



北京交通大学

BEIJING JIAOTONG UNIVERSITY

与世无争

SINGAPORE UNIVERSITY OF
TECHNOLOGY AND DESIGN

2024. 05. 28 | 中国, 北京

MATLAB 机器学习实现半导体器件 微观结构识别与宏观性能预测

周洋, 北京交通大学



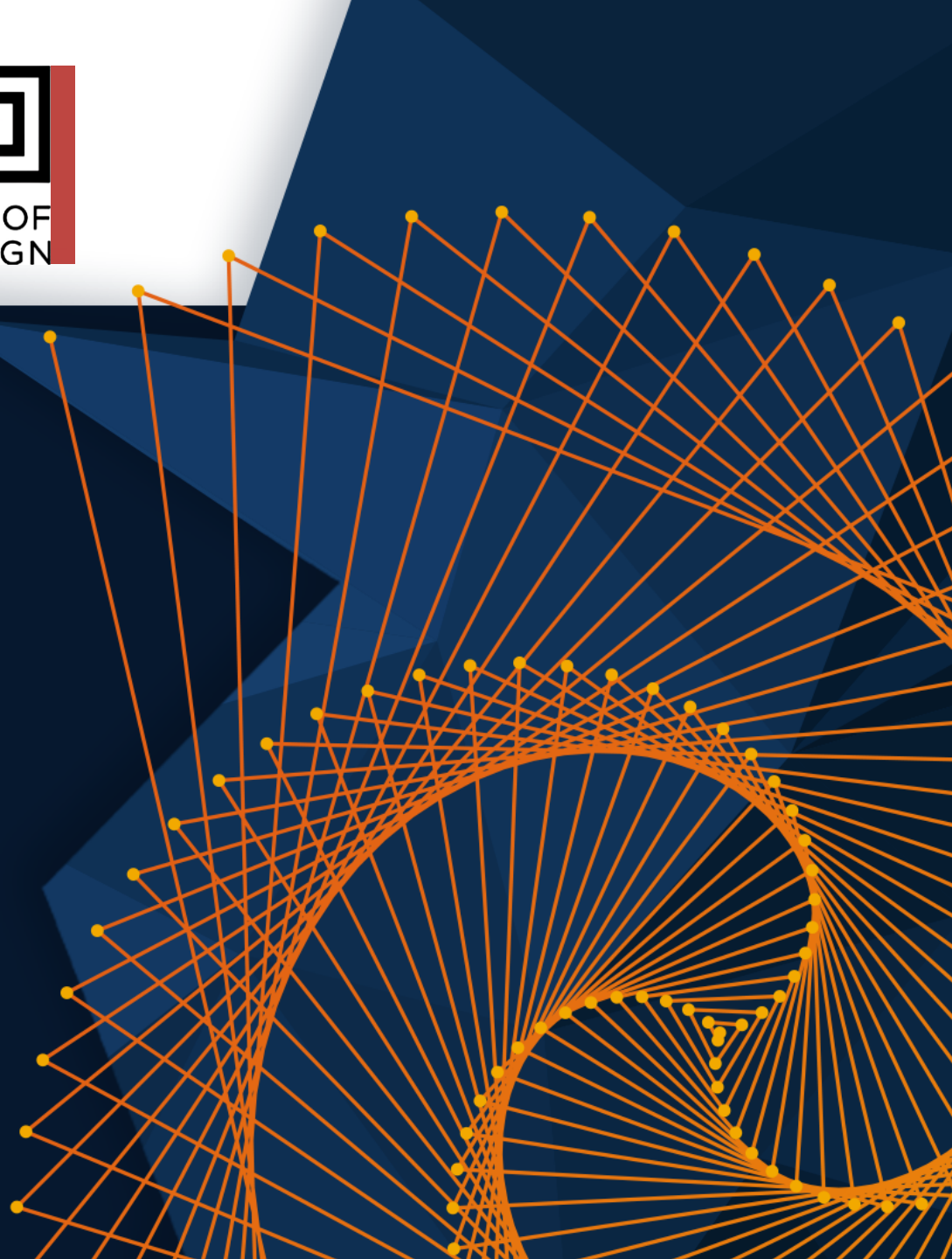
教授、博士生导师

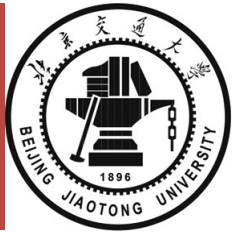
张哲轩, 北京交通大学



博士研究生

MATLAB EXPO





北京交通大学

BEIJING JIAOTONG UNIVERSITY

与世无争

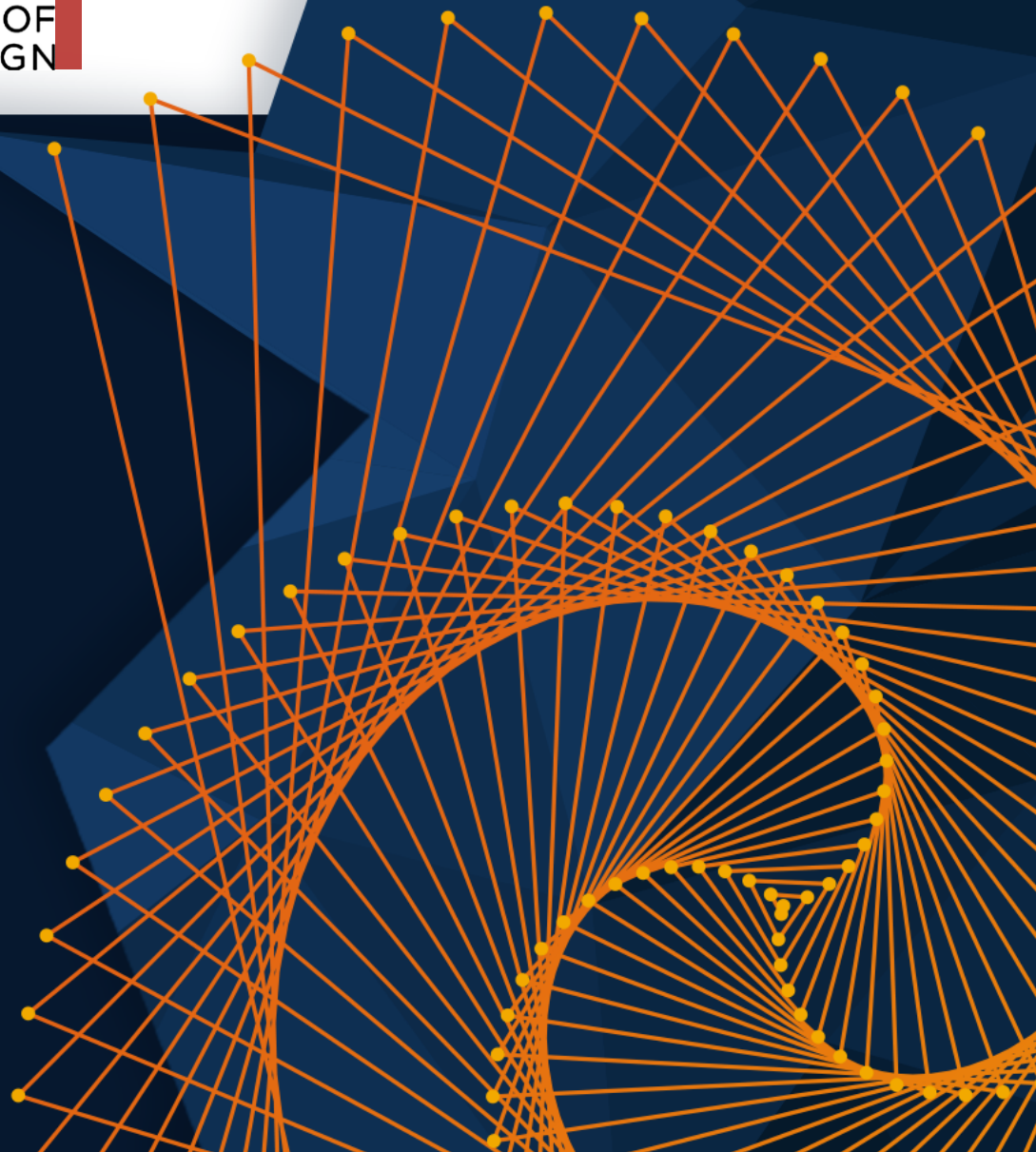
SINGAPORE UNIVERSITY OF
TECHNOLOGY AND DESIGN

一、研究背景

二、研究实例

三、未来展望

MATLAB EXPO



北京交通大学机械与电子控制工程学院



- 中国工程院双聘院士二人、国家百千万人才工程一人、国家万人计划一人、中央军委人才计划一人、IEEE Fellow一人、教育部重点实验室一个
- 交通运输工程学科连续五年排名第一
- 与中国铁道科学研究院、中国中车、德国亚琛工业大学、瑞典皇家理工学院有密切合作



团队介绍



张哲轩

北京交通大学，博士研究生
 半导体器件、深度学习
 合肥工业大学学士
 北京交通大学博士



周洋

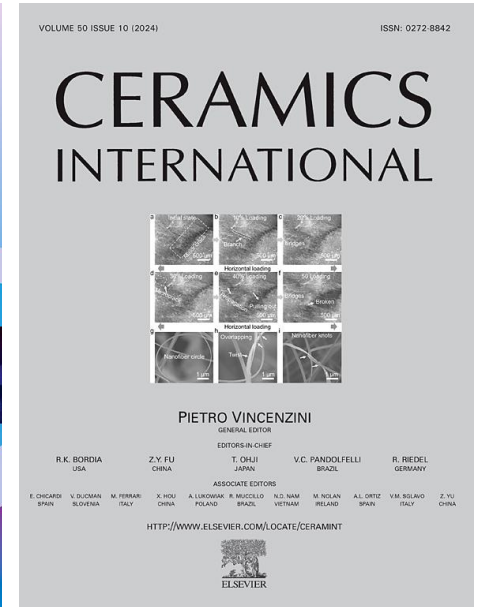
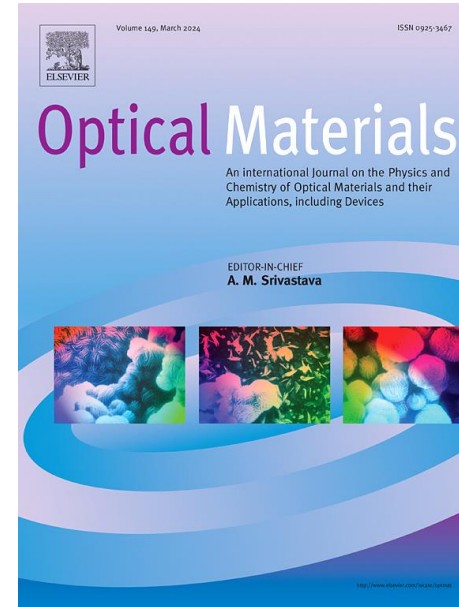
北京交通大学，教授
 功能陶瓷、半导体材料
 华中科技大学学士
 华中科技大学博士



Ang Yee Sin

新加坡科技设计大学，副教授
 半导体器件、深度学习
 澳大利亚伍伦贡大学学士
 澳大利亚伍伦贡大学博士

发表文章: *J. Mater. Res. Technol*、*Opt. Mater*、*Ceram. Int*



NEW ! The 2023 Update to the International Roadmap for Devices and Systems™ is now being posted and is available for free to the public.

The 2023 Update of the IEEE IRDS™ refreshes the 2022 Edition. Such changes keep the IRDS current and reflect the pace of microelectronics, future devices, advanced systems and architectures. Look for new updates published over the next few weeks.



INTERNATIONAL ROADMAP FOR DEVICES AND SYSTEMS™

参加会议: *IEEE International Roadmap for Devices and Systems (IRDS) Beyond CMOS Workshop 2019*

依托项目

国家自然科学基金“面上”项目（中国）

多元掺杂锰酸镧陶瓷的相变及红外发射特性研究



SUTD Kickstarter Initiative资助项目（新加坡）

Towards van der Waals Nanodevices: A Material Design Catalogue for Energy-Efficient Electronics and Sustainable Energy Applications



背景介绍

■ 半导体器件

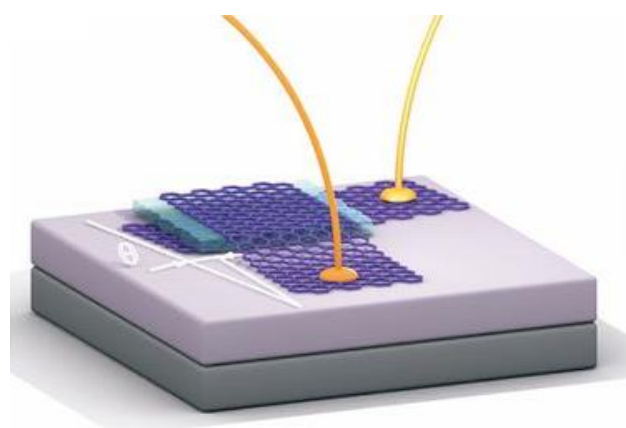
- 常温下导电性介于导体与绝缘体间的材料
- 基于半导体材料导电性实现特定功能的电子器件

■ 微观结构

- 材料或器件在原子、亚原子尺度下的结构
- 对不同结构的**图像**进行**分类**预测

■ 宏观性能

- 电导率、磁导率、反射率等
- 对不同性能的**数值**进行**回归**预测

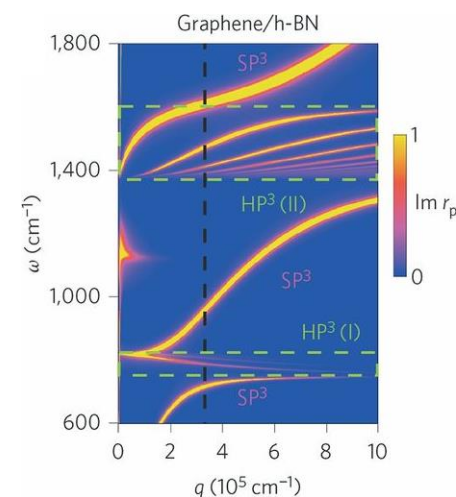
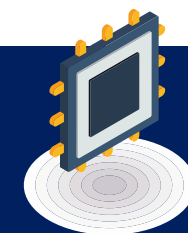


■ 难点

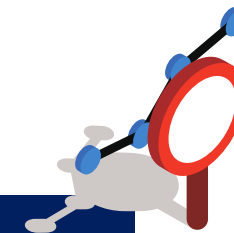
- 材料工艺特性复杂
- 研发周期冗长
- 制程品控严格

■ 实现方法

- SEM/TEM 表征
- AI 算法：机器学习、深度学习



数据源的挑战：表征技术



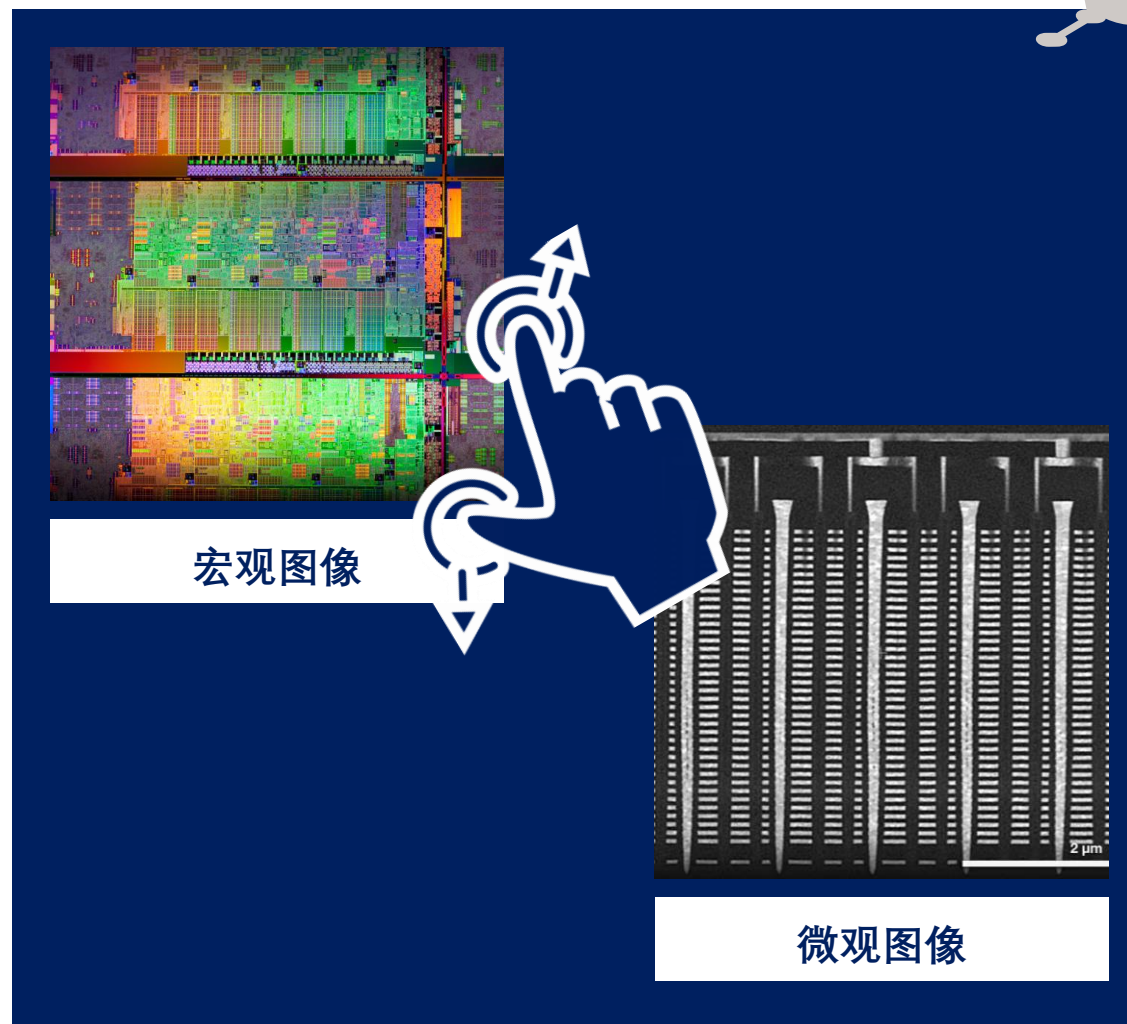
挑战

— 半导体器件小型化

- 纳米尺寸
- 放大图像

— 先进成像与分析技术

- 图像
- 数值



扫描电子显微镜 (SEM)

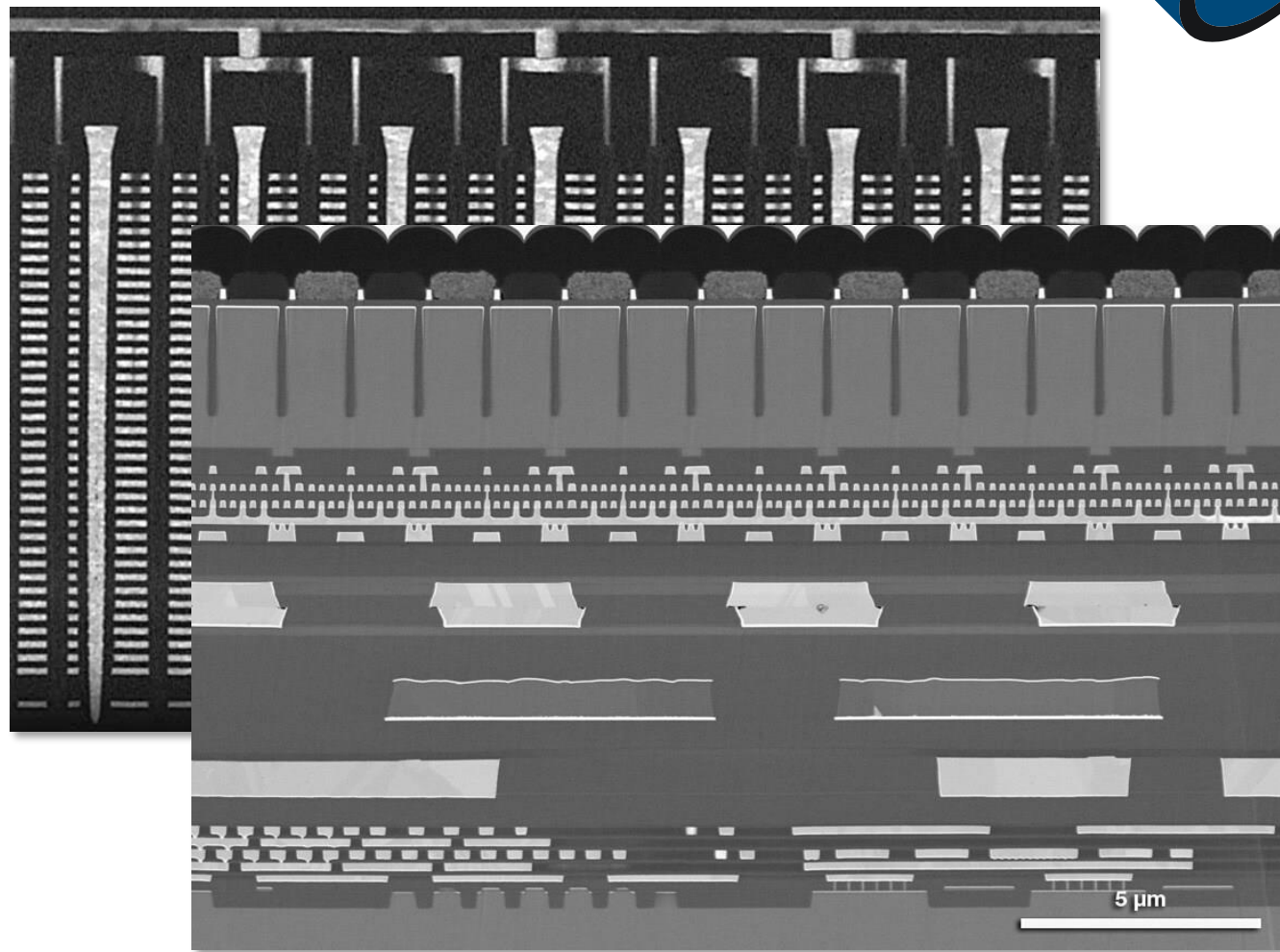


■ 解决方法一

- SEM 表征技术

■ 优势

- 提供关键数据：**微观图像**
- 数据精度：1.0 nm 分辨率
- 数据形式多样：**图像、数值**



透射电子显微镜 (TEM)



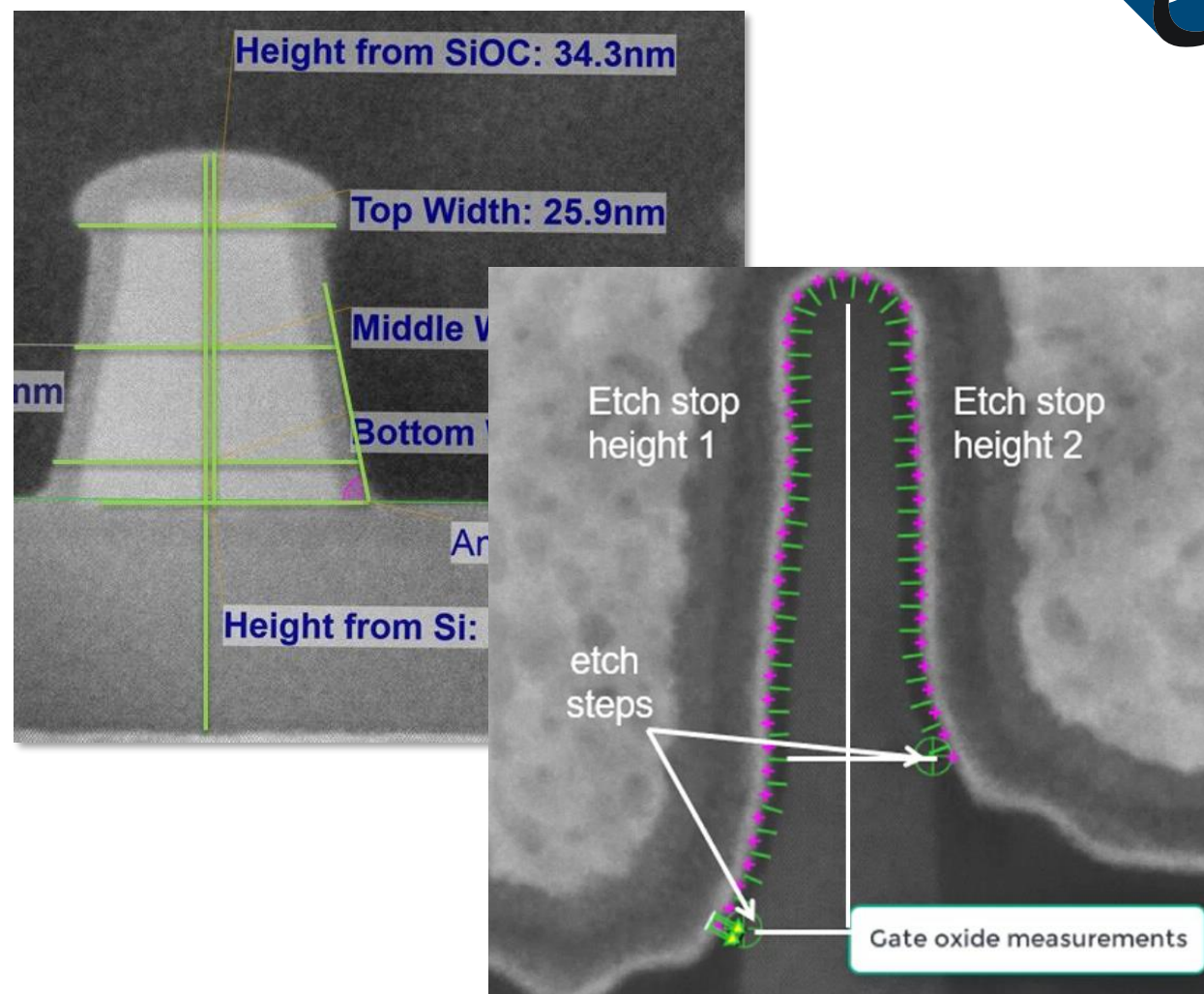
■ 解决方法二

— TEM 表征技术

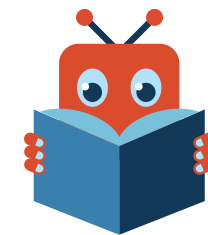
■ 优势

— 除 **SEM 优势** 外

— 数据精度 **更高**: 0.2 nm 分辨率



Why AI ?



人工智能

使机器模仿人类智能的技术

机器学习

使机器从数据中学习任务的统计方法

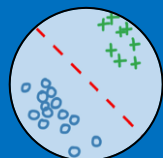
无监督学习

无数据标签



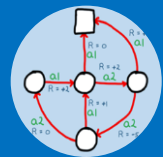
有监督学习

有数据标签



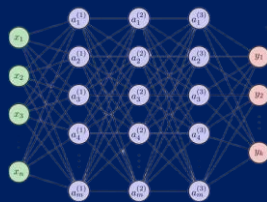
强化学习

交互数据



深度学习

多层神经网络



■ 任务

- 根据微观图像**甄别**不同结构
- 根据参数数值**评估**不同性能

■ 人工：效率低

- 挨个处理图像与数值
- 试错多、人员多

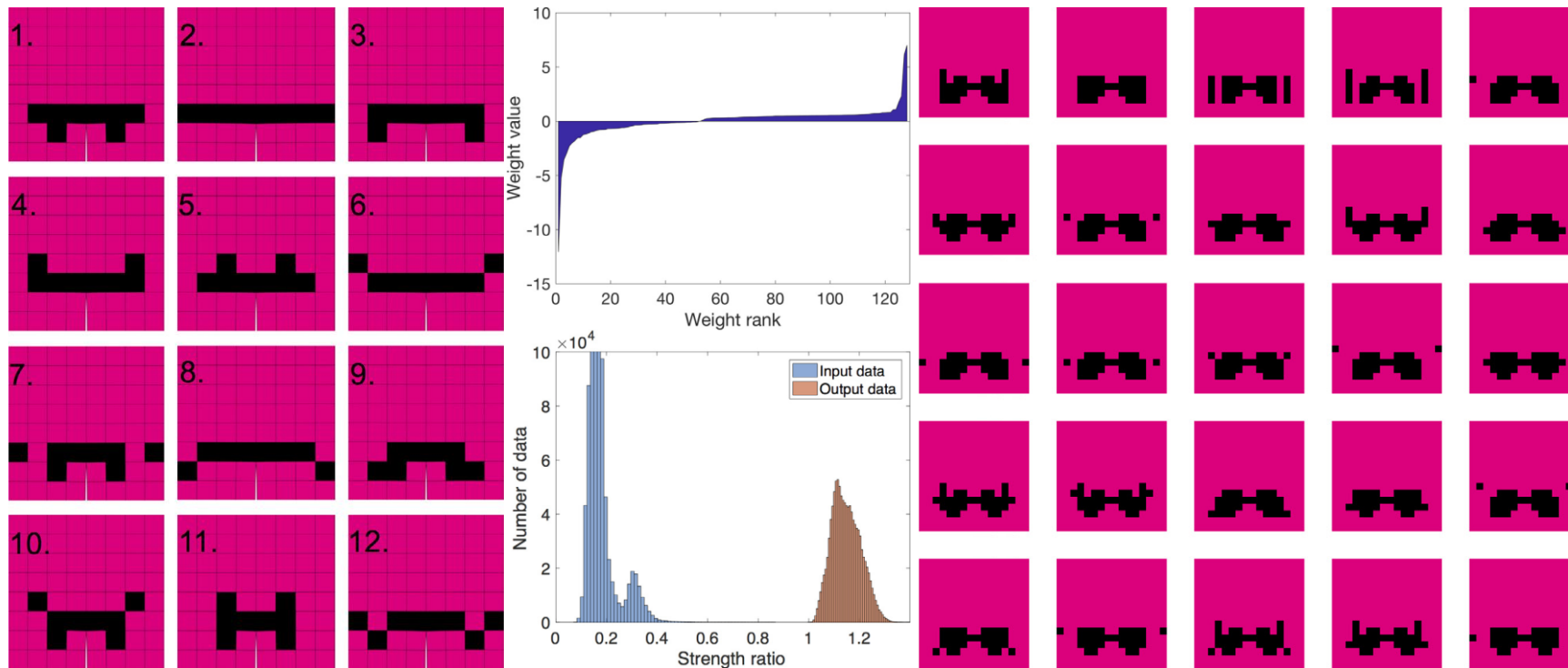
■ AI：效率高

- 批量处理图像与数



业内研究成果一

机器学习指导功能复合材料设计

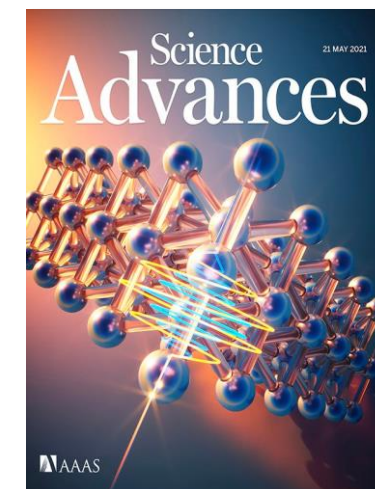
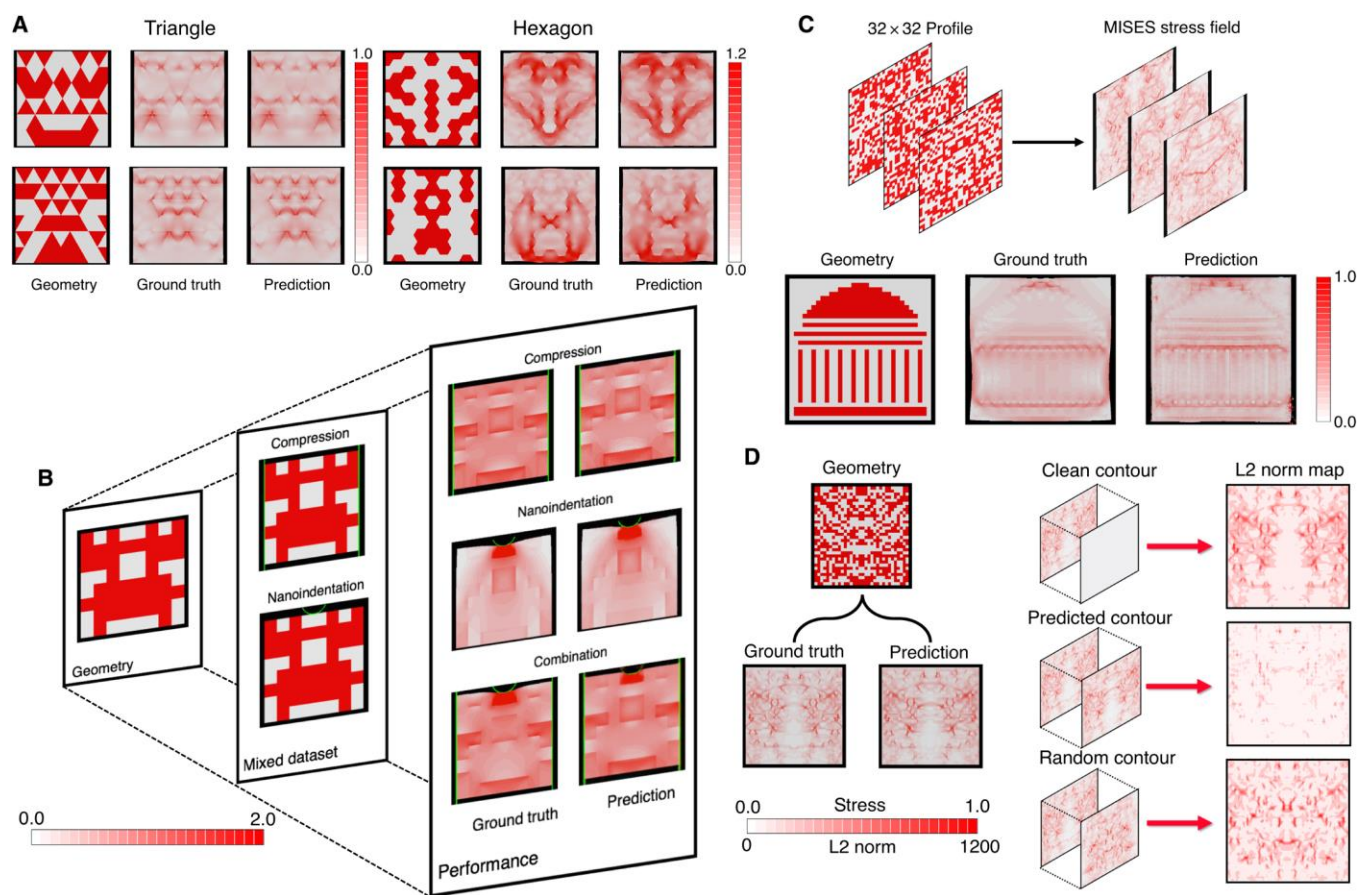


- 能**预测性能**
- 较穷举法**优化效果更佳**
- 能**修复数据**

Grace X. Gu, Chun-Teh Chen, Markus J. Buehler. De novo composite design based on machine learning algorithm [J]. Extreme Mechanics Letters. 2018, 18: 19-28.

业内研究成果二

深度学习预测功能复合材料应力应变场



- 生成神经网络
- 能预测应力应变场数值分布
- 能预测实验无法测量的参数数值

Zhenze Yang, Chi-Hua Yu, Markus J. Buehler. Deep learning model to predict complex stress and strain fields in hierarchical composites [J]. Science Advances. 2021, 7: eabd7416.

Why MATLAB ?




Statistics and Machine Learning
Toolbox

使用统计与机器学习进行数据分析及建模

获取免费试用版 查看定价

有疑问吗? 联系销售.



Deep Learning Toolbox

设计、训练、分析和仿真深度学习网络

获取免费试用版 查看定价

有疑问吗? 请联系销售人员.

高稳定性

- 不因**环境变量**配置、**版本兼容性**、**依赖项**缺失影响程序运行

C/C++ 代码

- 训练后模型能部署至**嵌入式**系统



分类学习器



回归学习器



深度网络设计器



北京交通大学

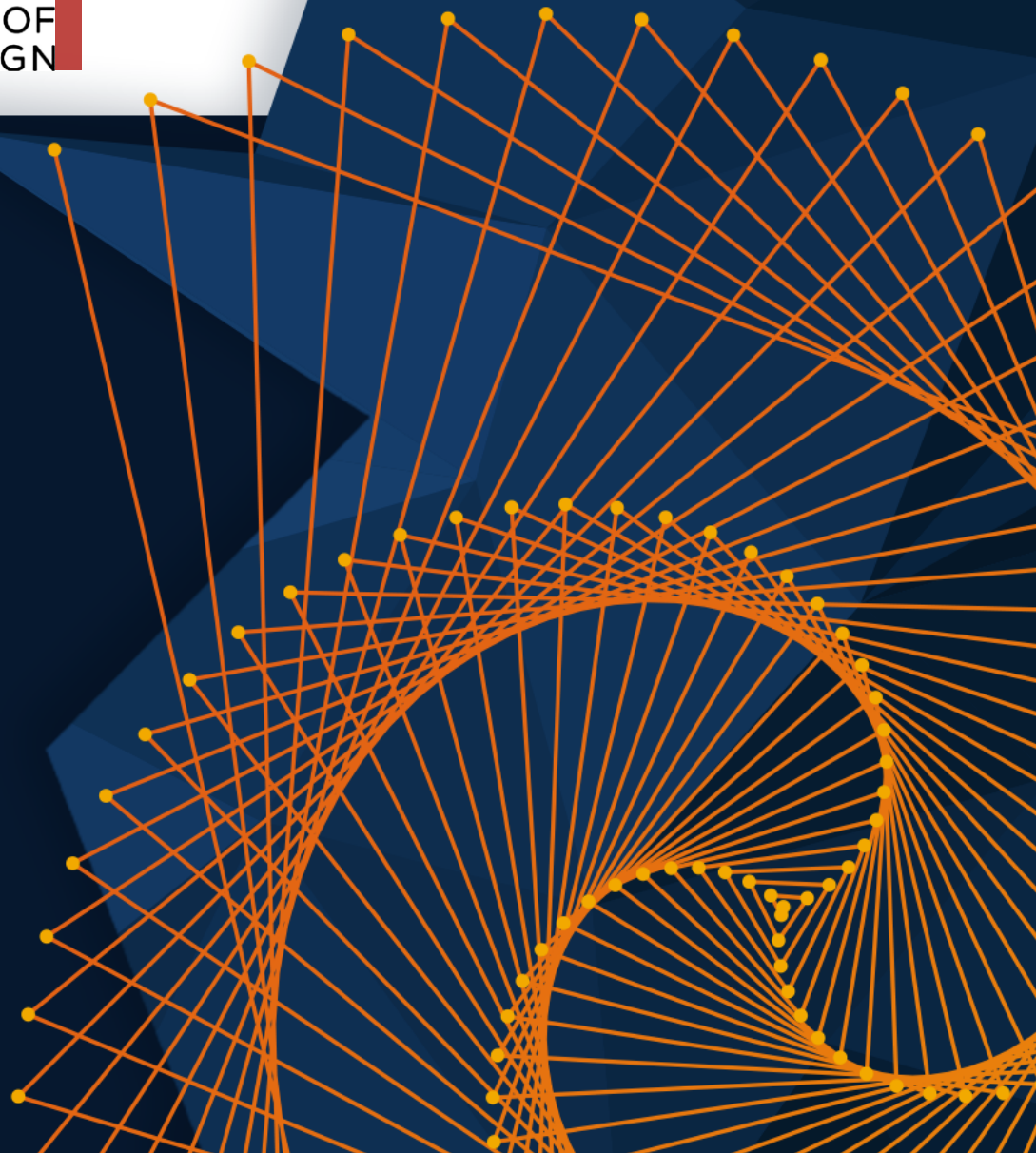
BEIJING JIAOTONG UNIVERSITY

与世无争

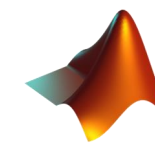
SINGAPORE UNIVERSITY OF
TECHNOLOGY AND DESIGN

- 一、研究背景
- 二、研究实例
- 三、未来展望

MATLAB EXPO



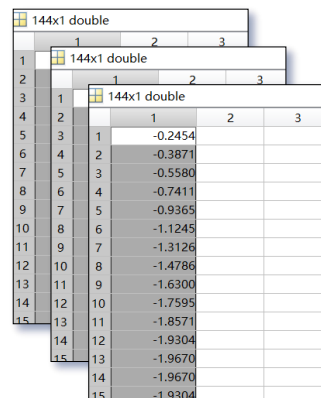
宏观性能预测



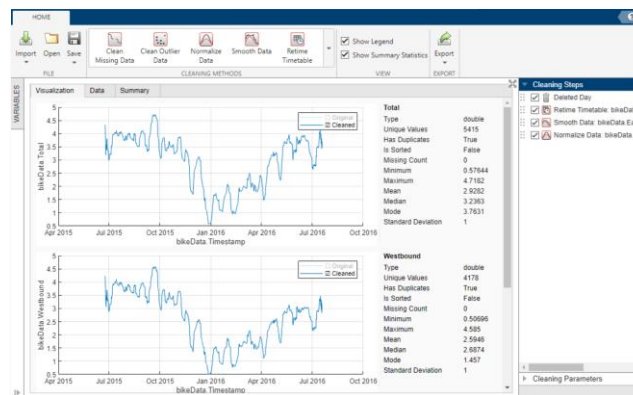
归一化数据

平滑处理数据

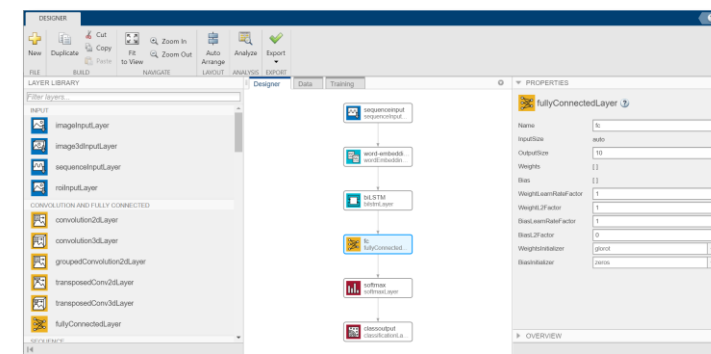
深度网络设计器



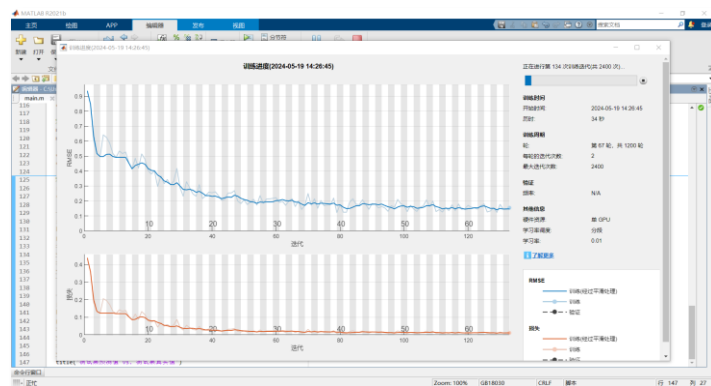
① 数据导入
参数曲线



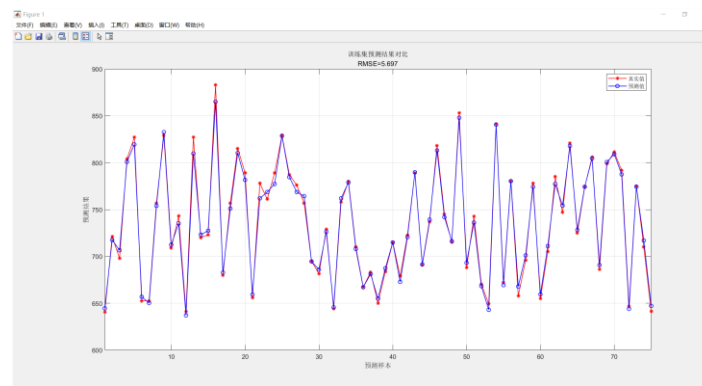
② 数据预处理
归一化 / 平滑 / 转置



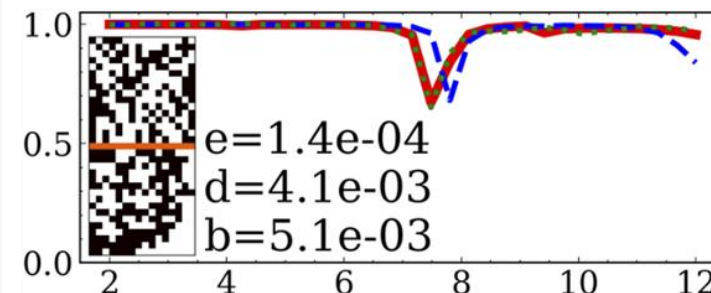
③ 神经网络创建
超参数设置



④ 模型训练
误差计算



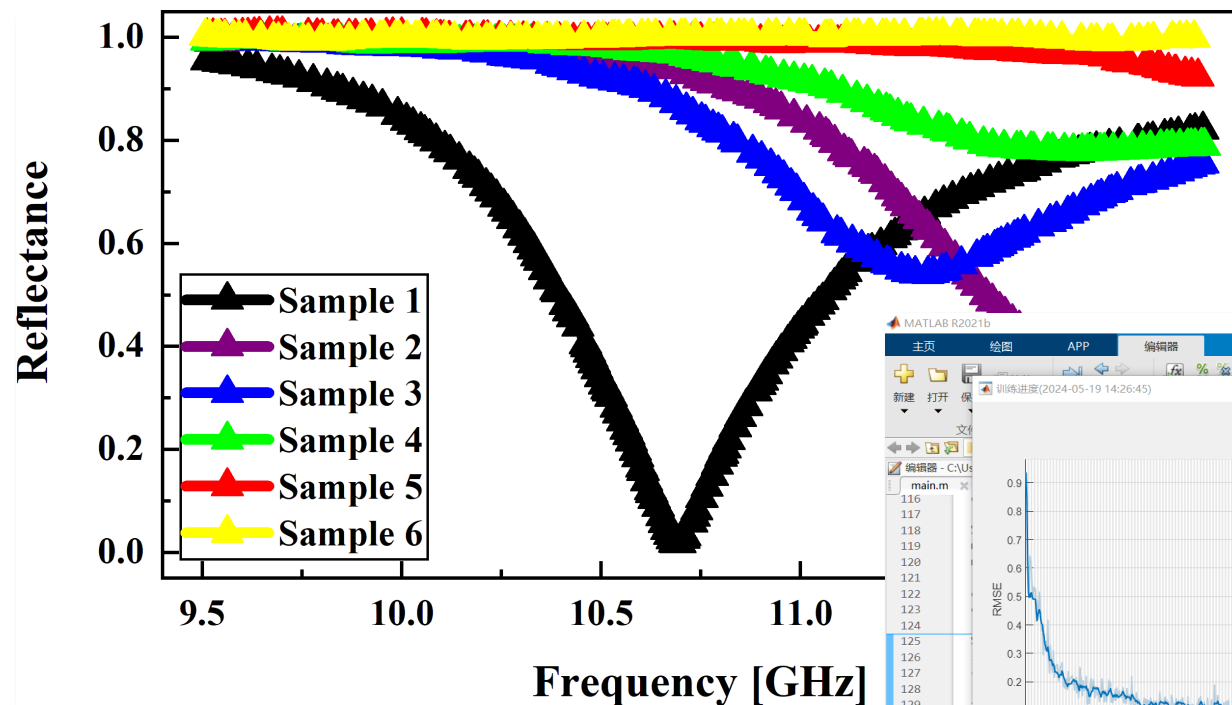
⑤ 评价指标计算
MSE计算 / 可视化



⑥ 性能预测
反射率 / 频率曲线

性能曲线回归预测 —— 表格数据

- 6 条反射率-频率曲线生成 100 组样本
- 75 组样本至训练集，25 组样本至测试集
- 生成卷积神经网络

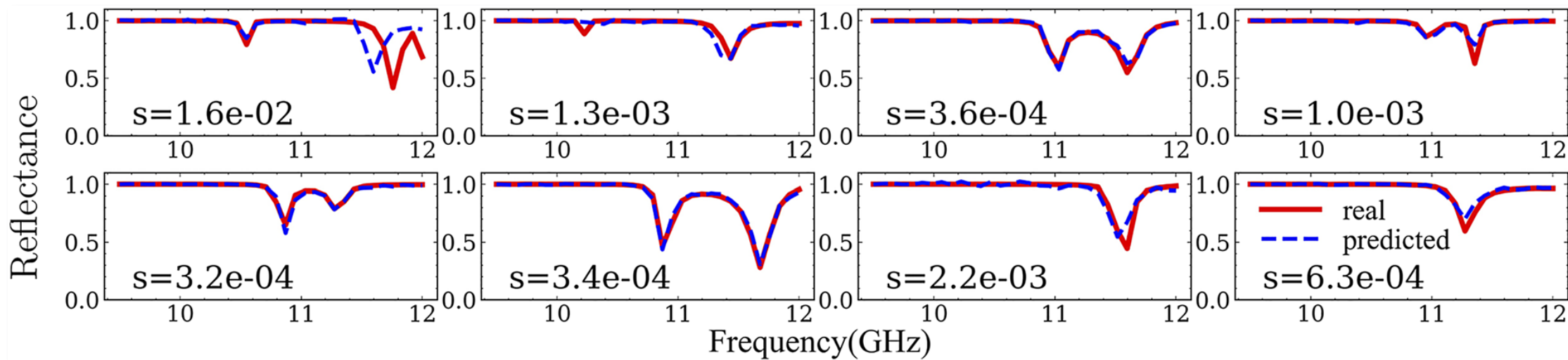


```

7 %% 导入数据
8 res = readmatrix('卷积神经网络数据回归预测数据集.xlsx');
9
10 %% 划分训练集和测试集
11 temp = randperm(100);
12
13 P_train = res(temp(1: 75), 1: 6)';
14 T_train = res(temp(1: 75), 7)';
15 M = size(P_train, 2);
16
17 P_test = res(temp(76: end), 1: 6)';
18 T_test = res(temp(76: end), 7)';
19 N = size(P_test, 2);
20
21 %% 数据归一化
22 [p_train, ps_input] = mapminmax(P_train, 0, 1);
23 p_test = mapminmax('apply', P_test, ps_input);
24
25 [t_train, ps_output] = mapminmax(T_train, 0, 1);
26 t_test = mapminmax('apply', T_test, ps_output);
27
28 %% 数据平铺
29 p_train = double(reshape(p_train, 6, 1, 1, M));
30 p_test = double(reshape(p_test, 6, 1, 1, N));
31 t_train = double(t_train)';
32 t_test = double(t_test)';
  
```



评价指标计算 —— MSE



```

116 disp(['测试集数据的MAE为: ',
117
118 % MBE
119 mbe1 = sum(T_sim1' - T_train
120 mbe2 = sum(T_sim2' - T_test
121
122 disp(['训练集数据的MBE为: ',
123 disp(['测试集数据的MBE为: ',
124
125 % 绘制散点图
126 sz = 25;
127 c = 'b';
128
129 figure
130 scatter(T_train, T_sim1, sz,
131 hold on
132 plot(xlim, ylim, '--k')
133 xlabel('训练集真实值');
134 ylabel('训练集预测值');
135 xlim([min(T_train) max(T_train)
136 ylim([min(T_sim1) max(T_sim1)
137 title('训练集预测值 vs. 训练集
138
139 figure
140 scatter(T_test, T_sim2, sz,
141 hold on
142 plot(xlim, ylim, '--k')
143 xlabel('测试集真实值');
144 ylabel('测试集预测值');
145 xlim([min(T_test) max(T_test)])
146 ylim([min(T_sim2) max(T_sim2)])
147 title('测试集预测值 vs. 测试集真实值')

```

trainNetwork 使用分析

名称: layers
分析日期: 2024-05-19 14:28:14

名称	类型	激活	可学习参数
1 imageinput	图像输入	6×1×1	-
2 conv_1	卷积	6×1×16	Weights 3×1×1×16 Bias 1×1×16
3 batchnorm_1	批量归一化	6×1×16	Offset 1×1×16 Scale 1×1×16
4 relu_1	ReLU	6×1×16	-
5 maxpool	最大池化	5×1×16	-
6 conv_2	卷积	5×1×32	Weights 3×1×16×32 Bias 1×1×32
7 batchnorm_2	批量归一化	5×1×32	Offset 1×1×32 Scale 1×1×32
8 relu_2	ReLU	5×1×32	-
9 dropout	丢弃	5×1×32	-
10 fc	全连接	1×1×1	Weights 1×100 Bias 1×1

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2$$

Where:
 \hat{y}_i = Predicted value for the i^{th} data point
 y_i = Actual value for the i^{th} data point
 n = number of observations

微观结构识别

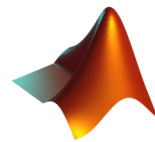
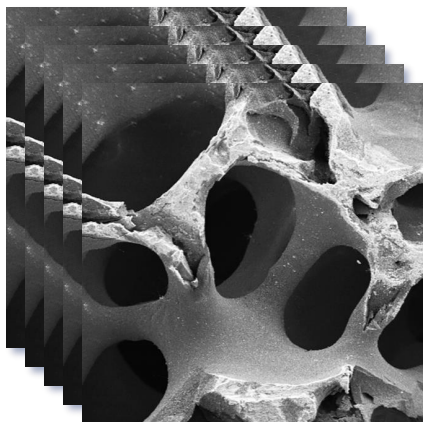
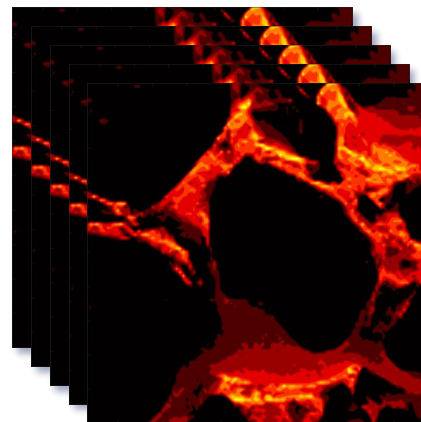


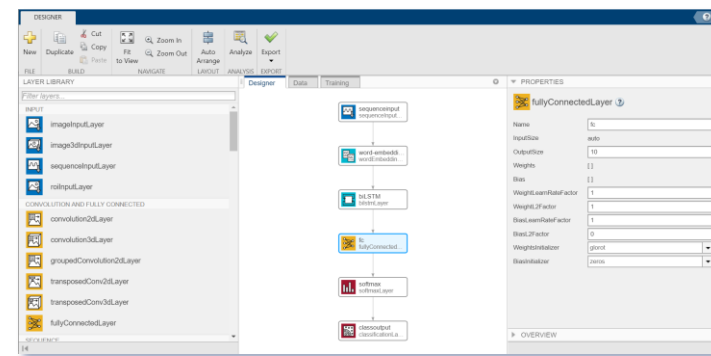
Image Processing Toolbox
执行图像处理、可视化和分析



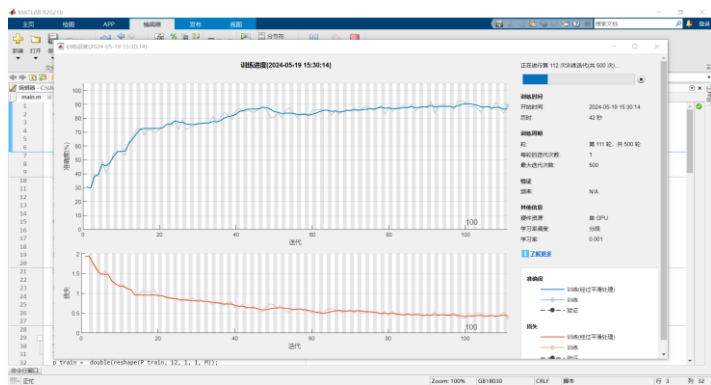
① 数据导入
标签 / 微观图像



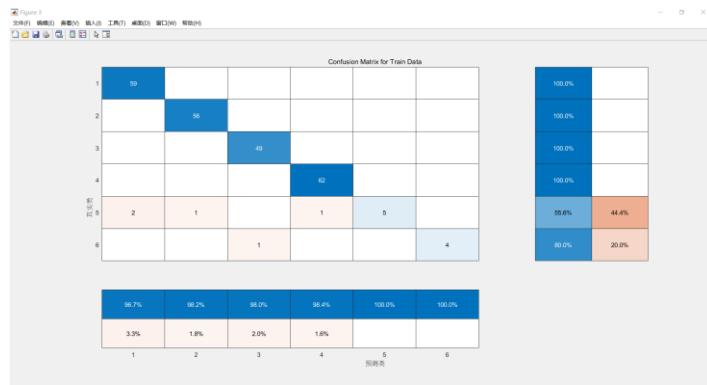
② 图像预处理
压缩 / 增强 / 过滤



③ 神经网络创建
超参数设置



④ 模型训练
误差计算



⑤ 评价指标计算
混淆矩阵 / 可视化



⑥ 结构识别

C0 / C1 / C2 / C3 / C4 / C5

图像预处理

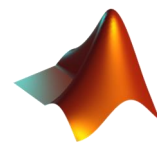
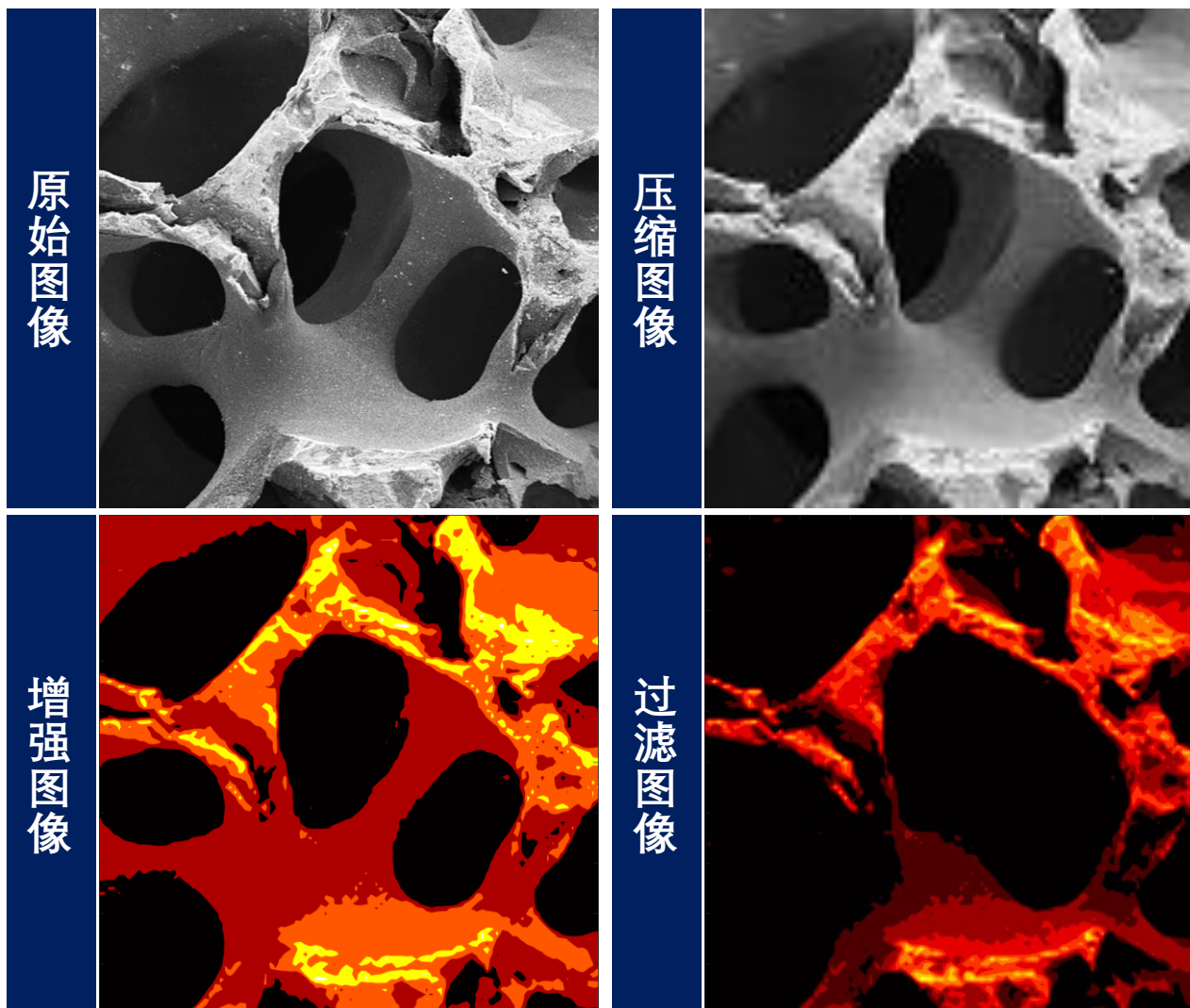


Image Processing Toolbox

执行图像处理、可视化和分析



深度网络设计器

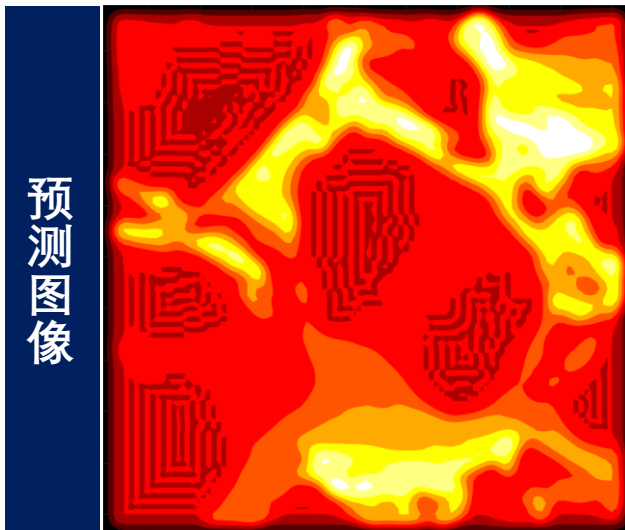


- 前体为**三维**结构，但器件图像仅呈现上表层**二维**结果
- 输入图像过大，为满足效率与精度要求，**先压缩后增强**
- 物化过程涉及扩散与相分离，**高斯卷积**满足扩散常数算术平方根特征，**拉普拉斯卷积**实现相界面边缘检测

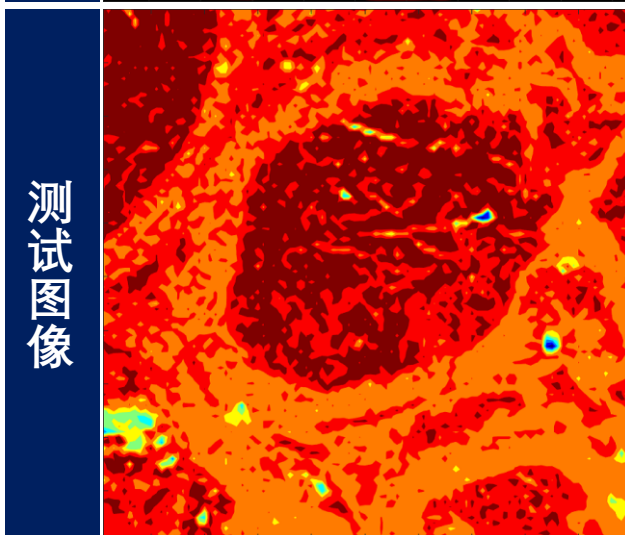
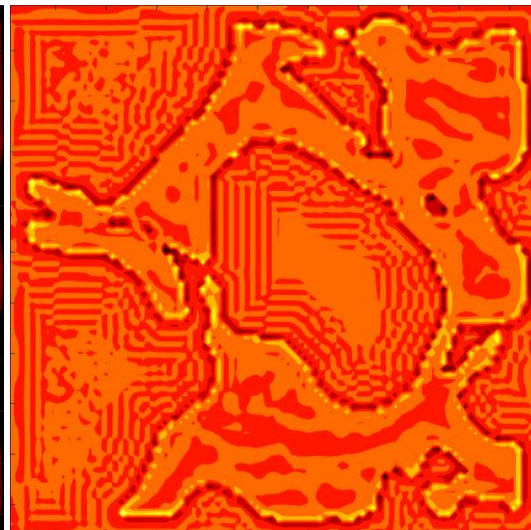
`imresize`

调整图像大小

特征提取



预测图像



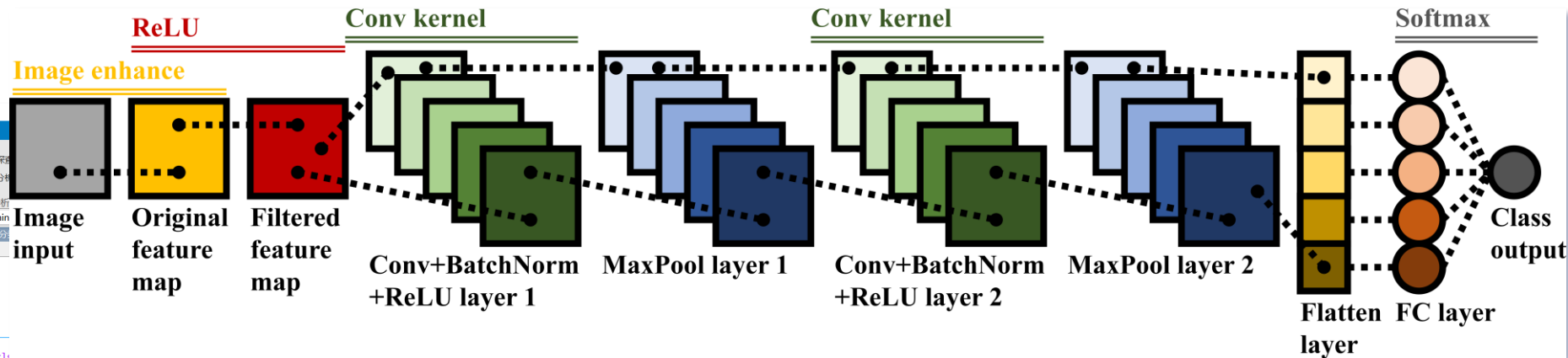
测试图像

0° / 360°	180°	C0 / C1 / C2 / C3 / C4 / C5
30°	210°	C0 / C1 / C2 / C3 / C4 / C5
60°	240°	C0 / C1 / C2 / C3 / C4 / C5
90°	270°	C0 / C1 / C2 / C3 / C4 / C5
120°	300°	C0 / C1 / C2 / C3 / C4 / C5
150°	330°	C0 / C1 / C2 / C3 / C4 / C5

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	0° / 360°	30°	60°	90°	120°	150°	180°	210°	240°	270°	300°	330°	类别
2	4.19	2.68	3.80	2.39	4.36	3.51	3.20	4.76	7.01	1.60	7.91	8.05	1
3	4.20	2.06	4.00	2.41	4.15	3.42	7.53	7.51	6.90	9.00	2.05	6.41	2
4	4.19	2.42	3.88	2.38	3.94	3.36	5.46	7.60	2.00	8.00	5.74	2.16	3
5	4.20	2.14	4.04	2.33	3.84	3.22	7.81	8.80	2.20	7.00	2.35	8.77	3
6	4.18	2.32	3.70	2.35	4.21	3.22	5.25	6.50	3.70	6.00	5.71	5.40	2
7	4.20	2.66	3.83	2.40	4.28	3.47	4.31	6.70	6.30	6.00	1.08	5.87	2
8	4.20	2.67	3.96	2.39	3.88	3.34	4.38	7.66	6.60	6.50	1.15	2.42	3
9	4.18	2.49	3.94	2.40	3.74	3.38	5.28	7.84	1.60	6.70	4.36	3.09	3
10	4.20	1.74	3.96	2.38	4.44	3.60	4.24	5.20	4.80	7.30	4.47	3.24	1
11	4.19	2.38	3.73	2.37	4.19	3.28	5.26	6.68	1.80	5.00	5.09	6.97	2
12	4.20	2.19	4.03	2.38	3.97	3.34	7.71	8.29	4.10	6.90	2.77	8.45	3
13	4.19	2.49	3.88	2.46	4.58	3.92							
14	4.19	2.63	3.85	2.46	4.53	3.83							
15	4.20	2.05	3.89	2.37	4.39	3.47							
16	4.20	2.14	3.95	2.41	4.39	3.60							
17	4.20	2.09	4.18	2.44	3.63	3.33							
18	4.20	1.91	4.00	2.44	4.41	3.68							
19	4.19	2.55	3.87	2.45	4.55	3.87							
20	4.20	2.03	3.97	2.36	4.09	3.30							
21	4.19	2.40	3.73	2.40	4.28	3.33							
22	4.20	2.63	3.93	2.43	4.06	3.44							
23	4.20	2.08	3.94	2.40	4.22	3.41							
24	4.20	2.09	4.10	2.39	3.77	3.28							
25	4.18	2.49	3.72	2.40	4.37	3.36							
26	4.19	2.45	3.92	2.43	3.85	3.42							
27	4.19	2.64	4.06	2.43	3.70	3.38							
28	4.20	2.66	3.94	2.45	4.07	3.47							
29	4.18	2.32	3.85	2.39	4.11	3.37							
30	4.19	2.40	3.71	2.35	4.26	3.26							
31	4.18	2.43	4.06	2.42	3.55	3.41							

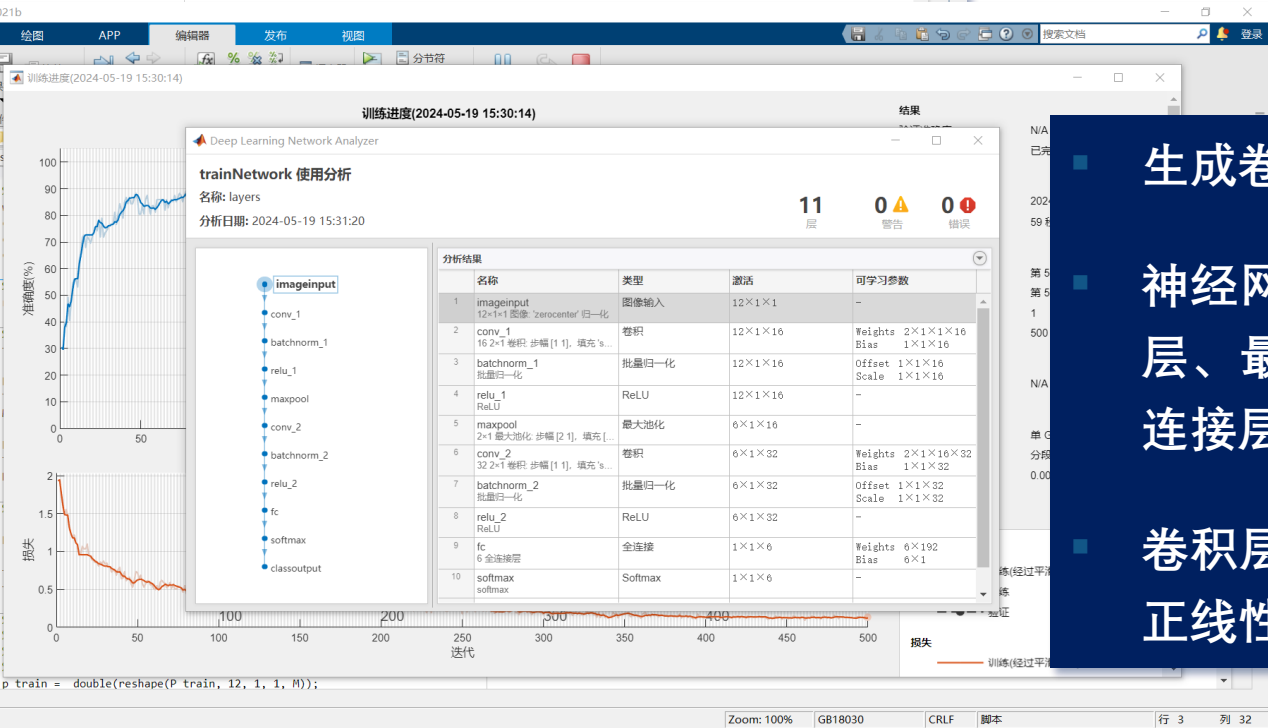
- 12 种角度生成 300 组样本
- 250 组样本至训练集，50 组样本至测试集

网络结构



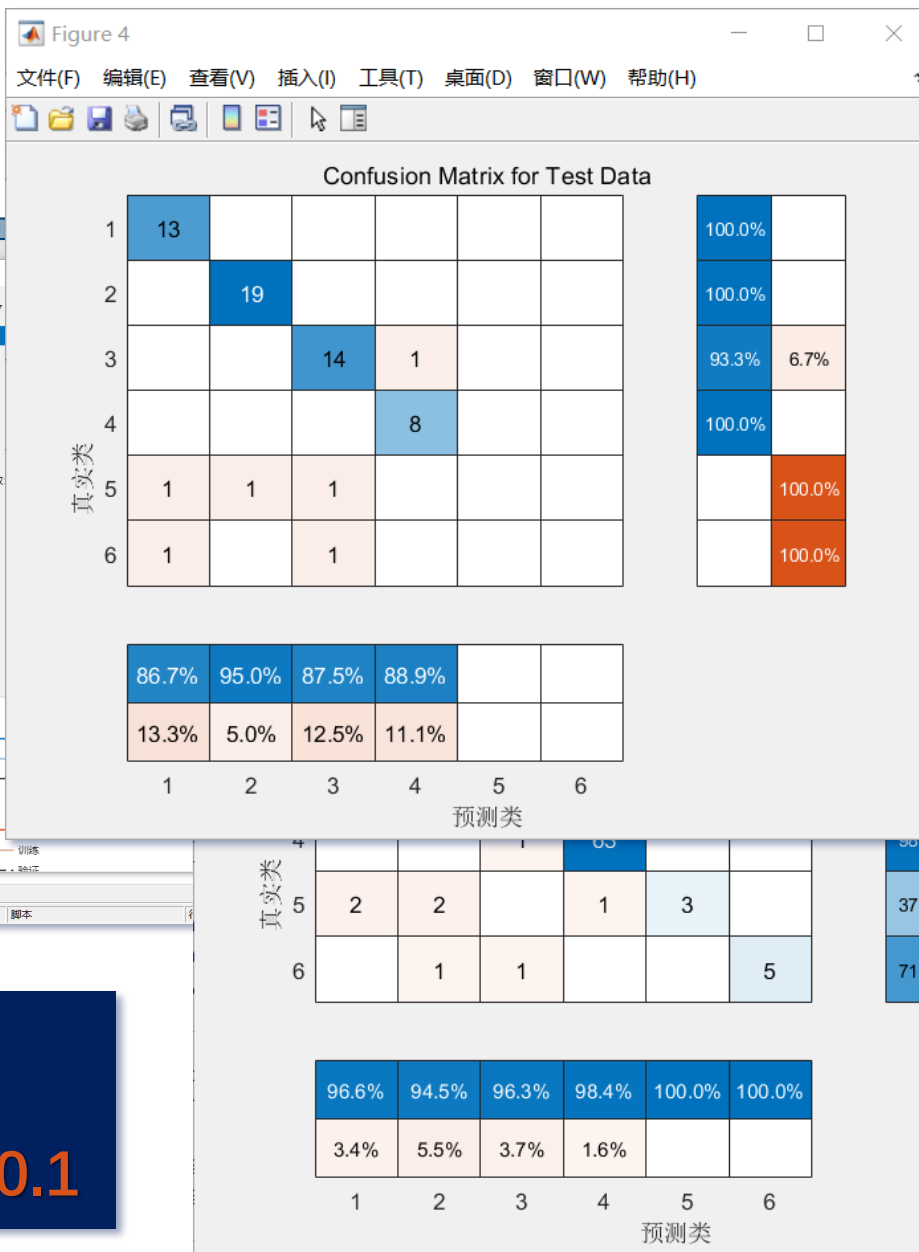
```

MATLAB R2021b
主 页  绘图  APP  编辑器  发布
+ 新建  打开  保存  打印  转至  查找  重构  分析
文件  导航  代码  分享
C:\Users\Dell\Desktop\MATLAB EXPO 2024 China
C:\Users\Dell\Desktop\MATLAB EXPO 2024 China\卷积神经网络数据分类
main.m
1  %% 清空环境变量
2  warning off % 关闭报警信息
3  close all % 关闭开启的图画
4  clear % 清空变量
5  clc % 清空命令行
6
7  %% 导入数据
8  res = readmatrix('卷积神经网络数据分类预测数据集.xlsx');
9
10 %% 划分训练集和测试集
11 temp = randperm(300);
12
13 P_train = res(temp(1: 250), 1: 12);
14 T_train = res(temp(1: 250), 13);
15 M = size(P_train, 2);
16
17 P_test = res(temp(251: end), 1: 12);
18 T_test = res(temp(251: end), 13);
19 N = size(P_test, 2);
20
21 %% 数据归一化
22 [P_train, ps_input] = mapminmax(P_train);
23 P_test = mapminmax('apply', P_test, ps_input);
24
25 t_train = categorical(T_train);
26 t_test = categorical(T_test);
27
28 %% 数据平铺
29 p_train = double(reshape(P_train, M, 1, 1, M));
30 p_test = double(reshape(P_test, M, 1, 1, M));
31
32 %% 构造网络结构
    
```



- 生成卷积神经网络
- 神经网络包含图像输入层、卷积层、最大池化层、平坦化层、全连接层、类输出层
- 卷积层包含批量归一化单元、校正线性单元

模型训练



- 混淆矩阵分类预测不同微观结构
- 模型准确率大于 **90%**，损失函数值低于 **0.1**



北京交通大学

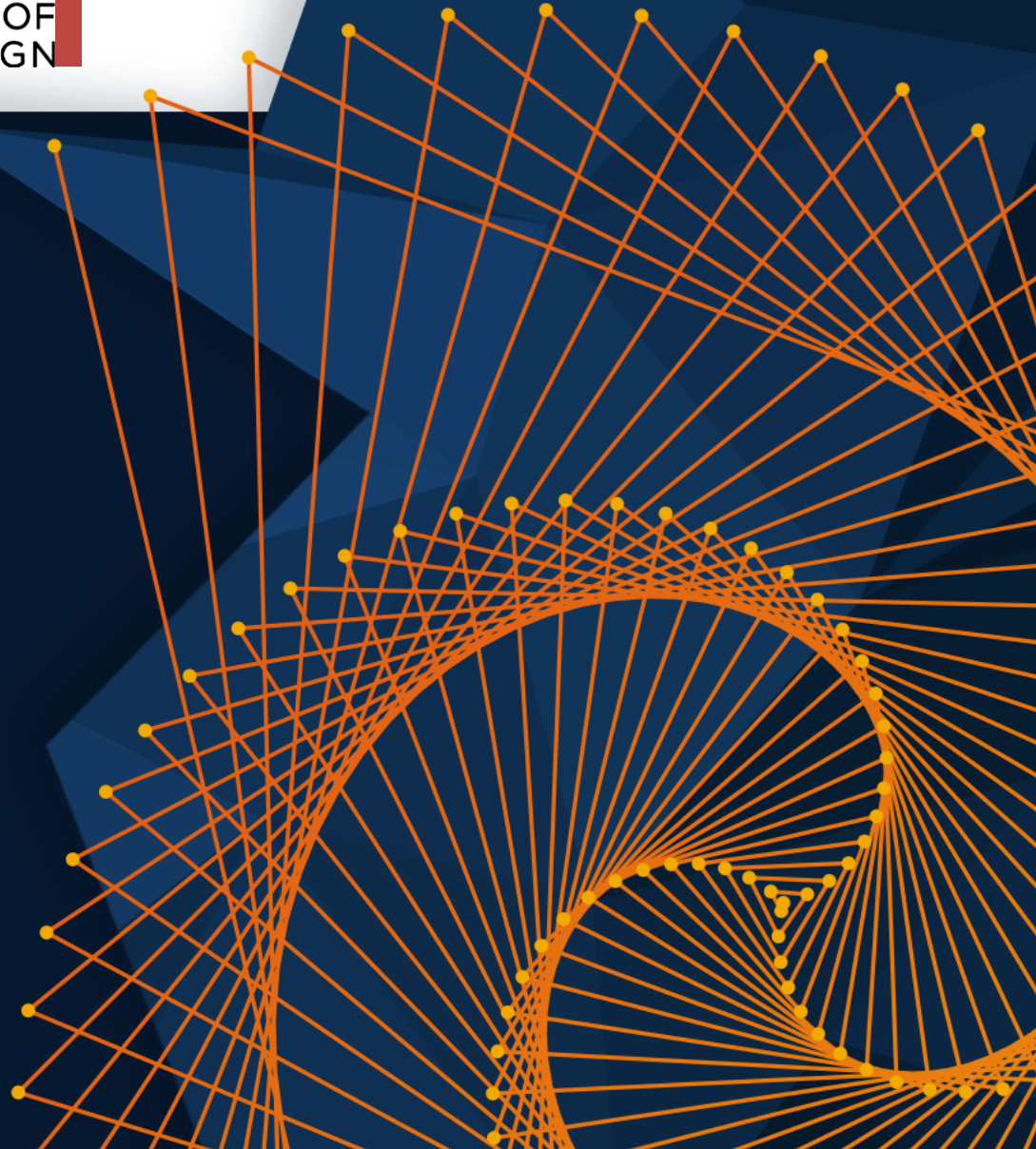
BEIJING JIAOTONG UNIVERSITY

与世无争

SINGAPORE UNIVERSITY OF
TECHNOLOGY AND DESIGN

- 一、研究背景
- 二、研究实例
- 三、未来展望

MATLAB EXPO

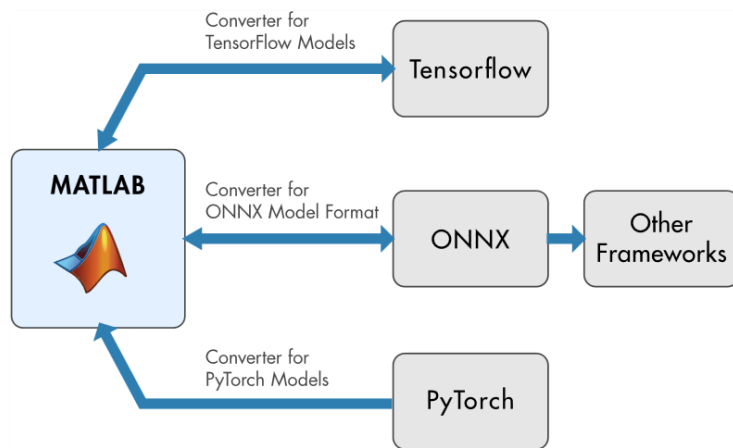




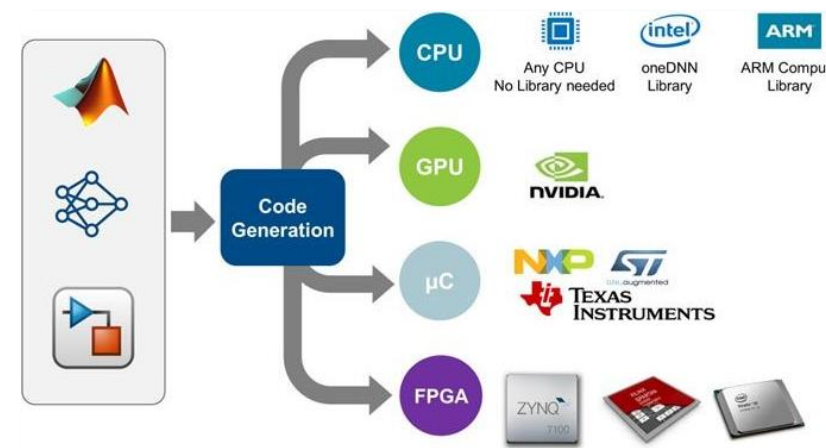
No

w

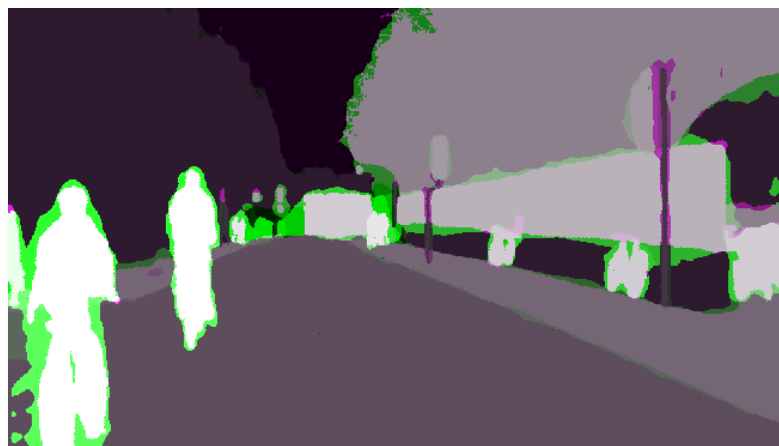
较 PyTorch 稳定性更高



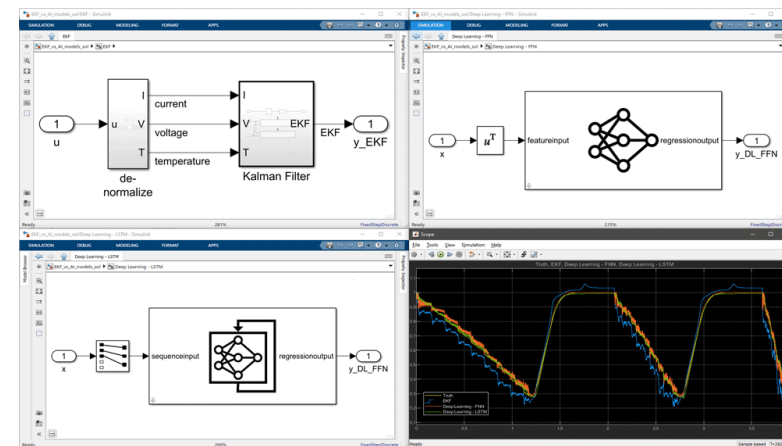
生成 C/C++ 代码至 STM32



拓展计算机视觉应用



拓展 Simulink 仿真应用



Futur

MATLAB EXPO

谢谢



© 2024 The MathWorks, Inc. MATLAB and Simulink are registered trademarks of The MathWorks, Inc. See [mathworks.com/trademarks](https://www.mathworks.com/trademarks) for a list of additional trademarks. Other product or brand names may be trademarks or registered trademarks of their respective holders.

