arXiv:2602.06241v3 [cs.LG] 31 Mar 2026

一种用于激光加工熔池预测的快速且可泛化的傅里叶神经算子代理模型

Alix Benoit[1], Toni Ivas[1], Mateusz Papierz[2], Asel Sagingalieva[2],Alexey Melnikov[2], Elia Iseli[1*]

[1]先进材料加工实验室，瑞士联邦材料科学与技术研究所，Feuerwerkerstrasse，图恩，3603，BE，瑞士。[2]Terra Quantum AG，Kornhausstrasse，圣加仑，9000，SG，瑞士。

*通讯作者。电子邮箱：elia.iseli@empa.ch；

摘要

激光焊接的高保真模拟能够捕捉复杂的热流体现象，包括相变、自由表面变形和匙孔动力学，但其计算成本限制了大规模工艺探索和实时应用。在这项工作中，我们提出了激光加工傅里叶神经算子（LP-FNO），这是一种基于傅里叶神经算子（FNO）的代理模型，可从使用 FLOW-3D WELD®生成的多物理场仿真中学习各种激光加工过程的参数化求解算子。通过一种新颖的方法，在移动激光坐标系中重构瞬态问题并进行时间平均，系统由此形成适用于算子学习的准稳态设置，即使在小孔焊接状态下也适用。

所提出的 LP-FNO 采用无量纲归一化焓公式，将工艺参数映射为三维温度场和熔池边界，覆盖从传导 режим 到匙孔模式的广泛工艺窗口。该模型的温度预测误差约为**1%**，熔池分割的交并比超过**0.9**。我们证明，使用粗分辨率数据训练的 LP-FNO 模型可在更细的网格上进行评估，在网格收敛的传导模式下生成准确的超分辨率预测；而在匙孔模式下出现的差异，则反映了粗网格训练数据中未能解析的动态过程。

这些结果表明，LP-FNO 为激光焊接提供了一种高效的代理建模框架，只需数十毫秒即可预测全三维场和相界面，覆盖广泛的参数范围，速度比传统有限体积多物理场软件快至十万倍。

关键词：激光熔化、物理信息神经网络、傅里叶神经算子、多物理场仿真。

1 引言

焊接长期以来一直是众多工业领域中的基础制造工艺。在现有技术中，激光焊接尤为重要，因为它能够加工异种材料，提供高度局部化且可精确控制的热输入，以高速运行，并能在几何受限区域内实现非接触、易于自动化的加工。然而，激光焊接涉及强烈的多物理场效应，例如瞬态传热、熔池中的流体流动、相变和自由表面变形等。众多影响参数使得人们迫切需要快速、准确的数值模拟，以了解并优化这些工艺的质量。

传统上，人们采用有限体积法（FVM）和有限元法（FEM）等方法，这些方法能够提供准确的解，且已成为稳健并在工业中广泛应用的方法 [1–3]。它们能够生成温度场、熔池形状、凝固形态及其他特征，随后可通过实验进行验证。然而，这些方法可能极其缓慢且计算成本高昂，尤其是在使用细网格、熔池梯度较大、蒸气凹陷（匙孔）较深、焊道较长以及进行多道焊接时 [4]。对于工艺控制，或涉及大量参数变化的情况（如工艺优化和不确定性量化），这种计算成本尤其棘手。也存在一些简化模型，例如纯扩散模型，其运行速度较快，但通常需要牺牲物理精度，且仅适用于有限的条件。这些模型通常在纯热模型框架内采用简化方法，通过有效热导率近似熔池对流的复杂效应[5–7], 但仍面临上述模型的相同问题。因此，亟需快速代理模型，既能忠实再现激光焊接的物理过程，又能适用于范围广泛且不断变化的工艺参数。

随着机器学习（ML）的最新进展，研究人员已通过基于机器学习的代理模型 [8–10] 来弥补这一空白。一种方法是将底层物理规律融入神经网络的架构或损失函数中，从而构建物理信息神经网络（PINNs）。PINNs 已成功应用于一些焊接和增材制造（AM）问题。例如， [11] 概述了近期发表的部分增材制造相关

采用 PINNs 的研究工作，但目前仍主要局限于传导（无蒸气凹陷）领域。此外，标准 PINNs 的一大缺点是，它们通常针对单个偏微分方程实例进行训练，以近似其解，也就是说，参数、几何形状以及边界条件/初始条件均固定不变。因此，当偏微分方程参数、几何形状或边界条件发生变化时，通常必须重新训练网络（或至少进行大幅调整）。此外，PINNs 可能难以优化（例如平衡多个损失项、处理多尺度现象、动态/时变问题以及刚性残差），这限制了它们在复杂多物理场或大参数空间场景中的可扩展性 [12] [13]。

与其尝试用神经网络直接近似某个偏微分方程实例的解，不如近似偏微分方程族算子，该算子将定义偏微分方程族的输入函数（边界条件、材料参数、任意系数等）映射为相应的解场。这种模型称为神经算子（NO）。至关重要的是，神经算子基于许多不同的偏微分方程解场进行训练，因此无需重新训练即可推广到新的参数集或几何形状。目前已有多种神经算子架构，例如 DEEPONET、傅里叶神经算子（FNO）、图神经算子（GNO）和卷积神经算子（CNO） [8, 14–16]。神经算子的优势在于，训练完成后，它们能够在广泛的参数范围内近乎即时地给出完整场的、符合物理规律的预测。这类模型对于激光焊接等应用具有不可估量的价值，因为通过数字孪生（DT）进行实时过程控制，以及快速制定和优化工艺，都能从这一方法中显著受益，甚至只有借助这一方法才得以实现。

在这一方向上已经开展了一些研究。在 [17] 中，研究人员提出了一种神经网络，用于推断温度场、温度梯度和熔池形状，但仅限于二维切片。在 [18] 中，给出了一个基于傅里叶神经算子的激光粉末床熔融（L-PBF）过程控制数字孪生示例。然而，该底层模型未考虑流体动力学或表面变形。在 [19] 中，采用 DEEPONET 和物理信息神经网络模拟多道激光粉末床熔融过程，但仅考虑传导。最后，[20] 将傅里叶神经算子与 DEEPONET 相结合，用于对直接能量沉积（DED）过程中的焊道体积（沉积材料的体积）和熔池最高温度进行建模，但同样侧重于传导机制，这与预期的直接能量沉积研究范围一致。

在本研究中，我们提出了激光加工傅里叶神经算子（LP-FNO），这是一种基于傅里叶神经算子的模型，通过考虑热传递和流体动力学来预测激光加工中的熔池特性。训练数据由对 Ti-6Al-4V 单道激光扫描进行的高保真热流体仿真生成，涵盖了激光功率和扫描速度范围广泛的工艺窗口。数据集涵盖多种焊接工况，从传导模式到“稳定”的小孔焊接。为实现高效的算子学习，我们将问题重新表述于一个随激光移动的参考坐标系中，从而能够在准稳态设置下处理控制动力学。模型训练完成后，所提出的 LP-FNO 可直接将工艺参数映射为三维温度场和熔池几何形状，耗时不到一秒，比传统的等效有限体积法快至十万倍。据我们所知，这是首个涵盖传导和小孔焊接工况，并在

通过时间平均在准稳态算子学习框架中处理匙孔动力学。我们采用基于归一化焓概念的参数采样策略 [21], 该策略可提供一种具有良好泛化能力的映射，均匀覆盖不同的焊接工况。

2 方法论

2.1 物理模型与数据生成

本研究使用 Ti-6Al-4V 作为材料。不过，引入无量纲参数变化（见下文）是迈向模型泛化的第一步，使模型不局限于单一材料。

仿真软件。
构建代理傅里叶神经算子模型的第一步，是选择高保真模拟作为真实值来训练模型。我们使用商业软件 FLOW-3D WELD® 2025R1 [22]中实现的耦合多物理场框架，对激光熔化过程进行了模拟。原则上，实验测量也可用作真实值，但为避免实验带来的额外成本和复杂性，本研究完全依赖模拟数据。通过在纳维–斯托克斯方程中加入反冲压力源项来模拟蒸发，这种方法在以往研究中很常用 [23, 24]，因为与完全可压缩的多相流公式 [26], 相比，它能大幅降低计算成本 [25]，同时仍能以足够的精度预测熔池动力学。FLOW-3D WELD® 采用流体体积法（VoF）进行自由表面追踪，以求解纳维–斯托克斯方程，并纳入表面张力、反冲压力以及伴随相变的热传递；该软件已在工业和学术领域得到广泛验证[27–29]。在 VoF 公式中，每个计算单元都被赋予一个体积分数α（也称为固相分数或金属-气体界面），表示其中熔融金属所占的比例：金属相中的 $\alpha = 1$ 、气相中的 $\alpha = 0$ ，而界面处则取中间值；这一场变量作为重要输出，用于重构熔池几何形状。热力学与流体动力学通过温度相关的马兰戈尼对流和蒸发诱导的反冲压力耦合；对于随匙孔几何形状变化而产生的激光能量吸收变化，则采用光线追踪方法进行处理。热物理性质取自 FLOW-3D®数据库，其中表面张力设为 1.65 $\mathrm{kg/s^2}$ ，温度系数设为$-2.4 \times 10^{-4} \mathrm{kg/s^2/K}$ [30]。计算域定义为尺寸为 0.9 mm $\times$ 0.4mm$\times$ 0.3mm 的长方体（长、宽、高），并采用分辨率为 10 µm 的均匀笛卡尔网格进行离散。顶面采用 1 atm 的压力边界条件，其余各边界均设定温度为 300 K。激光扫描采用半径为 50 µm、沿长度方向移动的高斯激光源。模拟结果每隔 5 µs 的时间步写出一次。根据扫描速度设定总模拟时间，使激光恰好移动 0.6 mm。参考值变更和时间平均处理过程见第 2.3 节。

工艺参数变化。
原则上，任何工艺参数或材料参数都可以变化；但我们选择改变激光扫描速度 V_{scan} 和激光功率 P，其范围分别为 $V_{scan} \in [0.1, 1]$ m/s 和$P \in [40, 190]$ W，以涵盖不同的熔化模式：未熔合（LoF）、传导熔化和匙孔模式。

为了确定如何在这些范围内对点进行采样，我们首先引入归一化焓的概念 [21]。归一化焓 H^* 是一个描述匙孔形成阈值的无量纲数，定义见方程1，数值取自表1。对我们而言最重要的是 $H^* \propto \frac{P}{\sqrt{V_{scan}}}$。为了使匙孔模式和传导 რეჟიმ具有相近的表示，我们在 H^* 和 P上以等间距网格对数据进行采样，并推导相应的 V_{scan}，依据方程1。随后，我们选取验证样本和测试样本（用于评估超分辨率精度），使其覆盖全部 H^* 取值，以确保从未熔合到匙孔的所有模式均被考虑在内，如图1所示。可以看到一个传导 რეჟიმ仿真示例，见图8，以及一个匙孔模式示例，见图9。

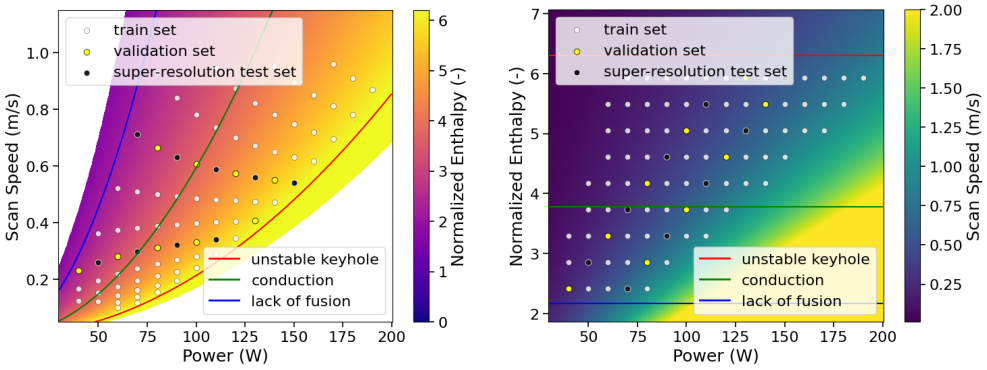
$$H^* = \frac{\eta P}{\rho \left(C_p \Delta T_m + L\right) \sqrt{\pi D \sigma^3 V_{\text{scan}}}} \tag{1}$$

符号	数值	描述
η	0.35	吸收率
ρ	4420 千克/米³	密度 (*)
C_p	750 J kg^{-1} K^{-1}	比热容 (**) at Tsolidus=1873K
ΔT_m	1573 K	熔化温升
D	8.1×10^{-6} m^2/s	热扩散率 (**)
σ	50 µm	光束半径 (1/e²)
L	3.45×10^5 J kg^{-1}	熔化潜热
P	40–190 W	激光功率范围
V_{scan}	0.1–1 米/秒	扫描速度范围

表 1 用于归一化焓评估的参数。（*）参数取值于 $T = 298$K。（**）参数取值于 Tsolidus=1873K

2.2 傅里叶神经算子

采用经典的傅里叶神经算子架构，以下章节将介绍如何使用该架构对激光熔化进行建模。LP-FNO 的概览图见 图 2。



(a) 按归一化焓着色的功率–扫描速度工艺图 H^*

(b) 按扫描速度着色的功率–焓工艺图 V_{scan}

图1 使用 FLOW-3D WELD 生成的高保真模拟数据的工艺空间覆盖范围。数据集涵盖激光功率 P 和扫描速度 $V_{\text{scan}} \in [0.1\,\text{m s}^{-1},\ 1。0\,\text{m s}^{-1}]$，并基于归一化焓 H^* 和功率均匀分布的网格构建。标记表示用于神经算子学习的训练集、验证集和超分辨率测试集

数学设定。

假设一类定义在有界区域 $D \subset \mathbb{R}^d$ 上的稳态（与时间无关）偏微分方程。该问题可写成如下算子形式：

$$\begin{cases} \mathcal{P}(u, a) = 0, & \text{in } D, \\ u = g, & \text{on } \partial D, \end{cases} \tag{2}$$

其中 $u \in \mathcal{U}$ 表示未知的解场，而 $a \in \mathcal{A}$ 表示一组输入参数，通常对应于空间变化系数、源项或偏微分方程的材料属性。在我们的情形中，u 是温度场T、体积分数 α和流体分数 $f_l(T)$ 的拼接结果（定义见第 2.3 节），变量参数场为 $a = (P, V_{scan})$，因此它在空间上为常数。边界条件 g 在上一节中已有说明。

算子 $\mathcal{P} : \mathcal{U} \times \mathcal{A} \to \mathcal{F}$ 表示定义该偏微分方程的微分算子，其中 $\mathcal{U}$、$\mathcal{A}$ 和 $\mathcal{F}$ 取为配备适当范数的巴拿赫空间。在标准适定性假设下，对于每个可容许的参数场 a，该偏微分方程都有唯一解。

解算子。

这种设定会产生一个解算子

$$\mathcal{G}^\dagger : \mathcal{A} \to \mathcal{U}, \quad a \mapsto u, \tag{3}$$

它将偏微分方程参数直接映射到相应的解。算子学习的目标是从数据中近似 $\mathcal{G}^\dagger$ ，而不是学习 a某个固定实例的解。

针对我们的情形。
在本工作中，控制方程为纳维–斯托克斯方程，以及在激光参考系中加入激光源项的热方程，连同体积分数方程 [25]。

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{U}) = 0, \tag{4}$$

其中 α 为体积分数， U 为速度场（在我们的情形中并未显式计算）。我们寻求这些方程的稳态解，作为准稳态假设的一部分。

采用傅里叶神经算子来学习解算子 $\mathcal{G}^\dagger$ 的近似；该近似具有分辨率不变性，并直接在算子层面定义，从而能够在域离散化的不同分辨率之间进行泛化。控制方程的确切描述并非必要，因为神经算子会在训练期间通过参数-解对隐式地学习它们。

离散算子学习问题。
在实践中，参数场 $a(\mathbf{x})$和相应的解场 $u(\mathbf{x})$在网格上观测（傅里叶神经算子可扩展至非笛卡尔网格 [31], ，但此处我们仍采用经典表述）。令 D_h 表示 D 的离散化，包含 N个点（例如，三维结构化网格的 $N = n_x n_y n_z$ ），则训练数据集由以下数据对给出：

$$\left\{ \left(a^{(j)}|_{D_h},\, u^{(j)}|_{D_h} \right) \right\}_{j=1}^{N}, \tag{5}$$

其中每一对对应一个准稳态模拟实例。学习任务是构建一个参数化算子 $\mathcal{G}_\theta$ ，使得 $\mathcal{G}_\theta(a) \approx \mathcal{G}^\dagger(a)$，并确保该近似在不同离散化$D_{h'}$ 上评估时仍然有意义（即跨分辨率泛化）。

架构概述。
傅里叶神经算子通过将作用于潜在场的 L 算子层进行组合来近似 $\mathcal{G}^\dagger$ 。其构造通常表示为

$$\mathcal{G}_\theta = \mathcal{Q} \circ \mathcal{K}^{(L)} \circ \cdots \circ \mathcal{K}^{(1)} \circ \mathcal{P}, \tag{6}$$

其中， $\mathcal{P}$ 表示将输入“提升”到更高维通道空间的映射， $\mathcal{K}^{(\ell)}$表示傅里叶层， $\mathcal{Q}$ 表示投影回感兴趣的物理量的输出投影。随后通过以下方式形成初始潜在表示：

$$v_0(\mathbf{x}) = \mathcal{P}(a(\mathbf{x}), \mathbf{x}), \tag{7}$$

其中 $\mathbf{x} = (x,\ y,\ z)$ 表示空间坐标。

作为全局卷积的傅里叶层。
每个傅里叶层都旨在高效地混合整个计算域内的信息，这对于存在长程耦合的问题至关重要。第 ℓ 层的更新在物理空间中按点表示为

$$v_{\ell+1}(\mathbf{x}) = \sigma\big(\big(\mathcal{W}_\ell v_\ell\big)(\mathbf{x}) + \big(\mathcal{F}^{-1} \circ \mathcal{R}_\ell \circ \mathcal{F}\big)[v_\ell]\,(\mathbf{x})\big)\,, \tag{8}$$

其中 σ 表示非线性函数（在我们的情形下为 GELU [32] ）， $\mathcal{W}_\ell$ 是一个可学习的逐点线性映射，而第二项则通过傅里叶变换实现可学习的积分算子 $\mathcal{F}$。第二项对应于一个具有平移不变核的全局卷积；在傅里叶空间中，这种卷积可转化为依赖模态的算子乘法。

模态截断与可学习谱权重。
对于离散化场 v_ℓ，傅里叶变换会得到由波矢 $\boldsymbol{k}$索引的系数 $\widehat{v}_\ell(\boldsymbol{k})$。在实践中，傅里叶空间算子 $\mathcal{R}_\ell$ 通过块对角算子实现，其中每个保留的傅里叶模态 $\boldsymbol{k}$ 都对应一个作用于通道维度的可学习矩阵 $\mathbf{R}_\ell(\boldsymbol{k})$。在傅里叶神经算子中，仅保留一组固定的低频模态：

$$\widehat{v}_{\ell+1}(\boldsymbol{k}) = \begin{cases} \mathbf{R}_\ell(\boldsymbol{k})\,\widehat{v}_\ell(\boldsymbol{k}), & \boldsymbol{k} \in \mathcal{K}_m, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases} \tag{9}$$

其中， $\mathcal{K}_m$ 表示保留的索引集（例如，前 $m_1 \times \cdots \times m_d$ 个模态）。这种截断基于一项经验观察：许多偏微分方程解算子都可以通过其低频成分得到良好近似，而高频成分要么激发较弱，要么受离散化噪声主导。从计算角度看，由于快速傅里叶变换，每层的计算成本按 $\mathcal{O}(n\log\, n)$增长，而可学习谱乘法仅作用于 $\mathcal{O}(m_1 \cdots m_d)$个模态。

输入/输出映射与物理场。
升维映射 $\mathcal{P}$ 和投影映射 $\mathcal{Q}$ 通常通过逐点多层感知机（MLP）实现。这种设计使网络能够适应可变的网格尺寸，也就是说，同一组参数会在每个空间位置重复使用，而傅里叶混合步骤则通过当前网格上的快速傅里叶变换来实现。对于多物理场设置，可以将多个输入通道（例如本例中的功率、扫描速度、归一化焓和网格坐标）拼接到 $a(\mathbf{x})$ 中，同时联合预测多个输出通道（例如本例中的温度、体积分数和液相分数）。

训练目标。
训练时使用监督样本对（$a^{(j)}$、 $u^{(j)}$），通过最小化经验风险函数来进行：

$$\min_\theta \; \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \left\| \mathcal{G}_\theta\left(a^{(j)}\right) - u^{(j)} \right\|_{\mathcal{U}_h}^2, \tag{10}$$

其中 $\|\cdot\|_{\mathcal{U}_h}$ 表示离散化范数（在我们的例子中为 L^2 网格点上的范数）。预测多个场时，有多种聚合方式，最简单的是加权和。我们采用专为物理信息神经网络设计的 ReLoBraLo [33] 聚合器。

分辨率不变性的实际应用。
FNO 的分辨率不变特性源于：(i) 不依赖网格尺寸的逐点映射 $\mathcal{P}$ 和 $\mathcal{Q}$，以及 (ii) 由一组固定的保留模态（$m_1, \ldots, m_d$）定义的傅里叶混合，而非固定数量的网格点。因此，只要评估网格能够表示保留的傅里叶指标，针对某一网格分辨率学习得到的谱权重 $\mathbf{R}_\ell(\boldsymbol{k})$ 就可应用于另一种网格分辨率。对于非周期域或非周期边界条件，在计算快速傅里叶变换（FFT）之前，会进行填充或采用其他边界处理，以确保谱卷积在数值上保持稳定。在我们的案例中，虽然某些边界是周期性的，但温度场的大多数边界温度均为 300 K，而顶部边界会破坏周期性；因此，我们在计算域边界周围采用大小为 9 的零填充。

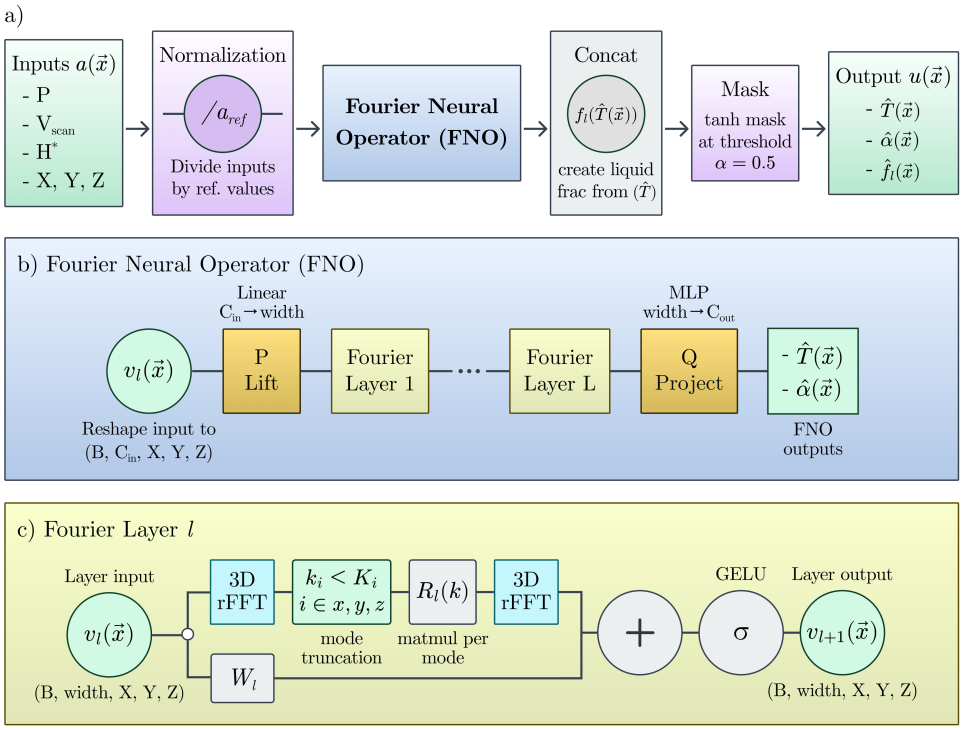


图 2 LP-FNO 前向传播架构

2.3 特定案例处理

为了将 FNO 架构用于激光熔化，我们进行了不同的调整，以确保训练过程一致。

参考系变换。

为将数据转换到以恒定速度V_{scan}移动的激光参考系中，时间采样的选择应使激光的位移与底层的均匀计算网格完全对齐。给定间距均匀的空间网格 Δx，时间增量 Δt 因此应选取为使激光在每个时间步内恰好移动一个网格单元，

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{V_{scan}}. \tag{11}$$

采用这一选择后，在移动参考系中，激光的位置会在每个时间步与网格点重合，从而无需进行空间插值。因此，如果激光经过的总距离对应于 m个网格单元，则转换后的参考系中仅保留 m 个离散时间步，对应的总经过时间为 $m\,\Delta x/V$。这种方法符合将激光的行进距离视为有效演化参数的处理方式，因为模拟运行至达到指定距离，而不是运行固定的物理时间。随后，我们通过索引 $t_k = k\Delta t$、 $k \in \mathbb{N}$表示激光参考系中的时间步。

准稳态假设与时间平均。

在以恒定速度随激光移动的参考坐标系中，温度场和熔池界面的时间变化主要局限于小尺度的界面波动，对大尺度熔池演化的贡献极小。为评估这些场是否可视为准静态，我们分析了移动坐标系中连续快照之间的时间差异。

图3和4 展示了传导和匙孔焊接工况下两个连续时间步的温度场平均绝对差异，$\|\Delta T(t_k)\| = \|T(t_k) - T(t_{k-1})\|$。未经时间平均处理时，匙孔模式下仍存在显著波动（图 4a），这反映了蒸汽腔及其相关熔池界面固有的不稳定动态。相比之下，传导 რეჟიმ表现出的变化显著较小，说明其更接近稳态行为。

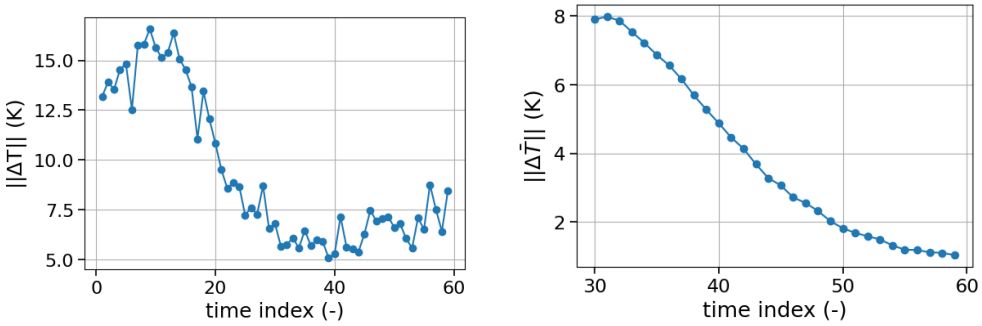
为分离熔池的大尺度缓慢变化结构，我们在滑动窗口内应用时间平均处理，定义如下：

$$\bar{T}(t_k) = \frac{1}{n}\sum_{i=k-n}^{k} T(t_i), \tag{12}$$

在移动坐标系中，时间步数为 $n = 30$。经过平均后， $\|\Delta T(t_k)\|$ 的幅值 $\bar{}$ 在两种状态下均趋近于零。这表明，一旦滤除高频界面振荡，温度场和熔池

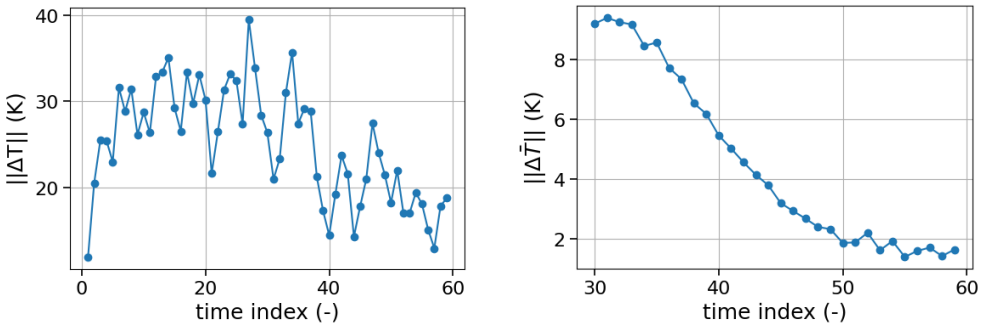
几何形状在激光移动足够远的距离后，仅表现出微弱的残余时间依赖性。

这些观察结果表明，只要采用适当的时间平均，就可以将激光参考系中的熔池视为准静态。



(a) 无时间平均　　(b) 对 30 步窗口进行平均

图 3 传导 режим（$P = 70$、 $V_{scan} = 0.298$、 $H^* = 4.75$）。激光参考系中的平均绝对温差随时间的演化。对于未进行平均的数据，在 $t = 30$ 附近出现准静态行为；对于经过平均的数据，则从$t_{avg} = 50$开始出现。时间平均定义见 公式 12



(a) 无时间平均　　(b) 对 30 步窗口进行平均

图 4 匙孔模式（$P = 150$、 $V_{scan} = 0.542$、 $H^* = 7.54$）。激光参考系中的平均绝对温差随时间的演化。时间平均抑制了高频界面波动，当激光移动了足够距离后，显现出准静态行为。时间平均定义见公式 12

场归一化

LP-FNO 使用的所有场变量均通过除以典型参考值进行归一化，使其量级大致相同，从而简化学习过程。所用参考值见表2。

表2用于归一化的参考值

特征参数	**符号**	**参考值**
长度	L	$1 \times 10^{-4}\,\mathrm{m}$
温度	T	$3000\,\mathrm{K}$
速度	V	$1 \times 10^{-1}\,\mathrm{m\,s^{-1}}$
功率	P	$10\,\mathrm{W}$
归一化焓	H	5.9

液相分数的计算。

液相分数 f_l 是液态物质相对于固态物质的百分比，定义如下:

$$f_\ell(T(\mathbf{x})) = \begin{cases} 0, & T(\mathbf{x}) \le T_s, \\ \dfrac{T(\mathbf{x}) - T_s}{T_l - T_s}, & T_s < T(\mathbf{x}) < T_l, \\ 1, & T(\mathbf{x}) \ge T_l. \end{cases} \tag{13}$$

其中， T_s 和 T_l 分别为该金属的固相线温度和液相线温度。对于 Ti-6Al-4V，基于 FLOW-3D®数据库，采用了 $T_s = 1873\mathrm{K}$ 和 $T_l = 1923\,\mathrm{K}$。 $0 < f_l < 1$ 的区域称为“糊状区” [34]。在此状态下，固态枝晶与液态金属在凝固或熔化等相变过程中共存，固相和液相的比例由该物质的相图决定。在本研究中，我们假设浓度变化可以忽略不计，且热物理性质和力学性质随温度连续变化。尽管 f_l 是一种热力学量，但在本研究中，主要通过在 $f_l = 0.5$处进行阈值化，将其用作熔池边界的几何指示量。因此，熔池区域定义为 $\alpha(\mathbf{x}) \ge 0.5$ 和 $f_l(\mathbf{x}) \ge 0.5$。在 LP-FNO 的前向传播过程中，根据推断出的 T 场计算 f_l 。随后，将其纳入监督损失的汇总中，以便在反向传播时促使网络更加准确地学习熔池边界温度。

气相 α-掩蔽。

由于所关注的量局限于金属域，且 FLOW- 3D WELD® 并未显式模拟气相，因此采用平滑掩蔽程序来抑制周围气相中的场。具体而言，连续体积分数 $\alpha(\mathbf{x}) \in [0,1]$ 用于区分金属与气体，其中 $\alpha < 0.5$

表示金属外部的区域。为在金属-气体界面处保持可微性，将平滑的双曲正切门定义为

$$g(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\left[\tanh\left(k\left(\alpha(\mathbf{x}) - 0.5\right)\right) + 1\right], \tag{14}$$

其中， k 控制过渡的锐度（我们使用 $k = 20$）。随后，温度场会根据以下公式平滑地过渡至一个固定值

$$\tilde{T}(\mathbf{x}) = T_{\text{boil}} + g(\mathbf{x})\big(T(\mathbf{x}) - T_{\text{boil}}\big), \tag{15}$$

其中， $T_{\text{boil}} = 3123$ K 对应 Ti–6Al–4V 的沸点。在推理过程中，该操作会在网络前向传播之后执行；在预处理真值数据时也会执行，从而避免在匙孔界面引入不必要的陡峭梯度。此外，液相分数 f_ℓ 和推断得到的体积分数$\hat{}\alpha$(x)在金属区域之外均被设为零，以确保它们仅表示熔池几何。

实现。
我们使用来自英伟达的 PhysicsNeMo [35] 软件包，以 Python 实现了傅里叶神经算子，超参数详见表 6，见附录A，并按照第® 节所述，在 FLOW-3DWELD 激光焊接模拟数据上训练模型。2.1训练时，我们采用了 [36]中的 LION优化器。

K折交叉验证
为了评估网络的性能，我们从完整数据集中留出一个验证子集，专门用于超参数调优。由于样本数量有限，其余数据采用8折交叉验证进行评估。每一折中，模型使用 7/8 的数据进行训练，并在剩余的1/8上进行评估；报告的指标为各折结果的平均值。为测试超分辨率，我们采用了图1所示的经典训练-验证-测试集划分，这是因为细网格参考多物理场仿真的计算和存储成本很高。为生成图6、11和10中的图，我们对完整数据集采用交叉验证，因为误差是针对每次仿真分别报告的，验证折之间的任何差异都会一目了然。模型在所有输出上均实现了收敛，无论是原始损失还是各折测试集上的表现皆如此，相关结果见第A节的图12。

模型性能评估指标。
为评估模型性能，采用平均绝对误差（MAE），其定义如下：

$$\text{MAE} = \frac{1}{N}\sum_{s=1}^{N}\left(\frac{1}{|D_h|}\sum_{\mathbf{x}\in D_h}\left|e^{(s)}(\mathbf{x})\right|\right), \tag{16}$$

以及均方根误差（RMSE），

$$\mathrm{RMSE} \;=\; \frac{1}{N}\sum_{s=1}^{N}\left(\sqrt{\frac{1}{|D_h|}\sum_{\mathbf{x}\in D_h}\left(e^{(s)}(\mathbf{x})\right)^2}\right). \tag{17}$$

其中， $y^{(s)}(\mathbf{x})$ 表示真实场，$\hat{}y^{(s)}(\mathbf{x})$ 表示样本$s \in \{1,\dots,N\}$ 在具有 $|D_h|$ 个网格点的离散化区域 D_h 上的预测场。逐点误差定义如下：

$$e^{(s)}(\mathbf{x}) = \hat{y}^{(s)}(\mathbf{x}) - y^{(s)}(\mathbf{x}). \tag{18}$$

除了平均绝对误差和均方根误差外，还分析了相应的相对指标。对于每个输出场，将评估集上真实值的全局均值定义为归一化常数，

$$\mu_y \;=\; \frac{1}{N\,|D_h|}\sum_{s=1}^{N}\sum_{\mathbf{x}\in D_h} y^{(s)}(\mathbf{x}), \tag{19}$$

相对误差的计算方式如下：

$$\mathrm{RelMAE} \;=\; \frac{\mathrm{MAE}}{\mu_y+\varepsilon}, \qquad \mathrm{RelRMSE} \;=\; \frac{\mathrm{RMSE}}{\mu_y+\varepsilon}, \tag{20}$$

其中使用较小的 $\varepsilon > 0$ 以确保数值稳定性。

对于固相分数 α 和液相分数 f_l （后者实际上定义了熔池边界），这项任务自然可以视为一个分割问题。因此，我们还研究了交并比（IoU）。给定阈值 $\tau = 0.5$，样本 s 的预测二值掩码和真实二值掩码可定义为：

$$\hat{M}^{(s)}(\mathbf{x}) = \mathbb{I}\Big[\hat{y}^{(s)}(\mathbf{x}) \geq \tau\Big], \qquad M^{(s)}(\mathbf{x}) = \mathbb{I}\Big[y^{(s)}(\mathbf{x}) \geq \tau\Big], \tag{21}$$

交并比定义如下：

$$\mathrm{IoU} \;=\; \frac{1}{N}\sum_{s=1}^{N}\frac{\sum_{\mathbf{x}\in D_h}\hat{M}^{(s)}(\mathbf{x})\,M^{(s)}(\mathbf{x})}{\sum_{\mathbf{x}\in D_h}\mathbb{I}\Big[\hat{M}^{(s)}(\mathbf{x}) + M^{(s)}(\mathbf{x}) \geq 1\Big]}. \tag{22}$$

由于 α 和 f_l 字段已无量纲且大部分点的数值为 0，因此未计算相对指标；评估主要依据绝对误差和交并比。

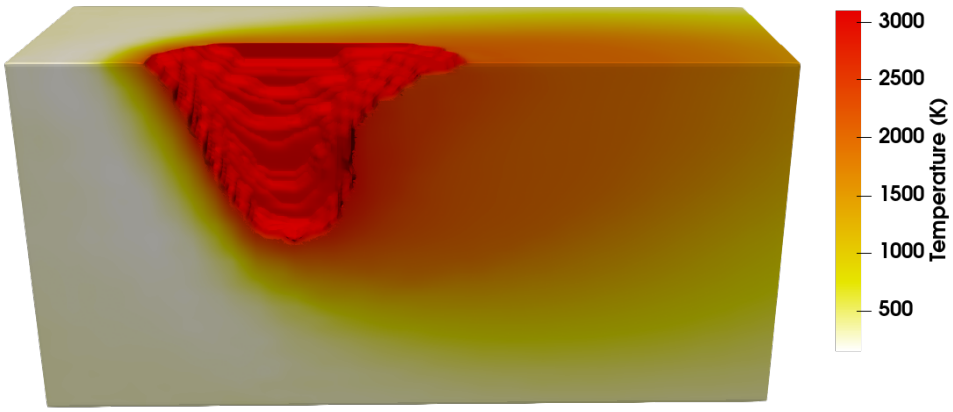


图 5 LP-FNO 在 $P = 150\text{W}$ 和$V_{\text{scan}} = 0.54\text{m/s}$ 条件下对匙孔模式模拟的三维推理结果。为便于观察，将计算域沿中间剖开。使用 ParaView [37] 进行可视化

3 结果与讨论

训练好 LP-FNO 后，对于训练范围内的任意一组工艺参数，我们都能在几分之一秒内，按所需的任意网格分辨率生成温度场和熔池。例如，输入功率 $P = 150\text{W}$ 和激光扫描速度 $V_{scan} = 0.54\text{m/s}$ 后，大约 10 ms 即可得到 图 5 所示的温度场和熔池，分辨率为 10 µm 时约需 10 ms，分辨率为 5µm 时约需 40 ms。这比在 10 ms 分辨率下运行等效的 FLOW-3D®模拟快一万多倍，比在 5 ms 分辨率下运行 FLOW-3D® 快约十万倍。给定参数组的具体运行时间见表 3。

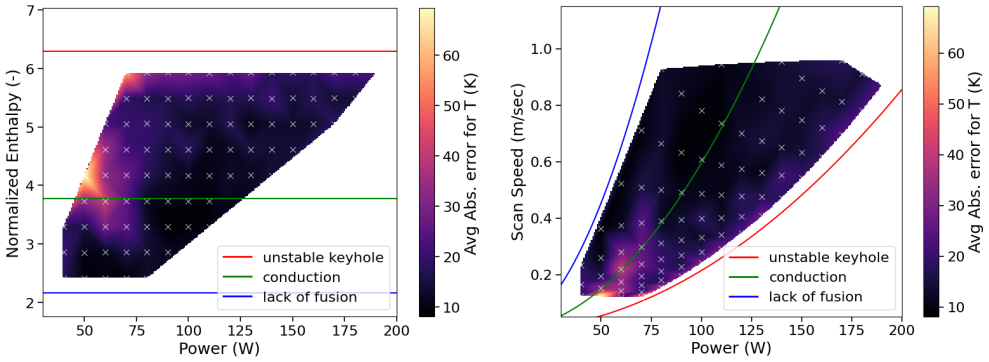
10 µm 网格下不同参数组合的指标。
考察模型在不同参数组合上的表现时，我们首先通过 K 折交叉验证，将整个参数域上的指标表示为热图，以识别模型表现特别好或特别差的区域。我们从图 6中看到，似乎有一个离群点位于 $P = 50\text{W}$、 V_{scan} =0.122m/s 处，该点位于数据范围边缘，处于传导-小孔转变的起始阶段。仔细查看该点处 α 的推理结果（见图 7），可以看到，由于这是一个转变点，模型无法确定该点是否属于匙孔点，还是

表 3高保真 FLOW-3D® 模拟与 LP-FNO 代理模型建模的计算运行时间对比。FLOW-3D® 运行时间对应一次瞬态模拟（功率 50 W、扫描速度 0.260 m/s，扫描距离为 0.6 mm）；LP-FNO 运行时间则包括一次性训练成本和单样本推理成本。LP-FNO 推断在运行 Ubuntu 24.04.3 LTS 的工作站上进行，该工作站配备 Intel Core i9-10900X（10 核 / 20 线程）、125 GiB 内存和两块 NVIDIA TITAN RTX GPU（每块 24 GiB），但每次仅使用一块 GPU。FLOW-3D® 模拟使用 AMD Ryzen Threadripper 7960X，启用 16 个核心运行

方法	网格分辨率	运行时间
FLOW-3D® 模拟	粗（10 µm）	6 分 7 秒
FLOW-3D® 仿真	细（5 µm）	1 小时 6 分 54 秒
LP-FNO 训练（6,000 步）	粗（10 µm）	7 分 24 秒
LP-FNO推理	粗（10 µm）	0.0100 秒
LP-FNO推理	细（5 µm）	0.0435 秒

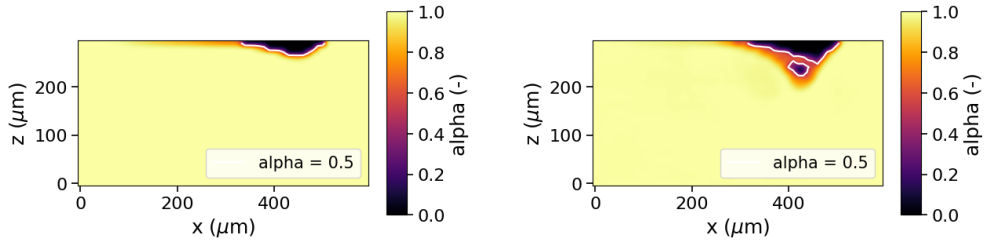
并非，从而导致界面出现一定程度的涂抹，并产生虚假的孔隙率预测。该问题可通过在该点附近范围内增加更多训练数据而轻松解决。除该点之外，模型表现相当出色，图上大多数点的平均温度误差为10 K，而在图中的高焓匙孔区域以及低速区域，误差略升至约20K；这符合预期，原因是这些区域复杂度更高，且图边缘缺乏训练数据。观察熔池的分割（f_l）见图10 以及金属-气体界面 α 见图11 于 附录A，我们看到类似的模式。同一离群点仍然存在，且图中高焓、匙孔边缘的误差更高，但熔池IoU 误差除外。这符合预期，因为在高焓状态下熔池更大，从而使较小的分割误差相对于小熔池中的相同误差被缩小。类似的原因解释了为何IoU 误差在图10c 与 10d中具有相对较大的量级，尤其是在低速和低焓状态下，因为这些状态下的熔池可能非常小，即使一个体素的误差也会占整个熔池的几个百分比，从而被放大。

平均指标：$10\mu\mathrm{m}$ 网格。
总体来看我们的模型性能，从表4可以看出，我们的模型在所有指标上平均表现良好。对于温度场，平均绝对误差为18.3 K，约为3%，均方根误差为36 K，即5.9%。对于金属-气体界面 α，平均绝对误差较低，仅为0.0035，均方根误差为0.017，交并比几乎达到完美的0.9992。对于完整的熔池分割，绝对误差为0.0024，均方根误差为0.037，交并比为



(a) 平均绝对温度误差 (b) 平均绝对温度误差（开尔文）随激光功率 P 及（开尔文）随激光功率 P 及归一化焓 H^* 扫描速度 V_{scan}的变化

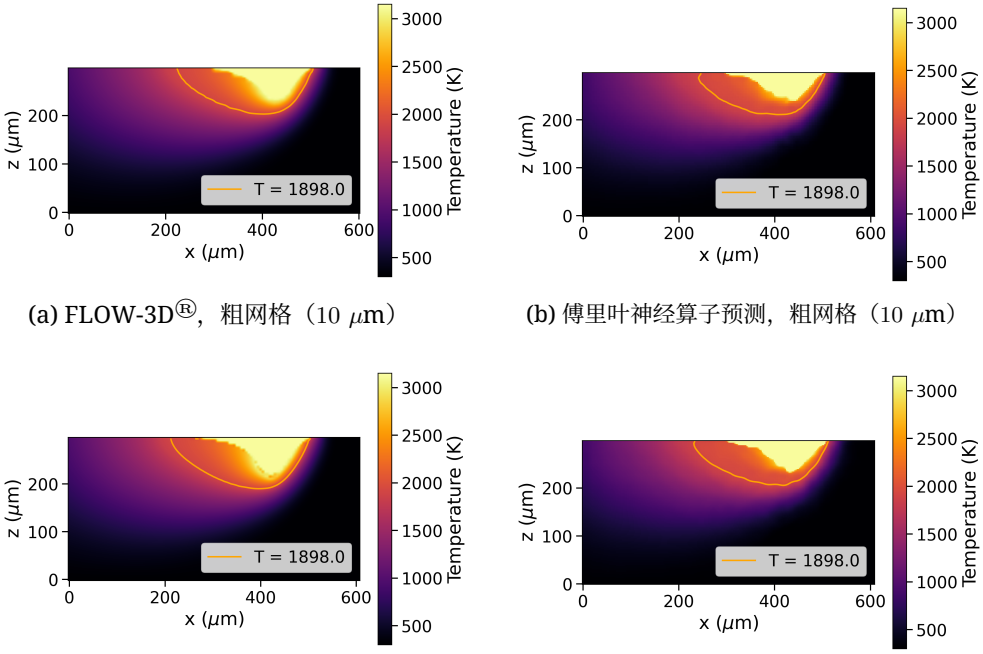
图 6工艺参数空间上的模型误差图。色标表示预测温度场的平均绝对误差。实线表示未熔合（蓝色）、传导（绿色）和不稳定小孔（红色）对应的大致模式指示线。白色标记表示用于训练和评估的仿真样本，评估采用 K 折交叉验证



(a) 真实值 (b) LP-FNO预测

图 7 离群案例在 $P = 50\text{W}$ 和 $V_{\text{scan}} = 0.122\text{ms}^{-1}$ 条件下的气-金属界面（α）真实值与 FNO 推断结果，此处模型偏差最大。尽管界面几何形状整体上得到了较好捕捉，但模型错误地推断出一个伪气泡。该工况点接近传导模式与匙孔模式之间的转变区域，在此处模型的不确定性有所增加。在该区域增加少量训练数据点，可能会大幅降低此误差

0.91。 α 和 f_l 交并比之间的差异源于： f_l 所表示的熔池区域远小于 α所表示的完整金属区域，因此，与 α相比， f_l 的交并比误差按比例更大。



(a) FLOW-3D®，粗网格（10 μm）　(b) 傅里叶神经算子预测，粗网格（10 μm）

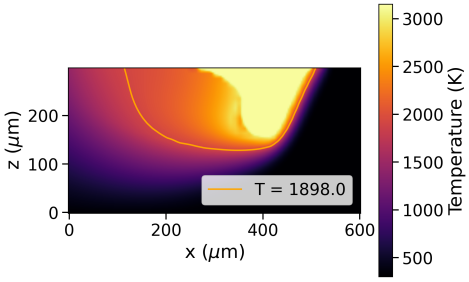
(c) FLOW-3D®，细网格（5 μm）　(d) 傅里叶神经算子超分辨率预测（5 μm）

图 8测试案例的传导模式熔池中点横截面对比，参数为 $P = 70.0$ and $V_{\text{scan}} = 0.298$ ms^{-1}。与匙孔模式不同，粗、细网格的 FLOW-3D® 解在视觉上相似，表明在传导模式下，网格收敛已在 10 μm 分辨率下有效实现

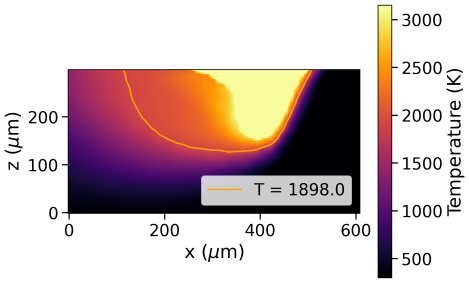
超分辨率。

傅里叶神经算子的一大优势是，正如第 2.2 节所述，它与分辨率无关，这意味着我们可以使用粗网格模拟数据训练傅里叶神经算子，这类数据的获取速度快得多（随着网格细化，耗时和数据量均按立方增长），并在精细得多的网格上进行模型推理。我们评估了使用网格尺寸为 10μm 的模拟数据训练的模型，并在一个具有代表性的样本上进行测试，该样本的网格尺寸为 5μm，涵盖了从传导到匙孔的所有物理状态，这些状态由图1中的测试集点表示。由于生成真值数据的计算成本和数据量都很高，我们没有在整个网格上进行 K 折交叉验证。

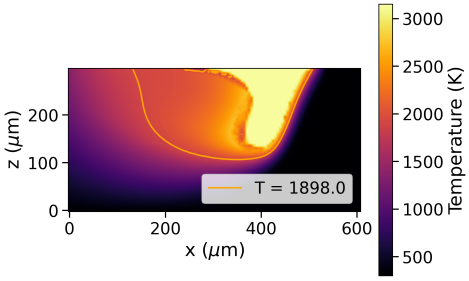
我们可以看到，图 8展示了传导模式参数集下粗网格和细网格模拟结果与推理结果的对比，图 9展示了匙孔模式参数集下的对比。在这两种情况下，超分辨率 FNO 推断本质上都是对粗略推断结果的更精细表示。这是预期之中的，因此结果的准确度取决于训练集的准确度。因此，在传导模式模拟中，我们得到了良好的一致性，因为相应的粗、细 FLOW-3D 模拟结果彼此接近。然而，对于匙孔模式，我们看到细网格 FLOW-3D 模拟结果比粗网格结果略复杂，而且



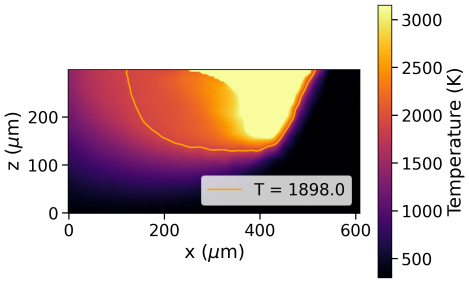
(a) FLOW-3D®，粗网格（10 μm）



(b) 傅里叶神经算子预测，粗网格（10 μm）



(c) FLOW-3D®，细网格（5 μm）



(d) 傅里叶神经算子超分辨率预测（5 μm）

图 9 对于一个具有 $P = 150.0$ 和 $V_{\text{scan}} = 0.54$ ms^{-1}的测试案例，匙孔模式熔池中点横截面的比较。细分辨率傅里叶神经算子结果是通过对仅使用粗网格（10 μm）数据训练的模型进行超分辨率处理获得的。粗网格与细网格 FLOW-3D 解之间的明显差异表明，在匙孔模式下， 10 μm 分辨率尚未实现网格收敛。这表明，尽管傅里叶神经算子超分辨率具有实用价值，但其效果最多只能达到训练数据保真度所允许的水平

因此，超分辨率 FNO推断结果无法完全捕捉细网格 FLOW-3D 参考模拟的复杂性。尽管 FNO 能够实现数值超分辨率，但它无法恢复粗网格训练数据中不存在的物理特征。

观察表5中的超分辨率指标可以发现，误差约为表4中未进行超分辨率处理的情况的两倍。正如所讨论的，这种差异主要源于匙孔模式下，采用 10μm 网格尺寸的训练数据尚未达到网格收敛。为确保所有模式下都具有真实的物理保真度，同时将计算训练成本控制在合理范围内，一种训练方法是采用由粗到细训练策略：先用大量粗网格数据训练傅里叶神经算子，再针对训练数据尚未达到网格收敛的模式，逐步使用更细网格的数据进行微调。

表4 傅里叶神经算子的误差指标，以均值和范围 [最小值，最大值] 的形式报告，涵盖 8 折（未使用用于超参数调优的验证集）。绝对温度误差以开尔文为单位报告；相对误差以百分比表示。由于 α 和 f_l 已是无量纲量，因此不报告其相对指标

指标	T (K)	金属-气体界面 (α)	熔池 (f_l)
绝对均值	18.3 [14.1,21.3]	0.0035 [0.0025,0.0048]	0.0024 [0.0018,0.0034]
RMSE	36.0 [30.0、45.0]	0.017 [0.013,0.025]	0.037 [0.030,0.045]
相对均值 [%]	2.9 [2.2,3.4]	–	–
相对均方根误差 [%]	5.9 [5.0,7.2]	–	–
交并比均值	–	0.9992 [0.9986,0.9992]	0.91 [0.88,0.93]
交并比标准差	–	0.00049 [0.00024,0.0011]	0.053 [0.020,0.13]

表5 超分辨率测试数据上的傅里叶神经算子误差指标（参见图 1 中的数据划分）(5 μm 网格)。绝对温度误差以开尔文为单位报告；相对误差以百分比表示。对于 α 和 f_l，由于它们无量纲，因此不报告相对指标

指标	T (K)	金属-气体界面 (α)	熔池 (f_l)
绝对均值	31.8	0.0040	0.0081
RMSE	68.0	0.036	0.080
相对均值 [%]	5.3	–	–
相对均方根误差 [%]	11.3	–	–
交并比均值	–	0.998	0.741
交并比标准差	–	0.0014	0.066

4 结论

在本研究中，我们提出了 LP-FNO，这是一种傅里叶神经算子代理模型，可用于预测激光加工中从传导到稳定小孔焊接等广泛模式下的准稳态熔池特性。我们使用由 FLOW-3DWELD® 生成的高保真热流体仿真作为真实值，其中纳入了自由表面动力学、相变、反冲压力和激光射线追踪。通过将数据转换到移动激光参考系并进行时间平均，我们将这一固有的瞬态问题重构为适用于算子学习的准稳态形式。

训练后的 LP-FNO 可直接根据工艺参数准确预测三维温度场、金属-气体界面和熔池界面，仅需不到一秒即可实现低绝对误差和相对误差，并对金属-气体界面取得近乎完美的分割性能。重要的是，该模型能够泛化至整个工艺窗口，包括从传导模式向匙孔模式过渡这一具有挑战性的区域，且无需针对新的参数组合重新训练。

该方法的一项核心优势是其分辨率不变形式。我们证明，仅使用粗分辨率 10µm 模拟数据训练的傅里叶神经算子可以

在更精细的 5µm 网格上进行评估，从而有效实现超分辨率。在传导模式下，底层 FLOW-3D 模拟在粗分辨率下已达到网格收敛，因此超分辨率预测仍保持很高的准确性。相比之下，在匙孔模式下，粗、细参考模拟之间的差异限制了超分辨率推理所能达到的准确度，这表明神经算子的保真度从根本上受训练数据的质量和收敛程度所限。

这些结果表明，LP-FNO为激光焊接提供了一种强大、快速且高效的代理建模框架，能够在广泛的参数范围内，近乎即时地预测完整的三维场。此类模型非常适用于快速工艺优化、不确定性量化和实时数字孪生等应用。

展望未来，高分辨率三维FNO代理模型的一个重要局限在于，其主要可训练组件——稠密谱通道混合权重——会随着保留模态和潜在通道数量的增加而成为参数和内存瓶颈，尤其是在扩展到更丰富的物理过程或更高保真度的网格时。因此，一个自然的未来研究方向是探索参数高效的谱混合，包括量子-经典混合变体：通过小型、模态共享的参数化量子电路生成可配置的傅里叶层通道混合子集，而非采用大量相互独立的稠密矩阵。此处探索量子电路的动机并非实现近期运行加速，而是提高表征效率 [38]：参数化量子电路可以充当紧凑的非线性混合器，通过纠缠引入全局交互，同时使可训练参数数量在很大程度上与傅里叶模态数量脱钩，从而有望在数据有限的情况下改善精度—参数量和泛化之间的权衡。量子傅里叶神经算子及相关混合算子学习设计的早期结果表明，这是一个可行的研究方向 [39, 40]。

声明与披露

作者声明不存在任何利益冲突。我们谨此感谢 EMPA 和 TerraQuantum AG 对本研究的支持。

参考文献

[1] Michaleris, P.: 增材制造工艺传热分析中的金属沉积建模。《有限元分析与设计》**86**, 51–60(2014)https://doi.org/10.1016/j.finel.2014.04.003 . 访问日期: 2026-01-25[2]Mukherjee, T., Zhang, W., DebRoy, T.: 增材制造中残余应力与变形的改进预测。《计算材料科学》**126**,360–372 (2017) https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.10.003 . 访问日期：2026-01-25[3] Mukherjee, T., Wei, H.L., De, A., DebRoy, T.: 增材制造中的热流与流体流动——第一部分：粉末床熔融建模。《计算材料

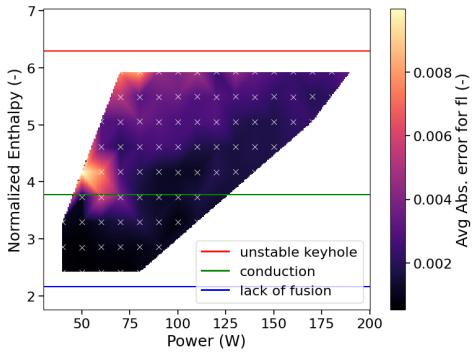
科学 150, 304–313 (2018) https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.04.022 . 访问日期：2026-01-25[4] Moreira, C.A., Chiumenti, M., Caicedo, M.A., Baiges, J., Cervera, M.: 采用一种计算高效且准确的方法进行金属增材制造的高保真零件尺度模拟。《增材制造》104, 104748 (2025) https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.104748 . 访问日期：2026-01-25[5] De, A., DebRoy, T.: 用于估算焊池有效热导率和黏度的智能模型。《应用物理学杂志》95(9), 5230–5240 (2004) https://doi.org/10.1063/1.1695593 . 访问日期：2026-01-26[6] Saldi, Z.S., Kidess, A., Kenjereˇs, S., Zhao, C., Richardson, I.M., Kleijn, C.R.: 增强热质传递及冷却过程中的流动反转对钢材激光点焊焊池形状的影响。International Journal of Heat and Mass Transfer 66, 879–888 (2013) https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer. 2013.07.085 . 访问日期：2026-01-26[7] Kamara, A.M., Wang, W., Marimuthu, S., Li, L.: 使用各向异性增强热导率方法对镍合金激光沉积中的熔池几何形状进行建模。Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal ofEngineering Manufacture 225(1), 87–99 (2011) https://doi.org/10.1177/09544054JEM2129 . 访问日期：2026-01-26[8] Li, Z., Kovachki, N., Azizzadenesheli, K., Liu, B., Bhattacharya, K., Stuart, A., Anandkumar, A.: 用于参数化偏微分方程的傅里叶神经算子。arXiv. arXiv:2010.08895 [cs] (2021). https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.08895 . http://arxiv.org/abs/2010.08895 访问日期：2025-09-04[9] Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G.E.: 物理信息神经网络：一种用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题与逆问题的深度学习框架。《计算物理学杂志》378, 686–707 (2019) https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045 . 访问日期：2025-09-04[10] Karniadakis, G.E., Kevrekidis, I.G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., Yang, L.: 物理信息机器学习。《自然综述：物理》3(6), 422–440 (2021) https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5 . 访问日期：2026-01-25[11] Ko, T., Kim, H., Shin, Y., Kim, D., Lee, Y.H., Hong, J., Lee, S.H.: 物理信息神经网络在增材制造和焊接研究中的最新应用综述。《焊接与连接杂志》42(4), 357–365 (2024) https://doi.org/10.5781/JWJ.2024.42.4.3 . 访问日期：2025-10-22[12]Li, Z., Zheng, H., Kovachki, N., Jin, D., Chen, H., Liu, B., Azizzadenesheli, K., Anandkumar, A.: 用于偏微分方程学习的物理信息神经算子。《ACM/IMS数据科学杂志》1(3), 1–27 (2024) https://doi.org/10.1145/3648506 . 访问日期：2025-09-04

[13] Torres, E., Schiefer, J., Niepert, M.：自适应物理信息神经网络：综述。arXiv. arXiv:2503.18181 [cs] (2025年)。https://doi.org/10.48550/arXiv. 2503.18181 . http://arxiv.org/abs/2503.18181 查阅于2025-11-14[14] Lu, L., Jin, P., Karniadakis, G.E.：DeepONet：基于算子通用逼近定理学习非线性算子以识别微分方程。《自然·机器智能》3(3)，218–229 (2021) https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5 . arXiv:1910.03193 [cs]。查阅于2025-09-04[15] Kovachki, N., Li, Z., Liu, B., Azizzadenesheli, K., Bhattacharya, K., Stuart, A., Anandkumar, A.：神经算子：学习函数空间之间的映射及其在偏微分方程中的应用。Journal of Machine Learning Research 24(89)，1–97 (2023年)[16] Raonic, B., Molinaro, R., De Ryck, T., Rohner, T., Bartolucci, F., Alaifari, R., Mishra, S., Bezenac, E.：卷积神经算子：稳健、准确地学习偏微分方程。载于：神经信息处理系统大会（NeurIPS）36 (2023年)。https://doi.org/10.48550/arXiv.2302.01178 [17] Manav, M., Perraudin, N., Lin, Y., Afrasiabi, M., Perez-Cruz, F., Bambach, M., De Lorenzis, L.：MeltpoolINR：预测激光粉末床熔融中的温度场、熔池几何形状及其变化率。《智能制造杂志》(2025年) https://doi.org/10.1007/s10845-025-02692-4 . 查阅于2026-01-08[18] Liu, N., Li, X., Rajanna, M.R., Reutzel, E.W., Sawyer, B., Rao, P., Lua, J., Phan, N., Yu, Y.：用于增材制造的深度神经算子数字孪生建模。《计算科学与工程进展》2(3)，174–201 (2024年) https://doi.org/10.3934/acse.2024010 . 查阅于2025-11-18[19]Safari, H., Wessels, H.：用于预测激光粉末床熔融多道扫描温度的物理信息代理模型。arXiv. arXiv:2502.01820 [cs](2025年)。https://doi.org/10.48550/arXiv.2502.01820 . http://arxiv.org/abs/2502. 01820 查阅于2025-11-18[20] Yaseen, M., Yushu, D., German, P., Wu, X.：利用算子学习快速、准确地对基于MOOSE的增材制造模型进行降阶建模。《国际先进制造技术杂志》129(7-8)，3123–3139 (2023年) https://doi.org/10.1007/s00170-023-12471-1 . 查阅于2026-01-05[21] Hann, D.B., Iammi, J., Folkes, J.：一种根据材料和激光参数预测激光焊接性能的简易方法。《物理学杂志D：应用物理》44(44)，445401 (2011) https://doi.org/10.1088/0022-3727/44/44/445401 . 查阅于2026-01-07[22] FLOW-3D WELD®。Flow Science公司，美国新墨西哥州圣菲（2025年）。https://

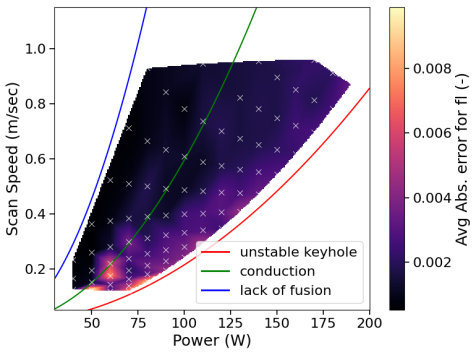
[23] Svenungsson, J., Choquet, I., Kaplan, A.F.：激光焊接工艺——小孔焊接建模综述。Physics procedia **78**，182–191 (2015)[24] Aggarwal, A., Shin, Y.C., Kumar, A.：揭示激光辐照Ti6Al4V过程中小孔不稳定性与激光吸收动力学：高保真热流体研究。International Journal of Heat and Mass Transfer **219**，124841 (2024年)[25] Flint, T.F., Robson, J.D., Parivendhan, G., Cardiff, P.：laserbeamFoam：激光光线追踪与热诱导状态转变仿真工具包。SoftwareX**21**，101299 (2023年) https://doi.org/10.1016/j.softx.2022.101299 。查阅于2025-09-16[26] Zenz, C., Buttazzoni, M., Florian, T., Armijos, K.E.C., V´azquez, R.G., Liedl, G., Otto, A.：用于模拟激光制造工艺的可压缩多相流体体积模型。Computers & Fluids **268**，106109 (2024年)[27] Hemmasian, A., Ogoke, O.F., Akbari, P., Malen, J., Beuth, J., Barati Farimani, A.：利用深度学习对熔池热场进行代理建模。社会科学研究网络，美国纽约州罗切斯特 (2022年)。https://doi.org/10.2139/ssrn.4190835. https://papers.ssrn.com/abstract=4190835 查阅于2026-01-25[28] Ahn, S.-H., Song, I., Bae, J., Jeong, G.-H., Cho, D.-W., Park, Y.W.：一种用于焊接和增材制造的新型热源模型：移动稳态熔池方法。Journal of Manufacturing Processes**153**，471–486 (2025年) https://doi.org/10.1016/j.jmapro.2025.09.012[29] Fulco, E., Coviello, D., Sargente, D.：数值分析静止激光束特性对22MnB5钢中铝硅涂层混合的影响。International Journal of Heat and Mass Transfer **255**(2)，127899 (2026年) https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.127899[30] Katinas, C., Shin, Y.C.：预测激光粉末床熔融过程中静止加热时的初始瞬态行为。International Journal of Heat and Mass Transfer **153**，119663 (2020)[31] Li, Z., Huang, D.Z., Liu, B.：通过学习变形，使傅里叶神经算子适用于一般几何形状上的偏微分方程。Journal of Machine Learning Research**24**(388)，1–26 (2023)[32] Hendrycks, D., Gimpel, K.：高斯误差线性单元（GELU）。arXiv. 版本号：5 (2016)。https://doi.org/10.48550/ARXIV.1606.08415 . https://arxiv.org/abs/1606.08415 查阅于2026-01-25[33] Bischof, R., Kraus, M.A.：物理信息深度学习的多目标损失平衡。Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **439**，

117914（2025年）htt ps://doi.org/10.1016/j .cma.2025.117914 . ccesse d 2026年 01 25
--[34] Kurz, W., Fisher, D.J., Rappaz, M.：《凝固基础》第5版，全面修订版。材料科学与工程基础；103，卷103。Trans Tech Publications Ltd，???（2023年）。https://doi.org/10.4028/b-v7b35q。
https://infoscience.epfl.ch/handle/20.500.14299/245295[35] Contributors, P.：英伟达PhysicsNeMo：用于科学与工程领域基于物理的深度学习的开源框架（ 2023 年）。https://github.com/NVIDIA/physicsnemo[36] Chen, X., Liang, C., Huang, D., Real, E., Wang, K., Liu, Y., Pham, H., Dong, X., Luong, T., Hsieh, C.-J., Lu, Y., Le, Q.V.：优化算法的符号发现。arXiv。arXiv:2302.06675 [cs]（2023年）。https://doi.org/10.48550/arXiv.2302.06675。http://arxiv.org/abs/2302.06675访问日期：2026-01-27[37]Ahrens, J., Geveci, B., Law, C.：ParaView：用于大型数据可视化的终端用户工具。爱思唯尔（2005年）。https://doi.org/10.1016/B978-012387582-2/50038-1 。https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780123875822500381访问日期：2026-01-27[38] Sedykh, A., Podapaka, M., Sagingalieva, A., Pinto, K., Pflitsch, M., Melnikov, A.：用于复杂形状计算流体动力学模拟的混合量子物理信息神经网络。《机器学习：科学与技术》5（2），025045（2024年）https://doi.org/10.1088/2632-2153/ad43b2[39] Jain, N., Landman, J., Mathur, N., Kerenidis, I.：用于求解参数化偏微分方程的量子傅里叶网络（2023年）。https://arxiv.org/abs/2306.15415[40] Marcandelli, P., He, Y., Mariani, S., Siena, M., Markidis, S.：《用于科学量子机器学习的分区混合量子傅里叶神经算子》。载于：2025年量子计算与工程国际会议（2025年）。https://doi.org/10.1109/QCE65121.2025.00185

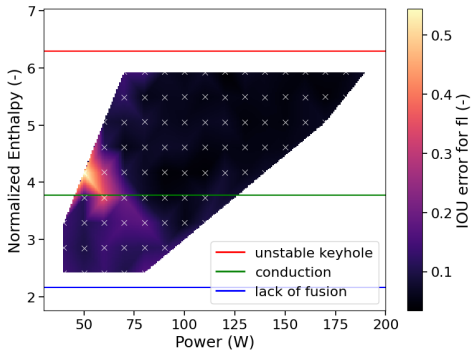
附录A LP-FNO 收敛和超参数的补充图



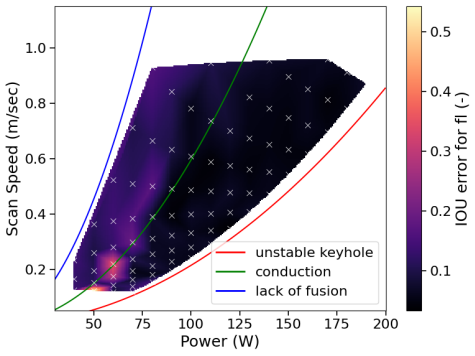
(a) f_l 的平均绝对误差（P–H）



(b) f_l 的平均绝对误差（P–V_{scan}）

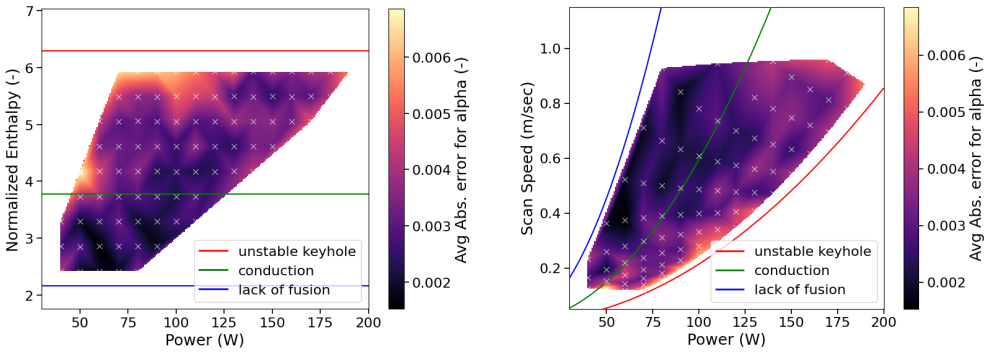


(c) f_l 的 IoU 误差（1–IoU）（P–H）



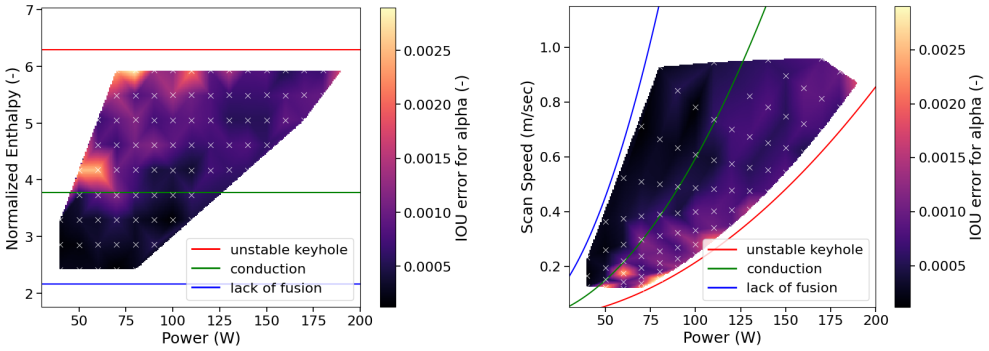
(d) f_l 的 IoU 误差（1–IoU）（P–V_{scan}）

图10 整个工艺窗口内熔池（液相分数 f_l）的分割性能。上排：平均绝对误差。下排：在阈值 $f_l \geq 0.5$ 处进行阈值化后计算的 IoU 误差（1-IoU）。结果以两种参数化形式展示：(P, V_{scan}) 和 (P, H)。整体分割效果良好，但在 $P = 50$W、 V_{scan} =0.122 m/s 处有一个离群点，该点位于数据边缘，处于传导-小孔转变的起始阶段



(a) α （P–H）的平均绝对误差

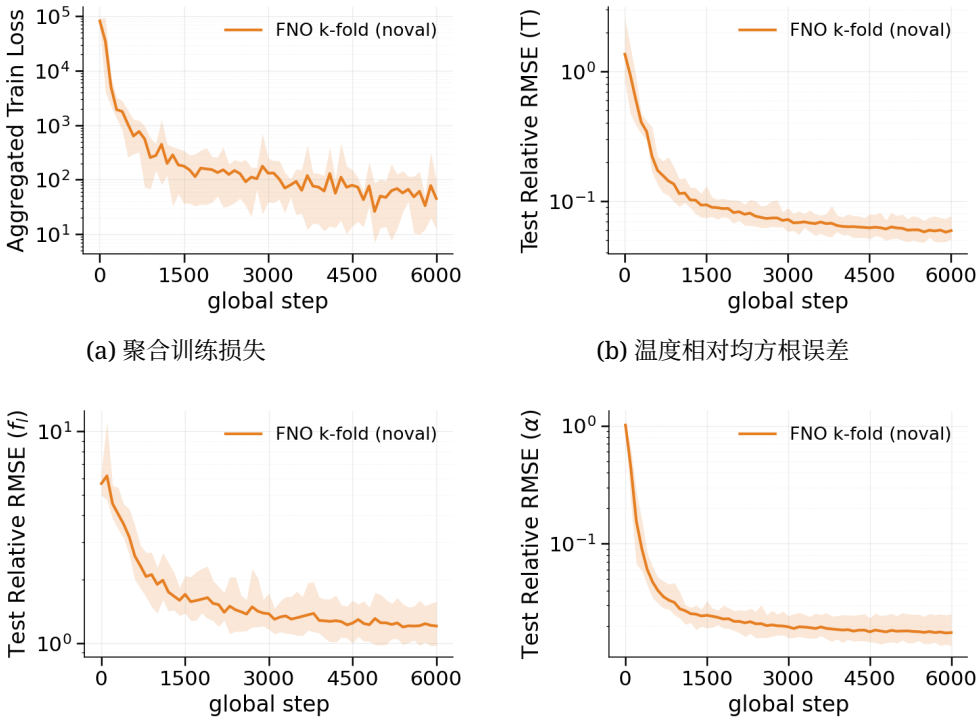
(b) α （P–V_{scan}）的平均绝对误差



(c) α （P–H）的交并比

(d) α （P–V_{scan}）的交并比

图11 工艺窗口内金属-气体界面（α）的分割性能。上排：平均绝对误差。下排：在$\alpha \geq 0.5$处进行阈值化后计算的交并比。结果以两种参数化方式展示：**(**P，H**)**（左）和(**P，V_{scan}**)**（右）



(a) 聚合训练损失

(b) 温度相对均方根误差

(c) 液相分数 (f_l) 相对均方根误差

(d) 固相分数 (α) 相对均方根误差

图 12 LP-FNO 在省略验证集模拟的数据集上的训练 k 折收敛指标。所有输出在训练过程中均呈现出一致的收敛趋势

表 6FNO架构和训练超参数

类别	参数	数值
FNO encoder		
	空间维度	3
	FNO层数	3
	每个维度的傅里叶模态数	[25, 20, 15]
	填充	9（常数）
	激活函数	GELU
	坐标特征	已启用
	输入变量	x, y, z, V_{scan}, P
Decoder (pointwise network)		
	架构	卷积全连接
	层数	3
	隐藏层宽度	32
	激活函数	SiLU
	权重归一化	启用
	跳跃连接	禁用
	输出变量	T
Loss aggregator (ReLoBRaLo)		
	α	0.95
	β	0.99
	τ	3.0
	ε	1×10^{-8}
Optimization		
	优化器	Lion
	学习率	6×10^{-5}
	β 系数	(0.9, 0.99)
	权重衰减	0
Learning-rate schedule		
	调度器	指数衰减
	衰减率	0.98
	衰减步数	100
Training setup		
	最大训练步数	6000
	梯度裁剪范数	0.5
	批量大小（训练／验证）	1 / 5