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

**«Аналітичні вирази для оцінки теплотранспортних властивостей мультишарових структур, отримані з використанням символьної регресії. Налаштовані моделі ансамблевого навчання на базі дерев рішень для оцінки теплотранспортних властивостей мультишарових кремнієвих структур (отримання аналітичних виразів для показника заломлення поруватого кремнію та взамозв’язку параметрів фотоакустичного сигналу з теплопровідністю мультишарових кремнієвих структур).»**

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

Виконавець \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Олег ОЛІХ

*Зміст виконаної роботи*

Робота, виконана під час даного етапу може біти розділена на дві частини. Перша пов’язана з отриманням аналітичних виразів для опису показника заломлення поруватого кремнію (*p*-Si) для різних діапазонів довжин хвиль, друга – знаходження функціонального взаємозв’язку між параметрами фотоакустичного сигналу та теплопровідністю двошарової структури.

Основною задачею проєкту загалом є розробка принципів створення та характеризації поруватих кремнієвих наноструктур з оптимальними теплотранспортними властивостями. Одним зі шляхів керування такими властивостями є створення мультишарових структур типу Брегівских відбивачів, які складаються з прошарків *p*-Si з різним ступенем поруватості. Проте для оптимізації подібних структур необхідна інформація щодо показника заломлення поруватого кремнію *npSi*. Загалом, оцінка цієї величина може бути проведена відповідно до ізотропної моделі Бруггемана [D. A. G. Bruggeman; Berechnung verschiedener physikalisher Konstanten von heterogen Substanzen // *Ann. Phys.(Leipzig*). 1935, 24. рр. 634-664.]. Застосовність цієї моделі обумовлюється морфологією структур (співвідношенням розмірів пор та довжин хвиль видимого та інфрачервоного діапазонів) і була детально проаналізована у попередніх звітах. У випадку, коли дійсна частина коефіцієнта заломлення суттєво більша за уявну, згідно з цією моделлю:

, (1)

де *р* – ступінь поруватості, *nSi* – показник заломлення монокристалічного кремнію. В (1), вважається, що пори заповнені повітрям з показником заломлення рівним одиниці.

Загалом, рівняння (1) може бути розв’язано аналітично:

, (2)

де

. (3)

Проте значення *nSi* не є відомою функцією довжини хвилі, визначаються з експерименту і табульовані лише при певних значеннях довжин хвиль; більше того, для широкого спектрального діапазону необхідно використовувати декілька джерел. Як наслідок, розрахунок *npSi* з використанням (2)-(3) не є зручним і такий підхід не може бути використаний при аналітичній оптимізації теплотранспортних властивостей мультишарових структур.

Водночас, алгоритм символьної регресіїї (Symbolic Regression, SR) на відміну від багатьох інших алгоритмів машинного навчання, дозволяє отримати аналітичні вирази, спираючись на набір даних. Тому в нашій роботі цей алгоритм був застосований для отримання залежностей *npSi* = *f* (λ, *p*), де λ – довжина хвилі. Отримані вирази відповідали температурі 293 К та мали дозволяти максимально точно оцінювати показник заломлення паруватого кремнію для діапазону *р* ∈ [0..0,8]. Щодо діапазону довжин хвиль, то так як *nSi* змінюється в достатньо широких межах, то окремо були отримані більш загальний вираз для діапазону [530 нм … 12000 нм], та більш точний, але обмежений у використанні, для діапазону [600 нм … 6000 нм]. При створенні тренувального та тестового наборів даних величина показника заломлення розраховувалася з використанням виразів (2) та (3), причому значення *nSi* бралися з роботи [M.A. Green; Improved silicon optical parameters at 25C, 295 K and 300 K including temperature coefficients // *Prog. Photovolt. Res. Appl*., 2022, 30, pp. 164–179] при λ ≤ 1450 нм та з роботи [H. H. Li; Refractive index of silicon and germanium and its wavelength and temperature derivatives //J. Phys. Chem. Ref. Data , 1980; 9 (3), pp. 561–658] при λ > 1450 нм. Для кожного визначених діапазонів довжин хвиль окремо створювалися набори даних. Тренувальний містив 800 величин *npSi* , розрахованих для пар (λ, *p*), значення яких випадковим чином вибиралися зі вказаних діапазонів. Перевірка точності отриманих виразів здійснювалася та тестових наборах, які відповідали всім комбінаціям значень коефіцієнта поруватості з діапазону [0..0,8] з кроком 0,02 та значень довжини хвилі з кроком 30 нм (для діапазону [530 нм … 12000 нм]) чи 20 нм (для діапазону [600 нм … 6000 нм]).

Метриками, які використовувалися для оцінки якості прогнозів були

- середня відносна похибка МАРЕ:

, (4)

де N – кількість значень у тренувальному наборі,  – істинне значення показника заломлення, розраховане з використанням виразів (2) та (3),  – прогнозоване значення відповідно до запронованого виразу;

- середня квадратична похибка МSE:

, (5)

- середня абсолютна похибка МАE:

. (6)

Окрім метрик, які відображали середні значення похибки, для оцінки найбільших відхилень розглядалася також максимальна відносна похибка

, (7)

та медіанна відносна похибка для *АРЕ*MED, яка показувала менше якої величини становить похибка для 50% прогнозів.

Символьна регресія була реалізована на мові Pyton з використанням пакету PySR. Під час розрахунків параметр populations (кількість популяцій) дорівнював 36 (рекомендоване потроєне значення кількості ядер), population\_size (кількість особин у кожній популяції) – 1000, ncycles\_per\_iteration (кількість ітерацій на цикл) – 500, максимальна складність виразу (maxsize) – 25, мультиплікативний коефіцієнт для визначення покарання за складність (parsimony) - 10-5. Попередня обробка даних не застосовувалася.

Під час тренування мінімізувалася функція втрат, яка була середнім значенням зваженої квадратичної похибки:

 (8)

де  – ваговий коефіцієнт. Вигляд вагового коефіцієнта був одним з гіперпараметрів, які підбиралися для оптимізації роботи алгоритму; зокрема розглядалися варіанти  Як показали проведені дослідження, для діапазону [600 нм … 6000 нм] раціональним вибором є  (стандартне статистичне зважування), а для [530 нм … 12000 нм] – .

Нижче наведено два найкращі варіанти залежностей *npSi* = *f* (λ, *p*), отримані для діапазону довжин хвиль [600 нм … 6000 нм]:

 (9)

 (10)

де значення довжини хвилі очікується в нанометрах.

На рис.1 приведено результати оцінки показника заломлення поруватого кремнію з використанням виразів (9) та (10) для тренувального та тестового наборів даних. В першому випадку (Рис.1,а та Рис.1,в) показане розташування прогнозованих даних відносно площини, розрахованої з використанням формул (2)-(3). В другому випадку представлено розподіл відносної похибки при різних значеннях аргументів у всьому діапазоні їхньої зміни. Як видно з наведених даних, точність виразу (9) дещо вища, проте в обох випадках для більшості значень поруватості та довжини хвилі похибка менша 0.2%.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |
| Рис.1. Передбачення величин показника заломлення, отримані з використанням формул (9) (а) та (10) (в) на тренувальному наборі та розподіли величини абсолютної відносної похибки, отримані на тестовому наборі (б – формула (9), г – формула (10)). Діапазон довжин хвиль [600 нм … 6000 нм]. | |

У табл. 1 зведено величини метрик, отримані в даному випадку. Видно, що найбільше відхилення складає 1,56% для (10) та 1,10% для (9). Причому, як можна бачити з Рис.1, подібний рівень неточності спостерігається лише в достатньо вузькому діапазоні довжин хвиль (600-700 нм). Можливо, доцільно в майбутньому розглянути цей діапазон окремо.

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Табл.1. Метрики точності передбачень показника заломлення поруватого кремнію, відповідно до аналітичних виразів, отриманих з використанням символьної регресії. | | | | | | | |
|  | тренувальний набір | тестовий набір | | | | |
| Формула | MWSE, 10-5 | *MAPE*, % | *MSE,*10-5 | *MAE* | *АРЕ*max, % | *АРЕ*МED, % |
| [600 нм … 6000 нм] | | | | | | | |
| (9) | 6,48 | 0,10 | 1,81 | 0,0024 | 1,10 | 0,09 |
| (10) | 8,11 | 0,16 | 3,27 | 0,0038 | 1,56 | 0,14 |
| [530 нм … 12000 нм] | | | | | | | |
| (11) | 6,32 | 0,17 | 1,03 | 0.0027 | 1,13 | 0.12 |
| (12) | 5,89 | 0,07 | 0,61 | 0,0015 | 1,38 | 0.05 |

Наступні формули відображають аналітичні вирази для спектральної та поруватої залежностей *npSi* для діапазону довжин хвиль [530 нм … 12000 нм].

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |
| Рис.2. Передбачення величин показника заломлення, отримані з використанням формул (11) (а) та (12) (в) на тренувальному наборі та розподіли величини абсолютної відносної похибки, отримані на тестовому наборі (б – формула (11), г – формула (12)). Діапазон довжин хвиль [530 нм … 12000 нм]. | |

 (11)

 (12)

Точність отриманих виразів проілюстровано Рис.2, а також даними Табл.1. Видно, що найбільші похибки спостерігаються при певних значеннях поруватості (0,2, 0,4) та при малих довжинах хвиль. Проте загалом їхні величини достатньо малі, що свідчить про доцільність використання отриманих виразів. Зокрема, вираз (12) забезпечує для половини діапазонів параметрів, що розглядалися, оцінку показника заломлення з точністю, що не перевищує 0,02%.

Друга частина роботи пов’язана з оптимізацією методу визначення теплопровідності TC мультишарових структур. Один із експериментальних способів оцінки цієї величини пов’язаний із вимірюванням частотної залежності фотоакустичного (ФА) сигналу. Як показують розрахунки, нахил відповідної залежності визначається значенням ТС (див. рис.3) і тому порівняння теоретичних кривих з експериментально виміряними дозволяє оцінити теплотранспортні властивості.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| Рис.3. Розраховані за допомогою програмного пакету Comsol амплітудно-частотні характеристики фотоакустичного відгуку двошарової структури поруватого кремнію при різних коефіцієнтах теплопровідності системи. На панелі а приведено значення напруги, що відповідають певній інтенсивності освітлення, на панелі б – нормовані на значення при частоті 100 Гц. Сисема складалася з двох шарів товщиною 2.5 мкм кожний з коефіцієнтами поруватості 0,6 та 0,4. | |

Проте подібний підхід має і недоліки, пов’язані з необхідністю проведення детальних вимірювань в широкому частотному діапазоні та труднощами ідентифікації відповідності експериментальних та теоретичних залежностей. Тому було запропоновано підхід, який базується на вимірюваннях фотоакустичного сигналу лише при кількох частотах та подальшого використання аналітичного виразу, що пов’язує результати вимірювань і параметри мутишарової структури з величиною теплопровідності та отриманий з використанням символьної регресії на основі теоретичних розрахунків. Під час реалізації цього варіанту були використані результати розрахунків амплітудно-частотні характеристик (АЧХ) фотоакустичного відгуку, проведених за допомогою програмного пакету Comsol, та представлених у попередньому звіті. Зокрема, була розглянута система, яка складалася з двох шарів поруватого кремнію товщиною 2,5 мкм кожний та коефіцієнтами поруватості *р*1 та *р*2 (*р*1 та *р*2 ∈ [0,4..0,7]). Частковим випадком цієї системи, який також брався до уваги, є шар *p*-Si товщиною 5 мкм. В розрахунках передбачалося, що освітлення відбувається при кімнатній температурі з використанням опромінення з довжиною хвилі 405 нм.

Як можна бачити з Рис.3,а, при малих частотах АЧХ структур з різним коефіцієнтом теплопровідності в умовах сталості інтенсивності освітлення достатньо близькі. Тому було вирішено використовувати значення ФА напруги, нормовані до значення при частоті 100 Гц. Окрім того, що такий підхід дозволяє рознести за величиною низькочастотний сигнал структур з відмінними значеннями ТС (див. Рис.3,б), він також має на меті позбутися залежності напруги від інтенсивності освітлення (яка на практиці може відрізнятися від значень, використаних при розрахунках). Таким чином, було запропоновано проводити визначення ФА напруги для трьох частот (10, 100 та 100 Гц) і використовувати як вхідні параметри символьної регресії (окрім *р*1 та *р*2) нормовані значення напруги при 10 Гц *u*10 та при 1000 Гц *u*100. Розглядався також варіант використання лише однієї напруги *u*10. Для визначеності, вважалося *р*1 ≥ *р*2.

Особливості реалізації символьної регресії збігаються з тими, які описані у попередній частині даного звіту. В результаті застосування SR отримано наступні вирази:

 (13)

. (14)

На рис.4 представлено порівняння прогнозованих та істинних (розрахованих) значень, а в Табл.2 – значення метрик.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| Рис.4. Діаграми розсіювання, що порівнюють значення коефіцієнта теплопровідності з тренувального набору та відповідні величини, отримані з використанням формул (13) (а) (14) (б). Пунктирні прямі – лінії ідентичності, наведені для зручності.. | |

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Табл.2. Метрики, отримані на тренувальному наборі, при використанні виразів (13)-(14) | | | | |
| Формула | MWSE, 10-4 | MAPE, % | MSE, 10-4 | MAE, Вт/м К |
| (13) | 8,29 | 1,91 | 8,29 | 0,015 |
| (14) | 14,5 | 4,32 | 14,5 | 0,026 |