

Метод машинного обучения для моделирования двумерных метаматериалов с максимальной запрещенной зоной в колебательном спектре.

Научный руководитель – Вершинин Анатолий Викторович

Семенов Николай Сергеевич

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,

Механико-математический факультет, Москва, Россия

E-mail: kolq.semenov@yandex.ru

В настоящее время метаматериалы (далее ММ) находят и будут находить широчайшее применение во всех сферах, где применяется электромагнитное излучение. Это медицина, наука, промышленность, космическое оборудование и многое другое. Метаматериалы - комплекс материалов, свойства которых определяются метаатомами, входящими в их состав. Благодаря уникальной комбинации таких метаатомов могут быть достигнуты требуемые для решения конкретной прикладной задачи свойства всего материала. Особенностью задачи проектирования модульных метаматериалов является необходимость прогнозирования значений характеристик итогового образца, по известным данным о структуре и материалах метаатомов [1].

В данной работе рассматривается модельная система - композит в виде двумерной полосы. Сама матрица, так же как и ее включения задается массовой плотностью, модулем Юнга и коэффициентом Пуассона.

Целью работы является нахождения такой последовательности включений, которая обеспечивает максимальную ширину запрещенной зоны в колебательном спектре рассматриваемого композита, используя численное моделирование и оптимизационный алгоритм на основе нейронной сети. Расчет собственных частот проводится в программной среде CAE Fidesys. Для проверки сходимости собственных частот проводилось измельчение сетки расчетной области.

Основная проблема поиска оптимальных характеристик итогового ММ - вычислительный ресурс. Метод перебора всех возможных вариантов структуры и материалов элемента неприменим, из-за ограниченных временных затрат на расчет.

Разработанный в рамках проекта метод представляет собой следующий алгоритм решения этой проблемы: обучение нейронной сети, предсказывающей оптимальное значение характеристик для заданных исходных данных. Этот метод хорош тем, что для обучения сети можно использовать ограниченное количество запусков расчета, к тому же, проводить расчеты для обучения нейронной сети можно параллельно. В этом преимущество данного метода перед другими методами машинного обучения. Реализация проводилась на языке программирования Python, с помощью библиотеки PyTorch.

В данной работе исследовались свойства двумерного ММ, для которого была получена структура образца с максимальной шириной запрещенной зоны. Применение разработанной методики позволило реализовать моделирование ММ, не требующее значительных временных затрат и вычислительных мощностей. Разработанная методика на основе нейронной сети апробирована в процессе проектирования и показала высокую эффективность.

Источники и литература

- 1 J. Schmidt, M. R. G. Marques, S. Botti, M. A. L. Marques, Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science, npj Comput. Mater. 2019, 5, 1.

- 2 L. Wu, L. Liu, Y. Wang, Z. Zhai, H. Zhuang, D. Krishnaraju, Q. Wang, H. Jiang, A machine learning -based method to design modular metamaterials, *Extreme Mech. Lett.* 36 (2020).
- 3 Yakovlev M.Ya, Lukyanchikov I.S., Levin V.A., Vershinin A.V., Zingerman K.M., Calculation of the effective properties of the prestressed nonlinear elastic heterogeneous materials under finite strains based on the solutions of the boundary value problems using finite element method, *Journal of Physics: Conference Series*, 1158(4):042037
- 4 V.A. Levin, K.M. Zingerman, A.V. Vershinin, M. Ya. Yakovlev, Numerical analysis of effective mechanical properties of rubber-cord composites under finite strains, *Compos. Struct.* 131 (2015) 25–36.
- 5 Kukushkin, A. V., Konovalov, D. A., Vershinin, A. V., and Levin, V. A. 2019. Numerical simulation in cae fidesys of bonded contact problems on non-conformal meshes. *Journal of Physics: Conference Series*, 1158(2):032022