МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ

ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ЗВІТ

по договору підряду № 25ГФ013-02/10

за договором від «03» березня 2025 року № 150/0024

на виконання грантової підтримки НФДУ

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

**«Фізичний аналіз теплового транспорту в напівпровідникових структурах різної розмірності: нанонитки, нанокомпозити, мультишарові структури, розрахунок температурних залежностей коефіцієнта теплопровідності матеріалів, їх аналіз та оптимізація морфології для енергоефективних застосувань (розрахунок температурних залежностей коефіцієнта теплопровідності матеріалів, їх аналіз).»**

Науковий керівник \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Ігор КОМАРОВ

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

*Зміст виконаної роботи*

Поруваті матеріали широко застосовуються в різних сферах, наприклад, як теплові бар'єри або термоелектричні матеріали для підвищення коефіцієнта корисної дії. Зокрема, шари поруватого кремнію (p-Si) можуть бути ефективно використані у високоефективних сонячно-теплових системах збереження енергії. Ефективне прогнозування теплопровідності (ТП) таких матеріалів може прискорити розробку систем з підвищеною енергоефективністю. Точну оцінку теплопровідності можна отримати за допомогою моделювання молекулярної динаміки (Molecular Dynamics, MD). Однак такі розрахунки вимагають великих обчислювальних і часових витрат. Одним із способів зменшити вартість та отримати результати для широкого діапазону параметрів є використання методів штучного інтелекту.

На даному етапі виконання проєкту проводився пошук аналітичних виразів для опису температурних залежностей коефіцієнту теплопровідності p-Si з різним ступенем поруватості. При цьому використовувався алгоритм символьної регресіїї (Symbolic Regression, SR), який під час пошуку функціональної залежності між вхідними та вихідними параметрами та числових коефіцієнтів використовує еволюційні алгоритми. На відміну від багатьох інших алгоритмів машинного навчання, SR дозволяє отримати результати (аналітичні формули), які можуть бути легко інтерпретовані. Крім того, цей підхід не вимагає значних об’ємів тренувальних даних для досягнення високоточних прогнозів.

Основою для побудови розрахункових аналітичних виразів були значення ТП, отримані в результаті застосування MD. Відповідні розрахунки проводилися за допомогою пакету LAMMPS, коефіцієнт теплопровідності (ТС) визначали шляхом обчислення середнього ансамблевого значення автокореляційної функції теплового струму в рамках формалізму Гріна-Кубо. Міжатомна взаємодія описувалася за допомогою потенціалу Tersoff. Всього були використані значення ТС отримані для кремнію з поруватістю *p* 0, 0,2 і 0,4% та семи значень температури, рівномірно розподілених в діапазоні температур 400-1000 К, а також ТС для 300 К, розраховані для р від 0 до 0,7 з кроком 0,1. Всього було використано 29 значень. Завдання полягала в отриманні виразу, застосовного в діапазоні температур *Т* = 250-100 К для поруватостями *р* = 0-0,8.

Символьна регресія була реалізована за допомогою 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) та мультиплікативний коефіцієнт для визначення покарання за складність (parsimony) варіювалися у різних запусках в діапазонах 15-25 та 10-6-10-3, відповідно. Попередня обробка даних полягала лише у нормуванні значення температури на 300 К.

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

 (1)

де N – кількість значень у тренувальному наборі,  – істинне значення коефіцієнта тепропровідності,  – прогнозоване значення,  – ваговий коефіцієнт. В нашому випадку використовувалося статистичне зважування, тобто .

Метриками, які використовувалися для оцінки якості прогнозів були

- середня відносна похибка МАРЕ:

, (2)

- середня квадратична похибка МSE:

, (3)

- середня абсолютна похибка МАE:

. (4)

Нижче наведені типові отримані виразі, які характеризуються найкращими величинами метрик:

 (5)

 (6)

 (7)

 (8)

де *Tn* = *Τ* / 300 K. Налаштування, при яких отримані вирази (5)-(8) вказані в Табл.1.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Табл.1. Гіперпараметри, використані при отриманні виразів (5)-(8) | | | |
| Формула | maxsize | parsimony | час тренувань, год |
| (5) | 20 | 10-4 | 30 |
| (6) | 25 | 10-4 | 20 |
| (7) | 25 | 10-6 | 50 |
| (8) | 25 | 10-6 | 30 |

На рис.1 представлено порівняння прогнозованих та істинних (розрахованих шляхом застосування методу молекулярної динаміки) значень, а в Табл.2 – значення метрик.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |
| Рис.1. Діаграми розсіювання, що порівнюють значення коефіцієнта теплопровідності з тренувального набору та відповідні величини, отримані з використанням формул (5) (а), (6) (б), (7) (в) та (8) (г). Пунктирні прямі – лінії ідентичності, наведені для зручності. | |

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Табл.2. Метрики, отримані на тренувальному наборі, при використанні виразів (5)-(8) | | | | |
| Формула | MWSE | MAPE | MSE | MAE |
| (5) | 0,1000 | 3,862 | 1,471 | 0,623 |
| (6) | 0,0356 | 3,552 | 0,0890 | 0,221 |
| (7) | 0,0711 | 2,023 | 1,430 | 0,564 |
| (8) | 0,0261 | 2,889 | 0,142 | 0,241 |

На Рис.2 наведено значення коефіцієнту теплопровідності у всьому діапазоні змінних (температури та поруватості), обчисленні відповідно до виразів, отриманих з використанням символьної регресії. Враховуючи значення метрик, а також поведінку отриманих виразів при високих значеннях поруватості та температури, вважаємо, що вираз (8) найбільш придатних для розрахунків температурних залежностей коефіцієнта теплопровідності поруватого кремнію

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |
| Рис.2. Залежності коефіцієнта ТП пористого кремнію від температури та пористості. Кульки представляють результати MD розрахунків, поверхні відповідають рівнянням (5) (а), (6) (б), (7) (в) та (8) (г). | |