

Моделирование частотных сканов

Богачев А.М.

24 июля 2022 г.

Глава 1

Цели и задачи

Согласно источнику [2] сигналы релаксации ёмкости барьерных структур можно условно разделить на три группы:

1. Моноэкспоненциальный сигнал релаксации, обусловленный одним единственным энергетическим уровнем в запрещённой зоне полупроводника.
2. Сигнал релаксации, состоящий из суммы нескольких моноэкспоненциальных сигналов релаксации.
3. Сигнал релаксации, характеризуемый непрерывным распределением скоростей эмиссии, представленным спектральной функцией $g(\lambda)$.

Таким образом, цель работы по моделированию частотных сканов в самом общем виде можно описать следующим образом: найти способ определять спектральную функцию $g(\lambda)$, её параметры, а также зависимость этих параметров от температуры.

Для достижения поставленной цели нужно решить предположительно следующие задачи:

1. Разработать алгоритм идентификации частотного скана моноэкспоненциального сигнала релаксации.
2. Разработать алгоритм идентификации частотного скана неэкспоненциального сигнала релаксации с показателем p , характеризующим нелинейность и неэкспоненциальность.
3. Разработать программу идентификации частотного скана сигнала релаксации, состоящего из суммы моноэкспоненциальных сигналов. Программа должна определять параметры каждого моноэкспоненциального сигнала.

4. Разработать программу идентификации группы частотных сканов при разных температурах. На данном этапе предполагается, что сигнал релаксации образован суммой моноэкспоненциальных сигналов, количество которых не меняется в зависимости от температуры, меняются только их параметры.
5. Разработать программу идентификации спектральной функции $g(\lambda)$ и её параметров для отдельного частотного скана.
6. Разработать программу идентификации спектральной функции $g(\lambda)$ и её параметров для группы частотных сканов при разных температурах, полагая, что от температуры зависят только параметры $g(\lambda)$.

Глава 2

Моделирование частотных сканов с одной экспоненциальной составляющей без показателя p

2.1 Подготовка данных

Выходной сигнал коррелятора спектрометра DLS-82E определяется выражением 2.1.

$$S(\tau, C_A, F_0, t_1) = C_A K_{BS} K_{LS} \phi(\tau, F_0, t_1), \quad (2.1)$$

где

C_A – амплитуда емкостного релаксационного сигнала,

K_{BS} – масштабный коэффициент, зависящий от чувствительности емкостного моста,

K_{LS} – масштабный коэффициент селектора,

τ – постоянная времени релаксации гулбокого уровня,

F_0 – частота сканирования импульсов заполнения,

t_1 – длительность импульса заполнения,

$\phi(\tau, F_0, t_1)$ – функция определяемая выражением 2.2.

$$\phi(\tau, F_0, t_1) = M\tau F_0 e^{-\frac{0.05}{\tau F_0}} \left(1 - e^{\frac{t_1 F_0 - 0.45}{\tau F_0}} - e^{-\frac{0.5}{\tau F_0}} + e^{\frac{t_1 F_0 - 0.95}{\tau F_0}} \right), \quad (2.2)$$

где M – масштабный множитель.

Введём коэффициент A , характеризующий амплитуду сигнала релаксации ёмкости:

$$A = C_A K_{BS} K_{LS}. \quad (2.3)$$

При моделировании будем считать масштабный коэффициент и длительность импульса заполнения постоянными: $t_1 = 20 \cdot 10^{-6} \text{с}$, $M = 5.861$.

При идентификации параметров модели будем определять коэффициент A , характеризующий амплитуду сигнала релаксации, и постоянную времени сигнала релаксации τ .

Так как выражения 2.1 и 2.2 при моделировании будут зависеть только от трёх параметров: τ , A , F_0 , их левые части можно переписать следующим образом:

$$S(\tau, A, F_0) = A\phi(\tau, F_0), \quad (2.4)$$

$$\phi(\tau, F_0) = M\tau F_0 e^{-\frac{0.05}{\tau F_0}} \left(1 - e^{\frac{t_1 F_0 - 0.45}{\tau F_0}} - e^{-\frac{0.5}{\tau F_0}} + e^{\frac{t_1 F_0 - 0.95}{\tau F_0}} \right). \quad (2.5)$$

Подготовим исходные данные для моделирования. На первом этапе предлагается использовать расчётные данные вместо экспериментальных, чтобы можно было оценить качество идентификации параметров модели.

Подготовим массив значений частоты, распределённых равномерно по логарифму частоты. Каждое значение вычисляется по следующей формуле 2.6.

$$F_{0i} = 10^{(i-1)d}, \quad (2.6)$$

i – номер элемента в массиве (от 1 до N ; N – количество элементов в массиве),

d – шаг по логарифму частоты, который вычисляется автоматически в программе моделирования.

В таблице 2.1 приведены параметры массива частот.

Таблица 2.1: Параметры массива частот

Параметр	Начальная частота, Гц	Конечная частота, Гц	Количество значений
Значения	1	2500	1000

Для каждого значения частоты вычислим значения выходного сигнала коррелятора по формуле 2.7.

$$S^*(\tau, A, F_0) = A\phi(\tau, F_0) + n(\mu, \sigma), \quad (2.7)$$

где n – нормально распределённый шум с математическим ожиданием μ и среднеквадратическим отклонением σ .

Для расчётов будем использовать параметры, перечисленные в таблице 2.2.

На рисунке 2.1 показан рассчитанный частотный скан.

Таблица 2.2: Параметры для вычисления исходных данных

Параметр	$\tau, \text{с}$	A	μ	σ
Значение	0.005	3.0	0	0.2

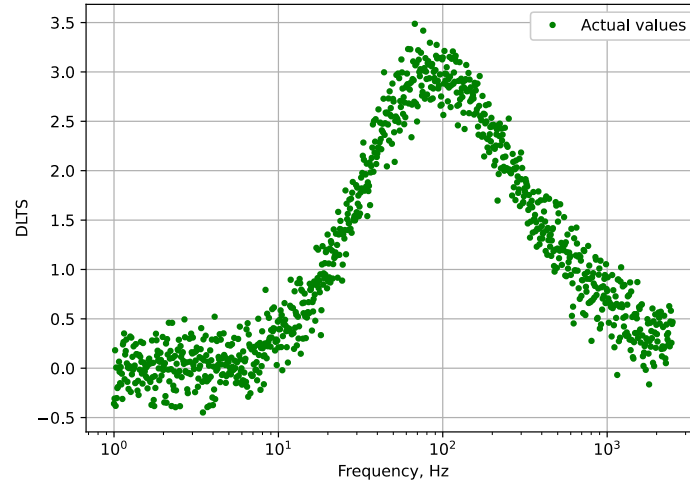


Рис. 2.1: Рассчитанный частотный скан. По горизонтали отложена частота в Гц, по вертикали – сигнал DLTS.

2.2 Идентификация параметров модели

Идентификацию параметров модели будем проводить нелинейным методом наименьших квадратов.

В качестве целевой функции при оптимизации параметров модели выберем минимум среднеквадратической ошибки между исходными данными и данными, вычисляемыми моделью (формула 2.8).

$$E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (S_i^* - S_i)^2 \quad (2.8)$$

Оптимизацию параметров модели будем выполнять методом стохастического градиентного спуска по мини-батчам (выборкам), так как данный алгоритм обладает высокой скоростью и меньше подвержен риску остановиться в локальном минимуме целевой функции. Размер выборки (параметр `batch_size`) зададим равным 100, количество итераций (параметр `epochs` – «эпохи») также зададим равным 100, скорость градиентного спуска (параметр `learning_rate`) зададим равным 0.1. Данный алгоритм работает следующим образом:

1. из всех исходных данных 100 точек (параметр `batch_size`) выбираются случайным образом;

2. по выбранным точкам выполняется градиентный спуск;
3. пункты 1 и 2 повторяются $N/batch_size$ раз (N – количество точек в массиве исходных данных), при каждом повторении фиксируются лучшие параметры модели;
4. пункты 1 – 3 повторяются заданное количество раз (параметр `epochs`), в конце каждой итерации фиксируются лучшие значения параметров.

Стохастический градиентный спуск находит решение быстрее и работает стабильнее, если значения параметров модели находятся примерно в одном и том же масштабе. Чтобы выполнить данное условие, будем оптимизировать не постоянную времени τ , а её логарифм, т.е. в выражениях 2.4 и 2.5 заменим τ выражением 2.9 и будем искать оптимальное значение степени ρ вместо τ .

$$\tau = 10^\rho \quad (2.9)$$

Данная замена также исключит возможность появления отрицательных значений τ в результате работы алгоритма оптимизации.

Начальные значения параметров будем выбирать случайными из диапазонов, приведённых в таблице 2.3.

Таблица 2.3: Диапазоны начальных значений параметров

Параметр	Минимальное значение	Максимальное значение
ρ	-3	-0.5
A	0.3	3.3

Не исключено, что вместо произвольных значений правильнее выбирать значения параметров в произвольной точке частотного скана.

На рисунке 2.2 показан результат работы алгоритма идентификации. На графике слева показаны исходные данные (зелёные точки), частотный скан, полученный на модели до оптимизации параметров (синяя линия), частотный скан, полученный на модели после оптимизации параметров (красная линия); по горизонтали отложена частота в Гц, по вертикали – сигнал DLTS. На графике справа показана зависимость среднеквадратической ошибки от количества «эпох».

В таблице 2.4 приведены численные значения результатов идентификации модели.

Алгоритм достигает сходимости очень быстро, таким образом, нет необходимости использовать вариации градиентного спуска с адаптивной скоростью.

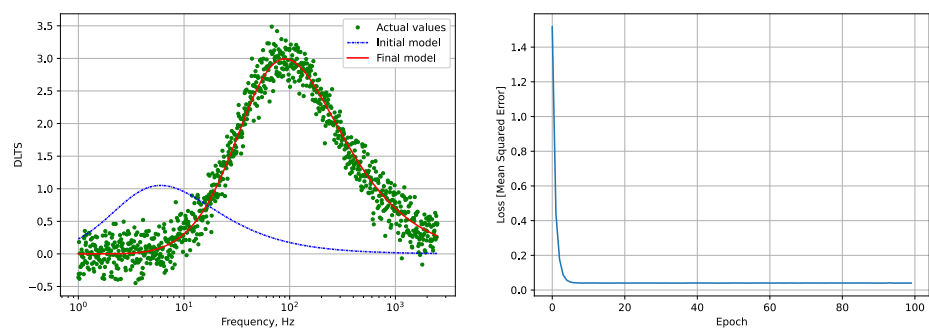


Рис. 2.2: Результаты идентификации модели

Таблица 2.4: Результаты идентификации параметров модели

Параметр	Значения до оптимизации	Значения после оптимизации	Исходные значения
A	1.0500	2.9973	3.0
ρ	-1.133	-2.312	—
τ	0.0736	0.0049	0.005
E	2.1472	0.0406	—
\sqrt{E}	1.465317	0.201380	—

Глава 3

Моделирование частотных сканов с учётом показателя p

3.1 Подготовка данных

Для комплексного учёта нелинейности аналогового тракта спектрометра и неэкспоненциальности релаксационного сигнала используется показатель p , введя его в выражение 2.4, получим выражение 3.1.

$$S(\tau, A, F_0) = A[\phi(\tau, F_0)]^p \quad (3.1)$$

Рассчитаем экспериментальные данные аналогично тому как это делалось в предыдущей части, но принимая во внимание коэффициент p . Для расчёта используется та же сетка частот, что и в предыдущем разделе. Параметры, использованные для расчёта приведены в таблице 3.1.

Таблица 3.1: Параметры для вычисления исходных данных

Параметр	τ , с	A	p	μ	σ
Значение	0.005	3.0	1.5	0	0.2

На рисунке 3.1 приведён рассчитанный частотный скан.

3.2 Идентификация параметров модели

Выполним идентификацию параметров модели тем же способом, что и в предыдущем разделе. Алгоритм и его параметры оставим без изменений, за исключением того, что идентификация теперь проводится по трём параметрам, а параметр p в начале идентификации всегда будет равным 1.

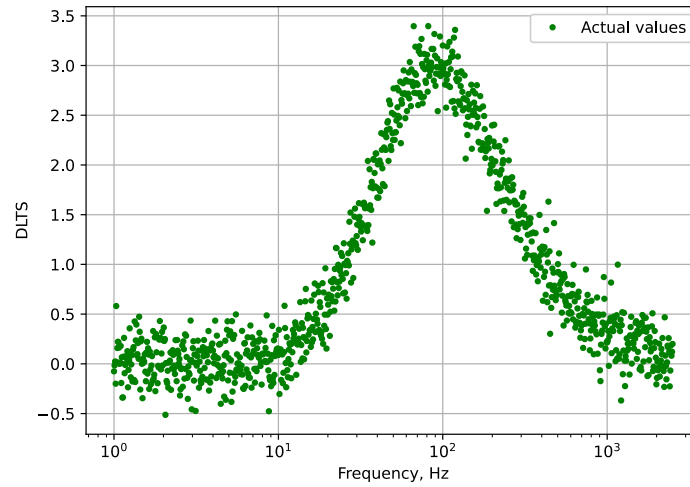


Рис. 3.1: Рассчитанный частотный скан. По горизонтали отложена частота в Гц, по вертикали – сигнал DLTS.

На рисунке 3.2 приведён результат работы алгоритма идентификации. На графике слева показаны исходные данные (зелёные точки), частотный скан, полученный на модели до оптимизации параметров (синяя линия), частотный скан, полученный на модели после оптимизации параметров (красная линия); по горизонтали отложена частота в Гц, по вертикали – сигнал DLTS. На графике справа показана зависимость среднеквадратической ошибки от количества «эпох».

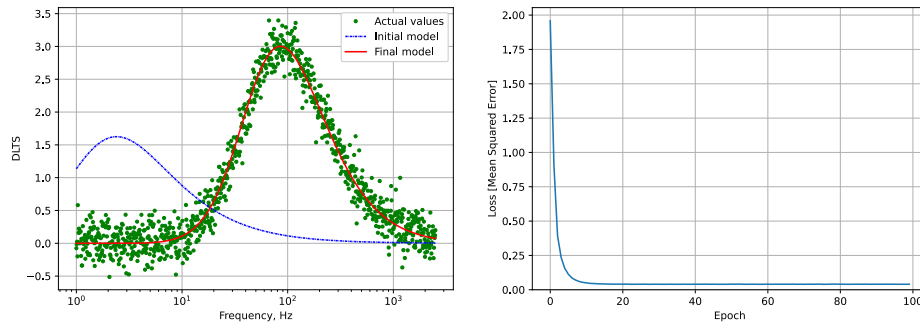


Рис. 3.2: Результаты идентификации модели

В таблице 3.2 приведены численные значения результатов идентификации модели.

Таблица 3.2: Результаты идентификации параметров модели

Параметр	Значения до оптимизации	Значения после оптимизации	Исходные значения
A	1.6234	3.0084	3.0
ρ	-0.7361	-2.2892	—
τ	0.1836	0.0051	0.005
p	1.0	1.5225	1.5
E	2.2571	0.0404	—
\sqrt{E}	1.5024	0.2010	—

Глава 4

Моделирование частотных сканов с несколькими экспоненциальными составляющими

4.1 Подготовка данных

Сигнал релаксации ёмкости может иметь неэкспоненциальную форму из-за того, что он сам является суммой нескольких экспоненциальных релаксационных сигналов. Такой сигнал можно описать выражением 4.1

$$f(t) = \sum_{i=1}^m A_i e^{-\frac{t}{\tau_i}}, \quad (4.1)$$

где m – количество экспоненциальных составляющих.

Частотный скан полученный в таком случае будет определяться выражением 4.2.

$$Y = \sum_{i=1}^m S(\tau_i, A_i, F_0), \quad (4.2)$$

где $S(\tau_i, A_i, F_0)$ – частотный скан для каждой моноэкспоненциальной составляющей без показателя p , определяемый выражением 2.4 и выражением 2.5.

Внесём соответствующие изменения в программную реализацию модели и рассчитаем исходные данные так же, как и в предыдущих разделах. В таблице 4.1 приведены параметры отдельных составляющих рассчитанного частотного скана.

Рассчитанный частотный скан будет иметь вид, приведённый на рисунке 4.1.

Таблица 4.1: Параметры моноэкспоненциальных составляющих частотного скана

Параметр	Значение
$\tau_1, \text{с}$	0.2
A_1	3.0
$\tau_2, \text{с}$	0.008
A_2	2.5
$\tau_3, \text{с}$	0.0004
A_3	2.0
μ	0.0
σ	0.2

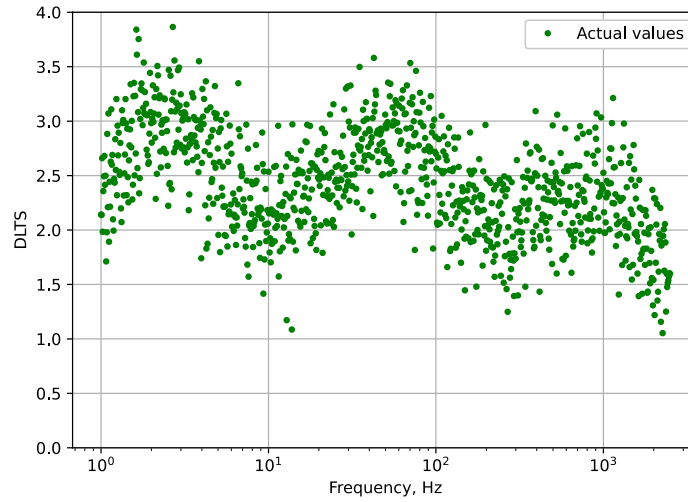


Рис. 4.1: Рассчитанный частотный скан. По горизонтали отложена частота в Гц, по вертикали – сигнал DLTS

4.2 Пример удачной идентификации

Выполним идентификацию частотного скана аналогично тому, как это делалось в предыдущих двух частях, за исключением того, что модель теперь определяется выражением 4.2. При этом укажем алгоритму идентификации, что количество экспоненциальных составляющих $m = 3$. На рисунке 4.2 на верхнем графике показаны исходные данные (зелёные точки), частотный скан, полученный на модели после оптимизации параметров (красная линия), частотные сканы отдельных экспоненциальных составляющих после оптимизации параметров (синие линии); по горизонтали отложена частота в Гц, по вертикали – сигнал DLTS. На нижнем графике показана зависимость среднеквадратической ошибки от количества «эпох».

На рисунке 4.2 представлены результаты идентификации.

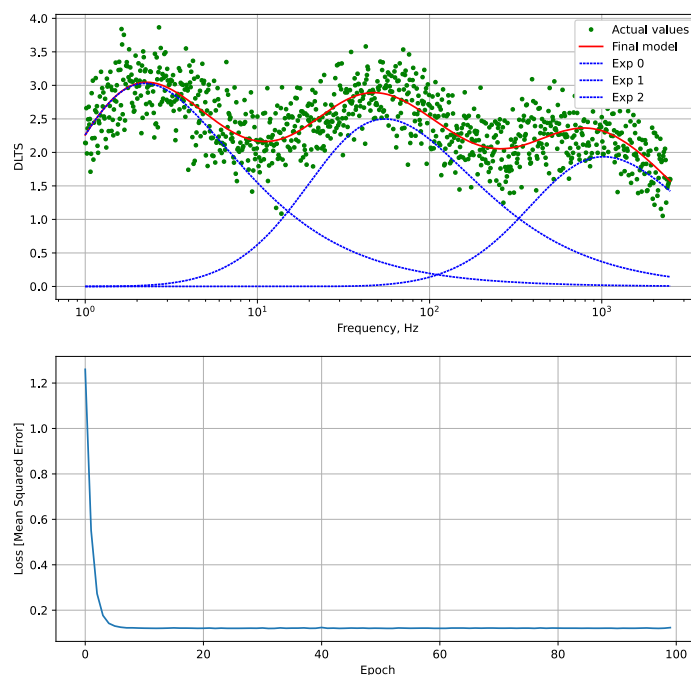


Рис. 4.2: Результаты идентификации модели

В таблице 4.2 приведены параметры модели после идентификации.

Таблица 4.2: Параметры модели после идентификации

Параметр	Значение
$\tau_1, \text{с}$	0.0079898
A_1	2.4998
$\tau_2, \text{с}$	0.0004082
A_2	1.9873
$\tau_3, \text{с}$	0.1990181
A_3	3.0273
\sqrt{E}	0.345909

Нужно отметить, что алгоритм оптимизации считает все составляющие равноправными, поэтому порядковые номера составляющих в таблицах 4.1 и 4.2 не совпадают.

4.3 Пример неудачной идентификации №1

На рисунке 4.3 приведем пример неудачной идентификации. Исходные данные будут те же, что и в предыдущем разделе (таблица 4.1), но количество

экспоненциальных составляющих $m = 6$. На верхнем графике показаны исходные данные (зелёные точки), частотный скан, полученный на модели после оптимизации параметров (красная линия), частотные сканы отдельных экспоненциальных составляющих после оптимизации параметров (синие линии); по горизонтали отложена частота в Гц, по вертикали – сигнал DLTS. На нижнем графике показана зависимость среднеквадратической ошибки от количества «эпох».

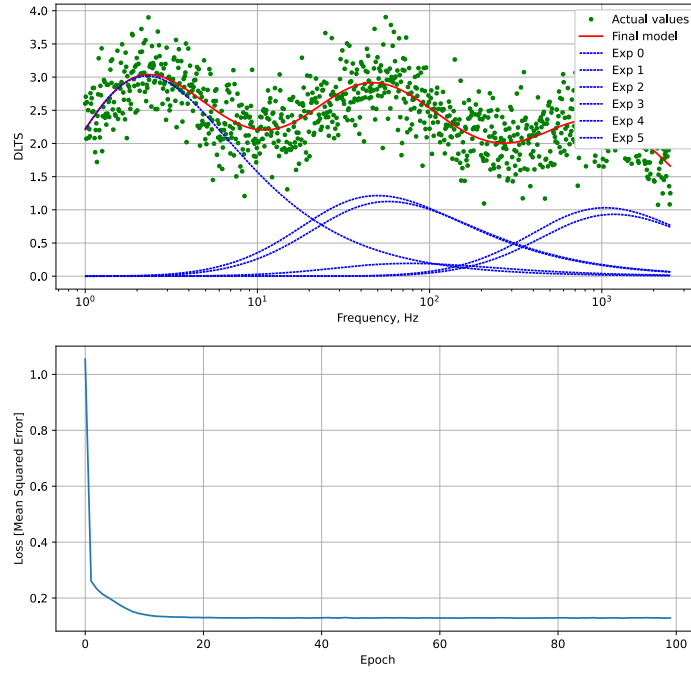


Рис. 4.3: Результаты неудачной идентификации модели

В таблице 4.3 приведены численные значения параметров после идентификации модели.

Нужно отметить, что в таких случаях появляются частотные сканы с практически одинаковой постоянной времени или с амплитудой близкой к нулевой. Также возможно появление составляющих с отрицательными амплитудами. В дальнейшем данная особенность может служить «индикатором» того, что количество экспоненциальных составляющих нужно сократить.

Также примечательно, что корень из среднеквадратического отклонения в данном (\sqrt{E} в 4.3) и предыдущем (\sqrt{E} в 4.2) случаях отличаются незначительно примерно на 0.011.

Таблица 4.3: Параметры модели после неудачной идентификации

Параметр	Значение
$\tau_1, \text{с}$	0.005769
A_1	0.1933
$\tau_2, \text{с}$	0.007637
A_2	1.1259
$\tau_{3,\text{с}}$	0.000353
A_3	0.9613
$\tau_4, \text{с}$	0.194380
A_4	3.0155
$\tau_5, \text{с}$	0.008820
A_5	1.2150
$\tau_6, \text{с}$	0.000399
A_6	1.0595
\sqrt{E}	0.357646

4.4 Пример неудачной идентификации №2

Рассмотрим ещё один пример неудачной идентификации, все параметры исходных данных останутся прежними (таблица 4.1), но количество экспоненциальных составляющих $m = 2$.

В таблице 4.4 приведены численные значения параметров после идентификации модели.

Таблица 4.4: Параметры модели после неудачной идентификации

Параметр	Значение
$\tau_1, \text{с}$	0.0035643
A_1	2.9990
$\tau_2, \text{с}$	0.1554596
A_2	3.1999
\sqrt{E}	0.789497

Графики, иллюстрирующие данную модель, приведены на рисунке 4.4. На верхнем графике показаны исходные данные (зелёные точки), частотный скан, полученный на модели после оптимизации параметров (красная линия), частотные сканы отдельных экспоненциальных составляющих после оптимизации параметров (синие линии); по горизонтали отложена частота в Гц, по вертикали – сигнал DLTS. На нижнем графике показана зависимость среднеквадратической ошибки от количества «эпох».

Важно, что в данном случае корень из среднеквадратического отклонения значительно выше чем в случае с $m = 3$.

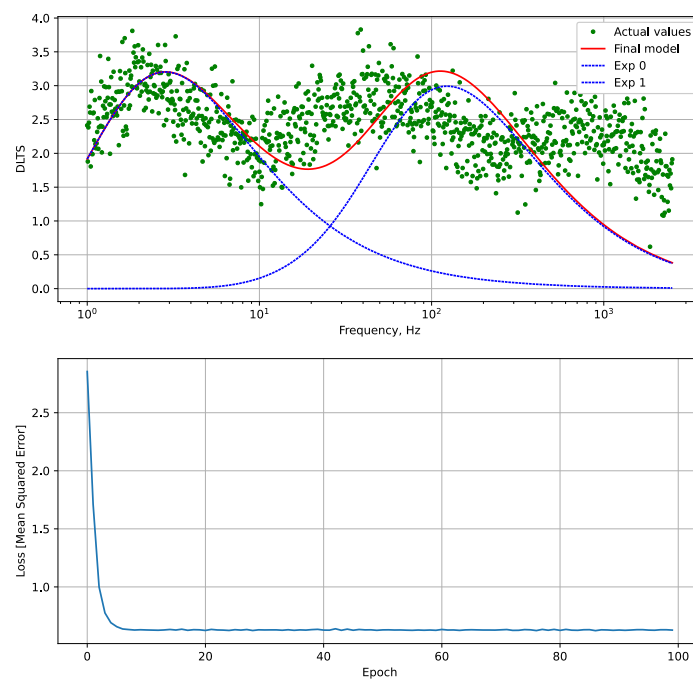


Рис. 4.4: Результаты неудачной идентификации модели

Глава 5

Выводы

Решены первые три задачи из поставленных в начале отчёта. При этом программа идентификации параметров частотного скана, образованного несколькими экспоненциальными составляющими нуждается в доработке, а именно, нужно решить проблему определения количества моноэкспоненциальных составляющих m .

Важно то, что m – параметр алгоритма идентификации, а не модели, к тому же его значения дискретны.

В литературе можно найти следующие рекомендации по выбору такого параметра [1]:

1. Ограничить значение параметра руководствуясь какой-либо гипотезой об исходных данных.
2. Перебрать несколько значений параметра и сравнить значения среднеквадратических отклонений. Применительно к данной задаче, из двух значений m , дающих близкие среднеквадратические отклонения, меньшее значение предпочтительнее.
3. Добавить регуляризацию.
4. Комбинировать первые три пункта.

Также в определении параметра m может помочь переход к идентификации по нескольким частотным сканам в диапазоне температур.

Прежде чем переходить к следующему этапу работы нужно решить следующие дополнительные задачи:

- опробовать имеющиеся алгоритмы идентификации на экспериментальных данных,
- определиться с методом выбора значения m ,
- сравнить результаты идентификации модели с показателем p и результаты идентификации модели частотного скана сигнала релаксации,

состоящего из суммы моноэкспоненциальных сигналов, на одинаковых тестовых и экспериментальных данных,

- разобраться с масштабным множителем M .

Список литературы

- [1] Aurelien Geron. *Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems*. 2nd. O'Reilly Media, Inc., 2019. ISBN: 1492032646.
- [2] Andrei A. Istratov и Oleg F. Vyvenko. «Exponential analysis in physical phenomena». В: *Review of Scientific Instruments* 70.2 (1999), с. 1233—1257. DOI: 10.1063/1.1149581. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.1149581>. URL: <https://doi.org/10.1063/1.1149581>.