

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. (Wyznaczanie parametrów relaksacyjnych z zastosowaniem metod inteligencji obliczeniowej)

Abstract: Summary: Based on TSDC analysis it's possible to determine the properties of electrotechnical materials. The complex spectrum of depolarization current makes this analysis difficult, considering the necessity of separating the overlapping relaxation sets. The parameters of individual processes can be determined by using computational intelligence methods. In this thesis, evolutionary algorithms and particle swarm algorithms are proposed as effective methods of analyzing complex TSDC spectrums. (**Determination relaxation parameters by using computational intelligence methods**)

Słowa kluczowe: analiza TSDC, algorytmy ewolucyjne, algorytmy rojowe

Key words: TSDC analysis, evolutionary algorithm, particle swarm algorithm

Wstęp

Analiza TSDC wykorzystująca zjawisko relaksacji dipolowych służy do wyznaczania ważnych parametrów materiałów elektrotechnicznych. Należy do nich między innymi energia aktywacji, czas relaksacji oraz 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 algorytmów 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, i do pewnego stopnia nieprzewidywalne. Do grupy metod CI należą między innymi algorytmy ewolucyjne (ang. evolution algorithm, EA) oraz algorytmy rojowe (ang. particle swarm optimization algorithm, PSO).

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

Algorytmy rojowe powstały w wyniku inspiracji biologicznej, której źródłem były obserwacje zachowań stadnych zwierząt (ławic ryb, rojów owadów). Badania dowiodły, iż zbiorowe zachowania zwierząt są zarządzane przez pewne reguły. Osobniki poruszają się w wielowymiarowej przestrzeni poszukiwań, a ich trajektorie ruchu zależą 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 uporządkowanego do 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 mierzalne 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:

$$(1) \quad J(T) = \frac{P_0}{\tau_0} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \exp\left(-\frac{1}{\tau_0 b} \int_{T_0}^T \exp\left(-\frac{E}{kT'}\right) dT'\right)$$

k – stała Boltzmana

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

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

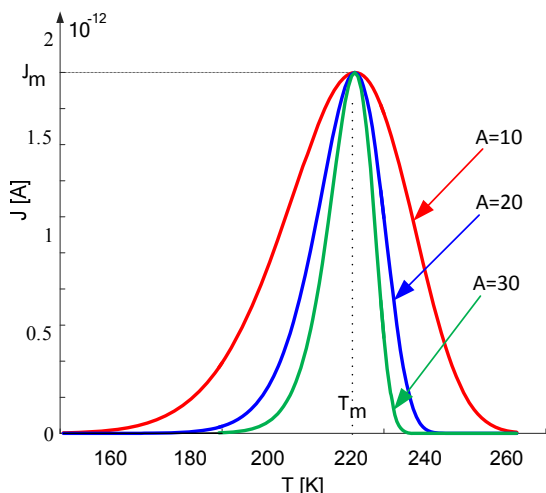
$$(2) \quad E = AkT_m$$

Początkowy czas relaksacji

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

oraz początkowa wartość aktywacji

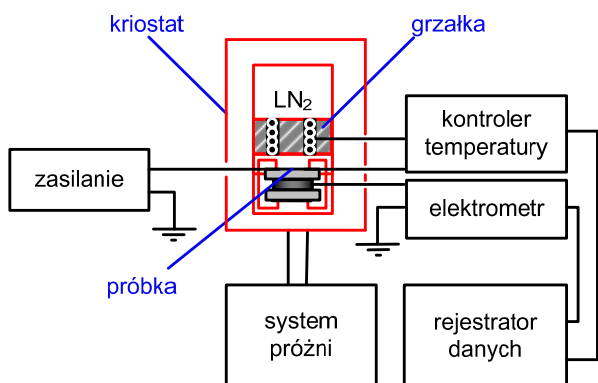
$$(4) P_0 = J_m \tau_0 \exp\left(\frac{E}{J_m k T_m}\right) \exp\left(\frac{1}{T_0 b} \int_{T_0}^{T_m} \exp\left(-\frac{E}{k T'}\right) dT'\right)$$



Rys. 1. Widmo TSDC pojedynczego procesu relaksacji dla różnych energii aktywacji

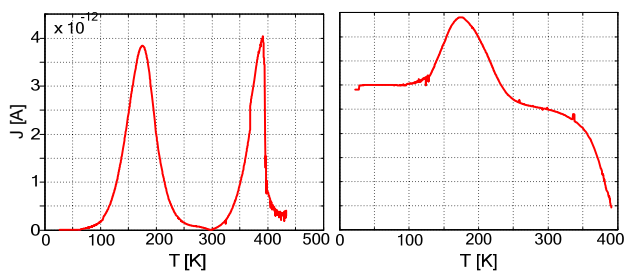
Pomiar widma TSDC

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 mierzono w zakresie temperatur od 100 K do 400 K. Próbkę umieszczano w próżniowej komorze pomiarowej, pomiędzy dwoma elektrodami. Żądaną wartość różnicy potencjałów pomiędzy elektrodami ustawiano tak, aby wymuszające pole elektryczne było rzędu 100 kV/m. Mierzoną próbkę schładzano ciekłym azotem poprzez układ zimnego palca. Podczas pomiarów temperatura próbki narastała ze stałą prędkością 4 K/min.



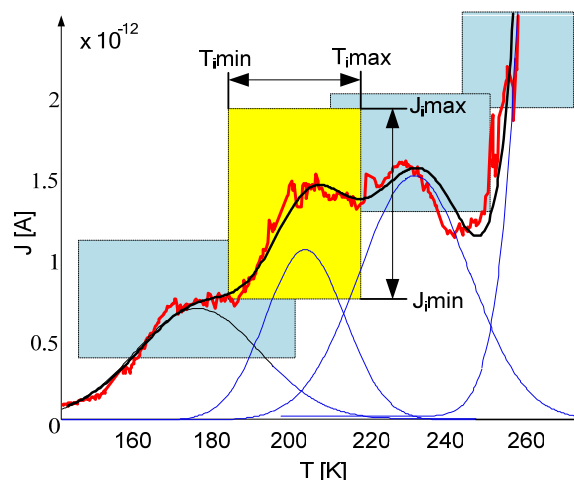
Rys. 3. Przykładowe zmierzone krzywe TSDC dla różnych materiałów a) szerokopasmowy półprzewodnik II-IV: $Cd_{1-x}Mn_xTe$ domieszkowany indem, b i c) masa warystorowa ZnO: Bi_2O_3 z różnymi odmianami polimorficznymi tlenku bizmutu α i γ .

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.

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

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 $J(T)$.



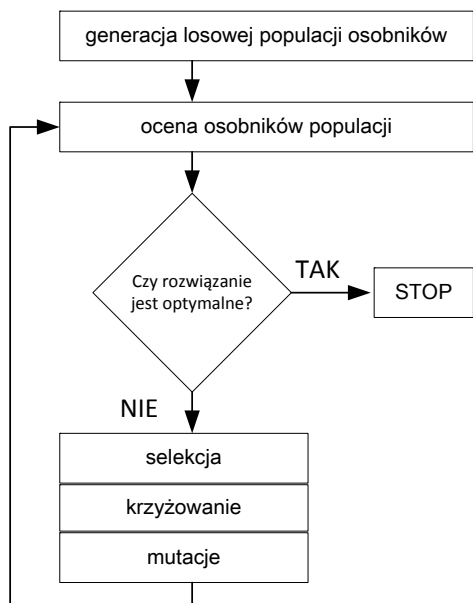
Rys. 4. Ilustracja zadanych obszarów poszukiwań dla czterech procesów relaksacji

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 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 .Schemat działania algorytmu ewolucyjnego

W ogólnym schemacie wykorzystania algorytmu ewolucyjnego przy rozwiązywaniu rzeczywistych zadań wyróżnia się dwa etapy. Pierwszy polega na opisanie 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

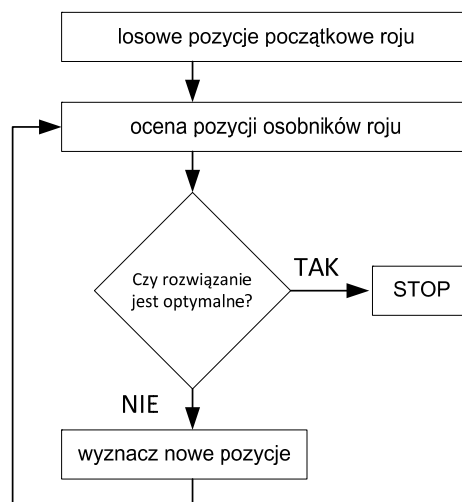
Algorytm rojowy jest metodą opartą na inteligencji roju. Układ jaki tworzą grupy zwierząt podczas poruszania się w celu uniknięcia drapieżników, poszukiwania pożywienia lub gniazda jest synchroniczny i bezkolizyjny, często towarzyszą mu nagłe zmiany kierunków i przegrupowania w optymalną formację. Badania 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 rys. 6.

Wyjaśnienia wymaga sposób poruszania się osobników roju w wielowymiarowym obszarze poszukiwań. Każdy osobnik porusza się w kierunku najlepszego rozwiązania znajdującego 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 stochastyczną prędkość która zależy od odległości do najlepszego dotąd znajdującego rozwiązania własnego rozpatrywanego osobnika i lidera wg zależności w zapisie wektorowym:

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

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

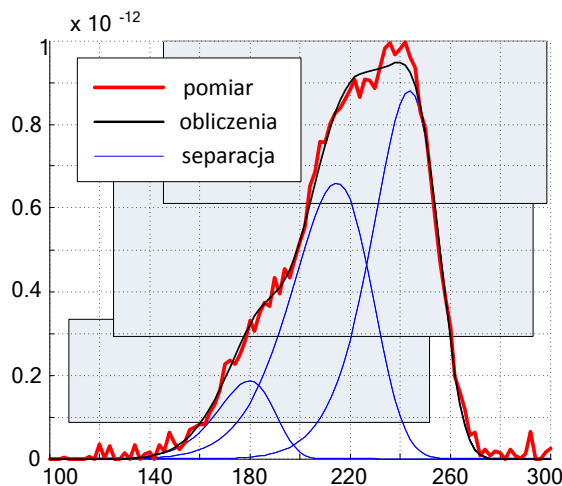
gdzie: \mathbf{V}_i – prędkość i-tego osobnika, \mathbf{X}_i – położenie, C_1, C_2 – współczynniki przyspieszenia, \mathbf{P}_i – najlepsze położenie i-tego osobnika, \mathbf{S} – najlepsze położenie lidera roju. $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ – liczby losowe z przedziału $\langle 0, 1 \rangle$.



Rys. 6 .Schemat działania algorytmu rojowego

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.



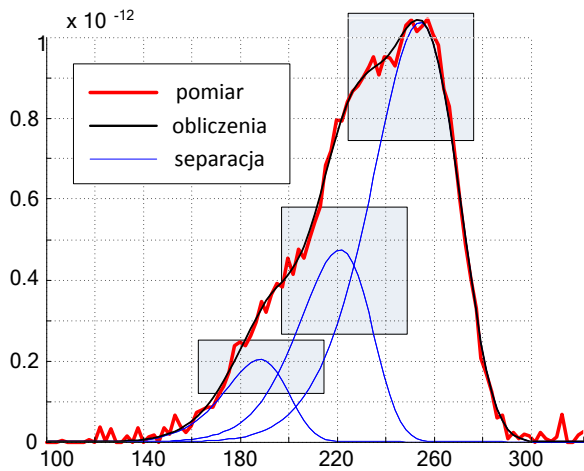
Rys. 7 .Wynik separacji procesów relaksacji metodą ewolucyjną

Tabela nr 1 zawiera wyniki przeprowadzonej estymacji symulowanej krzywej TSDC jak dla próbki $Cd_{1-x}Mn_xTe$ domieszkowanej indem. Analizę prowadzi się przy zastosowaniu algorytmu ewolucyjnego, przy czym nieznaną jest liczba pojedynczych procesów relaksacji. Algorytm sam określa liczbę poziomów pułapkowych i ich energie aktywacji.

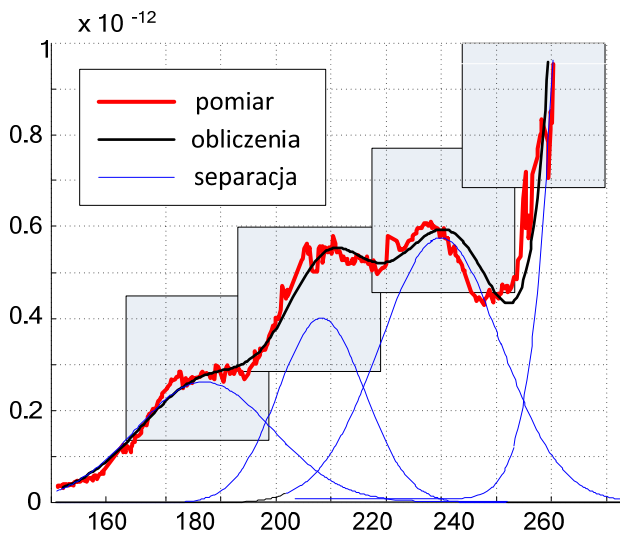
Tabela 1 .Wyniki separacji procesów relaksacji metodą ewolucyjną. Zadane obszary poszukiwań oznaczono na rysunku 7, liczby procesów relaksacji wyznacza algorytm.

	Nr	J_m, A	T_m, K	E, eV
Rzeczywiste	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

Rysunek nr 8 oraz tabela nr 2 dotyczy analizy prądu TSD metodą algorytmu rojowego. Symulowano widmo jak dla próbki $Cd_{1-x}Mn_xTe$ domieszkowanej indem. Stosując algorytm założono, że znana jest liczba procesów relaksacji. W tabeli pokazano rzeczywiste i wyznaczone wartości parametrów poszczególnych relaksacji.



Rys. 8 .Wynik separacji procesów relaksacji symulowanego TSDC metodą rojową



Rys. 9 .Wyniki separacji procesów relaksacji zmierzonego widma TSDC półprzewodnika $Cd_{1-x}Mn_xTe$ domieszkowanego indem.

Tabela 2 .Wyniki separacji procesów relaksacyjnych metodą rojową. Zadane obszary poszukiwań oznaczono rysunku 8, liczbę procesów przyjęto jako znaną i równą 3.

	nr	J_m, A	T_m, K	E_i, eV
Rzeczywiste	1	2.00e-13	1.80e+02	2.33e-01
	2	5.00e-13	2.10e+02	2.71e-01
	3	10.0e-13	2.40e+02	3.10e-01
Wyznaczone	1	1.94e-13	1.80e+02	2.21e-01
	2	4.52e-13	2.09e+02	2.65e-01
	3	9.88e-13	2.39e+02	2.88e-01

Analiza zmierzonych TSDC

Zmierzone widma TSDC półprzewodnika $Cd_{1-x}Mn_xTe$ domieszkowanego indem poddano analizie wykorzystującej proponowane metody. Algorytm ewolucyjny oraz rojowy zostały zastosowane w celu określenia liczby i parametrów pojedynczych procesów relaksacyjnych. Wyniki (rys. 9) pokazują, że widmo składa się z trzech mono-energetycznych procesów. Na podstawie separowanych składników widma określono energie aktywacji poziomów pułpkowych w badanym materiale na poziomach 0.22 eV, 0.26 eV i 0.29 eV. Analiza każdego 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.

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.

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

LITERATURA

- [1] Cresswell R. A., Perlman M. M., *Thermal currents from coronacharged carnauba wax electrets*, J. Appl. Phys., tom.42 (1971), s. 2645
- [2] Cresswell R. A., Perlman M. M., *Thermal currents from corona charged Mylar*, J. Appl. Phys., tom.41 (1970), s. 2365-2375
- [3] Gubanski A., Sharyapov M., Sezonov Y., *The Activation Distribution of Polyethylene Terephthalate Film*, Mat. Sci., tom XVI (1990), s. 221-224
- [4] Gubański A., Macalik B., *Bulletin of the Polish Academy of Sciences, Technical Sciences*, tom. 35 (1987), nr 9-10, s. 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., tom. 103 (2008), nr 6, s. 063720_1- 063720_4
- [7] J. Kennedy and R. C. Eberhart, *Swarm Intelligence*, Morgan Kaufmann Publishers, San Francisco, Calif, USA, 2001