

Adam GUBAŃSKI¹, Jacek REZMER¹

Politechnika Wrocławska, Wydział Elektryczny,
Katedra Podstaw Elektrotechniki i Elektrotechnologii (1)

Wyznaczanie parametrów relaksacyjnych z zastosowaniem metod inteligencji obliczeniowej

Streszczenie: Na podstawie pomiarów prądów termicznie stymulowanej depolaryzacji (TSDC) można określać właściwości materiałów elektrotechnicznych. Złożone spektrum prądu depolaryzacji czyni analizę trudną ze względu na konieczność separacji nakładających się zjawisk relaksacyjnych. Parametry poszczególnych procesów można wyznaczyć stosując metody inteligencji obliczeniowej. W pracy przedstawiono algorytmy ewolucyjne i rojowe jako efektywne metody analizy złożonych widm TSDC.

Słowa Kluczowe: analiza TSDC, algorytmy ewolucyjne, algorytmy rojowe

Wprowadzenie

Analiza TSDC wykorzystująca zjawisko relaksacji dipolowych służy do wyznaczania ważnych parametrów materiałów elektrotechnicznych. Należy do nich między innymi energia aktywacji, czas relaksacji i rozkład czasów relaksacji. Ponieważ mierzone widmo TSDC jest wynikiem jednoczesnego występowania kilku takich procesów, w rezultacie widmo prądu jest złożone i dlatego jego analiza wymaga stosowania zaawansowanych metod matematycznych. Problem separacji krzywych poszczególnych procesów relaksacji okazuje się być w praktyce trudny do rozwiązania przy korzystaniu z metod analitycznych i numerycznych dotąd stosowanych.

W pracy proponuje się wykorzystanie do analizy sygnałów TSDC algorytmy tzw. inteligencji obliczeniowej (ang. computational intelligence, CI). Inteligencja obliczeniowa bardzo intensywnie rozwija się w ostatnich latach i pomimo swojej krótkiej historii zawiera wiele opracowanych już metod. Metody CI są stosowane w tych przypadkach, w których tradycyjne postępowanie jest nieskuteczne. Inspirowane inteligencją dostrzeganą w naturze, algorytmy te mimo niezwykle prostych reguł przetwarzania są skuteczne i efektywne, a do pewnego stopnia nieprzewidywalne. Do grupy metod CI należą algorytmy ewolucyjne (ang. Evolution algorithm, EA) oraz algorytmy rojowe (ang. particle swarm optimization, PSO).

Obliczenia ewolucyjne to klasa obliczeń inspirowanych teorią doboru naturalnego i dziedziczenia. Do opisu EA wykorzystuje się terminy zapożyczone z genetyki. Algorytm bazuje na populacji, która składa się ze zbioru osobników reprezentujących rozwiązanie. Dowolny osobnik zbudowany jest z zespołu chromosomów, z których każdy jest uporządkowanym zbiorem genów. Potencjalne rozwiązanie zadania, reprezentuje genotyp, a ocena osobników jest przeprowadzana w oparciu o funkcję przystosowania.

Metody rojowe powstały w wyniku inspiracji biologicznej, której źródłem były stada zwierząt (ławice ryb, roje owadów). Badania dowiodły, iż zbiorowe zachowania zwierząt są zarządzane przez pewne reguły. Osobniki poruszają się w wielowymiarowej przestrzeni poszukiwań, a ich zachowanie zależy od wymiany informacji w roju (doświadczenia, wiedzy). Ogólny algorytm PSO polega na poszukiwaniu rozwiązania

w N-wymiarowej przestrzeni, gdzie każdy osobnik stanowi rozwiązanie i jest reprezentowany przez N-wymiarowy wektor. Metoda polega na wybraniu takiego osobnika, który reprezentuje najlepsze rozwiązanie.

Obie metody wymagają zaprojektowania odpowiedniej funkcji przystosowania, która pozwala na efektywną i dokładną estymację parametrów relaksacji. Do weryfikacji i oceny poprawności obliczeniowej proponowanych metod, wyznaczano parametry symulowanej złożonej krzywej TSDC. Następnie przeprowadzono badania w oparciu o pomiary rzeczywiste.

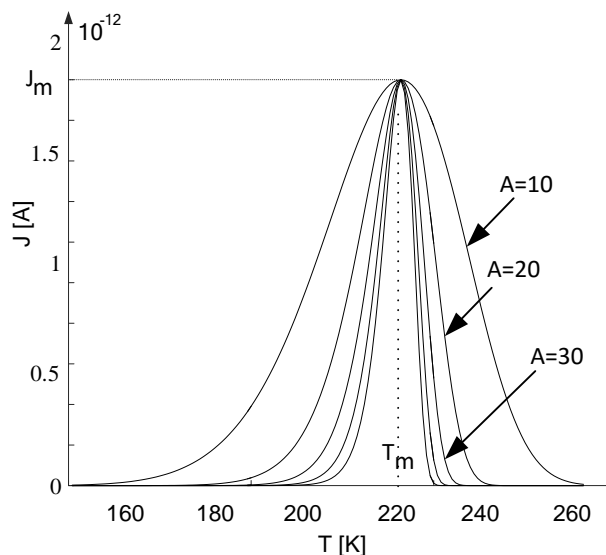
Termicznie stymulowana depolaryzacja (TSDC)

Prądy termicznie stymulowanej depolaryzacji są związane ze zmianą entropii dielektryków podczas przejścia ze stanu mniej uporządkowanego elektrycznie. Gdy materiały zawierają dipole, czynnikiem porządkującym jest działanie pola elektrycznego podczas polaryzacji. Czynnikiem burzącym uporządkowanie dipoli są ruchy cieplne. Warunki równowagi tych 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 odpowiednich wartościach natężenia pola elektrycznego uzyskać mieralne wartości prądu depolaryzacji. Zachowanie się polarnych molekuł w ciele stałym opisuje model Debye'a. Prądy termicznie stymulowanej depolaryzacji występują przy ogrzewaniu spolaryzowanej próbki. Przebieg prądu relaksacji J przy zmianie temperatury T określa zależność:

$$(1) \quad J(T) = \frac{P_0}{\tau_0} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \exp\left(-\frac{1}{T_0 b} \int_{T_0}^T \exp\left(-\frac{E}{kt}\right) dt\right)$$

k – stała Boltzmanna

Parametry charakteryzujące badany materiał można określić na podstawie wartości maksymalnych prądu separowanych widm jak na rysunku 1.



Rys. 1. Spectrum TSDC pojedynczego procesu relaksacji i różnych energii aktywacji.

IX Konferencja Naukowo-Techniczna – i-MITEL 2016

Po wyznaczeniu wartości J_m i T_m oblicza się parametry takie jak energia aktywacji

$$(2) \quad E = AkT_m$$

Początkowy czas relaksacji

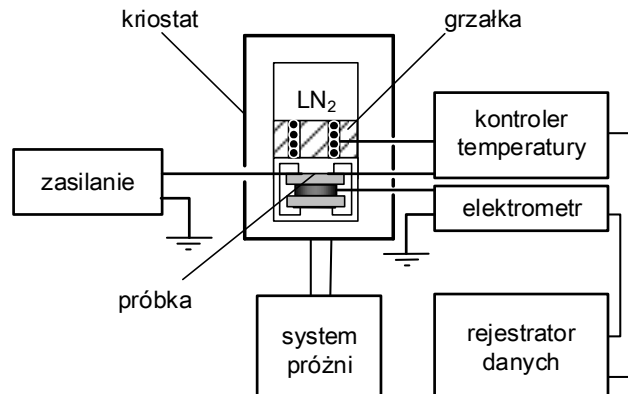
$$(3) \quad \tau_0 = \frac{kT_m^2}{bE} \exp\left(-\frac{E}{kT_m}\right)$$

oraz początkowa wartość aktywacji

$$(4) \quad P_0 = J_m \tau_0 \exp\left(\frac{E}{J_m k T_m}\right) \exp\left(\frac{1}{T_0 b} \int_{T_0}^{T_m} \exp\left(-\frac{E}{kt}\right) dt\right)$$

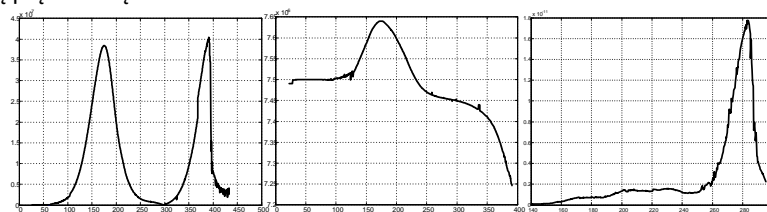
Pomiar widma TSDC

Pomiary wykonano na próbkach półprzewodników i dielektryków. Badany materiał posiadał wystarczająco dużą rezystywność aby można było wykorzystać metodę prądów termicznie stymulowanej depolaryzacji do badania własności elektronowych pułapek w tych materiałach. System pomiarowy pokazano na rysunku 2.



Rys. 2. Układ pomiarowy.

Widmo TSDC mierzy się w zakresie temperatur od 100 K do 400 K . Próbkę umieszczoną była 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 . Próbkę jest schładzana ciekłym azotem poprzez układ zimnego palca. Podczas pomiarów temperatura próbki narastała ze stałą prędkością 4 K/min .



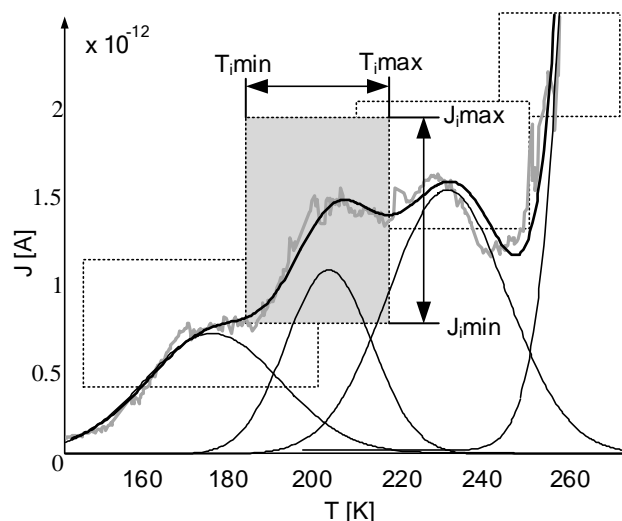
Rys. 3. Przykładowe zmierzone krzywe TSDC dla różnych materiałów a) szerokopasmowy półprzewodnik II-IV: $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ domieszkowany indem, b i c) masa warystorowa $\text{ZnO}:\text{Bi}_2\text{O}_3$ z różnymi odmianami polimorficznymi tlenku bizmutu α i γ .

Funkcja przystosowania

Funkcja przystosowania dla badanych algorytmów jest analogiczna i ocenia kolejne rozwiązania otrzymywane w krokach iteracji obliczając błąd aproksymacji krzywej zmierzonej $J(T)$ i wyznaczonej teoretycznie. Minimum błędu aproksymacji stanowi kryterium wyboru najlepszego rozwiązania.

$$(5) \quad \varepsilon = \sum_{T_{min}}^{T_{max}} [\hat{J}(T) - J(T)]^2$$

W proponowanym podejściu stosowano dwa różniące się sposoby określania obszarów poszukiwań rozwiązania. Pierwszy zakłada znaną liczbę procesów relaksacji. Pozwala to na bardziej precyzyjne określenie zakresów wartości szukanych parametrów. Na rysunku 4 zaznaczono zadane obszary poszukiwań dla założonych czterech procesów relaksacji. Taki sposób dotyczy pomiarów pozwalających określić liczbę relaksacji oraz w przybliżeniu odpowiadające im wartości maksymalne prądu $J(T)$.



Rys. 4. Ilustracja zadanych obszarów poszukiwań dla czterech procesów relaksacji.

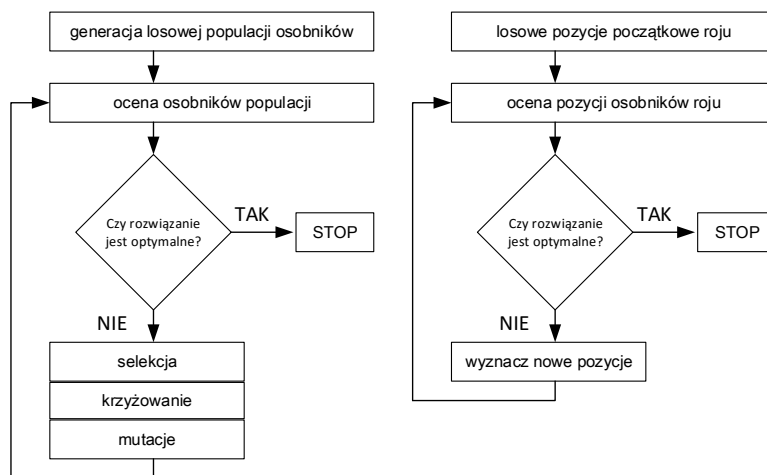
Drugi sposób dotyczy przypadków, gdy kolejne relaksacje są bardzo bliskie i trudne jest określenie ich liczby, szczególnie dla małych wartości energii aktywacji, powodujących rozmycie krzywej wypadkowej. Zakłada się nieznaną liczbę procesów relaksacyjnych oraz duży obszar możliwych rozwiązań dla parametrów. Liczba procesów relaksacyjnych, na które składa się zmierzone widmo TSDC jest jednym z parametrów szukanych przez algorytmy.

Algorytm ewolucyjny

Algorytm ewolucyjny należy do klasy metod numerycznych, które naśladują zasady ewolucji w naturze. Stanowi on rozszerzenie klasycznego algorytmu genetycznego, w którym chromosomy są reprezentowane tylko przez łańcuchy binarne, a transformacje polegają na binarnych operacjach mutacji i krzyżowania. Algorytmy ewolucyjne korzystają ze złożonych struktur danych oraz rozszerzonych i zmodyfikowanych operatorów, odpowiednich do wybranej struktury. Jest to algorytm probabilistyczny, który generuje w każdym kroku nową populację osobników. Każdy osobnik odwzorowuje

IX Konferencja Naukowo-Techniczna – i-MITEL 2016

możliwe rozwiązanie problemu. Rozwiązania otrzymywane w kolejnych krokach iteracji oceniane są na podstawie funkcji przystosowania. Każda nowa populacja tworzona jest przez selekcję i krzyżowanie osobników najlepiej przystosowanych. Wybrane osobniki nowej populacji podlegają dodatkowo mutacjom, zapobiegającym zatrzymaniu algorytmu przed znalezieniem najlepszego rozwiązania. Przy odpowiedniej strukturze danych i funkcji przystosowania algorytm jest zbieżny, a najlepszy osobnik reprezentuje rozwiązanie optymalne.



Rys. 5 .Schematy działania algorytmów ewolucyjnego i rojowego.

W ogólnym schemacie wykorzystania algorytmu ewolucyjnego przy rozwiązywaniu rzeczywistych zadań wyróżnia się dwa etapy. Pierwszy polega na opisanu problemu w terminologii używanej przez algorytm i wybraniu odpowiedniej struktury danych oraz funkcji przystosowania. Drugi etap to poszukiwanie rozwiązania, czyli ocena populacji oraz transformacje genetyczne. Faza poszukiwania zostaje zakończona w momencie gdy zostało znalezione satysfakcjonujące rozwiązanie lub nastąpił warunek końca algorytmu, np. przekroczona została założona liczba iteracji.

Algorytm rojowy

Algorytm rojowy jest metodą opartą na inteligencji roju. Układ jaki tworzą grupy zwierząt podczas poruszania się w celu uniknięcia drapieżników, poszukiwania pożywienia lub gniazda jest synchroniczny i bezkolizyjny, często towarzyszą mu nagłe zmiany kierunków i przegrupowania w optymalną formację. Badania dowiodły, że rojowe zachowania zwierząt są warunkowane przez określone reguły. Każdy osobnik roju tworzy własne doświadczenie posługując się instynktem, a postępowanie każdego z nich zależy od stanu grupy. Podstawą funkcjonowania roju jest wymiana informacji, doświadczenia i wiedzy, przez co możliwa jest współpraca wszystkich osobników. Ogólny schemat algorytmu przedstawia rysunek 5.

Wyjaśnienia wymaga sposób poruszania się osobników roju w wielowymiarowym obszarze poszukiwań. Każdy osobnik porusza się w kierunku najlepszego rozwiązania znalezionej przez siebie oraz lidera roju. W pierwszym kroku iteracji położenie i prędkość poruszania się osobników są losowe. W kolejnych krokach pozycja każdego

osobnika jest korygowana przez stochastyczna prędkość która zależy od odległości do najlepszego dotąd znalezionej rozwiązania własnego rozpatrywanego osobnika i lidera wg zależności w zapisie wektorowym:

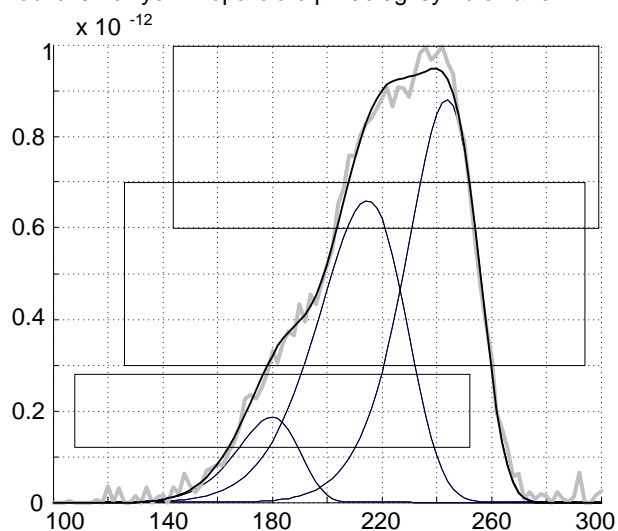
$$(6) \quad \mathbf{V}_i(k+1) = \mathbf{V}_i(k) + C_1 \mathbf{R}_{1i} [\mathbf{P}_i(k) - \mathbf{X}_i(k)] + C_2 \mathbf{R}_{2i} [\mathbf{S}(k) - \mathbf{X}_i(k)]$$

$$(7) \quad \mathbf{X}_i(k+1) = \mathbf{X}_i(k) + \mathbf{V}_i(k+1)$$

gdzie: \mathbf{V}_i – prędkość i-tego osobnika, \mathbf{X}_i – położenie, C_1, C_2 – współczynniki przyspieszenia, \mathbf{P}_i – najlepsze położenie i-tego osobnika, \mathbf{S} – najlepsze położenie lidera roju. $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ – liczby losowe z przedziału $<0,1>$.

Separacja procesów relaksacyjnych

W celu sprawdzenia poprawności działania oraz efektywności proponowanych algorytmów w rozwiązywaniu problemów separacji TSDC przeprowadzono szereg eksperymentów obliczeniowych w oparciu o przebiegi symulowane.

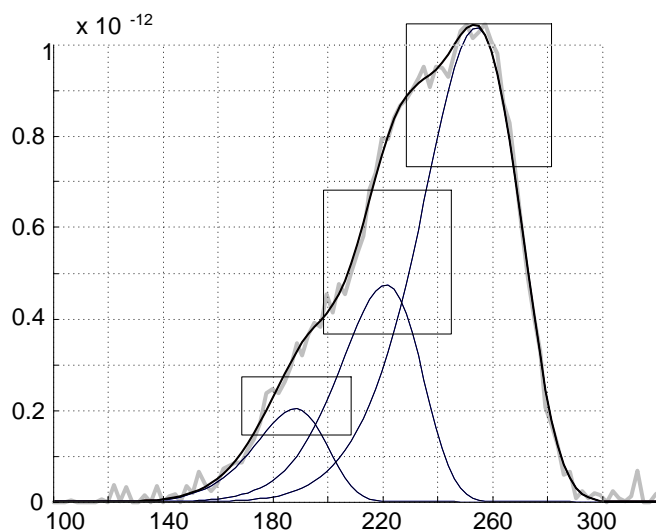


Rys. 6 .Wynik separacji procesów relaksacji metodą ewolucyjną.

Tab. 1 .Wyniki separacji procesów relaksacji metodą ewolucyjną. Zadane obszary poszukiwań oznaczono na rysunku 6, liczbę procesów wyznacza algorytm z zakresu od 1 do 5.

	Nr	J_m, A	T_m, K	E, eV
Symulowane	1	2.000e-13	1.800e+02	2.327e-01
	2	5.000e-13	2.100e+02	2.714e-01
	3	10.00e-13	2.400e+02	3.102e-01
Wyznaczone	1	1.865e-13	1.799e+02	2.308e-01
	2	6.571e-13	2.146e+02	2.325e-01
	3	8.807e-13	2.437e+02	3.763e-01

Tabela nr 1 zawiera wyniki przeprowadzonej estymacji krzywej TSDC próbki Cd1-xMnxTe domieszkowanej indem przy zastosowaniu algorytmu ewolucyjnego. W wyniku analizy algorytm określił energię aktywacji trzech poziomów pułapkowych w badanym półprzewodniku.



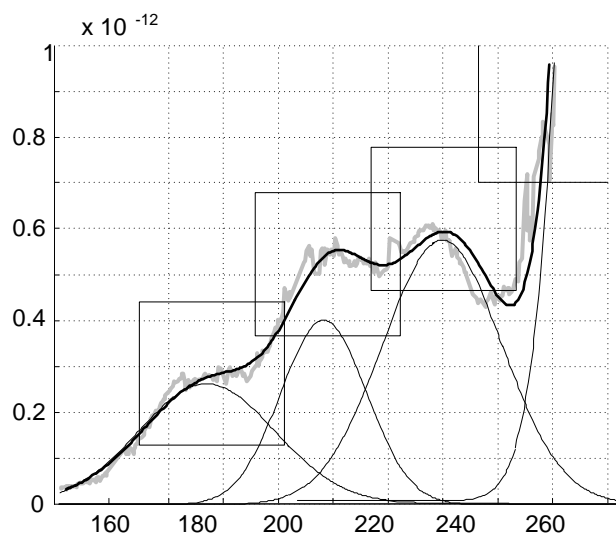
Rys. 7 .Wynik separacji procesów relaksacji symulowanego TSDC metodą rojową.

Tab. 2 .Wyniki separacji procesów relaksacyjnych metodą rojową. Zadane obszary poszukiwań oznaczono rysunku 6, liczbę procesów przyjęto jako znaną i równą 3.

	Nr	J_m, A	T_m, K	E, eV
Symulowane	1	2.000e-13	1.800e+02	2.327e-01
	2	5.000e-13	2.100e+02	2.714e-01
	3	10.00e-13	2.400e+02	3.102e-01
Wyznaczone	1	1.942e-13	1.799e+02	2.211e-01
	2	4.519e-13	2.093e+02	2.655e-01
	3	9.876e-13	2.391e+02	2.883e-01

Analiza zmierzonych TSDC

Zmierzone widma TSDC poddano analizie wykorzystującej proponowane metody. Algorytm ewolucyjny oraz rojowy został zastosowany w celu określenia parametrów odseparowanych procesów relaksacyjnych. Otrzymane parametry relaksacyjne pozwoliły na separację złożonego widma TSDC na trzy mono energetyczne procesy relaksacyjne. Na tej podstawie określono energie aktywacji poziomów pułpkowych w badanym półprzewodniku $Cd_{1-x}Mn_xTe$ domieszkowanego indem 0.22 eV, 0.26 eV i 0.29 eV. Analiza mono energetycznego widma TSDC pozwala na określenie innych parametrów relaksacyjnych takich jak czas relaksacji, koncentracja domieszki itp. Określenie tych parametrów jest istotne ze względu na późniejsze zastosowanie techniczne badanego materiału.



Rys. 8 .Wynik separacji procesów relaksacji zmierzonego widma TSDC metodą ewolucyjną.

Podsumowanie

Z przedstawionych przykładów obliczeń widać, że algorytmy inteligencji obliczeniowej mogą być uznane za skuteczne narzędzia do analizy parametrów złożonych procesów relaksacyjnych TSDC. Metody wymagają określenia możliwych obszarów poszukiwań. W pracy przeanalizowano przypadki widm symulowanych oraz z rzeczywistych pomiarów.

Bibliografia

1. Cresswell R. A., Perlman M. M., *Thermal currents from coronacharged carnauba wax electrets*, J. Appl. Phys., vol.42 (1971), 2645
2. Creswell R. A., Perlman M. M., *Thermal currents from corona charged Mylar*, J. Appl. Phys., vol.41 (1970), 2365-2375
3. Gubanski A., Sharyapov M., Sezonov Y., *The Activation Distribution of Polyethylene Terephthalate Film*, Mat. Sci., vol XVI (1990), 221-224
4. Gubański A., Macalik B., Bulletin of the Polish Academy of Sciences, Technical Sciences, vol. 35 (1987), no. 9-10, 537-541
5. Goldberg D. E., *Algorytmy genetyczne i ich zastosowania*, WNT, Warszawa (1995)
6. Wrobel J. M., Gubański A., Popko E., Rezmer J., Becla P., *Thermally stimulated current in high resistivity Cd_{0.85}Mn_{0.15}Te doped with indium*. J. Appl. Phys., vol. 103 (2008), nr 6, 063720_1- 063720_4
7. J. Kennedy and R. C. Eberhart, *Swarm Intelligence*, Morgan Kaufmann Publishers, San Francisco, Calif, USA, 2001

Autorzy: dr inż. Adam Gubański; Katedra Podstaw Elektrotechniki i Elektrotechnologii, Wydział Elektryczny, Politechnika Wrocławska, ul. Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, e-mail: adam.gubanski@pwr.edu.pl; dr hab. inż. Jacek Rezmer; Katedra Podstaw Elektrotechniki i Elektrotechnologii, Wydział Elektryczny, Politechnika Wrocławska, ul. Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, e-mail: jacek.rezmer@pwr.wedu.pl