visine (HWHM) i pomeraj spektralne linije opisane profilom datim jednačinom (51) može se dobiti iz:

$$\omega + id = tr_P \left( 1 - S_{ii} S_{ff}^\dagger \right) \quad (55)$$

Trag po perturberima možemo pisati u sledećem obliku [48]:

$$tr_P = N_P \int_0^{+\infty} v f(v) dv \int_0^{+\infty} 2\pi \rho d\rho \oint \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (56)$$

Gornja jednačina napisana je u semiklasičnoj aproksimaciji, gde se perturberi kreću po klasičnim putanjama sa parametrom sudara  $\rho$ . Perturberi, čija je gustina  $N_P$  se kreću relativnom brzinom  $v$ , sa raspodelom brzina  $f(v)$  koja je opisana Maxwell-ovom funkcijom. Integral

$$\oint \frac{d\Omega}{4\pi}$$

predstavlja usrednjavanje po svim pravcima sudarajućih čestica. Prema tome, dobijamo [48]:

$$\omega + id = N_P \int_0^{+\infty} v f(v) dv \int_0^{+\infty} 2\pi \rho d\rho \langle 1 - S_{ii} S_{ff}^\dagger \rangle_{angular\ average} \quad (57)$$

Ugaono usrednjavanje može biti napisano kao linearna kombinacija  $3j$  koeficijenata i inicijalnih i finalnih stanja S matrice. Finalna formula izgleda na sledeći način [48]:

$$\begin{aligned} \omega + id = N_P \int_0^{+\infty} v f(v) dv \int_0^{+\infty} 2\pi \rho d\rho \times & \left[ \sum_{M_i} \frac{1}{2J_i + 1} \langle \alpha_i J_i M_i | T(\rho, v) | \alpha_i J_i M_i \rangle + \right. \\ & + \sum_{M_f} \frac{1}{2J_f + 1} \langle \alpha_f J_f M_f | T^\dagger(\rho, v) | \alpha_f J_f M_f \rangle - \\ & - \sum_{\substack{M_i M_i' \\ M_f M_f' \\ \mu}} (-1)^{2J_f + M_f + M_f'} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_f \\ -M_i & \mu & M_f' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_f \\ -M_i' & \mu & M_f' \end{pmatrix} \times \\ & \left. \times \langle \alpha_i J_i M_i | T(\rho, v) | \alpha_i J_i M_i' \rangle \langle \alpha_f J_f M_f | T^\dagger(\rho, v) | \alpha_f J_f M_f' \rangle \right] \quad (58) \end{aligned}$$

Gde je  $T = 1 - S$ . Konciznije zapisano, imamo da je [48]:

$$\begin{aligned} \omega + id = N_P \int_0^{+\infty} v f(v) dv \times & \left[ \left( \sigma(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha J, v) + \sigma(\alpha_f J_f \rightarrow \alpha' J', v) \right) - \right. \\ & - 2\text{Re} \int_0^{+\infty} 2\pi \rho d\rho \left[ \sum_{\substack{M_i M_i' \\ M_f M_f' \\ \mu}} (-1)^{2J_f + M_f + M_f'} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_f \\ -M_i & \mu & M_f' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_f \\ -M_i' & \mu & M_f' \end{pmatrix} \times \right. \\ & \left. \left. \times \langle \alpha_i J_i M_i | T(\rho, v) | \alpha_i J_i M_i' \rangle \langle \alpha_f J_f M_f | T^\dagger(\rho, v) | \alpha_f J_f M_f' \rangle \right] \right] \quad (59) \end{aligned}$$

Gornja jednačina nam sada pruža mogućnost interpretacije članova. Prvi član u (59) predstavlja sumu svih preseka za neelastično rasejanje pri čemu se indukuju ekscitacioni i deekscitacioni prelazi sa gornjeg nivoa emitera  $\alpha_i J_i$  ka svim nivoima perturbera  $\alpha J$ . Slično i za drugi član, koji predstavlja deekscitacije i ekscitacije sa donjeg nivoa emitera  $\alpha_f J_f$  ka svim nivoima perturbera  $\alpha' J'$ . Treći član predstavlja interferencioni član kojeg sačinjava linearna kombinacija nedijagonalnih elemenata  $T$  matrice.



### 2.2.1.5 Semiklasična perturbaciona aproksimacija (SCP)

Ova aproksimacija se zasniva na sudarnoj aproksimaciji iznesenoj u paragrafu 2.2.1.4. Pretpostavka je da se perturberi kreću po klasičnim putanjama, pri čemu se uvodi aproksimacija da na oblik trajektorije perturbbera ne utiče interakcija sa emiterom. Emiter se tretira kvantno - mehanički, a interakcija perturber - emiter se tretira pomoću vremenski zavisne perturbacione teorije. Ovak prilaz razvila je Sylvie Sachal - Brechaut u svojim radovima [27, 28], a kasnije dodatno dopunjena u saradnji sa Milanom Dimitrijevićem [49].

Prilikom postavke simulacije, ukoliko je reč o neutralnim atomima, trajektorije perturbbera su prave linije, dok su za jonske emitere te trajektorije hiperboličke [48]. Matrica  $T$  se računa tako što se matrica  $S$ , koja je oblika [48]:

$$S = \mathcal{T} \left( \exp \left( \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{V}(t) dt \right) \right) \quad (60)$$

Razvije u Dyson-ov red do drugog člana. U jednačini,  $\mathcal{T}$  predstavlja hronološki operator, a  $\tilde{V}(t)$  interakcioni potencijal za sistem emiter - perturber. Pod pretpostavkom idealne plazme, interakcioni potencijal je zapravo elektrostatički potencijal oblika [48]:

$$\tilde{V}(t) = V = \frac{(Z_E + N)Z_P e^2}{r_P} - Z_P e^2 \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_{iP}} \quad (61)$$

Ovde  $(Z_E + N)$  predstavlja naelektrisanje jezgra, a  $Z_P$  predstavlja naelektrisanje perturbbera. Rastojanje  $r_P$  je rastojanje između jezgra i perturbbera, a  $r_{iP}$  je rastojanje između  $i$ -tog elektrona emitera i perturbbera. Sledeći korak je razvoj  $1/r_{iP}$  po multipolima, pri čemu se čuvaju samo članovi u aproksimaciji dugog dometa. Razvoj je oblika [48]:

$$V = \frac{Z_E Z_P e^2}{r_P} - \sum_{\lambda=1}^{+\infty} \frac{4\pi Z_P e^2}{2\lambda + 1} \frac{1}{r_P^{\lambda+1}} \sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda} \sum_{i=1}^N r_i^\lambda Y_{\lambda\mu}(r_P) Y_{\lambda\mu}^*(r_i) \quad (62)$$

Gde je  $Y_{\lambda\mu}$  sferni harmonik. Zbog sferne simetrije, Coulomb-ov član je jedank nuli, pa dipolni i kvadrupolni član postaju bitni i oni se zadržavaju u računu. Sada se ovaj oblik potencijala vraća u Dyson-ov red i računa  $T$  matrica, pa potom se iz jednačine (59) dobija širina spektralne linije na polovini visine (FWHM) i pomeraj spektralne linije  $d$ .

Granica važenja semiklasične perturbacione aproksimacije jeste zapravo granica važenja sudarne aproksimacije. Ako se vratimo na jednačinu (47), srednje vreme između dva sudara možemo izraziti kao  $\Delta T = N_P v_{typ} \rho_{typ}^2$  [48], dok se srednje vreme interakcije može proceniti sa  $\tau = \rho_{typ} / v_{typ}$ . Ovde je  $\rho_{typ}$  srednji parametar sudara, a  $v_{typ}$  tipična srednja relativna brzina perturbbera. Kada se sve uzme u obzir dobija se uslov važenja udarne aproksimacije [48]:

$$\rho_{typ} \ll N_P^{-\frac{1}{3}} \quad (63)$$

Sve dok je zadovoljen gornji uslov, i SCP teorija daje dobre rezultate. Druga aproksimacija koja je krucijalna za teoriju jeste aproksimacija izolovane linije, tj. da ne dolazi do preklapanja perturbujućih i atomskih nivoa [48]. Ova aproksimacija postaje kritična ukoliko imamo prelaze sa visokih nivoa (sa visokim glavnim kvantnim brojem) ili na velikim gustinama, pa

srednja energija elektrona može postati uporediva sa energetske razmakom između nivoa  $\Delta E$ , što može dovesti do mešanja perturbovanih i atomskih stanja.

Tokom godina, poluširine linija i pomeraji su računati za različite emitere i različite prelaze, a svi podaci su upisani u Stark- - B bazu podataka [?], gde postoji pristup bilo kom računatom prelazu. Postojanje ovako velike baze podataka navodi na ideju da bi veštačka inteligencija i mašinsko učenje mogli da se upotrebe za novi pristup proučavanju spektralnih linija.

### 2.2.1.6 Regularnosti Stark-ovog širenja spektralnih linija

Kako Stark-ova poluširina zavisi od parametara plazme i atomske strukture, a atomska struktura emitera pokazuje razne regularnosti, za očekivati je da se to nekako manifestuje i u slučaju Stark-ovih poluširina [50]. Zbog jednostavnosti atomske strukture, alkalni i zemno - alkalni metali bi trebalo da pokazuju najizraženije regularnosti. Sa porastom složenosti atomske strukture, ove regularnosti postaju sve manje uočljive [50]. U svom preglednom radu, Wiese i Konjević [50] su podelili ove regularnosti u tri grupe:

1. regularnosti u okviru spektra emitera. Tu mogu biti regularnosti duž spektralne serije, te za kompleksnije spektre, regularnosti u okviru multipleta. Neki primeri se mogu naći u radovima [51–53]
2. regularnosti u okviru istih prelaza kod homolognih atoma [54, 55].
3. regularnosti duž izoelektronskog niza za posmatrani prelaz [56–58].

Purić zajedno sa svojim saradnicima je intenzivno proučavao regularnosti Stark-ovog efekta [59–63]. Prema tim radovima, moguće je uspostaviti vezu između Stark-ove poluširine linije  $\omega$  i jonizacionog potencijala gornjeg nivoa  $\chi = E_g - E_i$ , pri čemu je  $E_g$  energija gornjeg nivoa, a  $E_i$  predstavlja jonizacionu energiju atoma. Purić i Šćepanović [64] su u svom radu predložili opštu formulu za određivanje Stark-ove poluširine jonskih emitera na osnovu uočenih regularnosti:

$$\omega = N_e f(T) Z^c a \chi^{-b} \quad (64)$$

U gornjoj formuli  $\chi$  predstavlja potencijal jonizacije gornjeg nivoa,  $Z$  predstavlja naelektrisanje jona koje vidi elektron koji vrši prelaz. Parametri  $a$ ,  $b$  i  $c$  predstavljaju fit parametre koji ne zavise od temperature elektrona, gustine elektrona i jonizacionog potencijala. Funkcija  $f(T)$  najčešće ima oblik:

$$f(T) = A + BT^{-C} \quad (65)$$

Gde je  $C$  još jedan fit parametar. Važenje formule (64) provereno je u nizu radova Purića i saradnika [65–68], ali univerzalni fit parametri do sada nisu utvrđeni. Regularnosti duž spektralnih serija neutralnog litijuma ispitane su i u ovoj tezi primenom mašinskog učenja, a rezultati ove analize su prikazani u delu 3.

### 2.2.2 EUV spektroskopija plazme

EUV spektroskopija podrazumeva merenje zračenja iz plazme u opsegu talasnih dužina od 5 do 100 nm. Zbog velike apsorpcije zračenja od strane atoma kiseonika u ovom spektralnom delu, sva merenja kao i spektrometar moraju da budu pod vakuumom. Dodatne poteškoće predstavlja skupljajuća i fokusirajuća optika, jer samo ograničen broj materijala ima nezamisljivu refleksiju u ovom delu spektra. Iz tog razloga, koriste se sferne rešetke koje se ponašaju i kao disperzivni i kao fokusirajući element unutar VUV i EUV spektrometra. Što se samog spektrometra tiče, postoje dve konfiguracije: u jednoj konfiguraciji, ulazni slit je fiksiran tako da imamo veliki upadni ugao na rešetku zbog smanjenja gubitaka usled astigmatizama, dok se izlazni slit spektrometra pomera po krugu poluprečnika  $R$ . Ovaj krug se naziva Rowland-ov krug, a sama konfiguracija se naziva Paschen - Runge-ova konfiguracija. U drugoj konfiguraciji, ugao između upadnog i difraktovanog zraka sa rešetke je fiksiran, a umesto da se pomera izlazni slit, rešetka se rotira tako da se omogućuje jednostavniji dizajn spektrometra. Ovakva konfiguracija EUV spektrometra se naziva Seya - Namioka konfiguracija. U eksperimentalnom delu ovog rada korišten je spektrometar na bazi Rowland-ovog kruga, pa će o njemu biti više reči u nastavku, dok je druga konstrukcija detaljno prikazana u radu [69].

Rowland je u svom radu pokazao da ako se rešetka ureže na sfernom ogledalu, ona može služiti i kao sopstveni kolimator te se spektrometar svodi na tri elementa: slit, rešetku i detektor [70]. Dokaz ovog koncepta ogleda se u činjenici da ako rešetka i slit leže na krugu čiji je prečnik jednak poluprečniku krivine rešetke, pri čemu je rešetka tangenta na krug, spektralne linije su u fokusu na krugu. Jednačina rešetke u tom slučaju ista je kao i za ravnu rešetku, što je pokazano i u detaljnim teorijskim razmatranjima Beutler-a o konkavnoj rešetki izloženim u [71]. Dakle, jednačina rešetke postaje:

$$m\lambda = d(\sin \alpha + \sin \beta) \quad (66)$$

Gde je  $d$  konstanta rešetke,  $\alpha$  predstavlja upadni ugao a  $\beta$  predstavlja difraktovani ugao. Ono što se menja u odnosu na slučaj ravne difrakcione rešetke jeste izraz za recipročnu disperziju, koji postaje [70]:

$$\frac{d\lambda}{d\beta} = \frac{1}{R} \frac{d\lambda}{d\beta} = \frac{d \cos \beta}{R} \quad (67)$$

Iz jednačine (67) da veći radius rešetke daje bolju rezoluciju spektrometra, a standardni prečnici kruga su 1, 3, 6 ili 6.6 m. Povećanje radijusa rešetke osim što otežava proces proizvodnje same rešetke, utiče i na povećanje gabarita, odnosno smanjenje svetlosne moći instrumenta, pa se danas kao kompromis koriste standardne dimenzije rešetki od 0.5, 1 i 3 m.

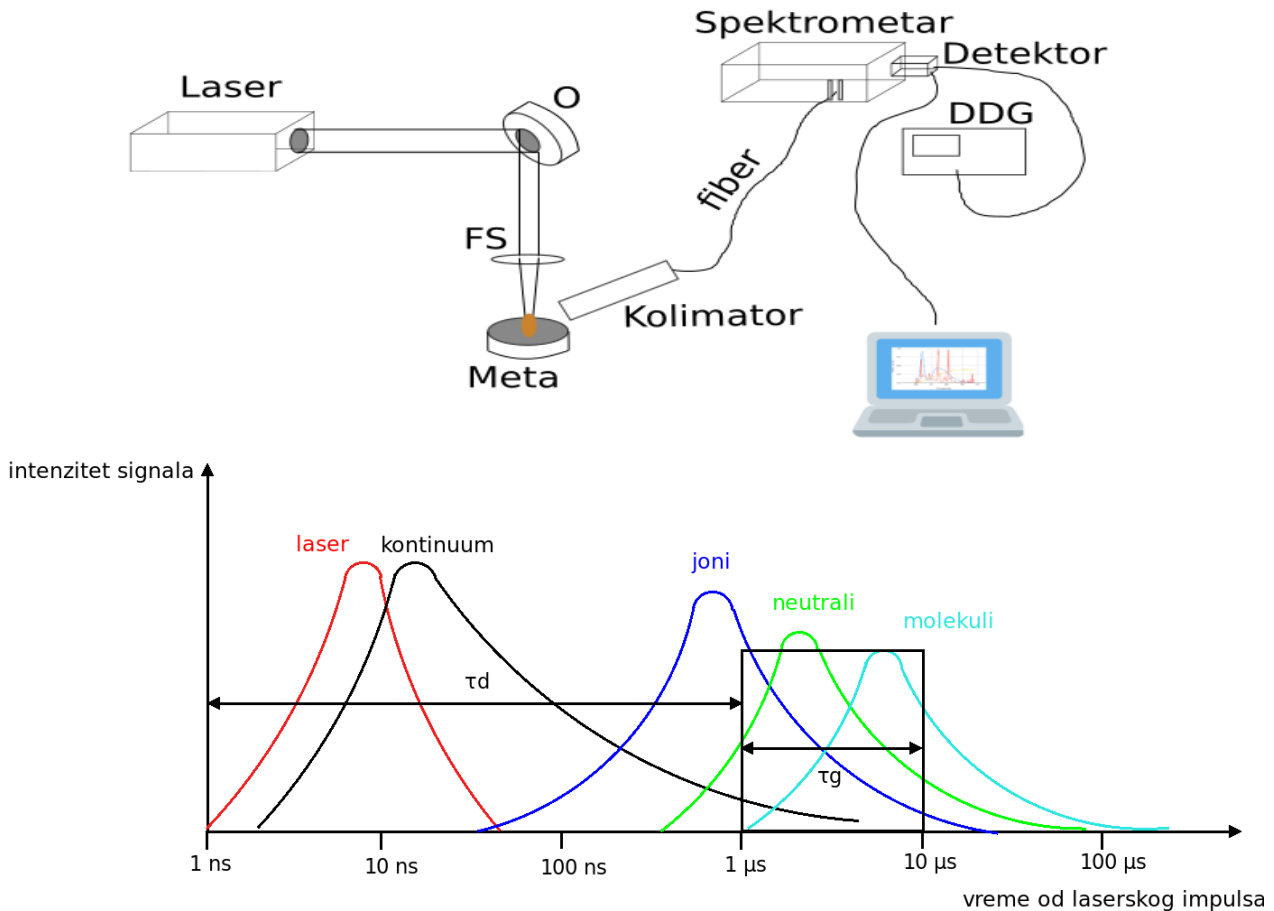
Astigmatizam predstavlja glavni izvor gubitaka kod sfernih difrakcionih rešetki, i prema Beutler-u, dat je izrazom [71]:

$$z' = l \left( \sin^2 \beta + \sin^2 \alpha \frac{\cos \beta}{\cos \alpha} \right) \quad (68)$$

Ovde  $z'$  predstavlja dužinu lika usled astigmatizma nakon fokusiranja tačkastog izvora, a  $l$  predstavlja visinu ureza na rešetci. Da bi ovi gubici bili manji, upadni ugao zraka mora biti manji.

## 2.3 Laserski indukovana plazma

Kako je u ovoj doktorskoj disertaciji korištena metoda laserski indukovanoj proboja u svrhu kvantitativne analize uzoraka čelika, u ovom poglavlju biće objašnjene osnove interakcije lasera sa materijalom i proces formiranja laserski indukovanih plazmi. Potom će biti date osnovne dijagnostičke metode laserski indukovanih plazmi, dok će na kraju biti opisana metoda laserski indukovanoj proboja kao analitičke tehnike koja se može koristiti kao tehnika za kvantitativnu analizu.



Slika 3: Tipična eksperimentalna postavka spektroskopije laserski indukovanoj proboja (gore) i vremenska zavisnost evolucije spektra i pojave emisionih linija u laserski indukovanoj plazmi (dole)

Laserski indukovane plazme se mogu proizvesti tako što se laserski impuls velike snage fokusira na ispitivanu metu. Nastala plazma se potom vrlo često analizira spektroskopskim putem, u cilju određivanja elementarnog sastava ispitivanog uzorka [72]. Dalje se na osnovu različitih hemometrijskih metoda mogu odrediti i relativne koncentracije elemenata u uzorku. Ova analitička metoda je dobila ime spektroskopija laserski indukovanoj proboja (eng. Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS)). Tipična LIBS postavka prikazana je na slici 3 gore. Laserski impuls preko sistema ogledala O i sočiva FS se fokusira na metu, gde se usled interakcije jakog laserskog zračenja sa metom stvara plazma na površini mete. Svetlost emitovana iz plazme se potom pomoću sočiva projektuje na ulazni slit spektrometra, ili se vodi

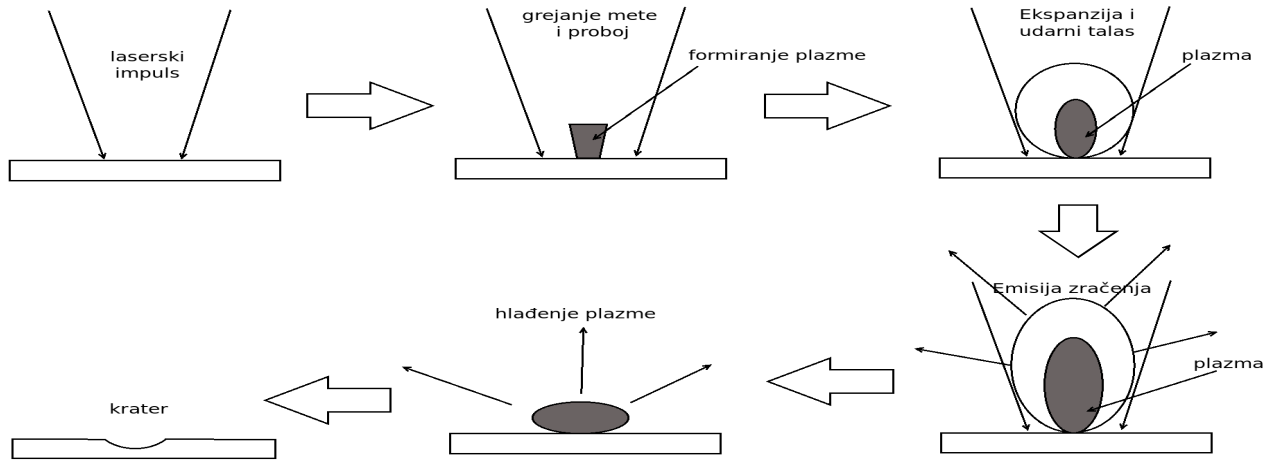
pomoću kolimatora i fiber optičkog kabla direktno na ulazni slit spektrometra kada prostorna raspodela emitovanog zračenja nije od interesa. Kao detektor se obično koristi iCCD ili CCD kamera često sinhronizovana pomoću elektronike za kašnjenje, označene sa DDG (eng. *Digital Delay Generator*) na slici postavke. Signal sa kamere se dalje preko kompjuterskog softvera snima i šalje se za dalju obradu.

Usled nehomogenosti uzorka i drugih faktora koji utiču na nereproducibilnost interackije laser-meta, a u cilju dobijanja kvalitetnijeg signala u smislu odnosa signal-šum, često se signali dobijeni LIBS tehnikom akumuliraju ili usrednjavaju [72]. Pošto laserski indukovana plazma predstavlja impulsni izvor svetlosti, njena vremenska evolucija praćena je veoma brzim promenama svetlosnog signala čiji se intenzitet i trajanje hronološki može objasniti dominantnim uticajima pojedinačnih faktora, što je u pojednostavljenoj formi prikazano na slici 3 dole. U početnim vremenima, emisionim spektrom dominira kontinuum koji nastaje usljed zakočnog zračenja i rekombinacionih procesa u plazmi [72]. Da ovaj kontinuum ne bi prekrpio koristan signal koji dolazi od elemenata zastupljenih u tragovima, u LIBS merenjima je karakteristično da se radi početno kašnjenje od 1  $\mu$ s. Nakon što prođe par stotina nanosekundi, dolazi do pojave emisije jonskih linija, koje nestaju sa opadanjem temperature u plazmi, i posleđično, dolazi do pojave emisije linija neutralnih elemenata na oko 5 do 10  $\mu$ s od kraja laserskog impulsa. Na kraju, nakon što temperatura dovoljno opadne, dolazi do pojave molekulskih traka. Zbog opisane vremenske dinamike emisije laserski proizvedene plazme, za vremenski nerazložena merenja, tipično postoje dva vremena karakteristična za snimanje spektra. Prvo vreme,  $\tau_d$  predstavlja vreme koje prođe od laserskog impulsa do aktiviranja senzora i početka snimanja spektra (eng. *delay time*) i  $\tau_g$  (eng. *gate*) koje predstavlja vreme ekspozicije kamere i u zavisnosti od detektora može biti reda nekoliko mikrosekundi (iCCD kamere) do nekoliko milisekundi (obično CCD kamere).

### 2.3.1 Proces formiranja laserski indukovane plazme

Proces formiranja laserski indukovane plazme i dinamika njenog razvoja prikazani su na slici 4. Prilikom interakcije laserskog zračenja sa metom, slobodni elektroni koji nastaju u nelinearnim procesima interakcije lasera i okolnog gasa (npr. višefotonskom apsorpcijom), interaguju sa laserskim zrakom i služe kao inicijalni absorberi energije [73]. Fotonska apsorpcija se najčešće vrši putem inverznog zakočnog zračenja [72]. Ovi elektroni se između dva sudara ubrzavaju pod dejstvom električnog polja laserskog zraka i u sudarima sa okolnim česticama kreiraju nove elektrone i jone, koji dalje mogu da interaguju sa električnim poljem i da budu ubrzani [72]. Ovo pravi lavinski efekat ubrzavanja i produkcije novih elektrona i jona koji su sposobni da dalje ekscituju ili jonizuju konstituente plazme.

Nakon uspostavljanja plazme, dolazi do njene ekspanzije u radialnom pravcu brzinama reda veličine nekoliko kilometara u sekundi. Najveću ekspanziju plazma ima u pravcu fokusirajućeg sočiva, pošto je najveći dotok energije u plazmu iz tog pravca [72]. Uspostavljanje plazme je obično praćeno jakim praskom usljed prostirujućeg udarnog talasa koji dolazi iz fokalne zapremine. Upadni laserski zrak veoma brzo greje i topi materijal sa kojim interaguje, zatim materijal mete isparava u sloj odmah iznad površine mete gde ga dalje zagreva laserski zrak. Sa porastom gustine elektrona u plazmi, sve veći deo laserskog zraka ostaje apsorbovan u plazmi dok manji deo prolazi do površine mete. U jednom trenutku, čitav laserski snop je apsorbovan od strane plazme, meta je ekranirana a plazma se širi u pravcu laserskog snopa.

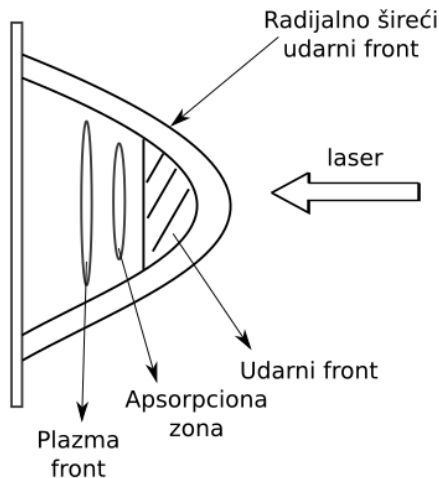


Slika 4: Vremenska zavisnost evolucije laserski indukovane plazme.

Kritična gustina za ovaj proces data je izrazom:

$$n_c \sim \left(\frac{10^{21}}{\lambda^2}\right) \text{ cm}^{-3} \quad (69)$$

Pri čemu je  $\lambda$  talasna dužina lasera izražena u mikronima. U procesu eskpanzije plazme bitne su tri oblasti: plazma front, udarni front i apsorpcioni front. Ove zone prikazane su na slici 5. Pri najmanjim intenzitetima, udarni front je ispred apsorpcionog i plazma fronta koji su kuplovani [73]. Akumulirana energija udarnog talasa odmah iza udarnog fronta kao i zračenje iz plazme su potrebni kako bi gurali apsorpcionu zonu ka laserskom zraku.



Slika 5: Dijagram ekspanzije plazme na čvrstim metama

U ovom režimu, sve tri oblasti spojene su u jednu i teško ih je razlikovati [73]. Laserski indukovane plazme, kada je iradijansa lasera jako blizu granice za formiranje plazme, dobro je opisana teorijom laserski podržanog detonacionog talasa, dok je pri većim iradijansama bolje opisana sa

modelom laserski podržanog radiacionog talasa. Okolni gas takođe ima uticaj na prostiranje i konfiniranje radijalno ekspandujuće plazme tako što usporava širenje plazme, a pritisak okolnog gasa utiče na veličinu plazme. Pri jako niskim pritiscima (vakuum), plazma ima jako male dimenzije, dok sa povećanjem pritiska raste i zapremina ekspandujuće plazme [73]. Posle nekog pritiska, veličina plazme opet kreće da opada kako se približavamo atmosferskom pritisku. Takođe, pritisak gasa ima uticaj i na vreme trajanja emisije spektralnih linija iz plazme. Na atmosferskom pritisku, kao i u vakuumu, plazma traje kraće, dok na niskim pritiscima reda desetak mbar emisija spektralnih linija iz plazme može trajati i do 100  $\mu$ s.

### 2.3.2 Tipične vrednosti parametara laserski indukovanih plazmi

Laserski indukovane plazme se odlikuju sa relativno velikim gustinama elektrona i niskim temperaturama elektrona. Jedna od glavnih dijagnostičkih metoda za određivanje gustine elektrona u laserski indukovanim plazmama jeste optička emisiona spektroskopija. Najčešće korištene linije su vodonikove linije (najčešće  $H_\alpha$  ili  $H_\beta$ ) ili linije okolnog gasa, ukoliko se meta nalazi u kontrolisanoj atmosferi nekog pozadinskog gasa. To mogu biti npr. neke helijumove linije (kao što su He I 447.1 nm ili He II 468.6 nm). U nekim slučajevima može se koristiti i neka spektralna linija materijala mete, ukoliko sama meta poseduje linije pogodno za određivanje gustine elektrona spektroskopskim putem. Glavna prepreka određivanju gustine elektrona u plazmi spektroskopskim putem jeste samoapsorpcija spektralnih linija u plazmi, što je često slučaj za laserski indukovane plazme koje su optički debele za emitovanu svetlost. Provera optičke debljine plazme može se raditi eksperimentalno [74] korištenjem konkavnog ogledala postavljenog na rastojanju od dve žižne daljine od plazme. Poredi se intenzitet spektralne linije sa i bez ogledala i ukoliko je taj odnos konstantan i približno jednak 2, linija nije samoapsorbovana. Drugi način je teorijskim putem iz odnosa intenziteta linija unutar istog multipleta [75]. Ako su ti odnosi približno isti, plazma je optički tanka za datu spektralnu liniju. Često se samoapsorpcija primećuje i tako što su eksperimentalne linije u zasićenju i imaju tzv. *flat-top* profil. U izraženim slučajevima samoapsorpcije, spektralna linija može da ima i rupu u centru, pa kažemo da je linija samo obrnuta (eng. *self-reversed*). Tipične vrednosti gustine elektrona za laserski indukovanu plazmu kreću se u intervalu od  $N_e \sim 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  za mala vremena kašnjenja  $\tau_d$  do  $N_e \sim 1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  za velika vremena kašnjenja.

Određivanje temperature elektrona u laserski indukovanim plazmama može se takođe vršiti spektroskopskim putem, a najčešće se koriste dve metode: Boltzmann plot metoda i korištenje odnosa intenziteta emitovanih spektralnih linija. Oba metoda zasnivaju se na osnovnoj pretpostavci o postojanju lokalne termodinamičke ravnoteže (LTR). Intenzitet emitovane spektralne linije iz plazme koja nastaje prilikom prelaska elektrona sa nivoa  $i$  na nivo  $j$  možemo napisati u obliku:

$$I_{ij} = h\nu_{ij}n_iA_{ij} \quad (70)$$

Ovde je  $h$  Planck-ova konstanta,  $\nu_{ij}$  frekvencija emitovanog fotona,  $n_i$  je populacija gornjeg energetskog nivoa a  $A_{ij}$  je Einstein-ov koeficijent za spontanu emisiju za posmatrani prelaz. Sada se iskoristi pretpostavljeni uslov važenja LTR i uzme se da populacija nivoa  $i$  prati Boltzmann-ovu raspodelu po nivoima:

$$I_{ij} = h \frac{c}{\lambda_{ij}} \frac{g_i}{g_j} n_j e^{-\frac{E_i - E_j}{kT}} \quad (71)$$

Ako se posmatra naseljenost u odnosu na osnovni nivo, gornja jednačina postaje:

$$I_{ij} = h \frac{c}{\lambda_{ij}} n_0 \frac{g_i A_{ij}}{Z} e^{-\frac{E_i}{kT}} \quad (72)$$

Logaritmovanjem i sređivanjem jednačine dobija se:

$$\ln \frac{I_{ij} \lambda_{ij}}{g_i A_{ij}} = \ln \frac{h c n_0}{Z} - \frac{E_i}{kT} \quad (73)$$

Odakle se uočava da se merenjem relativnih inteziteta više linija, ukoliko je zadovoljena Boltzmann-ova raspodela, dobija linearna zavisnost  $\ln \frac{I_{ij} \lambda_{ij}}{g_i A_{ij}}$  od  $E_i$  i moguće je odrediti temperaturu elektrona iz nagiba ove linije. Metoda je tačnija što su bolje određeni relativni intenziteti linija, što su bolje određeni ili izračunati Einstein-ovi koeficijenti i što je veći razmak između energija gornjih nivoa korištenih prelaza.

Druga metoda određivanja temperature elektrona predstavlja odnos intenziteta dve spektralne linije istog elementa. Ukoliko je zadovoljen uslov LTR i ako su populacije nivoa date Boltzmannovom raspodelom, onda je odnos intenziteta dat sa [73]:

$$\frac{I_{ij}}{I_{km}} = \frac{\lambda_{km} g_{ij} A_{ij}}{\lambda_{ij} g_{km} A_{km}} e^{-\frac{E_{ij} - E_{km}}{kT}} \quad (74)$$

Metoda je tačnija što je energijska razlika između ove dve linije veća. Upravo iz tog razloga, jako često se biraju linije koje predstavljaju isti prelaz za dva sukcesivna jonska stanja. Još jedan metod procene, koji najčešće daje vibracionu ili rotacionu temperaturu sa periferije plazme jeste snimanje molekulskih traka u kasnijim vremenima plazme. Ukoliko postoji LTR, sve tri merene temperature moraju da se slažu u razumnom opsegu greške. Tipične elektronske temperature za laserski indukovane plazme zavise od uslova. Prosečne elektronske temperature za laserski proizvedene plazme na atmosferskom pritisku su reda veličine od 8000 K do 12 000 K. Na sniženim pritiscima, u kontrolisanoj atmosferi sa pozadinskim gasom, temperature gasa se kreću od 20 000 K pri malim vremenima kašnjenja  $\tau_d$  do par hiljada kelvina za kasnija vremena kašnjenja. Bitno je napomenuti da su navedene temperature zapravo aproksimacija temeperature elektrona ekscitacionom temperaturom, a prava temperatura elektrona bi se dobila npr iz Thomson-ovog rasejanja.

### 2.3.3 Spektroskopija laserski indukovanog proboja (LIBS) kao analitička metoda

U poslednjih dvadesetak godina spektroskopija laserski indukovanog proboja se jako često primenjuje kao analitička metoda kao potencijala zamena za složenije i skuplje metode (npr ICP - Masena spektroskopija). Koristi se kao kvalitativna ali i kao kvantitativna analitička metoda. Neke glavne prednosti LIBSa u odnosu na druge analitičke metode su [72]:

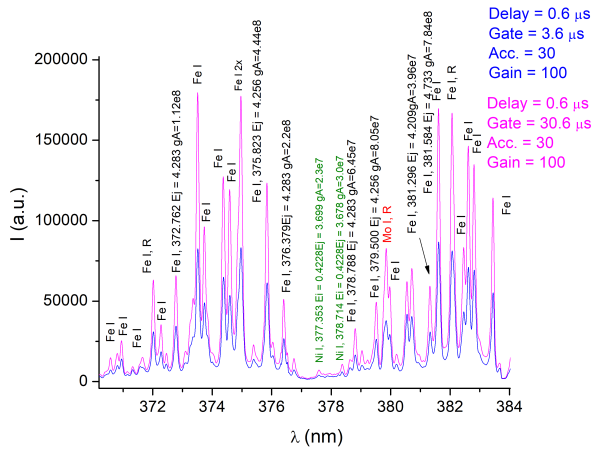
1. mogućnost detektovanja svih elemenata prisutnih u uzorku
2. jednostavnost
3. Brza analiza kao i analiza u realnom vremenu
4. minimalna priprema uzorka



## 5. *in-situ* analiza koja zahteva samo optički pristup uzorku

Prilikom evaluacije LIBSa kao analitičke metode, obično se procenjuju sledeći analitički parametri: granice detekcije, preciznost i tačnost, a u nekim slučajevima i selektivnost i osetljivost [73]. Prilikom snimanja spektra laserski indukovanog proboja, određuju se talasne dužine analita i pripadajući intenziteti. Primer LIBS spektra dat je na slici 6. Posle identifikacije linija i izdvajanja linija pogodnih za kvantitativnu ili kvalitativnu analizu pristupa se istim nekom od narednih metoda.

Prva metoda predstavlja tzv. univarijantnu metodu ili metodu kalibracione krive. U ovom postupku, prvo se pristupa snimanju standardnih uzoraka i intenzitet jedne ili više spektralnih linija se povezuje sa koncentracijom analita ukoliko je slučaj o kvantitativnoj analizi. Ovo se ponavlja za svaki analit od interesa i prave se kalibracione krive koje kasnije služe za određivanje koncentracije analita u ispitivanom uzorku. U idealnom slučaju, ova kalibraciona kriva će ustvari biti prava linija koja prolazi kroz koordinatni početak [73].



Slika 6: Snimljeni LIBS spektar čelika, gde je vreme kašnjenja  $\tau_d = 0.6 \mu$ s a vreme ekspozicije kamere u jednom slučaju iznosi  $\tau_g = 3 \mu$ s a u drugom  $\tau_g = 30 \mu$ s. Ovako indentifikovane spektralne linije analita se dalje koriste u analitičkim kvantitativnim i kvalitativnim metodama.

(jedan spektar LIBSa može sadržati hiljade kanala), analizu pravilnosti u podacima (eng. pattern analysis) itd. Mogućnost analiziranja više varijabli u istom trenutku omogućava ubrzanje analiza i poboljšava kvalitet dobijenih rezultata [73]. Najčešće korišćene hemometrijske metode za kvantitativnu analizu jesu regresija analizom glavnih komponenti (eng. *Principal Component Regression* (PCR)), parcijalni metod najmanjih kvadrata (eng. *Partial Least Squares* (PLS)), metoda potpornih vektora (eng. *Support Vector Machine* (SVM)) itd.

Multivarijantne metode predstavljaju uvod u upotrebu alata mašinskog učenja i veštačke inteligencije koja je danas jako zastupljena u kvantitativnoj i kvalitativnoj analizi LIBS

Međutim, odstupanja od linearnog grafička su moguća, a najčešći uzorci mogu biti samoapsorpcija spektralne linije ili netačno određivanje intenziteta linije. Samoapsorpcija je najčešće najviše izražena u oblasti visokih koncentracija analita, gde emisija iz unutrašnjih slojeva plazme biva apsorbovana u spoljašnjim slojevima plazme, dajući ponekad samo - obrnutu liniju kao rezultat. Efekat je najizraženiji za spektralne linije čiji donji energetski nivo je zapravo osnovni nivo (rezonantni prelazi) ili je jako blizak osnovnom nivou. Zbog svega ovoga, treba biti jako pažljiv pri izboru analitičkih linija ispitivanog analita kako bi se dobila što bolja i tačnija kalibraciona kriva. Drugi metod jesu multivarijantne metode gde se koriste hemometrijske metode [73]. Hemometrijske metode predstavljaju upotrebu statističkih modela i algoritama u analitičkoj hemiji u cilju ubrzanja analize kompleksih uzoraka. Upotreba ovih metoda je korišćena za klasterovanje, redukciju dimenzionalnosti podataka

spektara. Ključna ideja na kojoj se bazira primena alata mašinskog učenja i veštačke inteligencije u LIBS-u je snimanje velikog broja standardnih uzoraka sa različitim koncentracijama, i obučavanje modela na tako dobijenoj bazi podataka. Jednom obučeni modeli mogu se upotrebljavati za brzu analizu nepoznatih uzoraka bez potrebe preračunavanja koncentracije za svaki element posebno.

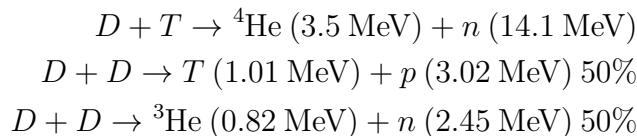
Mana ovog pristupa, jeste što je neophodno snimiti veliki broj spektara da bi se napravila dovoljno kvalitetna baza za obučavanje modela. Pošto i karakteristike instrumenta i sama merenja mogu da variraju od dana do dana [73], teško je i naporno praviti ovakve baze od nule za svako merenje. Ove poteškoće predstavljale su motivaciju da se u ovom radu ispita do koje mere se već snimljena baza može iskoristiti za obučavanje modela koji će kasnije biti korišten za ispitivanje nepoznatih uzoraka, a čiji je spektar snimljen sa sličnom aparaturom u drugoj laboratoriji.

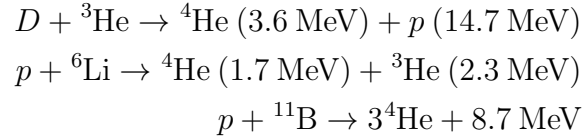
## 2.4 Visokotemperaturne plazme (fuzione plazme)

Visokotemperaturne plazme predstavljaju plazme u kojima temperature jona i elektrona dostižu i do nekoliko keV. Na Zemlji, to su jedino fuzione plazme. Pre nego što se dođe do plazmi na Zemlji, biće dat kratak uvod u reakcije fuzije koje se odvijaju u zvezdama. Kao glavni primer, biće uzeto Sunce koje je nama najbliža zvezda i predstavlja osnovnu pokretačku energiju svih bioloških procesa na Zemlji. Fuzija predstavlja reakciju spajanja dva lakša jezgra u teže jezgro, pri čemu se oslobađa energija jednaka energiji veze i postiže stabilnija konfiguracija. Da bi se desila reakcija fuzije, reaktanti (najčešće su to pozitivni joni) moraju da prevaziđu Coulomb-ovu barijeru da bi nuklearne sile počele da deluju. Ako uzmemo za primer deuterijum i tritijum koji će biti glavno gorivo u prvim fuzionim reaktorima, pri čemu je  $r_m = 3.7 \times 10^{-15}$  m tipičan radius jezgra dobićemo vrednost potrebne energije:

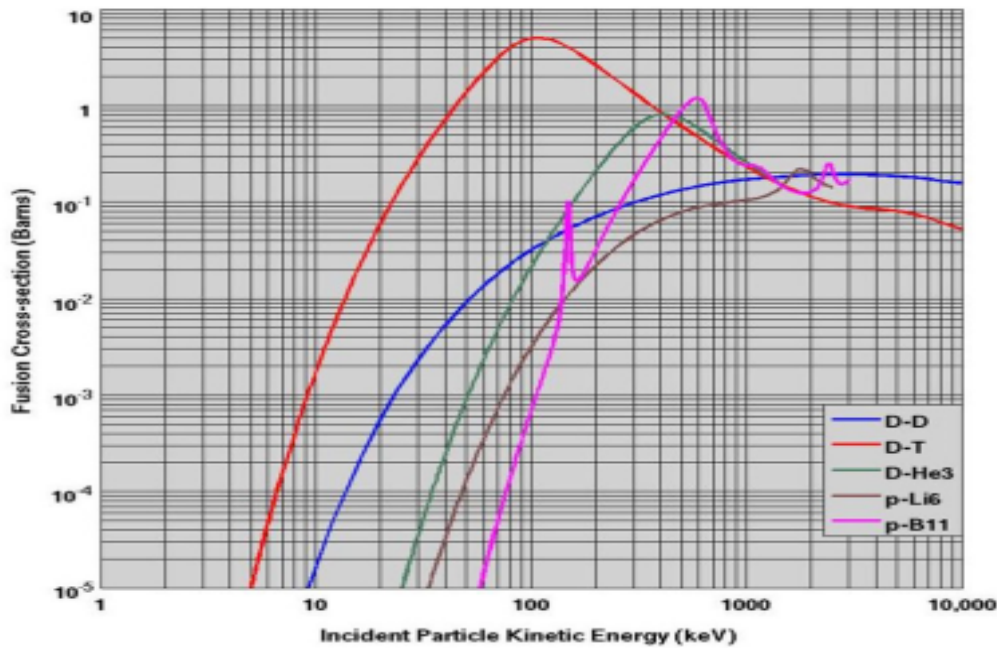
$$U = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_m} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_m} = 0.4 \text{ MeV} \quad (75)$$

Ovo nije toliko velika energija i ostvariva je u većini modernih akceleratora. Međutim, kao što je naglašeno u poglavlju 2.1.2 videli smo da presek za sudar opada sa četvrtim stepenom relativne brzine, stoga ukoliko se ispali snop visokoenergetskih čestica na metu, većina čestica iz snopa bi se samo elastično rasejala bez da stupe u reakciju fuzije [76]. Druga mogućnost za pokretanje reakcije fuzije jeste zagrevanje gasne smeše deuterijuma i tritijuma tako da sada svaka čestica mora da ima energiju od 0.25 MeV. To znači da temperatura gasa mora da bude  $E = kT \Rightarrow T = \frac{0.25 \text{ MeV}}{8.6 \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}} \simeq 3 \times 10^9$  K. Dakle, potrebno je dostići temperaturu od nekoliko milijardi stepeni celzijusa. Ova temperatura ostvariva je u Suncu zbog njegove ogromne mase, pa je plazma konfinirana gravitacionim poljem. Neke od razmatranih reakcija fuzije na Zemlji su sledeće [32]:





Odluka da se fuzija pokuša ostvariti u reakcijama koje uključuju deuterijum i tritijum (prva reakcija) doneta je na osnovu izračunatih preseka za reakciju prikazanih na slici 7. Vidi se da D - T reakcija ima maksimum na najnižoj temperaturi i takođe ima najveću verovatnoću od svih reakcija. Mana ove reakcije jeste što u svakoj reakciji nastaje neutron koji može da bude apsorbovan na površini zida reaktora. ApSORpcija neutrona negativno utiče na životni vek komponenti zida reaktora jer apSORpcijom neutrona metali postaju krći i radioaktivni [32]. Zbog toga, za drugu generaciju reaktora očekuje se da će raditi sa drugim tipovima reakcija koje ne uključuju neutrone. Ipak, mora se uzeti u obzir i nivo poteškoća u njihovom ostvarivanju.



Slika 7: Presek za reakcije za različite razmatrane fuzione reakcije. Verovatnoća za D - T reakciju dostiže maksimum pri najnižoj temperaturi. Slika preuzeta iz [32]

Pod pretpostavkom da reaktor radi sa D - T mešavinom u odnosu 50 % - 50 % Lawson [32] je izveo kriterijum za minimalnu temperaturu rada reaktora. Prvo se definiše dobitak u snazi iz fuzionih reakcija  $Q$  kao  $Q = \frac{P_{fusion}}{P_{aux}}$ . Kako bi fuzija bila komercijalno isplativa, minimalan uslov je  $Q > 1$ . Balans gubitaka i grejanja plazme daje [32]:

$$P_h = P_{aux} + P_\alpha - P_{Br} = P_{trans} + \frac{dW_p}{dt} \quad (76)$$

Pri čemu je  $P_{aux}$  grejanje plazme spoljašnjim metodama (ubrizgavanje neutralnih čestica, elektron - ciklotronsko grejanje itd.),  $P_\alpha$  je grejanje plazme kroz sudare sa  $\alpha$  česticama,  $P_{Br}$

su gubici usled zakočnog zračenja,  $P_{trans}$  su gubici usled različitih transportnih procesa a  $\frac{dW_p}{dt}$  predstavlja promenu termalne energije plazme. Dalje,  $P_{alpha}$  i  $P_{Br}$  možemo proceniti kao [32]:

$$P_\alpha = n_D n_T \langle \sigma v \rangle E_\alpha V_p = \frac{n_e^2 \langle \sigma v \rangle E_\alpha V_p}{4} \quad (77)$$

$$P_{Br} = C_B T_e^{\frac{1}{2}} n_e^2 V_p \quad (78)$$

Gde je pretpostavljeno da je  $n_D = n_T = n_e$ , a  $\langle \sigma v \rangle$  predstavlja srednji presek za sudar reaktanta,  $E_\alpha$  je energija  $\alpha$  čestice,  $V_p$  je zapremina plazme, a  $W_p = 3n_e k T_e V_p$  je termalna energija plazme. Transportni gubici procenjuje se kroz parametar vremena konfiniranja energije  $\tau_E$  definisanim sa:

$$\tau_E = \frac{W_p}{(P_h - \frac{dW_p}{dt})} \quad (79)$$

Jednačina (76) sada se može napisati kao [32]:

$$n_e^2 \langle \sigma v \rangle E_\alpha \frac{Q+5}{4Q} - C_B T_e^{\frac{1}{2}} n_e^2 = \frac{3n_e k T_e}{\tau_E} + \frac{d}{dt} (3n_e k T_e) \quad (80)$$

U stacionarnom stanju,  $d/dt = 0$ , dobijamo da je [32]:

$$n_e \tau_E = \frac{3k T_e}{\frac{\langle \sigma v \rangle E_\alpha (Q+5)}{4Q} - C_B T_e^{\frac{1}{2}}} \quad (81)$$

Postavljanjem  $Q = 1$ , dobijamo Lawsonov kriterijum koji je dat sa:

$$n_e \tau_E = \frac{3k T_e}{\frac{3\langle \sigma v \rangle E_\alpha}{2} - C_B T_e^{\frac{1}{2}}} \quad (82)$$

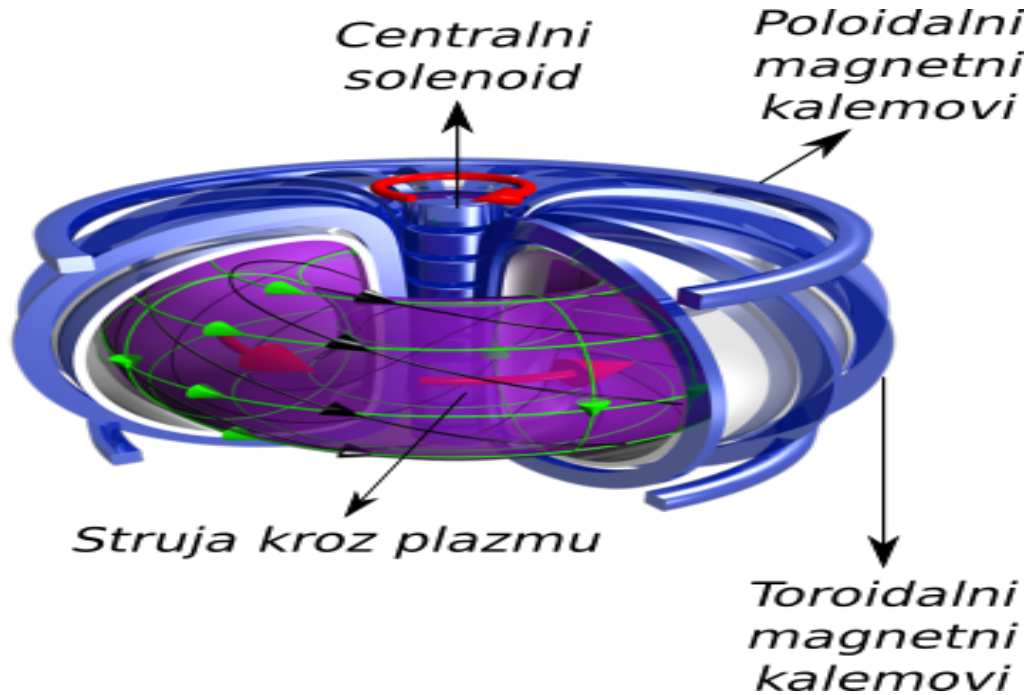
Za  $T_e = 15keV$ , pri čemu  $\langle \sigma v \rangle \sim T_e^2$ , Lawsonov kriterijum postaje:

$$n_e T_e \tau_E > 1.5 \times 10^{21} \text{ keV} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-3} \quad (83)$$

Izraz (83) predstavlja uslov da fuzioni rektor proizvede istu količinu energije koja je uložena u njegov rad, pod pretpostavkom da su najdominantniji gubici oni usled zakočnog zračenja. U ostalim slučajevima, članovi koji uračunavaju ostale gubitke mogu se pojaviti u imeniocu jednačine (82) (npr. ciklotronska emisija) [32].

#### 2.4.1 Načini konfiniranja visokotemperaturne plazme

U praktičnim pokušajima ostvarivanja fuzije na Zemlji, trenutno se razmatraju i u upotrebi su dva načina konfiniranja visokotemperaturne plazme. Jedan način konfiniranja je *magnetno konfiniranje plazme*, gde se plazma konfinira tako što se konfiguracijom magnetnog polja oko plazme postižu zatvorene trajektorije čestica i stabilne orbite. Drugi način konfiniranja je *inercijalno konfiniranje plazme*, gde se upotrebom snažnih laserskih zraka postiže implozija peleta sa gorivom i konfiniranje plazme. Podaci korišćeni u ovoj tezi dobijeni



Slika 8: Tokamak. Centralni solenoid indukuje struju kroz plazmu, koja potom konfinira plazmu svojim magnetnim poljem. Pošto magnetno polje indukovano protokom struje kroz plazmu nije dovoljno za stabilno konfiniranje plazme, dodatno se koriste toroidalni kalemovi kao i poloidalni magnetni kalemovi za pozicioniranje plazme.

su u uređaju koji radi na principu magnetnog konfiniranja plazme, pa će samo o ovom konfiniranju biti reči u nastavku teksta. Više o inercijalnom konfiniranju može se pročitati u predloženoj literaturi [32, 77].

Magnetno konfiniranje se može realizovati pomoću dva uređaja, *tokamak* i *stelerator*. Tokamak predstavlja uređaj koji suštinski funkcioniše kao transformator i prikazan je na slici 8. Oko centralnog solenoida, postavljen je torusni vakuumski sud u kojem se konfinira plazma. Puštanjem struje kroz centralni solenoid, što predstavlja primar transformatora, indukuje se struja kroz plazmu koja predstavlja sekundar transformatora. Struja kroz plazmu stvara pinč efekat, koji konfinira plazmu. Međutim, ovo polje samo po sebi nije dovoljno da bi plazma bila stabilno konfinirana, jer magnetno polje same struje kroz plazmu dovodi do razdvajanja pozitivnih i negativnih naelektrisanja i pojave električnog polja koji potom uzrokuje  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  drift jona i elektrona ka zidu reaktora. Da bi se to sprečilo, kao i da bi se vršila korekcija oblika i pozicije plazme u reaktoru koriste se toroidalni i poloidalni magneti. Zajedničkim delovanjem ovih magneta postiže se spiralna trajektorija čestice zatvorene unutar mašine, odnosno postiže se konfiniranje čestica unutar uređaja [78]. Kao mera stabilnosti reaktora, uvedena je veličina koja se naziva faktor sigurnosti  $q_s$  čija nam vrednost govori koliko krugova čestica u plazmi napravi toroidalno dok se njena trajektorija ne zatvori poloidalno. Definisan je kao [79]:

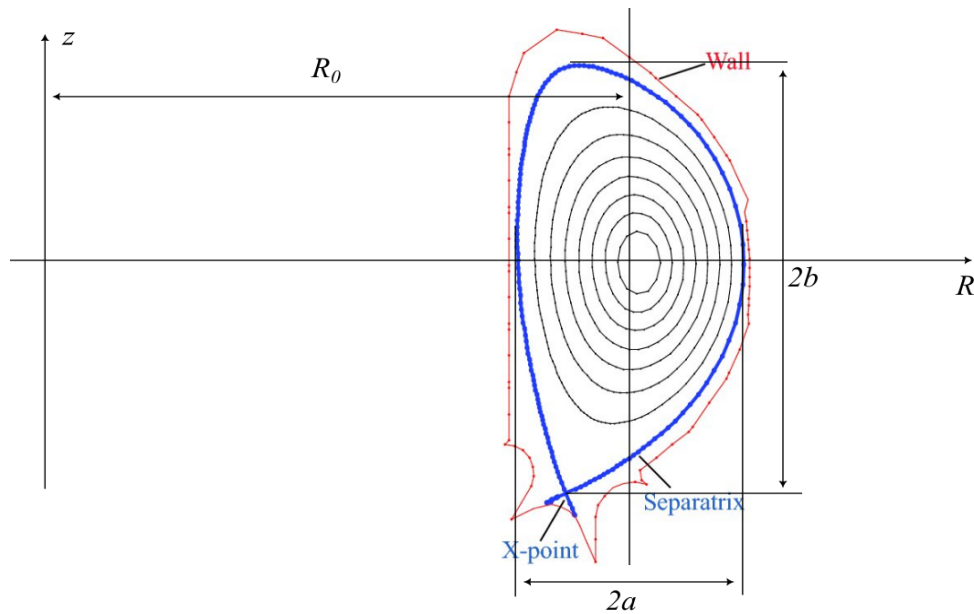
$$q_s = \frac{1}{\iota} = \frac{rB_\varphi}{R_0B_\theta} \quad (84)$$

Ovde  $\iota$  predstavlja rotacioni transform (eng. *rotational transform*), veličinu koja se koristi

češće u steleratorima,  $B_\varphi$  je toroidalno magnetno polje a  $B_\theta$  predstavlja poloidalno magnetno polje. Rotacioni transform daje meru uvrnutosti magnetnog polja u steleratoru kada se prati toroidalno. Može se reći da nam rotacioni transform  $\iota$  daje broj poloidalnih rotacija po jednoj toroidalnoj rotaciji. Primećuje se da rotacioni transform zavisi od radijalne koordinate, i ta zavisnost tj. veličina promene rotacionog transform se zove *magnetno smicanje* (eng. *magnetic shear*) [79]:

$$s = \frac{r}{q_s} \frac{dq_s}{dr} \quad (85)$$

Veća vrednost magnetnog smicanja je bolja za stabilan rad steleratora i tokamaka. Naime, ako imamo neke radijalne strukture ili nestabilnosti, pošto se čestice plazme kreću duž linija magnetnog polja, zbog postojanja smicanja postoji mogućnost da se ova nestabilnost "razmaže" u poloidalnom pravcu. Tada kažemo da je nestabilnost dekorrelisana.



Slika 9: Poloidalni poprečni presek tokamaka [80]. Na slici su prikazane zatvorene magnetne površi i poslednja zatvorena linija magnetnog polja sa X - tačkom koja se naziva separatriks. Takođe su označeni svi parametri koji ulaze u definiciju elongacije i trijanguliteta.

Eksperimentima je utvrđeno da je sa stanovišta nečistoća unetih u plazmu povoljnija konfiguracija sa diverzorom nego sa limiterom, pa zbog toga oblik plazme više nije kružni nego izdužen i u obliku latiničnog slova D, kao na slici 9. Ovakvom konfiguracijom se postiže da otvorene linije magnetnog polja završavaju na diverzoru čija je primarna uloga odvođenje čestica i viška toplote iz reaktora. Plazma se u diverzorskoj konfiguraciji karakteriše sa dva parametra, a to su elongacija  $\kappa$  i trijangulitet  $\delta$ . Elongacija  $\kappa$  definisana je kao odnos visine plazme i radiusa plazme  $a$ :

$$\kappa = \frac{z_{max} - z_{min}}{2a} = \frac{2b}{2a} \quad (86)$$

Dok je trijangulitet dat sa izrazom:

$$\delta = \frac{\delta_{upper} + \delta_{lower}}{2} \quad (87)$$

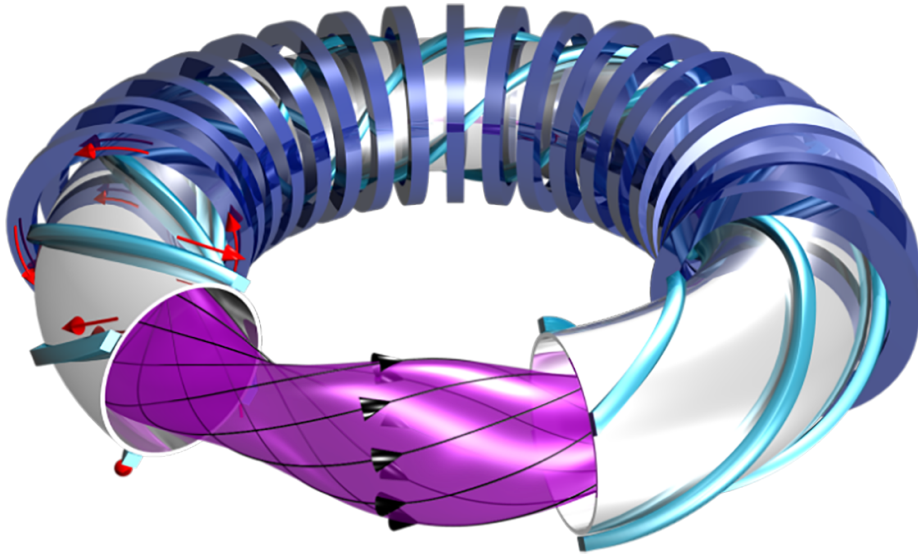


Pri čemu su  $\delta_{upper}$  i  $\delta_{lower}$  gornji i donji triunglaritet, dati sa izrazima [79]:

$$\delta_{upper} = \frac{R_0 - R(z = z_{max})}{a} \quad (88)$$

$$\delta_{lower} = \frac{R_0 - R(z = z_{min})}{a} \quad (89)$$

Linije magnetnog polja prolaze unutar ugnježdenih površi magnetnog fluksa, a poslednja zatvorena površ se naziva *separatriks* (eng. *separatrix*). Konfiniranje plazme u tokamaku nije lak zadatak, a eksperimentalno je utvrđeno da vreme konfiniranja energije raste sa porastom veličine mašine, tj. važi da je  $\tau \sim r_p$ , gde je  $r_p$  radius plazme unutar tokamaka (rastojanje od centra vakuumske komore do zida reaktora) [78]. Takođe, vreme konfiniranja energije raste sa povećanjem struje kroz plazmu, a opada sa pritiskom plazme [78].

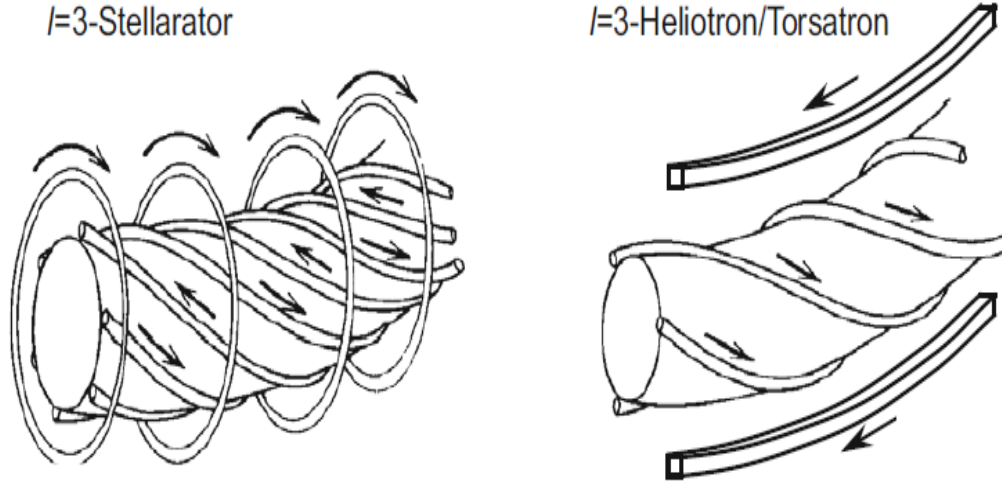


*Slika 10: Klasični stelerator  $l = 2$ . Oblici i pozicije spoljašnjih magneta su takve da su linije sila magnetnog polja zatvorene bez potrebe za propuštanjem struje kroz plazmu.*

Pošto je sam protok struje kroz plazmu u tokamacima izvor raznih nestabilnosti plazme i prepreka ka stabilnom radu reaktora, ispitivani su alternativni vidovi konfiniranja plazme pomoću spoljašnjih magnetnih polja. Jedna od najuspešnijih alternativa do kojih su naučnici uspeali da dođu jeste stelerator. Kod steleratora se zatvaranje linija magnetnog polja unutar uređaja i stabilne orbite postižu uvrtnjem spoljašnjih magneta tako da prave željeno magnetno polje [77]. S tim u vezi, za konfiniranje plazme nije potrebna struja koja prolazi kroz plazmu, već se konfiniranje vrši isključivo spoljašnjim magnetnim poljem. Prednost ovog dizajna jeste što se izbegavaju nestabilnosti koje nastaju unutar tokamaka, a čiji je uzrok upravo prolazak struje kroz plazmu [77].

Stelerator se može projektovati na tri načina, a glavni cilj je postizanje helikalnog magnetnog polja čije su linije sila zatvorene unutar torusa. Jedan način za postizanje helikalnog magnetnog polja je prikazan na slici 10. Kroz helikalne kalemove označene svetlo plavom bojom na slici propušta se struja u suprotnim pravcima, a na to polje se superponira jako

toroidalno polje nastalo dejstvom toroidalnih kalemova označenih tamno plavom bojom na slici 10. Steleratori se karakterišu sa dva broja, koji se najčešće označavaju sa  $l$  i  $m$ . Broj  $l$  najčešće ukazuje na broj helikalnih kalemova. Za stelerator na slici 10 imamo 2 para od po 4 kalema sa suprotnim strujama, što znači da ima broj  $l = 2$ . Kako se magnetne površi periodično ponavljaju u toroidalnom pravcu, broj tih toroidalnih segmenata označavamo sa  $m$ .



Slika 11:  $l = 3$  stelerator (levo) i torsatron [79] (desno). Primetno je postojanje poloidalnih magneta kod torsatrona kako bi se dobilo helikalno magnetno polje. Struje kod torsatrona idu u istom pravcu, dok kod klasičnog steleratora struje susednih kalemova su antiparalelne.

Drugi način da se postigne sličan efekat uvrtanja magnetnog polja i rezultujuće helikalno magnetno polje jeste konstrukcija tzv. *heliotrona* ili *torsatrona*. Kod heliotrona, struja kroz helikalne kalemove teče u istom pravcu, pa broj  $l$  odgovara broju helikalnih kalemova. Kako bi se postiglo helikalno magnetno polje, pored helikalnih kalemova dodaju se i poloidalni kalemovi koji prave vertikalno magnetno polje kako bi se dobilo željeno rezultujuće magnetno polje. Slika ovog uređaja prikazana je na slici 11 desno, a primer jednog ovakvog uređaja je heliotron LHD (Large Helical Device) u Japanu koji je heliotron sa  $l = 2$  i  $m = 10$ .

Treći način za kreiranje helikalnog magnetnog polja jeste da se spoljašnji kalemovi poređaju tako da prave helikalnu magnetnu osu. Ovi uređaji se još nazivaju *helijaci*. Taj dizajn koristi stelerator TJ - II u Madridu. Optimizovani steleratori, kao što je Wendelstein 7X u Greisfaldu koristi unapređeni dizajn helijaka. Njegovih 50 neplanarnih i 20 planarnih magneta su specijalno optimizovani i napravljeni kako bi uređaj postigao najbolje performanse u smislu magnetohidrodinamičke (MHD) stabilnosti, gustine plazme i dobrog konfiniranja visoko energetskih čestica ( $\alpha$  čestica npr.). On je  $m = 5$  stelerator.

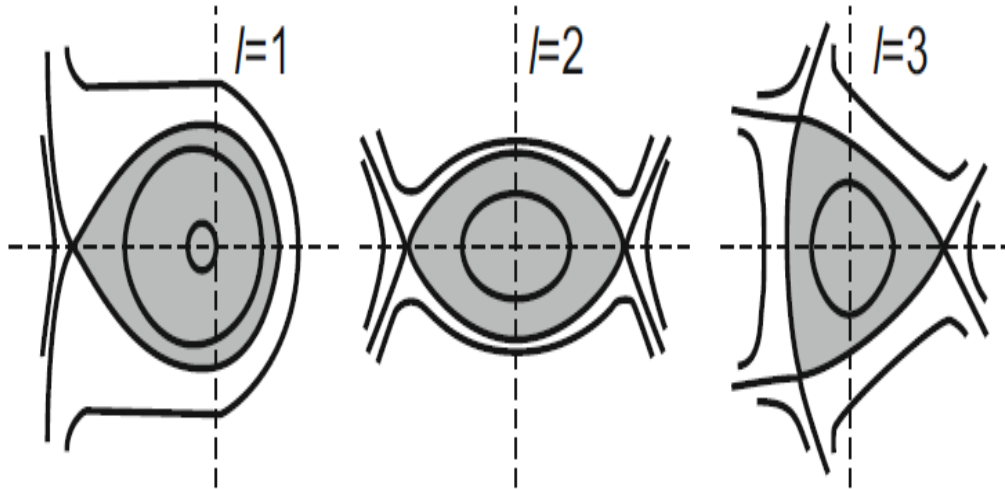
Teorijski, pokazuje se da uvrtanje magnetnog polja prati uvrtanje magnetnih kalemova, međutim ovo uvrtanje po periodu toroidalnog obilaska ima jako mali doprinos jer se skalira kao [79]:

$$r \frac{d\theta}{dz} \propto \frac{1}{B_{z0}^2} \quad (90)$$

Gde je  $B_{z0}$  toroidalno magnetno polje. Dakle, kako bi steleratori postigli jako uvrtanje mag-



netnog polja (veliko  $\iota$ ), oni moraju imati veliki broj perioda ili segmenata sa magnetima, odnosno veliki odnos glavnog radiusa i radiusa plazme (*aspect ratio*). Veliko  $\iota$  je povoljno za stabilnost reaktora kao i za efikasnost reaktora. Što se tiče magnetnih površi u steleratoru, one suštinski predstavljaju magnetne multipole, a na slici 12 prikazne su magnetne površi za  $l = 1, 2$  i  $3$  steleratore. Vidimo da je u slučaju  $l = 2$  poloidalni poprečni presek ima oblik



Slika 12: Izgled magnetnih površi za  $l = 1, 2$  i  $3$  steleratore [79].

elipse, dok je za  $l = 3$  poloidalni presek u obliku trougla.

## 2.4.2 Interakcija plazme sa zidom reaktora

Interakcija plazme sa zidom fuzionog reaktora je vrlo važan segment u istraživanju stabilnog rada reaktora, jer ukoliko čestice nečistoća sa zida uđu u plazmu, ona gubi energiju kroz zračenje te postaje nestabilna i gasi se. Takođe, čestice nečistoća mogu da izazovu i disrupcije, gde dolazi do naglog hlađenja ivice plazme [32]. Dva glavna problema do kojih interakcija vruće plazme sa zidom može dovesti je da se ošteti komponenta vakuumske suda prvog zida reaktora, te kontaminacija plazme i nemogućnost ostvarivanja fuzionih reakcija. Izvor čestica nečistoća jeste u raznim interakcijama plazme i materijala zida reaktora, procesima desorpcije kao i iz samih fuzionih reakcija (tzv. helijumski "pepeo"). Kako bi sprečili desorpciju i otpuštanje *bulk* materijala iz zida reaktora, rade se različiti tretmani zida koji uključuju čišćenje zida tinjavim pražnjenjem ili odgrevanjem zidova. Pored gore navedenih procesa, na pojavu čestica nečistoća u plazmi utiču još i spaterovanje zida reaktora, hemijska erozija, isparavanje i formiranje balončića na površini zida (eng. *blistering*) [81].

### 2.4.2.1 Fizičko spaterovanje

Fizičko spaterovanje zida reaktora predstavlja proces transfera impulsa visokoenergetskog jona na atom mete u zidu koji se time oslobađa i odlazi u plazmu. Ovaj proces nastaje kada je energija upadnog jona veća od energije veze  $E_s$  atoma na površini mete. Za spaterovanje, definiše se tzv. *prinos spaterovanja* (eng. *sputtering yield*), koji predstavlja krucijalnu veličinu

za ovaj proces [81]:

$$Y = \frac{\text{broj emitovanih atoma mete}}{\text{broj upadnih čestica}} \quad (91)$$

Kako bi opisali koliko čestica mete sa energijom  $E, E + dE$  biva spaterovano u jedinični prostorni ugao  $d\Omega$  uvodi se diferencijalni prinos spaterovanja definisan relacijom [81]:

$$\frac{d^2Y}{dEd\Omega} \quad (92)$$

Obično se razlikuju tri režima spaterovanja: (1) režim nekoliko sudara, (2) kaskadni režim i (3) režim termalnog pika (eng. *thermal spike regime*) [81]. Prvi režim se javlja za lake projektele i za male energije projektila. Tu razlikujemo dva procesa a to su uzmicanje atoma mete prve i druge generacije, dok za manje energije dolazi i to rasejanja projektila unazad [81]. Sa povećanjem energije projektila i njihove mase, dešava se uzmicanje i emisija atoma mete nekoliko generacija. Tako se pravi kaskadni proces u kome atomi koji se nalaze dublje u meti mogu dobiti dovoljno energije da napuste metu, te ostaje krater na materijalu koji se primećuje u eksperimentima [81]. Prinos spaterovanja može se proceniti kao odnos upadne energije projektila  $E_{dep}$  na sloj debljine  $d$  i energije veze na površini mete  $E_s$  [81]:

$$Y = \frac{E_{dep}}{E_s} \quad (93)$$

Deponovana energija  $E_{dep}$  se može proceniti iz izraza [81]:

$$E_{dep} = n_0 S_n(E_0) d \quad (94)$$

Gde je  $n_0$  gustina atoma u meti,  $S_n(E_0)$  predstavlja presek za zaustavljanje projektila koji zavisi od upadne energije projektila  $E_0$ , a  $d$  je debljina posmatranog sloja mete. Ovi preseki su dostupni u literaturi za razne vrste projektila. Bitno je reći da u procesima fizičkog spaterovanja čestice mete napuštaju metu prvenstveno kao neutrali, dok jako mali deo bude u obliku jona. Po pitanju koncentracija nečistoća, za lake čestice to je nekoliko procenata (npr. C i O) dok je za teške čestice ta koncentracija reda veličine nekoliko promila (npr. W i Mo) [77].

#### 2.4.2.2 Hemijsko spaterovanje

Hemijska erozija zida reaktora nastaje kada se u interakciji upadnog projektila i atoma mete formiraju lako isparljivi molekuli koji napuštaju metu i ulaze u plazmu. Ovaj proces je jako važan za materijale od ugljenika, jer u reakcijama između upadnih atoma vodonika ili kiseonika dolazi do emisije različitih molekula ugljovodonika i oksida ugljenika [81]. Rešenje za uklanjanje ugljenikovih oksida CO i CO<sub>2</sub> jeste smanjenje koncentracije kiseonika u reaktoru.

Što se tiče ugljovodonika, istraživanja su pokazala da se grejanjem površine prvo isparava CH<sub>3</sub> molekul, a daljim povećanjem temperature rekombinacija vodonika u molekul H<sub>2</sub> postaje dominantan proces što smanjuje ukupan prinos hemijskog isparavanja [81]. Još jedan mehanizam hemijske erozije predstavlja tzv. jonsko - indukovana desorpcija. Pri ovom procesu, upadni jon ima dovoljno energije da sa površine izbacuje ugljovodonične radikale sa niskom

energijom sublimacije putem raskidanja veze [81]. Hemijsko spaterovanje je jako teško opisati teorijski jer pored temperature površine mete, energije upadnih jona i upadnog fluksa, zavisi i od strukturalnih osobina same mete ugljenika i hemijskog sastava mete. Npr. primećeno je da se dodavanjem bora ili nekih metala (Ti) značajno menja i prinos nečistoća [81]. Dalje, primećeno je da ubacivanje plemenitih gasova u plazmu kako bi se povećalo zračenje plazme u okolini divertora značajno povećava hemijsko spaterovanje usled jako efikasnog raskidanja veze C-H u materijalu.

Pošto i dalje nedostaju simulacije koje bi dobro opisale ovaj tip spaterovanja (prvenstveno se rade simulacije molekularne dinamike) u drugim kodovima koji opisuju globalni prinos nečistoća u plazmu uvek se podrazumeva konstantan prinos od hemijskog spaterovanja koji iznosi negde oko 0.01 ili 0.02.

### 2.4.2.3 Termalno isparavanje

Porastom temperature površine mete, sve više atoma ima energiju da napusti površinu mete. Fluks nečistoća u plazmu može se proceniti na sledeći način [81]:

$$\Gamma_{subl} = s 2 \times 10^{24} \frac{p(T_s)}{\sqrt{MT_s}} \frac{\text{atoms}}{\text{m}^2\text{s}} \quad (95)$$

Gde je  $p$  napon pare koji zavisi od temperature površine mete, dok je  $s$  tzv. *sticking* koeficijent. Njegova vrednost za grafit je između 0.6 i 0.9 [81]. Za grafit, gornji izraz se može napisati i kao [81]:

$$\Gamma_{sub}^C = C_{sub} T_s^g e^{-\frac{E_s}{k_B T_s}} \quad (96)$$

Pri čemu je  $C_{sub} = 2 \times 10^{20} \text{K}^{3.25} / \text{s}$ ,  $g = 3.25$  i  $E_s = 7.42 \text{ eV}$ .

Ovi procesi su neizbežni na takozvanim vodećim ivicama divertora, gde linije sila magnetnog polja padaju normalno na divertorsku ploču.

### 2.4.2.4 Pojava balončića (Blistering)

Pojava balončića predstavlja proces do kojeg dolazi blizu površine mete zbog loše rastvorenih gasova. U eksperimentima prilikom bombardovanja mete sa atomima vodonika i helijuma, dolazi do ove reakcije pri velikim energijama po jediničnoj površini mete [81]. Helijum i vodonik se talože unutar pora uzorka jer je to energetski povoljnije nego ugradnja samog atoma u rešetku mete. Eksperimentima je pronađeno da je kritična vrednost za formiranje balončića helijuma u volframu reda  $0.5 \times 10^{22} \text{He}/\text{m}^2$  pri čemu je prosečni diameter balončića oko  $130 \mu\text{m}$  [81].

### 2.4.3 Problem akumulacije nečistoća sa velikim atomskim brojem Z

Ono što je primećeno u eksperimentima na TEXTOR tokamaku od strane Tokar-a i saradnika [82, 83] i potvrđeno u mnogim kasnijim studijama jeste akumulacija nečistoća u jezgru plazme koje je praćeno masivnim zračenjem energije iz centra plazme i zaravnavanjem profila elektronske temperature. Najčešće se ova nestabilnost objašnjava neoklasičnim transportom [83].

Naime, kada nečistoće putem nekog od gore navedenih procesa uđu u plazmu, dešava se

da usled sudara čestica nečistoća naelektrisanja  $Z$  sa pozadinskom plazmom imamo profil gustine nečistoća koji ima izraženiji maksimum (pik) od profila gustine glavnih jona u plazmi. Pošto neki atomi dospeju u jezgro plazme, član u neoklasičnoj brzini proporcionalan sa  $\frac{\partial T}{\partial r}$  usmeren ka ivici plazme se smanjuje. Kao posledica toga, javlja se ukupni fluks čestica usmeren ka centru plazme koji dalje nagomilava čestice nečistoća u plazmi i smanjuje temperaturu plazme. Ova akumulacija se može izbeći tako što se npr. izbegavaju profili gustine koji imaju izražen centralni maksimum [81].

Eksperimentalno je uvideno da postoji određena korelacija između akumulacije nečistoća u jezgru plazme i gustine elektrona u plazmi. Ova korelacija je uočena i u tokamaku TEXTOR [82] i u heliotronu LHD. Naime, što je gustina elektrona veća, čestice nečistoća se duže zadržavaju u plazmi i imaju dugačka vremena poluživota (i do nekoliko sekundi) dok za manje gustine vreme poluživota nečistoća u plazmi se dosta smanjuje. Radijalni fluks nečistoća  $Z$  dat je sa izrazom [83]:

$$\Gamma_Z = -D_{\perp}^Z \frac{dn_Z}{dr} + v_{\perp}^Z n_Z \quad (97)$$

i predstavlja sumu difuzionog i konvektivnog člana. Konvekcija se opisuje neoklasičnom transportnom teorijom, gde je brzina određena gradijentima gustine i temperature pozadinskih jona (najčešće deuterijuma) [83]:

$$v_{\perp}^Z = D_{neo} \left( \eta \frac{d \ln n_i}{dr} + \theta \frac{d \ln T_i}{dr} \right) \quad (98)$$

U gornjem izrazu  $D_{neo}$  je neoklasični koeficijent difuzije, a  $n_i$  i  $T_i$  su gustina i temperatura jona u plazmi. Parametri  $\eta$ ,  $\theta$  kao i koeficijent difuzije  $D_{neo}$  određeni su sa  $n_i$ ,  $T_i$ , faktorom sigurnosti  $q$  i vrednošću toroidalnog magnetnog polja  $B_t$ . U konvencionalnim fuzionim uređajima, član proporcionalan gradijentu gustine jona usmeren je ka centru plazme i odgovoran je za pik u gustini nečistoća, dok drugi član teži da izbalansira ovaj transport [83]. Pad temperature u centru, iz bilo kog razloga, dakle smanjuje član koji sprečava konvektivni transport ka centru plazme i kreće akumulacija nečistoća. Kako čestice nečistoća uđu u centar plazme, zračenjem temperatura plazme u centru dalje opada, što dalje dovodi do smanjenja člana  $\frac{d \ln T_i}{dr}$  i dalje akumulacije, pa se tako razvija nestabilnost plazme [83]. Tokar i saradnici su takođe dali predlog izraza za kritičnu vrednost gustine elektrona u jezgru plazme pri kojoj dolazi do pojave akumulacije nečistoća u centru plazme [83]:

$$n(0)_c = \frac{8D_{\perp} \kappa_{\perp} T(0)}{r_{max}^2 D_{neo}^{PS} Z_I n_I(0) L_I} \quad (99)$$

U gornjem izrazu,  $\kappa_{\perp}$  predstavlja koeficijent toplotne provodnosti plazme,  $D_{neo}^{PS}$  predstavlja koeficijent neoklasične difuzije u Pfirsch - Schlüter režimu (režim male kolizionalnosti),  $Z_I = \sum \frac{Z n_Z}{n_I}$  predstavlja srednje naelektrisanje nečistoća u plazmi,  $n_I$  predstavlja ukupnu gustinu nečistoća u plazmi,  $L_I$  je tzv. koeficijent brzine hlađenja (eng. *cooling rate coefficient*) nečistoće u plazmi, a  $r_{max}$  je parametar dat sa izrazom [83]:

$$r_{max} = \frac{1}{\sqrt{\frac{32D_{\perp}^2}{D_{neo}^{PS} Z_I \omega_{rad}} + \frac{1}{a^2}}} \quad (100)$$

Gde je  $a$  radius plazme, a  $\omega_{rad} = \frac{L_I n_I}{3T}$  u cgs sistemu jedinica.

## 2.5 Mašinsko učenje i veštačka inteligencija

Mašinsko učenje predstavlja skup metoda koje mogu da otkriju šablone i relacije između ulaznih podataka u toku treninga, te da korištenjem nađenih relacija predvide nove vrednosti za ulazne parametre koje model do tada nije video.

Većina algoritama mašinskog učenja mogu se podeliti u dve grupe: regresioni modeli, koji kao izlaz daju numerički rezultat i klasifikacione modele, koji kao izlaz najčešće daju verovatnoću da neki objekat pripada određenoj klasi. Kako bi uspeli u ovome, oni moraju da budu obučeni na nekoj bazi podataka koja sadrži reprezentativne uzorke posmatranog problema. Postoje generalno dva načina treninga: *nadgledano učenje* i *nenadgledano učenje*. Nadgledano učenje je najčešći oblik upotrebe, a pod njim se podrazumeva da model nauči funkciju preslikavanja sa ulaznih podataka  $\mathbf{x}$  ili atributa, koji su u određenom trenutku bili obeleženi ili obrađeni od strane čoveka na izlazne podatke  $y$  ili ciljne varijable tako što se obučava na parovima ulazno - izlaznih podataka  $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}, y)\}_{i=1}^N$  [84]. Kako bi procenili veličinu odstupanja predikcije modela od tačne vrednosti ciljne varijable uvodi se *funkcija greške*  $L(y, f(x))$ . Za svaki model može se definisati njegova funkcija greške, pa samim tim nije jedinstvena. Pod obeležavanjem podataka se misli npr. da u svrhu klasifikacije često čovek mora da označi tačnu klasu svakog objekta, kako bi modeli bili u mogućnosti da kasnije predvide klasu za objekte koji nisu označeni. Isti je slučaj i u regresionoj analizi, gde model treba da predvidi neku numeričku vrednost na osnovu ulaznih podataka. Ovde često čovek obrađuje sirove podatke dobijene na neki način (merene u nekom eksperimentu, podaci sa interneta itd.) te tako prilagođava podatke kako bi ih model što bolje naučio i imao bolji performans. Sa druge strane, u slučaju nenadgledanog učenja, čovek nema nikakvog kontakta sa sirovim podacima koji služe kao ulazni podaci za model. Ovi algoritmi najčešće služe kao modeli za klasterovanje, tj. grupaciju sličnih tačaka jednih drugima. Na ovaj način mogu se detektovati pravilnosti u podacima i eventualno naći odudarajući podaci koji bi inače pokvarili performans modela ako bi bili ostavljeni u bazi za trening.

Duboko učenje sa druge strane predstavlja upotrebu neuronskih mreža kako bi one uspele da donesu dobre zaključke bez intervencija čoveka. Termin duboko učenje potiče od toga da se vrlo često koriste neuronske mreže sa više od jednog sloja. Neuronske mreže mogu se obučavati kako za zadatke regresije, tako i za zadatke klasifikacije. Razne su podele neuronskih mreža, npr. prema načinu obučavanja, prema arhitekturi, prema načinu prostiranja informacija kroz mrežu itd. Kako su u ovom radu korišteni samo regresioni modeli, kao i generativni modeli, u nastavku će reći biti samo o njima, a o klasifikacionim algoritmima čitalac se upućuje na odgovarajuću literaturu [85]. Takođe, neće biti reči o prostim linarnim modelima mašinskog učenja jer nisu korišteni u ovom radu. Biće obrađeni samo nelinearni modeli mašinskog učenja i to ansambli, kao i neuronske mreže i generativni modeli.

### 2.5.1 Ansamblerski nelinearni modeli

Ansambli predstavljaju skup više modela koji zajednički donose neku odluku. Ključna pretpostavka kod ovih modela jeste ta, da ukoliko imamo veći skup modela, oni mogu dati mnogo veću preciznost u odnosu na jedan model, ukoliko su pravilno konstruisani [84]. Ova pretpostavka zasniva se na činjenici da ćemo usrednjavanjem pojedinačnih predikcija  $N$  nezavisnih modela dobiti vrednost koja je jako bliska pravoj, jer će se nezavisne slučajne greške koje ovi modeli prave u mnogome poništiti.

### 2.5.1.1 Prosta agregacija (*Bootstrap aggregation ili Bagging*)

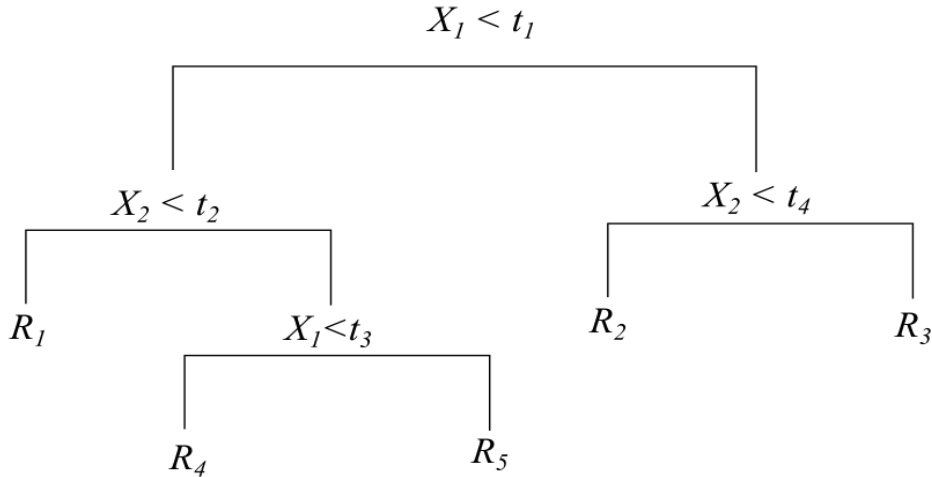
Prosta agregacija je postupak u kome se obučava veći broj modela čije predikcije moraju nužno da budu precizne, ali je bitno da su im greške nezavisne [84]. U slučaju regresije, modeli daju svoju vrednost koja se kasnije usrednjava kako bi se dobila konačna vrednost predikcije. U slučaju klasifikacije, vrši se glasanje. U slučaju regresije, koji je od interesa u ovoj tezi, ukoliko modele posmatramo kao  $m$  slučajnih nezavisnih promenljivih  $X_1, X_2, \dots, X_m$  od kojih svi imaju istu raspodelu opisanu sa srednjom vrednošću  $\mu$  i varijansom  $\sigma$ , onda na osnovu centralne granične teoreme važi [84]:

$$\sqrt{m} \left( \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m X_i - \mu \right) \rightarrow \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad (101)$$

Dakle, važi da model ima očekivanu vrednost  $\mu$  i varijansu  $\sigma/m$ . Ukoliko je  $\mu$  tačna vrednost koju model treba da proceni, onda modeli proste agregacije nude smanjenje varijanse bez povećanja sistemskog odsupanja [84]. Jedan od najrasprostranjenijih ansambl modela jeste slučajna šuma, klasa CART (Classification and Regression Trees) algoritama.

### 2.5.1.2 CART (Classification and Regression Trees) algoritmi

CART algoritmi predstavljaju grupu algoritama koji se koriste za klasifikaciju i regresiju. Osnovni model, nad kojim se kasnije gradi ansambl, predstavlja *stablo odlučivanja* ili *drvo odlučivanja*. Jedno drvo odlučivanja predstavljeno je na slici 13.



Slika 13: stablo odlučivanja. Svaki čvor predstavlja uslov tipa *if ... then*, dok se u listovima nalaze vrednosti nakon obrade uslova u čvoru.

Svako drvo odlučivanja počinje od glavnog čvora ili korena stabla koji sadrži jedan test vrednosti odabranog atributa. Test može imati više rezultata, a svaki od rezultata čini granu koja vodi do sledećeg čvora u kome se nalazi novi test. Listovi predstavljaju predviđanje stabla za ulazni set vrednosti atributa. Na slici, vidimo da ako je ispunjen uslov glavnog čvora da je  $X_1 < t_1$  tada granom dolazimo do drugog čvora u kome testiramo vrednost drugog

atributa  $X_2$ . Ukoliko je uslov ispunjen dolazimo do lista u kome je predviđena vrednost  $R_1$ . Ovaj pristup dalje važi za svaki od krajnjih listova sa predviđanjima modela.

Postavlja se pitanje, kako odabrati najbolji atribut koji će biti u glavnom čvoru stablu odlučivanja? Najlakše je ovaj postupak opisati za slučaj problema klasifikacije, a lako se prenosi i na problem regresije. Atribut koji se nalazi u glavnom čvoru mora biti takav da što bolje razdvaja ulazne podatke na podgrupe sa što homogenijim uzorkom u njima [84]. Kako bi ovo bilo moguće, definiše se stepen čistoće izvedene podgrupe nakon razdvajanja. Postoje dva testa: entropija i Gini-jev indeks. I entropija i Gini-jev indeks u osnovi počivaju na udelu u kome učestvuju instance različitih klasa. Entropija se za  $C$  klasa definiše kao:

$$H(p_1, \dots, p_C) = - \sum_{i=1}^C p_i \log p_i \quad (102)$$

Gde je  $p_i$  udeo klase  $i$  u podgrupi. Gornji izraz je jednak nuli kada je udio instance neke klase u podgrupi  $p_i = 1$ . To znači da je ta podgrupa homogena i entropija je jednaka nuli. Dakle, entropija po sebi, shodno i definiciji u fizici predstavlja meru nehomogenosti podgrupe nakon razdvajanja te je cilj da bude što niža. Gini-jev indeks, sa druge strane, se definiše kao:

$$G(p_1, \dots, p_C) = 1 - \sum_{i=1}^C p_i^2 \quad (103)$$

Vidi se da Gini-jev indeks ima vrednost nula kada podgrupa nakon podele ima samo instance jedne klase. Na osnovu nekog od ova dva kriterijuma, računa se smanjenje nehomogenosti podgrupe u odnosu na polazu grupu [84]:

$$H(\mathcal{D}) - \sum_i \frac{|\mathcal{D}_i|}{|\mathcal{D}|} H(\mathcal{D}_i) \quad (104)$$

Ovde skup  $\mathcal{D}_i$  predstavlja skup svih instanci gde je vrednost atributa  $A$  jednaka  $i$ . Ideja jeste da se izračuna razlika nehomogenosti polaznog skupa i prosečne nehomogenosti svih njegovih podskupova dobijenih particionisanjem po vrednostima datog atributa.

Nakon određivanja polaznog glavnog čvora, ostaje još da se odredi i kriterijum zaustavljanja u stablu odluke, tj. potrebno je odrediti kolika će biti dubina stabla ili koliki može biti minimalan broj uzoraka prisutnih u svakom listu. Dubina stabla direktno može uticati na prilagođavanje i podprilagođavanje modela podacima. Naime, duboka stabla teže da se prilagode podacima na kojima se obučavaju i da zbog primene velikog broja testova uhvate i neke nebitne specifičnosti u podacima, dok su plitka stabla obično sklona prilagođavanju podataka na kojima se obučavaju [84]. Što se tiče broja instanci u listu modela, obično je za slučaj regresije bolje imati nešto više uzoraka radi efekta usrednjavanja, kako model ne bi uradio prilagođavanje podacima ako imamo samo jednu vrednost u listu.

Generalno, model stabla odlučivanja se ne smatra preciznim modelom. Pored gore opisanih problema prilagođavanja i podprilagođavanja, razlog za to je i visoka varijansa modela koja je delom direktna posledica prirode obučavanja [84]. Sa druge strane, dobre osobine ovog modela jesu njegova interpretabilnost, mogućnost kombinovanja različitih vrsta atributa (numeričkih i kategoričkih) i jako velika efikasnost u vremenu predviđanja.

### 2.5.1.3 Slučajna šuma

Jedan od načina na koji se može smanjiti varijansa osnovnog modela jeste usrednjavanje vrednosti predviđanja više modela. To se jednostavno postiže obučavanjem  $M$  stabala odlučivanja na različitim podskupovima osnovne baze za obučavanje, što za konačan rezultat predikcije daje [86]:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M \frac{1}{M} f_m(\mathbf{x}) \quad (105)$$

Gde je  $f_m(\mathbf{x})$  predikcija  $m$ -tog stabla odlučivanja za skup ulaznih atributa  $\mathbf{x}$ . Iako se koriste nasumični podskupovi podataka, algoritam obučavanja je isti i onda kao rezultat možemo dobiti visoko korelisane prediktore, što u konačnici daje ograničeno smanjenje varijanse [86]. Kako bi se ovo sprečilo, Breiman [87] je u svom radu predložio model slučajnih šuma koje ovaj problem prevazilaze tako što je stabla odlučivanja obučavaju na različitim ulaznim atributima i na nasumično izabranim podskupovima ulaznih podataka. Ova kombinacija čini slučajne šume jako dobrim modelom mašinskog učenja sa visokom tačnošću, pri čemu je i relativno lak za obučavanje. Mana modela jeste nedostatak interpretabilnost, što nadomešćuje brzinom predviđanja i lakoćom obučavanja. Parametri koji mogu da se menjaju za vreme obučavanja model jesu broj stabala  $m$  i veličina podskupova instanci i atributa [84].

## 2.5.2 Neuronske mreže

Neuronske mreže predstavljaju klasu metoda veštačke inteligencije koje imaju jako široku upotrebu. Najčešće se ovi algoritmi koriste za konstrukciju modela koji se treniraju na jako velikim bazama podataka i mogu biti jako robusni modeli. Neke od njihovih primena su kompjutersko prepoznavanje objekata, autonomna vožnja, medicinska dijagnostika, obrada teksta itd. [84]. Generalno, neuronske mreže mogu se podeliti na potpuno povezane neuronske mreže, konvolucione neuronske mreže, rekurentne neuronske mreže i grafovske neuronske mreže. Bitno je naglasiti da za trening neuronske mreže mora biti dostupan veliki broj sirovih podataka. Ukoliko je uzorak mali, obučavanje neuronske mreže vrlo lako vodi preprilagođvanju. Međutim, glavna prednost neuronskih mreža jeste da imaju mogućnost da konstruišu nove attribute prilikom obučavanja na sirovim podacima [84]. Ovde će kratko biti opisane potpuno povezane neuronske mreže i konvolutivne neuronske mreže jer su samo one i korištene prilikom izrade ove doktorske disertacije.

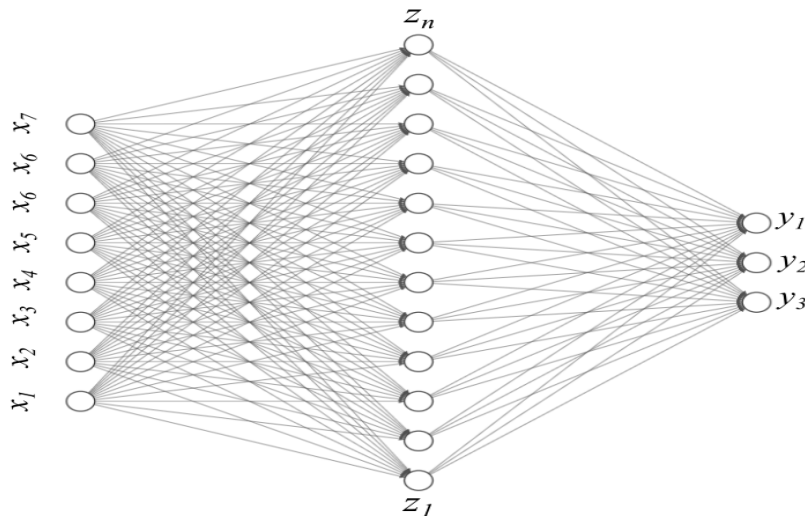
### 2.5.2.1 Potpuno povezane neuronske mreže

Osnovna gradivna jedinica potpuno povezane neuronske mreže jeste neuron. Tipično, ove neuronske mreže sastoje se od ulaznog sloja, skrivenog sloja i izlaznog sloja. Skrivenih slojeva može biti jedan ili više, čime se razlikuju *plitke* i *duboke* neuronske mreže. Tipična plitka neuronska mreža prikazana je na slici 14. Vidimo da ima ulazni sloj sa 8 neurona, skriveni sloj sa 12 neurona i izlazni sloj sa 3 neurona čija numerička vrednost predstavlja ujedno i rezultat predikcije neuronske mreže. Obično, vrednosti koje uzimaju neuroni u skrivenom sloju date su sledećom jednačinom [88]:

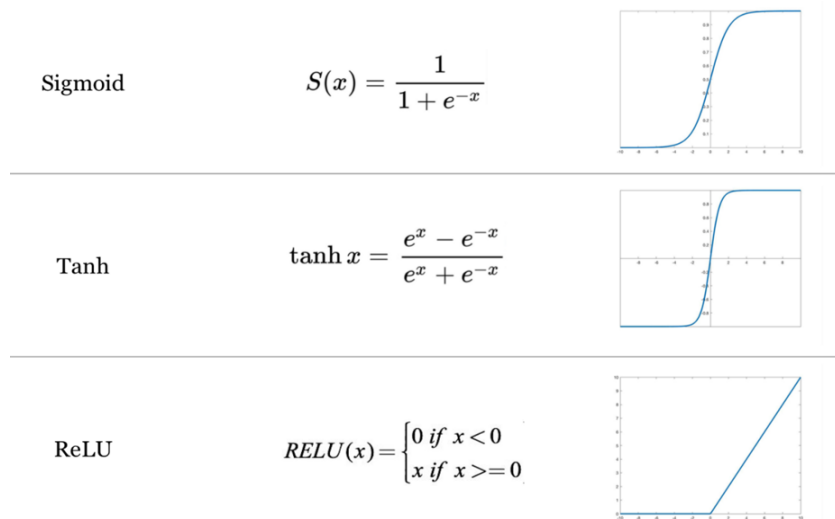
$$z_n = f\left(\sum_{j=1}^N \omega_{jn}^{(1)} x_j + \omega_{j0}^{(0)}\right) \quad (106)$$



Funkcija  $f$  u gornjem slučaju naziva se *aktivaciona funkcija* i služi da unese nelinearnost u model. Koeficijenti u linearnoj kombinaciji  $\omega_{jn}^{(1)}$  predstavljaju težinske vrednosti svakog ulaznog neurona (eng. *weights*) a  $\omega_{j0}^{(0)}$  predstavljaju slobodne članove (eng. *bias*).



Slika 14: Prosta potpuno povezana neuronska mreža sa 3 sloja (ulazni, skriveni i izlazni)



Slika 15: Aktivacione funkcije koje se najčešće koriste prilikom obučavanja neuronske mreže

Najčešće aktivacione funkcije koje se koriste u praksi jesu sigmoidna funkcija, hiperbolički tangens, ispravljачka linearna jedinica (ReLU - Rectified Linear Unit). One imaju oblik:

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

$$\tanh(x) = \frac{e^{2x} - 1}{e^{2x} + 1}$$

$$relu(x) = \max(0, x)$$

Ove funkcije prikazane su na slici 15. Arhitektura potpuno povezanih neuronskih mreža jedna je od najčešće korištenih u veštačkoj inteligenciji. Obučavanje neuronske mreže ovakve arhitekture tipično ide u dva koraka. Prvi korak predstavlja propagaciju unapred, gde se prema jednačini (107) od datih ulaznih vrednosti računa aktivacija za svaki skriveni i izlazni neuron. Drugi korak predstavlja propagacija unazad, gde modelu saopštavamo grešku te opet postavljamo težinske faktore i slobodne članove na nove vrednosti i ponovo se kreće unapred. Što se tiče propagacije unazad, u opštem slučaju svaki neuron računa otežinjenu sumu svih svojih ulaza [88]:

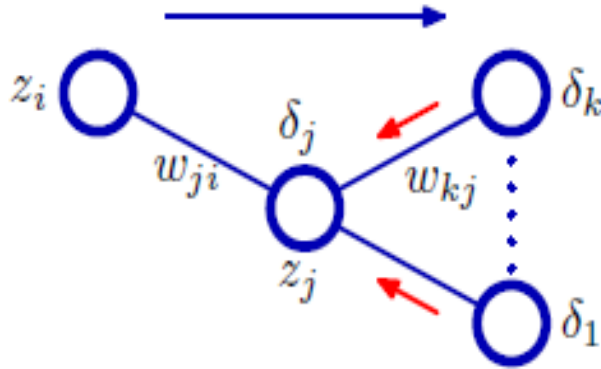
$$a_j = \sum_i \omega_{ji} z_i \quad (107)$$

Na ovu vrednost se onda primenjuje aktivaciona funkcija. Pretpostavimo da grešku predviđanja možemo opisati metrikom  $E_n$ . Polazna tačka propagacije unazad jeste evaluacija izvoda  $E_n$  po težinskim faktorima  $\omega_{ji}$ . Pošto  $E_n$  zavisi od težinskih faktora preko aktivacija  $a_j$  onda se može primeniti lančano pravilo i dobiti [88]:

$$\frac{\partial E_n}{\partial \omega_{ji}} = \frac{\partial E_n}{\partial a_j} \frac{\partial a_j}{\partial \omega_{ji}} \quad (108)$$

Ukoliko se uvede notacija  $\frac{\partial E_n}{\partial a_j} \equiv \delta_j$  i koristeći činjenicu da je  $\frac{\partial a_j}{\partial \omega_{ji}} = z_i$ , dobićemo [88]:

$$\frac{\partial E_n}{\partial \omega_{ji}} = \delta_j z_i \quad (109)$$



Slika 16: Ilustracija propagacije unapred i unazad. Plava strelica ilustruje protok informacija napred, dok crvene strelice objašnjavaju proceduru propagacije unazad. Promene težinskih faktora i slobodnih članova jednog sloja dolaze računom greške  $\delta$  za sloj ispred. Slika je preuzeta iz [88].

Dakle, traženi izvod dobija se tako što se pomnože vrednost  $\delta$  za neuron na izlaznom kraju sa vrednošću  $z$  koja se nalazi na ulazu u neuron [88]. Kako bi izračunali greške za skrivene slojeve, takođe koristimo lančano pravilo, te imamo [88]:

$$\delta_j = \frac{\partial E_n}{\partial a_j} = \sum_k \frac{\partial E_n}{\partial a_k} \frac{\partial a_k}{\partial a_j} \quad (110)$$

Suma ide po  $k$  neurona koji šalju impulse  $j$ -tom neuronu. Propagacija unazad prikazana je na slici 16. Vidi se da se greška  $j$  tog neurona koji šalje impulse ka  $k$  neurona, dobija tako što se evaluiraju greške  $k$ -tog sloja koji je ispred  $j$ -tog sloja. Znajući da se na aktivaciju  $a_j$  primenjuje aktivaciona funkcija  $h(\cdot)$  kako bi dobili konačnu vrednost  $j$ -tog neurona, tj.  $z_j = h(a_j)$ . Onda izraz (110) možemo pisati kao:

$$\delta_j = \sum_k \frac{\partial E_n}{\partial a_k} \frac{\partial a_k}{\partial a_j} = \sum_k \delta_k \frac{\partial}{\partial a_j} (\omega_{kj} z_j) = \sum_k \delta_k \frac{\partial}{\partial a_j} (\omega_{kj} h(a_j)) = h'(a_j) \sum_k \delta_k \omega_{kj} \quad (111)$$

Gornji rezultat daje konačnu formulu za evaluaciju algoritma propagacije unazad. Dakle, propagacija unazad se sastoji iz četiri koraka. Prvi korak jeste propagacija unapred gde nalazimo sve težinske faktore, slobodne članove i aktivacije koje povezuju ulazni vektor  $\mathbf{x}$  sa izlaznim slojem  $\mathbf{t}$ . Potom se nalaze greške izlaznog sloja [88]:

$$\delta_k = y_k - t_k \quad (112)$$

Gde je  $y_k$  vrednost ciljne promenljive a  $t_k$  predstavlja vrednost koju je predvideo model. Onda se korištenjem jednačine (111) nalaze greške za svaki skriveni sloj  $j$ , i na kraju pomoću jednačine (109) izračunaju potrebni izvodi te se završava propagacija unazad i ponovo kreće propagacija unapred.

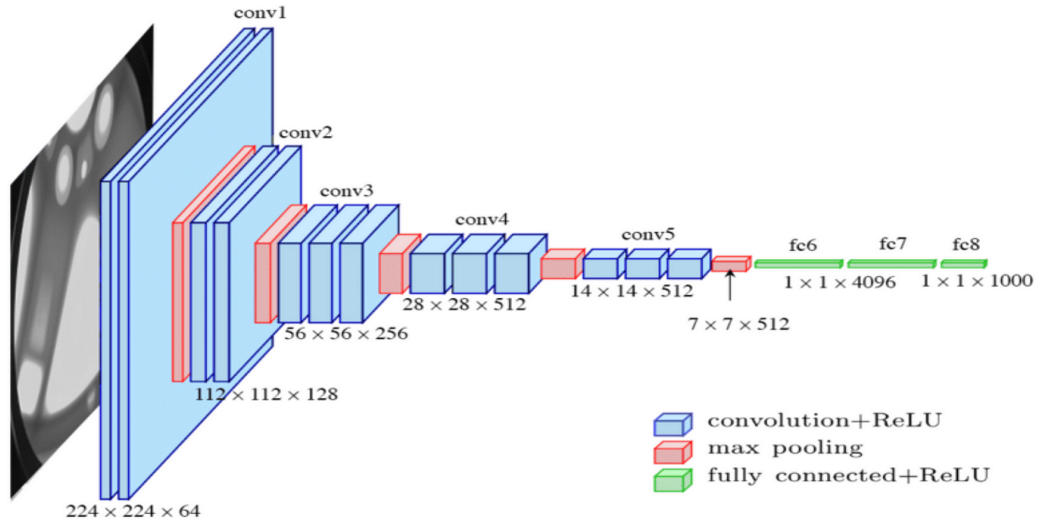
### 2.5.2.2 Konvolucione neuronske mreže

Konvolucione neuronske mreže predstavljaju tip neuronskih mreža koje se najintenzivnije koriste prilikom obrade slika, zvuka ili teksta [84]. Prednost konvolucionih neuronskih mreža jeste što imaju mogućnost da iz sirovih podataka koji su im dati konstruišu nove atribute na kojima zasnivaju predikcije. Ovo im omogućava činjenica da umesto da uče težinske faktore i slobodne članove, one uče filtere. Naime, filter ne predstavlja ništa drugo nego matricu koja je u mogućnosti da detektuje određenu osobinu ili svojstvo u signalu. Npr. to može biti filter za detekciju ivica na slici ili filter za detekciju karakterističnih oblika u nekom vremenski zavisnom signalu. Oblici ovih filtera su danas dorbo poznati jer je veliki broj njih razvijen kroz godine prakse u obradi slika, ali prednost konvolucionih neuronskih mreža jeste što se ovi filteri sami otkrivaju, te nema potrebe da ih korisnik unapred definiše. Ovime one zapravo same izdvajaju bitne karakteristike iz signala kroz filtere koje uče, te kroz tu osobinu daju optimalne rezultate. Zbog načina na koji funkcionišu, za njihovo obučavanje potrebna je dobra optimizacija i veliki broj podataka za obučavanje [84].

Sama arhitektura konvolucionih neuronskih mreža gotovo uvek podrazumeva duboke neuronske mreže jer je potrebno naučiti što više sitnih detalja u ulaznom signalu kako bi se dobili što bolji rezultati. To obično podrazumeva smenjivanje dva tipa slojeva, konvolucionih i agregacionih (eng. *pooling*) [84]. Izlazi iz konvolucionih slojeva se transformišu pomoću nelinearnih aktivacionih funkcija, a na kraj poslednjeg konvolucionog ili agregacionog sloja se nadovezuje potpuno povezani sloj, koji se obučava na atributima koje je konvolucionni sloj konstruisao. Primer proizvoljno kreirane konvolucione neuronske mreže prikazan je na slici 17.

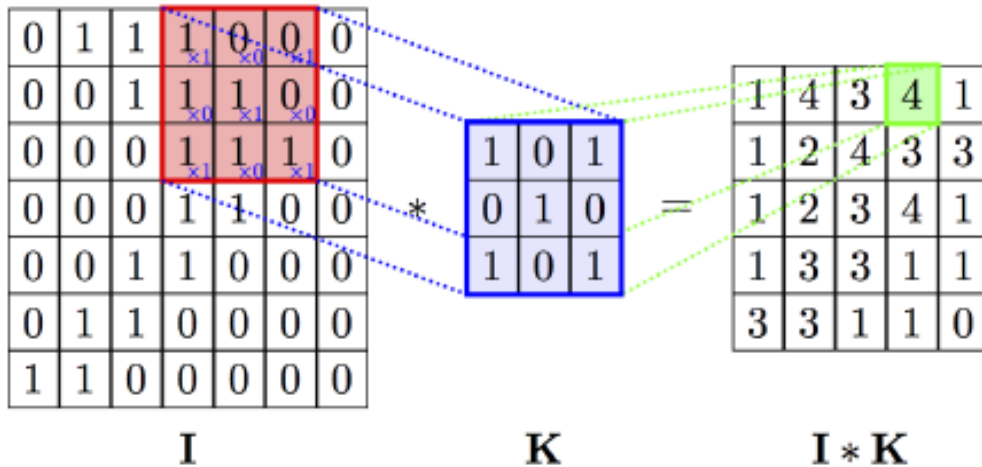
Matematički, operaciju konvolucije možemo zapisati kao [84]:

$$(f * g)_{ij} = \sum_{k=0}^{p-1} \sum_{l=0}^{q-1} f_{i-k, i-l} g_{k,l} \quad (113)$$



Slika 17: Arhitektura VGG16 konvolucione mreže. Sa slike se vide naizmenični konvolucioni i agregacioni slojevi, kao i tri potpuno povezana sloja na kraju. Slika je preuzeta kao javno dostupna, jer je VGG16 javno dostupna pretrenirana mreža čija se arhitektura može koristiti za različit niz problema.

Matrica  $f$  predstavlja ulaznu matricu ili signal, a matrica  $g$  predstavlja filter koji neuronska mreža uči i koji izdvaja neku korisnu osobinu signala. Primer funkcionisanja konvolucione neuronske mreže prikazan je na slici 18.



Slika 18: Princip funkcionisanja konvolucione neuronske mreže. Preko ulazne matrice prelazi tzv. filter i kao rezultat nastaje konvoluirani signal sa desne strane. Korak za koji se filter pomera udesno je parametar koji se zadaje neuronskoj mreži. Slika preuzeta iz [84]

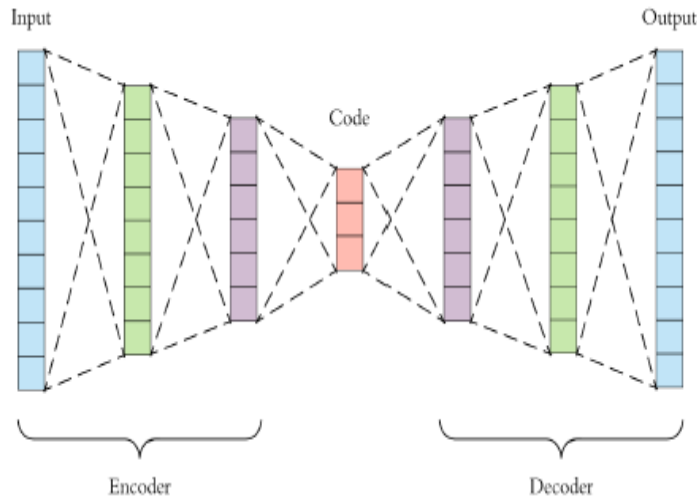
Dakle, sa slike se vidi da imamo ulaznu matricu koja predstavlja npr. sliku, gde su vrednosti u poljima intenzitet piksela, a matrica  $K$  predstavlja filter koji se primenjuje radi ekstrakcije nekog atributa sa slike. Rezultujuća matrica  $I * K$  ne mora nužno da ima istu dimenziju kao ulazna matrica  $I$  što nekad nije povoljno, pa se radi proširivanje ili *padding*.

Ovo znači da se ulazna matrica proširi za isti broj mesta sa leve i desne strane, kako bi se dimenzije ulaza i izlaza poklopile. Proširivanje može da se radi sa nulama sa obe strane ili sa vrednostima kolone koja je na levom odnosno desnom kraju.

Agregacija predstavlja ukрупnjivanje informacija koje se dobijaju iz konvolucionog sloja, tako što se primenjuje neka jednostavna funkcija agregacije na susjedne jedinice [84]. Ta funkcija može biti prosti maksimum ili srednja vrednost obuhvaćenih jedinica. Ako se agregacija vrši na 3x3 piksela iz prethodnog sloja, onda je izlaz iz agregacionog sloja 9 puta manje dimenzije nego ulazni sloj. Suštinski, agregacijom konvolucionog sloja zanemarujemo informacije gde je tačno nađena neka osobina na slici ili u signalu, ali ih ne gubimo, tj. ostaje informacija da je ta osobina nađena. Glavna uloga koju agregacija ima jeste da smanji broj ulaza u potpuno povezani sloj, čime se u mnogome smanjuje računarsko vreme koje je potrebno za obučavanje mreže i olakšava njenu optimizaciju.

### 2.5.3 Autoenkoderi

Autoenkoderi predstavljaju neuronske mreže koje uče da na izlazu rekonstruišu ono što je dobijeno kao ulaz. Tipična arhitektura autoenkodera prikazana je na slici 19.



Slika 19: Tipična arhitektura autoenkodera. Sastoji se od dve nezavisne neuronske mreže, enkodera i dekodera, koji su razdvojeni latentnim prostorom [84]

Vidimo da je autoenkoder sastavljen zapravo od dve neuronske mreže, enkodera i dekodera. Enkoder ima zadatak da ulazne podatke preslika u prostor manje dimenzionalnosti koji se naziva *latentni prostor*. Sa druge strane, dekoder ima zadatak da napravi preslikavanje iz latentnog prostora na ulazne varijable.

Latentni prostor je manje dimenzionalnosti u odnosu na ulazne podatke i tipično su podaci koji su bliski u prostoru atributa, bliski i u latentnom prostoru [84]. To znači da se interpolacijom između tačaka u latentnom prostoru mogu dobiti novi podaci. Poželjan je latentni prostor u kome su latentne varijable gusto spakovane i gde su prelazi između delova latentnog prostora glatki. Za proste autoenkodere često nije zadovoljen jedan od gornja dva kriterijuma. Naime, često se dešava da tačke koje su bliske jedna drugoj u latentnom prostoru

nisu bliske u prosotru atributa, ili da je latentni prostor takvog oblika da ne postoji glatki prelaz između njegovih delova. Pored ovoga, običan autoenkoder se ne može koristiti u svrhu generisanja novih podataka koji do tada nisu postojali, već se isključivo mogu generisati samo podaci koje je model video na ulazu. Kako bi se unapredile ove mane običnog autoenkodera, razvijen je model varijacionog autoenkodera, koji predstavlja model veštačke inteligencije sa Bayesovim zaključivanjem.

### 2.5.4 Varijacioni autoenkoder

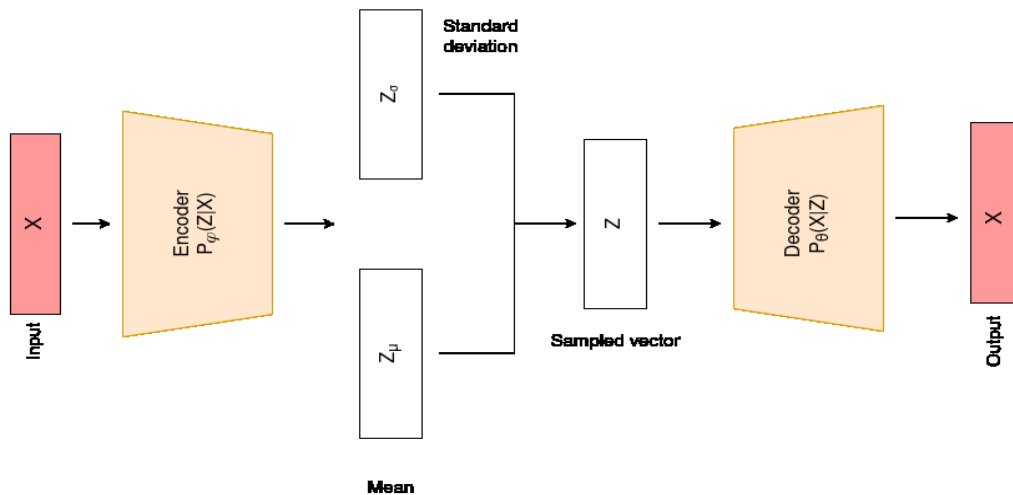
Kako bi se pravilno shvatio varijacioni autoenkoder, podesno je poći od Bayesove teoreme koja glasi [88]:

$$P(z|x) = \frac{P(x|z)P(z)}{P(x)} \quad (114)$$

U gornjoj jednačini  $P(z|x)$  predstavlja novu uslovnu verovatnoću da će hipoteza  $z$  biti zadovoljena ako je dostupna informacija  $x$ , i u Bayesovoj statistici naziva se aposteriori raspodela. Potom,  $P(x|z)$  predstavlja verovatnoću da se desi događaj  $x$  pri čemu se desio događaj  $z$  i naziva se verodostojnost.  $P(z)$  predstavlja prethodnu raspodelu (eng. *prior distribution*), odnosno verovatnoću opažanja događaja  $z$  pre nego što se desi događaj  $x$ , a  $P(x)$  predstavlja tzv. graničnu verodostojnost i ista je za svako  $z$ . Stoga, u izračunavanju  $P(z|x)$  ulogu igraju samo prethodna raspodela  $P(z)$  i verodostojnosti  $P(x|z)$ .

Pošto je prostor pretrage latentnog prostora jako veliki, aposteriori raspodela  $P(z|x)$  nikad nije unapred poznata, stoga se pribegava varijacionoj aproksimaciji, tj. zahtevu da  $P(z|x) \simeq Q(z|x)$ , pri čemu mora biti zadovoljeno da  $Q(z|x)$  pripada klasi jednostavnijih raspodela od  $P(z|x)$ .

Arhitektura varijacionog autoenkodera prikazana je na slici 20.



Slika 20: Arhitektura varijacionog autoenkodera. Enkoder ima zadatak da nauči aposteriori raspodelu  $p_\phi(z|x)$ , dok dekoder uči zajedničku raspodelu  $p_\theta(x, z) = p(x|z)p(z)$ .

Enkoder varijacionog autoenkodera ima zadatak da nauči raspodelu  $p_\phi(z|x)$ . Kako je prethodno napomenuto, pošto je ova raspodela uglavnom nepoznata, njen oblik se pretpostavlja,

tj. pokušava se dobiti da je raspodela  $p_\varphi(z|x) \simeq q_\varphi(z|x)$ , gde je  $q_\varphi(z|x)$  poznata raspodela. Tipično, za varijacioni autoenkoder pretpostavlja se da prethodna raspodela latentnih varijabli prati normalnu raspodelu  $p(z) = \mathcal{N}(0, I)$ , a potom se obučavanjem mreže postiže rezultat takav da je  $q_\varphi(z|x) = \mathcal{N}(\mu, \sigma)$ . Funkcija greške kod varijacionog autoenkodera se sastoji iz dva člana. Prvi član daje meru odstupanja generisanog izlaza od datog ulaza i često se naziva greška rekonstrukcije. Drugi član meri odstupanje  $q_\varphi(z|x)$  od  $p(z)$  i kod varijacionog enkodera se najčešće meri pomoću Kullback - Leibler divergencije. Ovaj član se još naziva i regularizacioni član jer se pomoću njega vrši regularizacija latentnog prostora sa ciljem da se slične varijable nađu što bliže u latentnom prostoru. Zbirno, funkcija gubitka varijacionog autoenkodera se naziva ELBO (eng. *Evidence Lower Bound*) i matematički se predstavlja kao:

$$ELBO = \mathbf{E}_{q_\varphi} \left[ \log \left[ \frac{p_\theta(x, z)}{q_\varphi(z|x)} \right] \right] + \mathbf{E}_{q_\varphi} \left[ \log \left[ \frac{q_\varphi(z|x)}{p(z)} \right] \right] \quad (115)$$

Greška rekonstrukcije je obično ili srednje kvadratno odstupanje ili srednje apsolutno odstupanje, dok KL divergencija za pretpostavljenu normalnu raspodelu ima oblik:

$$D_{KL}(q_\varphi(z|x)|p(z)) = -\frac{1}{2} \left( 1 + \log(\sigma^2 - \mu^2 - \sigma^2) \right) \quad (116)$$

U intuitivnom smislu, više se ne enkodira prost broj kao što je to slučaj kod običnih autoenkodera, već se enkodira raspodela. Kako bi bila moguća propagacija unazad, radi se reparametrizacija [89] i to:

$$z = \mu + \sigma \otimes \epsilon \quad (117)$$

Gde je  $\epsilon$  generisani slučajni broj iz jedinične uniformne raspodele. Drugim rečima, očekivana vrednost  $\mu$  predstavlja enkodiranu sliku sa ulaza, dok  $\sigma \otimes \epsilon$  predstavlja varijaciju toga originalni podatak može biti perturbovan, a da još uvek postoji dobro prepoznavanje na ulazu [85].

### 2.5.5 Prevenirica prilagođavanja modela veštačke inteligencije

Problem prilagođavanja modela trening podacima, pomenut nekoliko puta do sada u tezi, dovodi do loše generalizacije na nove podatke i tipično na test bazi podataka ima jako loše performanse. Postoje različite metode kojima se sprečava prilagođavanje. Ovde će biti reči samo o dve koje se najčešće koriste, a to su regularizacija i rano zaustavljanje obučavanja.

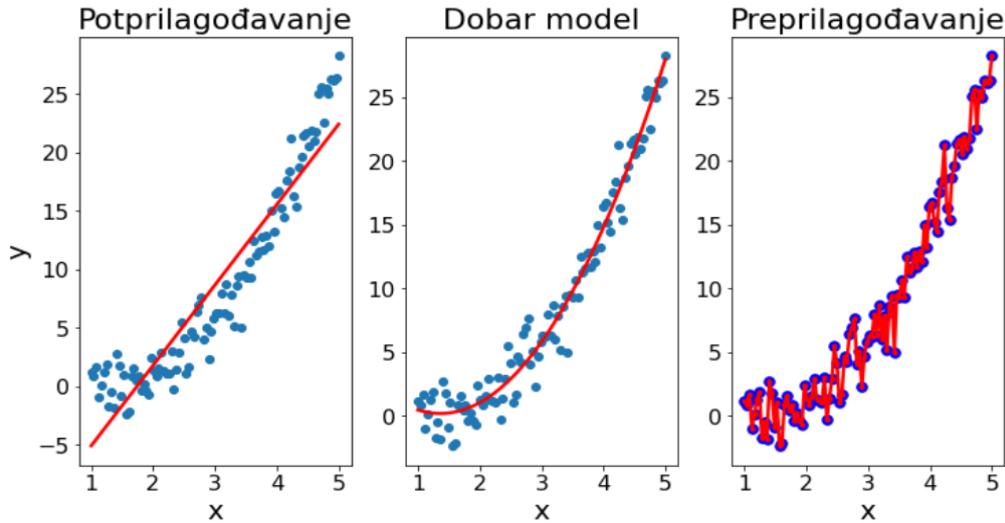
#### 2.5.5.1 Regularizacija

Regularizacija kod modela mašinskog učenja predstavlja tehniku gde se na izabranu funkciju gubitka dodaje tzv. regularizacioni član čiji zadatak jeste da oteža prilagođavanje modela i predstavlja kontratežu. Kako bi regularizacija bila iskontrolisana, dodaje se i koeficijent  $\lambda$  ispred, kako se ne bi u potpunosti sprečilo prilagođavanje modela podacima, što takođe nije cilj. Koeficijent  $\lambda$  dakle kontroliše koliko pažnje se usmerava na minimizaciju greške, a koliko na regularizacioni član [84]. Matematički, regularizaciju primenjujemo kao [84]:

$$\min \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, f_\omega(x_i)) + \lambda \Omega(\omega) \quad (118)$$

Tipično, regularizacioni član je  $l_2$  norma vektora koeficijenata, pa se dobija sledeći izraz:

$$\min \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, f_{\omega}(x_i)) + \lambda \|\omega\|_2^2 \quad (119)$$



Slika 21: Pretpostavljeni model kojeg dobro opisuje kvadratna regresija. Na slici je prikazan slučaj potprilagodavanja modela (levo), dobar model (sredina) kao i model koji se preprilagodio podacima (desno)

Pored  $l_2$  regularizacije, radi se i  $l_1$  regularizacija koja podrazumeva prostu sumu svih težinskih faktora, a ne njihovih kvadrata. Takođe, mogu se raditi obe regularizacije istovremeno. Bitno je naglasiti da se minimizacija radi na čitavom zbiru, a ne da se na minimalnu funkciju greške dodaje regularizacioni član. Dobar primer regularizacije može se ilustrovati modelom kojeg dobro opisuje kvadratna funkcija. Ova situacija opisana je na slici 21. Pretpostavimo da model može imati jedan od tri navedena oblika:

$$y = \omega_0 + \omega_1 x \quad (120)$$

$$y = \omega_0 + \omega_1 x + \omega_2 x^2 \quad (121)$$

$$y = \omega_0 + \omega_1 x + \omega_2 x^2 + \omega_3 x^3 + \omega_4 x^4 \quad (122)$$

Prvi model koji je ustvari linearna regresija, je prikazan na slici 21 levo. Ovaj model očigledno se potprilagodio podacima i ne može zadovoljavajuće da opiše vezu između ciljne promenljive i atributa, te se ne može iskoristiti za predviđanje novih rezultata. Treći model je prikazan na slici 21 desno<sup>3</sup>, gde očigledno vidimo da se model preprilagodio podacima. Model koji se dobro prilagodio podacima prikazan je na slici 21 u sredini. Ukoliko vrednosti koeficijenata  $\omega_3$  i  $\omega_4$  postanu jako bliske nuli, vidimo da se model koji se ranije preprilagodio podacima potencijalno može spečiti u tome i iskoristiti za predviđanje.

<sup>3</sup>Nije egzaktan fit, ali ideja grafika je da ilustruje slučaj preprilagodavanja uzimanjem u razmatranje više koeficijenata nego što je potrebno



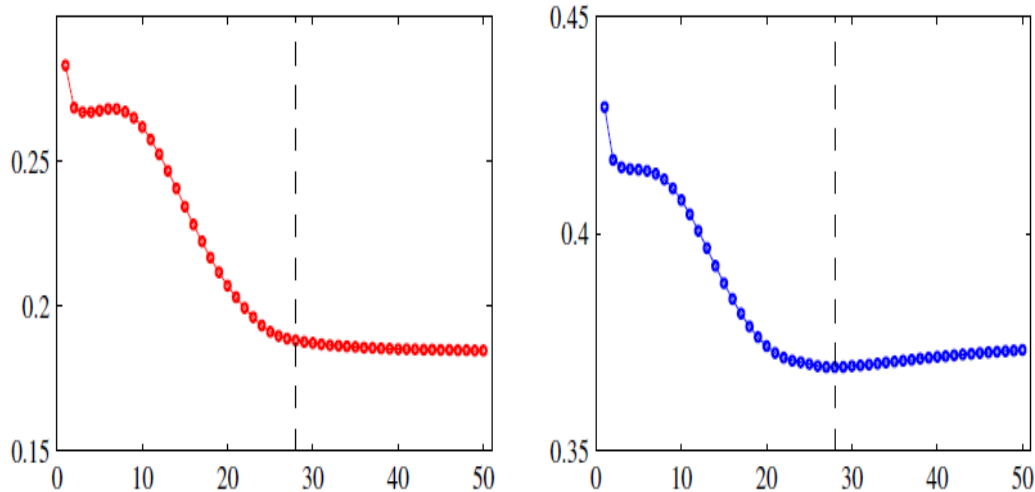
Na ovom primeru može se jasno uočiti uloga regularizacije. Ukoliko treći model u toku obučavanja poveća vrednosti  $\omega_3$  i  $\omega_4$ , to će se odraziti na sumu  $\| \omega \|_2^2$  koja će se takođe povećati, a samim tim raste i ukupna funkcija greške. Povećanje funkcije greške sprečava konvergenciju modela, pa se dobija efekat "kažnjavanja" modela ukoliko se ovi koeficijenti povećavaju. Dakle, regularizacijom se postiže snižavanje vrednosti nepotrebnih koeficijenata, odnosno detekcija atributa koji su nepotrebni u analizi. Regularizacija kod neuronskih mreža podrazumeva dodavanje regularizacionog člana na kraj aktivacije, tj:

$$a_j = \omega_0 + \sum_{i=1}^N \omega_i x_i + \lambda \| \omega \|^2 \quad (123)$$

Efekat je isti, ukoliko neki od članova ima veću vrednost od potrebne, regularizacioni član povećava funkciju gubitka i sprečava neuronsku mrežu da konvergira.

### 2.5.5.2 Rano zaustavljanje

Alternativu regularizaciji predstavlja rano zaustavljanje treninga modela i ulgavnom se koristi prilikom treninga nelinearnih modela kao što su neuronske mreže. Prilikom obučavanja neuronskih mreža, funkcija gubitka je nerastuća funkcija broja iteracija u odnosu na podatke za obučavanje mreže [88]. Međutim, ako se prati trend funkcije gubitka u odnosu na validacionu ili test bazu, onda se prvo primećuje trend opadanja koji je nakon određenog broja iteracija praćen blagim porastom. Ovaj trend ilustrovan je na slici 22.



Slika 22: Obučavanje modela. Levo je funkcija gubitka za trening bazu koja je opadajuća funkcija interakcija obučavanja, dok je desno funkcija gubitka validacione baze koja ima blagi rast nakon određenog broja iteracija. Slika je preuzeta iz [88]

Stoga je podesno zaustaviti obučavanje u trenutku kada funkcija gubitka na validacionoj bazi ne pokazuje dalje znake smanjivanja, odnosno zaustaviti obučavanje pre trenutka kada funkcija gubitka validacione baze kreće da raste.

Metod ranog zaustavljanja ima kvalitativno objašnjenje u sledećem. U trenutku započinjanja obučavanja mreže, broj stepeni slobode mreže je jako mali. Drugim rečima, kompleksnost modela je i dalje jako mala. Kako obučavanje napreduje, raste i kompleksnost mreže, a samim tim i sklonost ka preprilagođavanju podacima. Rano zaustavljanje u ovom smislu predstavlja efektivno ograničenje kompleksnosti mreže [88].

### 3 Primena mašinskog učenja za određivanje Stark-ovih poluširina linija

Prva od tri problematike primene alata mašinskog učenja u spektroskopiji i diagnostici plazme kojom se ova teza bavi predstavlja određivanje Stark-ove poluširine emitovanih atomskih linija, u okviru koje je nastala i studija regularnosti za neutralni atom litijuma. Teorijski proračuni Stark-ovih parametara se najčešće rade korišćenjem Griem-ove standardne teorije [90], Griem-ove semiempirijske formule [91], modifikovane semiempirijske formule Dimitrijevića i Konjevića [92], izloženom SCP teorijom Sahal - Brechaut i Dimitrijevića [27,28]. Purić i saradnici su u nizu radova [54, 55, 62, 63, 65, 66, 68] ispitivali regularnosti Stark-ovog efekta, što duž izoelektronskih nizova, što duž određenog prelaza unutar atoma. Kako u ovoj iscrpnoj studiji i dalje nisu našli univerzalnu ili bar aproksimativnu formulu koja bi važila za veći broj emitera, napravljen je model mašinskog učenja i testirana je njegova preciznost i tačnost pri određivanju elektronske Stark-ove poluširine spektralne linije i ispitana je mogućnost utvrđivanja regularnosti duž atomskih prelaza. U ovoj sekciji opisan je način na koji je formirana baza za obučavanje modela, a zatim je obrazložen metod kojim je izabran najbolji model sa odgovarajućim parametrima i prikazani su postignuti rezultati koji su detaljno obrazloženi u radovima [93, 94]. Obučavanje modela i predikcije rađene su u programskom jeziku python pomoću open source biblioteke sci-kit learn [95].

Značaj dobijenih rezultata leži u tome što je napravljeni model uspešno uočio očekivane regularnosti Stark-ovog efekta, što prelaza duž spektralne serije, što duž izoelektronskog niza nekog emitera. U radu su proučavane regularnosti duž spektralnih serija neutralnog litijuma, ali model se može primeniti na bilo koji emiter. Pored toga, nema više potrebe za traženjem neke generalizovane formule koja bi pokrila svaki slučaj regularnosti, jer je model dobro generalizovao fizičku sliku iza fenomena Stark-ovog širenja. Takođe, model se može koristiti za brzu procenu elektronske poluširine emitovane spektralne linije usled Stark-ovog efekta, gde su dobijena odstupanja od eksperimentalnih rezultata koja iznose između 20 i 30 %.

#### 3.1 Pravljenje baze za obučavanje modela

U svrhu formiranja baze podataka za određivanje Stark-ovih parametara, iskorištene su dve javno dostupne baze podataka koje se tiču atomskih parametara i Stark-ovih poluširina. Prva baza je Stark B baza podataka [96] gde su tabelirani Stark-ovi parametri za zadate parametere plazme. Atributi preuzeti iz ove baze podataka su: hemijski element (emiter), naelektrisanje jona, elektronska temperatura i gustina elektrona. Za potrebe nalaženja parametara povezanih sa datim prelazom, uzete su i konfiguracije gornjeg i donjeg elektronskog nivoa. Druga baza, iz koje su dobijene informacije o svim atomskim prelazima od interesa jeste NIST baza atomskih podataka. Iz NIST baze atomskih podataka iskorišteni su: energija jonizacije, energije gornjeg i donjeg elektronskog nivoa, ukupan ugaoni moment gornjeg i donjeg nivoa kao i glavni i orbitalni kvantni broj za gornji i donji energetske nivo. Algoritam povezivanja ove dve baze i dobijanja konačne radi na sledeći način. Prvo, za određeni emiter iz Stark B baze podataka uzimaju se sve konfiguracije gornjeg i donjeg energetskog nivoa za koje je izračunata poluširina emitovane linije. Nakon toga, za svaku konfiguraciju iz Stark- B baze, traži se poklapanje sa konfiguracijom iz NIST baze atomskih podataka.

Kada se poklapanje pronade, iz NIST atomske baze podataka uzima se energija tog nivoa, ukupan ugaoni moment za taj nivo, energija jonizacije, glavni i orbitalni kvantni broj za dati nivo. Energija jonizacije je potrebna za računanje efektivnog jonizacionog potencijala gornjeg nivoa  $\chi$ , parametra kojeg je uveo Purić [64] u svojim radovima o regularnosti, a računa se kao razlika energije jonizacije i energije gornjeg nivoa:

$$\chi = E_{ion} - E_j \quad (124)$$

Zbog toga što algoritmi mašinskog učenja moraju da uzimaju brojeve vrednosti, hemijski simboli elemenata su zamenjeni njihovim atomskim brojem  $Z$ . Radi boljeg razumevanja, pseudo algoritam je prikazan u algoritmu 1. Na kraju ovog postupka, uspešno je upareno 54236 prelaza za 53 različita emitera.

Nakon pravljenja baze, pristupljeno je čišćenju baze od odudarajućih podataka. Ovi odudarajući podaci nađeni su tako što je uočeno da za određeni broj prelaza ima tabelirane vrednosti energija donjeg nivoa veće od energija gornjeg nivoa, a kako je to fizički nemoguće, ovi prelazi su izbačeni iz baze podataka i nisu korišteni za trening. Takođe, kako su od interesa bile oblasti gustina elektrona  $N_e < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , elektronskih temperatura do 150 000 K, iz baze su uklonjeni svi prelazi za koje se vrednosti gustine elektrona i elektronske temperature nalaze van ovih opsega. Nakon primenjenih ograničenja, za trening modela je ostalo 34973 prelaza za 53 emitera. Model uzima 14 ulaznih atributa, i na osnovu njih predviđa Stark-ovu elektronsku poluširinu  $\omega_e$  koja je izražena u jedinicama rad/s jer se ispostavilo kao bolja opcija umesto da je data u nanometrima ili angstromima.

## 3.2 Predpriprema podataka i izbor najboljeg modela

Nakon kreiranja baze podataka, pristupljeno je predpripremi baze podataka kako bi modeli bili u stanju da što bolje nauče odnose između ulaznih atributa, a u cilju predviđanja ciljne varijable. Jedna od primetnih osobina napravljene baze podataka jesu različiti redovi veličina atributa. Na primer, gustine elektrona su reda  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , temperature elektrona reda par desetina hiljada kelvina, dok su kvantni brojevi reda veličine 10 i manji. Ako bi model bio pušten da se obučava na ovakvoj bazi podataka, ne bi se dobili dobri rezultati jer bi model bio nestabilan i algoritmi minimizacije i optimizacije bi loše radili. Stoga su svi ulazni atributi skalirani tako da uzimaju vrednosti između 0 i 1, što je jako povoljno za rad svih modela mašinskog učenja. Postoji nekoliko metoda, a u ovom radu je korišten metod standardnog skaliranja. Standardno skaliranje podataka znači da se od vrednosti svakog atributa oduzima srednja vrednost atributa i deli sa standardnom devijacijom atributa. Drugim rečima, skaliranje se vrši tako da:

$$x_{new} = \frac{x_{old} - \mu}{\sigma} \quad (125)$$

Gde je  $x_{new}$  nova vrednost atributa,  $x_{old}$  predstavlja staru vrednost atributa,  $\mu$  je srednja vrednost, a  $\sigma$  standardna devijacija atributa. Nakon skaliranja izabrani radni modeli bili su: linearna regresija, linearna regresija sa  $\mathcal{L}^2$  normom, stablo odlučivanja, slučajna šuma i gradijentno pojačano stablo odlučivanja. Pošto svaki od ovih modela ima mnogo promenljivih parametara koji se mogu optimizovati, izbor vrednosti hiperparametara modela je rađen pomoću algoritma koji se zove *Grid Search Cross Validation*. Ova tehnika se zasniva na nasumičnoj podeli baze za obučavanje u srazmeri 80% za trening i 20 % za test zadati

broj puta (u ovom radu 5 puta) za svaki model i svaki put nanovo trenira model za zadate hperparametre.

---

**Algoritam 1** Pseudo kod generisanja baze podataka

---

```

for element in Stark-BElements do
   $charge, Z \leftarrow$  OdrediNaelektrisanjeIAtomskiBroj(element)
   $elementNIST \leftarrow$  NađiElementUNISTu(element)
   $T_e \leftarrow$  Temperatura elektrona iz Stark- B
   $N_e \leftarrow$  Gustina elektrona iz Stark- B
   $\omega_e \leftarrow$  Stark-ova poluširina
   $UpperLevels \leftarrow$  Konfiguracije gornjih energetskekih nivoa iz Stark- B
   $LowerLevels \leftarrow$  Konfiguracije donjih energetskekih nivoa iz Stark- B
   $Levels \leftarrow$  Konfiguracije svih energetskekih nivoa iz NIST baze za elementNIST
   $ionEnergy \leftarrow$  NađiEnergijuJonizacije(elementNIST)
  for lowerlevel in LowerLevels do
    for level in Levels do
      if lowerlevel == level then
         $LowerBinEnergy, n_f, l_f, j_f \leftarrow$  energija donjeg nivoa i kvantni brojevi vezani
za dati prelaz
      end if
    end for
  end for
  for upperlevel in UpperLevels do
    for level in Levels do
      if upperlevel == level then
         $UpperBinEnergy, n_i, l_i, j_i \leftarrow$  energija gornjeg nivoa i kvantni brojevi vezani
za dati prelaz
         $\chi \leftarrow ionEnergy - UpperBinEnergy$ 
      end if
    end for
  end for
  if length(LowerBinEnergy) != length(UpperBinEnergy) then
    Greška return
  else
    while i != length(LowerBinEnergy) do
       $Z, T_e, N_e, charge, \chi, ionEnergy, UpperBinEnergy, j_i, LowerBinEnergy, j_f, n_i,$ 
 $l_i, n_f, l_f, \omega_e \leftarrow$  Upis u bazu za trening
    end while
  end if
end for

```

---

Za svaku podelu, model pamti rezultat i na kraju vraća najbolji rezultat modela u smislu  $R^2$  koeficijenta determinacije i parametre za koji je ovaj rezultat postignut. Razmotreni parametri za sve modele dati su u tabeli 1.

Tabela 1: Razmotreni modeli i odgovarajući hiperparametri

Model	Hiperparametri
stablo odlučivanja	max_depth = 3,5,10
Slučajna šuma	max_depth = 3,5,10
	min_samples_leaf = 3,4,5 n_estimators = 50,100,200
Gradijentno pojačano stablo odlučivanja	max_depth = 3,5,10
	min_samples_leaf = 2,3,4 n_estimators = 50,100,200

Najbolji rezultati postignuti treningom za svaki model dati su u tabeli 2.

Tabela 2: Najbolji rezultati modela nakon treninga i odgovarajući koeficijent determinacije  $R^2$

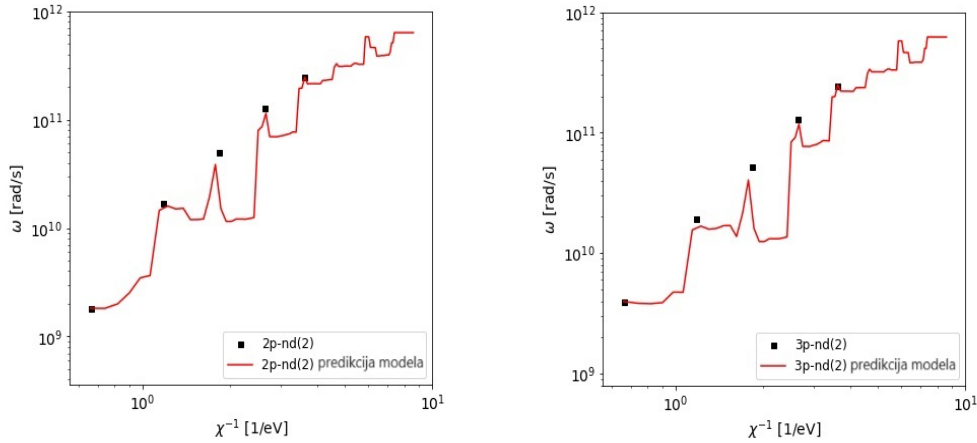
Model	Hiperparametri	$R^2$ koeficijent determinacije
stablo odlučivanja	max_depth = 5	0.9
Slučajna šuma	max_depth = 10	0.97
	min_samples_leaf = 3 n_estimators = 200	
Gradijentno pojačano stablo odlučivanja	max_depth = 10	0.96
	min_samples_leaf = 2 n_estimators = 200	

Zaključak Grid Search Cross Validation tehnike je da se najbolji rezultati dobijaju za model slučajne šume sa hiperparametrima koji su navedeni u tabeli 2. Preprilagođavanje nije problem ovde, a provereno je tako što su poređeni koeficijenti determinacije  $R^2$  dobijeni za trening podatke i za test podatke. Pošto su istog reda većinie (trening  $R^2 = 0.99$ , a test  $R^2 = 0.97$ ) zaključuje se da model nije preprilagodio podacima i da se može koristiti u analizi i predikciji Stark-ovih poluširina za različite emitere.

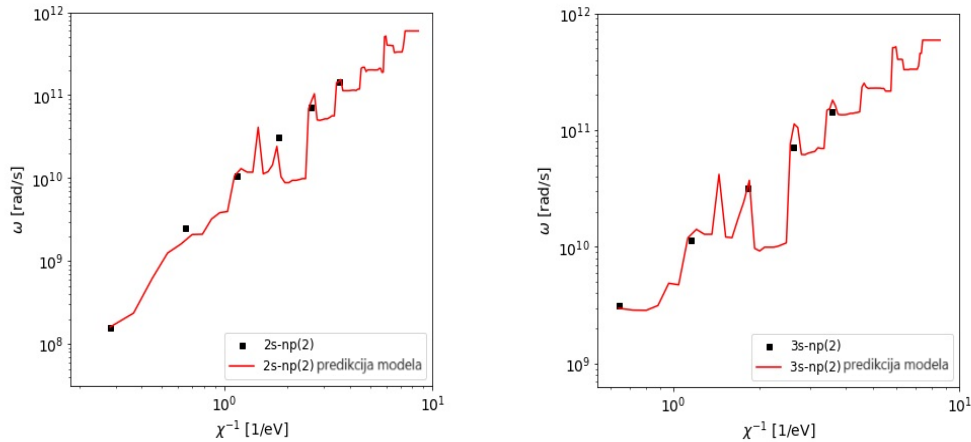
### 3.3 Analiza regularnosti Stark-ovog efekta za spektralne serije Li I

Model slučajne šume primenjen je na izučavanje regularnosti duž spektralnih serija neutralnog litijuma. Na slikama 23, 24 i 25 prikazani su rezultati predikcije modela sa izračunatim Stark-ovim elektronskim poluširinama iz Stark- B baze. Predikcije su rađene i za necelobrojne glavne kvantne brojeve, stoga fizički smisao imaju samo skokovi prikazani crvenom linijom,

dok ostali rezultati nemaju fizičkog smisla. Vidi se da je model uspešno predvideo kvantnu prirodu emisije, te da daje u skladu sa greškom razumne rezultate za ovaj tip analize.



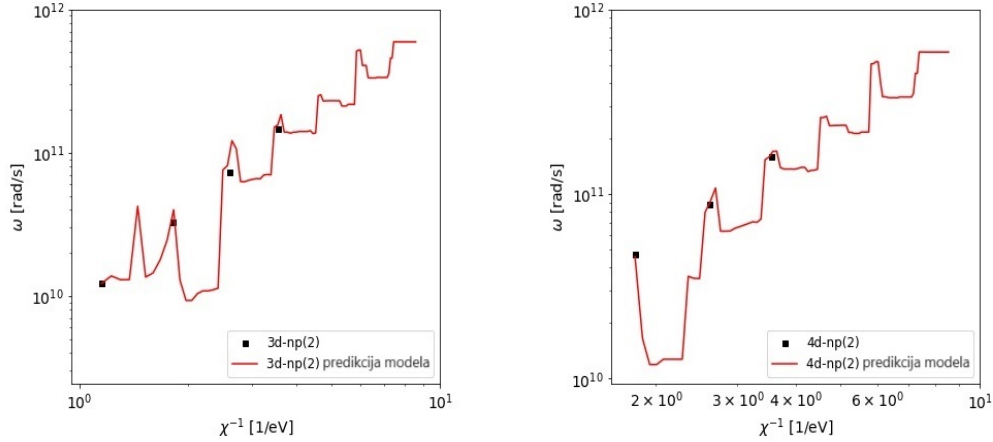
Slika 23: Predikcije modela za 2p - nd i 3p - nd spektralne serije Li I za  $N_e = 10^{20} \text{ m}^{-3}$  i  $T_e = 30\,000 \text{ K}$ .



Slika 24: Predikcije modela za 2s - np i 3s - np spektralne serije Li I za  $N_e = 10^{20} \text{ m}^{-3}$  i  $T_e = 30\,000 \text{ K}$ .

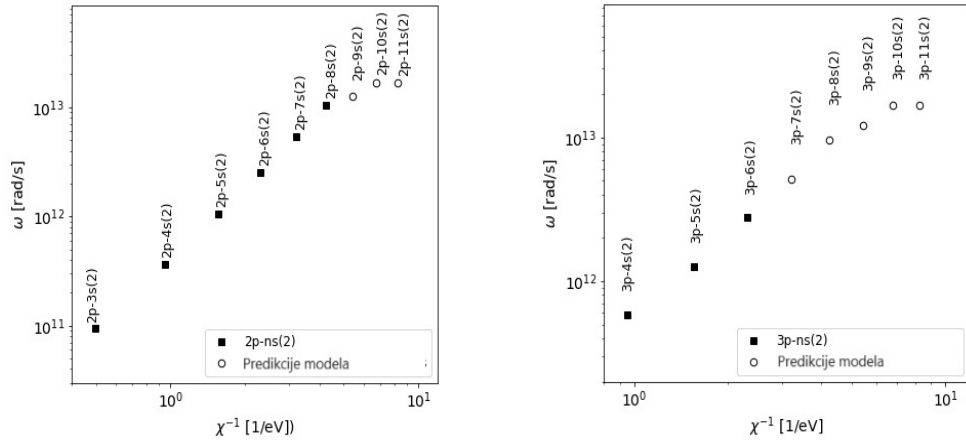
Sa slika 23 i 24 se primećuje da model nije na najbolji način predvideo energije na kojima se prelaz dešava, dok se na nekim mestima ni ne primećuje nagli skok u vrednosti. Ipak za većinu prelaza, ovo ponašanje je opaženo te se može reći da je model jasno uočio regularnosti duž spektralnih serija atoma Li I.

Od velikog interesa je bilo predvideti i elektronske Stark-ove poluširine za visoke energetske nivoe za koje ovi podaci još nisu izračunati. Predikcije su urađene za gustinu elektrona od  $N_e = 10^{22} \text{ m}^{-3}$  i temperaturu elektrona  $T_e = 30\,000 \text{ K}$ . Ovi rezultati prikazani su na slici 26. Uočava se da model dobro prati linearni trend do određenog prelaza kada nastupa saturacija. Saturacija nije bila predviđena u ranijim studijama regularnosti Stark-ovog efekta [60, 62, 63] a najverovatnije objašnjenje njenog postojanja ove jeste Debye-ev efekat ekraniiranja emitera. Naime, pošto je reč o prelazima sa vrlo visokim energijama i visokim kvantnim brojevima,



Slika 25: Predikcije modela za 3d - np i 4d - np spektralne serije Li I za  $N_e = 10^{20} \text{ m}^{-3}$  i  $T_e = 30\,000 \text{ K}$ .

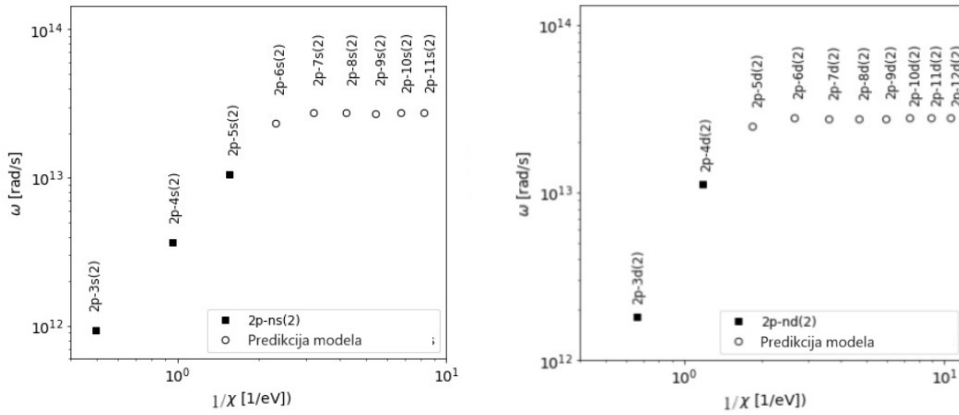
postoji verovatnoća da je emiter ekraniran i da ne vidi polje perturbujućih elektrona. Ovo predstavlja dobar primer fizičke slike koju je model uspeo da nauči iz podataka na kojima je obučavan, što znači da je postigao visok stepen generalizacije podataka.



Slika 26: Predikcije modela za 2p - ns i 3p - ns spektralne serije Li I za  $N_e = 10^{22} \text{ m}^{-3}$  i  $T_e = 30\,000 \text{ K}$ .

U cilju ispitivanja ove pretpostavke, urađena je i predikcija za veću elektronsku gustinu, za koju je Debye-ev radius manji, pa bi i saturacija trebalo da nastupi ranije, odnosno da bude uočljiva i na nižim glavnim kvantnim brojevima. Na slici 27 prikazana je predikcija modela za Stark-ove elektronske poluširine za spektralne serije 2p - ns i 2s - np za gustinu elektrona od  $N_e = 10^{23} \text{ m}^{-3}$  i  $T_e = 30\,000 \text{ K}$ . Kada se uporede slike 26 i 27 vidimo da se za spektralnu seriju 2p - ns saturacija javlja već kod glavnog kvantnog broja gornjeg energetskog nivoa  $n_i = 7$ , za razliku od gustine elektrona  $N_e = 10^{22} \text{ m}^{-3}$  gde se to dešava za  $n_i = 10$ . Ovaj rezultat predstavlja jak dokaz da je saturacija zapravo efekat Debye-vog ekraniranja. Pored regularnosti spektralnih serija, ispitana je i regularnost Stark-ovog efekta duž izoelektronskog niza atoma litijuma i rezultati su upoređeni sa eksperimentalnim podacima Blagojevića i

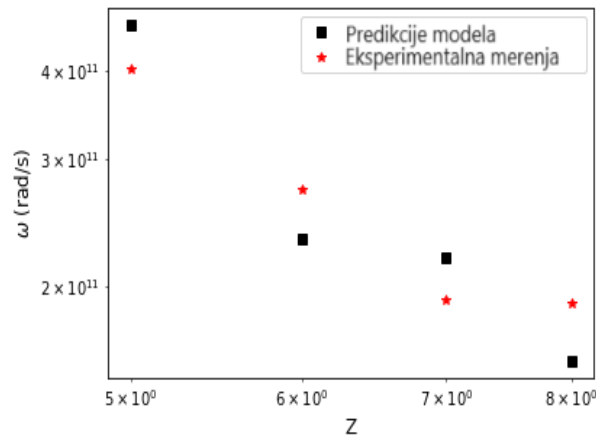




Slika 27: Predikcije modela za 2p - ns i 2s - np spektralne serije Li I za  $N_e = 10^{23} \text{ m}^{-3}$  i  $T_e = 30000 \text{ K}$ .

saradnika [97]. Rezultati su dati za 3s-3p prelaze emitera B III, C IV, N V i O VI. Predikcije modela slučajne šume prikazani su na slici 28. Sa slike se vidi slaganje između predviđenih vrednosti Stark-ovih poluširina i eksperimentalno merenih.

Vidi se da je model uspešno predvideo regularnost Stark-ovog efekta duž izoelektronskog niza koja je i eksperimentalno potvrđena.



Slika 28: Studije regularnosti Stark-ovog efekta duž izoelektronskog niza litijuma. Posmatrani prelaz je 3s-3p, a prelazi su u vidljivom delu spektra za proučavane emitere: B III, C IV, N V i O VI. Eksperimentalne i teorijski računete širine normirane na gustinu elektrona od  $N_e = 10^{23} \text{ m}^{-3}$ .

### 3.4 Procena važnosti atributa

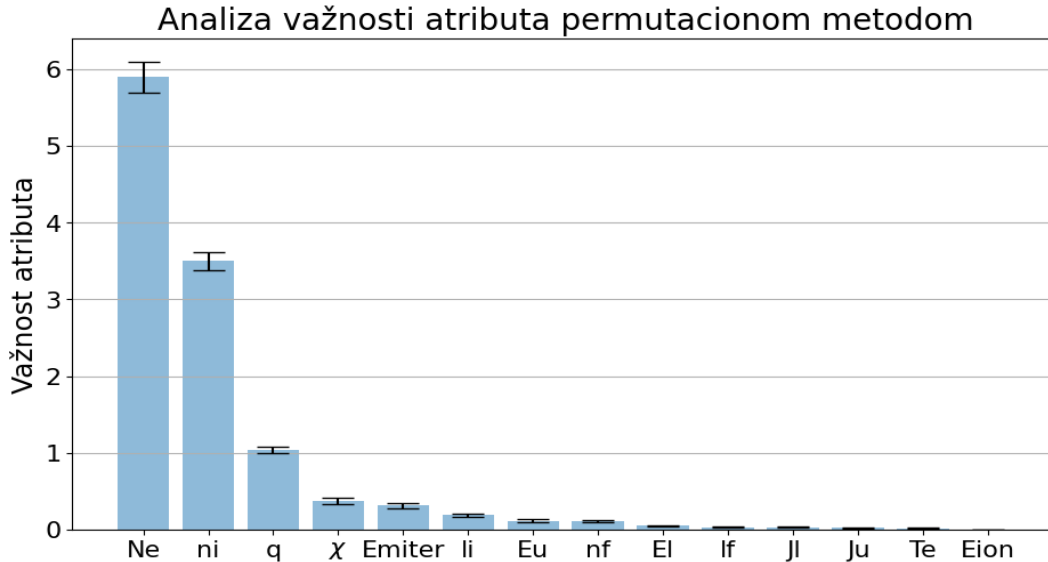
Pošto model uzima 14 ulaznih atributa na osnovu kojih se predviđa Stark-ova poluširina, može se ispitati koliko je svaki atribut pojedinačno bitan za finalnu predikciju modela. Odlučeno je da se važnost atributa za predikciju ispita korištenjem permutacione važnosti atributa (eng. *permutation feature importance*). Ovaj algoritam podrazumeva da se svaki atribut na-

izmenično permutuje sa nekim drugim atributom, pa se onda gleda opadanje performansi modela. Što je to opadanje izraženije, to je atribut bitniji za predikciju ciljne varijable. Neka je baza za obučavanje  $\mathcal{D}$ . Prvo se model obuči i izračuna referentni rezultat  $s$ . Potom se za svaki atribut  $j \in \mathcal{D}$  radi  $k$  permutacija. Za svaku permutaciju  $k$  atribut se premešta na drugo mesto u odnosu na inicijalnu bazu podataka i tako se pravi nova baza za trening koja je zapravo loša kopija originalne (eng. *corrupted database*). Za ovu bazu se onda model nanovo obučava i računa se novi rezultat predikcije, a potom i važnost atributa  $j$  preko formule:

$$i_j = s - \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K s_{k,j} \quad (126)$$

Analiza je važna sa stanovišta da li dati model može da ima manju dimenzionalnost od prvobitnog, ali tako da sačuva sve bitne informacije iz originalnog seta podataka. Takođe, u originalnoj bazi podataka postoje i redundantni podaci, npr. kada se definiše efektivni jonizacioni potencijal gornjeg nivoa preko formule (124) u njemu dalje figurišu i energija gornjeg nivoa i energija jonizacije. U originalnom modelu ovi atributi su ostavljeni, a sada treba ispitati i njihov uticaj.

Svaki atribut je permutovan 10 puta, i njegova važnost izračunata je po formuli (126). Rezultat analize prikazan je na slici 29.



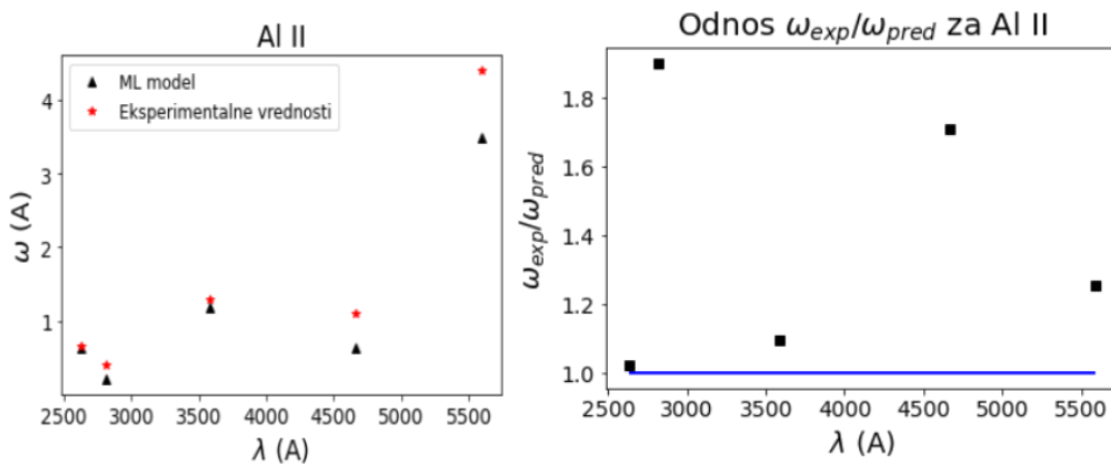
Slika 29: Analiza važnosti atributa korištenjem permutacione važnosti.

Očekivano, model smatra za najbitniji ulazni atribut gustinu elektrona što je i fizički opravdano, dok dalje imamo isključivo atomske parametre. Interesantno je da temperatura plazme jako slabo utiče na predikcije modela, što i jeste u skladu sa Stark-ovim efektom. Temperaturna zavisnost je mala, ali ipak postoji. Rezultat permutacione analize govori nam da možemo smanjiti dimenzionalnost ulaznih podataka, kako bi dobili još brži model sa istom moći predviđanja. Odbačeni atributi su energija gornjeg nivoa, jonizaciona energija, glavni kvantni broj donjeg nivoa i orbitalni kvantni broj donjeg nivoa. Ukupni orbitalni kvantni

broj oba nivoa zadržan je radi različitih multiplleta, dok je temperatura elektrona ostavljena iz fizičkih razloga jer ipak ima malog uticaja na Stark-ovu poluširinu linije. Model je ponovo obučen, ali nije bilo mnogo boljeg rezultata. Koeficijent determinacije za iste parametre slučajne šume date u tabeli 2 sada je bio  $R^2 = 0.98$ , što predstavlja blago poboljšanje, ali je srednja relativna greška modela ostala u opsegu od 8 do 10 %. Dakle, zaključak je da u početnoj analizi redundantni podaci nisu imali veliki uticaj na generalizaciju modela, stoga je nastavljeno sa korišćenjem istog modela čije su predikcije sada upoređene sa eksperimentalnim merenjima.

### 3.5 Poređenje predikcija modela slučajne šume sa eksperimentalnim podacima

Kako bi se ispitala pouzdanost razvijenog modela slučajne šume, njegove predikcije upoređene su sa eksperimentalnim podacima raznih autora. Prvo poređenje je poređenje sa rezultatima Dojića i saradnika [98] za emitere Al II i Al III. Rezultati poređenja prikazani su na slici 30.



Slika 30: Poređenje eksperimentalnih i predviđenih vrednosti za Al II. Prava linija na slici desno predstavlja slučaj kada je eksperimentalno merena poluširina jednaka predviđenoj poluširini

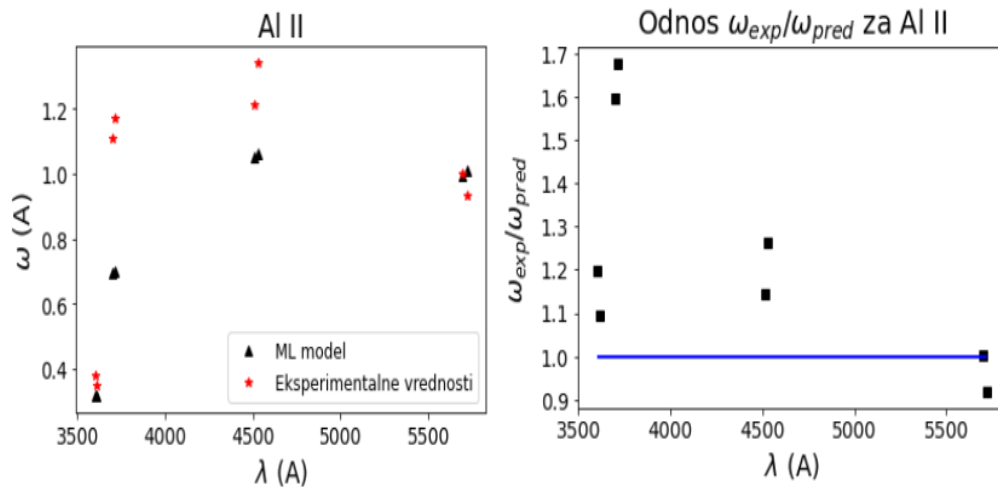
Pored slike 30 poređenje predviđenih vrednosti i eksperimentalnih vrednosti dato je u tabeli 3.

Tabela 3: Rezultati poređenja predviđenih Stark-ovih poluširina i eksperimentalno merenih vrednosti za Al II. Sve širine normirane su na gustinu elektrona od  $N_e = 10^{23} \text{ m}^{-3}$

Talasna dužina [nm]	$T_e$ [K]	$\omega_{exp}$ [Å]	$\omega_{pred}$ [Å]	$\omega_{exp}/\omega_{pred}$
263.154	26400	0.65	0.63	1.02
281.618	26400	0.40	0.21	1.89
358.66	26400	1.29	1.17	1.09
466.31	26400	1.09	0.64	1.70
559.33	26400	4.40	3.50	1.25

Sa slike 30 i iz tabele 3 može se zaključiti da je u slučaju emitera Al II srednja relativna greška predikcije modelom slučajne šume 24 %. Ova greška odgovara i SCP modelu čija usrednjena greška predikcije takođe iznosi oko 20 %.

Za Al III rezultati predikcije napravljenog modela dati su na slici 31 i u tabeli 4.

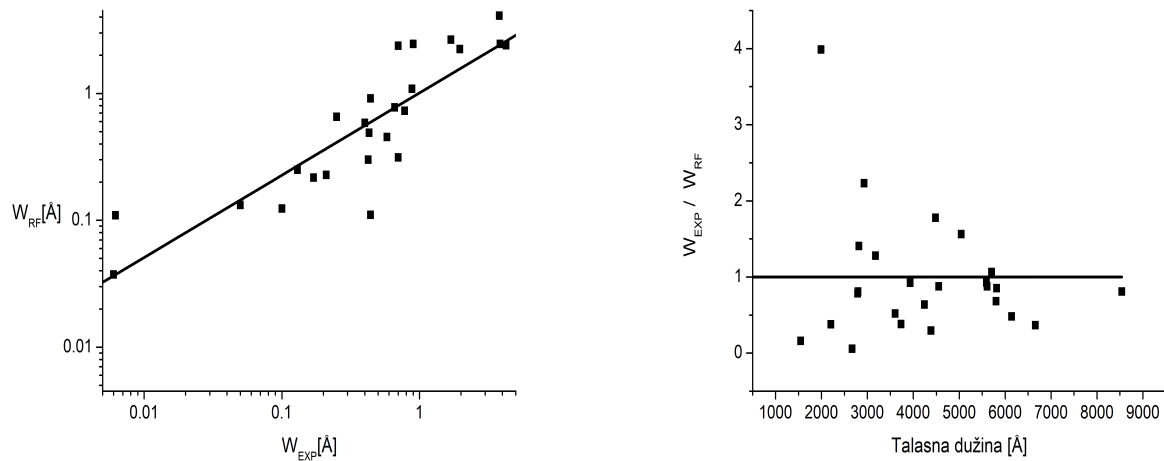


Slika 31: Poređenje eksperimentalnih i predviđenih vrednosti za Al III. Prava linija na slici desno predstavlja slučaj kada je eksperimentalno merena poluširina jednaka predviđenoj poluširini

Tabela 4: Rezultati poređenja predviđenih Stark-ovih poluširina i eksperimentalno merenih vrednosti za Al III. Sve širine normirane su na gustinu elektrona od  $N_e = 10^{23} \text{ m}^{-3}$

Talasna dužina [nm]	$T_e$ [K]	$\omega_{exp}$ [Å]	$\omega_{pred}$ [Å]	$\omega_{exp}/\omega_{pred}$
360.16	26400	0.38	0.32	1.18
361.24	26400	0.35	0.32	1.09
370.21	26400	1.11	0.70	1.59
371.31	26400	1.17	0.70	1.68
451.26	26400	1.21	1.05	1.14
452.92	26400	1.34	1.06	1.26
569.66	26400	1	0.99	1
572.27	26400	0.93	1.01	0.91

Iz tabele 4 zaključujemo da se srednja relativna greška modela za slučaj emitera Al III 18 %. Eksperimentalni podaci i predikcije modela upoređene su i za eksperimentalno određene širine iz radova [99, 100]. Rezultati ovog poređenja prikazani su na slici 32 i u tabeli 5.



Slika 32: Poređenje eksperimentalnih i predviđenih vrednosti za različite emitere date u tabeli 5. Prava linija na slici desno predstavlja slučaj kada je eksperimentalno merena poluširina jednaka predviđenoj poluširini

Tabela 5: Rezultati poređenja predviđenih Stark-ovih poluširina i eksperimentalno merenih vrednosti za različite emitere. Sve širine normirane su na gustinu elektrona od  $N_e = 10^{23} \text{ m}^{-3}$

Emiter	Talasna dužina [nm]	$T_e$ [K]	$\omega_{exp}$ [Å]	$\omega_{pred}$ [Å]	$\omega_{exp}/\omega_{pred}$
Al II	266.92	10500	0.0062	0.10	0.05
Al II	199.05	10500	0.44	0.11	3.98
Al III	360.52	50000	0.13	0.24	0.5
Al III	570.53	26400	0.78	0.73	0.06
Ba II	614.17	13000	0.44	0.91	0.48
Ba II	455.40	13000	0.49	0.43	0.87
Ca II	854.21	13000	0.88	1.08	0.80
Ca II	393.37	13000	0.23	0.21	0.92
Ca II	373.62	13000	0.25	0.65	0.38
Ca II	317.93	13000	0.58	0.45	1.27
Pb II	560.89	11600	1.96	2.23	0.87
Pb II	424.49	11600	1.69	2.64	0.63
Pb II	504.26	11600	3.84	2.45	1.56
Pb II	220.35	28000	0.05	0.13	0.05
Pb II	438.65	24000	0.70	2.37	0.29
Pb II	666.02	24000	0.90	2.45	0.36
Mg II	279.55	14300	0.12	0.10	0.80
Mg II	279.08	14300	0.17	0.21	0.78
Mg II	292.87	10000	0.70	0.31	2.23
Mg II	448.12	10000	4.26	2.39	1.78

Iz tabele 5 i sa slike 32 vidimo da model daje dobar red veličine Stark-ove poluširine emitovane spektralne linije sa tendencijom da uglavnom precenjuje njenu vrednost, što se jasno vidi sa grafika na slici 32 desno. Primetno je da model najveća odstupanja pravi u UV delu spektra, dok odstupanja teže manjim vrednostima u vidljivom delu spektra. Ukoliko izuzmemo odudarajuće podatke iz analize, dobićemo da je prosečna relativna greška modela oko 38%, što je dovoljno dobro za kvalitativnu ocenu elektronske poluširine spektralne linije koja do sada nije eksperimentalno određena. Treba takođe biti svestan i toga da su najbolje eksperimentalno određene Stark-ove poluširine i dalje date sa greškama reda veličine 15%

[99]. Ako se razmataju i analize date u tabelama 3 i 4 dolazi se do zaključka da je odstupanje modela prilikom poređenja sa eksperimentalnim vrednostima između 25 i 30 %.

## 4 Primena mašinskog učenja u LIBS kvantitativnoj analizi

Cilj istraživanja u ovom radu bio je ispitati mogućnost korištenja baze podataka za obučavanje modela snimljene pod kontrolisanim eksperimentalnim uslovima u jednoj laboratoriji, koji bi posle bio korišten za predviđanje sastava nepoznatih uzoraka iz spektara snimljenih u drugoj laboratoriji pod istim eksperimentalnim uslovima. Važnost rezultata dobijenih u ovom radu predstavlja i to da standardni uzorci nisu dostupni svim laboratorijama, skupi su, a i treba ih imati više desetina kako bi se postigla što bolja varijansa u bazi za obučavanje. Zbog toga što se zbog svojih osobina i dalje razmatraju kao referentni materijali za prvi zid reaktora [101], odlučeno je da ispitivani uzorci budu austenitni nerđajući čelici.

Što se tiče pristupa kvantitativnoj analizi u LIBSu, razlikuju se dve metode. Jedna je metoda univarijantne kalibracije, tj. pravljenje standardne kalibracione krive za intenzitet pogodno odabrane linije i određivanje nepoznate koncentracije prisutnog elementa iz ove kalibracione krive. Drugi način jeste da se iz Saha - Boltzmann-ove jednačine odrede gustina elektrona i elektronska temperatura, što dalje omogućava određivanje nepoznate koncentracije konstituenta metala nezavisno od efekta osnove. Za ovaj pristup neophodno je pretpostaviti važenje lokalne termodinamičke ravnoteže (LTR) u plazmi i on je poznat i kao bezkalibracioni metod (eng. *Calibration - Free LIBS*) [102]. Kako bi se ubrzala kvantitativna analiza uzoraka, u LIBS zajednicu ušla je i primena mašinskog učenja i veštačke inteligencije [103–106]. Osnovni algoritmi koji se najčešće koriste pri analizi jesu analiza glavnih komponenti (PCA) za snižavanje dimenzionalnosti ulaznih parametara (to su najčešće merene talasne dužine), potom metoda potpornih vektora (SVM) za klasifikaciju po kategorijama ili metod parcijalnih najmanjih kvadrata za kvantitativnu analizu [107]. Pored ovih osnovnih algoritama mašinskog učenja, razni autori su primenili i proste duboke neuronske mreže ili konvolucionalne neuronske mreže za klasifikaciju ili za kvantitativnu analizu različitih tipova uzoraka [108–112].

Nelinearni modeli mašinskog učenja, poput slučajnih šuma, takođe su u širokoj upotrebi u analizi LIBS spektara [113–116]. Pre same konstrukcije modela, umesto metode glavnih komponenti koja traži pravce maksimalne varijanse u podacima, mogu se koristiti i neki drugi algoritmi kao što su već pomenuti metod permutacione važnosti atributa, potom Gini-jev kriterijum važnosti atributa, kao i drugi metodi napravljeni od strane autora direktno. Iako su glavne linije emitera koji se očekuju uglavnom poznate, poboljšanje automatske detekcije glavnih linija u spektru u mnogome ubrzava kvantitativnu analizu. U slučaju LIBS analize čelika, koji su od interesa i u ovom radu, Zhang i saradnici [117] su primenili metod slučajne šume za određivanje sastava nepoznatih čeličnih uzoraka, dok su kasnije u radu [118] primenili i neuronsku mrežu kombinovanu sa predloženim algoritmom selekcije najvažnijih atributa koristeći sopstveni algoritam SelectKBest za određivanje koncentracije elemenata koji su prisutni u tragovima u meti. Dalje, za izbor najrelevantnijih atributa Liu i saradnici [119] su koristili metod permutacione važnosti atributa primenjen na model slučajne šume kako bi izvršili smanjenje dimenzionalnosti ulaznih podataka. Gini-jev kriterijum, koji je korišten i u ovom radu, korišten je u radovima [120, 121] u kombinaciji sa metodom slučajne šume za studiju klasifikacije, međutim ova kombinacija procene važnosti atributa i modela za predikciju nije bila do sada korištena za kvantitativne analize u LIBS zajednici i predstavljaju njen potencijalni originalni doprinos.



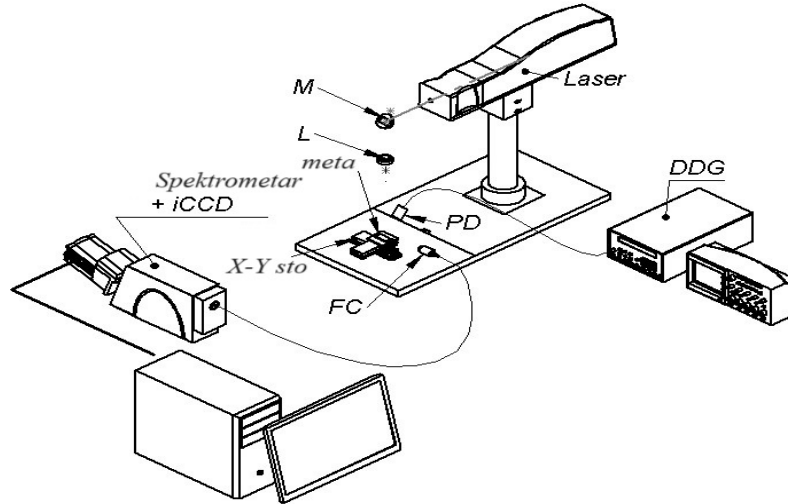
Jedan od problema koji se pojavljuje pri primeni veštačke inteligencije u LIBS zajednici jeste pravljenje dovoljno velike baze za obučavanje modela. To zahteva da eksperimentator poseduje veliki broj standardnih uzoraka (barem 50) koji su često i skupi te ih veliki broj laboratorija ne može priuštiti. Takođe, eksperimentator mora obezbediti i da se uslovi snimanja ne menjaju u toku akvizicije spektara, što značajno otežava rad. Jedne od jako pouzdanih baza podataka napravljene su za LIBS konferencije, u sklopu kojih se održava tradicionalno takmičenje uporedne procene (*benchmarking*) na temu primene veštačke inteligencije u LIBS-u. Na poslednjoj konferenciji LIBS 2022 u Bariju, rađena je LIBS kvantitativna analiza i određivanje koncentracije glavnih elemenata u čeliku, a baza za obučavanje je javno dostupna [122]. Postojanje javno dostupne i pouzdane baze podataka predstavljalo je idealnu priliku za testiranje mogućnosti obučavanja modela na već unapred pripremljenoj bazi za obučavanje, pri čemu se u laboratoriji eksperimentatora snimaju samo spektri nepoznatih test uzoraka. Ovo je bilo moguće izvesti jer u laboratoriji za spektroskopiju plazme i lasere u Institutu za fiziku postoji sva neophodna oprema kako a i potrebno iskustvo za postavljanje identičnog eksperimenta i postizanje približno istih uslova snimanja baze za obučavanje. Glavni cilj ovog rada je testiranje greške koja se inherentno uvodi u ovakvom procesu, kao i analiza metoda koje mogu da se preduzmu kako bi se iste minimizovale.

U nastavku, opisana je eksperimentalna postavka LIBS sistema za akviziciju. Nakon toga, objašnjen je postupak predpripreme baze za obučavanje i sam odabir modela, nakon čega su izloženi i rezultati. Celokupni rezultati ovog poglavlja predstavljeni su u radu [123], a sve analize rađene su u programskom jeziku python primenom sci-kit learn i keras biblioteka otvorenog koda [95].

## 4.1 Opis eksperimenta

Eksperimentalna postavka bila je identična kao ona opisana u propratnom fajlu koji je došao uz bazu za obučavanje i prikazan je na slici 33. Predstavlja klasičnu LIBS eksperimentalnu postavku gde se laserski zrak iz Nd:YAG lasera Quantel koji radi na osnovnom harmoniku  $\lambda = 1064$  nm, ima vreme trajanja impulsa od 6 ns i repeticiju od 10 Hz fokusira na metu preko ogledala M i sočiva L žižne daljine  $f = 15$  cm. Spektar generisane plazme se posmatra preko fokusirajućeg kolimatora žižne daljine  $f = 4.4$  cm i fiber optičkim kablom se vodi do spektrometra Mechelle 5000 i detektuje preko Andor iStar ICCD kamere hladene na  $-15$  °C. Kako bi se dobio što bolji odnos signal šum, korišteno je pojačanje kamere od 80 (mogući opseg 0-255). Kamera je okidana preko generatora kašnjenja Stanford Research Systems 535 (DDG generatora), kojim je kontrolisano kašnjenje kamere i njena ekspozicija. Sam DDG je okidan preko fotodiode PD koja je posmatrala plazmu. Meta je pomerana pomoću X-Y motorizovanog pomerača kako bi imali "šveže" mesto za novi pucanj. Akvizicija je rađena tako što se ispred laserskog zraka montirao opto - mehanički prekidač koji je povezan sa kontrolerom za brojanje impulsa. Na kontrolor je doveden sinhronizacioni signal iz lasera, koji vrši brojanje tih impulsa. Nakon izbrojanih 16 impulsa, prekidač se aktivira i laserski zrak se blokira. Ovo predstavlja jedno snimanje, a rađeno je usrednjavanje 20 ovakvih snimanja. To efektivno daje 320 laserskih pucnjeva u isto mesto. Rezultujući test spektar dobijen je kao zbir 5 ovako dobijenih spektara. Eksperiment je rađen u vazduhu, energija lasera bila je podešena na  $(96.1 \pm 1.2)$  mJ, dok je kašnjenje bilo  $0.6 \mu\text{s}$  a ekspozicija kamere  $50 \mu\text{s}$ . Diametar spota na meti bio je približno 0.2 mm, kako bi što bolje ponovili uslove snimanja.

Priprema uzoraka za snimanje uključivala je brušenje uzoraka sa brusnim papirom granulacije 200, pa potom sa brusnim papirom granulacije 600, te je na kraju površina uzorka obrisana sa etanolom.



Slika 33: Eksperimentalna postavka. Laserski impuls iz Nd:YAG lasera Quantel (6 ns,  $\lambda = 1064$  nm, 95 mJ) je preko ogledala M i sočiva L fokusiran na metu od čelika koja se nalazila na X-Y pomeraču.

Spektar svakog čelika snimljen je Mechelle 5000 spektrometrom za jedan pucanj Nd:YAG lasera, energije 95 mJ, talasne dužine  $\lambda = 1064$  nm i dužine trajanja impulsa od 10 ns, dok je promjer laserskog spota na meti bio 0.2 mm. Ovo su uslovi koji su ponovljeni prilikom snimanja test spektara.

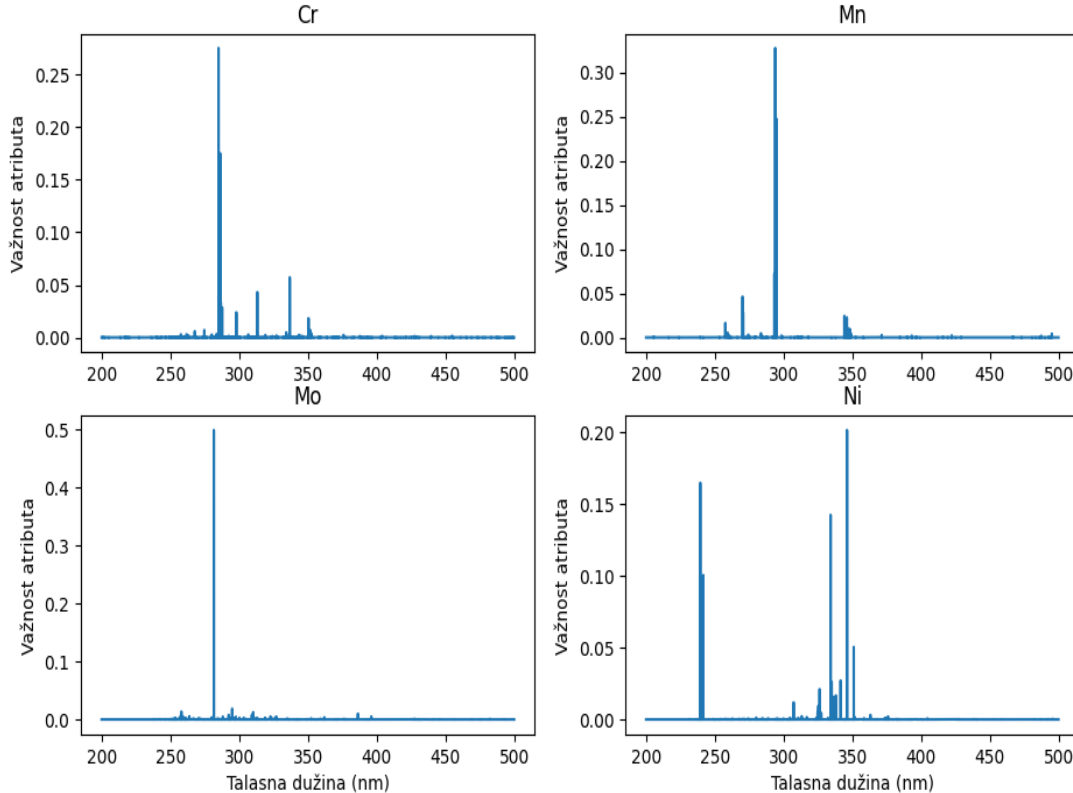
## 4.2 Predpriprema podataka

Snimljeni spektri u bazi za obučavanje su spektri 42 različite vrste čelika. Za svaki uzorak, u bazu je akumulirano 50 spektara. Ovo daje ukupno 2100 spektara u bazi za obučavanje, što predstavlja dovoljan broj kako bi se razvio dobar prediktivni model. Kako bi model što bolje naučio ulazne podatke, oni su normalizovani koristeći Standard Normal Variate (SNV) metodu normalizacije. Ova metoda podrazumeva da se od intenziteta svakog piksela oduzme srednja vrednost intenziteta svih piksela i podeli sa standardnom devijacijom snimljenog spektra [124]:

$$I_{new} = \frac{I_{old} - I_{\mu}}{\sigma} \quad (127)$$

Pri čemu je  $I_{new}$  vrednost intenziteta nakon normalizacije,  $I_{old}$  je merena vrednost intenziteta,  $I_{\mu}$  predstavlja srednju vrednost intenziteta a  $\sigma$  standardnu devijaciju spektra. Nakon normalizacije, uklanjanje odudarajućih podataka urađeno je sa algoritmom izolacione šume (eng. *Isolation Forest*). Potom, urađeno je i skaliranje podataka koristeći MinMax skaliranje dato sa:

$$I_{new} = \frac{I - I_{min}}{I_{max} - I_{min}} \quad (128)$$



Slika 34: Važnost ulaznih atributa. Vidi se da su prepoznate neke od glavnih analitičkih linija elemenata od interesa. Na primer, prepoznata je Mo II linija na 281.61 nm, a velika važnost je takođe data je i atributima jonskih linija Ni II na 239.45 nm i Ni II na 241.6 nm. Pored toga, za atom hroma veliku važnost imaju linije Cr II na oko 286 nm i 336 nm.

Ovo skaliranje dovodi vrednosti atributa na vrednosti između 0 i 1, što predstavlja stabilan opseg za većinu algoritama veštačke inteligencije i mašinskog učenja.

Pošto je ulazni set podataka velike dimenzionalnosti (40002 kolone), potrebno ga je smanjiti uz očuvanje najbitnijih informacija. Prvo smanjenje je jednostavno postignuto smanjenjem opsega emitovanog spektra na oblast talasnih dužina između 200 i 500 nm, jer u ovom opsegu leži većina analitičkih linija elemenata od interesa. Dimenzionalnost baze nakon ovog koraka iznosila je oko 15 000 kolonaje oko 15 000 kolona, što je i dalje prevelika brojka, pa je za dalju redukciju dimenzionalnosti iskorišten Gini-jev indeks. Biranjem atributa za koji je Gini-jev indeks najmanji, povećava se čistoća sledećih uzoraka, što rezultira time da algoritam na kraju teži da ostavi čiste uzorke sa samo jednom vrednošću za date ulazne podatke. Algoritam mašinskog učenja koji ima implementiran ovaj algoritam jeste slučajna šuma, koja je korištena za dalju redukciju podataka. Za svaki element od interesa (Cr, Ni, Mo i Mn) formirana je slučajna šuma sa različitim hiperparametrima. Koristeći GridSearchCV algoritam opisan u prethodnom poglavlju, nađeni su optimalni hiperparametri. Broj stabala odlučivanja u slučajnoj šumi za svaki element postavljen je na 300, dok dubina drveta nije

ograničavana. Svi ostali parametri modela ostali su na svojim podrazumevanim vrednostima. Rezultat analize važnosti ulaznih atributa korišćenjem Gini-jevog indeksa prikazan je na slici 34. Na slici vidimo da su prepoznate neke od glavnih analitičkih linija elemenata od interesa. Prepoznata je Mo II linija na 281.61 nm, a velika važnost data je i atributima jonskih linija Ni II na 239.45 nm i Ni II na 241.6 nm. Takođe veliku važnost imaju i linije Cr II na oko 286 nm i 336 nm. Granica važnosti atributa je menjana, a najbolji rezultati dobijeni su za  $2 \times 10^{-4}$ .

### 4.3 Rezultati

Nakon smanjenja dimenzionalnosti baze za obučavanje, broj spektara korišten za obučavanje je dat u tabeli 6.

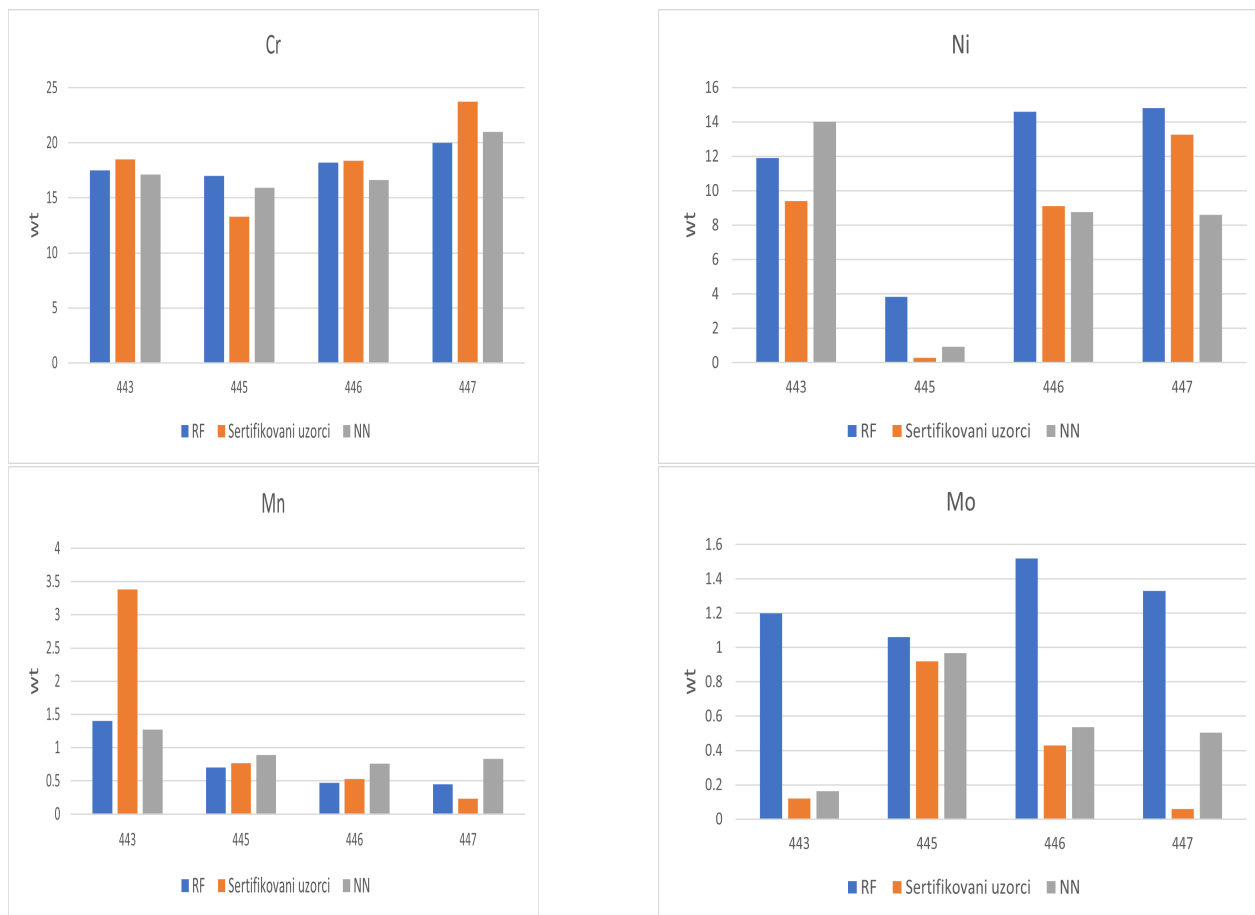
Tabela 6: Ukupna dimenzionalnost baze za obučavanje i broj uzoraka za obučavanje modela

Element	Broj ulaznih atributa	Broj spektara za trening	Broj spektara za validaciju
Cr	273	1608	492
Ni	120	1608	492
Mn	129	1608	492
Mo	317	1608	492

Instancirana su četiri modela, jedan za predikciju koncentracije svakog elementa od interesa. Korištena su dva različita prilaza, jedan je slučajna šuma, a drugi je prosta potpuno povezana neuronska mreža. Dakle, to čini ukupno četiri instancirane slučajne šume i četiri instancirane neuronske mreže. Svaki instancirani model slučajne šume je imao 350 stabala odlučivanja, dok je arhitektura svake neuronske mreže bila sa tri skrivena sloja sa 100, 150 i 50 neurona respektivno. Aktivaciona funkcija je bila ReLU, a maksimalan broj iteracija postavljen na 1000. Kao što se iz tabele 6 može zaključiti, baza za obučavanje podeljena je u odnosu 80% prema 20% za trening i validaciju svakog modela. Rezultati predikcije modela poređeni su na dva načina: preko koeficijenta determinacije  $R^2$  i preko korena iz srednjeg kvadratnog odstupanja RMSE (eng. *Root Mean Square Error*). Ovi rezultati prikazani su u tabeli 7.

Tabela 7: Rezultati predikcije modela slučajne šume (RF) i neuronske mreže (NN) na bazi za validaciju modela za elemente od interesa

Element	$R^2_{RF}$	$R^2_{NN}$	RMSE <sub>RF</sub>	RMSE <sub>NN</sub>
Cr	0.88	0.97	3.68	1.84
Ni	0.97	0.98	1.77	1.21
Mn	0.89	0.93	0.39	0.31
Mo	0.85	0.96	0.51	0.26



Slika 35: Predviđene koncentracije korištenjem RF i NN modela i njihovo poređenje sa sertifikovanim vrednostima. Brojevi na x - osi označavaju laboratorijski broj uzorka. Slika sugerše da je model postigao dobre rezultate za Cr, Mn i Ni, ali sa druge strane RF model je imao loš performans za slučaj molibdena Mo.

Na osnovu tabele 7 može se videti da je na osnovu oba parametra, neuronska mreža dala bolje rezultate za sve elemente od interesa.

Tabela 8: Koncentracije elemenata od interesa za laboratorijske uzorke čiji je spektar izmeren u ovom radu

Element	443 (Cr18.5-Ni9.5)	445 (AISI 410)	446 (AISI 321)	447 (AISI 309)
Cr	18.5	13.31	18.35	23.72
Ni	9.4	0.28	9.11	13.26
Mn	3.38	0.77	0.53	0.23
Mo	0.12	0.92	0.43	0.053

Međutim, cilj ovog rada bio je ispitati da li je moguće nakon obučavanja modela na

već dostupnoj bazi podataka koristiti isti model za predviđanje koncentracije nepoznatih uzoraka snimljenih pod istim uslovima u drugoj laboratoriji. Zbog toga je snimljen spektar 4 austenitna čelika laboratorijskih oznaka 443, 445, 446 i 447 čije su koncentracije elemenata od interesa unapred poznate i date su u tabeli 8. Koncentracije dobijene sa oba prilaza prikazane su na slici 35. Izloženi rezultati ukazuju da je moguće istrenirati model, a potom model koristiti za predviđanje test uzoraka snimljenih u sopstvenoj laboratoriji. Treba takođe naglasiti da je u ovom slučaju posao bio otežan činjenicom da ulazni spektri u bazi za obuku nisu bili korigovani na intenzitet, stoga ni ulazni test spektri nisu bili korigovani na intenzitet. Može se videti da neuronska mreža daje dobre rezultate za sve elemente, slučajn šuma (RF) nešto lošije, pa je u slučaju molibdena došlo i do preprilagođavanja modela trening podacima. Model za predikciju molibdena je još jednom obučen, pri čemu su korišteni svi ulazni atributi bez ikakve redukcije, međutim rezultati predikcija na validacionom skupu podataka kao i na test skupu su ostali isti.

## 5 Primena veštačke inteligencije za modelovanje EUV spektra volframa

Kako je volfram izabran za materijal prvog zida budućih fuzionih reaktora, sprovedene su intenzivne studije emitovanog elektromagnetnog spektra volframa u različitim tokamacima i steleratorima [125–130], ili u joniskim zamkama elektronskog snopa [131, 132] (EBIT). Joni sa najgornjom N ljuskom ( $n = 4$ ) predstavljaju dominantnu vrstu u plazama sa elektronskim temperaturama reda 0.6 do 4 keV. Emitovane spektralne linije većinom leže u oblasti ekstremnog ultraljubičastog zračenja i mekog X zračenja. Zbog veoma kompleksne strukture energetskih nivoa jona sa parcijalno popunjenom 4d ili 4f podljuskom, jako veliki broj emitovanih linija se stapa u veoma uskom intervalu talasnih dužina. Ovo stapanje dovodi do pojave kvazikontinuurnog spektra koji se naziva UTA (eng. za *Unresolved Transition Array*) spektar. Tipičan primer jeste UTA spektar volframa koji nastaje  $n = 4-4$  prelazima jona volframa različitih stepena jonizacije koji se međusobno stapaju na oko 5 nm, pa se dobija nešto nalik kvazikontinuurnoj traci [128]. Prvi pokušaji modelovanja ovakvog tipa spektra korištenjem CR modela nije u potpunosti uspelo delimično usled numeričkih ograničenja proračuna, a delom i zbog nemogućnosti da se uključe komplikovane pobuđene elektronske konfiguracije različitih emitera [126–129]. Dugi niz godina, spektri volframa proučavaju se na heliotronu LHD u Japanu pomoću različitih spektrometara [128–130]. Ova mašina pokazala se kao dobra za snimanje spektara volframa zbog visoke temperature jezgra plazme, intenziteta spektralnih linija koje su emitovane i robustnosti prilikom ubacivanja nečistoća. Kao rezultat ovih istraživanja, formirana je velika baza emitovanih spektara volframa. Stoga se prirodno nameće upotreba veštačke inteligencije kao rešenja za modelovanje ovog tipa spektra.

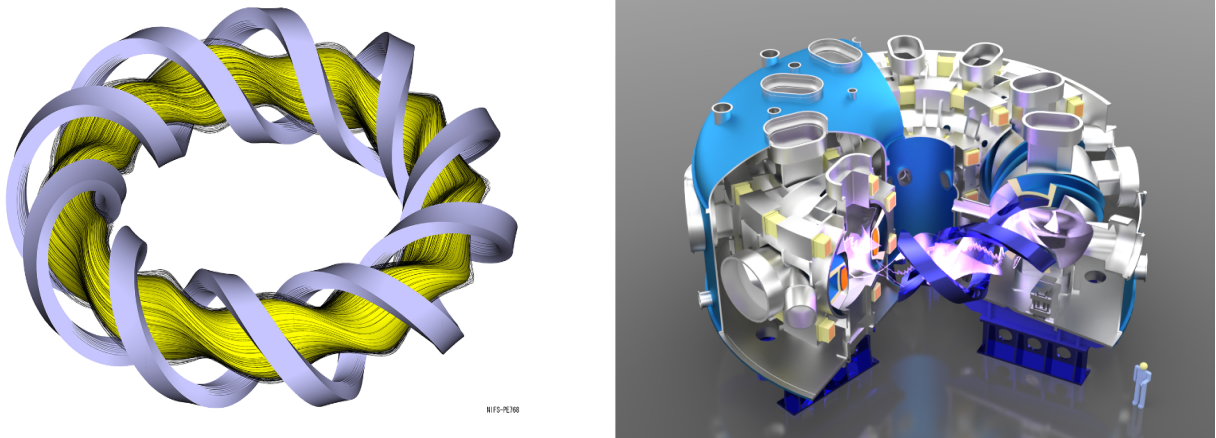
Za te svrhe, iskorišten je varijacioni autoenkoder (VAE), čija je arhitektura i princip rada objašnjen ranije u sekciji 2.5.4. Što se tiče primene varijacionih autoenkodera u fizici, najčešće se koriste za pravljenje kombinovanih modela, gde se koriste samo enkoder ili dekodekter. Naprimera, Streeter i saradnici [133] su koristili VAE kako bi enkodirali profile gustine elektrona i profila rasejanja laserskog zraka, čije su latentne reprezentacije zajedno sa vrednostima laserske energije iskorištene za pravljenje drugog modela koji daje finalne predikcije. U niskotemperaturnoj plazmi, Daly i saradnici [134] su iskoristili VAE za modelovanje spektra ICP plazmi, tako što su konstruisali neuronsku mrežu koja je za unapred zadate parametre plazme naučila latentnu reprezentaciju spektara, odakle su pomoću dekodektera rekonstruisali nove spektre.

Veštačka inteligencija i mašinsko učenje široko su rasprostranjeni i u fizici fuzionih plazmi. Piccione i saradnici [23] su iskoristili model slučajne šume i različite vrste neuronskih mreža kako bi proučavali MHD stabilnost tokamaka na bazi podataka dobijenoj merenjima na NSTX tokamaku. Li i saradnici [24] su iskoristili fluidne modele u kombinaciji sa potpuno povezanim neuronskim mrežama kako bi predvideli dominantne tip turbulencije kao i transportne osobine. Sa druge strane, Fu i saradnici [135] su koristili slučajnu šumu za predviđanje modova cepanja (eng. *tearing modes*) i disrupcija sa jako velikom tačnošću. Slučajna šuma je takođe korištena i u modelima Brenzkea i saradnika [21] kako bi predvideli snagu deponovanu na divertor na ASDEX-U tokamaku. Takođe, nedavno su Wei i saradnici [136] pokazali da veštačka inteligencija može uspešno biti primenjena i na rekonstrukciju profila faktora sigurnosti u tokamaku. Što se tiče varijacionog enkodera, on je iskorišten u radu Ferreira

i saradnika [137] kako bi detektovali anomalije u bolometarskoj tomografiji i te anomalije koristili kao perkurzore za disrupcije. Pored toga, Wei i njegovi saradnici [138] su iskoristili VAE kako bi našli oblasti stabilnosti tokamaka.

## 5.1 Opis eksperimenta

LHD predstavlja  $l = 2$ ,  $m = 10$  heliotron sa superprovodnim kalemovima koji se nalazi u Japanu, u Nacionalnom institutu za fuziona istraživanja. Ovaj heliotron prilazan je na slici 36.



Slika 36: Heliotron LHD u Japanu. Levo je prikazan oblik plazme u mašini, dok je desno prikazan sam uređaj sa kriostatom. Slike su preuzete sa zvaničnog sajta NIFSa i javno su dostupne

Parametri LHDa dati su u tabeli 9.

Tabela 9: Parametri LHDa

Veliki radius	3.9 m
Manji radius	0.6 m
Zapremina plazme	30 m <sup>2</sup>
Jačina magnetnog polja	3.6 T
Ukupna snaga grejanja plazme	36 MW

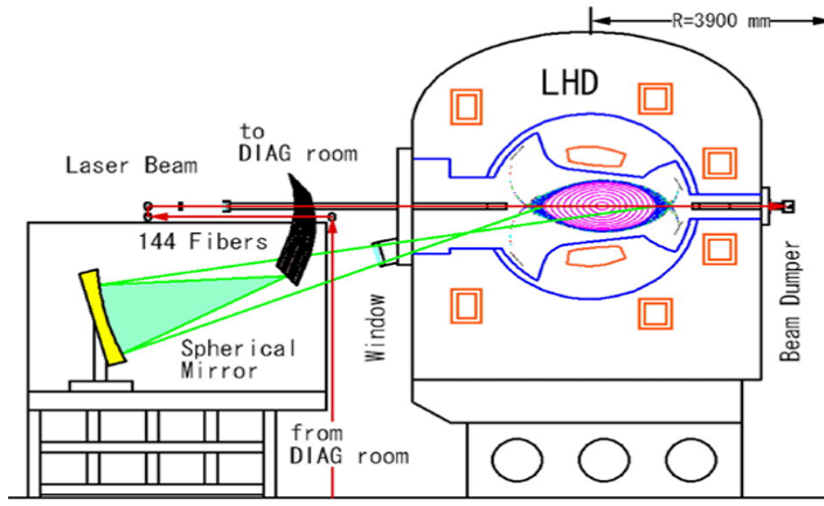
Grejanje plazme ostvaruje se pomoću 5 NBI (eng. *Neutral Beam Injection*) modula ukupne snage 27 MW i instaliranih ECH (eng. *Electron Cyclotron Heating*) i ICRH (eng. *Ion Cyclotron Resonance Heating*) žirotrona. Za ECH antene mogu da isporuče 1.3 MW u kontinualnom modu ili oko 2 MW u toku od 2 s. Antene od ICRHa daju 1.3 MW u toku 6 s u opsegu frekvencija 25 do 100 MHz ili 0.8 MW kontinualno. LHD je opremljen raznim vrstama dijagnostičkih uređaja, a u ovom radu korišteni su sistemi za Thomson-ovo rasejanje, EUV



spektrometar SOXMOS (*Soft X-Ray Multichannel Spectrometer*) kao i sistem za ubacivanje čestica TESPEL (*Tracer-Encapsulated Solid Pellet*) i o ovim sistema će biti reči u nastavku.

### 5.1.1 Thomson-ovo rasejanje

Heliotron LHD opremljen je sistemom za detekciju Thomson-ovog rasejanja koji se sastoji od 4 Nd:YAG lasera (jedan Continuum DLS 9030 energije 1.6 J repeticije 30 Hz, dva Thales SAGA 230-10 energije 2 J i repeticije 10 Hz i jedan Continuum NY-8050 energije 0.55 J i repeticije 50 Hz), kolektorske optike i detektora. Ovaj sistem je prikazan na slici 37 i detaljno opisan u radu [139].



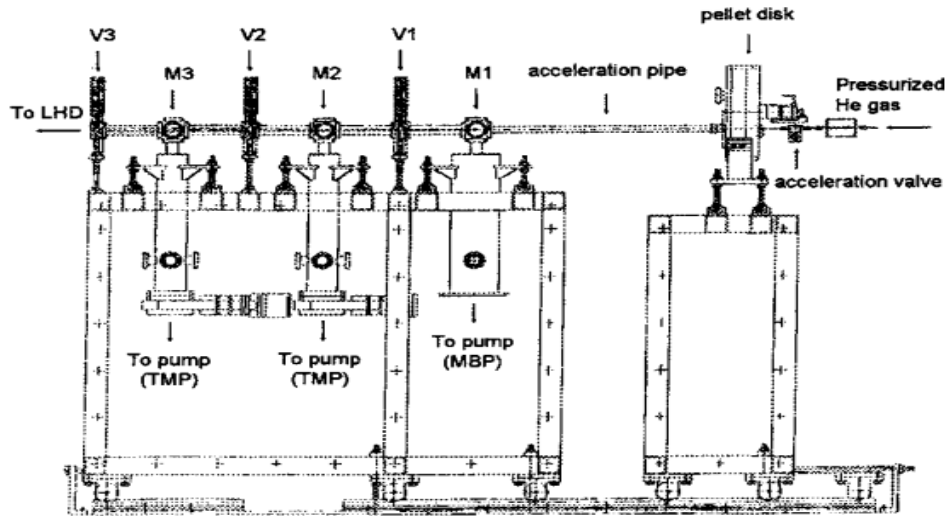
Slika 37: Shema Thomson-ovog rasejanja instalirana na LHDu.

Laserski zraci koji se vode iz dijagnostičke sobe dolaze do ogledala preko kojih se usmeravaju u plazmu duž glavnog radiusa u delu sa horizontalno izduženom plazmom. Rasejani zraci prolaze kroz prozor za posmatranje i kolimišu se preko zlatom prevučenom sfernog ogledala na 144 fibera koji vode svetlosni signal do detektora. Maksimalna vremenska rezolucija sistema je 10 ms. Opseg elektronskih temperatura koje sistem može da meri je između 5 eV i 20 keV. Elektronske koncentracije koje sistem može da meri su one iznad  $10^{18} \text{ m}^{-3}$ .

### 5.1.2 Tracer-Encapsulated Solid Pellet (TESPEL) sistem za ubacivanje čestica u plazmu

Tracer-Encapsulated Solid Pellet (TESPEL) sistem za ubacivanje čestica na LHDu koji se sastoji od tri sistema diferencijalnog pumpanja sa tri brzo zatvarajuća ventila prikazan je na slici 38 i detaljno je opisan u radovima [140–142]. Ubrzanje se vrši pomoću helijuma koji se nalazi pod pritiskom od od 6 do 20 atmosfera. Portovi M1, M2 i M3 služe za dijagnostiku peleta, a ventili V1, V2 i V3 imaju prosečno vreme zatvaranja od 5 ms što sprečava curenje helijuma u LHD. Komora M1 se vakumira mehaničkom pumpom, a komore M2 i M3 se vakumiraju turbo molekularnim pumpama i pritisak koji se postiže u komori M3 je reda veličine  $10^{-9}$  torr.

Peleti se prave u tri oblika: sfera, hemisfera i cilindar. Sistem postiže brzine peleta reda veličine  $200 \text{ m s}^{-1}$ . Primećeno je u eksperimentima da najbolji oblik što se tiče samog lansiranja bilo lakših bilo težih nečistoća predstavlja hemisfera.

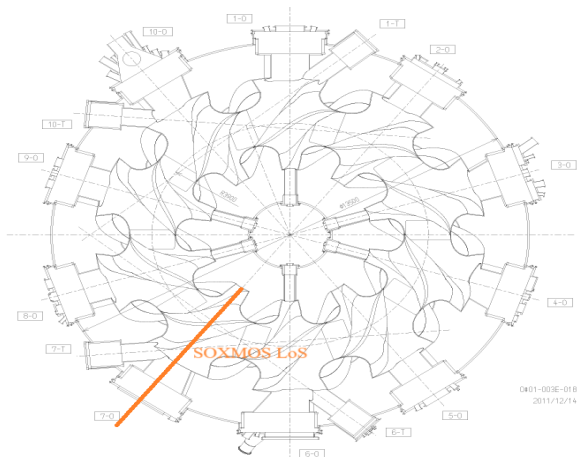
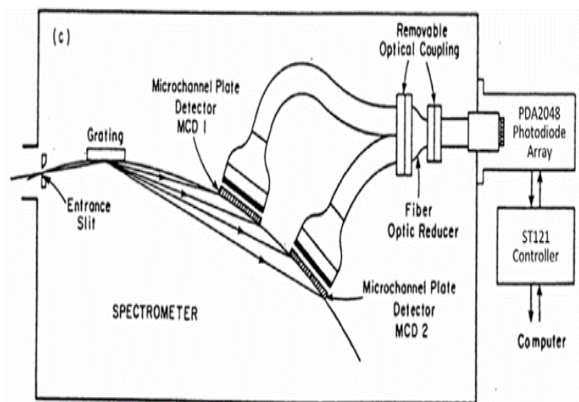


Slika 38: Shema TESPEL uređaja za ubacivanje nečistoća u plazmu [140]. 100 peleta koji staju u rotirajući nosač se lansiraju kroz cev za ubrzavanje dužine 1 m koristeći He pod pritiskom od 20 atmosfera.

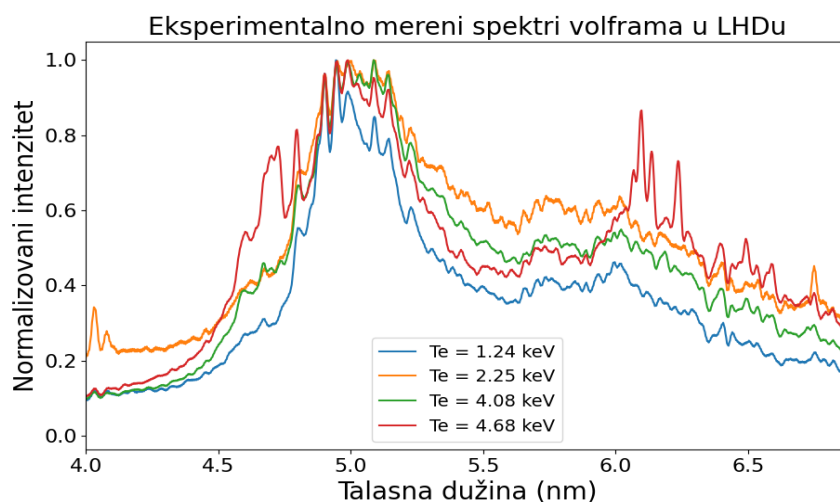
Ovaj oblik peleta omogućava velike lansirne brzine za teže nečistoće, dok istovremeno omogućava sporije lansiranje lakših nečistoća ako se eksperimentni rade na ivici plazme. Takođe, primećeno je da za pritiske veće od 16 atmosfera, brzina peleta na lansiranju postiže saturaciju [140], stoga je ta vrednost izabrana kao optimalna vrednost pritiska helijuma prilikom lansiranja.

### 5.1.3 Soft X-Ray Multichannel Spectrometer (SOXMOS) EUV spektrometar

Sistem se sastoji od VUV spektrometra sa velikim upadnim uglom (eng. grazing incidence spectrometer) sa Rolandovim krugom radiusa 2 m, koji ima upadni ugao od  $88^\circ$  i prikazan je na slici 39. Ovaj tip spektrometra je detaljno opisan u radu [143]. Kao disperzioni element mogu se koristiti dve difrakcione rešetke, jedna od 600 zarezova po milimetru i druga od 133 zarezova po milimetru. Rezolucija spektrometra se kreće od 0.01 nm za rešetku od 600 zarezova po milimetru, dok je rezolucija 0.06 nm za rešetku od 133 zarezova po milimetru. Spektrometar pokriva oblast talasnih dužina od 2 nm do 130 nm. Pre detektora, postoje dve multikanalne ploče, posle kojih dolazi fosforni element koji emituje svetlost koja se vodi putem fiber optičkih kablova na detektor, koji je u ovom slučaju niz od 2048 fotodioda. Instrument u ovoj konfiguraciji u svakom trenutku može da posmatra dve oblasti talasnih dužina. Vremenska rezolucija ovog spektrometra je 100 ms. Elektronska temperatura se donekle može kontrolisati spoljašnjim sistemima grejanja plazme (npr. ECH) te se tako mogu dobiti spektri volframa za različite temperature elektrona. Tipičan izgled spektra snimljen SOXMOS sistemom je prikazan na slici 40.



Slika 39: SOXMOS EUV spektrometar na LHDu. Levo je shema instrumenta, a desno je linija pogleda koju ima instrument. Linija pogleda je jedna linija kroz čitav horizontalno izdužen deo plazme.



Slika 40: Tipičan izgled spektra volframa snimljenog SOXMOS spektrometrom. Vidi se i UTA struktura spektra na 5 nm modelovana u ovom radu

## 5.2 Predpriprema podataka za obučavanje modela

Za potrebe ovog istraživanja, korišteni su spektri volframa u oblasti talasnih dužina između 3 i 7 nm koji su snimljeni u prethodnim kampanjama rađenim na LHD helitronu. Analizirano je ukupno 133 pražnjenja, od kojih kada se oduzmu neuspešna ubacivanja nečistoća u plazmu ostaje 99. Redni brojevi pražnjenja koja su razmotrena u ovom radu su: #181116 - 181198, #164695-164704, #151814-151847, #147567-147573. Od parametara plazme koji su od interesa, u razmatranje je uzeta samo temperatura elektrona. To je zbog toga što intenzitet spektralnih linija volframa jako slabo zavisi od gustine elektrona. To je diskutovano i u radu [126], gde kako autori navode, emisivnost spektralne linije volframa u prvom redu zavisi od temperature elektrona i od frakcije zastupljenosti posmatranog jona u plazmi. Ono što je takođe interesantno, u istom radu je pokazano da su u akumulacionoj zoni

zaravnjenja temperaturnog profila transportni procesi zanemarljivi. Naime, autori su pokazali da kada se izračunaju frakcije zastupljenosti jona volframa za slučaj bez transporta čestica i sa transportom, nema vidljive razlike u zastupljenosti. Stoga je dalje odlučeno da jedini parametar plazme od interesa u našem slučaju bude elektronska temperatura plazme. Zbog samog zaravnjavanja temperaturnog profila u jezgru plazme odakle dolazi emisija visokojonizovanih atoma volframa (u ovom radu opažena jonizaciona stanja od  $W^{40+}$ ) opravdano je pretpostaviti da je emisija dešava na jednoj temperaturi elektrona, te čitav emitovani spektar poistovetiti sa jednom temperaturom elektrona.

Vremenska zavisnost temperature elektrona uzeta je za svaki spektar iz rezultata dobijenih iz Thomson-ovog rasejanja, a da bi izbegli da neke odudarajuće tačke signal je obrađen Savitky - Golay filterom 4 reda sa prozorom od 11 tačaka. Isti filter je takođe korišten i na samom EUV spektru kako bi minimalizovali šum. Potom, kako bismo izbacili spektre koji sadrže čisti šum, samo spektri čija je srednja vrednost veća od empirijski postavljene granice od 600 odbroja po kanalu su uzeti u razmatranje za kreiranje baze za obučavanje modela koja je nakon prolaska kroz sve spektre brojala 1220 spektara. Takođe, kako bi VAE što bolje predvidio oblik spektra, spektri su normalizovani sa SNV koja uključuje oduzimanje srednje vrednosti spektra od vrednosti svakog piksela, te deljenje te vrednosti sa standardnom devijacijom spektra:

$$I_n = \frac{I_s - I_{sr}}{\sigma} \quad (129)$$

Gde je  $I_n$  nova vrednost spektra koja ulazi u bazu za obučavanje,  $I_{old}$  je merena vrednost,  $I_{sr}$  je srednja vrednost spektra a  $\sigma$  predstavlja standardnu devijaciju spektra. Odudarajući podaci su uklonjeni korištenjem Isolation Forest algoritma i na kraju je baza za obučavanje brojala 1125 spektara.

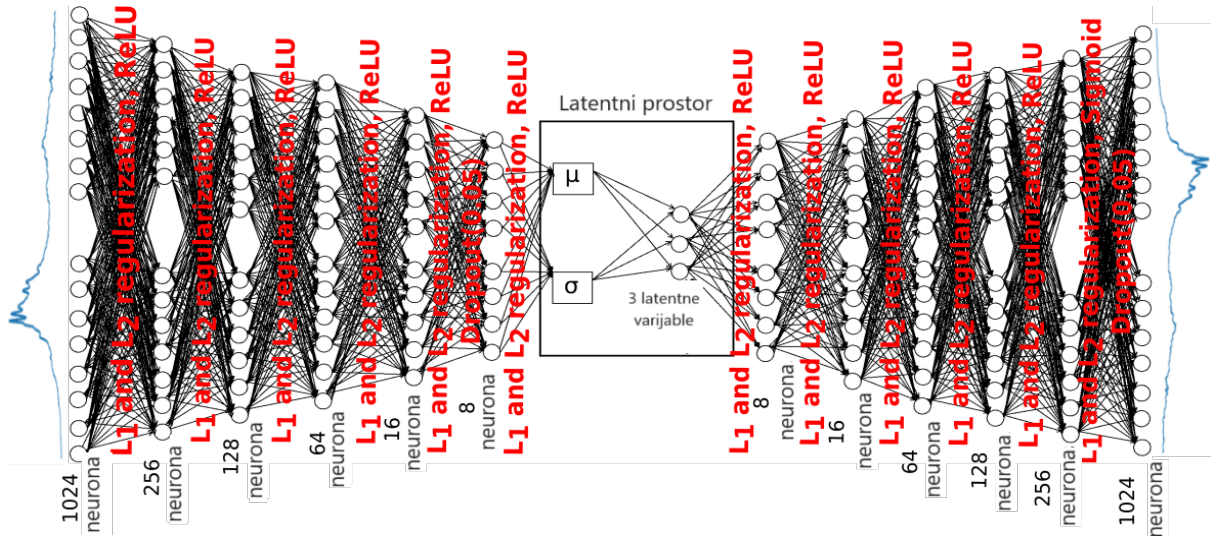
Od tog broja, proveravanjem je zaključeno da je samo 120 spektara za koje je centralna elektronska temperatura veća od 3 keV. Da bi izvršili balansiranje baze za obučavanje, odrađena je augmentacija podataka. Augmentacija je rađena pomoću 2D grid interpolacije algoritmom najbližih suseda na sledeći način. Prvo je izdvojen podskup od 15 različitih spektara za prvih 15 elektronskih temperatura, između kojih je interpolacijom dodato još 100 spektara. Kako je ovih podskupova bilo 8, to znači da je augmentacijom podataka dodato 800 spektara, tako da je finalna baza za obučavanje modela imala 1727 spektara za obučavanje. Kako bi obučavanje išlo bolje i kako bi se izbegle nestabilnosti algoritma za trening poput eksplodirajućih gradijenata, urađeno je skaliranje ulaznih podataka koristeći MinMax skaliranje, gde je:

$$I_n = \frac{I_s - I_{min}}{I_{max} - I_{min}} \quad (130)$$

### 5.3 Pravljenje modela

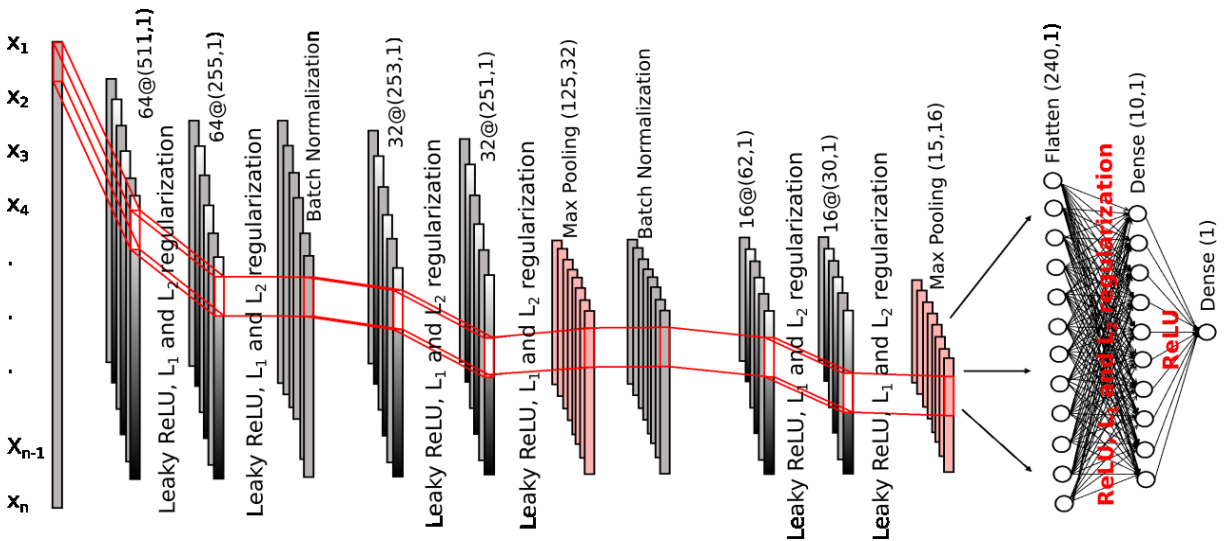
Nakon predpripreme podataka, započeto je sa pravljenjem radnih modela. Svi modeli napravljeni su korištenjem biblioteka otvorenog koda keras i tensorflow [144]. Enkoder varijacionog enkodera predstavlja potpuno povezanu neuronsku mrežu koja na ulazu ima 1024 jedinice, potom ima 5 skrivenih slojeva sa po 256, 128, 64, 16 i 8 neurona i na kraju, u latentnom prostoru ima 3 neurona. Korištena aktivaciona funkcija u ulaznom kao i u svim skrivenim slojevima je propuštajući ReLU (eng. *Leaky ReLU*) sa konstantom  $\alpha = 0.3$ . Pre

latentnog sloja, ubačen je Dropout sloj koji služi da nasumično izbaci neke veze između neurona dva sloja kako bi se izbeglo preprilagođavanje neuronske mreže. Dropout layer ima faktor izbacivanja od 5 %. VAE korišten u ovom radu prikazan je na slici 41.



Slika 41: Arhitektura varijacionog autoenkodera korištenog u ovom radu

Dekoder je simetričan autoenkoderu, gde imamo latentni sloj, zatim 5 skrivenih slojeva sa po 8, 16, 64, 128 i 256 neuroma i izlazni sloj od 1024 vrednosti što ustvari predstavlja rekonstruisani spektar. Aktivaciona funkcija svakog neurona bila je propuštajući ReLU sa koeficijentom  $\alpha = 0.3$ .



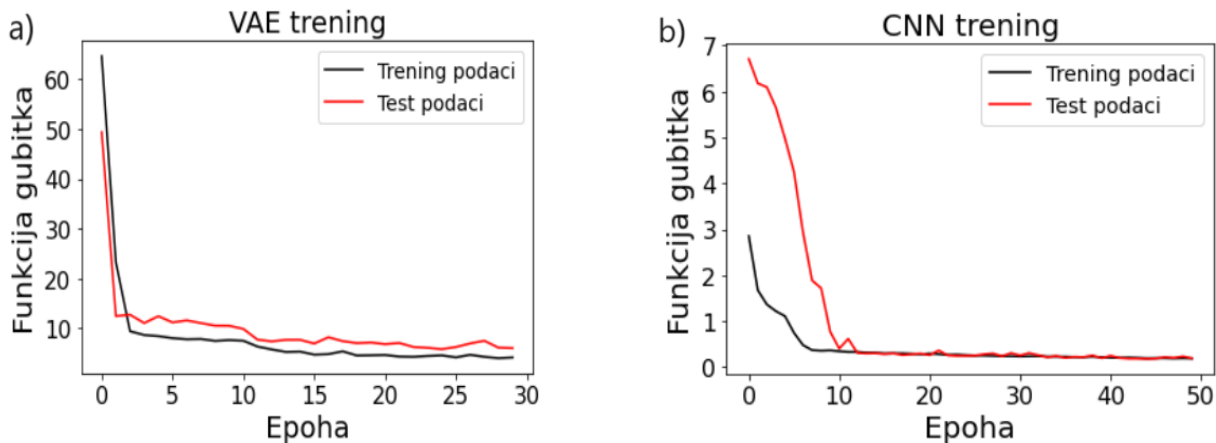
Slika 42: Arhitektura konvolucione neuronske mreže za određivanje temperature elektrona generisanog spektra

Aktivaciona funkcija poslednjeg izlaznog sloja dekodera bila je sigmoid funkcija. Takođe, Dropout sloj je postavljen između poslednjeg skrivenog sloja i izlaznog sloja dekodera sa faktorom izbacivanja od 5 %. Zbog jako malog uzorka na kome se model obučava, primenjene

su jake mere protiv prilagođavanja modela podacima. Na prvom mestu, korištene su  $l_1$  i  $l_2$  regularizacije u svakom sloju enkodera pri čemu je koeficijent  $l_1 = 10^{-4}$ , dok je koeficijent  $l_2 = 10^{-5}$ . Brzina učenja  $\eta$  ostavljena je na vrednosti od  $\eta = 0.001$ . Takođe, kao još jedna mera protiv prilagođavanja modela implementirano je rano zaustavljanje treninga. Obučavanje modela je zaustavljeno ako se funkcija gubitka modela ne poboljšava značajno u pet sukcesivnih epoha. Rekonstruktivni deo funkcije gubitka ovde je modelovan sa srednjim kvadratnim odstupanjem, dok KL divergencija za pretpostavljeni oblik Gauss-ove raspodele ima oblik:

$$D_{KL} = -\frac{1}{2} \left( 1 + \log(\sigma^2) - \mu^2 - \sigma^2 \right) \quad (131)$$

Kako bi znali kojoj temperaturi elektrona odgovara generisani spektar volframa, obučena je i jedna konvoluciona neuronska mreža. U suštini to je 1D konvoluciona neuronska mreža prikazana na slici 42 koja na početku ima dva konvoluciona bloka sa 64 filtera. Veličina jezgra je bila 3, a stride parametar je jednak 2. Aktivaciona funkcija u oba slučaja bila je propuštajuća ReLU funkcija sa  $\alpha = 0.3$ . Nakon ovog bloka sledi jedan Batch Normalisation sloj koji ima ulogu da spreči prilagođavanje modela i ubrza obučavanje tako što ulazne težinske faktore recentrira i reskalira. Nakon ovog sloja idu još dva konvoluciona sloja sa po 32 filtera, veličinom jezgra jednakom 3 i sa stride parametrom jednakim jedinici. Dalje, nakon ovog bloka ide MaxPooling sloj i još jedan Batch Normalisation sloj. Konačno, još jedan konvolucioni blok od dva konvoluciona sloja sa 16 filtera, istom veličinom jezgra i stride parametrom jednakim 2. Posle trećeg konvolucionog bloka, MaxPooling je urađen i



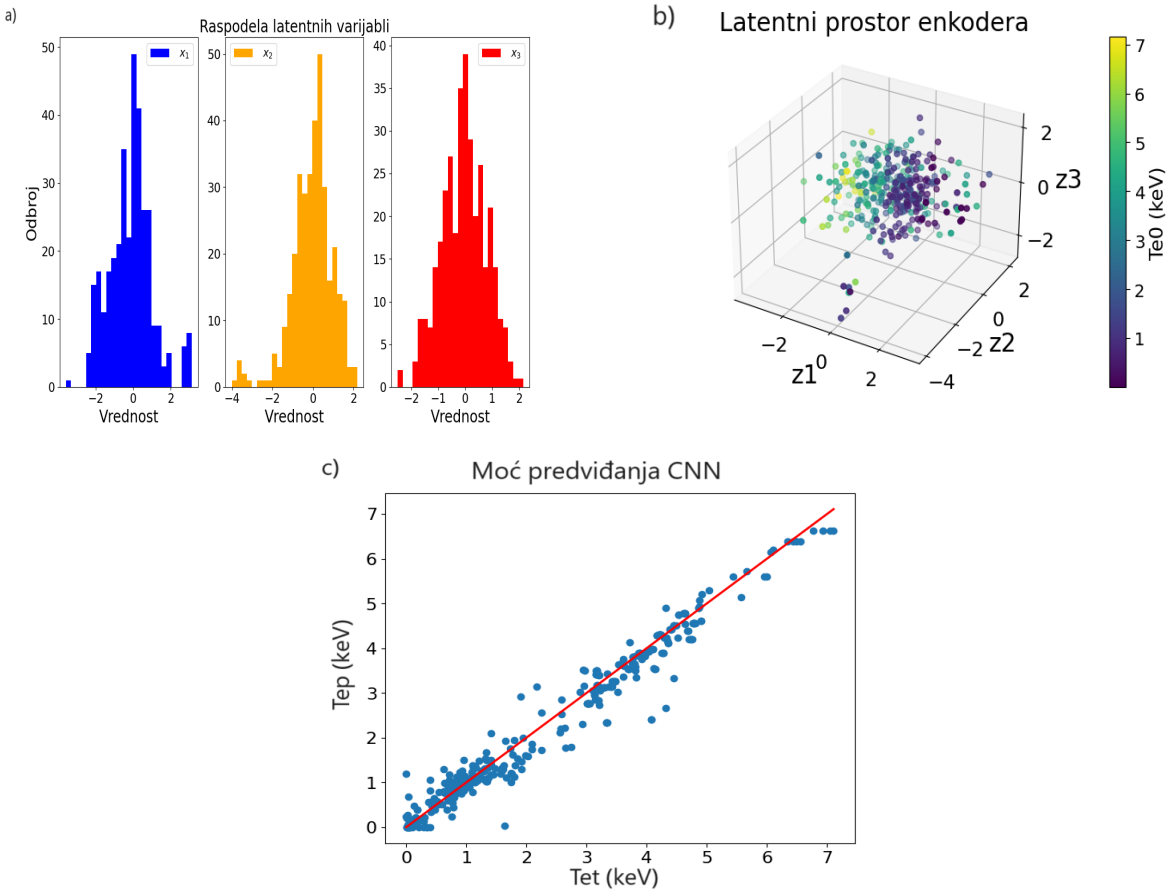
Slika 43: Rezultat obučavanja VAE (a) i CNN modela (b). VAE je postigao konvergenciju nakon 30 epoha, dok je CNN model konvergirao posle 50 epoha. Obučavanje je zaustavljeno od strane implementiranog ranog zaustavljanja,

izvršeno je pretvaranje 2D niza u 1D niz koji je imao 240 neurona, odakle sledi jedan sloj sa 10 neurona i konačno izlazni sloj sa jednim neuronom. Aktivaciona funkcija za guste slojeve je ReLU. Zbog malog uzorka i ovde su implementirane  $l_1$  i  $l_2$  regularizacije sa koeficijentima  $l_1 = 10^{-5}$  i  $l_2 = 10^{-6}$  i sa rano zaustavljanje gde je takođe implementirano da se obučavanje zaustavlja ukoliko nakon 5 epoha ne dođe do značajnog poboljšanja funkcije gubitka.

Optimizacija oba modela (VAE i CNN model) su rađeni sa optimizatorom Adam, s tim što je brzina učenja za CNN model bila  $\eta = 10^{-4}$ . Baza za obučavanje je podeljena na bazu



za obučavanje i bazu za testiranje u takvom omeru da je 80 % podataka iskorišteno za obučavanje, a 20 % podataka za testiranje i validaciju modela. Rezultati obučavanja modela prikazani su na slici 43. VAE je postigao konvergenciju nakon 30 epoha, dok je CNN model konvergirao posle 50 epoha, a prva naznaka da model nije izvršio preprilagođavanje podacima jeste da su funkcije gubitka za trening i test bazu podataka istog reda veličine. Kako bi se stekao uvid u performas varijacionog autoenkodera, na slici 44 (b) prikazan je latentni prostor varijacionog enkodera i distribucija latentnih varijabli (a).



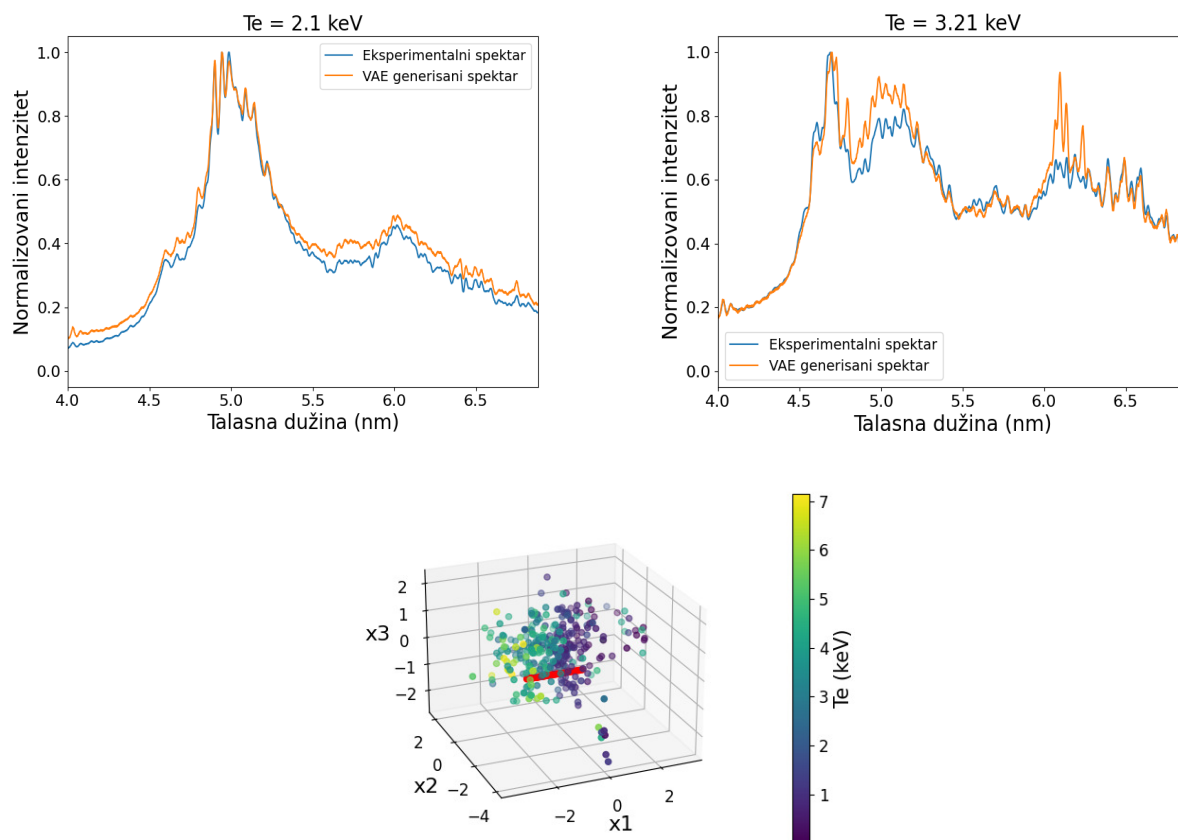
Slika 44: Raspodela latentnih varijabli (a), latentni prostor VAE (b) i prediktiona moć konvolucione mreže (c). Primetno je da su tačke koje odgovaraju bliskim centralnim elektronskim temperaturama bliske, te da je svaka latentna varijabla približno opisana normalnom raspodelom. Ovo je dobar znak da je enkoder uspešno naučio reprezentaciju podataka te da je uspešno urađena redukcija dimenzionalnosti ulaznih podataka. Prediktiona moć konvolucione neuronske mreže je najbolja između 1 keV i 5 keV i tu je greška predviđanja od 15 % i manje.

Primetno je da su sve tri latentne varijable odgovaraju normalnoj raspodeli, što je bio i polazni cilj, stoga možemo reći da je enkoder uspešno obavio posao. Takođe, vidi se i da postoji još par prisutnih odudarajućih tačaka u modelu, ali one ne kvare mnogo generalni performans modela. Sa druge strane, vidimo da su tačke u latentnom prostoru koje odgovaraju bliskoj centralnoj elektronskoj temperaturi, bliske i u latentnom prostoru. Stoga se može zaključiti da je enkoder uspešno generalizovao fizičku sliku iza samog signala, što dodatno

daje na snazi ovom modelu. Finalni performas VAE modela, zajedno sa dekodeom testiran je preko koeficijenta determinacije  $R^2$  koji je iznosio 0.86 za finalni model, što je sasvim zadovoljavajuće za trenutne primene. Performas konvolucione neuronske mreže prikazan je na slici 44 (c). Neuronska mreža je optimizovana sa funkcijom gubitka srednje kvadratno odstupanje i iznosila je 0.24 keV, a određena je i srednja apsolutna greška odstupanja koja je iznosila 0.2 keV. Koeficijent determinacije  $R^2$  iznosio je 0.96 i ovi parametri govore da u srednjem greška određivanja elektronske temperature koja se pridružuje generisanom spektru iznosi manje od 15 %.

## 5.4 Rezultati

Kako bi proverili rad i predikcionu moć kreiranog modela, model je primenjen na test spektre i rezultat generacije modela za dve temperature prikazan je na slici 45.

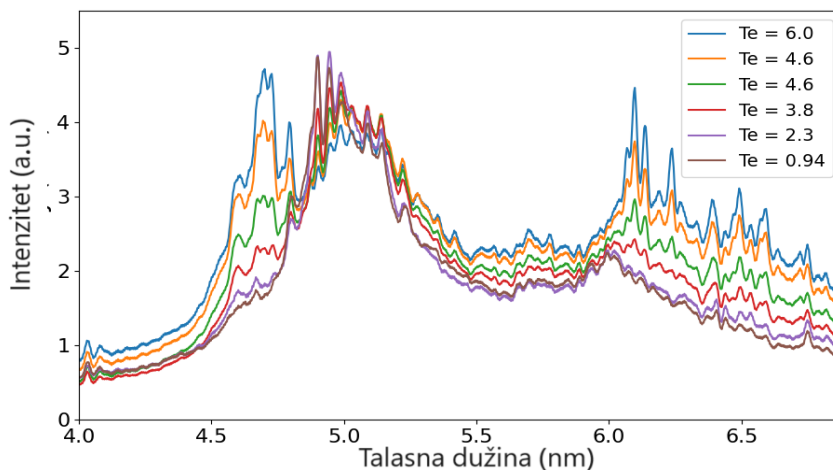


Slika 45: Generacija test spektara za temperaturu elektrona od 2.08 keV i 3.21 keV. Spektar za 2 keV je reprovovan vrlo dobro i odlično se slaže sa eksperimentalnim spektrom, dok generisani spektar na 3.21 keV pokazuje spektralne linije na oko 6 nm koje nisu pristune u eksperimentalnom spektru, ali je poklapanje zadovoljavajuće. Treći grafik predstavlja odabrane tačke u latentnom prostoru za koje su generisani spektri pomoću dekodera.

Vidimo da model jako dobro opisuje spektar volframa i UTA strukturu za temperaturu od



2 keV na 5 nm nastalu od prelaza 4f - 4d i 4d - 4p  $W^{29+}$  -  $W^{34+}$  jona, te 4f - 4d prelaza  $W^{25+}$  -  $W^{28+}$ . Kako se temperatura povećava, raste i emisija jona na oko 4.5 nm koji odgovaraju jonima volframa  $W^{37+}$  -  $W^{42+}$ , dok se emisija na 5 nm smanjuje. Pikovi na oko 6 nm koji inače odgovaraju emisijama sa nivoa 4d - 4p prelazima  $W^{29+}$  do  $W^{34+}$  i  $W^{23+}$  -  $W^{28+}$ , 4f - 4d prelazima  $W^{23+}$  -  $W^{28+}$  i 5d - 4f prelazima  $W^{21+}$  -  $W^{23+}$  u ovom slučaju nisu dobro opisani, jer ih model predviđa a ne pojavljuju se u spektru na ovoj temperaturi. Sledeći korak bilo je iskoristiti mogućnost varijacionog enkodera da iz latentnog prostora generišemo pomoću dekodera nove spektre za različite temperature. U tu svrhu izabrano je 100 novih tačaka kroz latentni prostor i za generisane spektre određena je elektronska temperatura pomoću konvolucione neuronske mreže.



Slika 46: Generisani spektri volframa korištenjem dekodera za tačke iz latentnog prostora prikazane na slici 45

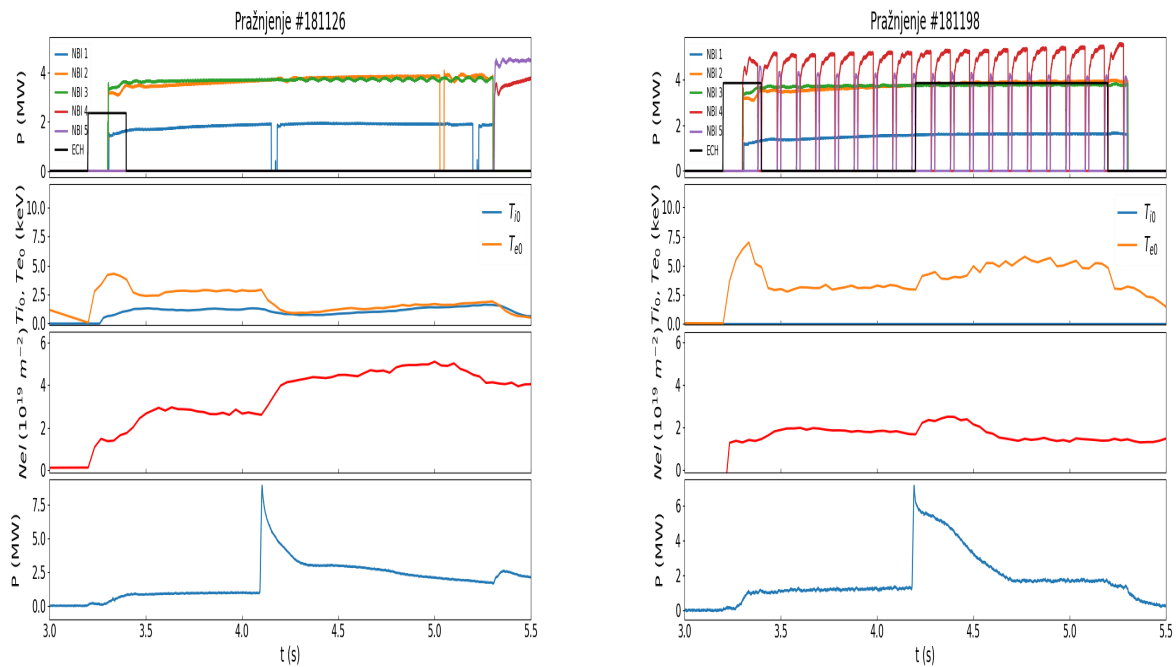
Tačke u latentnom prostoru za koje su generisani spektri prikazane su na slici 45 a generisani spektri prikazani su na slici 46.



Slika 47: Korelaciona mapa za spektre generisane za tačke sa slike 16, a koji su prikazani na slici 46

Vidi se sa slike da kako temperatura raste, tako nastaje i nagla promena u izgledu spektra. UTA struktura polako nestaje, a postaju izraženije spektralne linije koje odgovaraju visokojonizovanim stanjima volframa na 4.5 nm, kao i pikovi na 6 nm koji odgovaraju jonizacionim stanjima od 21+ do +34. Da bi ovo dodatno potvrdili, za ove generisane spektre urađena je korelaciona mapa prikazana na slici 47. Korelaciona mapa nedvosmisleno ukazuje na to da prilikom porasta temperature jasno dolazi i do

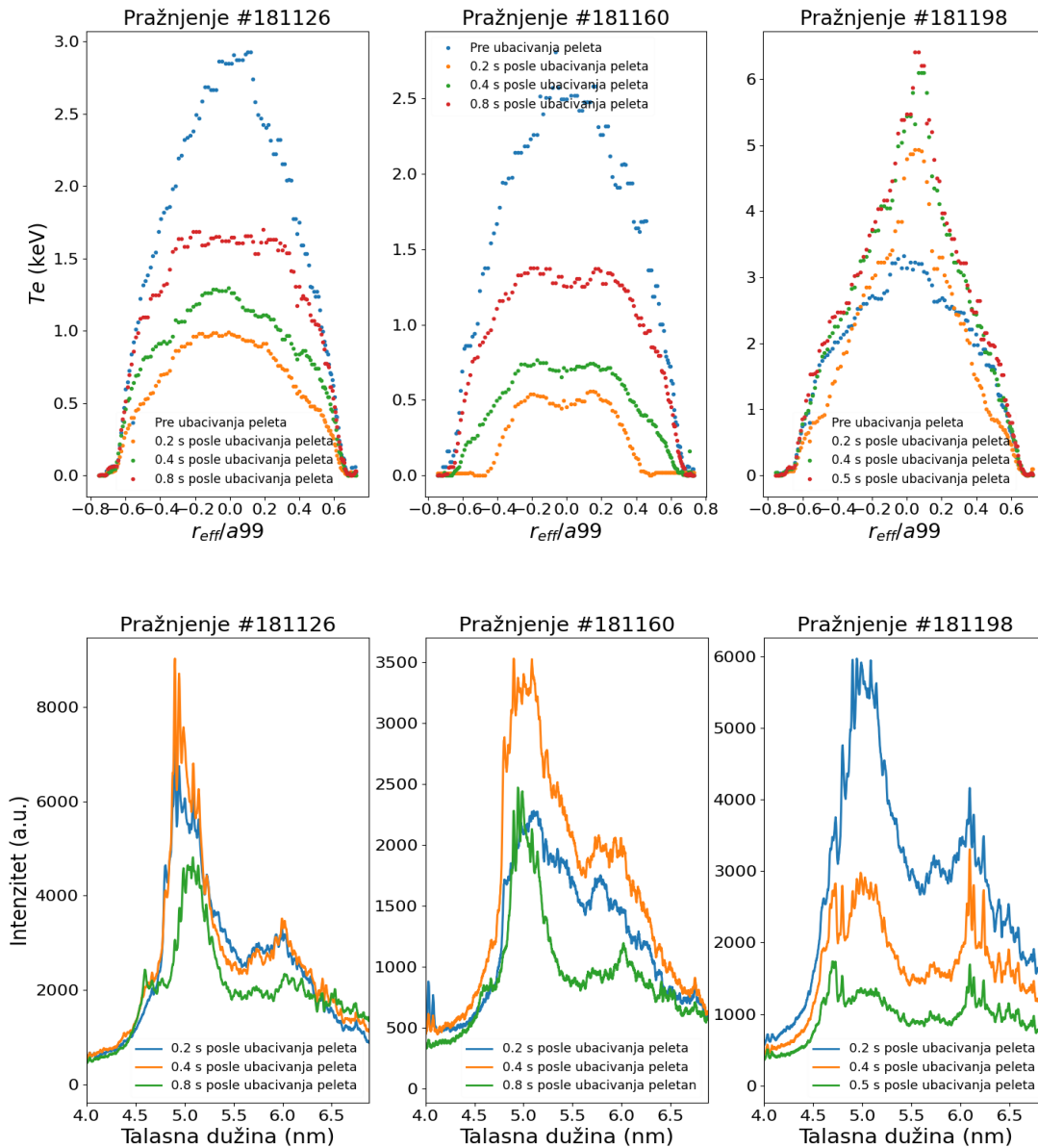
porasta emisije na talasnim dužinama od 4.5 nm i 6 nm dok se emisija UTA strukture na oko 5 nm smanjuje. Objašnjenje ove pojave jeste i ujedno i glavna slabost trenutnog modela, a to je pretpostavka jedne elektronske temperature koja odgovara čitavom spektru. Naime, ova aproksimacija je dobra jer najčešće postoji zaravnjenje profila elektronske temperature duž linije posmatranja spektrometra, pa je i ova aproksimacija opravdana. Međutim, u slučajevima kada je ova aproksimacija narušena, dešava se da imamo emisiju spektralnih linija iz različitih delova plazme duž linije posmatranja koja se superponira u jedan spektar i model jedne elektronske temperature više nije dobar model. Kako bismo ovo ilustrovali, posmatraćemo tri pražnjenja razmatrana prilikom obučavanja ovog modela. Parametri ovih pražnjenja prikazani su na slici 48.



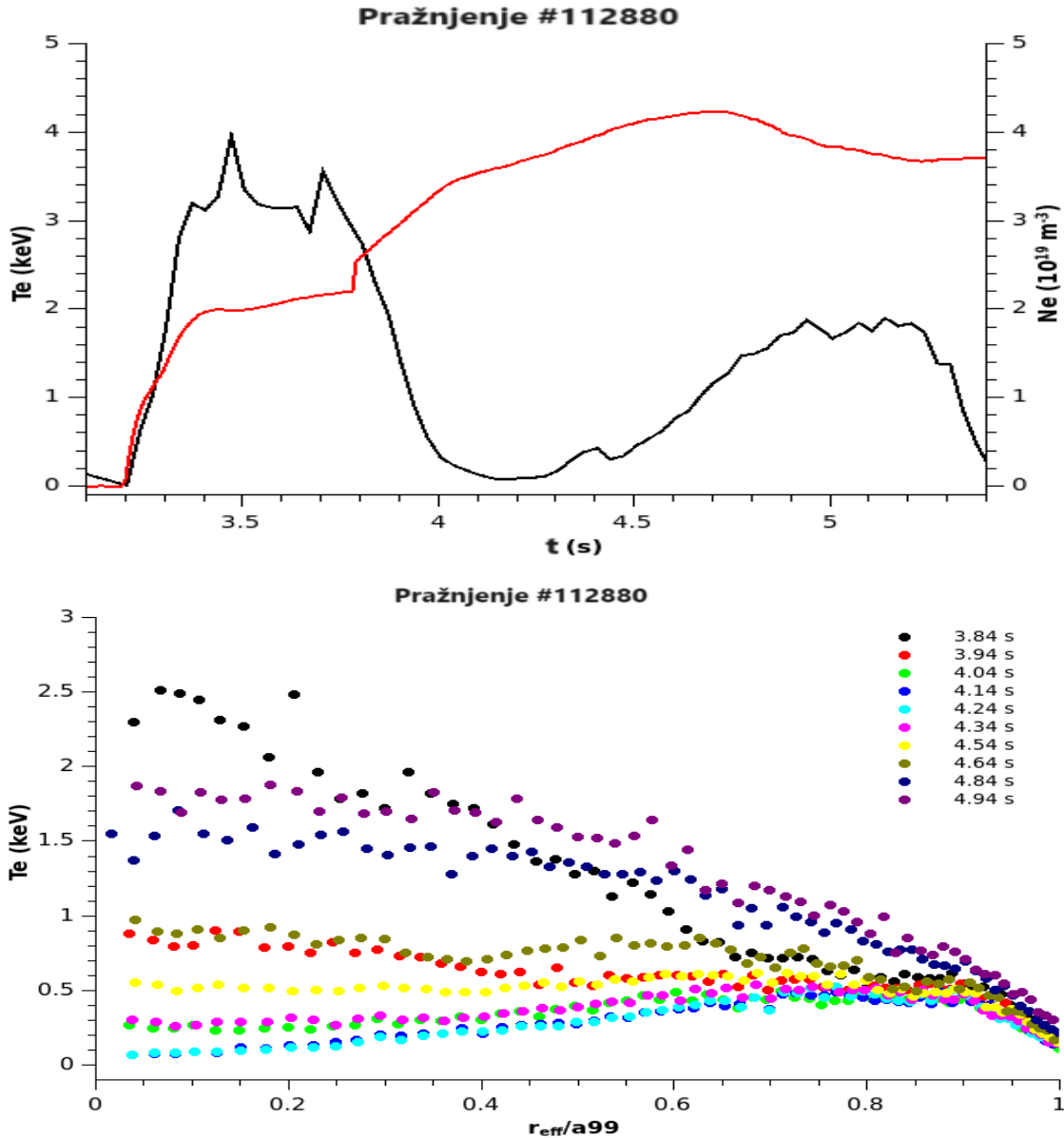
Slika 48: Parametri plazme za pražnjenja #181126 i #181198. Na prvom panelu oba grafika prikazana je aktivnost spoljašnjeg grejanja plazme. Na drugom panelu prikazane su centralna elektronska i jonska temperatura. Treći panel prikazuje linijsku gustinu elektrona dobijenu iz Thomsonovog rasejanja a četvrti panel prikazuje bolometarska merenja zračenja iz plazme.

Vremenski trenutak ubacivanja peleta u plazmu lako je prepoznati kao pik u bolometarskom merenju. Temperaturni profili koji odgovaraju ovim pražnjenjima prikazani su na slici 49 gore za neka vremena od interesa, a spektri koji su povezani sa njima na slici 49 dole. Primećuje se na slici 49 iznad da su u dva slučaja profili elektronske temperature ravni, te je pretpostavka modela opravdana, međutim na trećem panelu, u slučaju pražnjenja broj #181198 vidimo da imamo pik u profilu elektronske temperature. Pik se javlja usled paljenja ECH grejanja velike snage u tom trenutku, stoga je primetna i nagla promena spektra prikazana na slici 49 dole na trećem panelu. Promena nastaje usled postojanja prostorne raspodele elektronske temperature, te pretpostavka modela više ne važi i nije moguće poistovetiti čitav

emitovani spekter sa jednom temperaturom elektrona. Kao poslednji test modela, generisani su spektri za pražnjenje #112880 korišteno u ranijim studijama koje model nije video prilikom obučavanja i testiranja. Parametri pražnjenja prikazani su na slici 50 a), a profili temperature elektrona prikazani su na slici 50 b). Generisani su spektri za dve elektronske temperature, od 1.5 keV i od 0.9 keV i upoređeni su sa eksperimentalno merenim.

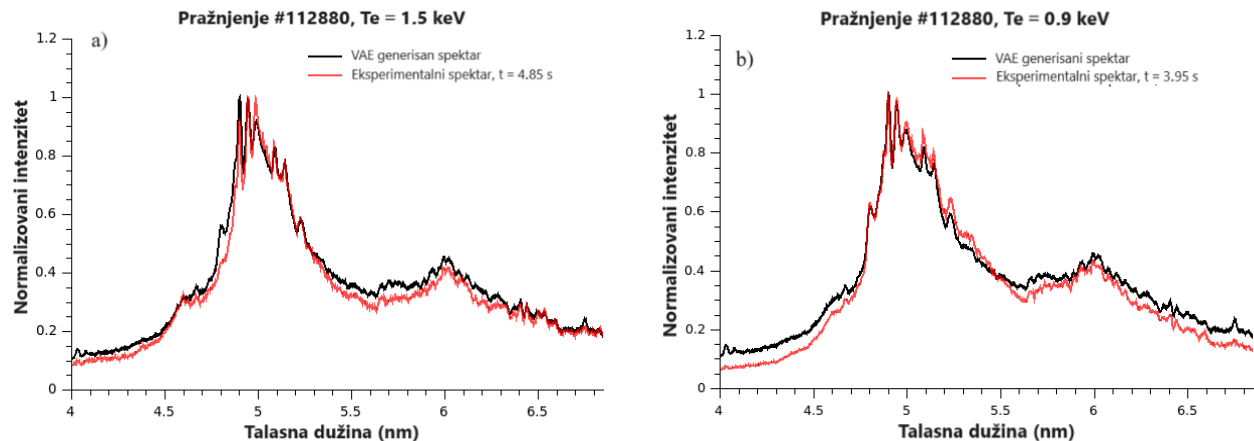


Slika 49: Temperaturni profili koji odgovaraju pražnjenjima prikazanim na slici 48. Primećujemo da je za dva analizirana pražnjenja prisutno zaravnjenje profila u jezgru plazme, dok je na trećem panelu primetan veliki pik profila temperature zbog aktivnog ECH grejanja te nagla promena odgovarajućeg emitovanog spektra u odnosu na druga dva analizirana pražnjenja.



Slika 50: Parametri plazme za pražnjenje #112880 kao i odgovarajući profili elektronske temperature. Vidi se da je prisutno zaravnjenje profila, stoga je opravdana pretpostavka modela

Rezultati ovog poređenja prikazani su na slici 51. Vidimo da se model i eksperimentalni spektar odlično slažu, te da se ovaj model može koristiti za generisanje spektra volframa ali samo u slučajevima kada nastupi akumulacija nečistoća i dođe do zaravnjenja profila temperature elektrona. Model je dobro opisao sve karakteristike spektra u ovoj oblasti talasnih dužina, od UTA strukture na 5 nm, preko pojave spektralnih linija na 4.5 nm i 6 nm usled povećanja temperature ili usled odstupanja od aproksimacije učinjene prilikom pravljenja modela. Drugi modeli razvijani za istu primenu, uglavnom koliziono radijativni modeli [126,128], nisu bili u potpunosti uspešni prilikom opisivanja čitavog spektra. Još jedna prednost ovog modela jeste što je ekstremno brz, te nam omogućava generisanje više stotina spektara u svega nekoliko sekundi.



Slika 51: Generisani spektri volframa za temperature elektrona od 0.9 keV (a) i 1.5 keV (b). Slaganje sa eksperimentalnim merenjima je jako dobro.

## 6 Zaključak

Tema ove doktorske disertacije je primena veštačke inteligencije i mašinskog učenja u spektroskopiji niskotemperaturnih i visokotemperaturnih plazmi. Razmotreni su i analizirani različiti tipovi plazmi: laserski indukovane plazme, fuzione plazme itd. Prvi deo doktorske disertacije bavi se primenom mašinskog učenja za određivanje Starkovih poluširina emitovanih spektralnih linija u UV, optičkom i infracrvenom delu elektromagnetnog spektra. U ovom delu disertacije, uspešno je demonstrirana upotreba mašinskog učenja za predikcije Stark-ovog širenja spektralne linije, kao i predikcije regularnosti Stark-ovog efekta duž spektralnih serija i duž izoelektronskog niza. Napravljena je baza za obučavanje modela uspešnim spajanjem dve javno dostupne baze podataka NIST i Stark B. Na kraju, kreirana baza za obučavanje je sadržala oko 53235 upisanih atomskih prelaza za koje je pri unapred zaradim uslovima izračunata Stark-ova poluširina na osnovu semiklasične perturbativne teorije (SCP). Posle kreiranja, iz baze su izbačeni odudarajući podaci kao oni za koje je energija gornjeg nivoa manja od energije donjeg nivoa, a dodatno nisu razmatrani uslovi plazme gde gustina elektrona prelazi  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  i gde temperatura elektrona nije veća od 150 000 K. Zbog fizičke prirode ulaznih atributa i različitih redova veličine, vrednost atributa je skalirana tako da svaki atribut uzima vrednost između 0 i 1 putem algoritma standardnog skaliranja. Baza za obučavanje imala je 15 ulaznih atributa na osnovu čijih vrednosti je predviđana jedna ciljna varijabla. Probana su tri modela: stablo odlučivanja, slučajna šuma i gradijentno pojačano stablo odlučivanja. Za sva tri modela, upotrebom Grid Search CV algoritma pronađeni su parametri modela pri kojima daje najbolje predikcije. Najbolji rezultat postigla je slučajna šuma koja je imala koeficijent determinacije  $R^2$  od 0.97 ostvaren na predikcijama na bazi za testiranje modela. Ovo je predstavljao dovoljan dokaz da model se nije prilagodio podacima i da se može dalje koristiti u analizi Stark-ovog širenja spektralnih linija.

Prva analiza koja je u sklopu ove disertacije jeste proučavanje regularnosti Stark-ovog efekta. Testirane su regularnosti duž spektralnih serija neutralnog litijuma, kao i regularnosti duž izoelektronskog niza litijuma. Bitan rezultat postignut u ovom radu je da je model pokazao saturacioni efekat pri određivanju poluširine linije za prelaze sa visokim kvantnim brojem, što

raniji modeli koji su se bavili predviđanjem regularnosti Stark-ovog efekta nisu predvideli. Ovo je dobra naznaka da je model naučio fizičku sliku iza Debyeovog ekraniranja emitera, što je dosta bolje nego da su rezultati ukazivali na konstantan porast širine spektralne linije. Dodatni dokaz za ovu tvrdnju jeste da se efekat saturacije javlja ranije za veće elektronske gustine, što je takođe u skladu sa teorijskim predviđanjima, jer Debye-ev radius opada sa porastom gustine elektrona. Pored regularnosti duž spektralnih serija, posmatrana je i regularnost duž izoelektronskog niza litijuma i rezultati su upoređeni sa eksperimentalnim rezultatima Blagojevića i saradnika. Pokazano je da model može uspešno da prevedi i ovu vrstu regularnosti, što predstavlja dodatnu potvrdu da je model uspešno opisao ranije uočene regularnosti Stark-ovog efekta. Konačno, rezultati predikcije mdoela upoređeni su eksperimentalnim rezultatima iz radova Konjevića i saradnika. Dobijeni rezultati sugerišu na to da model daje bolje rezultate u vidljivoj oblasti spektra, dok u UV oblasti teži da podceni poluširinu linije skoro za faktor 2. Još jedan od zaključaka iz analize poređenja sa eksperimentalnim rezultatima jeste da model teži većim vrednostima Stark-ovih poluširina spektralne linije nego što je ona eksperimentalno izmerena. Prosečna greška koju model pravi određenja procenjena poređenjem eksperimentalnih i prediktovanih rezultata je između 25 i 30 %.

Na kraju, analize urađene u ovoj tezi sugerišu da mašinsko učenje može biti iskorišteno u modelovanju širenja spektralnih linija usled Stark-ovog efekta. Značaj ovog rezultata ogleda se u tome što model razvijen u ovoj tezi omogućava da se za jednostavan unos od 15 ulaznih parametara dobije procena Stark-ove poluširine jako brzo sa tačnošću od oko 30 %, što predstavlja jako dobru kvalitativnu procenu upotrebljivosti emitovane spektralne linije u svrhu dijagnostike plazme. Takođe, bitno je napomenuti da je model jako dobro generalizovao fizičku sliku iza Stark-ovog širenja spektralnih linija, na način da je uspešno predvideo očekivane regularnosti duž spektralnih serija i izoelektronskog niza, što je unapređenje u odnosu na formulu koju je predložio Purić u radu [64], gde ne postoje univerzalni fit parametri koji bi važili za svaki emiter.

Drugi deo ove doktorske disertacije bavi se primenom mašinskog učenja u kvantitativnoj analizi određivanja koncentracija glavnih konstituenata meta od čelika metodom spektroskopije laserski indukovanoj probnoj. U sklopu ove disertacije pokazano je barem kvalitativno da postoji mogućnost korištenja prethodno snimljene baze podataka dobijene u jednoj laboratoriji koja je snimljena pod jasno definisanim i precizno kontrolisanim eksperimentalnim uslovima, a koja bi bila korištena za obučavanje modela koji bi posle bio korišten za predikciju nepoznatih uzoraka snimljenih u drugoj laboratoriji. Bitno je napomenuti da je važnost ove analize u tome što dovoljan broj standardnih uzoraka nije dostupan u svim laboratorijama. U cilju ispitivanja polazne pretpostavke, snimljeni su test spektri različitih standardnih uzoraka čelika pri istim uslovima i sa istom aparaturom kao i u originalnoj bazi za obučavanje. Nd:YAG laserki impuls koji radi na osnovnom harmoniku, trajanja impulsa od 6 ns i energije 95 mJ bio sočivom je fokusiran tako da prometer spota na meti bude približno 0.2 mm. Spektar je snimljen korištenjem Mechelle 5000 spektrometra i iCCD kamere, a rađeno je u vazduhu. Ovime su uspešno ponovljeni svi uslovi pri kojima je snimana originalna baza za obučavanje.

Kao predpriprema podataka korišten je MinMax algoritam skaliranja podataka, a procena važnosti ulaznih atributa rađena je na osnovu Gini-jevog kriterijuma. Takođe, ovo je prvi put da je ovaj način korišten za selekciju atributa za regresioni problem, jer je do sada uglavnom bio korišten za klasifikacione probleme. Obučena su četiri modela slučajne šume da

bi se procenila važnost atributa za svaki element ponaosob (Cr, Ni, Mo i Mn). Posle toga, najbolje rezultate redukcije dimenzionalnosti dala je empirijski određena granica od  $2 \times 10^{-4}$  kao granica iznad koje su svi bitni atributi. Tako je ulazna dimenzionalnost od 40002 talasne dužine, snižena na svega par stotina atributa što dosta olakšava obučavanje modela, a bez da su žrtvovane najbitnije informacije. Za konačne predikcije koncentracije glavnih konstituenata čelika obučena su dva modela, slučajna šuma i potpuno povezana neuronska mreža. Broj stabala odlučivanja u svakoj slučajnoj šumi bio je 350, dok dubina svakog drveta nije bila ograničena. Arhitektura neuronske mreže koja je korištena imala je 3 sakrivena sloja sa 100, 150 i 50 neurona. Neuronska mreža se u ovom slučaju pokazala kao bolji izbor modela, jer je za sva četiri elementa od interesa imala koeficijent determinacije  $R^2$  veći od 0.9 i niži RMSE od modela slučajne šume.

Konačno u trećem delu ove doktorske disertacije, uspešno je demonstrirana mogućnost primene veštačke inteligencije za generisanje emitovanog spektra volframa u EUV oblasti spektra, u opsegu talasnih dužina od 4 do 7 nm. Nečistoće su unošene u plazmu pomoću TESPEL sistema za ubacivanje nečistoća, a spektar se snimao pomoću EUV spektrometra sa velikim upadnim uglom koji je postavljen u Paschenovoj konfiguraciji, gde je kao detektor korišten niz fotodioda. Temperatura elektrona ovom radu merena je Thomson-ovim rasejanjem, kao jedini relevantan parametar plazme za intenzitet emitovanih spektralnih linija. Urađena je predpriprema podataka kako bi ulazni podaci bili pogodni za obučavanje neuronskih mreža. Podaci su normalizovani korištenjem SNV normalizacije kako bi svi spektri imali istu srednju vrednost i standardnu devijaciju, što je pogodno za učenje oblika spektra i skalirani korištenjem MinMax algoritma skaliranja gde su vrednosti atributa dovedene između 0 i 1, što je pogodno za obučavanje modela. Kako bi se smanjio šum u eksperimentalno merenom signalu, podaci su filtrirani pomoću Savitzky - Golay filtera četvrtog reda sa prozorom od jedanaest tačaka. Nakon predpripreme podataka, podaci su podeljeni u odnosu 80 % - 20 % za obučavanje i testiranje modela. Napravljena su i obučena dva modela, jedan model je služio za generisanje spektra a drugi za određivanje elektronske temperature koja odgovara ovom generisanom spektru. Ključna pretpostavka ovog modela jeste da se emisija dešava efektivno na jednoj temperaturi elektrona, a opravdanje ove pretpostavke predstavlja činjenica da prilikom ulaska nečistoća u plazmu dolazi do zaravnjivanja profila temperature elektrona. Model obučen za generisanje spektra bio je varijacioni autoenkoder, gde je arhitektura enkodera i dekodera takva da imaju po 5 skrivenih slojeva sa po 256, 128, 64, 16 i 8 neurona. Ulazni i izlani sloj autoenkodera imaju po 1024 neurona, dok latentni prostor autoenkodera ima tri tačke. Zbog malog broja podataka za obučavanje, primenjuje se mere protiv preprilagođavanja, a one su bile  $l_1$  i  $l_2$  regularizacija i rano zaustavljanje obučavanja. Dokazano je da latentne varijable prate normalnu raspodelu i da su tačke koje odgovaraju sličnim temperaturama elektrona bliske u latentnom prostoru. Ovo je dobar dokaz da se enkoder nije prilagodio podacima, te da je uspešno naučio reprezentaciju podataka i dobro uradio smanjenje dimenzionalnosti ulaznih podataka. Da model nije izvršio preprilagođavanje ukazuje i to da su funkcije greške za trening i test faze jako bliske, kao i to da je koeficijent determinacije  $R^2$  na test podacima 0.86. Konvoluciona neuronska mreža koja je obučena za određivanje temperature elektrona na osnovu ulaznog spektra volframa imala je takvu arhitekturu da se sastojala od tri konvoluciona bloka sa po dva konvoluciona sloja, dva Batch Normalisation sloja između svakog konvolucionog bloka i dva agregaciona sloja. Na kraju, iza konvolucionog bloka imala je tri potpuno povezana sloja sa 240, 10 i jednim izlaznim

neuronom. I za konvolucionu mrežu, zbog sprečavanja preprilagođavanja, urađena je  $l_1$  i  $l_2$  regularizacija kao i rano zaustavljanje. Model je postigao koeficijent determinacije od  $R^2 = 0.96$  sa srednjim kvadratnim odstupanjem od 0.24 keV.

Obučeni modeli primenjeni su na generisanje spektra volframa, tako što je u latentnom prostoru enkodera nasumično izabrano 100 tačaka za koje je pomoću dekodera generisan spektar. Dobijeni rezultati ukazuju na to da je na nižim temperaturama plazme (ispod 3 keV) dominantna UTA struktura na 5 nm koja potiče od emisije jona  $W^{29+}$  -  $W^{34+}$  i  $W^{25+}$  -  $W^{28+}$ . Porastom temperature, ova struktura polako nestaje, a pojavljuju se spektralne linije emtovane na oko 4.5 nm koje potiču od jona  $W^{37+}$  -  $W^{42+}$  i na 6 nm koje potiču od 4d - 4p prelaza  $W^{29+}$  -  $W^{34+}$  i  $W^{23+}$  -  $W^{28+}$ , te od 4f - 4d prelaza  $W^{23+}$  -  $W^{28+}$  i 5d - 4f prelaza  $W^{21+}$  -  $W^{23+}$ . Primećena je nagla promena oblika spektra volframa sa porastom temperature, a objašnjena je trenutnom slabošću modela i aproksimacije jedne elektronske temperature. Naime, u slučaju viših elektronskih temperatura, primećen je pik profila temperature umesto tipičnog zaravnjenja profila usled paljenja jakog ECH grejanja nakon ubacivanja peleta, pa se zapravo dobija efekat emisije spektralnih linija iz delova plazme sa različitim elektronskim temperaturama koje se superponiraju i mere integralno. Na kraju, kao finalni test, generisani su spektri za pražnjenje koje nije uključeno u pravljenje baze za obučavanje i trening radi potvrde validnosti modela. Model je dao dobra slaganja za dve odabrane elektronske temperature od 1.5 keV i 0.9 keV. Iz toga se može zaključiti da trenutni model predstavlja dobar alat za dalju generaciju spektra i uvećanje baze za obučavanje zbog primene na dalje istraživanje. Glavna prednost varijacionog enkodera jeste što je pravilno naučio fizičku sliku procesa koji se odvijaju u plazmi i pored toga jako je kompjuterski efikasan, u smislu da možemo generisati nekoliko stotina spektara za nekoliko sekundi. Poređenja radi, trenutni CR modeli koje razvijaju kolege iz Japana rade tri nedelje račun samo jednog spektra jer moraju da uzmu u obzir jako veliki broj prelaza te raspodelu broja jonskih emitera u plazmi, kao i komplekse konfiguracione inerakcije između različitih emitera.

Kao unapređenje i dalje istraživanje, u sklopu prvog dela doktorske disertacije moguće je proširiti model tako da opisuje i plazme koje imaju veću gustinu elektorna od  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  i temperaturu elektrona iznad 150 000 K. To bi u predviđanje modela uključilo i različite plazme koje se javljaju u svemiru, i relevantne su za astrofiziku. Kao finalni praktični proizvod ovog rada bila bi internet aplikacija za brzo računanje Stark-ove poluširine za unete atomske i plazmene parametre.

Što se tiče unapređenja koja se mogu uraditi u drugom delu disertacije kako bi ova procedura dobila na značaju i na dodatnoj preciznost, jeste da se prvo uradi kalibracija po osetljivosti. Ona u slučaju originalne baze nije urađena kako bi se dodatno otežalo takmičarima koji su učestvovali. Pored toga, iako se uzorci snimaju sa istim instrumentom i pod istim eksperimentalnim uslovima, bilo bi potrebno i poželjno izvršiti i transfer kalibracije sa jednog uređaja na drugi. Naime, iako su to suštinski isti instrumenti, stanje komponentni u instrumentu kao i optike ne mora biti nužno isto, tako da su i drugačiji rezultati neminovni. U ovom radu, ovaj transfer nije bilo moguće uraditi jer u laboratoriji nije postojao nijedan isti uzorak kao onaj iz baze za obučavanje. Zbog toga bi uz ovako kvalitetne baze podaka trebalo dati i jedan standardni uzorak koji je lako dostupan svima kako bi druga laboratorija, odnosno eksperimentator ili korisnik, bio u mogućnosti da izvrši transfer kalibracije na svoj instrument. Takođe, ovaj rad podrazumeva i dostupnost iste opreme u obe laboratorije, što jako često nije slučaj, tako da bi mnogo ozbiljnija primena veštačke inteligencije podrazumevala i neku



vrstu standradizacije u pogledu eksperimentalnih procedura. Druga procedura koja je donekle ispitana, a mogla bi da ponudi alternativu transferu kalibracije, predstavlja mogućnosti primene metoda tzv. prenosa učenja (eng. *transfer learning*). Ovde se jedan dobro istrenirani model na nekoj velikoj bazi kao što je ona korištena u ovom radu, retrenira na manjoj bazi za obučavanje kako bi se prilagodio novom instrumentu i malo korigovao pretrenirane parametre.

Dalje istraživanje u sklopu trećeg dela teze predstavlja poboljšanje trenutnog modela tako da za ulazne parametre ima i profile elektronske temperature i gustine elektrona, kako bi se kasnije mogli izučavati i predviđati i neki atomski i transportni procesi u plazmi. Pored toga, uključivanjem gore pomenutih profila omogućio bi se i precizan i dobar test za izučavanje mehanizama uspostavljanja i prevencije akumulacije nečistoća u plazmi. Pored ovoga, bilo bi dobro i ispitati druge delove EUV spektra volframa i videti da li se u tim oblastima mogu naći neke korisne dijagnostičke linije.

## Literatura

- [1] Yang, A. *et al.* *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology* **8** (2020).
- [2] Vamathevan, J., Clark, D., Czodrowski, P. *et al.* *Nat Rev Drug Discov* **18**, 463–477 (2019).
- [3] Ball, N. M. and Brunner, R. J. *International Journal of Modern Physics D* **19**, 1049–1106 (2010).
- [4] Ishida, E. *et al.* *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **483**, 2–18 (2019).
- [5] Rohde, D. J., Drinkwater, M. J., Gallagher, M. R., Downs, T. and Doyle, M. T. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **360**, 69–75 (2005).
- [6] A., G. *Topics in Current Chemistry* **32**, 1–32 (2012).
- [7] Carrasquilla, J. and Melko, R. *Nature Physics* **13**, 431–434 (2017).
- [8] Deringer, V. L., Caro, M. A. and Csányi, G. *Advanced Materials* **31**, 1902765 (2019).
- [9] Carleo, G. and Troyer, M. *Science* **355**, 602–606 (2017).
- [10] Hartmann, M. and Carleo, G. *Physical Review Letters* **122**, 250502 (2019).
- [11] Krenn, M., Malik, M., Fickler, R., Lapkiewicz, R. and Zeilinger, A. *Physical Review Letters* **116**, 090405 (2016).
- [12] Krenn, M., Gu, X. and Zeilinger, A. *Physical Review Letters* **119**, 240403 (2017).
- [13] Djordjević, B. Z. *et al.* *Physics of Plasmas* **28**, 043105 (2021).
- [14] Ralbovsky, N. M. and Lednev, I. K. *Chemical Society Reviews* **49**, 7428–7453 (2020).
- [15] Park, H. and Son, J. *Sensors* **21** (2021).
- [16] Koubiti, M. and Kerebel, M. *Applied Sciences* **12** (2022).
- [17] Poggialini, F. *et al.* *Review of Scientific Instruments* **91**, 073111 (2020).
- [18] Li, L.-N. *et al.* *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* **180**, 106183 (2021).
- [19] Babu, M. S., Imai, T. and Sarathi, R. *IEEE Transactions on Plasma Science* **49**, 1088–1096 (2021).
- [20] Cui, X., Wang, Q., Zhao, Y. *et al.* *Appl. Phys. B* **125**, 56 (2019).
- [21] Brenzke, M. *et al.* *Nuclear Fusion* **61**, 046023 (2021).
- [22] Nieuwenhuizen, D. Modeling nuclear fusion reactors using variational auto-encoders (2021).

- [23] Piccione, A., Berkery, J., Sabbagh, S. and Andreopoulos, Y. *Nuclear Fusion* **60**, 046033 (2020).
- [24] Li, H., Fu, Y., Li, J. and Wang, Z. *Plasma Science and Technology* **23**, 115102 (2021).
- [25] NIKOLA KONJEVIĆ AND THE BELGRADE SCHOOL OF SPECTROSCOPY: 50 YEARS OF SCIENTIFIC LEADERSHIP AND CONTRIBUTIONS TO THE ADVANCEMENT OF PLASMA DIAGNOSTICS. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* **131**, 139–140 (2017).
- [26] Ralchenko, Y., Griem, H. and Bray, I. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **81**, 371–384 (2003).
- [27] Sahal-Bréchet, S. *Astron. Astrophys* **1**, 91 (1969).
- [28] Sahal-Bréchet, S. *Astron. Astrophys* **2**, 322 (1969).
- [29] Bellan, P. M. *Fundamentals of Plasma Physics* (Cambridge University Press, 2006).
- [30] Milić, B. *Osnove fizike gasne plazme* (Građevinska knjiga, 1989).
- [31] Miyamoto, K. *Plasma Physics for Controlled Fusion* 2 edn (Springer-Verlag Berlin, 2016).
- [32] *Fusion Physics* Non-serial Publications (International Atomic Energy Agency, Vienna, 2012).
- [33] Hutchinson, I. H. *Principles of Plasma Diagnostics* 2 edn (Cambridge University Press, 2002).
- [34] Demtröder, W. *Laser Spectroscopy, Vol. 1: Basic Principles* 4 edn (Springer-Verlag Berlin, 2008).
- [35] Gigosos, M. A. *Journal of Physics D: Applied Physics* **47**, 343001 (2014).
- [36] Griem, H. R. *Phys. Rev.* **128**, 515–523 (1962).
- [37] Griem, H. R. *Phys. Rev. Lett.* **17**, 509–513 (1966).
- [38] Griem, H. R. *Plasma Spectroscopy* 1 edn (McGraw-Hill, Inc., 1964).
- [39] Baranger, M. *Phys. Rev.* **111**, 481–493 (1958).
- [40] Baranger, M. *Phys. Rev.* **111**, 494–504 (1958).
- [41] Baranger, M. *Phys. Rev.* **112**, 855–865 (1958).
- [42] Holtzmark, J. *Annalen der Physik* **363**, 577–630 (1919).
- [43] Mozer, B. and Baranger, M. *Phys. Rev.* **118**, 626–631 (1960).
- [44] Hooper, C. F. *Phys. Rev.* **149**, 77–91 (1966).

- [45] Hooper, C. F. *Phys. Rev.* **165**, 215–222 (1968).
- [46] Hooper, C. F. *Phys. Rev.* **169**, 193–195 (1968).
- [47] Ecker, G. and Müller, K. *Z. Physik* **153**, 317–330 (1958).
- [48] Sahal-Bréchet, S., Dimitrijević, M. and Ben Nessib, N. *Atoms* **2**, 225 (2014).
- [49] Dimitrijevic, M. and Sahal-Bréchet, S. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **31**, 301–313 (1984).
- [50] Wiese, W. and Konjevic, N. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **28**, 185–198 (1982).
- [51] Kelleher, D. E. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **25**, 191–220 (1981).
- [52] Assous, R. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **10**, 975–990 (1970).
- [53] Jung, M. *Astron. Astrophys.* **58** (1963).
- [54] Purić, J., Labat, J., Ćirković, L., Lakićević, I. and Djeniže, S. *J. Phys. B.* **10**, 2375 (1977).
- [55] Miller, M. H., Lesage, A. and Purić, J. *Astrophys. J.* **239**, 410 (1980).
- [56] Platisa, M., Popovic, M., Dimitrijevic, M. and Konjevic, N. *Z. Naturforsch. a.* **212** (1975).
- [57] Platisa, M., Dimitrijevic, M., Popovic, M. and Konjevic, N. *Astron. Astmphys.* **54**, 837 (1977).
- [58] Bridges, J. M. and Wiese, W. L. *Phys. Rev.* **159**, 31–38 (1967).
- [59] Purić, J., Dimitrijević, M. S. and Lakićević, I. S. *Physics Letters A* **67**, 189 (1978).
- [60] Purić, J., Dojčinović, I. P., Nikolić, M. *et al.* *Astrophys. J.* **680**, 803 (2008).
- [61] Purić, J., Miller, H. and Lessage, A. *Astrophys. J.* **416**, 825 (1993).
- [62] Tapalaga, I., Dojčinović, I. P. and Purić, J. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **415**, 503 (2011).
- [63] Tapalaga, I., Dojčinović, I. P. and Purić, J. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **474**, 5479 (2018).
- [64] Purić, J. and Šćepanović, M. *Astrophys. J.* **521**, 490 (1999).
- [65] Trklja, N., Tapalaga, I., Dojčinović, I. P. and Purić, J. *New Astron* **59**, 54 (2019).
- [66] Trklja, N., Dojčinović, I. P., Tapalaga, I. and Purić, J. *Atoms* **7**, 99 (2019).

- [67] Jevtić, D., Dojčinović, I. P., Tapalaga, I. and Purić, J. *Bull. Astron. Soc. India* **40**, 151 (2012).
- [68] Scepanovic, M. and Puric, J. *Rom. Rep. Phys.* **65**, 1275–1280 (2013).
- [69] Namioka, T. *J. Opt. Soc. Am.* **49**, 951–961 (1959).
- [70] Thorne, A. P. *Spectrophysics* 1 edn (Springer Dordrecht, 1988).
- [71] Beutler, H. G. *J. Opt. Soc. Am.* **35**, 311–350 (1945).
- [72] Miziolek, A. W., Palleschi, V. and Schechter, I. *Laser Induced Breakdown Spectroscopy* (Cambridge University Press, 2006).
- [73] Cremers, D. A. and Radziemski, L. J. *Handbook of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy* (Wiley, 2013).
- [74] Burger, M., Skočić, M. and Bukvić, S. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* **101**, 51–56 (2014).
- [75] Konjević, N., Ivković, M. and Jovićević, S. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* **65**, 593–602 (2010).
- [76] Martin, B. R. *Nuclear and Particle Physics* (John Wiley and Sons, 2006).
- [77] Schumacher, U. *Fusionforschung: eine Einführung* (Wiss. Buchges., 1993).
- [78] Wesson, J. *Tokamaks* (Oxford University Press, 2011).
- [79] Stroth, U. *Plasmaphysik: Phänomene, Grundlagen und Anwendungen* (Springer Spektrum Berlin, Heidelberg, 2018).
- [80] Adams, M. F. *et al. Journal of Physics: Conference Series* **180**, 012036 (2009).
- [81] Naujoks, D. *Plasma-Material Interaction in Controlled Fusion* (Springer Berlin, Heidelberg, 2006).
- [82] Tokar, M. Z. *et al. Plasma Physics and Controlled Fusion* **37**, A241 (1995).
- [83] Tokar, M. *et al. Nuclear Fusion* **37**, 1691 (1997).
- [84] Nikolić, M. and Zečević, A. *Mašinsko učenje* (Matematički fakultet, 2019).
- [85] Charniak, E. *Introduction to Deep Learning* (The MIT Press, 2018).
- [86] Murphy, K. P. *Machine Learning A Probabilistic Perspective* (The MIT Press, 2012).
- [87] Breiman, L. *Machine Learning* **45**, 5–32 (2001).
- [88] Bishop, C. M. *Pattern Recognition and Machine Learning* (Springer, 2006).

- [89] Kingma, D. P. and Welling, M. *Foundations and Trends in Machine Learning* **12**, 307–392 (2019).
- [90] Griem, H. R. *Spectral Line Broadening by Plasmas* (New York:Academic, 1974).
- [91] Griem, H. R. *Phys. Rev.* **165**, 258–266 (1968).
- [92] Dimitrijević, M. and Konjević, N. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **24**, 451–459 (1980).
- [93] Tapalaga, I., Traparić, I., Trklja Boca, N. *et al. Neural Comput. Applic.* **34**, 6349 (2022).
- [94] Majlinger, Z. and Traparić, I. *Contrib. Astron. Obs. Skalnaté Pleso* **53**, 58–71 (2023).
- [95] Pedregosa, F. *et al. Journal of Machine Learning Research* **12**, 2825–2830 (2011).
- [96] Sahal-Bréchet, S., Dimitrijević, M. S. and Moreau, N. Stark-b database. <http://stark-b.obspm.fr> (2015). Accessed: September 2023.
- [97] Blagojević, B., Popović, M., Konjević, N. and Dimitrijević, M. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **61**, 361–375 (1999).
- [98] Dojić, D., Skočić, M., Bukvić, S. and Djeniže, S. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* **166**, 105816 (2020).
- [99] Konjević, N., Dimitrijević, M. S. and Wiese, W. L. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **13**, 469 (1984).
- [100] Konjević, N., Lessage, A., Fuhr, J. R. and Wiese, W. L. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **31**, 819 (2002).
- [101] Konings, R. J. M. and Stoller, R. E. (eds) *Comprehensive Nuclear Materials* (Elsevier, Amsterdam, 2020).
- [102] Tognoni, E., Cristoforetti, G., Legnaioli, S. and Palleschi, V. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* **65**, 1–14 (2010).
- [103] Chen, T., Zhang, T. and Li, H. *Trends in Analytical Chemistry* **133**, 116113 (2020).
- [104] Sun, C., Tilan, Y., Gao, L. *et al. Scientific Reports* **9**, 11363 (2019).
- [105] Zhang, X. *et al. International Journal of Environmental Research and Public Health* **15** (2018).
- [106] Sheng, L. *et al. Journal of Analytical Atomic Spectrometry* **30**, 453–458 (2015).
- [107] Tian, Y. *et al. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* **175**, 106027 (2021).
- [108] Babu, M. S., Imai, T. and Sarathi, R. *IEEE Transactions on Plasma Science* **49**, 1088–1096 (2021).

- [109] Cui, X., Wang, Q., Zhao, Y. *et al.* *Applied Physics B* **125**, 12556 (2019).
- [110] Junjuri, R. and Gundawar, M. K. *Waste Management* **117**, 48–57 (2020).
- [111] Li, L.-N. *et al.* *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* **180**, 106183 (2021).
- [112] Poggialini, F. *et al.* *Review of Scientific Instruments* **91**, 073111 (2020).
- [113] Tang, H., Zhang, T., Yang, X. and Li, H. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry* **32**, 2194–2199 (2017).
- [114] Ruan, F. *et al.* *Analytical Methods* **7**, 9171–9176 (2015).
- [115] Liang, J. *et al.* *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* **207**, 104179 (2020).
- [116] Yang, G. *et al.* *Analytical Methods* **9**, 5365–5370 (2017).
- [117] Zhang, T. *et al.* *Journal of Analytical Atomic Spectrometry* **29**, 2323 (2014).
- [118] Zhang, Y. *et al.* *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* **166**, 105802 (2020).
- [119] Liu, K. *et al.* *Analytical Methods* **11**, 4769 (2019).
- [120] Wei, K. *et al.* *Applied Sciences* **12** (2022).
- [121] Jin, X. *et al.* *J. Anal. At. Spectrom.* **38**, 243–252 (2023).
- [122] Kepes, E. LIBS 2022 quantification contest (2022). URL [https://figshare.com/projects/LIBS2022\\_Quantification\\_Contest/142250](https://figshare.com/projects/LIBS2022_Quantification_Contest/142250).
- [123] Traparić, I. and Ivković, M. *Eur. Phys. J. D* **77**, 30 (2023).
- [124] Randolph, T. W. *Cancer Biomarkers* **2**, 135–144 (2006).
- [125] Asmussen, K. *et al.* *Nuclear Fusion* **38**, 967–986 (1998).
- [126] Pütterich, T. *et al.* *Plasma Physics and Controlled Fusion* **50**, 085016 (2008).
- [127] Nakano, T., Asakura, N., Kubo, H., Yanagibayashi, J. and Ueda, Y. *Nuclear Fusion* **49**, 115024 (2009).
- [128] Murakami, I. *et al.* *Nuclear Fusion* **55**, 093016 (2015).
- [129] Murakami, I. *et al.* *Nuclear Materials and Energy* **26**, 100923 (2021).
- [130] Oishi, T. *et al.* *Atoms* **9**, 69 (2021).
- [131] Radtke, R., Biedermann, C., Schwob, J. L., Mandelbaum, P. and Doron, R. *Phys. Rev. A* **64**, 012720 (2001).
- [132] Utter, S. B., Beiersdorfer, P. and Träbert, E. *Canadian Journal of Physics* **80**, 1503 (2002).

- [133] Streeter, M. J. V. *et al.* *High Power Laser Science and Engineering* **11** (2023).
- [134] Daly, G. A., Fieldsend, J. E., Hassall, G. and Tabor, G. R. *Machine Learning: Science and Technology* **4**, 035035 (2023).
- [135] Fu, Y. *et al.* *Physics of Plasmas* **27**, 022501 (2020).
- [136] Wei, X. *et al.* *Nuclear Fusion* **63**, 086020 (2023).
- [137] Ferreira, D. R., Carvalho, P. J., Sozzi, C., Lomas, P. J. and JET Contributors. *Fusion Science and Technology* **76**, 901–911 (2020).
- [138] Wei, Y., Levesque, J., Hansen, C., Mauel, M. and Navratil, G. *Nuclear Fusion* **61**, 126063 (2021).
- [139] Narihara, K., Yamada, I., Hayashi, H. and Yamauchi, K. *Review of Scientific Instruments* **72**, 1122–1125 (2001).
- [140] Nozato, H., Morita, S., Goto, M., Ejiri, A. and Takase, Y. *Review of Scientific Instruments* **74**, 2032–2035 (2003).
- [141] Tamura, N. *et al.* *Review of Scientific Instruments* **79**, 10F541 (2008).
- [142] Sudo, S. and Tamura, N. *Review of Scientific Instruments* **83**, 023503 (2013).
- [143] Schwob, J. L., Wouters, A. W., Suckewer, S. and Finkenthal, M. *Review of Scientific Instruments* **58**, 1601–1615 (1987).
- [144] Chollet, F. *et al.* Keras (2015). URL <https://github.com/fchollet/keras>.



## Biografija

Ivan Traparić rođen je u Trebinju, BiH, 14.9.1996. godine gde je završio osnovnu i srednju školu. Na osnovne studije Fizičkog fakulteta Univerziteta u Beogradu upisuje se 2015. godine na smer Primenjena i kompjuterska fizika. Osnovne studije završava u redovnom roku 2019. godine sa srednjom prosečnom ocenom 9.43. Iste godine upisuje master studije na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu na smeru Teorijska i eksperimentalna fizika. Master studije je završio sa srednjom prosečnom ocenom 10, a master rad odbranio sa ocenom 10. Master rad pod naslovom „Vakuum ultraljubičasta spektroskopija Lajmanove serije jonizovanog atoma helijuma“ je urađen u Laboratoriji za spektroskopiju plazme i lasere na Institutu za fiziku u Beogradu, pod rukovodstvom dr Milivoja Ivkovića.

Na Institutu za fiziku u Beogradu je zaposlen od aprila 2021. godine kao student doktorskih studija u zvanju istraživač pripravnik, a od novembra 2023. godine u zvanju istraživač saradnik. Tokom doktorskih studija, bavio se ili se bavi vakuum ultraljubičastom (VUV) spektroskopijom električnih gasnih pražnjenja, primenom mašinskog učenja i veštačke inteligencije u spektroskopiji plazme u optičkoj i VUV oblasti spektra, te unapređivanjem metoda i poboljšanja granica detekcije pojedinih elemenata u spektroskopiji laserski indukovano proboja.

Trenutno učestvuje kao član projektnog tima na projektu NOVA2LIBS4fusion koji se realizuje u okviru poziva IDEJE Fonda za nauku Republike Srbije. Kandidat je do sada publikovao 5 radova, od kojih su 3 objavljena u vodećim međunarodnim časopisima. Prema indeksnoj bazi Scopus ima h faktor 2, a radovi su citirani 5 puta bez autocitata. Održao je pozivno predavanje na međunarodnoj konferenciji *14th Serbian Conference on Spectral Line Shapes in Astrophysics* u sekciji *Spectral Line Research: New Frontiers*.

## Spisak publikacija:

1. Tapalaga, I., Traparić, I., Trklja Boca, N. et al. *Neural Comput Applic* 34, 6349–6358 (2022).  
<https://doi.org/10.1007/s00521-021-06763-4>.
2. Traparić, I., Ivković, M. *Eur. Phys. J. D* 77, 30 (2023). <https://doi.org/10.1140/epjd/s10053-023-00608-6>.
3. M Ivkovic, J Savovic, Biljana D Stankov, M Kuzmanovic, I Traparic, *Spectrochim. Acta B* 213 (2024) 106874, <https://doi.org/10.1016/j.sab.2024.106874>.
4. NM Sakan, I Traparic, VA Sreckovic, M Ivkovic, *Contrib. Astron. Obs. Skalnaté Pleso* 52, 97-104, 2022, <https://doi.org/10.31577/caosp.2022.52.3.97>.
5. Z Majlinger, I Traparic, *Contrib. Astron. Obs. Skalnaté Pleso* 53, 58-71, 2023, <https://doi.org/10.31577/caosp.2023.53.3.58>

## ИЗЈАВА О АУТОРСТВУ

Име и презиме аутора: Иван Трапарић  
Број индекса: 8009/2020

Изјављујем

Изјављујем да је докторска дисертација под насловом Примена машинског учења и вештачке интелигенције у спектроскопији плазме

- резултат сопственог истраживачког рада;
- да дисертација у целини ни у деловима није била предложена за стицање друге дипломе према студијском програмима других високошколских установа;
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

У Београду,

---

Потпис аутора

---

**Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада**

Име и презиме аутора: Иван Трапарић

Број индекса: 8009/2020

Студијски програм: Физика јонизованог гаса и плазме

Наслов рада: Примена машинског учења и вештачке интелигенције у спектроскопији плазме

Ментор: доц. др Маријана Гавриловић Божовић и др Миливоје Ивковић

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао ради похрањивања у **Дигиталном репозиторијуму** Универзитета у Београду.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског назива доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

У Београду,

---

Потпис аутора

---

## Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Примена машинског учења и вештачке интелигенције у спектроскопији плазме

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду и доступну у отвореном приступу могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио.

1. Ауторство (CC BY)
2. Ауторство – некомерцијално (CC BY-NC)
3. Ауторство – некомерцијално – без прерада (CC BY-NC-ND)
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима (CC BY-NC-SA)
5. Ауторство – без прерада (CC BY-ND)
6. Ауторство – делити под истим условима (CC BY-SA)

У Београду,

---

Потпис аутора

---

1. Ауторство. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.
2. Ауторство – некомерцијално. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.
3. Ауторство – некомерцијално – без прерада. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.
5. Ауторство – без прерада. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.
6. Ауторство – делити под истим условима. Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.