

УДК 004.8

Pavlo Krysenko, Doctor of Philosophy, Research Assistant
ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-5612-9474> **e-mail:** p.krysenko@gmail.com

Institute of Telecommunications and Global Information Space of NASU, Kyiv, Ukraine

THE PROBLEM OF PREDICTION OF THE TRANSMISSION COEFFICIENT USING NEURAL NETWORKS WITH A LIMITED QUANTITY OF DATA

***Annotation.** The article discusses available approaches to predicting the transmission coefficient of metamaterials. In the paper was proposed different approaches that create the possibility of using data from various open sources, as well as the possibility of encoding complete structural information about the composition of metamaterials. A neural network with two inputs was designed, which is based on a three-dimensional convolution operation. Using these approaches, the training of an artificial neural network was carried out, and the results of transmission coefficient prediction were presented. The nature of metamaterial use can be determined by the predicted coefficient, but the resulting root mean square error still does not allow using such a neural network as a substitute for existing approaches. The paper presents an analysis of the obtained results, in which possible approaches to solving the problem of the amount of data are proposed, as well as solving the problem of different intervals of electromagnetic radiation in the dataset using the architecture of a three-dimensional transformer.*

Key words: deep learning, low pass filter, convolutional neural networks, metamaterials.

П. Крисенко

Інститут телекомунікацій і глобального інформаційного простору НАНУ, м. Київ, Україна

ПРОБЛЕМАТИКА ПРОГНОЗУВАННЯ КОЕФІЦІЄНТА ПРОПУСКАННЯ ЗА ДОПОМОГОЮ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ З ОБМЕЖЕНОЮ КІЛЬКІСТЮ ДАНИХ

***Анотація.** У статті розглянуто наявні підходи до прогнозування коефіцієнта пропускання метаматеріалів. В роботі пропонуються підходи, які створюють можливість використання даних з різних відкритих джерел, а також можливість кодувати повну структурну інформацію про склад метаматеріалів. Було спроектовано нейронну мережу з двома входами, яка заснована на операції тривимірної згортки. Використовуючи ці підходи, було проведено навчання штучної нейронної мережі, представлені результати прогнозування коефіцієнта пропускання. За прогнозованим коефіцієнтом можна визначити характер використання метаматеріалу, але отримана середньоквадратична похибка все ще не дозволяє використовувати таку нейронну мережу як замітник існуючих підходів. В роботі представлено аналіз отриманих результатів, запропоновані можливі підходи до вирішення проблематики кількості даних, а також вирішення проблеми різних проміжків електромагнітного опромінення у датасеті за допомогою архітектури тривимірного трансформера.*

Ключові слова: глибоке навчання, фільтр низьких частот, згорткова нейронна мережа, метаматеріали.

<https://doi.org/10.32347/2411-4049.2025.1.155-163>

Вступ

Метаматеріали – це штучно створені структури, які мають визначні характеристики через складні та періодичні внутрішні структури. Ці матеріали знайшли широке використання у сучасних приладах та пристроях. Вони активно використовуються для створення лінз та підсилювачів у оптичному та мікрохвильовому діапазонах, а також у пристроях для покращення роздільної здатності джерел випромінення [3, 4]. Також, одним із перспективних напрямків використання метаматеріалів є створення інфрачервоних камуфляжних покриттів від засобів нічного бачення [5, 6].

Сучасне програмне забезпечення для роботи з дизайном метаматеріалів спирається на класичні математичні моделі, які були створені під різні діапазони випромінення. На жаль, не існує універсальних методів для роботи з метаматеріалами, що спираються на класичні математичні моделі.

Зі зростанням обчислювальних потужностей відбулося збільшення використання методів глибокого навчання для створення універсальних розв'язків задач, які до цього розв'язувалися класичними методами. Було запропоновано для вирішення задачі прогнозування властивостей метаматеріалів різні архітектури нейронних мереж [7–9]. В цих дослідженнях метаматеріали розглядалися як двовимірна площина, що зменшує об'єм корисної інформації про структуру метаматеріалу. Інший запропонований підхід – це представлення інформації у вигляді сферичних наночасток, з яких складаються метаатоми. Властивості таких метаатомів використовуються як вхідна інформація для нейронної мережі [10, 11].

Всі описані підходи так чи інакше спрощують інформацію про структуру метаматеріалу та не використовують об'ємну топологію, яка для складних структур може мати надзвичайний вплив на характеристики.

Також, в попередніх роботах не була використана інформація про характеристики електромагнітного опромінення. Електромагнітні метаматеріали мають властивість дисперсії характеристик. Тобто, їх коефіцієнти пропускання, поглинання та відбивання залежать від частоти хвилі.

Основна частина

Джерелом даних для навчання було обрано низку досліджень [12–16]. Ці роботи були обрані, так як відповідали критеріям:

- 1) визначена та відтворювана топологія метаматеріалів;
- 2) визначені матеріали, з яких були створені зразки;
- 3) однаковий тип експериментальних характеристик;
- 4) визначені параметри електромагнітного опромінення;
- 5) терагерцовий діапазон опромінення та надскладна об'ємна структура для моделювання.

Ці структури та їх розміри зображені на рисунках 1–5 відповідно.

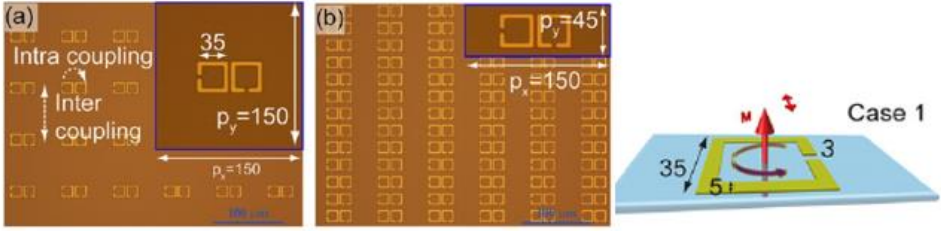


Рис. 1. Схематичний вигляд метаматеріалу – 1 [12]

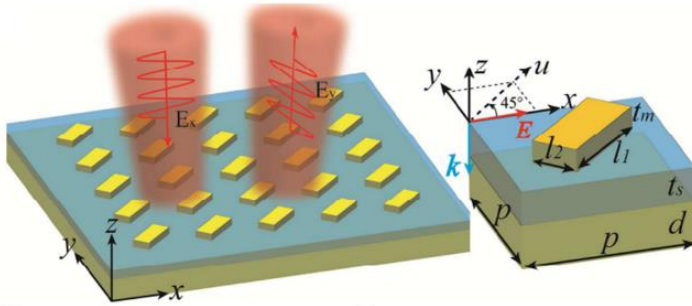


Рис. 2. Схематичний вигляд метаматеріалу – 2 [13]

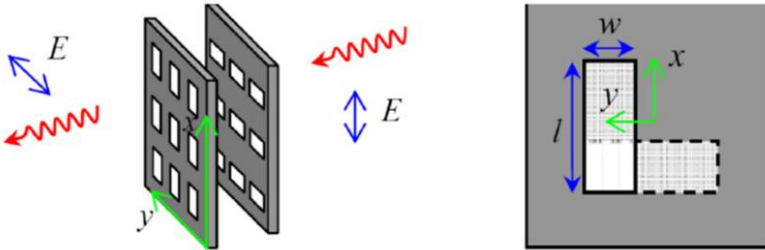


Рис. 3. Схематичний вигляд метаматеріалу – 3 [14]

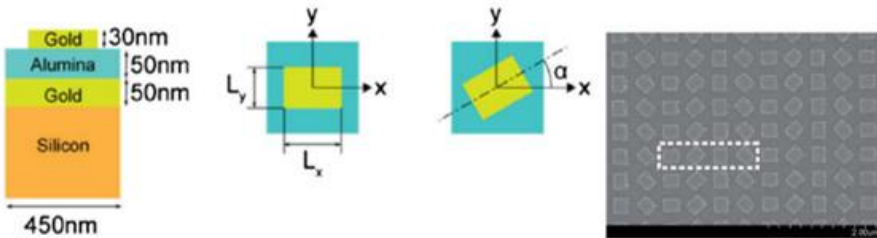


Рис. 4. Схематичний вигляд метаматеріалу – 4 [15]

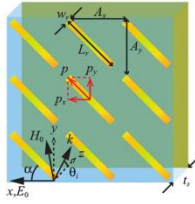


Рис. 5. Схематичний вигляд метаматеріалу – 5 [16]

Інформація про структуру та тип матеріалів представлена у вигляді чотиривимірного тензора розмірністю:

$$X = (x, y, z, p), \quad (1)$$

де X – вхідний тензор, x, y, z – координати відповідних осей, p – канал з характеристиками матеріалу.

В якості характеристик, що однозначно представляють матеріал, були обрані діелектрична проникність, питома провідність та магнітна провідність.

Тобто, кожному елементу у просторі відповідає трійка значень, що однозначно представляють матеріал, з якого побудована внутрішня структура метаматеріалу. Таке представлення топологічної структури можна представити у вигляді об'ємного RGB зображення, де замість RGB каналу знаходиться канал з характеристиками матеріалів.

Для кодування інформації про параметри електромагнітного опромінення можна використати декілька підходів. Одним з таких підходів є додавання параметрів опромінення у вхідний тензор структурного представлення. Цими параметрами виступають тип поляризації електромагнітної хвилі, кут опромінення та коефіцієнт заломлення діелектрика. Додавання такої трійки значень збільшить розмір вхідних даних у 2 рази. Так як значення параметрів електромагнітної хвилі в даних експериментах константні відносно структури метаматеріалу, то використання такого підходу не є оптимальним.

Інший підхід – це представлення параметрів електромагнітного опромінення у вигляді вектора, який буде поданий на додатковий вхід нейронної мережі:

$$c = [pol, \alpha, n], \quad (2)$$

де c – вектор параметрів електромагнітного опромінення, α – кут опромінення, n – коефіцієнт заломлення діелектрика.

Коефіцієнт пропускання залежить від частоти опромінення, тому для прогнозування цього коефіцієнта було обрано 20 точок з таблиці значень експериментів, з однаковим проміжком і для одних і тих самих частот.

Основою архітектури штучної нейронної мережі була обрана тривимірна згортка (операція яка виражається формулою):

$$y(N_i, C_{out_j}) = bias(C_{out_j}) + \sum_{k=0}^{C_{in}^{-1}} weight(C_{out_j}, k) * input(N_i, k), \quad (3)$$

де y – вихідний чотиривимірний тензор, $bias$ – матриця зсуву, $weight$ – ваги згортки, $input$ – вхідний чотиривимірний тензор.

Архітектура штучної нейронної мережі буде являти собою комбінацію з трьох блоків та представлена на рис. 6. Блок «А» представлений послідовно з'єднаними шарами тривимірної згортки для вивчення структурної топологічної інформації метаматеріалу та представлення цієї інформації у вигляді n-мірного вектора. Блок «В» – послідовно з'єднані шари повнозв'язної нейронної мережі для знаходження залежності у параметрах електромагнітного опромінення та представлення її у вигляді вектора. Та блок «С» – який на вхід прийматиме векторне представлення структурної інформації з першого блоку, яке об'єднане операцією конкатенації з векторним представленням параметрів електромагнітного опромінення та прогнозуватиме 20 точок значень коефіцієнта пропускання та відповідних їм значень частот.

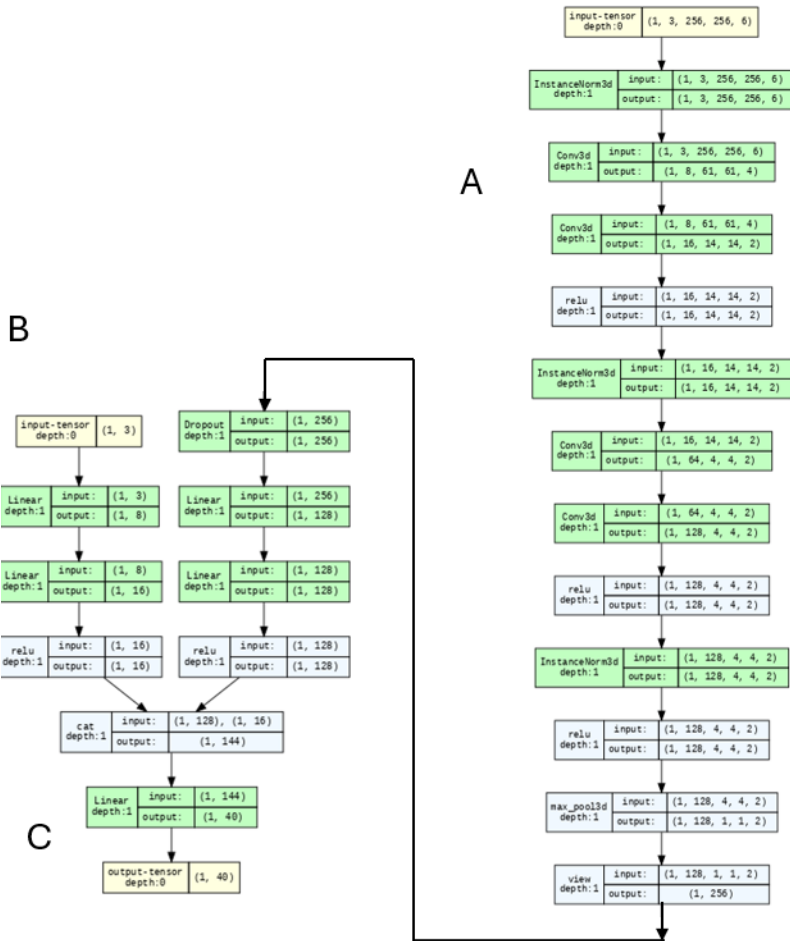


Рис. 6. Архітектура штучної нейронної мережі

Використання додаткової гілки параметрів електромагнітного опромінення збільшує кількість даних для навчання штучної нейронної мережі. У порівнянні з роботою [17] обсяг даних збільшився на 16 семплів, так як з'явилася змога використати одні й ті самі структури для різних параметрів електромагнітного опромінення та різних значень коефіцієнта пропускання для частотного діапазону.

Зібрані дані для навчання були розбиті на три підвибірки даних. Кількість семплів у цих вибірках зазначена у таблиці 1.

Таблиця 1. Кількість даних у вибірках даних

Тренування	Валідація	Тестування
18	4	1

В якості функції помилки для навчання була обрана функція середньоквадратичної похибки.

Алгоритмом навчання був обраний алгоритм NAdam з параметрами по замовчуванню та швидкістю навчання 0.001.

Результати навчання продемонстровані на рис. 7–8. На рис. 7 зображений графік функції помилки, з якого можна побачити, що нейронна мережа здатна навчатися на такому типі даних.

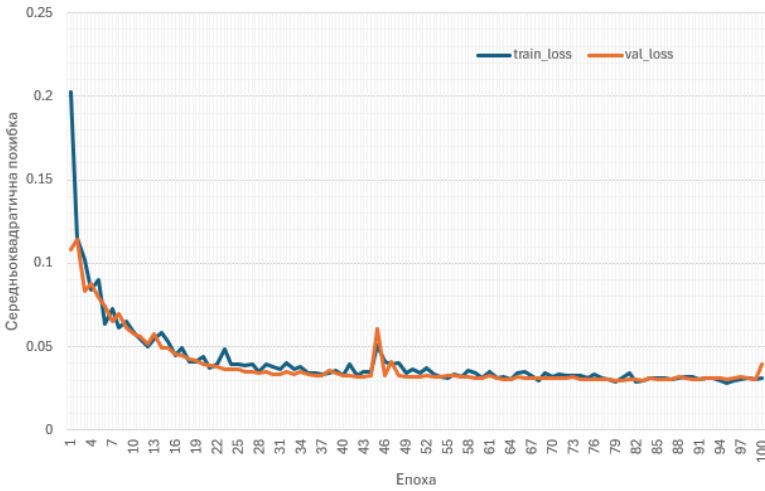


Рис. 7. Графік функції похибки

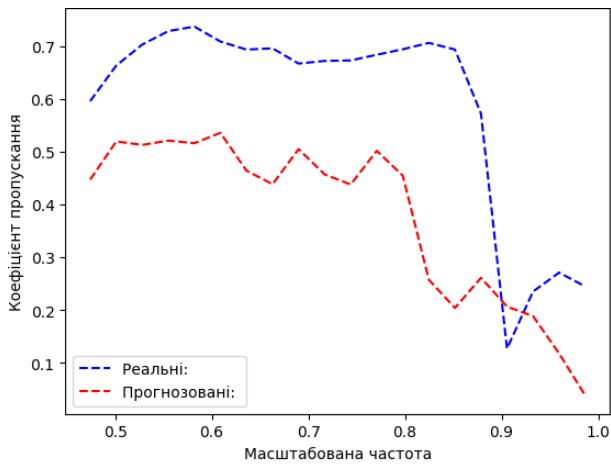


Рис. 8. Порівняння прогнозованого коефіцієнта пропускання та реального

З рис. 8 можна побачити, що нейронна мережа ще не має змоги достатньо добре прогнозувати коефіцієнт пропускання, але за прогнозованим параметром можна визначити характер метаматеріалу, а саме – фільтр низьких частот.

Висновки

У порівнянні з роботою [17] покращилася середньоквадратична похибка прогнозування. Це зумовлено використанням додаткової інформації про параметри електромагнітного опромінення та збільшенням кількості даних.

Запропонована архітектура не використовує значення частоти опромінення. Для застосування цієї інформації можна використати сучасні архітектури, які засновані на механізмі уваги. У роботі [18] був проведений огляд існуючих архітектур Transformer для випадку тривимірного типу даних. Для такої архітектури можливо закодувати інформацію про електромагнітне випромінення у додатковий канал з інформацією про характеристики матеріалів і використати послідовність значень частот як додаткове джерело інформації в блоці перехресної уваги.

Мала кількість даних обумовлена малою кількістю відкритих робіт з дослідження метаматеріалів, що можуть бути використані для створення датасету для навчання. Існує нагальна потреба у подальшій уніфікації даних. В цій роботі були уніфіковані лише параметри електромагнітного опромінення. Використання значень частот опромінення значно розширить діапазон умов для збору даних з відкритих джерел. Можливість використання значень частот описана в попередньому абзаці.

Також, проблемою збору даних є швидкість рендеру тривимірних структур. Всі семпли, які були зібрані для цього експерименту, створені в ручному режимі за допомогою програмного забезпечення Blender. Так як метаматеріали мають періодичну структуру, можна запропонувати алгоритм, що буде генерувати тривимірні структури за заданими елементами, з яких складається метаматеріал. Такий алгоритм значно пришвидшить збір даних, аніж створення структур власноруч у Blender.

Не всі дослідження метаматеріалів мають чітко визначені табличні дані коефіцієнтів пропускання та поглинання, і відбивання. У випадку, коли ціллю дослідження є комплексний пристрій на основі метаматеріалів, ці параметри не завжди вказані для всього діапазону частот. Інформація з таких досліджень поки що ніяк не може бути використана. Так як вхідна інформація все ще може бути отримана з таких досліджень, може бути зібраний датасет для Unsupervised та Self-supervised навчання. Так як інформація про структуру є найбільш складною, то можна запропонувати передбачення замаскованих та квантизованих елементів структури, як це було зроблено для навчання розпізнавання мови з обмеженою кількістю даних у [19].

Збільшення кількості відкритих даних може спонукати інших дослідників до розв'язання цієї задачі. Більш актуальним також є розв'язок зворотної задачі, в якій за заданих характеристик нейронна мережа буде генерувати дизайн метаматеріалів. Для розв'язку такої задачі існує проблема із кількістю даних для навчання, так як такі зворотні задачі потребують значної кількості семплів на навчання у порівнянні із прямою задачею.

REFERENCES

- [1] Lopez, M., Dupont, T., & Panneton, R. (2023). A mass-spring analogy for modeling the acoustic behaviour of a metamaterial. *INTER-NOISE and NOISE-CON Congress and Conference Proceedings*, 265(1), 6295–6301. https://doi.org/10.3397/in_2022_0935
- [2] Porfyrakis, P., & Tsitsas, N. L. (2019). Nonlinear electromagnetic metamaterials: Aspects on mathematical modeling and physical phenomena. *Microelectronic Engineering*, 216, 111028. <https://doi.org/10.1016/j.mee.2019.111028>
- [3] Zharov, A. A., Zharova, N. A., Noskov, R. E., Shadrivov, I. V., & Kivshar, Y. S. (2005). Birefringent left-handed metamaterials and perfect lenses for Vectorial Fields. *New Journal of Physics*, 7, 220–220. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/7/1/220>
- [4] Bowers J. A.; Hyde R. A. et al. "Evanescent electromagnetic wave conversion lenses I, II, III" US Patent and Trademark Office, Grant US-9081202-B2, 14 juli 2015, U.S. Patent 9,081,202.
- [5] Zharov, A. A., Zharova, N. A., Noskov, R. E., Shadrivov, I. V., & Kivshar, Y. S. (2005). Birefringent left-handed metamaterials and perfect lenses for Vectorial Fields. *New Journal of Physics*, 7, 220–220. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/7/1/220>
- [6] Ge, L., Li, J., Zhong, K., Wang, Y., Xu, D., & Yao, J. (2023). A thermocouple based on wideband hybrid metamaterial absorber for mid-infrared photo-thermoelectric detector. *Optics Communications*, 545, 129714. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2023.129714>
- [7] Khatib, O., Ren, S., Malof, J., & Padilla, W. J. (2021). Deep learning the electromagnetic properties of metamaterials – a comprehensive review. *Advanced Functional Materials*, 31(31). <https://doi.org/10.1002/adfm.202101748>
- [8] Hammond, A. M., & Camacho, R. M. (2019). Designing integrated photonic devices using artificial neural networks. *Optics Express*, 27(21), 29620. <https://doi.org/10.1364/oe.27.029620>
- [9] Xu, Y., Zhang, X., Fu, Y., & Liu, Y. (2021). Interfacing photonics with Artificial Intelligence: An innovative design strategy for photonic structures and devices based on Artificial Neural Networks. *Photonics Research*, 9(4). <https://doi.org/10.1364/prj.417693>
- [10] Peurifoy, J., Shen, Y., Jing, L., Yang, Y., Cano-Renteria, F., DeLacy, B. G., Joannopoulos, J. D., Tegmark, M., & Soljačić, M. (2018). Nanophotonic particle simulation and inverse design using artificial neural networks. *Science Advances*, 4(6). <https://doi.org/10.1126/sciadv.aar4206>
- [11] Shi, R., Huang, J., Li, S., Niu, L., & Yang, J. (2022). Forward prediction and inverse design of nanophotonic devices based on Capsule Network. *IEEE Photonics Journal*, 14(4), 1–8. <https://doi.org/10.1109/jphot.2022.3182050>
- [12] Cong, L., Srivastava, Y. K., & Singh, R. (2016). Inter and intra-metamolecular interaction enabled broadband high-efficiency polarization control in metasurfaces. *Applied Physics Letters*, 108(1). <https://doi.org/10.1063/1.4939564>
- [13] Ding, F., Wang, Z., Shalaev, V. M., & Kildishev, A. V. (2015). Broadband high-efficiency half-wave plate using plasmonic metasurface. *CLEO: 2015*. https://doi.org/10.1364/cleo_qels.2015.ftu1c.6
- [14] Huang, C. (2015). Efficient and broadband polarization conversion with the coupled metasurfaces. *Optics Express*, 23(25), 32015. <https://doi.org/10.1364/oe.23.032015>
- [15] Shaltout, A., Liu, J., Kildishev, A., & Shalaev, V. (2015). Photonic Spin Hall effect in gap-plasmon metasurfaces for on-chip chiroptical spectroscopy. *Optica*, 2(10), 860. <https://doi.org/10.1364/optica.2.000860>
- [16] Grady, N. K., Heyes, J. E., Chowdhury, D. R., Zeng, Y., Reiten, M. T., Azad, A. K., Taylor, A. J., Dalvit, D. A., & Chen, H.-T. (2013). Terahertz metamaterials for linear polarization conversion and anomalous refraction. *Science*, 340(6138), 1304–1307. <https://doi.org/10.1126/science.1235399>

- [17] Zozyuk, M., Koroliouk, D., Krysenko, P., Yurikov, A., & Yakymenko, Y. (2023). Prediction of characteristics using a convolutional neural network based on experimental data on the structure and composition of metamaterials. *Statistics, Optimization & Information Computing*, 11(3), 730–739. <https://doi.org/10.19139/soic-2310-5070-1707>
- [18] Lahoud, J., Cao, J., Khan, F. S., Cholakkal, H., Anwer, R. M., Khan, S., & Yang, M. H. (2022). 3D vision with transformers: A survey. arXiv preprint arXiv:2208.04309.
- [19] Lodagala, V. S., Ghosh, S., & Umesh, S. (2023). CCC-WAV2VEC 2.0: Clustering Aided Cross contrastive self-supervised learning of speech representations. 2022 IEEE Spoken Language Technology Workshop (SLT). <https://doi.org/10.1109/slt54892.2023.10022552>

Стаття надійшла до редакції 09.12.2024 і прийнята до друку після рецензування 25.02.2025

The article was received 09.12.2024 and was accepted after revision 25.02.2025

Крисенко Павло

доктор філософії, молодший науковий співробітник, Інститут телекомунікацій і глобального інформаційного простору НАН України

Адреса робоча: Україна, м. Київ, Чоколівський бульвар, 13

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-5612-9474> **e-mail:** p.krysenko@gmail.com