МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ

ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ЗВІТ

по договору підряду № 25 ГФ051-02

за договором від «03» березня 2025 року № 93/0252

на виконання грантової підтримки НФДУ

за період з «03» березня 2025 року по «30» травня 2025 року

**«Глибокі нейронні мережі для оцінки та оптимізації теплотранспортних властивостей мультишарових структур (прогнозування амплітудо-частотних характеристик фотоелектричного відгуку мультишарових структур).»**

Науковий керівник \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Павло ЛІЩУК

Виконавець \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Денис КАЛЮЖНИЙ

*Зміст виконаної роботи*

Один із шляхів експериментального визначення коефіцієнта теплопровідності (ТС) мультишарових поруватих структур полягає у порівнянні експериментально виміряних амплітудо-частотних характеристик (АЧХ) фотоакустичного (ФА) сигналу з сімейством теоретично розрахованих при різних значеннях ТС. Розрахунки проводяться, наприклад, за допомогою програмного пакету Comsol і вимагають достатньо багато часу. Основним завданням, яке вирішувалося на даному етапі полягало у створенні глибокої нейронної мережі (ГНМ), здатної генерувати АЧХ ФА сигналу для двошарової системи поруватого кремнію з довільними значеннями поруватості шарів та величини теплопровідності.

Для створення тестового та тренувального наборів даних використовувалися результати розрахунків АЧХ систем, що складалися з двох шарів товщиною 2,5 мкм кожен та наступними наборами коефіцієнтів поруватості *p*1/*p*2 (%): 60/40, 60/45, 65/40, 65/45, 65/50, 70/45, 70/50, 40/40, 45/45, 50/50, 60/60, 65/65, 70/70. В розрахунках передбачалося, що освітлення відбувається при кімнатній температурі з використанням опромінення з довжиною хвилі 405 нм. АЧХ розраховувалися в діапазоні частот *f* = (1-2999) Гц з кроком 1 Гц для систем з теплопровідністю ТС = (0,1-5) Вт/мК з кроком 0,25 Вт/мК. Набір дескрипторів для передбачення величини ФА напруги складався з чотирьох параметрів: (*p*1, *p*2, ТС, *f*). Попередня обробка даних полягала у логарифмуванні величини *f*. Цільовою змінною вважалася величина напруги, нормована на значення, яке очікується при 100 Гц. Такий підхід дозволяв узагальнити результати для широкого кола значень інтенсивності освітлення. Величина напруги також логарифмувалася. Крім того, і для масиву ознак, і для вектору цільових змінних проводилася стандартизація, яка забезпечувала рівність нулеві середнього значення та одиничне стандартне відхилення для кожної змінної. Використання розрахунків при всіх частотах дозволяло отримати набір ознак, який складався з 3 274 908 чисел. На жаль, наявне обладнання не дозволяє ефективно працювати з такими об’ємами даних. Тому для роботи були вибрані дані лише при певних частотах, крок вибору залежав від частоти і складав 1 Гц при *f* ≤ 10 Гц, 2 Гц при 10 Гц < *f* ≤ 100 Гц, 10 Гц при 100 Гц < *f* ≤ 200 Гц, 20 Гц при 200 Гц < *f* ≤ 500 Гц, 50 Гц при 500 Гц < *f*. Можливість подібного підходу пов’язана з тим, що у подвійному логарифмічному масштабі АЧХ складається з декількох прямолінійних ділянок. Зменшений таким чином набір ознак складався з 144 144 чисел, розділених на тренувальний та тестовий набір у пропорції 80:20.

ГНМ були імплементовані на мові Pyton з використанням пакету Keras. Використані гіперпараметри наведені в Табл.1. Всього було розглянуто 4 мережі, які відрізнялися конфігурацією прихованих шарів та кількістю вузлів: [4, 100, 90, 80, 70, 60, 50, 1] (надалі позначатиметься T100), [4, 50, 45, 40, 35, 30, 25, 1] (T50), [4, 100, 100, 100, 100, 100, 100, 1] (P100) та [4, 50, 50, 50, 50, 50, 50, 1] (Р50). Окремі числа відповідають кількості вузлів у послідовних шарах і відображають той факт, що ГНМ використовувати чотири дескриптори і орієнтувалися на регресійне передбачення однієї величини. Тренування здійснювалося протягом 500 епох, при цьому для оцінки повторюваності використовувалася 5-кратна крос-валідація.

|  |  |
| --- | --- |
| Табл.1 Значення гіперпараметрів, використаних при побудові ГНМ | |
| Гіперпараметр | Значення |
| Batch size | 16 |
| Activation function | sigmoid |
| Optimizer | Adamax |
| Leaning rate | 0,01 |
| Weight initializer | HeNormal |
| Dropout | False |

Для оцінювання якості передбачень використовувалися середня квадратична похибка (mean squared error, MSE), середня відносна похибка (mean absolute percentage error, MAPE) та коефіцієнт детермінації (R2).

На рис.1 приведені результати передбачень мережі Т100 на тренувальному та тестовому наборах. Для інших мереж візуально результати схожі і тому при порівнянні їхньої точності доречно звернутися до значень метрик, представлених у Табл.2. Як видно з наведених даних, не існує однозначного взаємозв’язку між кількістю параметрів та точністю передбачень, значну роль відіграє також архітектура шарів. Зокрема, для нашого випадку найкращі метрикові показники має мережа Т100.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| Рис.1. Діаграми розсіювання, що порівнюють істинні та передбаченні значення ФА напруги для тренувального (а) та тестового наборів (б). Мережа Т100. Пунктирні прямі – лінії ідентичності, наведені для зручності. | |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Табл.2. Метрики використаних ГНМ для тренувального та тестового наборів | | | | | |
|  | | Мережа | | | |
| Т100 | Т50 | Р100 | Р50 |
| Кількість параметрів | | 29901 | 7701 | 51101 | 13051 |
| Тренувальний набір | MSE, 10-5 | 1,44 | 3,25 | 2,39 | 1,68 |
| MAPE, % | 0.520 | 0,851 | 0,807 | 0,610 |
| R2 | 0,9993 | 0,9994 | 0,9998 | 0,9997 |
| Тестовий набір | MSE, 10-5 | 1,44 | 3,26 | 2,49 | 1,66 |
| MAPE, % | 0,527 | 0,856 | 0,824 | 0,616 |
| R2 | 0,9994 | 0,9995 | 0,9999 | 0,9997 |

Використовуючи натреновані моделі також були відтворені АЧХ структур які раніше моделювалися у пакеті Comsol. Так, на Рис.2 представлені результати для структури 50/50 при ТС=0,25 Вт/мК. Видно чудову збіжність результатів. На цьому ж рисунку приведені частотні залежності величини похибки реконструюваних за допомогою різних ГНМ АЧХ для цієї ж структури. За виключенням декількох низьких частот, які не є важливими при практичних вимірюваннях, похибка не перевищує 1%. MAPE для даного відтворення складає 0,53% для Т100, 0,98% для Т50, 0,61% для Р100 та 0,32% для Р50.

На наступному Рис.3 наведено АЧХ, створена за допомогою мережі Т100 для значення теплопровідності, якого не було в тренувальному наборі, а також АЧХ, розраховані для близьких за величиною ТС. Видно, що характер поведінки АЧХ, отриманої за допомогою ГНМ, відповідає очікуванням.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| Рис.2. (а) АЧХ двошарової структури з поруватість 50%/50% для ТС=0,25 Вт/мК, розрахована за допомогою Comsol (точка) та відтворена за допомогою ГНМ Т100. (б) Частотна залежність відносної похибки АЧХ, відтворених за допомогою різних ГНМ. | |

|  |
| --- |
|  |
| Рис.3. АЧХ двошарової структури з поруватість 70%/50% для ТС=1,0 Вт/мК (крива 2), 1,1 Вт/мК (1) та 1,25 Вт/мК (3). Криві 2 та 3 розраховані за допомогою Comsol, 1 – за допомогою ГНМ Т100. |