

Recenzja pracy doktorskiej
mgr inż. Upadesh SUBEDI

pod tytułem:

**Towards Digital Twins for Quantifying Laser-Microstructure
Interface in Multicomponent Alloys Using
Thermodynamic Tensor Model**

przygotowanej pod kierunkiem:

dr hab. inż. Tomasz TAŃSKI, prof. Pol. Śląskiej

opiekun pomocniczy:

dr inż. Anil Kunwar

1. Podstawa opracowania

Recenzja została wykonana na zlecenie Rady Dyscypliny Inżynieria Materiałowa Politechniki Śląskiej.

Podstawa prawna art. 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” (z późn. zm.).

Opinia dotycząca przedmiotowej rozprawy doktorskiej zawiera trzy elementy:

- 1) Ocenę wraz z uzasadnieniem czy rozprawa doktorska prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną Doktoranta w dyscyplinie Inżynieria Materiałowa;
- 2) Ocenę wraz z uzasadnieniem czy rozprawa doktorska wykazuje umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej przez Doktoranta ubiegającego się o nadanie stopnia doktora;
- 3) Ocenę wraz z uzasadnieniem czy rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego.

2. Charakterystyka i opis rozprawy

Uwagi ogólne

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska mgr inż. Upadesha Subediego pt. „Towards Digital Twins for Quantifying Laser-Microstructure Interface in Multicomponent Alloys Using Thermodynamic Tensor Model”, wykonana została na Politechnice Śląskiej pod kierunkiem dr hab. inż. Tomasza Tańskiego, prof. PŚ oraz promotora pomocniczego dr. inż. Anila Kunwara.

Rozprawa poświęcona została niezwykle aktualnemu i ważnemu problemowi naukowemu dotyczącemu ilościowego opisu, modelowania oraz prognozowania ewolucji mikrostruktury podczas obróbki laserowej stopów wieloskładnikowych. Autor rozprawy wskazał, że procesy zachodzące podczas oddziaływania wiązki laserowej z materiałem obejmują wzajemnie sprzężone zjawiska transportu ciepła, dyfuzji składników stopowych, przemian fazowych, reakcji międzyfazowych oraz dynamiki jeziorka ciekłego metalu. Zrozumienie tych zjawisk oraz opracowanie metod ich ilościowego opisu stanowi jedno z najważniejszych wyzwań współczesnej inżynierii materiałowej i jest kluczowe dla rozwoju nowoczesnych technologii wytwarzania przyrostowego oraz projektowania materiałów nowej generacji.

Doktorant podjął się bardzo ambitnego zadania badawczego polegającego na opracowaniu jednolitego, termodynamicznie spójnego środowiska obliczeniowego umożliwiającego reprezentację, ilościowy opis, kompresję, rekonstrukcję i predykcję ewolucji interfejsu laser-mikrostruktura w stopach wieloskładnikowych. Zadanie to wymagało połączenia zaawansowanego modelowania metodą pola fazowego, reprezentacji tensorowej danych mikrostrukturalnych oraz metod uczenia maszynowego. Szczególnie istotnym aspektem badań było stworzenie podstaw do budowy cyfrowych bliźniaków (Digital Twins), pozwalających na przewidywanie zmian mikrostrukturalnych w warunkach zbliżonych do czasu rzeczywistego.

Należy zwrócić uwagę, że recenzowana dysertacja na oryginalną formę. Jest opisem badań przedstawionych w cyklu pięciu tematycznie spójnych publikacji naukowych opublikowanych w renomowanych czasopismach. Poszczególne publikacje tworzą logiczną całość, prowadząc czytelnika od zagadnień związanych z prezentacją danych mikrostrukturalnych, poprzez modelowanie procesów laserowych i ewolucji faz międzymetalicznych, aż do wykorzystania metod sztucznej inteligencji w predykcji zachowania materiałów.

Za najważniejsze osiągnięcie naukowe doktoranta należy uznać opracowanie autorskiego Termodynamicznego Modelu Tensorowego (Thermodynamic Tensor Model), który umożliwia efektywne odwzorowanie, przechowywanie i odtwarzanie informacji o ewolucji mikrostruktury. Autor wykazał możliwość reprezentacji wyników symulacji pola fazowego w postaci wielowymiarowych struktur tensorowych poddawanych procesom redukcji, dekompozycji i rekonstrukcji bez utraty kluczowych informacji o morfologii mikrostruktury i granicach międzyfazowych.

Za wysoce oryginalne należy uznać także wykorzystanie metod sztucznej inteligencji do prognozowania ewolucji mikrostruktury. Wyniki badań wykazały możliwość skutecznej integracji modeli wielofizycznych, obliczeń termodynamicznych i uczenia maszynowego w ramach jednolitego środowiska obliczeniowego stanowiącego podstawę budowy cyfrowych bliźniaków procesów obróbki laserowej stopów wieloskładnikowych.

Autor rozprawy podjął trudny i interdyscyplinarny problem badawczy znajdujący się na styku inżynierii materiałowej, modelowania numerycznego, informatyki materiałowej oraz sztucznej inteligencji. Uważam, że uzyskane wyniki wnoszą istotny wkład do rozwoju metod modelowania procesów materiałowych i tworzą podstawy dla przyszłego rozwoju cyfrowych bliźniaków materiałów oraz technologii ich wytwarzania.

Uwagi redakcyjne

Rozprawa doktorska została przygotowana bardzo starannie zarówno pod względem merytorycznym, jak i redakcyjnym. Napisana jest poprawnym i precyzyjnym językiem naukowym, właściwym dla rozpraw doktorskich z obszaru inżynierii materiałowej. Autor posługuje się terminologią specjalistyczną w sposób konsekwentny i prawidłowy, a sposób prezentowania badań świadczy o bardzo dobrym opanowaniu zarówno zagadnień materiałoznawczych, jak i metod obliczeniowych oraz narzędzi sztucznej inteligencji wykorzystywanych w pracy.

Układ rozprawy jest logiczny, przejrzysty i spójny. Poszczególne rozdziały zostały uporządkowane w sposób umożliwiający czytelnikowi stopniowe poznawanie problemu badawczego oraz zrozumienie kolejnych etapów jego rozwiązania. Na szczególne podkreślenie zasługuje fakt, że mimo przygotowania rozprawy w formie zbioru publikacji autorowi udało się zachować jednolity charakter opracowania oraz stworzyć spójną narrację naukową prowadzącą od identyfikacji problemu badawczego do sformułowania końcowych wniosków.

W rozdziale pierwszym przedstawiono szerokie wprowadzenie do problematyki oddziaływania laser–mikrostruktura w stopach wieloskładnikowych, wskazując aktualny stan wiedzy, najważniejsze wyzwania badawcze oraz istniejącą lukę naukową. Rozdział drugi zawiera jasno sformułowane cele pracy oraz cele szczegółowe, które konsekwentnie realizowane są w dalszych częściach rozprawy. W rozdziale trzecim Autor precyzyjnie definiuje problem naukowy oraz stawia hipotezy badawcze stanowiące podstawę prowadzonych analiz. Najobszerniejszy rozdział czwarty poświęcono przedstawieniu głównych wyników badań oraz integracji rezultatów uzyskanych w ramach poszczególnych publikacji. Rozdział ten stanowi wartościową syntezę wyników zawartych w publikacjach i podkreśla ich wzajemne powiązania. Ostatni rozdział zawiera dobrze sformułowane wnioski końcowe oraz interesujące kierunki dalszych badań, wskazujące możliwości rozwoju proponowanej metodyki w kontekście cyfrowych bliźniaków materiałów i procesów technologicznych.

Na uwagę zasługuje również wysoka jakość opracowania materiału ilustracyjnego. Rysunki, schematy i zestawienia tabelaryczne są czytelne, dobrze opisane i właściwie powiązane z treścią rozprawy. Bibliografia została dobrana starannie i obejmuje aktualne publikacje dotyczące modelowania pola fazowego, technologii przyrostowych, uczenia maszynowego oraz cyfrowych bliźniaków.

Teza, cel i zakres pracy

Problematyka podjęta przez Doktoranta wpisuje się w jeden z najbardziej dynamicznie rozwijających się obszarów współczesnej inżynierii materiałowej, związany z cyfryzacją procesów projektowania materiałów oraz wykorzystaniem metod sztucznej inteligencji do modelowania i prognozowania zjawisk mikrostrukturalnych. Motywacją Doktoranta do podjęcia badań była obserwowana w literaturze naukowej luka pomiędzy bardzo dokładnymi, lecz kosztownymi obliczeniowo modelami wielofizycznymi opisującymi ewolucję mikrostruktury a szybkimi modelami predykcyjnymi opartymi na analizie danych, które często tracą fizyczną i termodynamiczną interpretowalność wyników. Szczególne znaczenie problem ten ma w przypadku stopów wieloskładnikowych poddawanych obróbce laserowej, gdzie przebieg procesów mikrostrukturalnych zależy od wzajemnie sprzężonych oddziaływań cieplnych, chemicznych i kinetycznych.

Przeprowadzona przez Doktoranta analiza stanu wiedzy wykazała, że mimo intensywnego rozwoju metod modelowania pola fazowego, reprezentacji danych mikrostrukturalnych oraz narzędzi uczenia maszynowego nadal brakuje uniwersalnego

podejścia umożliwiającego jednocześnie zachowanie informacji termodynamicznej, efektywne przetwarzanie wysokowymiarowych danych oraz szybkie prognozowanie ewolucji mikrostruktury.

Na tej podstawie Autor rozprawy sformułował główną hipotezę badawczą zakładającą, że termodynamiczna reprezentacja tensorowa jest zdolna do zachowania informacji przestrzennych, międzyfazowych i termodynamicznych w stopniu umożliwiającym skuteczne wykorzystanie metod uczenia maszynowego do predykcji ewolucji mikrostruktury indukowanej oddziaływaniem wiązki laserowej. W konsekwencji możliwe staje się stworzenie podstaw do budowy cyfrowych bliźniaków procesów obróbki laserowej stopów wieloskładnikowych.

Głównym celem rozprawy było opracowanie jednolitego, termodynamicznie spójnego środowiska obliczeniowego przeznaczonego do ilościowego opisu i prognozowania ewolucji interfejsu laser–mikrostruktura poprzez integrację modelowania wielofizycznego metodą pola fazowego, reprezentacji tensorowej danych mikrostrukturalnych oraz metod uczenia maszynowego. Cel ten został rozwinięty poprzez szereg celów szczegółowych obejmujących opracowanie termodynamicznego modelu tensorowego, budowę nieizotermicznych modeli pola fazowego dla procesów obróbki laserowej, opracowanie metod ilościowej charakterystyki interfejsów mikrostrukturalnych, stworzenie modeli predykcyjnych opartych na architekturach Conv-LSTM i U-Net oraz integrację wszystkich tych elementów w kierunku budowy cyfrowego bliźniaka procesu.

Zakres pracy jest bardzo szeroki i ma charakter wyraźnie interdyscyplinarny. Badania przeprowadzono dla kilku reprezentatywnych układów materiałowych, w tym Ti–Cr, $\text{Cu}_x(\text{Ti-6Al-4V})_y$, Ti–Au oraz Au, analizując zarówno procesy wzrostu faz międzymetalicznych, jak i ewolucję jeziorka ciekłego metalu podczas oddziaływania wiązki laserowej. Istotną część pracy stanowiły również badania nad kompresją, rekonstrukcją i analizą wysokowymiarowych danych mikrostrukturalnych oraz wykorzystaniem ich w modelach predykcyjnych.

Należy podkreślić, że zastosowana metodyka badań jest nowoczesna, oryginalna i zgodna z aktualnymi światowymi trendami rozwoju inżynierii materiałowej. Integracja modelowania wielofizycznego, reprezentacji tensorowej oraz metod uczenia maszynowego stanowi niewątpliwie jeden z najcenniejszych aspektów rozprawy i świadczy o bardzo dobrym przygotowaniu naukowym Doktoranta oraz jego umiejętności prowadzenia badań na pograniczu kilku zaawansowanych dyscyplin badawczych.

3. Ocena rozprawy doktorskiej

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska stanowi oryginalne i wartościowe osiągnięcie naukowe z zakresu współczesnej inżynierii materiałowej, lokujące się na pograniczu modelowania procesów materiałowych, termodynamiki obliczeniowej, informatyki materiałowej oraz sztucznej inteligencji. Autor podjął problem badawczy należący do bardzo aktualnych zagadnień rozwijanych obecnie w światowej nauce, związanych z budową cyfrowych bliźniaków procesów materiałowych oraz wykorzystaniem metod uczenia maszynowego do wspomagania projektowania materiałów i procesów ich wytwarzania.

Na szczególne podkreślenie zasługuje fakt, że rozprawa doktorska została przygotowana w formie cyklu pięciu tematycznie powiązanych publikacji naukowych opublikowanych w renomowanych czasopismach międzynarodowych, takich jak *Scripta Materialia*, *Materials & Design*, *Engineering with Computers* oraz *Computational Materials Science*. Taka forma rozprawy wymaga nie tylko uzyskania wyników o wysokiej wartości naukowej, ale również ich pozytywnej weryfikacji przez recenzentów międzynarodowych czasopism naukowych. Wszystkie publikacje tworzą spójny merytorycznie cykl poświęcony opracowaniu metod ilościowego opisu, reprezentacji, modelowania i predykcji ewolucji mikrostruktury w materiałach poddawanych oddziaływaniu wiązki laserowej.

Na podstawie przedstawionych deklaracji współautorów należy stwierdzić, że udział Doktoranta w powstaniu publikacji stanowiących podstawę rozprawy był znaczący i w większości przypadków dominujący. W czterech z pięciu publikacji Doktorant jest pierwszym i korespondencyjnym autorem, a jego udział wynosi od 60% do 72%. Obejmował on przede wszystkim opracowanie koncepcji badawczej, przygotowanie modeli obliczeniowych, realizację symulacji numerycznych, analizę i interpretację wyników, opracowanie metodologii badawczej oraz przygotowanie pierwotnych wersji manuskryptów. Świadczy to o wysokim stopniu samodzielności naukowej Doktoranta oraz jego wiodącej roli w realizacji przedstawionych w publikacjach badań.

Na tle aktualnego stanu wiedzy szczególnie istotnym osiągnięciem rozprawy jest opracowanie jednolitej koncepcji opisu interfejsu laser–mikrostruktura, traktowanego nie jako klasyczna granica fazowa, lecz jako złożony, dynamiczny obszar wzajemnego oddziaływania energii cieplnej, składu chemicznego i zmiennej morfologii mikrostruktury. Takie podejście stanowi znaczące rozszerzenie klasycznych metod modelowania procesów obróbki laserowej, które najczęściej analizują poszczególne zjawiska oddzielnie, bez ich pełnej integracji w ramach jednego modelu obliczeniowego.

Za najważniejsze osiągnięcie naukowe rozprawy uważam opracowanie autorskiej koncepcji Termodynamicznej Reprezentacji Tensorowej (Thermodynamic Tensor Representation). Rozwiązanie to umożliwia reprezentację wysokowymiarowych danych mikrostrukturalnych generowanych przez modele pola fazowego w postaci zwartej, matematycznie uporządkowanej i jednocześnie zachowującej fizyczną interpretowalność struktury danych. W literaturze dostępnych jest wiele metod redukcji wymiarowości danych, jednak najczęściej prowadzą one do utraty części informacji fizycznej. Doktorant wykazał możliwość przeprowadzenia kompresji, dekompozycji i rekonstrukcji danych przy zachowaniu kluczowych informacji o morfologii mikrostruktury, położeniu granic międzyfazowych oraz ich ewolucji. Osiągnięcie to należy uznać za istotny wkład do rozwijającego się obszaru zastosowania informatyki w inżynierii materiałowej.

Wysoko oceniam również opracowanie zaawansowanych wielofizycznych modeli pola fazowego przeznaczonych do opisu procesów zachodzących podczas obróbki laserowej stopów wieloskładnikowych. Szczególnie wartościowe są badania dotyczące wzrostu faz międzymetalicznych Ti_2Cu w układzie $\text{Cu}_x(\text{Ti-6Al-4V})_y$ oraz stworzenie nieizotermicznego modelu wielofazowego dla układu Ti–Au. Modele te uwzględniają sprzężone oddziaływanie transportu ciepła, dyfuzji składników, przepływu materiału w ciekłym jeziorce oraz przemian fazowych, dzięki czemu pozwalają na znacznie pełniejszy opis procesów zachodzących podczas oddziaływania wiązki laserowej niż rozwiązania spotykane w większości dotychczasowych publikacji.

Do najcenniejszych elementów rozprawy zaliczam również wykorzystanie metod sztucznej inteligencji do predykcji ewolucji mikrostruktury. Opracowane przez Doktoranta modele Conv-LSTM umożliwiają prognozowanie zmian mikrostrukturalnych w kolejnych etapach rozwoju układu, natomiast modele MicroTwin i FlowTwin oparte na architekturze U-Net pozwalają przewidywać rozkłady faz oraz pola prędkości na podstawie danych temperaturowych. Na szczególne podkreślenie zasługuje fakt, że modele te nie mają charakteru wyłącznie statystycznego, lecz wykorzystują dane pochodzące z termodynamicznie spójnych symulacji wielofizycznych. Takie podejście odpowiada obecnym światowym trendom rozwoju metod Physics-Informed Machine Learning i stanowi ważny krok w kierunku budowy wiarygodnych cyfrowych bliźniaków procesów materiałowych.

Na uwagę zasługuje również interdyscyplinarny charakter rozprawy. Autor wykazał się bardzo dobrą znajomością zagadnień z zakresu inżynierii materiałowej, termodynamiki, metod numerycznych, analizy danych oraz uczenia maszynowego. Umiejętne połączenie tych obszarów wiedzy pozwoliło na opracowanie nowej metodyki badawczej, której znaczenie wykracza poza analizowane w pracy układy materiałowe i może znaleźć zastosowanie również w innych procesach technologicznych wykorzystujących lokalne źródła energii.

Podsumowując, uważam, że rozprawa doktorska stanowi dojrzałe, oryginalne i wartościowe osiągnięcie naukowe. Autor nie tylko rozwiązał postawiony problem badawczy, ale również zaproponował nową metodologię integrującą modelowanie wielofizyczne, reprezentację tensorową danych oraz metody sztucznej inteligencji. Opracowane rozwiązania wnoszą znaczący wkład do rozwoju nowoczesnej inżynierii materiałowej oraz tworzą solidne podstawy do dalszego rozwoju koncepcji cyfrowych bliźniaków procesów obróbki laserowej materiałów.

4. Uwagi

- W jakim stopniu opracowany model tensorowy jest uniwersalny? Czy możliwe jest jego zastosowanie do materiałów ceramicznych lub kompozytowych, gdzie charakter ewolucji mikrostruktury jest odmienny niż w stopach metali?
- Opracowana metodyka została zweryfikowana dla wybranych układów stopowych. Jakie grupy materiałów Autor uważa za najbardziej perspektywiczne do dalszych badań z wykorzystaniem zaproponowanego podejścia?
- W rozprawie wykorzystano dane generowane przez modele pola fazowego. W jaki sposób Autor widzi możliwość integracji opracowanego środowiska obliczeniowego z rzeczywistymi danymi procesowymi pochodzącymi z monitoringu procesu LPBF, DED lub innych technologii przyrostowych?
- Czy opracowana metodyka może zostać rozszerzona na przewidywanie właściwości użytkowych materiałów (np. twardości, wytrzymałości) na podstawie prognozowanej mikrostruktury? Jakie byłyby główne wyzwania takiego podejścia?

- Jakie elementy opracowanej metodyki wymagają jeszcze rozwoju, aby możliwe było stworzenie cyfrowego bliźniaka działającego w czasie rzeczywistym i wspomagającego sterowanie procesem technologicznym w warunkach przemysłowych?

5. Opinia końcowa

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska mgr inż. Upadesha Subediego pt. *„Towards Digital Twins for Quantifying Laser-Microstructure Interface in Multicomponent Alloys Using Thermodynamic Tensor Model”* dotyczy aktualnej i ważnej problematyki naukowej związanej z modelowaniem procesów materiałowych, cyfryzacją badań materiałowych oraz wykorzystaniem metod sztucznej inteligencji do opisu i prognozowania ewolucji mikrostruktury materiałów poddawanych oddziaływaniu wiązki laserowej.

Na podstawie analizy rozprawy stwierdzam, że Doktorant wykazał się bardzo szeroką i ugruntowaną wiedzą teoretyczną w dyscyplinie inżynieria materiałowa. Przeprowadził pogłębioną analizę aktualnego stanu wiedzy, poprawnie identyfikując istniejące ograniczenia metod modelowania mikrostruktury oraz wskazując kierunki ich dalszego rozwoju. Sposób formułowania problemu naukowego, hipotez badawczych oraz interpretacji uzyskanych wyników jednoznacznie potwierdza bardzo dobre przygotowanie teoretyczne Autora dysertacji oraz jego dojrzałość naukową.

Doktorant samodzielnie przeprowadził analizy numeryczne, opracował modele obliczeniowe, dokonał krytycznej interpretacji wyników oraz sformułował wnioski o charakterze naukowym i aplikacyjnym. Wiodący udział autora w publikacjach stanowiących podstawę rozprawy dodatkowo potwierdza jego znaczący wkład i samodzielność badawczą. Uzyskane wyniki stanowią istotny wkład do rozwoju współczesnej inżynierii materiałowej i otwierają nowe możliwości badań nad cyfrowym projektowaniem materiałów i procesów technologicznych.

Podsumowując, stwierdzam, że rozprawa doktorska mgr inż. Upadesha Subediego prezentuje wysoki poziom naukowy, potwierdza posiadanie przez Doktoranta ugruntowanej wiedzy teoretycznej w dyscyplinie inżynieria materiałowa, wykazuje jego umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej oraz stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego.

W związku z powyższym stwierdzam, że recenzowana rozprawa spełnia wymagania określone w art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce i wnoszę do Rady Dyscypliny Inżynieria Materiałowa Politechniki Śląskiej o dopuszczenie mgr inż. Upadesha Subediego do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa.

Jednocześnie, biorąc pod uwagę bardzo wysoki poziom naukowy rozprawy, wysoką oryginalność uzyskanych wyników opublikowanych w renomowanych czasopismach międzynarodowych oraz istotny wkład w rozwój nowoczesnych metod modelowania procesów materiałowych i koncepcji cyfrowych bliźniaków w inżynierii materiałowej, wnioskuję o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr inż. Upadesha Subediego.



prof. dr hab. inż. Jarosław Mizera