

基于深度学习的KDP晶体三维已加工表面形貌预测

闫祖龙 庞启龙* 熊建龙

南京林业大学机械电子工程学院,南京,210037

摘要:以单点金刚石车削加工磷酸二氢钾(KH_2PO_4 ,KDP)的已加工表面形貌为研究对象,采用连续小波变换和功率谱密度方法提取已加工KDP晶体三维形貌的低频、中频、高频的波长和幅值作为样本集,将切削参数作为关键变量,建立双向长短期神经网络(BiLSTM)、门循环单元(GRU)、随机森林网络(RF)和卷积神经网络(CNN)分别预测已加工KDP晶体各频段的波长和幅值,最终实现三维已加工表面形貌的预测。结果表明,BiLSTM模型对中频和低频波长、低频和高频频幅值的预测结果最优,预测结果误差均值分别为2.14%和3.03%、4.62%和7.19%;GRU网络对低频波长和中频频幅值的预测结果最优,预测结果误差均值分别为3.83%和5.68%;由深度学习模型预测的高频、中频、低频的幅值和波长所生成KDP晶体的三维已加工表面形貌与验证集的实验结果高度一致,验证了结合连续小波、功率谱密度与深度学习方法建立切削参数与KDP晶体三维已加工表面的对应关系的正确性。

关键词:KDP晶体;表面形貌;深度学习;连续小波变换

中图分类号:TH161

DOI:10.3969/j.issn.1004-132X.2025.10.021

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



Prediction of Three-dimensional Machined Surface Topography of KDP Crystals Based on Deep Learning

YAN Zulong PANG Qilong* XIONG Jianlong

College of mechatronics Engineering, Nanjing Forestry University, Nanjing, 210037

Abstract: The surface morphology of potassium dihydrogen phosphate(KH_2PO_4 , KDP) machined by single point diamond turning was the research objects. The low, mid, and high-frequency wavelengths and amplitudes of the three-dimensional surface were extracted by CWT and power spectral density (PSD) as sample sets. Cutting parameters were treated as key variables, and bi-directional long short-term memory (BiLSTM), gated recurrent units (GRU), random forest (RF), and convolutional neural network (CNN) were developed to predict the wavelengths and amplitudes of different frequency bands, ultimately enabling the prediction of the three-dimensional machined surface topography. The results indicate that the BiLSTM model demonstrate superior prediction performance for mid and high-frequency wavelengths, as well as low and high-frequency amplitudes, with average percentage errors of 2.14% and 3.03% for mid and high-frequency wavelengths, and 4.62% and 7.19% for low and high-frequency amplitudes, respectively. The GRU model excels in predicting low-frequency wavelengths and mid-frequency amplitudes, with errors of 3.83% and 5.68%. The predicted three-dimensional surface topography closely matches experimental results from the validation sets. The correspondence between cutting parameters and the three-dimensional machined surface of KDP crystals was revealed by combining continuous wavelet transform, power spectral density, and deep learning methods and the correctness was verified.

Key words: potassium dihydrogen phosphate(KDP) crystal; surface topography; deep learning; continuous wavelet transform(CWT)

0 引言

深度学习具备强大的数据处理和模式识别能力,尤其在处理复杂、多维的非线性数据时展现出

独特的优势,被广泛应用于智能制造、增材制造、表面质量在线检测和优化等领域^[1-3]。磷酸二氢钾(KH_2PO_4 ,KDP)晶体在光学领域中有着重要的应用,是惯性约束核聚变光路系统(NIF)中唯一可作为普克尔斯盒和末端激光倍频的关键元件^[4]。KDP晶体具有脆性高、质软、易潮解等特性,目前单点金刚石车削技术是其主要的加工方

收稿日期:2024-10-21

基金项目:江苏省“六大人才高峰”计划(JXQC-022);江苏省精密与细微制造技术重点实验室开放基金(HGAMTL-1605)

法^[5]。在KDP晶体加工过程中,切削参数、机床振动和材料特性等均会影响其已加工表面形貌,而表面形貌将直接影响KDP晶体的激光损伤阈值和使用寿命^[6-7],因此,为提高KDP晶体的使用性能,精确控制和预测KDP晶体加工后的表面形貌对优化其加工工艺有重要的借鉴意义。

目前,利用深度学习预测表面粗糙度,可以实现对复杂加工工艺的优化和对产品质量的实时预测^[8-10]。ZHANG等^[11]建立高斯过程回归模型,基于切削速度、进给量和切削深度等加工参数,成功预测了黄铜车削的表面粗糙度,预测结果表现出了较高的精度和稳定性。ZENG等^[12]提出了一种人工神经网络和遗传算法集成方法,用于优化加工参数,以最小化表面粗糙度,模型的预测结果与实验数据非常吻合。ZHANG^[13]使用线性回归、决策树、随机森林和深度神经网络模型预测了车削加工AL6061的表面粗糙度,结果表明,深度神经网络模型可以获得更好的预测性能。SANGWAN等^[14]提出一种物理信息指导的深度学习方法来预测铣削表面粗糙度,将物理知识与深度学习相结合,提高了数据稀缺情况下的预测精度和解释性。三维已加工表面形貌的预测和研究通常通过实验设计方法和基于加工机理的理论方法^[15-17]进行。PANG等^[18]基于连续小波变换和功率密度函数提取已加工KDP晶体的表面形貌,并探究切削参数对表面形貌的影响。GUO等^[19]基于刀具的运动轨迹建立几何表面模型,结合机床主轴不平衡导致的振动位移、刀具磨损行为、材料的弹塑性等因素来预测表面形貌,该模型显著提高了预测精度。CAI等^[20]结合超精密磨削的制造机制与优化后的体积误差模型,建立了硅片表面形貌的预测模型,考虑体积误差的优化模型显著提高了硅片表面形貌预测的精度。

综上所述,传统表面形貌预测方法的计算过程复杂,研究主要集中在形貌的二维特征,且难以建立工艺过程对三维已加工表面形貌的影响规律。当前,深度学习技术已成为表面形貌预测中一种高效且准确的解决方案。基于上述分析,本文提出一种结合连续小波变换、功率谱密度和深度学习的预测方法,以全面分析和预测KDP已加工晶体表面形貌中频率特征的波长和幅值特性,并实现对三维形貌的准确预测。

1 实验与方法

本文的分析计算过程如图1所示。使用连续

小波变换(continuous wavelet transform, CWT)和功率谱密度(power spectral density, PSD)方法提取实验样本的不同频率特征信息,用作训练深度学习的训练集,结合验证集并分析误差后,选取最优模型用于预测三维表面形貌。

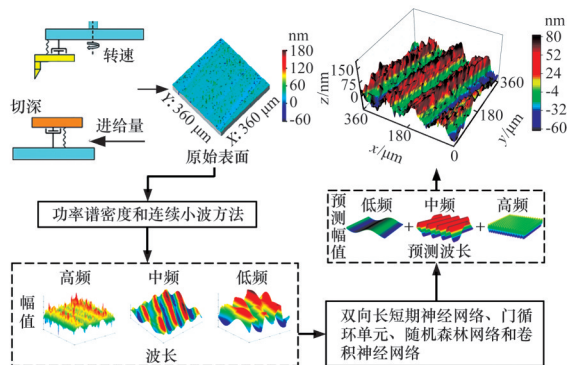


图1 分析计算流程

Fig.1 Analysis and calculation process

1.1 切削实验

本研究采用单点金刚石车削加工KDP晶体,共进行24组切削实验。采用的切削用量参数范围为:进给量8~12 μm/r、主轴转速800~1500 r/min、切深3~10 μm。将实验数据进行样本扩充后分为训练集和验证集,选取的4组验证集所使用的切削参数如表1所示。

表1 验证集切削参数

Tab.1 Cutting parameters for the validation set

验证集	进给量 $f/(\mu\text{m}\cdot\text{r}^{-1})$	主轴转速 $n/(\text{r}\cdot\text{min}^{-1})$	切削深度 $a_p/\mu\text{m}$
1	12	900	9
2	12	1200	3
3	12	1500	3
4	8	900	3

使用白光干涉仪测量KDP晶体已加工表面的三维形貌,取样面积为360 μm×360 μm,取样点数为256×256,取样周期1.412 μm/pixel,验证集三维测量结果如图2所示。

1.2 样本获取

采用CWT和PSD相结合的方法获取已加工表面三维形貌所包含的频率特征的波长和幅值。CWT和PSD相结合的方法能够全面获取取样范围内已加工表面形貌所包含的所有频率特征。二维的连续小波系数表达式为

$$F_{\text{CWT},x}(a, b) = \frac{1}{a} \iint x(r) \psi\left(\frac{r-b}{a}\right) dr \quad (1)$$

式中: $x(r)$ 为二维信号; r 为二维空间坐标, $r=(x, y)$; $\psi(r)$ 为二维母小波函数; b 为平移参数, $b=(b_x, b_y)$; $1/a$ 为归一化因子。

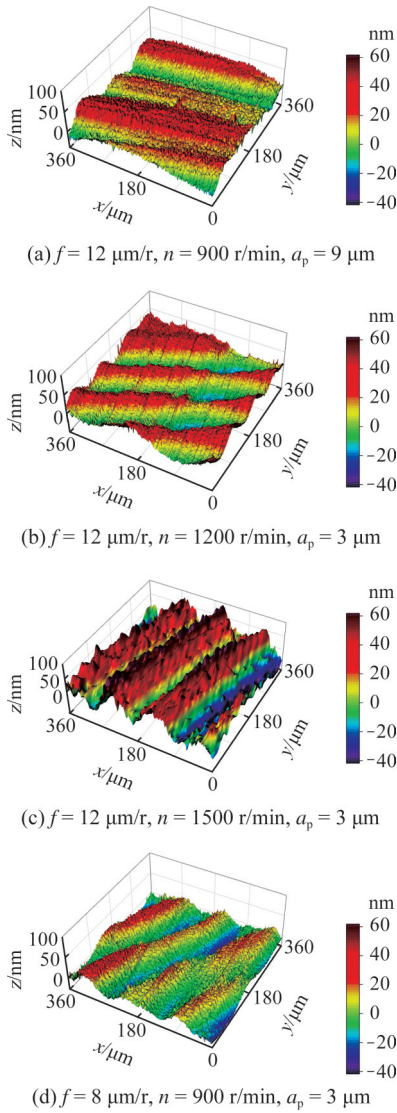


图2 验证集的已加工表面三维形貌

Fig.2 3D topography of the machined surface

二维功率谱函数的表达式为

$$F_{\text{PSD}}(f_x, f_y) = \frac{|Z(f_x, f_y)|^2}{L_x L_y} \quad (2)$$

式中: $Z(f_x, f_y)$ 为 $z(x, y)$ 的傅里叶变换; f_x, f_y 分别为空间实际频率特征 X, Y 方向上的分量; L_x, L_y 分别为 X, Y 方向上的测量长度。

1.3 深度学习算法

表面形貌数据中波长和幅值的复杂性以及多尺度特征使得传统的分析方法难以有效地建立与切削参数之间的关系。为了解决这一问题,引入深度学习技术,以切削参数为输入变量预测已加工表面的波长和幅值,最终实现已加工表面的三维形貌的精准预测。

1) 双向长短期神经网络(BiLSTM)模型。BiLSTM通过同时对输入序列 x_t 进行前向和后向编码,使生成的隐藏状态 h_t 能够包含更加全面的序列特征。BiLSTM的表达式为

$$h_t = \text{BiLSTM}(x_t) \quad (3)$$

式中:下标 t 表示 t 时刻; BiLSTM 表示双向长短期记忆网络,包含两个方向的长短期记忆单元。

2) 门循环单元(GRU)模型。GRU简化了门的数量,只有两个门,分别是重置门(Reset Gate)和更新门(Update Gate),通过这两个门,GRU能够控制哪些信息需要遗忘,哪些信息需要保留:

$$z_t = \sigma(W_z \cdot [h_{t-1}, x_t]) \quad (4)$$

$$r_t = \sigma(W_r \cdot [h_{t-1}, x_t]) \quad (5)$$

式中: z_t 为更新门的输出; r_t 为重置门的输出; W_z, W_r 为权重矩阵; h_{t-1} 为上一个时刻的隐藏状态; x_t 为当前的输入; σ 为 sigmoid 函数。

3) 随机森林网络(RF)模型。RF是一种基于Bagging(Bootstrap Aggregating)的集成学习方法。它通过构建多个相对独立的决策树,并结合这些树的预测结果来降低模型的方差和提高泛化能力:

$$H(x) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T h_t(x) \quad (6)$$

其中,每棵树 t 对 x 的预测为 $h_t(x)$,最终的回归预测 $H(x)$ 为所有预测结果的平均值。

4) 卷积神经网络(CNN)模型。CNN的核心思想是通过卷积操作提取输入数据的局部特征。卷积操作通过滑动一个小矩阵(即卷积核)在输入数据上进行局部加权求和,逐层提取数据中的局部和全局特征。公式如下:

$$Y(i, j) = \sum_m \sum_n X(i+m, j+n) K(m, n) \quad (7)$$

式中: X 为输入数据; K 为卷积核; $Y(i, j)$ 为输出的特征图。

2 结果与讨论

2.1 预测结果分析

表2所示为4种不同算法模型所预测的不同频率特征表面的波长和幅值。选取4个验证集表面作为分析对象,并将训练结果与测试集进行比较,计算百分比误差。

4种模型预测提取的不同频率特征下表面波长误差如图3所示。从图3中可以看出,GRU模型在低频特征下对波长的预测结果最优,百分比误差均值为3.83%;BiLSTM模型在中频和高频特征下对波长的预测结果最优,百分比误差均值分别为2.14%和3.03%。对比4种模型的整体预测结果可以发现,RF模型和CNN模型的预测结果和分散性很差,在预测波长范围的整体误差均值分别为32.11%和19.21%。其原因考虑为,这两种模型在未加改进的情况下对本研究的样本容

表2 模型预测结果

Tab.2 Model prediction results

模型	组别	波长/ μm			幅值/nm		
		低频	中频	高频	低频	中频	高频
真实值	1	221.47	62.52	13.12	5.11	23.16	4.11
	2	217.35	91.44	18.72	7.84	16.58	5.04
	3	272.73	100.62	21.35	8.54	31.12	8.86
	4	208.09	94.75	15.12	6.69	14.97	3.67
BiLSTM	1	214.75	65.49	13.71	5.09	22.43	3.36
	2	231.48	93.85	17.98	7.58	15.07	5.15
	3	263.74	99.58	21.77	8.68	34.31	8.67
	4	213.27	94.91	14.86	6.35	15.25	3.86
GRU	1	231.63	75.26	15.06	4.86	21.75	2.56
	2	222.59	91.86	16.68	10.90	17.06	5.84
	3	271.01	103.35	21.76	8.33	27.59	8.50
	4	217.89	90.74	16.19	4.96	15.34	3.44
RF	1	274.08	52.19	20.82	6.46	12.09	5.16
	2	294.61	54.01	23.98	13.25	17.70	8.27
	3	260.16	50.22	18.62	5.04	43.72	3.65
	4	274.01	52.12	20.81	6.49	12.09	3.81
CNN	1	276.62	71.8	17.81	8.51	18.01	6.06
	2	272.95	76.37	18.36	12.49	19.08	6.11
	3	272.92	76.37	18.36	6.87	43.91	4.08
	4	274.73	73.14	17.85	8.56	17.45	3.27

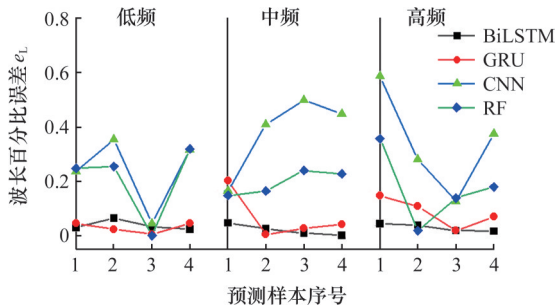


图3 表面波长预测结果误差

Fig.3 Error in surface wavelength prediction results

量和分析模型的适用性较差。对于表现较差的RF模型,通过调整树的数量并调整样本权重可以修正该模型以改变预测值;对于CNN模型,通过迁移学习和小批量训练可以改变其针对小样本数据的预测值。在实际计算过程中,对以上模型的相关参数已在小范围内进行了修正,但效果不显著。

4种模型预测提取的不同频率特征下波形幅值误差如图4所示。GRU模型在中频特征下对幅值的预测结果最优,百分比误差均值为5.68%。BiLSTM模型在低频和低频特征下对幅值的预测结果最优,百分比误差均值分别为4.62%和7.19%。RF模型和CNN模型的预测结果和分散性很差,预测幅值的整体百分比误差均值分别为34.01%和32.96%。在计算过程中,对于BiL-

STM模型,通过自定义损失函数降低对异常值的敏感度,提高预测效果。结果表明,BiLSTM模型预测结果的稳定性较好,误差的分散性很低,预测性能优于RF模型和CNN模型。对GRU模型在计算过程中修改了激活函数,提高其在不同频率波长和幅值情况下的整体预测准确性。GRU模型在中频幅值预测中表现良好,在低频和高频幅值预测中表现出不稳定,误差波动较大。训练集的样本存在的测量误差,特别是采样过程中的高频噪声,会使模型学习到错误的映射关系,导致在高频幅值的预测上模型输出不准确的预测值,与原始数据出现较大的误差。

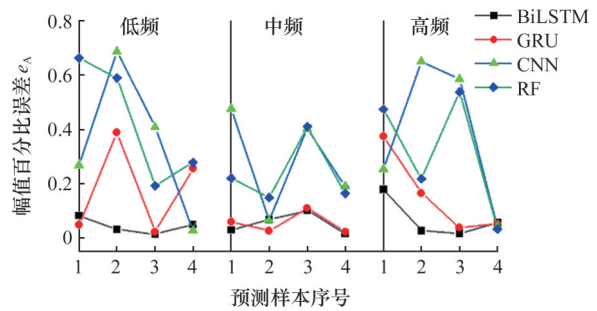


图4 表面幅值预测结果误差

Fig.4 Error in surface amplitude prediction results

2.2 二维轮廓预测结果分析

选择BiLSTM模型预测中频和低频波长、低频和高频幅值,GRU模型预测低频波长和中频幅值,在预测结果的基础上进行二维轮廓绘制。重构二维轮廓时,考虑到原始轮廓的扫描位置对频率特征的相位影响,对预测结果进行相位调整的计算。选择对照实验的低频、中频、高频和整体的二维轮廓如图5所示。

对比不同频率特征下的分析结果发现,低频和中频特征下的预测二维轮廓与相应频率特征下的真实二维轮廓波长和幅值相符,整体相似度较高。但同时注意到,二维功率谱密度所提取的不同频率特征表面存在其他频率特征,这是造成表面预测误差的主要原因,如图5b中的中频波形中含有高频信息。预测高频二维轮廓与真实高频二维轮廓的一致性较差,分析原因为机床产生的高频振动更具随机性,因此高频轮廓具有较多的随机波形,且幅值有剧烈变化,导致PSD方法和CWT方法在高频特征下无法较全面获取表面波长和幅值信息。预测二维整体轮廓与真实二维整体轮廓的波长和幅值相符,同时在表面形貌波形的空间变化上也体现出较好的一致性。

2.3 三维形貌预测结果分析

根据高中低频信息,结合不同频率波长和幅

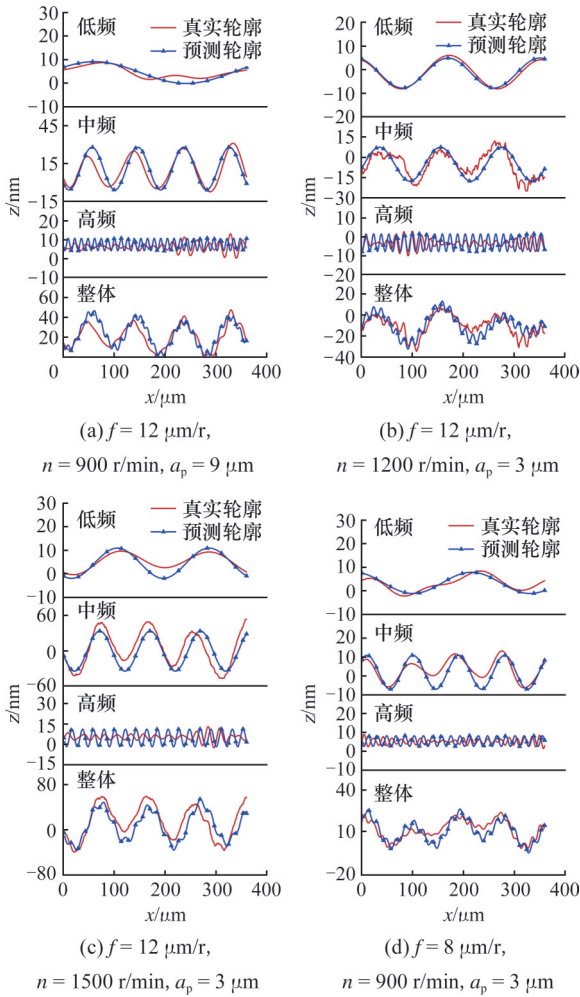


图5 二维轮廓预测结果

Fig.5 2D contour prediction results

值的相位变化,由正弦函数生成高中低频特征的三维表面。其中因材料属性、环境振动及各种复杂振动信号对高频波形有较大影响,因此高频特征的三维表面添加了正交的两个方向的波形。将计算得到的高中低频的三维表面做叠加,生成最终的KDP晶体三维已加工表面形貌的预测值,如图6所示。

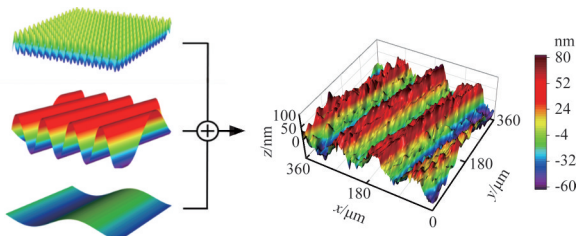


图6 三维形貌绘制

Fig.6 3D surface topography drawing

预测形貌与验证集原始形貌对比如图7所示。对比真实表面,预测表面具有相同的波长和频率特性,整体相似度较高。由于预测表面由三组不同频率特征的重构理想表面构成,因此它的每个波峰的幅值和频率也具有与真实表面相同的

变化规律。以三维表面的峰值间距均值为波长,峰值与谷值之差均值的一半为幅值,对比发现,第一组的波长误差最大,为13 μm,第三组的波长误差最小,为3 μm。第三组的幅值误差最大,为11 nm,第一组的幅值误差最小,为4 nm。造成预测表面的细节部分与原始表面误差的原因可分析为如下两点:一是提取的表面掺杂了其他频率特征的信息,使用简单正弦波模拟产生误差;二是由于只考虑了进给方向的表面波形,忽略了切削方向由于加工过程产生的振动,造成已加工表面沿切削方向表面起伏而导致误差。

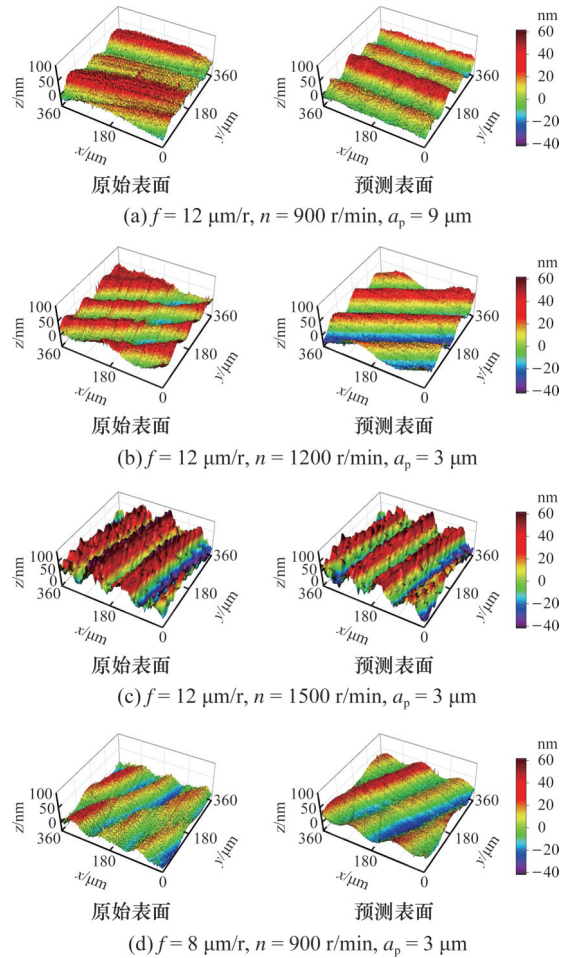


图7 三维形貌预测结果

Fig.7 3D topographies of prediction results

3 结论

1)连续小波和功率谱密度相结合能够全面地反映已加工表面形貌的频率特征的波长和幅值,并生成足够可靠的样本集。预测结果与验证集在二维轮廓和三维形貌上均具有较好的一致性。

2)在中频和低频波长、低频和高频幅值的预测中,BiLSTM模型的预测结果最优,中频和低频波长预测结果误差均值分别为2.14%和3.03%,

低频和高频幅值预测结果误差均值分别为4.62%和7.19%;在低频波长和中频幅值的预测中GRU网络的预测结果最优,预测结果误差均值分别为3.83%和5.68%。RF模型和CNN模型在本研究中的预测结果较差,这两种网络在不加优化的情况下适用性较差。

3)提取的高频特征表面与高频特征预测结果吻合较差。其原因为高频表面轮廓存在较多随机波形和测量高频噪声,使功率谱密度和小波方法所获得的高频特征的表面频率信息不全面。

4)本研究所使用的方法和模型可以比较方便地建立起加工工艺参数对已加工二维轮廓和三维表面形貌的影响规律,并同时适用于任意材料三维已加工表面形貌的预测。

参考文献:

- [1] XIA C, PAN Z, POLDEN J, et al. Modelling and Prediction of Surface Roughness in Wire Arc Additive Manufacturing Using Machine Learning [J]. *Journal of Intelligent Manufacturing*, 2022, 33(5): 1467-1482.
- [2] ZHANG H, PRASAD VALLABH C K, ZHAO X. Machine Learning Enhanced High Dynamic Range Fringe Projection Profilometry for In-situ Layer-wise Surface Topography Measurement during LPBF Additive Manufacturing[J]. *Precision Engineering*, 2023;84:1-14.
- [3] NASIR V, SASSANI F. A Review on Deep Learning in Machining and Tool Monitoring: Methods, Opportunities, and Challenges[J]. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2021, 115(9/10):2683-2709.
- [4] LEI H, CHENG J, YANG D, et al. Effect of Pre-existing Micro-defects on Cutting Force and Machined Surface Quality Involved in the Ball-end Milling Repairing of Flawed KDP Crystal Surfaces[J]. *Materials (Basel)*, 2022,15(21):7407.
- [5] PANG Q, XIONG J. Prediction Model of Three-dimensional Machined Potassium Dihydrogen Phosphate Surfaces Based on a Dynamic Response Machining System[J]. *Materials*, 2022, 15(24):9068.
- [6] LIU Q, CHENG J, LIAO Z, et al. Fractal Analysis on Machined Surface Morphologies of Soft-brittle KDP Crystals Processed by Micro Ball-end Milling [J]. *Materials*, 2023, 16(5):1782.
- [7] CHEN D, LI S, FAN J. Effect of KDP-crystal Material Properties on Surface Morphology in Ultra-precision Fly Cutting[J]. *Micromachines*, 2020, 11(9):802.
- [8] GIUSTI A, DOTTA M, MARADIA U, et al. Image-based Measurement of Material Roughness Using Machine Learning Techniques [J]. *Procedia CIRP*, 2020, 95:377-382.
- [9] YUHANG P, PING Z, YING Y, et al. New Insights into the Methods for Predicting Ground Surface Roughness in the Age of Digitalisation[J]. *Precision Engineering*, 2020, 67:393-418.
- [10] MISHRA A, JATTI V S. A Cutting-edge Framework for Surface Roughness Prediction Using Multi-verse Optimization-driven Machine Learning Algorithms[J]. *International Journal on Interactive Design and Manufacturing (IJIDeM)*, 2024, 18(7): 5243-5260.
- [11] ZHANG Y, XU X. Machine Learning Surface Roughnesses in Turning Processes of Brass Metals [J]. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2022. 121(3/4):2437-2444.
- [12] ZENG S, PI D. Milling Surface Roughness Prediction Based on Physics-informed Machine Learning [J]. *Sensors*, 2023, 23(10):4969.
- [13] ZHANG W. Surface Roughness Prediction with Machine Learning [J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, 1856(1):012040.
- [14] SANGWAN K S, SAXENA S, KANT G. Optimization of Machining Parameters to Minimize Surface Roughness Using Integrated ANN-GA Approach [J]. *Procedia CIRP*, 2015, 29:305-310.
- [15] NG C K, CHEN C, YANG Y, et al. Femtosecond Laser Micro-machining of Three-dimensional Surface Profiles on Flat Single Crystal Sapphire[J]. *Optics & Laser Technology*, 2024, 170:110205.
- [16] CUI Z P, LI G, LIU H Z, et al. Tool Anisotropic Wear Prediction and Its Influence on Surface Topography in Diamond Turning of Oxygen-free Copper [J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2023, 318:118042.
- [17] LIU T, ZHANG P, SU Y, et al. Fractal Analysis on the Surface Topography of Monocrystalline Silicon Wafers Sawn by Diamond Wire [J]. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2024, 180: 108588.
- [18] PANG Q, SHU Z, XU Y. Extraction and Reconstruction of Arbitrary 3D Frequency Features from the Potassium Dihydrogen Phosphate Surfaces Machined by Different Cutting Parameters [J]. *Materials*, 2022, 15(21):7759.

(下转第 2342 页)