

Streszczenie

Współczesne komponenty i systemy inżynierskie coraz częściej wymagają materiałów, których niezawodność strukturalna, odpowiedź elektromechaniczna i stabilność interfejsów są projektowane łącznie z geometrią i warunkami pracy. Opierając się na charakterystyce i modelowaniu materiałów, niniejsza rozprawa opracowuje metody obliczeniowe wspierające projektowanie poprzez przewidywanie właściwości materiałowych i wiązanie ich z wymaganiami na poziomie komponentu, urządzenia i systemu. W stopach wieloskładnikowych, ceramikach i polimerach piezoelektrycznych oraz interfejsach elektroda-elektrolit w układach litowych właściwości użytkowe wyłaniają się z hierarchii deskryptorów. Deskryptory te obejmują wiązania atomowe, symetrię krystaliczną, mikrostrukturę i morfologię interfejsów. Żadna izolowana metoda modelowania nie obejmuje pełnego zakresu tych skal. Opracowane ramy wieloskalowe łączą modelowanie oparte na fizyce z metodami opartymi na danych. Wiążą także deskryptory materiałowe z właściwościami strukturalnymi i funkcjonalnymi poprzez jawny pośredni stan materiału.

W stopach wieloskładnikowych zespołowe uczenie maszynowe wspiera specyfikację stopów konstrukcyjnych, odwzorowując wspólnie skład chemiczny i metodę wytwarzania na równowagę twardości i wydłużenia. Pozwala to wskazać sprzężone obszary projektowe zamiast izolowanych punktów optymalnych. Sparаметryzowane metodą DFT symulacje pola fazowego wykazują, że dopasowanie stałych sprężystości do temperatury symulacji zmienia przewidywaną mikrostrukturę układu Al-Cu-Ni o 18%. Wynik ten potwierdza znaczenie spójności temperaturowej parametrów dla przewidywania mikrostruktury istotnego dla projektowania procesu i komponentu. W materiałach piezoelektrycznych sieć neuronowa uwarunkowana krystalograficznie przewiduje kompletny tensor piezoelektryczny ograniczony symetrią i ocenia go w modelu urządzenia metodą elementów skończonych. Wybrany przez model i optymalnie zorientowany domieszkowany AlN zwiększa przewidywaną wydajność pozyskiwania energii 9,96-krotnie względem materiału wyjściowego. Uzupełniający model wspomagany wiedzą fizyczną łączy parametry elektroprzewodzenia i zawartość wypełniacza z efektywną odpowiedzią nanowłókien PVDF/SnO₂. Zwiększa także przewidywaną wartość d_{33} z 18 do 29 pC N⁻¹. W interfejsach elektroda-elektrolit w układach litowych model pola fazowego ze sprzężonymi polami odwzorowuje mechanizm wzmacniania wzrostu dendrytów przez wierzchołek. Synteza literatury konsoliduje strategie tłumienia obejmujące aspekty materiałowe, interfejsowe i operacyjne w dziesięć wzajemnie powiązanych wskaźników wydajności i stabilności dla niezawodnych elektrochemicznych układów energetycznych.

We wszystkich trzech obszarach powtarza się wspólna logika deskryptor-właściwości, mimo że fizyka rządząca i modele różnią się w zależności od materiału. Skład chemiczny i przetwarzanie określają zakres osiągalnej odpowiedzi. Pośredni stan materiału przenosi tę

informację między skalami do komponentu, urządzenia lub interfejsu. Na tym poziomie sprzężona odpowiedź wielofizyczna określa uzyskiwane właściwości. Wyniki sprowadzono do pięciu transferowalnych schematów projektowych oraz fizycznie ugruntowanej metodologii dla strukturalnych komponentów ze stopów, piezoelektrycznych czujników i pozyskiwaczy energii oraz elektrochemicznych układów energetycznych.