

基于机器学习的电喷印精度预测方法研究

杨静文, 陈小勇, 张军华

(桂林电子科技大学 机电工程学院, 广西 桂林 541004)

摘要: **目的** 节省电流体喷射打印精度预测的时间和解决电流体工艺参数的选择问题, 达到提高电流体打印的质量和效率的目的。**方法** 为了对电流体喷射打印精度进行预测, 提出有限元模型与机器学习相结合的方法。基于线性回归、支持向量回归和神经网络等机器学习算法建立 4 种参数与射流直径的关系模型。**结果** 算法结果表明: 支持向量回归和神经网络预测模型的决定系数 R^2 能达到 0.9 以上, 表示模型可信度高; 支持向量回归和神经网络预测模型指标都比线性回归预测模型的小。**结论** 机器学习算法可对电喷印打印精度进行有效预测, 预测效率提高了十几倍, 节省了精度预测的时间。

关键词: 机器学习; 电流体微纳打印; 射流精度; 预测模型

中图分类号: TS853⁺.5 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3563(2022)13-0203-06

DOI: 10.19554/j.cnki.1001-3563.2022.13.026

Machine Learning Based E-jet Printing Accuracy Prediction Method

YANG Jing-wen, CHEN Xiao-yong, ZHANG Jun-hua

(College of Mechanical & Electrical Engineering, Gulin University of Electronic Technology,
Guangxi Guilin 541004, China)

ABSTRACT: The work aims to save time in predicting the accuracy of E-jet printing, solve the problems in selection of electrofluidic process parameters, and improve the design quality and efficiency of electrofluidic printing. A combination of finite element models and machine learning was proposed to predict the accuracy of E-jet printing. Based on machine learning algorithms such as linear regression, support vector regression and neural networks, a model on relationship between four parameters and jet diameter was established. The algorithm results showed that the determination coefficient R^2 of the support vector regression and neural network prediction models could reach above 0.9, indicating that the models were highly credible; RMSE and MAE, which were indicators of model error, were both smaller than those of the linear regression prediction models. Machine learning algorithms enable effective prediction of E-jet printing accuracy, increasing prediction efficiency by more than a factor of ten and saving time on accuracy prediction.

KEY WORDS: machine learning; electrofluidic micro-nano printing; jet accuracy; prediction model

电流体喷射打印技术 (E-Jet Printing) 是一种基于电流体动力学的打印制造技术, 其利用电场力和机械力影响流体, 以“拉”的方式从液锥 (泰勒锥) 顶端向下形成精细射流和微滴, 从而实现材料的高分辨率

打印制造^[1]。电流体喷墨打印制造技术的优点: 摒弃了传统的增材制造加工工艺, 利用流体形成的精细射流, 在衬底上直接打印出图案化的高分辨率的微纳结构; 电流体打印材料广泛, 应用领域较多, 如可穿戴

收稿日期: 2021-08-20

基金项目: 广西自然科学基金 (22GXNSFAA035616); 广西制造系统和先进制造技术重点实验室基金 (2006540007Z)

作者简介: 杨静文 (1997—), 女, 桂林电子科技大学硕士生, 主攻基于电流体动力学的柔性电子 3D 打印技术。

通信作者: 陈小勇 (1984—), 男, 硕士, 高级实验师, 主要研究方向为基于电流体动力学的柔性电子 3D 打印、微电子互连技术。

设备^[2]、柔性电子设备、材料成形、光学器件^[3]等，在这些领域中都显示出很大的应用潜力。

电喷印成形机理比较复杂，而且影响因素很多，主要包括：打印材料性能（质量分数、密度、电导率、表面张力等），工艺参数（入口流速、电压等），结构参数（喷嘴内径、收集板高度等）。为了对电流体射流稳定性和精度进行预测，一些学者也展开了研究。Jayasinghe 等^[4]首先报道了陶瓷悬浮液的电射流打印技术，之后使用浓缩的悬浮液打印了宽度为 70 μm 的图案。高翔宇等^[5]通过调整打印工艺参数来影响锥射流的形状和尺寸，揭示了打印尺寸与锥长和射流长度的关系及规律。Jeong 等^[6]用纳米颗粒和石墨烯打印出源电极、漏电极和沟道并制备了薄膜晶体管。Parke 等^[7]使用细小的毛细管喷针打印了直径为 490 nm 的点阵列。

机器学习算法就是从数据中自动分析获得规律，因此该研究基于机器学习算法和有限元相结合建立了加工参数与电流体射流精度的预测方法^[8]。调节电流体喷射打印技术的过程特性（外加电压、溶液流速）和结构特性（喷嘴直径、收集板高度）4种参数，得到大量的模拟试验作为样本。利用机器学习算法对电喷印打印精度进行预测，以此提高喷射打印设计效率。

1 电流体射流理论分析与模型

电喷印的基本原理见图 1。通过在喷嘴和衬底之间加高电压（几百到几千伏），相同极性的电荷就会聚集到喷嘴尖端，当尖端电场力超过液体的表面张力时，液体会从半球形弯月牙面变成锥形（泰勒锥）^[9]。随着电场强度的增强，泰勒锥的顶端喷出一个小射流或液滴，一般可达到几十 nm 到 1 μm，最终实现高分辨率打印。电喷印喷嘴结构见图 2。其中高电位电压范围为 1 200 ~ 2 500 V，喷嘴内径 d 为 0.05 ~ 0.2 mm，喷嘴距基板高度 h 为 0.4 ~ 1 mm，入口流速为 0.05 ~ 0.2 m/s，以上数值是前期仿真探索后得到的能够使电流体形成稳定锥射流的参数范围。

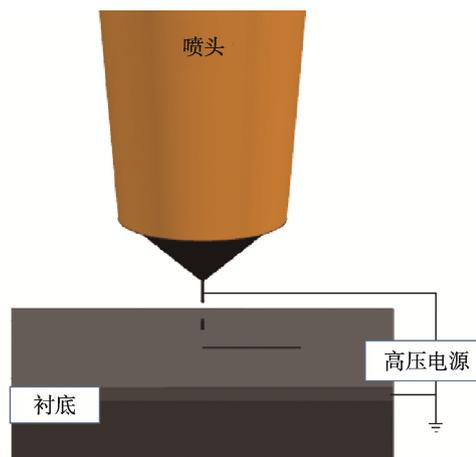


图 1 EHD 打印喷射技术原理
Fig.1 Principle diagram of EHD printing jet technology

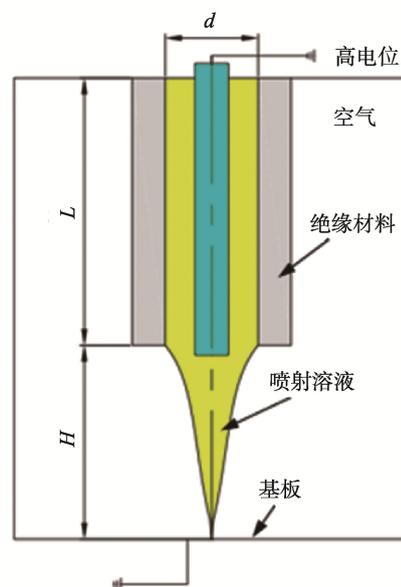


图 2 电喷印喷嘴结构
Fig.2 Structure of E-jet printing nozzle

根据以上分析，文中使用 COMSOL 有限元多物理场耦合分析软件建立电流体射流状态数值仿真模型。施加不同电压时得到的射流成型状态见图 3。电流体射流成形过程属于多物理场耦合问题。

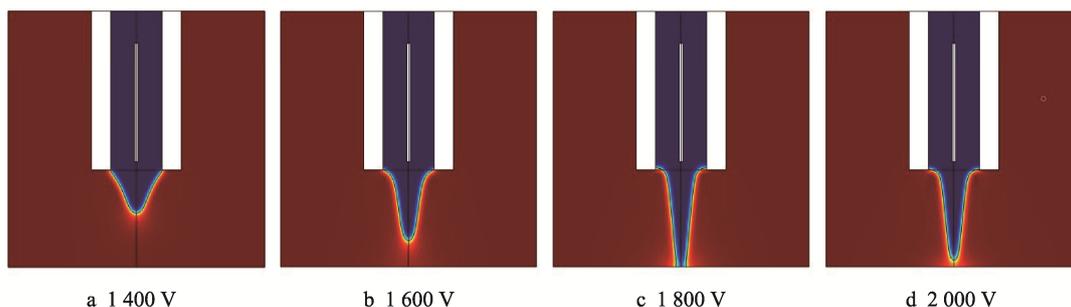


图 3 不同电压下的射流成型状态
Fig.3 Injection molding state under different voltage

2 机器学习算法

文中利用线性回归、支持向量回归和神经网络等机器学习算法建立 4 种参数与射流直径之间的关系。给定由 4 个属性描述的示例 $\bar{x} = (x_1; x_2; x_3; x_4)$, 其中 x_i 是 \bar{x} 在第 i 个属性上的取值, 因变量是射流直径, 记为 \bar{y} 。下面将具体介绍所使用的机器学习算法^[10]。

2.1 线性回归算法

线性模型形式简单, 容易建模, 支持向量机和神经网络等非线性模型基本上都是通过在线性模型上引入层级结构或高维映射而得到的, 线性模型的表达式见式 (1)。

$$f(x) = w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + w_4x_4 + b = w^T x + b \quad (1)$$

式中: $\bar{w} = (w_1; w_2; w_3; w_4)$ 为各项特征的权重系数; b 为截距项。均方误差是回归问题最常用的性能指标, 应使均方误差最小化, 即:

$$\arg \min \sum_{i=1}^4 [f(x_i) - y_i]^2 \quad (2)$$

2.2 支持向量回归算法

支持向量用于回归任务得到支持向量回归算法 (Support Vector Regression, SVR), 支持向量回归算法是给定训练样本 D , 使得 $f(x)$ 与 y 尽可能接近, 引入松弛变量 ξ 后的 SVR 算法为:

$$\begin{aligned} \min_{w, b} & \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^4 (\xi_i + \hat{\xi}_i) \\ \text{s.t.} & \begin{cases} f(x_i) - y_i \leq \varepsilon + \xi_i \\ y_i - f(x_i) \leq \varepsilon + \hat{\xi}_i \quad i = 1, 2, 3, 4 \\ \xi_i \geq 0, \hat{\xi}_i \geq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (3)$$

将样本从原始空间映射到一个更高维的特征空间, 即引入核函数 $k(x_i, x_j)$ 后, 将线性回归拓展到非线性回归。得到核化后的 SVR 模型为:

$$f(x) = \sum_{i=1}^4 (\hat{\alpha}_i - \alpha_i) k(x, x_i) + b \quad (4)$$

式中: $k(x_i, x_j) = \phi(x_i)^T \phi(x_j)$ 为核函数。

在不知道特征映射形式的情况下, 支持向量机模型预测的一个关键因素是核函数的选用。支持向量机常用的核函数有: 多项式核、高斯核 (RBF 核) 和 Sigmoid 核等。

2.3 神经网络算法

神经网络是广泛的并行互连网络, 由具有适应性的神经元组成^[11]。神经网络算法包括多层感知机 (Multilayer Perceptron, MLP)、卷积神经网络、BP

算法等。

多层感知器是一个全连接神经网络, 由输入层、隐藏层 (1 个或多个) 和输出层组成。隐层的数量通常由具体问题来确定^[12], MLP 使用激活函数来生成神经元的输出。常用的激活函数有 Sigmoid 函数、Tanh 函数和 ReLU 函数。3 种函数的表达式见 (5) — (7)。

$$\text{Sigmoid}(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (5)$$

$$\tanh x = \frac{\sinh x}{\cosh x} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (6)$$

$$\text{ReLU}(x) = \begin{cases} x & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases} \quad (7)$$

3 电喷印预测模型和性能评估

文中应用 python 语言的第三方模块 scikit-learn^[13] 库来编写和运行算法。scikit-learn 以 numpy、scipy、matplotlib 等数据包为基础, 能实现机器学习中的数据预处理、模型选择、分类、回归、聚类等功能。使用机器学习建立预测模型的流程见图 4。

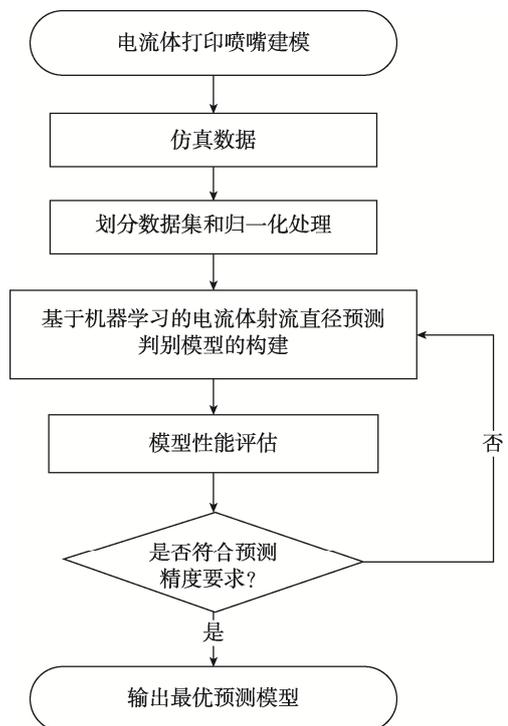


图 4 机器学习方法建立预测模型的基本流程
Fig.4 Basic process of machine learning methods for building prediction models

3.1 建立数据集

进行机器学习要确定输入变量和输出变量, 并建

立包含一定数量数据的数据集。电流体喷射打印射流直径的统计结果图 5。

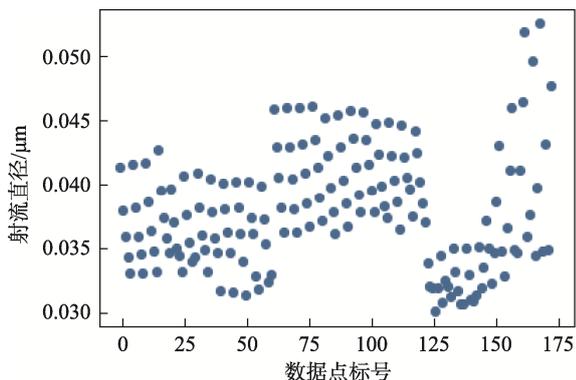


图 5 射流直径数据集的分布
Fig.5 Distribution of jet diameter data set

3.2 数据预处理

3.2.1 划分数据集

通常把数据按 8:2 的比例划分为训练集和测试集。训练集用于训练模型,测试集用来评估模型的性能^[14]。

由于样本数不够多,所以采用 K 折交叉验证的方法^[15],其具体过程:将全体训练数据等分为 K 份,每次取 1 份数据用于模型评估,余下 $(K-1)$ 份数据用来训练模型,这个过程重复 K 次。一般来说, K 值越大,模型的预测的精度就越高,但同时计算量也会增加。出于预测精度和效率的考虑,这里将 K 的值确定为 5。

3.2.2 特征缩放

不同特征数据之间的量级不同,例如:电极电压量级为 10^3 ,入口流量量级为 10^{-2} 。如果数据不按比例缩放,转化成无量纲化的数据,电极两端电压这个特征就会对模型结果产生决定性的影响,影响模型的精度。因此,采用特征缩放方法对原始数据进行无量纲化处理,以保证计算精度和预测的准确性。

文中所用的特征缩放方法为“线性函数归一化”,表达式见式(8)。

$$X_{\text{norm}} = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \quad (8)$$

式中: X_{norm} 为归一化后的数值; X 为原始数据; X_{\max} 、 X_{\min} 分别为范围内的最大值和最小值。

3.2.3 模型超参数调优

交叉验证的目的就是寻找最优超参数 λ^* 。首先通过超参数调优遍历不同的超参数值,选择性能最好的超参数 λ^* ;然后在给定的最优超参数 λ^* 的情况下,用全体训练数据再次训练模型,得到模型参数 w ;最后得到最终模型 $f(X;w,\lambda^*)$ 。文中选用网格搜索用于

选取模型的最优超参数。将平均得分最高的超参数组合返回模型中进行学习。

3.3 模型预测

3.3.1 线性回归

线性回归算法使用 L1 正则化的 LASSO 线性回归来建立预测模型。正则化的作用是避免模型产生过拟合,这里将正则参数的搜索范围设置为 0.01 ~ 100,交叉验证得到最佳正则参数为 0.01。线性回归模型预测值与实际值的比较结果见图 6。

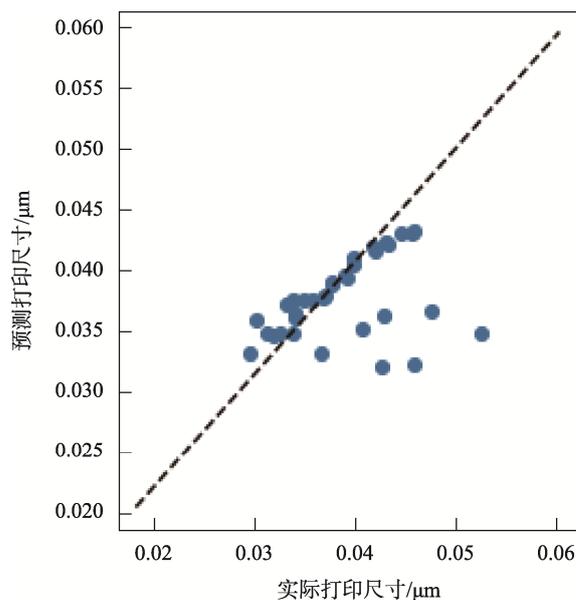


图 6 线性回归模型预测值与实际值的比较
Fig.6 Comparison of predicted and actual values of linear regression model

由图 6 可知,线性回归算法预测准确率不高,特别是在打印尺寸变大的情况下。造成这种情况的原因是假设该问题是线性关系,但是该假设不足以预测打印精度,因此后面用到非线性模型来预测。

3.3.2 支持向量回归

高斯核有较好的学习能力,文中采用高斯核作为支持向量回归模型的核函数,见式(9)。

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2\sigma^2}\right) \quad (9)$$

式中: $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2$ 为 2 个特征矢量之间的平方欧氏距离; σ 为核函数的带宽。通常用参数 γ ($\gamma=1/2\sigma^2$) 来简化公式。使用超参数调优后的正则化参数为 1 000, γ 为 0.1。

支持向量回归输出变量在测试集上预测值与真值的对比见图 7。可以看出,文中算法在训练集和测试集上的预测效果都很好,这是因为通过核方法将线性模型转化为核化的非线性模型后,非线性核有时能显著提高模型的性能。

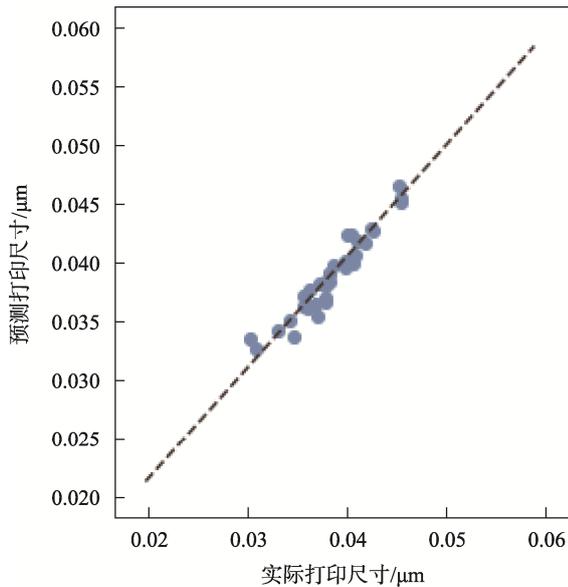


图 7 SVR 模型预测值与实际值的比较
Fig.7 Comparison of predicted and actual values of SVR model

3.3.3 神经网络

多层感知机需提前定义隐层的层数、单个隐层神经元个数和激活函数的形式等参数,学习器中需要设定学习率、优化算法、随机种子、权重和阈值等参数^[16]。通过超参数调优获得最佳的一组超参数:优化算法选择拟牛顿法,正则化为 L2 正则,正则系数为 1×10^{-5} ,隐层层数为 2,各层的神经元数量为 5 和 2。tanh 函数在隐藏层的表现要好于 sigmoid 函数,因此激活函数选择 tanh 函数。

该神经网络模型的预测结果见图 8,可以看出数据点的误差较小,模型的可信度较好,训练得到的模型兼顾训练集和预测集上的性能,基本达到需要的精度。

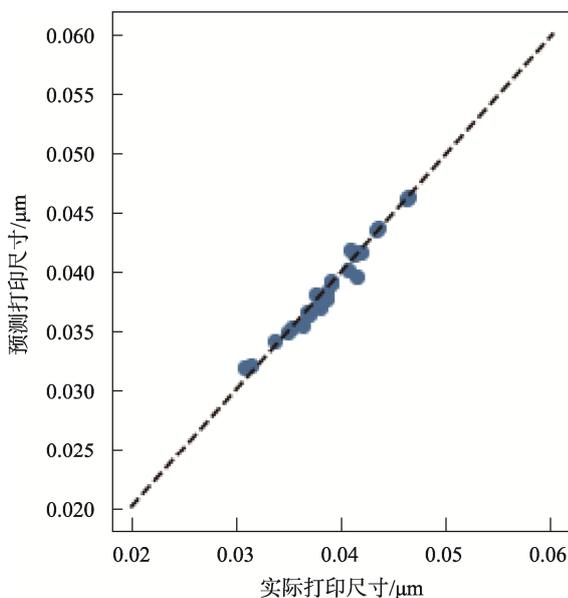


图 8 多层感知机模型预测值与实际值的比较
Fig.8 Comparison of predicted and actual values of MLP model

3.4 模型性能的评估

对学习器的泛化性能进行评估,这里选择决定系数 R^2 、开方均方误差 RMSE、平均绝对误差 MAE 等 3 个回归模型性能评价指标对预测性能进行评价,计算式见式 (10) — (12)。

$$R^2(y, \hat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (10)$$

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$$

$$RMSE(y, \hat{y}) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (11)$$

$$MAE(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (12)$$

式中: y_i 和 \hat{y}_i 分别为输出的预测值和真实值。3 种机器学习算法在测试集和训练集上的性能评价指标见表 1。 R^2 分数最大值为 1,越接近 1 表示模型预测性能好,可信度越高。支持向量回归和神经网络算法在数据集上得分能达到 0.9 以上。线性回归算法得分只有 0.7 左右,表明模型可信度低。RMSE 值和 MAE 值是反映模型误差的指标。支持向量回归和神经网络算法的误差值低,说明预测值与真实值越接近,该算法具有良好的模型拟合性能。

综上,所有的评价指标都表明支持向量回归、神经网络算法都能达到很高的预测精度,而线性回归算法预测可信度较低。

表 1 3 种机器学习算法模型在不同的数据集上的性能比较

Tab.1 Performance comparison of three machine learning algorithm models on different datasets

算法	数据集	R^2 分数	RMSE 值	MAE 值
线性回归	训练集	0.694 8	0.002 9	0.001 7
	测试集	0.693 7	0.005 4	0.003 2
支持向量回归	训练集	0.995 9	0.000 4	0.000 4
	测试集	0.957 6	0.001 0	0.000 8
神经网络	训练集	0.994 0	0.000 5	0.000 4
	测试集	0.986 1	0.000 6	0.000 5

4 结语

文中基于机器学习理论,应用线性回归、支持向量回归和神经网络 3 种机器学习算法构建了 3 种机器学习模型,并利用所构建的算法模型实现电喷印精度的预测。分析了 4 种参数与射流直径的关系。结果表

明,利用机器学习建立预测模型进行能够高效地预测射流直径,相比传统基于CFD模拟计算的方法,机器学习的预测效率提高了十几倍,而且预测精度具有较高的精度和可信度。

1)通过支持向量机可以准确预测电喷印精度,利用交叉验证的方法能够有效提高预测的准确性;激活函数为 \tanh 的神经网络,可以准确预测电流体喷射打印精度,而线性回归算法只能预测线性模型,拟合效果差。

2)将电流体喷射打印技术研究从传统的解析计算和数值模拟的方法转为利用数据驱动的建模方法,可提高电流体喷射打印设计效率,实现柔性电子、生物医药、光学器件等的精确打印。

3)机器学习预测模型的建立可为电流体喷射打印设计和优化提供数据支持和指导作用。后续可以将机器学习建立的电流体射流精度模型与遗传算法、灰狼优化算法等智能算法相结合,从而找到多个约束条件下的喷射打印最优解。

参考文献:

- [1] JANG J, HYUN B G, JI S, et al. Rapid Production of Large-Area, Transparent and Stretchable Electrodes Using Metal Nanofibers as Wirelessly Operated Wearable Heaters[J]. *NPG Asia Materials*, 2017, 9(9): 1-8.
- [2] KIM S Y, KIM K, HWANG Y H, et al. High-Resolution Electrohydrodynamic Inkjet Printing of Stretchable Metal Oxide Semiconductor Transistors with High Performance[J]. *Nanoscale*, 2016, 8(39): 17113-17121.
- [3] IM H G, AN B W, JIN J, et al. A High-Performance, Flexible and Robust Metal Nanotrough-Embedded Transparent Conducting Film for Wearable Touch Screen Panels[J]. *Nanoscale*, 2016, 8(7): 3916-3922.
- [4] JAYASINGHE S N, EDIRISINGHE M J, WILDE T. A Novel Ceramic Printing Technique Based on Electrostatic Atomization of a Suspension[J]. *Materials Research Innovations*, 2002, 6(3): 92-95.
- [5] 高翔宇, 杨伟东, 王媛媛, 等. 微滴喷射工艺参数与液滴形态关系的数值模拟[J]. *机械科学与技术*, 2021, 40(3): 475-480.
GAO Xiang-yu, YANG Wei-dong, WANG Yuan-yuan, et al. Numerically Simulating Relationship of Process Parameters between Droplet Ejection and Droplet Morphology[J]. *Mechanical Science and Technology for Aerospace Engineering*, 2021, 40(3): 475-480.
- [6] JEONG S, LEE S H, JO Y, et al. Air-Stable, Surface-Oxide Free Cu Nanoparticles for Highly Conductive Cu Ink and Their Application to Printed Graphene Transistors[J]. *Journal of Materials Chemistry C*, 2013, 1(15): 2704-2710.
- [7] JANG-UNG P, MATT H, JUN K S, et al. High-Resolution Electrohydrodynamic Jet Printing[J]. *Nature Materials*, 2007, 6(10): 782-789.
- [8] GE Y, LI X, LANG L, et al. Prediction of CNC Bending Quality of Tubes Based on Machine Learning[J]. *Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics*, 2016, 42(8): 1691-1697.
- [9] 钱江红, 杜致远, 杜召亮, 等. 柔性衬底的电流体喷射按需打印研究[J]. *机电工程技术*, 2020, 49(9): 40-41.
QIAN Jiang-hong, DU Zhi-yuan, DU Zhao-liang, et al. Research on Electrohydrodynamic Drop-on-Demand Printing of Flexible Substrate[J]. *Mechanical & Electrical Engineering Technology*, 2020, 49(9): 40-41.
- [10] 张冬梅, 闫蓓. 对话周志华教授: 关于人工智能和机器学习[J]. *科学通报*, 2017, 62(33): 3800-3801.
ZHANG Dong-mei, YAN Bei. Professor Zhou Zhihua: About Artificial Intelligence and Machine Learning[J]. *Chinese Science Bulletin*, 2017, 62(33): 3800-3801.
- [11] TEUVO K. An Introduction to Neural Computing[J]. *Neural Networks*, 1988, 1(1): 3-16.
- [12] KIM H, SUI C, CAI K et al., Fast and Precise High-Speed Channel Modeling and Optimization Technique Based on Machine Learning[J]. *Journal of Robotics & Machine Learning*, 2019, 60(6): 2049-2052.
- [13] ARLOT S, CELISSE A. A Survey of Cross-Validation Procedures for Model Selection[J]. *Statistics Surveys*, 2010, 4: 40-79.
- [14] WAN Xing. Influence of Feature Scaling on Convergence of Gradient Iterative Algorithm[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, 1213(3): 1-4.
- [15] REN Y. Optimizing Predictive Maintenance with Machine Learning for Reliability Improvement[J]. *ASCE-ASME Journal of Risk and Uncertainty in Engineering Systems*, 2021, 7(3): 2-5.
- [16] 亓欣波, 李长鹏, 李阳, 等. 基于机器学习的电子束选区熔化成形件密度预测[J]. *机械工程学报*, 2019, 55(15): 48-55.
QI Xin-bo, LI Chang-peng, LI Yang, et al. Machine Learning Algorithms on Density Prediction of Electron Beam Selective Melted Parts[J]. *Journal of Mechanical Engineering*, 2019, 55(15): 48-55.