REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



Université de Batna
Faculté Des Sciences de l'Ingénieur
Département d'Electronique



Mémoire
Présenté en vue de l'obtention du diplôme de Magister en Electronique

OPTION
Technologie des semi-conducteurs et dispositifs photovoltaïques

PAR

Torche Saber

THEME

Modélisation par les réseaux de neurones et simulation d'un biocapteur à base de FET

Soutenu le : 10 / 12 / 2008

Devant le jury :

Président :	*Dr. Z. DIBI*	*M.C*	*U. Batna*
Rapporteur :	*Dr. R. MAHAMDI*	*M.C*	*U. Batna*
Examinateurs :	*Dr. H. BOURIDAH*	*M.C*	*U. Jijel*
	Dr. A. BENHAYA	*M. C*	*U. Batna*
	Dr. F.DJEFFAL	*M. C*	*U. Batna*

Remerciements

Mes remerciements s'adressent tout d'abord au Dieu tout puissant de m'avoir donné tous ce que je possède et de guider mes pas vers le chemin du savoir.

Je tiens à exprimer ma haute gratitude, mes profonds respects et mes sincères remerciements et reconnaissances d'abord à Monsieur R. MAHAMDI Maître de Conférences au Département d'Électronique, Université Hadj Lakhdar Batna qui m'a guidé avec grande patience tout au long de l'élaboration de ce travail.

J'adresse mes chaleureux remerciements à Monsieur Z. DIBI Maître de Conférences au Département d'Électronique, Université Hadj Lakhdar Batna, pour avoir accepté de présider le Jury de ce mémoire.

Mes sincères remerciements sont adressés à Monsieur F. DJEFFAL Maître de Conférences au Département d'Electronique, Université de Batna, qui ma fait l'honneur de s'intéresser à ce travail, pour ses aides précieuses, et pour m'avoir honoré en acceptant d'examiner ce modeste travail.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude et ma reconnaissance à Monsieur A.BENHAYA Maître de Conférences au Département d'Electronique, Université de Batna, et Monsieur H. BOURIDAH Maître de Conférences à l'Université de Jijel, qui m'ont fait l'honneur de participer au jury et examiner ce travail.

Mes sincères remerciements sont également adressés à Monsieur A. ERRACHID Professeur à l'Université de CLAUDE BERNARD-LYON1 pour son aide précieuse et pour avoir accepté de nous aider prochainement dans des sujets similaires.

Je tiens également à remercier Madame le Professeur F. MANSOUR Directrice du LEMEAMED (Laboratoire d'Etude des Matériaux Electronique pour Applications Médicales), Département d'Électronique, Université Mentouri de Constantine, qui m'a fait l'honneur de s'intéresser à ce travail en acceptant de m'intégrer dans son laboratoire.

Dédicace

A

Ma tendre mère

A

Mon père

A

Mes frères et mes sœurs.

A l'ensemble des enseignants

A tous mes collègues et amis.

Je dédie ce mémoire.

Symbole	Description	Unité
ChemFET	Chemical Field Effect Transistor	
ISFET	Ion Selective Field Effect Transistor	
MOSFET	Metal oxide semi-conductor field effect transistor	
pH	Potentiel d'hydrogène	
RNA	Réseau de neurones artificiel	
ANN	Artificial Neural Network	
ANN-model	Modèle à base des réseaux de neurones	
MLP	Multi layer perceptron	
EQM	Erreur quadratique moyenne	
MSE	Mean squared error	
V_{gs}	Tension Grille - Source	Volt
V_{ds}	Tension Drain - Source	Volt
I_{ds}	Courant du drain	Ampère
S	Sensibilité	mV/pH
T	Température	°C
TCF	Coefficient de dérive thermique	mV/°C
Vout	Tension de sortie	Volt

Table des matières

Introduction générale……..…….……..1

Chapitre I : Les capteurs chemFETs

I.1. Principe de fonctionnement des ChemFETs ..... ….3
I.2. Principe physico-chimique de détection 4
I.3. Détermination du potentiel chimique ψ 5
I.3.1 Etude de l'interface solide-électrolyte 5
I.3.2. Interface Electrolyte/Isolant/Silicium (EIS) 8
I.4. Détection du pH 11
I.5. Principe de mesure 13
I.6. Le micro-capteur pH-ISFET 14
I.6.1 Technologie de fabrication de l'aiguille 16
I.6.2 Caractérisation du micro-capteur pH-ISFET 17
Conclusion 19

Chapitre II: Les réseaux de neurones artificiels

Introduction 20
II.1. Modèle d'un neurone 20
II.1.1. Fonctions de transfert 24
II.1.2 Architecture de réseau 26
II.1.3 Le perceptron multicouches 30
II.1.4 L'apprentissage (supervisé) 30
II.1.5 La rétropropagation 31
II.2. Topologies des réseaux de neurones 31
II.2.1 Le réseau de neurone à propagation avant (feedforward) 31
II.2.2 Réseau de neurone récursif 32
II.3. Le choix de l'architecture des RNA 33
II.4. L'algorithme d'apprentissage : « Back propagation » 33
II.5. Propriétés des réseaux de neurones multicouches 34
II.5.1.La propriété d'approximation universelle 34
II.5.2 La propriété de parcimonie 35
II.6. Applications des réseaux de neurones 35
Conclusion 36

Chapitre III: Modélisation du pH-ISFET par les RNA (ANN)

Introduction 37
III.1 Modélisation du capteur pH-ISFET : 37
III.1.1. Macro-modélisation du capteur pH-isfet (Mosfet based macro-model): 37
III.1.2.Simulation du modèle ISFET (MOSFET based) dans PSPICE et HSPICE 39
III. 1.2.1. Présentation du simulateur ORCAD-PSPICE 39
III. 1.2.2. Présentation du simulateur Star-HSPICE 40
III. 1.2.3. Résultas de simulations (PSPICE et HSPICE) 40
III.2.Modélisation neuronale 43
III.2.1. Les étapes de modélisation 43
III.2.2. Conception d'une base de données 43
III.2.3 Choix du topologie et apprentissage du réseau de neurones 45
III.2.4. Test du modèle ANN 51
III.2.5 Implantation du modèle ANN sur ORCAD-PSPICE 54
III. 2.5.1. Implantation du modèle ANN du capteur pH-isfet 54
III. 2.5.2. Résultats de simulation du model ANN-ISFET 56
Conclusion 59

Chapitre IV: Circuits de mesure de pH pour ISFET

Introduction 60
IV.1.Instrumentation des ISFETs. 60
VI.1.1 Le circuit de mesure conventionnel CVCC 60
VI.1.2 Les circuits de mesure de type pont 64
VI.1.2 .1 Circuit de type pont avec diode zener 64
VI.1.2 .2 Circuit de type pont avec source de tension band-gap 65
VI.1.2 .3 Circuit de mesure à base de pont de Wheatstone 66
VI.1.3 Solution de compensation des dérives pour Microsystèmes a base d'ISFET 68
IV.2. Developpement d'une interface d' mesure pour ISFET: 70
Conclusion 75
Conclusion générale 76
Bibliographie 78
Abstract

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale

Les capteurs chimiques contribuent à la détection des gaz des ions et des espèces biologiques. Ces capteurs sont devenus aujourd'hui primordiaux du fait de leurs nombreuses applications dans des domaines très divers. Ils sont largement utilisés dans la biologie, biochimie, médecine, sécurité, agriculture et environnement.

Dans les années 70, Bergveld [1] a présenté le principe de mesure de la concentration des quantités chimiques présentes dans une solution avec un dispositif électronique, appelé ChemFET (Chemical Field Effect Transistor). Les avantages de ce composant par rapport aux grosses électrodes de mesure de pH en verre (la méthode la plus couramment utilisée pour la mesure du pH) sont la taille très petite, la rapidité de réponse, la possibilité de production en volume élevé [2-5], l'impédance d'entrée élevée et la faible impédance de sortie [6-8] et enfin la possibilité d'intégration de l'électronique ensemble avec le capteur sur la même puce. Ces avantages rendent les ChemFETs extrêmement attractifs pour les biocapteurs et les applications biologiques et médicales.

A l'heure actuelle, la majorité des analyses médicales physicochimiques et bactériologiques sont basées sur le suivi des variations de pH au cours de la réaction biochimique.

Dans notre travail, on s'intéresse à un capteur chimique chemFET à usage biologique de type micro-capteur ISFET (Ion Selective Field Effect Transistor micro-sensor) d'un système multi micro-capteurs de nouvelle génération utilisé dans la chirurgie cardiaque pour la détection de l'ischémie myocardique pendant la phase effective de la circulation extracorporelle de sang.

Il s'agit dans ce mémoire, premièrement de modéliser ce capteur à l'aide des réseaux de neurones pour approcher sa réponse expérimentale aux ions H^+ dans un environnement dynamique avec précision, suivie par l'implémentation du modèle neuronal « ANN model » dans le simulateur Orcad-PSPICE et faire du capteur ISFET un composant de la bibliothèque de ce simulateur. Deuxièmement, on procède à la simulation en associant le nouveau composant ISFET à une interface de mesure de pH (read out circuit) proposée pour minimiser la dépendance de la réponse du capteur ISFET à la température.

Dans un premier chapitre, nous nous intéresserons à la théorie des capteurs chimiques ChemFETs, au principe de fonctionnement du capteur chimique de type ISFET, à la détection du potentiel chimique et à la détection du pH. Ensuite une présentation du micro-capteur pH–ISFET utilisé dans ce travail sera exposée.

Le deuxième chapitre est consacré à la présentation des réseaux de neurones, leur principe et quelques propriétés et le type de réseau utilisé dans notre travail.

Le troisième chapitre décrit le modèle existant basé sur le transistor MOS (Metal Oxide Semiconductor based macro model) suivi par la construction de modèle à base des réseaux de neurones (ANN model) adopté pour le capteur ISFET, ainsi que les simulations effectuées par Orcad PSPICE de ces deux modèles.

Enfin, le dernier chapitre présentera la simulation des interfaces de mesure du pH en utilisant le modèle à base des réseaux de neurones (ANN model) du chapitre précédent associé à une électronique proposée pour surmonter la dépendance en température de la réponse du micro-capteur ISFET sensible aux variations du pH.

CHAPITRE 1
LES CAPTEURS ChemFETs

I.1. Principe de fonctionnement des ChemFETs

En 1970, *Piet Bergveld* [1] développa un nouveau procédé électronique permettant de mesurer l'activité des ions dans un milieu chimique et biochimique. Il utilisa le principe d'une électrode de verre et d'un transistor à effet de champ. Il mit en évidence la sensibilité aux ions H^+ d'un transistor MOS (Métal-Oxyde-Semiconducteur) sans grille métallique. Il introduisit ainsi le premier capteur chimique (ChemFET) à effet de champ, l'ISFET (Ion Sensitive Field Effect Transistor) [9]. La méthodologie de l'ISFET pour la mesure d'ions est développée sur la base du transistor MOSFET (transistor à effet de champ commandé en tension par une grille métallique). Le principe de base du transistor MOSFET est de pouvoir contrôler le courant circulant entre deux zones de semi-conducteur (source et drain) par l'application d'une tension V_{gs} sur la grille.

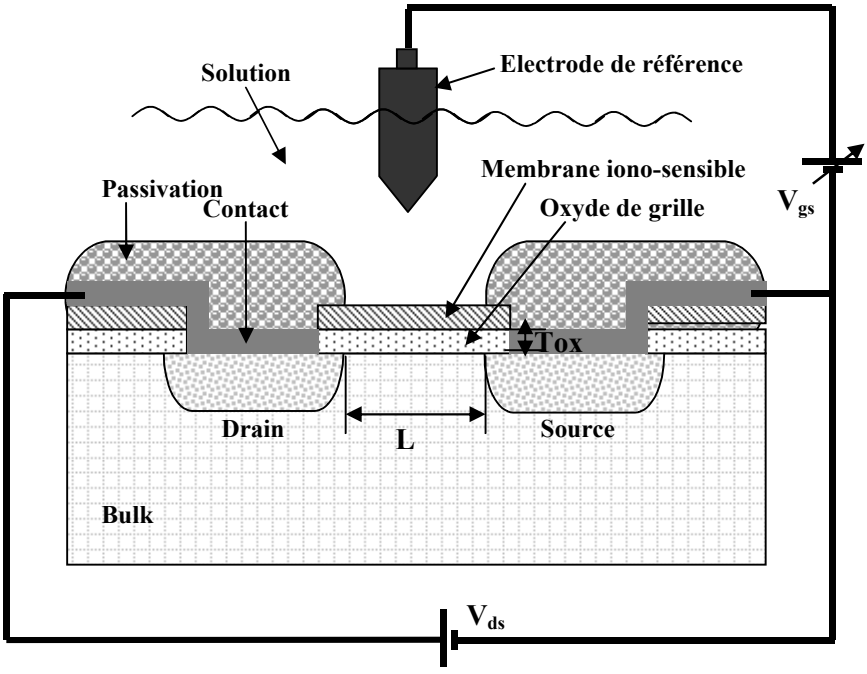


Fig I-1. *Capteur chimique **ChemFET***

L'électrode de grille métallique est isolée du drain et de la source au moyen d'un oxyde de silicium (SiO_2) et commande le courant drain source (I_{ds}) électrostatiquement. L'impédance d'entrée, extrêmement élevée de l'électrode de grille implique qu'il n'est pas nécessaire d'appliquer une grande tension d'entrée

pour commander ce courant (I_{ds}). Dans le cas de l'ISFET, la grille métallique est remplacée par une électrode de référence, l'électrolyte à analyser et une grille isolante sensible à la concentration en ion recherché (par exemple H^+). Le système fondamental de mesure de l'ISFET est montré sur la figure I-1.

Quand Bergveld présenta pour la première fois le composant ISFET, celui-ci fonctionnait sans électrode de référence. Cependant, des travaux ultérieurs ont indiqué que les opérations propres à l'ISFET demandent la présence d'une électrode de référence pour établir un potentiel dans l'électrolyte en contact avec le substrat en silicium [2].

I.2. Principe physico-chimique de détection

L'équation qui régit la tension de seuil d'un MOSFET est la suivante [2,3]:

$$V_t = \frac{\phi_M - \phi_{Si}}{q} - \frac{Q_{OX} + Q_{SS} + Q_b}{c_{OX}} + 2\phi_f \qquad \text{(I-1)}$$

Où : $\phi_M - \phi_{Si}$ reflètent la différence des travaux de sortie entre la grille métallique Φ_M et le silicium Φ_{Si}. Les charges Q_{OX}, Q_{SS} *et* Q_b sont respectivement les charges dans l'oxyde, à l'interface oxyde-silicium et dans la couche de déplétion du substrat silicium et Φ_f est caractéristique du niveau de dopage du substrat.

Dans le cas de l'ISFET, le même procédé de fabrication est utilisé. Cependant des contributions supplémentaires se manifestent; en effet l'électrode métallique de grille du MOSFET étant remplacée par une électrode de référence, l'électrolyte et la couche chimiquement sensible, l'équation précédente devient [2 ,3]:

$$V_t = E_{ref} - \psi + \chi_{sol} - \frac{\phi_{Si}}{q} - \frac{Q_{OX} + Q_{SS} + Q_b}{c_{OX}} + 2\phi_f = V_{t_0} - \psi \qquad \text{(I-2)}$$

Le terme E_{ref} représente le potentiel de l'électrode de référence, ψ est le potentiel chimique fonction du pH et χ_{sol} est un paramètre constant représentant le potentiel de surface du solvant.

Le principe de fonctionnement du capteur chimique ISFET est donc basé sur le piégeage d'ions au niveau de la couche sensible. Les charges piégées induisent une variation du potentiel chimique ψ et donc de la tension de seuil du transistor V_t.

I.3. Détermination du potentiel chimique ψ

Contrairement aux électrodes à ions spécifiques, le principe physico-chimique de détection de l'ISFET est basé sur le cas d'une électrode idéalement bloquante. Dans le cas où aucune charge ne pourrait traverser l'interface électrode-électrolyte, il apparaît à cette interface une région très dense en ions, épaisse de quelques angstroems, qui est le siège de réactions électriques et chimiques. L'accumulation de ces charges modifie le comportement de cette interface qui devient alors analogue à un condensateur. Plusieurs modèles ont été développés pour rendre compte et expliquer les phénomènes électrostatiques qui ont lieu à l'interface Electrolyte/Isolant/Solide. Pour expliquer le fonctionnement de cette structure, la théorie du Site-Binding [5,6] semble être à l'heure actuelle la seule théorie utilisée.

I.3.1. Etude de l'interface solide-électrolyte

Du fait de la dimension finie des ions et des molécules de solvant dans une solution électrolytique, il apparaît une différence entre les zones de charge d'espace d'un système solide-électrolyte. Ainsi, dans un système à électrode idéalement bloquante, la zone de charge d'espace est formée de plusieurs couches de structures différentes qui définissent la double couche électrique d' Helmholtz [2,6]. La capacité de cette double couche est fonction du potentiel. Pour une électrode chargée négativement, la distribution des espèces est présentée de façon simplifiée sur la figure I-2. La distribution du potentiel dans la couche diffuse est décrite par le modèle de Gouy-Chapman-Stern [5,6].

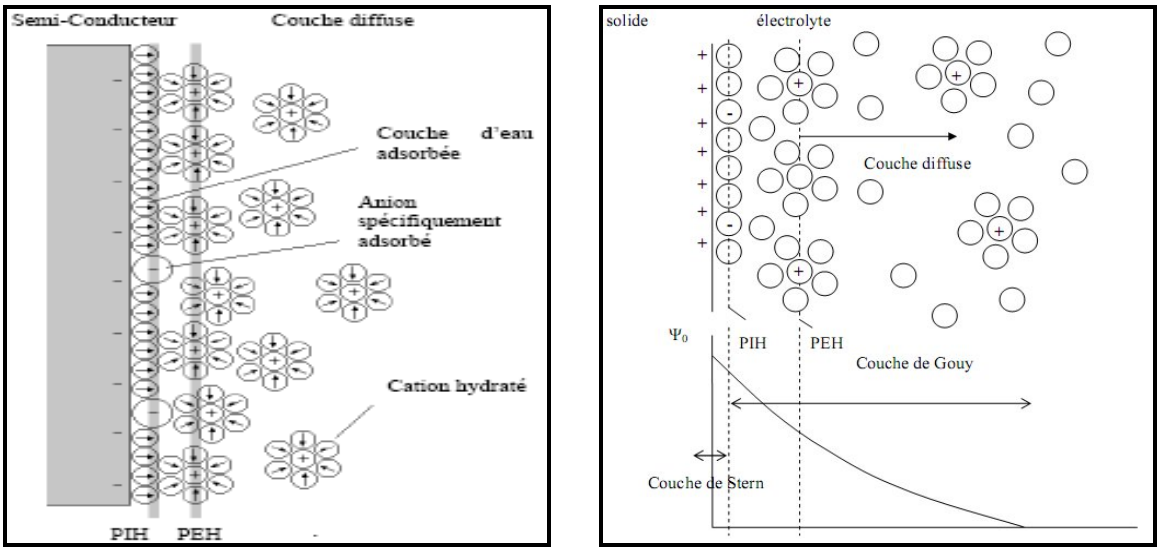


Fig I-2. *Distribution des espèces à l'interface-solide électrolyte, Représentation du modèle de Gouy-Chapman-Stern [2,3].*

Ce modèle considère trois régions: La première région, la plus proche du solide est appelée couche interne. Elle contient les molécules d'eau et certaines espèces (ions ou molécules) dont on dit qu'elles sont spécifiquement adsorbées. Cette région s'étend jusqu'au lieu des centres électriques des ions spécifiquement adsorbés appelé plan interne d' Helmholtz (PIH). Dans la littérature, cette couche interne est aussi appelée couche d' Helmholtz. L'orientation des dipôles dépend de la charge de l'électrode [3, 7, 10,11].

Stern [2] a amélioré ce modèle en tenant compte de la taille des ions solvatés et en considérant que ceux-ci ne pouvaient s'approcher de la surface que jusqu'au plan interne d'Helmholtz (PIH). La deuxième couche appelée couche de Stern est réservée aux ions solvatés. Cette région s'étend de la distance de contact entre les ions adsorbés et les ions solvatés jusqu'au centre des ions solvatés. Le centre des ions solvatés, le plus proche de la surface du solide est appelé plan externe d' Helmholtz (PEH) [7,10]. La chute de potentiel entre l'électrode et la solution dans ce cas est linéaire et l'interface est équivalente du point de vue électrique à un condensateur plan parallèle.

Une troisième région qui s'étend du plan externe d' Helmholtz jusqu'au sein de l'électrolyte est appelée couche diffuse. Cette couche, comprend les ions non spécifiquement adsorbés. Cette couche diffuse est comparable à la zone de charge

d'espace des MOSFETs; l'extension de cette couche dépend du potentiel et de la concentration en ions de l'électrolyte [2,3].

A partir de ce modèle, il a été montré que le champ électrique était constant et que le potentiel variait linéairement dans la couche compacte. La capacité de ce système est donc équivalente à la mise en série de la capacité de la couche diffuse et de la capacité de la couche compacte.

La relation entre le potentiel électrique $\varphi_0(x)$ à une distance x du plan PEH et la densité de charge d'espace $\rho(x)$ est donc :

$$\frac{d^2\varphi_0(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_r.\varepsilon_0} \qquad \text{(I-3)}$$

Où : ε_r est la permittivité de l'eau et ε_0 celle du vide.

La distribution des ions dans la double couche sous l'action du potentiel et de l'agitation thermique est décrite par la statistique de Boltzmann :

$$C_i(x) = C_{i_0}.\exp\left(\frac{q_i\varphi_0(x)}{k.T}\right) \qquad \text{(I-4)}$$

Où : C_i et q_i sont respectivement la concentration et la charge de l'ion (i).

La densité de charge est :

$$\rho(x) = \sum_i C_i \cdot q_i = \sum_i q_i.C_{i_0}.\exp\left(-\frac{q_i\varphi_0(x)}{k.T}\right) \qquad \text{(I-5)}$$

La combinaison des équations I-3 et I-5 conduit à l'équation Poisson-Boltzmann :

$$\frac{d^2\varphi_0(x)}{dx^2} = -\frac{1}{\varepsilon_r.\varepsilon_0}\sum_i q_i.C_{i_0}.\exp\left(-\frac{q_i\varphi_0(x)}{k.T}\right) \qquad \text{(I-6)}$$

Pour un électrolyte symétrique, dans lequel les ions ont une charge de valeur absolue q:

$$q_+ = q_- = q$$
$$C_+ = C_- = C$$

Il est possible d'intégrer l'équation I-6 avec comme conditions aux limites :

$$\varphi_0(x) = \varphi_{0d} \quad \text{à } x = 0$$

$$\rho_0(x) = 0 \text{ et } \frac{d\varphi_0}{dx} = 0 \text{ à } x \to \infty$$

La solution de l'équation (I-6) est alors donnée par :

$$\frac{d\varphi_0(x)}{dx} = -\left(\frac{8.k.T.C}{\varepsilon_r.\varepsilon_0}\right)^{1/2}.\sinh\left(\frac{q.\varphi_0(x)}{2.k.T}\right) \qquad \text{(I-7)}$$

En utilisant la loi de Gauss, on obtient la charge de la couche diffuse :

$$\sigma_d = -\left(8.\varepsilon_r.\varepsilon_0.k.T.C\right)^{1/2}.\sinh\left(\frac{q.\varphi_{0d}}{2.k.T}\right) \qquad \text{(I-8)}$$

Il est maintenant possible de calculer la capacité différentielle C_d de la couche diffuse en différenciant l'équation précédente :

$$C_d = -\frac{d\sigma_d}{d\varphi_{0d}} = \left(\frac{2.q^2.\varepsilon_r.\varepsilon_0.C}{kT}\right)^{1/2}.\cosh\left(\frac{q.\varphi_{0d}}{2.k.T}\right) \qquad \text{(I-9)}$$

Cette capacité diffuse, qui varie avec la concentration passe par un minimum. C_d croît rapidement de part et d'autre de ce minimum. Stern, en tenant compte de la taille finie des ions, et du fait qu'ils ne peuvent approcher la surface qu'à une distance finie, a montré que la capacité est en réalité constituée de deux composantes montées en série [2]:

- une capacité indépendante du potentiel correspondant à la capacité des charges portées par le plan externe d'Helmholtz,
- une capacité en forme de V correspondant à la capacité de la charge réellement diffuse.

I.3.2. Interface Electrolyte/Isolant/Silicium (EIS)

Dans la pratique, la sensibilité au pH mesurée par un ISFET est inférieure à la valeur prédite par la loi de Nernst. Un phénomène chimique propre aux membranes sensibles formées à partir de couche de SiO_2 est responsable de cette

dérive. Il n'y a plus d'équilibre thermodynamique entre les ions dans l'isolant et les ions dans l'électrolyte, par conséquent la loi de Nernst n'est plus applicable. La théorie du site-binding, inspirée des travaux de Bousse [10], explique le procédé qui se produit à l'interface isolant-électrolyte [2,3]. Ce modèle considère les groupes SiOH sur la couche d'oxyde comme des centres actifs dont la charge varie proportionnellement aux ions présents à la surface de l'ISFET. Ces centres actifs sont responsables de la formation de la double couche électrique décrite par la théorie de Gouy-Chapman-Stern et donne le potentiel à l'interface oxyde-électrolyte.

Les ions H^+ et OH^-, présents dans une solution aqueuse sont appelés «ions déterminants le potentiel». Ces ions sont responsables de l'état de charge à l'interface SiO_2/électrolyte. Au contact de la solution aqueuse, des groupements de silanol (SiOH) se forment à la surface de l'isolant. Ces groupements peuvent être, suivant le pH de la solution, chargés positivement, chargés négativement ou neutres. Le pH particulier pour lequel la surface de la membrane a zéro charge est appelé «pH au point de charge nulle» pH_{PCN} ou (pH_{pzc}). La présence de ces groupements de charges amène une correction à l'équation de Nernst habituellement utilisée en électrochimie.

La figure I-3 illustre les trois différents types de groupements silanols à la surface d'une membrane.

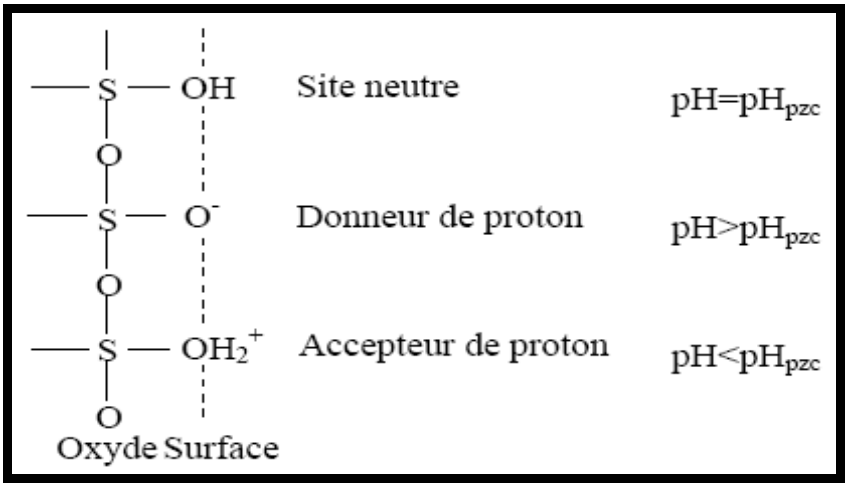


Fig I-3. *Représentation schématique de la théorie du site-binding [3].*

La manière la plus simple de calculer la relation reliant la différence de potentiel entre la surface de l'isolant et l'électrolyte (φ_0) et la charge de surface de l'isolant (σ_0) est d'utiliser

les constantes d'équilibres k_a (constante d'acidité) et k_b (constante de basicité) des réactions de dissociation des sites hydroxyles amphotères.

$$Si - OH \leftrightarrow Si - O^- + H_S^+ \qquad k_a = [Si - O^-][H_S^+]/[Si - OH] \qquad \text{(I - 10)}$$

$$Si - OH + H_S^+ \leftrightarrow Si - OH_2^+ \qquad k_b = [Si - OH_2^+]/[Si - OH].[H_S^+] \qquad \text{(I - 11)}$$

Où $[H_S^+]$ représente la concentration en ions H^+ à la surface de l'isolant et $[H^+]$ représente la concentration des ions H^+ dans l'électrolyte. Comme dans l'équation I-4, la distribution des ions hydrogène dans l'électrolyte peut être décrite par la statistique de Boltzmann :

$$[H_S^+] = [H^+] e^{-q\varphi_0 / kT} \qquad \text{(I-12)}$$

La théorie du site binding permet ainsi de montrer que :

$$[H^+] = \left(k_a / k_b\right)^{1/2} e^{-\left(q\varphi_0 / kT\right)} F(\varphi_0) \qquad \text{(I-13)}$$

En prenant le logarithme de l'équation précédente, on aboutit à :

$$pH = -\log\left(k_a / k_b\right)^{1/2} - \frac{q\varphi_0}{kT(\ln 10)} - \log F_{(\varphi_0)} \qquad \text{(I-14)}$$

Ainsi, en isolant le potentiel φ_0, on obtient :

$$\frac{q\varphi_0}{kT} + G_{(\varphi_0)} = \ln(10)(pH_{pzc} - pH) \qquad \text{(I-15)}$$

Avec :

$$pH_{pzc} = -\frac{1}{2}\log\left(k_a / k_b\right) \qquad \text{(I-16)}$$

L'étude complète permet également de montrer que :

$$G_{(\varphi_0)} = \arg Sh\left(\frac{q\varphi_0}{\beta kT}\right) \qquad \text{(I-17)}$$

Avec :

$$\beta = \frac{2N_S q^2}{\left(k_a / k_b\right)^{1/2} C_D kT} \tag{I-18}$$

Ce terme β va rendre compte de la sensibilité finale. Il est fonction de l'équilibre acide base relatif aux réactions de surface, du nombre total de sites amphotères à la surface de l'isolant N_S et de la capacité de la double couche C_D (équation 9).

Lorsque $\beta >> q\varphi_0 / kT$, on a :

$$G_{(\varphi_0)} \simeq \frac{q\varphi_0}{\beta kT} \tag{I-19}$$

L'équation I-15 deviendra alors :

$$\frac{q\varphi_0}{kT} = \frac{\beta}{\beta + 1} \ln 10 (pH_{pzc} - pH)) \tag{I-20}$$

Ainsi, la sensibilité de l'ISFET sera définie par :

$$S = \left|\frac{d\varphi_0}{dpH}\right| = \ln 10 \cdot \frac{kT}{q} \cdot \frac{\beta}{\beta + 1} \tag{I-21}$$

Pour un bon nitrure (β >> 1), à T = 300°K, la sensibilité est Nernstienne *(S ≈ 59 mV/pH)* [2].

I.4. Détection du pH

Le capteur pH-ChemFET avec la grille SiO_2 possède une sensibilité faible et sub-Nernstienne de 30 mV/pH. L'amélioration des propriétés des micro-capteurs pH-ChemFETs passe par l'investigation et l'optimisation des matériaux de détection et de leur dépôt sur la grille SiO_2. De nombreuses membranes sensibles aux ions hydrogène (généralement ce sont des matériaux non-organiques [2,3]) ont été élaborées afin d'améliorer la sensibilité, la sélectivité, la stabilité et la durée de vie. Notons les principales membranes sensibles aux ions hydrogène et leurs caractéristiques :

- Le nitrure de silicium (Si_3N_4) : le capteur pH-ChemFET avec la grille diélectrique SiO_2/Si_3N_4 est caractérisé par un court temps de réponse, un faible courant de fuite et une sensibilité quasi-Nernstienne (autour de 50 - 56 mV/pH). Ce matériau qui est bien connu et maîtrisé dans la technologie des circuits intégrés (IC) a été parmi les premiers impliqués dans les capteurs chimiques. Généralement, cet isolant est obtenu par dépôt chimique en phase vapeur à basse pression (LPCVD) [2,3].
- L'oxyde d'aluminium (Al_2O_3) : la sensibilité de cette membrane est autour de 53 -56 mV/pH, néanmoins les capteurs pH-ChemFETs avec la couche SiO_2/Al_2O_3 possèdent une importante dérive temporelle. La couche sensible est habituellement obtenue par dépôt chimique en phase vapeur (CVD). Cependant, il existe une technique alternative de dépôt par laser pulsé (Pulsed Laser Deposition PLD) qui est chargée d'améliorer la sensibilité du capteur ainsi que sa stabilité temporelle par une meilleure qualité des couches obtenues [5,6].
- L'oxyde de tantale (Ta_2O_5) : cette couche diélectrique est prometteuse pour la détection des ions hydrogène. Elle possède une bonne sensibilité de 58 – 59 mV/pH et une petite dérive temporelle de 0,03 – 0,05 pH/jour [5]. Les membranes de Ta_2O_5 ne sont pas sélectives aux ions potassium K^+, calcium Ca^{+2} et sodium Na+. Ce matériau est déposé soit par pulvérisation radiofréquence RF, soit par dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma ou PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) [6].

Pour aller plus loin, notons que les matériaux conducteurs tels que Pt, TiN sont également sensibles aux ions hydrogène. On peut citer ici d'autres types d'oxydes sensibles aux ions hydrogène: TiO_2, PtO_2, Ir_2O_3, OsO_2, SnO_2, WO_3, ZrO_2 ou encore le silicium amorphe hydrogéné, le carbone structure diamant, etc. Ces couches sont déposées sur la grille diélectrique par pulvérisation. Leur sensibilité au pH est autour de 55 mV/pH. Cependant, elles ne sont pas trop utilisées.

Les membranes organiques qui sont répandues pour la détection de divers types d'ions sont rarement utilisées pour la détection du pH. Wakida & al [2,6] ont proposé d'utiliser la couche sensible à base d'amines ternaires (tridodecylamine, methyldioctadecylamine) pour détecter des ions hydrogène. Son rôle consiste à diminuer l'interférence de la force ionique et des charges contaminant la surface.

Généralement, ces membranes fonctionnent dans la gamme du pH 2 à 9, elles ont un coefficient important de non-linéarité et une faible adhérence aux surfaces diélectriques. Ce type de capteurs pH-ChemFETs est destiné à des applications spécifiques [5].

I.5. Principe de mesure

Le principe de mesure est le suivant : la valeur du courant de drain (I_{ds}) est maintenue constante à une valeur I_0 au moyen d'un asservissement électronique. Si la valeur du pH de la solution change, la tension de seuil de l'ISFET (V_t) change ainsi que le courant de drain. La rétroaction électronique rajuste la tension fixée par l'électrode de référence de telle manière que le courant de drain soit maintenu constant à la valeur I_0. L'écart entre la nouvelle tension de grille (V_{pH2}) et l'ancienne (V_{pH1}) est proportionnel à la variation de pH (figure I-4).

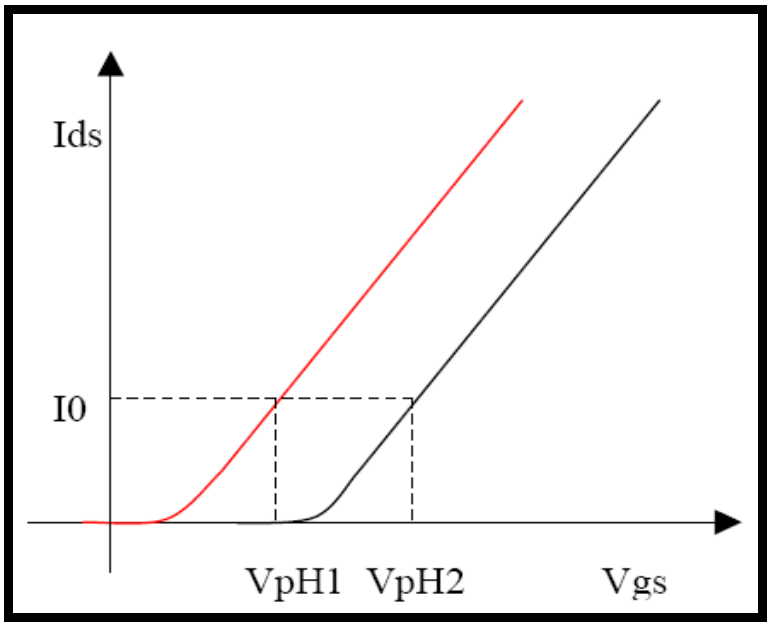


Fig I-4. *Réponse au pH d'un capteur ISFET. Variation de la tension de seuil pour des mesures $I_{ds}(V_{gs})$ dans deux solutions différentes [2].*

Le courant drain-source I_{ds} dans la région non linéaire d'un pH-ChemFET est donné par l'expression suivante [3]:

$$I_{ds} = \mu \cdot C_{ins} \frac{W}{L}\left[\left(V_{gs} - \left(E_{ref} - \psi_0 + \chi^{sol} - \frac{\Phi_{si}}{q} - \frac{Q_{ox}+Q_{ss}}{c_{ox}} - \frac{Q_b}{c_{ox}} + 2\phi_f\right)\right)\cdot V_{ds} - \frac{1}{2}V_{ds}^2\right] \quad \text{(I-22)}$$

A une tension drain source constante (V_{ds}=cst) et un courant de drain I_{ds} constant nous pouvons tirer le décalage de la caractéristique I_{ds} (V_{Gs}) à V_{ds} constant [3].

Ainsi, la sensibilité au pH est déterminée de la manière suivante :

$$S = \frac{d\psi}{dpH} = \frac{V_{pH2} - V_{pH1}}{pH_2 - pH_1} \quad \text{(I-23)}$$

La mesure de pH devient donc possible par un circuit qui comporte deux sources de tension (V_d et V_s), une source courant (I_{ds}) et deux amplificateurs opérationnels associés dans une configuration pour former une interface connue dans le domaine des ISFETs par le circuit de mesure de sortie CCCV (constant current constant voltage read out circuit) que nous allons voir dans les chapitres subséquents.

I.6. Le micro-capteur pH-ISFET

L'ISFET sujet de notre étude est l'un des ISFET du système multi micro-capteurs ISFET de silicium - qui a été fabriqué au « *Centre Nacional de Microlectrònica (IMB-CSIC) Barcelone / Espagne* [4]» sous forme d'aiguille, comprenant deux micro-capteurs ISFET, une pseudo-électrode de référence (Pt) et un capteur de température. Pour la conception de ce multi micro-capteurs, une technologie de fabrication des ISFETs compatible avec le CMOS et le micro-usinage du silicium a été utilisée.

Ces multi micro-capteurs de nouvelle génération sont utilisés pour la détection de l'ischémie myocardique pendant la chirurgie cardiaque [4].

Les technologies de silicium permettent l'intégration des micro-capteurs dans une même puce de petite taille. Elles sont donc les plus convenables pour le développement de dispositifs multi micro-capteurs qui, à leur tour, vont être utilisé pour le contrôle de l'ischémie myocardique et aussi pour d'autres applications biomédicales. C'est dans ce cadre qu'ils ont développé un multi micro-capteur de

silicium implantables sous forme d'aiguille pour la mesure simultanée des concentrations des ions K^+, H^+ et de la température sur le tissu myocardique pendant la chirurgie cardiaque [4].

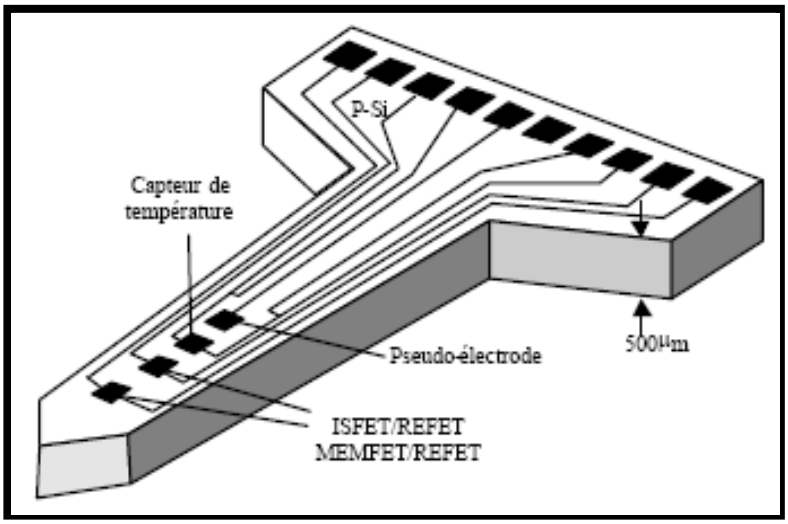


Fig I-5. *Vue schématique de la structure Multi micro-capteurs [4].*

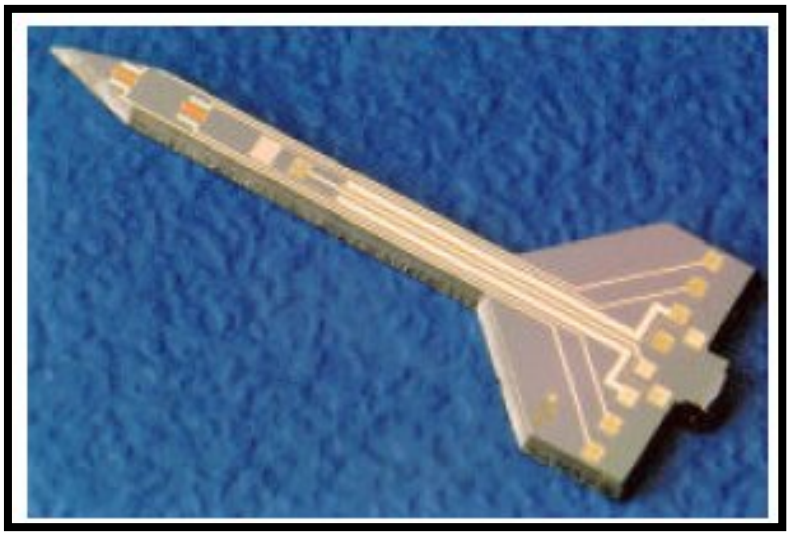


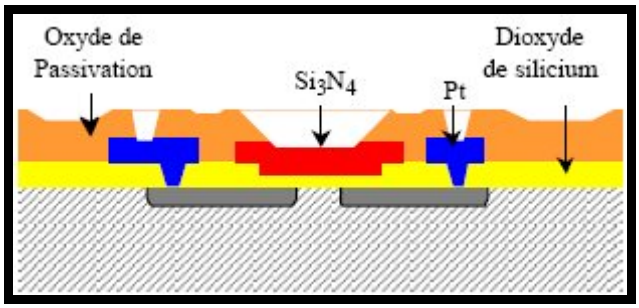
Fig I-6. *Photographie du multi micro-capteurs [4].*

I.6.1. Technologie de fabrication de l'aiguille

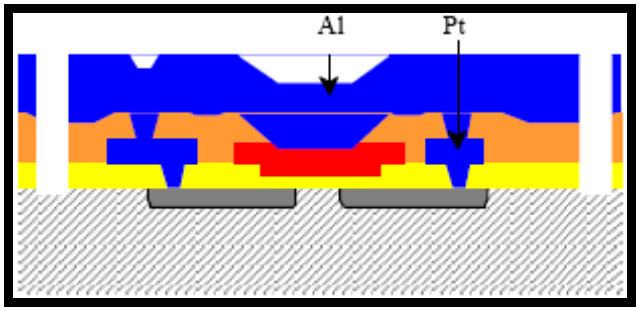
Les multi micro-capteurs ont été fabriqués sur des substrats de silicium de type p, avec une orientation <100> et une résistivité qui varie de 4 à 40 Ω.cm et qui correspond à un niveau de dopage de 10^{15} cm^{-3}. Dans un premier temps ils ont procédé à la fabrication des micro-capteurs ISFET suivie d'une étape finale de gravure du substrat permettant la réalisation de l'aiguille. Pour la fabrication de l'ISFET ils ont utilisé le processus NMOS W/L = 400um/20um compatible avec la technologie CMOS (six niveaux de lithographie) [4].

La grille de l'ISFET est formée d'une couche d'oxyde de silicium d'épaisseur 800 Å et est recouverte d'une couche de nitrure de silicium de 1000 Å, déposée grâce à la technique LPCVD. Le nitrure de silicium est meilleur que l'oxyde de silicium en termes de sensibilité au pH, linéarité de la réponse et de temps de vie [4].

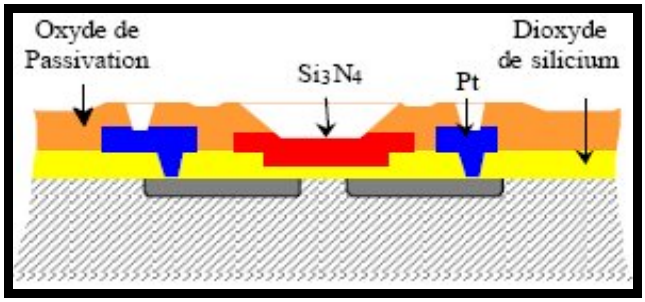
Le métal utilisé est une combinaison de 500 Å de titane et de 1500 Å de platine. Le rôle de la couche mince de Ti est d'augmenter l'adhérence entre le Pt et le silicium. La figure 1-7.a montre une coupe transversale simplifiée du dispositif après la fabrication de l'ISFET. Pour séparer les aiguilles du disque de silicium, une couche d'aluminium a été utilisée d'abord comme masque (Figure 1.7.b). Un processus de gravure dans un plasma (RIE) est ensuite employé pour définir la forme de l'aiguille.



(a) *Après la fabrication de l'ISFET [4].*



(b) *Après dépôt du masque d'aluminium utilisé pour le processus micro-usinage [4].*



(c) *A la fin de la fabrication de la structure ISFET [4].*

Fig 1-7. *Sections transversales schématiques du processus de fabrication. La coupe est prise transversalement à l'axe d'aiguille, et à un dispositif 'ISFET [4].*

I.6.2 Caractérisation du micro-capteur pH-ISFET

Dans notre travail on s'intéressera aux capteurs ISFETs , les courbes de caractérisation expérimentale I_{ds} *et* G_M (V_{gs}) et la courbe de la sensibilité de ce micro-capteur sont présentées respectivement par les figure I-8 et I-9 :

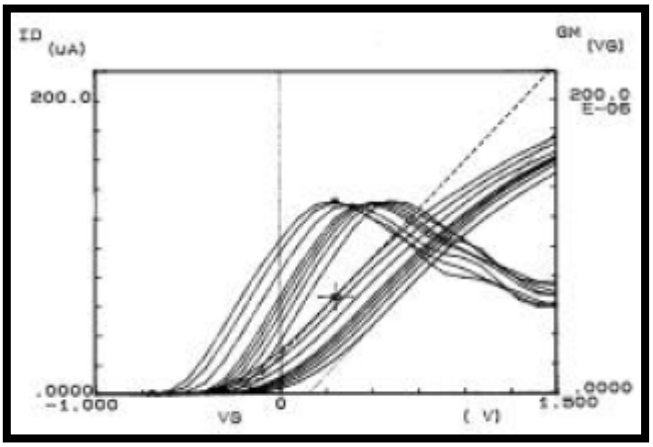
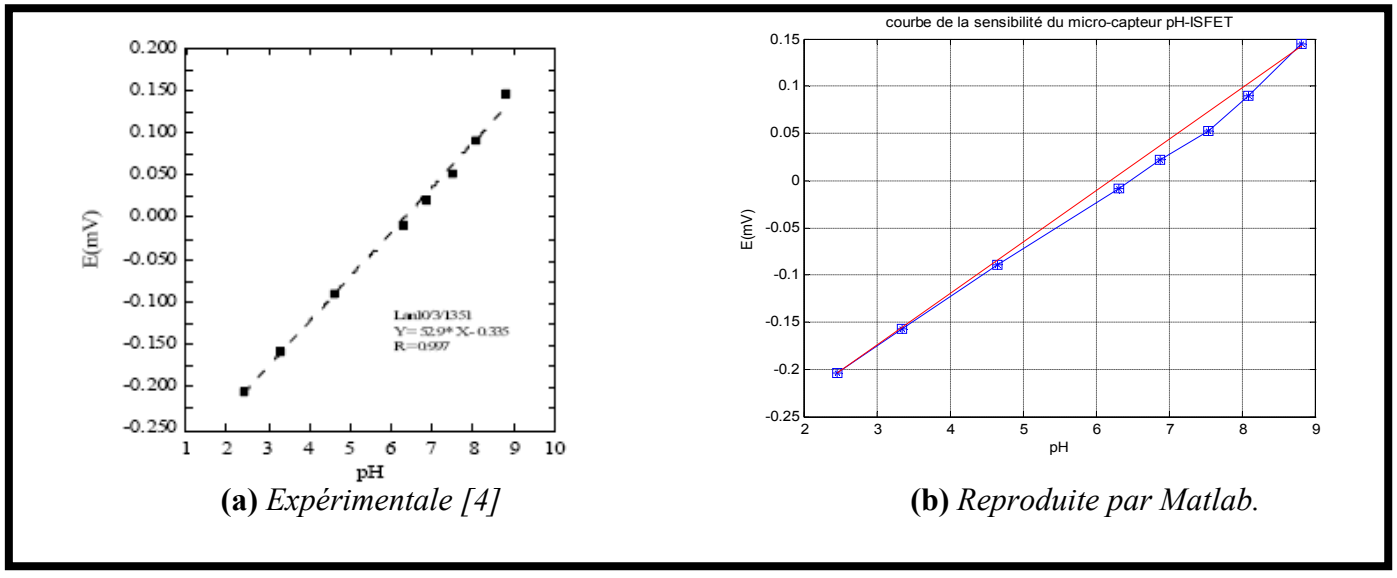


Fig I-8. *Courant de drain (I_D) et transconductance (G_M) en fonction de la tension de grille pour différentes valeurs de pH de la solution à analyser [4].*

Reportant sur un graphe la valeur de la tension seuil en fonction du pH, on obtient une courbe linéaire entre pH=2 et 9, dont la pente vaut 52 mV/pH. Cette valeur est presque *Nernstienne*.



(a) *Expérimentale [4]* **(b)** *Reproduite par Matlab.*

Fig I-9. *Courbe de la sensibilité expérimentale du micro-capteur ISFET [4].*

Conclusion

Les capteurs chimiques ChemFETs présentent une structure générique qui permet de concevoir sur la même puce un système de multi-capteurs selon leurs applications. D'autre part, les caractéristiques des capteurs (sensibilité et sélectivité) ne dépendent que des propriétés chimiques des couches ionosensibles. Si l'utilisation d'une électrode de référence ne permet pas leur intégration complète, des solutions, actuellement à l'étude, passent par la fabrication des microélectrodes de pseudo référence en faisant appel aux métaux nobles (or, platine).

Pour expliquer le fonctionnement de cette structure ISFET, la théorie du «Site-Binding» qui semble la seule théorie utilisée à l'heure actuelle a été présentée, ainsi que le modèle de « *Gouy-Chapman-Stern* » qui décrit la distribution du potentiel dans la couche diffuse de l'interface solide / électrolyte.

La courbe de la sensibilité du micro-capteur ISFET montre une linéarité satisfaisante, tandis que, les caractéristiques de transfert I_{ds} (V_{gs}) présentent une non linéarité, ces caractéristiques non linéaires vont représenter le champ de l'utilisation des réseaux de neurones, d'une part, pour l'approximation de la réponse expérimentale, et d'autre part, pour la prédiction des nouvelles mesures de pH.

CHAPITRE II
LES RESEAUX DE NEURONES ARTIFICIELS

Introduction

L'étude des réseaux de neurones a commencé en 1943 avec la présentation de W. MCCulloch et W. Pitts [23] du neurone formel, abstraction du neurone physiologique.

En 1958, F. Rosenblatt [24] développe le modèle du perceptron. Il s'agit d'un réseau de neurones inspiré du système visuel possédant deux couches de neurones : une première couche relative à la perception et une seconde liée à la prise de décision. C'est le premier système artificiel capable d'apprendre par expérience.

Dans ce chapitre, nous présentons le modèle mathématique que nous emploierons dans le chapitre suivant pour décrire, d'une part, un neurone artificiel et, d'autre part, un réseau de neurones complet, c'est-`a-dire un ensemble de neurones reliés en réseau. Le modèle que nous présentons dans ce chapitre est celui de base, commun à beaucoup d'architectures. Il n'est cependant pas universel.

II.1. Modèle d'un neurone

Le neurone artificiel (ou cellule) est un processeur élémentaire. Il reçoit un nombre variable d'entrées en provenance de neurones appartenant à un niveau situé en amont (on parlera de neurones "amont"). A chacune des entrées est associé un poids w représentatif de la force de la connexion. Chaque processeur élémentaire est doté d'une sortie unique, qui se ramifie ensuite pour alimenter un nombre variable de neurones appartenant à un niveau situé en aval (on parlera de neurones "aval"). A chaque connexion est associé un poids [23] (figure II-1).

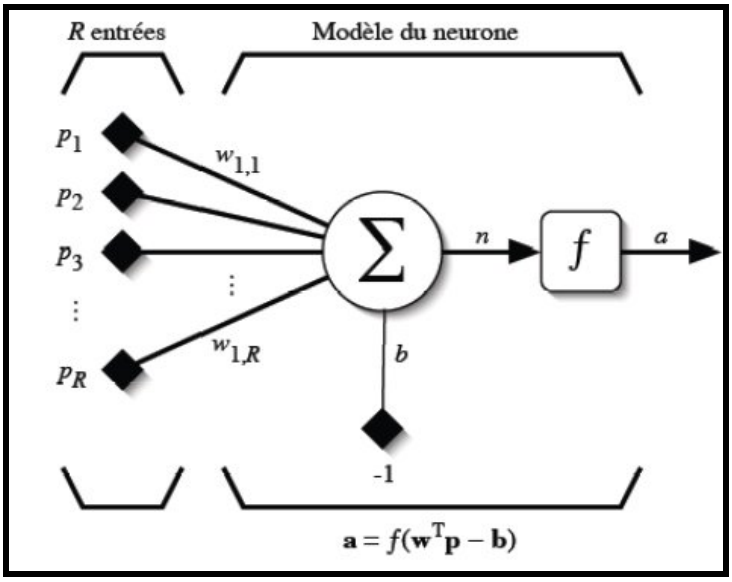


Fig II-1. *Modèle d'un neurone artificiel [24].*

En suivant les notations présentées à la figure II-1, les R entrées du neurone correspondent au vecteur $p = [p_1\ p_2 \ldots\ p_R]^T$, alors que $\omega = w\ [\omega_{1,1}\ \omega_{1,2}\ .....\ \omega_{1,R}]^T$ représente le vecteur des poids du neurone. La sortie *n* de l'intégrateur est donnée par l'équation suivante :

$$n = \sum_{j=1}^{R} \omega_{1,j} p_j - b = \omega_{1,1} p_1 + \omega_{1,2} p_2 + ... + \omega_{1,R} p_{1R} - b \qquad \text{(II-1)}$$

Que l'on peut aussi écrire sous forme matricielle :

$$n = W^T p - b \qquad \text{(II-2)}$$

Cette sortie correspond à une somme pondérée des poids et des entrées moins ce qu'on nomme le biais *b* du neurone. Le résultat *n* de la somme pondérée s'appelle le niveau d'activation du neurone. Le biais *b* s'appelle aussi le seuil d'activation du neurone. Lorsque le niveau d'activation atteint ou dépasse le seuil *b*, alors l'argument de *f* devient positif (ou nul). Sinon, il est négatif.

On peut faire une comparaison entre ce modèle mathématique et certaines informations à propos du neurone biologique. Le neurone biologique est une cellule vivante spécialisée dans le traitement des signaux électriques. Les neurones sont reliés entre eux par des liaisons appelées

axones. Ces axones vont eux-mêmes jouer un rôle important dans le comportement logique de l'ensemble. Ces axones conduisent les signaux électriques de la sortie d'un neurone vers l'entrée (synapse) d'un autre neurone.

Les neurones font une sommation des signaux reçus en entrée et en fonction du résultat obtenu vont fournir un courant en sortie [23] (figure II-2).

La structure d'un neurone se compose de trois parties :

- La somma : ou cellule d'activité nerveuse, au centre du neurone.
- L'axone : attaché au somma qui est électriquement actif, ce dernier conduit l'impulsion conduite par le neurone.
- Dendrites : électriquement passives, elles reçoivent les impulsions d'autres neurones.

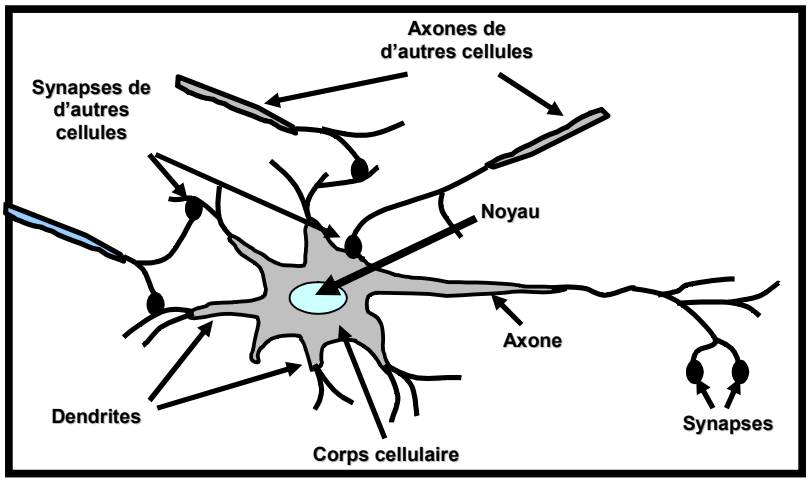


Fig II-2. *Schéma d'un neurone biologique [26].*

Un poids d'un neurone artificiel représente donc l'efficacité d'une connexion synaptique. Un poids négatif vient inhiber une entrée, alors qu'un poids positif vient l'accentuer. Il importe de retenir que ceci est une grossière approximation d'une véritable synapse qui résulte en fait d'un processus chimique très complexe et dépendant de nombreux facteurs extérieurs encore mal

connus. Il faut bien comprendre que notre neurone artificiel est un modèle pragmatique qui, comme nous le verrons plus loin, nous permettra d'accomplir des tâches intéressantes. La vraisemblance biologique de ce modèle ne nous importe peu. Ce qui compte est le résultat que ce modèle nous permettra d'atteindre [24].

Un autre facteur limitatif dans le modèle que nous nous sommes donnés concerne son caractère discret. En effet, pour pouvoir simuler un réseau de neurones, nous allons rendre le temps discret dans nos équations. Autrement dit, nous allons supposer que tous les neurones sont synchrones, c'est-à-dire qu''a chaque temps *t*, ils vont simultanément calculer leur somme pondérée et produire une sortie *a(t) = f (n(t))*. Dans les réseaux biologiques, tous les neurones sont en fait asynchrones.

Revenons donc à notre modèle tel que formulé par l'équation II-2 et ajoutons la fonction d'activation *f* pour obtenir la sortie du neurone :

$$a = f(n) = f(\mathbf{W}^{\mathbf{T}}\mathbf{P} - b) \tag{II-3}$$

En remplaçant $\mathbf{w}^T$ par une matrice $\mathbf{W} = \mathbf{w}^T$ d'une seule ligne, on obtient une forme générale que nous adopterons tout au long de ce mémoire :

$$a = f(\mathbf{W}\mathbf{p} - b) \tag{II-4}$$

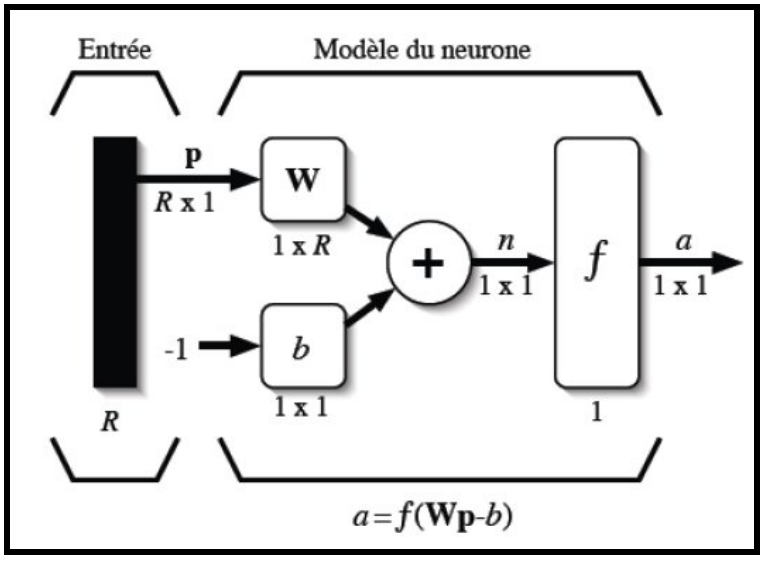


Fig II-3. *Représentation matricielle du modèle d'un neurone artificiel [24].*

L’′équation II-4 nous amène à introduire un schéma de notre modèle plus compact que celui de la figure II-1. La figure II-3 illustre celui-ci. On y représente les R entrées comme un rectangle noir (le nombre d’entrées est indiqué sous le rectangle). De ce rectangle sort le vecteur p dont la dimension matricielle est R×1. Ce vecteur est multiplié par une matrice W qui contient les poids (synaptiques) des neurones. Dans le cas d’un neurone simple, cette matrice possède la dimension 1×R. Le résultat de la multiplication correspond au niveau d’activation qui est ensuite comparé au seuil b (un scalaire) par soustraction. Finalement, la sortie du neurone est calculée par la fonction d’activation *f*. La sortie d’un neurone est toujours un scalaire.

II.1.1. Fonctions de transfert

Jusqu’à présent, nous n’avons pas spécifié la nature de la fonction d’activation de notre modèle. Il se trouve que plusieurs possibilités existent. Différentes fonctions de transfert pouvant être utilisées comme fonction d’activation du neurone sont énumérées au tableau II-1. Les trois les plus utilisées sont les fonctions «seuil» (en anglais «hard limit»), «linéaire» et «sigmoïde».

Comme son nom l’indique, la fonction seuil applique un seuil sur son entrée. Plus précisément, une entrée négative ne passe pas le seuil, la fonction retourne alors la valeur 0 (on peut interpréter ce 0 comme signifiant faux), alors qu’une entrée positive ou nulle dépasse le seuil, et la fonction retourne 1 (vrai). Utilisée dans le contexte d’un neurone, cette fonction est illustrée à la figure II-4a. On remarque alors que le biais b dans l’expression de a = hardlim ($\mathbf{w}^T$p− b) (équation II.4) détermine l’emplacement du seuil sur l’axe $\mathbf{w}^T$p, ou la fonction passe de 0 à 1.

Le tableau II-1 résume les Fonctions de transfert couramment utilisées.

Nom de la fonction	Relation d'entrée/sortie	Icône	Nom Matlab
seuil	$a = 0$ si $n < 0$ $a = 1$ si $n \geq 0$		hardlim
seuil symétrique	$a = -1$ si $n < 0$ $a = 1$ si $n \geq 0$		hardlims
linéaire	$a - n$		purelin
linéaire saturée	$a = 0$ si $n < 0$ $a = n$ si $0 \leq n \leq 1$ $a = 1$ si $n > 1$		satlin
linéaire saturée symétrique	$a = -1$ si $n < -1$ $a = n$ si $-1 \leq n \leq 1$ $a = 1$ si $n > 1$		satlins
linéaire positive	$a = 0$ si $n < 0$ $a = n$ si $n \geq 0$		poslin
sigmoïde	$a = \frac{1}{1+\exp^{-n}}$		logsig
tangente hyperbolique	$a = \frac{e^n - e^{-n}}{e^n + e^{-n}}$		tansig
compétitive	$a = 1$ si n maximum $a = 0$ autrement		compet

TAB II-1. *Fonctions de transfert a = f(n) [26].*

La fonction linéaire est très simple, elle affecte directement son entrée à sa sortie :

$$a = n. \qquad \text{(II-5)}$$

Appliquée dans le contexte d'un neurone, cette fonction est illustrée à la figure II-4 b. Dans ce cas, la sortie du neurone correspond à son niveau d'activation dont le passage à zéro se produit lorsque $\mathbf{w}^T\mathrm{p} = b$.

La fonction de transfert sigmoïde est quant à elle illustrée `a la figure II.4 c. Son équation est donnée par :

$$a = \frac{1}{1 + \exp^{-n}} \tag{II-6}$$

Elle ressemble soit à la fonction seuil, soit à la fonction linéaire, selon que l'on est loin ou prés de b, respectivement. La fonction seuil est non-linéaire car il y a une discontinuité lorsque $\mathbf{w}^T\mathrm{p} = b$. De son côté, la fonction linéaire est tout à fait linéaire. Elle ne comporte aucun changement de pente. La sigmoïde est un compromis intéressant entre les deux précédentes.

Notons finalement, que la fonction «tangente hyperbolique» est une version symétrique de la sigmoïde.

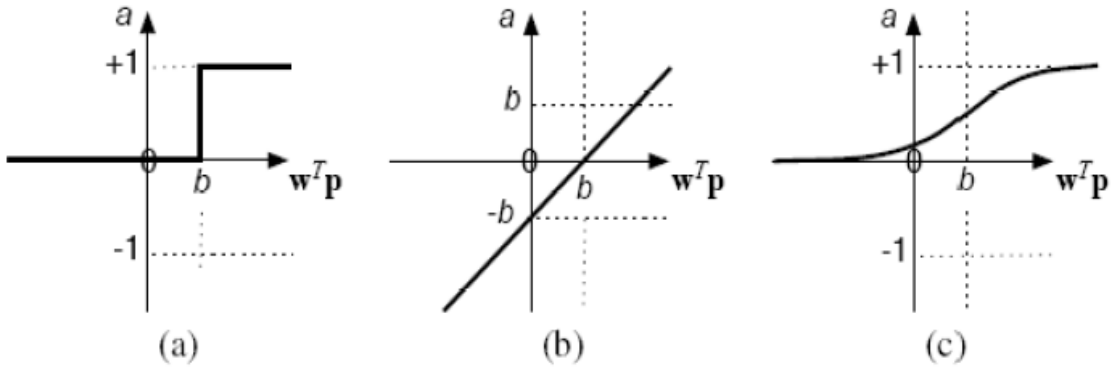


Fig II-4. *Fonction de transfert :* **(a)** du neurone «seuil», **(b)** du neurone «linéaire», et **(c)** du neurone «sigmoïde».

II.1.2. Architecture de réseau

Un réseau de neurones est un maillage de plusieurs neurones, généralement organisé en couches. Pour construire une couche de S neurones, il s'agit simplement de les assembler comme à la figure II-5. Les S neurones d'une même couche sont tous branchés aux R entrées. On dit alors que la couche est totalement connectée.

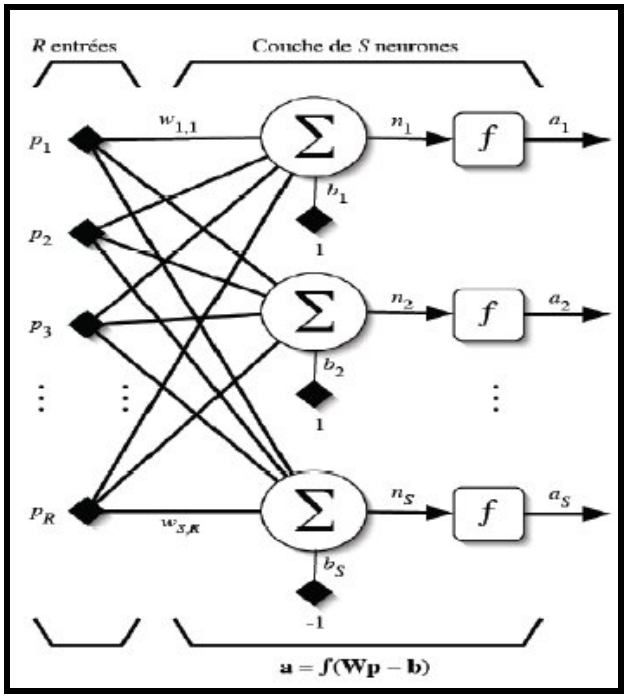


Fig II-5. *Couche de S neurones [26].*

Un poids $\mathbf{w}_{i,j}$ est associé à chacune des connexions. Nous noterons toujours le premier indice par *i* et le deuxième par *j* (jamais l'inverse). Le premier indice (rangé) désigne toujours le numéro de neurone sur la couche, alors que le deuxième indice (colonne) spécifie le numéro de l'entrée. Ainsi, $\mathbf{w}_{i,j}$ désigne le poids de la connexion qui relie le neurone *i* à son entrée *j*. L'ensemble des poids d'une couche forme donc *une matrice* ***W*** *de dimension S × R :*

$$W = \begin{bmatrix} w_{1,1} & w_{1,2} & \cdots & w_{1,R} \\ w_{2,1} & w_{2,2} & \cdots & w_{2,R} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{S,1} & w_{S,2} & \cdots & w_{S,R} \end{bmatrix} \qquad \text{(II.7)}$$

Notez bien que $S \neq R$, dans le cas général (les nombres de neurones et d'entrées sont indépendants). Si l'on considère que les S neurones forment un vecteur de neurones, alors on peut créer les vecteurs $b = [b_1 b_2 \cdots b_S]^T$, $n = [n_1 n_2 \cdots n_S]^T$ et $a = [a_1 a_2 \cdots a_S]^T$. Ceci nous amène à la représentation graphique simplifiée, illustrée à la figure II-6. On y retrouve, comme à la figure II-3, les mêmes vecteurs et matrice. La seule différence se situe au niveau de la taille, ou plus précisément du nombre de rangées (S), de *b*, *n*, *a* et **W**.

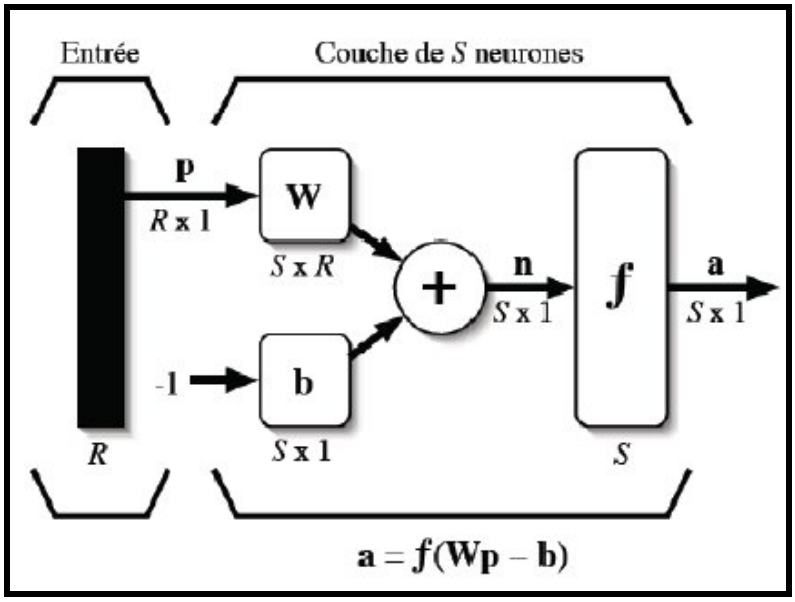


Fig II-6. *Représentation matricielle d'une couche de S neurones [24].*

Finalement, pour construire un réseau, il ne suffit plus que de combiner des couches comme à la figure II-7. Cet exemple comporte R entrées et trois couches de neurones comptant respectivement S1, S2 et S3 neurones. Dans le cas général, de nouveau, S^1, S^2, S^3. Chaque couche possède sa propre matrice de poids W^k, où k désigne l'indice de couche. Dans le contexte des vecteurs et des matrices relatives à une couche, nous emploierons toujours un exposant pour désigner cet indice. Ainsi, les vecteurs b^k, n^k et a^k sont aussi associés à la couche k.

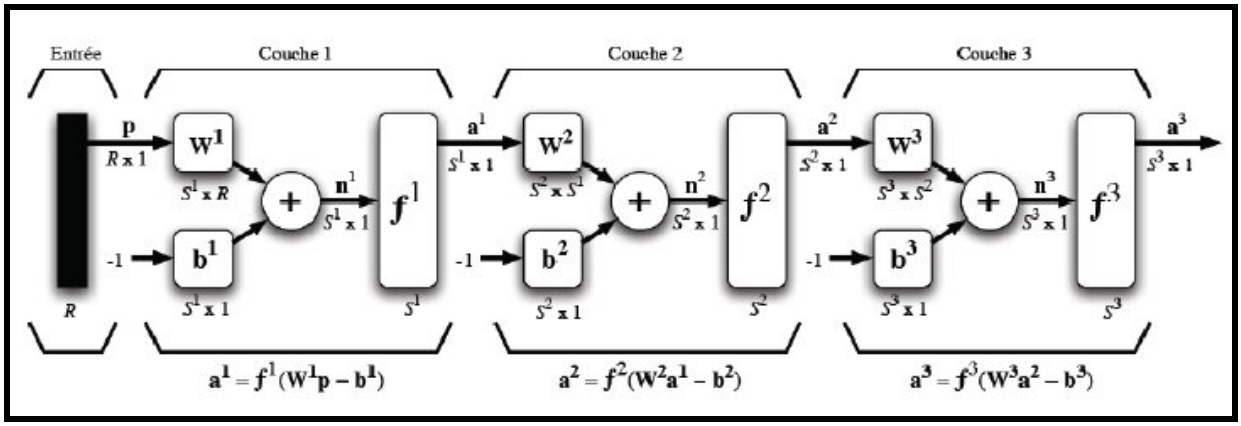


Fig II-7. *Représentation matricielle d'un réseau de trois couches [26].*

Il importe de remarquer dans cet exemple que les couches qui suivent la première ont comme entrée la sortie de la couche précédente. Ainsi, on peut enfiler autant de couche que l'on veut, du moins en théorie. Nous pouvons aussi fixer un nombre quelconque de neurones sur chaque couche. En pratique, nous verrons plus tard qu'il n'est cependant pas souhaitable d'utiliser trop de neurones. Finalement, notez aussi que l'on peut changer de fonction de transfert d'une couche à l'autre. Ainsi, toujours dans le cas général $f^1 \neq f^2 \neq f^3$.

La dernière couche est nommée «couche de sortie». Les couches qui précédent la couche de sortie sont nommées «couches cachées».

.

Les réseaux multicouches sont beaucoup plus puissants que les réseaux simples à une seule couche. En utilisant deux couches (une couche cachée et une couche de sortie), à condition d'employer une fonction d'activation sigmoïde sur la couche cachée, on peut entraîner un réseau à produire une approximation de la plupart des fonctions, avec une précision arbitraire (cela peut cependant requérir un grand nombre de neurones sur la couche cachée). Sauf dans de rares cas, les réseaux de neurones artificiels exploitent deux ou trois couches.

Entraîner un réseau de neurones signifie modifier la valeur de ses poids et de ses biais pour qu'il réalise la fonction entrée/sortie désirée., il existe différents algorithmes pour y parvenir dans différents contextes. Pour spécifier la structure du réseau, il faut aussi choisir le nombre de couches et le nombre de neurones sur chaque couche.

Tout d'abord, rappelons que le nombre d'entrées du réseau (R), de même que le nombre de neurones sur la couche de sortie est fixé par les spécifications du problème que l'on veut résoudre avec ce réseau. Par exemple, si la donnée du problème comporte quatre variables en entrée et qu'elle exige de produire trois variables en sortie, alors nous aurons simplement R = 4 et $S^M = 3$, où M correspond à l'indice de la couche de sortie (ainsi qu'au nombre de couches). Ensuite, la nature du problème peut aussi nous guider dans le choix des fonctions de transfert. Par exemple, si l'on désire produire des sorties binaires 0 ou 1, alors on choisira probablement une fonction seuil pour la couche de sortie. Il reste ensuite à choisir le nombre de couches cachées ainsi que le nombre de neurones sur ces couches, et leur fonction de transfert. Il faudra aussi fixer les différents paramètres de l'algorithme d'apprentissage.

II.1.3. Le perceptron multicouches

Le perceptron multicouches (noté MLP pour Multi Layer Perceptron en anglais) est directement inspiré du raisonnement présenté au dessus. L'idée principale est de grouper des neurones dans une couche. On place ensuite bout à bout plusieurs couches et connecte complètement les neurones de deux couches adjacentes. Les entrées des neurones de la deuxième couche sont donc en fait les sorties des neurones de la première couche. Les neurones de la première couche sont reliés au monde extérieur et reçoivent tous le même vecteur d'entrée (c'est en fait l'entrée du réseau). Ils calculent alors leur sorties qui sont transmises aux neurones de la deuxième couche, etc. Les sorties des neurones de la dernière couche forment la sortie du réseau [24].

II.1.4. L'apprentissage (supervisé)

En ajustant les paramètres d'un MLP, on peut lui faire calculer toute sorte de fonction. Si on se donne une fonction vectorielle particulière, on peut tenter de faire apprendre cette fonction par un MLP : c'est l'apprentissage. La méthode classique pour l'apprentissage supervisé consiste à se donner un ensemble d'exemples, c'est à dire un ensemble fini de couple de vecteurs *(x_i,y_i).* Dans un tel couple*, x_i* désigne l'entrée du réseau et *y_i* la sortie désirée pour cette entrée. On

écrit alors la fonction calculée par le réseau sous une forme paramétrique : *f(x,w)* désigne la sortie du réseau quand on lui présente en entrée le vecteur x et qu'il utilise les poids synaptiques contenus dans le vecteur w. On se donne enfin une distance sur l'espace vectoriel de sortie, c'est à dire un moyen de mesurer l'erreur commise en un point par le réseau. Si cette distance est notée d, on cherche alors à trouver la valeur de w qui minimise la somme l'erreur totale commise par le réseau, c'est à dire la somme des distances entre les sorties obtenues et les sorties désirées, c'est à dire somme des *d(f(x_i,w),y_i)*. Cette erreur est une fonction de w et on peut donc utiliser les techniques classiques d'optimisation de fonction pour trouver son minimum [25].

II.1.6. La rétro-propagation

Les algorithmes d'optimisation de fonction efficaces utilisent en général la différentielle de la fonction considérée (c'est à dire son gradient car elle est à valeurs réelles). Quand les fonctions de transfert utilisées dans les neurones sont différentiables, et quand la fonction distance est aussi différentiable, l'erreur commise par un MLP est une fonction différentiable des coefficients synaptiques du réseau. L'algorithme de rétro-propagation permet justement de calculer le gradient de cette erreur de façon efficace : le nombre d'opérations (multiplications et additions) à faire est en effet proportionnel au nombre de connexions du réseau, comme dans le cas du calcul de la sortie de celui-ci. Cet algorithme rend ainsi possible l'apprentissage d'un MLP [24].

II.2. Topologies des réseaux de neurones

II.2.1. Le réseau de neurone à propagation avant (feedforward)

Il existe plusieurs architectures de réseaux possibles. En fait, lorsque les neurones sont branchés entre eux d'une façon peu commune, la difficulté principale devient alors de trouver un algorithme efficace pour l'apprentissage de ce réseau. L'architecture multi-couches à propagation avant est sans aucun doute la plus utilisée. Voici un exemple avec 4 entrées, 2 sorties et la sigmoïde comme fonction d'activation:

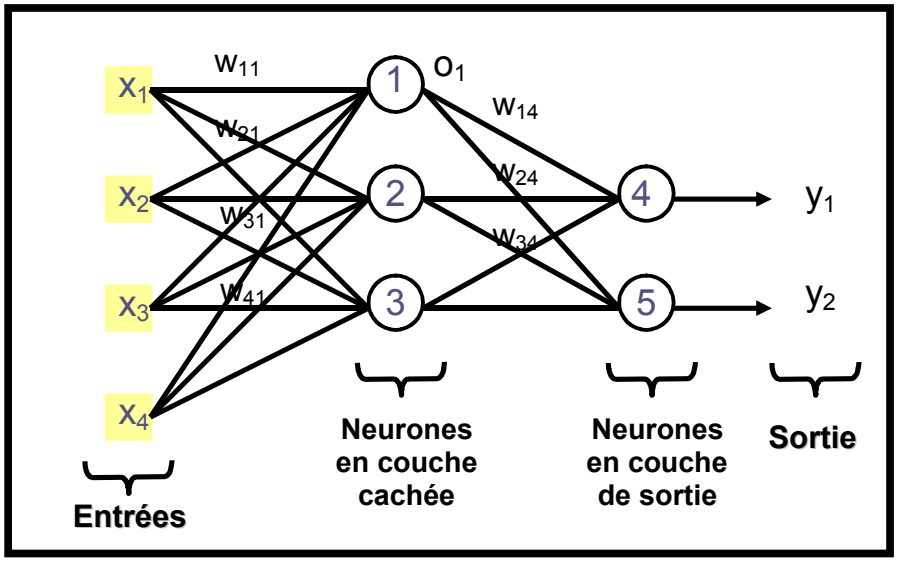


Fig II-8. *Réseau de neurones à propagation avant.*

II.2.2. Réseau de neurone récursif

Dans l'exemple précédent, uniquement des liens à propagation avant ont été utilisés. Parfois des liens récursifs sont aussi présents et cela pour ajouter plus de flexibilité au réseau. Par ailleurs, le cerveau humain compte plusieurs neurones avec des liens récursifs. Plusieurs chercheurs affirment que la récursivité des réseaux neuronaux du cerveau sont à la base de notre capacité de mémorisation. Une topologie de réseau avec des liens récursifs est présentée à titre d'exemple.

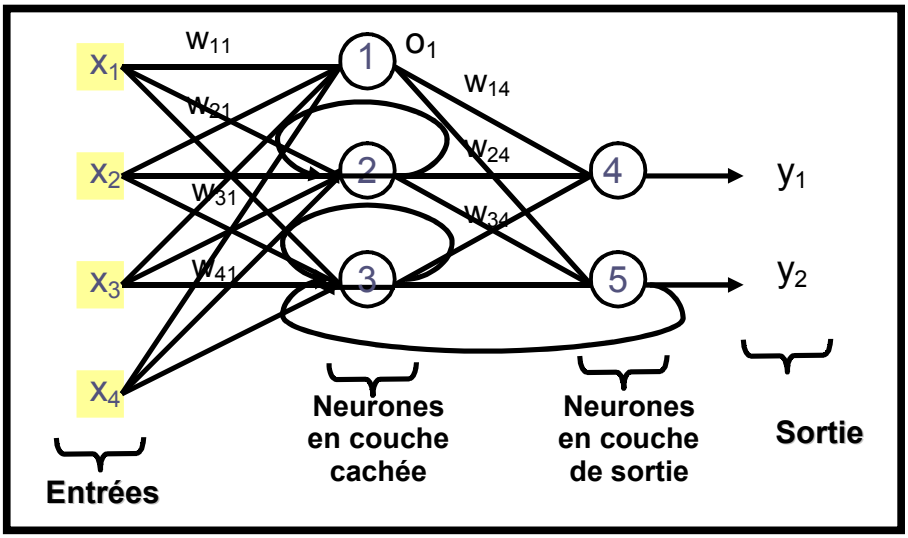


Fig II-9. *Réseau de neurones récursif.*

II.3. Le choix de l'architecture des RNA

Le choix d'une architecture adéquate de RNA est primordiale pour obtenir un système performant ou tout au moins fonctionnel. Or plusieurs aspects sont à considérer lors de la conception dont les plus importants sont :

- Le nombre d'entrées et de sorties
- Le nombre de couches de neurones
- Le nombre de neurones sur chaque couche
- Les interconnexions entre les couches (récursif ou non-récursif)
- La fonction d'activation

II.4. L'algorithme d'apprentissage : « Back propagation »

La théorie se rattachant à l'apprentissage des RNA peut paraître complexe à première vue. Bien que certains algorithmes soient réellement complexes, l'apprentissage supervisé d'un réseau à propagation avant avec un des algorithmes les

plus populaire, soit « Back propagation », est plutôt simple. Voici les différentes étapes à suivre lors de l'apprentissage d'un réseau de neurones à propagation avant avec l'algorithme « Back propagation ».

1er étape : Initialiser les poids des liens entre les neurones. Souvent des petites valeurs déterminées aléatoirement, est assignées à chacun des poids.

2e étape : Application d'un vecteur entrées-sorties à apprendre.

3e étape : Calcul des sorties du RNA à partir des entrées qui lui sont appliquées et calcul de l'erreur entre ces sorties et les sorties idéales à apprendre.

4e étape : Correction des poids des liens entre les neurones de la couche de sortie et de la première couche cachée selon l'erreur présente en sortie.

5e étape : Propagation de l'erreur sur la couche précédente et correction des poids des liens entre les neurones de la couche cachée et ceux en entrées.

6e étape : Boucler à la 2e étape avec un nouveau vecteur d'entrées-sorties tant que les performances du RNA (erreur sur les sorties) ne sont pas satisfaisantes.

II.5. Propriétés des réseaux de neurones multicouches

Les réseaux de neurones à couches ou les perceptrons multicouches MLP (muti-layer perceptron), présentés précédemment dans ce chapitre, ont la propriété générale d'être des approximateurs universels parcimonieux. Il s'agit en fait de deux propriétés distinctes détaillées ci-dessous.

II.5.1. La propriété d'approximation universelle

La propriété d'approximation universelle a été démontrée par Cybenko et Funahashi (1989) [23] et peut s'énoncer de la façon suivante :

« Toute fonction bornée suffisamment régulière peut être approchée uniformément, avec une précision arbitraire, dans un domaine fini de l'espace de ses variables, par un réseau de neurones comportant une couche de neurones cachés en nombre fini, possédant tous la même fonction d'activation, et un neurone de sortie linéaire ».

Cette propriété justifie l'utilisation de l'architecture présentée plus loin dans ce mémoire. Comme le montre ce théorème, le nombre de neurones cachés doit être choisi convenablement pour obtenir la précision voulue.

II.5.2. La propriété de parcimonie

Lorsque l'on cherche à modéliser un processus à partir des données, on s'efforce toujours d'obtenir les résultats les plus satisfaisants possibles avec un nombre minimum de paramètres ajustables. Dans cette optique, Hornik *et al* [23] ont montré que :

« Si le résultat de l'approximation (c'est-à-dire la sortie du réseau de neurones) est une fonction non linéaire des paramètres ajustables, elle est plus parcimonieuse que si elle est une fonction linéaire de ces paramètres. De plus, pour des réseaux de neurones à fonction d'activation sigmoïdale, l'erreur commise dans l'approximation varie comme l'inverse du nombre de neurones cachés, et elle est indépendante du nombre de variables de la fonction à approcher. Par conséquent, pour une précision donnée, donc pour un nombre de neurones cachés donné, le nombre de paramètres du réseau est proportionnel au nombre de variables de la fonction à approcher ».

II.6. Applications des réseaux de neurones

Il existe une grande variété de projets dans lesquels les réseaux de neurones artificiels ont eu du succès. Les RNA se démarquent des techniques plus conventionnelles notamment grâce à leur capacité d'apprendre et de généraliser, à leur immunité au bruit ainsi que par leur architecture hautement parallèle, fortement appréciée pour le traitement de l'information en temps réel. Or, voici quelques exemples d'applications possibles, regroupées sous forme de grandes classes fonctionnelles :

- **La Prédiction :** les réseaux de neurones artificiels peuvent apprendre à prédire certaines sorties qui tendent à apparaître lorsqu'une certaine combinaison

d'entrées lui est présentée. Les RNA peuvent parfois même déduire certaines sorties pour des vecteurs d'entrées qui ne leur ont pas été présentés lors de leur phase d'apprentissage. Les RNA sont donc capable de généraliser.

- **La Classification :** la reconnaissance de caractères est probablement l'une des applications qui a fait le plus connaître la capacité de classification des réseaux de neurones artificiels.
- **Le contrôle de processus**
- **Le filtrage**
- **L'étude du fonctionnement de neurones biologiques**

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons essayé d'introduire les réseaux de neurones d'une manière simple et de s'intéresser un peu plus à l'application de cet outil de l'intelligence artificielle à l'approximation de fonctions moyennant une topologie à propagation avant « feed forward » et par un apprentissage supervisé « back propagation », ce qui va constitue notre application de cette technique dans le chapitre suivant.

Attiré par leurs applications diverses et par leurs deux propriétés fondamentales présentés dans ce chapitre (l'approximation universelle et la parcimonie) les réseaux de neurones constitue des approximateurs de fonctions promoteurs qui peuvent aider à la modélisation des processus non linéaires.

CHAPITRE III
MODELISATION DU pH-ISFET PAR LES RESEAUX DE NEURONES (RNA)

Introduction

Notre troisième chapitre se divise en deux parties, dans une première partie nous allons présenter le macro-modèle de l'ISFET basé sur la théorie appelée « site-binding » combinée au modèle de « Gouy-Chapman-Stern » expliqué au «chapitre1», ainsi nous allons présenté l'implémentation de ce modèle sur les deux simulateurs Orcad-PSPICE et Star- HSPICE et les résultats obtenus de la simulation.

La création d'un modèle à base des réseaux de neurones « ANN-model » à l'aide du logiciel MATLAB pour substituer à la réponse de l'ISFET aux ions H^+ ,représente la deuxième partie de ce chapitre .L'implémentation du ANN-model sur le simulateur PSPICE ainsi que les résultats de simulation obtenus sont également reportés dans cette partie.

Le but de La construction d'un modèle à base des ANN pour l' ISFET, est de présenter la capacité des réseaux de neurones de reproduire son comportement et de prédire sa réponse pour un domaine de fonctionnement plus étendu, ce modèle peut servira à la simulation de la dépendance de la réponse de l'ISFEET aux différents paramètres (pH,paramètres liés à la technologie de fabrication,courants et tensions ,dépendance en température).Cette simulation va aider à la conception des circuits de conditionnement pour améliorer la réponse et minimiser la dépendance aux paramètres technologiques et environnementaux des dispositifs de mesure basés sur les ISFETs.

III.1. Modélisation du capteur pH-ISFET

III.1.1. Macro-modélisation du capteur pH-isfet (Mosfet based macro-model)

La réponse du capteur ISFET aux ions H^+ peut être décomposée en deux parties,une partie chimique décrite par le model *site-binding-model* [10,2,3,5,6], qui explique l'interaction des charges d'un oxyde et leur piégeage et l'équilibre thermodynamique entre les charges piégées et les ions H^+ dans le volume de la solution à analysée, combiné au model de Gouy-Chapman-Stern [11] qui décrit le profil de potentiel dans un électrolyte .la physique du MOSFET représente la partie électronique du modèle de l'ISFET. Ces deux parties donnent une description complète du comportement du pH-ISFET.

Le circuit électrique équivalent de l'ISFET est présenté dans la figure III-1:

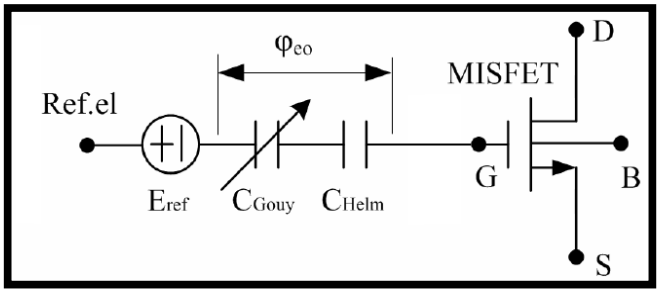


Fig III-1. *Le schéma du circuit équivalent de l'ISFET [5].*

$\mathbf{E_{ref}}$: le potentiel de l'électrode de référence

$\boldsymbol{\varphi_{eo}}$: le potentiel d'interface électrolyte –isolant

$\mathbf{C_{Gouy}}$: capacité de Gouy-Chapman

$\mathbf{C_{Helm}}$: capacité de Helmholtz

Le macro modèle qui considère l'ISFET comme deux étages (Fig.III-2) : Un étage électronique et un étage électrochimique a été implémenté sur les deux simulateur PSPICE et HSPICE :

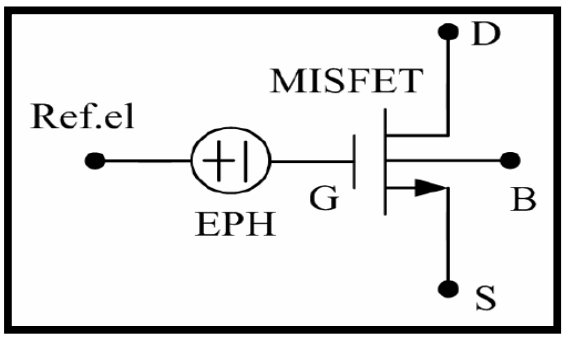


Fig III-2. *Macro model de l'ISFET [5].*

Où: ***Ref.el*** *:* l'électrode de référence

D*:* drain.

***S**:* source.

***B:** substrat*.

***EPH**:* potentiel de l'interface électrolyte – isolant

L'étage électronique est modélisé par l'utilisation d'un model de MOSFET à grille métallique (level 2) :

```
.MODEL MISFET NMOS LEVEL=2
+ VTO = 0.7 LAMBDA = 7.59e-3 RSH = 3.5e+1
+TOX = 1800e-10
+ UO = 6.53E2 TPG = 0
+ UEXP = 7.64E-2 NSUB = 3.27E15 NFS = 1.21E11
+ NEFF = 3.88 VMAX = 5.35E4 DELTA = 1.47 LD = 2.91E-6
+ UCRIT = 7.97E4 XJ = 6.01E-9 CJ = 4.44E-4 IS = 1E-11
+ CJSW = 5.15E-10 PHI = 5.55E-1 GAMMA = 9.95E-1
+ MJ = 0.395 MJSW = 0.242 PB = 0.585
```

III.1.2. Simulation du modèle ISFET par PSPICE et HSPICE (MOSFET based)

III. 1.2.1. Présentation du simulateur ORCAD-PSPICE

ORCAD-PSPICE est un programme de simulation qui modélise le comportement d'un circuit électrique contenant des composants analogiques. Il est utilisé avec ORCAD Capture pour la conception. ORCAD-PSPICE permet l'analyse statique, transitoire et dynamique des circuits électroniques. Ainsi que l'analyse Paramétrique, Monte-Carlo, et de sensibilité.

Les circuits peuvent contenir des différents dispositifs électroniques résistances, condensateurs, inductances, des sources de tension et de courant, ainsi que des modèles de dispositifs actifs : diodes, transistors bipolaires, transistors à effet de champ à jonction… (une bibliothèque de modèles de plus de 11300 modèles analogiques). ORCAD-PSPICE supporte aussi la modélisation comportementale analogique donc on peut décrire les bloques fonctionnels des circuits avec des expressions mathématiques [15].

III. 1.2.2. Présentation du simulateur Star-HSPICE

Star-Hspice simulateur-optimisateur de circuits est un environnement de simulation et d'analyse des circuits électriques et électronique de grade industriel de la compagnie *Avant!*, comme le PSPICE il permet la simulation des circuits en statique et dynamique, transitoire, et fréquentiel du continu aux micro-ondes. Star-Hspice est beaucoup plus utilisé dans le domaine du design des circuits intégrés.

III. 1.2.3.Résultas de simulations (PSPICE et HSPICE)

La figure III-3 représente le composant ajouté à la bibliothèque du simulateur PSPICE après implémentation par un sub-circuit écrit en langages PSPICE.

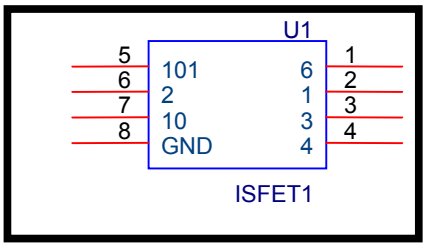


Fig III-3. *.ISFET comme composant de la bibliothèque PSPICE.*

Où : 6 : drain
1 : électrode de référence
3 : source
4 : bulk (substrat)
101 : pH de la solution
2 : interne
10 : interne et GND : masse (ground)

La simulation a été réalisée par le circuit de la figure III-4, le pH est remplacé par le potentiel de la solution sous forme d'une source de tension continue:

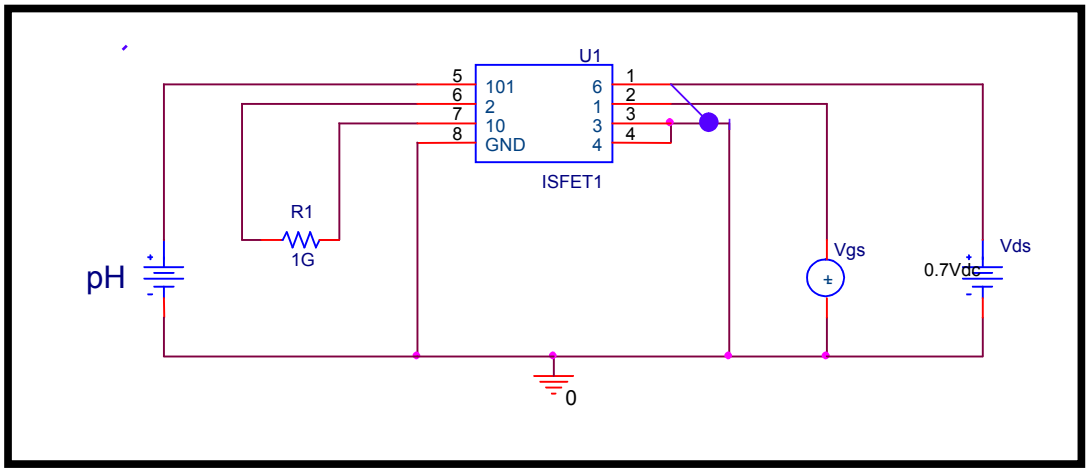


Fig III-4. *Circuit de simulation des caractéristiques I_{ds} (V_{gs}) : I_{ds} (V électrode de référence – source).*

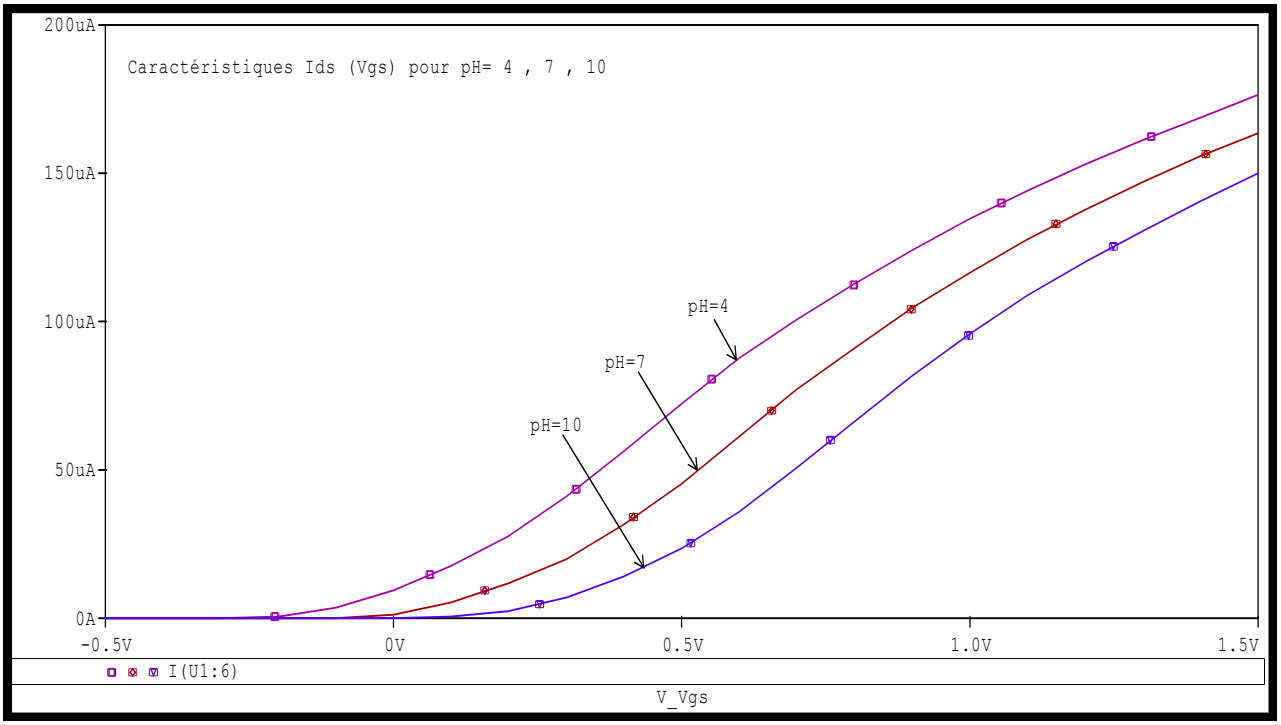


Fig III-5. *I_{ds} (V_{gs}) à V_{ds}=0.5 V pour pH = 4, 7,10 (Simulation sur PSPICE).*

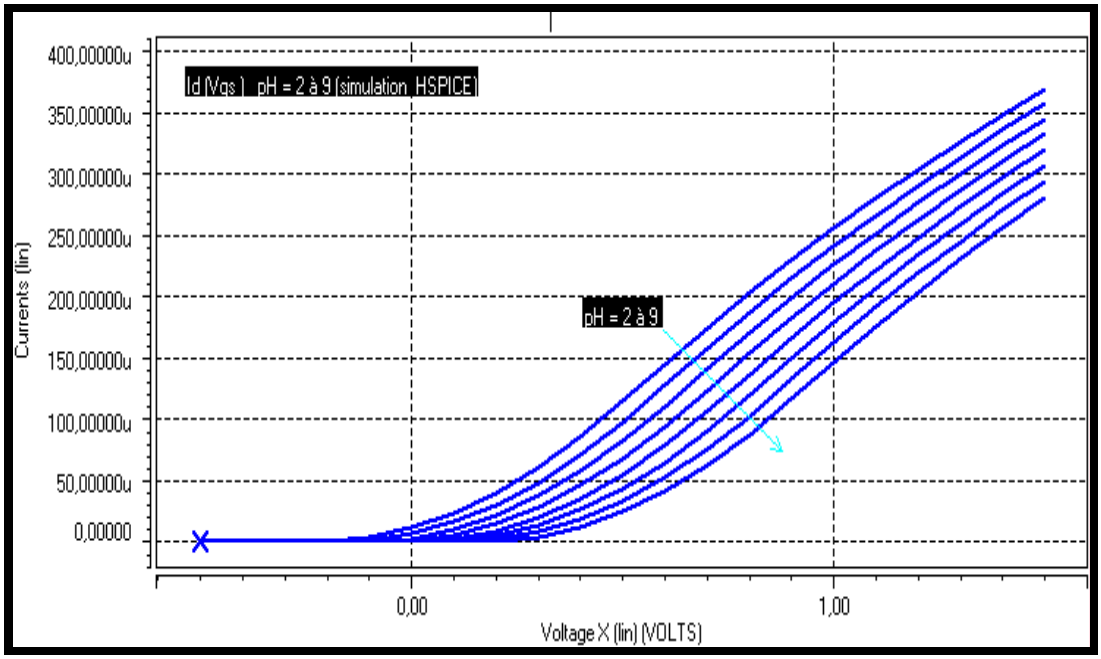


Fig III-6. *I_{ds} (V_{gs}) à V_{ds} = 0.5V, pH = 2 à 9 (simulation sur HSPICE).*

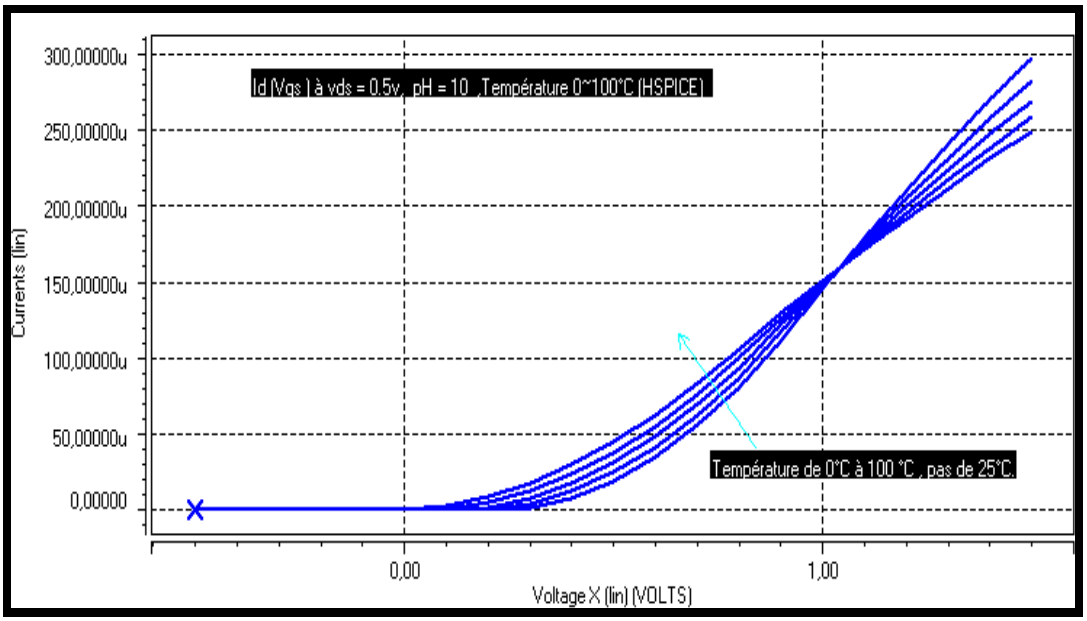


Fig III-7. *I_{ds} (V_{gs}) à V_{ds} = 0.5V, pH = 10 ,Température 0~100°C, par un pas de 25°C (simulation sur HSPICE).*

III.2.Modélisation neuronale

III.2.1. Les étapes de modélisation

La modélisation par les réseaux de neurones de notre capteur ISFET, doit passer par les étapes suivantes :

- Conception d'une base de données, (Base d'apprentissage ,base de validation et base test).
- Choix d'un réseau de neurones et l'entraîner sur la base d'apprentissage et la base de validation avec un algorithme approprié.
- Mesure de la performance du modèle obtenu avec la base de test et teste du modèle avec une base de test supplémentaire si nécessaire.

III.2.2. Conception d'une base de données

L'apprentissage d'un réseau de neurones nécessite une base de données assez représentative sur le domaine de fonctionnement. Notre micro-capteur ISFET détecte les pH entre 2 et 9 (résultats expérimentaux) fig III-8, afin d'étendre cette base de données pour pouvoir simuler les différents paramètres on a fait recours aux résultats de la simulation du *Marcro model* (MOSFET based macromodel) implémenté précédemment sur PSPICE et HSPICE.

Les trois bases de données d'apprentissage de validation et de test à concevoir doivent couvrir le domaine de fonctionnement du micro-capteur et représente la dépendance de sa réponse aux différents paramètres technologiques, électriques et environnementaux.

En se basant sur les résultats précédents du micro-capteur ISFET,on a construit une base de données hybride (expérimentale / simulation) de 6800 exemples, en utilisant l'interface Matlab on l'a décomposé en : une base de données d'apprentissage composée de 4760 exemples (70%), et une base de données de validation composée de 1360 exemples qui vaut 20% de notre base de données, 10 % (680 exemples) de la base de données a été

utilisé pour base de Test, chaque exemple représente les entrées (V_{gs}, V_{ds}, pH, T, T_{ox}, L) et la sortie (I_{ds}) de notre réseau à multi-entrées et une seule sortie où :

- V_{gs} : la tension grille-source (v) entre - 0.5 à 1.5 V. (entrée)
- V_{ds} : La tension drain-source de 0.5 à 1.5V (entrée)
- pH : pH entre 2 à 9. (entrée)
- T : Température entre 0°C et 80°C (entrée)
- T_{ox} : l'épaisseur d'oxyde entre 500 et 1800 A° (entrée)
- L : la longueur du canal entre 20 à 100 µm (entrée)
- I_{ds} : courant de drain (A) **(sortie)**

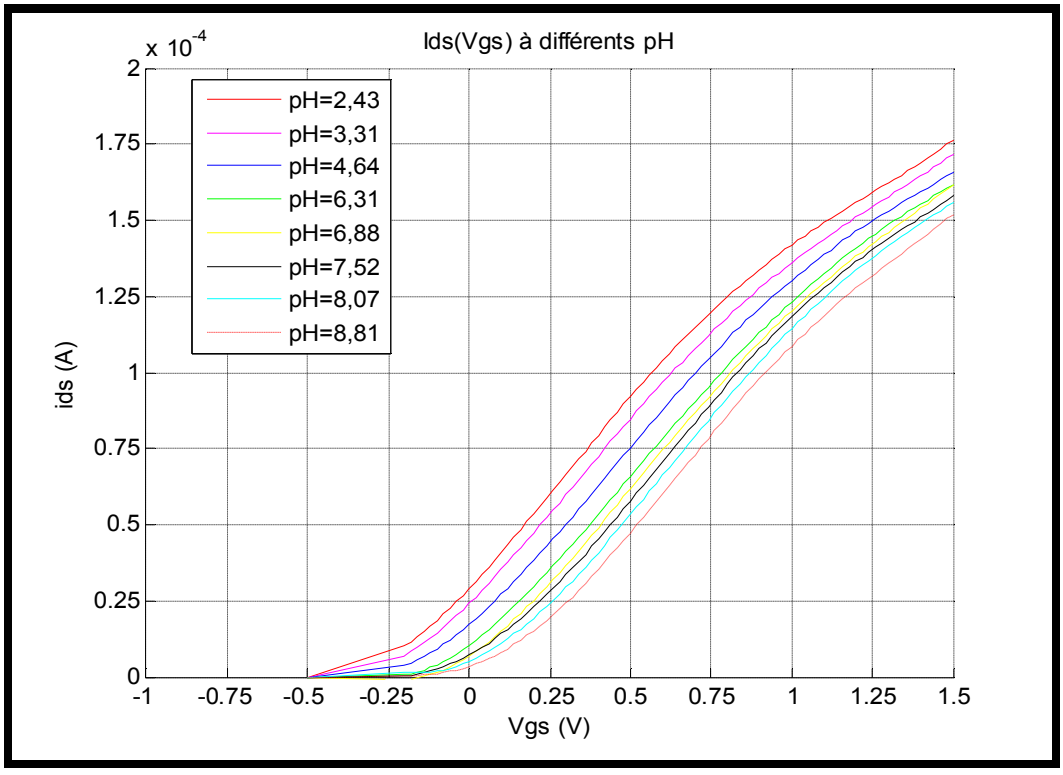


Fig III-8. *Caractéristiques I_{ds} (V_{gs}) à V_{ds} =0.5V de l'ISFET [4] reconstruite par MATLAB.*

A l'aide de la base de données construite auparavant on a reproduit correctement (comparer au courbes I_{ds} = f(V_{gs}) à V_{ds} constant et différents pH 2~9) les caractéristiques du capteur pH-ISFET, (Figure III-8). Notons que, d'une manière générale la base de validation doit être entre 10 et 25% de la base de données, suivant le problème étudié, et il est important de ne pas utiliser aucun élément de la base de validation et de test dans la base d'apprentissage. Cette base est réservée uniquement au contrôle de l'apprentissage pour la validation, et à la mesure de la performance pour la base de test.

III.2.3. Choix du topologie et apprentissage du réseau de neurones

- **La propriété d'approximation universelle des MLP**

La propriété d'approximation universelle des réseaux de neurones a été présentée au deuxième chapitre et peut s'énoncer de la façon suivante [23]:

« Toute fonction bornée suffisamment régulière peut être approchée uniformément, avec une précision arbitraire, dans un domaine fini de l'espace de ses variables, par un réseau de neurones comportant - au moins - *une couche de neurones cachés en nombre fini, possédant tous la même fonction d'activation, et un neurone de sortie linéaire » .*

Cette propriété justifie l'utilisation de l'architecture à présenter par la suite. Comme le montre ce théorème, le nombre de neurones cachés doit être choisi convenablement pour obtenir la précision voulue ou satisfaisante.

- **La propriété de parcimonie des MLP**

Lorsque l'on cherche à modéliser un processus à partir des données, on s'efforce toujours d'obtenir les résultats les plus satisfaisants possibles avec un nombre minimum de paramètres ajustables. Dans cette optique, Hornik *et al* [23] ont montré que :

« Si le résultat de l'approximation (c'est-à-dire la sortie du réseau de neurones) est une fonction non linéaire des paramètres ajustables, elle est plus parcimonieuse que si elle est une fonction linéaire de ces paramètres. De plus, pour des réseaux de neurones à fonction d'activation sigmoïdale, l'erreur commise dans l'approximation varie comme l'inverse du nombre de neurones cachés, et elle est indépendante du nombre de variables de la fonction à approcher. Par conséquent, pour une précision donnée, donc pour un

nombre de neurones cachés donné le nombre de paramètres du réseau est proportionnel au nombre de variables de la fonction à approcher ».

Sur la base de ces deux propriétés fondamentales des réseaux de neurones et Après avoir construit les trois bases de données (apprentissage, validation et test), on procède à l'apprentissage du réseau de neurones. D'abord il faudra définir le type du réseau dans notre cas nous avons choisis un MLP (Multi Layer Perceptron), l'intérêt de ce type de réseau est dans sa caractéristique d'approximation universelle, et de parcimonie, et sa facilité de l'implémentation. Le schéma de la figure III-9 représente le système d'apprentissage pour la modélisation du capteur. Le but de cet apprentissage est d'estimer les coefficients (poids et biais) du réseau de neurones. La figure (III-10) montre un exemple de courbe d'apprentissage.

La base de données d'apprentissage est constituée des entrées (V_{gs}, V_{ds}, pH, T, T_{ox} et L) appliquées au capteur et au modèle ANN et des sorties désirées pour le modèle ANN, qui sont les sorties Y_d qui représentent les courant I_{ds} mesurés sur le capteur. Les coefficients sont estimés de manière à minimiser une erreur d'approximation définie à partir de l'écart (Y_d -Y), à l'aide d'un algorithme d'apprentissage approprié.

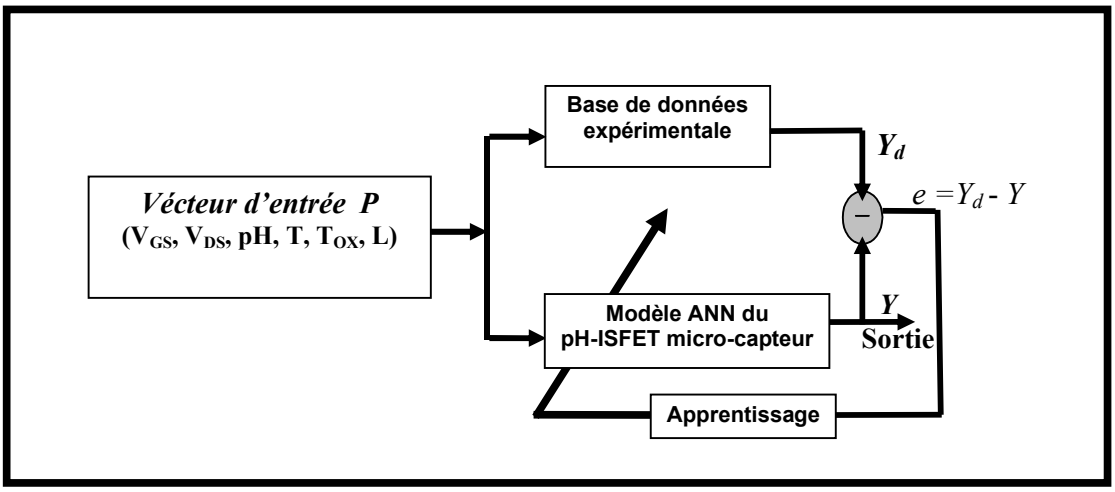


Fig III-9. *Système d'apprentissage pour la modélisation du capteur.*

Où: $\mathbf{Y_d}$: la sortie désirée (base de données).

Y : la sortie du modèle.

e : l'erreur de la modélisation.

Modèle ANN : Le modèle du capteur à base du réseau de neurones.

Après avoir choisie le type du réseau il faudra trouver une architecture optimale du réseau de neurones (MLP), nombre de couches cachées, nombre de neurones dans chaque couche, ainsi que la fonction d'activation pour chaque couche.

L'apprentissage et l'optimisation du réseau précédent est accompli par un programme structuré en MATLAB, la Figure III -11 montre l'Organigramme suivi. Le réseau optimisé possède six entrées, et un neurone dans la couche de sortie qui est déterminé par le nombre de sorties du système à modéliser, (le notre possède une seule sortie I_{ds}), quant aux couches cachées et après optimisation, le réseau à deux couches de 7 neurones pour la première et 6 neurones pour la deuxième couche représente la structure choisie pour notre modélisation. La fonction d'activation de la sortie est la fonction linéaire, pour les deux couches cachées, nous avons choisi la fonction sigmoïde (logsig).

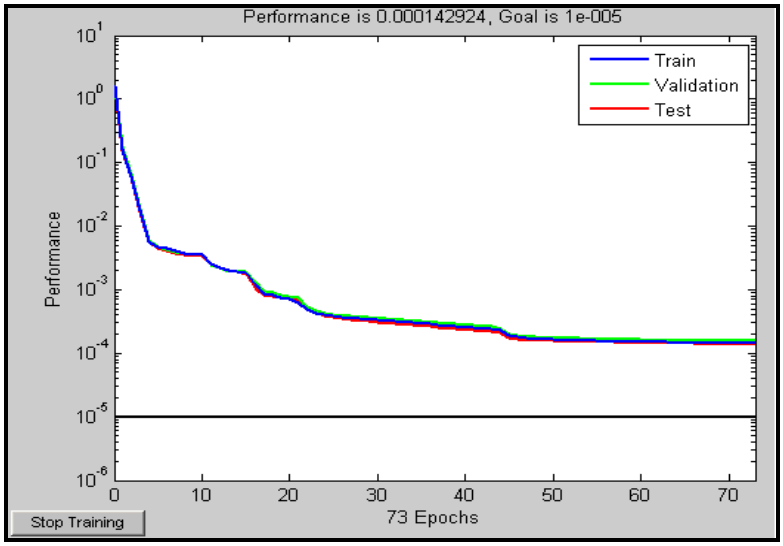


Fig III-10. *Courbe typique d'apprentissage pour un réseau à 5 neurones pour la 1° couche et 3 neurones pour la 2° couche.*

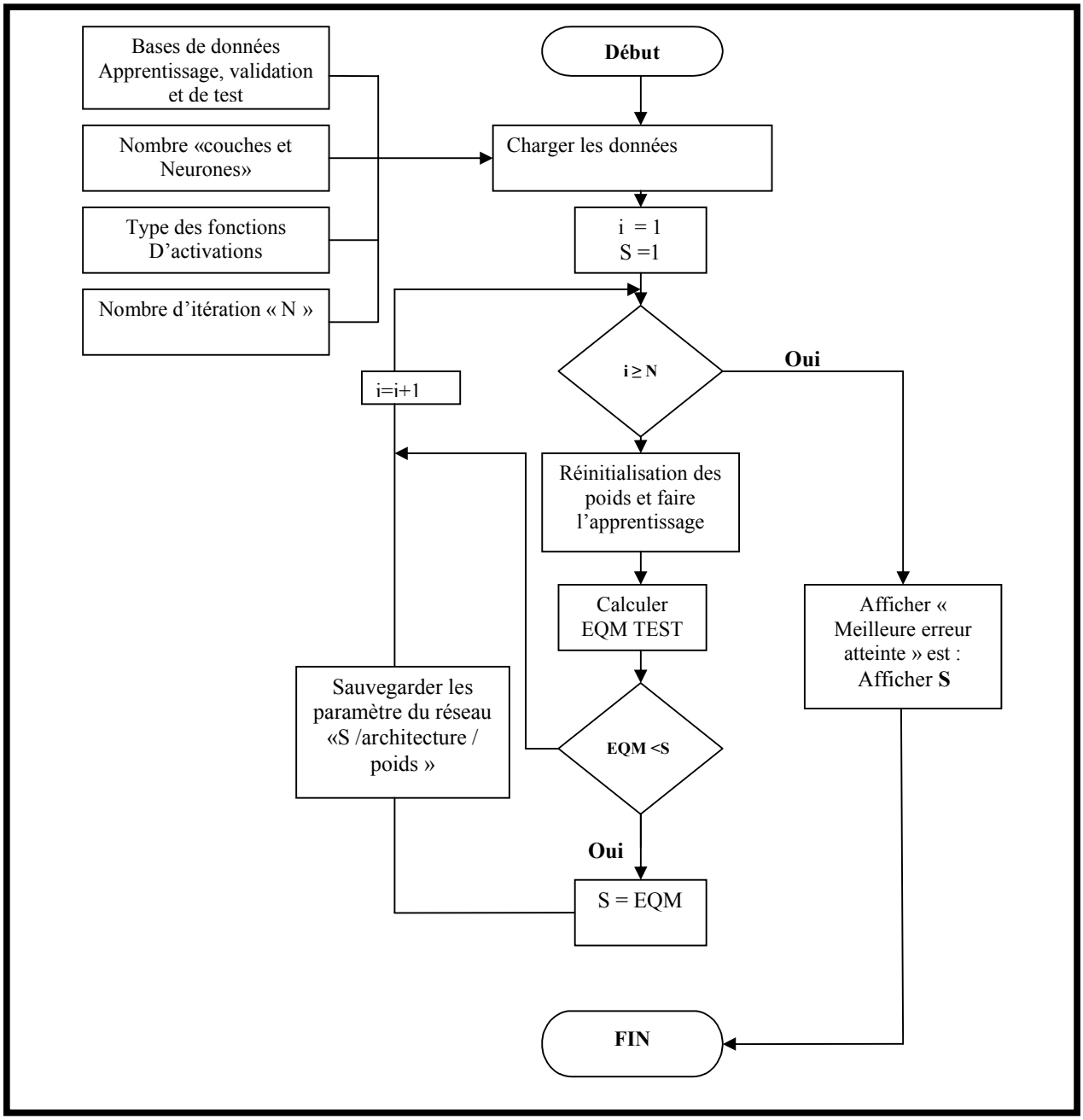


Fig III -11. *Organigramme d'apprentissage et d'optimisation.*

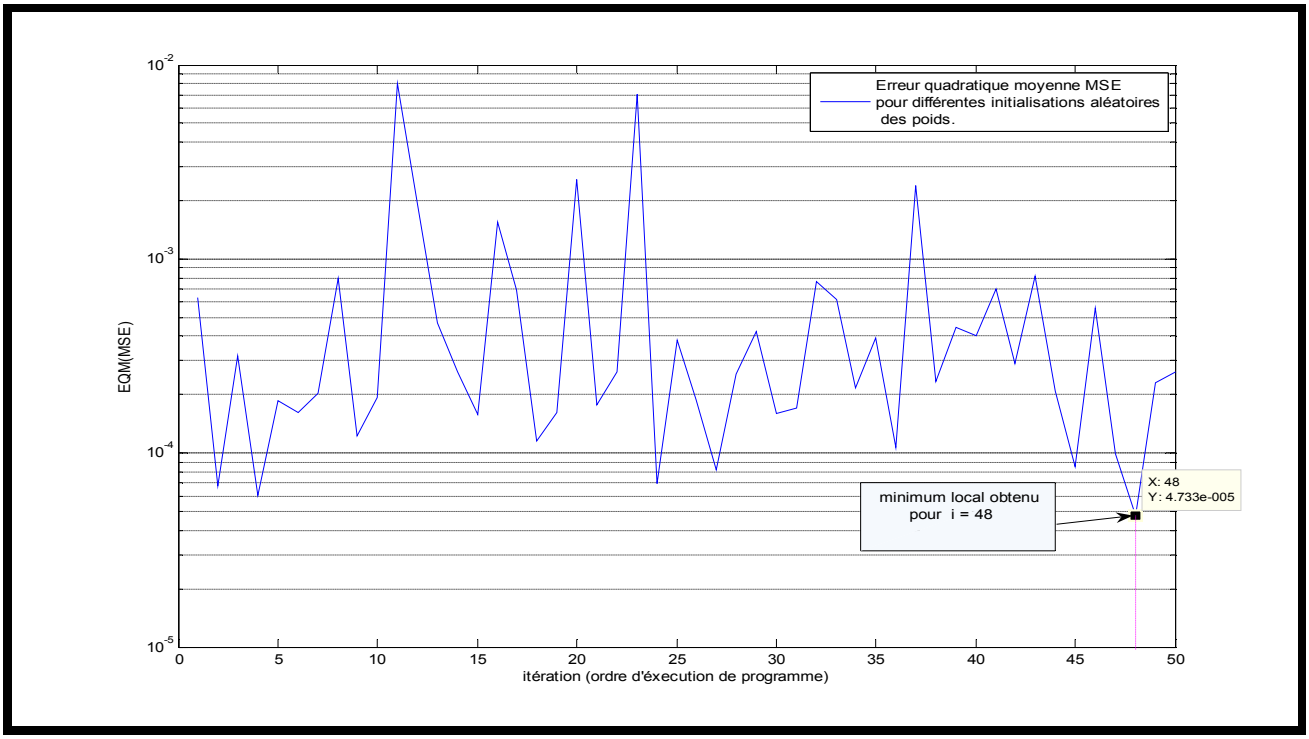


Fig III-12. *Erreur MSE après plusieurs apprentissages à des poids Initialisés par des petites valeurs aléatoires.*

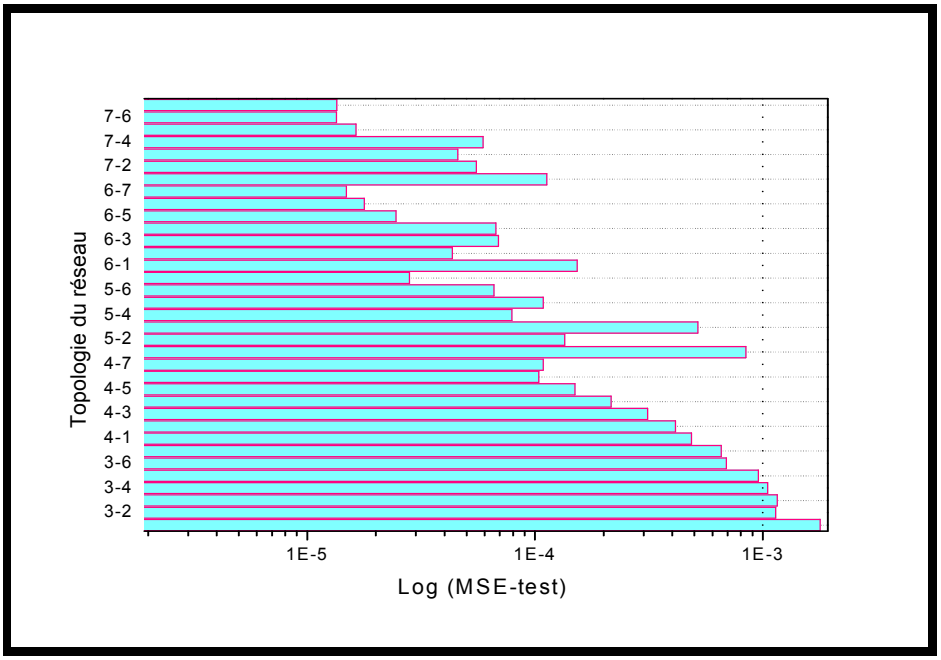


Fig III-13. *Evolution de l'erreur du test en fonction de la topologie du réseau.*

Le Tableau III-1 résume les caractéristiques du réseau optimisé pour la modélisation du Micro-capteur pH-ISEFT.

PROPRIETE	**CARACTERISTIQUE**
Architecture	7-6-1 Feed-forward MLP
Fonctions d'activation	Logsig-Logsig- linéaire
Règle d'apprentissage	Rétro propagation des erreurs (Lm)
EQM de test	Proche de 0.00001
Nombre d'itérations	4000

Tab III-1. *Caractéristiques du réseau optimisé.*

Ainsi la Figure III-14 illustre l'architecture du réseau conçu :

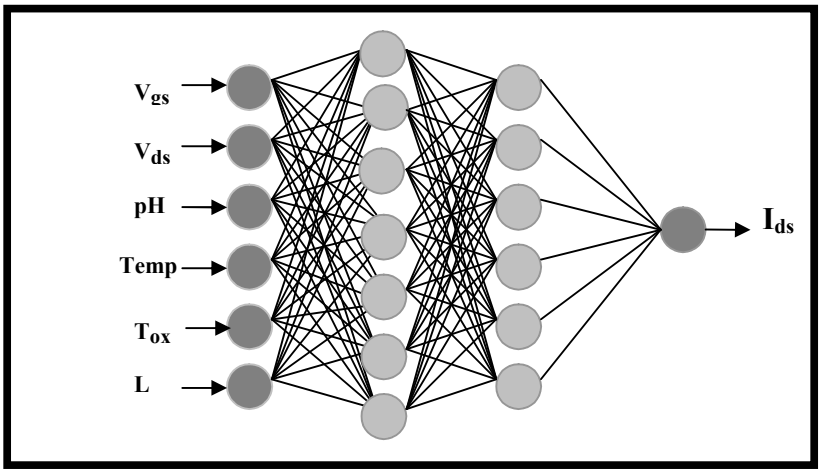


Fig. III-14. *Architecture du réseau choisi.*

III.2.4. Test du modèle ANN

Nous avons conçu un modèle à base des réseaux de neurones (Modèle ANN), pour modéliser le comportement du micro-capteur pH-ISFET dans un environnement dynamique dans le but que ce modèle exprime fidèlement le comportement expérimental du capteur et qu'il tien compte de la dépendance en température et aux paramètres technologiques (épaisseur d'oxyde et longueur du canal). les résultats obtenus sont montrée sur les figures (III-15), (III-16), (III-17) et (III-18).

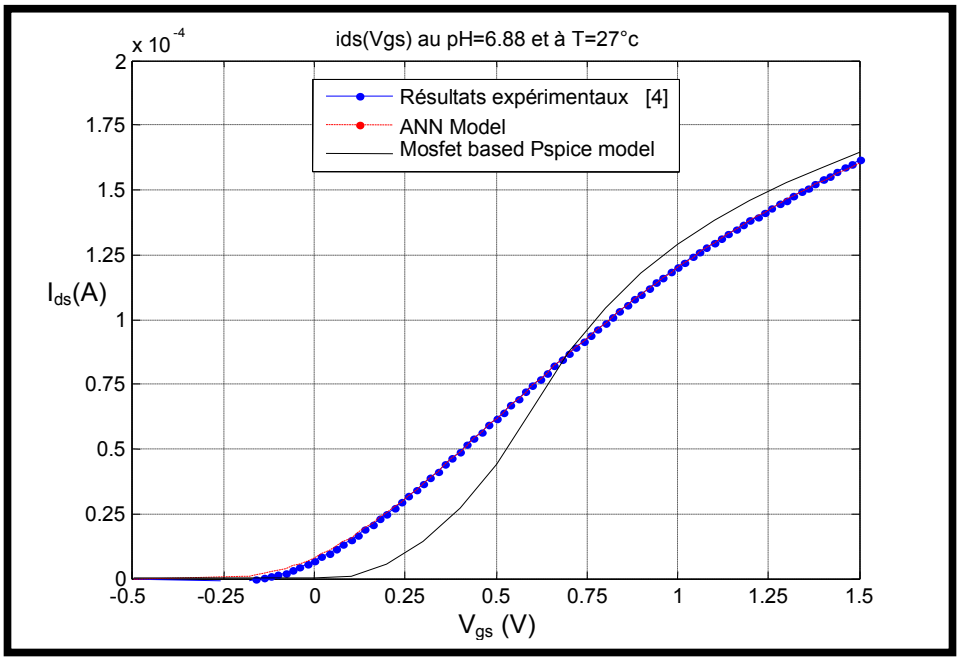


Fig III-15. *Caractéristiques $I_{ds} = f(V_{gs})$ pour pH = 6.88 à 27°C.*

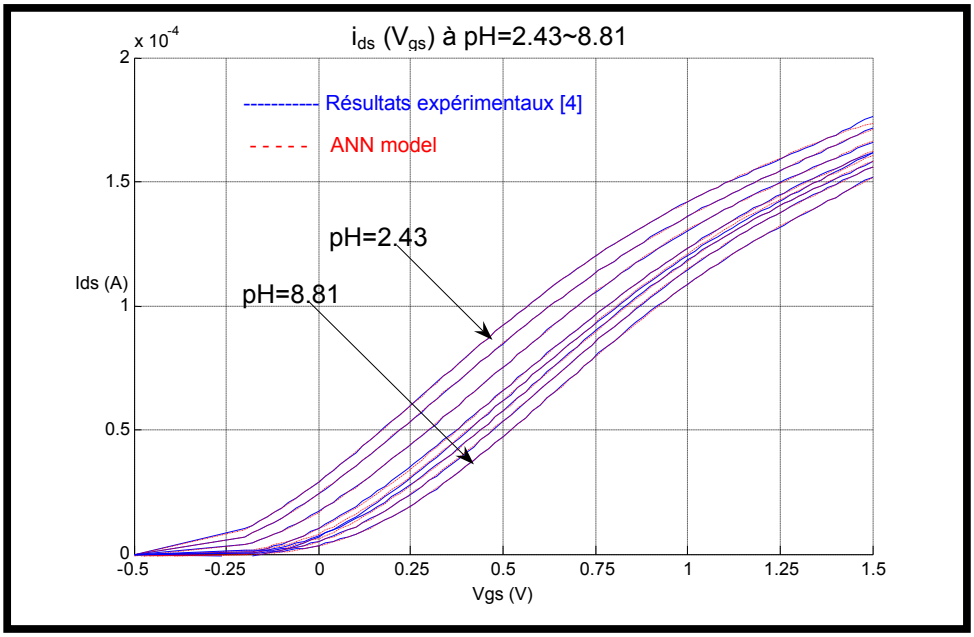


Fig III-16. *Caractéristiques $I_{ds} = f(V_{gs})$ pour pH= 2.43 à 8.81.*

La Figure (III-16) montre que le modèle ANN conçu a pu reproduire les courbes expérimentales du micro-capteur en exprimant fidèlement la non linéarité de la caractéristique $I_{ds}(V_{gs})$ du capteur.

En plus de l'approximation des caractéristiques I_{ds} (V_{gs}) pour le pH=2.43 à 8.81, le model ANN-ISFET a présenté une capacité de généralisation montrée sur par la prédiction de nouvelles courbes $I_{ds}(V_{gs})$ pour pH=11 et pH=13, Figure (III-17).

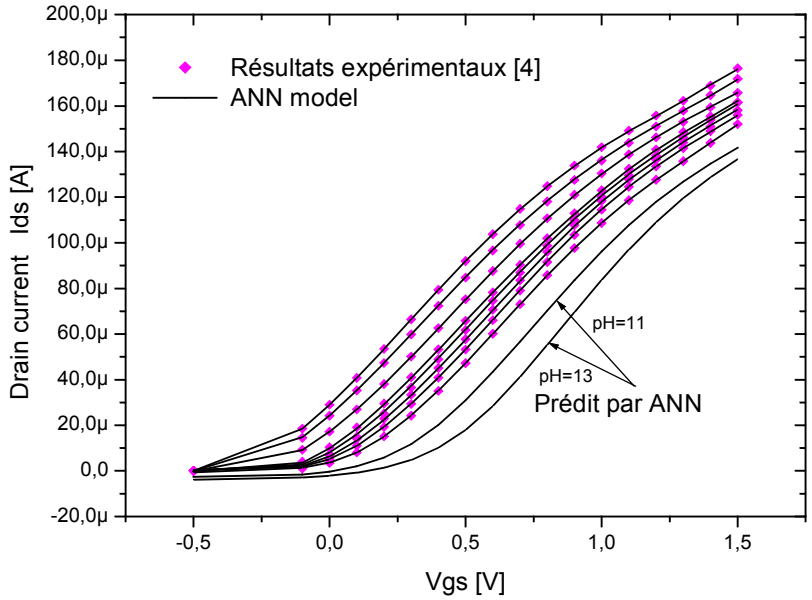


Fig III-17. *Caractéristiques $I_{ds} = f(V_{gs})$ du Model ANN pour pH= 2.43 à 8.81 et pH=11,pH=13.*

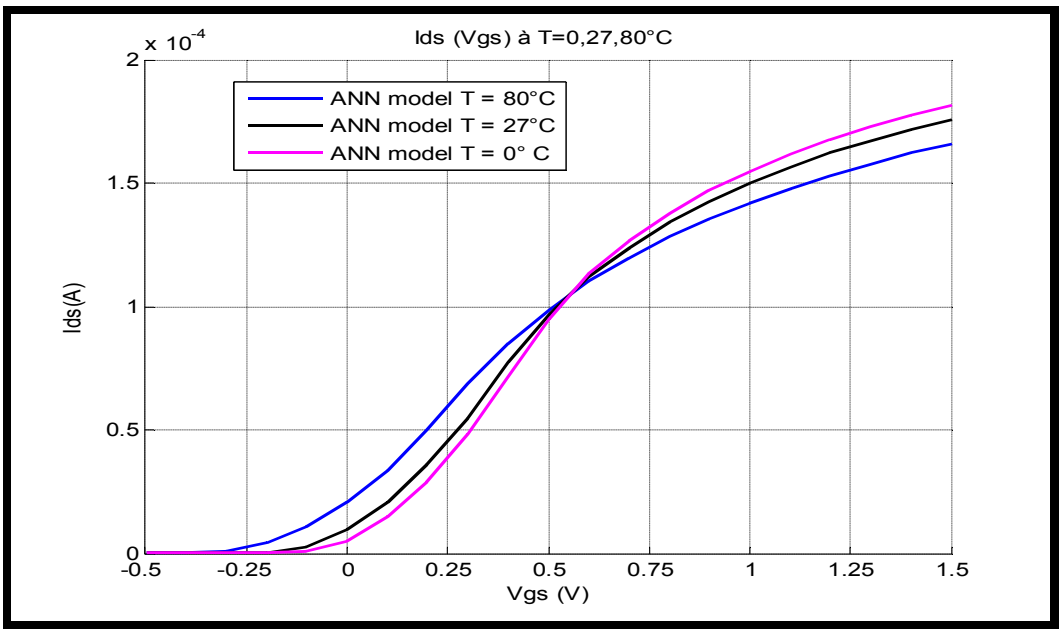


Fig III-18. *Caractéristiques $I_{ds} = f(V_{gs})$ pour pH= 2.43 à T=0 ,27 et 80 °C.*

III. 2.5. Implantation du modèle ANN sur ORCAD-PSPICE

L'évaluation des performances d'un circuit avec le logiciel ORCAD-PSPICE avant sa réalisation nous permet d'obtenir un temps de conception réduit et limiter ainsi les coûts de production. La qualité des résultats obtenus de la conception et de la simulation des circuits électroniques dépend de la précision des modèles utilisés. Dans ce cadre, nous proposons une implantation du modèle ANN sur le simulateur ORCAD-PSPICE, cette implantation va nous permettre de tester les performances du modèle.

III. 2.5.1. Implantation du modèle ANN du capteur pH-isfet

Le modèle du capteur (ANN-ISFET) implémenté dans PSPICE est composé du réseau de neurones conçu et optimisé auparavant par Matlab, où chaque neurone du réseau est implémenté par le circuit suivant :

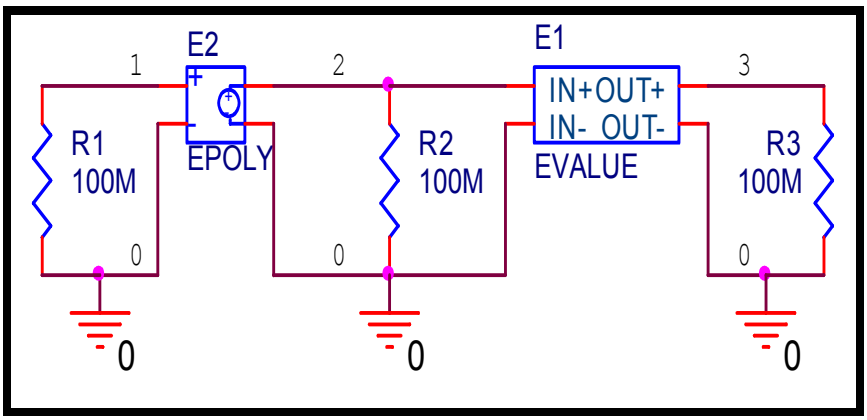
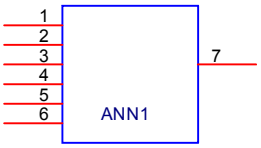


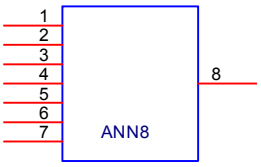
Fig III-19. *Schéma équivalent d'un neurone dans Pspice.*

Chaque neurone (de la première couche, la deuxième et la troisième couche) a été remplacé par le sub-circuit et le composant associé (pour le premier neurone de chaque couche) :

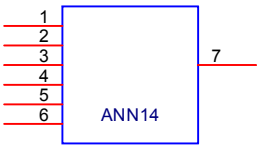
********* Neurone de la Première couche cachée ********
.SUBCKT **Ann1** 1 2 3 4 5 6 8
E1 7 0 POLY(6) (1,0) (2,0) (3,0) (4,0) (5,0) (6,0) B11 W111 W112 W113 W114 W115 W116
E2 8 0 VALUE={1/(1+EXP(-V(7,0)))}
R1 7 0 100M
R2 8 0 100M
.ENDS



********** Neurone de la Deuxième couche cachée ********
.SUBCKT **Ann8** 1 2 3 4 5 6 7 9
R1 8 0 100M
R2 9 0 100M
E1 8 0 POLY(7) (1,0) (2,0) (3,0) (4,0) (5,0) (6,0) (7,0) B21 W211 W212 W213 W214 W215 W216 W217
E2 9 0 VALUE={1/(1+EXP(-V(8,0)))}
.ENDS



********** Neurone de la couche de sortie *********
.SUBCKT **Ann14** 1 2 3 4 5 6 8
R1 7 0 100M
R2 8 0 100M
E1 7 0 POLY(6) (1,0) (2,0) (3,0) (4,0) (5,0) (6,0) B31 W311 W312 W313 W314 W315 W316
E2 8 0 VALUE={1/(1+EXP(-V(7,0)))}
.ENDS



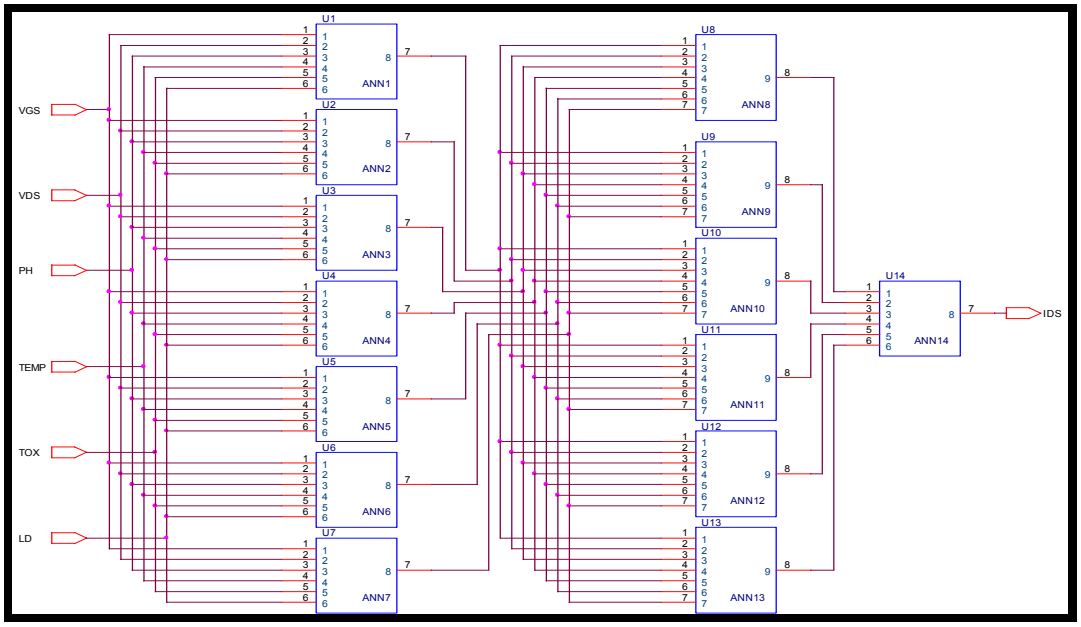


Fig III-20. *Schéma d'implémentation du modèle ANN-ISFET dans PSpice.*

III.2.5.2. Résultats de simulation du model ANN-ISFET

La figure (III-21) représente le circuit de simulation utilisé aux tests du pH-ISFET.

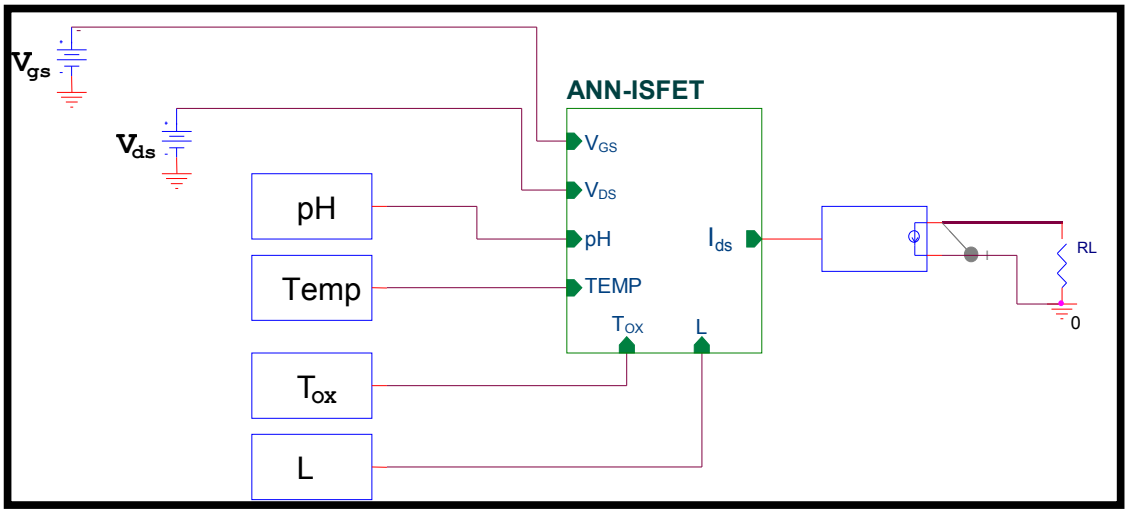


Fig III-21. *Circuit de simulation des caractéristiques du pH-ISFET.*

Où :

- V_{gs} : la tension grille-source
- V_{ds} : La tension drain-source
- pH : pH de la solution
- T : Température
- T_{ox} : l'épaisseur d'oxyde
- L : la longueur du canal
- I_{ds} : courant de drain

Quelques exemples de la simulation réalisée sont présentés :

❖ Par une analyse « DC- SWEEP », en fixant V_{ds} à 0.5 V, en fait varier la tension V_{gs} de -0.5 à 1.5 V et le pH pour les valeurs 4, 7 et 10 à la température 27 °C, on obtient:

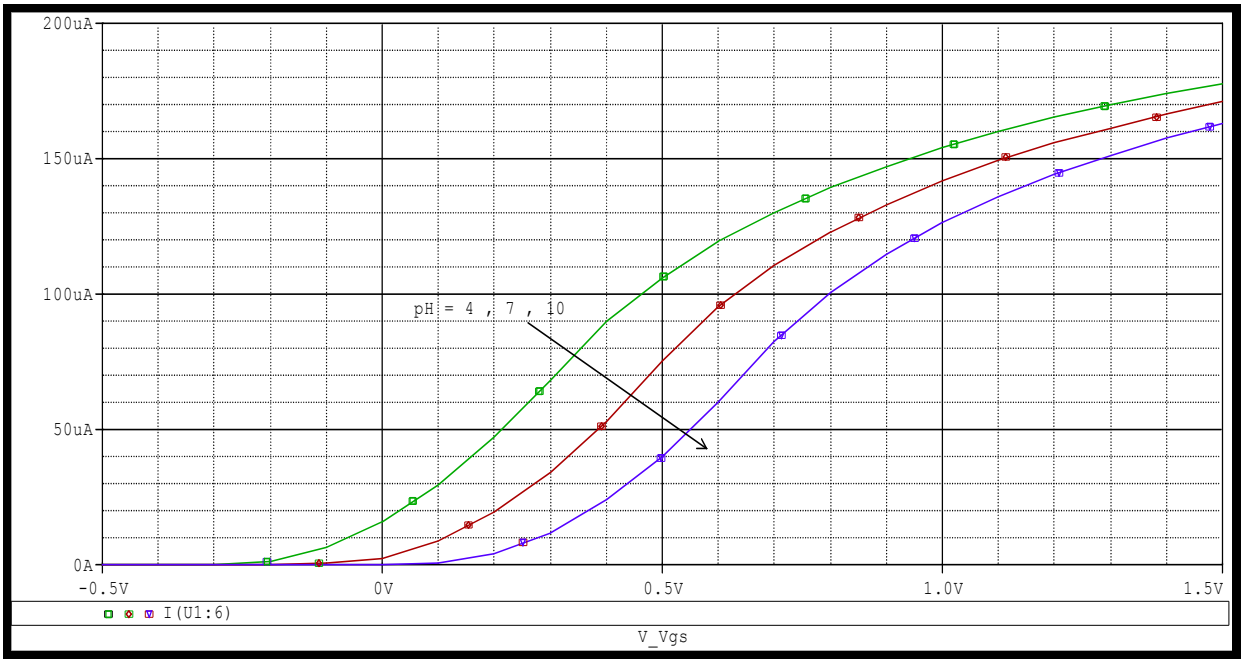


Fig III-22. *$I_{ds}(V_{gs})$ à pH = 4 ,7 et 10, T = 27 °C, T_{OX} = 1800 A°, L =20 µm.*

❖ Une analyse « DC- SWEEP », en fixant V_{ds} à 0.5 V et le pH à 7, en fait varier la tension V_{gs} de -0.5 à 1.5 V, pour les valeurs de la température 0°C ,27°C et 80°C, donne les résultats suivants :

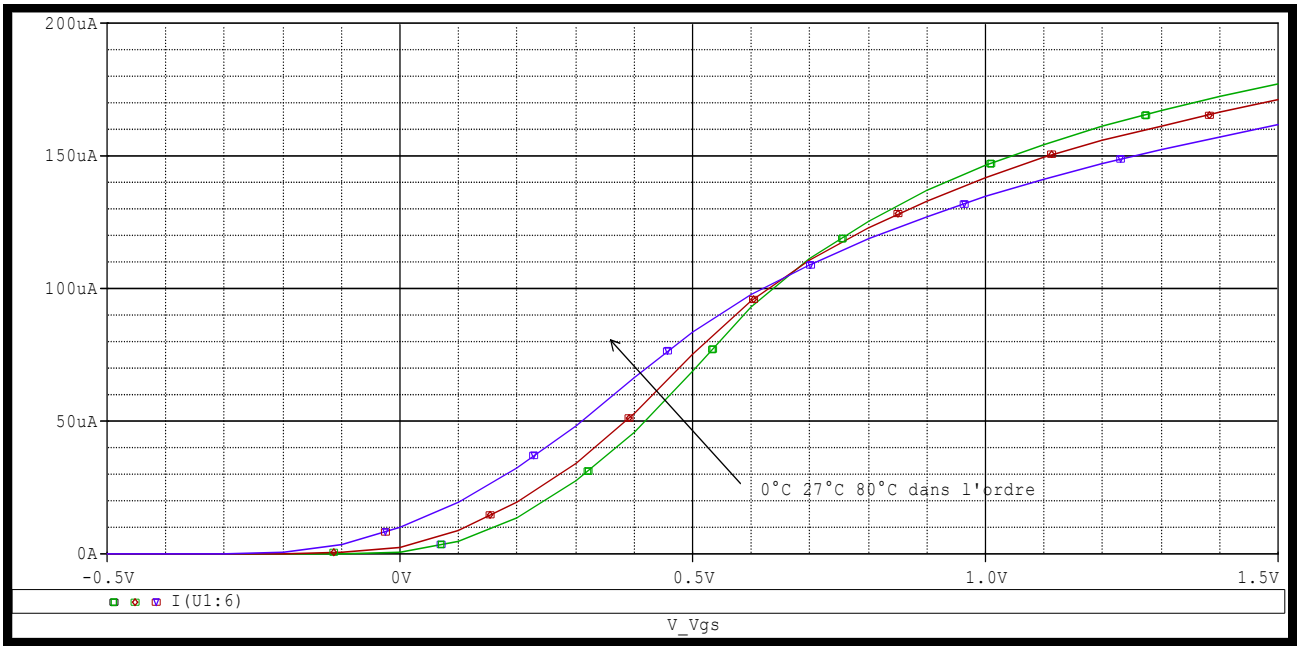


Fig III-23. *$I_{ds}(V_{gs})$ à pH = 7 et T = 0°C, 27°C et 80°C ,T_{OX} = 1800 A°, L =20 µm.*

❖ Une analyse « DC- SWEEP » en fixant V_{ds} à 0.5 V, en fait varier la tension V_{gs} de -0.5 à 1.5V et le pH à 7 pour une température 27°C et T_{OX} = 500 A°, L =20 µm donne :

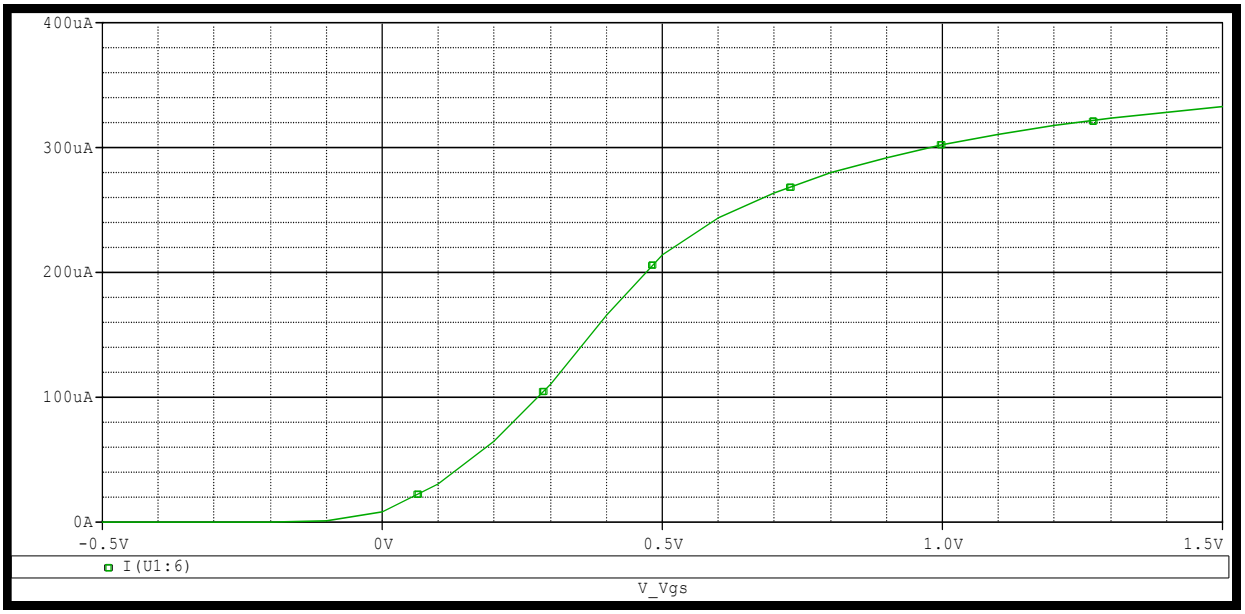


Fig III-24. *$I_{ds}(V_{gs})$ pour T_{OX} = 500 A°, L =20µm à pH = 7 et T = 27°C.*

❖ Une analyse « DC- SWEEP », en fixant V_{ds} à 0.5 V et le pH à 7, en fait varier la tension V_{gs} de -0.5 à 1.5V pour une température 27°C et T_{OX} = 1800 A°, L = 100 µm, donne les résultats suivants :

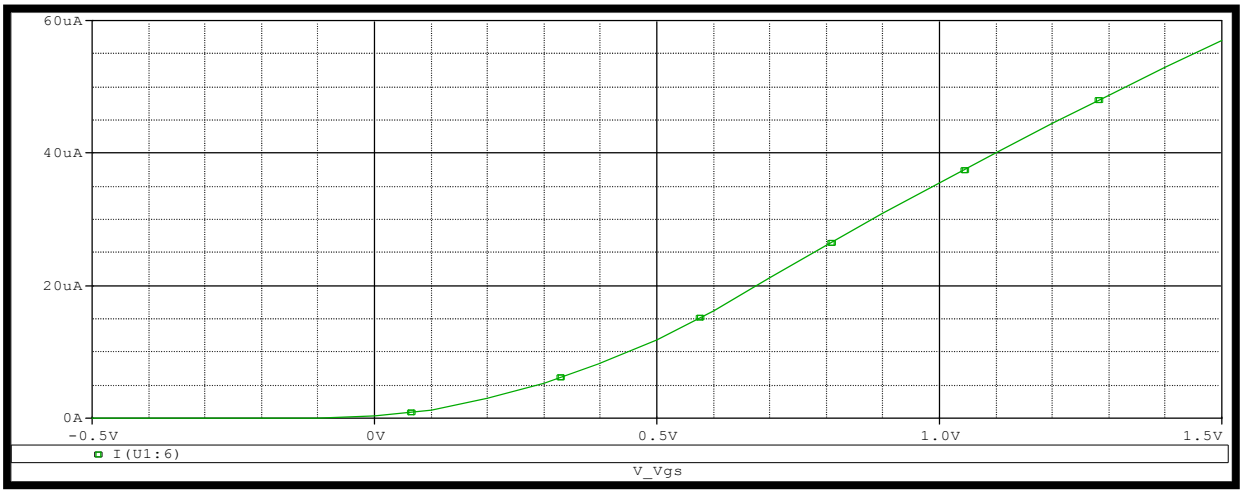


Fig III-24. *$I_{ds}(V_{gs})$ pour T_{OX} = 1800 A°, L =100 µm à pH= 7 et T = 27°C.*

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté le modèle ANN du micro-capteur pH - ISFET Conçu à l'aide d'un réseau de neurones MLP et implémenté sous forme d'un composant électronique dans la bibliothèque du simulateur ORCAD-PSPICE, son implémentation nous a permis de tester ses performances dans un environnement électrique.

Le modèle ANN a présenté la capacité de bien approximer la caractéristique de transfert du capteur sous l'influence des variations du pH, de la température, des tensions de polarisation, et de deux paramètres technologiques : l'épaisseur d'oxyde et la longueur du canal.

En plus de la capacité de prédiction pour de nouvelles valeurs de ces grandeurs qui n'ont pas été connues auparavant. Les différentes simulations effectuées sur l'environnement de simulation PSPICE, ont été présentées dans ce chapitre.

CHAPITRE IV
SIMULATION DES CIRCUITS DE MESURE DE pH POUR ISFET

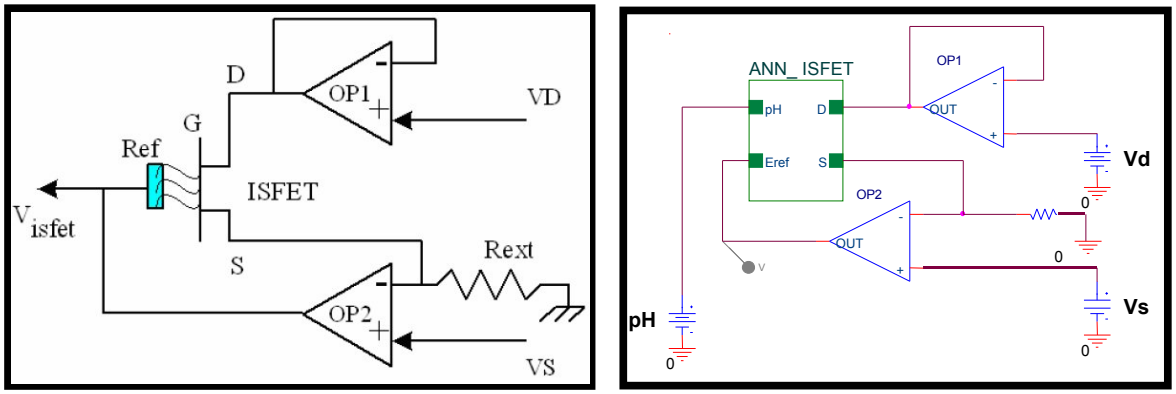
Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter les différents circuits de mesure de pH qui peuvent être associés à un pH-ISFET pour la détection et la mesure de l'activité ionique d'une solution, ainsi que les avantages et les inconvénients de chacun de ces circuits, les résultats de simulation sur le simulateur PSPICE sont accomplis en utilisant le modèle ANN-ISFET conçu au chapitre précédent. Ensuite le composant ANN ISFET implémenté sur le simulateur PSPICE sera utilisé dans une circuiterie que nous proposerons pour la mesure du décalage de la tension de seuil du capteur émergé dans la solution de pH à analysée.

IV.1. Instrumentation des ISFETs

IV.1.1. Le Circuit de mesure conventionnel CVCC

La membrane ionosensible de l'ISFET génère un potentiel proportionnel au logarithme de l'activité des ions détectés, ce potentiel est mesuré par rapport au potentiel de l'électrode de référence a l'aide d'une méthode potentiométrique qui mesure la variation du pH traduite par le décalage correspond de la tension de seuil du dispositif ISFET. Le circuit de mesure de la tension de sortie de la figure IV-1 détecte la concentration des ions de la solution en mode courant de drain constant et tension drain - source constante CVCC « *constant voltage constant current* » avec une électrode de référence émergée dans la solution de pH à mesurer [12,13]. Avec cette configuration, deux tension constantes 0,7 Volt et 0,2 Volt par exemple sont appliquées aux pôles positifs des deux amplificateurs opérationnels (entrées non-inverseuses) pour maintenir la tension entre le drain (D) et la source(S) de l'ISFET constante à une valeur de 0 ,5 Volt, d'autre part la résistance (Rext) peut être ajustée pour fixer le point de stabilité thermique « Athermal point » à un courant de drain constant [14]. Pour maintenir l'ISFET fonctionne dans la région linéaire de sa réponse $I_{ds} = f(V_{gs})$, les variations de la tension grille-source de sa tension de seuil doivent être directement proportionnelles aux variations des valeurs de pH. La différence de potentiel entre la grille ionosensible (G) et l'électrode de référence (Ref) est ainsi déterminée par la concentration en ions dans la solution.

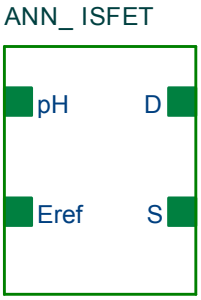


(a) **(b)**

Fig IV-1. ***(a) -*** *Schéma du circuit de mesure conventionnel CVCC à électrode de référence flottante [5].*

(b) - *Schéma de simulation PSPICE du circuit conventionnel de mesure CVCC à électrode de référence flottante.*

Le composant ANN_ISFET utilisé :



Où :

Eref : électrode de référence

D: drain

S: source

pH: pH

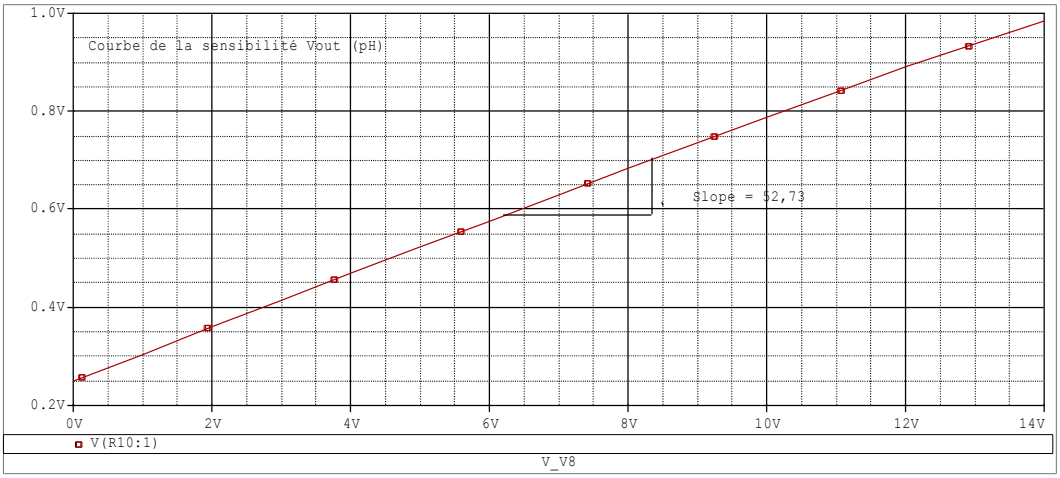


Fig IV-2. *Courbe de la sensibilité du circuit pour pH=0 à 14 (Pspice).*

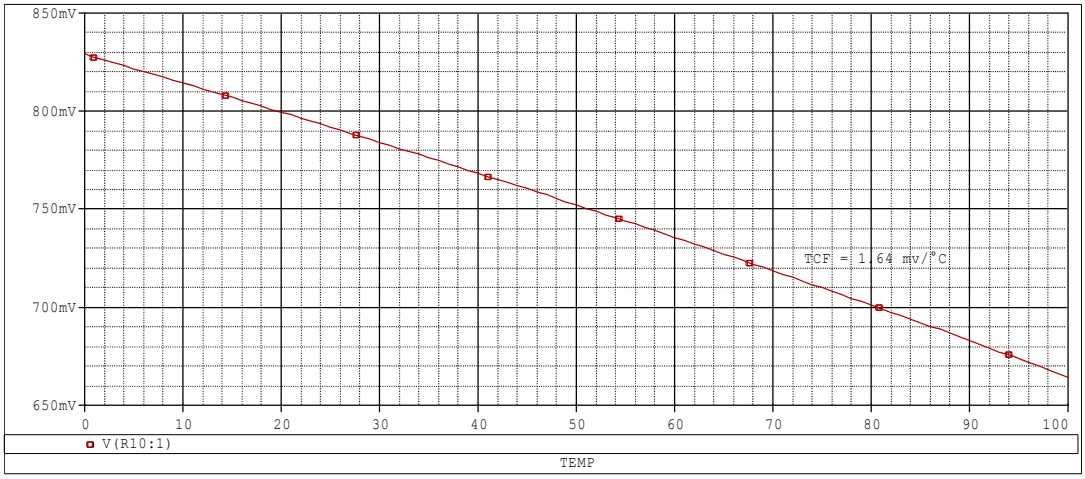


Fig IV-3. *Dépendance en température pour pH=10 ((Pspice).*

Bien que le circuit conventionnel de mesure (CVCC) présente en simulation une sensibilité quasi Nernestienne S=52 ,73 mV/pH Figure IV-2, les résultats de simulation de la dépendance en température Figure IV-3 montre que ce circuit présente un coefficient de dérive en température :
TCF = - 1.64 mV/°C.
Pour compenser cette dérive thermique on doit ajuster le courant Drain-Source :

Agissant sur la résistance Rext jusqu'à ce que le courant I_{ds} de l'ISFET soit égale au courant correspondant au point de stabilité thermique mesuré sur les caractéristiques de transferts $I_{ds}(V_{gs})$ de l'ISFET.

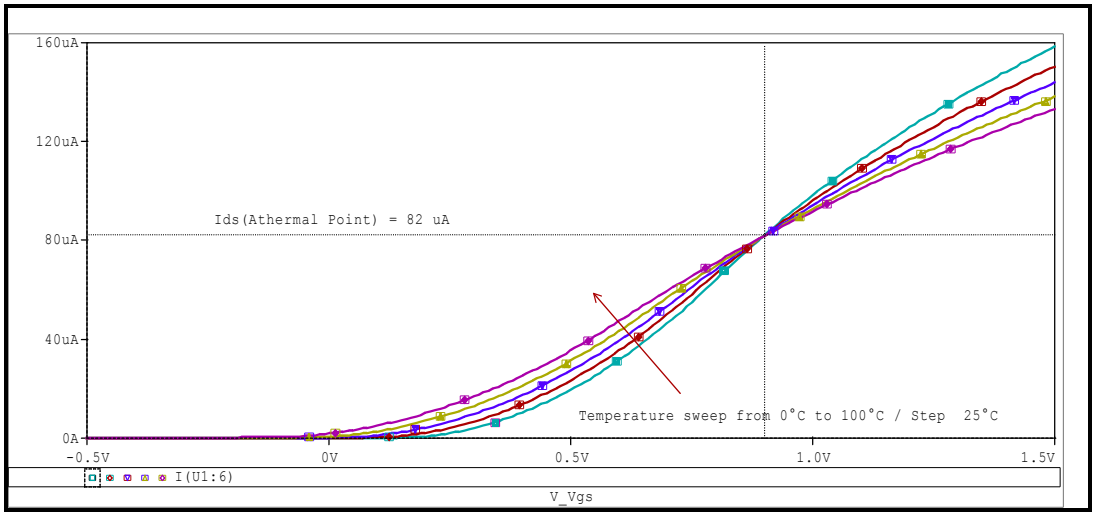


Fig IV-4. *Dépendance en température des caractéristiques $I_{ds}(V_{gs})$ / pH=10 ,T=0°C à 100°C (Pspice).*

La figure IV-4 montre la dérive thermique des caractéristiques $I_{ds}(V_{gs})$ pour pH = 10 à des températures varient entre 0°C et 100°C, ainsi que le courant du point de stabilité thermique appelé aussi le point à coefficient de température zéro qui égale dans ce cas :

$I_{ds(Athermal\ point)}$ = 82 µA.

La figure IV-5 montre la dépendance en température de la réponse de l'ISFET associé au circuit conventionnel de mesure CVCC avec ajustement du courant I_{ds} à la valeur correspondante au point de stabilité thermique.

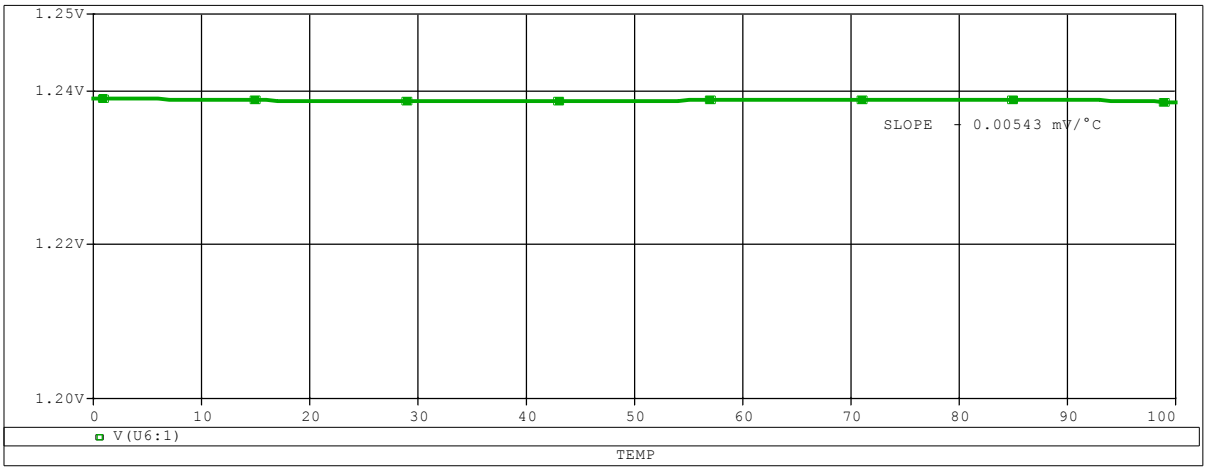


Fig IV-5. *Dépendance en température pour pH=10 pour le courant de point de stabilité thermique I_{ds} = 82 µA (Pspice).*

Le circuit de mesuré conventionnel CVCC polarisé à V_{ds} = 0.5 V et $I_{ds}=I_{ds\ (Athermal\ point)}$ présente un coefficient de dérive thermique TCF= - 0.00543 mV/°C, qui correspond au point de fonctionnement optimale pour que la réponse de l'ISFET soit la plus stable dans le cas des mesures de pH dans un milieu thermiquement variable.

Le circuit de mesure de la figure IV-1 présente l'avantage d'être facile à implémenter dans des circuits intégrés. Le signal de sortie est mesuré à la sortie de l'amplificateur opérationnel OP2 connectée à l'électrode de référence Ref. Ce pendant, lorsque ce circuit de mesure est utilisé pour un dispositif multi-capteurs chaque capteur ISFET nécessite une électrode de référence ce qui augmente le nombre d'électrodes de références sur une puce à multi-ISFETs.

IV.1.2. Les circuits de mesure de type pont

IV.1.2 .1. Circuit de type pont avec diode Zener

La configuration de type pont de la figure IV-6 contient un pont de résistance et une diode Zener avec l'électrode de référence portée à la masse. L'avantage de ce circuit est dans son électrode de référence portée à la masse Ref, donc une seule électrode de référence est nécessaire pour un système de détection multi–ISFET. Ce montage peut fonctionner sur une large gamme d'opérations ce qui le rend adaptable aux ISFET dont les caractéristiques sont inconnues. L'inconvénient de ce circuit consiste dans la difficulté d'intégration par la technologie CMOS standard de la diode Zener à des microsystèmes à base d'ISFETs.

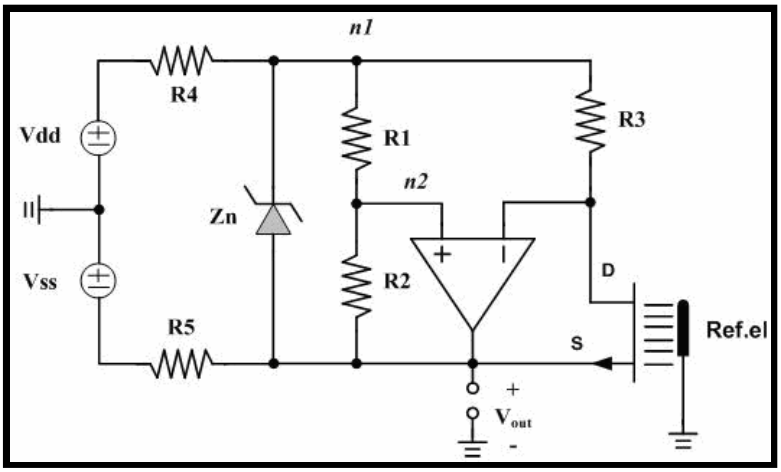


Fig IV-6. *Circuit de type pont avec diode Zener [16].*

IV.1.2 .2. Circuit de type pont avec source de tension band-gap :

Un autre circuit a été proposé par Pechstein [17] dans la figure IV-7 similaire au montage en pont de mesure précédent. Ce circuit comporte une source de tension bande-gap UBG stable en terme de dérive thermique et la sortie est mesurée entre le drain et l'électrode de référence. Il présente aussi deux inconvénients :

a / l'ISFET serve comme dispositif d'entrée , ainsi la résistance du drain R_{DS} du transistor ISFET est une résistance d'entrée pour l'amplificateur opérationnel .

b / le potentiel du drain est mesuré mais il n'est pas bloqué à la sortie du montage .

Ces deux inconvénients rendent le gain de l'amplificateur sensible aux effets de l'environnement causé par la polarisation et par les solutions.

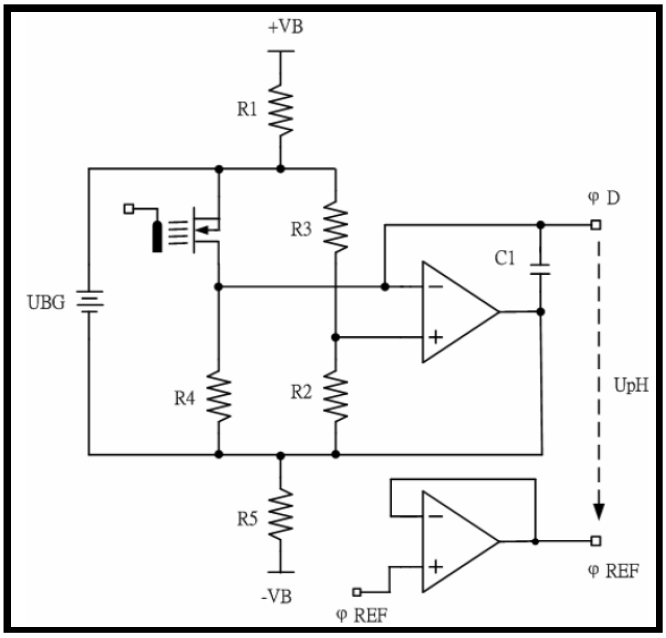


Fig IV-7. *Circuit de type pont de Pechstein [17].*

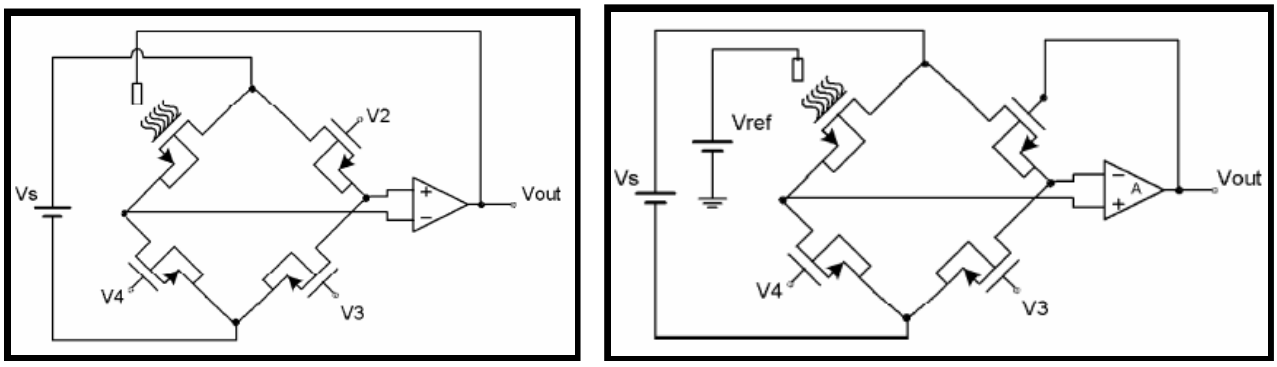
IV.1.2.3. Circuit de mesure à base de pont de Wheatstone

En 2004 Arkadiy Morgenshtein [18] a proposé une nouvelle interface de mesure de la sortie du dispositif (read out circuit) à base de pont de Wheatstone. Le circuit est capable de travailler en mode différentiel, et il permet l'intégration sur circuit (SOC), ainsi il apporte une compensation de l'effet de la température et une mesure par une paire ISFET/REFET (transistor de référence à grille métallique dont les caractéristiques sont identiques avec celles de l'ISFET) .

La figure IV-8 montre l'interface de mesure (readout circuit) a base de pont de Wheatstone :

Les tensions externes V2, V3 et V4 sont appliquées pour maintenir le pont en équilibre.

- Une partie du circuit ne fonctionne pas en mode CVCC.



(a) **(b)**

Fig IV-8. *Circuit de type pont de Wheatstone*
***(a)** Directe **(b)** indirect [18].*

Le Tableau IV-1 récapitule les propriétés des interfaces de mesure pour ISFET :

Configuration	**Circuiterie**	**Signal de sortie**	**Application**
CVCC conventionnel électrode flottante	compliqué : Deux *Apmli-Op* & Une source *band-gap Reference*	Source connectée Au point commun, Grille flottante	Plus adaptable à un seul Capteur ISFET spécifique.
Circuit CVCC de type pont Source flottante	Simple : Un seul *Ampli-Op* & Diode *Zener*	Grille connectée, Source flottante	Utilisable pour les systèmes Multi capteurs et les capteurs dont les caractéristiques sont inconnues.

***Tab IV-1.** Propriétés des interfaces de mesure pour ISFET.*

Tous les circuits présentés auparavant dans ce chapitre nécessitent une compensation de température (par pré-ajustement du courant ou par l'ajout de d'autres composants) et de la dérive en temps ou ne sont pas entièrement intégrable dans des microsystèmes.

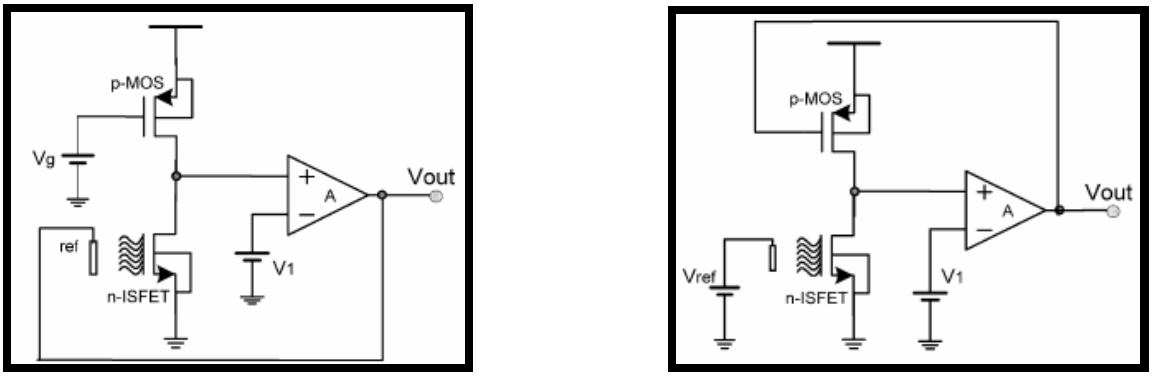
IV.1.3. Solutions de compensation des dérives pour microsystèmes à base d'ISFET

Dans la plus part des processus CMOS d'aujourd'hui, un dispositif NMOS est fabriqué sur un substrat de type P complètement porté à la masse en le connectant au point le plus négatif du système, par conséquent, la majorité des circuits interfaces de mesure souffrent du problème de la grande influence du potentiel de substrat sur les caractéristiques des dispositifs intégrés à base d'ISFETs. En 2004 Morgenshtein et al [19] ont présenté une nouvelle technique, permet d'élimine l'effet du substrat des interfaces de mesure dans les microsystèmes à base d' ISFETs [19]. Mais dans le but de maintenir le potentiel de l'électrode de référence constant, le circuit direct a paire ISFET /REFET complémentaires «complementary ISFET/MOSFET pair (CIMP)» avec retour (feedback) sur la grille Figure IV-9 (a) n'est pas utilisable pour les applications à multi - capteurs ISFETs.

Le circuit CIMP indirect avec retour sur la grille de la Figure IV-9 (b) ne peut avoir qu'une tension Vds constante mais le courant du drain est variable.

Plusieurs circuits électroniques ont été développés pour compenser la dépendance en température et la dérive temporelle de l'ISFET [20,21]. Par exemple, en 1987 Wang et al ont décrit un ajustement du coefficient de température à zéro comme une méthode de compensation de la dépendance en température pour réduire le coefficient (TCF) des pH-ISFET.

.



(a) **(b)**

Fig 4-9. *Circuit CIMP avec feed-back [19].*
***(a)** Direct **(b)** indirect.*

Cet ajustement - (TCF) Zéro de la tension sortie - est mieux adapté aux cas de contrôle en temps réel ou dans le cas des mesures ou la valeur du pH de la solution est limitée à une certaine région, ce pendant, il est nécessaire de trouver le courant du drain approprié pour chaque ISFET séparément.

En 1999 Palan et al [22] en utilisant deux circuits de mesure identiques à deux ISFETs avec deux matériaux de grille différents (Si_3N_4 et SiO_2), comme il est montré dans la figure IV-10, ces ISFETs de deux sensibilités différentes peuvent compenser la dépendance en température et la dérive temporelle pour les applications biomédicales. En revanche, différents matériaux de grille et différentes dimensions des dispositifs présentent différents effets de température et dérive en temps.

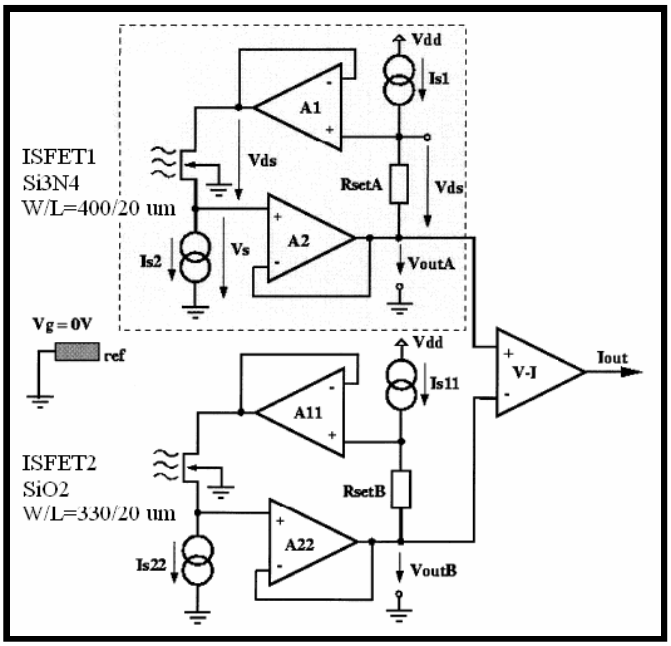


Fig IV-10. *Schéma du circuit de mesure différentiel pour ISFET [22].*

Il existe encore plusieurs recherches sur la minimisation des effets influant sur la réponse des ISFETs qui n'ont pas été mentionnées ici. Dans ce qui suit nous allons proposer un circuit de mesure de la réponse de l'ISFET fonctionnant en mode CVCC (constant voltage constant current) qui a présenté en phase de simulation la capacité de compenser la dépendance en température du dispositif pH-ISFET.

IV.2.Developpement d'une interface d' mesure pour ISFET:

Le circuit de mesure proposé est basé sur l'idée d'utiliser deux ISFETs (ISFET1 et ISFET2 identiques) en mode de polarisation CVCC (constant voltage constant current).
L'ISFET2 est utilisé pour compensé la dépendance en température de l'ISFET1 par l'utilisation d'un étage Sommateur à amplificateurs opérationnels qui fait la somme entre la sortie du circuit CVCC1 associé au ISFET1 et la sortie de CVCC2 associé au ISFET2, la tension de sortie du CVCC2 (ISFET2) est inversée préalablement par un autre étage Inverseur de tension avant d'être appliquée à l'entrée de l'amplificateur Sommateur figure IV-16.

Notons que l'ISFET en général, présente un coefficient de dérive thermique négatif TCF < 0 en fonctionnant dans la partie linéaire de la caractéristique $I_{ds}(V_{gs})$.

La figure IV-11 de la dépendance en température des caractéristiques $I_{ds}(V_{gs})$ montre bien la variation alternée du coefficient de dérive thermique TCF autour du courant $I_{ds(Athermal\ Point)}$.

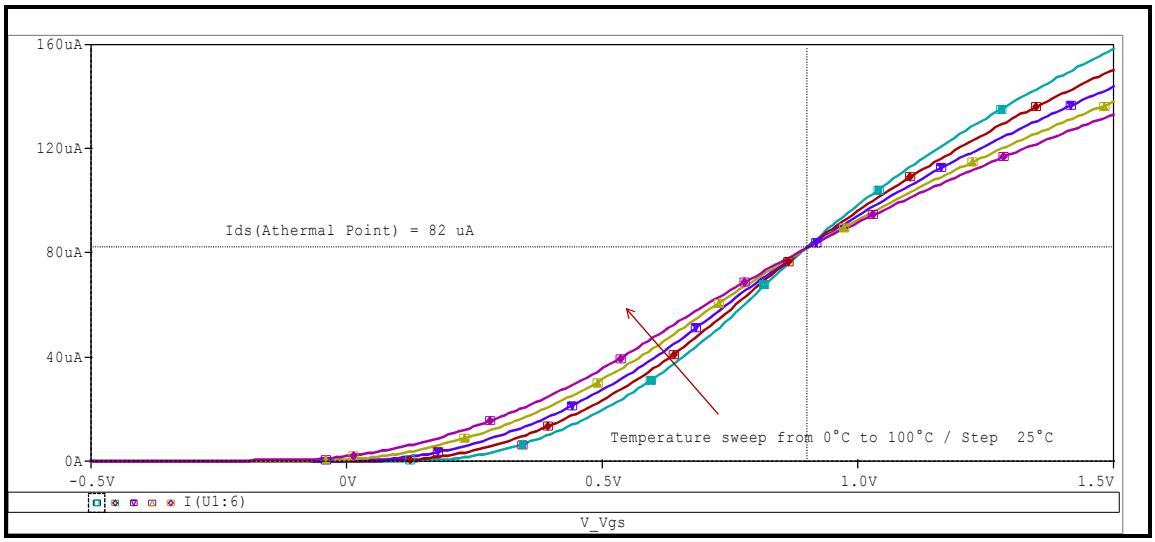


Fig IV-11. *Dépendance en température des caractéristiques $I_{ds}(V_{gs})$ / pH=10, T=0°C à 100°C.*

La figure (IV-12) montre la dépendance en température de la tension de sortie d'un seul circuit de mesure de pH pour ISFET, CVCC *(V_{ds}=0,7V I_{ds}=200µA)* (pente négative : TCF<0).

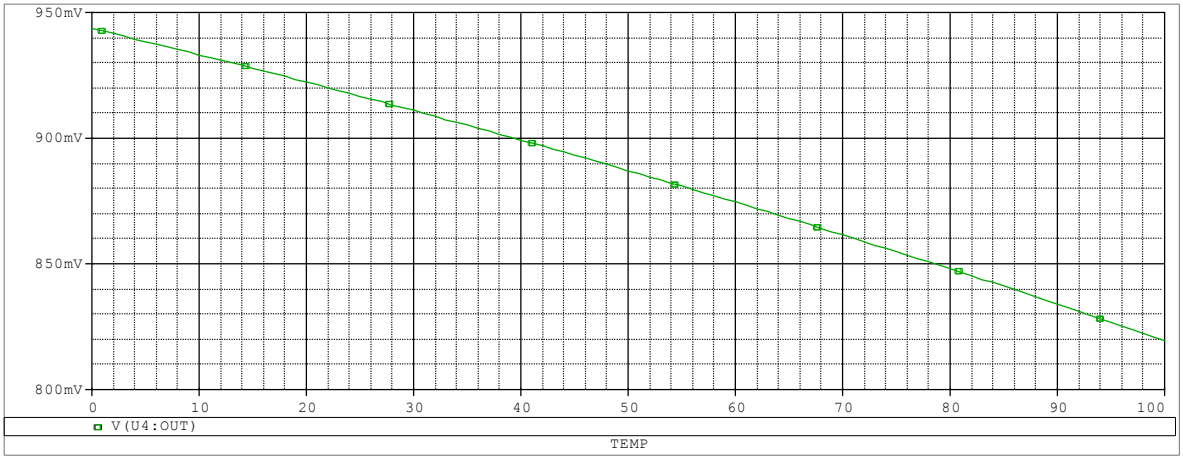


Fig IV-12. *Visfet-Dépendance en température pour I_{ds}=200µA, V_{ds}=0.7V pH=10, T entre 0 et 100°C.*

L'inversion de la sortie du CVCC2 correspond à l'ISFET2 inverse le coefficient de dérive thermique.

La sortie de l'amplificateur sommateur en fonction de la température :
Vout (T) =Visfet1(T) –Visfet2 (T) représente la sortie compensée de notre circuit à deux ISFETs identiques, par conséquent la valeur de la tension de sortie linéaire reste stable et ne sera pas influencée par la variation de la température.

Sachant que :

L'ISFET présente la même sensibilité pour les deux régimes de fonctionnement (linéaire et saturé), la figure IV-13 montre la sensibilité expérimentale d'un capteur pH ISFET aux ions hydrogène [3].

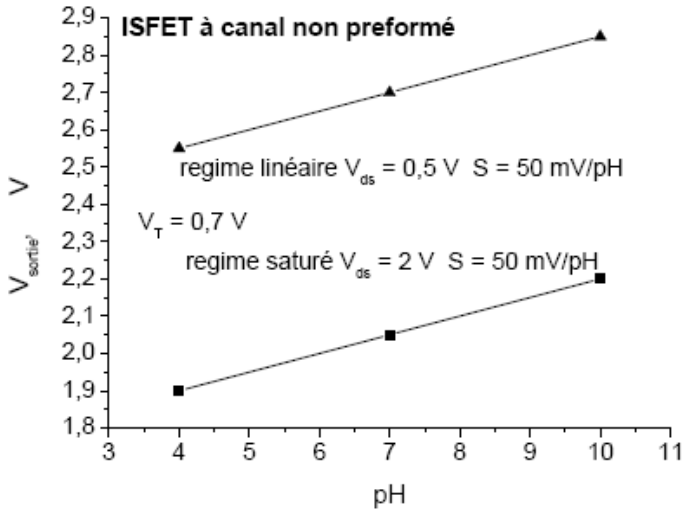


Fig IV-13. *Courbes de la sensibilité expérimentale d'ISFET dans les différents régimes de fonctionnement du capteur [3].*

La figure IV-14 montre la sensibilité simulée d'un capteur pH-ISFET dans différents régimes de fonctionnement, linéaire et saturée.

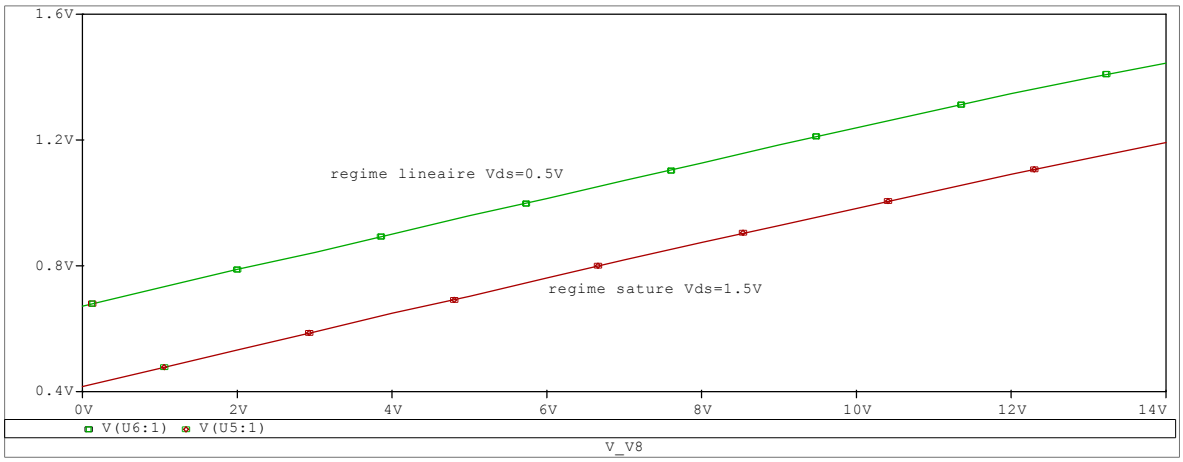


Fig IV-14. *Sensibilité de l'ISFET, pH=0 à 14, à V_{ds}=0.5V et V_{ds}=1.5V, (PSPICE).*

Prenant maintenant la somme des sorties des deux ISFETs, nous obtenons un signal de sortie qui conserve la même sensibilité mais Indépendant de la température identique à celui obtenu par fixation du courant Ids au courant correspondant au point athermal $I_{ds(Athermal\ point)}$.

À la différence que ce circuit peut être utilisé pour différents V_{ds} allant du régime linéaire au saturé, notons que le courant correspond au point de stabilité en température varie avec Vds ce qui nécessite un réajustement du courant de drain pour avoir une stabilité en température.

Donc on peut minimiser la nécessité d'utiliser des sources de tension stable aux variations de la température, sachant que l'ISFET présente la même sensibilité pour les deux régimes de fonctionnement (linéaire et saturé), la figure IV-12 montre la sensibilité expérimentale d'un capteur pH ISFET aux ions d'hydrogène [3].

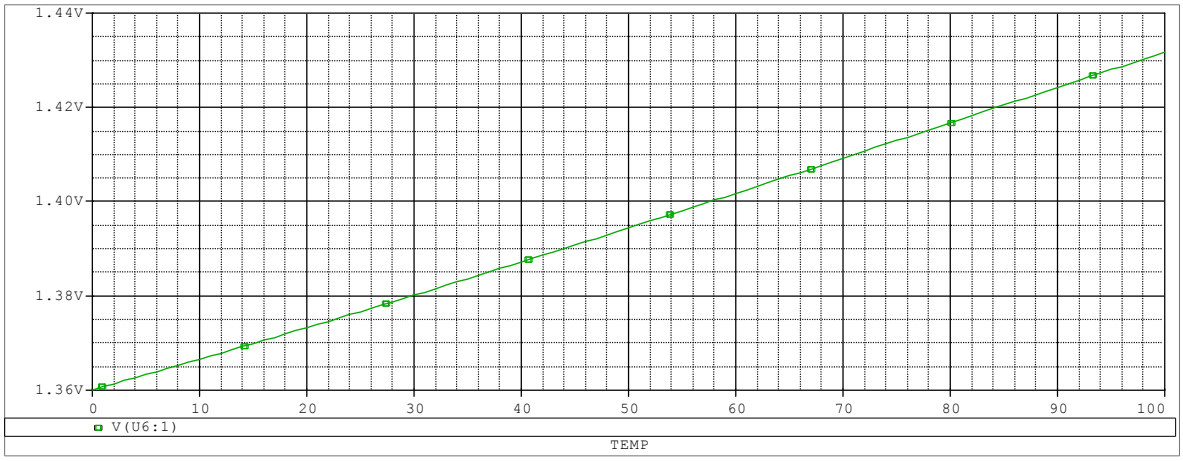


Fig IV-15. *Dépendance en température pour I_{ds}=60µA, V_{ds}=0.7V pH=10, T entre 0 et 100°C, TCF>0.*

Le modèle a base de réseaux de neurones a été utilisé et le capteur pH-ISFET est polarisé en Vds = 0.7V, le circuit de mesure a base de deux ISFETs à deux courants Ids différents obtenus par l'ajustement des valeurs des deux résistances R1 et R2 est montré sur la figure (IV-16) :

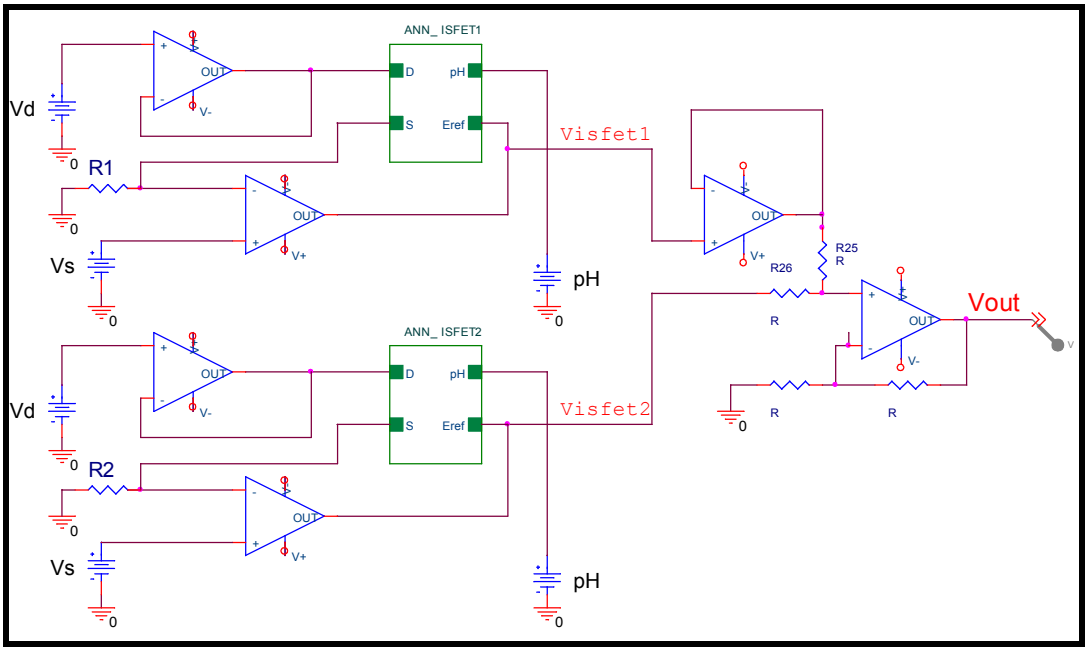


Fig IV-16. *Circuit de simulation à deux ISFETs.*

La réponse du circuit précèdent est t montrée sur la figure **(IV-17)**.

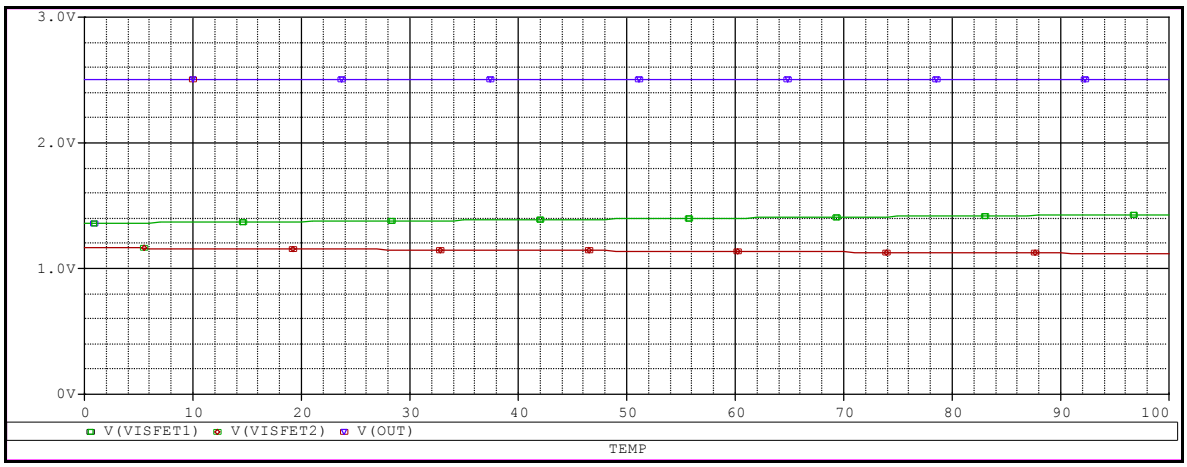


Fig IV-17. *Réponse du circuit à deux ISFETs.*

Le circuit proposé fonctionne en mode CVCC et montre un coefficient de température TCF = 0,003mV /°C, ce qui lui confère la capacité de compenser la dérive thermique présentée par les ISFET.

Conclusion

Une interface de mesure de la tension de sortie sensible aux variations du pH a été simulée, la minimisation de la dépendance en température de la réponse du capteur a été montrée à travers les deux coefficients de températures obtenus. Le circuit montre un coefficient de dérive en température TCF = -1,64 mV/°C pour le circuit de mesure CVCC conventionnel et un TCF = 0,003mV /°C pour le circuit de mesure CVCC à deux ISFETs courants de drain symétrique autour du point de stabilité (athermal point).

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

A travers notre étude, la technologie de fabrication du capteur pH –ISFET repose sur un transistor MOS à grille diélectrique (sans grille métallique), l'oxyde de silicium SiO_2 et le nitrure de silicium Si_3N_4 constituent respectivement l'isolant et la couche ionosensible de cette structure, la présence d'ions auprès de la couche d' isolant crée un potentiel dans cette région qui se traduit par un décalage de la tension de seuil du dispositif lors de l'application d'une tension de caractérisation sur la grille du capteur remplacée par rapport à un transistor MOS par une électrode de référence et une solution d'analyse. Ce décalage de la tension de seuil du transistor pH-ISFET traduit la variation du pH de la solution à analyser.

La modélisation par les réseaux de neurones du micro-capteur pH-ISFET peut être considérée comme une technique de modélisation prédictive précise et rapide. Rapide bien en temps de conception du modèle qu'au temps d'implémentation et de simulation des circuits qui associé le composant implémenté dans un simulateur des circuits électroniques tel que Orcad-PSPICE. Précise par la reproduction de la nature de la réponse du capteur aux ions H^+ comparée au modèle à base du transistor MOS, et Prédictive par la capacité de généralisation du modèle neuronal montrée par la prédiction de la réponse du capteur pH-ISFET au ions d'hydrogène dans des conditions de fonctionnement extrêmes comme dans le cas des solutions à pH très fort ou très faible.

La propriété d'approximation et de prédiction des réseaux de neurones permettent de concevoir un modèle neuronal qui tient compte des phénomènes dus uniquement et essentiellement aux conditions expérimentales de mesure comme l'effet de l'auto échauffement (self-heating) subi par les composants à base de structure MOS.

La non disponibilité d'une base de données expérimentale contenant plus de grandeurs d'influence comme la dérive temporelle, l'hystérésis, l'effet du substrat (body effect), l'influence de la lumière rend difficile la conception d'un modèle qui touche à toute la dynamique de fonctionnement du capteur pH-ISFET. (Ce qui peut construire un futur sujet de caractérisation).

Le développement d'une interface de mesure de pH s'avère possible à l'aide du circuit de mesure conventionnel CCCV à deux amplificateurs opérationnels associés à un ISFET avec l'électrode de référence intégrée (pseudo électrode de référence) ou par l'utilisation d'une électrode de référence externe. En considérant l'électrode de référence de l'ISFET comme une grille, les caractéristiques I-V de l'ISFET peuvent être obtenues comme dans le cas d'un MOSFET. Dans le cas des applications où les variations de la température sont préalablement connues ou bien la température est peu variable, la fixation du point de stabilité thermique correspondant aux valeurs de V_{ds} et I_{ds} convenablement calculées, simulées, et mesurées peut remplacer une compensation suffisante de la température.

BIBLIOGRAPHIE

Bibliographie

[1] P. Bergveld. Development of an Ion-Sensitive solid-state device for Neurophysiological measurements, IEEE Trans Biomed Eng., 1970, BME-17, pp. 70-71.

[2] B. Torbiero. Développement de micro-capteurs électrochimiques pour l'analyse en phase liquide, thèse de doctorat, INSA de Toulouse, 2006.

[3] I. Humenyuk. Développement des micro-capteurs chimiques ChemFETs pour l'analyse de l'eau, Thèse de doctorat, INSA de Toulouse, 2005.

[4] A. Errachid, A. Ivorra, J. Aguiló, R. Villa, N. Zine, J.Bausells. Implementation of multisensor silicon needeles for cardiac applications, Sensors and Actuators B 78, (2001) 279- 284.

[5] C-H. Yang**.** ISFET Performance Enhancement by Mixed-Mode Signal Processing, Thèse Ph.D, Chung Yuan Christian university, Tawain, 2005.

[6] J-L. Chiang**.** Study on the pH-Sensing Characteristics of ISFET with Aluminum Nitride Membrane, Thèse Ph.D, Chung Yuan Christian university, Tawain, 2005.

[7] S. Martinoia, G. Massobrio. A Behavioral macromodel of the ISFET in SPICE, Sensors and Actuators B 62, pp. 182-189, 2000.

[8] B. D. Liu, Y. K. Su and S. C. Chen, Ion sensitive field effect transistor with silicon nitride gate for pH sensing, Int. J. Electronics, 67 (1989) 59-63.

[9] http://www.probiotics.com/html/ProbioticProducts/PicturesofProbiotics.htm

[10] D. E. Yates, S. Levine, T. W. Healy, Site-binding model of the electrical double layer at the oxide/water interface, J. Chem. Soc. Farady Tran. 70, pp. 1807-1818, 1974.

[11] C. D. Fung, P. W. Cheung, W. H. Ko, A generalized theory of an electrolyte- insulator-semiconductor field-effect transistor" , IEEE Trans. Elcetron Devices ED-33 (1), pp. 3-18, 1986.

[12] P. Bergveld and A. Sibbald,Analytical and Biomedical Applications of Ion-Selective Field-effect Transistors, Wilson and Wilson's Comprehensive Analytical Chemistry, vol. 23, edited by G. Svehla, Elsevier, 1988.

[13] Danny Wen-Yaw Chung, Dorota G. Pijanowska, Wladyslaw Torbicz, Pei-Cheng Wang, Heh-Sen Lin, Gow-Long Dong, Ming-Yi You, CMOS Integrated Circuit and System Design for Ion-Sensitive FET-based Biosensor Applications, Journal of Biocybernetics and Biomedical Engineering, pp.87-106, Vol. 21, No. 4, 2001.

[14] Carsten Engels, *"*pH Measurement Today and Tomorrow*"*, Sentron Integrated Technology, The Netherlands, 1995.

[15] Cadence, *"PSpice A/D Reference Guide". Product Version 10.0 June 2003*

[16] Krzyskow A., Pijanowska D., Kruk J, Polish Patent Rp, P-312822, 1996.

[17] T. Pechstein. U. S. Patent No. 6624637, September 2003.

[18] A. Morgenshtein, L. Sudakov-Boreysha, U. Dinnar, C. G. Jakobson, Y. Nemirovsky. Wheatstone -Bridge readout interface for ISFET/REFET applications, Sens. Actuators B, Chem 98, pp. 18-27, 2004

[19] A. Morgenshtein, L. Sudakov-Boreysha, U. Dinnar, C. G. Jakobson, Y. Nemirovsky. CMOS readout circuitry for ISFET Microsystems, Sens. Actuators, B, Chem 97, pp. 122-131, 2004.

[20] G. H. Wang, D. Yu, and Y. L. Wang. ISFET temperature characteristics, *Sensors and Actuators*, vol. 11, pp. 221-237, 1987.

[21] S. Casans, A. E. Navarro, D. Ramirez, E. Castro, A. Baldi, and N. Abramova, Novel voltage-controlled conditioning circuit applied to the ISFETs temporary drift and thermal dependency, Sens. Actuators, B, Chem 91, pp. 11-16, 2003.

[22] B. Palan, F. V. Santos, J. M. Karam, B. Courtois, M. Husak, New ISFET sensor interface circuit for biomedical applications, Sens. Actuators, B, Chem 57, pp. 63-68, 1999.

[23] Claude TOUZET**,** "Les réseaux de neurones artificiels introduction au connexionnisme", cours, exrcices et travaux pratiques**,** Juillet 1992.

[24] Marc Parizeau,"Réseaux de neurones", GIF-21140 et GIF-64326, Universtité de LAVAL Automne 2004.

[25] Rémi COULOM, "Apprentissage par renforcement utilisant des réseaux de neurones, avec des applications au contrôle moteur ".

[26] Kouda Souhil, Conception D'un Capteur D'Humidité Intelligent, thèse de Magister Université de Batna 2008.

Abstract

pH-ISFET like most sensors can not be modeled easily, which leads to the problem that a circuit with sensors can not be simulated in PSPICE . Using MATLAB, a method based on the neural network for modeling pH-ISFET sensors in PSPICE is presented to solve the problem.

Firstly, a multi-input /single-output MLP multi-layer feedforward neural network is used to approximate the characteristics of the microsensor pH-ISFET to experimental data . Secondly, the achieved structure of the neural network after optimization is described in the PSPICE language to form a subcircuit. Finally, the subcircuit is used as the sensor model when the changes of a non-electric quantity imposed on the sensor in real applications is replaced with that of an electric quantity in PSPICE simulation. Using this method, the pH-ISFET is modeled and temperature drift, oxide thickness and canal length effects are presented in this work.

Keywords: *Artificial neural network ; feedforward neural network ; MLP ; PSPICE ; chemFETs ; pH-ISFETs ; temperature drift .*

Résumé

Les pH-ISFET comme la plus part du capteurs ne peuvent pas être modélisés facilement, ce que Pose le problème qu'un circuit avec des capteurs ne peut pas être simulé dans PSPICE. Pour remédier à ce problème et moyennant MATLAB, une méthode basée sur les réseaux de neurones pour modéliser les capteurs pH ISFET est présentée dans ce travail.

Premièrement, un réseau de neurones multi couches MLP à propagation-avant avec multi entrées et une seule sortie est utilisé pour l'approximation des caractéristiques du Micro-capteur pHISFET aux résultats expérimentaux .Deuxièmement,la structure du réseau de neurones obtenue après optimisation est en suite traduite en langage PSPICE pour former un Subcircuit. Finalement, le Subcircuit est utilisé comme model du capteur ISFET dont les variations des grandeurs non électriques au quelles le capteurs est soumis dans le cas d'une application réelle sont remplacées par des grandeurs électriques pour la simulation sur PSPICE .A l'aide de cette méthode, les pH-ISFETs peuvent être modélisés et la dérive de la température, l'effet de l'épaisseur d'oxyde et de la longueur du canal sont présentés dans ce travail.

Mots clés **:** *réseaux de neurones artificiels ; réseaux de neurones à propagation- avant ; MLP ; PSPICE ; chemFETs ; pH-ISFETs ; dérive de la température .*