

Блок исследования

Низкотемпературная физика наномеханических систем

Предполагаемое название

Наномеханический резонатор как детектор квантовых вихрей в сверхтекучем гелии

Описание работы

Моя работа состоит в изготовлении наномеханических резонаторов на основе нитрида кремния на базе лаборатории «Криоэлектроника» МГУ, а также исследовании их резонансных характеристик. Такие устройства зарекомендовали себя как высокочувствительные сенсоры различных физических величин, таких как масса, сила, смещение.

Изготовление таких устройств – сложный и долгий процесс, требующий использования дорогостоящего оборудования. Для каждого эксперимента требуется изготовление уникального набора устройств, которые обладают определенными резонансными частотами. Некоторые резонансные характеристики можно приближенно вычислить на основе теоретических расчетов, однако такой расчет обладает большой погрешностью. С помощью численного расчета по методу конечных элементов можно получить высокую точность, однако такие вычисления затратны по вычислительным и временным ресурсам.

В связи с этим, целью исследования является разработка модели, которая исходя из известных геометрических и электрических параметров устройства могла бы с высокой точностью и за оптимальное время предсказывать резонансные характеристики устройства.

Задачами исследования является сбор данных для обучения в программе COMSOL Multiphysics, создание и обучение модели и последующее изготовление экспериментальных устройств на основе предсказаний модели для проведения измерений.

Описание данных

Тип данных – табличные данные в формате txt. Признаками являются размеры устройства, размеры управляющих контактов, значение потенциала управления, температура и т.д. Предсказываемыми параметрами являются резонансные частоты первых мод колебаний, добротность для каждой из резонансных частот, максимальная амплитуда, эффективная масса. Приблизительный объем данных: 10-100 Мб. Данные собираются при помощи пакета вычислений COMSOL Multiphysics (в процессе).

Пример данных можно найти по ссылке ([Link](#))

При генерации данных в вычислительном пакете производится случайный выбор параметров устройства. Дальнейшее разбиение датасета будет производиться методом случайного распределения.

Метрики качества

Планируется:

1. Улучшить качество предсказаний модели (в сравнении с уже существующими схожими работами научного сообщества)
2. Значительно уменьшить временные затраты на вычисления (в сравнении с методом конечных элементов).

В частности, по первому пункту планируется улучшать значения метрик MSE и R-squared (поскольку задача регрессионная). В данной области авторам ([Link](#)) удалось добиться $MSE < 0.06$ (для нормированных данных) и $R\text{-squared} \sim (0.93 - 0.96)$ (результаты немного различаются для разных предсказываемых параметров).

По второму пункту планируется сравнение времен расчета с помощью метода конечных элементов и с помощью нейросети: будет измерено время вычислений для относительно большого числа устройств (~100). Такой подход уже был реализован в той же работе ([Link](#)). Было продемонстрировано, что использование нейросети ускоряет процесс вычислений в 15000 раз. (Однако, надо помнить о том, что данные для обучения генерируются как раз-таки методом конечных элементов, и на это уходит много времени).

Модели и алгоритмы

Задача, похожая на мою, была решена несколькими авторами. Отличие моей задачи от уже решенных задач состоит в области применения устройств: в моем случае это наноразмерные (а не микроразмерные) резонаторы, применяющиеся в фундаментальных исследованиях в качестве высокочувствительных сенсоров взаимодействий. В работах ([Link](#)), ([Link 2](#)) использовались Fully Connected сети с одним скрытым слоем, были продемонстрированы приемлемые для моей области исследования ошибки.

Проанализировав научные работы в области анализа табличных данных, например ([Link](#)), я пришел к выводу, что в моем исследовании нужно пробовать применить несколько разных моделей из разных частей машинного обучения. Конкретно, планируется попробовать применить:

- RandomForestRegressor (который поддерживает multi-output регрессию в связке с MultiOutputRegressor)
- XGBRegressor (который сам по себе поддерживает multi-output регрессию, но, судя по ([Link](#)), все ещё находится в процессе доработки)
- Простые модели на основе nn.Linear
- Более сложные DL-модели, например, ResNet-подобные.

Текущие результаты

На 6 февраля собраны наборы значений для 3000 конфигураций устройств из желаемых 5000-6000, скорость сборки – 4 часа на 400 различных конфигураций. Первые результаты планируется получить в феврале-начале марта, далее будет осуществляться доработка моделей (и, если потребуется, генерация дополнительного набора данных).

Список литературы

По ссылке ([Link](#)) можно, по желанию, ознакомиться с областью исследования наномеханических систем. Это не является необходимостью.