

基于不同神经网络的 DLC 薄膜综合性能预测的对比研究

陈志立¹ 梁帅² 李国浩¹ 赵执鹏¹ 刘宇泰¹ 杜广煜^{1*}

(1. 东北大学机械工程与自动化学院 沈阳 110819; 2. 中国电子科技集团公司第五十五研究所 南京 210016)

Comparative Study on Comprehensive Properties Prediction of DLC Thin Films Based on Different Neural Networks

CHEN Zhili¹, LIANG Shuai², LI Guohao¹, ZHAO Zhipeng¹, LIU Yutai¹, DU Guangyu^{1*}

(1. School of Mechanical Engineering and Automation, Northeastern University, Shenyang 110819, China;

2. The 55th Research Institute, China Electronics Technology Group Corporation, Nanjing 210016, China)

Abstract Diamond-like carbon (DLC) films are widely used in mechanical, aerospace and other fields because of their excellent properties, such as high hardness and high wear resistance. However, in order to meet the needs of different industries, DLC thin films often adopt different preparation methods and process parameters to obtain different characteristics, and it is time-consuming and laborious to test the characterization performance of samples prepared by different process flows. In order to solve this problem, this paper explores the feasibility and applicability of different artificial neural networks in the field of film performance prediction. BP, ELM and KELM neural networks were trained by using the data of DLC films prepared by experiments as training samples, taking different process parameters as inputs and various properties of DLC films prepared by corresponding processes as outputs. Verified the three models by using the verification samples and compared the results of predictive values and true values of the three neural networks, relative error, determination coefficient and mean square error. The sensitivity analysis of the properties of the film was carried out with the best performance network model as a sample. The results show that the prediction accuracy and stability of KELM are better than BP and ELM neural networks, and KELM is more suitable for predicting the comprehensive properties of DLC films. And the influence of each process parameter on each performance index is obtained.

Keywords Diamond-like carbon film, Neural Network, Forecast model, Sensitivity analysis

摘要 类金刚石(DLC)薄膜因其具备高硬度、高耐磨性等优良性质而被广泛应用于机械、航空航天等领域。但为满足不同行业应用的需求, DLC 薄膜常常采用不同的制备方法及工艺参数以获得不同的特性, 对不同工艺流程制备出的样品进行表征性能测试费时费力。为了解决这一问题, 文章探索了不同人工神经网络在薄膜性能预测领域应用的可行性及适用性。将试验制备的 DLC 薄膜数据作为训练样本, 以不同的工艺参数作为输入, 对应工艺下制备的 DLC 薄膜各项性能作为输出, 对 BP、ELM、KELM 三种神经网络进行训练。利用验证样本对训练好的三种模型进行验证, 对比三种神经网络预测值与真实值的结果、相对误差、决定系数及均方误差, 以性能最佳的网络模型为样本对薄膜各性能进行灵敏度分析。结果表明, KELM 的预测精度与稳定性均优于 BP 与 ELM 神经网络, 更适用于 DLC 薄膜的综合性能预测, 且得到了各工艺参数对各性能指标的影响情况。

关键词 类金刚石薄膜 神经网络 预测模型 灵敏度分析

中图分类号: TP183

文献标识码: A

doi: 10.13922/j.cnki.cjvst.202212005

收稿日期: 2022-12-02

基金项目: 国家重点研发计划资助项目(2020YFB2007804); 中央高校基本科研业务费专项资金资助项目(N2203020)

* 联系人: (024)83676945; E-mail: gydu@mail.neu.edu.cn

类金刚石(Diamond-like Carbon, DLC)薄膜是碳的一种亚稳定形态,由 sp^2 和 sp^3 键结合而成,兼备金刚石与石墨的优良性质^[1],在机械^[2,3]、电子^[4,5]、医疗^[6]、航空航天^[7]等领域被广泛应用。DLC薄膜的性质范围很宽,而不同的领域应用对DLC薄膜的性能有着不同的要求^[8],例如:作为刀具涂层的DLC薄膜应具有高硬度、高耐磨性等特点^[9];用于医疗行业的DLC薄膜具备良好的生物相容性与化学惰性更为重要^[10];而DLC薄膜的低摩擦系数使其在航空航天领域备受关注^[11,12]。

等离子体增强化学气相沉积(PECVD)是制备DLC薄膜的主要方法之一^[13],而制备时的工艺参数直接影响着DLC薄膜的内部结构,也决定着其薄膜的各项性能^[14,15]。用试验方法探索测试不同条件下制得DLC薄膜的性质特征会耗费大量的人力物力^[16],而人工神经网络由于其较强的自学习能力可用于建立数据间的非线性函数映射模型,且占用计算资源较少^[17],将人工神经网络应用于不同工艺制备薄膜各项性能的预测可能是解决上述问题的有效途径之一。

文中将PECVD中常见的几个工艺参数(镀膜温度、基片负偏压及占空比、 C_2H_2 气流量、电子枪电流、Ar气流量)作为输入,将薄膜的各项性能(如硬度、成膜速率、杨氏模量、 I_D/I_G 值及膜基结合力)作为输出,训练BP、ELM、KELM三种神经网络,对比不同神经网络模型的预测值与真实值,最终以预测性能最佳的网络模型为样本对薄膜的各项性能进行敏感度分析。

1 试验

1.1 样品制备

试验选用标准高速钢试片,使用纯度99.5%的异丙醇进行超声波清洗。制备样品前先对设备进行例行检查,清理转架、电子枪以及炉体内部等位置的杂质与灰尘。将炉体抽真空至 10^{-2} Pa并加热至200℃进行烘烤除气,之后使用 Ar^+ 离子轰击基片表面30 min,去除基材表面污染物和氧化物,激发基片表面活性。刻蚀工艺完成后,将Cr原子向基体表面溅射沉积65 min,此粘结层用以提升DLC薄膜与基体之间的结合力,厚度约1 μm。最后使用热阴极辉光PECVD法制备DLC薄膜,在该工艺中,影响DLC薄膜性能的主要工艺参数有镀膜温度、

基片负偏压及占空比、 C_2H_2 气流量、电子枪电流、Ar气流量,各工艺参数的范围如表1所示。在表中所示的范围内,选取工艺参数,共制备34组试验样品。

表1 制备DLC薄膜样品的各工艺参数范围

Tab. 1 Range of process parameters for DLC film samples

Process parameters	Range
Temperature	200℃~260℃
C_2H_2 flow rate	220~400 mL/min
Ar flow rate	130~210 mL/min
Current of electron gun	10~70 A
Bias voltage	700~900 V
Duty ratio	25%~65%

1.2 样品表征

用球磨仪测量DLC薄膜的厚度,测量时间设定为8 s,测量三次取平均值,以测得的厚度与镀膜时间的比值(即成膜速率)表征各工艺参数下设备的工作效率;用纳米压痕仪测量DLC薄膜的硬度和杨氏模量,定深压入20 nm进行测量;用Raman光谱仪对DLC薄膜进行Raman光谱分析,波长633 nm,光谱测量范围 $1000\sim 2000\text{ cm}^{-1}$,采用Gauss方法分峰并得到 I_D/I_G 比值;用划痕仪与3D显微镜表征DLC薄膜的膜基结合力,划痕仪在压头滑动过程中施加载荷,划痕共9 mm,载荷由0 N至100 N线性增大,使用3D显微镜观察第一破裂点,并以起始点与第一破裂点距离量化膜基结合力的大小。

2 人工神经网络

人工神经网络(Artificial Neural Networks, ANN)是受到生物神经网络启发而建立的一种用于信息处理的模型^[18]。一种简单的神经网络结构如图1所示,主要分为输入层、隐含层与输出层, x_i 为各输入节点, y_i 为各输出节点,Cell_j为各隐含层神经元。输入层与隐含层、隐含层与输出层之间由权值与阈值向量连接,输入量通过与权值和阈值矩阵的计算、隐含层神经元激活函数的处理等最终成为输出量。而不同的神经网络用不同的方法调整各层之间的权值与阈值矩阵以降低预测值与实际值的误差值大小。由于神经网络具备良好的自组织、自适应、与自学习能力,因而被广泛的被应用于预测、模式识别、自动控制等领域^[19]。

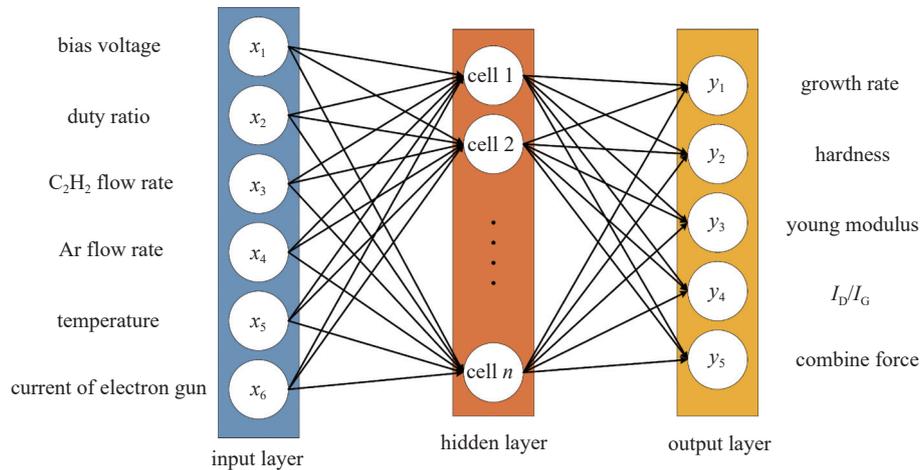


图1 神经网络结构

Fig. 1 Neural network structure

2.1 BP 神经网络

BP(Back Propagation)神经网络是一种多层前馈型神经网络,采用误差反向传播训练方法来提高网络准确率,是应用最广泛的神经网络模型之一^[20]。

BP神经网络的训练包含工作信号正向传递与误差信号反向传递两个过程。正向传递过程中,每个节点 x_j 的输出值由上一层所有节点 x_i 的输出值、当前节点与上一层节点的权值 w_{ij} 、当前节点的阈值 b_j 以及激活函数 f 共同决定,计算如式(1):

$$x_j = f\left(\sum w_{ij}x_i + b_j\right) \quad (1)$$

而在反向传递过程中,将预测值 d_j 与真实值 y_j 的误差信号反向传递,通过梯度下降法更新权值与阈值,再用更新后的权值与阈值正向传递输入信号。BP神经网络经过多次迭代,反复修正权值与阈值,使得误差函数值达到一定范围之内,完成训练。误差函数值的计算如式(2):

$$E(\omega, b) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{n-1} (d_j - y_j)^2 \quad (2)$$

BP神经网络可以应用在多种领域,Robert Hecht-Nielsen 证明了对于任何闭区间内的一个连续函数都可以用一个隐含层的 BP神经网络来逼近,即万能逼近原理^[21]。但 BP神经网络也存在一些问题,例如训练速度慢、易陷入局部极小等^[22]。

2.2 极限学习机

极限学习机(Extreme Learning Machine, ELM)是一种单隐含层前馈神经网络。和 BP神经网络不同,ELM避免了复杂数学运算,不需要多次迭代反向传递误差,而是通过求解广义逆矩阵的方法更新

权值阈值进而提高预测拟合性能^[23]。

ELM网络训练分为两个阶段:随机特征映射和线性参数求解。在随机特征映射阶段,隐含层阶段参数(ω 和 b)根据连续的概率分布随机生成,得到隐含层输出矩阵 H 。输出权值 β 为线性参数求解阶段需要求解的参数,将神经网络的输出 $H\beta$ 与样本矩阵 T 的最小化平方差作为训练误差的评价指标,使其函数值最小的解即为训练的最优解,如式(3):

$$\min \|H\beta - T\|^2 \quad (3)$$

根据数学公式推导,要使训练达到最佳效果, β 值的解为:

$$\beta^* = H^+T \quad (4)$$

其中 H^+ 为矩阵 H 的广义逆矩阵,此时 β 值的求解即为求解矩阵 H 的广义逆矩阵问题。

隐含层输出矩阵 H 的随机生成与训练样本个数与数目无关,因而和 BP神经网络相比,ELM训练效率更高。

2.3 核极限学习机

由 ELM网络输出权值的求解可知,需要计算隐含层输出矩阵 H 的广义逆矩阵 H^+ ,但由于 ELM网络的隐含层输出矩阵 H 的生成是随机的,这就使得输出权值矩阵 β 的计算并不稳定^[24]。为了改善这一问题,提出核极限学习机(Kelme Extreme Learning Machine, KELM)网络算法。

在 KELM中,用核函数矩阵 Ω 代替了 ELM网络中生成的隐含层随机矩阵 H 。核函数矩阵 Ω 的计算式(5):

$$\Omega = H^T = h(x_i)h(x_j) = K(x_i, x_j) \quad (5)$$

引入正则化系数 C 、单位矩阵 I ，将核函数矩阵 Ω 代入输出权值矩阵 β 的求解中^[25]，此时 β 最优值的计算可用式(6)求解：

$$\beta^* = H^* \left(\frac{I}{C} + HH^T \right)^{-1} T \quad (6)$$

由上式可以看出，KELM 通过引入正则化系数 C 与核函数 Ω 将输出权值矩阵 β 的求解转变为矩阵内积的计算，避免了 ELM 网络训练时因随机分配隐含层权值阈值带来的不稳定性影响，提高了 ELM 的泛化性能^[26]。

3 网络的构建

3.1 数据获得

将偏压、占空比、乙炔气流量、电子枪电流、温度和氩气流量作为输入层参数，成膜速率、硬度、杨氏模量、拉曼光谱 I_D/I_G 值及膜基结合力作为输出层参数，将所有试验数据分为训练集与验证集。从 34 组试验数据中随机选取 5 组作为验证集，余下 29 组试验数据作训练集。为了保证预测结果的质量，要对数据进行归一化处理，在将预测值与实际值进行对比时，预测值需要进行反归一化处理。

3.2 神经网络模型训练

3.2.1 BP 神经网络训练

设定 BP 神经网络训练前的各项参数，设置目标最小误差为 1.0×10^{-5} ，学习速率为 0.01，最大迭代次数为 1000 次，激活函数采用 Sigmoid 函数，如式(7)：

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (7)$$

一般来说隐含层的节点数量对神经网络的预测精度有着一定影响，在这里隐含层节点数按经验公式选取，如式(8)：

$$l = \sqrt{m+n} + a \quad (8)$$

式中， l 为隐含层节点数量； m 、 n 分别为输入层与输出层节点数； a 为常数，一般取值为 1~10 之间。

由经验公式、输入输出层节点数量以及多次尝试，最终确定隐含层节点数量为 10。

3.2.2 ELM 极限学习机训练

设定 ELM 神经网络训练前的参数，隐含层的激活函数选择 Sigmoid 函数，由于 ELM 无需多次迭代计算误差值，且权值阈值无需在训练过程中调整，因此在 ELM 神经网络中只需设置隐含层的神经元数量，和 BP 神经网络隐含层神经元数量选择的原则一致，最终确定隐含层节点数量为 10。

3.2.3 KELM 核极限学习机训练

设定 KELM 神经网络训练前的参数，选择核矩阵函数为 RBF 径向基函数，设定核矩阵系数 S 为 2，正则化系数 C 为 25。

4 灵敏度分析

灵敏度分析 (Sensitivity analysis, SA) 的目的在于明确未知映射模型中各项输入参量变化对输出结果的影响。全局灵敏度分析方法被广泛应用于非线性较高的模型分析中，本文中使用 Sobol 灵敏度分析方法通过一阶以及全局灵敏度数值大小分析各工艺参数对性能指标的影响程度^[27]。

Sobol 灵敏度分析方法采用方差对描述模型输入参数对输出结果的不确定性，可以将模型输出相应的方差 Y 归因于各个输入参数 X 以及各个输入变量之间的交叉效应^[28]，通过高维模型展开，如式(9)：

$$Y = f_0 + \sum_{i=1}^d f_i(X_i) + \sum_{i<j}^d f_{ij}(X_i, X_j) + \dots + f_{1,2,\dots,d}(X_1, X_2, \dots, X_d) \quad (9)$$

式中 f_0 为常数， f_i 是 X_i 的函数，依此类推。当函数 f 平方可积、输入变量相互独立且展开式中所有项两两相互正交时，将公式分解的每一项进行定义：

$$\begin{cases} f_0 = E(Y) \\ f_i = E(Y|X_i) - f_0 \\ f_{ij}(X_i, X_j) = E(Y|X_i, X_j) - f_0 - f_i - f_j \end{cases} \quad (10)$$

此时将展开式两边同时取方差可得：

$$V(Y) = \sum_{i=1}^d V_i + \sum_{i<j}^d V_{ij} + \dots + V_{1,2,\dots,d} \quad (11)$$

式中： $V_i = V(E(Y|X_i))$ ； $V_{ij} = V(E(Y|X_i, X_j)) - V_i - V_j$ 。其中，一阶偏方差 V_i 衡量了输入变量 X_i 对输出结果的单独影响大小，二阶偏方差 V_{ij} 衡量输入变量 X_i 和 X_j 对输出结果的共同影响大小。根据全方差公式， X_i 对应的总偏方差 V_{T_i} 可以通过总方差减去 X_i 对应的一阶偏方差得到，即 $V_{T_i} = V(Y) - V(E(Y|X_i))$ 。

一阶灵敏度指数 S_i 与全局灵敏度指数 S_{T_i} 通过 V_i 与 V_{T_i} 的标准化得到，计算如式(12)：

$$\begin{cases} S_i = \frac{V(E(Y|X_i))}{V(Y)} \\ S_{T_i} = \frac{V(Y) - V(E(Y|X_i))}{V(Y)} = \frac{E(V(Y|X_i))}{V(Y)} \end{cases} \quad (12)$$

5 结果与讨论

5.1 预测结果

在神经网络完成训练后，将 5 组试验数据中的

6 个工艺参数作为输入, 得到不同神经网络模型的预测结果。图 2 为不同神经网络模型对成膜速率、硬度、杨氏模量、 I_D/I_G 、结合力的预测值与试验值对比图, 由图 2 可以看出各神经网络对五个性能参数的预测情况。总的来说, BP 神经网络与 ELM 神经网络对各项性能的预测在一些验证组上有着不错的准确率, 但整体的预测性能并不稳定。

5.2 相对误差对比

计算全部预测值与真实值的相对误差, 并取绝对值, 如图 3 为 BP、ELM、KELM 三种神经网络对各项性能预测值与真实值的相对误差情况。从图中可以看出 ELM 神经网络的各项预测稳定性最差, 对成膜速率、硬度、 I_D/I_G 预测的相对误差在 2.4%~66.8% 之间变化, 对杨氏模量结合力预测的相对误

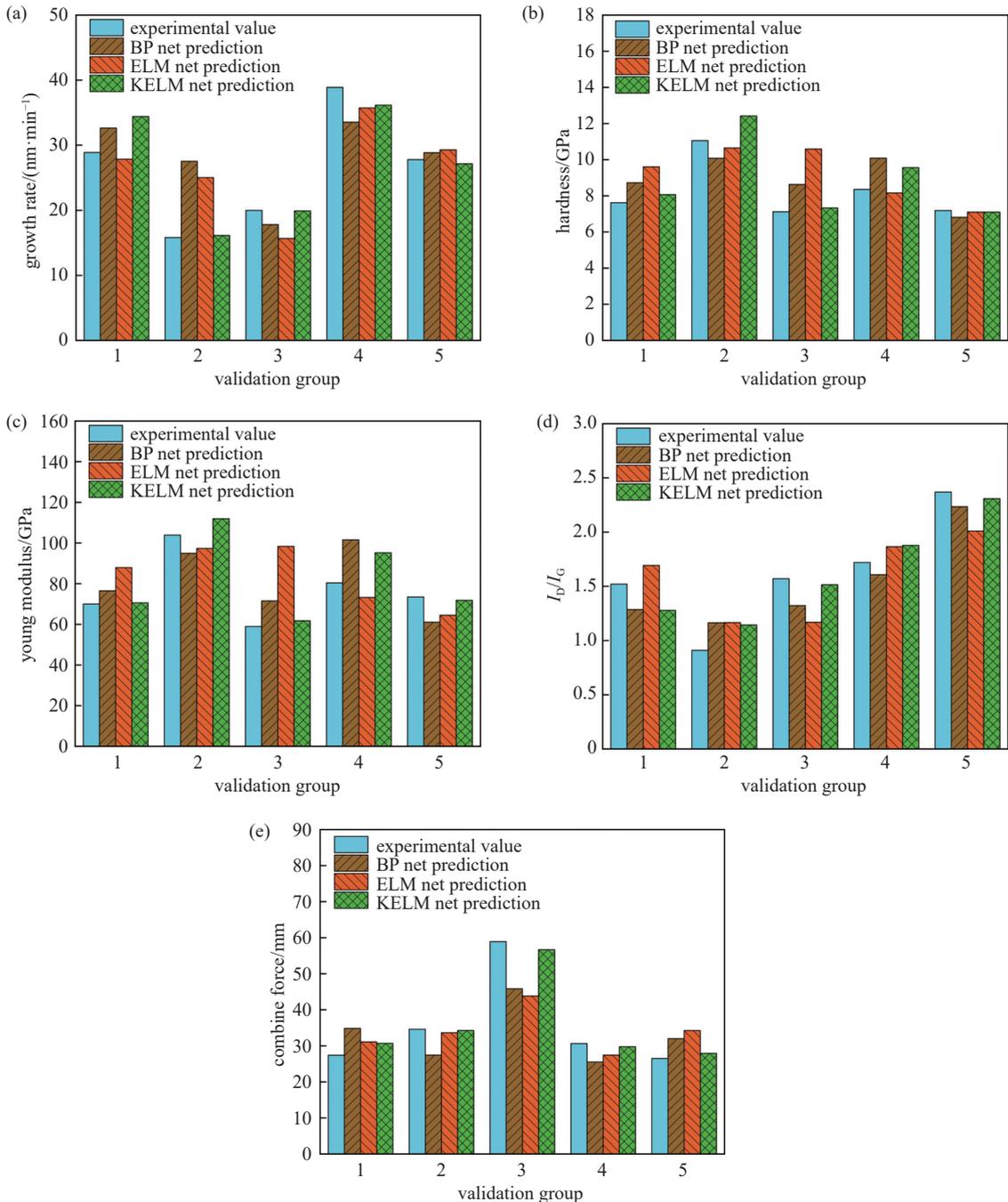


图2 不同神经网络模型的预测值与真实值(a)成膜速率; (b)硬度; (c)杨氏模量; (d) I_D/I_G ; (e)结合力

Fig. 2 Predicted and true values of different neural network models (a) growth rate; (b) hardness; (c) Young's modulus; (d) I_D/I_G ; (e) combine force

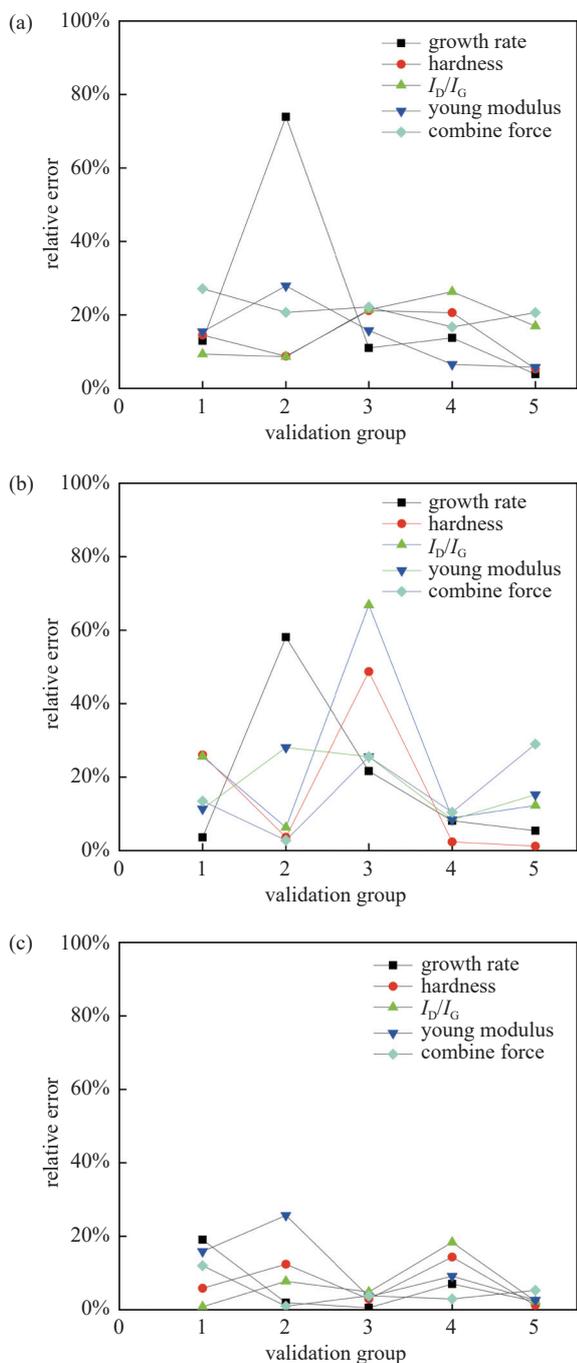


图3 不同网络模型预测值与真实值的相对误差 (a) BP net; (b) ELM net; (c) KELM net
 Fig. 3 Relative error between predicted and true values of different network models (a) BP net; (b) ELM net; (c) KELM net

差在 2.8%~28.1% 之间浮动。BP 神经网络对薄膜生长速率的预测效果稳定性最差,其相对误差最高达到 73.9%,对硬度、 I_D/I_G 、杨氏模量、结合力的预测结果相对误差在 5.3%~27.9% 之间浮动。KELM 神经网络的各项预测稳定性是最好的,对成膜速率、

硬度、杨氏模量、 I_D/I_G 、结合力预测的相对误差均在 0.5%~25.7% 之间浮动。从各组预测值与真实值的相对误差上来看, KELM 的预测性能更佳。

5.3 决定系数与均方误差对比

为了更好的评估训练后的神经网络,采用决定系数与均方误差对各网络的性能进行评估。决定系数也被称为拟合优度,常用于评价预测性能的优劣,决定系数越接近 1,拟合程度越高,网络的性能越好。均方误差可以体现网络的拟合程度与稳定性,均方误差越小,网络预测结果越准确且越稳定。可以看出,决定系数的范围在 0~1 之间,用于评价预测性能时,不会受到预测值与真实值自身数量级大小的影响,可以用于比较同一神经网络对不同物理量的预测性能。但也由于其范围较小,当不同网络对同一物理量的预测性能相近时,计算出的决定系数值可能无限接近,难以进行预测性能差异的比较;与决定系数不同,使用均方误差对预测性能进行评价时,预测值与真实值自身的数量级越大,其对应的均方误差一般也越大,因此不能用于比较神经网络对不同物理量的预测性能。而均方误差的数值范围很大,即便不同网络对同一物理量的预测性能相近,也可以通过比较均方误差值的大小来评价不同网络预测性能的优劣。

决定系数的计算如式(13):

$$R^2 = \frac{(n \sum_{i=1}^n t_{sim} t_{test} - \sum_{i=1}^n t_{sim} \times \sum_{i=1}^n t_{test})^2}{[n(\sum_{i=1}^n t_{sim})^2 - (\sum_{i=1}^n t_{sim})^2] \times [n(\sum_{i=1}^n t_{test})^2 - (\sum_{i=1}^n t_{test})^2]} \quad (13)$$

式中 n 为测试集样本个数, t_{sim} 和 t_{test} 分别为根据测试集进行计算的神经网络预测值和验证集样本真值。

分别计算三种神经网络对成膜速率、硬度、杨氏模量、 I_D/I_G 、结合力预测结果的决定系数与均方误差,表 2、表 3 为计算后的结果。对比之后可以看出, KELM 对各性能预测的决定系数均为最高,均方误差均为最低。

表 2 不同类型网络训练后各项输出参数的决定系数

Tab. 2 Determining coefficients of different neural networks for various performances

Net type	Growth rate	Hardness	Young modulus	I_D/I_G	Combine force
BP	0.47	0.48	0.41	0.86	0.61
ELM	0.68	0.54	0.36	0.68	0.81
KELM	0.89	0.98	0.93	0.88	0.99

表 3 不同类型网络训练后各项输出参数的均方误差

Tab. 3 Mean square error of different neural networks for various performances

Net type	Growth rate	Hardness	Young modulus	I_D/I_G	Combine force
BP	37.10	1.51	176.92	0.04	66.63
ELM	19.43	3.29	330.45	0.10	52.20
KELM	7.67	0.71	58.82	0.03	3.75

5.4 灵敏度分析结果

以各性能拟合效果最佳的 KELM 网络预测结果作为灵敏度分析样本, 通过 Matlab 求解得到偏压、占空比、乙炔气流量、电子枪电流、温度和氩气气流量对各项性能的一阶灵敏度和全局灵敏度。成膜速率、硬度、杨氏模量、拉曼光谱、 I_D/I_G 值及膜基结合力的灵敏度分析结果如表 4~8 所示。

表 4 成膜速率灵敏度分析结果

Tab. 4 Sensitivity analysis results of growth rate

SA	Bias voltage	Duty ratio	C_2H_2 flow rate	Current of electron gun	Temperature	Ar flow rate
First-order	0.1040	0.0210	0.3400	0.5010	0.0055	-0.0522
Global	0.1200	0.0121	0.3960	0.5610	-0.0116	0.0423

表 5 硬度灵敏度分析结果

Tab. 5 Sensitivity analysis results of hardness

SA	Bias voltage	Duty ratio	C_2H_2 flow rate	Current of electron gun	Temperature	Ar flow rate
First-order	0.0763	0.0603	0.1020	0.5710	0.0848	0.1350
Global	0.1720	0.2130	0.2000	0.7870	0.0582	0.2050

表 6 杨氏模量灵敏度分析结果

Tab. 6 Sensitivity analysis results of Young's modulus

SA	Bias voltage	Duty ratio	C_2H_2 flow rate	Current of electron gun	Temperature	Ar flow rate
First-order	0.0755	0.0855	0.1200	0.5350	0.1040	0.1130
Global	0.1960	0.2460	0.2480	0.7710	0.1040	0.1230

表 7 I_D/I_G 灵敏度分析结果

Tab. 7 Sensitivity analysis results of I_D/I_G

SA	Bias voltage	Duty ratio	C_2H_2 flow rate	Current of electron gun	Temperature	Ar flow rate
First-order	0.1776	0.1040	0.1410	0.5773	0.2290	0.0976
Global	0.1380	0.2990	0.1645	0.6297	0.1690	0.1816

表 8 膜基结合力灵敏度分析结果

Tab. 8 Sensitivity analysis results of combine force

SA	Bias voltage	Duty ratio	C_2H_2 flow rate	Current of electron gun	Temperature	Ar flow rate
First-order	0.0797	0.0977	0.5576	0.2145	0.0073	0.1026
Global	0.2341	0.1748	0.4552	0.2670	0.0618	0.0723

由表可知, 各工艺参数波动对各性能的影响程度大小关系为: 成膜速率: $S_4 > S_3 > S_1 > S_2 > S_5 > S_6$; 硬度: $S_4 > S_6 > S_3 > S_5 > S_1 > S_2$; 杨氏模量: $S_4 > S_3 > S_6 > S_5 > S_2 > S_1$; I_D/I_G : $S_4 > S_5 > S_1 > S_3 > S_2 > S_6$; 膜基结合力: $S_3 > S_4 > S_6 > S_2 > S_1 > S_5$ 。其中 S_1 为偏压, S_2 为偏压占空比, S_3 为乙炔气流量, S_4 为电子枪灯丝电流, S_5 为温度, S_6 为氩气气流量。

综合上述的各项结果, 即说明在 DLC 薄膜的

综合性能预测上, BP、ELM、KELM 三种神经网络中, KELM 展现出了更好的拟合性能与稳定性。但也发现了一些问题, 即便 KELM 网络模型的性能最佳, 但其在部分验证组的预测结果相对误差最高仍达到了 25% 以上, 训练样本少是导致部分验证组预测结果误差大的重要原因; 而综合灵敏度分析结果可知, 对于整个薄膜制备工艺映射模型, 在设定的参数范围内, 电子枪灯丝电流对薄膜的沉积速率及

各方面力学性能影响最大;乙炔气流量的大小对膜基结合力及成膜速率有着重要影响;偏压、占空比及氩气流量为影响薄膜各项性能的次要因素;温度在设定范围内,对 I_D/I_G 有着一定影响,而对其他各项性能的影响占比都较小,这可能是温度的设定范围较小所导致。

在后续的工作中,仍需优化网络,通过增加实验数据量、增加隐含层数、调整正则化系数取值、采用遗传等算法优化权值阈值等方式提高少样本预测准确度。

6 结论

文中以试验制备的 DLC 薄膜数据作为样本源,将 PECVD 制备中的重要工艺参数作为输入,将 DLC 薄膜的各项特征性质作为输出,训练神经网络。探索神经网络在薄膜综合性能预测领域应用的可行性,以及不同神经网络的适用性。研究结果表明,训练后的神经网络可以对 DLC 薄膜的性能进行预测,将各网络模型预测值与真实值的结果与相对误差、决定系数与均方误差进行对比, KELM 神经网络的各项表现优于 BP 与 ELM 神经网络。在 DLC 薄膜的各项性能预测上, KELM 神经网络具备更好的预测精度与稳定性。而各个工艺参数对 DLC 薄膜的各项性能影响占比各不相同,在本文给定的参数选取范围内,电子枪灯丝电流与乙炔气流量对 DLC 薄膜各项性能的影响占据主导作用,偏压、占空比及氩气流量为次要影响因素,温度的影响占比最小。

参 考 文 献

- [1] Jia dongxu, Liu xing, Sun gang, et al. Effect of substrate heating temperature on the structure and frictional wear properties of WC-DLC coatings[J]. Chinese Journal Vacuum Science and Technology, 2022, 42(05): 364–370 (贾东旭, 刘星, 孙刚, 等. 衬底加热温度对 WC-DLC 涂层结构和摩擦磨损性能的影响[J]. 真空科学与技术学报, 2022, 42(05): 364–370(in chinese))
- [2] Wang L, Liu Y, Chen H, et al. Modification methods of diamond like carbon coating and the performance in machining applications: a review[J]. Coatings, 2022, 12(2): 224
- [3] Park C, Choi S G, Park H, et al. Compensation effect of boron and nitrogen codoping on the hardness and electrical resistivity of diamond-like carbon films prepared by magnetron sputtering deposition[J]. Journal of Materials Research, 2012, 27(23): 3027–3032
- [4] Jo Y J, Zhang T F, Son M J, et al. Synthesis and electrochemical properties of Ti-doped DLC films by a hybrid PVD/PECVD process[J]. Applied Surface Science, 2018, 433: 1184–1191
- [5] Ait-Hamouda K, Ababou A, Ouchabane M, et al. Study of optical properties of diamond-like carbon/porous silicon antireflective coating layers for multicrystalline silicon solar cell applications[J]. Vacuum, 2007, 81(11-12): 1472–1475
- [6] Love C A, Cook R B, Harvey T J, et al. Diamond like carbon coatings for potential application in biological implants—a review[J]. Tribology International, 2013, 63: 141–150
- [7] Zhou Y, Chen Z, Hu Z, et al. Tribological performance of hydrogenated diamond-like carbon coating deposited on superelastic 60NiTi alloy for aviation self-lubricating spherical plain bearings[J]. Chinese Journal of Aeronautics, 2022, 35(12): 309–320
- [8] Kamada T, Sohma Y, Watanabe M, et al. Fabrication of diamond-like carbon films using pseudo-spark discharge plasma-enhanced chemical vapor deposition method[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 2014, 53(6): 68001–68006
- [9] Chenrayan V, Manivannan C, Velappan S, et al. Experimental assessment on machinability performance of CNT and DLC coated HSS tools for hard turning[J]. Diamond and Related Materials, 2021, 119: 108568
- [10] Harigai T, Tamekuni K, Iijima Y, et al. Wear-resistive and electrically conductive nitrogen-containing DLC film consisting of ultra-thin multilayers prepared by using filtered arc deposition[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 2019, 58(SE): D5
- [11] Suzuki A, Aiyama Y, Tokoro M, et al. Friction and wear characteristics of hydrogenated diamond-like carbon films formed on the roughened stainless steel surface[J]. Wear, 2010, 269(1-2): 118–124
- [12] Li dangjuan, Wang na, Wu shenjiang, et al. Stress state of DLC films under different process parameters[J]. Chinese Journal Vacuum Science and Technology, 2020, 40(05): 421–426 (李党娟, 王娜, 吴慎将, 等. 不同工艺参数下 DLC 薄膜的应力状态[J]. 真空科学与技术学报, 2020, 40(05): 421–426(in chinese))
- [13] Yang W J, Sekino T, Shim K B, et al. Microstructure and tribological properties of SiOx/DLC films grown by

- PECVD[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2005, 194(1): 128–135
- [14] Liu J Q, Li L J, Wei B, et al. Effect of sputtering pressure on the surface topography, structure, wettability and tribological performance of DLC films coated on rubber by magnetron sputtering[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2019, 365: 33–40
- [15] Caschera D, Cossari P, Federici F, et al. Influence of PECVD parameters on the properties of diamond-like carbon films[J]. *Thin Solid Films*, 2011, 519(12): 4087–4091
- [16] Nakamura K, Ohashi H, Enta Y, et al. Effects of silicon doping on the chemical bonding states and properties of nitrogen-doped diamond-like carbon films by plasma-enhanced chemical vapor deposition[J]. *Thin Solid Films*, 2021, 736: 138923
- [17] Liu X, Tian S, Tao F, et al. A review of artificial neural networks in the constitutive modeling of composite materials[J]. *Composites Part B:Engineering*, 2021, 224: 109152
- [18] Ding S, Li H, Su C, et al. Evolutionary artificial neural networks: a review[J]. *Artificial Intelligence Review*, 2013, 39(3): 251–260
- [19] Ulas M, Altay O, Gurgenc T, et al. A new approach for prediction of the wear loss of PTA surface coatings using artificial neural network and basic, kernel-based, and weighted extreme learning machine[J]. *Friction*, 2020, 8(6): 1102–1116
- [20] Ibrahim A O, Shamsuddin S M, Abraham A, et al. Adaptive memetic method of multi-objective genetic evolutionary algorithm for backpropagation neural network[J]. *Neural Computing and Applications*, 2019, 31(9): 4945–4962
- [21] Hecht-Nielsen. Theory of the backpropagation neural network, 1989[C]. IEEE TAB Neural Network Committee, 1989
- [22] Siu S, Yang S, Lee C, et al. Improving the Back-Propagation Algorithm Using Evolutionary Strategy[J]. *IEEE Transactions on Circuits and Systems II:Express Briefs*, 2007, 54(2): 171–175
- [23] Eshay M, Faris H, Obeid N. Metaheuristic-based extreme learning machines: a review of design formulations and applications[J]. *International Journal of Machine Learning and Cybernetics*, 2019, 10(6): 1543–1561
- [24] Cao J, Lin Z, Huang G. Self-Adaptive evolutionary extreme learning machine[J]. *Neural Processing Letters*, 2012, 36(3): 285–305
- [25] Iosifidis A, Tefas A, Pitas I. DropELM: Fast neural network regularization with dropout and DropConnect[J]. *Neurocomputing*, 2015, 162: 57–66
- [26] Shamshirband S, Mohammadi K, Chen H, et al. Daily global solar radiation prediction from air temperatures using kernel extreme learning machine: A case study for Iran[J]. *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 2015, 134: 109–117
- [27] Sakurahara T, Reihani S, Kee E, et al. Global importance measure methodology for integrated probabilistic risk assessment[J]. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part O:Journal of Risk and Reliability*, 2020, 234(2): 377–396
- [28] Borgonovo E, Plischke E. Sensitivity analysis: a review of recent advances[J]. *European Journal of Operational Research*, 2016, 248(3): 869–887