

基于神经网络方法预测薄膜的厚度^{*}

于丽娟¹ 朱长纯¹ 陈晓宁²

(1 西安交通大学电信工程学院电子系, 西安 710049)

(2 西安交通大学电气工程学院, 西安 710049)

摘要: 首次利用前馈三层神经网络模型, 建立了场发射薄膜的膜厚的神经网络预测模型, 用金刚石薄膜的膜厚数据进行验证。结果表明, 该模型预测的相对误差小于 6.1%。

关键词: 薄膜; 厚度; 预测; 神经网络

EEACC: 7360F; 7970; 8710; 8730

中图分类号: TN711.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-4177(2000)04-0400-04

Neural Networks Models on Thickness of Thin Film^{*}

YU Li-juan, ZHU Chang-chun and CHEN Xiao-ning

(School of Electronics and Information Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Received 12 December 1998, revised manuscript received 16 April 1999

Abstract: A neural network model for prediction the thickness of thin film is established by using of firstly the BP model taken into account the characteristic of field-emission in thin film. The data of thicknesses of diamond thin film is used to test the model. The results show that relative error of the prediction is within 6.1% and possess good forecast characteristics.

Key words: thin film; thickness; prediction; neural network

EEACC: 7360F; 7970; 8710; 8730

Article ID: 0253-4177(2000)04-0400-04

1 引言

由于金刚石薄膜具有高硬度、高熔点、热导率大、化学稳定性好、负电子亲合势等特别优异的性质, 因

* 国家自然科学基金(69676004)和教育部博士点基金(96069803)资助项目[Project Supported by National Natural Science Foundation of China under Grant No. 69676004 and by Doctoral Foundation of the State Education Ministry of China under Grant No. 96069803].

于丽娟 女, 1963 年出生, 博士生, 现从事半导体薄膜场发射方面的研究。

朱长纯 男, 1936 年出生, 博士生导师, 现从事真空微电子与微机械, 电力电子器件, 传感器等方面的研究。

1998-12-12 收到, 1999-04-16 定稿

此对其场发射特性的研究引起了人们极大的关注。目前,关于金刚石薄膜场发射特性的研究已有很多报道。金刚石薄膜不仅具有极低的场发射开启电压,而且,具有很高的场发射电流密度,因而被认为是最理想的场发射冷阴极材料。近年来成为真空微电子学领域的研究热点,并已成功地应用于场发射平板显示器。

在薄膜场发射的应用中,我们常常需要具有某一特定场发射开启电压和功函数的薄膜。薄膜厚度是决定开启电压和功函数的重要参数,因此事先预知满足特定条件的膜厚是非常重要的。场发射开启电压的大小与很多因素有关,且关系复杂。目前还不知道它们之间的密切关系,所以理论上很难根据开启电压和功函数的值计算出薄膜厚度。人工神经网络方法,作为一种新的预测方法,近年来越来越引起人们的兴趣和关注,而且在许多方面都得到了成功的应用^[1-3]。理论上已经证明,前向人工神经网络能够逼近所有的多元连续函数^[4,5]。这使得人们希望,通过对数据样本的学习,神经网络能自动地逼近那些最佳刻画样本数据规律的函数,而不必事先设想函数应具备的具体形式,从而能自动地建立预测模型并作出正确的预测。本文将前向多层神经网络的模型应用在薄膜膜厚的预测上,以金刚石为例,把薄膜的场发射开启电压和功函数作为输入,膜厚作为单输出,通过调节神经网络的权值和阈值,建立起金刚石薄膜膜厚的神经网络预测推理模式,并对已知场发射开启电压和功函数的薄膜厚度进行了预测,表明具有很好的预测性能。

2 前向多层神经网络预测模型的建立

本文将流行的一种人工神经网络模型应用于薄膜的膜厚的预测中,BP 网络预测模型如图 1 所示。

关于宽禁带半导体薄膜的场发射特性的研究,在实验方面已取得了很大的进展,但对薄膜场发射理论机制的研究还非常有限,原因在于影响薄膜场发射特性的开启电压,场发射电流的因素很多(例如:薄膜的晶格常数、晶向、晶粒尺寸、介电系数、电阻率、膜厚、功函数等等),而且这些因素之间相互作用,相互制约,因此薄膜的场发射开启电压与这些因素之间存在一个非常复杂的函数关系,所以用建立物理模型、数学求解的方法,计算其中的某一个参量的值,存在着准确建模与求解两方面的困难。人工神经网络是模拟人脑神经网络结构的新型数据处理系统,具有自学习,自适应功能,可以从大量的实验数据中直接提取隐含的有用信息,因而特别适应于解决非线性及复杂系统的问题。因此,我们可以利用前向神经网络研究薄膜场发射的开启电压与影响开启电压的诸多因素之间的非线性关系。

薄膜的任意一个物理参量(晶格常数、电阻率、介电系数、膜厚、功函数、温度等),与薄膜场发射的特征参量(开启电压、场发射电流等)和其它的物理参量之间也存在着非线性关系。若我们把已知的物理参量和特征参量作为系统的输入,未知的物理参量作为系统的输出,则其输入、输出构成一个非线性的映射。由 Kolmogorov 定理^[6],一个三层前馈(Back-Propagation, BP)神经网络,可以在任意精度内逼近任意连续映射,因此可以取 BP 网络作为预测模型的核心结构。让 BP 网络根据样本数据进行训练,网络根据输出误差不断调节权值,直至网络误差平方和收敛到所要求的目标误差为止,这时权值达到稳定,预测模型随之建立起来。让网络所表达的映射逐步逼近薄膜场发射的输入、输出之间的函数关系,并让神经网络记忆由实际经验总结的规律,这样,训练得到神经网络可以作为膜厚预测模型使用。

以金刚石薄膜的场发射为例。假设金刚石薄膜场发射开启电压和功函数只与膜厚有关,神经网络的预测模型变成两个输入一个输出的简单模式。场发射开启电压和功函数作为神经网络模型输入层节点,记为 x_1, x_2 , 预测的薄膜厚度作为输出层节点,记为 Y , 隐层节点先确定几个值,然后由数据样本进行调节。

我们用两层的前向 BP 网络代替三层的 BP 网络,设输入层为第 0 层,输出层为第 2 层,并令 $w_{jk}^{(n)}$ 为第 $n+1$ 层第 j 单元与第 n 层中第 k 单元间的连接权值,网络中各单元的输入、输出取值为某个区域 $[a, b]$ 中的

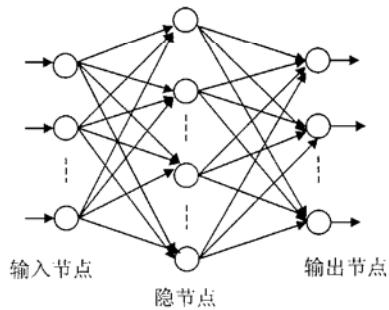


图 1 神经网络预测模型

FIG. 1 The Forecasting Model of Neural Network

连续值, 则各单元输出值的计算公式为:

$$x_j^{(n+1)} = f(\sum_k w_{jk}^{(n)} x_k^{(n)}) \quad n = 0, 1 \quad (1)$$

当选定 L 个训练样本后, 调整 $w_{jk}^{(n)}$ 的目的是使误差 E 尽可能减小, 而 E 的计算公式为:

$$E = \sum_{p=1}^L (d_p^{(p)} - x_p^{(p)(2)})^2 \quad (2)$$

其中 $d_p^{(p)}$ 为第 p 个样本输入时网络的期望输出值; $x_p^{(p)(2)}$ 为第 p 个样本输入时网络的实际输出值, $p = 1, 2, \dots, L$. 调整 $w_{jk}^{(n)}$ 的公式为:

$$w_{jk}^{(p)(n)} = w_{jk}^{(p-1)(n)} + \Delta w_{jk}^{(p)(n)}$$

其中 $\Delta w_{jk}^{(p)(n)}$ 可以按如下二式求得, 当 $n+1=2$ 时, 令

$$\delta_1^{(2)} = (d_1 - x_1^{(2)}) x_1^{(2)} (1 - x_1^{(2)}) \quad (3)$$

$$\Delta w_{jk}^{(1)} = \eta \delta_1^{(2)} x_k^{(1)} \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad (4)$$

这里 $\delta_1^{(2)}$ 可以看成是输出层的误差, 以后各层误差是将上一层误差通过网络往下传播而得, 即:

$$\delta_j^{(n)} = x_j^{(n)} (1 - x_j^{(n)}) \sum_k \delta_k^{(n+1)} w_{kj}^{(n)} \quad n = 0, 1 \quad (5)$$

$$\text{而} \quad \Delta w_{jk}^{(n)} = \eta \delta_j^{(n+1)} x_k^{(n)} \quad (6)$$

η 是学习率. 在实际应用中, 学习率的选择是一个重要问题, 在学习的初期阶段 η 应选得大些, 可使学习速度加快, 但是在临近最佳点时 η 必须相当小, 否则, 权重系数将产生反复振荡而不能收敛. 在学习中采用动量和学习率自适应调节, 从而提高了学习速度并增加了算法的可靠性. 动量法可降低网络对于误差曲面局部细节的敏感性, 有效地抑制网络陷于局部极小, 自适应调整学习率利于缩短学习时间.

3 实验与结果

利用文献[7]提供的数据, 再通过插值, 得到 19 组数据, 随机地取 15 组数据作为学习样本, 在网络模型的学习中同时调节动量系数和学习率, 两者都选得比较大或比较小时, 可以达到相同的收敛效果, 这里动量系数为 0.9, 目标误差平方和为 0.001, 在输入样本数据一定的情况下, 我们发现学习时间与隐节点的数目有关, 根据学习速度和模拟误差值的大小, 确定隐层节点数为 25 个. 图 2 表示的是神经网络训练误差变化趋势曲线(X 轴表示训练步数, Y 轴表示误差, 虚线表示目标误差), 可以看出这是一个收敛速度较快

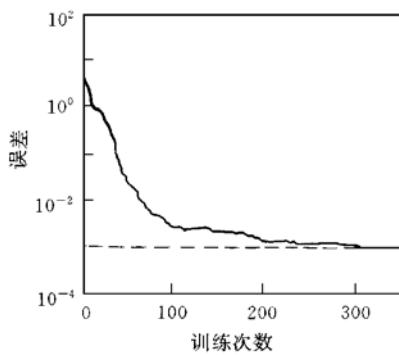


图 2 误差与训练步数之间的关系曲线

FIG. 2 The Relation of Epoch and Sum-Squared Error

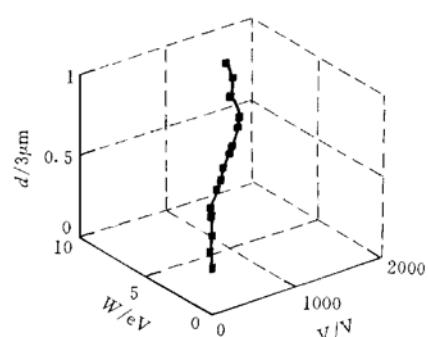


图 3 膜厚模拟曲线

FIG. 3 The Simulating Curve Diagram of Thickness

的学习过程。随着一次又一次的权值修正, 网络的误差不断减小, 逐渐接近目标误差, 神经网络只经过 355 次学习训练, 达到目标误差, 网络收敛, 训练结束。得到模拟曲线如图 3 所示(X 轴表示膜厚 (d), Y 轴表示功函数 (W), Z 轴表示开启电压 (V)), 其中 实线'表示目标函数曲线, 点线'(\bullet) 表示神经网络模拟曲线。

我们用训练得到的神经网络预测模型对其余的 4 组数据进行预测, 其模拟值与实际值基本吻合, 如表 1 所示, 其相对误差在 0.2%~6.1% 之间。

表 1 金刚石薄膜的厚度实测值与模拟值

Table 1 The Testing and Simulating Value of Diamond Film Thickness

样本号	1	2	3	4	5	6
实验值	0.5	0.7	2.5	2.7	0.9	1.5
模拟值	0.469	0.698	2.469	2.705	- 0.9303	1.495
绝对误差	0.030	0.002	0.012	- 0.002	- 0.030	0.005
相对误差/%	6.1	0.3	1.2	- 0.2	3.4	0.3

从表 1 可以看出, 所建模型具有较高的预测精度, 除第一组相对误差较大外, 其余五组的误差均很小, 证明神经网络学习所得映射函数是正确的, 能够正确预测未知薄膜的膜厚。

4 结论

本文首次将前向神经网络模型应用到金刚石薄膜的膜厚的预测上, 以薄膜阴极材料的物理参数和薄膜场发射的特征参数作为输入变量, 薄膜的几何参数作为输出变量, 模拟值与实验值的相对误差较小, 模拟仿真结果是令人满意的, 如果我们已知所需薄膜的开启电压和功函数, 就可以通过神经网络经过学习所得映射函数预测未知薄膜的膜厚, 所以前向神经网络模型不仅有助于薄膜场发射理论的研究, 而且也有一定的实际应用价值。对于膜厚的预测, 目前只考虑到两个输入变量, 如果能搜集到更多的数据, 增加输入变量的个数, 再通过变量选择, 预测精度可能会更高。

参 考 文 献

- [1] 余新新, 决策与决策控制, 1993, 3: 39—42[YU Xinxin, Policy Decision and Its Control, 1993, 3: 39—42(in Chinese)].
- [2] 姜天戟, 信息与控制, 1995, 1: 47—51[JIANG Tian-ji, Information and Control, 1995, 1: 47—51(in Chinese)].
- [3] 张兆春, 彭瑞伍, 陈念贻, 等, 半导体学报, 1998, 19(1): 49—52[ZHANG Zhaochun, PENG Ruiwu, CHEN Nianyi et al., Chinese Journal of Semiconductors, 1998, 19(1): 49—52(in Chinese)].
- [4] K. Hornik, M. Stinchcombe and H. White, Neural Networks, 1990, 3: 551—560.
- [5] H. N. Mhaskar, A. Charles et al., Basis Functions Adv. Appl. Math., 1992, 13: 350—373.
- [6] A. N. Kolmogorov, On the representation of continuous function of many variables by superposition of continuous functions of one variable and addition, American Mathematical Society Translation.
- [7] G. J. Wojak, V. V. Zhirnov, W. B. Choi et al., Interpretation of I - V Characteristics of Diamond Cold Cathodes, Technical Digest of the IVMC'97, p146~ 150.