



รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ : แบบจำลองโครงข่ายประสาทเทียมเพื่อศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าของ
สารเฟอร์โรอิเล็กทริก PZT

Artificial Neural Network modeling of electrical properties
of PZT ferroelectrics

โดย ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. วิมลีน สุขถมยา เหล่าศิริถาวร และคณะ

มีนาคม 2554

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ : แบบจำลองโครงข่ายประสาทเทียมเพื่อศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าของ
สารเพโรอิเล็กทริก PZT

Artificial Neural Network modeling of electrical
properties of PZT ferroelectrics

คณะผู้วิจัย

ผศ. ดร. วิมลสิน สุขถมยา เหล่าศิริถาวร

ภาควิชาวิศวกรรมอุตสาหกรรม

คณะวิศวกรรมศาสตร์

มหาวิทยาลัยเชียงใหม่

ผศ. ดร. รัตติกร ยี่มนิรัญญ์

สาขาวิชาฟิสิกส์

สำนักวิทยาศาสตร์

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

สนับสนุนโดยสำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา

และสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย

(ความเห็นในรายงานนี้เป็นของผู้วิจัย สกอ. และ สกว. ไม่จำเป็นต้องเห็นด้วยเสมอไป)

กิตติกรรมประกาศ

ผู้วิจัยใคร่ขอขอบพระคุณ สำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา (สกอ.) และสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย (สกว.) ที่ได้ให้การสนับสนุนงานวิจัยและพัฒนาครั้งนี้ ผ่านทางทุนพัฒนาศักยภาพการทำงานวิจัยของอาจารย์รุ่นใหม่ ประจำปี พ.ศ. 2552 และขอขอบพระคุณ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. รัตติกกร ยี่มนิรัญ ที่ปรึกษาโครงการที่ได้ให้การสนับสนุนและคำแนะนำในทุกๆ ด้านเกี่ยวกับการวิจัย นอกจากนี้ ขอขอบคุณภาควิชาวิศวกรรมอุตสาหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ ที่ช่วยอำนวยความสะดวกในการใช้เครื่องมือ อุปกรณ์ และ สถานที่ ที่ท้ายสุดขอขอบคุณผู้ร่วมงานทุกท่าน ที่มีส่วนช่วยเหลือผู้วิจัยให้ดำเนินงานโครงการวิจัยนี้ให้สำเร็จลุล่วงได้ด้วยดี

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. วิมลน สุขธมยา เหล่าศิริถาวร)

หัวหน้าโครงการ

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ : MRG5280204

ชื่อโครงการ : แบบจำลองโครงข่ายประสาทเทียมเพื่อศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าของสาร
เพอร์โรอิเล็กทริก PZT

ชื่อนักวิจัย : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. วิมลีน สุขถมยม เหล่าศิริถาวร
ภาควิชาวิศวกรรมอุตสาหการ คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. รัตติกร ยิ้มนรินทร์
สาขาวิชาฟิสิกส์ สำนักวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

E-mail Address : wimalin@hotmail.com

ระยะเวลาโครงการ : 16 มีนาคม 2552 ถึง 15 มีนาคม 2554

ในโครงการวิจัยนี้ ได้ใช้วิธีโครงข่ายประสาทเทียมซึ่งเป็นเครื่องมือหนึ่งในการทำเหมืองข้อมูลเพื่อศึกษาและทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิสของสารเพอร์โรอิเล็กทริก โดยได้ศึกษาสาร PZT แบบอ่อนภายใต้การแปรค่าความถี่และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้าและความเค้นแบบแกนเดียว สาร PZT แบบแข็งภายใต้การแปรค่าความถี่และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้าในช่วงกว้าง และสาร BT ภายใต้การแปรค่าความถี่และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้าและปัจจัยเชิงโครงสร้างแบบเซรามิกส์และแบบผลึกเชิงเดี่ยว จากผลการศึกษา สามารถออกแบบสถาปัตยกรรมของชั้นซ้อนที่เหมาะสม ทำให้สามารถทำนายผลสมบัติฮิสเทอรีซิสเป็นฟังก์ชันกับปัจจัยที่แปรค่าได้อย่างถูกต้องในคราวเดียว แม้ว่าปัจจัยเหล่านั้นจะให้ค่าสมบัติฮิสเทอรีซิสที่แตกต่างกันมาก ซึ่งมีประโยชน์กว่าการศึกษาที่ผ่านมามีด้วยวิธีการสเกลแบบเลขชี้กำลัง ซึ่งจะต้องแบ่งข้อมูลฮิสเทอรีซิสออกเป็นช่วงๆที่มีรูปแบบคล้ายกันก่อนจึงจะสามารถศึกษาได้ จากความประสิทธิภาพของการทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิสด้วยวิธีโครงข่ายประสาทเทียมจากการศึกษาโครงการวิจัยนี้ จึงให้แง่คิดความรู้ใหม่เชิงสหวิทยาการระหว่างการทำเหมืองข้อมูลกับผลข้อมูลทางวัสดุศาสตร์ ซึ่งอาจจะนำไปใช้งานในทางประยุกต์จริงต่อไปในอนาคต

คำหลัก : โครงข่ายประสาทเทียม, เพอร์โรอิเล็กทริก, สมบัติฮิสเทอรีซิส, พีแซดที, บีที

Abstract

Project Code : MRG5280204

Project Title : แบบจำลองโครงข่ายประสาทเทียมเพื่อศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าของสารเฟอร์โรอิเล็กทริก PZT

Investigators : Assistant Professor Dr. Wimalin Sukthomya Laosiritaworn
Department of Industrial Engineering, Faculty of Engineering,
Chiang Mai University
Assistant Professor Dr. Rattikorn Yimnirun
School of Physics, Institute of Science, Suranaree University of
Technology

E-mail Address : wimalin@hotmail.com

Project Period : March 16, 2009 to March 15, 2011

In this research project, artificial neural network, one of the data mining tools, was used to investigate and predict hysteresis properties of ferroelectric materials. Those are soft PZT by varying electric field frequency and amplitude and uniaxial stress, hard PZT by varying electric field frequency and amplitude over a wide range, and BT by electric field frequency and amplitude and system structure in both ceramic and single crystal forms. From the study, suitable network architectures were retrieved which yielded accurate predicted hysteresis results even the varying parameters give hysteresis properties with very much different in values. This therefore provide more advantages upon previously used power law scaling, which had to divide hysteresis data into many subgroups having similar hysteresis behaviors before taking the scaling. According to its efficiency of the artificial neural network in this research project, new inter-disciplinary knowledge between the use of data mining and materials science data has been achieve which may be used for real applications in the future.

Keywords : Artificial Neural Network, Ferroelectric, Hysteresis properties, PZT, BT

Executive Summary

1. ที่มาและความสำคัญของปัญหา

วัสดุเฟอร์โรอิเล็กทริก (ferroelectric) ในกลุ่มของไพเอโซอิเล็กทริก (piezoelectric) จัดเป็นวัสดุฉลาดที่มีคุณสมบัติในการแปลงสัญญาณทางกลกลับไปมาจากสัญญาณทางไฟฟ้าได้ มีประโยชน์อย่างยิ่งในการประยุกต์ใช้กับอุตสาหกรรมอิเล็กทรอนิกส์ โดยเฉพาะอย่างยิ่งในการสร้างอุปกรณ์ไฟฟ้าประเภทต่าง ๆ อาทิเช่น ตัวแปรสัญญาณ(transducer) (Viehland and Powers, 2001) ตัวขับเคลื่อน (actuator) (Uchino, 1997) ตัวจุดประกายไฟ (ignitors) ไมโครโฟน (microphones) รวมไปถึงจนถึงอุปกรณ์ทางการแพทย์ต่าง ๆ เป็นต้น ตัวอย่างสารที่มีความโดดเด่นในกลุ่มไพเอโซอิเล็กทริกนี้ คือ เลดเซอร์โคเนตไตทานเนต ($\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ หรือ PZT) ซึ่งเป็นสารเฟอร์โรอิเล็กทริกที่เป็นสารละลายของแข็งระหว่างเลดเซอร์โคเนต (PbZrO_3) กับเลดไททานเนต (PbTiO_3) มีประโยชน์มากมายในการประยุกต์ใช้งานเป็นสารเซรามิกไพเอโซอิเล็กทริก โดยเฉพาะอย่างยิ่งการนำไปประยุกต์ใช้ในการสร้างตัวขับเคลื่อนและตัวแปรสัญญาณเนื่องด้วยสาร PZT นี้มีข้อดีคือ มีสัมประสิทธิ์ไฟฟ้าเชิงกลคู่ควบ (Electromechanical Coupling Coefficient) ค่อนข้างสูง (Viehland and Powers, 2001)

อย่างไรก็ตามสาร PZT ก็มีจุดเสียตรงที่มีการสูญเสียพลังงานค่อนข้างสูง (มีสมบัติฮิสเทอรีซิส : Hysteresis) ซึ่งไม่เป็นที่ต้องการในการใช้งานที่ละเอียดอ่อน นอกจากนั้นในการใช้งานในอุปกรณ์ตัวขับเคลื่อนหรือตัวแปรสัญญาณ สารเซรามิกมักจะถูกใช้ภายใต้สภาวะความเค้น (stress) ซึ่งผลของความเค้นนี้ จะทำให้สมบัติทางไฟฟ้าของสารเซรามิกดังกล่าวเปลี่ยนไปจากสภาวะอุดมคติที่ไม่มีมีความเค้นมากกระทำ ดังนั้นการวิจัยอิทธิพลของความเค้นมีความสำคัญอย่างยิ่งต่อการออกแบบและจัดสร้างอุปกรณ์ทางตัวขับเคลื่อนและตัวแปร ดังที่มีการวิจัยซึ่งพบว่าความเค้นแบบแกนเดียว มีบทบาทในการเพิ่มหรือลดประสิทธิภาพการใช้งานและคุณสมบัติของสารเซรามิกที่มีสมบัติทางไฟฟ้าบางประเภท (Zhang *et al.*, 1997; Zhao, 1999; Yimnirun *et al.*, 2003; 2004; 2005) ยิ่งไปกว่านั้น นอกจากอิทธิพลของความเค้นเชิงกลดังกล่าวที่มีผลต่อสมบัติทางไฟฟ้าแล้วขนาดของสนามไฟฟ้าสูงสุด(แอมพลิจูดสนามไฟฟ้า) และความถี่ของสนามไฟฟ้าก็มีผลต่อสมบัติทางไฟฟ้าด้วย (Moulson and Herbert, 2003) กล่าวคือ แอมพลิจูดสนามไฟฟ้าและความถี่ของสนามจะเป็นปัจจัยที่สำคัญในการกำหนดสมบัติฮิสเทอรีซิสไม่ว่าจะเป็นรูปร่าง (hysteresis shape) ขนาดพื้นที่ (hysteresis area) สภาพขั้วไฟฟ้าเกิดเอง (spontaneous polarization) และขนาดสนามไฟฟ้าหักล้าง (coercive field) เป็นต้น ด้วยเหตุนี้การวิจัยเกี่ยวกับผลของความเค้นแบบแกนเดียวที่พิจารณาร่วมกับผลของขนาดไฟฟ้าสูงสุด และผลของความถี่ของสนามไฟฟ้าต่อสมบัติฮิสเทอรีซิสและอุณหภูมิ ในแง่การทดลองเป็นสิ่งที่ใหม่ (มีปรากฏในวารสารงานวิจัยในระดับนานาชาติในช่วงเร็ว ๆ นี้เป็นจำนวนมาก) อย่างไรก็ตามเนื่องจากโครงสร้างทางจุลภาคของสารเซรามิกมักจะมี

โครงสร้างที่ซับซ้อน การศึกษาในช่วงที่ผ่านมาจึงเน้นศึกษาผลของความเค้นเพียงปัจจัยเดียว หรือความถี่เพียงปัจจัยเดียวต่อสมบัติฮิสเทอรีซิสของสารเซรามิก PZT แบบอ่อน (Zhou *et al.*, 2005) แต่ในช่วงหลังได้เริ่มมีการพยายามศึกษาหลายๆปัจจัย ไม่ว่าจะเป็นผลของแอมพลิจูดควบคู่กับความถี่ของสนาม และมีการรวมผลของความเค้น หรือผลของอุณหภูมิด้วย (Yimnirun *et al.*, 2006a; 2006b; 2007a; 2007b; 2007c) โดยทำการหาว่าสมบัติฮิสเทอรีซิส เช่น พื้นที่ที่มีการสเกลตามปัจจัยภายนอก ในลักษณะเลขชี้กำลังอย่างไร ผลจากการสเกลที่ได้มีค่า R-Square ที่ค่อนข้างดี แต่อย่างไรก็ตามการทำการฟิตข้อมูลเพื่อการสเกลโดยวิธีนี้ จำเป็นต้องใช้ข้อมูลจำนวนมากเนื่องจากมีหลายองศาอิสระ(หลายตัวแปร) ยิ่งไปกว่านั้น ในการฟิตข้อมูลเหล่านี้ได้ใช้ข้อมูลทั้งหมด ทำให้หากข้อมูลหากต้องทำไปใช้ทำนายข้อมูลที่ไม่ได้ทำการทดลอง อาจจะได้ค่าที่คลาดเคลื่อนออกไป (เนื่องจากไม่ได้มีการพิสูจน์ให้เห็นถึงความสามารถในการทำนาย) นอกจากนี้ จากลักษณะการฟิตข้อมูลที่ละกลุ่ม ทีละชุด ทำให้ลำดับในการฟิตข้อมูลมีผลต่อค่าของการฟิต กล่าวคือ ถ้าฟิตข้อมูลแอมพลิจูดก่อนความถี่ อาจจะได้ผลต่างจากการฟิตข้อมูลความถี่ก่อนแอมพลิจูด ด้วยเหตุนี้ การฟิตข้อมูลควรจะทำทีละตัวทั้งหมด แต่เนื่องจากปัญหาหลายองศาอิสระ(หลายตัวแปร) ทำให้การฟิตได้ผลที่ไม่ได้ ดังนั้น โครงการวิจัยจึงเล็งหาวิธีทางอื่นที่จะสามารถนำมาช่วยในการวิเคราะห์ผล ซึ่งในโครงการวิจัยนี้จะใช้วิธี โครงข่ายประสาทเทียม (Artificial Neural Network: ANN)

โครงข่ายประสาทเทียมมีวิธีการทำงานหรือที่เรียกว่าการเรียนรู้โดยรับข้อมูลตัวอย่างเข้ามาจำนวนหนึ่งแล้วทำการปรับค่าถ่วงน้ำหนักจนได้ผลลัพธ์ที่ใกล้เคียงกับค่าผลลัพธ์ที่ต้องการมากที่สุด การเรียนรู้สำหรับโครงข่ายประสาทเทียมจะแบ่งออกเป็น 2 แบบคือ 1) การเรียนรู้แบบไม่มีผู้สอนหรือการเรียนรู้แบบไม่มีผู้ชี้แนะ (unsupervised learning) เพื่อให้โครงข่ายประสาทเทียมมีความใกล้เคียงกับสมองมนุษย์มากขึ้น เนื่องจากมนุษย์สามารถเรียนรู้ได้จากประสบการณ์โดยตรงไม่ต้องการสอน ดังนั้นชุดข้อมูลสำหรับใช้สอนจึง มีเพียงชุดข้อมูลป้อนเข้าไม่ต้องมีชุดข้อมูลเป้าหมาย 2) การเรียนรู้แบบมีผู้สอนหรือการเรียนรู้แบบมีผู้ชี้แนะ (supervised learning) ต้องการชุดข้อมูลป้อนเข้าและชุดข้อมูลตัวแปรนำออกเป้าหมาย เรียกว่าชุดการสอนควบคู่ (training pair) โดยปกติการสอนโครงข่ายประสาทเทียมจะใช้ชุดการสอนควบคู่หลายชุดในระหว่างการสอนโครงข่ายประสาทเทียมจะเกิดผลลัพธ์จริงขึ้น โดยผลต่างระหว่างผลลัพธ์จริงกับผลลัพธ์เป้าหมายคือค่าความคลาดเคลื่อนหรือค่าความผิดพลาด โดยค่าความผิดพลาดนี้จะถูกป้อนกลับเข้าสู่โครงข่าย เพื่อให้มีค่าลดลงเรื่อยๆ จนถึงระดับที่ยอมรับได้ ในระหว่างกระบวนการลดค่าความผิดพลาดนั้นค่าน้ำหนักจะถูกปรับตาม

จากความสามารถของโครงข่ายประสาทเทียมที่สามารถทำงานและเรียนรู้ได้จากข้อมูลเดิมที่มีอยู่เป็นจำนวนมากได้เป็นอย่างดีและมีความเที่ยงตรงสูงโดยสามารถเรียนรู้จากฐานข้อมูลเดิมโดยที่ไม่จำเป็นต้องรู้ความสัมพันธ์ต่าง ๆ ของข้อมูลมาก่อนเลยก็ตาม ถึงแม้จะมีรูปแบบในการปฏิบัติงานที่ซับซ้อนและมีความยุ่งยากมากในการประมวลผลก็ตามก็ได้มีการนำมาประยุกต์ใช้ใน

งานต่างๆ อาทิเช่น การพยากรณ์และวิเคราะห์ข้อมูลต่างๆในงานบำรุงรักษาเครื่องจักรในโรงงานอุตสาหกรรม การจดจำรูปแบบการพูดของคนเพื่อถอดเสียงพูดเป็นข้อความ การพยากรณ์การเคลื่อนไหวของข้อมูลหลักทรัพย์ในตลาดหุ้น เป็นต้น

ด้วยเหตุนี้ ผู้วิจัยจึงมีวัตถุประสงค์ที่จะศึกษาเงื่อนไขอิทธิพลของปัจจัยต่างๆที่มีผลต่อสมบัติทางไฟฟ้าของสาร PZT โดยใช้วิธีโครงข่ายประสาทเทียม ซึ่งจะสามารถสร้างทฤษฎีความสัมพันธ์และเมื่อนำไปประยุกต์ใช้งานในทางอุตสาหกรรมจะได้เกิดประโยชน์สูงสุด โดยการวิจัยจะเน้นไปยังสมบัติฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้า ซึ่งเป็นดัชนีหนึ่งที่สำคัญในการบ่งชี้ประสิทธิภาพในการประยุกต์ใช้งานสารที่มุ่งเน้นในงานวิจัยนี้ คือ สาร PZT ทั้งแบบอ่อน (soft PZT) ซึ่งมีสมบัติที่ไวต่อการเปลี่ยนแปลงเชิงกลค่อนข้างสูง(เหมาะที่จะนำมาใช้สร้างเป็นตัวตรวจวัดหรือเซ็นเซอร์) และแบบแข็ง (hard PZT) ที่ตอบสนองต่อการเปลี่ยนแปลงทั้งเชิงกลและสนามที่น้อยกว่าแบบอ่อน มีค่าการสูญเสียพลังงานที่ค่อนข้างสูงมาก (แต่อาจจะเหมาะนำมาใช้เป็นสื่อบันทึกข้อมูลแบบดิจิตอล) ดังนั้นสาร PZT ทั้งสองแบบนี้จึงเหมาะที่จะนำมาเป็นกรณีศึกษาอย่างยิ่ง จากนั้นเมื่อประสบความสำเร็จในการทำนาย จะนำองค์ความรู้ที่ได้ไปขยายผลศึกษาสารเฟอร์โรอิเล็กทริกชนิดอื่นที่มีความซับซ้อนยิ่งขึ้น ซึ่งในโครงการวิจัยนี้ได้ขยายผลไปศึกษาทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้าของสาร BaTiO₃ (BT) ที่มีโครงสร้างทางจุลภาคแบบเซรามิกและแบบผลึกเดี่ยว โดยได้ทำนายทั้งสองโครงสร้างในคราวเดียว ผลที่คาดว่าจะได้จากการวิจัยในหัวข้อดังกล่าว คือ ทฤษฎีความรู้-ความเข้าใจที่สามารถนำมาช่วยเสริมสร้างองค์ความรู้พื้นฐานใหม่เกี่ยวกับสมบัติของสารเซรามิกเฟอร์โรอิเล็กทริก สามารถนำไปตีพิมพ์ในวารสารวิชาการในระดับชาติหรือนานาชาติได้ ผลสืบเนื่องจะนำมาซึ่งฐานข้อมูลที่สำคัญสำหรับการค้นหาเงื่อนไขการใช้งานสารเฟอร์โรอิเล็กทริกที่เหมาะสม อันจะสามารถนำไปใช้ช่วยเสริมข้อมูลที่จำเป็นในการพัฒนา และการประยุกต์ใช้ของสารเฟอร์โรอิเล็กทริกและเสริมองค์ความรู้พื้นฐานทางวิทยาศาสตร์ต่ออุตสาหกรรมเซรามิกและเศรษฐกิจของชาติต่อไป ทั้งนี้วัตถุประสงค์ของการวิจัยนี้มีดังต่อไปนี้ คือ

1. เพื่อศึกษาสมบัติฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้าของสารเฟอร์โรอิเล็กทริก ภายใต้อิทธิพลของความเค้นแบบแกนเดี่ยว, แอมพลิจูดสนามไฟฟ้า และความถี่ของสนามไฟฟ้าต่อของสมบัติฮิสเทอรีซิส โดยอาศัยวิธีโครงข่ายประสาทเทียม
2. เพื่อตีพิมพ์ผลงานวิชาการในวารสารวิชาการระดับนานาชาติอย่างน้อย 2 ฉบับ เพื่อเผยแพร่งานวิจัยออกไปสากลและเพื่อประโยชน์ในการสร้างความเชื่อมโยงกับความร่วมมือระหว่างนักวิจัยในระดับนานาชาติ

และภายใต้วัตถุประสงค์ดังกล่าว โครงการวิจัยนี้ได้แบ่งแนวทางการศึกษาออกเป็น 4 ส่วนดังต่อไปนี้

1. การใช้วิธีโครงการประสาทเทียมเพื่อศึกษาและทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้า ที่ตอบสนองต่อการเปลี่ยนแปลงความถี่และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้าของสาร PZT แบบอ่อน
2. การใช้วิธีโครงการประสาทเทียมเพื่อศึกษาและทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้า ที่ตอบสนองต่อการเปลี่ยนแปลงความถี่และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้าของสาร PZT แบบแข็ง
3. การใช้วิธีโครงการประสาทเทียมเพื่อศึกษาและทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้า ที่ตอบสนองต่อการเปลี่ยนแปลงความถี่และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้า และความดันเชิงกลแบบแกนเดียว ของสาร PZT แบบอ่อน
4. การใช้วิธีโครงการประสาทเทียมเพื่อศึกษาและทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้า ที่ตอบสนองต่อการเปลี่ยนแปลงความถี่และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้า ของสาร BT ที่มีโครงสร้างแบบเซรามิกส์และแบบผลึกเดี่ยวในคราวเดียว

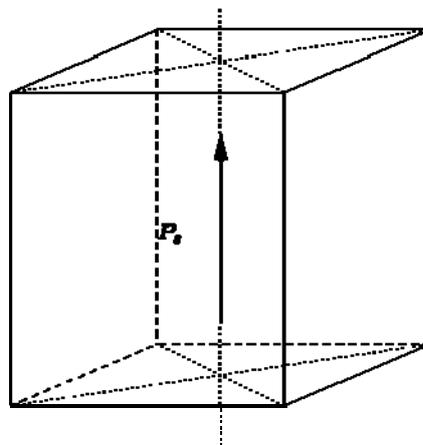
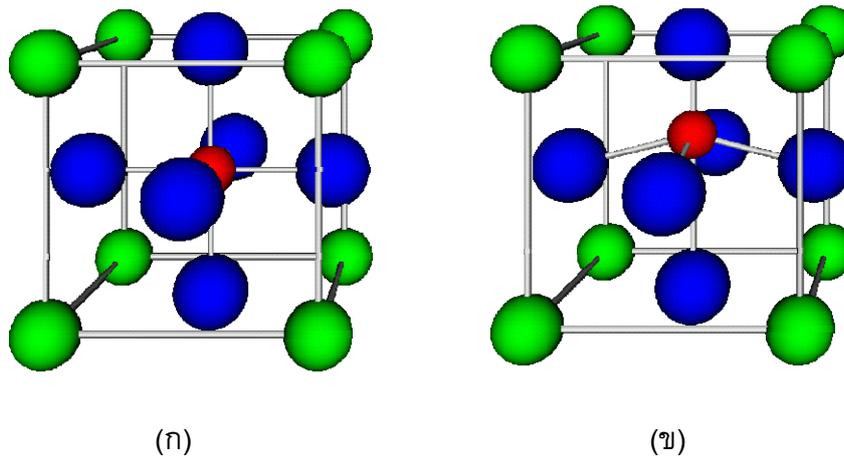
2. ทฤษฎีพื้นฐาน วรรณกรรมปริทรรศน์ และ ระเบียบวิธีวิจัย

ในหัวข้อนี้ จะอธิบายทฤษฎีพื้นฐานเกี่ยวกับสารเฟอร์โรอิเล็กทริก เช่น การเกิดขั้วทางไฟฟ้าของสารเฟอร์โรอิเล็กทริก สมบัติฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้าและการวิเคราะห์ค่า และเทคนิคทางโครงข่ายประสาทเทียมที่ใช้ในการวิจัยนี้

2.1 การเกิดสภาพขั้วทางไฟฟ้าของสารเฟอร์โรอิเล็กทริก

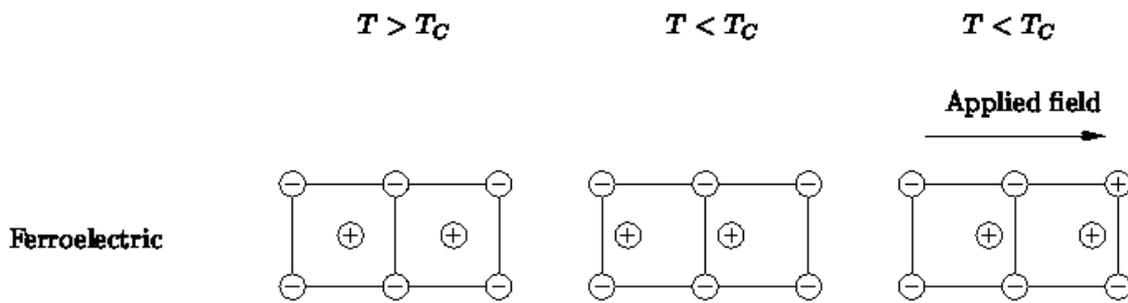
สมบัติทางไฟฟ้าของสารเซรามิกแบบเฟอร์โรอิเล็กทริกเป็นผลมาจากสมมาตร-อสมมาตรทางโครงสร้างของหน่วยเซลล์ (unit cell) ของสารเซรามิก ซึ่งโดยปกติสารเซรามิกนี้จะมีสมมาตรสูงที่อุณหภูมิสูง เฟสที่มีลักษณะเช่นนี้เรียกว่า เฟสต้นแบบ (prototype phase) สภาพขั้วทางไฟฟ้า(หรือโพลาริเซชันทางไฟฟ้า) ของสารเฟอร์โรอิเล็กทริกเป็นลักษณะหนึ่งของความไม่สมมาตรในสารโดยที่เฟสต้นแบบมีสมมาตรแบบศูนย์กลาง (centrosymmetric) อย่างไรก็ตาม เมื่ออุณหภูมิลดลงจนต่ำกว่าอุณหภูมิเปลี่ยนเฟสหรือที่เรียกว่าอุณหภูมิคูรี โดยทั่วไปโครงสร้างแบบอสมมาตรจะเกิดขึ้นดังแสดงในรูปที่ 1 (ก) และ(ข) ถ้าในประจุของสารเฟอร์โรอิเล็กทริกมีเพียงสองตำแหน่งที่เป็นไปได้โดยทั้งสองประจุนี้ตั้งอยู่บนแกนสมมาตรของแลตทิซหนึ่งๆ ความไม่เสถียรที่จะเกิดขึ้นจะเป็นแบบแกนเดี่ยว ลักษณะการเกิดสภาพขั้วทางไฟฟ้าในสารเฟอร์โรอิเล็กทริกแบบแกนเดี่ยวสามารถอธิบายได้โดยใช้รูปที่ 2 (ค) กล่าวโดยสรุป คือ เมื่ออุณหภูมิลดลงต่ำกว่าอุณหภูมิคูรี T_C ระบบจะมีสมมาตรที่สูงและสมมาตรของประจุบวกและลบ(ภายในเซลล์เดียวกัน)จะอยู่ที่เดียวกันยังผลให้สภาพทางไฟฟ้าโดยรวมมีค่าเป็นศูนย์ซึ่งเรียกเฟสที่มีสมบัติเช่นนี้ว่าเฟสพาราอิเล็กทริก

(paraelectric) คือ รูปที่ 1(ก) อย่างไรก็ตามเมื่อลดอุณหภูมิลงจนต่ำกว่าอุณหภูมิคูรี สมมาตรของระบบจะเสียไปดังรูปที่ 1 (ข) และทำให้ระบบมีค่าประจุสุทธิเกิดขึ้นและจะเรียกเฟสที่มีสมบัติเช่นนี้ว่า เฟสเฟอร์โรอิเล็กทริก และมีสมบัติทางไฟฟ้าแบบไดโพลไฟฟ้าเกิดขึ้นเรียกว่ามีสภาพขั้วทางไฟฟ้า หรือมีโพลาริเซชันทางไฟฟ้า (electric polarization) ซึ่งต่อไปจะเรียกสั้นๆว่าโพลาริเซชัน โดยจากนี้เมื่อทำการจ่ายสนามจากภายนอกเข้าไป สมมาตรของประจุก็จะเปลี่ยนไปอีกตามอิทธิพลของสนามภายนอกดังแสดงในรูปที่ 2



(ค)

รูปที่ 1 (ก) โครงสร้างแลตทิซของผลึกเพอร์รอฟสไกต์ที่สมมาตร (ไม่มีสภาพขั้วทางไฟฟ้า) และ (ข) ผลึกที่ผิดรูปไปเป็นแบบแบบเทตระโกนอลซึ่งมีสภาพขั้วทางไฟฟ้าเกิดขึ้น ดังแสดงในรูป (ค)



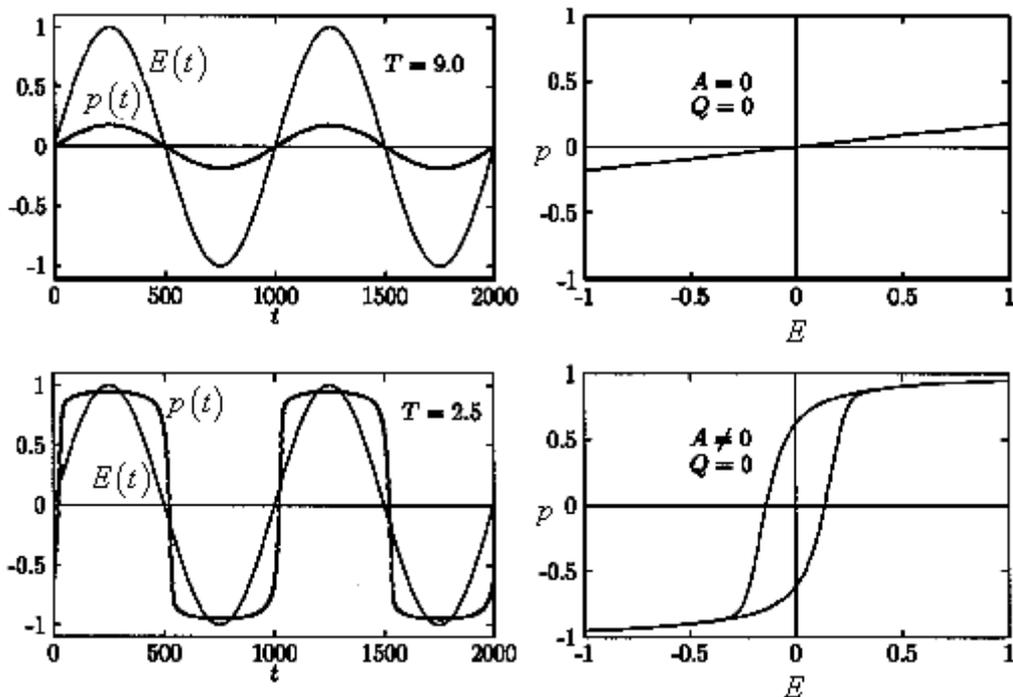
รูปที่ 2 สภาพทางไฟฟ้าที่เกิดขึ้นในสารเฟอร์โรอิเล็กทริกแบบแกนเดี่ยว(การเลื่อนของสมมาตรประจุอยู่ในแนวแกนใดแกนหนึ่งเท่านั้น) เกิดจากที่อุณหภูมิต่ำกว่า T_C และสมมาตรของประจุบวก และลบอยู่คนละที่กัน ซึ่งเมื่อมีผลจากสนามไฟฟ้าภายนอก สมมาตรก็จะเปลี่ยนไปตามอิทธิพลของสนามภายนอกนั้น (ดัดแปลงจาก Line and Glass (1996))

2.2 สมบัติฮิสเทอรีซิส

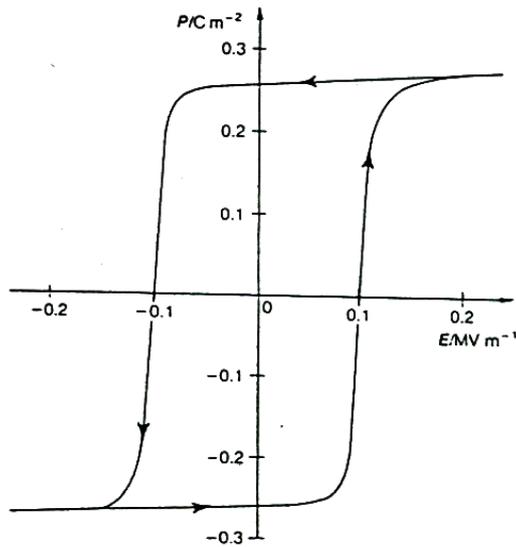
เมื่อระบบเฟอร์โรอิเล็กทริก (ferroelectric) อยู่ภายใต้อิทธิพลของสนามไฟฟ้าภายนอก(ที่แปรเปลี่ยนตามเวลา) สภาพชั่วคราวไฟฟ้าหรือโพลาริเซชันทางไฟฟ้า (electric polarization) ของระบบ จะพยายามเปลี่ยนทิศตามสนามไฟฟ้าภายนอก โดยทั่วไปผลจากอันตรกิริยาแลกเปลี่ยนระหว่างโพลาริเซชันในโดเมนจะทำให้สภาพชั่วคราวไฟฟ้าโดยรวม ไม่สามารถเปลี่ยนตามทิศของสนามไฟฟ้าได้อย่างทันทั่วทั้งที่ และจะพบความหน่วงเฟสระหว่างสัญญาณสภาพชั่วคราวไฟฟ้าและสนามไฟฟ้าเมื่อพิจารณาเป็นฟังก์ชันกับเวลา ซึ่งเกิดจากสัญญาณสภาพชั่วคราวไฟฟ้าเปลี่ยนแปลงช้ากว่าสัญญาณสนามไฟฟ้า (จากภาพนอกซึ่งเครื่องกำเนิดสัญญาณทั่วไปจะให้สัญญาณในลักษณะเป็นคาบ) ผลของความหน่วงเฟสนี้จะทำให้เกิดวงฮิสเทอรีซิส(เมื่อวาดกราฟระหว่างสภาพชั่วคราวไฟฟ้ากับสนามไฟฟ้า) และมีพื้นที่ภายในวงไม่เท่ากับศูนย์ (รูปที่ 3 ล่างซ้ายและขวา) อย่างไรก็ตามหากระบบเฟอร์โรอิเล็กทริกที่พิจารณาอยู่ในสภาพพาราอิเล็กทริก (paraelectric) พลังงานความร้อนจากอุณหภูมิภายนอกจะเพียงพอที่จะชดเชยอันตรกิริยาไฟฟ้า ทำให้สัญญาณสภาพชั่วคราวไฟฟ้าสามารถติดตามสัญญาณสนามไฟฟ้าได้อย่างทันทั่วทั้งที่ (เฉพาะในทางอุดมคติเท่านั้น) และจะส่งผลให้วงฮิสเทอรีซิสมีลักษณะเป็นเส้นตรงมีพื้นที่ใต้วงเป็นศูนย์ (รูปที่ 3 บนซ้ายและขวา) วงวนฮิสเทอรีซิสทั่วไปแสดงได้ดังในรูปที่ 4 ซึ่งมีองค์ประกอบที่สำคัญคือ

- ค่าแอมพลิจูดของสนาม (field amplitude, E_0) เป็นขนาดสูงสุดของสนามภายนอกที่จ่ายให้กับระบบ ถ้าแอมพลิจูดมีค่าสูงมากจะสื่อถึงพลังงานไฟฟ้าที่ให้กับระบบสูงขึ้นไปด้วย ทำให้โพลาริเซชันมีการเปลี่ยนทิศตามสนามได้ง่าย

- สภาพขั้วทางไฟฟ้าคงค้าง (remanent polarization, P_r) เป็น ค่าสภาพขั้วทางไฟฟ้าที่ค้างมีอยู่ในระบบเฟอร์โรอิเล็กทริกเมื่อขนาดของสนามภายนอกเป็นศูนย์ ซึ่งจะมีทั้งสองด้าน(บวกหรือลบ) ตามทิศของสนาม แสดงได้ตั้งจุด c และ f ในรูปที่ 4
- ค่าสนามไฟฟ้าลบกลับ (coercive field, E_C) เป็น ค่าสนามไฟฟ้าภายนอกที่ต้องใช้ในการหักล้างให้สภาพขั้วทางไฟฟ้ามีขนาดเป็นศูนย์ ซึ่งจะมีทั้งสองด้าน(บวกหรือลบ)ตามทิศของสภาพขั้วทางไฟฟ้าขณะนั้น แสดงได้ตั้งจุด d และ g ในรูปที่ 4
- พื้นที่วงฮิสเทอรีซิส (hysteresis area) เป็น พื้นที่ใต้วงฮิสเทอรีซิสซึ่งจะสื่อถึงงานหรือพลังงานที่ต้องให้ในการกลับทิศของสภาพขั้วทางไฟฟ้าให้กลับขึ้นมา จะพบว่ามีค่าติดลบเสมอซึ่งหมายความว่า เป็นพลังงานที่ต้องให้หรือสูญเสีย(dissipation energy)



รูปที่ 3 ตัวอย่างสนามไฟฟ้า $E(t)$ และสภาพขั้วทางไฟฟ้า $p(t)$ เป็นฟังก์ชันกับเวลา รูปบนซ้ายแสดงสัญญาณสภาพขั้วทางไฟฟ้าและสนามไฟฟ้าภายนอกซึ่งเปลี่ยนแปลงตามกันโดยมีมุมเฟสเท่ากันตลอดเวลา(จะพบในสารพาราอิเล็กทริกแบบอุดมคติเท่านั้น) ส่วนรูปล่างซ้ายแสดงความหน่วงเฟสระหว่างสัญญาณสภาพขั้วทางไฟฟ้าและสนามไฟฟ้าภายนอกที่พบได้ทั่วไปสำหรับสารเฟอร์โรอิเล็กทริก และรูปทางด้านขวาแสดงวงฮิสเทอรีซิสของรูปทางด้านซ้าย (ดัดแปลงจาก Chakrabarti and Acharyya, 1999).



รูปที่ 4 วงฮิสเทอรีซิสของสารเฟอร์โรอิเล็กทริกบางชนิด

อย่างไรก็ตาม ในการศึกษาหากพิจารณาสมบัติฮิสเทอรีซิสของสารเฟอร์โรอิเล็กทริก จะมีตัวแปรหนึ่งที่สำคัญคืออุณหภูมิ หากอุณหภูมิมียุคสูงขึ้นความผันผวนเชิงความร้อนจะทำให้สภาพขั้วทางไฟฟ้าลดลง และถ้าหากสูงกว่าอุณหภูมิวิกฤต(ในทางทฤษฎี)จะทำให้วงฮิสเทอรีซิสหายไป เนื่องจากสารเฟอร์โรอิเล็กทริกเปลี่ยนไปอยู่ในสถานะพาราอิเล็กทริกแล้ว นอกจากอุณหภูมิแล้วตัวแปรอื่นๆ ที่สำคัญในการก่อเกิดวงฮิสเทอรีซิส คือ ความถี่ของสนามที่ก่อให้เกิดความหน่วงเฟสระหว่างสภาพขั้วทางไฟฟ้าและสนามดังที่กล่าวมาแล้ว และรวมทั้งแอมพลิจูดของสนามด้วย เนื่องจากเป็นตัวกำหนดพลังงานสูงสุดที่จ่ายให้กับระบบ

ผลของความหน่วงเฟสของระบบเฟอร์โรอิเล็กทริกภายใต้สนามไฟฟ้าที่แปรเปลี่ยนตามเวลาที่ก่อให้เกิดสมบัติฮิสเทอรีซิสนี้ นำมาซึ่งปรากฏการณ์ทางฟิสิกส์และการประยุกต์ใช้ที่สำคัญ หากพิจารณาสมบัติสภาพขั้วทางไฟฟ้าคงค้าง และสนามไฟฟ้าหักล้าง จะสามารถนำไปประยุกต์ใช้ในการสร้างหม้อแปลงไฟฟ้า (transformer) ซึ่งสารเฟอร์โรอิเล็กทริกควรจะเป็นแบบอ่อน (มีค่าสนามไฟฟ้าหักล้างที่ต่ำ) และ สื่อบันทึกข้อมูลที่มีความจุสูง (high-capacity magnetic recording media) ซึ่งควรจะทำจากสารเฟอร์โรอิเล็กทริกแบบแข็ง (มีค่าสนามลบกลับที่สูงเพื่อเสถียรภาพของข้อมูล) ดังนั้น จากประโยชน์ในแง่การประยุกต์ใช้ทำให้การศึกษาฮิสเทอรีซิสเป็นสิ่งจำเป็น

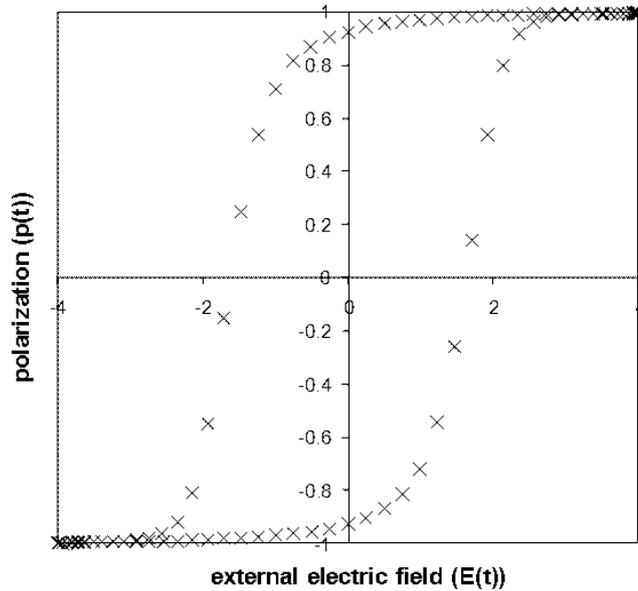
ในด้านของการทดลอง จากการศึกษาที่ผ่านมาเกี่ยวกับสารเซรามิกส์ เช่น สาร PZT ได้มีการทำการวัดสมบัติฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้า แล้วทำการหาความสัมพันธ์ในรูปแบบเลขชี้กำลังในลักษณะ

1. การหาความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่วงฮิสเทอรีซิส A กับความถี่ f และแอมพลิจูด E_0 ของสนามของสาร PZT แบบอ่อนได้ความสัมพันธ์ในลักษณะ $A \propto f^{-1/4} E_0$ (Yimnirun *et al.*, 2006a)
2. การหาความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่วงฮิสเทอรีซิส กับความเค้น σ ความถี่ f และแอมพลิจูด E_0 ของสนามของสาร PZT แบบอ่อนได้ความสัมพันธ์ในลักษณะ $A - A_0 \propto \sigma^{0.44} f^{-0.25} E_0$ เมื่อ A_0 คือ พื้นที่วงเมื่อไม่มีการจ่ายความเค้น σ (Yimnirun *et al.*, 2006b)
3. การหาความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่วงฮิสเทอรีซิส กับอุณหภูมิ T ของสาร PZT แบบอ่อนได้ความสัมพันธ์ในลักษณะ $A \propto T^{-1.1024}$ (Yimnirun *et al.*, 2007a)
4. การหาความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่วงฮิสเทอรีซิส A กับความถี่ f และแอมพลิจูด E_0 ของสนามของสาร PZT แบบแข็งได้ความสัมพันธ์ในลักษณะ $A \propto f^{-0.43} E_0^{3.19}$ (Yimnirun *et al.*, 2007b)
5. การหาความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่วงฮิสเทอรีซิส กับอุณหภูมิของสาร PZT แบบแข็งได้ความสัมพันธ์ในลักษณะ $A \propto T^{-0.9650}$ (Yimnirun *et al.*, 2007c)

ทั้งนี้ในการหาความสัมพันธ์ดังกล่าวจะใช้สมมติฐานว่า ความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่วงเป็นฟังก์ชันเลขชี้กำลังกับปัจจัยภายนอกเสมอ ในกรณีที่มีตัวแปรต้น(ปัจจัยภายนอก)มากกว่าหนึ่งตัวแปรจะทำการพิตค่าข้อมูลที่ละตัวแปร เช่น ถ้าต้องการพิตข้อมูล A กับ f ก็จะทำให้ตัวอื่นคงที่ทั้งหมดหลังจากที่ได้เลขชี้กำลังของ f แล้วจะทำการแทนค่ากลับเข้าไปแล้วทำการพิตกับ E_0 ในภายหลังอย่างไรก็ตาม เมื่อจำนวนตัวแปรเพิ่มเป็น 3 ตัว เช่น มี σ หรือ T จะก่อให้เกิดความยุ่งยากเป็นอย่างมาก โดยเฉพาะอย่างยิ่ง เมื่อตัวแปรที่ 3 เป็นอุณหภูมิ T ทำให้ เลขชี้กำลังของ f เป็นฟังก์ชันกับตัวแปรอื่นด้วย เช่น E_0 นอกจากนี้ ในการพยายามที่จะพิตทุกค่าพร้อมกันพบว่าได้ค่า R-Square ที่ไม่ดีนัก นอกจากนั้น ยังต้องใช้ข้อมูลทั้งหมดในการพิตข้อมูล ทำให้ไม่มีการเปรียบเทียบว่า ฟังก์ชันสมการความสัมพันธ์ที่ได้สามารถนำมาใช้ทำนายข้อมูลที่ยังไม่ได้ทำการทดลองได้ดีเพียงใด ด้วยเหตุนี้ จึงควรมีวิธีทำนายข้อมูลโดยที่ไม่ต้องใช้ข้อมูลทั้งหมด โดยที่สามารถหาความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรต้นและตัวแปรตามได้ (เหมาะสมกับการนำไปประยุกต์ใช้ได้อย่างรวดเร็ว โดยไม่ต้องหาความสัมพันธ์จริงๆในรูปสมการทางคณิตศาสตร์ เช่น สมการเลขชี้กำลัง) ทั้งนี้ สมบัติฮิสเทอรีซิสที่แท้จริงในธรรมชาติอาจจะยุ่งยากมาก จนการสมมติให้อยู่ในรูปฟังก์ชันเลขชี้กำลังไม่เหมาะสมในทุกช่วงค่าของตัวแปรต้นที่เป็นไปได้

2.3 การคำนวณหาพื้นที่วงฮิสเทอรีซิส

โดยทั่วไปวงฮิสเทอรีซิสที่วัดได้จากการทดลอง จะประกอบด้วยข้อมูลโพลาริเซชันทางไฟฟ้า และที่เก็บตามค่าของสนามไฟฟ้าค่าต่างๆ เกิดเป็นคู่อันดับของข้อมูลจำนวนหลายๆคู่ เกิดเป็นวงฮิสเทอรีซิสดังแสดงในรูปที่ 5



รูปที่ 5 ตัวอย่างรูปฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้า ซึ่งตำแหน่งที่ใช้ในการพิจารณาค่าสภาพโพลาริเซชันคงค้าง ($\pm p_r$) และ ค่าสนามไฟฟ้าลบกลับ ($\pm E_c$) คือตำแหน่งที่ตัดแกน p และแกน E ตามลำดับ จากรูปแสดงค่าที่ได้การจำลองสถานการณ์จำนวน 100 คู่อันดับข้อมูล (E_i, p_i)

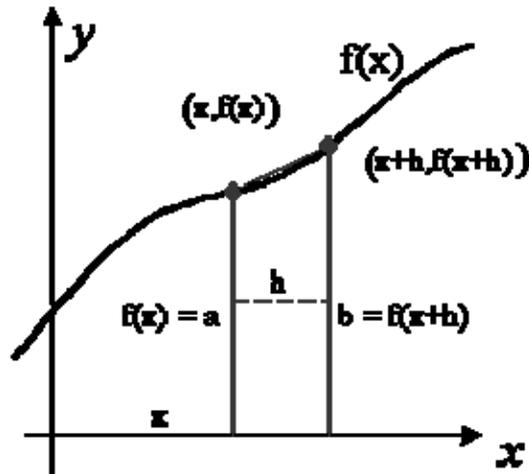
ทั้งนี้ ในการหาพื้นที่ใต้กราฟของฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์ใดๆ เช่น วงฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้า ซึ่งแสดงความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลโพลาริเซชันกับสนามไฟฟ้านั้นจะสามารถหาได้ดังสมการ

$$A = \oint PdE \quad (1)$$

อย่างไรก็ตาม ในทางปฏิบัตินั้นจะพบว่าข้อมูลที่นั้นไม่ได้เป็นข้อมูลแบบต่อเนื่อง แต่จะเป็นข้อมูลแบบไม่ต่อเนื่อง ดังนั้นในการหาพื้นที่จะใช้วิธีการทางคณิตศาสตร์เพื่อประมาณค่าของพื้นที่ ซึ่งในการวิจัยนี้จะเลือกวิธีการสี่เหลี่ยมคางหมู (trapezoidal method) ซึ่งเป็น การประมาณหาพื้นที่ใต้กราฟ เช่น ดังรูปที่ 6 ซึ่งจะสามารถหาพื้นที่ใต้กราฟของรูปสี่เหลี่ยมคางหมูได้ดังสมการ

$$A = \frac{1}{2} [f(x) + f(x+h)]h \quad (2)$$

เมื่อ h คือผลต่างในแนวแกน x ซึ่งจะเห็นได้ว่าถ้าค่า h มีค่าน้อยๆ จะทำให้พื้นที่ที่ทำการประมาณนั้นมีค่าเข้าใกล้ค่าพื้นที่จริงมากขึ้น



รูปที่ 6 การหาพื้นที่ใต้กราฟโดยวิธีสี่เหลี่ยมคางหมู

ดังนั้น เมื่อพิจารณาวงฮิสเทอริซิสจะได้แกน y คือค่าโวลตาไรเซชัน (P) และแกน x คือค่าสนามไฟฟ้าภายนอก (E) ดังนั้นจะสามารถคำนวณหาค่าพื้นที่ของวงฮิสเทอริซิสได้ดังนี้

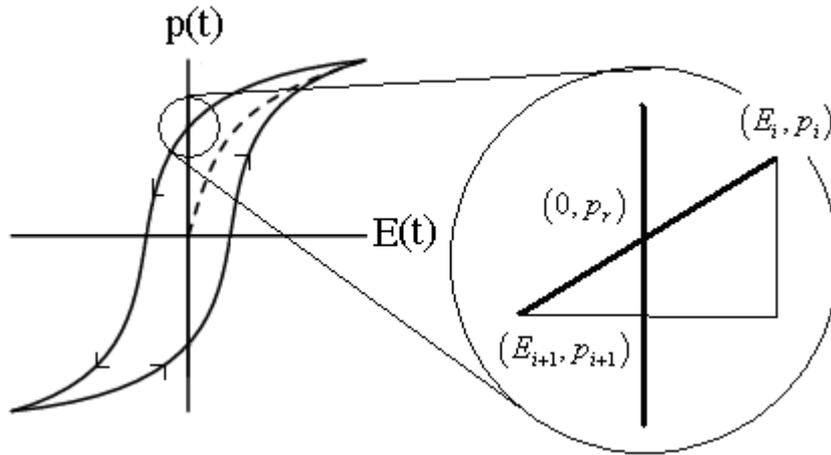
$$A = \sum_i \frac{1}{2} (P_{i+1} + P_i) (E_{i+1} - E_i) \quad (3)$$

เมื่อ i คือ ดัชนีในการระบุตำแหน่ง(เวลา)ข้อมูลที่บันทึกในช่วงเวลาต่างๆของการกวัดแกว่งสนามไฟฟ้าในหนึ่งรอบ(หนึ่งคาบ)

2.4 การหาค่าเฉลี่ยของค่าโวลตาไรเซชันคงค้าง และค่าสนามไฟฟ้าหักล้าง

ในการวิจัยครั้งนี้ นอกจากจะพิจารณาลักษณะและพื้นที่ใต้กราฟของวงฮิสเทอริซิสแล้ว ยังพิจารณาคคุณสมบัติอื่นๆของวงฮิสเทอริซิสด้วย คือ ค่าโวลตาไรเซชันคงค้าง และค่าสนามไฟฟ้าหักล้าง เพื่อใช้ในการอธิบายผลกระทบที่เกิดจากความเค้นเชิงกลแบบแกนเดี่ยวอีกด้วย

ค่าโวลตาไรเซชันคงค้าง คือค่าของโวลตาไรเซชันเมื่อสนามไฟฟ้าภายนอกมีค่าเท่ากับศูนย์ นั่นคือ เมื่อพิจารณาวงฮิสเทอริซิส ค่าโวลตาไรเซชันคงค้างคือจุดตัดของแกน y ดังแสดงในรูปที่ 7



รูปที่ 7 การหาค่าสภาพโพลาริเซชันคงค้างค่าบวก โดยการพิจารณาสามเหลี่ยมคล้าย

ในการวิจัยนี้ได้บันทึกฮิสเทอรีซิสหลาย ๆ วงเพื่อหาค่าเฉลี่ย ซึ่งค่าเฉลี่ยของโพลาริเซชันคงค้างจะหาได้จาก

1. ตั้งตัวแปรที่จะเก็บค่าผลรวมของโพลาริเซชันคงค้างที่เกิดขึ้นแต่ละวง ซึ่งในที่นี้จะตั้งให้ P_r^+ คือโพลาริเซชันคงค้างที่เป็นบวก และ P_r^- คือโพลาริเซชันคงค้างที่มีค่าเป็นลบ และตัวแปรที่จะเก็บจำนวนครั้งของการเกิดค่าโพลาริเซชันคงค้าง โดย $count P_r^+$ เก็บจำนวนครั้งที่เป็นบวก และ $count P_r^-$ เก็บจำนวนครั้งที่เป็นลบ
2. ตรวจสอบในแต่ละวงฮิสเทอรีซิสที่บันทึกผลคำนวณหาค่าโพลาริเซชันคงค้าง ถ้าพบว่าเป็นบวกให้เก็บค่าใน P_r^+ แต่ถ้าเป็นด้านลบให้เก็บในค่า P_r^- แล้วทำการนับจำนวนครั้งที่เกิดขึ้น
3. เมื่อสิ้นสุดการบันทึกผลให้นำค่า P_r^+ หาค่าด้วย $count P_r^+$ จะได้ค่าเฉลี่ยของค่าโพลาริเซชันคงค้างที่เป็นค่าบวก และในทำนองเดียวกันให้นำค่า P_r^- หาค่าด้วย $count P_r^-$ เพื่อหาค่าที่เป็นลบ
4. ในการทดลอง ในกรณีที่วงฮิสเทอรีซิสมีความสมมาตรทางด้านสนามค่าบวกและลบ จะพิจารณาให้ขนาด ของ P_r^+ และ P_r^- มีค่าใกล้เคียงกัน ดังนั้น ค่า P_r ที่เป็นตัวแทนของเงื่อนไขหนึ่งๆในการทดลองจะหาได้จาก

$$P_r = \frac{P_r^+ + |P_r^-|}{2} \quad (4)$$

ทั้งนี้ในการหาค่า P_r^+ และ P_r^- นั้น หาได้โดยการประมาณเชิงเส้น นั่นคือประมาณจากการความชันของจุดสองจุดที่อยู่ใกล้กับแกน y ดัง รูปที่ 8 สามารถเขียนได้ว่า

$$slope = \frac{P_1 - P_2}{E_1 - E_2} = \frac{P_1 - P_r}{E_1 - 0} \quad (5)$$

โดยที่ตำแหน่ง 1 และ 2 คือ ตำแหน่งเมื่อสนามมีค่ามากกว่าศูนย์และน้อยกว่าศูนย์ตามลำดับเมื่อต้องการหาค่าโพลาริเซชันคงค้ำด้านบวก และ คือ ตำแหน่งเมื่อสนามมีค่าน้อยกว่าศูนย์และมากกว่าศูนย์ตามลำดับเมื่อต้องการหาค่าโพลาริเซชันคงค้ำด้านลบ ผลที่ตามมาหาเมื่อทำการย้ายข้างสมการจะได้ว่า

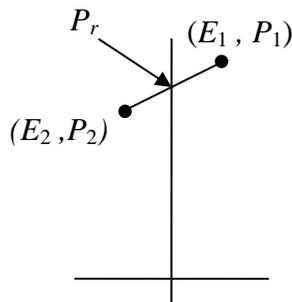
$$P_r = P_1 - E_1 \left(\frac{P_1 - P_2}{E_1 - E_2} \right) \quad (6)$$

และในทำนองเดียวกัน จะสามารถคำนวณหาค่าสนามไฟฟ้าหักล้างได้โดยการพิจารณาเช่นเดียวกันกับค่าโพลาริเซชันคงค้ำ ซึ่งจะได้สมการดังนี้

$$E_c = E_1 - P_1 \left(\frac{E_1 - E_2}{P_1 - P_2} \right) \quad (7)$$

โดยที่ตำแหน่ง 1 และ 2 คือ ตำแหน่งเมื่อโพลาริเซชันมีค่ามากกว่าศูนย์และน้อยกว่าศูนย์ตามลำดับเมื่อต้องการหาค่าสนามไฟฟ้าหักล้างด้านลบ และ คือ ตำแหน่งเมื่อโพลาริเซชันมีค่าน้อยกว่าศูนย์และมากกว่าศูนย์ตามลำดับเมื่อต้องการหาสนามไฟฟ้าหักล้างด้านบวก และค่าสนามหักล้างที่เป็นตัวแทนของเงื่อนไขหนึ่งๆในการทดลองจะหาได้จาก

$$E_c = \frac{E_c^+ + |E_c^-|}{2} \quad (8)$$



รูปที่ 8 แสดงการหา P_r โดยการประมาณให้ระหว่างจุดสองจุดมีความชันเท่ากัน

2.5 การออกแบบโครงข่ายประสาทเทียม

ในการประยุกต์ใช้งานโครงข่ายประสาทเทียมเพื่อทำการทำนายข้อมูลนั้น ได้มีการใช้งานอย่างหลากหลายโดยเฉพาะอย่างยิ่งในทางอุตสาหกรรม ตัวอย่างที่สามารถแสดงได้ดังนี้ คือ

Published Year	Application type	Descriptions
1990	System-level Decision Making	To determine operational policies for hierarchical manufacturing systems under a multiple criteria decision making framework
1999	Part classification and coding	Part classification system to facilitate the retrieving and reviewing similar parts from the part polygon picture database
1999	Part-Family and Machine Cell	To cluster machine cells in cellular manufacturing
1993	Process Selection	to combine human and machine intelligence to achieve integrated collaborative planning
1993	Process Sequencing	To automate the process selection and task sequencing in machining processes
1995	Job Scheduling	To determine the scheduling rule from the shop floor status and dispatching rules classified by a neural network composed of adalines
2006	Machining Process Optimization	To establish the nonlinear multivariate relationships between wire boning parameters and responses by MLP_BP. Finally, a GA is adopted to find the most desired parameter
1993	Machining Process Monitoring	To detect machine faults from Frequency domain analyzed by MLP_BP
1993	Failure detection	To monitor machine degradation and

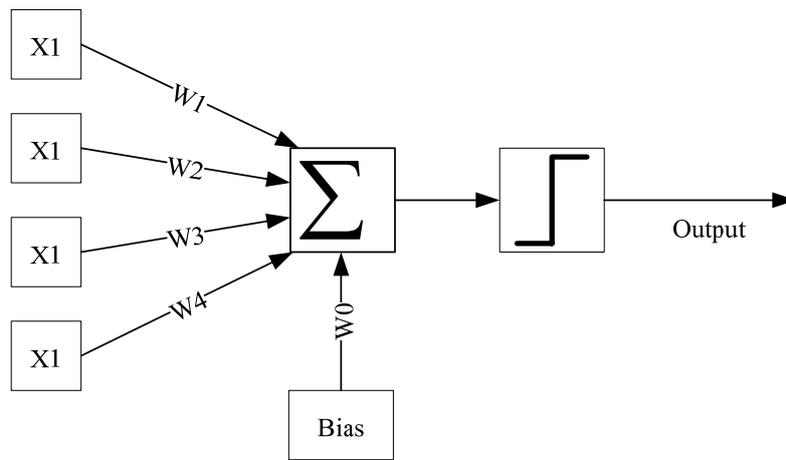
Published Year	Application type	Descriptions
		detecting faults or failures provided by a pattern discrimination model, based on CMAC
1993	Process control	To control laser heating for a fiber placement composite manufacturing process
1998	Tool wearing monitoring	To identify tool wear based on process parameters, cutting forces, and acoustic emission measures of the cutting process
1991	Surface roughness inspection	To control and inspect surface Roughness related to R_{max} forecasting by MLP_BP
1993	Sampling plan determination	To determining multistage and multiattribute acceptance sampling inspection plans for quality assurance in serial production systems.
1999	Statistical process control	To identify the patterns in the control chart by taking 16 consecutive points

ดัดแปลงจาก: Wang and Kusiak (2001)

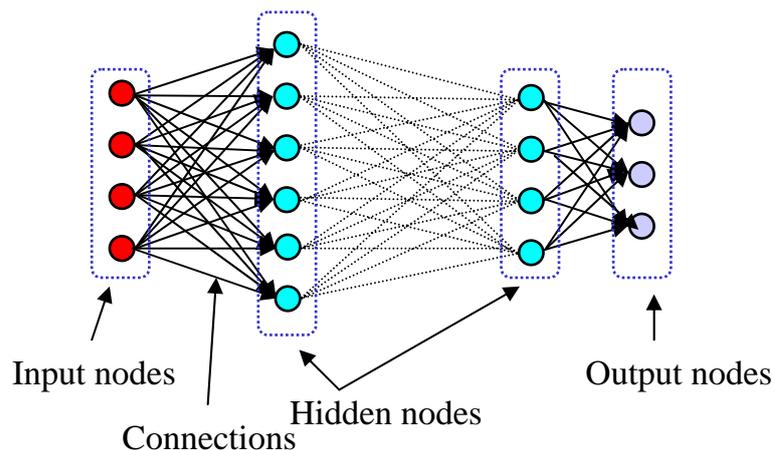
สำหรับในการใช้งานโครงข่ายประสาทเทียมในด้านวัสดุศาสตร์ ได้มีการใช้เพื่อทำนายหาความสัมพันธ์ระหว่างปัจจัยต้น คือ เวลาเผาแซ่ อุณหภูมิแคลไซน์ และอัตราชั้นลงของอุณหภูมิที่มีต่อการเตรียมผง $NiNb_2O_6$ (NN) เพื่อให้ได้เฟสของสารที่บริสุทธิ์ที่สุด โดยที่เปอร์เซ็นต์ความบริสุทธิ์เป็นปัจจัยตาม ซึ่งได้ให้ทราบว่าปัจจัยใดมีผลต่อความบริสุทธิ์ของสารมากที่สุด นอกจากนั้นยังสามารถทำนายเปอร์เซ็นต์ความบริสุทธิ์ได้ถูกต้อง (Laosiritaworn *et al.*, 2008) แสดงให้เห็นถึงความสามารถในการประยุกต์โครงข่ายประสาทเทียมในทางด้านวัสดุศาสตร์เป็นอย่างดี ดังนั้นในการศึกษาวิจัยนี้ จะนำข้อมูลสมบัติอิทธิสเทอร์ซิสทางไฟฟ้าของสารเฟอร์โรอิเล็กทริก มาทำการออกแบบโครงข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมกับชนิดของข้อมูล

โครงข่ายประสาทเทียม (Artificial Neural Network: ANN) คือแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ เพื่อจำลองการทำงานของเครือข่ายประสาทในสมองมนุษย์ (Kevin, 1997) ตัวโครงข่ายประสาทเทียม คือการรวมกลุ่มแบบขนานของหน่วยประมวลผลย่อย ๆ ที่ช่วยให้เกิดการ

เรียรู้ยั้งคงสามารถถูกจำลองขึ้นอย่างง่ายด้วยโครงข่ายประสาทนี้ดังแสดงในรูปที่ 9 และในการวิเคราะห์ข้อมูลโครงข่ายประสาทเทียมจะทำการรวมหน่วยประสาทเทียม(ดังรูปที่ 9) ขึ้นเป็นโครงข่าย โดยจะต้องพิจารณาทั้งปัจจัยนำเข้าและผลลัพธ์ควบคู่กันไป ดังรูปที่ 10 โดยจำลองให้ปัจจัยนำเข้าแต่ละอันมี ค่าน้ำหนัก (weight) เป็นตัวกำหนดน้ำหนักของปัจจัยนำเข้า โดยโครงข่ายประสาทเทียมแต่ละหน่วยจะมีค่าระดับมูลฐาน (threshold) เป็นตัวกำหนดว่าน้ำหนักรวมของปัจจัยนำเข้าต้องมากขนาดไหนจึงจะสามารถส่งผลลัพธ์ไปยังโครงข่ายประสาทเทียมตัวอื่นได้ (Kumar, 2005)



รูปที่ 9 แบบจำลองการรู้จำหน่วยประสาทเทียมในคอมพิวเตอร์
(ที่มา <http://www.sageintelligent.com/product.html>)



รูปที่ 10 โครงสร้างวงจรโครงข่ายประสาทเทียม
(ที่มา <http://www.sageintelligent.com/product.html>)

ในการทำงานของโครงข่ายประสาทเทียม มีปัจจัยและเทคนิคการคำนวณที่สำคัญ ซึ่งสามารถแสดงได้ดังต่อไปนี้

1. ค่าน้ำหนัก (weight) ในการทำงานของเซลล์ประสาทหนึ่ง จะรับปัจจัยนำเข้าหลายปัจจัย ซึ่งค่าน้ำหนักนี้จำเป็นต้องใช้ในการรวบรวมสัญญาณปัจจัยนำเข้าของเซลล์ประสาท ซึ่งค่าน้ำหนักทำหน้าที่เปรียบเสมือนไซแนปส์ในระบบเซลล์ประสาทจริง ปัจจัยนำเข้าแต่ละตัวจะมีความสัมพันธ์กับค่าน้ำหนัก ซึ่งในบางกรณีปัจจัยนำเข้าบางตัวมีความสำคัญมากกว่าปัจจัยตัวอื่น ๆ การเลือกใช้ค่าน้ำหนักจึงมีผลต่อประสิทธิภาพของโครงข่ายประสาทเทียม
2. ฟังก์ชันการรวม (summation function) หรือฟังก์ชันมูลฐาน (basic function) ในการทำงานของเซลล์ประสาท คือการหาผลรวมของสัญญาณปัจจัยนำเข้ากับค่าน้ำหนักที่เข้ามาก่อน โดยฟังก์ชันมูลฐานจะทำหน้าที่ในการรวมนี้ ซึ่งฟังก์ชันมูลฐานสามารถแบ่งออกเป็น 2 ประเภท คือ
 - ก. ฟังก์ชันมูลฐานเชิงเส้น (linear basis function) เป็นฟังก์ชันชนิดไฮเปอร์เพลน (Hyperplane) โดยเป็นฟังก์ชันมูลฐานอันดับที่หนึ่ง ผลรวมจากการรวมสัญญาณปัจจัยนำเข้า ดังแสดงในสมการที่ (9)

$$u_i = \sum_{j=1}^n w_{ij} x_j \quad (9)$$

เมื่อ u_i = ผลรวมจากการรวมสัญญาณของปัจจัยนำเข้าชั้นที่ i

w_{ij} = น้ำหนักของเส้นเชื่อมระหว่างชั้นที่ i กับ j

x_j = ค่าผลลัพธ์จากเซลล์ประสาทชั้นที่ j

- ข. ฟังก์ชันมูลฐานเชิงรัศมี (radial basis function) เป็นฟังก์ชันชนิดไฮเปอร์สเฟียร์ (Hypersphere) เป็นฟังก์ชันมูลฐานอันดับที่สอง ผลรวมจากการรวมสัญญาณปัจจัยนำเข้า ดังแสดงในสมการที่ (10)

$$u_i = \sqrt{\sum_{j=1}^n (x_j - w_{ij})^2} \quad (10)$$

เมื่อ u_i = ผลรวมจากการรวมสัญญาณของปัจจัยนำเข้าชั้นที่ i

w_{ij} = น้ำหนักของเส้นเชื่อมระหว่างชั้นที่ i กับ j

x_j = ค่าผลลัพธ์จากเซลล์ประสาทชั้นที่ i

- ค. ฟังก์ชันกระตุ้น (activation function) หรือทรานเฟอร์ฟังก์ชัน (transfer function) ทำหน้าที่ประมวลผลรวมของสัญญาณให้เป็นผลลัพธ์ของเซลล์ประสาท ซึ่งการเลือกใช้ฟังก์ชันกระตุ้นมีผลต่อประสิทธิภาพการทำงานของโครงข่ายประสาทเทียม ทั้งนี้ ปัจจัยนำเข้าของ

เซลล์ประสาทจะถูกนำมารวมกันก่อนโดยใช้ฟังก์ชันมูลฐาน ก่อนที่ผลลัพธ์ที่ออกจากฟังก์ชันมูลฐานจะถูกแปลงด้วยฟังก์ชันกระตุ้น ดังแสดงในสมการที่ (11)

$$I_i = \sum w_{ij}x_j + w_{i,n+1} \quad (11)$$

เมื่อ $x_j =$ ค่าผลลัพธ์จากเซลล์ประสาทชั้นที่ j

$w_{ij} =$ น้ำหนักของเส้นเชื่อมระหว่างชั้นที่ i กับ j

$n =$ จำนวนเซลล์ประสาทในชั้นปัจจุบัน

ผลรวมของปัจจัยนำเข้าไปในสมการที่ (11) จะถูกแปลงด้วยฟังก์ชันกระตุ้นเป็นผลลัพธ์ของเซลล์ประสาท ดังสมการที่ (12)

$$O_i = \Omega(I_i) \quad (12)$$

เมื่อ $O_i =$ ค่าผลลัพธ์จากเซลล์ประสาท ซึ่งเป็นค่าปัจจัยนำเข้าไปของเซลล์ประสาทตัวอื่นในชั้นถัดไป หรือเป็นค่าผลลัพธ์ของโครงข่ายประสาทเทียม

$\Omega =$ ฟังก์ชันกระตุ้น

โดยทั่วไปโครงข่ายประสาทเทียมแบบหลายชั้นจำนวนหน่วยประสาทเทียมของแต่ละชั้นไม่จำเป็นต้องเท่ากันและฟังก์ชันกระตุ้นแต่ละชั้นก็ไม่จำเป็นต้องเหมือนกัน ฟังก์ชันถ่ายโอนที่นิยมใช้ในโครงข่ายประสาท ได้แก่ ฟังก์ชันเฮฟวิไซด์ (Heaviside Function) ซึ่งมีรูปแบบดังสมการที่ (13) ฟังก์ชันเชิงเส้นเป็นช่วง (Piecewise Linear Function) ดังสมการที่ (14) ฟังก์ชันซิกมอยด์ (Sigmoid Function) เช่น ฟังก์ชันไฮเพอร์โบลิกแทน (Hyperbolic Tangent Function) ดังสมการที่ (15) ฟังก์ชันซิกมอยด์ (Logistic Function) ดังสมการที่ (16)

- ฟังก์ชันเฮฟวิไซด์

$$f(v) = \begin{cases} 1 & , v \geq 0 \\ 0 & , v < 0 \end{cases} \quad (13)$$

- ฟังก์ชันช่วงเชิงเส้น

$$f(v) = \begin{cases} 0 & , v \leq -1/2 \\ v & , -1/2 < v < 1/2 \\ 1 & , v \geq 1/2 \end{cases} \quad (14)$$

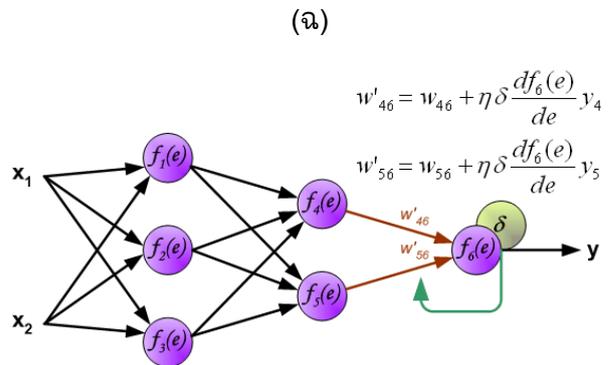
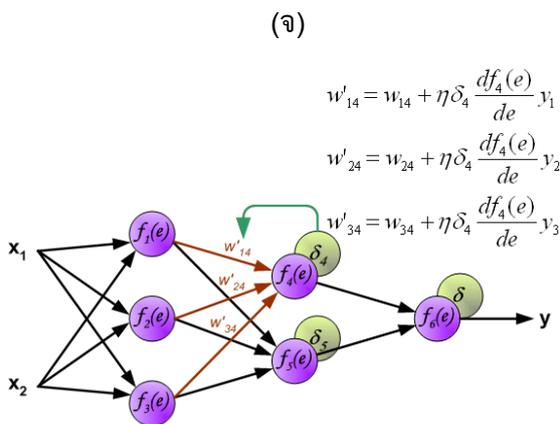
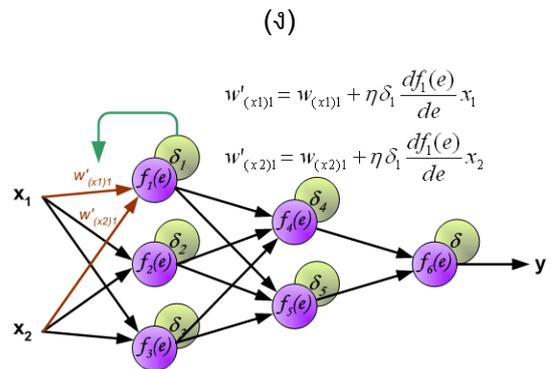
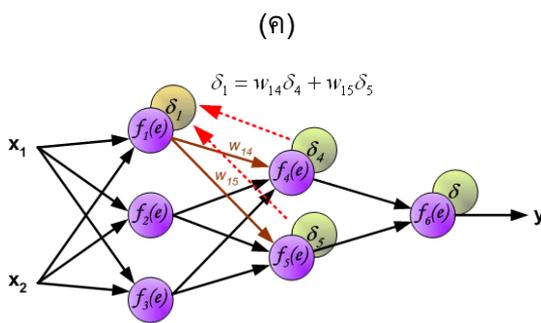
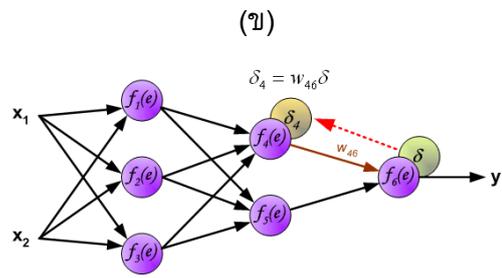
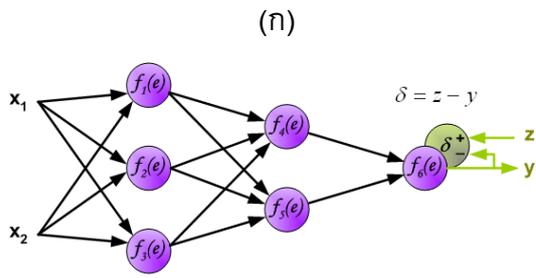
- ฟังก์ชันไฮเพอร์โบลิกแทน

$$f(v) = \frac{1 - \exp(-av)}{1 + \exp(-av)} \quad (15)$$

- ฟังก์ชันซิกมอยด์

$$f(v) = \frac{1}{1 + \exp(-\alpha v)} \quad (16)$$

- ง. การปรับขอบเขตและกำหนดช่วงของข้อมูลที่ใช้ฝึก (scaling and limiting) สำหรับการปรับขอบเขตของชุดข้อมูลอยู่ในช่วงการทำงานของทรานส์เฟอร์ฟังก์ชัน
 - จ. ค่าผิดพลาด (error) ในการฝึกและการเรียนรู้ของโครงข่ายประสาทเทียม จะใช้ค่าผิดพลาดระหว่างผลลัพธ์ของโครงข่ายประสาทเทียมกับข้อมูลเป้าหมาย ไปใช้ในการปรับค่าน้ำหนักรูปแบบที่ใช้ในการปรับขึ้นอยู่กับแนวทางการฝึกโครงข่ายประสาทเทียมที่เลือกใช้
 - ฉ. อัตราการเรียนรู้ (learning rate) การใช้อัตราการเรียนรู้ที่มีค่าสูง ๆ นั้นอาจทำให้โครงข่ายประสาทเทียมไม่สามารถให้ผลตอบสนองที่ดีได้ พบว่าช่วยให้โครงสร้างประสาทเทียมการเรียนรู้ได้ง่ายขึ้น แต่อาจจะมีผลทำให้ผลตอบสนองของโครงข่ายประสาทเทียมเกิดการแกว่ง คือมีการลดลงของค่าผิดพลาดที่เร็วและลดลงมากเกินไป ทำให้ค่าผิดพลาดที่ลดลงถึงจุดที่กำหนดและโครงข่ายประสาทเทียมหยุดทำการฝึกเร็วเกินไป
3. การเรียนรู้แบบแพร่ย้อนกลับ (back propagation) วิธีการหนึ่งที่นิยมใช้ในการปรับค่าน้ำหนักในเส้นเชื่อมโครงข่ายประสาทเพื่อให้ได้ค่าการทำนายที่ถูกต้อง(กับเป้าหมาย)มากที่สุด คือ การปรับน้ำหนักด้วยวิธีการเรียนรู้แบบแพร่ย้อนกลับ ซึ่งจะใช้ค่าผลต่างระหว่างค่าที่ทำนายได้กับค่าผลลัพธ์ในการปรับค่าน้ำหนักในเส้นเชื่อมต่อระหว่างโหนดให้เหมาะสม ดังแสดงใน
 4. รูปที่ 11 คือ จะคำนวณหาผลต่างระหว่างค่าผลลัพธ์กับเป้าหมาย คือ $\delta = z - y$ (รูป ก) จากนั้นคำนวณหาการปรับปรุงค่า δ สำหรับโหนดในชั้นซ่อนแต่ละชั้น (รูป ข และ ค) จากนั้น นำค่า δ ของแต่ละโหนดเพื่อไปคำนวณหาค่าน้ำหนักที่ปรับปรุง (รูป ง ถึง ฉ)



รูปที่ 11 รูปแบบการปรับค่าน้ำหนักในโครงข่ายประสาทเทียมการเรียนรู้แบบแพร่ย้อนกลับ
 (ที่มา : http://galaxy.agh.edu.pl/~vlsi/AI/backp_t_en/backprop.html)

5. ขั้นตอนการทำนายผลด้วยวิธีโครงข่ายประสาทเทียม จากรายละเอียดข้างต้น วิธีการโครงข่ายประสาทเทียมและการปรับค่าน้ำหนักโดยการเรียนรู้แบบแพร่ย้อนกลับ สามารถแจกแจงรายละเอียดโดยคร่าว ๆ ได้ดังนี้
- กำหนดค่าเริ่มต้นให้กับค่าน้ำหนัก (w_{ij}) ที่เชื่อมต่อระหว่างเซลล์ประสาทในแต่ละชั้น เริ่มกำหนดโดยใช้การสุ่มค่าน้ำหนักที่มีค่าน้อย ๆ
 - กำหนดชุดข้อมูลที่เป็นผลลัพธ์ และชุดข้อมูลที่เป็นค่าเป้าหมายของโครงข่ายประสาทเทียม โดยใส่ข้อมูลที่ใช้เป็นปัจจัยนำเข้าให้กับชั้นผลลัพธ์ ในกรณีที่ชุดข้อมูลที่ใช้ในการฝึกเป็นชุดข้อมูลที่เป็นลำดับซึ่งเปลี่ยนแปลงตามเวลา ในการปรับค่าน้ำหนักที่เหมาะสมกับชุดข้อมูล จะเริ่มจากการทำการป้อนข้อมูลให้กับชั้นปัจจัยนำเข้า และคำนวณค่าผลลัพธ์ของโครงข่ายประสาทเทียม โดยใช้สมการที่ (11) และ (12) ในการคำนวณ
 - ปรับค่าน้ำหนักของทุกชั้นด้วยวิธีการเรียนรู้แบบแพร่ย้อนกลับ โดยใช้สมการที่ (17) และ (18) ในการคำนวณ

$$w_{(t+1)} = w_{(t)} + \eta \delta x \quad (17)$$

$$\delta = y(1 - y)(d - y) \quad (18)$$

- เมื่อ
- η = อัตราการเรียนรู้
 - δ = ค่าผิดพลาด
 - x = ข้อมูลที่เป็นปัจจัยนำเข้าของโครงข่ายประสาทเทียม
 - d = ข้อมูลเป้าหมาย
 - y = ผลลัพธ์ของโครงข่ายประสาทเทียม

- ดำเนินการซ้ำจากขั้นตอน ข ถึง ค สำหรับทุกชุดข้อมูล และทำการตรวจสอบค่าผิดพลาดกับค่าผิดพลาดต่ำสุดที่ตั้งไว้ โดยขั้นตอนในการปรับน้ำหนักจะยุติก็ต่อเมื่อค่าความผิดพลาดในการเรียนรู้มีค่าน้อยกว่าค่าผิดพลาดต่ำสุดที่กำหนดไว้
- เมื่อได้ค่าน้ำหนักที่ให้ความถูกต้องมากที่สุด จะนำค่าน้ำหนักเหล่านั้นมาใช้ในการคำนวณหรือทำนายค่าที่ต้องการ

ในโครงการวิจัยนี้ ชุดข้อมูลที่นำเข้าจะได้แก่ตัวแปรต้นต่างๆ เช่น อุณหภูมิ ความถี่ของสนามไฟฟ้า แอมพลิจูดของสนามไฟฟ้า และความเค้นเชิงกล และตัวแปรผลลัพธ์ที่ต้องการทำนายคือ พื้นที่วงฮิสเทอรีซิส ขนาดความเป็นจตุรัสของวง โพลาริเซชันทางไฟฟ้าคงค้าง และ ขนาดสนามไฟฟ้าหักล้าง เป็นต้น

3. ผลการทดลอง และการวิจารณ์ผล

พิจารณาภาคผนวก ก. ข. ค. และ ง. (เพื่อหลีกเลี่ยงความซ้ำซ้อน)

4. บทสรุปโครงการ

ในโครงการวิจัยนี้ ได้ใช้วิธีการโครงข่ายประสาทเทียม เพื่อศึกษาสมบัติฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้าของสารเพโรอิเล็กทริก PZT (ทั้งแบบแข็งและแบบอ่อน) และ BT ภายใต้อิทธิพลของสนามไฟฟ้าภายนอก(ผ่านความถี่และแอมพลิจูดค่าหนึ่งๆ) ความเค้นภายนอกที่กระทำต่อระบบ และ ชนิดรูปแบบของโครงสร้างในระดับจุลภาค ซึ่งจากการวางแผนการทดลองในโครงการวิจัย สามารถแบ่งลักษณะของการศึกษาออกเป็น 4 แบบ คือ

1. การศึกษาสมบัติฮิสเทอรีซิสของสาร PZT แบบอ่อน ซึ่งวิธีโครงข่ายประสาทเทียมสามารถทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิสภายใต้การแปรค่าของความถี่ และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้าได้อย่างถูกต้อง
2. การศึกษาสมบัติฮิสเทอรีซิสของสาร PZT แบบแข็ง ซึ่งจากการศึกษาที่ผ่านมาด้วยจะต้องทำการแบ่งแยกวงฮิสเทอรีซิสที่เป็นวงย่อย(ยังไม่อิ่มตัว)ที่เกิดขึ้นที่แอมพลิจูดค่าต่ำๆ ออกจากวงฮิสเทอรีซิสที่อิ่มตัวซึ่งเกิดขึ้นเมื่อแอมพลิจูดมีค่าสูงพอ แล้วทำการสเกลด้วยฟังก์ชันเลขชี้กำลังต่างฟังก์ชันกัน โดยไม่สามารถหากฟังก์ชันการสเกลหนึ่งเดียวที่สามารถทำนายวงฮิสเทอรีซิสได้ทั้งสองแบบ อย่างไรก็ตาม ด้วยการศึกษาด้วยวิธีโครงข่ายประสาทเทียม จะสามารถทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิสภายใต้การแปรค่าของความถี่และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้าได้อย่างถูกต้อง โดยมีต้องทำการแยกศึกษาระหว่างวงฮิสเทอรีซิสย่อย และวงฮิสเทอรีซิสอิ่มตัวดังเช่นการศึกษาก่อนหน้า ซึ่งแสดงให้เห็นถึงศักยภาพของการสร้างแบบจำลองเพื่อทำนายผลที่ได้จากปัญหาจากวิธีโครงข่ายประสาทเทียม
3. การศึกษาสมบัติฮิสเทอรีซิสของสาร PZT แบบอ่อน ภายใต้ความเค้นเชิงกล ควบคู่กับการแปรค่าปัจจัยความถี่และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้า ซึ่งจากการศึกษาก่อนหน้าด้วยวิธีการสเกลด้วยฟังก์ชันเลขชี้กำลัง จะสามารถทำนายได้เพียงค่าความแตกต่างระหว่างพื้นที่วงฮิสเทอรีซิสที่เปลี่ยนแปลง(จากเมื่อไม่มีความเค้น)เป็นฟังก์ชันกับตัวแปรปัจจัยดังกล่าว อย่างไรก็ตาม ด้วยวิธีโครงข่ายประสาทเทียมสามารถทำนายค่าพื้นที่วงฮิสเทอรีซิสสัมบูรณ์ สำหรับแต่ละค่าความเค้นความถี่และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้า ซึ่งถือเป็นความสำเร็จอีกขั้นหนึ่งของการจัดการปัญหาด้วยวิธีโครงข่ายประสาทเทียม
4. การศึกษาสมบัติฮิสเทอรีซิสของสาร BT ที่มีโครงสร้างแบบเซรามิกและแบบผลึกเชิงเดี่ยวควบคู่กัน โดยจากการศึกษาก่อนหน้าด้วยวิธีการสเกลด้วยฟังก์ชันเลขชี้กำลังนั้นจะต้องใช้ฟังก์ชันการ

สเกลที่ต่างกันสำหรับ BT แบบเซรามิกและแบบผลึกเชิงเดี่ยว เนื่องจาก BT ทั้งสองแบบตอบสนองต่อความสนามไฟฟ้าในช่วงแอมพลิจูดที่ต่างกันมาก อย่างไรก็ตาม โดยการกำหนดชนิดของโครงสร้าง BT ให้เป็นหนึ่งในปัจจัยนำเข้า(ตัวแปรต้น) พบว่าสามารถทำนายค่าพื้นที่วงฮิสเทอรีซิสสำหรับแต่ละความถี่และแอมพลิจูดของสนามไฟฟ้าได้ถูกต้อง ทำให้เป็นที่ประจักษ์แน่ชัดว่าวิธีโครงข่ายประสาทเทียมสามารถจัดการปัญหาแบบจัดกลุ่ม (classification) ควบคู่ไปกับการประมาณทำนายค่า (estimation) ในคราวเดียวกันได้เป็นอย่างดี และสำหรับในปีพญานี้ (ปัญหาโครงสร้างต่างประเภทต่างแบบของสาร BT แต่ยังคงเป็นสารเดียวกัน) วิธีโครงข่ายประสาทเทียมช่วยทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิสได้ถูกต้องภายในช่วงที่สาร BT ทั้งสองตอบสนองต่อการเปลี่ยนแปลงของสนามไฟฟ้าอย่างมีนัยสำคัญ ซึ่งเป็นประโยชน์อย่างยิ่ง เนื่องจากไม่จำเป็นต้องใช้ฟังก์ชันการสเกลหลายฟังก์ชันเพื่อร่วมกันทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิส

ดังนั้น จากผลการศึกษาในข้างต้นจะพบว่าวิธีโครงข่ายประสาทเทียม เป็นวิธีที่มีประสิทธิภาพอย่างยิ่งในการนำมาทำนายสมบัติฮิสเทอรีซิสทางไฟฟ้าของสารเฟอร์โรอิเล็กทริก

5. เอกสารอ้างอิง

- Chakrabarti, B.K., and M. Acharyya. 1999. Dynamic transitions and hysteresis. *Rev. Mod. Phys.* 71, 847.
- Kevin, G. 1997. *An Introduction to Neural Networks*. United Kingdom: UCL Press Limited.
- Kumar, S. 2005. *Neural Networks: A Classroom Approach*. International Edition. McGraw-Hill Publishing, Singapore.
- Laosiritaworn, W., O. Khamman, S. Ananta, R. Yimnirun and Y. Laosiritaworn. 2008. *Ceram. Inter.* 34, 809.
- Lines, M.E. and A.M. Glass. 1996. *Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials*. Oxford University Press.
- Moulson, A.J. and J.M. Herbert, *Electroceramics*, 2nd ed. 2003. John Wiley & Sons, New York.
- Uchino, K. 1997. *Piezoelectric Actuators and Ultrasonic Motors*. Kluwer Academic.

- Viehland, D. and J. Powers. 2001. Effect of Uniaxial Stress on the Electromechanical Properties of 0.7PMN-0.3PT Crystals and Ceramics. *J. Appl. Phys.* 89, 1820.
- Wang, J. and A. Kusiak. 2001. *Computational intelligence in manufacturing handbook*. CRC Press.
- Yimnirun, R., S. Ananta, E. Meechoowas and S. Wongsanmai. 2003. Effects of Uniaxial Stress on Dielectric Properties of Lead magnesium Niobate-Lead Zirconate Titanate Ceramics. *J. Phys. D* 36, 1615.
- Yimnirun, R., S. Ananta, and P. Laoratakul. 2004. Ferroelectric Properties of Ceramics in Lead Zirconate Titanate - Lead Magnesium Niobate System. *CMU. J.* 3, 53.
- Yimnirun, R., S. Ananta, A. Ngamjarrojana, and S. Wongsanmai. 2005. Uniaxial Stress Dependence of Ferroelectric Properties of x PMN- $(1-x)$ PZT Ceramic Systems. *Appl. Phys. A* 81, 1227.
- Yimnirun, R., Y. Laosiritaworn, S. Wongsanmai and S. Ananta. 2006a. Scaling Behavior of Dynamic Hysteresis in Soft PZT Bulk Ceramics. *Appl. Phys. Lett.* 89, 162901.
- Yimnirun, R., S. Wongsanmai, S. Ananta, and Y. Laosiritaworn. 2006b. Stress-Dependent Scaling Behavior of Dynamic Hysteresis in Bulk Soft Ferroelectric Ceramics. *Appl. Phys. Lett.* 89, 242901.
- Yimnirun, R., R. Wongmaneerung, S. Wongsanmai, A. Ngamjarrojana, S. Ananta, and Y. Laosiritaworn. 2007a. Temperature Scaling of Dynamic Hysteresis in Soft Lead Zirconate Titanate Bulk Ceramic” *Appl. Phys. Lett.*,90, 112906.
- Yimnirun, R., R. Wongmaneerung, S. Wongsanmai, A. Ngamjarrojana, S. Ananta, and Y. Laosiritaworn. 2007b. Dynamic Hysteresis and Scaling Behavior of Hard Lead Zirconate Titanate Bulk Ceramic. *Appl. Phys. Lett.* 90, 112908.
- Yimnirun, R. A. Ngamjarrojana, R. Wongmaneerung, S. Wongsanmai, S. Ananta and Y. Laosiritaworn. 2007c. Temperature scaling of ferroelectric hysteresis in hard lead zirconate titanate bulk ceramic. *Appl. Phys. A* 89, 737–741.
- Zhang, Q.M., J. Zhao, K. Uchino, and J. Zheng. 1997. Change of the weak-field properties of $\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ piezoceramics with compressive uniaxial stress and its

links to the effect of dopants on the stability of the polarizations in the materials, J. Mater. Res. 12, 226.

Zhao, J., A.E. Glazounov., and Q.M. Zhang. 1999. Change in Electromechanical Properties of $_{0.9}\text{PMN}_{-0.1}\text{PZT}$ Relaxor Ferroelectric Induced by Uniaxial Compressive Stress Directed Perpendicular to the Electric Field. Appl. Phys. Lett. 74, 436.

Zhou, D., M. Kamlah, and D. Munz. 2005. Effects of uniaxial prestress on the ferroelectric hysteretic response of soft PZT. J. Eur. Ceram. Soc. 25, 425.

Output จากโครงการวิจัยที่ได้รับทุนจาก สกอ. และ สกว.

ผลสัมฤทธิ์เชิงวิชาการ (output) ที่ได้จากโครงการวิจัยนี้ อยู่ในรูปแบบบทความวิชาการที่ได้ตีพิมพ์ และอยู่ในขั้นตอนตอบรับการตีพิมพ์ในวารสารวิชาการนานาชาติ (International publications) ที่อยู่ในฐานข้อมูล ISI หรือ Scopus รวม จำนวน 3 เรื่อง โดยเป็นผู้วิจัยหลักทั้งหมดคือ

1. W. Laosiritaworn; R. Yimnirun and Y. Laosiritaworn, “Artificial Neural Network Modeling of Ferroelectric Hysteresis: An Application to Soft Lead Zirconate Titanate Ceramics”, Key Engineering Materials 421-422, 432-435 (2010) อยู่ในฐานข้อมูล Scopus (ภาคผนวก ก.)
2. W. Laosiritaworn; A. Ngamjarurojana; R. Yimnirun and Y. Laosiritaworn, “Modeling of Ferroelectric Hysteresis Area of Hard Lead Zirconate Titanate Ceramics: Artificial Neural Network Approach”, Ferroelectrics 401, 233-238 (2010) อยู่ในฐานข้อมูล Scopus และ ISI (มี impact factor 0.447, JCR2009) (ภาคผนวก ข.)
3. W. Laosiritaworn, N. Wongdamnern, R. Yimnirun and Y. Laosiritaworn, “Concurrent Artificial Neural Network Modeling of Single-Crystal and Bulk-Ceramics Ferroelectric-Hysteresis: An Application to Barium Titanate”, Ferroelectrics (*accepted*) (2011) อยู่ในฐานข้อมูล Scopus และ ISI (มี impact factor 0.447, JCR2009) (ภาคผนวก ค.)

นอกจากนี้ ยังมีผลงานที่อยู่ในขั้นตอนการดำเนินการเพื่อส่งตีพิมพ์จำนวน 1 ผลงาน คือ

(ปกปิด)

1. W. Laosiritaworn, S. Wongsanmai, R. Yimnirun and Y. Laosiritaworn, “Artificial-Neural-Network Modeling of the Compressive Uniaxial Stress Dependence of Ferroelectric Hysteresis: An Application to Soft Lead Zirconate Titanate Ceramics”, คาดว่าจะส่งไปที่ Materials Science and Engineering B (ภาคผนวก ง.)

ภาคผนวก ก.

บทความวิชาการที่ได้รับการตีพิมพ์

W. Laosiritaworn; R. Yimnirun and Y. Laosiritaworn, “Artificial
Neural Network Modeling of Ferroelectric Hysteresis: An
Application to Soft Lead Zirconate Titanate Ceramics”, Key
Engineering Materials 421-422, 432-435 (2010) อยู่ในฐานข้อมูล

Scopus

Artificial Neural Network Modeling of Ferroelectric Hysteresis: An Application to Soft Lead Zirconate Titanate Ceramics

Wimalin Laosiritaworn¹, Rattikorn Yimnirun² and Yongyut Laosiritaworn³

¹Department of Industrial Engineering, Faculty of Engineering, Chiang Mai University, Chiang Mai, Thailand.

²School of Physics, Institute of Science, Suranaree University of Technology, Nakhon Ratchasima 30000 Thailand

³Department of Physics, Faculty of Science, Chiang Mai University, Chiang Mai, Thailand.

Keywords: Artificial Neural Network, Ferroelectric Hysteresis, Soft Lead Zirconate Titanate.

ABSTRACT

In this work, the Artificial Neural Network (ANN) was used to model ferroelectric hysteresis using data measured from soft lead zirconate titanate [Pb (Zr_{1-x}Ti_x)O₃ or PZT] ceramics as an application. Data from experiments were split into training, testing and validation dataset. Four ANN models were developed separately to predict output of the hysteresis area, remnant, coercivity and squareness. Each model has two neurons in the input layer, which represent field amplitude and field frequency. The ANNs were trained with varying number of hidden layer and number of neurons in each layer to find the best network architecture with highest accuracy. After the networks have been trained, they were used to predict hysteresis properties of the unseen testing patterns of input. The predicted and the testing data were found to match very well which suggests the ANN success in modeling ferroelectric hysteresis properties obtained from experiments.

INTRODUCTION

During recent years, ferroelectric materials have become more and more attractive in terms of both fundamental and technological interest e.g. high-speed recording media in nonvolatile memory application [1]. In such an application, the amplitude (E_0) and frequency (f) dependence of hysteresis parameters are of important consideration. Theoretical studies have mainly focused on the use of power law scaling to investigate how hysteresis properties response to external field parameters (i.e. E_0 and f of the applied electric field) in a form of $A \propto f^\alpha E_0^\beta$ where A denotes the hysteresis area, α and β are exponents to the scaling e.g. Ref. [2]. In spite of its reasonable success on finding how hysteresis area relates to the field, each exponent obtained in this way is not truly independent. This is since with a small number of data, the non-linear regression for multiple independent variables (i.e. f and E_0) has limitation arisen from convergence problems. Therefore, in previous works, α and β were extracted separately [2]. Specifically, one exponent was extracted at a time and when it was retrieved, it was assumed constant and fed back to the power law to find another exponent. However, though this method is sound, the extracted exponents are very vulnerable where a small change or error in α could cause a considerable change in β . Moreover, the hysteresis behavior is also very different between low and high frequency regions, so one has to propose two different power law scaling relations applicable to the low-frequency and high-frequency limits e.g. Refs.[3] and [4]. Being evident, this power law technique becomes problematic unless the frequency region (high or low) is known in advance. Consequently, in this work, we aim to provide another sophisticated technique which can be used to model the hysteresis behavior i.e. the Artificial Neural Network (ANN) which is widely used in industries for various purposes due to its ability to 'learn' from examples.

BACKGROUND THEORIES

Artificial neural network (ANN) is a computer programming that mimic human nervous system. It can be used to model relationship between given inputs and their related outputs from examples. ANN is made up of simple processing element, neuron, connected together. Neurons can be located in the input layer, hidden layer or output layer. ANN is used to model or 'learn' relationship by tuning a set of parameters called 'weight' (the strength of the connection between neurons). This weight alteration process is called training. In the training process, a set of examples of input-output pairs is passed through the model and the weights adjust in order to minimize the error between the answer from the network and the desired outputs. The weight adjustment procedure is controlled by the learning algorithm. Once the error is minimal, the network is successfully trained. The trained network is able to predict output for unseen input. In this study, the Back Propagation (BP) algorithm, one of the most widely used algorithm [5], was used. The algorithm can be summarized as the following [6].

Initially, the BP performs a 'forward pass', where the input is fed through the network to attain the output by calculate weighted sum (S_j) for every neuron, i.e. $S_j = \sum_i a_i w_{ij}$, where a_i is the activation level of unit i , and w_{ij} is the weight from unit i to unit j . Then, the sigmoid transfer function, i.e. $g(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ where $x = S_j$, were applied to the output. Then, $g(x = S_j)$ becomes the output of unit j , and the same procedure repeats for all neurons. After that, the BP performs a 'backward pass', where the error $\delta_j = (t_j - a_j)g'(S_j)$ is calculated to update (adjust) the weight for each neuron for the output layer but $\delta_j = \left[\sum_k \delta_k w_{kj} \right] g'(S_j)$ for the hidden layer. In these equations, t_j is the target value for unit j , a_j is the output value for unit j , $g'(x)$ is the derivative of the sigmoid function g and S_j is weighted sum of inputs to j . Then, the weight adjustment is calculated as $\Delta w_{ji} = \eta \delta_j a_i$ where η is the learning rate. These forward and backward processes repeat with new input vector until stopping criteria are met.

EXPERIMENTAL RESULTS AND DISCUSSIONS

In this study, the relation between the input data (f and E_0) and the output data (the hysteresis area A , the remnant polarization p_r , the coercivity E_c , and the loop squareness) was established by the ANN modeling. The measured hysteresis properties were obtained from commercial soft PZT ceramic disks (PKI-552, Piezo Kinetics Inc., USA) with diameter of 10 mm and thickness of 1 mm. The data were taken at room temperature (25 °C) by with f ranging from 0.6 to 100 Hz and E_0 ranging from to 6 to 18 kV/cm. The details of the experimental setup and data acquisition were described elsewhere [7].

In the modeling, four ANN were trained separately for A , p_r , E_c , and loop squareness. All models have the same two inputs, which are E_0 and f and only one output. Of all 75 records available, data were separated into three sets; training dataset, validate dataset, and testing dataset, at the ratio of 68%, 16%, and 16% respectively. Training dataset was the data used to tune the weight to the correct value. Validate dataset was used during training process to prevent 'overfitting'. Testing dataset was used after the training process finished as 'unseen' data to test the model accuracy. Data were preprocessed before training. Input data were coded to the range between [-1,1] and output to the range between [0,1]. In the training process, architecture search were carried out. The search

was performed for up to two hidden layers, and up to 10 nodes in each layer. Results from training process were shown in Table 1 and Fig. 1.

Table 1 ANN training results

Output of ANN model	Best architecture	Training		Testing	
		MAE	R-squared	MAE	R-square
Hysteresis Area	2-7-10-1*	741,825,26	0.996	947,941.95	0.994
Remnant	2-8-2-1*	74.92	0.999	134.00	0.996
Coercivity	2-8-9-1*	11.320	0.998	16.732	0.997
Squareness	2-7-9-1*	0.011	0.956	0.015720	0.907

* 4 digits represent number of neurons in input, first hidden, second hidden, and output layer.

In measuring how close the forecast value are to the actual one, two indexes were used, which are Mean Absolute Error (MAE) and R-square. MAE is a measure of average absolute different of actual output and predicted output from the model, and R-square is the goodness of fit of the model. The closer this ratio to 1 the better the model is. The results shown in Table 1 indicate a good fit of all model as MAE are low and R-square is very close to 1.

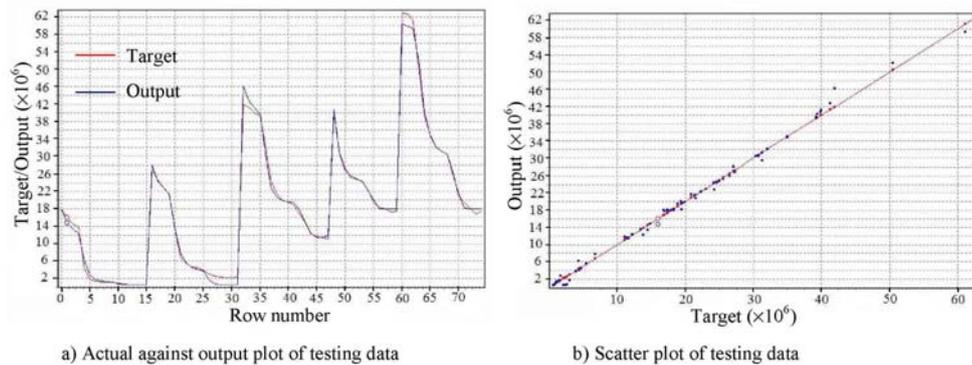
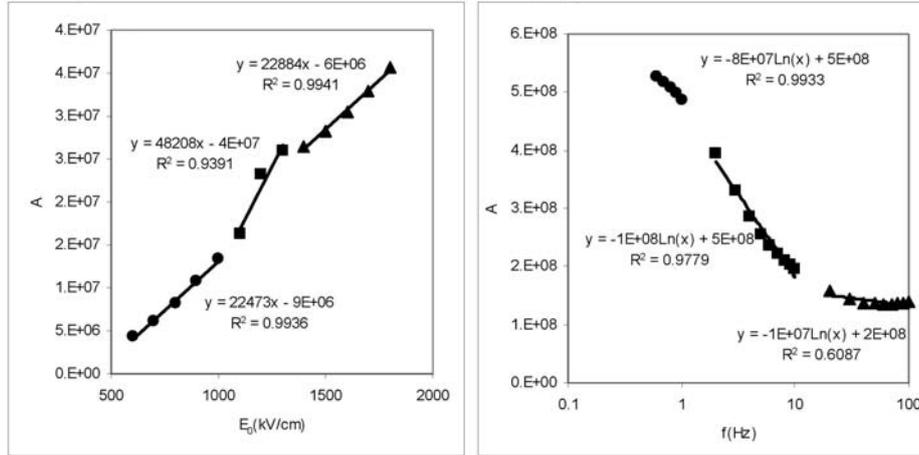


Fig. 1 Comparison of the predicted data (output) with the real data (target) from the area

Then, with the weight obtained, ANNs were used to generate data to compare with the 'unseen'. An example of comparing the output (predicted data) with the target (actual data) for all dataset of Area model is given in Fig. 1. In Fig. 1a, the actual against output plot shows good agreement which verifies the successfulness of the modeling. In addition, the scatter plot of data (Fig. 1b) also shows a very good fit to straight line with just small deviation. These can be concluded that the model can provide very accurate approximation for data.

In addition, it is also of interest to use the model to investigate the hysteresis behavior and compare with experiment [2]. Figs. 2(a,b) show the mean effect plot for A as a function E_0 (by averaging over f) and the mean effect plot for A as a function of f (by averaging over E_0). As can be seen, the relation between A and E_0 or A and f is not trivial and can be categorized into 3 main groups which are for the minor loops, the minor loops at their transition to saturated loops and the saturated loops. This is in good agreement with previous experiment [2]. In the previous experiment investigation, the minor and saturated loops had to be analyzed separately unless the power law scaling would not be much useful. However, in this ANN study, the method can be used to accurately predict

(forecast) the data over the whole considered range of input parameters with ease.



a) Effect of amplitude E_0 on area A

b) Effect of frequency f on area A

Fig. 2 a) The mean effect plot for A as a function E_0 (by averaging over f) and b) the mean effect plot for A as a function of f (by averaging over E_0).

CONCLUSIONS

In this work, the Artificial Neural Network is used to model ferroelectric hysteresis using data measured from soft lead zirconate titanate ceramics. The ANNs were trained to relate the inputs, which are the field amplitude and the field frequency, to the outputs, which are the hysteresis area, the remnant polarization, the coercivity and the loop squareness. From the training, the best algorithm was achieved and used to generate output to test with 'unseen' data. From the testing, the output was found to agree well with the available experimental data. This well matching over the whole range of considered parameters can then imply its success in modeling ferroelectric hysteresis.

ACKNOWLEDGEMENT

This work is supported by Thailand research fund and Commission on higher education.

REFERENCES

- [1] J. F. Scott, *Ferroelectric Memories*, Springer-Verlag, Berlin, 2002.
- [2] R. Yimmirun, Y. Laosiritaworn, S. Wongsanmai, and S. Ananta, *Appl. Phys. Lett.* **89** (2006), p. 162901.
- [3] J.-M. Liu, H. L. W. Chan, C. L. Choy, Y. Y. Zhu, S. N. Zhu, Z. G. Liu, and N. B. Ming, *Appl. Phys. Lett.* **79** (2001), p. 236
- [4] M. Rao and R. Pandit, *Phys. Rev. B* **43** (1991), p. 3373.
- [5] C. A. O, Nascimento, R Giudici, and R. Guardani, *Comput. Chem. Eng.* **24** (2000), p. 2303.
- [6] J.E. Dayhoff, *Neural Network Architectures*. New York: Van Nostrand Reinhold, 1990, ch. 4.
- [7] R. Yimmirun, Y. Laosiritaworn, and S. Wongsanmai, *J. Phys. D* **39** (2006), p. 759.

e-mail: yongyut_laosiritaworn@yahoo.com Fax: +66-5394-3445

ภาคผนวก ข.

บทความวิชาการที่ได้รับการตีพิมพ์

W. Laosiritaworn; A. Ngamjarrojana; R. Yimnirun and Y.

Laosiritaworn, “Modeling of Ferroelectric Hysteresis Area of Hard

Lead Zirconate Titanate Ceramics: Artificial Neural Network

Approach”, *Ferroelectrics* 401, 233-238 (2010) อยู่ในฐานข้อมูล

Scopus และ ISI (มี impact factor 0.447, JCR2009)

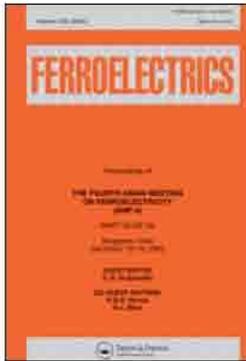
This article was downloaded by: [Chiang Mai University Library]

On: 6 March 2011

Access details: Access Details: [subscription number 780894007]

Publisher Taylor & Francis

Informa Ltd Registered in England and Wales Registered Number: 1072954 Registered office: Mortimer House, 37-41 Mortimer Street, London W1T 3JH, UK



Ferroelectrics

Publication details, including instructions for authors and subscription information:
<http://www.informaworld.com/smpp/title-content=t713617887>

Modeling of Ferroelectric Hysteresis Area of Hard Lead Zirconate Titanate Ceramics: Artificial Neural Network Approach

W. Laosritaworn^a, A. Ngamjarrojana^{a*}, R. Yimnirun^a, Y. Laosritaworn^{b,c}

^a Department of Industrial Engineering, Faculty of Engineering, Chiang Mai University, Chiang Mai, Thailand ^b Department of Physics and Materials Science, Faculty of Science, Chiang Mai University, Chiang Mai, 50200, Thailand ^c TheEP Center, CHE, 328 Si Ayutthaya Road, Bangkok, Thailand ^d School of Physics, Institute of Science, Suranaree University of Technology, Nakhon Ratchasima, 30000, Thailand ^e Science and Technology Research Institute, Chiang Mai University, Chiang Mai, 50200, Thailand

Online publication date: 01 December 2010

To cite this Article Laosritaworn, W. , Ngamjarrojana, A. , Yimnirun, R. and Laosritaworn, Y. (2010) 'Modeling of Ferroelectric Hysteresis Area of Hard Lead Zirconate Titanate Ceramics: Artificial Neural Network Approach', *Ferroelectrics*, 401: 1, 233 – 238

To link to this Article: DOI: 10.1080/00150191003677064

URL: <http://dx.doi.org/10.1080/00150191003677064>

PLEASE SCROLL DOWN FOR ARTICLE

Full terms and conditions of use: <http://www.informaworld.com/terms-and-conditions-of-access.pdf>

This article may be used for research, teaching and private study purposes. Any substantial or systematic reproduction, re-distribution, re-selling, loan or sub-licensing, systematic supply or distribution in any form to anyone is expressly forbidden.

The publisher does not give any warranty express or implied or make any representation that the contents will be complete or accurate or up to date. The accuracy of any instructions, formulae and drug doses should be independently verified with primary sources. The publisher shall not be liable for any loss, actions, claims, proceedings, demand or costs or damages whatsoever or howsoever caused arising directly or indirectly in connection with or arising out of the use of this material.

Modeling of Ferroelectric Hysteresis Area of Hard Lead Zirconate Titanate Ceramics: Artificial Neural Network Approach

W. LAOSIRITAWORN,^{1,*} A. NGAMJARUROJANA,^{2,3}
R. YIMNIRUN,⁴ AND Y. LAOSIRITAWORN^{2,3,5}

¹Department of Industrial Engineering, Faculty of Engineering, Chiang Mai University, Chiang Mai 50200, Thailand

²Department of Physics and Materials Science, Faculty of Science, Chiang Mai University, Chiang Mai, 50200, Thailand

³TheP Center, CHE, 328 Si Ayutthaya Road, Bangkok 10400, Thailand

⁴School of Physics, Institute of Science, Suranaree University of Technology, Nakhon Ratchasima, 30000, Thailand

⁵Science and Technology Research Institute, Chiang Mai University, Chiang Mai, 50200, Thailand

In this work, the relationship between hysteresis area of hard lead zirconate titanate and external perturbation was modeled using the Artificial Neural Network (ANN). The model developed has the applied electric field parameters and temperature as inputs, and the hysteresis area as an output. Then ANN was trained with experimental data and used to predict hysteresis area of the unseen testing patterns of input. The predicted and the actual data of the testing set were found to agree very well for all considered input parameters. Furthermore, unlike previous power-law investigation where the low-field data had to be discarded in avoiding non-convergence problem, this work can model the data for the whole range with fine accuracy. This therefore suggests the ANN success in modeling hard ferroelectric hysteresis properties and underlines its superior performance upon typical power-law scaling technique.

Keywords: Artificial Neural Network; Hysteresis Area; Hard Lead Zirconate Titanate

1. Introduction

Ferroelectric hysteresis modeling has recently been a topic of interest due to its success in predicting hysteresis properties [1–6]. However, most studies have mainly focused on the use of power law scaling to empirically investigate how hysteresis properties response to external field parameters (i.e. amplitude E_0 and frequency f of the applied electric field) and temperature T in a form of $A \propto f^\alpha E_0^\beta T^\gamma$ where A denotes the hysteresis area, while α , β and γ are exponents to the scaling. In spite of its reasonable success, each exponent obtained in this way may not truly independent. This is since the use of non-linear fit for multiple independent variables has limitation arisen from non-convergence problems

Received August 23, 2009.

*Corresponding author. E-mail: wimalin@hotmail.com

when the number of data in the fit is not enough, or the data is with very much different in their behaviors. Therefore, in previous investigations [1, 2], α and β were extracted separately, where one exponent was assumed constant and fed back to the power law to find another exponent. Consequently, the extracted exponents are very vulnerable to errors as a small change or error in α could cause a considerable change in β . Moreover, in hard ferroelectric materials, the hysteresis behavior is very different between minor- and saturated-hysteresis loops, and one has to propose two different power law scaling relations [3, 4]. The problem becomes even more complicated when the temperature effect is taken into account [5, 6]. Consequently, one can perform the temperature scaling only when the hysteresis is of saturated shape to avoid the non-convergence problem [6]. Being evident, the power law scaling technique may not be the best preference in such the case. Therefore, in this work, we consider the use of Artificial Neural Network (ANN) to model the complex hysteresis behavior of the hard lead zirconate titanate ceramics. This is due to the ANN's ability in relating unknown correlations [7], and its success in modeling material properties prepared/measured under various conditions [8–12].

2. Experimental Setups, Results and Discussions

In this work, the hysteresis area A was obtained from the commercial hard PZT ceramic disks (APC-840, APC International, Ltd., USA) with a diameter of 8 mm and a thickness of 1 mm. Details of the experimental setup are explained elsewhere [4, 6]. The field frequency f was varied from 1 to 100 Hz, the field amplitude E_0 was varied from 0 to 35 kV/cm, and the temperature T was varied from 25 to 180°C. In the ANN modeling, the network training process was divided into 4 phases i.e. the analysis, the preprocessing, the design and the training phases. In the analysis phase, raw area data were analyzed using 'Alyuda NeuroIntelligence' software and those unsuitable for neural network training were marked, which include missing values, wrong type values and outliers. In this phase, input data (T, f in the natural log-scale, and E_0), output data (A) and the types of data (numeric) were set. Information regarding to input and output data can be found in Table 1. Next, the data were divided into three sets i.e. training, validation, and testing data sets. The training set was used in the training process to adjust network's weight. The validation set was used to tune other network parameters. For example, it was used to detect number of hidden units when the network performance became worse. Finally, the testing set was used to test the trained network on its performance with the 'unseen' data. In this works, as there were 538 records (of input-output) available, data were divided with the ratio of training: validation: testing of 366:86:86 records.

In the preprocessing phase, the data had been scaled into the comparable range before it was fed to a neural network to minimize mismatch ranged effect [7]. All input data were

Table 1
Input and output data used in ANN training

Parameters	Unit	Type	Min	Max	Scaling Factor
T	Celsius	Input	25	180	0.012903
$\log(f)$	$\log(\text{Hz})$	Input	0	2	1
E_0	KV/cm	Input	10	35	0.08
A	$\mu\text{J}/\text{cm}^3$	Output	0.0708	5.17111	0.193647

scaled to the range $[-1, 1]$ via $SF = \frac{(SR_{max} - SR_{min})}{(X_{max} - X_{min})}$ and $X_p = SR_{min} + (X - X_{min}) \times SF$, where X is an actual value of a considered input/output, X_{min} is the minimum actual value, X_{max} is maximum actual value, SR_{min} is the lower scaling range limit, SR_{max} is the upper scaling range limit, SF is the scaling factor, and X_p is the preprocessed value. After that, the output data (in the output layer) was scaled to the range of $[0, 1]$ using the logistic activation function i.e. $F(x) = \frac{1}{(1+e^{-x})}$ [7]. The scaling factors used in these equations were also summarized in Table 1.

After data was preprocessed, the next phase was the design phase. In this phase, network architecture (number of hidden layers and number of hidden nodes) and network properties (error and activation functions) were specified. In this work, exhaustive search was conducted to identify the appropriate number of hidden layer and hidden nodes. Search was carried out for up to 2 hidden layers and 40 nodes in each layer. The best architecture obtained was found to be 2 hidden layers with 30 neurons in the first hidden layer and 11 neurons in the second layer. Network properties including error and activation function were also set in this stage. Input and output activation function used was logistic function. Output error function used was sum-of-squares function where the error was calculated from the sum of the squared differences between the actual value and neural network output. After network architecture and network properties had been identified, the network was trained using quick propagation algorithm. Stopping criteria used were the mean average value less than 0.1 and maximum 500 iterations.

To validate the model accuracy, the mean absolute error (*MAE*) and the correlation coefficient (*r*) were used to value the predicting performance. They were calculated from the formula $MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |f_i - y_i|}{n}$, and $r = \frac{n \sum_{i=1}^n f_i y_i - (\sum_{i=1}^n f_i)(\sum_{i=1}^n y_i)}{\sqrt{n(\sum_{i=1}^n f_i^2) - (\sum_{i=1}^n f_i)^2} \sqrt{n(\sum_{i=1}^n y_i^2) - (\sum_{i=1}^n y_i)^2}}$, where f_i is the prediction from neural network for record i , y_i is the actual value for record i , n is the total number of data. In general, the smallest *MAE* is desirable as it indicates that only small prediction error exists, while the correlation coefficient *r* should be close to 1 to assure the model appropriateness. From the training result, the *MAE* for training, validation, and testing data set are 0.073015, 0.061952, and 0.069630 respectively (all with $r > 0.994$). As *MAE*'s are small and *r*'s are very close to 1, it can be concluded that the model is very accurate. Further, actual data and predicted output from ANN were plotted in order to visualize ANN model accuracy. For instance, Fig. 1 shows a scatter plot of testing data and their corresponding output from the ANN. The plot forms a straight with only small deviation suggesting the good fit of the model.

To compare the predicting hysteresis area behavior with real experiment [6], the trained ANN was used to predict hysteresis area for the combination of input as the following; T at 9 levels (25, 40, 60, 80, 100, 120, 140, 160, 180), f at 11 levels (1, 2, 4, 6, 8, 10, 20, 40, 60, 80, 100) and E_0 at 6 levels (10, 15, 20, 25, 30, 35), which makes a total of 594 ($9 \times 11 \times 6$) combinations. The results are shown in Fig. 2 which is the mean effect plot for A as a function of T by averaging over all f and E_0 (upper left), the mean effect plot for A as a function of f by averaging over all T and E_0 (upper right), and the mean effect plot for A as a function of E_0 by averaging over all T and f (lower left). As can be seen, the relation between A and T , A and f and A and E_0 are evident. For instance, the A and T relations (upper left) show a slight decrease of A on increasing T . This is as the higher temperature brings more thermal fluctuation into the system so less electrical work is required in cycling the polarization. However, the A - T dependence seems to be very small which could be due to that the considered temperatures are relatively much lower than the Curie point, so the magnitude of spontaneous polarization does not change much with temperature in this range. From the A - f relation (upper right), a steeper decay of A

Downloaded By: [Chiang Mai University Library] At: 04:48 6 March 2011

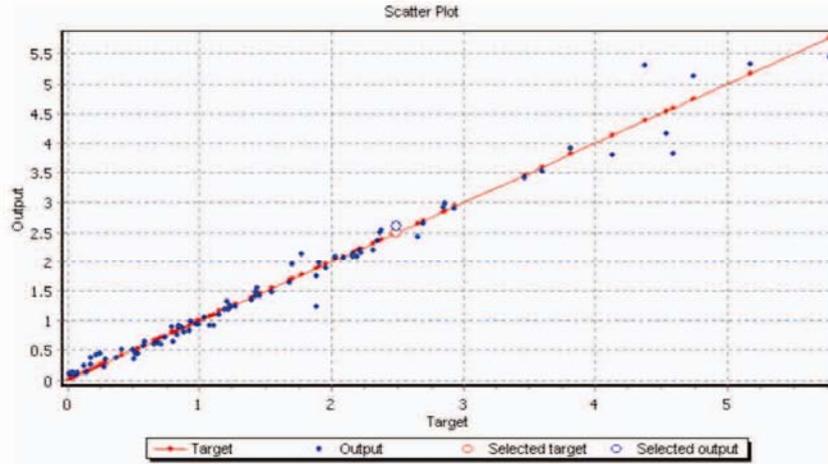


Figure 1. Scatter plot of actual and output plot of testing data. (See Color Plate XLI)

in f is found. This is expected as the faster of the field switching, the less polarization can respond to the field changes. As a result, the average polarization gets smaller and this lessens the remnant polarization, the coercive field, and hence the hysteresis area. Finally, for the $A-E_0$ relation, it is found that with increasing the field amplitude E_0 , the area A increases. This is since the more 'electric force' supplying into the system, the higher

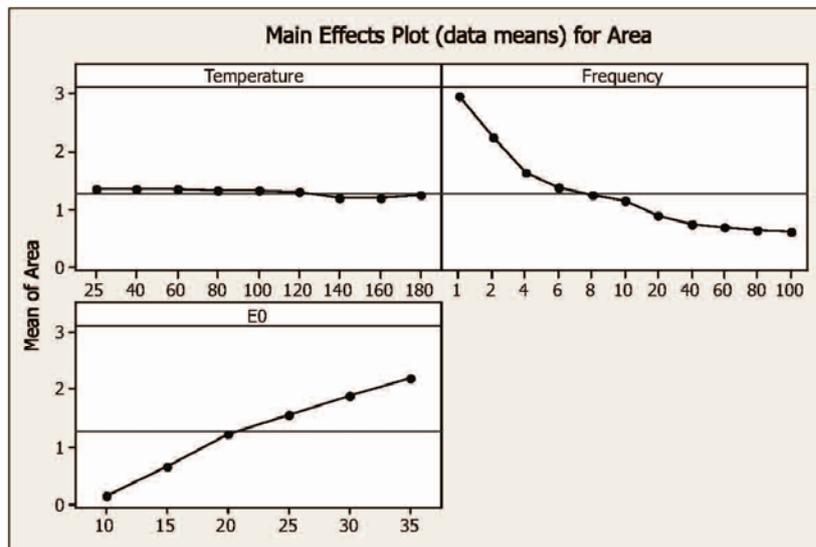


Figure 2. Main effects plot of hysteresis area predicted from ANN.

chances the polarizations orienting in following the field signal into the field direction. This therefore enhances the remnant polarization and to cancel the higher remnant polarization requires higher field in the opposite direction, which enhances the coercive field. Being evident, unlike the temperature T , the field parameters (f and E_0) have more influences on the hysteresis area (for the considered ranges of parameters in this study). One is therefore required to be aware of undesired field-variation due to electric noises (e.g. from poor circuit assembling) or material degradation, but may feel relieved on temperature fluctuation.

As can be seen, the relations among the area A and perturbation parameters (f , E_0 , T) were found and their behaviors are in good agreement with the dynamic ferroelectric hysteresis results (e.g. [5, 6]). However, in the previous experiment investigation [6], only hysteresis area measured at the field amplitude higher than the coercive field are allowed in the scaling unless the power law scaling would not be much useful (as the non-linear fits do not converge). Nevertheless, in this ANN study, the method can be used to accurately predict (forecast) the data over the whole considered range of input parameters with ease.

3. Conclusions

In this work, the Artificial Neural Network is used to model ferroelectric hysteresis area using data measured from hard lead zirconate titanate ceramics. The network was trained to relate the inputs, which are the field amplitude, the field frequency and the temperature, to the output which is the hysteresis area. From the training, the best network architectures were achieved from exhaustive search. The architecture used was 3 neurons in the input layer, 30 neurons in the first hidden layer, 11 neurons in the second hidden layer and 1 neuron in the output layer. After training, the network was used to generate data for 594 sets of input-output. The output obtained from ANN was found to agree well with the available experimental data. This well matching over the whole range of considered parameters can imply its success in modeling hard ferroelectric hysteresis.

Acknowledgment

This work is supported by the Thailand Research Fund (TRF) and the Commission on Higher Education (Thailand).

References

1. N. Wongdamern, A. Ngamjarrojana, Y. Laosiritaworn, S. Ananta, and R. Yimnirun, Dynamic ferroelectric hysteresis scaling of BaTiO₃ single crystals. *J. Appl. Phys.* **105**, 44109 (2009).
2. R. Yimnirun, Y. Laosiritaworn, S. Wongsanmai, and S. Ananta, Scaling behavior of dynamic hysteresis in soft lead zirconate titanate bulk ceramics. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 162901 (2006).
3. R. Yimnirun, N. Wongdamern, N. Triamnak, T. Sareein, M. Unruan, A. Ngamjarrojana, S. Ananta, and Y. Laosiritaworn, Power-law scaling of sub-coercive field dynamic hysteresis response in 0.7Pb(Zr_{1/2}Ti_{1/2})O₃-0.3Pb(Zn_{1/3}Nb_{2/3})O₃ ceramic. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41**, 205415 (2008).
4. R. Yimnirun, R. Wongmaneeung, S. Wongsanmai, A. Ngamjarrojana, S. Ananta, and Y. Laosiritaworn, Dynamic hysteresis and scaling behavior of hard lead zirconate titanate bulk ceramics. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 112908 (2007).
5. R. Yimnirun, R. Wongmaneeung, S. Wongsanmai, A. Ngamjarrojana, S. Ananta, and Y. Laosiritaworn, Temperature scaling of dynamic hysteresis in soft lead zirconate titanate bulk ceramic. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 112906 (2007).

6. R. Yimnirun, A. Ngamjarrojana, R. Wongmaneerung, S. Wongsanmai, S. Ananta, and Y. Laosiritaworn, Temperature scaling of ferroelectric hysteresis in hard lead zirconate titanate bulk ceramic. *Appl. Phys. A*. **89**, 737–741 (2007).
7. K. Swingler, *Applying Neural Networks: A Practical Guide*, London: Academic Press Limited (1996).
8. W. Laosiritaworn, Application of artificial neural network to calculate Curie temperature of ferromagnetic materials. *Adv. Mater. Res.* **55–57**, 901–904 (2008).
9. W. Laosiritaworn, O. Khamman, S. Ananta, R. Yimnirun, and Y. Laosiritaworn, Artificial neural network modeling of ceramics powder preparation: application to NiNb_2O_6 . *Ceram. Inter.* **34**, 809–812 (2008).
10. W. Laosiritaworn, and Y. Laosiritaworn, Artificial neural network modeling of mean-field Ising hysteresis. *IEEE Trans. Magn.* **45**, 2644–2647 (2009).
11. W. Laosiritaworn, and N. Chotchaitanakorn, Artificial neural networks parameters optimization design of experiments: an application in materials modeling. *Chiang Mai J. Sci.* **36**, 83–91 (2009).
12. W. Laosiritaworn, R. Yimnirun, and Y. Laosiritaworn, Artificial neural network modeling of ferroelectric hysteresis: an application to soft lead zirconate titanate ceramics. *Key Eng. Mater.* **421–422**, 432–435 (2010).

ภาคผนวก ค.

บทความวิชาการที่ได้รับตอบรับให้ตีพิมพ์

Wimalin Laosiritaworn, Natthapong Wongdamnern, Rattikorn
Yimnirun and Yongyut Laosiritaworn, “Concurrent Artificial
Neural Network Modeling of Single-Crystal and Bulk-Ceramics
Ferroelectric-Hysteresis: An Application to Barium Titanate”,
Ferroelectrics (*accepted*) (2011) อยู่ในฐานข้อมูล Scopus และ ISI (มี
impact factor 0.447, JCR2009)

Acceptance_P2c-02_Laosiritaworn

From: **rcbjsf-10** (rcbjsf10@edu.shimane-u.ac.jp)
Sent: Tuesday, August 24, 2010 9:42:43 AM
To: Wimalin Laosiritaworn (wimalin@hotmail.com)

Dear Dr. Laosiritaworn

Thank you for attendance in RCBJSF-10.

ABSTRACT NO.:P2c-02
TITLE: Concurrent Artificial-Neural-Network Modeling of Single-Crystal and Bulk-Ceramics Ferroelectric-Hysteresis: An Application to Barium Titanate
CORRESPONDING AUTHOR: W. Laosiritaworn

We are pleased to inform you that the above referenced manuscript has been accepted for publication in a special issue of the journal "Ferroelectrics" published by Taylor & Francis.

This e-mail is the formal notification of acceptance. Your paper will be forwarded to production later. You will receive the proof of your manuscript directly from the publisher via e-mail.

Thank you for your cooperation.

Sincerely,

Yukikuni Akishige
RCBJSF-10 Program Committee
Shimane University
Phone&FAX +81-852-32-6304
e-mail: rcbjsf10@edu.shimane-u.ac.jp

Concurrent Artificial Neural Network Modeling of Single-Crystal and Bulk-Ceramics Ferroelectric-Hysteresis: An Application to Barium Titanate

Wimalin Laosiritaworn¹, Natthapong Wongdamnern², Rattikorn Yimnirun³ and Yongyut Laosiritaworn^{2,4}

¹Department of Industrial Engineering, Faculty of Engineering, Chiang Mai University, Chiang Mai 50200, Thailand.

²Department of Physics and Materials Science, Faculty of Science, Chiang Mai University, Chiang Mai 50200 Thailand.

³School of Physics, Institute of Science, Suranaree University of Technology, Nakhon Ratchasima 30000 Thailand.

⁴TheEP Center, CHE, 328 Si Ayutthaya Road, Bangkok 10400, Thailand.

E-mail address of the principal author: wimalin@hotmail.com

Abstract

This paper proposed an application of Artificial Neural Network (ANN) to concurrently model ferroelectric hysteresis properties of Barium Titanate in both single-crystal and bulk-ceramics forms. In the ANN modeling, there are 3 inputs, which are type of materials (single or bulk), field amplitude and frequency, and 1 output, which is hysteresis area. Appropriate number of hidden layer and hidden node in were achieved through a search of up to 2 layers and 30 neurons in each layer. After ANN had been properly trained, a network with highest accuracy was selected. Query file of unseen input data was then input to the selected network to obtain the predicted hysteresis area. From the results, the target and predicted data were found to match very well. This therefore suggests that ANN can be successfully used to concurrently model ferroelectric hysteresis property even though the considered ferroelectrics are with different domains, grains and microscopic crystal structures.

Keywords: Artificial Neural Network, Hysteresis Area, Barium Titanate.

1. Introduction

The dynamic ferroelectric hysteresis properties in response to external electric field parameter (i.e. field amplitude E_0 and field frequency f) have recently gained an intense interest. This is since if the understanding of how the hysteresis properties relate to the field perturbation is fully obtained, one may use this knowledge in designing state of the art ferroelectric applications with high efficiency. Nevertheless, most previous investigations on the topic focused only on the use of simple empirical power-law-scaling to relate the hysteresis area to the field parameters. For instance, the area scaling has a form $A \propto f^\alpha E_0^\beta$ where α and β are exponents to the scaling, which can be extracted from regression analysis presuming that they are constant. Nevertheless, in some ferroelectric systems, the exponents α and β are not constant but in fact are functions of field parameters, i.e. α as a function of E_0 , and β as a function of f . For instance, the BaTiO₃ single crystals were found to present unusual power-law-scaling behavior [1]. The hysteresis area scaling in the form $A \propto f^{-0.195} E_0^{0.950}$ was found above the coercive field condition, but $A \propto f^{1.667E_0-2.804} E_0^{4.157}$ was found under the coercive field condition. As can be seen, even in a same crystal, α and β vary with the E_0 -range. Moreover, the frequency exponent α for the coercive field is indeed a function of field-amplitude E_0 i.e. $\alpha = 1.667E_0-2.804$ [1]. Similarly, in BaTiO₃ bulk ceramics, the scaling takes the forms $A \propto f^{-0.024E_0-0.036} E_0^{-0.004f+1.055}$ above the coercive field but $A \propto f^{0.294E_0-0.505} E_0^{0.004f+3.467}$ under the coercive field [2]. Being obvious, the simple power-law-scaling is no longer simple. The scaling-relation is very different for above and under the coercive field. Further, the scaling-exponents are not truly constant but functions of field parameters. In addition, even with the same chemical composition, the single crystal and polycrystalline ceramics have different scaling formalisms. Consequently, alternative applicable techniques are required for substitution i.e. the Artificial Neural Network (ANN) in this work. This is due to the ANN's ability to 'learn' from examples, which proves it to be useful in modeling complex correlations [3]. Recently, it was found to provide success in modeling ceramic power preparation [4] and in modeling of material properties prepared/measured under various conditions [5-7].

In this work, the ANN was used to concurrently model ferroelectric hysteresis of both BaTiO₃ single crystal and BaTiO₃ bulk ceramics (which have different microscopic domain orientations). The input hysteresis area was split into training, testing and validation data. The model developed has 3 neurons in the input layer, which represent E_0 , f and type of BaTiO₃ (single crystal or bulk ceramics), and 1 neuron in the output layer, which represents the hysteresis area. ANNs were trained with varying number of neurons in hidden layer to find the best network architecture with highest accuracy. After the network has been trained, it was used to predict hysteresis properties of the unseen testing patterns of input.

2. Background Theories

Artificial neural network (ANN) simulated human nerve system in order to create a computational model that has ability to ‘learn’ from example the same way as human do. It can be used to model unknown relationship between inputs and outputs by presenting ‘examples’ to the network. Multilayer perceptron (MLP) is the type of ANN used as shown in Fig.1. In the MLP, simple processing element or ‘neurons’ are locating in layers typically consist of input, hidden and output layers. Each neuron performs a simple task as follows; When inputs are fed into neuron, each neuron attains output by calculating weighted sum (S_j) from $\sum_i a_i w_{ij}$, where a_i is the activation level of unit i , and w_{ij} is the weight from unit i to unit j . Logistic transfer function, i.e. $g(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ where $x = S_j$, was applied to calculate the output of that particular neuron.

These neurons are connected together and the strength of the connection (connection weight) are assigned initially with small random number. By tuning these weights, ANN can learn relationship between set of input and output parameters. This tuning process is call ‘learning’. A number of learning algorithms are available to govern the learning process. The most extensively used learning algorithm is the back propagation [8]. Back propagation is a two steps learning algorithm consists of forward and backward pass. In the forward pass input pattern is presented to the input layer. Then

neurons in each layer calculate their output until the final outputs in the output layer are obtained. In the backward pass the target patterns is applied to the output layer. Then the difference between the obtained output and target output is calculated and weights are adjusted to minimize this error. Error in the output layer is calculated from $\delta_j = (t_j - a_j)g'(S_j)$ and $\delta_j = \left[\sum_k \delta_k w_{kj} \right] g'(S_j)$ for the hidden layers. In these equations, t_j is the target value for unit j , a_j is the output value for unit j , $g'(x)$ is the derivative of the logistic function g and S_j is weighted sum of inputs to j . Then, the weight adjustment is calculated as $\Delta w_{ji} = \eta \delta_j a_i$ where η is the learning rate. These processes are repeated until the stopping criteria are met [11]. In this research, the stopping criterion used were the mean average value less than 0.1 or maximum iterations of 500.

3. Experimental Setups, Results and Discussions

In this work, the dynamic ferroelectric hysteresis data (the P-E loops) were measured from single-crystal and bulk-ceramics of Barium Titanate (BaTiO_3). The used BaTiO_3 single crystal was of tetragonal {001} phase containing a-c domains and grown by the Remeika process [5,10] (triangular-shaped plates with 5 mm edge length and thickness of 0.5 mm). The hysteresis loops were measured with frequency f covering from 1 to 300 Hz and field amplitude E_0 from 0 to 6.6 kV/cm, where the field was applied on the (001) direction [1]. On the other hand, the BaTiO_3 bulk ceramics was prepared by a conventional mixed-oxide method ($T_C = 124.5$ °C, disc-shaped plates with a diameter of 8 mm and thickness of 1 mm). The hysteresis loops were measured with f covering from 1 to 100 Hz and E_0 from 0 to 15 kV/cm [1]. Both BaTiO_3 were characterized at room temperature (25 °C) by using a modified Sawyer-Tower circuit. The electric field was applied to a sample by a high voltage ac amplifier (Trek 610D) with the input sinusoidal signal from a function generator (HP 3310A). The P-E loops were recorded by a digital oscilloscope (HP 54645A, 100 MHz). Each loop was obtained after 20 sampling cycle to average out the noise deformation.

Then the experimental hysteresis data of BaTiO_3 were supplied to the ANN. However, due to the extreme electrical noises, those with very high f and very low E_0

were discarded. The input data range used in this work is listed in Table 1 where 619 data records were available for ANN training. All available data were randomly separated into three datasets for training, validating and testing purposes with the ratio 421: 99: 99 records respectively. The training dataset is used for adjusting weights of ANN. The validating dataset is used during training to prevent overtraining problem. Note that overtraining is a typical problem occurred with back propagation algorithm, where ANN is trained too much. When this happens, the ANN performs well on ‘seen’ data but performs poorly on ‘unseen’ data. The testing data is used after the training is over and all the weights are preserved to test the accuracy of the network. Training data were summarized in Table 1. There are 3 inputs to ANN which are type of materials (single crystal or bulk ceramics), field amplitude and frequency. ANNs were trained to model the relationship between the inputs to the output (the hysteresis area). To prepare the data for the ANN in an appropriate scale, input data were preprocessed by scaling into the range between -1 to 1 and output data was scaled to the range of 0 to 1. This process was done by using scaling factors (SF). The SF is calculated from $(SR_{\max}-SR_{\min})/(X_{\max}-X_{\min})$ where SR_{\max} is the upper scaling range limit, SR_{\min} is the lower scaling range limit, X_{\max} is the maximum actual value, and X_{\min} is the minimum actual value. Then the preprocessed value is calculated from $SR_{\min} + (X-X_{\min})\times SF$, where X is the actual numeric value. The used SF for each parameter was also shown in Table 1.

After data had been preprocessed, the network architecture (for selecting the number of hidden layer and number of hidden node) and network properties (error and activation function) were specified. The extensive search was conducted to identify the appropriate number of hidden layer and hidden node. Search was carried out for up to 2 hidden layers and 30 nodes in each layer. The best architecture obtained was found to be 10 and 18 neurons in the first and second layer respectively (shown in Fig. 1). The accuracy of this model is measured from mean absolute error (MAE) and the square of correlation coefficient (R^2). MAE is calculated from the average of the absolute difference between actual data and predicted data. As a result, the lower the MAE the better. The R^2 is a statistical ratio that measure actual and predicted data and the closer of this ratio to 1 the better the model is. MAE and R^2 are calculated as follows;

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |f_i - y_i|}{n}$$

and

$$R = \frac{n \sum_{i=1}^n f_i y_i - \left(\sum_{i=1}^n f_i \right) \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)}{\sqrt{n \left(\sum_{i=1}^n f_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^n f_i \right)^2} \sqrt{n \left(\sum_{i=1}^n y_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2}}$$

where f_i is the prediction from neural network for record i , y_i is the actual value for record i , and n is the total number of data.

From the trained network, the training and testing data provided MAE of 15.37 and 26.31 with R^2 of 0.9802 and 0.9297 respectively. Being apparent, the small value of MAE and the R^2 being close to 1 confirm the validity of the ANN modeling of BaTiO₃ in both single-crystal and ceramics in this work. For a graphical verification, a plot of actual target (from experiment) and output (from ANN) of testing data is shown in Fig. 2. As can be seen, the figure shows a very well match of those two set of data. Including with previous works in modeling hysteresis properties over extensive ranges but in the same ceramic disc, this work proves that ANN is a very resourceful and reliable technique which can be used to model ferroelectric hysteresis across systems with high accuracy.

The best trained ANN is used to ‘query’ or predict hysteresis area. Query file was prepared for the input of single crystal and bulk ceramics for the range of f from 5 to 220 Hz and E_0 from 2 to 1400 kV/cm. Approximately 6400 records were fed to ANN in order to obtain hysteresis area value. The plot of these data is shown in Fig. 3 which is a plot of the actual experimental hysteresis area (open square) as a function of field amplitude for various frequencies for both the single crystal and the bulk ceramics. Lines in the figure are from ANN modeling. It can be seen from Fig. 3 that predicted data from ANN provide good approximation of hysteresis area as the lines are properly match between each open square.

4. Summary

In this work, the Artificial Neural Network was used to concurrently model ferroelectric hysteresis properties of both single-crystal and bulk-ceramics Barium Titanate. In the modeling, inputs are type of materials (single or bulk), field amplitude and frequency, and output is hysteresis area. Then, the architecture of the network with highest accuracy was selected and used to generate sequence of predicted outputs. The target and predicted data were found to match well even concurrently using the data from ferroelectrics with different grain, domain and crystal structure. This may approve the ANN a superior and versatile technique which can be used to model ferroelectrics with different microscopic structure.

Acknowledgment

This work is supported by the Thailand Research Fund (TRF) and the Commission on Higher Education (Thailand)

References

- 1 N. Wongdamnern, A. Ngamjarurojana, Y. Laosiritaworn, S. Ananta and R. Yimnirun, *J. Appl. Phys.* 105, 044109 (2009).
- 2 N. Wongdamnern, A. Ngamjarurojana, Y. Laosiritaworn, S. Ananta and R. Yimnirun, *Key Eng. Mater.* 421-422, 399 (2010).
- 3 K. Swingler, *Applying Neural Networks: A Practical Guide* (Academic Press Limited, London, 1996)
- 4 W. Laosiritaworn, O. Khamman, S. Ananta, R. Yimnirun and Y. Laosiritaworn, *Ceram. Inter.* 34, 809 (2001).
- 5 W.S. Laosiritaworn. *Adv. Mater. Res.* 55-57, 901-904 (2008); W. Laosiritaworn and N. Chotchaithanakorn, *Chiang Mai J. Sci.* 36, 83-91 (2009).
- 6 W. Laosiritaworn and Y. Laosiritaworn, *IEEE Trans. Magn.* 45, 2644-2647 (2009).

- 7 W. Laosiritaworn, R. Yimnirun and Y. Laosiritaworn, *Key Eng. Mater.* 421-422, 432-435 (2010).
- 8 C.A.O. Nascimento, R. Giudici, R. Guardani, *Comput. Chem. Eng.*; 24: 2303-2314(2000).
- 9 E. M. Sabolsky, A. R. James, S. Kwon, S. Troler-Mckinstry, and G. L. Messing, *Appl. Phys. Lett.* 78, 2551 (2001).
- 10 E. M. Sabolsky, S. Troler-Mckinstry, and G. L. Messing, *J. Appl. Phys.* 93, 4072 (2003).
- 11 Dayhoff, J. E. *Neural Network Architectures: An Introduction* (Van Nostrand Reinhold, New York, 1990).

Table 1

Table 1 Input and output data used in ANN training

Parameter	Type	Data format	Scaling range	Min	Max	Scaling factor
Type of materials	Input	Categorical	[-1,1]	n/a	n/a	n/a
Frequency (Hz)	Input	Numerical	[-1,1]	1	240	0.008368
Field amplitude (V/mm)	Input	Numerical	[-1,1]	16.67	1500	0.001348
Hysteresis area (mCV/cm)	Output	Numerical	[0,1]	0.00013	1180.73	0.000847

Figure 1

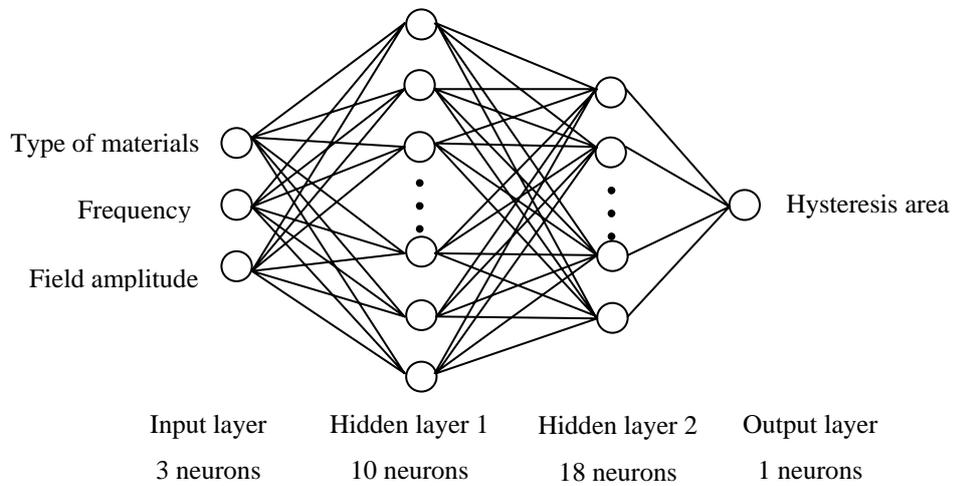


Figure 1 Artificial neural network composed of 3-10-18-1 neurons multilayer.

Figure 2

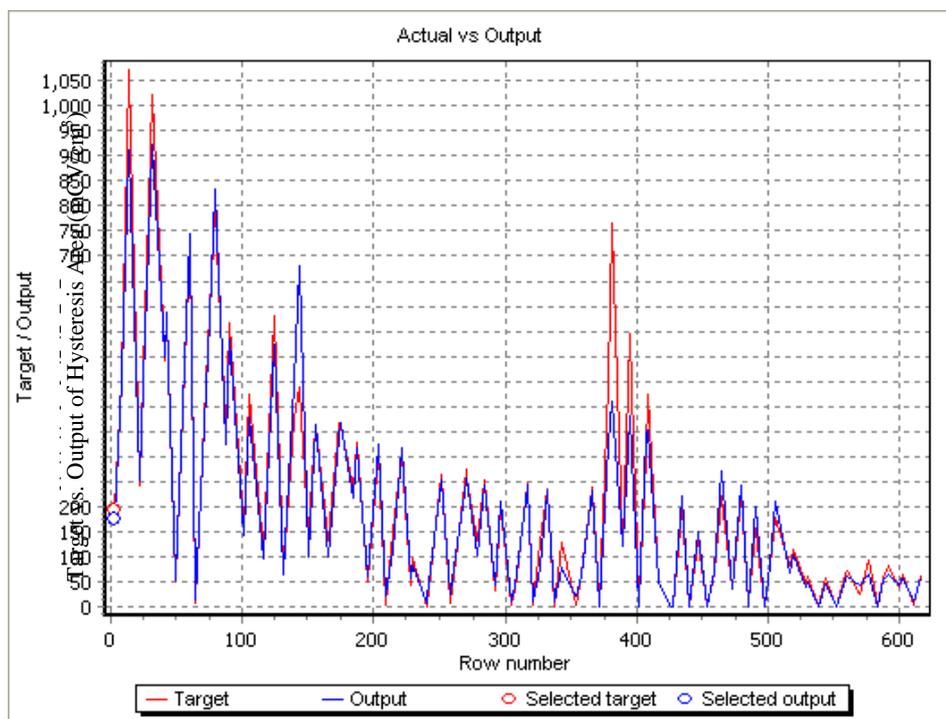
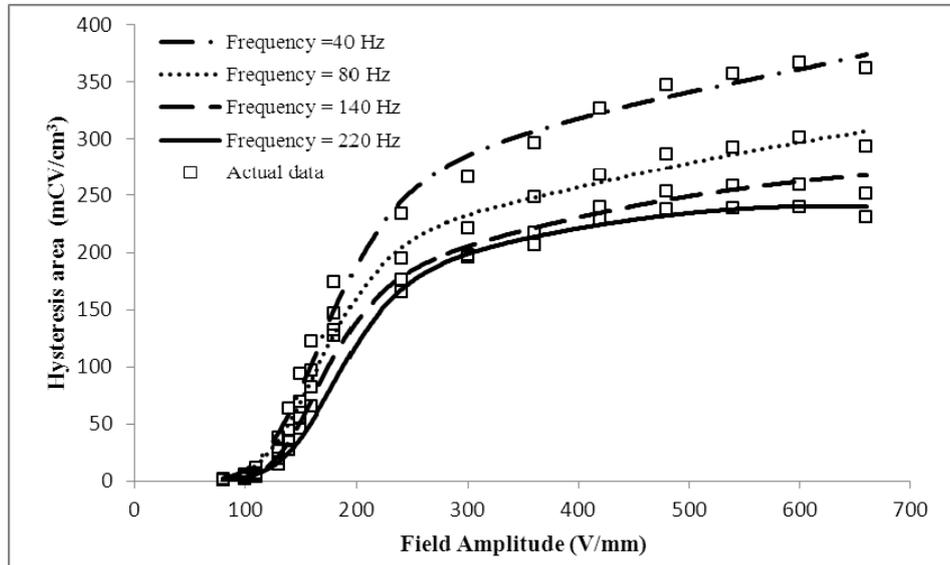


Figure 2 Plot of target and output plot of testing data of ANN architecture 3-10-18-1

Figure 3

a) single crystal



b) Bulk ceramics

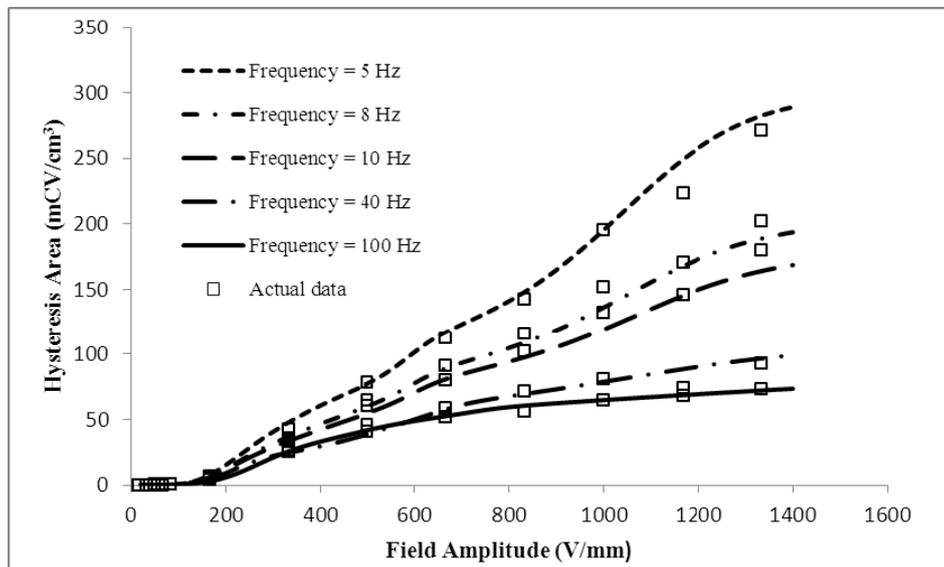


Figure 3 The actual experimental hysteresis area (open square,) as a function of field amplitude for various frequency for a) the single crystal and b) the bulk ceramics. Lines in the figure are from ANN modeling.

(ปกปิด)

ภาคผนวก ง.

บทความวิชาการที่กำลังจะส่งตีพิมพ์

Wimalin Laosiritaworn, Supattra Wongsanmai, Rattikorn

Yimnirun and Yongyut Laosiritaworn, “Artificial-Neural-Network

Modeling of the Compressive Uniaxial Stress Dependence of

Ferroelectric Hysteresis: An Application to Soft Lead Zirconate

Titanate Ceramics”, คาดว่าจะส่งไปที่ Materials Science and

Engineering B

Artificial-Neural-Network Modeling of the Compressive Uniaxial Stress Dependence of Ferroelectric Hysteresis: An Application to Soft Lead Zirconate Titanate Ceramics

Wimalin Laosiritaworn^{1*}, Supattra Wongsanmai², Rattikorn Yimnirun³ and Yongyut Laosiritaworn^{4,5}

¹Department of Industrial Engineering, Faculty of Engineering, Chiang Mai University, Chiang Mai 50200, Thailand.

²Department of Physics, Faculty of Science, Maejo University, Chiang Mai 50290, Thailand.

³School of Physics, Institute of Science, Suranaree University of Technology, Nakhon Ratchasima 30000 Thailand.

⁴Department of Physics and Materials Science, Faculty of Science, Chiang Mai University, Chiang Mai 50200 Thailand.

⁵TheP Center, CHE, 328 Si Ayutthaya Road, Bangkok 10400, Thailand.

E-mail address of the principal author: wimalin@hotmail.com

Abstract

In this work, Artificial Neural Network (ANN) modeling was used to model ferroelectric hysteresis under the influence of compressive uniaxial stress using the hysteresis data obtained from soft Lead Zirconate Titanate as an application. The main objective is to model the role of external stress, including electric field perturbation, on the complex hysteresis properties, which are hysteresis area, remnant polarization, coercivity and loop squareness. With its false tolerance abilities, ANN was used to predict how the stress direction (on applying and releasing), the stress magnitude (σ) the electric field amplitude (E_0), and the electric frequency (f) affect on the hysteresis properties, quantitatively. The best network architecture with highest accuracy was found in the ANN training through extensive architecture search. It was then used to predict hysteresis properties of the unseen testing patterns of input. The predicted and the actual testing data were found to match very well for the whole extensive range of considered input parameters. This well match, even when the stress was applied, certifies the ANN one of

the superior techniques, which can be used for the benefit of technological development of ferroelectric applications.

Keywords: Artificial Neural Network, Hysteresis Properties, Soft Lead Zirconate Titanate, Uniaxial Stress.

1. Introduction

During recent years, the ferroelectric hysteresis topic has become of frequent investigating issue due to the need of important ferroelectric applications [1,2]. In such an application, the amplitude (E_0) and frequency (f) dependence of hysteresis parameters are of important consideration. Both experimental and theoretical studies have mainly focused on the use of power law scaling to investigate how hysteresis properties response to external field parameters in a form of $A \propto f^\alpha E_0^\beta$ where A denotes the hysteresis area, α and β are exponents to the scaling (e.g. consistent Ref. [1]). In spite of its reasonable success on finding how hysteresis area relates to the field, each exponent obtained in this way is not truly independent. Therefore, in previous works, α and β were extracted separately [3]. Specifically, one exponent was extracted at a time and when it was retrieved, it was assumed constant and fed back to the power law to find another exponent. However, though this method is sound, the extracted exponents are very vulnerable where a small change or error in α could cause a considerable change in β . In addition, with further including of relevant parameters in the scaling such as the inclusion of the stress parameter σ to seek for the scaling in the form $A \propto f^\alpha E_0^\beta \sigma^\gamma$, the problem becomes even more complicated and some approximation has to be applied. For instance, instead of the sole magnitude of the hysteresis area, one has to consider the difference between the area at current applied stress and that of the unstressed to form the scaling [4]

$$\langle A - A_{\sigma=0} \rangle \propto f^\alpha E_0^\beta \sigma^\gamma. \quad (1)$$

Though its reasonable success in constructing the scaling formalism, it is very obvious that the zero-stress hysteresis-area $A_{\sigma=0}$ in Eq. (1) must be known before hand for each f and E_0 conditions. On the other hand, in some systems, the unstressed condition is not accessible such as in films structure where the internal stress is induced from the

lattice spacing mismatch between the films and the substrate. In this case, one cannot make the best use of Eq. (1) in the modeling. Instead, one has to phenomenologically propose new scaling function using either trial-and-error or more sophisticated empirical methods. Moreover, when including the minor hysteresis loop, 2 scaling functions have to be differently proposed for minor loop and saturated loop even within the same ferroelectric ceramic [5]. Further, the scaling exponents are not truly constants but a function of field parameters, e.g. α may be a function of E_0 and γ may be a function of f [5]. Therefore, there is no guarantee if there really exists simple power-law-scaling form (where the exponents α , β and γ are truly constant) for all ferroelectric systems. In such cases, the simple power-law-scaling is no longer simple.

Consequently, in this work, Artificial Neural Network (ANN), another sophisticated technique, was applied to model the hysteresis behavior. ANN is a technique widely used in industries for various purposes due to its ability to 'learn' from examples. Further, the ANN was recently found to be useful in modeling properties of material prepared/measured under various conditions [6-10]. Therefore, in this work, the ANN was used to model ferroelectric hysteresis under mechanical loading condition using soft Lead Zirconate Titanate as an application.

2. Background ANN theories

Artificial neural network (ANN) is a statistical model of actual system built by tuning a set of parameters known as weight. It can perform function mapping for a set of given values of inputs to corresponding set of outputs [14]. ANN simulates biological neural networks in human brains so that it can learn to pick up relationship or pattern in data the same way human brain function. The type of ANN used in this paper is a multilayer perceptron (MLP) which consists of input layer, hidden layer and output layer, e.g. see Fig. 1. Each layer consists of simple processing elements called neurons and neurons in each layer are connected together to form a neural network. Weight is assigned to each connection between neurons, initially by small random number. By tuning and adjusting these weights, ANN can be used to learn relationship between input and output.

A number of training algorithms are available for weight tuning process. In this study, the Back Propagation (BP) algorithm, one of the most widely used algorithms [1], was applied. In BP learning, two steps were performed, the forward pass and the backward pass. In the forward pass, inputs are fed to ANN. Each neurons attain output by calculate weighted sum (S_j) from $\sum_i a_i w_{ij}$, where a_i is the activation level of unit i , and w_{ij} is the weight from unit i to unit j . Then, the logistic transfer function, i.e. $g(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ where $x = S_j$, were applied to the output. Then, $g(x = S_j)$ becomes the output of unit j , and the same procedure repeats for all neurons to obtain the final output. This output is then compared with its corresponding target value and the deviation between them are calculated in the backward pass. Error in the output layer is calculated from $\delta_j = (t_j - a_j)g'(S_j)$ and $\delta_j = \left[\sum_k \delta_k w_{kj} \right] g'(S_j)$ for the hidden layers. In these equations, t_j is the target value for unit j , a_j is the output value for unit j , $g'(x)$ is the derivative of the logistic function g and S_j is weighted sum of inputs to j . Then, the weight adjustment is calculated as $\Delta w_{ji} = \eta \delta_j a_i$ where η is the learning rate. These forward and backward processes repeat with new input vector until stopping criteria are met [11].

3. Methodologies, results and discussions

In this work, the ferroelectric hysteresis data of the soft PZT was used to train the network. The hysteresis loops were measured at room temperature (25 °C) from commercial soft PZT ceramic disks (PKI-552, Piezo Kinetics Inc., USA) with diameter of 10 mm and thickness of 1 mm with f covering from 2 to 100 Hz and E_0 from 600 to 1800 mV. Details of the measuring system were described elsewhere [1,4,13]. Then, from the hysteresis loops, the loop area A , the remnant polarization P_r , the hysteresis coercivity E_c , and the hysteresis loop squareness S were extracted and used as output hysteresis data for the ANN training. The input data for the ANN are the field frequency f , the field amplitude E_0 , the stress application (applying or releasing), and the stress magnitude σ . These actual input experimental data were used to train the artificial neural network for

predicting the output hysteresis properties. Input and output of the ANN are summarized in Table 1.

As can be seen in Table 1, 2 network architectures were considered to maximize the training efficiency and for accuracy comparison. Specifically, in the first architecture, a single ANN was used to model four outputs in the same time. Therefore, there were 4 neurons in input layer (representing stress application, σ , E_0 , and $\Delta\sigma$) and 4 neurons in output layer (representing A , P_r , E_c and S). In the second architecture, 4 ANNs were trained separately to model the four outputs, i.e. 1 network for 1 output. Then the number of hidden layers and hidden nodes in each hidden layers search were conducted for up to 2 layers and up to 30 neurons in each layer. Appropriate number of hidden layer and hidden nodes were achieved through heuristic and exhaustive search. Note that the best architecture is listed in the format XX-XX-XX-XX where XX refers to the number of nodes in input layer, first hidden layer, second hidden layer and output layer respectively. After that, the raw input-output data of 68 records were separated into 3 sets which are training, validate and testing dataset at the ratio of 36: 126: 126 respectively.

From the training, the network with highest accuracy for each architecture were found and they are summarized in Table 2. The network accuracy is measured in terms of mean absolute error (MAE) and the square of correlation coefficient (r^2) i.e.

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |f_i - y_i|}{n}$$

and

$$r^2 = \frac{n \sum_{i=1}^n f_i y_i - \left(\sum_{i=1}^n f_i \right) \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)}{\sqrt{n \left(\sum_{i=1}^n f_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^n f_i \right)^2} \sqrt{n \left(\sum_{i=1}^n y_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2}}$$

where f_i is the prediction from neural network for record i , y_i is the actual value for record i , and n is the total number of data. In general, the smaller of MAE and the closer of r^2 to 1 are desirable. Therefore, from Table 2, it can be concluded that training with 4 separate networks (second architecture) can improve modeling accuracy judging from both MAE and r^2 . However, the first architecture required much less time and effort in training and provide acceptable r^2 (> 0.8978). An example of scatter plot can be found in Figure ,

which shows the plot between target value (testing group) and output from ANN of the network trained to model hysteresis area with the architecture of 4-19-25-1. Further, Fig. 3 shows the comparison between the actual data (open square) and that from the ANN predicting (lines). Being evident, the predicting data forms well representatives for the actual experiments data for both applying and releasing stresses. In addition, unlike the previous power-law-scaling investigation where the scaling was performed on one particular stress application (applying) [4], as applying and releasing stresses are of different behaviors, this work can modeling both stress applying and releasing at the same time. Therefore, including with the good r^2 provided, it can be concluded that the ANN is one of the appropriate and successful techniques in modeling ferroelectric hysteresis even under both electrical and mechanical perturbations.

4. Summary

In this work, the ANN was used to model the hysteresis properties of soft PZT ceramics under loading condition. Based on the agreement between the actual experiment values and those from the ANN prediction, the ANN has assured itself one of the fruitful techniques in modeling ferroelectric hysteresis properties even under applied stresses. Further, without the need to separate the data for the stress applying and stress releasing, the ANN investigation further approved its advantage over the conventional power law scaling technique.

Acknowledgment

This work is supported by the Thailand Research Fund (TRF) and the Commission on Higher Education (Thailand)

References

1. K. Uchino, *Ferroelectric Devices* (Dekker, New York, 2000).
2. O. Auciello, J. F. Scott, and R. Ramesh, *Phys. Today* 51, 22 (1998).
3. R. Yimnirun, Y. Laosiritaworn, S. Wongsanmai, and S. Ananta, *Appl. Phys. Lett.* 89,

- 162901 (2006).
4. R. Yimnirun, S. Wongsanmai, S. Ananta and Y. Laosiritaworn, Appl. Phys. Lett. **89**, 242901 (2006).
 5. N. Wongdamern, A. Ngamjarrojana, Y. Laosiritaworn, S. Ananta and R. Yimnirun, J. Appl. Phys. 105, 044109 (2009).
 6. W.S. Laosiritaworn, Adv. Mater. Res. 55-57: 901 (2008).
 7. W. Laosiritaworn, O. Khamman, S. Ananta, R. Yimnirun and Y. Laosiritaworn, Ceram. Inter. 34, 809 (2008).
 8. W. Laosiritaworn and Y. Laosiritaworn, IEEE Trans. Magn. 45, 2644 (2009).
 9. W. Laosiritaworn and N. Chotchaithanakorn N. Chiang Mai J. Sci. 36: 83 (2009).
 10. W. Laosiritaworn, R. Yimnirun and Y. Laosiritaworn, Key Eng. Mater. 421-422, 432 (2010).
 11. Dayhoff, J. E. Neural Network Architectures: An Introduction (Van Nostrand Reinhold, New York, 1990).
 12. C.A.O. Nascimento, R. Giudici, R. Guadani, Comput. Chem. Eng. 24: 2303-2314 (2000).
 13. R. Yimnirun, Y. Laosiritaworn, and S. Wongsanmai, J. Phys. D 39, 759 (2006).
 14. K. Swingler, Applying Neural Networks: A Practical Guide (Academic Press, London, 1996)

Table 1

Table 2 Input and output data used in ANN training

Parameter	Type	Data format	Max	Min
Stress action	Input	Categorical	n/a	n/a
Stress magnitude	Input	Numerical	0.75	0
Field amplitude	Input	Numerical	1800	0
Field frequency	Input	Numerical	100	0
Hysteresis area	Output	Numerical	49111000	248720
Remnant polarization	Output	Numerical	8496.2	147.3
Hysteresis Coercivity	Output	Numerical	1654.9	169.34
Loop squareness	Output	Numerical	0.5345	0.10709

জালাল

জালাল

Table 2

Table 3 ANN training results

ANN Architecture		ANN Output	Training		Test	
			MAE	R ²	MAE	R ²
First	4-24-13-4	A	748556.95	0.971936	920018.97	0.963404
		P_r	213.03	0.940677	250.45121	0.906773
		E_c	34.263541	0.975414	35.135949	0.980771
		S	0.009821	0.910215	0.012338	0.879406
Second	4-19-25-1	A	561048.95	0.981167	767065.37	0.978375
	4-22-22-1	P_r	157.87	0.968957	227.54	0.933713
	4-30-27-1	E_c	24.66	0.988093	33.61	0.983918
	4-30-26-1	S	0.006037	0.969711	0.011621	0.897849

Figure 1

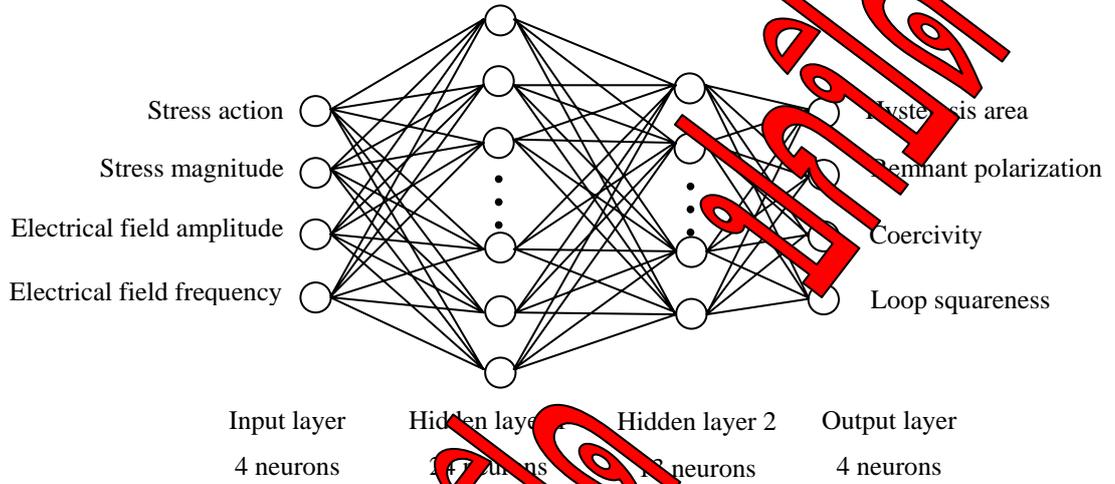


Figure 12 The schematic diagram of the ANN used in this work.

Figure 2

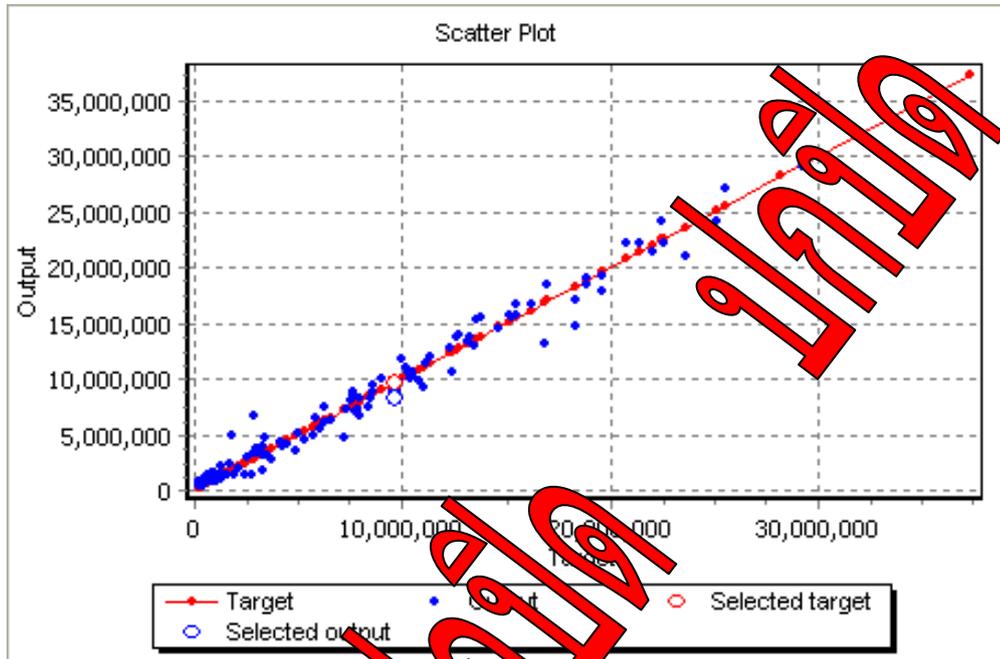
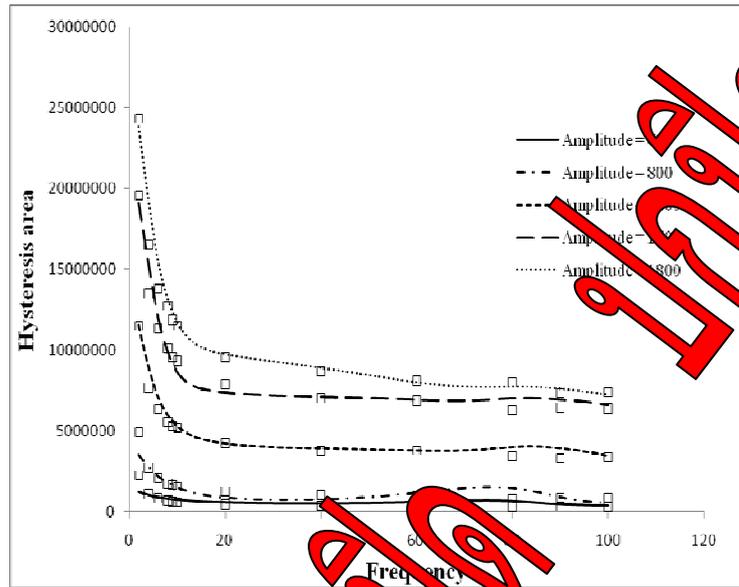


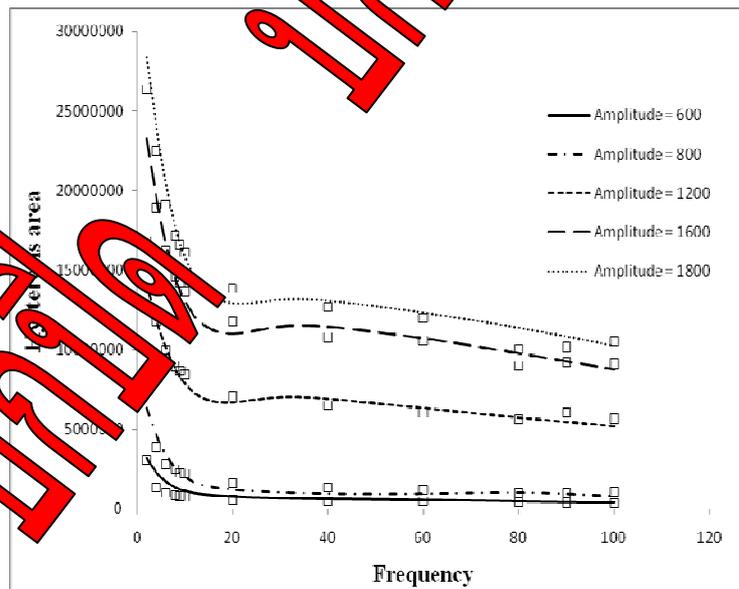
Figure 13 Scatter plot of target (testing group) and output of hysteresis area output generated from the area architecture (4-12, 13-1)

স্বাক্ষর

Figure 3



a) Apply stress = 0.375



b) Release stress = 0.375

Figure 14 Comparison of the actual data (open square) and that from the ANN predicting (lines) for the field amplitude E_0 ranging from 600 to 1800 mV and at $\sigma = 0.375$ $\text{kN}/\pi(5\text{mm})^2$ for (a) stress applying and (b) stress releasing.