

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ НА ОСНОВЕ “MS EXCELL” ДЛЯ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ В ФИЗИКЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Жонибекова Севара Дилмурод кизи, Зиётдинов Жахонгир Норбоевич, Носиров Мурод Зокирович

^{1,2,3} Преподаватель Андижанского государственного пединститута Андижан, Узбекистан

<https://doi.org/10.5281/zenodo.7214397>

ARTICLE INFO

Received: 27th September 2022

Accepted: 01st October 2022

Online: 17th October 2022

KEY WORDS

метод наименьших квадратов, физический эксперимент, достоверность результатов, полупроводник, диффузия.

ABSTRACT

В статье рассматривается возможность применения MS Excell приложения для аппроксимации экспериментальных данных методом наименьших квадратов. Приведены примеры для линейной, квадратичной и кубической зависимостей физических величин в физике полупроводников.

ВВЕДЕНИЕ

Метод наименьших квадратов является наиболее широко распространенным методом обработки данных физических экспериментов. Данный метод стали применять для статистической обработки данных как лабораторных работ по элементарной и общей физике, так и педагогических экспериментов. Преимущественно встречается случай программирования расчета на базе различных программных языков с последующим выводом результатов расчета в виде неких таблиц или графиков [1-3, 6]. Разнообразие используемых программ расчета и различие их в степенях совместимости с операционными системами представляет актуальности разработки более универсального MS Excell приложения этого метода. Авторами настоящей работы разработано MS Excell приложение метода наименьших квадратов для обработки данных любых физических экспериментов [4, 5]. Рассмотрены некоторые примеры применения новой методики для расчета определенных экспериментальных данных.

ТЕОРИЯ

Если некоторая физическая величина y зависит от другой величины x , то эту зависимость можно исследовать, измеряя y при различных значениях x . В результате измерений получается ряд значений:

$$x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n;$$

$$y_1, y_2, \dots, y_i, \dots, y_n.$$

По данным такого эксперимента можно построить график зависимости $y = f(x)$. Полученная кривая дает возможность судить о виде функции $f(x)$. Однако значения постоянных коэффициентов, которые входят в эту функцию, остаются неизвестными. Применение метода наименьших квадратов позволяет легко определить их значения.



Экспериментальные точки, как правило, не ложатся точно на линии кривой. Метод наименьших квадратов требует, чтобы сумма квадратов отклонений экспериментальных точек от кривой, т.е. $[y_i - f(x_i)]^2$ была наименьшей.

На практике этот метод наиболее часто используется в случае линейной зависимости, т.е. когда

$$y = kx \quad \text{или} \quad y = a + bx.$$

Линейная зависимость очень широко распространена в физических задачах. И даже когда зависимость нелинейная, обычно стараются построить график так, чтобы получить прямую линию. Например, если предполагать, что показатель преломления стекла n связан с длиной λ световой волны соотношением $n = a + b/\lambda^2$, то на графике строят зависимость n от λ^{-2} .

Рассмотрим случай, когда экспериментальные точки должны удовлетворить формулу:

$$y = a + bx. \quad (1)$$

Задача состоит в том, чтобы по имеющемуся набору значений x_i, y_i найти наиболее приближенные значения a и b .

Составим формулу для средне квадратичной погрешности χ^2 , равную сумме квадратов отклонений точек x_i, y_i от прямой (1)

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2 \quad (2)$$

и найдем значения a и b при условиях, соответствующих минимуму χ^2 :

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i) = 0,$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^n x_i (y_i - a - bx_i) = 0.$$

Совместным решением этих уравнений можно получить:

$$b = \frac{\sum (x_i - \bar{x}) y_i}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \quad (3)$$

$$a = \bar{y} - b\bar{x} \quad (4)$$

где $\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i$, $\bar{x} = \sum_{i=1}^n x_i$

При обработке результатов измерения этим методом удобно все данные сводить в таблицу MS Excel, в которой подсчитываются все физические величины, входящие в формулы (1) – (4). Кроме того, удобно выражать результаты расчета в графической или диаграммной форме, которые позволяют наглядно проанализировать физический механизм исследуемой зависимости.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

MS Excel позволяет легко определить неизвестные коэффициенты не только линейной, но и квадратичной, кубической и другие более сложные виды функций. Применение



этого метода для обработки данных различных задач приведено в рассматриваемых ниже примерах.

Пример 1. С целью определения температурного коэффициента удельного сопротивления, измерены удельное сопротивление полупроводника в зависимости от температуры и получены следующие результаты: $\rho = 63 \text{ Ом}\cdot\text{м}$ (при $t = 0 \text{ }^\circ\text{C}$); $\rho = 61 \text{ Ом}\cdot\text{м}$ (при $t = 20 \text{ }^\circ\text{C}$); $\rho = 58 \text{ Ом}\cdot\text{м}$ (при $t = 40 \text{ }^\circ\text{C}$); $\rho = 55 \text{ Ом}\cdot\text{м}$ (при $t = 60 \text{ }^\circ\text{C}$); $\rho = 53 \text{ Ом}\cdot\text{м}$ (при $t = 80 \text{ }^\circ\text{C}$). Необходимо определить температурный коэффициент удельного сопротивления.

Решение. Предположим, что температурный коэффициент удельного сопротивления зависит от температуры по закону

$$\rho = at + b \quad (5)$$

и находим неизвестные коэффициенты описанным методом.

Для определения a и b обозначим ρ как функция y , а t аргументом x . Введив в колонки таблицы MS Excell формулы x , x^2 и $(y_i - y^m)^2$ подготовим расчетную "MS Excell" приложение - матрицу. Введив исходные данные эксперимента в 2- и 3- колонки, производим расчет и получаем результаты в 4-колонке (таблица 1).

Таблица 1.

Данные эксперимента $y(\rho)$ и результаты расчета $y^m(\rho^m)$ при различных значениях $x(t)$ (по 5 точкам измерения)

№	$x(t)$	$y(\rho)$	$y^m(\rho^m)$
1	0	63	63,20
2	20	61	60,60
3	40	58	58,00
4	60	55	55,40
5	80	53	52,80

Предложенный способ позволяет легко построить диаграмму зависимости коэффициента удельного сопротивления от температуры (Рис.1), где точки соответствуют данным эксперимента и линия – результатам расчета.

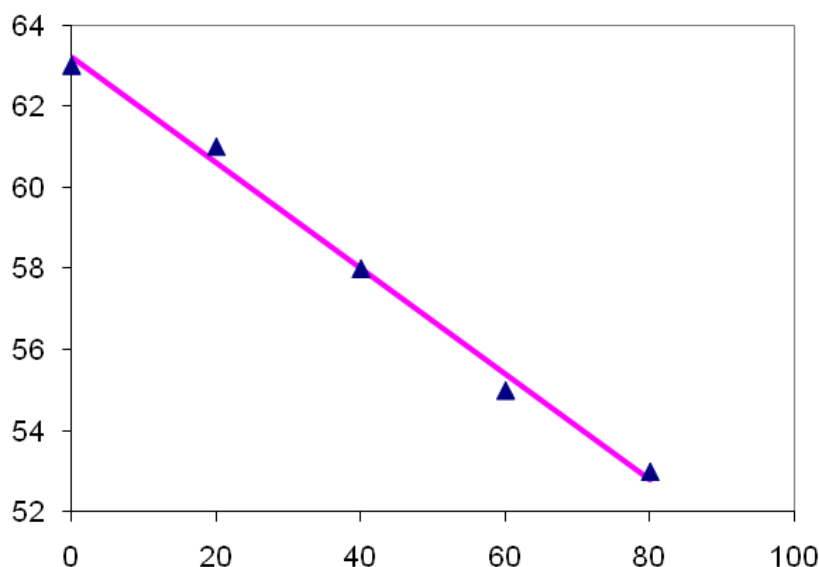




Рис. 1. Графическая диаграмма зависимости коэффициента удельного сопротивления от температуры: точки – данные эксперимента; линия – результаты расчета.

Последовательно, можно определить расчетным путем значения искоемых коэффициентов: $n = 5$; $b = 63,20$; $a = -0,13$; $\chi^2 = 0,13$.

Данные таблицы 1, вид графика (рис. 1) и определенное значение χ^2 свидетельствуют о достоверности результатов.

Пример 2. С целью определения параметров диффузии элементов I группы монокристалле кремния в зависимости от порядкового номера элемента в периодической системе получены следующие результаты:

Таблица 2.

Данные эксперимента $y(D_0)$ и результаты расчета $y^m(\rho^m)$ при различных значениях $x(Z)$ (по 6 точкам измерения)

№	Z	$D_0, \text{см}^2/\text{с}$
1	3 (Li)	$4,40 \cdot 10^{-3}$
2	11 (Na)	$1,65 \cdot 10^{-3}$
3	19 (K)	$1,10 \cdot 10^{-3}$
4	29 (Cu)	0,015
5	47 (Ag)	0,6
6	79 (Au)	0,28

Определить диффузионные параметры.

Решение. Известно, что коэффициенты диффузии элементов в кремнии зависят от температуры в виде

$$D = D_0 \exp(-E/kT), \quad (6)$$

где D_0 — предэкспоненциальный множитель, E — энергия активации.

$$D_0 = AZ^2 + BZ + C \quad (7)$$

Путем ввода данные эксперимента различных авторов [7, 8] для различных элементов (Li, Na, K, Cu, Ag и Au) в соответствующие ячейки MS Excell (3-колонка), результаты расчета получим в 4-колонке таблицы (таблица 3).

Таблица 3.

Данные эксперимента D_0 и результаты расчета D_0^m при различных значениях Z (для атомов Li, Na, K, Cu, Ag и Au)

№	Z	D_0	D_0^m
1	3 (Li)	$4,40 \cdot 10^{-3}$	0,005
2	11 (Na)	$1,65 \cdot 10^{-3}$	0,002
3	19 (K)	$1,10 \cdot 10^{-3}$	0,001
4	29 (Cu)	0,015	0,127
5	47 (Ag)	0,6	0,555
6	79 (Au)	0,28	0,285



Аналогично используя преимущество MS Excel приложения можно легко построить графический вид зависимости коэффициента диффузии атомов от их порядкового номера в периодической системе (Рис. 2).

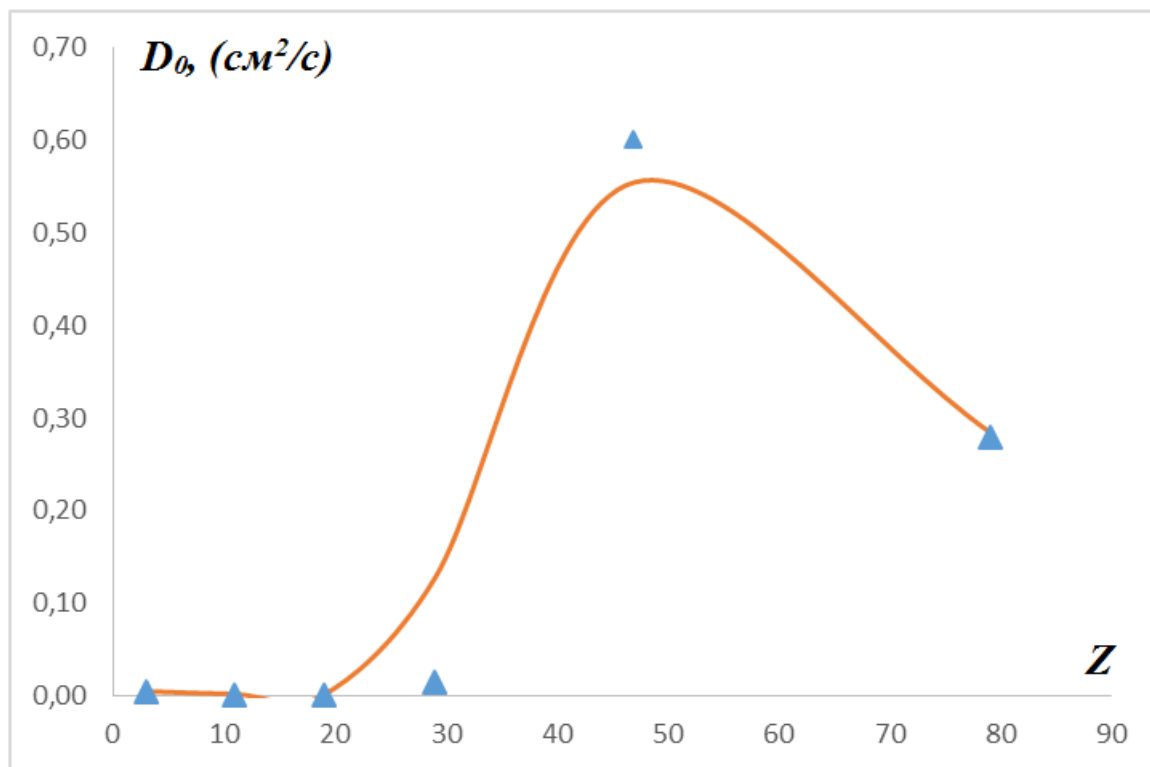


Рис. 2. Графическая диаграмма зависимости коэффициента диффузии атомов I группы от их порядкового номера в периодической системе: точки – данные эксперимента; линия – результаты расчета.

Последовательно, можно определить расчетным путем значения искомых коэффициентов: $n = 6$; $A = -1,46 \cdot 10^{-5}$; $B = 1,63 \cdot 10^{-3}$; $C = -3,55 \cdot 10^{-2}$ $\chi^2 = 0,0258$

Данные таблицы 3, вид графика (рис. 2) и определенные значения $\chi^2 = 0,0258$ свидетельствуют о достоверности результатов.

Пример 3. Как известно, коэффициент диффузии элементов IV группы в кремнии зависит от температуры по закону аналогично выражению (6).

Различными авторами для D_0 получены различные значения в зависимости от порядкового номера элемента (Z) в периодической системе. Предполагая, что D_0 зависит от Z по закону

$$D_0 = aZ^3 + bZ^2 + cZ + d, \quad (8)$$

необходимо определить неизвестные коэффициенты.

Решение. Применяв выше описанный метод, определим неизвестные коэффициенты: a, b, c, d .

Путем ввода данные эксперимента различных авторов [7, 8] для различных элементов (C, Si, Ti, и Ge) в соответствующие ячейки MS Excel (3-колонка), результаты расчета получим в 4-колонке таблицы (таблица 4).



Таблица 4.

Данные эксперимента D_0 и результаты расчета D_0^m при различных значениях Z
(для атомов C , Si , Ti , и Ge)

№	Z	D_0	D_0^m
1	6 (C)	0,44	0,44
2	14 (Si)	0,006	0,01
3	22 (Ti)	0,12	0,12
4	32 (Ge)	1,38e-05	1,4e-5

Аналогично используя преимущество MS Excell приложения можно легко построить графический вид зависимости коэффициента диффузии атомов от их порядкового номера в периодической системе (Рис. 3.).

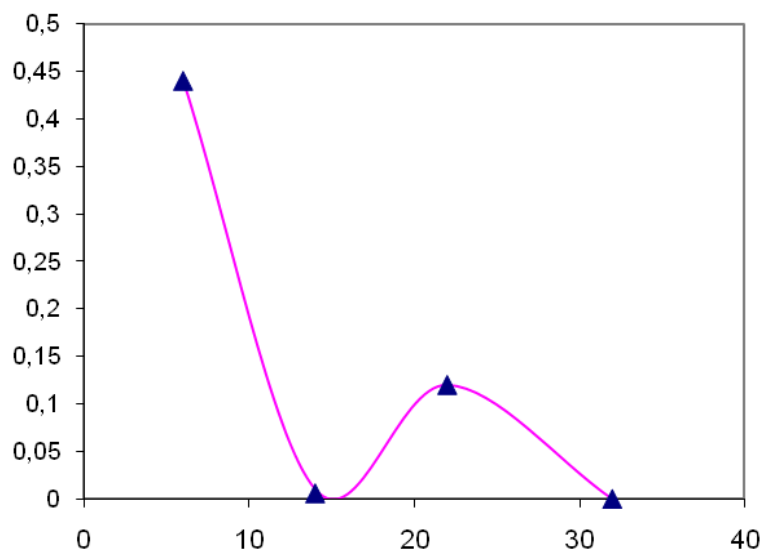


Рис. 3. Графическая диаграмма зависимости коэффициента диффузии атомов IV группы от их порядкового номера в периодической системе: точки – данные эксперимента; линия – результаты расчета.

Последовательно, можно определить расчетным путем значения искомых коэффициентов, которые изображаются в отдельных ячейках таблицы MS Excell приложения: $a = 0,001$; $b = 0,01$; $c = -0,26$; $d = 1,53$. Данные таблицы 4, вид графика (рис. 3) и определенное значение $\chi^2 = 0,001$ свидетельствуют о достоверности результатов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Достоверность результатов свидетельствуют о том, что метод наименьших квадратов можно использовать для любых задачах экспериментальной физики. Важно отметить, что построив научные задачи по определению диффузионных параметров экспериментально изученных химических элементов и получив расчетные результаты либо путем экстраполяции полученной графической кривой, можно прогнозировать диффузионные параметры других (экспериментально неизученных) элементов, что подтверждает важность выполненной работы.

References:



1. Бурсиан Е.В. Задачи по физике для компьютера, М.Просвещение, 1991 г.
2. Nosirov M.Z., Alieva J.R. "Universal calculator" for solving the physical problems, Materials of the I International scientific conference, Chicago, USA, 2013, p.278-282.
3. Насиров М.З., Алиев Р.У. Применение информационных технологий в преподавании физики (монография), Ташкент, Фан, 2012, -176 с.
4. Биллинг В.А. VBA в Office 2000. Офисное программирование. —М.: Издательско-торговый дом "Русская редакция", 1999. — 480 с.
5. Гарнаев А.Ю. Использование MS Excel и VBA в экономике и финансах. — СПб.: БХВ — Санкт-Петербург, 1999. — 336 с.
6. Насиров М.З., Алиев Р.У., Туланова Б., Базаров А. Изучение электрического поля на компьютере с использованием анимаций и численных методов//, Физика в школе, №1, 2011, с.40-43.
7. Зайнабидинов С., Насиров М.З., Алиева Ж.Р. О коэффициентах диффузии 3d элементов в кремнии//Узб. Физ. Жур., 2003, №1, 69-71.
8. Зайнабидинов С., Йулчиев Ш, Назиров Д.Э, Насиров М.З. Диффузия атомов в кремнии, Ташкент, 2012, -170 с.
9. Алиева Ж., Носиров М. Полуэмпирические диффузионные параметры атомов 3d переходных элементов в кремнии//Математические и компьютерное моделирование № 2 (3), февраль, 2019 г., с.98-102.
10. Носиров М., Алиева Ж., Абдукаххорова М., Аббосова Н. О диффузионных параметрах примесных атомов V группы элементов в кремнии//Молодой ученый, 2018, №51 (237), с.1-3.