СЕНСОРИ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ СИСТЕМИ SENSORS AND INFORMATION SYSTEMS

РАСS 2010:72.20.JV УДК:538.915, 538.911,004.932

АДАПТАЦІЯ МЕТОДУ ШТУЧНИХ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ ДО АНАЛІЗУ СИГНАЛІВ РЕЛАКСАЦІЙНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ ГЛИБОКИХ РІВНІВ

Д. Б. Грязнов², С. А. Корінь¹, В. Я. Опилат¹, О. В. Третяк¹

¹Інститут високих технологій Київського національного університету імені Т. Шевченка, 03022, Глушкова 4г, Київ, Україна, тел.+380(44)521-35-66, факс +380(44)521-33-43 sergii.korin@univ.net.ua opylat@gmail.com tov@univ.kiev.ua ²Радіофізичний факультет Київського національно університету імені Т. Шевченка, 03022, Глушкова 4г, Київ, Україна, тел., факс +380(44)521-35-90 dima@univ.net.ua

АДАПТАЦІЯ МЕТОДУ ШТУЧНИХ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ ДО АНАЛІЗУ СИГНАЛІВ РЕЛАКСАЦІЙНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ ГЛИБОКИХ РІВНІВ

Д. Б. Грязнов, С. А. Корінь, В. Я. Опилат, О. В. Третяк

Анотація. На основі аналізу недоліків класичних методів обробки сигналів РСГР (релаксаційна спектроскопія глибоких рівнів) запропоновано альтернативний алгоритм, що базується на перевагах методу штучних нейронних мереж. Доведено правомірність його застосування для дослідження простих моделей з одним глибоким рівнем та стійкість до значного рівня зашумленості сигналу.

Ключові слова: РСГР, шум, переріз захоплення, енергія активації, штучні нейронні мережі

ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS METHOD FITTING FOR DEEP-LEVEL TRANSIENT SPECTROSCOPY SIGNALS ANALYSIS

D. B. Gryaznov, S. A. Korin, V. J. Opylat, O. V. Tretyak

Abstract. On the basis of analysis of classical methods disadvantages of deep level transient spectroscopy (DLTS) signal processing, we proposed alternative algorithm, which is based on the advantages of artificial neural networks. We proved the legitimacy of its application to the investigation of simple models with one deep level and its stability to a significant noise degree in signal.

Keywords: DLTS, noise, capture cross section, activation energy, artificial neural network

АДАПТАЦИЯ МЕТОДА ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ К АНАЛИЗУ СИГНАЛОВ РЕЛАКСАЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ

Д. Б. Грязнов, С. А. Коринь, В. Я. Опилат, О. В. Третяк

Аннотация. На основании анализа недостатков классических методов обработки сигналов РСГУ (релаксационная спектроскопия глубоких уровней) предложен альтернативный алгоритм, основанный на преимуществах метода искусственных нейронных сетей. Доказана правомерность его применения для исследования простых моделей с одним глубоким уровнем и устойчивость к значительному уровню зашумленности сигнала.

Ключевые слова: РСГУ, шум, сечение захвата, энергия активации, искусственные нейронные сети

Вступ

Ряд корисних властивостей напівпровідникових матеріалів чутливі до присутності у кристалі домішок та дефектів структури. Особливий інтерес становлять ті з них, які створюють у забороненій зоні напівпровідника локалізовані стани зі значними енергіями активації [1]. До порушень структури, що обумовлюють появу глибоких рівнів у напівпровідниках відносяться власні дефекти (вакансії, власний атом у міжвузлі, антиструктурні дефекти) і дефекти домішкової природи. Уведення глибоких рівнів - дієвий засіб регулювання швидкостей рекомбінаційних та генераційних процесів. Найбільш ефективно рекомбінація здійснюється через рівні, розміщені біля середини забороненої зони. У цьому випадку, відповідні поперечні перерізи захоплення носіїв стають максимальними, а часи життя вільних носіїв мінімальними. Глибокорівневі центри генерації, розміщені біля середини забороненої зони у широкозонних напівпровідниках, забезпечують високий коефіцієнт фотопідсилення. На практиці широко використовується ефект домішкової фотопровідності. Напівпровідники з глибокими рівнями можуть виконувати роль термочутливих елементів у термісторних пристроях. Центри з глибокими рівнями можуть визначати спектр випромінювання світлодіодів. Глибокорівневі дефекти (як центри компенсації) дозволяють одержати високоомні зразки для специфічних застосувань.

Уведення дефектів структури в кристал – навмисне чи неконтрольоване – породжує і ряд небажаних ефектів. Зростання питомого опору зразків внаслідок компенсації дії основної легуючої домішки та додаткового розсіяння носіїв заряду на іонізованих центрах – складають далеко не повний перелік паразитних явищ, пов'язаних з глибокими рівнями у напівпровідниках.

Зі сказаного зрозуміло, що вивчення властивостей глибокорівневих дефектів стимулюється як пошуком нових областей їх застосування так і потребою мінімізації ними ж обумовлених побічних (шкідливих) ефектів.

Виключна роль глибоких центрів домішок та дефектів структури у функціонуванні широкого класу приладів, які зокрема використовуються в опто- та термосенсориці, спонукає до пошуку нових та вдосконалення відомих методів дослідження зазначених неоднорідностей структури монокристалу. До найбільш інформативних, широковживаних і перспективних з точки зору можливостей удосконалення методів дослідження глибокорівневих центрів належить релаксаційна спектроскопія глибоких рівнів (РСГР).

Метод РСГР був запропонований Ленгом [2,3]. Метод базується на фіксації та аналізі нерівноважних процесів термоемісії носіїв з глибоких локальних енергетичних рівнів і дозволяє визначати термічний поперечний переріз захоплення носіїв дефектом $s_n(\sigma_h)$, енергію активації термоемісії носіїв E_t з рівня та концентрацію самих дефектів N_t . Завдяки простоті використання, точності визначення параметрів та відносно низьким часовим затратам, метод, завоювавши прихильність дослідників тих часів, залишається популярним і понині.

Метод не був безпроблемним, особливо стосовно точності визначення поперечного перерізу захоплення носіїв заряду, енергії активації та їх залежностей від різних зовнішніх факторів (температури, напруженості електричного поля та інших). Причини недосконалостей містили методичний, апаратний та математичний аспекти. Проте бачився чіткий шлях розвитку і покращення кожної компоненти. Удосконалення методики проведення вимірювань і відповідних алгоритмів одержання фізичних величин дозволило позбутись джерел похибок фундаментального характеру [4]. Поява швидкодіючих багаторозрядних аналого-цифрових перетворювачів дозволила відстежувати сигнал не у двох коротких відрізках часу (класичний ленгівський boxcar), а протягом усього процесу релаксації. Останнє створило підґрунтя для розвитку нових чисельних методів обробки релаксаційних кривих. Серед них пріоритетними є методи, здатні коректно виділяти сигнал з фонових шумів, сумірних з амплітудою сигналу, а отже - реалізувати основний резерв підвищення чутливості методу в цілому. Свого часу набули популярності метод квадратур [5], Фур'є спектроскопії глибоких рівнів (DLTFS) [6], перетворень Лапласа (Лаплас-DLTS) [7], регуляризації Тихонова [8] та інші. Проте безперечні позитивні сторони, притаманні цим методам, залишаються нереалізованими при роботі з зашумленими сигналами. Зокрема при обробці складних щільних релаксаційних спектрів приведені методики не здатні однозначно встановити число близькорозміщених енергетичних рівнів. Подібні задачі з математичного погляду відносяться до некоректних. І саме шуми роблять їх такими.

З огляду на сказане, природнім виглядає пошук нових математичних методів, позбавлених недоліків своїх попередників. Проте корисними можуть виявитись і спроби використання вже існуючих методів, успішно застосовуваних до задач, що мають високу спорідненість з обробкою зашумлених сигналів. Дана робота є спробою показати перспективність адаптації методу штучних нейронних мереж (ШНМ) для обробки РСГР – сигналів.

Штучні нейронні мережі та постановка задачі

Штучні нейронні мережі (ШНМ) [9] – це математичні моделі, що побудовані за принципом функціонування біологічних нейронних мереж. Ключовими властивостями таких моделей є: самонавчання, адаптивність, шумостійкість та відмовостійкість.

Завдяки зазначеним особливостям метод нейронних мереж з більшим чи меншим успіхом застосовується у галузях: прогнозування, класифікації, побудови асоціативної пам'яті, розпізнавання, керування, фільтрації даних тощо. Успіхи продемонстровані нейромережами, як програмами, що працюють у рамках традиційних операційних систем та комп'ютерних архітектур, початково не оптимізованих до потреб ШНМ, обґрунтували актуальність розробки нейрокомп'ютерів – апартно-системна реалізація яких відповідає ідеології функціонування нейронної мережі.

В галузях природничих наук метод ШНМ застосовується для апроксимації функцій, моделювання фізичних процесів, побудови профільних астро- та геофізичних моделей і прогнозів, задач керування (наприклад, корегування орбіт частинок у прискорювачах, контроль плазми в режимі реального часу), вирішення обернених задач (наприклад, розпізнавання піків в атомно-емісійних спектрах, флюорисцентної діагностики забруднень води) тощо [15-17].

Перелічені особливості методу ШНМ, особливо - фільтрація даних та розпізнавання образів - дозволяють сподіватись на їх успішне застосування для аналізу зашумлених складних РСГР спектрів. Дана робота має на меті розширити діапазон успішного застосування нейронних мереж саме для означеного випадку.

Вихідними положеннями для побудови алгоритмів нейронної мережі слугували ключові залежності РСГР-спектрометрії.

Як відомо [10], поведінка нестаціонарної ємності, що є джерелом інформації при дослідженні параметрів глибокорівневих дефектів методом РСГР, описується залежністю:

$$\Delta C(t,T) = \Delta C_{\max} e^{-\frac{t}{\tau_e(T)}}, \qquad (1)$$

де τ_e – постійна часу нестаціонарної ємності:

$$\tau_e(T) = \frac{1}{\sigma_c(T)bT^2} e^{\frac{E_c - E_i}{kT}},$$
(2)

 ΔC_{max} — максимальна амплітуда нестаціонарної ємності:

$$\Delta C_{\max} = C_b \frac{N_t}{2N_{dnet}}$$

C_b - рівноважна бар'єрна ємність досліджуваної структури при напрузі зміщення *U*:

$$C_b = S \sqrt{\frac{e \varepsilon N_{dnet}}{2(U+U_k)}} \,. \tag{3}$$

Інші величини: T – температура спостереження, N_t – концентрація рівня з енергією залягання E_t , N_{dnet} – «чиста» концентрація донорів в ОПЗ (всі іонізовані донори мінус всі іонізовані акцептори), E_c – рівень зони провідності, σ_c – термічний поперечний переріз захоплення рівня, b – константа, k – стала Больцмана, U_k – висота потенціального бар'єру структури.

Основою для побудови алгоритмів проведення вимірювань та обчислень було взято метод використання імпульсів заповнення різної тривалості [4,11]. Зокрема для діапазону коротких імпульсів (як правило – до 500 нс), де функція заповнення рівня виражається співвідношенням:

$$f(t_p) = 1 - e^{-\sigma_e v_e n t_p}$$

амплітуда релаксації набуває третього аргументу - t_n (довжина заповнюючих імпульсів):

$$\Delta C(t_p, t, T) = \Delta C_{\max} \left(1 - e^{\frac{t_p}{\tau_c(T)}}\right) e^{\frac{t}{\tau_e(T)}}, \quad (4)$$

де постійна часу захоплення:

$$\tau_c(T) = \frac{1}{\sigma_c(T)v(T)n},$$
(5)

v(T) – середня швидкість теплового руху носіїв та n – концентрація носіїв у зоні провідності.

Провівши цикли вимірювань при різних температурах, можна встановити температурну залежність $\sigma_c(T)$ та енергію активації E_c .

Проте питання математичної обробки результатів при високому рівні шумів та відсутності інформації про кількість глибоких рівнів залишається відкритим. При розв'язку задачі були використані основні переваги ШНМ над іншими математичними методами:

1. Базова стійкість результатів до шумів – завдяки особливій структурі мережі, що дозволяє виконувати розподілену обробку даних [9,12].

2. Можливість одночасно обробляти величезну кількість релаксаційних кривих, одержаних при різних тривалостях імпульсів заповнення та у діапазоні температур, значно ширшому ніж це необхідно для дослідження кількох близькорозміщених рівнів традиційним методом. Таке розширення температурного діапазону за межі доцільності (з точки зору класичної РСГР спектрометрії) дає нейронній мережі, здатній працювати за умови $\tau 1/\tau 2 \approx 1$, додаткову інформацію, необхідну для коректного розділення щільно розташованих енергетичних рівнів.

3. Окрім того, результат роботи ШНМ може бути використаний як початкове наближення розв'язку для поширених математичних методів, але вже з відомою кількістю глибоких рівнів.

Результати та обговорення

Для використання нейронна мережа потребує попереднього навчання - своєрідного налаштування своєї структури на специфічну задачу. Процес навчання полягав у постійному генеруванні випадковим чином всіх можливих наборів параметрів (σ_{c} , N_{r} , E_{i}) при наявності одного глибокого рівня, на основі яких обраховувались криві релаксації (4) та почергово подавались на вхід нейронній мережі для побудови своєї структури. Для кожного окремого набору параметрів (σ_{c} , N_{c} , E_{i}) навчання ШНМ відбувалося за методикою «з учителем» [9] кінцеві параметри для зворотньої задачі були відомими, бо відповідали вхідним, згенерованим для прямої задачі. Найбільш поширеним методом для такого навчання ШНМ є алгоритм градієнтного спуску (алгоритм зворотного поширення помилки [9,12]). Таким чином, після закінчення навчання на скінченній кількості наборів параметрів, завдяки своїй властивості створювати узагальнення, ШНМ стає здатною визначати параметри довільного глибокого рівня довільного зразка без перенавчання чи донавчання.

Особливості нашої власної реалізації програмного продукту для побудови і навчання штучних нейронних мереж дозволяють поетапно відстежувати систему в процесі навчання, та забезпечують гнучкість стосовно внесення змін до базових алгоритмів. Так для пришвидшення процесу навчання та уникання проблем з потраплянням в локальні мінімуми було використано математичні рекомендації для оптимізації кроку в алгоритмі градієнтного спуску [13,14].



Рис. 1. На рисунку зображено криві РСГР (4) при кожному фіксованому значенні імпульсу заповнення. Значення кожного вхідного нейрона визначалось як площа відповідної клітинки під кривою – заштрихована область.

Для задання достатньої роздільної здатності на вході та отримання трьох невідомих параметрів глибоких рівнів на виході, і разом з тим не будувати занадто велику ШНМ, збільшуючи тим самим час її навчання, була вибрана компромісна топологія ШНМ - (400-400-3) типу багатошаровий персептрон [9]. При цьому для вхідних даних (рис.1), з тих же міркувань, брались 20 кривих релаксації при різних тривалостях імпульсів заповнення у діапазоні від 10 нс до 500 нс. Криві релаксації подавались на нейрони в експоненційному масштабі по часу для рівномірного перекриття всього діапазону сталих часу релаксації та тривалостей імпульсів заповнення. В результаті, на основі рис.1, визначалась двовимірна матриця 20х20 для вхідних нейронів. Три нейрони на виході відповідали значенням ΔC_{max} , τ_e , τ_c , з яких згідно (2), (3) та (5) визначались шукані параметри σ_c , $N_c E_c$

Результат процесу навчання ШНМ для модельованих незашумлених кривих релаксації від одного глибокого рівня зображений на рис.2 з кінцевою похибкою визначення параметрів (ΔC_{max} , τ_e , τ_c) для обґрунтованої вище базової топології близько 0.25%. Видно, що у випадку малої ШНМ (рис. 2_а) процес навчання демонструє найкращу динаміку зменшення похибки, проте швидко виходить на межу точності, тоді як найбільша з тестованих мереж (рис. 2_с) досягнувши втричі меншої похибки, ще далека від насичення. Висновок очевидний – платою за точність обробітку результатів є розмір нейромережі та час її навчання.



Рис.2. Залежність відносної середньої похибки визначення параметрів глибоких рівнів (для незашумленого сигналу) від часу навчання для ШНМ з кількістю нейронів в шарах: а) 10х10 (одночасно обробляється 10 кривих релаксації); б) 20х20 (одночасно обробляється 20 кривих релаксації); с) 40х40 (одночасно обробляється 40 кривих релаксації).

В таблиці 1 наведено приклад моделювання прямої та оберненої задач. Спочатку на основі довільно вибраних параметрів глибоких рівнів і залежності (4) було побудовано масив даних (пряма задача), а потім за цими - вхідними для оберненої задачі даними - ШНМ відтворила початкові параметри моделювання. Для моделювання були прийняті наступні параметри напівпровідника та експерименту: діелектрична проникливість $\varepsilon = 12$, площа зразка $S = 10^{-2}$ см², концентрація носіїв $n = 10^{14}$ см⁻³, температура T = 293К, напруга зміщення U = 5В, висота потенціального бар'єру структури $U_{\kappa} = 1$ В, матеріальна константа $b = 3.6 \times 10^{17}$ м⁻²с⁻¹К⁻².

Таблиця 1 Перевірка роботи ШНМ

Випадково згенеровані параметри глибокого рівня		Обраховані параметри глибокого рівня з результатів ШНМ	
Piblic	1 51000 15 2		1 50 405 15 2
σ	1,5192Е-15 см ²	σ_{c}	1,5042Е-15 см ²
E	9,3520E-02 eB	E	9,3334E-02 eB
N _t	9,7341E+11 см ⁻³	N _t	9,7372Е+11 см ⁻³

Видно, що результати роботи навченої протягом 20000 секунд ШНМ відповідають вхідним даним з похибкою близько 0.5%, яка збільшилась через нелінійні залежності σ_c , N_r , E_t від ΔC_{max} , τ_e , τ_c .

Стійкість до шумів

Відповідні моделювання було проведено для перевірки стійкості побудованої ШНМ щодо шумів. В експериментах шум задавався як випадкова зміна до кривої РСГР (4) різної амплітуди.

Результати кількох серій навчань ШНМ для різних рівнів шумів представлені в табл.2

Видно, що при шумові 100% від максимальної амплітуди релаксації (при максимальній тривалості імпульсу заповнення) точність визначення параметрів складає менше 1,5 %. Таблиця 2

Залежність відносних середніх похибок визначення параметрів глибоких рівнів від часу навчання при різних рівнях шумів, виражених у відсотках щодо ΔC_{max}

Рівень шуму, %	Відносна середня похибка після 8000 секунд навчання, %
1	0,39
2	0,40
5	0,41
10	0,45
20	0,55
50	0,90
100	1,30

На рис. З зображено вигляд 2 з 20 подаваних на вхід ШНМ зашумлених кривих при найменшій 10 нс (випадок а) та найбільшій 500 нс (випадок b) тривалостях імпульсів заповнення для ілюстрації.



Рис. 3. Вигляд змодельованих кривих релаксації – вхідних для обробки ШНМ.

Результати обробки штучною нейронною мережею зашумленого (рівень шуму 100%) сигналу у числовій формі приведені у табл.3.

Середня похибка визначення параметрів складає близько 3%.

Висновки

Отримані на даному етапі досліджень результати свідчать, що штучна нейронна мережа може бути застосована для обробки сигналів РСГР. Для одного глибокого рівня метод дозволяє визначати характерні параметри де-

	Таолиця 3
Результати обробки	зашумленого сигналу
	ШНМ

Випадково згенеровані		Обраховані параметри	
параметри глибокого		глибокого рівня з	
рівня		результатів ШНМ	
σ	1,5192E-15 см ²	σ	1,4496Е-15 см ²
E	9,3520E-02 eB	E	9,2017E-02 eB
N _t	9,7341E+11 см ⁻³	N _t	9,8117E+11 см ⁻³

фекту структури з прийнятною точністю без жорстких вимог до рівня зашумленості релаксаційних кривих. Отримані результати можна покращити ускладнюючи структуру нейронної мережі шляхом збільшення кількості нейронів та їх шарів. Проте, залежність необхідних обчислювальних ресурсів для виконання процедури навчання від складності структури ШНМ близька до квадратичної. Це вимагає значно довшої тривалості навчання або застосування технологій паралельного програмування для ефективного використання багатопроцесорних систем. Подальші дослідження передбачатимуть адаптацію методу ШНМ для аналізу складних релаксаційних процесів, притаманних системам з кількома близькими за енергіями глибокими рівнями.

Список використаної літератури

- *1. Милнс А.* Примеси с глубокими уровнями в полупроводнках. -М., Мир, 1977, -562 с.
- Lang D. V. Deep-level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors. // Journal of Applied Physics. – 1974. – vol.45, №7. pp. 3023–3032.
- Lang, D. V. Fast Capacitance Transient Apparatus: Application to ZnO and O centers in GaP p–n Junctions. // Journal of Applied Physics. – 1974. – vol.45, №.7. pp. 3014–3022.
- 4. Третяк О. В., Опилат В. Я., Бойко Ю. В., Грязнов Д. Б., Деркач І. О., Поварчук В. Ю. До питання про визначення поперечного перерізу захо-

плення носіїв заряду методом DLTS // Сенсорна електроніка і мікросистемні технології. №1, 2010, с. 42-50.

- 5. Верлань А. Ф., Сизиков В. С. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. -Киев, 1986.
- 6. Weiss S., Kassing R. Deep Level Transient Fourier Spectroscopy (DLTFS)–A technique for the analysis of deep level properties // Solid-State Electronics, -1988. – vol.31, № 12,p.1733-1742).
- Dobaczewski L., Peaker A. R., Nielsen K. B., Laplace-transform deep-level spectroscopy: The technique and its applications to the study of point defects in semiconductors // Journal of Applied Physics. 2004. V.96. № 9. pp 4689-4728.
- Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1979.
- Уоссермен Ф. Нейрокомпьютерная техника: Теория и практика. – М.: Мир, 1992.
- 10. Берман Л. С., Лебедев А. А. Емкостная спектроскопия глубоких центров в полупроводниках. Л.: Наука, 1981. 46-93 с.
- 11. Reddy C. V., Fung S., Beling C. D., Inexpensive circuit for the measurement of capture cross section of deeplevel defects in semiconductors // Review of Scientific Instruments. — 1996. — V67. — № 12, pp. 4279-4281.
- 12. Haykin S (1998). Neural Networks: A Comprehensive Foundation. Prentice Hall, NJ, USA, pp. 178-278.
- 13. Xiao-Hu Yu, Guo-An Chen Efficient backpropagation learning using optimal learning rate and momentum. Neural Networks – 1997 – V10. – № 3 – pp. 517–527.
- 14. Korin S. A, Gryaznov D. B., Boyko Yu. V. Examination of processes and methods of training neuronet for processing DLTS signals// Вісник КНУ: радіофізика та електроніка – 2009. – 12 pp.23–27.

- 15. Tommy W. S., Chow Siu-Yeung Cho, Neural Networks and Computing: Learning Algorithms and Applications, // Series: In Electrical and Computer Engineering. – 2007. – Vol.7. – 324p.
- 16. Belic I., Gyergyek L. Neural network methodologies for mass spectra recognition // Vacuum. – 1997, – Vol. 48, – №7–9. – pp. 633–637.
- 17. Calderon-Macias C., Sen M., Stoffa P. Artificial neural network for parameter estimation in geophysics // Geophysical prospecting – 2000, – Vol.48, – №1, – pp. 21-47.