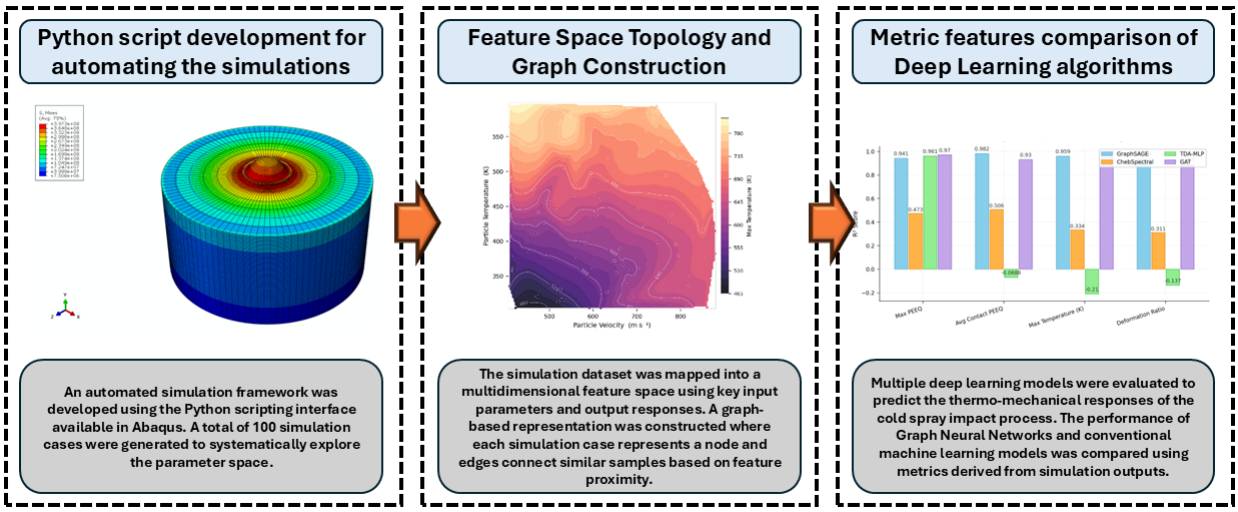
用于冷喷涂沉积工艺建模中热力学性能预测的几何与拓扑深度学习

Akshansh Mishra[1]

[1]米兰理工大学工业与信息工程学院，意大利米兰



摘要： 本研究提出了一种几何深度学习框架，利用有限元仿真数据预测冷喷涂颗粒冲击响应。我们通过自动化 Abaqus 仿真生成参数化数据集，覆盖颗粒速度、颗粒温度和摩擦系数的系统性取值范围，得到五个输出目标：最大等效塑性应变、平均接触塑性应变、最高温度、最大冯·米塞斯应力和变形比。我们实现并评估了四种新型算法，即 GraphSAGE 风格的归纳式图神经网络、切比雪夫谱图卷积网络、融入拓扑数据分析的多层感知机，以及几何注意力网络。我们将每个输入样本视为 k近邻特征空间图中的一个节点，使模型能够在训练过程中利用工艺条件之间的空间相似性。三维特征空间可视化和二维等高线投影证实，输入输出关系具有高度非线性，且主要由速度决定。定量评估表明，在大多数目标上，GraphSAGE 和 GAT 的 R^2 值均稳定超过 0.93；其中，GAT 在最大塑性应变预测上的表现最佳，R^2 达到 = 0.97。ChebSpectral 和 TDA-MLP 的表现则差得多，在若干目标上的 R^2 值为负。这些发现表明，基于空间图的邻域聚合是一种稳健且具有物理可解释性的代理建模策略，可用于冷喷涂工艺优化。

关键词：冷喷涂　　冲击力学、几何深度学习、图神经网络、有限元仿真

1. 引言

冷喷涂是一种固态沉积工艺，其中金属颗粒被加速至超音速并射向基体，在颗粒-基体界面处通过极端塑性变形而非熔化或熔合实现结合 [1-4]。自成为一种实用的涂层与增材制造技术以来，冷喷涂因能够沉积热敏材料，且不会引发相变、氧化或产生与热喷涂相当工艺相关的残余孔隙，而受到广泛关注

。沉积层的力学完整性在很大程度上取决于撞击事件期间形成的界面条件，而这些条件受到一组复杂且高度耦合的工艺参数支配，包括粒子撞击速度、接触时的颗粒温度，以及界面处的摩擦学条件。理解这些参数如何相互作用并决定撞击颗粒最终的变形状态、应力场和热响应，仍是推动冷喷涂迈向航空航天、生物医学和能源领域精密工程应用的一项根本挑战。

有限元建模一直是解析单粒子尺度冷喷涂撞击瞬态力学的主要研究工具 [5-7]。早期研究表明，结合得益于粒子外围的绝热剪切失稳；在该区域，局部热软化会暂时克服应变硬化，并促进紧密的金属间接触。改进后的计算研究引入了应变率相关本构模型、内聚区公式以及任意拉格朗日-欧拉框架，从而更准确地捕捉成功粒子黏附所特有的极端变形梯度和射流现象。尽管取得了这些进展，单次有限元仿真仍然计算成本高昂，而由速度、温度和摩擦定义的参数空间足够庞大，以至于基于穷举仿真的探索在实践中难以实现。这推动了人们对数据驱动代理模型的日益关注，这类模型能够快速近似从具有代表性的仿真数据集中学习到的输入输出关系。

近年来，应用于冷喷涂及更广泛冲击力学问题的机器学习方法取得了长足进展。基于回归的方法、人工神经网络和集成学习算法均已展现出根据工艺参数输入以合理精度预测宏观沉积结果的能力 [8-11]。然而，这些传统架构将每个仿真样本视为独立观测，忽略了占据输入参数空间相近区域的样本之间存在的几何关系。在响应随控制参数平滑且连续变化的物理系统中，特征空间中的邻近条件包含相互提供信息的上下文，而标准前馈架构无法加以利用。当训练数据稀疏且底层响应面呈非线性时，这一表征局限性尤为明显；对于覆盖整个运行范围的冷喷涂冲击力学而言，情况正是如此。

几何深度学习通过在图结构数据表示上进行操作，而非独立处理特征向量 [12-15]，为将关系信息和结构信息纳入学习过程提供了一个有原则的框架。图神经网络在连接相似节点的边之间传播信息，使每个样本都能够参考其在特征空间中的最近邻响应，从而捕捉逐点模型无法表示的局部几何规律性。图卷积的谱方法，包括对图拉普拉斯算子进行切比雪夫多项式近似，将这一能力扩展到频域，并为在不规则域上进行多尺度特征提取提供了具有理论依据的机制。拓扑数据分析则通过持久同调编码数据流形的全局形状属性，提供了互补的视角；它以能够反映点云在多个空间尺度上的连通性和结构的描述符，增强了局部邻域信息。

这些方法已应用于分子性质预测、流体动力学代理建模和结构力学问题，展现了它们在科学计算领域的广泛用途，但其在冷喷涂工艺预测中的潜力尚未得到探索。本研究通过构建一个参数化有限元仿真数据集，涵盖颗粒速度、温度和摩擦系数的系统性变化范围，并在所得数据上实现和评估四种几何深度学习架构，以弥补这一空白。本研究旨在确定哪种算法策略最能捕捉冷喷涂冲击力学特有的非线性耦合输入输出关系，并展示基于图的表示作为一种符合物理原理的归纳偏置，在固态沉积技术的工艺级代理建模中的价值。

2. 方法论

2.1. 本文采用的几何定义

图1展示了本研究采用的几何模型，该模型描述了单个金属球形颗粒撞击平坦圆柱表面的过程。这种配置常用于研究冷喷涂沉积机制。所提出的模型由两个主要部分组成：半径为 40 μm 的球形颗粒，以及半径为 250 μm、深度为 250 μm 的圆柱基体。这两个部分的几何形状均在 Abaqus 建模环境中采用草图与旋转方法生成。

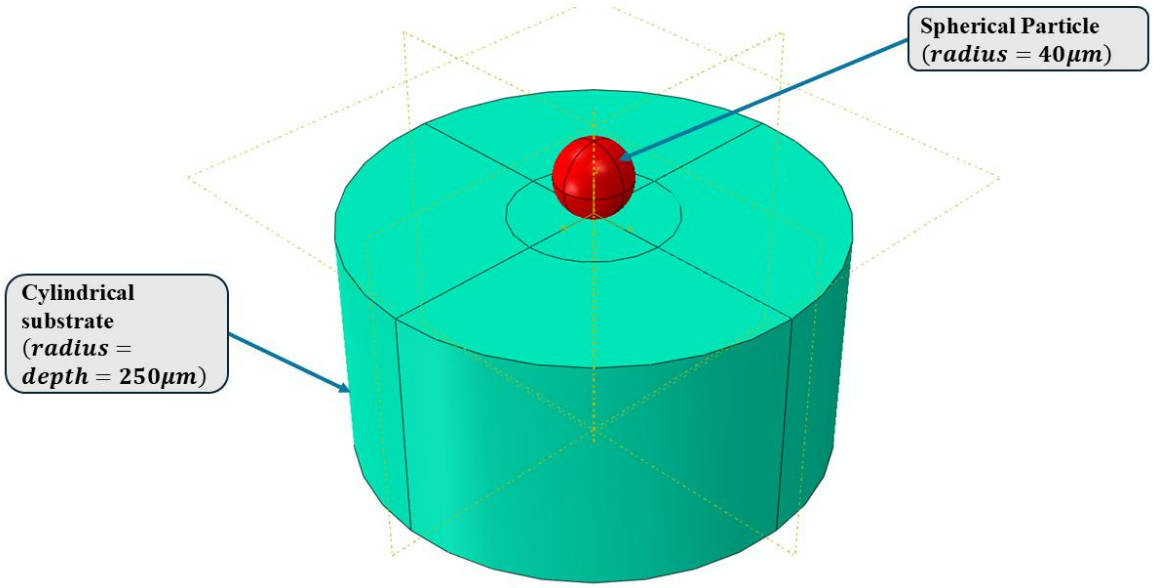


图1. 本文采用的冷喷涂冲击模型的几何构型。该模型由一个半径为 40 μm 的球形颗粒和一个半径及深度均为 250 μm 的圆柱基体组成。颗粒沿中心轴对齐，并沿竖直方向撞击基体，模拟冷喷涂工艺中的颗粒法向冲击。

颗粒位于基体表面上方，其下表面与冲击轴对齐。颗粒沿竖直方向平移一段等于其半径的距离，使其在冲击现象开始前恰好位于基体表面上方。冲击沿竖直方向发生，这代表球形颗粒法向入射至圆柱基体表面，这是单颗粒冷喷涂冲击研究中的典型假设。

2.2. 本文采用的材料模型

本文假设基体和颗粒均由铝制成，以模拟典型的冷喷涂沉积过程，即铝颗粒撞击铝基体。采用热力耦合本构框架对高速冲击过程中的材料行为进行建模，该框架考虑了弹性变形、塑性变形、应变率效应和温度演化。为准确捕捉颗粒冲击过程中极高应变率和剧烈塑性变形所导致的材料响应，必须采用率相关塑性模型。

材料的弹性行为由其剪切模量和密度定义，同时引入热导率和比热容等热属性，以表示过程中热量的产生与传递

冲击。塑性变形采用 Johnson–Cook本构模型进行模拟，该模型广泛用于包括冷喷涂、弹道冲击和爆炸载荷在内的高应变率变形过程。该模型考虑了材料的应变硬化、应变率敏感性和热软化。塑性变形的应变率依赖性通过 Johnson–Cook应变率相关公式纳入模型。材料模型还包含基于冲击波速度–颗粒速度（Us–Up）线性关系的状态方程（状态方程），以准确描述高速冲击过程中的压力波传播和可压缩性效应。该公式使模拟能够表征材料在极端载荷条件下的压力响应。塑性功转化为热量的过程也通过非弹性生热比例纳入模型，从而在变形过程中实现热力耦合。表1列出了本研究所用的材料属性。

表1. 模拟中使用的铝材料属性

属性	**符号**	**数值**	**Unit**
密度	ρ	2700	$kg\ m^{-3}$
剪切模量	G	27×109	Pa
热导率	κ	237.2	$W\ m^{-1}\ K^{-1}$
比热容	C_p	898.2	$J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
Johnson-Cook 屈服应力	A	148.4×106	Pa
Johnson-Cook 硬化常数	B	345.5×106	Pa
Johnson-Cook 硬化指数	n	0.183	-
应变率系数	C	0.001	-
热 so软化指数	m	0.895	-
熔化温度	T_m	916	K
参考温度	T_0	298	K
体声速（状态方程）	C_0	5386	米·秒⁻¹
雨贡纽斜率系数	S	1.339	-
格吕奈森参数	Γ_0	1.97	-

2.3. 本研究采用的网格划分策略

在本研究中，球形颗粒和圆柱基底均采用 Abaqus/Explicit 求解器提供的三维热力耦合实体单元进行离散。单元公式采用带温度自由度的减缩积分，以便在撞击事件期间同时求解机械场和热场。为准确捕捉冲击过程中产生的大塑性变形和应力梯度，球形颗粒采用相对精细的网格进行划分。颗粒域采用约 2.5 μm 的全局种子尺寸。 基体采用粗细网格区域相结合的方式进行划分，以兼顾计算效率和求解精度。基体主体区域采用约 35 μm 的全局网格尺寸，而在预期会出现较高应力和应变梯度的撞击区附近，则采用精细得多的网格，尺寸约为 3.5 μm。

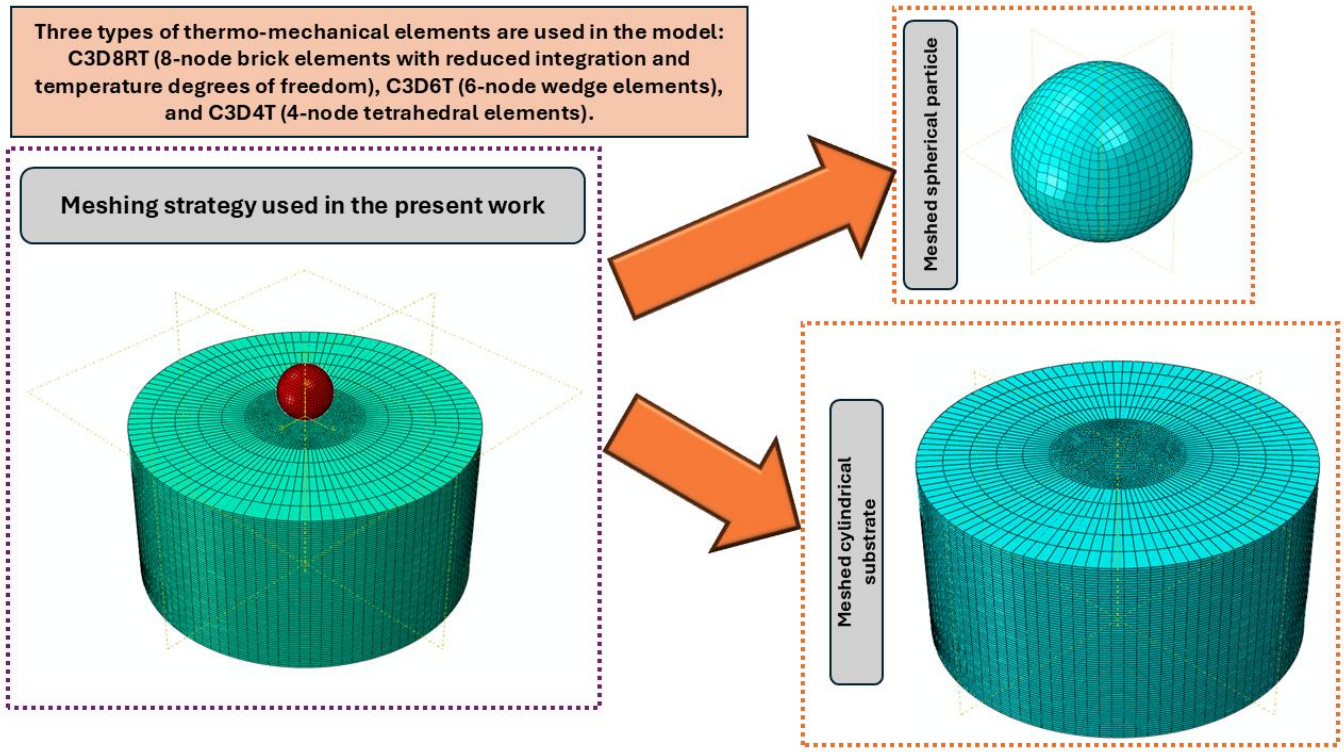


图 2. 数值模型采用的网格划分策略。球形颗粒和圆柱基底采用热力耦合单元进行离散，包括 C3D8RT（带减缩积分和温度自由度的 8 节点六面体单元）、C3D6T（6 节点楔形单元）和 C3D4T（4 节点四面体单元）。在颗粒–基体接触区域附近采用更精细的网格，以准确捕捉冲击过程中的高应力、高应变和温度梯度；远离撞击区则采用相对较粗的网格，以提高计算效率。

模型中使用了三种热力耦合单元：C3D8RT（带减缩积分和温度自由度的 8 节点六面体单元）、C3D6T（6 节点楔形单元）和 C3D4T（4 节点四面体单元）。C3D8RT 单元主要用于可以进行结构化网格划分的区域，而楔形单元和四面体单元则用于适应几何过渡并保持网格兼容性。

基于任意拉格朗日–欧拉（ALE） formulation 的自适应网格细化技术应用于颗粒和撞击区附近的基体区域，以进一步提高数值稳定性，并处理颗粒冲击过程中产生的极端变形。自适应网格划分过程可使网格在模拟过程中持续调整，从而减少单元畸变，并在整个高变形过程中保持单元质量。这种方法对于冷喷涂模拟尤为重要，因为大幅塑性变形和剧烈的接触相互作用可能导致网格畸变，并使模拟提前终止。

2.4. 自动化仿真框架、参数化研究与数据提取

我们利用 Abaqus 中提供的 Python 脚本接口开发了图3所示的自动化仿真框架，以高效执行大量冷喷涂撞击模拟。该框架能够自动完成整个仿真流程，包括模型生成、参数赋值、作业执行和后处理，无需人工干预。

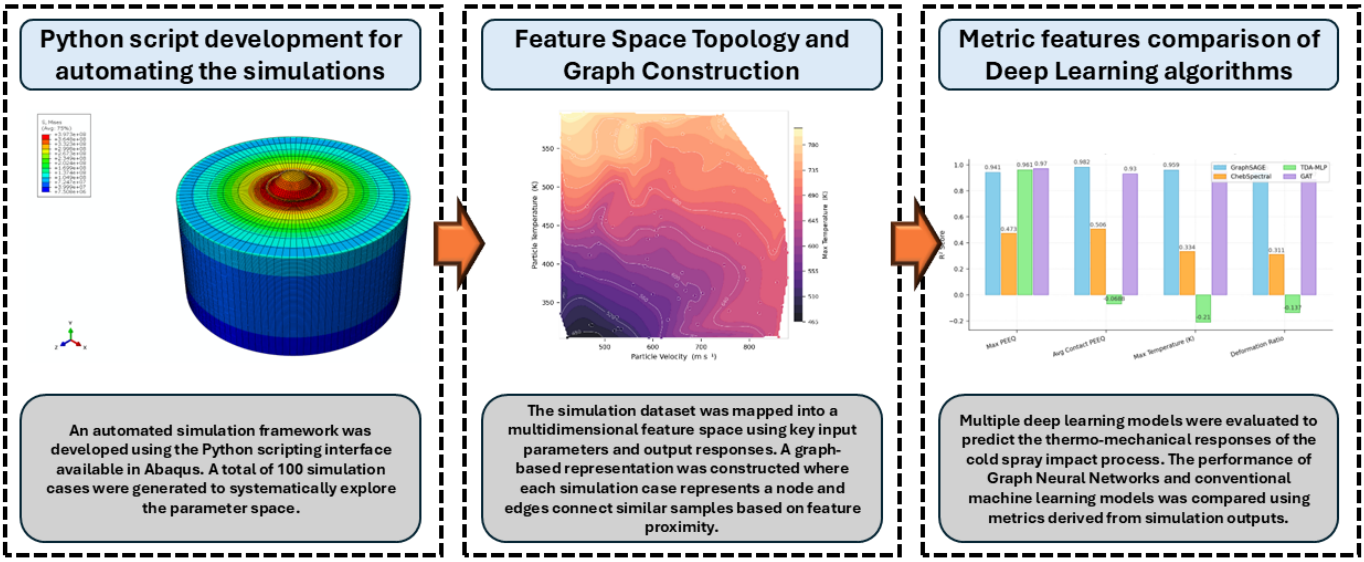


图3. 本研究采用的仿真–深度学习框架。我们在 Abaqus 中开发了一个自动化 Python 脚本框架，用于生成涵盖所选参数空间的冷喷涂颗粒撞击仿真数据集。随后，利用关键输入参数和输出响应将仿真数据映射到多维特征空间，并构建基于图的表示，其中节点代表仿真案例，边则体现样本之间的相似性关系。接着，使用根据仿真输出得出的指标评估多种深度学习模型，以检验其预测冷喷涂撞击过程热力学响应的能力。

仿真过程首先定义一组代表不同冷喷涂条件的输入参数。本研究中，如表2所示，我们改变了三个关键参数，即粒子撞击速度、颗粒温度以及颗粒–基体界面的摩擦系数。这些参数对冷喷涂工艺中的变形行为、结合机制和热响应起着重要作用。我们共生成了100个仿真案例，以系统地探索参数空间。

表2. 参数化仿真研究中使用的输入参数

参数	符号	范围	Unit	描述
颗粒速度	V	400-900	m s⁻¹	初始速度施加于颗粒
颗粒温度	T_p	300-600	K	初始温度颗粒的冲击前
摩擦系数	μ	0.10-0.50	-	库仑摩擦系数颗粒–基体界面

计算了多个性能指标，以表征颗粒冲击行为。这些指标包括最大等效塑性应变（PEEQ）、接触区域的平均塑性应变、冲击过程中达到的最高温度、最大 von Mises 应力，以及颗粒的变形比。变形比用于衡量颗粒压扁程度，其计算依据是颗粒相对于原始直径的最大向下位移

。所有提取的结果及相应的输入参数均存储在结构化数据集中，以供进一步分析。

2.5. 本研究中使用的几何深度学习算法

本研究实现了四种数据驱动模型，即 GraphSAGE、切比雪夫谱图神经网络、拓扑数据分析增强型多层感知机和几何注意力网络（GAT）。每个样本的输入特征向量定义为 $x_i \epsilon \mathrm{R}^d$，其中各特征分别对应颗粒速度、颗粒温度和摩擦系数。在归一化特征空间中构建了一个 k 近邻（k-NN）图，其中每个模拟案例均视为一个节点，边连接相邻样本。边权重通过高斯核计算，公式见方程 1。

$$w_{ij} = exp\left(-\frac{{d^2}_{ij}}{2\sigma^2}\right) \tag{1}$$

其中，d_{ij} 是节点i 与j之间的欧几里得距离，σ 是根据边距离中位数得出的尺度参数。

在 GraphSAGE 模型中，通过加权均值消息传递整合邻近节点的信息，从而更新节点表示。节点i 在第 $l+1$ 层的隐藏表示由方程 2 计算。

$$h_i{}^{(l+1)} = \sigma\left(W_s{}^{(l)} h_i{}^{(l)} + W_n{}^{(l)} AGG\left(\left\{h_j{}^{(l)} : j \epsilon \aleph(i)\right\}\right)\right) \tag{2}$$

其中，$\mathrm{h}_i{}^{(l)}$ 是第l层的节点嵌入，$\aleph(i)$表示节点i的邻域，$W_s{}^{(l)}$ 和$W_n{}^{(l)}$ 是可训练权重指标，$\sigma(\,.\,)$是非线性激活函数。该模型能够捕获特征空间图中的局部几何关系。

切比雪夫谱图神经网络使用图拉普拉斯算子的切比雪夫多项式近似，在谱域中执行图卷积。卷积运算通过公式 3 计算。

$$g_\theta(L)x = \sum_{k=0}^{K-1} \theta_k T_k(L)x \tag{3}$$

其中，L 是归一化图拉普拉斯算子，$T_k(L)$是k阶切比雪夫多项式，θ_k 是可学习系数。该公式无需对拉普拉斯算子进行特征分解，即可在图上高效地进行多尺度特征传播。

在拓扑数据分析增强型多层感知机中，原始输入特征通过数据集中成对距离结构导出的拓扑描述符得到增强。这些描述符包括受持久同调启发的连通性和密度相关代理指标，增强后的特征向量随后输入通过公式 4 计算的多层感知机。

$$h^{(l+1)} = \emptyset\left(W^{(l)} h^{(l)} + b^{(l)}\right) \tag{4}$$

其中，$W^{(l)}$ 和$b^{(l)}$ 是可学习的权重和偏置，$\emptyset(\,.\,)$表示非线性激活函数。该方法将原始工艺参数与感知拓扑的描述符相结合，以提升预测能力。

几何注意力网络（GAT）使用注意力机制，在消息传递过程中为相邻节点赋予不同的重要性。连接节点i 和 j 之间的注意力系数采用公式5计算。

$$\alpha_{ij} = \frac{exp\left(LeakyReLU\left(a^T[Wh_i \| Wh_j]\right)\right)}{\sum_{k \in \aleph(i)} exp\left(LeakyReLU\left(a^T[Wh_i \| Wh_k]\right)\right)} \tag{5}$$

其中，W 为可学习变换矩阵，a 为注意力向量，|| 表示拼接。在当前实现中，这些注意力分数还会受到由几何距离导出的边权重进一步调制，使网络能够在特征空间图中突出更相关的相邻节点。模型采用公式6进行训练，以最小化预测目标值与实际目标值之间的均方误差（MSE）。

$$MSE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{y}_i)^2 \tag{6}$$

并使用决定系数 R^2、平均绝对误差（MAE）和均方误差（MSE）评估其预测性能。该框架可对基于图的学习方法与拓扑增强学习方法进行比较，以预测冷喷涂工艺中的热力学响应。

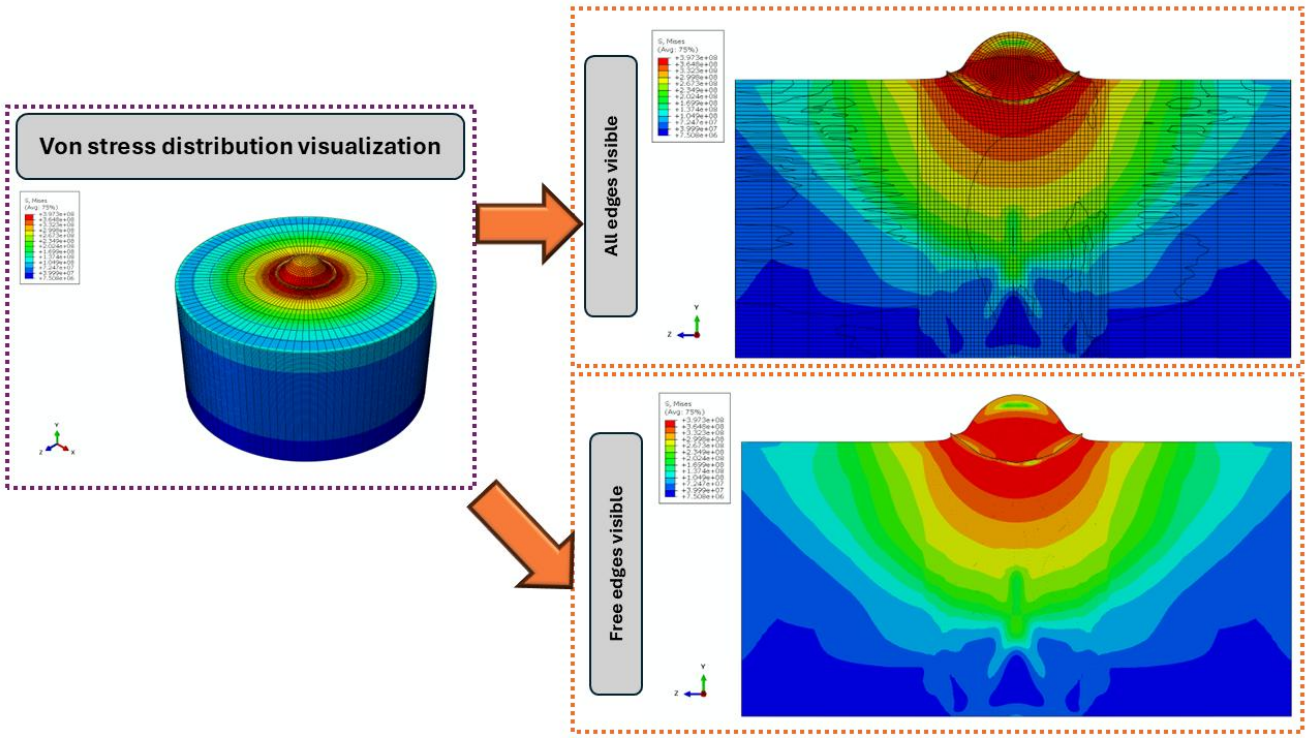
3. 结果与讨论

3.1. 有限元分析结果

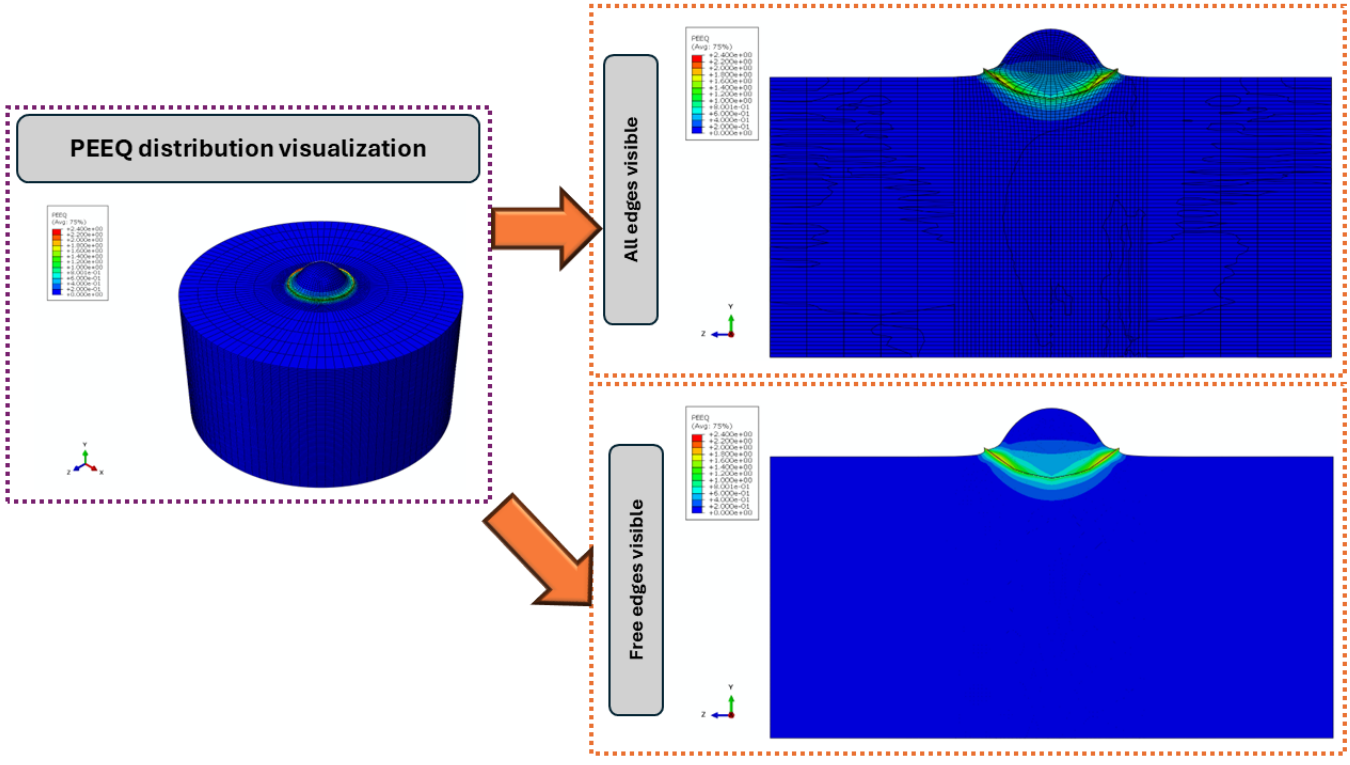
图 4a 展示了颗粒和基体中的冯·米塞斯应力分布，显示撞击界面处存在高度集中的应力场，并以典型的蝴蝶形分布向外辐射。截面图证实，峰值应力局限于变形颗粒及其紧邻的近表层区域，而周围基体中的应力值相对较低，这与冷喷涂冲击力学高度局部化的特性一致。

图 4b 展示了等效塑性应变（PEEQ）分布，其中剧烈塑性变形几乎完全局限于颗粒以及基体表面的狭窄接触区。基体的大部分体积区域的 PEEQ 接近于零，这表明塑性变形不会深入基体内部，且结合主要由粒子外围的极端局部应变所决定，而非块体材料屈服。

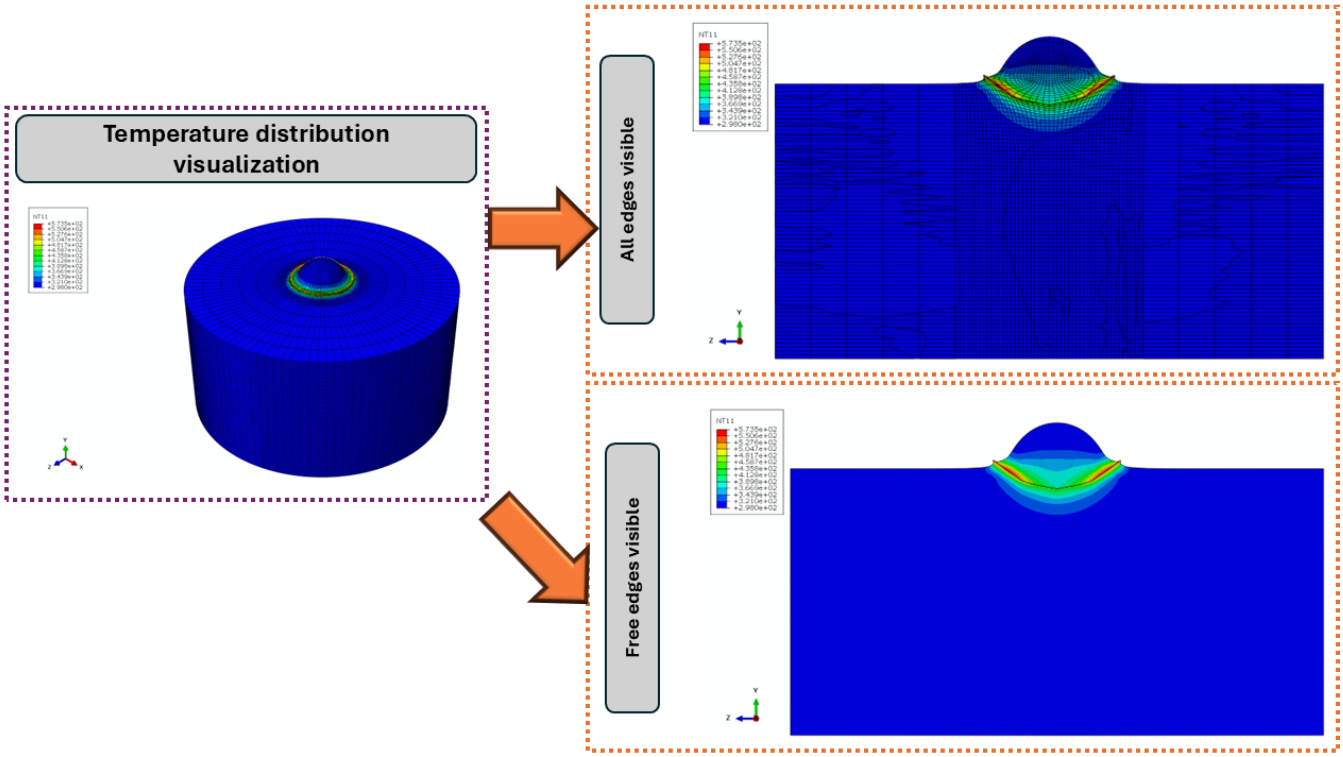
图 4c 显示了撞击峰值时刻的节点温度场，其中升高的温度仅限于颗粒与基体之间的薄界面层。温度梯度沿各个方向远离接触区后均迅速衰减，表明绝热剪切生热具有高度局部性和瞬态性，这支持了既有认识：界面处的热软化，而非整体熔化，是促进冷喷涂沉积过程中粒子黏附的主要热驱动机制。


Von stress distribution visualization
All edges visible
Free edges visible

a)


PEEQ distribution visualization
All edges visible
Free edges visible

b)

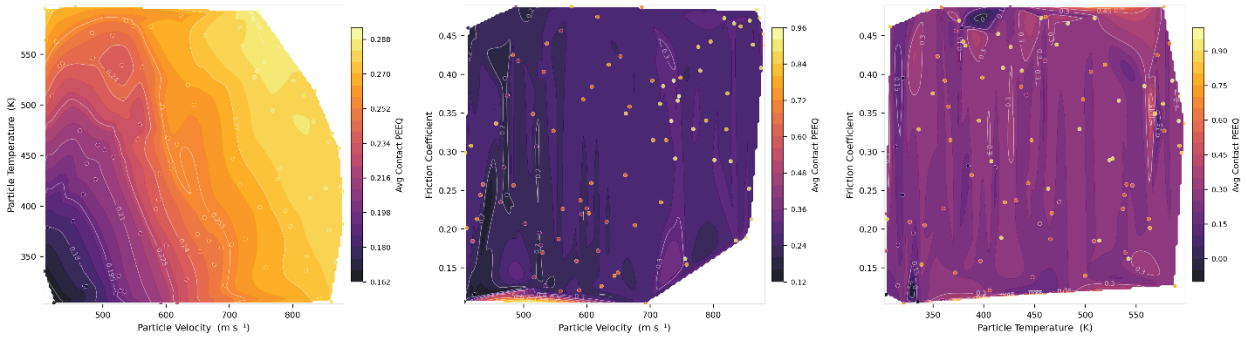


c)

图 4. 冷喷涂撞击事件的有限元仿真等值云图，展示了在显示全部边和显示自由边两种条件下的横截面分布：(a) 冯·米塞斯应力分布显示，颗粒-基体界面处存在集中的应力场，并以蝴蝶形分布向外传播至基体中；(b) 等效塑性应变（等效塑性应变）分布证实，剧烈塑性变形局限于受撞击颗粒及其紧邻接触区，而周围基体基本未发生变形；(c) 节点温度分布表明，绝热剪切生热局限于接触点处的薄界面层，并向各个方向迅速衰减。

3.2. 特征空间拓扑与图构建

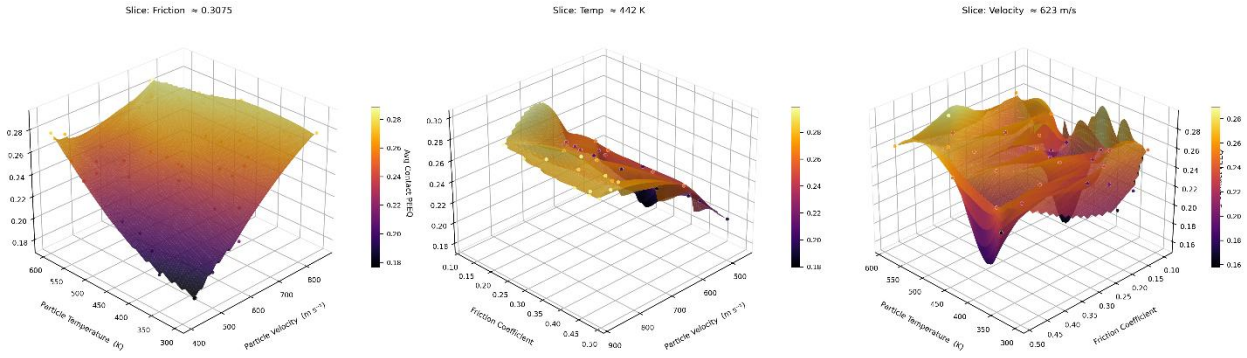
图5a（速度 × 温度）呈现出最清晰的响应：当速度超过 ~650 m s^{-1} 时，等效塑性应变急剧且单调增加，而在较高速度下，温度则起到次要的放大作用。平滑且分辨良好的梯度证实，这两个参数共同构成冷喷涂中塑性变形的主要驱动因素。图5b（速度 × 摩擦系数）呈现出明显的垂直带状分布，表明无论摩擦系数如何，等效塑性应变几乎完全由颗粒速度决定，等值线几乎与摩擦轴平行。高速度下孤立的高值点表明，在特定条件下摩擦可能会短暂放大变形，但这一影响在整个数据集中并不一致。图5c（温度 × 摩擦系数）的等高线形态最不规则，色标范围也明显更宽，其中包含低于零的插值伪影（–4.5），反映出投影时去除速度后数据覆盖稀疏。该面板表明，温度或摩擦系数单独都不足以充分解释等效塑性应变，进一步说明必须同时捕捉全部三个输入维度。



a) b) c)

图5. 三个两两输入组合下最大等效塑性应变（PEEQ）的二维等高线投影：(a) 颗粒速度与颗粒温度，(b) 颗粒速度与摩擦系数，(c) 颗粒温度与摩擦系数。填充等高线表示插值PEEQ响应面（三次网格数据插值），白色等值线表示恒定应变边界，叠加的散点则对应实际仿真样本，并按其PEEQ值着色。从(a)到(c)，等值线规则性逐渐降低，这反映出排除颗粒速度后，各输入对的解释能力随之减弱，凸显了变形响应固有的三维非线性特征。

图6a（摩擦系数 ≈ 0.31，速度 × 温度切片）呈现出最平滑、最符合物理规律的曲面，形成清晰的马鞍状几何形态：平均接触PEEQ随速度增加而升高，向中等温度（~400–450 K）区域降低，随后在更高温度下回升。该曲面形态规整，与插值网格相比几乎没有散点偏差，这证实在摩擦系数固定时，速度–温度相互作用以结构清晰且可预测的方式控制接触变形。图6b（温度 ≈ 442 K，速度 × 摩擦切片）呈现总体上升的曲面，其中速度是主导轴，但在高速度（>750 m s^{-1}）下，沿摩擦方向出现轻微起伏。曲面整体仍较为连贯，但在低摩擦、高速度附近的后缘开始出现轻微不规则，这表明在动能较高时，摩擦系数开始以不可忽略的方式调节接触变形。图6c（速度 ≈ 623 m s^{-1}，温度 × 摩擦切片）是地形最复杂的面板，在温度–摩擦平面上呈现明显的脊线、局部极小值和表面起伏。这种粗糙形态与固定速度后该投影中的稀疏采样相符，同时也从物理上表明，在中等速度下，热学条件与摩擦学条件的组合会产生相互竞争的变形机制，既非完全由动能驱动，也非完全由热效应驱动。

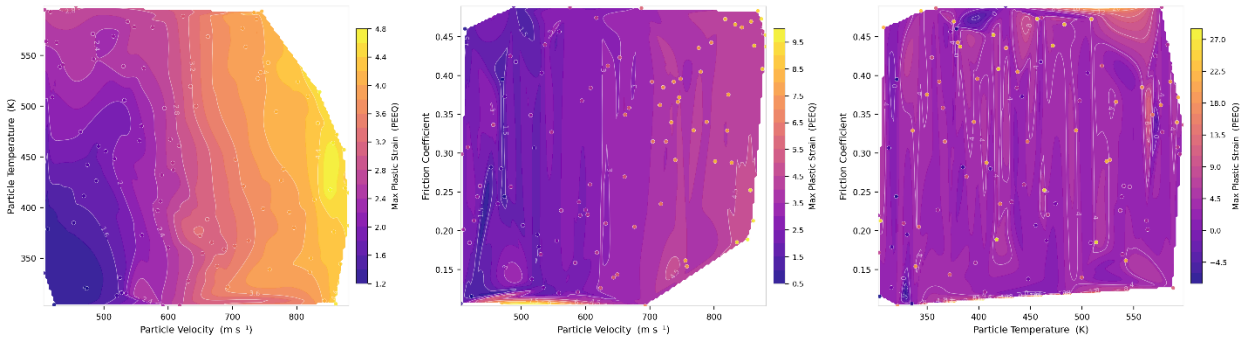


a) b) c)

图5. 平均接触等效塑性应变（平均接触PEEQ）的三维响应面：将一个输入参数固定在接近其中位数的值，并对其余两个参数进行扫描：(a) 将摩擦系数固定在约0.31，扫描颗粒速度和温度；(b) 将颗粒温度固定在约442 K，扫描颗粒

速度和摩擦系数；以及 (c) 将颗粒速度固定在约 623 m s⁻1，扫描颗粒温度和摩擦系数。曲面通过在结构化网格上进行三次插值生成，并叠加代表实际仿真样本的散点。从 (a) 到 (c)，表面起伏逐渐增大，反映出随着主要输入参数颗粒速度逐步受到约束，响应的平滑性随之降低；这揭示了接触变形对完整三维输入空间的耦合非线性依赖。

图 7a（速度 × 温度）呈现出最清晰且最具物理可解释性的响应：当速度超过约 650 m s⁻1 后，等效塑性应变急剧且单调地增加，而在较高速度下，颗粒温度起到次要的增强作用。高速度区域平滑且分辨清晰的梯度以及密集的等值线证实，这两个参数共同构成冷喷涂中最大塑性变形的主要驱动因素；在整个参数范围内，速度的动能贡献均超过热贡献。图 7b（速度 × 摩擦系数）显示，等高线场中存在明显的垂直带状分布，表明最大等效塑性应变几乎完全由颗粒速度决定，而不受摩擦系数影响，等值线几乎与摩擦轴平行。高速度下聚集的孤立高值散点表明，在特定局部条件下，摩擦可能会短暂地放大变形，但这一效应在整个数据集中缺乏系统一致性，也未在插值曲面上形成连贯的梯度。图 7c（温度 × 摩擦系数）的等高线形态在三种投影中最不规则，色标范围较宽，且包含低于零的、物理上不合理的插值伪影；这反映出投影去除速度后，数据覆盖稀疏且分布不均。该图表明，脱离速度单独考察颗粒温度或摩擦系数，均不足以解释最大等效塑性应变；这进一步证实，必须同时捕捉全部三个输入维度，并凸显了采用能够覆盖完整特征空间的非线性、基于图的建模方法的必要性。

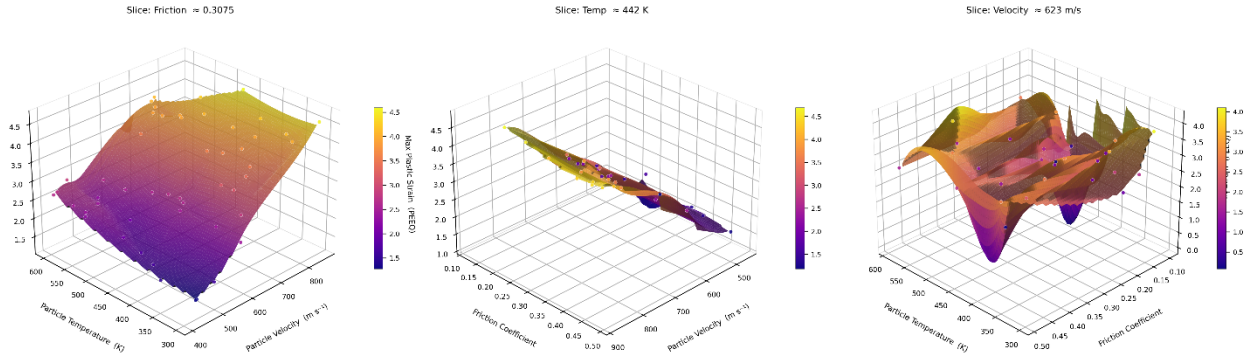


a) b) c)

图 7. 最大等效塑性应变（PEEQ）在三种两两输入组合下的二维等高线投影：(a) 颗粒速度与颗粒温度，(b) 颗粒速度与摩擦系数，以及 (c) 颗粒温度与摩擦系数。填充等高线表示通过三次 griddata 插值获得的插值PEEQ响应面，白色等值线表示恒定应变边界，叠加的散点则对应实际仿真样本，并按各自的 PEEQ 值着色。从 (a) 到 (c)，等值线规则性逐渐降低，这反映出排除颗粒速度后，各输入对的解释能力随之减弱，凸显了塑性变形响应本质上具有三维和非线性特征，也说明有必要采用能够同时解析完整输入空间的基于图的学习框架。

图 8a（摩擦 ≈ 0.31、速度 × 温度切片）呈现出最平滑、最规整的曲面，最大等效塑性应变随颗粒速度增加而近乎线性、单调上升，而温度则沿正交轴形成平缓的调节梯度。插值

网格与该面板中叠加的散点高度吻合，证实在摩擦系数固定时，速度和温度输入共同决定了连贯且可预测的变形分布，未能解释的方差极小。图8b（温度 ≈ 442 K、速度 × 摩擦切片）显示，曲面沿速度轴陡然上升，而在低至中等速度范围内，沿摩擦维度则相对平坦。当速度超过约 750 m s⁻1 时，曲面的后缘开始弯曲并变窄，这表明在高动能与低摩擦值并存的情况下，可用数据变得稀疏；同时，摩擦系数仅在这些极端条件下才开始产生不可忽视的次级影响。图8c（速度 ≈ 623 m s⁻1、温度 × 摩擦切片）是地形最复杂的面板，其特征是在温度与摩擦平面上分布着尖锐的脊线、深邃的局部极小值以及显著的表面起伏。这种不规则几何形态既反映了该投影中的数据密度较低，也体现了中等速度下出现的、相互竞争的变形机制：此时动能驱动力和热驱动力均未完全占据主导地位，因此对温度和摩擦系数的变化会产生敏感且高度局部化的响应。

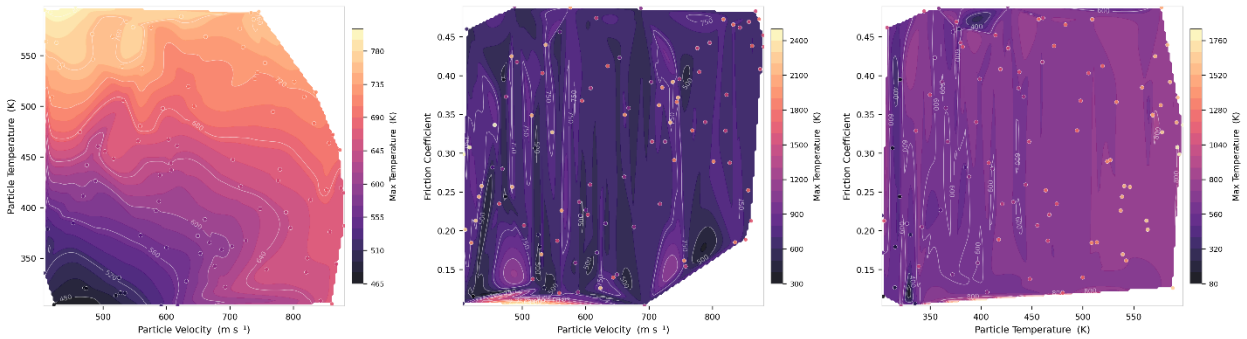


a) b) c)

图8. 将一个输入参数固定在接近其中位数的值，并扫描其余两个参数，得到的最大等效塑性应变（PEEQ）三维响应面：(a) 将摩擦系数固定在约 0.31，扫描颗粒速度和温度；(b) 将颗粒温度固定在约 442 K，扫描颗粒速度和摩擦系数；(c) 将颗粒速度固定在约 623 m s⁻1，扫描颗粒温度和摩擦系数。曲面通过在结构化网格上进行三次插值生成，叠加的散点代表实际仿真样本，其颜色对应各自的 PEEQ 值。从 (a) 中平滑且单调上升的曲面，逐渐转变为 (c) 中愈发起伏且局部不规则的几何形态，这反映出当主导工艺参数——颗粒速度——保持不变时，最大塑性应变响应的规律性逐渐减弱，并显露出中等动能条件下颗粒温度与摩擦系数之间复杂的耦合作用。

图9a（速度 × 温度）呈现出整体平滑、逐渐上升的响应；随着颗粒速度和颗粒温度升高，最高温度持续上升。参数空间内的等高线梯度较为均匀，但在中等速度范围（约 550 至 650 m s⁻1）附近略有起伏，表明热响应与输入之间的线性耦合在此过渡区间有所减弱。该图整体规律性良好，说明速度和温度输入共同构成了对冲击过程中产生的最高热场一种物理一致且条件良好的描述。图9b（速度 × 摩擦系数）在三个投影中呈现出最严重的不规则性，色标范围延伸至约 2400 K，高温散点之间夹杂着深色的垂直通道，其中插值结果异常偏低。这种极大的离散程度和不规则的等高线拓扑表明，该投影平面中的数据稀疏且分布不均，导致严重的插值不稳定性，而非真实的物理响应。散点本身的颜色大体一致，说明底层数据在物理上合理，但当速度和摩擦

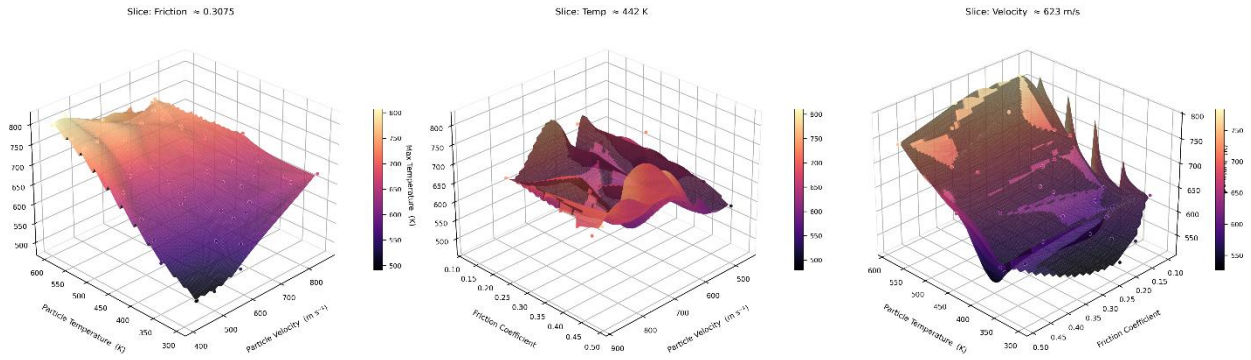
被单独考虑时，数据密度不足以支持稳定的表面重建。图9c（温度 × 摩擦系数）同样呈现垂直带状分布和较宽的色标范围，但伪影程度略低于图9b。投影的大部分区域仍以均匀的深色为主，较高的温度值集中在边界处，这反映出移除速度的动能贡献后，仅凭温度和摩擦输入难以充分解析最高温度。



a) b) c)

图9. 三种两两输入组合下最高温度（K）的二维等高线投影：(a) 颗粒速度与颗粒温度，(b) 颗粒速度与摩擦系数，以及 (c) 颗粒温度与摩擦系数。填充等高线表示通过三次 griddata 插值得到的插值最高温度响应面，白色等值线表示恒定温度边界，叠加的散点则对应实际仿真样本，其颜色表示各自的最高温度值。(a) 中观察到的规则梯度在 (b) 和 (c) 中逐渐变差，因为颗粒速度未被纳入投影平面；数据稀疏区域的插值不稳定性导致色标范围大幅扩大。这证实，最高冲击温度主要受速度控制，只有同时考虑全部三个输入维度，才能忠实捕捉其响应拓扑。

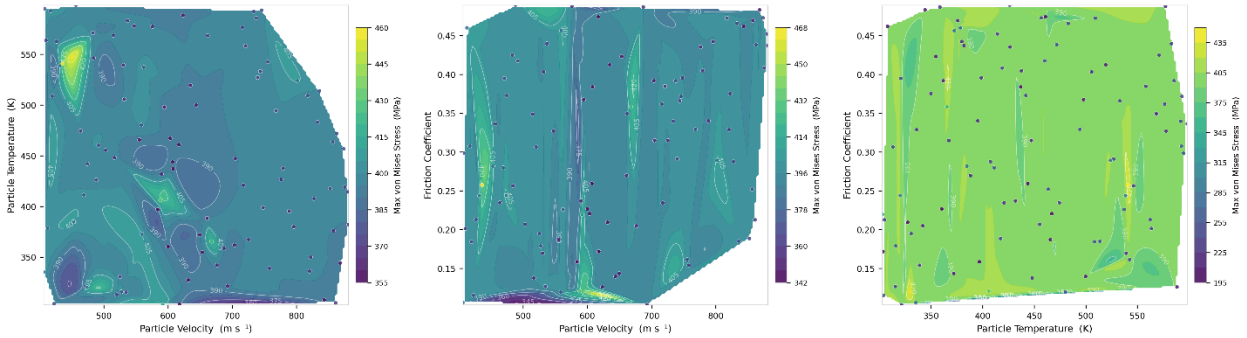
图10a（摩擦系数 ≈ 0.31、速度 × 温度切片）在三个面板中呈现出最规则且最具物理可解释性的曲面：随着颗粒速度增加，最高温度平滑、单调上升，而颗粒温度则沿正交轴产生次级叠加梯度。在整个扫描范围内，插值网格与叠加散点之间高度吻合，这表明在摩擦系数固定时，热响应场具有良好的条件性，并以直接且可预测的方式受综合动能和热输入控制。图10b（温度 ≈ 442 K、速度 × 摩擦切片）表现出相当复杂的曲面，在速度—摩擦平面上分布着多处起伏、局部脊线和凹陷谷地。尽管最高温度随速度增加的总体趋势得以保留，但曲面形态受到明显振荡的干扰，尤其是在约 550 至 700 m s^{-}1 的中等速度范围内更为突出。这表明，在颗粒温度固定时，摩擦系数与速度之间以空间上不一致的方式相互作用，而三次插值难以利用现有数据密度对其进行解析。图10c（速度 ≈ 623 m s^{-}1、温度 × 摩擦切片）在三个面板中呈现出最严重的曲面退化，其特征是温度—摩擦平面上出现尖锐的不连续脊线、突兀的阶梯状转变，以及近乎垂直的曲面折叠区域。这种行为反映出，当速度固定在中等值时，潜在的平滑趋势几乎完全缺失；热响应对其余两个输入的微小变化变得高度敏感，在当前数据稀疏性水平下，仅通过插值实际上无法解析。



a) b) c)

图10。 通过将一个输入参数固定在接近其中位数的值，并扫描其余两个参数，得到的最高温度（K）三维响应面：(a) 将摩擦系数固定在约 0.31，扫描颗粒速度和颗粒温度；(b) 将颗粒温度固定在约 442 K，扫描颗粒速度和摩擦系数；(c) 将颗粒速度固定在约 623 m s−1，扫描颗粒温度和摩擦系数。曲面通过在结构化网格上进行三次插值得到，并叠加散点以表示实际仿真样本，散点颜色对应其最高温度值。(a) 中观察到的平滑单调曲面，在 (b) 和 (c) 中逐渐转变为起伏更明显、地形更不规则的几何形态；这反映出随着颗粒速度这一主导控制参数从扫描空间中移除，并凸显颗粒温度与摩擦系数之间次级耦合交互作用，插值热响应的不稳定性逐渐增强。

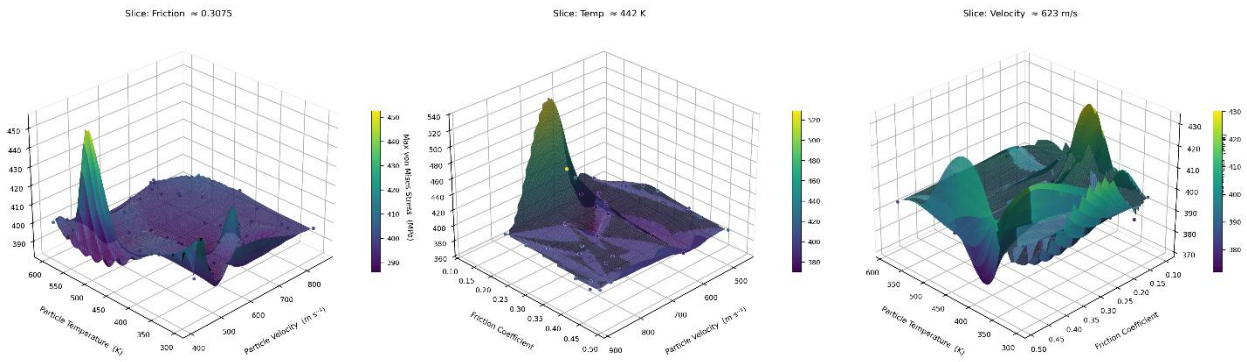
图 11a（速度 × 温度）揭示出空间上复杂且非单调的响应：最大冯·米塞斯应力在中等速度范围（约 580 至 650 m s−1）附近、颗粒温度约为 550 K 时呈现局部高值集中，而不是随任一输入均匀增加。参数空间中存在闭合等高线环，以及交替分布的高、低应力区域，表明冯·米塞斯应力响应受相互竞争的机制控制：速度增加同时驱动变形和软化，从而形成难以用简单参数关系描述的复杂景观。图 11b（速度 × 摩擦系数）呈现出与速度主导作用一致的中等程度垂直带状分布，但其横向变化明显大于等效塑性应变对应投影中的变化，这表明摩擦系数对应力的次级影响比对塑性应变的影响更为显著。在约 580 至 620 m s−1 范围内、跨越多个摩擦水平可见一条应力升高的窄带，进一步证实存在一个过渡速度区间，在该区间内，应力状态对接触界面上占主导地位的摩擦学条件尤其敏感。图 11c（温度 × 摩擦系数）呈现出三个面板中最宽且分布最均匀的颜色条范围，约跨越 195 至 435 MPa；其中包含大面积连续分布的中间应力值区域，以及散布的局部极值。与相应的等效塑性应变和温度投影相比，该面板中的等高线模式相对弥散且结构较弱，表明冯·米塞斯应力对三个输入均具有较为分散的敏感性，不太受单一参数支配，因此成为最难仅通过双变量投影解析的输出。



a) b) c)

图 11. 三组两两输入组合下最大冯·米塞斯应力（MPa）的二维等高线投影：(a) 颗粒速度与颗粒温度，(b) 颗粒速度与摩擦系数，以及 (c) 颗粒温度与摩擦系数。填充等高线表示通过三次 griddata 插值得到的插值应力响应面，白色等值线表示恒定应力边界，叠加的散点对应实际仿真样本，并根据各自的冯·米塞斯应力值着色。

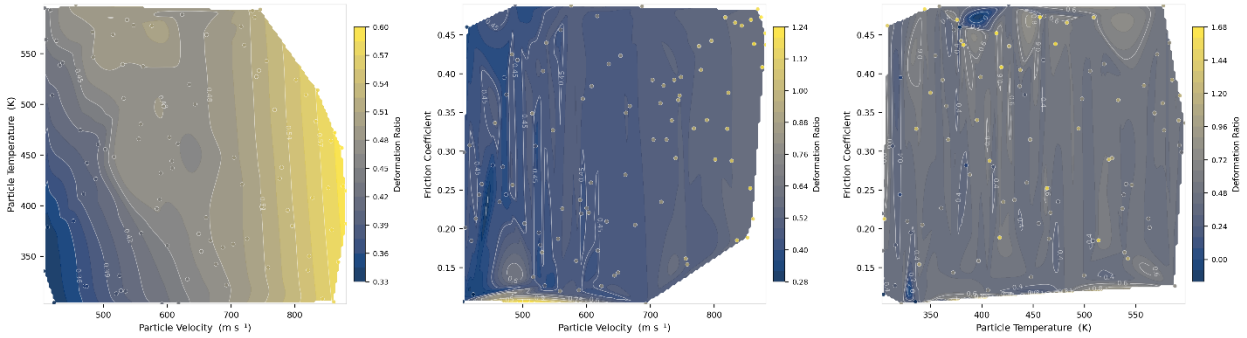
图 12a（摩擦 ≈ 0.31，速度 × 温度切片）与其他输出目标对应的曲面截然不同，其特征是在约 420 MPa 的相对平坦平台上方，出现一个突出而尖锐的局部应力峰值。这个孤立的尖峰集中在较低速度下约 450 至 500 K 的中间颗粒温度附近，表明特定热力学与动力学条件下出现了高度局部化的应力集中，而非平滑单调趋势的一部分；它与周围曲面相互孤立，说明对应于一个狭窄的参数区间，在该区间内，变形硬化暂时超过了热软化。图 12b（温度 ≈ 442 K，速度 × 摩擦切片）呈现三个面板中最显著的表面几何形态，其特征是在约 600 m s⁻1 的中等速度和约 0.15 至 0.20 的低摩擦系数下，出现一个明显的中心峰值，达到约 540 MPa，随后向各个方向急剧下降。这个尖锐峰顶及其周围的谷地结构证实，在颗粒温度固定时，速度与摩擦空间的组合存在一个明确的应力最大值，且对任一输入的微小扰动都高度敏感。这种行为符合过渡冲击状态：材料在屈服前短暂承受最大弹性应力。图 12c（速度 ≈ 623 m s⁻1，温度 × 摩擦切片）呈现出纹理丰富的褶皱表面，在温度与摩擦平面上分布着多个相互竞争的峰值、脊线和凹陷；在输入空间相对较小的区域内，应力值覆盖了整个颜色条范围，约为 370 至 430 MPa。该面板的地形密集且不规则，比其他输出目标对应的任何切片都更为复杂，这证实在中等速度下，冯·米塞斯应力响应对颗粒温度与摩擦系数的精确组合极其敏感，不存在占主导地位的梯度方向，高应力区域与低应力区域之间也没有平滑过渡。



a) b) c)

图12. 通过将一个输入参数固定在接近其中位数的值，并扫描其余两个参数，得到的最大冯·米塞斯应力（MPa）三维响应面：(a) 将摩擦系数固定在约 0.31，扫描颗粒速度和颗粒温度；(b) 将颗粒温度固定在约 442 K，扫描颗粒速度和摩擦系数；(c) 将颗粒速度固定在约 623 m s^{-}1，扫描颗粒温度和摩擦系数。曲面通过在结构化网格上进行三次插值生成，并叠加散点表示实际仿真样本，散点颜色对应其冯·米塞斯应力值。与其他输出目标不同，这三个面板均呈现出明显的局部峰值和不规则的曲面形貌，而非平滑的单调趋势；这反映了变形硬化与热软化的共同作用，使应力响应在整个输入空间内高度敏感且呈非单调变化。

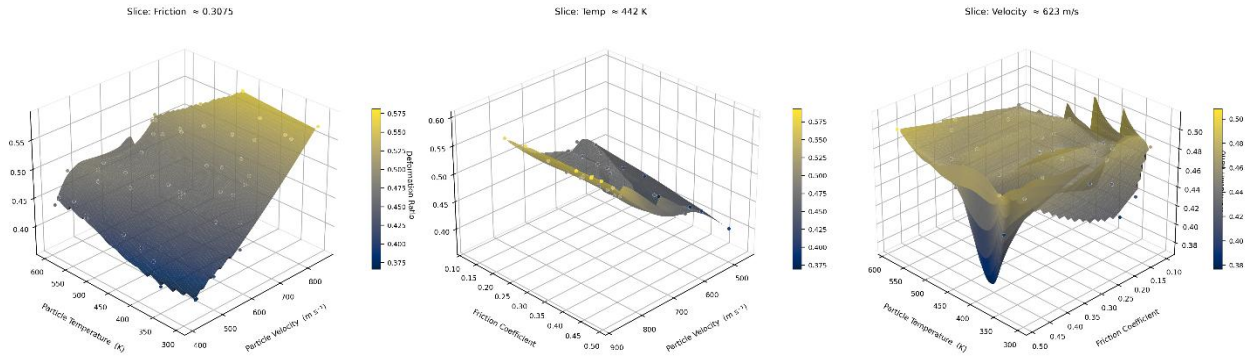
图13a（速度 × 温度）呈现出平滑且结构良好的响应：变形比随颗粒速度稳步单调增加，而颗粒温度沿正交轴产生的调节作用则相对较小。参数空间大部分区域内等值线间距较宽且近乎垂直，这证实速度是主要控制变量；变形比从低到高逐步变化，没有突然的不连续现象。这表明在典型冷喷涂工况下，颗粒冲击时的几何变形是动能输入的适定函数。图13b（速度 × 摩擦系数）呈现出强烈的垂直带状分布，与对应的等效塑性应变（PEEQ）投影相似；等值线几乎完全平行于摩擦轴，变形比梯度则几乎完全沿速度方向分布。颜色条范围较宽，最高约为 1.24，这一范围是由聚集在高速度区域的孤立高值散点所致；这进一步表明，摩擦系数对颗粒变形几何形态几乎没有系统性影响，而投影右侧边界的高值离群点代表的是局部条件，并非普遍的摩擦驱动趋势。图13c（温度 × 摩擦系数）呈现出三个面板中最弱且特征最不明显的等值线结构：在投影平面的大部分区域，插值曲面在较低变形比数值附近几乎保持均匀，而孤立的高值散点分布其间，没有明显的空间规律。颜色条范围扩展至约 1.68，完全是由边界插值伪影造成的，并非物理变化。该面板中看不出任何明显的梯度方向，这证实与本研究的其他输出目标相比，变形比主要由颗粒速度决定；若不考虑速度，则其基本不受温度和摩擦系数组合影响。



a) b) c)

图13. 变形比在三组两两输入组合下的二维等高线投影：(a) 颗粒速度与颗粒温度，(b) 颗粒速度与摩擦系数，以及 (c) 颗粒温度与摩擦系数。填充等高线表示通过三次网格数据插值获得的插值变形比响应面，白色等值线表示变形边界保持不变，叠加的散点则对应实际仿真样本，其颜色表示各自的变形比值。(a) 和 (b) 中等值线近乎垂直的走向及平滑的梯度结构证实，变形比主要受颗粒速度支配；而 (c) 中缺乏结构特征的曲面表明，温度和摩擦系数对这一输出的独立解释能力可以忽略，因此，在本研究考察的五种输出中，变形比是动力学主导性最强、参数集中度最高的目标。

图14a（摩擦 ≈ 0.31、速度 × 温度切片）在该切片条件下的五个输出目标中呈现出最平滑且几何形态最规整的曲面，表现为一个宽阔、缓慢倾斜的平面；随着颗粒速度增加，该平面持续上升，而沿温度轴方向则相对平坦。在整个扫描范围内，插值网格与叠加散点高度吻合，偏差或曲面畸变极小，这表明在固定摩擦系数下，变形比对速度呈近似线性响应，且对温度不敏感；这与其被表征为数据集中受动力学主导程度最高的输出相一致。图14b（温度 ≈ 442 K、速度 × 摩擦切片）呈现出薄而类似刀刃的曲面几何形态，并在参数空间的低速度和低摩擦角处急剧变窄；变形比沿速度轴持续升高，而在所扫描范围的大部分区域内，沿摩擦维度基本保持不变。该曲面保持了良好的一致性，并与散点高度吻合，进一步表明摩擦系数对颗粒变形几何形态没有显著的系统性影响；在固定温度下，该响应实际上是速度的单变量函数，仅受到极小的次级调制。图14c（速度 ≈ 623 m s^{-}1、温度 × 摩擦切片）偏离了前两幅图的规整性，呈现出整体抬高的平台，其中央有明显凹陷，并且在平面的低温和低摩擦角处集中出现尖锐的边缘波纹。



a) b) c)

图 14. 通过将一个输入参数固定在接近其中位数的值，并扫描其余两个参数，得到的变形比三维响应面：(a) 将摩擦系数固定在约 0.31，扫描颗粒速度和颗粒温度；(b) 将颗粒温度固定在约 442 K，扫描颗粒速度和摩擦系数；(c) 将颗粒速度固定在约 623 m s^{-1}，扫描颗粒温度和摩擦系数。曲面通过在结构化网格上进行三次插值生成，并叠加散点以表示实际仿真样本，散点颜色对应其变形比值。面板 (a) 和 (b) 中平滑、近似平面的几何形态反映了颗粒速度对几何变形的主导性影响，且这种影响大体呈线性；而面板 (c) 中可见的阶梯状平台和局部凹陷则揭示了在中等速度下，颗粒温度与摩擦系数仍存在耦合敏感性，证实即使对于这一条件相对良好的输出目标，仍有必要采用完整的三维输入表示。

3.3. 几何深度学习模型的评估

表 3-6和图15展示了四种几何深度学习算法在所有输出目标上的预测性能。对于最大等效塑性应变（表 3）和平均接触塑性应变（表 4），GraphSAGE 和 GAT 均取得了持续较高的 R^2 值，超过0.93；其中 GAT 的整体性能最佳，R^2 分别为 = 0.9700 和0.9304，这证实基于空间图的消息传递非常适合捕捉局部化变形响应。对于最高温度（表 5），GraphSAGE 和 GAT 再次占据优势，R^2 值分别为0.9594和0.9465；而 TDA-MLP 的 R^2 为负值 −0.2104，表明仅依靠拓扑特征增强，在缺乏显式图连通性的情况下不足以解析热场。对于颗粒变形比（表6），GraphSAGE 取得了最高 R^2 值0.9360，GAT 以0.8867紧随其后；相比之下，ChebSpectral 和 TDA-MLP 在所有目标上的表现均明显较差，这表明，与 GraphSAGE 和 GAT 所采用的空间邻域聚合策略相比，切比雪夫谱近似以及结合持久同调增强的多层感知机在泛化冷喷涂输入输出关系方面效果较弱。

表 3. 最大等效塑性应变（max_peeq）的预测性能

算法	MSE	MAE	R^2
GraphSAGE	0.069657	0.185068	0.9414
ChebSpectral	0.625710	0.603719	0.4734
TDA-MLP	0.046952	0.170959	0.9605
GAT	0.035597	0.140189	0.9700

表 4. 平均接触塑性应变（avg_peeq_contact）的预测性能

算法	MSE	MAE	R^2
GraphSAGE	0.000028	0.004320	0.9821

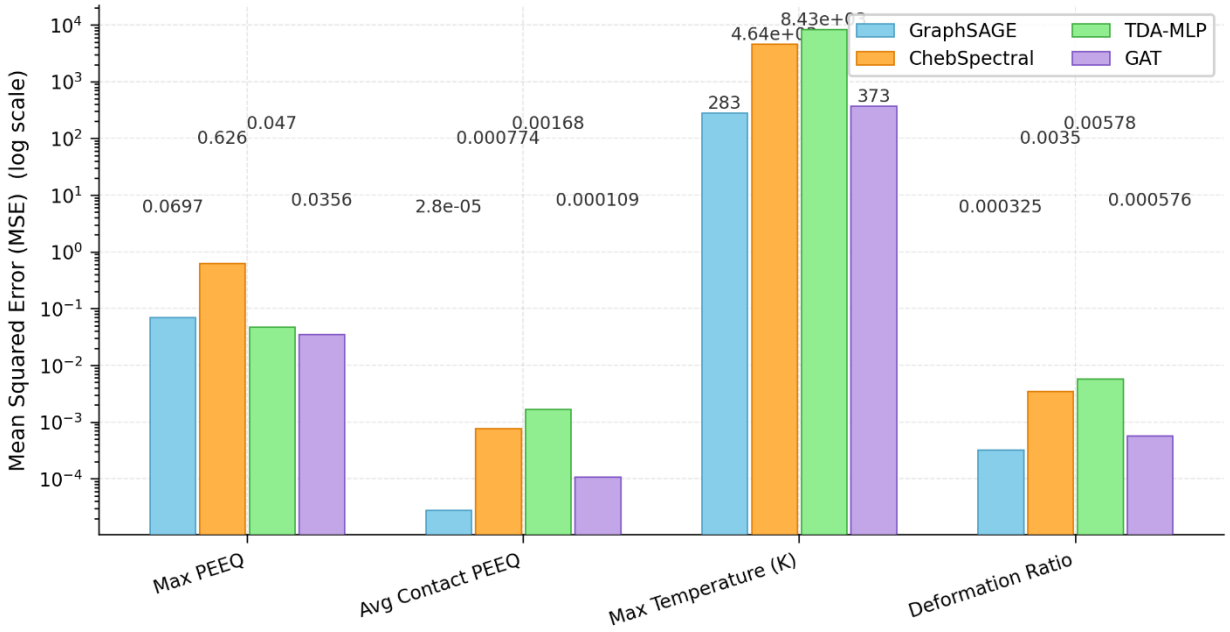
ChebSpectral	0.000774	0.023146	0.5062
TDA-MLP	0.001676	0.033979	-0.0688
GAT	0.000109	0.007314	0.9304

表5. 最高温度预测性能（最高_温度_K）

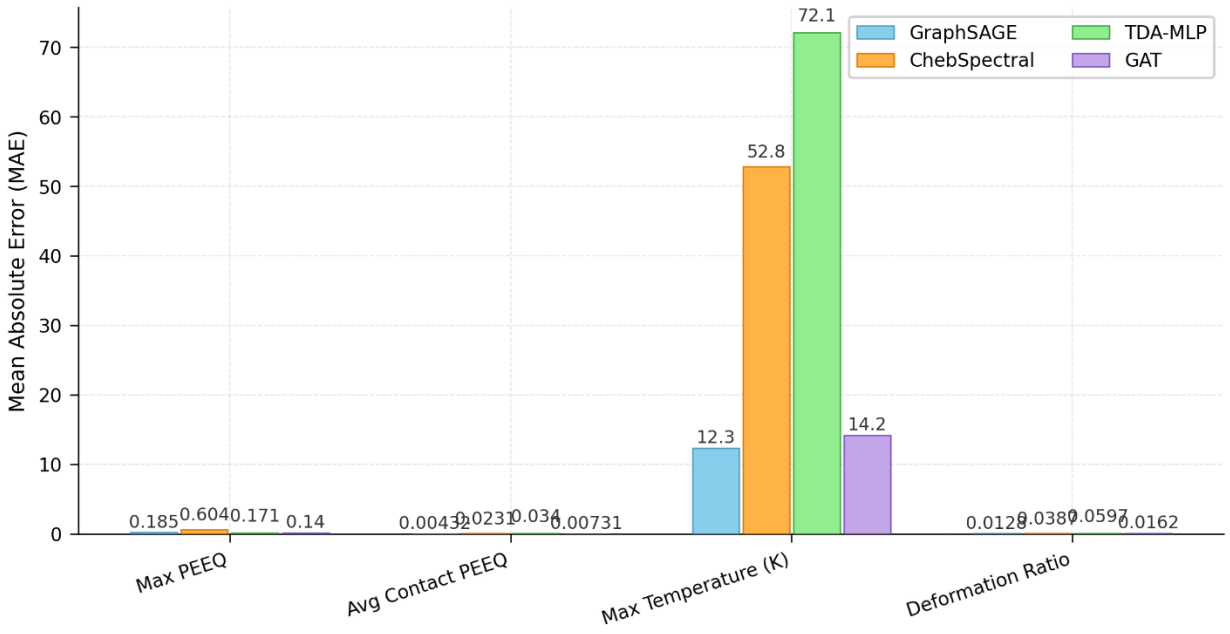
算法	MSE	MAE	R^2
GraphSAGE	283.043396	12.343616	0.9594
ChebSpectral	4642.883301	52.834316	0.3335
TDA-MLP	8430.983398	72.116943	-0.2104
GAT	372.935272	14.187658	0.9465

表6。 颗粒变形比的预测性能

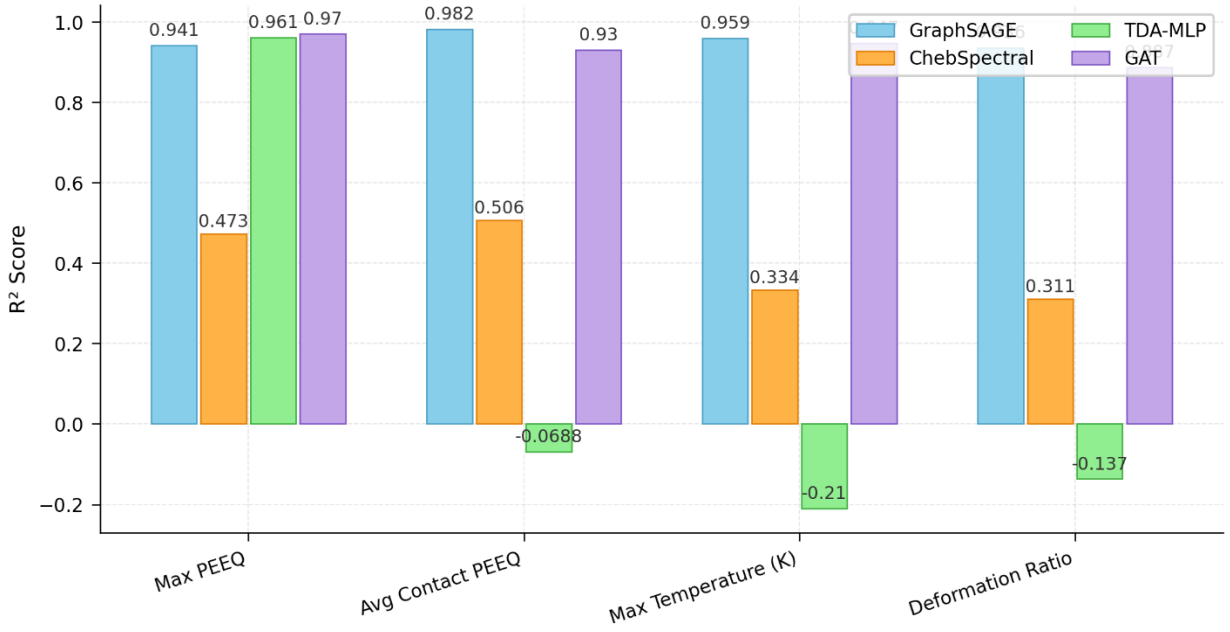
算法	MSE	MAE	R^2
GraphSAGE	0.000325	0.012830	0.9360
ChebSpectral	0.003503	0.038748	0.3111
TDA-MLP	0.005781	0.059728	-0.1367
GAT	0.000576	0.016186	0.8867



a)



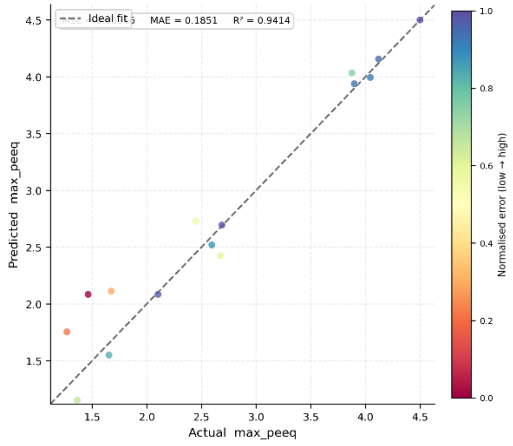
b)

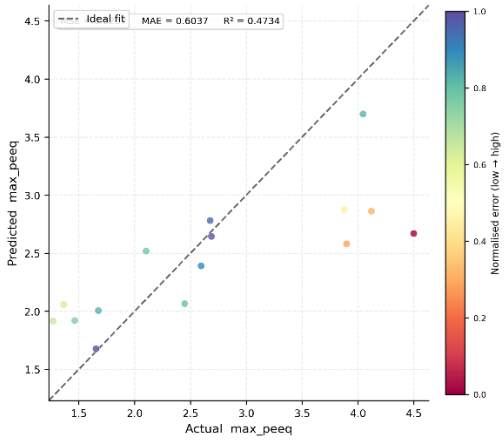


c)

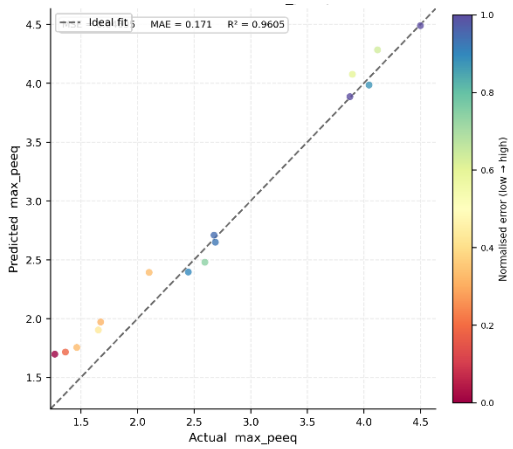
图15。四种几何深度学习算法在所有输出目标上的预测性能：(a) 均方误差（MSE，对数尺度）、(b) 平均绝对误差（MAE）和 (c) R^2分数。GraphSAGE 和 GAT 在所有目标上始终实现最低误差和最高 R^2 值，而 ChebSpectral 和 TDA-MLP 的表现明显较差，其中 TDA-MLP 在多个输出上的 R^2为负值，这证实了基于空间图的聚合方法在冷喷涂工艺预测中的优越性。

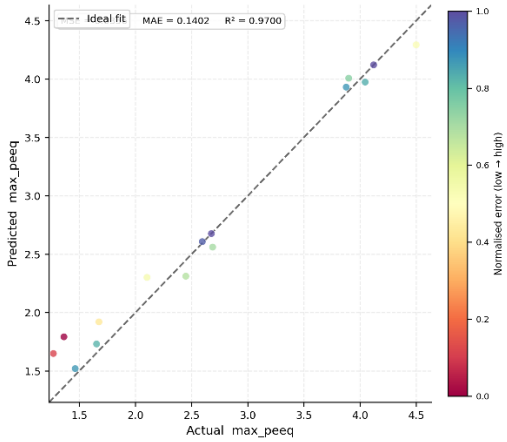
图16展示了最大等效塑性应变（最大 PEEQ）的预测值与实际值对比图。GraphSAGE 和 GAT 的数据点紧密聚集在理想对角线附近，散布极小，与其 R^2 值 0.94 和 0.97 相符；而 ChebSpectral 的数据点分散显著，TDA-MLP 的拟合有所改善，但精度仍较低。图17展示了平均接触塑性应变（平均 PEEQ）的相应对比图。GraphSAGE 与恒等线最为吻合，R^2 为 = 0.98；GAT 紧随其后，R^2 为 0.93。TDA-MLP 的散点图呈现近乎随机的点分布，没有明显趋势，这与其负 R^2 值 −0.07 相符，表明该模型未能学得这一目标所对应的潜在关系。图18展示了最高温度的预测值与实际值对比图。GraphSAGE 和 GAT 再次表现出与对角线高度吻合且散布较小的特点，反映出二者的 R^2 值均高于 0.94；相比之下，ChebSpectral 的数据点广泛分散，TDA-MLP 的拟合退化最为严重，数据点几乎呈随机分布，这与其负 R^2 值 −0.21 以及超过 72 K 的平均绝对误差相符。图19展示了颗粒变形比的预测值与实际值对比图。GraphSAGE 的拟合最为紧密，R^2 为 = 0.936；GAT 紧随其后，R^2 为 0.887，二者的数据点均紧密聚集在对角线附近。ChebSpectral 和 TDA-MLP 的散点图与恒等线偏离显著，TDA-MLP 再次得到负 R^2 值 −0.137。这进一步印证了四个目标中一致的规律：空间图聚合方法能够有效泛化，而谱增强与拓扑增强方法则无法以同等可靠的程度捕捉变形几何。





a) b)





c) d)

图16. 使用 (a) GraphSAGE、(b) ChebSpectral、(c) TDA-MLP 和 (d) GAT 得到的最大_等效塑性应变实际值与预测值图。

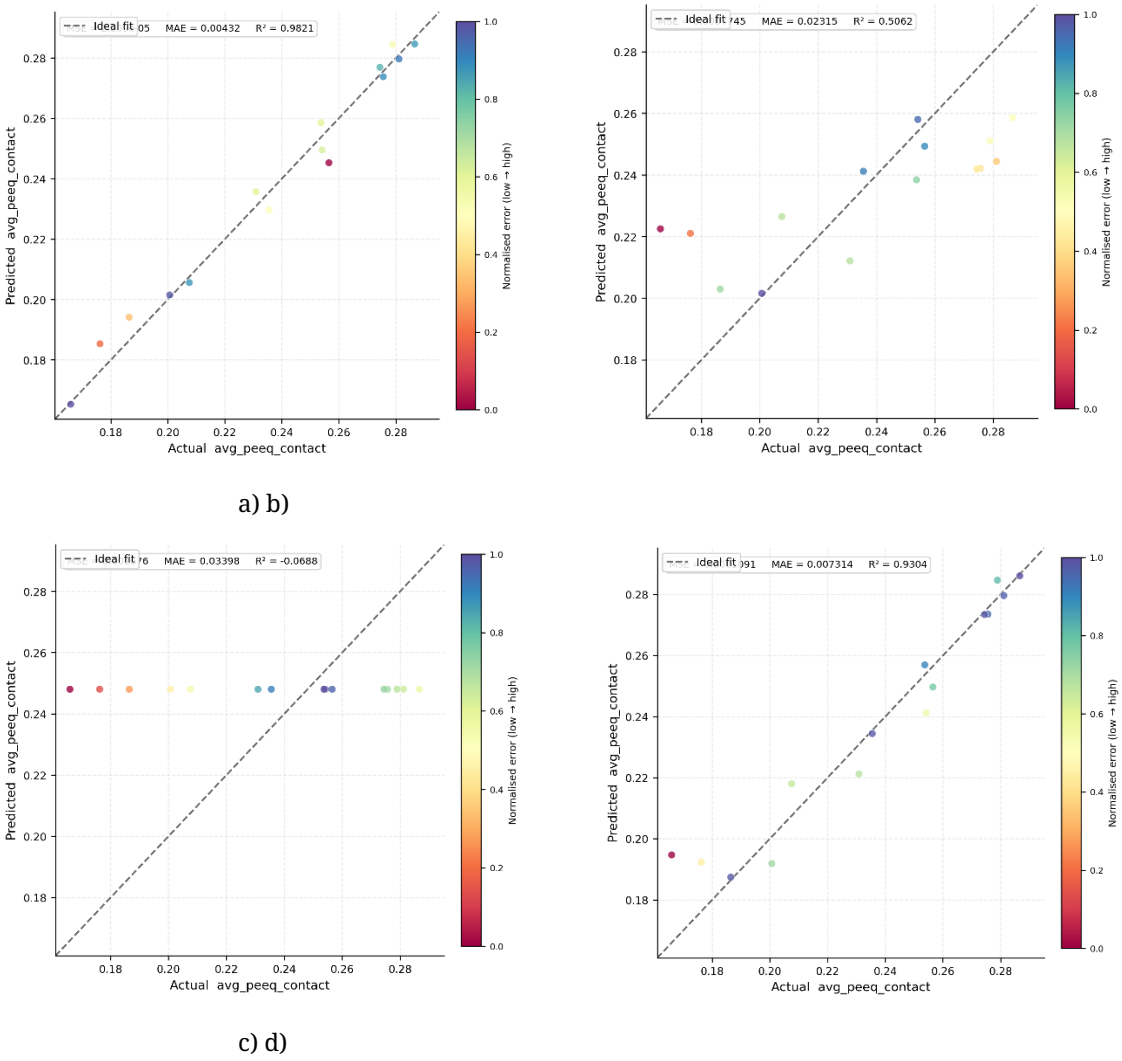
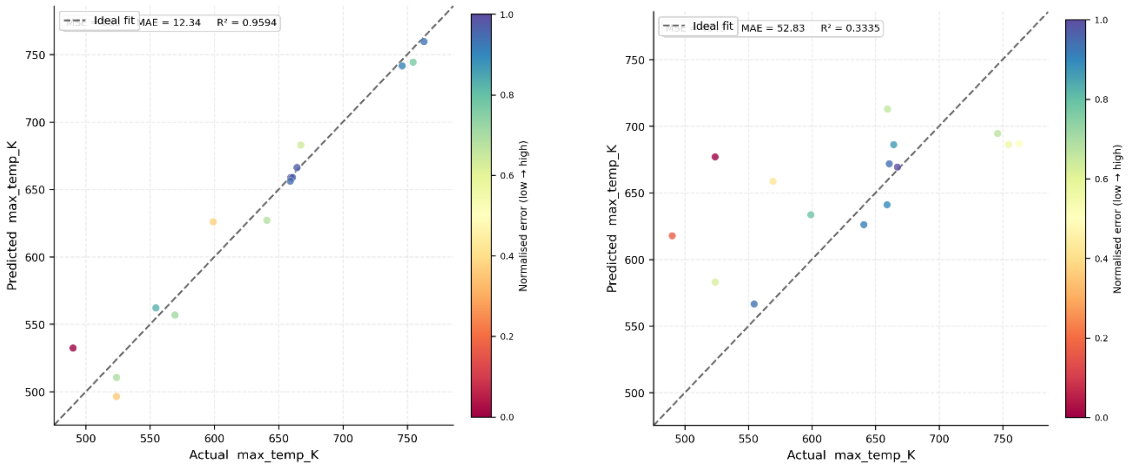
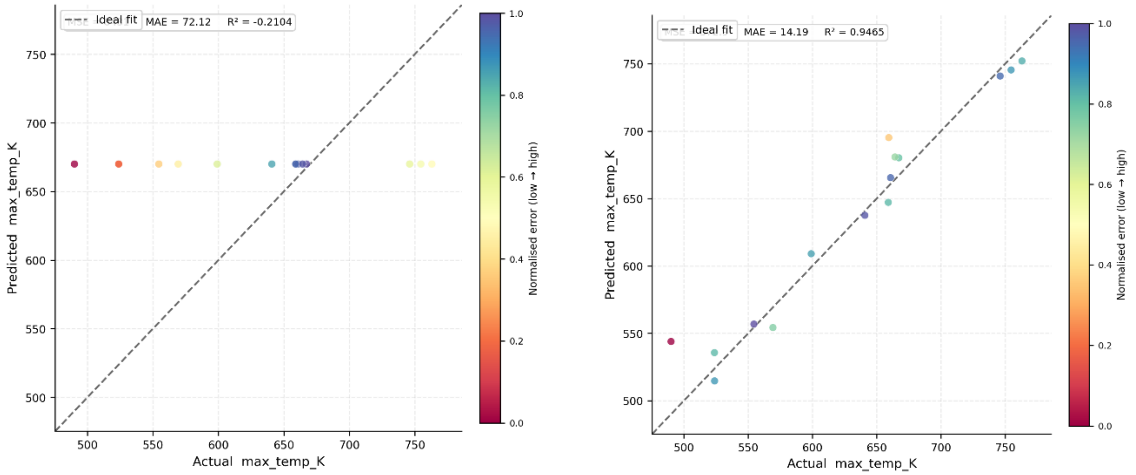


图17. 使用 (a) GraphSAGE、(b) ChebSpectral、(c) TDA-MLP 和 (d) GAT 得到的平均_等效塑性应变实际值与预测值图。

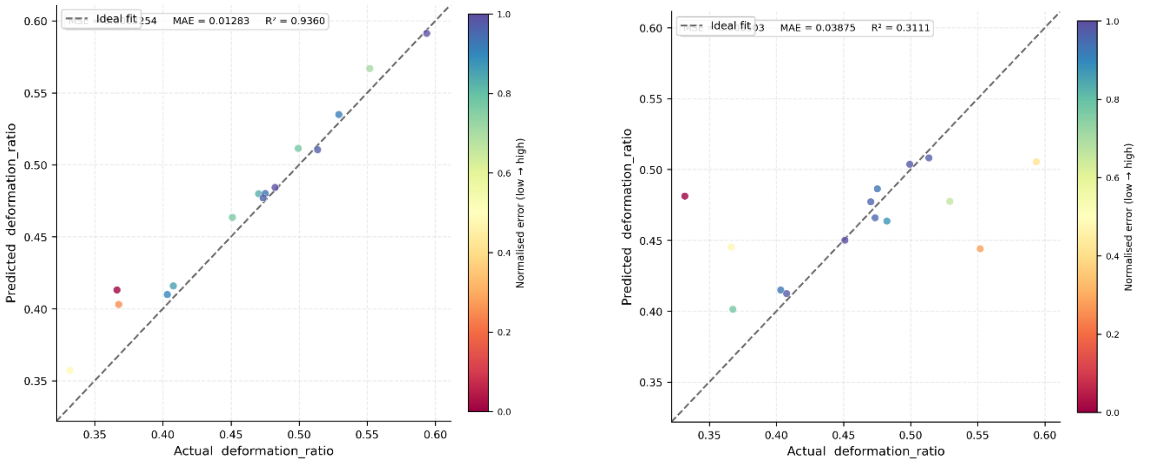


a) b)

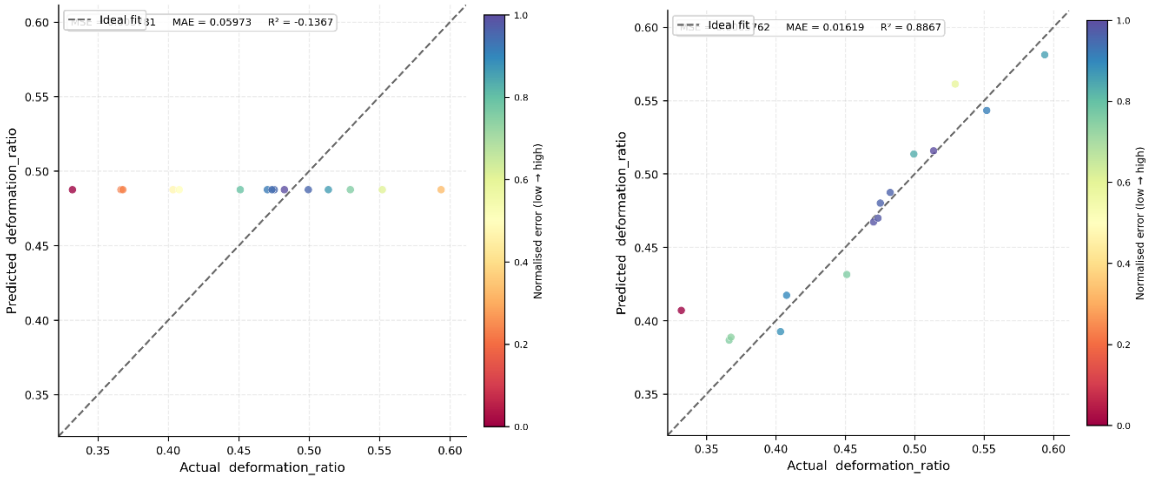


c) d)

图18。 使用 (a) GraphSAGE、(b) ChebSpectral、(c) TDA-MLP 和 (d) GAT 得到的最高温度实际值与预测值图。



a) b)



c) d)

图19。使用（a）GraphSAGE、（b）ChebSpectral、（c）TDA- 多层感知机和（d）GAT得到的变形比实际值与预测值对比图。

4. 结论

本研究开发并评估了四种几何深度学习架构，将其作为冷喷涂颗粒撞击预测的代理模型，并使用涵盖颗粒速度、温度和摩擦系数的参数化有限元仿真数据集进行训练。在输入特征空间中构建K近邻图，使每个模型都能利用工艺条件之间的空间相似性，从而引入一种具有物理依据的归纳偏置，这是传统逐点架构无法利用的。三维特征空间分析证实，在大多数输出目标中，颗粒速度是主导参数，而温度和摩擦系数则产生次要且相互耦合的影响，因此需要采用完整的三维输入表示。

GraphSAGE 和几何注意力网络在最大塑性应变、平均接触塑性应变、最高温度和变形比这四项指标上均稳定取得超过 0.93 的 R^2，其中 GAT 在最高

等效塑性应变上的 R^2 准确率达到峰值 = 0.97。切比雪夫谱网络和经拓扑数据分析增强的多层感知机表现明显较差，在若干目标上得到负的 R^2 值，表明仅采用谱增强和拓扑增强策略不足以解析冷喷涂撞击的非线性响应面。这些研究结果确立了基于空间图的邻域聚合作为冷喷涂工艺优化的一种稳健且计算高效的代理建模策略，并为未来将几何深度学习框架扩展至多颗粒沉积场景和微观结构层级的性能预测奠定了基础。

参考文献

1. Moridi, A., Hassani-Gangaraj, S.M., Guagliano, M. 和 Dao, M.，2014年。冷喷涂涂层：材料体系综述与未来展望。《表面工程》，30(6)，第369–395页。2. Moridi, A.，2016年。冷喷涂建模。载于《冷喷涂粉末固结：工艺建模与新兴应用》（第33–75页）。尚贝里：施普林格国际出版。3. Champagne, V. 和 Helfritch, D.，2016年。冷喷涂沉积的独特能力。《国际材料评论》，61(7)，第437–455页。4. Gärtner, F.、Stoltenhoff, T.、Schmidt, T. 和 Kreye, H.，2006年。冷喷涂工艺及其在工业应用中的潜力。《热喷涂技术杂志》，15(2)，第223–232页。5. Heydari Astaraee, A.、Colombo, C. 和 Bagherifard, S. 使用冷喷涂进行聚合物表面金属化中的键合形成数值建模。《热喷涂技术杂志》30，1765–1776（2021年）。https://doi.org/10.1007/s11666-021-01224-96. Heydari Astaraee, A.、Colombo, C. 和 Bagherifard, S. 冷喷涂过程中金属颗粒与热塑性聚合物基材结合的见解。《科学报告》12，18123（2022年）。https://doi.org/10.1038/s41598-022-22200-57. Xie, J.、Nélias, D.、Walter-Le Berre, H.、Ogawa, K. 和 Ichikawa, Y.，2015年。冷喷涂颗粒沉积工艺模拟。《摩擦学杂志》，137(4)，第041101页。8. Savangouder, R.V.、Patra, J.C. 和 Palanisamy, S.，2024年。用于预测冷喷涂增材制造输入工艺参数以实现目标喷涂沉积轮廓的机器学习技术。《IEEE工业信息学汇刊》，20(10)，第12275–12283页。9. Perna, A.S.、Auriemma Citarella, A.、De Marco, F.、Di Biasi, L.、Viscusi, A.、Tortora, G. 和 Durante, M.，2025年。优化热塑性塑料上的冷喷涂沉积：聚焦于粉末性质的机器学习方法。《材料工程与性能杂志》，34(8)，第6527–6538页。10. Xia, C.、Zhang, C. 和 Li, R.，2026年。用于快速预测冷喷涂增材制造中残余应力的基于机器学习的代理模型。《增材制造前沿》，第200323页。11. Hutasoit, N.、Khadka, S. 和 Palanisamy, S.，2026年。使用随机森林模型对空气式冷喷涂增材制造中沉积几何形状的数据驱动预测。《制造快报》。12. Tam, K.M.M.、Brown, N.C.、Bronstein, M.、Van Mele, T. 和 Block, P.，2026年。通过CW复形上的物理信息几何深度学习，学习受约束静态平衡以实现推力网络逆向找形。《先进工程信息学》，70，第103870页。13. Wang, Z.、Yi, H.、You, Z. 和 Jin, Q.，2026年。使用等变图变换器进行反应预测的三维几何深度学习。《人工智能工程应用》，163，第112850页。14. Wang, Z.、Zhang, T.、Yu, M.、Zhou, C.、Xu, Z.、Liu, H.、Wen, Y.、Chen, L.、Zheng, J. 和 Jiang, S.，2026年。学习对接：用于预测超分子主客体复合物的几何深度学习。arXiv预印本 arXiv:2601.12268。

15. Pathan, M.S.、Karthikeyan, K.、Pilla, S. 和 Kangde, S.S.，2026年1月。使用几何深度学习对发动机连杆进行人工智能驱动的应力与疲劳寿命预测。载于《国际汽车技术研讨会》（2026年）。SAE技术论文。