

Optimisation de Paramètres : Application aux Modèles de Transport de Charges dans les Diélectriques Solides

Fulbert BAUDOIN, Séverine LE ROY, Gilbert TEYSSÈDRE, Christian LAURENT
fulbert.baudoin@laplace.univ-tlse.fr

LAPLACE – Laboratoire Plasma et Conversion d’Energie – UMR 5213 CNRS/INP/UPS
Université Paul Sabatier- Bâtiment 3R3
118, route de Narbonne – 31062 Toulouse Cedex - France



I - RESUME

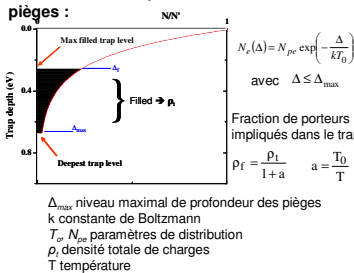
Cette étude a pour objectif le développement d’outils d’aide à l’estimation des paramètres utilisés en modélisation, outils établissant une corrélation optimale et systématique entre valeurs simulées et observations. Des techniques numériques, appelées « problèmes inverses », sont appliquées à la résolution de modèles numériques décrivant les phénomènes de transport et de piégeage de charges dans les diélectriques solides. Le modèle de transport considéré est non stationnaire, unipolaire et une distribution exponentielle de pièges est prise en compte. Le nombre de paramètres à estimer est de quatre. Plusieurs critères seront analysés : le temps de calcul, la convergence, les minima locaux ou globaux, pour mieux appréhender le comportement de notre algorithme d’optimisation vis-à-vis, par exemple, des incertitudes de mesures.

II – LE PROBLEME DIRECT

Modèle physique développé dans le cadre du projet Européen HVDC

HYPOTHESES PHYSIQUES

Distribution exponentielle des pièges :



$N_e(\Delta) = N_{pe} \exp\left(-\frac{\Delta}{kT_e}\right)$
avec $\Delta \leq \Delta_{max}$
Fraction de porteurs impliqués dans le transport:
 $\rho_f = \frac{\rho_i}{1+a}$ $a = \frac{T_0}{T}$

Mobilité:

$$\mu(x,t) = \frac{2v_d}{E(x,t)} \left(\frac{\rho_f(x,t)}{N_{pe} k T_0} + \exp\left(\frac{\Delta_{max}}{kT_0}\right) \right)^a \sinh\left(\frac{eE(x,t)d}{2kT}\right)$$

v fréquence des sauts
 d distance moyenne entre pièges avec $d = (N_{pe} k T_0)^{-1/3}$
 E champ électrique local

Injection de charges:

$$j_e(x,t) = AT^2 \exp\left(-\frac{e\phi}{kT}\right) \exp\left(\frac{eE(x,t)}{4\pi\epsilon}\right) - 1$$

$j_e(x,t)$ flux d’injection à la cathode
 A constante de Richardson
 w barrière d’injection
 ϵ permittivité du diélectrique.

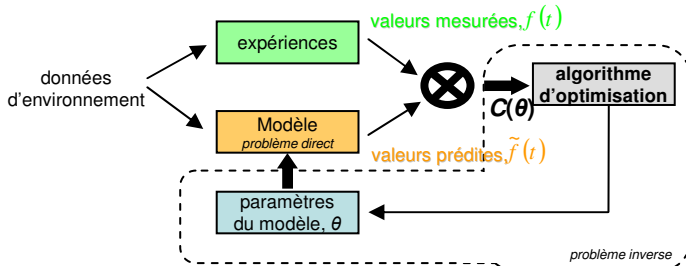
ÉQUATIONS DE BASE POUR LA DESCRIPTION DU TRANSPORT DE CHARGES

- modèle non stationnaire ;
 - unipolaire (uniquement des électrons) ;
 - unidimensionnel.
- $$\frac{\partial \rho_f(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x,t)}{\partial x} = 0$$
- continuité
-
- $$\frac{\partial E(x,t)}{\partial x} = \frac{\rho_f(x,t)}{\epsilon}$$
- Poisson
-
- $$j(x,t) = \mu(x,t) \rho_f(x,t) E(x,t)$$
- transport

OBJECTIF : identifier les 4 paramètres suivants

- barrière d’injection w_e ;
 - profondeur maximale des pièges Δ_{max} ;
 - facteur pré exponentiel N_{pe} ;
 - paramètre relatif à la forme de la distribution des pièges T_0
- vecteur de paramètres θ
 $\theta = (w_e \ T_0 \ \Delta_{max} \ N_{pe})^T$

III – LE PROBLEME INVERSE : PRINCIPE



L’optimisation de paramètres est basée sur la minimisation de l’erreur relative entre les données observées et les données

$$C(\theta) = \sum_{i=0}^{T-1} (f_i(t) - \tilde{f}_i(\theta, t))^2$$

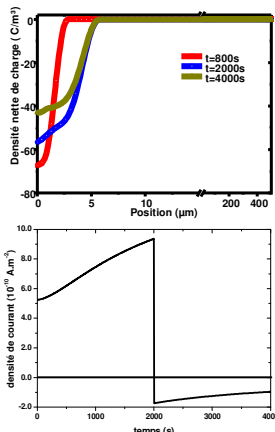
Algorithme d’optimisation : méthode de Levenberg Marquardt

$$\theta_i = \theta_{i-1} - [H_{i-1} + \lambda_{i-1} I]^{-1} \nabla C_{i-1}(\theta)$$

i , numéro de l’itération
 H , Hessian de la fonction critère

IV – LE PROBLEME INVERSE : RESULTATS

Données d’entrée – Fonction critère



Les données d’entrée sont issues de simulation effectuées avec le modèle direct. Le vecteur paramètres optimal est le suivant:

$$\theta_{opt} = (1,18eV \ 7000K \ 0,72eV \ 6.10^{44} m^{-3} J^{-1})^T$$

Comme seules la densité de courant et la répartition spatio-temporelle de la densité nette de charges sont disponibles en entrée, notre fonction critère, $C(\theta)$, est constituée de deux termes relatifs aux données accessibles par les techniques expérimentales

$$C(\theta) = \int_0^D \int_0^T (f_p(t, x) - \tilde{f}_p(\theta, t, x))^2 dx dt + \int_0^T (f_j(t) - \tilde{f}_j(\theta, t))^2 dt$$

erreur sur la densité nette de charges erreur sur la densité de courant

Influence du vecteur paramètres initial

vecteurs-paramètres initiaux :

$$\theta_{init1} = (1,1564eV \ 6583K \ 0,6984eV \ 2,6.10^{44} m^{-3} J^{-1})^T$$

$$\theta_{init2} = (1,1092eV \ 5000K \ 0,8280eV \ 1,10^{44} m^{-3} J^{-1})^T$$

$$\theta_{init3} = (1,0974eV \ 1.10^5 K \ 0,9360eV \ 1,10^{47} m^{-3} J^{-1})^T$$

Le temps de calcul dépend fortement de l’écart entre paramètres initiaux et optimaux; tous les minima sont globaux.

	convergence	temps de calcul	nature du minimum	Nombre d’itérations
θ_{init1}	Oui	33min	Global	7
θ_{init2}	Oui	38min	Global	8
θ_{init3}	Oui	207min	Global	31

Impact du bruit de mesure introduit sur les données d’entrée

Cas d’un signal bruité de SNR = 30 dB

vecteur paramètres estimé par la méthode inverse avec vecteur initial θ_{init2}

$$\theta_{30dB} = (1,18eV \ 6730K \ 0,7224eV \ 5,74.10^{44} m^{-3} J^{-1})^T$$

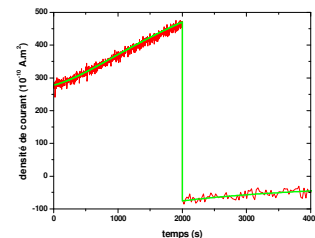
les paramètres liés à la mobilité sont les plus sensibles au bruit de mesure

mobilités obtenues pour $E=30kV.mm^{-1}$ et $\rho=0 C.m^{-3}$

$$\mu_{\theta_{opt}} = 0,1218.10^{-14} m^2.V^{-1}.s^{-1} \text{ avec } \theta_{opt}$$

$$\mu_{\theta_{30dB}} = 0,1194.10^{-14} m^2.V^{-1}.s^{-1} \text{ avec } \theta_{30dB}$$

erreur < 2% !!!



rapport signal/bruit	convergence	temps de calcul	nature du minimum
50 dB	Oui	41min	Local
40 dB	Oui	33min	Local
30 dB	Oui	26min	Local

données d’environnement :

- tension appliquée, 15 kV
- température, 295 K
- temps de polarisation, 2000 s;
- temps de dépolarisation, 2000 s
- épaisseur du diélectrique $D=500 \mu m$
- pas de discrétisation dans le temps: 1 s
- pas de discrétisation dans l’espace: 1 μm

CONCLUSION

- ✓ L’incorporation de bruit sur les données d’entrée conduit à une convergence vers un minimum local. Ce comportement peut découler de la stratégie d’optimisation. Cependant, la convergence est également dépendante de la nature du modèle physique considéré, des jeux de paramètres différents pouvant conduire à des comportements quasi-identiques.
- ✓ Pour le type d’approche développé ici, il est important d’utiliser un grand nombre de données d’entrée, le nombre de solutions potentielles s’en trouvant normalement réduit. Cela va aussi de pair avec une augmentation drastique du temps de calcul.