DED-Agent：一种用于激光定向能量沉积中自主热仿真模型开发与校准的智能体式人工智能方法

预印本

MichaelSong[1] Yilong Dai[1] Lin Cheng*马里兰大学帕克分校机械工程系，美国马里兰州帕克市20742[1]这些作者对本研究贡献相同。*通讯作者。电子邮箱：lcheng90@umd.edu

2026年11月23日

arXiv:2611.32822v1 [cs.CE] 24 Nov 2026

摘要

在金属增材制造（增材制造）中，工艺参数决定局部热历史，而热历史支配缺陷、微观组织和性能。由于激光功率、扫描速度、道间距、层厚、扫描策略和位置共同构成包含 10^4–10^6 种条件的设计空间，使用有限元热模型对其进行映射已超出人工专家手工完成的能力：每个模型都必须由专家完成设置、网格划分、求解和校准，仅校准未知热源参数就可能耗时数天至数周。本文提出DED-Agent，这是一种用于激光定向能量沉积（激光定向能量沉积）工艺自主仿真模型开发与校准的智能体人工智能方法。在该多智能体系统中，监督智能体协调三个共享结构化仿真规范的专业智能体，并调用开源工具以实现可靠仿真。具体而言，意图智能体将自然语言请求转换为经验证的规范；仿真智能体通过物理感知的逐步推理构建、运行并检查有限元热模型；校准智能体则利用信赖域搜索中的高阶广义特征分解（HOPGD）代理模型，根据实验数据（例如热电偶数据）识别热源模型的关键参数。在五个基准构建中，从单道墙到圆柱管上的多道带状沉积体，智能体无需人工干预即可构建可执行的热模型；对于简单和中等构建，误差为4.1%–9.1%。经过三轮校准后，这些构建的误差降至0.9%–2.5%。代理模型与完整有限元模型的结果误差控制在0.08%–1.55%以内，并将校准时间缩短了5–13倍。这些结果表明，智能体人工智能能够为增材制造工艺自主建立可靠且准确的仿真模型，并在加速探索和识别用于微观组织控制的最优工艺参数方面具有巨大潜力。

关键词：智能体人工智能；大语言模型；定向能量沉积；自主热仿真；模型校准

1 引言

在金属增材制造（AM）中，加工条件决定局部热历史，进而影响微观结构演变、缺陷形成，并最终决定零件的材料性能和表现 [1, 2]。由于热历史会随扫描道、层以及位置而变化，单次构建中可能出现柱状晶、混合晶和等轴晶，机械性能也会呈现空间差异。因此，定量理解加工条件如何塑造热历史，以及热历史如何反过来控制微观组织，对于工艺优化和确保增材制造构件的可靠性至关重要 [2, 3]。

过去二十年来，人们开发了热模拟模型，以了解增材制造的热历史及其与微观组织和性能之间的联系 [1,2]。最早的零件尺度模型大量借鉴了焊接领域的做法。这些模型将激光表示为移动的体积热源，通常采用Goldak双椭球 [4],，并求解具有温度相关属性和潜热的瞬态热传导。增材制造与焊接的区别在于材料连续添加，模型通过沿刀具路径激活单元来处理这一过程。Michaleris [5]指出，采用静默单元还是非激活单元，以及如何处理演化自由表面，都会改变预测的温度和热损失。通过原位热电偶测量数据验证后，这些有限元（FE）模型能够再现定向能量沉积（DED）壁的逐层加热和热积累；将其与力学分析耦合后，还能预测变形和残余应力 [3,6]。在熔池这一更小尺度上，热与流体流动模型可以捕捉马兰戈尼对流及其形成的熔池几何形状 [7],，而机理模型则将计算得到的温度梯度和凝固速率与晶粒形貌、缺陷及性能联系起来 [2]。然而，这些高保真模型的计算成本限制了其在工艺设计中的应用。因此，近期研究开发了降阶模型和数据驱动代理模型，并将其嵌入数字孪生 [8],，其中包括适当广义分解方法，可利用少量高保真计算构建参数化解 [9–11]。借助这些更快速的模型，热模拟日益广泛地用于解读原位监测数据、选择工艺参数和扫描策略，以及控制层间温度和冷却速率 [1,8]。

金属增材制造能够制造复杂几何形状，加之其工艺参数可调范围广，因此有望在单个零件内定制局部微观组织和性能。然而，同样的灵活性也使得难以针对每种目标构建开发可靠的热模拟模型。激光功率、扫描速度、道间距、层厚、扫描策略和空间位置共同构成高维工艺空间；每种组合都会在时空中产生不同的热历史，而每种热历史又可能形成不同的微观组织。由此产生的设计空间 $N_{proc} \times N_{spatial} \times N_{mechanism}$ 很容易超出 10^4–10^6 条件。基于物理的有限元热模型是探索这一空间的主要工具 [3,6,8],，但每个模型仍由专家逐案构建。分析人员需要设置几何形状和刀具路径、施加边界条件、划分计算域网格、配置求解器并对结果进行后处理。任何一步出错，都可能导致求解器崩溃；更糟的是，还可能生成一个能够运行、却悄然反映错误物理过程的模型。热源模型 [4] 还包含一些参数，例如吸收效率；这些参数取决于熔池尺寸，在打印并表征构建件之前无法确定 [3,12]。这些参数需要手动校准，或使用需要进行数百次有限元计算的全局优化器，因此校准单个模型可能耗时数天乃至数周。如此高昂的成本意味着，人工专家只能研究数百万个设计空间点中的少数几个，增材制造在特定位置性能控制方面的巨大潜力仍未得到充分探索。

智能体人工智能（AI）为克服这一瓶颈提供了一条颇具前景的路径。基于大语言模型（LLM）构建的智能体能够推理任务、调用外部工具，并根据结果迭代采取行动 [13,14],；它们已开始自动化科学计算工作流，包括用于求解力学问题的多智能体系统 [15]，以及能够在 OpenFOAM 中设置并运行计算流体力学模拟的智能体 [16–18]。然而，这些系统主要是在数学模型已确定的情况下自动化后续工作流，而将物理问题转化为正确数值模型这一更根本的步骤仍然颇具挑战。直接提示大语言模型编写求解器，目前还不可靠：在我们近期针对 75 个偏微分方程（PDE）问题进行的基准测试中，前沿大语言模型在物理推理方面的得分约为 88/100，但它们生成的 FEniCSx 求解器没有一个能端到端成功运行 [19]。据我们所知，目前还没有面向金属增材制造的智能体方法，能够打通从用户意图到可执行热模型，并将其依据实验测量数据进行校准的完整闭环。

为弥补这一空白，本文提出 DED-Agent，这是一种用于激光定向能量沉积（L-DED）热模拟模型自主开发与校准的多智能体 AI 方法。DED-Agent 中的每个智能体都有明确界定的职责、输入和输出。具体而言，监督智能体负责协调三个专业智能体：(i) 意图智能体，将自然语言请求转换为经过验证的仿真规范；(ii) 仿真智能体，通过遵循物理规律的逐步推理构建、运行并检查有限元热模型；(iii) 校准智能体，利用高阶广义特征分解（HOPGD）代理模型 [10,11]，根据热电偶数据识别热源参数。我们首先介绍各智能体的设计，然后在五个几何形状和刀具路径复杂度逐步增加的 L-DED 构件基准测试中评估该方法。本文聚焦于自主模型开发以及依据已发表实验数据进行校准；针对内部实验的校准、基于智能体的冷却速率控制和缺陷最小化将在后续期刊论文中报告。

2 DED-Agent 方法

2.1 监督智能体与共享状态

图 1 展示了 DED-Agent，其由一个监督智能体和多个专业智能体组成。监督智能体将用户的请求转化为任务计划，为各子任务分派专业智能体，重试失败步骤，并在信息缺失或某项检查反复失败时向用户升级求助。专业智能体之间不传递自由文本，而是读写共享状态，其中包含仿真规范（JSON）、运行记录、测量数据和日志。每次交接都会经过自动检查：模式验证、物理合理性检查（单位、属性范围、能量输入、峰值温度相对于液相线的情况）、在重试次数上限内进行自校正，以及必要时向用户升级求助。智能体调用由开源组件构成的工具层：温度相关材料数据库（k, c_p, ρ、潜热、固相线和液相线）、用于网格划分的 Gmsh [20]、用于有限元求解的 FEniCSx/DOLFINx [21] 和 PETSc、探针历史数据、熔池和冷却速率的后处理、HOPGD 代理模型，以及差分进化 [22] 和 Nelder–Mead [23] 优化器。DED-Agent 中的所有智能体均使用 Grok 4.6 作为大语言模型核心，所有实验均在一台工作站上运行：AMD Ryzen 9 9900X CPU（12 核、24 线程）、32 GB RAM 和 NVIDIA GeForce RTX 5070 Ti GPU（16 GB，CUDA 13.0，驱动程序 595.99）。有限元求解通过 cuDOLFINx 在 GPU 上以单进程运行，采用 GMRES，并使用代数多重网格（GAMG）预条件器和对角缩放。

2.2 意图智能体

意图智能体是用户与模拟之间的接口。它会读取自然语言请求（例如“运行新的热模拟，并绘制一个探针处的温度历史”），以及随后提供的基板、壁和刀具路径说明，还有待打印零件的 CAD模型，并提取材料、基底和沉积几何、刀具路径、激光功率、扫描速度、层高、停留时间、边界条件及探针位置。请求中缺失的值会从材料数据库或文档默认值中补齐，并标记为假设；同时会检查所有值的单位和物理范围。输出为 JSON 规范，例如 {“material”: “SS316L”, “laser_power_W”: 800, “scan_speed_mm_s”: 16.7, “layers”: 20, “probes”: [“TC2”]}，它是所有下游智能体唯一的信息来源。如果某个量存在歧义且无法安全地采用默认值，例如热电偶的位置，监督器会在运行任何模拟之前询问用户。

2.3 仿真智能体

仿真智能体将规范转化为可执行且经过检查的有限元模型。它不采用端到端生成求解器代码的方式，而是遵循我们为偏微分方程到有限元求解器合成所制定的逐步推理流程 [19]。它解析规范，组装控制方程，确定并标注每个边界条件和初始条件，选择离散化方法与求解策略，并定义后处理量。随后，它按照模块化方案编写代码：几何、带标签的网格导入、函数空间、变分形式、约束、求解与后处理。

对于激光定向能量沉积，智能体在活动域 $\Omega(t)$ 上构建温度 $T(x,t)$ 的瞬态热传导问题：

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q(x,t), \quad \text{in } \Omega(t) \tag{1}$$

其中，ρ、c_p 和 k 分别为与温度相关的密度、比热和导热系数，潜热则通过固相线与液相线之间的表观热容表示。激光采用 Goldak椭球体积热源 [4] 建模：

$$Q = \frac{6\sqrt{3}\eta P}{abc\pi\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{3\xi^2}{c^2} - \frac{3y^2}{a^2} - \frac{3z^2}{b^2}\right) \tag{2}$$

其中，P 为激光功率，η 为吸收效率，a 为横向半轴，b 为深度半轴，c 为纵向半轴，ξ 和 y 为相对于移动热源的平面内坐标（ξ 沿扫描方向），而z 为从沉积层顶面起算的垂直坐标（$z \le 0$ 表示位于顶面下方）。自由表面通过对流和辐射散热：

$$-k\nabla T \cdot n = h(T - T_\infty) + \varepsilon\sigma\left(T^4 - T_\infty^4\right), \quad \text{on } \Gamma_s(t) \tag{3}$$

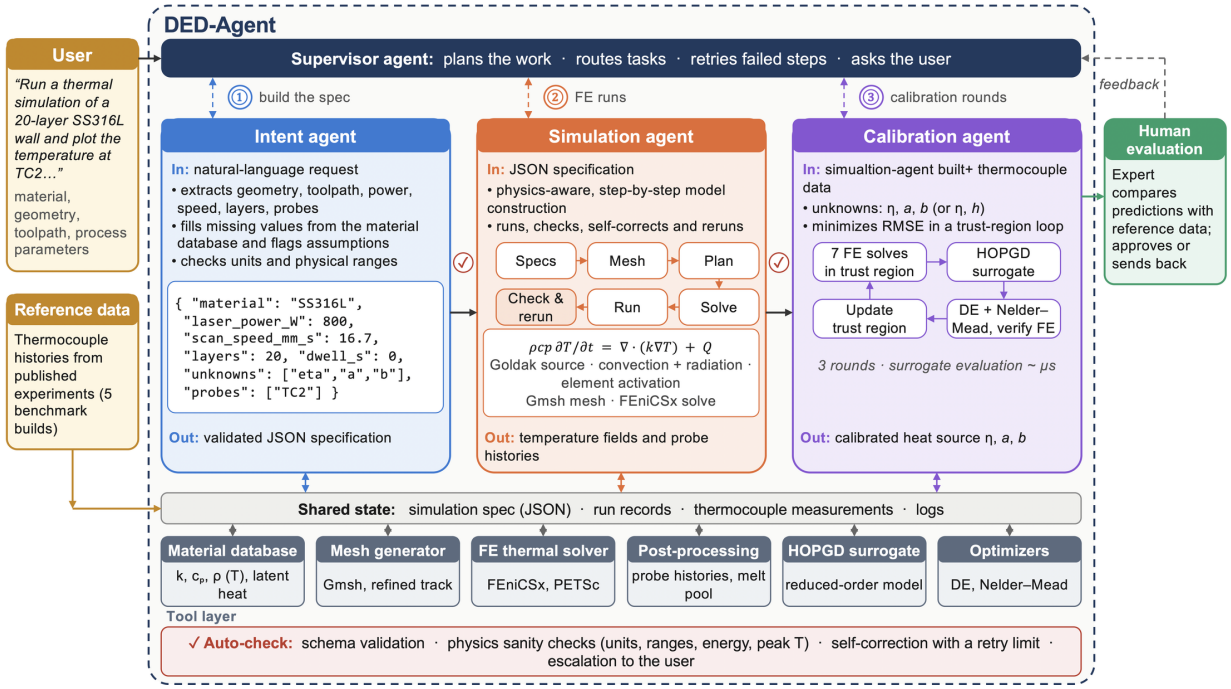

图 1：DED-Agent 的架构。监督智能体负责规划工作、分派任务、重试失败的步骤，并在需要时询问用户。意图智能体（①）将请求转化为经过验证的 JSON 规范；仿真智能体（②）通过逐步进行物理到代码推理来构建、运行并检查有限元模型；校准智能体（③）则借助 HOPGD 代理模型，在信赖域循环中识别热源参数。各智能体共享同一状态，调用工具层，并在每次交接时通过自动检查；人工专家负责评估结果。冷却速率控制、缺陷最小化以及利用内部实验进行校准是未来的工作方向。

其中，h 为传热系数，ε 为发射率，σ 为斯特藩–玻尔兹曼常数。沉积过程通过沿刀具路径激活单元（非激活单元法）[5], 进行建模，并在单元激活时更新自由表面 $\Gamma_s(t)$。沉积层单元从一开始就进行网格划分，但激活前，其导热系数和热容分别按 10^{-6} 和 10^{-2}的比例缩放，同时关闭这些单元上的热源和表面散热。当某个单元的质心位于当前层顶面或其下方，且该单元任一节点处的归一化 Goldak 强度达到 0.05 时，该单元即被激活。智能体使用 Gmsh 对基底和沉积层进行网格划分，并在扫描道附近加密网格；在 FEniCSx 中使用一阶拉格朗日单元和后向欧拉时间积分离散方程（1），并选择合适的时间步长，使热源每步前进四分之一个横向半轴。每次运行后，它都会检查求解器收敛情况、非物理温度和能量平衡。若检查未通过，它会诊断原因、修改代码，并在重试次数上限内重新运行。它会返回探针温度历程、温度场和熔池指标。

2.4 校准智能体

即使智能体构建的模型在物理上是正确的，其预测也取决于打印前无法测量的热源参数，而这些参数通常是误差的主要来源。因此，校准智能体会调整这些参数，使模拟的热历史与原位测量结果一致。遗传算法等全局优化器通常用于此目的，但需要数百次有限元评估 [12], ，这对于零件尺度 L-DED 模型而言并不实际。相反，智能体对关键热源参数 $\mu = (\eta, a, b)$ 进行校准，并将纵向半轴设为与横向半轴相等（$c = a$）；或者，在热源几何已知的情况下，对吸收效率和边界条件参数进行校准。为减少有限元求解次数，智能体以降阶代理模型替代有限元模型。根据 Lu 等人 [10, 11], 的方法，该代理模型采用高阶广义特征分解（HOPGD）构建。HOPGD 是适当广义分解的一种变体 [9], ，可利用少量有限元快照构建探针温度的非侵入式分离表示：

$$T(t;\mu) \approx \sum_{m=1}^{M} F_m^t(t) \prod_{j=1}^{d} F_m^j(\mu_j) \tag{4}$$

其中， F_m 是一维模态， M 是模态数量， $d = 3$ 是参数数量。构建完成后，该代理模型可在其参数范围内的任意位置以微秒级速度进行评估，从而使穷举优化变得可行。随后，将校准定义为在信赖域框 B_k 内、于第 k 轮中最小化模拟热电偶温度历程与测量热电偶温度历程之间的均方根误差（RMSE）：

$$\min_{\mu \in B_k} J(\mu) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(T(t_i; \mu) - T_i^{\exp} \right)^2} \tag{5}$$

每轮校准按以下步骤进行。智能体首先在 B_k 上运行有限元仿真，并利用这些快照构建 HOPGD代理模型。随后，在代理模型上最小化式（5），通过差分进化进行全局搜索，再用 Nelder–Mead 对结果进行细化。由于代理模型只是近似模型，因此需通过完整有限元求解验证所得最优解。最后，智能体围绕验证结果最佳的点重新确定 B_k 的中心并调整其尺寸。总共进行三轮。精度也以平均相对误差（百分比）报告。为评估测量数据对各参数的约束强度，计算识别点处均方根误差（RMSE）的归一化灵敏度，公式如下：

$$S_j = \left| \frac{\partial J}{\partial \mu_j} \right| \Delta \mu_j \tag{6}$$

其中， $\Delta \mu_j$ 是 μ_j 允许范围的宽度。

3 基准案例

为评估 DED-Agent，研究人员将五个具有已发表热电偶数据的 L-DED构件整理为案例数据库，并根据几何形状和刀具路径复杂度分为三个等级。表1列出了这五个案例及其来源、复杂度等级、构件描述和校准参数。简单等级包括两面单道墙（s1、s3）；中等等级包括一个多道方形沉积体（m1）和一个在无层间停留条件下构建的单壁（m2）；复杂等级则为在圆柱管上通过之字形扫描沉积的多道带状沉积体（c2）。对于每个案例，智能体仅收到构件的自然语言描述，没有提供模板仿真模型；随后由人工专家将其预测结果与实测及已发表的温度历史进行比较。

表1：基准案例。

ID	热源	层级	构建	校准参数
s1	Yang 等人 [6]	简单	Ti-6Al-4V 单道矩形墙，10 层	η，对流边界
s3	Nain 等人 [24]	简单	SS316L 单道墙（60 mm），位于 100 × 50 mm 板上	η, a, b
m1	d'Ambelle 等人 [25]	中等	SS316L 多道方形沉积体，20层，之字形，无停留，800瓦，1米/分钟，0.38毫米/层	η, a, b
m2	Heigel等人 [3]	中等	Ti-6Al-4V 无停留单壁（情况1）	η、a、b
c2	Ye等人 [26]	复杂	圆柱管上的 SS316L 多道带状沉积体，之字形扫描	η，a，b

4 结果与讨论

结果按照智能体链的顺序呈现。第4.1节考察意图智能体如何将用户请求转换为仿真规范，第4.2节评估仿真智能体构建并执行的热模型，第4.3节评估校准智能体如何根据测量数据修正这些模型。每个小节首先详细考察一个具有代表性的案例，然后总结全部五个案例的结果。第4.1节和第4.2节所依据的工作流如图2所示。

4.1 意图智能体：从请求到规范

图2展示了一个典型请求，这里以案例 m1 为例。该请求指定了材料、沉积几何、层数、扫描策略、停留时间、激光功率、扫描速度、层高、需要报告温度的探针位置，以及构建部件的相关信息。对于此类请求，意图智能体为全部五个案例生成了完整的 JSON 规范，并且每个规范在交给仿真智能体之前都通过了模式验证。然而，请求的完整性会直接影响仿真精度。对于案例 s3，如图3中 s3 行所示，完全指定的提示得到的均方根误差为 51.8 °C，相对于实验的误差为 9.13%；而对于信息不完整的提示，由于智能体必须为若干工艺参数假设默认值，

得到的结果为 74.0 °C（13.12%）。由于智能体会标记每一个假设值，用户可以识别出对预测影响最大的输入，而热源中的剩余不确定性则随后由校准智能体处理。

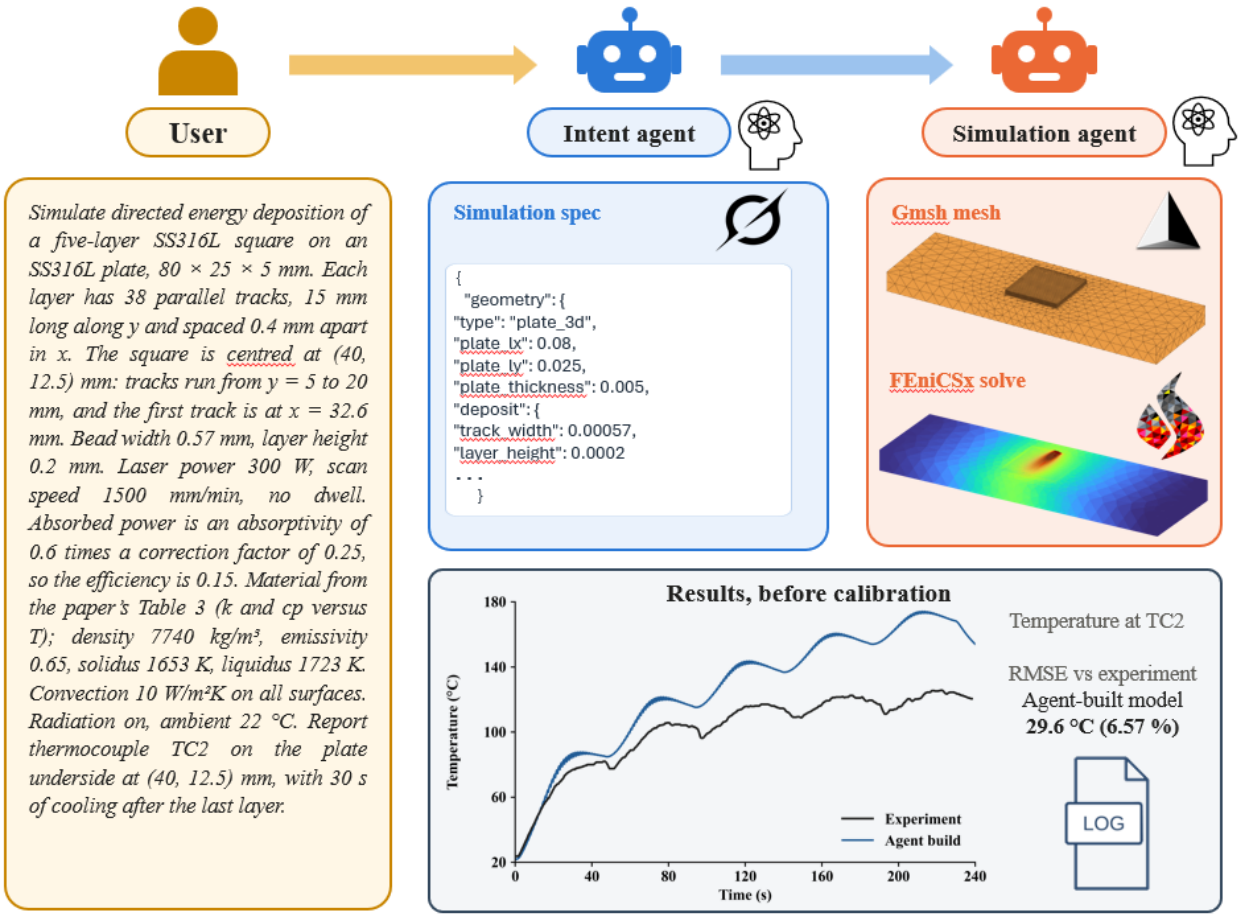

图2：自主模型开发，以案例 m1（d'Ambelle 等人 [25], SS316L 多道壁、5 层、探针 2）为例。从左到右：用户提交自然语言请求，且未提供模板仿真模型；意图智能体将请求转换为 JSON 规范，并根据模式、单位和允许范围进行检查，同时填入默认值并标记；仿真智能体使用 Gmsh 对计算域进行网格划分，在 FEniCSx 中求解瞬态热问题，并自动检查每次运行，若失败则重新运行；人工专家将探针 2 处预测和测得的温度历史进行比较，得到 29.6 °C 的均方根误差和 6.57% 的相对误差。日志文件记录令牌使用量和计算机实际运行时间。

4.2 仿真智能体：自主模型开发

为说明仿真智能体的运行方式，图2展示了工作流仿真阶段的一个中等复杂度多道方形沉积体案例（m1）。仿真智能体根据意图智能体提供的经验证的规范，构建基底和五层多道方形沉积，使用 Gmsh 生成网格并沿沉积路径进行细化，然后在 FEniCSx 中组装式（1）–（3）的瞬态热模型，并沿矩形轮廓刀具路径激活单元。在返回任何结果之前，智能体会检查求解器收敛情况、温度范围和运行的能量平衡；每当检查失败时，便自动重新运行模型。最终模型在无需人工干预的情况下运行了 46.2 分钟。预测的 TC2 处温度历史再现了实验测得的逐层加热和冷却循环以及逐渐形成的热积累，但高估了层间温度，均方根误差为 29.6 °C（6.57 %）。使用标称工艺参数时出现这种偏差是意料之中的，将由第 4.3 节中的校准智能体加以处理。

随后将相同的流程应用于全部五个基准案例。图2展示了m1的结果，图3则对其余四个案例分别进行了比较，将参考几何形状和测量数据与仿真智能体生成的网格、温度场和

探针历史进行了对比，表2总结了相应的模型统计数据。五个模型均在无需人工干预的情况下完成构建和执行。对于简单案例，模型再现了逐层加热峰值及随后的冷却过程。对于s1，探针1处的预测历史与原始研究中的有限元模型结果相当，均方根误差为15.4 °C（4.05%）；对于s3，在使用完全指定的提示时，均方根误差为51.8 °C（9.13%）。另一个中等案例m2表现出与m1相同的趋势：模型捕捉到了逐渐发生的热积累和逐层的温度振荡，但高估了层间温度（62.0 °C，8.40%）。复杂案例c2的要求最高，需要智能体构建圆柱形基板、弯曲多道带以及带有重复之字形反转的刀具路径。E点处的预测历史再现了热峰值的时序和顺序，但低估了峰值幅度和道间温度（均方根误差为362.8 K，20.9%）。如图3所示，四个简单和中等构建的校准前误差为4.05–9.13%，而c2为20.9%。

表2报告了各个案例的模型规模、自校正循环次数，以及智能体在获得有效运行前检测并纠正的错误类型。最常见的错误是时间步长过大：在 m1 和 c2 中，初始步长使热源在每个增量中推进过远，验证器因此拒绝该设置，智能体随后进行了修正。在 c2 中，还检测并纠正了电导率表中的单位错误。

表2：仿真智能体统计数据。

Case	单元	时间步数	自校正次数	修正的错误类型	令牌使用量（输入/输出）	运行时间
s1	118,850	8,144	0	–	3282/1291	1.4 分钟
s3	132,464	4,959	0	–	3030/1089	8.9 分钟
m1	72,243	40,781	1	时间步长	8906/2718	46.2 分钟
m2	345,543	6,891	0	–		19.9 分钟
c2	3,433,793	1,410	3	时间步长单位		5.5 分钟

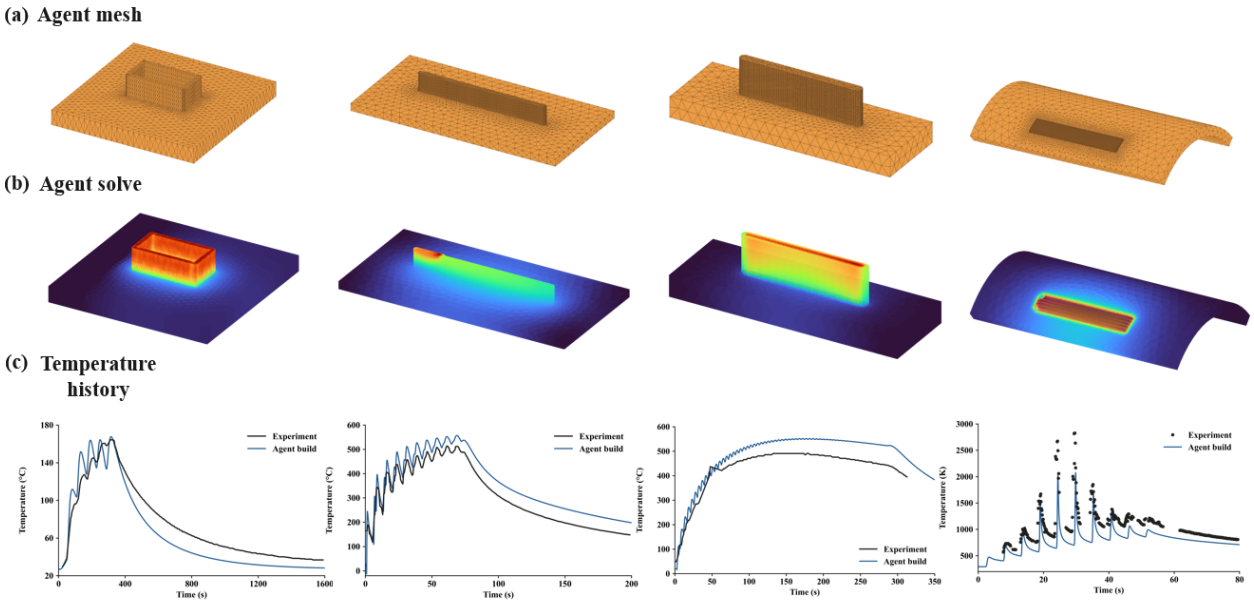

图3：仿真智能体为其余四个基准案例自主开发的模型（从左到右：s1、s3、m2 和 c2；案例 m1 如图2所示）：(a) 智能体生成的网格；(b) 智能体预测的温度场；(c) 智能体预测的温度历史与参考值的比较。

4.3 校准智能体：自主校准

为说明校准流程，我们以 m1 作为具体案例。该案例的未校准模型相对高估了第4.2节中的层间温度。图4展示了该案例的完整流程。用户通过通用提示描述问题的概况和目标。意图智能体首先提取了构建设置（

五层多道方形沉积在 SS316L板上，采用无停留的单向扫描，300瓦功率，25毫米每秒扫描速度，每层0.2毫米）以及问题陈述（吸收效率、横向半轴和深度半轴未知；计算相对于实验结果的均方根误差）。基于这一说明，仿真智能体构建了初始模型（第0轮），该模型高估了 TC2热电偶处的热积累（均方根误差为29.6 °C，即6.57%）。随后，校准智能体制定了星形试验设计并对信赖域进行采样，构建了HOPGD代理模型，并在其基础上更新热源参数；在后续各轮中重复这些步骤，直至完成最后一轮。第1轮后误差降至4.86%，第2轮后降至1.93%；第3轮的最优解经完整有限元求解验证后，误差达到7.88 °C（1.87%）。校准后的历史曲线与测得的逐层振荡以及层间温度的逐渐升高均高度吻合。

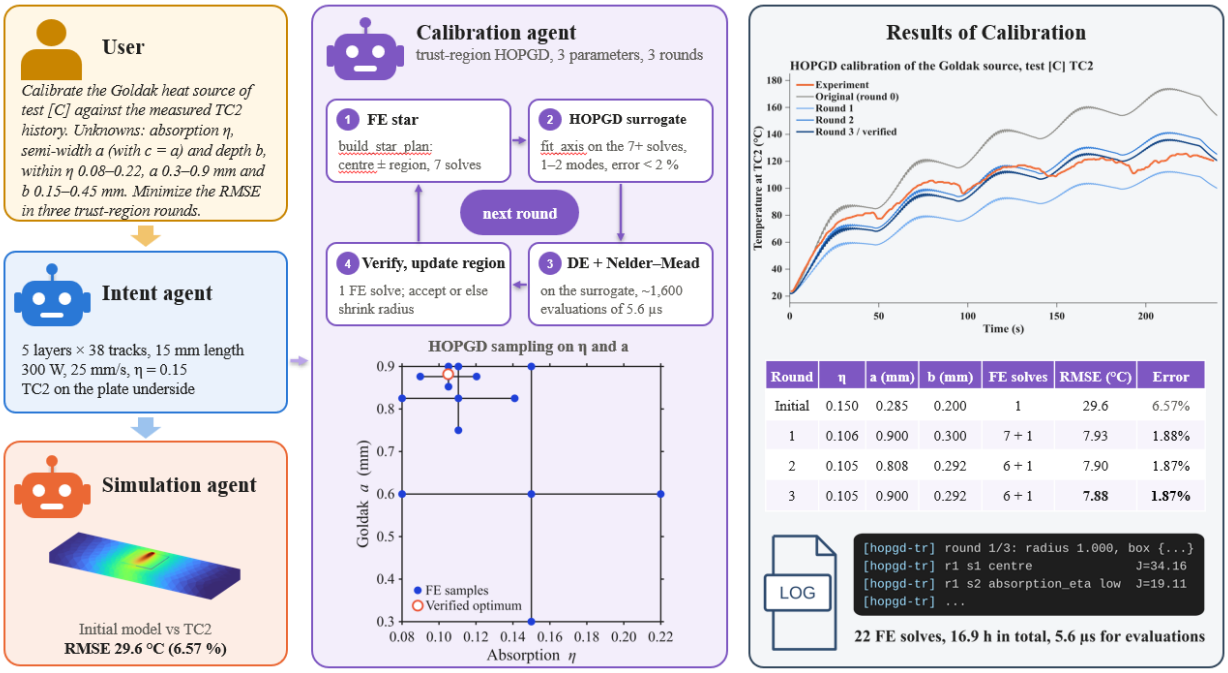

图4：案例m1的智能体链。智能体1（意图）说明设置和问题；智能体2（模拟）构建初始模型；智能体3（校准）对信赖域进行采样并构建HOPGD代理模型。右侧：实验、原始模型及第1—3轮的TC2历史，以及均方根误差和相对于轮次的百分比误差。

随后将相同的校准应用于全部五个案例，图5和表3总结了结果。对于案例s1，热源尺寸已在原始研究中完成校准，因此智能体转而校准吸收效率和对流边界条件。在所有案例中，最大改善均发生在第一轮，随后各轮逐渐收敛。对于四个简单和中等构建，校准使均方根误差降低了64.5–73.4%，降至5.46–19.92 °C，对应的百分比误差为0.89–2.48%。对于c2，校准将百分比误差从20.90%降至8.26%，但均方根误差仍高达271 °C。由于即使在较大范围内改变热源参数，该残差仍然存在，因此将其归因于模型形式局限，即对曲面几何中的之字形反转、散热和边界条件的处理所导致的局限；仅校准热源无法纠正这一问题。

表3：校准性能汇总。

Case	RMSE	误差（%）	识别的 η、a（mm）、b（mm）代理模型与有限元历史记录对比（%）	有限元/HOPGD时间（小时）	
s1	15.4 → 5.5 °C	4.05 → 0.89	η 和 h（0.4,5）	4.06	2.3 / 0.5 (×5)
s3	51.8 → 17.0 °C	9.13 → 2.25	0.40, 1.35, 0.30	0.19	24.0 / 3.3 (×7)
m1	29.6 → 7.9 °C	6.57 → 1.87	0.105, 0.90, 0.292	0.37	162 / 16.9 (×10)
m2	62.0 → 19.9 °C	8.40 → 2.48	0.397, 2.00, 1.80	1.19	96.0 / 7.3 (×13)
c2	362.8 → 270.9 K	20.90 → 8.26	0.65、2.39、0.625	1.65	10.6 / 2.0 (×5)

由于每一校准轮次依赖的是 HOPGD代理模型而非有限元模型，因此还评估了代理模型的准确性和计算优势。在每个验证点，代理模型预测结果均被

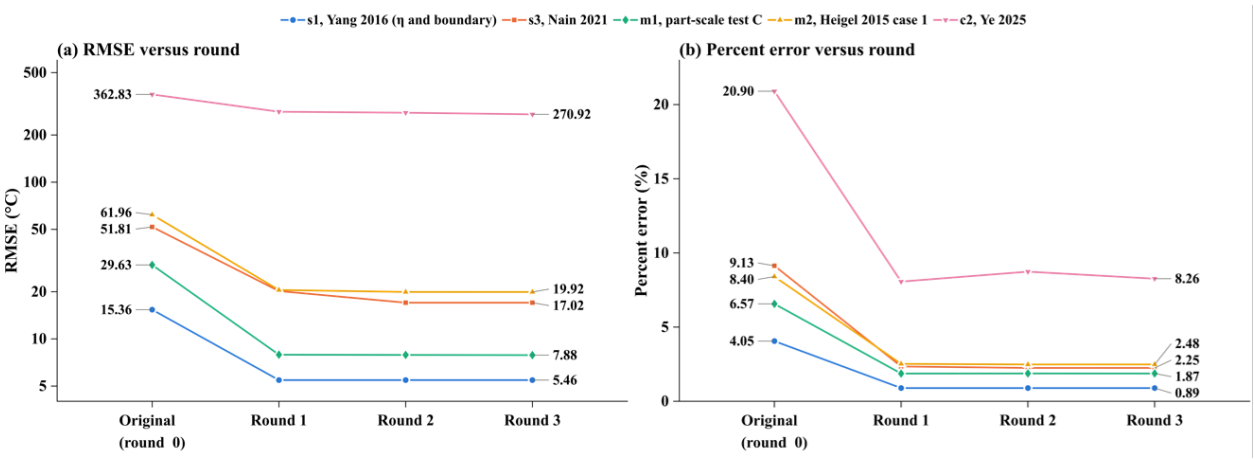

图5：五个案例的信赖域 HOPGD 校准收敛情况：(a) 均方根误差（对数尺度）和 (b) 相对于轮次的百分比误差。

与完整有限元解进行比较。在两个数量级的范围内，HOPGD预测的均方根误差与有限元均方根误差保持一致；在最后一轮中，代理模型将有限元温度历程复现至0.19%–4.06%的误差范围内。案例s1与有限元历程的差异较大，这是因为智能体构建的模型相较于有限元模型更接近真实值。单次HOPGD评估耗时仅需6–8 μs，而完整有限元求解则需1.4–46.2分钟（不同复杂度的案例），对应的加速比为1.1×10^7 至4.6×10^8。端到端的节省时间较少，因为每一轮都必须根据新的有限元快照重新构建代理模型。即便如此，如表3所示，三轮校准耗时0.5–16.9小时，比在完整有限元模型上进行Nelder–Mead 搜索的估计成本低5–13倍。对于计算成本最高的模型（m1、m2），节省最为显著，这表明随着模型规模增大，该优势还将进一步扩大。

4.4 展望：从模型开发到工艺探索

借助 DED-Agent，热模型的开发与校准——这是限制工艺设计空间探索范围的环节——基本无需人工干预即可运行，由人工专家负责审查结果。目前正在开展三项扩展工作。首先，将利用内部激光定向能量沉积实验对模型进行校准；这些实验结合了原位热电偶和红外测量数据，以及离位熔池横截面数据，同时还将约束热源的穿透深度。其次，图1所示的优化智能体将在经过校准的代理模型上搜索激光功率、扫描速度和停留时间，以实现目标冷却速率，并通过完整有限元模拟和实验验证所推荐的参数。第三，将把冷却速率控制与孔隙率和微观结构模型相结合，以最大限度地减少缺陷。此外，还将把基准测试扩展到更广泛的几何形状、材料和刀具路径，并通过重复运行量化智能体输出的变异性；同时，将采用模型形式诊断以及带差异项的贝叶斯校准 [27]来处理 c2 等案例。

5 结论

我们提出了 DED-Agent，这是一种智能体式人工智能方法，由监督器协调意图智能体、仿真智能体和校准智能体，将关于激光定向能量沉积构建的自然语言描述转化为可执行且经过校准的有限元热模型。在五个基准构建中，意图智能体将自然语言请求转换为经验证的规范；请求的完整性会对准确性产生可测量的影响：对于完整描述和描述不完整的 s3 提示，误差分别为 9.1% 和 13.1%。借助物理感知的逐步推理和执行检查，仿真智能体无需人工干预，便为所有案例构建了可执行的热模型；对于简单和中等构建，校准前误差为 4.05–9.13%。随后，基于 HOPGD 的校准智能体在三轮以内将这些误差降低至 0.89–2.48%，同时与完整有限元结果的偏差控制在 0.08–1.55% 以内，并将校准时间缩短了 5–13 倍。复杂案例 c2 仍存在 8.3% 的残余误差，这揭示了模型形式限制，并推动未来研究开发模型细化、冷却速率控制和缺陷最小化智能体，并通过内部实验对其进行验证。

致谢

作者衷心感谢美国国家科学基金会（NSF，资助编号 2245106）提供的资金支持，以及马里兰大学信息技术部提供的计算资源。

参考值

[1] DebRoy T, Wei HL, Zuback JS, Mukherjee T, Elmer JW, Milewski JO, Beese AM, Wilson-Heid A, De A, Zhang W. 金属部件的增材制造——工艺、结构与性能。《材料科学进展》2018;92:112–224。[2] Wei HL, Mukherjee T, Zhang W, Zuback JS, Knapp GL, De A, DebRoy T. 金属部件增材制造的机理模型。《材料科学进展》2021;116:100703。[3] Heigel JC, Michaleris P, Reutzel E W. Ti–6Al–4V定向能量沉积增材制造的热机械模型开发与验证。《增材制造》2015;5:9–19。[4] Goldak J, Chakravarti A, Bibby M. 一种用于焊接热源的新型有限元模型。《冶金学报B辑》1984;15:299–305。[5] 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》2014;86:51–60。[6] Yang Q, Zhang P, Cheng L, Min Z, Chyu M, To AC. Ti-6Al-4V定向能量沉积增材制造热机械行为的有限元建模与验证。《增材制造》2016;12:169–77。[7] Mukherjee T, Wei HL, De A, DebRoy T. 增材制造中的热与流体流动——第一部分：粉末床熔融建模。《计算材料科学》2018;150:304–13。[8] Gunasegaram DR, Murphy AB, Barnard A, DebRoy T, Matthews MJ, Ladani L, Gu D. 朝着开发用于金属增材制造数字孪生的多尺度多物理场模型及其代理模型迈进。《增材制造》2021;46:102089。[9] Chinesta F, Ladevèze P, Cueto E. 基于适当广义分解的模型降阶简要综述。《计算方法工程档案》2011;18:395–404。[10] Lu Y, Blal N, Gravouil A. 基于自适应稀疏网格的HOPGD：构建时空焊接计算手册的非侵入式策略。《国际数值方法工程杂志》2018;114:1438–61。[11] Lu Y, Blal N, Gravouil A. 用于参数研究的多参数时空计算手册：实时焊接仿真的应用。《有限元分析与设计》2018;139:62–72。[12] Gan Z, et al. Inconel 625激光粉末床熔融中熔融扫描道几何形状的基准研究。《综合材料制造创新》2021;10:177–95。[13] Yao S, Zhao J, Yu D, Du N, Shafran I, Narasimhan K, Cao Y. ReAct：在语言模型中协同推理与行动。载于：国际学习表征会议（ICLR）论文集；2023。[14] Wang L, Ma C, Feng X, Zhang Z, Yang H, Zhang J, et al. 基于大语言模型的自主智能体综述。《计算机科学前沿》2024;18:186345。[15] Ni B, Buehler MJ. MechAgents：大语言模型多智能体协作能够解决力学问题、生成新数据并整合知识。《极端力学快报》2024;67:102131。[16] Pandey S, Xu R, Wang W, Chu X. OpenFOAMGPT：面向基于OpenFOAM的计算流体力学的检索增强大语言模型（LLM）智能体。《流体物理学》2025;37:035120。[17]Chen Y, Zhu X, Zhou H, Ren Z. MetaOpenFOAM：基于LLM的计算流体力学多智能体框架。arXiv:2407.21320；2024。[18]Yue L, Somasekharan N, Cao Y, Pan S. Foam-Agent：迈向自动化智能计算流体力学工作流。arXiv:2505.04997；2025。[19] Cheng L, Lu Y. 科学智能体人工智能基础：用于自主问题分析和可靠端到端偏微分方程仿真的领域适配型LLM框架。审稿中；2026。[20] Geuzaine C, Remacle JF. Gmsh：一种内置前处理与后处理功能的三维有限元网格生成器。《国际数值方法工程杂志》2009;79:1309–31。[21] Baratta IA, Dean JP, Dokken JS, Habera M, Hale JS, Richardson CN, Rognes ME, Scroggs MW, Sime N, Wells GN. DOLFINx：新一代FEniCS问题求解环境。Zenodo；2023。doi:10.5281/zenodo.10447666。

[22] Storn R, Price K. 差分进化——一种简单高效的启发式算法，用于连续空间上的全局优化。《全球优化杂志》1997;11:341–59。[23] Nelder JA, Mead R. 一种用于函数最小化的单纯形法。《计算机杂志》1965;7:308–13。[24] Nain V, Engel T, Carin M, Boisselier D, Seguy L. 开发一种长椭球热源模型，以缩短定向能量沉积工艺的计算时间。《材料前沿》2021;8:747389。[25] de Peindray d’Ambelle L, Sánchez Pérez MA, Moussaoui K, Lachaud F, Mabru C, Chieragatti R. 激光送粉定向能量沉积的零件尺度数值模拟：实验校准。《国际交互设计与制造杂志》2025;19:6625–41。[26] Ye J, et al. 曲面构件定向能量沉积扫描模式热评估的数值建模。《制造工艺杂志》2025;153:703–20。[27] Kennedy MC, O’Hagan A. 计算机模型的贝叶斯校准。《英国皇家统计学会杂志B辑》2001;63:425–64。