

# Design of a Terahertz Metasurface Absorber Based on Machine Learning Technique

Mohammad M. Fakharian\*

Faculty of Engineering, University of Garmsar, Garmsar, Iran  
E-mails: fakharian@fmgarmsar.ac.ir

\*corresponding author

## Short Abstract

The development of metasurface absorbers offers a potential solution to achieve low weight, thin thickness, favorable absorption rate, and acceptable terahertz absorption characteristics. In order to optimize the absorption properties of metasurfaces, the absorption spectrum is usually used as an important evaluation criterion, which can show many important characteristics such as the rate of absorption at different frequencies. However, the analysis of absorption spectra related to a large number of variable structural parameters is required when designing the structure, which consumes a lot of resources and time, because electromagnetic wave absorption involves the processes of complex impedance matching and electric field excitation. To address this issue, this study proposes a machine learning approach based on a random forest algorithm to predict absorption rates based on structural parameters, reducing the need for numerical simulation and spectrum analysis time. With the random forest model, the absorption rate is predicted with the  $R^2$  score of more than 0.99. In addition, the proposed absorber design has the advantages of being thin, insensitive to polarization and with a relatively stable incident angle, due to the symmetry of the structure. This study presents a practical and effective approach for the design of complex systems related to absorbing, reflecting and transmitting electromagnetic wave propagation.

## Keywords

Absorber, metasurface design, Terahertz, machine learning, random forest algorithm.

## 1- Short Introduction (4-5 lines)

In the last few decades, metasurfaces, as a two-dimensional equivalent of metamaterials, are able to freely manipulate the frequency, phase, amplitude and polarization of electromagnetic (EM) waves. These surfaces offer unprecedented control over light-matter interactions, enabling rapid development in EM absorber systems. Metasurface EM absorbers have important wireless applications, especially in the terahertz (THz) band, including in the field of radar and target detection, broadband communications, detection of dangerous objects, etc. On the other hand, the machine learning technique can be used to predict the behavior of various parameters of electronic and photonic systems. It has already been reported how machine learning enables access to essential simulations to achieve the same levels of accuracy but be hundreds of times faster. This research has provided a new approach for the precise design of absorber systems of complex EM waves with machine learning technique.

## 2- Proposed Work and Methodology

In this paper, machine learning technique is combined with metasurface absorber design. When designing a metasurface absorber structure, researchers usually adjust the structure parameters based on experience to obtain the optimal structure parameters. The absorption process of suprasurface EM waves is usually associated with mixed impedance matching and electric field excitation processes. However, it is difficult for researchers to design structures based on these physical phenomena and analyze the inherent relationships between parameters to optimize important parameters. The absorbers that are designed considering these factors are often time-consuming and it is very difficult to determine whether the structural parameters have reached their optimal values or not. Accordingly, through simulation-based design optimization, a type of metasurface absorber (with an absorption rate of more than 99%) has been proposed. To investigate the dependence of absorption, parametric analysis has been performed using some structural parameters. The proposed structure has a simple structural design, very low thickness and compact dimensions, which is very useful for various applications. Also, the related ideal structural parameters have been trained and predicted using the Random Forest algorithm. The findings of this research have provided a new approach for the precise design of absorbing, reflecting and transmitting systems of complex EM waves.

## 3- Conclusion

In summary, a new approach to predict the adsorption rate based on structural parameters for the design of a metasurface adsorbent has been successfully tested, which is based on a combination of numerical simulation and Random Forest algorithm in machine learning. For terahertz applications, a metasurface absorber consisting of four side slits on a silicon dioxide substrate is presented. The absorption peak with an absorption rate of more than 99% can be found at 2.6 THz. With Random Forest regression model, structure absorption rate is predicted with  $R^2$  more than 0.99. The results show that using the Random Forest model to simulate the design of the absorber can reduce the simulation time and required resources by 60%.

## 4- References

- [1] Patel, S. K., Parmar, J., Katkar, V., Al-Zahrani, F. A. & Ahmed, K. Ultra-broadband and polarization-insensitive metasurface absorber with behavior prediction using machine learning. *Alex. Eng. J.* 61, 10379–10393. (2022).
- [2] Prince Jain, Himanshu Chhabra, Urvashi Chauhan, Dhiraj Kumar Singh, Twana Mohammed Kak Anwer, Shaik Hasane Ahammad, Md Amzad Hossain, Ahmed Nabih Zaki Rashed, "Multiband Metamaterial absorber with absorption prediction by assisted machine learning," *Materials Chemistry and Physics*, Volume 307, 2023, 128180.
- [3] Zhipeng Ding, Wei Su, Yinlong Luo, Lipengan Ye, Hong Wu, Hongbing Yao, Machine learning in design of broadband terahertz absorbers based on composite structures, *Materials & Design*, vol. 233, 2023, 112215.

## طراحی یک جاذب فراسطی ترهترز بر پایه تکنیک یادگیری ماشین

محمد مهدی فخاریان

استادیار، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه گرمسار، گرمسار، ایران

### چکیده

توسعه جاذب‌های فراسطی راه‌حل بالقوه‌ای برای دستیابی به وزن کم، ضخامت نازک، نرخ جذب مطلوب و ویژگی‌های قابل قبول جذب امواج ترهترز، ارائه می‌دهد. به منظور بهینه‌سازی خواص جذب فراسطح‌ها، معمولاً از طیف جذب به عنوان یک معیار ارزیابی مهم استفاده می‌شود که می‌تواند بسیاری از ویژگی‌های مهم مانند مقدار جذب در فرکانس‌های مختلف را نشان دهد. اما، تحلیل طیف‌های جذب، به تعداد زیادی پارامترهای ساختاری وابسته است که منابع و زمان زیادی را مصرف می‌کند، زیرا جذب موج الکترومغناطیسی شامل فرآیندهای تطبیق امپدانس مختلط و تحریک میدان الکتریکی است. برای پرداختن به این موضوع، این تحقیق یک رویکرد یادگیری ماشین مبتنی بر الگوریتم جنگل تصادفی را برای پیش‌بینی نرخ جذب بر اساس پارامترهای ساختاری پیشنهاد می‌کند و نیاز به شبیه‌سازی عددی و زمان تجزیه و تحلیل طیف را کاهش می‌دهد. با مدل جنگل تصادفی، نرخ جذب با امتیاز  $R^2$  بیش از ۰/۹۹ پیش‌بینی می‌شود. علاوه بر این، طرح جاذب پیشنهادی دارای مزایای نازک بودن، غیرحساس بودن به پلاریزاسیون و با زاویه برخورد نسبتاً پایدار به واسطه تقارن ساختار است. این مطالعه یک رویکرد عملی و موثر برای طراحی سیستم‌های پیچیده مرتبط با انتشار موج الکترومغناطیسی جاذب، بازتاب و انتقال ارائه می‌کند.

### کلمات کلیدی

جاذب، طراحی فراسطح، ترهترز، یادگیری ماشین، الگوریتم جنگل تصادفی.

نام نویسنده مسئول: دکتر محمد مهدی فخاریان

ایمیل نویسنده مسئول: fakharian@fmgarmsar.ac.ir

تاریخ ارسال مقاله: ۱۴۰۲/۰۶/۱۷

تاریخ(های) اصلاح مقاله: ۱۴۰۲/۰۹/۱۸

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۲/۱۰/۲۵

### ۱- مقدمه

پارامترها برای بهینه‌سازی پارامترهای مهم، برای محققان امری دشوار است. جاذب‌هایی که با در نظر گرفتن این عوامل طراحی می‌شوند، اغلب از نظر زمانی پرهزینه هستند و تعیین اینکه آیا پارامترهای ساختاری به مقادیر بهینه خود رسیده‌اند یا خیر، بسیار دشوار است.

در این مقاله، تکنیک یادگیری ماشین<sup>۶</sup> (ML) با طراحی جاذب فراسطی ترکیب شده است. تکنیک ML را می‌توان برای شناسایی و پیش‌بینی رفتار پارامترهای مختلف سیستم‌های شبکه‌ای، الکترونیکی، فوتونیک و غیره به کار برد [۱۵]. همچنین از ML برای طراحی فرامواد برای انطباق ویژگی‌های هدف، انتخاب مواد پایه و فرآیند ساخت نیز استفاده نمود [۱۶]. قبلاً گزارش شده که چگونه ML دسترسی به شبیه‌سازی‌های ضروری را امکان‌پذیر می‌کند تا به سطوح یکسانی از دقت با روش‌های گوناگون دست یابد اما صدها برابر سریعتر باشد [۱۷-۱۹]. به عنوان نمونه، در [۱۸]، یک جاذب فراسطی پیچیده مبتنی بر هرم و یک جاذب فراسطی پیچیده مبتنی بر هرم معکوس با استفاده از روش ML برای پیش‌بینی پهنای باند جذب در باند THz ارائه شده است. همچنین یک روش جدید برای طراحی جاذب فراسطی گرافن طرح‌دار با ترکیب الگوریتم‌های ML، در [۱۹] ارائه شده است. اما، از طریق بهینه‌سازی طراحی مبتنی بر شبیه‌سازی، در این مطالعه یک نوع جاذب فراسطی ساده (با نرخ جذب بیش از ۹۹٪) پیشنهاد شده است. برای بررسی وابستگی جذب، تجزیه و تحلیل پارامتری با استفاده از برخی پارامترهای ساختاری انجام شده

در چند دهه گذشته، فراسطح‌ها<sup>۱</sup>، به عنوان معادل دو-بعدی فرامواد<sup>۲</sup>، قادرند فرکانس، فاز، دامنه و پلاریزاسیون امواج الکترومغناطیسی (EM) را آزادانه دستکاری کنند [۱-۶]. این سطوح یک کنترل بی‌سابقه برای برهم کنش نور- ماده<sup>۳</sup> ارائه می‌دهد، به گونه‌ای که توسعه سریع را در جاذب‌های EM، میکروولت‌ها، فناوری هولوگرافی، سیستم‌های پیچیده پردازش سیگنال، رمزگذاری اطلاعات و سایر کاربردها فراهم کرده است [۷-۸]. در میان آنها، جاذب‌های EM فراسطی دارای کاربردهای بی‌سیم مهمی هستند، به ویژه در باند ترهترز (THz)، از جمله در حوزه رادار و شناسایی اهداف، ارتباطات پهن باند، تشخیص اشیاء خطرناک و غیره [۹-۱۱]. در مقایسه با ساختارهای جاذب کلاسیک همچون سالزبری<sup>۴</sup> یا صفحات جاومن<sup>۵</sup>، جاذب‌های فراسطی از نظر وسیع بودن پهنای باند، ضخامت بسیار نازک و استحکام زاویه‌ای مزایای زیادی داشته و بهتر می‌توانند استانداردهای بالای "سبک، نازک و عریض" را برآورده کنند.

هنگام طراحی یک ساختار جاذب فراسطی، محققان معمولاً پارامترهای ساختار را بر اساس تجربه تنظیم می‌کنند تا پارامترهای بهینه ساختار را به دست آورند. فرآیند جذب امواج EM فراسطی، معمولاً با تطبیق امپدانس مختلط [۱۲] و فرآیندهای تحریک میدان الکتریکی [۱۳-۱۴] همراه است. اما، طراحی ساختارها بر اساس این پدیده‌های فیزیکی و تحلیل ارتباطات ذاتی بین

<sup>4</sup> Salisbury

<sup>5</sup> Jaumann screens

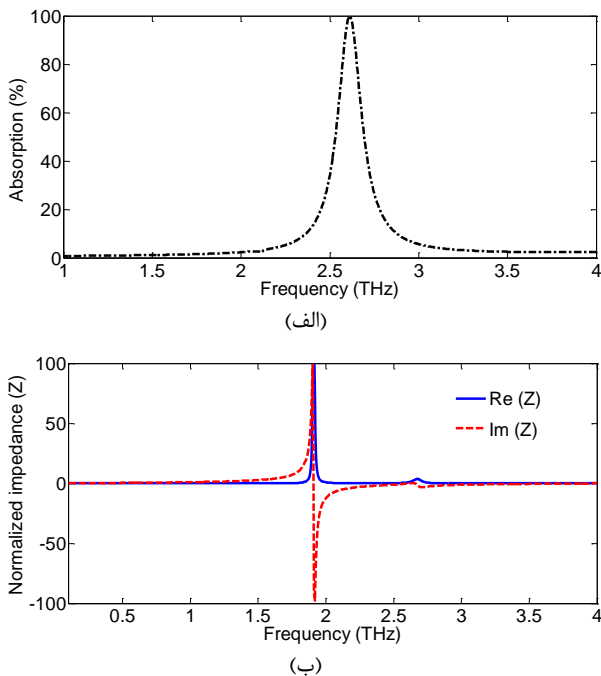
<sup>6</sup> Machine Learning (ML) technique

<sup>1</sup> Metasurfaces

<sup>2</sup> Metamaterials

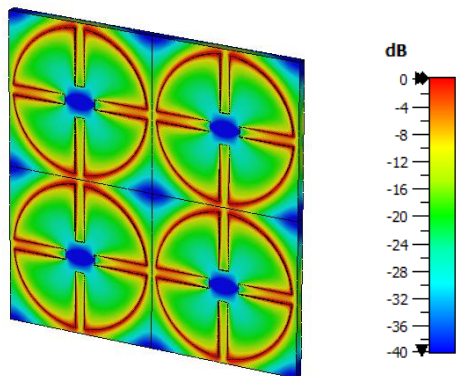
<sup>3</sup> Light-matter interaction

مطابق آنچه در بخش ۲ گفته شد، با فرض  $S_{21} = 0$ ، جذب معادل،  $A = 1 - |S_{11}|^2$  است. از آنجایی که،  $S_{11} = (Z_{in} - Z_0) / (Z_{in} + Z_0)$ ، که در آن امپدانس ورودی ساختار و  $Z_0$  امپدانس مشخصه فضای آزاد است، وقتی  $Z_{in} = Z_0$  است، جذب کامل می‌تواند به دست آید. همانطور که در شکل ۲ (ب) نشان داده شده، امپدانس به دست آمده برابر  $1.09 + j0.09$ ، در فرکانس  $2/6$  تراهرتز است. در نتیجه، جذب ساختار کمتر از ۱۰٪ است زیرا امپدانس ورودی ساختار هرگز با امپدانس مشخصه فضای آزاد یکسان نخواهد بود.



شکل ۲- (الف) طیف جذب و (ب) امپدانس نرمالیزه حقیقی و موهومی ساختار پیشنهادی.

برای درک بهتر مکانیسم جذب، توزیع میدان الکتریکی در فرکانس  $2/6$  تراهرتز تجزیه و تحلیل شده است. همانطور که در شکل ۳ نشان داده شده، توزیع‌های میدان الکترونیکی در لبه‌های شکاف و پج متمرکز شده‌اند. توزیع میدان الکترونیکی را می‌توان در دو طرف داخلی و خارجی پج به دلیل ترکیب ساختار رزونانسی با شکاف‌های لبه‌ای، همانطور که در شکل نشان داده شده است، یافت.

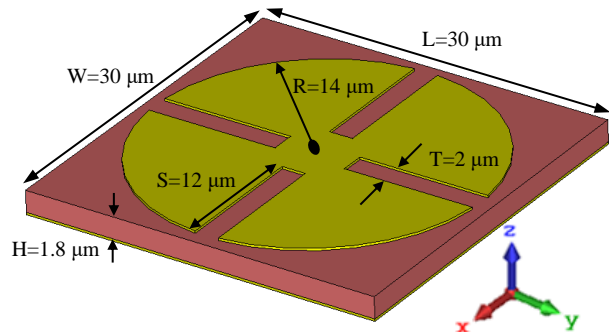


شکل ۳- توزیع میدان الکتریکی بر روی صفحه بالایی در فرکانس  $2/6$  تراهرتز

است. ساختار پیشنهادی دارای طراحی ساختاری ساده، ضخامت بسیار کم و ابعاد کوچک است که برای کاربردهای مختلف بسیار مفید است. همچنین پارامترهای ساختاری ایده‌آل مرتبط، با استفاده از الگوریتم جنگل تصادفی<sup>۷</sup> (RF) آموزش و پیش‌بینی شده است. یافته‌های این تحقیق یک رویکرد جدید برای طراحی دقیق سیستم‌های جاذب، بازتاب و انتقال امواج EM پیچیده ارائه داده است.

## ۲- طراحی و شبیه‌سازی

شکل ۱ یک نمای پرسپکتیو از سلول واحد جاذب فراسطوحی سه لایه نشان می‌دهد. لایه فلزی بالایی از یک پج دایروی شکل با چهار شکاف کناری تشکیل شده، در حالی که لایه پایینی از یک صفحه فلزی پیوسته تشکیل شده است و هر دو لایه از جنس طلا با رسانایی  $4.09 \times 10^7$  S/m و ضخامت  $0.2$  میکرومتر ساخته شده‌اند. لایه میانی از یک سیلیکون دی‌اکسید با ثابت دی الکتریک  $3/8$  تشکیل شده است. پارامترهای ابعادی بهینه‌شده این ساختار فراسطوحی در همان شکل ۱، نشان داده شده است. این پارامترهای هندسی با تکنیک نگاشت پارامترهای پراکندگی فراسطوحی بر روی توابع پذیرفتاری مغناطیسی و تانسور سطحی الکتریکی سنتز می‌شوند و با بهینه‌سازی دقیق تنظیم می‌گردند [۲۰]. در فرکانس عملکرد، بزرگترین بعد سلول واحد و ضخامت آن به ترتیب  $0.26 \lambda$  و  $0.16 \lambda$  است. نرخ جذب معادل  $A = 1 - |S_{11}|^2 - |S_{21}|^2$  است، که در آن  $S_{11}$  و  $S_{21}$  به ترتیب نشان‌دهنده ضرایب بازتاب و انتقال هستند. حداکثر جذب، هنگامی حاصل می‌شود که  $S_{11}$  و  $S_{21}$  به صفر برسند. ضریب انتقال را می‌توان صفر در نظر گرفت ( $S_{21} = 0$ )، زیرا ضخامت صفحه زمین بیشتر از عمق پوستی است. علاوه بر این، سایر پارامترهای هندسی مانند ضخامت و ابعاد پج طلا باید به منظور کاهش ضریب بازتاب بهینه شوند.



شکل ۱- نمای پرسپکتیو سلول واحد و پارامترهای جاذب فراسطوحی پیشنهادی

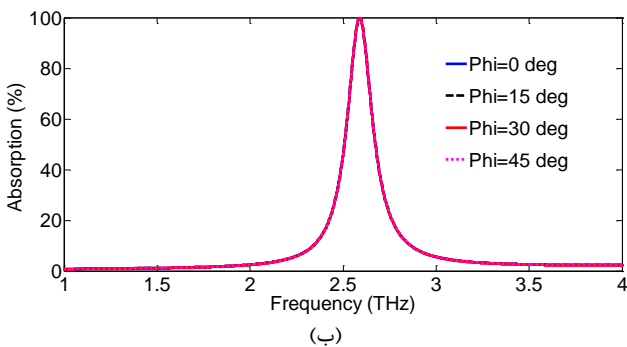
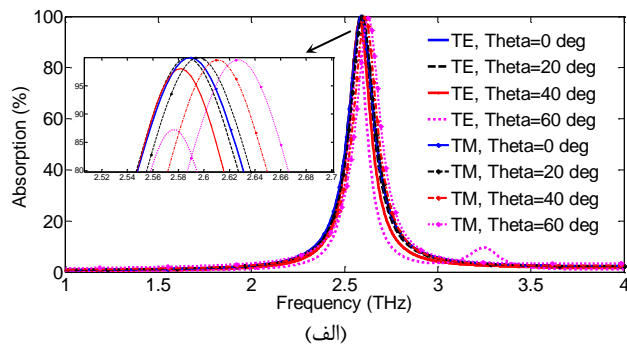
ساختار پیشنهادی با استفاده از نرم افزار CST Microwave Studio (نسخه ۲۰۱۹) با پورت متناوب Floquet در جهت z و شرایط مرزی متناوب در راستای x و y شبیه‌سازی شده است. در طول شبیه‌سازی، امواج EM که در امتداد محور y قطبی شده‌اند، اغلب بر روی سطح جاذب در امتداد محور z برخورد می‌کنند.

## ۳- نتایج و بحث‌های مربوطه

همانطور که در شکل ۲ (الف) نشان داده شده، ساختار پیشنهادی دارای یک پیک جذب در فرکانس  $2/6$  تراهرتز با ضرایب جذب نسبتاً کامل  $99/8$  درصد است. برای رسیدن به جذب کامل، امپدانس ساختار باید با امپدانس مشخصه فضای آزاد ( $Z_0 = 376.73 \Omega$ ) برابر باشد، یعنی امپدانس نرمالیزه شده حقیقی و موهومی باید به ترتیب نزدیک به یک و صفر باشند [۲۱]. چرا که

<sup>7</sup> Random Forest (RF) algorithm

z و خط اتصال مبدا و نقطه است. همانطور که از شکل ۵ (الف) قابل مشاهده است، حداقل بازده جذب تحت زوایای برخورد مایل، برای مد TE در زاویه ۶۰ درجه رخ داده و معادل ۸۷ درصد است که برای کاربردهای واقعی قابل قبول است. کاهش نرخ جذب نیز به این دلیل است که بروز زاویه برخورد مایل بیشتر، منجر به افزایش انعکاس موج EM می‌شود. همینطور از شکل ۵ (ب) مشاهده می‌شود که ساختار به واسطه تقارن تحت مدهای مختلف و تابش نرمال به زاویه پلاریزاسیون حساس نیست و این مفهوم را منتقل می‌کند که این ساختار تحت تأثیرات مختلف، مستقل از زوایای پلاریزاسیون است.



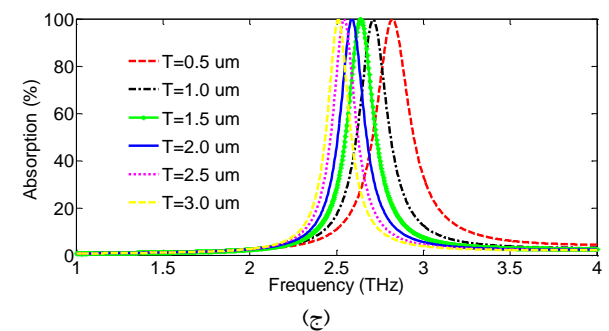
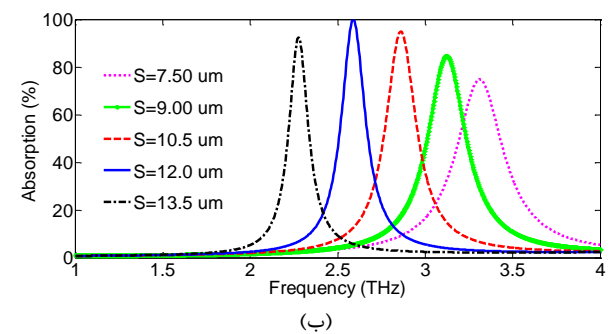
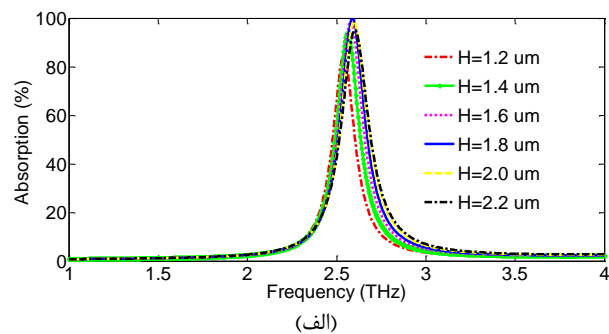
شکل ۵- جذب ساختار پیشنهادی برای الف) برخورد موج نرمال و مایل برای هر دو مد TE و TM و ب) برخورد موج نرمال تحت زوایای مختلف پلاریزاسیون در مد TE

اگرچه در این پژوهش به دلیل محدودیت‌های فعلی در اندازه‌گیری طیف جذب در باند THz، فقط شبیه‌سازی ساختار ارائه شده، اما امکان ساخت و اندازه‌گیری طرح پیشنهادی در آینده، وجود دارد. برای ساخت طرح، دی-الکترونیک با ضخامت  $H=1.8 \mu\text{m}$  با پوشش طلا در دو طرف، می‌تواند توسط روش لایه نشانی اسپاترینگ یا دستگاه اواپراتور پرتو الکترونیکی انباشت شود [۲۲]. سپس می‌توان اندازه‌گیری طرح را توسط یک سیستم طیف‌سنجی دامنه زمانی THz انجام داد.

#### ۴- پیش‌بینی جذب ساختار با استفاده از تکنیک یادگیری ماشین

در این بخش، هدف استفاده از تکنیک ML برای فرآیند شبیه‌سازی است. به طوری که چگونه مدل‌های رگرسیونی در ML می‌توانند زمان و منابع مورد نیاز برای شبیه‌سازی طراحی جذب را به طور موثری کاهش دهند. تحلیل رگرسیونی یک رویکرد موثر برای تعیین مقادیر پارامترهای وابسته بر اساس مقادیر پارامتر مستقل است. در این مقاله، فرکانس یک پارامتر مستقل در طراحی جذب است، در حالی که نرخ جذب یک پارامتر وابسته است. غالباً فرآیند طراحی یک ساختار پیچیده، زمان و منابع بیشتری را برای شبیه‌سازی می‌طلبد. این موارد را می‌توان به طور موثر با استفاده از روش‌های ML برای

همان‌طور که در شکل ۴ (الف)، (ب) و (ج) نشان داده شده، تجزیه و تحلیل پارامتری با ضخامت زیرلایه (H)، طول (S) و عرض (T) شکاف سلول واحد انجام شده تا تاثیر آنها بر پاسخ جاذب مشخص شود. کاملاً از شکل ۴ (الف) مشهود است که پاسخ جذب با کاهش H، به فرکانس‌های پایین‌تر سوق می‌یابد، در حالی که میزان نرخ جذب نیز تا حدودی تقلیل دارد. بالاترین نرخ جذب برای ضخامت ۱/۸ میکرومتر به دست آمده است. افزایش ضخامت همان‌طور که در نتیجه ارائه شده باعث بهبود جذب می‌شود، اما پس از یک نقطه بهینه، ضخامت زیاد باعث افزایش خاصیت اندوکتانس و کاهش نرخ جذب می‌شود. در شکل ۴ (ب) قابل مشاهده است که با افزایش طول شکاف‌ها، فرکانس جذب به میزان قابل توجهی کاهش می‌یابد، در حالی که نرخ جذب با این افزایش به یک نقطه بهینه افزایشی رسیده و سپس کاهشی می‌شود. در شکل ۴ (ج) نیز قابل مشاهده است که افزایش عرض شکاف نیز منجر به کاهش فرکانس جذب شده، در حالی که در نرخ جذب کاملاً بی‌تاثیر است.



شکل ۴- پاسخ جاذب در پارامترهای مختلف (الف) ضخامت زیرلایه (H) از ۱/۲ تا ۲/۲ میکرومتر، (ب) طول شکاف (S) از ۷/۵ تا ۱۳/۵ میکرومتر و (ج) عرض شکاف (T) از ۰/۵ تا ۳ میکرومتر

همچنین، تأثیر زاویه برخورد ( $\theta$ ) از ۰ تا ۶۰ درجه در مدهای  $TE^0$  و  $TM^0$  و زاویه پلاریزاسیون ( $\Phi$ ) از ۰ تا ۴۵ درجه) بر عملکرد جذب ساختار پیشنهادی در شکل ۵ مورد بررسی قرار گرفته است. در مختصات کروی  $\Phi$  همان زاویه‌ای است که در مختصات قطبی استفاده می‌شود و  $\theta$  زاویه بین محور

<sup>9</sup> Transverse Magnetic

<sup>8</sup> Transverse Electric

در مقایسه با سایر الگوریتم‌ها، الگوریتم رگرسیون RF می‌تواند از تصادفی بودن (درخت تصمیم و متغیرهای مشخصه به‌طور تصادفی تولید شده)، همبستگی بین هر درخت تصمیم را به حداقل برساند، و دقت پیش‌بینی نرخ جذب و پارامترهای ساختاری مربوطه را بهبود بخشد.

#### ۴-۲- ساخت مجموعه داده اصلی

همانطور که در بخش ۳ مشاهده شد، ابعاد شکاف و ضخامت لایه دی-الکتریک تأثیر زیادی بر نرخ جذب ساختار پیشنهادی دارند، بنابراین پارامترهای ساختاری مربوطه به عنوان متغیرهایی برای پیش‌بینی بهینه استفاده می‌شوند. در اینجا، روند ساخت مجموعه داده اصلی ارائه شده است:

گام اول: بر اساس مدل‌سازی شبیه‌سازی با روش اجزای محدود<sup>۱۳</sup> FEM، سه پارامتر ساختاری H، S و T به عنوان متغیرهای مشخصه مدل رگرسیون RF استفاده می‌شوند.

گام دوم: طیف جذب  $A(\omega)$  را از مانیتور خارج کرده و ۲۰ مجموعه داده را به طور تصادفی در محدوده پارامترهای ساختاری انتخاب کرده تا در مجموع ۲۰ طیف جذبی به دست آید. از شکل ۴، محدوده مقادیر و حداقل دقت برای هر پارامتر ساختاری قابل مشاهده است. (محدوده پارامترهای ساختاری با سعی و خطا در طول مدل‌سازی شبیه‌سازی FEM تعیین شده‌اند).  
گام سوم: سپس مقادیر نرخ جذب غیر موثر (کمتر از ۰.۹۰٪)، جذب موثر (بیش از ۰.۹۰٪) و جذب کامل (بیش از ۰.۹۸٪) برای ساخت مجموعه داده اصلی به دست می‌آید.

#### ۴-۳- روش مدل‌سازی RF

در مدل RF، مجموعه‌ای از درختان تصمیم رگرسیون ساخته شده است. پیش‌بینی‌های درختان برای به دست آوردن پیش‌بینی نهایی با محاسبه میانگین حسابی جمع‌آوری می‌شوند که برای ادغام نتایج هر درخت رگرسیون استفاده می‌شود، همانطور که در معادله ذیل نشان داده شده است [۲۶]:

$$\text{predicted output} = \sum_{j=1}^n RF_j(x) \quad (1)$$

که در آن x مقدار پارامتر مستقل و n نشان دهنده تعداد درختان تصمیم است. پس از تولید RF، درخت‌های تصمیم تولید شده در یک مدل رگرسیونی از RF تشکیل می‌شوند و اثر رگرسیون با استفاده از داده‌های OOB برای ارزیابی اثربخشی پیش‌بینی، مورد بررسی قرار می‌گیرد. چندین شاخص عملکرد می‌توانند دقت مدل رگرسیون آموزش دیده را بررسی کنند، که شامل امتیاز مربع  $R^2$  (R<sup>2</sup>)، امتیاز مربع R تنظیم شده<sup>۱۵</sup> (Adj-R<sup>2</sup>S)، خطای مطلق انتگرال<sup>۱۶</sup> (IAE)، میانگین درصد خطای مطلق<sup>۱۷</sup> (MAPE) و میانگین مربع خطا<sup>۱۸</sup> (MSE) هستند. از این میان، امتیاز R<sup>2</sup> اغلب از معیارهایی است که برای ارزیابی دقیق پیش‌بینی نتایج توسط یک مدل رگرسیون آموزش‌دیده استفاده می‌شود. این شاخص را می‌توان با استفاده از معادله ذیل محاسبه نمود:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i^{OOB})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (2)$$

که در آن،  $y_i$  مقدار واقعی متغیر وابسته در داده‌های OOB است،  $\hat{y}_i^{OOB}$

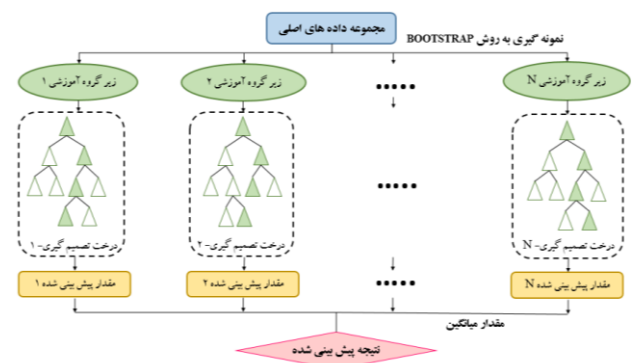
مسائل رگرسیون مدیریت نمود و می‌توان مقادیر پارامترهای از دست رفته را نیز شناسایی کرد. از سه گام زیر می‌توان برای رفع این مسائل با استفاده از روش‌های تحلیل رگرسیون مبتنی بر ML استفاده نمود:  
گام اول: طراحی جاذب را با افزایش مقدار اندازه گام فرکانس، شبیه‌سازی نمود.

گام دوم: با استفاده از داده‌های شبیه‌سازی شده، مدل رگرسیون مبتنی بر ML را آموزش داد.

گام سوم: پیش‌بینی جذب فرکانس‌های میانی یا از دست رفته را با استفاده از مدل رگرسیون آموزش داده شده، محقق نمود.

#### ۴-۱- مدل رگرسیون الگوریتم جنگل تصادفی (RF)

RF یک الگوریتم ML است که پیش‌بینی‌های مکرری را برای یک پدیده معین با ساخت تعداد زیادی درخت تصمیم ایجاد کرده و به طور گسترده‌ای در مدل‌های پیش‌بینی رگرسیون مختلف استفاده می‌شود [۲۳]. شکل ۶ نمودار شماتیک و فرآیند تولید RF را نشان می‌دهد. اولاً، نمونه‌گیری بوت استرپ<sup>۱۰</sup> برای انتخاب N مجموعه نمونه (پارامتر n\_estimators) از مجموعه آموزشی اصلی به عنوان مجموعه آموزشی فرعی هر درخت تصمیم استفاده می‌شود که در آن N تعداد درخت‌های تصمیم است. هر نمونه، اندازه مجموعه آموزشی اصلی را دارد و می‌توان آنها را بیش از یک بار استخراج نمود. در حالی که داده‌هایی که نبودند از داده‌های n خارج از کیسه<sup>۱۱</sup> (OOB) به عنوان مجموعه داده آزمون برای ارزیابی اثر رگرسیون انتخاب می‌شوند. ثانیاً، بر اساس مجموعه آموزش فرعی، N مدل درخت تصمیم ایجاد می‌شود. برای هر درخت تصمیم، یک سیکل پیوسته از a تا b برای رشد آن استفاده می‌شود تا هنگامی که گره برگ Lmin کوچکترین اندازه باشد. به طوری که a به انتخاب تصادفی m متغیرهای مشخصه از همه متغیرها اشاره می‌کند و b نشان‌دهنده انتخاب بهترین متغیرها و نقاط تقسیم از m متغیرهای مشخصه است. در نهایت، درخت‌های تصمیم در یک RF ادغام می‌شوند و میانگین نتایج پیش‌بینی درخت‌های تصمیم N به عنوان نتیجه پیش‌بینی استفاده می‌شود. الگوریتم RF را می‌توان به عنوان یک پیش‌بینی‌کننده قوی در نظر گرفت که توسط چندین درخت تصمیم ضعیف ادغام شده است، که برخی از خطاهای تصادفی را جبران می‌کند و تحمل بهتری نسبت به نقاط پرت<sup>۱۲</sup> و نویز فراهم می‌کند [۱۸، ۲۴-۲۵].



شکل ۶- شماتیک و نحوه عملکرد الگوریتم RF

در فرآیند طراحی جاذب پیشنهادی، ساختار دارای تعداد نسبتاً زیادی پارامترهای ساختاری است و هر کدام از آنها با یک متغیر مشخصه مطابقت دارد.

<sup>15</sup> Adjusted R Square Score

<sup>16</sup> Integral absolute error

<sup>17</sup> Mean Absolute Percentage Error

<sup>18</sup> Mean Squared Error

<sup>10</sup> Bootstrap sampling

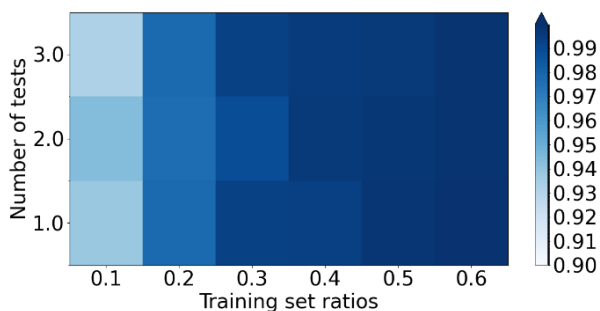
<sup>11</sup> n out-of-bag (OOB)

<sup>12</sup> Outliers

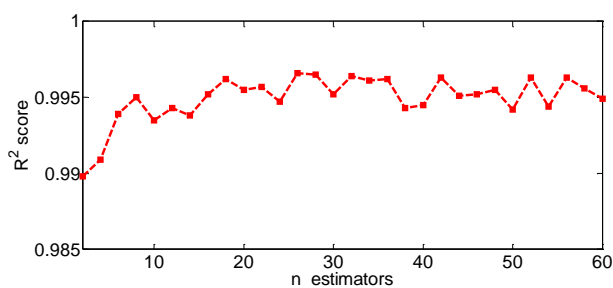
<sup>13</sup> Finite Element Method

<sup>14</sup> R-Square Score

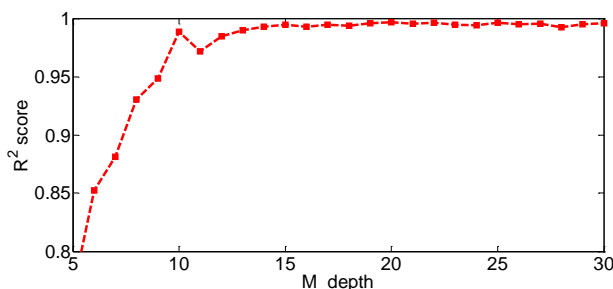
الگوریتم RF می‌تواند به طور موثر زمان طراحی را کاهش دهد و به پیش‌بینی‌های بسیار دقیق پارامترهای ساختاری دست یابد.



شکل ۷- اثر بخشی پیش‌بینی‌کننده (امتیاز  $R^2$ ) در سه بار آزمون تکراری تحت مدل رگرسیون در نسبت‌های مختلف مجموعه آموزشی



(الف)



(ب)

شکل ۸- منحنی یادگیری امتیاز  $R^2$  به ازای (الف) مقادیر  $n\_estimators$  و (ب) مقادیر  $Max\_depth$

شکل ۹ نمودارهای پراکندگی مقادیر جذب پیش‌بینی‌شده توسط مدل RF به ازای مقادیر جذب شبیه‌سازی شده برای یکی از پارامترها مانند ابعاد مختلف زیرلایه (H)، نشان می‌دهد. ضخامت زیرلایه از ۱/۴ میکرومتر تا ۲/۲ میکرومتر برای مقادیر مختلف  $n\_estimators$  در نسبت آموزشی ۴۰٪ مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که وقتی  $n\_estimators = 20$  باشد، مقدار پیش‌بینی‌شده به مقدار واقعی به طور قابل قبولی نزدیک می‌شود. جهت درک کمی نتایج، امتیاز  $R^2$  هر کدام از حالت‌ها در شکل نیز مشخص شده است.

در نهایت، مقایسه جاذب پیشنهادی نسبت به سایر کارهای مشابه اخیر که از روش RF بهره برده‌اند، در جدول ۱ نشان داده شده است. مقایسه برای محدوده فرکانس عملکرد، میانگین جذب، عدم حساسیت پلاریزاسیون، پایداری زاویه‌ای و امتیاز  $R^2$  ارائه شده است. مقایسه به وضوح نشان می‌دهد که کار ارائه‌شده پاسخ جذب کارآمدتری را نشان می‌دهد. علاوه بر این، از مدل رگرسیون RF مبتنی بر یادگیری ماشین با حداکثر امتیاز  $R^2$  برای پیش‌بینی مقادیر جذب استفاده شده است. این رویکرد منابع و زمان مورد نیاز برای فرآیند شبیه‌سازی را با دقت بالایی کاهش می‌دهد.

پیش‌بینی RF از مقادیر پیش‌بینی‌شده داده‌های OOB است و  $\bar{Y}$  نشان‌دهنده میانگین نمونه است. در مرحله ارزیابی، مقدار هدف پیش‌بینی‌شده مقداری است که توسط مدل رگرسیون پیش‌بینی می‌شود و مقدار هدف واقعی مقداری است که توسط فرآیند شبیه‌سازی ایجاد شده است.

#### ۴-۴- بهینه‌سازی مدل RF

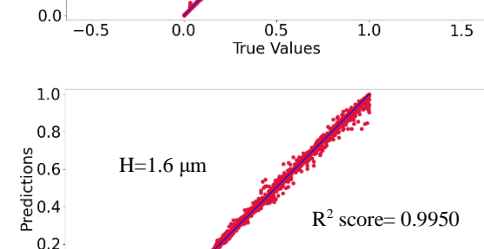
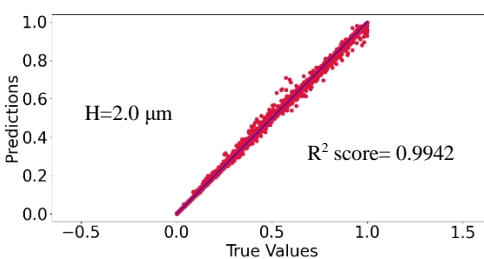
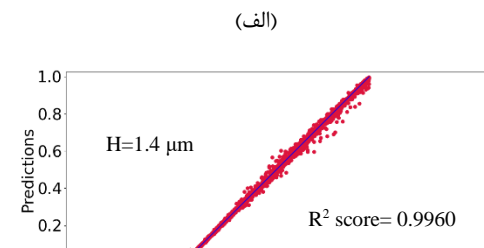
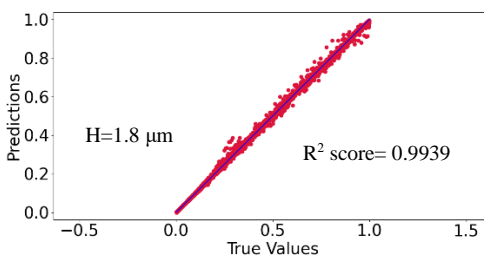
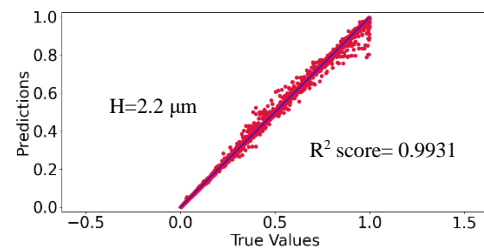
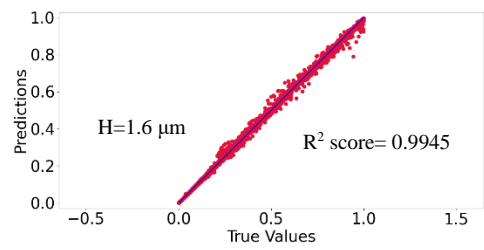
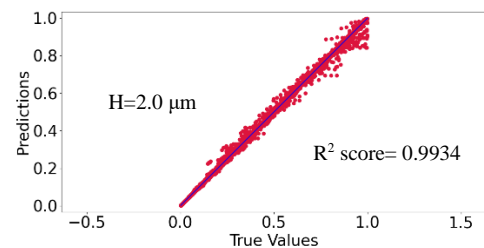
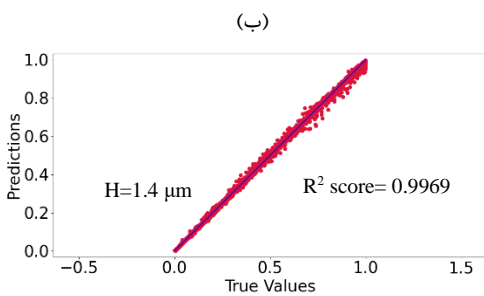
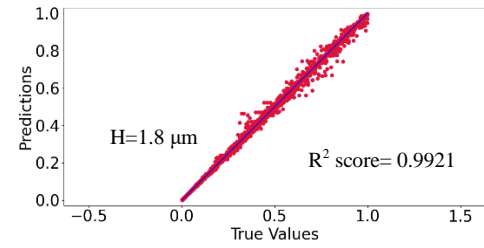
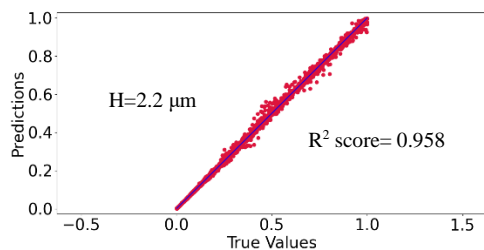
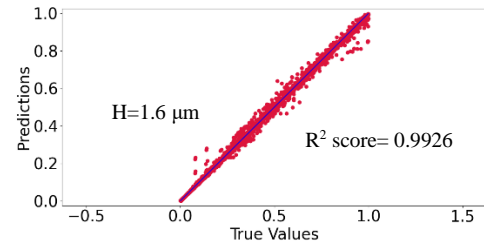
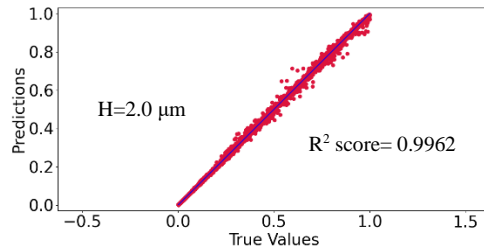
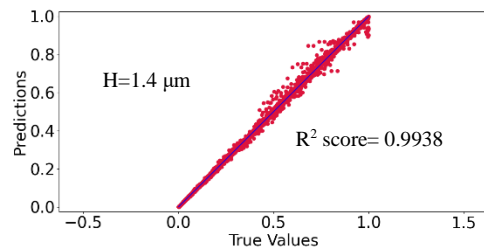
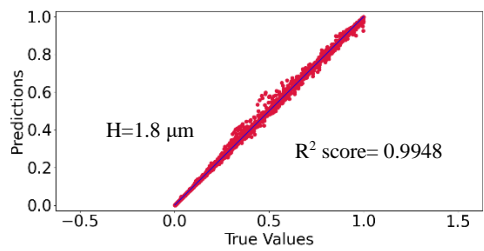
در ابتدا امتیاز  $R^2$ ، در نسبت‌های مختلف مجموعه آموزشی<sup>۱۹</sup>، آزمایش شده و مدل رگرسیون سه بار در نسبت‌های ۰/۱ تا ۰/۶ برای کاهش خطا مورد آزمایش قرار گرفته‌اند. شکل ۷ نتایج به‌دست‌آمده را نشان می‌دهد، که می‌توان از نقشه حرارتی مشاهده کرد که هر چه نسبت مجموعه آموزشی بزرگ‌تر باشد، امتیاز  $R^2$  بیشتر می‌شود. در نسبت مجموعه آموزشی ۰/۴، میانگین امتیاز  $R^2$  مدل رگرسیون به ۰/۹۹۵۵ رسیده و بنابراین نسبت مجموعه آموزشی در فرآیند بهینه‌سازی مدل‌های بعدی به ۰/۴ تنظیم می‌شود. اگر مدل رگرسیون در پیش‌بینی مقادیر جذب برای ۰/۴ مؤثر باشد، نشان می‌دهد که یک مدل RF آموزش دیده با ۴۰ درصد رکوردهای شبیه‌سازی، می‌تواند مقادیر جذب را برای ۶۰ درصد باقی‌مانده رکوردها پیش‌بینی کند و بنابراین ۶۰ درصد در زمان شبیه‌سازی و منابع صرفه‌جویی کند. وحدت رویکرد مقادیر امتیاز  $R^2$ ، دقت پیش‌بینی بالا با حداقل خطای پیش‌بینی را نشان می‌دهد [۲۹-۲۷]. علاوه بر این، تعداد درخت تصمیم ( $n\_estimators$ ) یکی از فرآیندهای<sup>۲۰</sup> هست که بر دقت مدل تأثیر می‌گذارد. هنگامی که  $n\_estimators$  کوچک هستند، اثرات آنها بر دقت مدل RF معمولاً یک جهته است (یعنی هر چه  $n\_estimators$  بزرگ‌تر باشد، امتیاز  $R^2$  بیشتر است). در عین حال، هر مدل الگوریتمی دارای یک مرز تصمیم است و دقت RF هنگامی که  $n\_estimators$  به مقدار معینی می‌رسد، به یک مقدار ثابت سوق می‌یابد. برای به دست آوردن بالاترین امتیاز  $R^2$ ،  $n\_estimators$  به طور پیوسته تنظیم شده تا منحنی یادگیری با ۶۰ سیکل به دست آید. امتیاز  $R^2$  برای هر سیکل به دست آمده و به صورت گرافیکی ارائه شده تا یافتن مقادیر پارامتر بهینه را تسهیل کند. شکل ۸ (الف) منحنی یادگیری  $n\_estimators$  به ازای امتیاز  $R^2$  نشان می‌دهد. از این منحنی می‌توان دریافت هنگامی که  $n\_estimators$  مدل رگرسیون بیش از ۲۰ باشد، تمایل به صاف بودن نوسانی دارند. بنابراین با انتخاب ۲۰ به عنوان  $n\_estimators$  در RF، بیشتر حداکثر عمق درخت ( $Max\_depth$ ) نیز برای ارزیابی دقت، قابلیت اطمینان و پایداری مدل پیش‌بینی، مورد استفاده قرار می‌گیرد. شکل ۸ (ب) نیز منحنی یادگیری  $Max\_depth$  را به ازای امتیاز  $R^2$  نشان می‌دهد، وقتی  $Max\_depth$  بیشتر باشد، مقدار امتیاز  $R^2$  بالاتر است. هنگامی که  $Max\_depth$  به ۱۵ می‌رسد، اثر بخشی پیش‌بینی RF به یک مقدار ثابت تمایل دارد و بنابراین ۱۵ به عنوان  $Max\_depth$  برای مدل انتخاب می‌شود. علاوه بر این، برای کاهش بایاس تعمیم در RF، پارامترهای  $min\_samples\_leaf$  و  $min\_samples\_split$  بر روی ۲ و ۱ به ترتیب تنظیم شده‌اند.

#### ۴-۵- پیاده‌سازی پیش‌بینی جذب با الگوریتم RF

ماژول پایتون scikit-learn برای پیاده‌سازی RF استفاده شده، که پیچیدگی بالاتری در مقایسه با الگوریتم‌های دیگر دارد، به طوری که پیچیدگی زمان آموزش شامل  $n\_estimators$  نسبت مجموعه آموزشی و متغیرهای مشخصه است، در حالی که پیچیدگی زمان پیش‌بینی شامل نسبت مجموعه آموزشی و  $Max\_depth$  است. پیچیدگی فضای زمان اجرا شامل نسبت مجموعه آموزشی و نقاط تقسیم می‌شود. در مقایسه با فرآیندهای طراحی مصنوعی سنتی، که می‌تواند روزها یا حتی هفته‌ها برای طراحی‌های پیچیده طول بکشد، مدل

<sup>20</sup> Hyperparameters

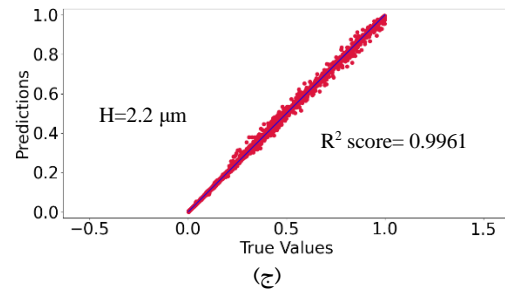
<sup>19</sup> Training set ratio





assisted metamaterials", *Optics Express*, vol. 29, no. 5, pp. 7666-7679, 2021.

- [3] B. Tang, Y. Ren, "Tunable and switchable multi-functional terahertz metamaterials based on a hybrid vanadium dioxide-graphene integrated configuration", *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 24, no. 14, pp. 8408-8414, 2022.
- [4] Z. Tang, L. Li, H. Zhang, J. Yang, J. Hu, X. Lu, Y. Hu, S. Qi, K. Liu, M. Tian, J. Jin, Z. Zhang, H. Lin, Y. Huang, "Multifunctional Janus metasurfaces achieving arbitrary wavefront manipulation at dual frequency", *Materials & Design*, vol. 223, 111264, 2022.
- [5] Z. Zhang, W. Xiang Jiang, X. Ge Zhang, W. Kang Cao, L. Bai, C.W. Qiu, T. Jun Cui, "Efficient digital metasurfaces for full-space manipulation of acoustic waves with low crosstalk between reflection and transmission", *Materials & Design*, vol. 229, 111903, 2023.
- [6] B. Rezaee Rezvan, M. Yazdi, S. E. Hosseininejad, "A 2-bit programmable metasurface for dynamic beam steering applications", *Tabriz Journal of Electrical Engineering*, vol. 51, no. 2, pp. 277-284, 2021.
- [7] W. Liu, Z. Song, "Terahertz absorption modulator with largely tunable bandwidth and intensity", *Carbon*, vol. 174, pp. 617-624, 2021.
- [8] X. Luo, M. Pu, Y. Guo, X. Li, X. Ma, "Electromagnetic architectures: Structures, properties, functions and their intrinsic relationships in subwavelength optics and electromagnetics", *Advanced Photonics Research*, vol. 2, no. 10, 2100023, 2021.
- [9] M.S. Islam, J. Sultana, M. Biabanifard, Z. Vafapour, M.J. Nine, A. Dinovitser, C.M. B. Cordeiro, B.W.H. Ng, D. Abbott, "Tunable localized surface plasmon graphene metasurface for multiband superabsorption and terahertz sensing", *Carbon*, vol. 158, pp. 559-567, 2020.
- [10] W.W. Liu, Z.Y. Song, "Terahertz absorption modulator with largely tunable bandwidth and intensity", *Carbon*, vol. 174, pp. 617-624, 2021.
- [11] M. M. Fakharian, "Design of a graphene-based multi-band metamaterial perfect absorber with polarization-insensitive ability for terahertz applications", *Journal of Modeling in Engineering*, vol. 20, no. 69, pp. 93-102, 2022.
- [12] G.C. Ma, M. Yang, S.W. Xiao, Z.Y. Yang, P. Sheng, "Acoustic metasurface with hybrid resonances", *Nature Materials*, vol. 13, no. 9, pp. 873-878, 2014.
- [13] J. Lee, M. Tymchenko, C. Argyropoulos, P.Y. Chen, F. Lu, F. Demmerle, G. Boehm, M.C. Amann, A. Alu, M.A. Belkin, "Giant nonlinear response from plasmonic metasurfaces coupled to intersubband transitions", *Nature*, vol. 511, no. 7507, pp. 65-69, 2014.
- [14] H.A. Qi, B. Tang, "An active tunable terahertz functional metamaterial based on hybrid-graphene vanadium dioxide", *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 25, no. 11, pp. 7825-7831, 2023.
- [15] M. Vasoujouybari, E. Ataie, M. Bastam, "An MLP-based deep learning approach for detecting DDoS attacks", *Tabriz Journal of Electrical Engineering*, vol. 52, no. 3, pp. 195-204, 2022.
- [16] M. A. Bessa, P. Glowacki, M. Houlder, "Bayesian machine learning in metamaterial design: Fragile becomes supercompressible", *Advanced Materials*, vol. 31, no. 48, 1904845, 2019.
- [17] V. L. Deringer, M. A. Caro, G. Csányi, "Machine learning interatomic potentials as emerging tools for materials science", *Advanced Materials*, vol. 31, no. 46, 1902765, 2019.
- [18] Z. Ding, Wei Su, Y. Luo, L. Ye, H. Wu, H. Yao, "Machine learning in design of broadband terahertz absorbers based on composite structures", *Materials & Design*, vol. 233, 112215, 2023.
- [19] Z. Ding, W. Su, Y. Luo, L. Ye, H. Wu and H. Yao, "Design of an ultra-broadband terahertz absorber based on a patterned graphene metasurface with machine learning", *Journal of Materials Chemistry C*, vol. 11, pp. 5625-5633, 2023.
- [20] K. Achouri, B. A. Khan, S. Gupta, G. Lavigne, M. A. Salem, and C. Caloz, "Synthesis of electromagnetic metasurfaces: Principles and illustrations", *EPJ Applied Metamaterials*, vol. 2, no. 12, pp. 1-11, 2015.
- [21] D. Yan, "Tunable all-graphene-dielectric single-band terahertz wave absorber", *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 52, 275102, 2019.



شکل ۹- نمودار پراکندگی مقادیر جذب پیش‌بینی شده توسط مدل RF به ازای مقادیر شبیه‌سازی شده جذب برای ضخامت‌های مختلف زیر لایه (H) برای الف)  $n\_estimators = 10$  ب)  $n\_estimators = 20$  ج)  $n\_estimators = 30$  برای نسبت آموزشی ۴۰٪.

جدول ۱- مقایسه جاذب پیشنهادی با طرح‌های قبلی

فرکانس عملکرد (THz)	میانگین جذب (%)	عدم حساسیت پلاریزاسیون	پایداری زاویه‌ای (deg)	حداقل امتیاز $R^2$	طرح
۳	۹۵	بله	۰-۶۰	۰/۹۶۷	[۱۸]
۴/۵	۹۸	بله	۰-۶۰	۰/۹۳۸	[۱۹]
۲/۶	۹۹	بله	۰-۶۰	۰/۹۹۴	این کار

## ۵- نتیجه‌گیری

به طور خلاصه، یک رویکرد جدید برای پیش‌بینی نرخ جذب بر اساس پارامترهای ساختاری برای طراحی یک جاذب فراسطحی با موفقیت آزمایش شده که بر اساس ترکیبی از شبیه‌سازی عددی و الگوریتم RF در ML است. در این تحقیق، یک جاذب فراسطحی متشکل از چهار شکاف کناری بر روی زیرلایه سیلیکون دی اکسید برای کاربردهای تراهرتز، ارائه شده است. به طوری که پیک جذب با قابلیت نرخ جذب بیش از ۹۹ درصد را می‌توان در فرکانس ۲/۶ تراهرتز یافت. با مدل رگرسیون RF، نرخ جذب ساختار با امتیاز  $R^2$  بیش از ۰/۹۹ پیش‌بینی شده است. امتیاز  $R^2$  برای  $n\_estimators = 20$  و  $Max\_depth = 15$  است که کارایی پیش‌بینی مدل RF را در تخمین مقادیر جذب در موارد مختلف آزمایش، نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد که استفاده از مدل RF برای شبیه‌سازی طراحی جاذب می‌تواند زمان شبیه‌سازی و منابع مورد نیاز را تا ۶۰ درصد کاهش دهد. علاوه بر این، ساختار جاذب پیشنهادی، دارای مزایای نازکی، عدم حساسیت پلاریزاسیون و زاویه برخورد نسبتاً پایدار است. این نتایج امکان و اثربخشی ترکیب ML با طراحی دستگاه فوتونیک را برای پیش‌بینی نرخ جذب برجسته می‌کند و راه‌های جدیدی را برای طراحی سیستم‌های پیچیده مرتبط با انتشار موج EM جاذب، بازتاب و انتقال ارائه می‌کند.

## سیاس‌گذاری

نویسنده مقاله مراتب تشکر و قدردانی خود را از دانشگاه گرمسار جهت حمایت از تحقیق حاضر ابراز می‌دارد.

## مراجع

- [1] C. Wang, H.X. Xu, Y. Wang, G. Hu, H. Luo, K. Wang, "Reconfigurable transmissive metasurface synergizing dynamic and geometric phase for versatile polarization and wavefront manipulations", *Materials & Design*, vol. 225, 111445, 2023.
- [2] Y.i. Ren, T. Zhou, C. Jiang, B. Tang, "Thermally switching between perfect absorber and asymmetric transmission in vanadium dioxide-



- using machine learning", *Progress In Electromagnetics Research M*, vol. 108, pp. 27–38, 2022.
- [27] S. K. Patel, J. Surve, V. Katkar, J. Parmar, "Machine learning assisted metamaterial-based reconfigurable antenna for low-cost portable electronic devices", *Scientific Reports*, vol. 12, pp. 1-13, 2022.
- [28] P. Jain, H. Chhabra, U. Chauhan, D. K. Singh, T. M. K. Anwer, S. H. Ahammad, M. A. Hossain, A. N. Z. Rashed, "Multiband Metamaterial absorber with absorption prediction by assisted machine learning", *Materials Chemistry and Physics*, vol. 307, 128180, 2023.
- [29] S. K. Patel, J. Parmar, V. Katkar, F. A. Al-Zahrani, K. Ahmed, "Ultra-broadband and polarization-insensitive metasurface absorber with behavior prediction using machine learning", *Alexandria Engineering Journal*, vol. 61, pp. 10379-10393, 2022.
- [22] G. Zheng, H. M. Hlenbernd, M. Kenney, G. Li, T. Zentgraf, and S. Zhang, "Metasurface holograms reaching 80% efficiency", *Nature Nanotechnol.*, vol. 10, no. 4, pp. 308-312, 2015.
- [23] B. Lariviere, D. Van den Poel, "Predicting customer retention and profitability by using random forests and regression forests techniques", *Expert Systems with Applications*, vol. 29, no. 2, pp. 472-484, 2005.
- [24] A. Prinzie, D. Van den Poel, "Random forests for multiclass classification: Random MultiNomial Logit", *Expert Systems with Applications*, vol. 34, no. 3, pp. 1721-1732, 2008.
- [25] Liu Y, Wang Y, Zhang J. "New Machine Learning Algorithm: Random Forest", *International Conference on Information Computing and Applications*, pp. 246–52, 2012.
- [26] P. Ranjan, A. Maurya, G. H. Swati Yadav, A. Sharma "Ultra-wideband CPW fed band-notched monopole antenna optimization