

Використання згорткової нейронної мережі для прогнозування коефіцієнту пропускання метаматеріалів від їх структури та складу

Зозюк М. О., ORCID [0000-0001-9116-7217](https://orcid.org/0000-0001-9116-7217)

Юріков О. І., ORCID [0000-0001-8620-9902](https://orcid.org/0000-0001-8620-9902)

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» ROR [00syn5v21](https://orcid.org/00syn5v21)

Київ, Україна

Анотація—В цій роботі пропонується використання згорткової нейронної мережі для прогнозування властивостей метаматеріалів на основі інформації про структуру та фізичний склад метаматеріалів. Основна мета дослідити можливість заміни великої вибірки вхідних даних на велику кількість інформації про елементи вибірки. Основні методи, які були використані – опис метаматеріалу у вигляді 3D об'єкта, запис інформації про склад метаматеріалів у вигляді додаткових компонентів у векторах об'єкта, представлення експериментальних досліджень у вигляді коефіцієнтів поліному та точок на графіку. Незважаючи на малу кількість даних, отримано достатньо малу похибку для випадку представлення залежності коефіцієнта проходження від частоти у вигляді коефіцієнтів поліному та у випадку представлення даних у вигляді набору точок, та представлено результати прогнозування експериментальних досліджень. Кількість даних може бути збільшена врахуванням умов при яких отримувались експериментальні дані – поляризація, кут падіння, інтенсивність випромінювання і так далі. Основні питання можуть виникнути при підготовці даних для нейронної мережі по причині складнощів при конвертації форматів 3D в потрібний масив даних та врахування всіх обставин, які можуть впливати на експериментальні дослідження.

Ключові слова – метаматеріал; 3D-згорткова нейронна мережа; фізичні властивості матеріалу; інформативність елементу вибірки.

I. ВСТУП

Метаматеріали – це штучні матеріали, властивості і структури яких, як правило, не були спостережені в природі, або важко отримувати природним шляхом. Створення метаматеріалів є великим проривом, тому що вони дають змогу отримати властивості, які важко або неможливо отримати природним чином [1]–[3]. Як правило метаматеріали – це періодична мікроструктура, яка в макромасштабі дає визначені властивості. Отримання метаматеріалів є не простою задачею, теоретичний (точний) прорахунок всіх взаємодій займає велику кількість часу та енергії [4]–[8]. Використовуючи наближені методи прорахунку фізичних величин, ми виграємо в часі та енергії, але програємо в точності. Одним із таких наближених методів є нейронні мережі. В цій роботі представлена ідея та модель з прогнозування фізичних характеристик метаматеріалів, опираючись на структуру метаматеріалу, фізичні властивості окремих складових метаматеріалу та умови вимірювання. На даний час не існує чіткої та доведеної теорії, яка б описувала залежність кількості шарів, кількості нейронів від типу задачі та інформативності вхідних даних нейронної мережі. Ця робота є спробою перевірити можливості заміни великої вибірки даних на інформацію про елементи вибірки. За рахунок великої кількості інформації про структуру та склад метаматеріалу, нейронна мережа не потребує великої кількості

різних метаматеріалів, а навчається на великій кількості залежностей, які присутні у зв'язку – структура метаматеріалу, склад метаматеріалу – експериментальні характеристики метаматеріалу. Актуальність даного питання полягає в тому, що технології нейронних мереж розвинуті в достатній мірі (оптимізація, регуляризація та ін.), але формування інформації для навчання нейронних мереж ні.

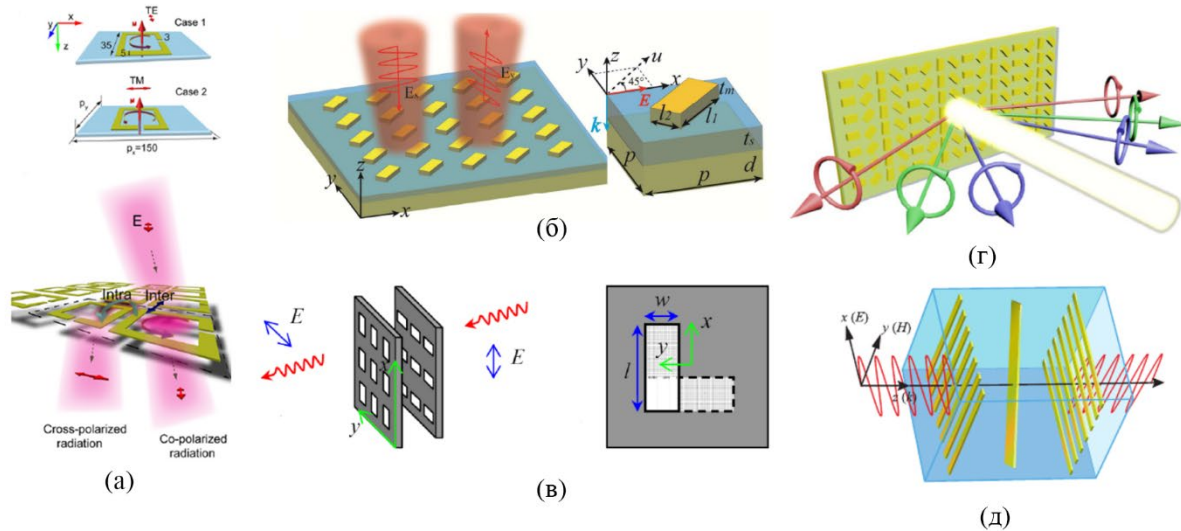
II. ПІДГОТОВКА ДАНИХ

Для того, щоб нейронна мережа успішно виконувала свою функцію, потрібно щоб були виконані достатні умови, які в процесі дослідження і випробування можуть змінюватись в залежності від успішності прогнозування (величини похибки) [9]–[11].

Перша вимога – однорідність даних. Це означає, що розміри структур, умови досліджень, масштабованість вхідних і вихідних параметрів мають однаковий порядок.

Друга вимога – це величина вибірки, тобто кількість тренувальних варіантів, до яких нейронна мережа буде адаптуватись і потім прогнозувати. Щоб сформувавши вибірку, потрібна велика кількість експериментів з реальними даними, які мають єдині умови вимірювання (матеріали, характеристики, процедури і т. д.).





Схематичні зображення метаструктур, які були побудовані та використані для навчання системи на основі згортової нейронної мережі – всі розміри вказані у вказаних роботах [12]–[16]. (а) На верхньому рисунку показані розміри комірки. (б) На правому рисунку позначені розміри, які були використані для цифрового представлення. (в) Представлена метаструктура (зліва) та позначення розмірів. (г) Схематичне представлення метаматеріалу та його взаємодію з падаючим випромінюванням. (д) Схематичне представлення метаматеріалу та падаючого випромінювання.

Третя вимога стосується стадії побудови архітектури, так як для кожної ситуації потрібен окремий підхід (тип нейронної мережі, кількість слоїв, кількість нейронів, гіперпараметри і т. д.).

В цій роботі ми представили малу частину із того, як можна використати можливості нейронної мережі для прогнозування властивостей матеріалів в цілому. Щоб задовольнити хоча б наближено необхідні умови, ми взяли п'ять досліджень метаматеріалів (Рис. 1) [12]–[16]. В кожній із них є дані про структуру метаматеріалу, обставини при яких проводились дослідження (кут падіння випромінювання, характеристики матеріалів, тип поляризації), а також самі результати досліджень – функціональна залежність коефіцієнта проходження від частоти випромінювання.

III. ПРЕДСТАВЛЕННЯ ВХІДНИХ ДАНИХ

В цьому дослідженні була використана згорточна нейронна мережа. Тобто, ця нейронна мережа на вхід приймає тензор, який може представляти зображення. Представити структуру матеріалу за допомогою зображення важко, тому ми використали тензор четвертого рангу з трьома додатковими каналами. Так структура матеріалу була відтворена за допомогою програмного пакету для створення трьох-вимірних моделей. Кожна модель була записана у вигляді матриці з трьома стовпцями, де кожен рядок – це один піксель моделі (координати). Три додаткових канали – це властивості матеріалу, який представляє даний піксель (для кожного набору координат (точки) свої властивості). Тобто, ми врахували властивість матеріалу, яку закріпили для кожної точки окремо. Всі розміри 3D об'єктів були зжаті до розмірів – (256, 256, 6). В кінці кінців, маємо вхід з 6 каналів, де перших три – це координати точки, а останніх три – властивості матеріалу цієї точки, представленою масивом

$$X = [x, y, z, \varepsilon, \chi_m, \sigma] \quad (1)$$

де x – координати по вісі x , y – координати по вісі y , z – координати по вісі z , ε – діелектрична проникність, χ_m – магнітна проникність, σ – питома провідність.

Властивості матеріалу були зашифровані за допомогою цифрового закріплення інформації про колір для кожного пікселю. Піксель (окрім координат) має три додаткових числа – RGB: величина червоного, зеленого та синього відтінку. Кожна структура у всіх метаматеріалах мала покрашені пікселі у відповідність до реального зразка – наприклад: золото – червоний колір, діелектрик – зелений і т. д.. Тепер програмно потрібно замінити числа відтінків кольорів на властивості матеріалу, так як кольори не пов'язані з реальною різницею у властивостях різних матеріалів. Насправді кожен колір можна замінити на будь-яку кількість параметрів, але в цій роботі ми взяли тільки три – діелектричну проникність, магнітну сприйнятливості та питому провідність. Причиною вибору такого набору параметрів були характеристики метаматеріалів (коефіцієнт проходження в залежності від частоти), які вимірювались в експериментальних дослідженнях.

IV. ВИГЛЯД ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

Результати експерименту були представлені у вигляді двовимірного масиву, тобто кожна характеристика була представлена у вигляді набору точок – двовимірної площини. Умовою того, що ці дані підходять для нашої моделі, є те, що одиниці вимірювання у всіх характеристиках приведені до спільного масштабу. Так для всіх графіків по x це частота, а по y – коефіцієнт проходження (Рис. 2).

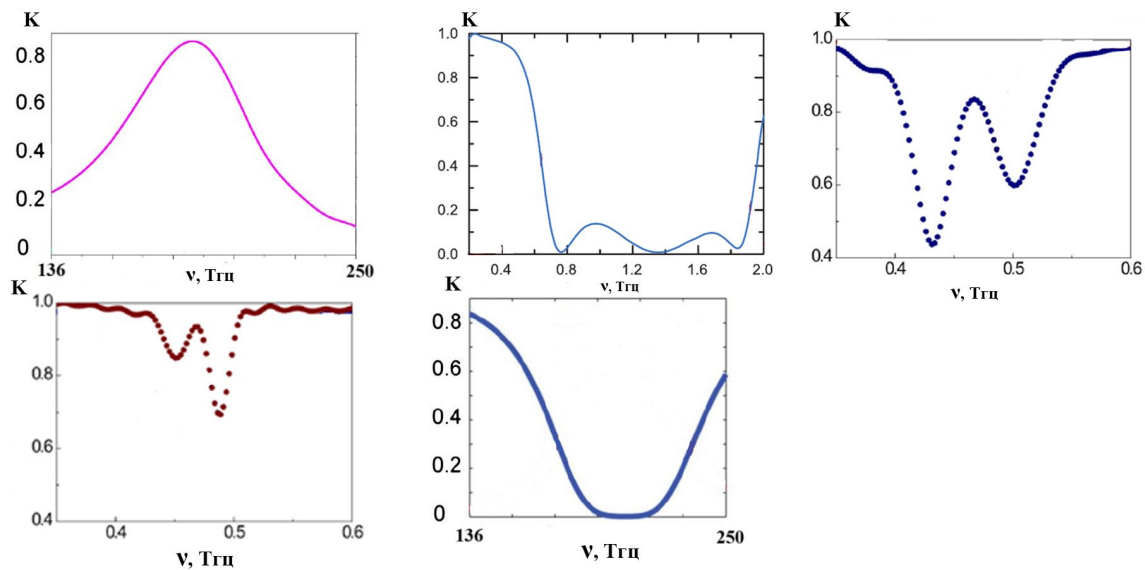


Рис. 2 Графіки експериментальних досліджень залежності коефіцієнта проходження від частоти випромінювання, на основі яких навчалась та перевірялась нейронна мережа [12]-[16].

По причині малої кількості потрібних даних та невеликої кількості досліджень маємо п'ять (рис. 1) структур матеріалів та двадцять п'ять графіків результатів експериментів..

Так в нашій моделі, для обробки великих масивів даних, а саме 3D-моделей, було використано згорточну нейронну мережу [17]-[24]. Вихідні нейрони будуть представляти параметри, які описують

кожний унікальний графік експериментальних досліджень метаматеріалів.

Загальна формула для розрахунку вихідного значення при вхідних значеннях $[N, C_{in}, H_{in}, W_{in}, D_{in}]$ і вихідних значень $[N, C_{out}, H_{out}, W_{out}, D_{out}]$ [25] має такий вигляд:

$$\text{out}(N_i, C_{out j}) = \text{bias}(C_{out j}) + \sum_{k=0}^{C_{in}-1} \text{weight}(C_{out j}, k) \odot \text{input}(N_i k) \quad (2)$$

де N – величина вибірки, C – число каналів, H – висота в пікселях, W – ширина в пікселях, D – глибина в пікселях.

Для розрахунку вихідного масиву використовуються формули [19]:

$$\begin{aligned} D_{out} &= \left\lfloor \frac{D_{in} + 2 \times \text{padding}[0] - \text{dilation}[0] \times (\text{kernel_size}[0] - 1) - 1}{\text{stride}[0]} + 1 \right\rfloor, \\ H_{out} &= \left\lfloor \frac{H_{in} + 2 \times \text{padding}[1] - \text{dilation}[1] \times (\text{kernel_size}[1] - 1) - 1}{\text{stride}[1]} + 1 \right\rfloor, \\ W_{out} &= \left\lfloor \frac{W_{in} + 2 \times \text{padding}[2] - \text{dilation}[2] \times (\text{kernel_size}[2] - 1) - 1}{\text{stride}[2]} + 1 \right\rfloor; \end{aligned} \quad (3)$$

де padding – відступ (в нашому випадку за умовчанням 0), dilation – відстань між елементами ядра, kernel_size – ядро згортки, детальніше в документації *PyTorch* для 3D згортки [20].

V. АРХІТЕКТУРА НЕЙРОННОЇ МЕРЕЖІ ТА ОБРОБКА ДАНИХ

Архітектура представлена у вигляді графу навчання або в моделі навчання, як показано в наступних рисунках роботи.

Для прогнозування використовувались два підходи для представлення графіків – у вигляді коефіцієнтів поліному та точок графіку.

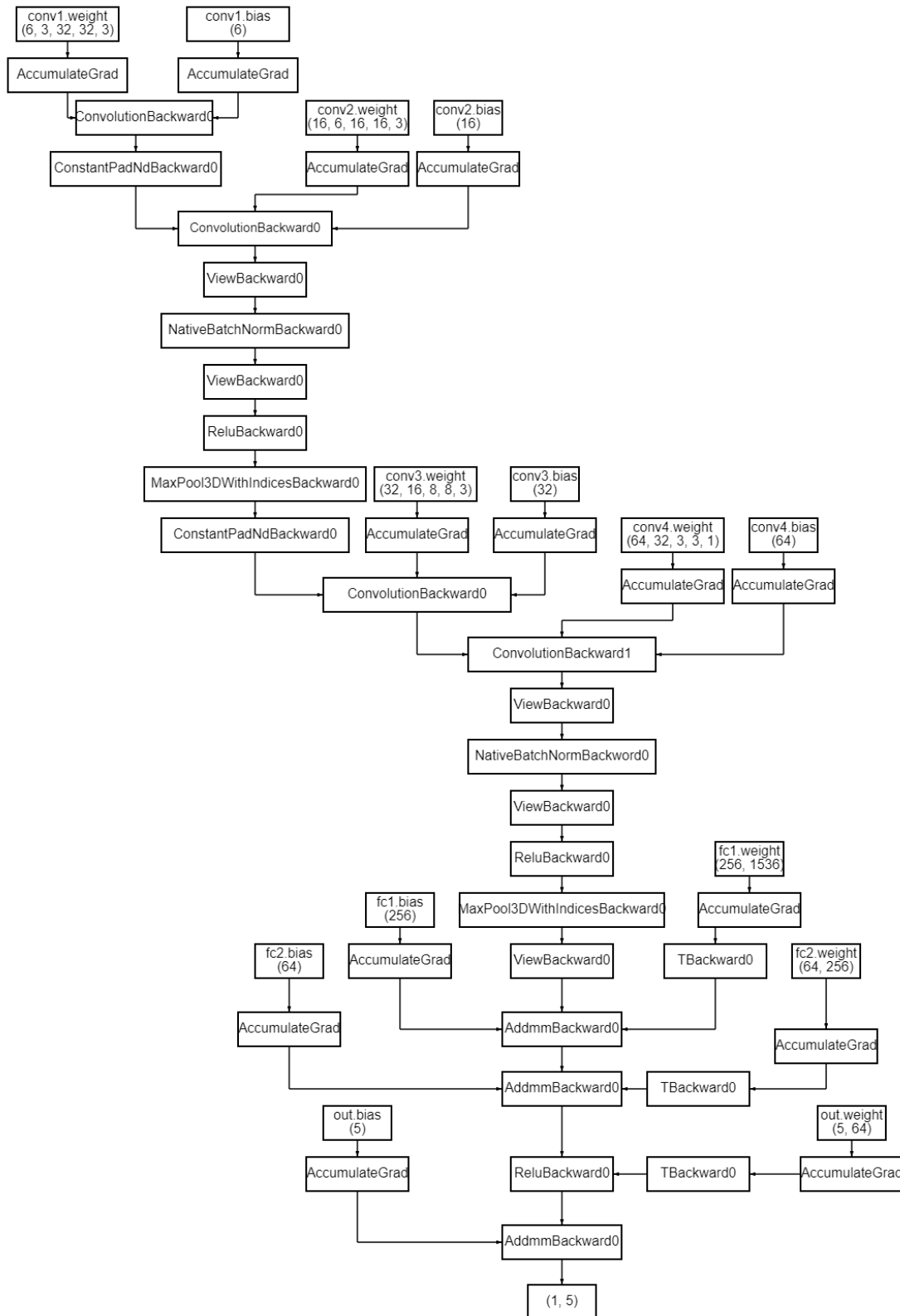


Рис. 3 Схема алгоритму навчання нейронної мережі для випадку з представлення експериментальних досліджень у вигляді коефіцієнтів поліному

У першому варіанті проводились операції задля представлення графіку у вигляді функціонального поліному відповідного порядку. Спочатку проводились нормалізації всіх графіків до $[0, 1]$, і потім проводились апроксимації для знаходження

коефіцієнтів. Ручним перебором були знайдені коефіцієнти, які потрібним чином представляють графіки. Основна задача була представити поведінку залежностей, а не деталі.



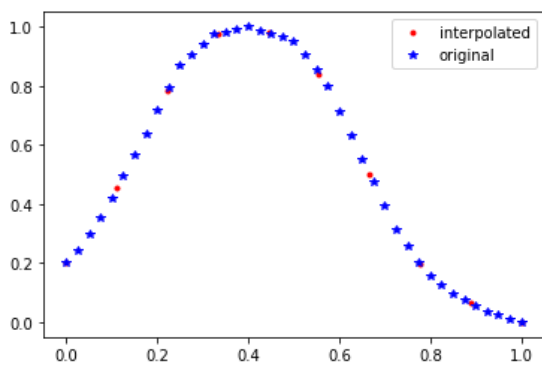


Рис. 4 Приклад інтерполяції значень на графіку для скорочення кількості вихідних нейронів

Так, поліном був вибраний п'ятого ступеня. Збільшуючи ступінь поліному вигляд графіку, який апроксимує експериментальний графік, майже не змінюється.

Точки графіків були масштабовані до $[0, 1]$. Схема алгоритму показана на Рис. 3.

У другому випадку бралась невелика кількість точок, які повністю описують всі потрібні зміни на графіку. Підготовка вигляду даних для нейронної мережі відбувалась в такі стадії:

- 1) Величезну кількість точок спрогнозувати важко, потрібна інтерполяція, щоб зменшити кількість точок до десяти. Точки обирались вручну, і таким чином, щоб зберегти поведінку залежності.
- 2) Для того, щоб нейронна мережа легше опрацювала дані, приводимо масштабвання даних (скейлінг) до масштабу $[0, 1]$:

$$\max \min scale = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)} \quad (4)$$

На наступному рисунку (Рис. 4) показано, які точки були відібрані в результаті інтерполяції значень графіку.

На вхід подається структура даних, яка є представленням 3D структури метаматеріалу та складу метаматеріалу (який представлений у вигляді трьох каналів з числами, які закріплюються до кожного пікселя – координати) – $(3,256,256,6) : (\text{канали}, x, y, z)$.

На Рис. 5, показана схема алгоритму для другого випадку.

Параметри навчання були вибрані наступні – $\text{learning_rate} = 1E-3$ (швидкість навчання), $\text{batch_size} = 1$ (розмір пакету даних), $\text{optimizer} = \text{NAdam}$ (оптимізатор – Adam with Nesterov momentum).

VI. РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Було використано 5 структур – 4 на тренування нейромережі і одну на тестування. Денормалізація не проводилась після отримання результатів, так як головна задача, яка була це отримати загальний висновок – чи є можливість прогнозувати залежність коефіцієнту проходження від частоти використовуючи інформацію про структуру та склад метаматеріалів.

На Рис. 6 та Рис. 8 показані графіки залежності похибки в залежності від кількості епох. Зазвичай, це найкраще представлення результатів навчання нейронних мереж. На Рис. 7 та Рис. 9 представлені моделі навчання у програмному вигляді. На цих рисунках найкраще видно архітектуру нейромережі, та параметри, які були використані при її навчанні.

Для варіанту з представленням графіків у вигляді точок на вихід нейронної мережі.

Тепер розглянемо варіант з представленням графіків у вигляді поліному п'ятого ступеня. Як видно з графіку (Рис. 9), структура дійсно працює та навчається і ми бачимо зменшення похибки із кожної наступною епохою навчання. А отже, з кожною наступною епохою, прогнозування вихідного графіку все більше буде більш якісним та правдоподібним. Звичайно, графіки не будуть повністю співпадати по ряду причин – мала кількість даних; недостатня інформація про реальний вплив всіх факторів на вимірювання експериментальних даних; не ідеальна конвертація програмного 3D пакету з програмного формату (ply, obj, fbx ...) в xyzrgb; перетворення RGB каналів в канали з фізичними властивостями; масштабування графіків до одиничного інтервалу, не ідеальність архітектури нейронної мережі – гіперпараметри, кількість шарів, кількість нейронів та ін. Незважаючи на це, ми отримали нейронну мережу, яку можна покращувати та алгоритм, який дає можливість аналізувати і прогнозувати властивості та структуру метаматеріалів.

Враховуючи на те, що похибка для варіанту з поліномами не дуже велика, різниця між потрібними та прогнозованими коефіцієнтами є величезною у зв'язку з тим, щоб при збільшенні похибки навіть на маленьку долю, коефіцієнти змінюються у незрівнянно більшій степені, тому даний варіант не є дуже ефективним в порівнянні з варіантом з представленням графіку у вигляді точок. Похибка у коефіцієнті, який стоїть перед п'ятим степенем, навіть на 2% приводить до зміни поведінки графіку кардинально (враховуючи ще те, що коефіцієнти були нормовані).

В результаті, ми отримали достатньо якісну модель для прогнозування майбутніх характеристик метаматеріалів, як показано на Рис. 10.

По осі X , величини масштабовані у зв'язку з потребами архітектури нейронної мережі, але це ніяк не впливає на сам результат.

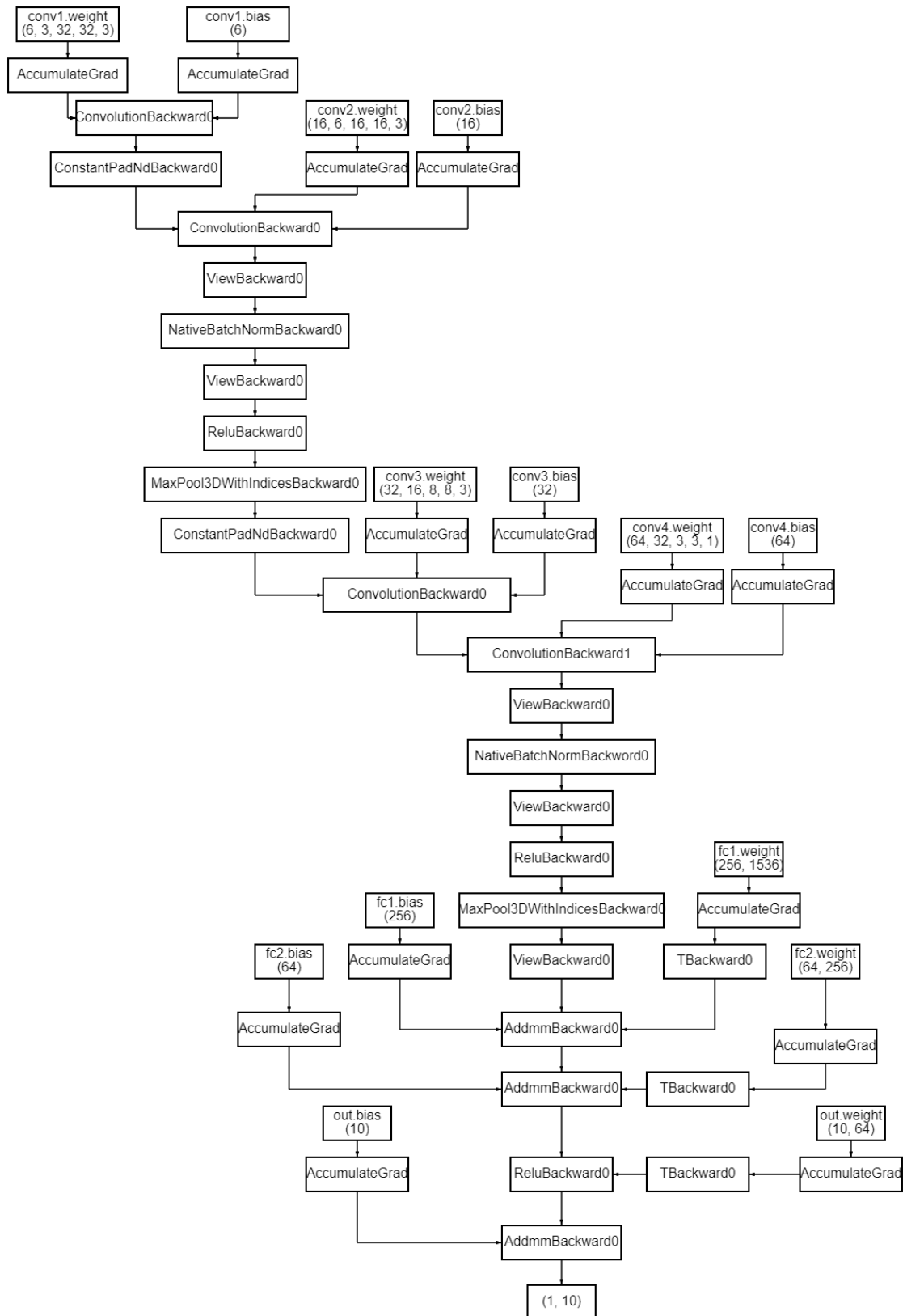


Рис. 5 Схема алгоритму навчання нейронної мережі для випадку з представлення експериментальних досліджень у вигляді точок на графіку

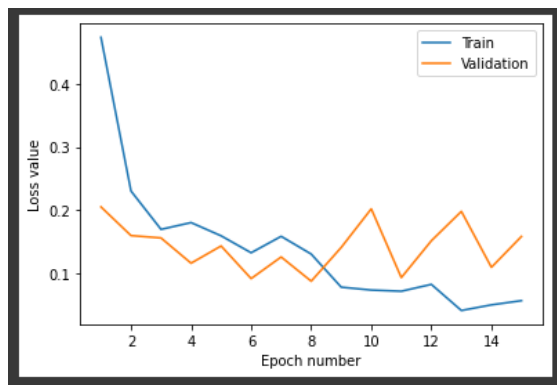


Рис. 6 Графік залежності похибки в залежності від кількості епох навчання для першого випадку

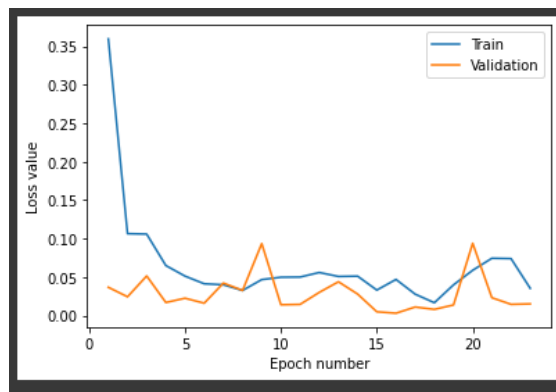


Рис. 8 Графік залежності похибки в залежності від кількості епох навчання для другого випадку

Layer (type)	Output Shape	Param #
InstanceNorm3d-1	[-1, 3, 256, 256, 6]	0
Dropout-2	[-1, 3, 256, 256, 6]	0
Conv3d-3	[-1, 6, 256, 256, 6]	55,302
Conv3d-4	[-1, 16, 256, 256, 6]	73,744
InstanceNorm3d-5	[-1, 16, 256, 256, 6]	0
Conv3d-6	[-1, 32, 25, 25, 6]	98,336
Conv3d-7	[-1, 64, 25, 25, 6]	18,496
InstanceNorm3d-8	[-1, 64, 25, 25, 6]	0
Dropout-9	[-1, 1536]	0
Linear-10	[-1, 256]	393,472
Linear-11	[-1, 64]	16,448
Linear-12	[-1, 10]	650

Total params: 656,448
Trainable params: 656,448
Non-trainable params: 0

Input size (MB): 4.50
Forward/backward pass size (MB): 136.59
Params size (MB): 2.50
Estimated Total Size (MB): 143.60

Рис. 7 Модель навчання у програмному вигляді для першого випадку

Layer (type)	Output Shape	Param #
InstanceNorm3d-1	[-1, 3, 256, 256, 6]	0
Dropout-2	[-1, 3, 256, 256, 6]	0
Conv3d-3	[-1, 6, 256, 256, 6]	55,302
Conv3d-4	[-1, 16, 256, 256, 6]	73,744
InstanceNorm3d-5	[-1, 16, 256, 256, 6]	0
Conv3d-6	[-1, 32, 25, 25, 6]	98,336
Conv3d-7	[-1, 64, 25, 25, 6]	18,496
InstanceNorm3d-8	[-1, 64, 25, 25, 6]	0
Dropout-9	[-1, 1536]	0
Linear-10	[-1, 256]	393,472
Linear-11	[-1, 64]	16,448
Linear-12	[-1, 5]	325

Total params: 656,123
Trainable params: 656,123
Non-trainable params: 0

Input size (MB): 4.50
Forward/backward pass size (MB): 136.59
Params size (MB): 2.50
Estimated Total Size (MB): 143.59

Рис. 9 Модель навчання у програмному вигляді для другого випадку

Аналізуючи отримані результати, можна підсумувати наступне – сам характер прогнозованих характеристик зберігається, що означає, що ми отримали систему, яка розроблена правильним шляхом; звичайно, кількість точок не дає змогу повністю отримувати бажаний результат, що пов'язано із зростаючою складністю обчислень при збільшенні точок; немала похибка пов'язана з дуже малою кількістю даних та складністю алгоритму підготування даних для нейромережі, що означає, що велика кількість неточностей в сукупності може дати велику похибку.

Як бачимо, існує можливість заміни великої вибірки вхідних даних на більшу кількість інформації про елементи вибірки з деякою потрібною кількістю елементів вибірки. Чіткої теорії, яка б давала можливість знаходити потрібну кількість інформації про елементи вибірки та величину вибірки, яка потрібна, немає.

ВИСНОВОК

У даній роботі представлена ідея та модель з прогнозування властивостей метаматеріалів на основі структури, складу структури та експериментальних досліджень даних структур. Було показано, як можна отримати та конвертувати основні властивості та відмінності структури у цифровому вигляді та як потрібно їх конвертувати до потрібного для нейронної мережі формату. В роботі використано основні переваги згортової нейронної мережі для 3D об'єктів. Показано, що навіть при малій кількості даних та великій кількості нюансів, які можуть впливати на якість результатів, отримано достатньо невеликі похибки для двох випадків – представлення експериментальних графіків у вигляді коефіцієнтів поліному та точок на графіку. Проаналізовано основні моменти, на які потрібно звертати увагу при використанні даного алгоритму, та складності, які можуть виникнути при розробці аналогічних систем. Знайдено можливість розробки теорії, яка б описувала залежність інформації про елементи вибірки на протигагу кількості елементів вибірки.

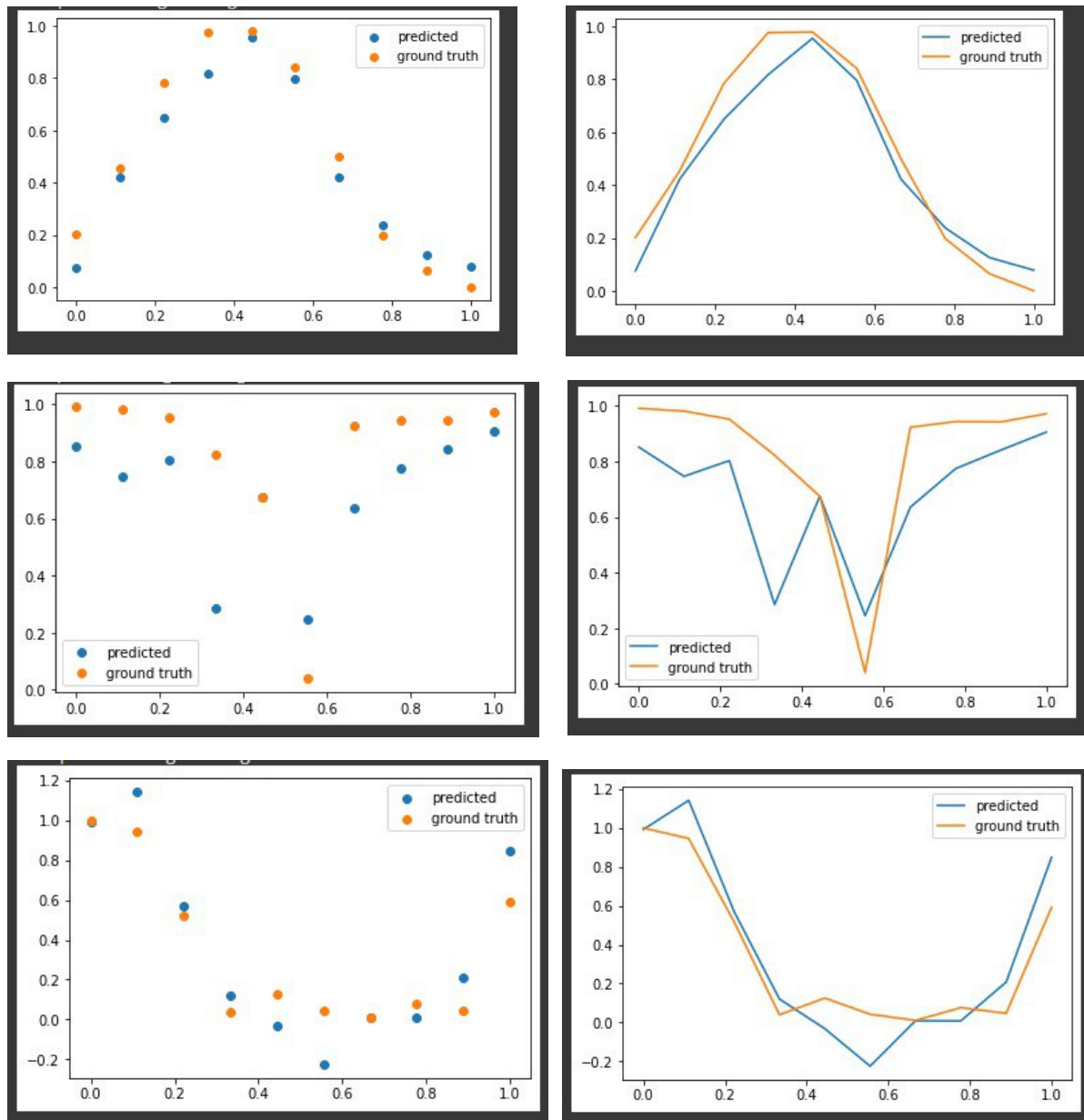


Рис. 10 Реальні характеристики та спрогнозовані на основі представленої моделі

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

- [1] N. I. Zheludev, "The Road Ahead for Metamaterials," *Science* (1979), vol. 328, no. 5978, pp. 582–583, Apr. 2010, DOI: [10.1126/science.1186756](https://doi.org/10.1126/science.1186756).
- [2] D. Ozevin and S. Tol, "Role of acoustic metamaterials and phononic crystals in sensing and damage detection in solids," in *The Rise of Smart Cities*, Elsevier, 2022, pp. 115–137, DOI: [10.1016/B978-0-12-817784-6.00014-X](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-817784-6.00014-X).
- [3] E. Semouchkina, "Periodic arrays of dielectric resonators as metamaterials and photonic crystals," in *Dielectric Metamaterials and Metasurfaces in Transformation Optics and Photonics*, Elsevier, 2022, pp. 1–20, DOI: [10.1016/B978-0-12-820596-9.00008-X](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-820596-9.00008-X).
- [4] M. Maasch, *Tunable Microwave Metamaterial Structures*, 1st ed. Springer, 2016, ISBN: 978-3319802909.
- [5] A. Sprafke and J. Schilling, "Non-resonant dielectric metamaterials," in *Dielectric Metamaterials*, Elsevier, 2020, pp. 249–288, DOI: [10.1016/B978-0-08-102403-4.00014-1](https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102403-4.00014-1).
- [6] T. Gric and O. Hess, "Electromagnetics of Metamaterials," in *Phenomena of Optical Metamaterials*, Elsevier, 2019, pp. 41–73, DOI: [10.1016/B978-0-12-813896-0.00002-X](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-813896-0.00002-X).
- [7] J. Sun and N. M. Litchinitser, "Metamaterials," in *Fundamentals and Applications of Nanophotonics*, Elsevier, 2016, pp. 253–307, DOI: [10.1016/B978-1-78242-464-2.00009-9](https://doi.org/10.1016/B978-1-78242-464-2.00009-9).
- [8] I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville, *Deep Learning*. The MIT Press, 2016, ISBN: 9780262035613.
- [9] Y. Levine, N. Wies, O. Sharir, N. Cohen, and A. Shashua, "Tensors for deep learning theory," in *Tensors for Data Processing*, Elsevier, 2022, pp. 215–248, DOI: [10.1016/B978-0-12-824447-0.00013-3](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-824447-0.00013-3).



- [10] K. Santosh, N. Das, and S. Ghosh, "Deep learning models," in *Deep Learning Models for Medical Imaging*, Elsevier, 2022, pp. 65–97, DOI: [10.1016/B978-0-12-824447-0.00013-3](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-824447-0.00013-3).
- [11] V. Sze, Y.-H. Chen, T.-J. Yang, and J. Emer, "Efficient Processing of Deep Neural Networks: A Tutorial and Survey," Mar. 2017, ArXiv: [1703.09039](https://arxiv.org/abs/1703.09039).
- [12] F. Ding, Z. Wang, S. He, V. M. Shalaev, and A. v. Kildishev, "Broadband High-Efficiency Half-Wave Plate: A Supercell-Based Plasmonic Metasurface Approach," *ACS Nano*, vol. 9, no. 4, pp. 4111–4119, Apr. 2015, DOI: [10.1021/acs.nano.5b00218](https://doi.org/10.1021/acs.nano.5b00218).
- [13] C. Huang, "Efficient and broadband polarization conversion with the coupled metasurfaces," *Opt Express*, vol. 23, no. 25, p. 32015, Dec. 2015, DOI: [10.1364/OE.23.032015](https://doi.org/10.1364/OE.23.032015).
- [14] A. Shaltout, J. Liu, A. Kildishev, and V. Shalaev, "Photonic spin Hall effect in gap-plasmon metasurfaces for on-chip chiroptical spectroscopy," *Optica*, vol. 2, no. 10, p. 860, Oct. 2015, DOI: [10.1364/OPTICA.2.000860](https://doi.org/10.1364/OPTICA.2.000860).
- [15] N. K. Grady *et al.*, "Terahertz Metamaterials for Linear Polarization Conversion and Anomalous Refraction," *Science (1979)*, vol. 340, no. 6138, pp. 1304–1307, Jun. 2013, DOI: [10.1126/science.1235399](https://doi.org/10.1126/science.1235399).
- [16] L. Cong, Y. K. Srivastava, and R. Singh, "Inter and intra-metamolecular interaction enabled broadband high-efficiency polarization control in metasurfaces," *Appl Phys Lett*, vol. 108, no. 1, p. 011110, Jan. 2016, DOI: [10.1063/1.4939564](https://doi.org/10.1063/1.4939564).
- [17] P. Wang *et al.*, "3D shape segmentation via shape fully convolutional networks," *Comput Graph*, vol. 70, pp. 128–139, Feb. 2018, DOI: [10.1016/j.cag.2017.07.030](https://doi.org/10.1016/j.cag.2017.07.030).
- [18] Y. Liang, F. He, X. Zeng, and B. Yu, "Feature-preserved convolutional neural network for 3D mesh recognition," *Appl Soft Comput*, vol. 128, p. 109500, Oct. 2022, DOI: [10.1016/j.asoc.2022.109500](https://doi.org/10.1016/j.asoc.2022.109500).
- [19] J. Raitoharju, "Convolutional neural networks," in *Deep Learning for Robot Perception and Cognition*, Elsevier, 2022, pp. 35–69, DOI: [10.1016/B978-0-32-385787-1.00008-7](https://doi.org/10.1016/B978-0-32-385787-1.00008-7).
- [20] Sigaki HYD, Lenzi EK, Zola RS, Perc M, Ribeiro HV. Learning physical properties of liquid crystals with deep convolutional neural networks. *Sci Rep*. 2020 May 6;10(1):7664. DOI: [10.1038/s41598-020-63662-9](https://doi.org/10.1038/s41598-020-63662-9).
- [21] Xie, T., & Grossman, J. C., "Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties", *Physical review letters*, 120(14), 145301, 2018, DOI: [10.1103/PhysRevLett.120.145301](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.145301).
- [22] Abueidda, DW, Almasri, M, Ammourah, R, Ravaioli, U, Jasiuk, "Prediction and optimization of mechanical properties of composites using convolutional neural networks", IM & Sobh, NA 2019, *Composite Structures*, vol. 227, 111264. DOI: [10.1016/j.compstruct.2019.111264](https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2019.111264).
- [23] Cecen, A., Dai, H., Yabansu, Y. C., Kalidindi, S. R., and Song, L., "Material structure-property linkages using three-dimensional convolutional neural networks", *Acta Materialia*, vol. 146, pp. 76–84, 2018, DOI: [10.1016/j.actamat.2017.11.053](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.11.053).
- [24] Chengping Rao, Yang Liu, "Three-dimensional convolutional neural network (3D-CNN) for heterogeneous material homogenization", *Computational Materials Science*, vol. 184, 2020, 109850, ISSN 0927-0256, DOI: [10.1016/j.commatsci.2020.109850](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109850).
- [25] PyTorch Contributors, "CONV3D," 2022. [Online]. Available: <https://pytorch.org/docs/stable/generated/torch.nn.Conv3d.html#torch.nn.Conv3d>.

Надійшла до редакції 09 січня 2023 року
Прийнята до друку 26 березня 2023 року



Convolutional Neural Network to Predict the Penetration Coefficient of Metamaterials Based on Their Structure and Composition

M. O. Zoziuk, ORCID [0000-0001-9116-7217](https://orcid.org/0000-0001-9116-7217)

O. I. Yurikov, ORCID [0000-0001-8620-9902](https://orcid.org/0000-0001-8620-9902)

National Technical University of Ukraine «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute» ROR [00syn5v21](https://ror.org/00syn5v21)
Kyiv, Ukraine

Abstract—The work is devoted to the development of a technique for predicting the coefficient passage of metamaterials based on topological structure and chemical composition with the use of machine learning techniques, namely artificial neural networks using convolution. In modern scientific and technical research, the methods of machine learning, namely: convolutional neural networks, occupy the most rapidly researched method in the design tasks of metamaterials and their properties. The advantage of this technique is the ease of implementation, the availability of data for this approach, the speed of calculations compared to the exact methods of predicting properties and topological structure based on physical laws. Of course, artificial neural networks are a rather complex process that has its own drawbacks – the need for a large amount of data, the relative complexity of optimization, and the complexity of problem formulation. With the development of machine learning technologies, these disadvantages are more and more eliminated, and therefore their use becomes more accessible. A large amount of information about metamaterials from relevant sources was used, namely the topology, chemical composition and measurement conditions of metamaterials. Software environments were used for writing digital code and building 3D objects of metamaterials with defined properties. An algorithm for predicting the transmission coefficient based on the structure, chemical composition of metamaterials based on a convolutional neural network using experimental data of laboratory metamaterials has been developed. An algorithm for saving information about the chemical composition of metamaterials has been developed. It is shown that using information about the electromagnetic properties of chemical elements, it is possible to predict the transmission coefficient of metamaterials. The process of presenting the coefficient of passage of metamaterials in a form convenient for training a convolutional neural network is described. Two methods were used to compare the effectiveness of both methods. It is shown that the method of representing experimental characteristics in the form of polynomial coefficients is faster, but not suitable for solving problems of predicting the characteristics of metamaterials. Data augmentation is shown to be the most effective method for improving forecasting results. Nevertheless, performance improvement methods based on architecture changes and hyperparameter changes should be continually evaluated and used whenever possible.

Keywords – metamaterial, 3D convolutional neural network, physical properties of material, informativeness of selection elements.

