

**Adam GUBAŃSKI, Jacek REZMER, Krzysztof LEŚNIAK**

Politechnika Wrocławska, Instytut Podstaw Elektrotechniki i Elektrotechnologii

## **Zastosowania metod ewolucyjnych w analizie TSDC**

**Streszczenie.** Wyniki pomiarów TSDC są superpozycją wielu procesów relaksacji. Złożone spektrum czyni analizę trudną, stąd parametry opisujące proces relaksacji są obciążone dużym błędem. Aby separować poszczególne procesy relaksacyjne i estymować odpowiadające im parametry, zastosowano algorytmy ewolucyjne. Algorytmy te efektywnie przeszukują skomplikowane przestrzenie rozwiązań, do których należy estymacja parametrów złożonego spektrum TSDC.

**Abstract.** The result of a TSDC measurement is a superposition of several relaxation processes. The resulting complexity of the spectrum makes the analysis difficult, while the parameters describing the relaxation process carry a large error. In order to separate individual relaxation processes and estimate the corresponding parameters, the evolutionary algorithm has been used. The algorithms are durable and effective in analyzing processes in very complicated solution spaces, such as the estimation of a complex TSDC spectrum. (*Preparation of Papers for Przegląd Elektrotechniczny – Evolutionary algorithms used to TSDC analysis*).

**Słowa kluczowe:** prądy termicznie stymulowane, separacja relaksacji, estymacja parametrów, algorytmy ewolucyjne.

**Keywords:** thermally stimulated currents, separate relaxation, parameters estimation, evolutionary algorithms.

### **Wstęp**

Zagadnienie relaksacji ładunków elektrycznych w dielektrykach jest ważne zarówno dla celów poznawczych jak i dla praktycznych zastosowań. Wyznaczanie parametrów relaksacji pozwala poznać własności elektryczne badanych materiałów. Znajomość tych procesów jest szczególnie ważna dla materiałów stosowanych do przechowywania ładunku elektrycznego przez długi czas, tzw. elektretów.

Jedną z metod eksperymentalnych badań zjawisk relaksacji dielektryków jest pomiar termicznie stymulowanej depolaryzacji (TSDC) [1]. Punkty charakterystyczne spektrum wykorzystuje się w klasycznej analizie procesów relaksacji [2]. Mierzone spektra TSDC są zwykle superpozycją wielu procesów. W rezultacie analiza takiego przebiegu jest bardzo trudna, a parametry opisujące parametry poszczególnych procesów są obciążone dużym błędem.

Do separacji poszczególnych impulsów TSDC stosuje się wiele metod [3-7]. Niestety metody te są zwykle ograniczone do przypadków, gdy szczyty relaksacji TSDC są dobrze wydzielone eksperymentalnie. Często również metody te wymagają znajomości struktury materiału. W wielu przypadkach warunki takie nie mogą być spełnione, wtedy parametry charakteryzując materiał są wyznaczane błędnie lub zależą od warunków eksperymentu.

Do separacji indywidualnych procesów relaksacji i estymacji odpowiadających im parametrów zastosowano metody ewolucyjne [4]. Metody te należą do klasy metod optymalizacyjnych wzorowanych na procesach biologicznych zachodzących w naturze. Są to procedury numeryczne, wykorzystujące losowy wybór do prowadzenia wysoce

ukierunkowanego poszukiwania optimum w bardzo skomplikowanych przestrzeniach rozwiązań, jaki stanowi analiza spektrum TSDC [5].

### **Termicznie Stymulowana Depolaryzacja**

Prądy termicznie stymulowanej depolaryzacji są związane ze zmianą entropii dielektryków podczas przejścia ze stanu bardziej uporządkowanego do mniej uporządkowanego elektrycznie.

Jeżeli materiały zawierają dipole, czynnikiem porządkującym jest działanie pola elektrycznego podczas polaryzacji. Czynnikiem burzącym uporządkowanie dipoli w polu elektrycznym są ruchy cieplne. Warunki równowagi obu przeciwstawnych procesów zależą od wartości pola elektrycznego, temperatury próbki oraz struktury badanego materiału.

W dielektrykach, w odpowiednich temperaturach, swoboda ruchu dipoli jest wystarczająca aby przy realnych wartościach natężenia pola elektrycznego uzyskać mierzalne wartości depolaryzacji. Dla typowych materiałów przebieg prądu depolaryzacji podczas liniowej zmiany temperatury będzie wykazywał jedno lub więcej lokalnych maksimum.

Zachowanie się relaksujących polarnych molekuł w ciele stałym opisuje model Debye'a. Prądy termicznie stymulowanej depolaryzacji występują przy ogrzewaniu uprzednio spolaryzowanego dielektryka. Czas relaksacji w temperaturze  $T$  określa zależność

$$(1) \quad \tau(T) = \tau_0 \exp\left(\frac{E_a}{kT}\right)$$

gdzie:  $\tau_0$  - czas początkowy,  $E_a$  – energia kwantyzacji,  $k$  – stała Boltzmana.

W przypadku liniowego wzrostu temperatury polaryzacja dielektryka zanika zgodnie z zależnością

$$(2) \quad P(t) = P_0 \exp\left(-\frac{1}{T_0 b} \int_{T_0}^T \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) dT\right)$$

gdzie:  $P_0$  – początkowa wartość polaryzacji

Powoduje to przepływ prądu TSD, którego gęstość wynosi

$$(3) \quad j(T) = \frac{P_0}{\tau_0} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \exp\left(-\frac{1}{T_0 b} \int_{T_0}^T \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) dT\right)$$

Rzeczywiste spektra TSDC, otrzymywane z pomiarów są często bardzo skomplikowane w wyniku nakładania się wielu procesów relaksacyjnych. Celem analizy jest wyznaczenie parametrów indywidualnych relaksacji.

### **Algorytmy ewolucyjne**

Algorytmy ewolucyjne należą do klasy metod numerycznych, które naśladują zasady ewolucji w naturze przy rozwiązywaniu zadań optymalizacji parametrycznej. W odróżnieniu od klasycznych algorytmów genetycznych [10-11], których chromosomy są reprezentowane tylko przez łańcuchy binarne, a transformacje polegają na binarnej mutacji i krzyżowaniu osobników, algorytmy ewolucyjne korzystają ze złożonych struktur danych a także rozszerzonych i modyfikowanych operatorów genetycznych, odpowiednich do wybranej struktury i zadania.

## VI Lubuska Konferencja Naukowo-Techniczna – i-MITEL 2010

Są to algorytmy probabilistyczne, które generują w każdym kroku populację osobników. Każdy osobnik przedstawia możliwe rozwiązanie rozpatrywanego zadania i jest reprezentowany przez odpowiednią strukturę danych. Każde rozwiązanie ocenia się na podstawie funkcji przystosowania. W ten sposób nową populację w kolejnym kroku tworzy się przez selekcję osobników najlepiej dopasowanych (proces selekcji). Niektóre osobniki nowej populacji podlegają dodatkowo transformacjom za pomocą operatorów genetycznych, dając w ten sposób nowe rozwiązanie. Są to transformacje jednoargumentowe (proces mutacji), w których nowe osobniki powstają poprzez małą zmianę pojedynczego osobnika, lub transformacje wieloargumentowe (proces krzyżowania), w których nowe osobniki powstają poprzez łączenie części dwóch lub więcej osobników. Przy odpowiedniej strukturze danych i funkcji przystosowania po zadanej liczbie kroków tworzenia nowych populacji, algorytm zbiega się, a najlepsze osobniki reprezentują rozwiązanie bliskie optymalnemu.

```
begin  
t := 0  
początkowa populacja X(t)  
ocena X(t)  
while (not warunek zakończenia) do  
begin  
t := t + 1  
Y(t) := reprodukcja z X(t-1)  
Z(t) := krzyżowanie i mutacja Y(t)  
ocena Z(t)  
P(t) := Z(t)  
ocena P(t)  
end  
end
```

Rys 1. Struktura algorytmu ewolucyjnego

Ewolucja populacji jest procesem przeszukiwania przestrzeni potencjalnych rozwiązań. W procesach takich istotne jest zachowanie równowagi pomiędzy przekazywaniem najlepszych cech do następnego pokolenia, a szerokim przeszukiwaniem przestrzeni rozwiązań. W ogólnym schemacie wykorzystania algorytmów ewolucyjnych przy rozwiązywaniu rzeczywistych zadań wyróżnia się dwa etapy.

Pierwszy etap polega na opisaniu problemu w terminologii używanej przez algorytm, wybraniu struktury danych (utworzenie początkowej populacji) oraz wybraniu odpowiedniej funkcji przystosowania.

Do analizy spektrum TSDC metodą ewolucyjną przyjęto zmiennoprzecinkową reprezentację poszukiwanych parametrów poszczególnych relaksacji  $E_{ak}$ ,  $P_{0k}$ ,  $\tau_{0k}$ . Taka reprezentacja stanowi wygodną i jednoznaczną zależność między zmienną i genem, umożliwia także zastosowanie specjalnych operatorów genetycznych oraz szybszą zbieżność niż w przypadku reprezentacji binarnej.

Założona funkcja przystosowania ocenia kolejne rozwiązania obliczając błąd aproksymacji krzywej eksperymentalnej  $j(T)$ . Minimum błędu aproksymacji stanowi kryterium prowadzonej selekcji.

$$(4) \quad \varepsilon = \sum_{T=T_0}^{T_{lim}} [\tilde{j}(T) - j(T)]^2$$

gdzie funkcję aproksymującą opisuje zależność

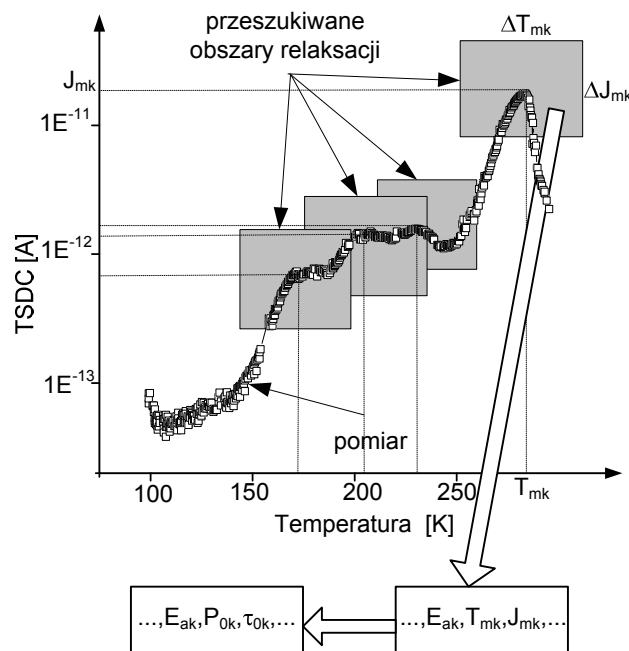
$$(5) \quad \tilde{j}(T) = \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{P_{0k}}{\tau_{0k}} \exp\left(-\frac{E_{ak}}{kT}\right) \exp\left[-\frac{1}{\tau_{0k} b} \int_{T_0}^T \exp\left(-\frac{E_{ak}}{kT}\right) dT\right]\right\}$$

gdzie  $N$  jest liczbą relaksacji,  $k = 1, \dots, N$

Drugi etap, to poszukiwania rozwiązań, czyli ocena populacji oraz procesy reprodukcji i transformacji genetycznych. Faza poszukiwania rozwiązań zostaje zakończona w momencie gdy zostało znalezione satysfakcjonujące rozwiązanie lub nastąpił warunek końca algorytmu, przekroczona została założona liczba pokoleń.

Do analizy przyjmowano mutację losową bitów oraz mutację nierównomierną mającej na celu skompensowanie zastosowania reprezentacji zmiennopozycyjnej. Jako operator krzyżowania stosowano krzyżowanie arytmetyczne jedno i wielopunktowe polegające na uśrednianiu zamiast wymiany wartości dwóch elementów w wybranych punktach chromosomów.

Dla efektywnego wykorzystania algorytmów ewolucyjnych konieczne jest dobre określenie zakresu wartości parametrów (dziedziny poszukiwań).



Rys. 2. Schemat wyboru obszaru poszukiwań parametrów dla wybranej liczby relaksacji

Przyjmowano do obliczeń jako znane wartości, przybliżoną energię aktywacji  $E_{ak}$  dla poszczególnych relaksacji oraz odpowiadające im temperatury wyznaczające punkty maksymalne spektrum TSDC, to jest temperatury  $T_{mk}$  i wartości maksymalne gęstości prądu  $J_{mk} = J(T_{mk})$  odczytywane z danych pomiarowych. Na tej podstawie określano

## VI Lubuska Konferencja Naukowo-Techniczna – i-MITEL 2010

obszary przeszukiwań parametrów przez algorytm ewolucyjny dla poszczególnych relaksacji.

Wartości czasu relaksacji  $\tau_0$ , i mocy polaryzacji  $P_0$  dla każdego procesu relaksacyjnego wyznaczano zgodnie z zależnościami

$$(6) \quad \tau_0 = \frac{kT_m^2}{bE_a} \exp\left(-\frac{E_a}{kT_m}\right)$$

$$(7) \quad P_0 = J_m \tau_0 \exp\left(\frac{E_a}{kT_m}\right) \exp\left(\frac{1}{T_0 b} \int_{T_0}^{T_m} \exp\left(-\frac{E_a}{kT'}\right) dT'\right)$$

### **Badania symulacyjne**

Wadą algorytmów ewolucyjnych jest brak gwarancji, że osiągnie się optimum globalne i nie zakończy się poszukiwania rozwiązania w optimum lokalnym. Istnieje jednak możliwość doboru parametrów algorytmu ewolucyjnego do potrzeb konkretnego zadania. W celu weryfikacji zastosowanej metody oraz do wyboru parametrów algorytmu w zadaniach separacji TSDC przeprowadzono badania symulacyjne.

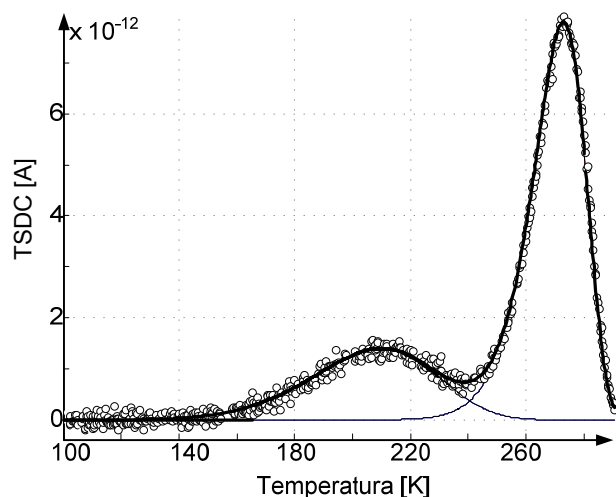
Spektra testowe dla znanych parametrów procesów relaksacyjnych utworzono wg zależności (4). Szum o rozkładzie normalnym dodany do krzywej teoretycznej miał na celu symulację rzeczywistych warunków pomiarowych.

*Tabela 1 Rzeczywiste i estymowane parametry TSDC*

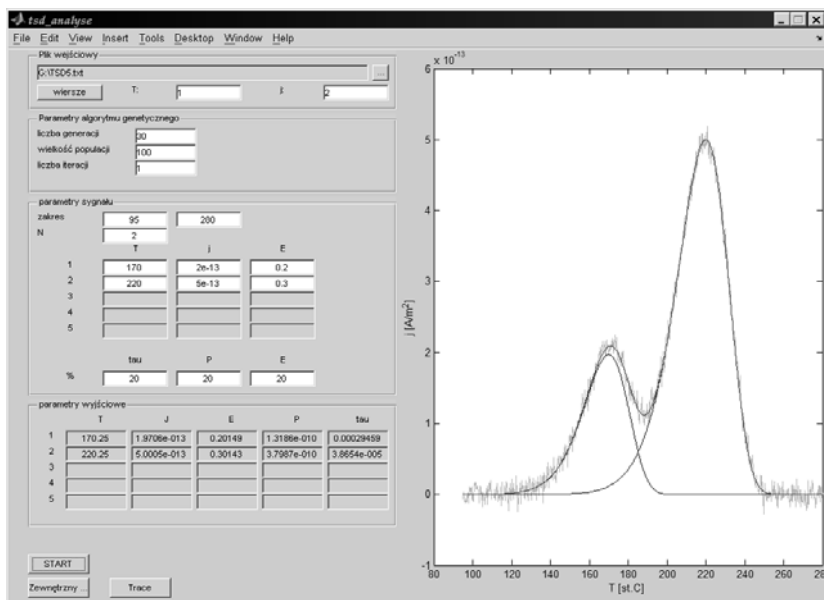
Parametry	Relaksacja 1	Relaksacja 2
<i>Symulowane</i>		
<i>E<sub>a</sub></i>	<i>6.900 e-001</i>	<i>1.600 e-001</i>
<i>P<sub>0</sub></i>	<i>4.169 e-009</i>	<i>1.710 e-009</i>
<i>τ<sub>0</sub></i>	<i>3.825 e-011</i>	<i>7.716 e-002</i>
<i>Estymacja</i>		
<i>E<sub>a</sub></i>	<i>6.902 e-001</i>	<i>1.597 e-001</i>
<i>P<sub>0</sub></i>	<i>4.169 e-009</i>	<i>1.712 e-009</i>
<i>τ<sub>0</sub></i>	<i>3.833 e-011</i>	<i>7.941 e-002</i>

Tabela 1 zawiera wyniki estymacji parametrów symulowanej krzywej TSDC. Przyjęto następujące parametry algorytmu: wielkość populacji – 100, liczba populacji – 30,

metoda selekcji – normalizowana geometryczna, metoda krzyżowania – arytmetyczna, prawdopodobieństwo krzyżowania – 0.6, prawdopodobieństwo mutacji – 0.05. Do obliczeń zastosowano bibliotekę programu Matlab, (Algorithms for Optimization Toolbox - GAOT) [13]. Biblioteka zawiera specjalizowane funkcje genetyczne zarówno dla reprezentacji binarnej jak i zmiennoprzecinkowej. Aplikacja wymaga zdefiniowania funkcji przystosowania, określenia zakresów poszukiwań poszczególnych parametrów, sposobu zakończenia obliczeń, określenia wielkości populacji, wyboru typu selekcji, mutacji i krzyżowania oraz ich parametrów.



Rys 3. Krzywa symulowana oraz jej aproksymacja wyliczona metodą ewolucyjną



Rys.4. Panel aplikacji do analizy spectrum TSDC metodą ewolucyjną

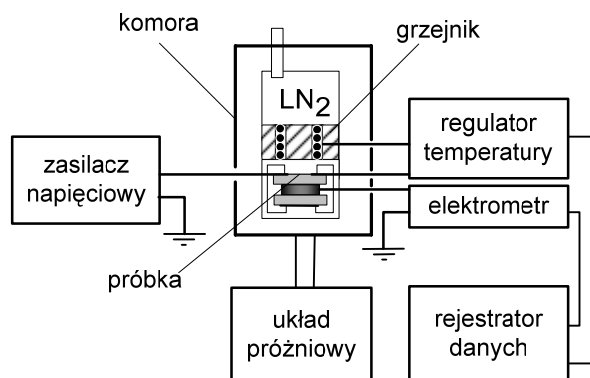
## VI Lubuska Konferencja Naukowo-Techniczna – i-MITEL 2010

### **Implementacja algorytmu ewolucyjnego**

Na bazie biblioteki GAOT stworzono aplikację do analizy TSDC metodą ewolucyjną. Program komunikuje się z użytkownikiem za pomocą przejrzystego interfejsu graficznego pozwalającego na import danych pomiarowych TSDC, wybór parametrów algorytmu ewolucyjnego oraz obserwację wyników estymacji. Po uruchomieniu programu należy wprowadzić dane pomiarowe z pliku. Po wczytaniu danych na wykresie zostanie wykreślony przebieg krzywej TSDC (rys. 4). Następnie należy wybrać w panelu parametry spektrum: ilość relaksacji, charakterystyczne punkty krzywej i parametry algorytmu. Po wybraniu przycisku 'Start' uruchomiony zostanie algorytm ewolucyjny. Po zakończeniu obliczeń na wykresie narysowane zostaną krzywe poszczególnych relaksacji oraz ich suma, która stanowi aproksymację krzywej pomiarowej.

### **Pomiary eksperymentalne**

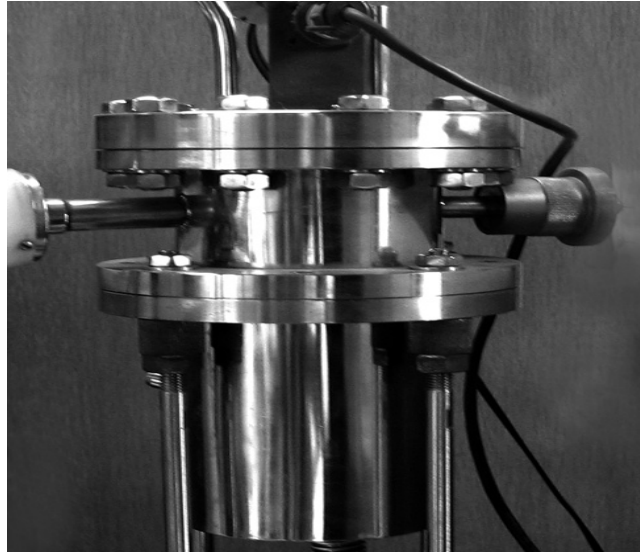
Badania wykonano na próbce szerokopasmowego półprzewodnika II-IV:  $Cd_{1-x}Mn_xTe$  domieszkowanego indem. Z pomiarów fotoluminescencji i optycznej absorpcji określono zawartość manganu na  $x = 0.15$ . Badany materiał posiada wystarczająco dużą rezystywność aby można było wykorzystać metodę prądów termicznie stymulowanej depolaryzacji do badania własności elektronowych pułapek w tym materiale.



Rys.5. Schemat układu pomiarowego

Widmo TSDC mierzono w zakresie temperatur od  $100 K$  do  $300 K$ . System pomiarowy pokazano na rysunku 5 [9]. Próbkę umieszczono w próżniowej komorze pomiarowej, pomiędzy dwoma elektrodami. Żądana wartość różnicy potencjałów pomiędzy elektrodami była ustawiana tak, aby wymuszające pole elektryczne było rzędu  $100 kV/m$ .

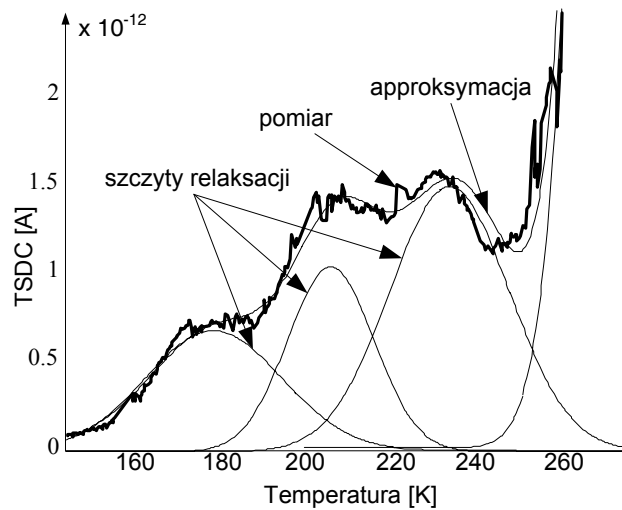
Po trzech minutach polaryzacji w temperaturze pokojowej, próbka była gwałtownie schładzana ciekłym azotem do temperatury około  $80 K$ . Podczas pomiarów prądów termicznie stymulowanej depolaryzacji, temperatura próbki narastała ze stałą prędkością  $4 K/min$ .



Rys.6. Komora pomiarowa układu TSDC

### **Separacja procesów relaksacyjnych**

W celu separacji pojedynczych procesów relaksacyjnych i określenia ich parametrów ze zmierzonego widma TSDC, wykorzystano algorytm ewolucyjny. Otrzymane wyniki estymacji przedstawiono na rysunku 7. Odpowiadające tym szczytom parametry procesów relaksacyjnych przedstawiono w tabeli 2.



Rys.7. Średnie wartości estymacji parametrów relaksacji TSDC przy zastosowaniu algorytmu ewolucyjnego

Program ewolucyjny [10] został wykorzystany w celu określenia parametrów pojedynczych procesów relaksacyjnych. Zaimplementowano procedury numeryczne algorytmu ewolucyjnego do wyznaczania optymalnego rozwiązania. Jako kryterium selekcji (funkcję przystosowania)



## **VI Lubuska Konferencja Naukowo-Techniczna – i-MITEL 2010**

wybrano minimalny błąd aproksymacji. Otrzymane parametry relaksacyjne przedstawiono w tabeli 2.

*Tabela 2. Analiza widma TSDC z wykorzystaniem algorytmu ewolucyjnego*

	<i>Relaks.1</i>	<i>Relaks.2</i>	<i>Relaks.3</i>	<i>Relaks.4</i>
$E_a$	<i>2.5 e-01</i>	<i>2.8 e-1</i>	<i>4.5 e-1</i>	<i>7.8 e-1</i>
$P_0$	<i>0.30 e-09</i>	<i>0.88 e-9</i>	<i>0.85 e-9</i>	<i>0.90 e-8</i>
$\tau_0$	<i>1.15 e-5</i>	<i>3.6 e-5</i>	<i>3.5 e-8</i>	<i>2.0 e-12</i>

### **Podsumowanie**

Z przytoczonych przykładów obliczeń widać, że algorytm ewolucyjny może być uznany za skuteczne narzędzie przy identyfikacji parametrów separowanych procesów relaksacyjnych TSDC opisanych zależnością (5). Metoda wymaga wstępnych badań analitycznych w celu określenia możliwych obszarów poszukiwań. Analiza prądu TSDC przy pomocy algorytmu ewolucyjnego, daje porównywalne rezultaty z innymi metodami separacji, co pokazano w tabeli 3. W pracy przeanalizowano przypadek symulowany i rzeczywisty

*Tabela 3. Energia w eV potrzebna do uwolnienia „spużakowanych” nośników ładunku otrzymana metodami DLTS, TSDC i PL*

<i>Label</i>	<i>DLTS</i>	<i>TSDC</i>	<i>PL</i>
$E_{a1}$	-	<i>0.25</i>	<i>0.10</i>
$E_{a2}$	-	<i>0.28</i>	<i>0.25</i>
$E_{a3}$	<i>0.48</i>	<i>0.45</i>	<i>0.40</i>
$E_{a4}$	<i>0.76</i>	<i>0.78</i>	-

### **LITERATURA**

- [1] Groszainer L. J., A Note on the Analysis of FirstOrder Glow Curves, *J. Appl. Phys.*, vol.24 (1953), 1306
- [2] Chen R., Glow Curves with General Order Kinetics, *J. Appl. Phys.*, vol.40 (1969), 570,
- [3] Bucci C., Fieschi R., Guidi G., Ionic thermocurrents in dielectrics, *Phys. Rev.*, vol.148 (1966), 816
- [4] Cresswell R. A., Perlman M. M., Thermal currents from coronacharged carnauba wax electrets, *J. Appl. Phys.*, vol.42 (1971), 2645
- [5] Cresswell R. A., Perlman M. M., Thermal currents from corona charged Mylar, *J. Appl. Phys.*, vol.41 (1970), 2365-2375

- [6] Vanderschueren J., Gasiot J., Field-induced thermally stimulated currents in Thermally Stimulated Relaxation in Solids, *Springer-Verlag*, Berlin (1979), 135-223
- [7] Cowell T. A. T., Woods J., The evaluation of thermally stimulated current curves, *Brit. J. Appl. Phys.*, (1967)
- [8] Gubanski A., Sharyapov M., Sezonov Y., The Activation Distribution of Polyethylene Terephthalate Film, *Mat. Sci.*, vol XVI (1990), 221-224
- [9] Gubański A., Macalik B., *Bulletin of the Polish Academy of Sciences, Technical Sciences*, vol. 35 (1987), no. 9-10, 537-541
- [10] Michalewicz Z., *Algorytmy genetyczne + struktury danych = programy ewolucyjne*, PWN, Warszawa (1999)
- [11] Goldberg D. E., *Algorytmy genetyczne i ich zastosowania*, WNT, Warszawa (1995)
- [12] Wrobel J. M., Gubański A., Popko E., Rezmer J., Becla P., Thermally stimulated current in high resistivity Cd<sub>0.85</sub>Mn<sub>0.15</sub>Te doped with indium. *J. Appl. Phys.*, vol. 103 (2008), nr 6, 063720\_1-063720\_4
- [13] Houck C., Joines J., Kay M., A Genetic Algorithm for Function Optimization: A Matlab Implementation, *Technical Report: NCSU-IE-TR-95-09, North Carolina State University*, (1995)

---

**Autorzy:**

dr inż. Adam Gubański, Politechnika Wroclawska, Instytut Podstaw Elektrotechniki i Elektrotechnologii, wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, E-mail: adam.gubanski@pwr.wroc.pl;  
 dr inż. Jacek Rezmer, Politechnika Wroclawska, , Instytut Podstaw Elektrotechniki i Elektrotechnologii, wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, E-mail: jacek.rezmer@pwr.wroc.pl;  
 Krzysztof Leśniak, Politechnika Wroclawska, Wydział Elektryczny, wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, E-mail: 145522@student.pwr.wroc.pl