

人工神经网络和电阻抗谱法压电材料快速表征

向辉^{1,2}, 吴校生¹

(1. 上海交通大学 微米纳米加工技术全国重点实验室, 上海 200240;

2. 上海交通大学 电子信息与电气工程学院, 上海 200240)

摘要: 压电材料作为重要的功能材料, 广泛应用于社会的各领域, 但其弹性常数的偏差会导致应用过程中出现错误的设计, 弹性常数的正确表征对压电器件的正确设计尤为重要。与其他测量方法相比, 电阻抗谱法仅需要阻抗分析仪即可实现测量, 通过测量阻抗谱反演获得压电材料的弹性常数。传统电阻抗谱法通过不断修正材料参数, 使得测量阻抗谱和计算阻抗谱最大程度吻合, 该过程需要多次迭代, 计算量大, 耗时较长。该文提出采用神经网络建立阻抗谱到弹性常数的正向模型, 测量得到阻抗谱后仅需一次正向计算即可得到弹性常数。使用 Comsol 和 Matlab 联合仿真建立数据集, 引入丢弃法避免模型过拟合, 利用 Pytorch 建立模型, 经过训练后, 最大谐振频率偏差从初始 2.8% 降至 0.8%。该技术为压电材料弹性常数精密测量提供可靠的理论与实践途径。

关键词: 压电材料表征; 电阻抗谱法; 人工神经网络; 弹性常数矩阵

中图分类号: TN384; TM22 **文献标识码:** A

Fast Electrical Impedance Spectroscopy-Based Characterization of Piezoelectric Material Using Artificial Neural Network

XIANG Hui^{1,2}, WU Xiaosheng¹

(1. National Key Laboratory of Advanced Micro and Nano Manufacture Technology, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240, China; 2. Dept. of Micro/Nano Electronics, School of Electronic Information and Electrical Engineering, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: As important functional materials, piezoelectrics are widely used in various fields. However, the deviation of their elastic constants results in erroneous designs during application processes. Accurate characterization of the elastic constant is crucial for the correct design of piezoelectric devices. In contrast to other measurement methods, electrical impedance spectroscopy can only be carried out using an impedance analyzer, and the elastic constants of piezoelectric materials can be obtained by the inversion of the impedance spectroscopy data. In traditional electrical impedance spectroscopy, the measured impedance spectra are coincided with the calculated impedance spectra to the best possible extent by constantly modifying the material parameters. However, the process requires many iterations, making it tedious and time consuming. This study developed a forward model that yields elastic constants from impedance spectra by harnessing an artificial neural network. Upon measuring the impedance spectrum, the elastic constant can be obtained by only one forward calculation. COMSOL and MATLAB co-simulation were used to generate the data-sets. The discard method was employed to avoid overfitting of the model, and Pytorch was used for implementation. The resonant frequency error was reduced from the initial 2.8% to 0.8% after training. The proposed technique affords a reliable theoretical and practical approach for accurately measuring the elastic constants of piezoelectric materials.

Key words: piezoelectric material characterization; electrical impedance spectroscopy method; artificial neural network; elastic constant matrix

收稿日期: 2023-12-06

基金项目: 上海市科委平台建设基金资助项目(19DZ2291103)

作者简介: 向辉(1999-), 男, 湖北省天门市人, 硕士生。通信作者: 吴校生, 男, 副研究员。

0 引言

压电材料广泛地应用于生物医学、声传感器、换能器以及执行器等领域,成为深入现代社会各个层面的重要功能材料^[1-4]。但使用压电材料进行相关器件的设计时,材料参数的偏差会导致计算结果的不准确。另外,压电材料的生产过程中,需要准确测试材料参数,以对加工工艺及材料构成进行优化^[5]。压电材料参数的准确快速表征对相关工程技术极为重要。

压电材料表征目前主要的方法有电谐振法、超声脉冲-回波法、超声共振谱法和电阻抗谱技术。电谐振法和超声脉冲-回波法是 IEEE 提出的标准测量方法^[6],均需要使用多块试样进行测量,样品间材料参数存在个体偏差,多样件测量会出现材料参数的不自洽问题。超声共振谱技术^[7-8]只使用一块样品,需要使用特殊的设备进行顶角激励,得到谐振谱,通过测量频率和计算频率之间的反演,迭代计算出材料常数。电阻抗谱技术^[9]只需一块样品即可表征出完整的材料常数,通过电极激励得到电阻抗谱,可避免使用特殊的实验设备,同样通过测量阻抗谱和计算阻抗谱之间的反演,得到弹性常数。

电阻抗谱技术最初由 Hyun-Woo Joo 等^[9]提出,用于压电换能器材料参数的测量,其使用有限元分析计算电阻抗谱,反演计算得到材料参数。Shiyang Li 等^[10]在单一电阻抗谱测量方法的基础上,采用超声脉冲回波法测量部分对于电阻抗谱不敏感的材料参数,其他材料参数通过电阻抗谱技术反演得到。Da Huo 等^[11]针对 $[001]_c$ 方向极化的单晶材料 $0.63\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3-0.37\text{PbTiO}_3$ (PMN-0.37PT),同样采用电阻抗谱技术和超声脉冲回波法相结合进行测量,仅使用一块样品,消除了样品成分变化和取样程度差异带来的误差。但使用电阻抗谱技术进行表征时,仍然避免不了大量的反演计算。

神经网络可以从经验中进行学习,通过训练不断提高模型自身精度^[12]。但神经网络训练需要大量数据,目前越来越多的研究者将有限元方法产生的高质量数据用于神经网络建模,辅助 MEMS 结构设计^[13-14]、道路疲劳预测^[15]等。Xuecui Zou 等^[13]采用有限元分析得到的数据进行训练,建立基于 MEMS 谐振器的数字频率转换器设计中空气间隙与谐振频率关系的神经网络模型,误差可以减小至

1%。Ruiqi Guo 等^[14]采用卷积神经网络模型,建立 MEMS 几何结构与模态频率、品质因数的模型,缩短了 MEMS 结构的设计周期,其精确度可分别达到 $98.8 \pm 1.6\%$ 和 $96.8 \pm 3.1\%$ 。Zhenhua Wu 等^[15]使用人工神经网络模型建立了道路的机械属性与道路裂纹强度因子之间的关系模型,其模型的决定系数(R^2)可达 0.99,均方误差仅 10^{-4} 。

本文提出一种基于人工神经网络和电阻抗谱技术的压电材料快速测量方法,该方法不需要反演,大大加快了表征过程。测量得到电阻抗谱后,利用电阻抗谱数据集训练获得人工神经网络模型,通过该模型一次正向计算即可得到弹性常数矩阵。采用表面电极进行分组激励,避免传统方法使用专用实验设备进行顶角激励,也避免了错峰匹配错误。

1 表征原理

本文研究的电阻抗谱法表征原理如图 1 所示,主要通过模式分组理论进行分组激励测量电阻抗谱,利用电阻抗谱数据集训练获得人工神经网络模型,通过人工神经网络,模型一次正向计算得到弹性常数。

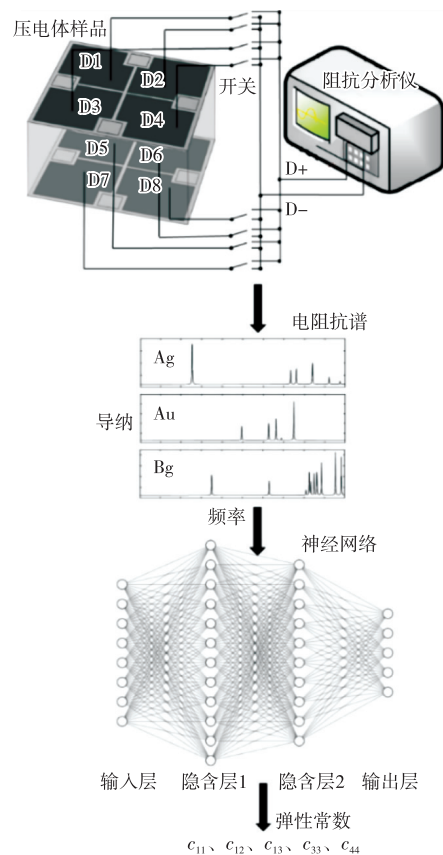


图1 表征原理

1.1 测试样品

样品采用长方形压电体,上下表面共有 8 个表面电极,分别为上表面的 D1~D4 和下表面的 D5~D8。测量获得样品长、宽、高分别为 7.64 mm、7.66 mm、3.00 mm,密度为 7 700 kg/m³。样品选用 C203 压电陶瓷作为结构材料,C203 压电陶瓷属于六方晶系,具有 C2h 对称性,共有 5 个独立的弹性常数(c_{11} 、 c_{12} 、 c_{13} 、 c_{33} 、 c_{44}),弹性常数 c 矩阵为

$$c = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{c_{11}-c_{12}}{2} \end{bmatrix} \quad (1)$$

1.2 模式分组理论

Mochizuki^[16]指出,具有 C2h 对称性的材料有 Ag、Bg、Au 和 Bu 4 种谐振模式。根据材料的对称性,基于不同方向位移函数的奇偶性,可以进行分类。分类如表 1 所示。表中,O 代表偶函数,E 代表奇函数。

表 1 4 种模式位移函数的奇偶性

模式	位移分量	奇偶性		模式	位移分量	奇偶性	
		x	$y+z$			x	$y+z$
Ag	u	O	E	Au	u	E	E
	v	E	O		v	O	O
	w	E	O		w	O	O
Bg	u	E	O	Bu	u	O	O
	v	O	E		v	E	E
	w	O	E		w	E	E

1.3 分组激励

为避免模态遗漏和错峰匹配,在模态分组的基础上,测量谐振频率时,采用分组激励的方式,激励出不同的谐振方式。通过 Comsol 实验得出,采用 3 种电极组合激励方式^[17-18],可以激发出对应的 3 种不同的谐振模。相应的激发模式如表 2 所示,十代表接正极,一代表接负极。

表 2 电极激发模式

电极	Ag	Bg	Au
D1D2	++	++	++
D3D4	++	--	--
D5D6	--	++	--
D7D8	--	--	++

1.4 电阻抗谱测量

采用阻抗分析仪 PV80A 测量 C203 压电谐振器阻抗谱,用 20 Hz 作为步长进行扫频。同时在测量时,应用模式分组理论,每次测量需按照表 2 在电极上施加不同的电压组合,激励出不同的谐振模式,避免错峰匹配。

1.5 基于神经网络的电阻抗谱法

传统电阻抗谱技术主要分为正问题和逆问题,正问题为通过有限元法等计算一定弹性常数下的电阻抗谱,逆问题则为通过 LM 算法、粒子群算法等算法迭代计算,以缩小测量阻抗谱和计算阻抗谱之间的偏差^[9-11]。该迭代过程计算时间长,且对初始值的取值范围有更高的要求。当初始值偏离目标值较大时,会导致迭代过程不收敛。

人工神经网络在结构上模拟生物神经网络结构,由许多简单的、可并行运行且可互相联结的计算单元按特定方式链接而组成。作为一种信息处理系统,其所能实现的功能一定程度上取决于其网络结构、各个单元的功能及处理方式和它们之间的连接形式及连接强度^[12]。神经网络算法在电阻抗谱法的基础上,通过模型训练,可在测得阻抗谱后,通过一次正向计算得到弹性常数矩阵。

2 神经网络训练

2.1 数据集获取

神经网络首先需要大量的数据进行训练,采用 Comsol 与 Matlab 联合仿真进行有限元分析获取数据集。有限元法计算压电体样品谐振频率,有谐振分析和模态分析两种方式。谐振分析为采用电极进行分组激励,完成扫频计算,不仅可以得到谐振频率信息,还可以获得阻抗等幅值信息,有利于谐振频率的匹配。模态分析为采用 Comsol 特征频率研究,直接计算出压电体样品的谐振频率,计算时间短,但丢失了阻抗等幅值信息。

表3 初始值匹配及组内编号

	测量值	谐振分析	模态分析	相对偏差/%	组内编号
Ag-1	226 540	220 400	220 844.4	2.514 1	4
Ag-2	334 940	328 800	329 967.9	2.240 5	7
Ag-3	452 280	438 400	442 146.6	2.837 9	13
Ag-4	457 440	445 400	444 458.0	1.311 8	14
Au-1	169 240	165 000	164 817.8	2.612 9	2
Au-2	253 460	248 000	248 379.5	2.004 4	4
Au-3	375 680	364 200	367 228.7	2.249 6	8
Au-4	460 640	450 600	453 136.3	1.628 9	14
Au-5	466 560	456 800	458 575.3	1.711 4	15
Bg-1	247 520	245 000	245 571.1	0.787 3	3
Bg-2	350 400	342 600	343 320.3	2.020 4	6
Bg-3	387 220	378 800	379 399.4	2.019 6	9
Bg-4	523 900	512 200	513 246.8	2.033 4	17

计算数据集时,采用谐振分析进行初始匹配,利用计算耗时较短的模态分析多次计算。首先,采用弹性常数初始值对压电体进行谐振分析,将得到的计算阻抗谱与测量阻抗谱进行初始匹配。其次,根据振型,将谐振分析匹配上的谐振频率和模态分析计算出的谐振频率进行对应。在模态分组的基础上,记录下谐振频率在相应谐振模式分组里的编号。谐振频率匹配及组内编号如表3所示,共匹配了13个谐振频率,初始最大偏差为2.8%。

将Comsol模态分析仿真文件mph另存为m文件,即可在Matlab中进行仿真。Matlab中使用for循环设置5个材料参数,自动计算数据集。在计算数据集的过程中,需提取各个方向的位移,判断出每个谐振频率对应的模式,并根据组内编号在分组里面得到与测量谐振频率匹配的计算频率。Matlab计算伪代码如表4所示。选取数据集计算范围如表5所示,分别对5个弹性常数在初始值上下偏移一定范围,以5 GPa为步长,共计算1600个样本点。

表4 Matlab计算伪代码

算法1 Matlab&Comsol 联合仿真
Initial
Initialize model=c203
for c_{11} 、 c_{12} 、 c_{13} 、 c_{33} 、 c_{44} in range do
model.sol('sol1').runAll
//计算研究1
$zx = \text{real}(\text{line_z_x.d1}(:,4)). * \text{real}(\text{line_z_x.d1}(:,6))$
>0

续表

算法1 Matlab&Comsol 联合仿真

```
//由于浮点误差,对称坐标上位移相乘大于0为偶函数
//上语句为计算  $u(x)$  方向位移分量函数关于  $z$  坐标的奇偶性
Mode=sort(zx,zy,zz,yx,yy,yz,xx,xy,xz)
//得到位移函数奇偶性后,根据 Mochizuki 分组理论判断模式
Freqs=Mode(i)
//根据组内编号提取出对应的谐振频率
end for
```

表5 数据集计算范围

	弹性常数/GPa				
	c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{33}	c_{44}
最大值	140	89	93	130	28
最小值	125	69	73	115	13
步长	5	5	5	5	5

2.2 模型训练

为避免模型训练中的过拟合问题,在模型训练中引入丢弃法^[19]。丢弃法即为在前向传播过程中,在计算每一内部层的同时注入噪声,为模型训练引入随机性。具体为在单层的计算中,引入丢弃概率 p ,从均匀分布 $U[0,1]$ 中抽取,与这层神经网络的维度一致。在计算中只保留大于 p 的节点,计算式为

$$q = \begin{cases} q & (\delta > p, \delta \in U[0,1]) \\ 0 & (\delta \leq p, \delta \in U[0,1]) \end{cases} \quad (2)$$

式中: δ 为满足均匀分布的随机数; p 为丢弃概率; q 为训练点。

在模型训练前为避免数据量纲的影响,需要对

数据进行归一化处理。归一化计算式为

$$x = \frac{x - \mu}{\sigma} \quad (3)$$

式中: μ 为样本均值; σ 为样本标准差; x 为训练样本点。

神经网络训练时,采用 MSE 作为损失函数,计算神经网络模型计算值和真实值之间的误差。MSE 计算式为

$$MSE = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \right) \quad (4)$$

式中: n 为样本点个数; y_i 为第 i 个样本点真实值; \hat{y}_i 为第 i 个样本点神经网络计算值。

人工神经网络模型有许多超参数需要确定,如训练步长、激活函数、模型层数。尝试多种超参数的组合,留下其中计算结果较好的超参数组合,最后采用的超参数如表 6 所示。采用 Pytorch 建立模型,模型训练误差如图 2 所示。设置模型最高训练次数为 20 000 次。由图可看出,模型在训练到 4 000 次时,基本收敛。

表 6 神经网络超参数

超参数	数值
神经网络层数/个	5
输入层单元数(谐振频率)	13
隐含层 1 单元数/个	400
隐含层 2 单元数/个	200
隐含层 3 单元数/个	50
输出层单元数(弹性常数)/个	5
训练步长	0.03
优化算法	Adam ^[20]
丢弃概率	0.2, 0.05, 0.025

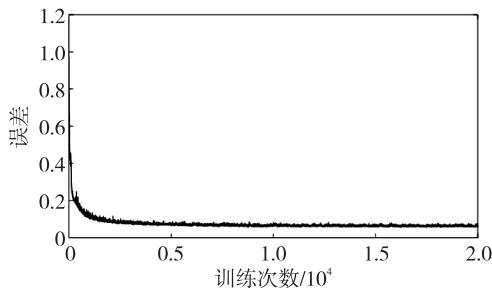


图 2 模型训练

3 结果与分析

采用训练后的模型,将测量得到的谐振频率作为输入,经过神经网络一次正向计算,即可计算获得优化后的弹性常数。弹性常数初始值和优化值

如表 7 所示。

表 7 弹性常数

	弹性常数/GPa				
	c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{33}	c_{44}
初始值	130	74	78	120	23
优化值	143.79	85.258	88.275	131.13	23.363

为验证人工神经网络模型计算结果的正确性,采用有限元法分别进行了模态分析和谐振分析两种数值分析。在模态分析中,以优化后的弹性常数作为压电体模型的仿真材料参数,根据表 3 计算数据集时得到的组内编号,提取对应编号的谐振频率。经计算后匹配结果如表 8 所示,最大谐振频率偏差从初始值的 2.8% 降低至 0.8%。

表 8 测量和计算得到的谐振频率

模式	$f_i^{\text{obs}}/\text{Hz}$	$f_i^{\text{cal}}/\text{Hz}$	相对偏差/%
Ag-1	226 540	227 734.5	0.527 279
Ag-2	334 940	337 690.1	0.821 081
Ag-3	452 280	451 527.4	0.166 400
Ag-4	457 440	453 785.0	0.799 017
Au-1	169 240	169 081.5	0.093 627
Au-2	253 460	254 177.2	0.282 959
Au-3	375 680	376 012.1	0.088 396
Au-4	460 640	462 950.1	0.501 504
Au-5	466 560	468 638.1	0.445 411
Bg-1	247 520	249 190.0	0.674 683
Bg-2	350 400	347 751.7	0.755 783
Bg-3	387 220	385 259.9	0.506 196
Bg-4	523 900	523 008.4	0.170 184

在训练采用的 1 600 个样本点中,匹配得到最大谐振频率误差最小为 1.684 2%。而以测量得到的谐振频率作为输入,人工神经网络模型计算出的弹性常数能使最大的谐振频率偏差降低至 0.8%。训练得到的人工神经网络模型不仅在样本点内能将损失函数收敛到较小值,而且具有较强的泛化能力,对于未知数据仍然能够获得较好的预测能力。

在谐振分析中,针对 3 种不同的谐振模式,按照表 2 施加对应极性的电极激励,在 0~600 kHz 内以 200 Hz 为步长进行扫频。谐振分析计算时间长,但可以保留阻抗等幅值信息,相比模态分析能更好地可视化模型误差。谐振分析匹配结果如图 3 所示。在测量得到的 3 组谐振模式中,与初始值计算得到的电阻抗谱相比,测量阻抗谱与最终优化计算得到

阻抗谱匹配度大幅提升,即计算阻抗谱和测量阻抗谱之间的偏离大幅减小。由图3可知,即使是未纳

入计算的小峰,在神经网络优化后与最终计算阻抗谱也可获得较好的匹配。

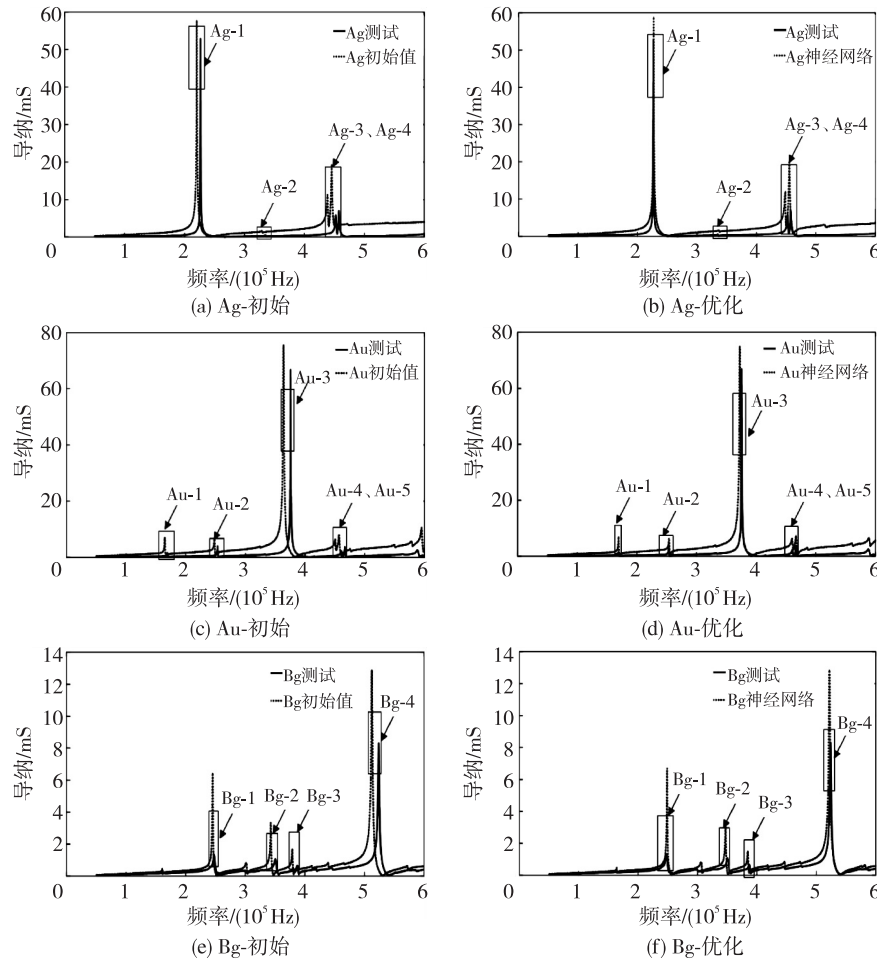


图3 阻抗谱与优化阻抗谱

4 结束语

为避免传统电阻抗谱技术中的反演过程,提出利用人工神经网络建立电阻抗谱到弹性常数的正向模型,测量得到电阻抗谱后仅需一次正向计算即可得到弹性常数,最大谐振频率偏差仅为0.82%。虽然在神经网络对弹性常数进行表征时,正向计算不依赖弹性常数的初始值,但在构建训练数据集时,仍然需要采用初始弹性常数进行频率匹配。未来可以在进行频率匹配时采用激光测振仪等方式对振型进行实时观测,直接对长方形压电体样品的振型进行匹配,这样的匹配过程不依赖弹性常数的初始值。

本文所采用的人工神经网络模型方便部署在以FPGA等嵌入式芯片为核心的边缘设备上,为压电材料弹性常数表征提供一种新的实现方案。

参考文献:

- [1] KAPAT K, SHUBHRA Q T H, ZHOU M, et al. Piezoelectric nano-biomaterials for biomedicine and tissue regeneration[J]. Advanced Functional Materials, 2020, 30(44):1909045.
- [2] KRISHNAKUMAR R, RAMESH R. Enhancing the performance characteristics of piezoelectric transducers by broadband tuning[J]. IEEE Sensors Journal, 2021, 21(19):21667-21674.
- [3] VIPIN V, TRIVEDI K, KOLEY S. Performance of a submerged piezoelectric wave energy converter device in time domain[J]. Energy Reports, 2022, 8:309-314.
- [4] LIU K, HAN W, GU H, et al. Displacement-maintaining piezoelectric actuator without friction[J]. Smart Materials and Structures, 2022, 31(3):35026.
- [5] CHEN C, WANG X, WANG Y, et al. Additive manufacturing of piezoelectric materials [J]. Advanced

- Functional Materials, 2020, 30(52):2005141.
- [6] ANSI/IEEE Std 176-1987. IEEE Standard on Piezoelectricity[S].
- [7] TANG L, ZHANG Y, CAO W. Characterizing full matrix constants of piezoelectric single crystals with strong anisotropy using two samples [J]. Journal of Applied Physics, 2016, 120(16):13730.
- [8] ZHUANG M, TANG L, ZHU R, et al. Nondestructive evaluation of homogeneity of Mn-doped $0.23\text{Pb}(\text{In}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$ - $0.48\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ - 0.29PbTiO_3 single crystals via resonant ultrasound spectroscopy [J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2020, 53(3):35303.
- [9] JOO H W, LEE C, RHO J, et al. Identification of material constants for piezoelectric transformers by three-dimensional, finite-element method and a design-sensitivity method[J]. IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, 2003, 50(8):965-971.
- [10] LI S Y, ZHENG L, JIANG W, et al. Characterization of full set material constants of piezoelectric materials based on ultrasonic method and inverse impedance spectroscopy using only one sample[J]. J Appl Phys, 2013, 114(10):104505.
- [11] HUO D, WANG Q, LYU W, et al. Characterization of full tensor properties of single-domain tetragonal $0.63\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ - 0.37PbTiO_3 single crystal using only one sample[J]. Ceramics International, 2018, 44(7):8358-8362.
- [12] CAUDILL M. Neural networks primer, [J]. Part I. AI Expert, 1987, 2(12):46-52.
- [13] ZOU X C, AHMED S, FARIBORZI H. Implementation of a MEMS resonator-based digital to frequency converter using artificial neural networks[C]//[S. l.]: 2021 EDAA, 2021.
- [14] GUO R Q, SUI F, YUE W, et al. Deep learning for non-parameterized MEMS structural design[J]. Microsystems & Nanoengineering, 2022, 8(1):91.
- [15] WU Z H, HU S, ZHOU F. Prediction of stress intensity factors in pavement cracking with neural networks based on semi-analytical FEA[J]. Expert Systems with Applications, 2014, 41(4):1021-1030.
- [16] EIJI M. Application of group theory to free oscillations of an anisotropic rectangular parallelepiped[J]. Earth Planets & Space, 1987, 35(2):159-170.
- [17] 曾照丰, 吴校生, 黄山, 等. 电极激励超声谐振谱压电材料定征技术[J]. 压电与声光, 2021, 43(3):421-425.
ZENG Zhaofeng, WU Xiaosheng, HUANG Shan, et al. Piezoelectric material characterization technology based on RUS with electrode excitation[J]. Piezoelectrics & Acoustooptics, 2021, 43(3):421-425.
- [18] FENG Q, WU X, ZHAO J, et al. Piezoelectric materials full-matrix constants characterization based on local electrodes using one sample[J]. Journal of Shanghai Jiaotong University (Science), 2023.
- [19] SRIVASTAVA N, HINTON G, KRIZHEVSKY A, et al. Dropout: A simple way to prevent neural networks from overfitting[J]. The Journal of Machine Learning Research, 2014, 15(1):1929-1958.
- [20] KINGMA D P, BA J. Adam: A method for stochastic optimization[M]. Ithaca: Cornell University Library, 2014.