

Модели искусственного интеллекта позволили предсказать свойства новых материалов для инфракрасной оптики



Ученые Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого создали и экспериментально апробировали модель искусственного интеллекта для прогнозирования плотности и температуры стеклования халькогенидных стекол, являющихся основой инфракрасной оптики и сенсорики.

С использованием сформированной базы данных о свойствах и составах стекол, были разработаны модели на основе неглубоких нейронных сетей и машинного обучения для предсказания свойства стекла от состава. Проверка корректности предсказания моделей проводилась на новых составах стекол, не входивших в обучающую выборку. Такой подход позволил оценить не только точность вычислений на литературных данных, но и способность модели работать с ранее не изученными экспериментальными составами. В работе были синтезированы стекла на основе двух систем: As-S-Se и As-S-I.

Сравнение нескольких моделей показало, что наилучшие результаты для предсказания температуры стеклования и плотности дает модель на основе многослойной нейронной сети.

Полученные результаты прогнозов показали, что даже весьма ограниченного объема данных (менее 2000 записей), достаточно для обучения моделей и получения квадратный корень среднеквадратичной ошибки (RMSE) прогноза по температуре стеклования 15,84°C и плотности — 0,0433 г/см³. В работе также проведено сравнение полученных результатов с существующей универсальной нейросетевой моделью GlassNet, ошибки прогноза которой составили 21,07°C и 0,1423 г/см³, соответственно.

Отдельного внимания заслуживает полученная в работе интерпретацией прогнозов модели. Анализ показал, что нейросеть воспроизводит известные для халькогенидных стекол зависимости: увеличение доли мышьяка, как правило, приводит к росту температуры стеклования и плотности, тогда как влияние серы и селена различается и зависит от концентрационного диапазона. Это означает, что модель улавливает не только статистические совпадения в данных, но и физически осмысленные связи между составом и свойствами материала.

По оценке авторов, разработанный подход можно использовать для предварительного поиска составов с заданным набором свойств и значительно сокращает сроки разработки таких стекол. Он не заменяет экспериментальную проверку, однако позволяет сократить число пробных синтезов и ограничить область поиска при разработке новых стекол для инфракрасной техники. Практическая неопределенность прогноза составляет около 20 °C для температуры стеклования и около 0,05 г/см³ для плотности, что вполне достаточно для первичного скрининга материалов и оценки его применимости к требуемой задаче.

«Наши результаты показывают, что специализированные модели искусственного интеллекта для халькогенидных стекол могут давать достаточно точные прогнозы, чтобы заметно сократить объем пробных синтезов и ускорить разработку новых составов с заданным набором свойств. Особую практическую значимость имеет то, что исследованные в работе свойства, плотность и показатель преломления, имеют практическую значимость для технологии получения оптических изделий методом прецизионного прессования», — отмечают авторы работы.

Халькогенидное стекло отличается от привычного тем, что пропускает тепловое излучение в инфракрасном диапазоне. Такие материалы используют в тепловизорах, датчиках ночного видения, волоконной ИК-оптике, в том числе для медицинской диагностики и контроля промышленных процессов.

Исследование выполнено в Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого в рамках программы «Приоритет-2030». Статья **Machine learning models for predicting density and glass transition temperature of chalcogenide glasses: Comparison and validation on novel compositions** по итогам работы опубликована в журнале *Materialia*

Авторы: **Виктор Клинков**, заведующий Учебной лабораторией прикладной химии, научный сотрудник Научно-образовательного центра «Нанотехнологии и покрытия»; **Александр Семенча**, директор Научно-образовательного центра «Нанотехнологии и покрытия»; **Евгений Павлов**, старший преподаватель Высшей школы программной инженерии.

