## 模型架构、技术与训练测试过程

### 1. 模型架构（Architecture）

本次实验使用的是多层感知机（MLP）模型，是一种经典的前馈神经网络（Feedforward Neural Network），用于预测多变量回归任务。具体架构如下：

#### (1) ****输入层（Input Layer）****：

* **特征数**：模型接收 9 个输入特征：
  + Pressure (mT), SRF-C (W), SRF-E (W), BRF (W), SF6 (sccm), Ar (sccm), He Pressure (T), Chiller Temp (℃), Time (s)
* **数据标准化**：对所有输入特征进行了标准化处理（均值为 0，方差为 1），以减少特征尺度差异对模型训练的影响。

#### (2) ****隐藏层（Hidden Layers）****：

* **第一隐藏层**：
  + **神经元数量**：64 个
  + **激活函数**：ReLU（Rectified Linear Unit），具有良好的非线性表示能力，能够有效缓解梯度消失问题。
  + **正则化**：使用 Dropout（丢弃率 0.3），随机丢弃 30% 的神经元，以减少模型过拟合的风险。
* **第二隐藏层**：
  + **神经元数量**：64 个
  + **激活函数**：ReLU。
  + **正则化**：使用 Dropout（丢弃率 0.3）。

#### (3) ****输出层（Output Layer）****：

* **输出神经元数量**：2 个，分别对应两个目标变量：
  + Etching Rate (nm/min)：刻蚀速率预测。
  + Angle (°)：刻蚀角度预测。
* **激活函数**：无（线性激活），用于输出连续值。

### 2. 技术细节（Technical Details）

#### (1) ****损失函数（Loss Function）****：

* **均方误差（MSE）**：用于回归任务的损失计算。计算预测值与实际值之间的平方差，并将其平均化。

#### (2) ****优化器（Optimizer）****：

* **Adam 优化器**：一种自适应学习率优化算法，结合了 AdaGrad 和 RMSProp 的优点，能够加速模型收敛，并对学习率进行动态调整，稳定性较强。

#### (3) ****评估指标（Evaluation Metrics）****：

* **平均绝对误差（MAE）**：用于评估模型预测值与实际值的平均偏差。

#### (4) ****正则化技术（Regularization Techniques）****：

* **Dropout**：在每个隐藏层中使用 Dropout 层，以防止模型过拟合。在训练过程中随机丢弃一定比例的神经元（本实验中为 30%），减少对个别神经元的依赖。

### 3. 数据集划分与模型训练过程（Data Splitting and Model Training Process）

#### (1) ****数据集划分（Data Splitting）****：

* **总数据量**：32 条。
* **测试集（Test Set）**：手动选择前 5 条数据（16%），用于最终模型评估，完全不参与训练和验证。
* **训练和验证集（Training and Validation Sets）**：其余 27 条数据（84%），用于交叉验证模型训练和性能评估。

#### (2) ****交叉验证（Cross-Validation）****：

* **方法**：使用 5 折交叉验证（K-Fold Cross-Validation）。
  + **步骤**：将 27 条数据分成 5 份，每次使用 4 份作为训练集（80%），1 份作为验证集（20%）。
  + **重复训练**：模型在每一折训练时，都重新训练和验证，总共训练 5 次。
  + **评估**：每次训练后，计算验证集的 MAE，并记录每一折的表现，最终计算 5 折交叉验证的平均 MAE。

#### (3) ****模型训练（Model Training）****：

* **训练集大小**：每次折叠的训练集包含约 21-22 条数据。
* **验证集大小**：每次折叠的验证集包含约 5-6 条数据。
* **训练轮次（Epochs）**：100 轮。
* **批次大小（Batch Size）**：16。
* **训练优化**：在每个折叠的训练过程中，模型参数被不断更新，以最小化损失函数（MSE）。

#### (4) ****最终模型训练与保存（Final Model Training and Saving）****：

* 使用所有 27 条数据重新训练最终模型，并将其保存为 v1.h5 文件。
* 同时保存标准化参数（均值和标准差）以便后续对新数据进行相同的标准化处理。

### 4. 模型测试与评估（Model Testing and Evaluation）

#### (1) ****测试集预测（Test Set Prediction）****：

* 使用最终训练好的模型，对保留的 5 条测试数据进行预测。
* 计算预测值与实际值的 MAE，评估模型的泛化能力。

#### (2) ****误差范围评估（Error Range Evaluation）****：

* 对 Etching Rate (nm/min) 预测值，判断其与实际值的误差是否在 2.5% 以内。
* 对 Angle (°) 预测值，判断其与实际值的误差是否在 ±1° 以内。

#### (3) ****可视化（Visualization）****：

* 绘制 Etching Rate 和 Angle 的实际值与预测值的散点图，展示模型的预测效果。
* 通过图表展示模型在测试集上的表现，直观了解模型预测与实际值之间的关系。

### 5. 训练与测试结果总结（Training and Testing Results Summary）

* **交叉验证平均 MAE**：在 5 折交叉验证中，平均 MAE 为 X（需填入实际值），说明模型在训练数据上的整体表现。
* **测试集 MAE**：在测试集上的 MAE 为 Y（需填入实际值），代表模型在未见过的数据上的表现。
* **预测误差范围**：
  + Etching Rate (nm/min)：Z 条样本（需填入实际值）在 2.5% 的误差范围内。
  + Angle (°)：W 条样本（需填入实际值）在 ±1° 的误差范围内。

