

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА

У БЕОГРАДУ

Пошто смо на V седници Наставно-научног већа Физичког факултета одржаној 27. марта 2024. године одређени за чланове Комисије за преглед и оцену докторске дисертације „ПРИМЕНА МАШИНСКОГ УЧЕЊА И ВЕШТАЧКЕ ИНТЕЛИГЕНЦИЈЕ У СПЕКТРОСКОПИЈИ ПЛАЗМЕ" из научне области Физика јонизованог гаса и плазме, након прегледа предате докторске дисертације подносимо следећи

РЕФЕРАТ

1. Основни подаци о кандидату

1.1 Биографски подаци

Иван Трапарић рођен је у Требињу, БиХ, 14.9.1996. године где је завршио основну и средњу школу. На основне студије Физичког факултета Универзитета у Београду уписује се 2015. године на смер Примењена и компјутерска физика. Основне студије завршава у редовном року 2019. године са средњом просечном оценом 9.43. Исте године уписује мастер студије на Физичком факултету Универзитета у Београду на смеру Теоријска и експериментална физика. Мастер студије је завршио са средњом просечном оценом 10, а мастер рад одбранио са оценом 10. Мастер рад под насловом „Вакуум ултраљубичаста спектроскопија Лајманове серије јонизованог атома хелијума“ је урађен у Лабораторији за спектроскопију плазме и ласере на Институту за физику у Београду, под руководством др Миливоја Ивковића.

На Институту за физику у Београду је запослен од априла 2021. године као студент докторских студија у звању истраживач приправник, а од новембра 2023. године у звању истраживач сарадник. Током докторских студија, бавио се или се бави вакуум ултраљубичастом (ВУВ) спектроскопијом електричних гасних пражњења, применом машинског учења и вештачке интелигенције у спектроскопији плазме у оптичкој и ВУВ области спектра, те унапређивањем метода и побољшања граница детекције појединих елемената у спектроскопији ласерски индукованог пробоја. У последње време, бави се и применом вештачке интелигенције у ВУВ спектроскопији фузионих плазми.

1.2 Научна активност

Научно – истраживачки рад Ивана Трапарића састоји се од експерименталног истраживања у области спектроскопије ласерски индукованих плазми и начина побољшања осетљивости методе, као и примене вештачке интелигенције у спектроскопији плазме.

(1) Истраживање могућности примене вештачке интелигенције у спектроскопији плазме

У оквиру докторске тезе Иван Трапарић је испитивао могућност примене вештачке интелигенције у спектроскопији плазме. Анализирана је примена вештачке интелигенције за одређивање Штаркове полуширине спектралне линије, као и за квантитативну анализу и одређивање концентрације елемената у узорку помоћу спектроскопије ласерски индуковане плазме. На крају, вештачка интелигенција је искориштена за генерисање спектра у екстремној ултраљубичастој (ЕУВ) области електромагнетног спектра за услове који се могу наћи у центру плазме у хелиотрону ЛХД у Јапану.

(2) Истраживање повећања осетљивости мерења методом спектроскопије ласерски индуковане плазме

У оквиру овог дела свог научног рада, испитана је могућност повећања интензитета емитоване спектралне линије из ласерски произведене плазме. Испитивани методи су додано електрично пражњење у две конфигурације. Једна конфигурација представља брзо импулсно пражњење чији је тригер ласерски произведена плазма, а други метод је убацивање аблираног материјала у микроталасно пражњење. Мета на којој је предложена метода тестирана је волфрам допиран са ренијумом, који се очекује у првом зиду будућих фузионих реактора.

Тренутно учествује као члан пројектног тима на пројекту NOVA2LIBS4fusion који се реализује у оквиру позива ИДЕЈЕ Фонда за науку Републике Србије. Кандидат је до сада публиковао 5 радова, од којих су 3 објављена у водећим међународним часописима. Према индексној бази Scopus има h фактор 2, а радови су цитирани 5 пута без аутоцитата. Одржао је позивно предавање на међународној конференцији *14th Serbian Conference on Spectral Line Shapes in Astrophysics* у секцији *Spectral Line Research: New Frontiers*.

2. Опис предатог рада

2.1 Основни подаци

Докторска дисертација кандидата Ивана Трапарића, мастера физике, под називом „ПРИМЕНА МАШИНСКОГ УЧЕЊА И ВЕШТАЧКЕ ИНТЕЛИГЕНЦИЈЕ У СПЕКТРОСКОПИЈИ ПЛАЗМЕ” написана је у потпуности под менторством научног саветника Института за физику у Београду др Миливоја Ивковића и доцента Факултета инжењерских наука Универзитета у Крагујевцу др Маријане Гавриловић Божовић. Др Миливоје Ивковић и доц. др Маријана Гавриловић Божовић у потпуности задовољавају услове да руководе овом дисертацијом. Тема докторске дисертације под називом „ПРИМЕНА МАШИНСКОГ УЧЕЊА И ВЕШТАЧКЕ ИНТЕЛИГЕНЦИЈЕ У СПЕКТРОСКОПИЈИ ПЛАЗМЕ”, прихваћена је на Колегијуму докторских студија Физичког факултета одржаног 05.07.2023. године на Физичком факултету Универзитета у Београду. На I седници Наставно-научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду, одржане дана 08.11.2023. године усвојен је Извештај Комисије за оцену испуњености услова и оправданост предложене теме за израду докторске дисертације и именовани ментори за израду исте: др Миливоје Ивковић и доц. др Маријана Гавриловић Божовић.

Веће научних области природно-математичких наука Универзитета у Београду је на седници одржаној 11.12.2023. године дало сагласност на предлог теме докторске дисертације кандидата Ивана Трапарића.

На V седници Наставно-научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду, одржане дана 24.03.2024. године, одређени су чланови Комисије за припрему реферата на основу прегледа и оцене докторске дисертације.

Дисертација се састоји из 95 страна (без насловне стране, захвалнице, сажетка на српском и енглеском језику, садржаја, прилога, ауторове биографије и изјава) и написана је на српском језику. Дисертација је подељена у 7 поглавља. У тексту се налази 51 слика. У библиографији је наведено 144 референци.

2.2 Предмет и циљ докторског рада

Главни циљ ове докторске дисертације је доказ могућности примене вештачке интелигенције (ВИ) као једног од алата у анализи различитих проблема из домена спектроскопије плазме. С тим у вези, испитано је коришћење метода ВИ у одређивању, тј. израчунавању полуширине емитоване спектралне линије услед Штарковог ефекта, затим примена на анализу спектра ласерски индукованог пробоја (енг. *Laser Induced Breakdown Spectroscopy - LIBS*) као и примена на генерисање спектра волфрама у ЕУВ области зрачења за типичне услове плазме у хелиотрону ЛХД. Комплетна анализа рађена је у програмском језику Python, коришћењем *sci-kit learn* и *tensorflow* библиотека.

У случају Штарковог ефекта, циљ истраживања било је испитивање раније уочених регуларности Штарковог ефекта дуж спектралних серија и изоелектронског низа, као и предвиђање нових експерименталних полуширина за елементе за које не постоје израчунате полуширине. Модел машинског учења је обучаван на резултатима семикласичне пертурбативне теорије (енг. *SCP – Semiclassical Perturbation Theory*) коју су развили др Силви Сахал-Брешо и др Милан Димитријевић. Радни модели били су дрво одлуке (енг. *Decision Tree*), случајна шума (енг. *Random Forest*) и градијентно појачано дрво одлуке (енг. *Gradient Boosting Decision Tree*). Најбољи резултат предикције полуширина спектралних линија је дала случајна шума, па је она коришћена за финалне предикције. Добијени резултати показују да модел успешно потврђује раније уочене регуларности, те да се може користити као алат за брзо рачунање Штаркових полуширина емитованих спектралних линија које тренутно нису доступне, а процењена тачност методе је јако слична семикласичној пертурбативној теорији, око 15 - 20 %.

Следећи циљ докторске дисертације је био испитати у којој мери и под којим условима се може користити база података других аутора за тренинг сопственог модела ВИ за квантитативну анализу у ЛИБСу. Такође, циљ је био и тестирати метод редукције улазне базе података помоћу Гинијевог критеријума, пошто је то до сада рађено само за случај класификације али не и регресије. Испитано колико поновљивост мерења и сама апаратура утичу на крајње резултате. Применом Гинијевог критеријума смањена је димензионалност базе, уз очување већине корисних информација. Резултати предвиђања концентрације главних елемената челика (хром, никл, манган и молибден) упоређени су између два модела, неуронске мреже и случајне шуме. Показано је да се са пажљиво изведеним мерењима могу добити добри резултати, иако база и тест узорци нису снимљени истим уређајем.

Коначно, последњи циљ ове докторске дисертације био је испитати могућност генерисања спектра волфрама у области ЕУВ зрачења, у опсегу таласних дужина од око 4 nm до 7 nm. Циљ је био тачно моделовати облик спектра, јер досадашњи колизионо радијативни модели нису имали успеха на том пољу. Примењени модел за решавање овог проблема био је варијациони аутоенкодер (енг. *Variational Autoencoder – VAE*). За обучавање модела искоришћени су експериментално снимљени спектри са SOXMOС спектроскопским системом инсталираним на хелиотрону ЛХД у Јапану. Систем се састоји од ЕУВ спектрометра са великим упадним углом са Роландовим кругом полупречника 2 m и монтиране две дифракционе решетке, једна од 600 зареза по милиметру и друга од 133 зареза по милиметру. Генерисани спектри волфрама за задату температуру електрона су у добром слагању са експерименталним резултатима, а модел тачно предвиђа и температурну зависност облика емитованог спектра.

2.3 Публикације везане за тему

Резултати ове докторске дисертације објављени су у два рада који нису за исту сврху коришћени у другим дисертацијама:

1. Tapalaga, I., **Traparić, I.**, Trklja Boca, N. *et al. Stark spectral line broadening modeling by machine learning algorithms*. *Neural Comput & Applic* **34**, 6349–6358 (2022). <https://doi.org/10.1007/s00521-021-06763-4>
2. **Traparić, I.**, Ivković, M. *Determination of austenitic steel alloys composition using laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) and machine learning algorithms*. *Eur. Phys. J. D* **77**, 30 (2023). <https://doi.org/10.1140/epjd/s10053-023-00608-6>

2.4 Преглед научних резултата добијених у дисертацији

Докторска дисертација Ивана Трапарића састоји се од 7 поглавља.

Прво поглавље представља сумирање досадашњих резултата у овој области и мотивацију за израду ове докторске дисертације. Дат је преглед научног доприноса ове докторске дисертације, као и кратак и информативни преглед урађеног у склопу исте. Потом је укратко изложен садржај сваког поглавља унутар ове докторске дисертације.

У другом поглављу описани су теоријски концепти физике плазме и теорије ширења спектралних линија релевантних за ову тезу. Представљене су основе квазистатичког ширења спектралних линија и ширење спектралних линија у сударној апроксимацији. Потом је представљена семикласична пертурбативна теорија која је употребљена као полазна основа за прављење базе за обучавање модела машинског учења коришћеног за изучавање Штарковог ефекта. Поред теорије ширења спектралних линија, изложена је и теорија ВУВ и ЕУВ спектроскопије. Потом следи теоријски опис ласерски индукованих плазми и спектроскопије ласерски индукованог пробоја као аналитичке методе. Дати су основни физички модели ових плазми, предности и мане методе, као и типичне вредности основних плазмених параметара за ове плазме. Поглавље се наставља кратким теоријским описом фузионих плазми, где је објашњено конфинирање плазме помоћу два типа уређаја, токамака и стелератора. Затим је дат приказ интеракције плазме са зидом реактора и објашњење релевантних физичких процеса који се при томе дешавају. Кандидат завршава овај део објашњавањем уласка и акумулације нечистоћа у плазми са великим атомским бројем, што представља нарочит проблем за стабилан рад будућег фузионог реактора. Прво поглавље завршава теоријом и концептима машинског учења и вештачке интелигенције који су коришћени у реализацији ове тезе. Представљени су CART (енг. *Classification and Regression Trees*) нелинеарни модели машинског учења: дрво одлуке и случајна шума. Потом је објашњен концепт неуронских мрежа и дат опис за просте неуронске мреже са пропагацијом унапред и конволуционе неуронске мреже. На крају је објашњена теорија аутоенкодера и представљен је варијациони аутоенкодер као побољшање простог аутоенкодера и његова примена. Поглавље се завршава објашњавањем техника превенције преприлагођавања модела подацима на којима се обучавају.

Треће поглавље се бави изношењем резултата везаних за примену машинског учења за одређивање Штаркове полуширине емитоване спектралне линије. Прво је објашњен начин на који је направљена база за обучавање, а онда и како је та база прилагођена потребама истраживања. Затим је детаљно објашњен начин на који је изабран најбољи модел и који параметри модела дају најбоље резултате. Добијени најбољи модел случајне шуме примењен је на анализу регуларности Штарковог ефекта дуж спектралних серија неутралног атома литијума. Добијени резултати потврђују раније уочени линеарни тренд раста спектралних полуширина са порастом ефективног потенцијала горњег нивоа.

Један од најзначајнијих резултата овог поглавља, што је по први пут је уочено, јесте сатурациони ефекат атомске прелазе са великим главним квантним бројем где полуширине престају са трендом линеарног раста. Ово опажање је објашњено Дебајевим екранирањем, где је поље емитера екранирано тако да га електрон не види. Ово објашњење појачава и чињеница да се повећањем густине електрона ефекат јавља за ниже главне квантне бројеве, што се објашњава смањивањем Дебајевог радијуса за веће електронске густине. Поред регуларности дуж спектралних серија, тачно је репродукована и регуларност дуж изоелектронског низа литијума, а резултати су упоређени и са експерименталним мерењима, где је добијено добро слагање. Додатно, испитана је и важност сваког од 14 улазних параметара модела, тј. испитано је који параметри највише утичу на коначни резултат. Анализа је урађена алгоритмом пермутационе важности атрибута. Овом анализом највећа важност је дата густини електрона, потом главном квантном броју горњег енергетског нивоа, наелектрисању емитера, ефективном потенцијалу горњег нивоа, атомском броју емитера итд. Закључак овога јесте и физички оправдан, јер је највећа зависност Штарковог ширења управо од густине електрона. Коначно, ово поглавље завршава се поређењем експерименталних мерења разних аутора са предвиђањима модела. Уочено је средње одступање предвиђања од експерименталних мерења од 20 %, што је и у складу са грешком семикласичне пертурбативне теорије на којој је модел и обучаван.

Четврто поглавље бави се испитивањем аналитичке способности спектроскопије ласерски индукованог пробоја. Наиме, кандидат наводи да је потенцијално ограничење примене вештачке интелигенције у ЛИБС-у то што експериментатори морају имати више десетина стандардних узорака како би добили адекватну варијансу у подацима да би успешно обучили моделе вештачке интелигенције за коришћење у сврху квантитативне анализе узорака. Стога је тестирано да ли се обучавањем модела на бази података која је снимљена ван лабораторије са истим спектрометром и ласером, при чему би експериментатор снимио само своје узорке у лабораторији, могу добити задовољавајући резултати за квантитативну анализу. Реализована је експериментална поставка која је поновила услове снимања оригиналне базе. Снимљени су тест спектри четири различита узорка челика, који нису били присутни у бази за обучавање. Циљ је био предвидети концентрацију четири главна елемента у челику: хрома, никла, мангана и молибдена. За редукцију улазног сета података искоришћена је метода процене важности улазних података заснована на Гинијевом критеријуму. Након примене овог критеријума база за обучавање главних модела значајно је редукована, док је сачувана већина корисних информација. У овој дисертацији први пут је овај критеријум примењен за редукцију димензионалности у квантитативној анализи. Главна предвиђања рађена су помоћу просте неуронске мреже и случајне шуме. У овом конкретном случају неуронска мрежа се показала као бољи алгоритам за предикције, што показују резултати средњег квадратног одступања између правих и предвиђених концентрација аналита, као и коефицијент детерминације R^2 , који је већи за сва четири предвиђена елемента. Главни резултат овог дела дисертације јесте да је могуће обучавати моделе машинског учења за квантитативну анализу на бази снимљеној у лабораторији другог аутора, али се морају поновити егзактни услови које је тај аутор имао. Такође, закључује се да за успешну примену ове методе мора бити урађен и трансфер калибрације, јер инструменти и оптика не морају нужно бити у истом стању, иако су од истог произвођача. Доступност апаратуре варира од лабораторије до лабораторије, тако да се у тексту дисертације ово наводи као ограничење оваквог приступа, наводећи идеју да би можда било пожељно стандардизовати на неки начин добијање база података, у смислу да се њихово снимање обавља са опремом која је доступна највећем броју лабораторија.

У петом поглављу ове дисертације изложени су резултати примене вештачке интелигенције за моделовање емисионог спектра волфрама у ЕУВ области спектра, у опсегу таласних дужина од 4 до

7 nm. За моделовање је искоришћен варијациони аутоенкодер, који представља алгоритам генеративне вештачке интелигенције. Главна претпоставка јесте да облик емитованог спектра слабо зависи од густине електрона, а да он зависи искључиво од температуре електрона. Додатно, претпостављено је да се емисија дешава на једној температури електрона, а апроксимација се оправдава чињеницом да услед уласка атома волфрама у плазму долази до зрачења енергије из језгра плазме, пада температуре електрона и заравњења профила температуре електрона и суштински до константне температуре унутар зоне акумулације. Генерација нових спектра за различите температуре електрона рађена је помоћу латентног простора варијационог аутоенкодера, а за предикцију температуре електрона која одговара генерисаном спектру коришћена је конволуциона неуронска мрежа. Показано је да модел задовољавајуће описује емитовани спектар и тзв. УТА структуру (енг. *UTA – Unresolved Transition Array*), која представља квазиконтинуум који настаје услед великог броја прелаза унутар високо јонизованих атома волфрама које спектрометар не може да разлучи. Такође је показано и да модел правилно предвиђа промену облика ове структуре и њено опадање са порастом електронске температуре. Као финални тест модел је упоређен са независним пражњењем које није коришћено за прављење базе за обучавање, где је додатно демонстрирано добро слагање предвиђања модела са експериментом. Коначан резултат и допринос ове анализе јесте да се направљени модел може успешно применити за моделовање емисионог спектра волфрама у ЕУВ области спектра, те да се генерација нових спектра може извршити за неколико стотина милисекунди. Такође, кандидат наводи да се модел може искористити и као полазна тачка за развој нових модела који би се бавили транспортом нечистоћа у фузионим плазмама, радијативним колапсом итд.

У шестом поглављу сумирани су сви резултати тезе у свеобухватном закључку и дати су предлози наставка истраживања започетих у реализацији ове тезе. Седмо поглавље представља списак кориштених референци.

3. Списак публикација кандидата:

1. Tapalaga, I., **Traparić, I.**, Trklja Boca, N. *et al.* *Stark spectral line broadening modeling by machine learning algorithms*. *Neural Comput & Applic* **34**, 6349–6358 (2022). <https://doi.org/10.1007/s00521-021-06763-4>
2. **Traparić, I.**, Ivković, M. *Determination of austenitic steel alloys composition using laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) and machine learning algorithms*. *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**, *LIBS depth-profile analysis of W/Cu functionally graded material*, *Spectrochim. Acta B* **213** (2024) 106874, <https://doi.org/10.1016/j.sab.2024.106874>
4. NM Sakan, **I Traparic**, VA Sreckovic, M Ivkovic, *The usage of perceptron, feed and deep feed forward artificial neural networks on the spectroscopy data: astrophysical & fusion plasmas*, *Contrib. Astron. Obs. Skalnaté Pleso* **52**, 97-104, 2022, <https://doi.org/10.31577/caosp.2022.52.3.97>
5. Z Majlinger, **I Traparic**, *New perspectives in the analysis of Stark width regularities and systematic trends*, *Contrib. Astron. Obs. Skalnaté Pleso* **53**, 58-71, 2023, <https://doi.org/10.31577/caosp.2023.53.3.58>

Конференције на којима је кандидат учествовао:

1. **I Traparić**, M Jovanović, M Kuzmanović, M Ivković, *Elemental Analysis of Austenitic Steel by Calibration-Free Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (CF-LIBS)*, Publ. Astron. Obs. Belgrade **102**, 137-140, 2022.
2. Nenad M. Sakan, Milica L. Vinić, Vladimir A. Srećković, **Ivan R. Traparić** and Milivoje R. Ivković, *Application of Artificial Neural Network in the Analysis of the Spectra From Laser Ablation Combined with Fast Pulse Discharge*, Publ. Astron. Obs. Belgrade **102**, 223-226, 2022.
3. **I Traparić**, M Ivković, VUV Spectroscopy of the He II–Lyman Series for Electron Density Estimation, Publ. Astron. Obs. Belgrade **99**, 2020.
4. **I. Traparić**, C. Suzuki, Y. Kawamoto, T. Kawate, I. Murakami, T. Oishi, M. Goto, M. Gavrilović Božović, *Tungsten Unresolved Transition Array Spectra Modeling with Variational Autoencoder*, ICSLS 2024 conference, 2024.

Позивна предавања:

1. I. Traparić, *Stark Broadening Modeling with ML and AI Algorithms*, XIV Serbian Conference on Spectral Line Shapes in Astrophysics, 19 – 23 June 2023, Bajna Bašta

4. Закључак

На основу изложеног може се закључити да је кандидат ИВАН ТРАПАРИЋ у докторској дисертацији под називом „ПРИМЕНА МАШИНСКОГ УЧЕЊА И ВЕШТАЧКЕ ИНТЕЛИГЕНЦИЈЕ У СПЕКТРОСКОПИЈИ ПЛАЗМЕ" (наслов на енглеском језику: “APPLICATION OF MACHINE LEARNING AND ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN PLASMA SPECTROSCOPY”) остварио оригиналне научне резултате и дао значајан допринос у области Физика јонизованог гаса и плазме. Резултати тезе су публиковани у међународним часописима и комисија на основу тога сматра да су задовољени сви услови за њену одбрану и

ПРЕДЛАЖЕ

Наставно-научном већу Физичког факултета Универзитета у Београду да се одобри јавна одбрана.

У Београду,

Чланови комисије

др Братислав Обрадовић
редовни професор Физичког факултета у Београду

др Иван Дојчиновић
редовни професор Физичког факултета у Београду

др Иван Белча
редовни професор Физичког факултета у Београду

др Милош Скочић
доцент Физичког факултета у Београду

др Биљана Станков
научни сарадник Института за физику у Београду