

用人工神经网络预测场发射开启电场*

于丽娟 朱长纯

(西安交通大学电信工程学院电子系,西安 710049)

(1998 年 12 月 9 日收到;1999 年 5 月 5 日收到修改稿)

利用前馈多层神经网络模型,结合薄膜场发射的特性,建立了场发射开启电场的神经网络预测模型,并用金刚石薄膜的开启电场数据样本进行验证.结果表明,该模型预测的相对误差小于 6.6%,具有很好的预测性能.

PACC: 7970; 7360F; 8730

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,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场,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往往要事先已知它的开启电场,而场发射开启电场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确切关系,所以理论上很难计算出它们的值.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场发射开启电场的预测上,以金刚石为例,把金刚石薄膜的膜厚和功函数作为输入,场发射开启电场作为单输出,通过调节神经网络的权值和阈值,建立起金刚石薄膜场发射开启电场的神经网络预测推理模式.

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场发射开启电场的预测中,BP 网络预测模型如图 1 所示.

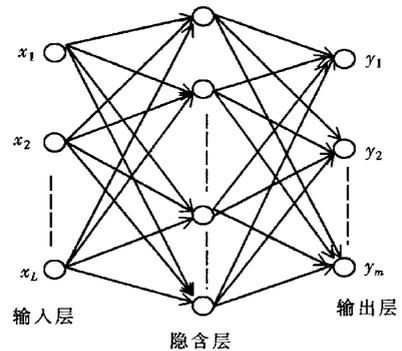


图 1 神经网络预测模型

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开启电场,场发射电流的因素很多,如薄膜的晶格常数、晶向、晶粒尺寸、介电系数、电阻率、表面形貌、表面吸附特性、 sp^2/sp^3 比值、杂质、缺陷、膜厚、功函数等,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场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,计算场发射开启电场,存在着准确建模与求解两方面的困难.而神经网络模型对于解决这类复杂非线性问题占有优势.因此,可以利用前向神经网络研究薄膜场发射的开启电场与影响开启

*国家自然科学基金(批准号:59676004)和博士点基金(批准号:98069828)资助的课题.

电场的诸多因素之间的非线性关系。

将薄膜场发射的特征参量, 开启电场、场发射电流等作为系统的输出, 薄膜的晶格常数、电阻率、介电系数、膜厚、功函数、温度等作为系统的输入, 则其输入、输出向量是一个非线性的映射, 若该系统的输入是一个 L 维的向量, $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_L)$, $x_i \in R^L$. 输出是一个 m 维的向量, $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_m)$, $y_i \in R^m$. 则输入、输出关系的映射, 记作 $S: R^L \rightarrow R^m$, $\mathbf{Y} = F(\mathbf{X})$. 由 Kolmogorov 定理, 一个三层 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场发射预测模型使用.

以金刚石薄膜的场发射为例, 我们假设金刚石薄膜场发射开启电场只与膜厚和功函数有关, 这时神经网络的预测模型变成两个输入一个输出的简单模式. 将膜厚和功函数作为神经网络模型中输入层节点, 记为 x_1, x_2 , 需进行预测的场发射开启电场为输出层节点, 记为 Y .

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 $[a, b]$ 中的连续值, 则各单元输出值的计算公式为

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

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

$$E = \sum_{p=1}^L (d_p^1 - x_1^{(2)})^2, \quad (2)$$

其中 d_p^1 为第 p 个样本输入时网络的期望输出值, $x_1^{(2)}$ 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

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

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

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

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

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

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

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

η 是学习的步幅(学习率), η 取值越小, 学习速度越慢, η 值越大, 学习速度越快, 每次权值的改变也越激烈. 在实际应用中, 步幅的选择是一个至关重要的问题, 在学习的初期阶段 η 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震荡而不能收敛. 在学习过程中采用动量和学习率自适应两种策略, 从而提高了学习速度并增加了算法的可靠性, 动量法降低了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 [6] 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, 提高学习速度, 加速收敛. 学习率为 0.008, 目标误差平方和为 0.0001, 在输入样本数据一定的情况下, 学习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的非常好的学习过程, 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, 当神经网络经过 629 次学习训练时, 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 (μm), Y 轴表示功函数 W (eV), Z 轴表示开启电场 E (V/ μm), 其中 '实线' 表示目标函数曲线; 点线 (■) 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符合, 如表 1 所示.

表 1 金刚石薄膜场发射开启电场 (V/ μm) 的实测值与模拟值

样本号	1	2	3	4
实验值	3.73	4.27	7.4	7.73
模拟值	3.62	4.55	7.35	7.79
绝对误差	0.11	-0.28	0.05	-0.06
相对误差/%	3	6.6	0.7	0.8

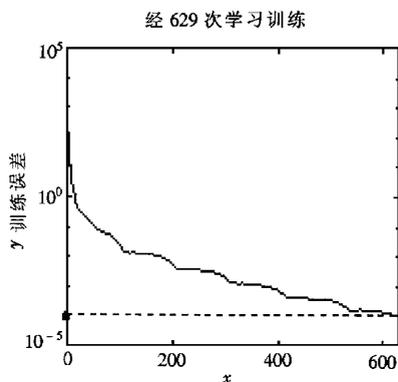


图2 误差与训练步数之间的关系曲线

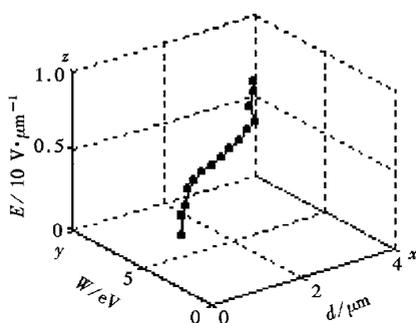


图3 场发射电场模拟曲线

从表1可以看出,所建模型具有较高的预测精度,相对误差的绝对值在0.7%—6.6%之间,证明

神经网络的学习所得映射函数是正确的,所获神经网络预测模型具有实际意义。

4 结 论

本文首次将前向神经网络模型应用到金刚石薄膜场发射开启电场的预测上,以薄膜阴极材料的物理参数和几何参数作为输入变量,薄膜场发射的特征参数作为输出变量,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,无论在理论上,还是在实际上都具有指导意义。目前,我们只对同种材料薄膜的场发射开启电场进行了预测(只考虑两个输入变量:膜厚和功函数),如果将该模型推广应用到多输入变量、不同材料薄膜场发射开启电场的预测上,我们就可以预知未知薄膜场发射开启电场。

- [1] 文新辉、牛明洁,预测,4(1992),58 [Xin-nui Wen, Ming-jie Niu, Forecasting, 4(1992) 58 in Chinese].
- [2] 姜天戟等,信息与控制,1(1995)47 [Tian-ji Jiang et al., Information and Control, 1(1995) 47 in Chinese].
- [3] 余新新,决策与决策控制,3(1993),39 [Xing-xing Yu, Decision and Decision Control, 3(1993) 39 in Chinese].
- [4] K. Hornik, M. Stinchcombe, H. White, Neural Networks, 3(1990) 551.
- [5] H. N. Mhaskar, A. Charles et al., Adv Appl Math., 13(1992) 350.
- [6] G. J. Wojak, V. V. Zhirmov, W. B. Choi et al., Technical Digest of the IVMC'97 (Korea, 1997), pp. 146—150.

NEURAL NETWORKS MODELS ON THRESHOLD ELECTRIC FIELD OF FIELD EMISSION*

YU LI-JUAN ZHU CHANG-CHUN

(Department of Electronic Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049)

(Received 9 December 1998; revised manuscript received 5 May 1999)

ABSTRACT

This article uses the model of BP neural networks, proposes the forecasting model of neural networks in combination with the characteristics of field emission cold cathode, and applies the data of threshold electric field of diamond thin film to test. The results show that the relative error of the model is within 6.6% and the model possesses good forecast characteristics through simulation and imitation.

PACC: 7970; 7360F; 8730

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 69676004).