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 (налаштування моделей ансамблевого навчання для оцінки теплотранспортних властивостей поруватих кремнієвих структур з використанням підходу мереж на основі фізичних даних).»**

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

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

*Зміст виконаної роботи*

Штучний інтелект знаходить все більше застосування у різноманітних галузях фізики напівпровідників, включно із вирішенням завдань, пов’язаних із характеризацією теплопровідності різноманітних структур. Проте однією з проблем ефективного застосування подібних методів є необхідність значної кількості даних для тренування відповідних моделей. Як правило, отримати з експерименту необхідний обсяг даних практично неможливо і тому застосовують моделювання (що нерідко є дуже вимогливим з точки зору часових та розрахункових затрат), Physics-Informed Neural Networks (PINN, які передбачають використання фізичних законів у функції втрат і дозволяють генерувати дані) чи Transfer Learning (коли модель, навчена на одній задачі, використовується для розв’язання іншої, пов’язаної задачі).

Під час даного етапу був реалізований підхід, який передбачає використання PINN для оцінки ефективної теплопровідності поруватих структур. Водночас, при цьому були використані можливості машинного аналізу щодо роботи із зображеннями різноманітної природи. Під час роботи була розвинута ідея, запропонована в роботі [https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124671]. При цьому використовувався певний функціонал на мові Pyton, що перебуває у відкритому доступі та описаний в [https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.05.024].

Головна ідея може бути проілюстрована рис.1. Входом мережі слугувало зображення поруватої структури (128х128), значення пікселів якої відповідало значенням тепловопровідності κ (в умовних одиницях) матриці та середовища, яке заповнює пори. Воно оброблювалося конволюційною нейронною мережею типу енкодер-декодер. Перша частина мережі (енкодер) здійснювала стискування зображення, зменшуючи розмір картинки (до 64х64, а потім 32х32), водночас збільшуючи кількість каналів. Друга частина (декодер) проводила поступове відновлення просторового розділення. Вихідні дані складалися з трьох зображень, пікселі яких відповідали значенням температури *Т* в кожній точці поруватої структури, а також двом компонентам теплового потоку Qx та Qy. Якість вихідних даних оцінювалася з використанням фізичних законів: рівняння теплопровідності теплопровідності та граничних умов, що, загалом і відповідає основній ідеї PINN.

Зокрема бралися до уваги наступні співвідноження:

|  |
| --- |
|  |
| Рис.1. Схема мережі, що використовує фізичні знання, для оцінки теплопровідності поруватих середовищ. |

, (1)

, (2)

які мали виконуватися у всіх точках зображення та граничні умови

, (3)

, (4)

, (5)

які відповідали рівності температур заданим величинам *Т*1 та *Т*2 на правій та лівій границях середовища та рівності нулеві нормальних компонент теплового потоку на верхній та нижній границях і мали виконувалися лише для відповідних приграничних пікселів. Таким чином, під час тренування мережі мінімізувалася загальна похибка

,

(6)

де перший доданок це так звана установча похибка, другий – похибка неперервності, третій – похибка Діріхле (пов’язана з необхідністю виконання крайових умов (3) та (4)), четвертий – похибка Неймана; λi – вагові коефіцієнти, n, nl, nr, nt-b – кількості точок у всьому зображення, на лівій, правій та верхній і нижній границях, відповідно. При знаходженні просторових градієнтів використовувався підхід, запропонований в [https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124671], який передбачав використання додаткової корекційної матриці.

Навчання проводилося на масиві з 1024 зображень, зміна похибки зі збільшенням кількості епох представлена на рис.2.

|  |
| --- |
|  |
| Рис.2Ht. Залежності від кількості епох загальної похибки (1), установчої (2), похибок неперервності (3), Діріхле (4) та Неймана(5). |

Після отримання розподілів температури та теплового потоку по поруватому середовищі, скалярна ефективна теплопровідність обчислювалась наступним чином:

. (7)

На рис. 3 приведено декілька прикладів отриманих розподілів теплових параметрів разом з вихідними зображеннями структур.

|  |
| --- |
|  |
|  |
|  |
|  |
|  |
| Рис.3. Результати розрахунків теплових величин. У кожному рідку рисунки зліва направо відповідають морфології структури, компоненті теплового потоку Qx вздовж вхідного температурного градіенту, перпендикулярній компоненті теплового потоку Qy та повному тепловому потоку Q. Ефективна теплопровідність складає 0.84, 0,90, 0,34, 0,57, 0,28 для зразків у кожному з рядків згори до низу у припущення, що теплопровідність матриці 1, а матеріалу пор 0,1. |

Крім того, для створення зображень структур з різною пористістю був реалізований метод QSGS (quartet structure generation set), запропонований в [https://doi.org/10.1103/PhysRevE.75.036702]. Цей метод призначений для моделювання пористих або зернистих структур із заданими статистичними характеристиками. Його ідея полягає у тому, що в початковій матриці випадковим чином розміщуються "зародки" пор (або зерен) відповідно до заданої ймовірності. Далі вони поступово розростаються: з певною ймовірністю тверді пікселі, що межують із порами, перетворюються на пори. У результаті формується структура з контрольованою поруватістю, морфологією та статистичним розподілом фаз. Зокрема, для отримання пор з формою, наближеної до правильної, необхідно обирати швидкості росту зародків у діагональних напрямках в чотири рази меншу ніж в напрямках основних осей.

На рис.4 представлено приклади згенерованих поруватих структур з різною поруватістю.

|  |
| --- |
|  |
|  |
|  |
| Рис.4. Приклади структур з поруватістю 10% (верхній рядок), 30% (середній рядок) та 50% (нижній рядок). |

Крім того реалізований метод дозволяє моделювати структуру з різною морфологією завдяки варіюванню співвідношення частоти появи зародків та загальної поруватості. Приклад представлено на рис.5.

|  |
| --- |
|  |
|  |
|  |
|  |
| Рис.5. Приклади поруватих структур зі ступенем поруватості 40%, згенерованих за допомогою методу QSGS. |