

Utilização de Redes Neurais na Recuperação dos Parâmetros da Equação de KPZ em 2D e Aplicações em Silício Poroso

Mariana Pelissari Monteiro Aguiar Baroni, José Demisio Simões de Souza, Reinaldo Roberto Rosa
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, INPE
Caixa Postal 515, 12201-970, São José dos Campos, Brasil
mariana@lac.inpe.br, demisio@lac.inpe.br, reinaldo@lac.inpe.br.

Resumo

O objetivo deste trabalho é recuperar os valores dos parâmetros da equação de KPZ utilizando uma rede neural e um conjunto de treinamento através de solução numérica da equação de KPZ utilizando o método de diferenças finitas. Os resultados obtidos mostram que a utilização de redes neurais é um método eficaz na recuperação dos valores dos parâmetros da equação de KPZ. Além disso, propõe-se a aplicação dessa técnica para encontrar os valores dos parâmetros da equação de KPZ compatíveis com um padrão de superfície de silício poroso. O estudo de tais parâmetros são importantes para a aproximar solução numérica de uma superfície real gerada a partir de processos estocásticos.

Palavras-chaves: equação de KPZ, redes neurais, algoritmo de retropropagação do erro, perceptron de múltiplas camadas, silício poroso.

1. Introdução

Uma variedade de processos dinâmicos naturais e/ou indústrias são capazes de produzir perfis, superfícies e volumes cuja estrutura apresenta irregularidades causadas pela deposição (crescimento) ou erosão (remoção) de materiais resultando em padrões complexos, os quais podem evoluir através da alteração espaço-temporal das interfaces entre os materiais envolvidos [1].

Nas últimas décadas a caracterização dos processos de formação (lineares e não-lineares) dessas estruturas tornou-se um desafio para as mais diversas áreas, dentre elas, a matemática, a física e a computação. Em particular, na área de nanotecnologia, a caracterização de materiais e processos de formação tem recebido especial atenção de físicos-estatísticos devido à falta de ferramentas robustas para a análise de porosidade em novos materiais com propriedades importantes para aplicações tecnológicas.

A dinâmica de crescimento de uma superfície e/ou interface pode ser descrita através de equações diferenciais. Um modelo matemático estudado em [1,5], que simula a dinâmica de formação de superfície ou

interface, é o modelo que utiliza a equação de KPZ (Kardar-Parisi-Zhang). A equação de KPZ foi apresentada em 1986 por Kardar, Parisi e Zhang para modelar a evolução do perfil do crescimento estocástico de uma interface [2].

O objetivo deste trabalho é recuperar os parâmetros da equação de KPZ utilizando uma rede neural e um conjunto de treinamento obtidos por Baroni, 2005 [1] através de solução numérica da equação de KPZ utilizando o método de diferenças finitas.

Além disso, propõe-se a aplicação dessa técnica para encontrar os parâmetros da equação de KPZ de uma imagem de superfície de silício poroso que podem ser utilizados para aproximar a solução numérica de uma superfície real. O silício poroso foi escolhido como estudo de caso neste trabalho, pois durante a última década o interesse pela pesquisa do silício que é considerado um material fundamental para a indústria eletrônica tem crescido significativamente [5,8]. Este interesse aumentou principalmente após a publicação dos resultados encontrados pelo Dr. Leigh Canham [12], comunicando a presença do fenômeno da fotoluminescência associada à superfície de amostras de silício poroso [1].

Este artigo está organizado da seguinte forma: na seção 2 apresenta-se uma breve introdução sobre a equação de KPZ; na seção 3 apresenta-se uma breve introdução sobre redes neurais e o algoritmo de aprendizagem de retropropagação; na seção 4 apresenta-se e discute-se os resultados obtidos. A seção 5 inclui a conclusão e perspectivas.

2. A Equação de KPZ

A equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) escrita abaixo:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \eta(x, t)$$

é a equação de crescimento mais simples que descreve o processo de crescimento estocástico de uma interface, onde $h(x, t)$ é a altura de uma interface em uma posição do substrato x no tempo t ; $\eta(x, t)$ é o termo de ruído

branco e, v e λ são os parâmetros relacionados a tensão superficial e o crescimento lateral respectivamente. Essa equação é a primeira extensão da equação linear de Edwards-Wilkinson (EW) [10]. A equação de KPZ inclui um termo não linear que na equação de EW não existe. Este termo não linear é necessário, pois inclui um crescimento lateral da interface na equação de crescimento.

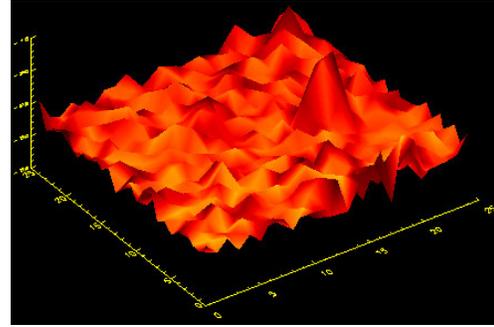
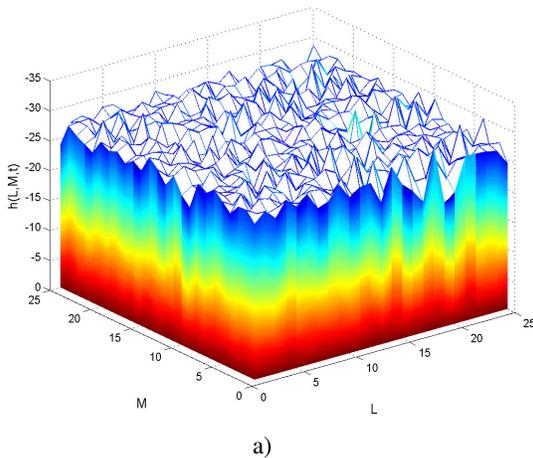
Esta equação foi resolvida numericamente por utilizando o método de diferenças finitas FTCS (*Forward Time Centered Space*) [1]. Para a equação de KPZ 2D existem na literatura dois tipos conhecidos: a equação de KPZ anisotrópica e a equação de KPZ isotrópica. A diferença entre essas duas equações é que a equação de KPZ anisotrópica considera as duas direções x e y não equivalentes em relação à direção do processo de crescimento [1]. Considerando um caráter homogêneo da geração de porosidade no caso do silício poroso, neste trabalho utilizou-se a equação de KPZ 2D isotrópica, que é dada pela seguinte equação:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 + \eta(x, t)$$

onde os parâmetros são os mesmo para o caso 1D

Os resultados obtidos mostram que esse método é capaz de solucionar numericamente a equação de KPZ 2D. A Figura 1 apresenta uma imagem de uma simulação da equação de KPZ 2D.

Recentemente, verificou-se ([11]) que a morfologia superficial de amostras de silício (Si(111)) atacadas por gota em ambiente não saturado em água, apresenta uma direção preferencial de crescimento, resultando da combinação entre a orientação cristalográfica e a técnica de ataque realizado, podendo este sistema ser descrito por um modelo com direção preferencial (modelo KPZ), para as correlações globais e por um modelo difusional para as correlações locais da superfície.



b)
Figura 1. a) Uma simulação da equação de KPZ 2D, e b) uma representação tridimensional arbitrária da superfície gerada nessa simulação.

Buscando encontrar os melhores parâmetros para o modelo KPZ que produza uma superfície com características morfológicas compatíveis com a superfície real de silício poroso, por exemplo, neste trabalho buscou-se encontrar uma rede neural que recuperasse os parâmetros da equação de KPZ 2D com um algoritmo de aprendizagem supervisionado (retropropagação) onde o conjunto de treinamento foram as soluções numéricas encontradas utilizando o método de diferenças finitas obtidas por Baroni, 2005 [1].

3. Redes Neurais

Dentre as várias definições existentes na literatura sobre Redes Neurais, Haykin [6] define redes neurais como:

Uma rede neural é um processador maciçamente paralelamente distribuído constituído de unidades de processamento simples, que têm a propensão natural para armazenar conhecimento experimental e torna-lo disponível para o uso. Ela se assemelha ao cérebro em dois aspectos:

1. *O conhecimento é adquirido pela rede a partir de seu ambiente através de um processo de aprendizagem.*
2. *Forças de conexão entre neurônios, conhecidas como pesos sinápticos, são utilizadas para armazenar o conhecimento adquirido.*

Neste trabalho é usada uma rede do tipo perceptron de múltiplas camadas (PMC) (uma arquitetura deste tipo de rede neural é mostrada na Figura 2) com uma camada escondida de neurônios e uma camada de saída. O sinal de entrada é propagado para frente pela rede, camada por camada. O treinamento é realizado de forma supervisionada através do algoritmo de retropropagação do erro (*error backpropagation*).

Resumidamente, esse algoritmo consiste de dois passos: o primeiro trata-se da propagação onde a entrada é aplicada a todos os neurônios da rede, camada por camada, tendo seu efeito propagado através da rede e os

pesos sinápticos fixos, produzido a saída real da rede; o segundo passo consiste do ajuste dos pesos sinápticos através de uma regra de correção do erro. Propaga-se o erro para trás através da rede ajustando os pesos para que estes produzam respostas mais próximas das respostas desejadas.

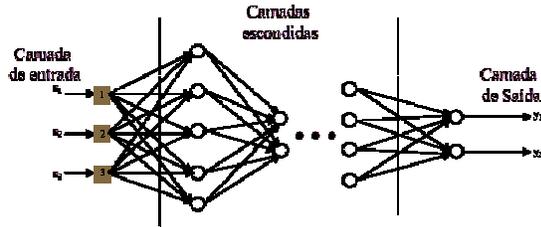


Figura 2. Grafo arquitetural de um perceptron de múltiplas camadas (fonte: [7]).

3.1 Algoritmo de retropropagação

Para este trabalho as entradas da rede neural são as soluções numéricas obtidas por [1] da equação de KPZ 2D variando os parâmetros v (tensão superficial), λ (crescimento lateral) e σ (influência do ruído) para 21 valores diferentes. Em cada caso a variação dos parâmetros ocorre da seguinte maneira: um deles varia enquanto os outros dois têm valores fixos.

Os vetores de entrada têm dimensão 1×625 , correspondente a matrizes 25×25 . Dessa forma fixou-se que são 625 entradas e 3 neurônios de saída, correspondente aos valores dos parâmetros para cada padrão apresentado a rede (cerca de 21 padrões para cada parâmetro).

Como o objetivo do trabalho é recuperar os valores dos parâmetros da equação de KPZ 2D (v , λ e σ parâmetro obtido da discretização do termo de ruído branco), optou-se em determinar a melhor rede para todos os padrões, ou seja, aquela que apresenta a menor soma dos erros obtidos entre a saída da rede e cada padrão. Para isso, variou-se a quantidade de neurônios da camada escondida para verificar qual a melhor quantidade para resolver o problema (entre 1 a 50 neurônios), variou-se também a taxa de aprendizagem entre o intervalo de 0.05 a 1 e a constante de momento de 0 a 1. A função de ativação usada tanto na camada escondida quanto na camada de saída foi a tangente hiperbólica dada pela seguinte equação [6, 7, 9]:

$$y(v) = \frac{1 - e^{-v}}{1 + e^{-v}}.$$

Para o ajuste dos pesos foi usada a medida do erro quadrático médio e a regra do gradiente descendente. O erro quadrático médio é dado pela seguinte expressão [6,

7, 9]:

$$\epsilon_{med} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \epsilon(n)$$

onde

$$\epsilon(n) = \frac{1}{2} \sum_{j \in C} e_j^2(n)$$

e

$$e_j(n) = d_j(n) - y_j(n).$$

Onde j é o índice do neurônio, n é a iteração, d é a saída desejada, y é a saída da rede e N é o número de padrões (conjunto de treinamento).

Os pesos sinápticos e os desvios são ajustados utilizando a seguinte expressão [6, 7, 9]:

$$\Delta w_{ji}(n) = \alpha \Delta w_{ji}(n-1) + \eta \delta_j(n) y_i(n)$$

onde α corresponde a constante de momento, η a taxa de aprendizagem, δ_j o gradiente local e y_i o sinal de entrada da camada. Para todos os casos utilizou-se a mesma condição inicial para os pesos sinápticos e bias em ambas camadas.

A próxima sessão apresenta os resultados encontrados durante a fase de treinamento e a generalização.

4. Resultados e Discussões

4.1 Fase de treinamento

Utilizou-se quatro conjuntos de treinamento onde as soluções numéricas da equação de KPZ apresentam a seguinte variação de parâmetros:

- v fixo (= 1), λ fixo (= 3) e σ variando (entre -1 e 5),
- v fixo (= 1), λ variando (entre -1 e 5) e σ fixo (= 1),
- v variando (entre -1 e 5), λ fixo (= 3), e σ fixo (= 1),
- a união dos outros três conjuntos.

Para os quatro conjuntos foram gerados os resultados para a variação da taxa de aprendizagem, do número de neurônios da camada escondida e a constante de momento. Em cada caso, obteve-se o erro entre a saída da rede e a saída desejada para cada padrão. Com esse dado, posteriormente será possível obter a melhor arquitetura do PMC para todos os padrões.

Observou-se durante esta fase que para grande quantidade de neurônios o desempenho da rede não é satisfatório. Isto também ocorre quando aumenta-se o valor da constante de momento e da taxa de aprendizagem. A constante de momento começa a influenciar nos resultados quando atinge valor muito alto (acima de 0,5).

Três exemplos deste comportamento são apresentados nas Figuras 3, 4 e 5. A Figura 3 mostra um resultado da ativação da rede para 1 neurônios na camada escondida, constante de momento igual a 0.7 e taxa de

aprendizagem igual a 0.05.

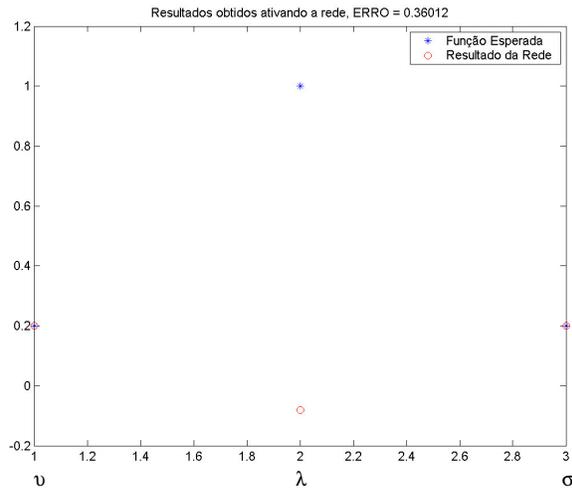


Figura 3. Comparação entre a saída da rede e a saída desejada: 1 neurônio na camada escondida, $\alpha = 0,7$ e $\eta=0,05$.

A Figura 4 mostra o resultado da ativação da rede também para 50 neurônios na camada escondida e taxa de aprendizagem igual a 0.05 e constante de momento igual a 0.

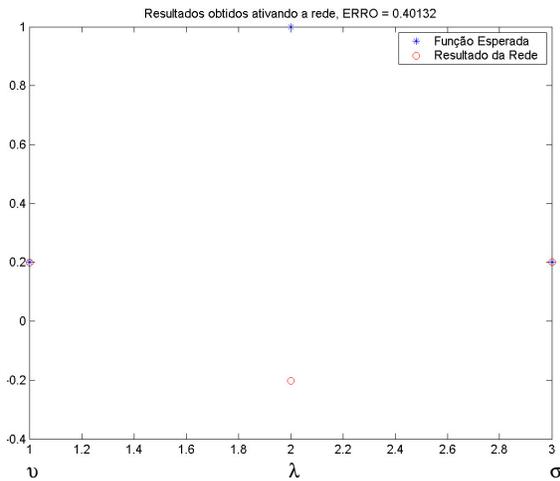


Figura 4. Comparação entre a saída da rede e a saída desejada: 50 neurônios na camada escondida, $\alpha = 0.1$ e $\eta = 1$.

A Figura 5 mostra o resultado da ativação da rede também para 1 neurônio na camada escondida e taxa de aprendizagem igual a 0.5 e constante de momento igual a 0.

Para escolher a melhor arquitetura do PMC para a recuperação dos parâmetros, procedeu-se da seguinte maneira: obteve-se a soma das diferenças entre a saída da rede e cada padrão durante ativação. A rede que apresentou o menor erro foi a escolhida. Dessa forma

obteve-se 4 arquiteturas de redes para cada conjunto de treinamento:

- ν fixo, λ fixo e σ variando: 2 neurônios na camada escondida, taxa de aprendizagem igual a 0.05 e constante de momento igual a 0.3.
- ν fixo, λ variando e σ fixo: 1 neurônio na camada escondida, taxa de aprendizagem igual a 0.05 e constante de momento igual a 0.3.
- ν variando, λ fixo e σ fixo: 1 neurônio na camada escondida, taxa de aprendizagem igual a 0.05 e constante de momento igual a 0.2.
- a união dos outros três conjuntos: 1 neurônio na camada escondida, taxa de aprendizagem igual a 0.05 e constante de momento igual a 0.

Como esses resultados partiu-se então para o teste de generalização das 4 redes obtidas.

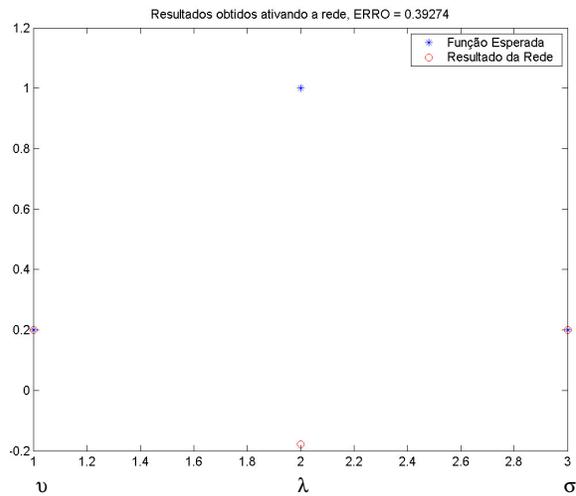


Figura 5. Comparação entre a saída da rede e a saída desejada: 1 neurônios na camada escondida, $\alpha = 0.5$ e $\eta = 0$.

4.2 Generalização

Para a generalização foram utilizados os pesos sinápticos e os desvios encontrados para cada arquitetura de rede. Foram utilizadas soluções da equação de KPZ com combinações de valores dos parâmetros diferentes daqueles utilizados no conjunto de treinamento.

4.2.1 Primeiro conjunto de treinamento (ν fixo, λ fixo e σ variando)

Neste caso, utilizou a solução numérica da equação de KPZ com valores dos parâmetros iguais a: $\nu = 1$, $\lambda = 3$ e $\sigma = -0.05$. O resultado obtido é apresentado na Figura 6. O erro médio entre a saída da rede e a saída desejada foi de 0,03.

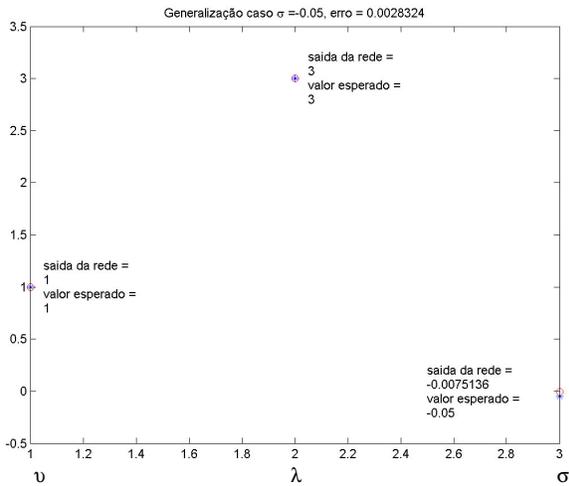


Figura 6. Teste de generalização

4.2.2 Segundo conjunto de treinamento (ν fixo, λ variando e σ fixo)

Neste caso, utilizou a solução numérica da equação de KPZ com valores dos parâmetros iguais a: $\nu = 1$, $\lambda = 0.35$ e $\sigma = 1$. O resultado obtido é apresentado na Figura 7. O erro médio entre a saída da rede e a saída desejada foi de 0,02.

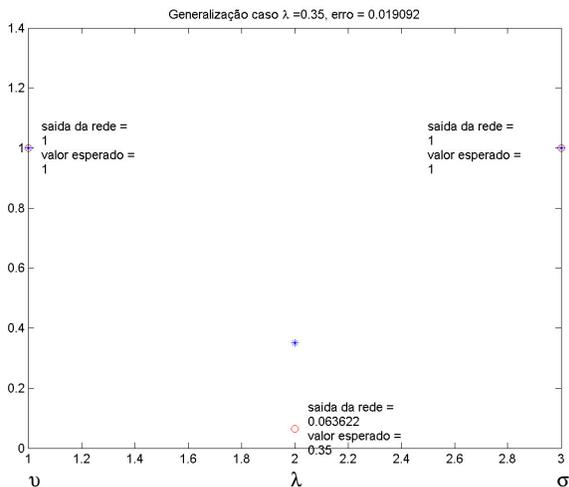


Figura 7. Teste de generalização

4.2.3 Terceiro conjunto de treinamento (ν variando, λ fixo e σ fixo)

Neste caso, utilizou a solução numérica da equação de KPZ com valores dos parâmetros iguais a: $\nu = -0.05$, $\lambda = 3$ e $\sigma = 1$. O resultado obtido é apresentado na Figura 8. O erro médio entre a saída da rede e a saída desejada foi de 0,001.

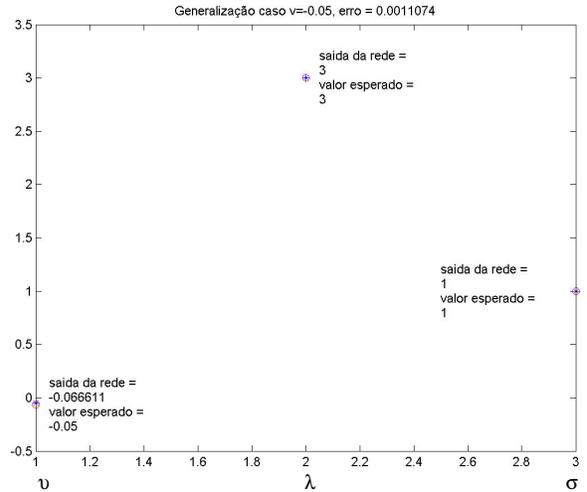


Figura 8. Teste de generalização

4.2.4 Quarto conjunto de treinamento (união dos outros três conjuntos)

Neste caso, utilizou a solução numérica da equação de KPZ com valores dos parâmetros iguais a: $\nu = -0.05$, $\lambda = 1.3$ e $\sigma = -0.15$. O resultado obtido é apresentado na Figura 9. O erro médio entre a saída da rede e a saída desejada foi de 0,16.

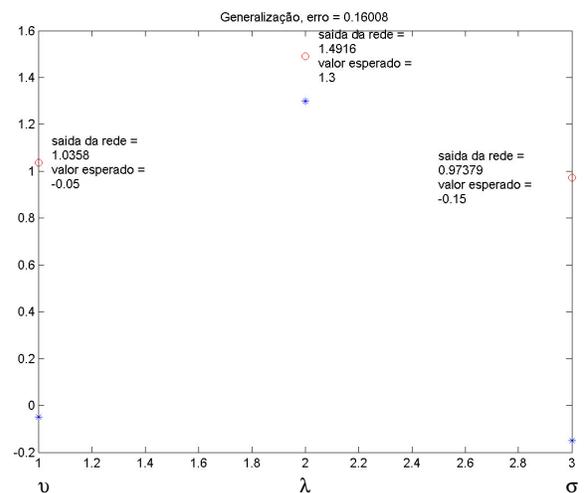


Figura 9. Teste de generalização

Analisado as Figuras com todos os testes de generalização é possível observar que a arquitetura de rede obtida para os três primeiros conjuntos de treinamento foi capaz de recuperar os parâmetros da equação de KPZ 2D. Para o quarto conjunto de treinamento o resultado não foi satisfatório.

A Figura 10 mostra uma região de uma amostra de silício poroso de tamanho compatível com as obtidas através do modelo numérico.

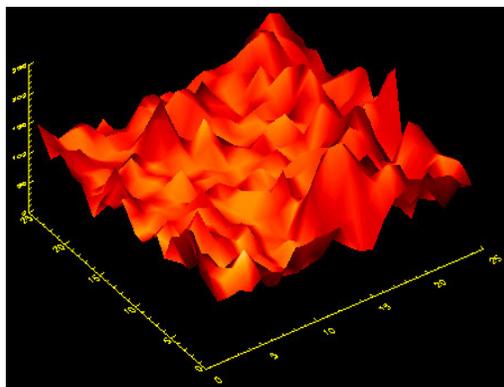


Figura 10. Região 25x25 pixels de uma imagem de uma superfície de silício poroso

Abaixo apresenta-se os valores de parâmetros encontrados para cada arquitetura de rede:

- Primeira arquitetura: $\nu = 1$, $\lambda = 3$ e $\sigma = 0,30605$
- Segunda arquitetura: $\nu = 0,99562$, $\lambda = 0,064598$ e $\sigma = 1,0013$
- Terceira arquitetura: $\nu = 1$, $\lambda = 3$ e $\sigma = 0,30605$
- Quarta arquitetura: $\nu = 0,96734$, $\lambda = 1,8495$ e $\sigma = 0,8784$.

5. Conclusões e Perspectivas

De diversos modos, as redes neurais são aplicadas para resolver diversos tipos de equações, ou ainda de maneira geral como foi estudado em [3] ou por classes como foi estudado em [4]. A utilização de modelos matemáticos para o estudo dos processos de formação estocásticas de estruturas [9] e sua aplicação na área de nanotecnologia é temas que recentemente tem recebido atenção da comunidade científica. A adequação de um modelo matemático para problemas específicos nessa área será capaz de contribuir para os projetos de nanofabricação [1].

A utilização de uma metodologia capaz de obter parâmetros de um modelo numérico que gera superfícies compatíveis com uma superfície real contribuirá para a geração de superfícies, de maneira ideal, que possam ser utilizadas na fabricação em série de nanodispositivos. Para o caso da equação de KPZ 2D, as redes neurais são uma alternativa, para este tipo de problema atual.

Os resultados da aplicação de uma rede neural do tipo perceptron de múltiplas camadas com algoritmo de aprendizagem de retropropagação do erro na obtenção dos parâmetros da equação de KPZ 2D mostrou-se eficiente, pois é possível observar que a rede recuperou os parâmetros quando dois dos três parâmetros são conhecidos. No caso dos três parâmetros desconhecidos (quarto conjunto de treinamento) a rede não apresentou resultados satisfatórios. Possivelmente, isso deve-se ao fato que o conjunto de treinamento não cobre todo o espaço de soluções, por isso deve-se aumentar este

conjunto para a obtenção de melhores resultados.

Conhecendo uma superfície e sabendo que ela pode ser modelada por um modelo numérico, este trabalho contribui como uma alternativa para encontrar os parâmetros que serão usados no modelo numérico para encontrar uma superfície compatível com uma superfície real. Além disso, a arquitetura das redes encontradas é simples e de fácil implementação (1 camada escondida com no máximo 2 neurônios).

Com os resultados obtidos é possível aplicar as arquiteturas de redes encontradas para tentar determinar os valores dos parâmetros de uma superfície de silício poroso.

Um próximo passo é gerar as superfícies com esses valores de parâmetros encontrados e analisar a morfologia, utilizando os Funcionais de Minkowski, por exemplo, e o nível de fragmentação assimétrica da superfície, utilizando a Análise de Padrões Gradientes, para verificar a compatibilidade com a superfície real.

6. Referências Bibliográficas

- [1] Baroni, M. P. M. A. Análise Matemático-Computacional de Superfícies Irregulares: Aplicações para Materiais Ativos Nanoestruturados. Dissertação. INPE, 2005.
- [2] Kardar, M.; Parisi, G.; Zhang, Yi-C. Dynamic scaling of Growing Interfaces. *Physical Review Letters*, v. 56, n. 9, p. 889-892, Mar. 1986.
- [3] Lagaris, I. E.; Likas, A. Fotiadis, D.I. Artificial Neural Networks for Solving Ordinary and Partial Differential Equations. *IEEE Transactions on Neural Networks*, v. 9, n. 5, Set. 1998.
- [4] He, S.; Reif, K.; Unbehauen, R. Multilayer neural networks for solving a class of partial differential equations. *Neural networks*, v. 13, n. 3, p. 385-396, 2000.
- [5] Baroni, M.P.M.A.; Rosa, R.R.; Silva, A F.; Pepe, I.; Roman, L.S.; Ramos, F.M.; Ahuja, R.; Persson, C.; Veje, E. Modeling and gradient pattern analysis of irregular SFM structures of porous silicon . *Microelectronics Journal*, accepted (in press), 2005.
- [6] Haykin, S. S. *Redes Neurais - Princípios e Prática*. Bookman Companhia Ed. 2ª edição, 2000.
- [7] Notas de aula Prof. José Demísio Simões de Souza, Neurocomputação, INPE, 2005. <<http://www.lac.inpe.br/~demisio/cap351.html>>.
- [8] Da Silva, A. F.; Rosa, R. R.; Roman, L. S.; Veje, E.; Pepe, I. Characterization of asymmetric fragmentation patterns in SFM images of porous silicon. *Solid State Communications*, v. 113, n. 12, p. 703-708, Jan. 2000.
- [9] Patrikar, R. M. Modeling and simulation of surface roughness. *Applied Surface Science*, v. 228, p. 213-220, 2004.

[10] Barabási, A. L.; Stanley, H. E. Fractal concepts in surface growth. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. 366p.

[11] Dotto, M. E. R. Universalidade e leis de escalas em amostras de silício atacadas quimicamente, Tese, Unicamp, 172p. 2003

[12] Canham, L. T. Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers. Applied Physics Letters, v. 51, n. 10, p. 1046-1048, 1990