



Silesian
University
of Technology

Politechnika Śląska

Wydział Mechaniczny Technologiczny

Katedra Materiałów Inżynierskich i Biomedycznych

ROZSZERZONE STRESZCZENIE

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

mgr inż. Upadesh Subedi

Dyscyplina naukowa: Inżynieria materiałowa

Promotor: **dr hab inż. Tomasz Tański, prof. PŚ**

Promotor pomocniczy: **dr inż. Anil Kunwar**

Politechnika Śląska

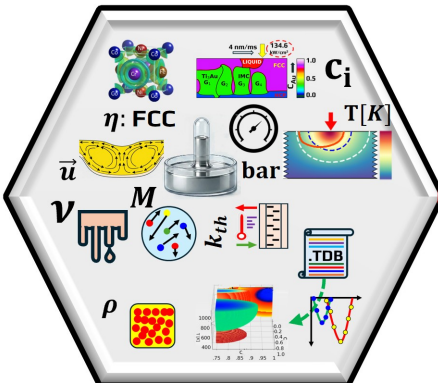
Wydział Mechaniczny Technologiczny

Gliwice, 2026

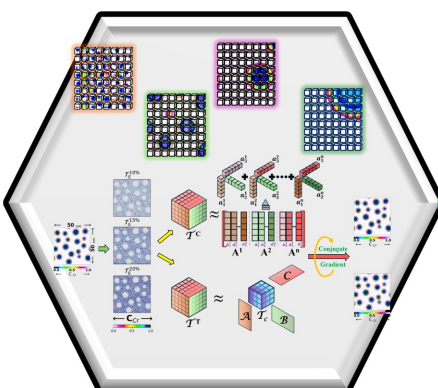
SPIS TREŚCI

Streszczenie graficzne	1
Rozszerzone streszczenie	2
1 Zakres rozprawy doktorskiej	2
2 Cele rozprawy doktorskiej	3
2.1 Cele szczegółowe i teza rozprawy	3
3 Opis przedmiotu badań	4
3.1 Interfejs laser-mikrostruktura ($\mathcal{L}$ - $\mathcal{M}$)	4
3.2 Wielofizyczne modelowanie metodą pola fazowego	5
3.3 Termodynamiczna reprezentacja tensorowa	6
3.4 Uczenie maszynowe oparte na fizyce	7
4 Główna metodologia	8
5 Główne wyniki i dyskusja	9
5.1 Rekonstrukcja tensorowa ewolucji mikrostruktury	9
5.2 Laserowo indukowany wzrost fazy międzymetaliczne Ti_2Cu w $\text{Cu}_x(\text{Ti-6Al-4V})_y$	10
5.3 Predykcja ewolucji mikrostruktury w przestrzeni jawnej	10
5.4 Nieizotermiczne wielofazowe modelowanie pola fazowego	11
5.5 Wirtualne ramy cyfrowego bliźniaka oparte na U-Net	11
6 Publikacje autora i szczegóły wkładu	13
7 Główne wnioski	17
8 Perspektywy dalszych badań	18
Literatura	20

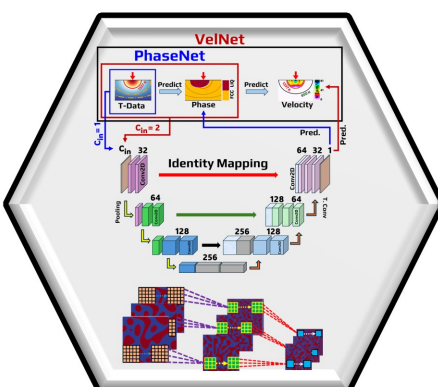
STRESZCZENIE GRAFICZNE



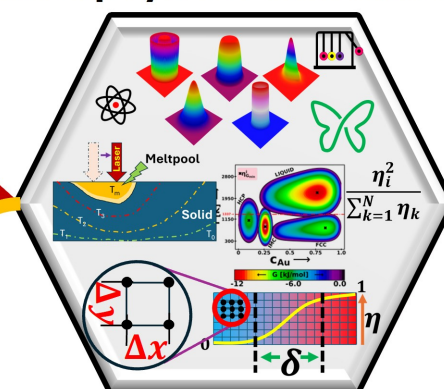
Field & Bulk Properties



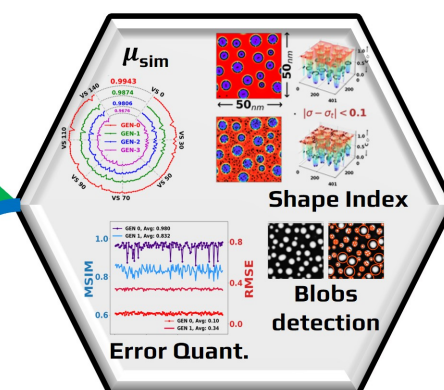
Tensor Computation



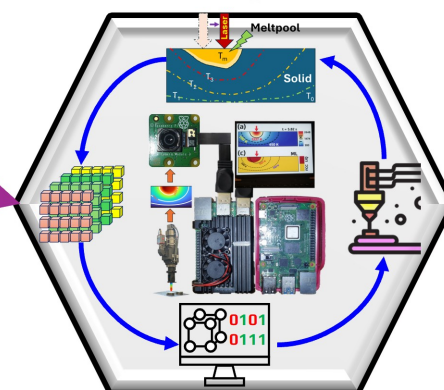
Physics Guided Machine Learning



Interface Quantification



Towards Digital Twin



ROZSZERZONE STRESZCZENIE

1 Zakres rozprawy doktorskiej

Laserowe wytwarzanie przyrostowe oraz laserowa obróbka powierzchni stopów metalicznych obejmują złożone, wzajemnie sprzężone zjawiska cieplne, chemiczne, fazowe i hydrodynamiczne. W trakcie oddziaływania wiązki laserowej z materiałem lokalne dostarczanie energii prowadzi do powstawania silnych gradientów temperatury, intensywnego topnienia i krzepnięcia, wzajemnej dyfuzji składników, reakcji międzyfazowych, przepływu ciekłego metalu w jeziorce oraz przemian fazowych. W przypadku stopów wieloskładnikowych procesy te stają się jeszcze bardziej złożone, ponieważ ewolucja mikrostruktury zależy nie tylko od parametrów procesu laserowego, lecz również od składu chemicznego stopu, lokalnej stabilności termodynamicznej faz, kinetyki dyfuzji pierwiastków oraz ewolucji granic międzyfazowych. Zakres rozprawy obejmuje modelowanie, ilościowy opis, kompresję danych, rekonstrukcję oraz predykcję interfejsu laser-mikrostruktura ($\mathcal{L}$ - $\mathcal{M}$) w układach stopowych. W niniejszej pracy interfejs $\mathcal{L}$ - $\mathcal{M}$ nie jest rozumiany wyłącznie jako geometryczna granica rozdzielająca obszary materiału. Traktowany jest jako dynamiczna strefa, w której współewoluują ewolucja pola temperatury, skład fazowy, rozkład stężeń składników, rozkład energii swobodnej, procesy dyfuzyjne, reakcje międzyfazowe oraz przepływ ciekłego metalu w jeziorce. W rozprawie opracowano ramy obliczeniowe integrujące termodynamicznie uwarunkowane modelowanie metodą pola fazowego, tensorową reprezentację ewolucji mikrostruktury oraz metody uczenia maszynowego uwzględniające prawa fizyki. Elementy te połączono w spójną ścieżkę badawczą prowadzącą do rozwoju cyfrowych bliźniaków dla laserowo przetwarzanych stopów wieloskładnikowych.

Zakres naukowy rozprawy został przedstawiony w pięciu tematycznie powiązanych publikacjach stanowiących jej podstawę. [Artykuł I](#) [1] poświęcono opracowaniu tensorowego opisu oraz rekonstrukcji danych dotyczących ewolucji mikrostruktury w układzie Ti-Cr, wygenerowanych metodą pola fazowego. [Artykuł II](#) [2] łączy badania eksperymentalne, analizę cieplną opartą na metodzie elementów skończonych oraz modelowanie metodą pola fazowego w celu opisu wzrostu międzymetalicznej fazy Ti_2Cu indukowanego oddziaływaniem lasera w układzie $\text{Cu}_x(\text{Ti-6Al-4V})_y$. [Artykuł III](#) [3] przedstawia opracowanie modelu Conv-LSTM przeznaczonego do długoterminowego prognozowania ewolucji mikrostruktury bezpośrednio w przestrzeni fizycznej. [Artykuł IV](#) [4] prezentuje nieizotermiczny, wielofazowy model pola fazowego opisujący oddziaływanie jeziora ciekłego metalu z ziarnami międzymetalicznej fazy Ti_3Au w układzie Ti-Au. [Artykuł V](#) [5] przedstawia architekturę U-Net wspomaganą modelem pola fazowego, przeznaczoną do uczenia morfologii jeziora ciekłego metalu oraz pól prędkości dla różnych profili wiązki laserowej i różnych postaci

funkcji energii swobodnej w jednoskładnikowym układzie Au.

Łącznie prace te tworzą spójne ramy obliczeniowe opisu obszaru interakcji laser-mikrostruktura ($\mathcal{L}-\mathcal{M}$), rozpatrywanego z trzech wzajemnie uzupełniających się perspektyw. **Po pierwsze, wielofizyczne modelowanie** metodą pola fazowego zapewnia fizycznie uzasadniony opis pól temperatury, składu chemicznego, przemian fazowych oraz przepływu ciekłego metalu. **Po drugie, tensorowy opis danych** umożliwia efektywne przechowywanie, kompresję i rekonstrukcję wysokowymiarowych danych mikrostrukturalnych oraz ich analizę w postaci uporządkowanej struktury danych. **Po trzecie, modele uczenia maszynowego** umożliwiają szybkie prognozowanie ewolucji mikrostruktury oraz jeziora ciekłego metalu z zachowaniem informacji przestrzennej i charakteru oddziaływań międzyfazowych.

Rozprawa dotyczy zatem zarówno fizycznych aspektów laserowo indukowanej ewolucji mikrostruktury, jak i zagadnień obliczeniowych związanych z opisem, reprezentacją danych oraz prognozowaniem tej ewolucji w złożonych układach materiałowych.

2 Cele rozprawy doktorskiej

Głównym celem rozprawy jest opracowanie termodynamicznie uwarunkowanych ram obliczeniowych do ilościowego opisu i prognozowania sprzężenia laser-mikrostruktura w wieloskładnikowych układach stopowych poprzez integrację modelowania metodą pola fazowego, tensorowego opisu danych mikrostrukturalnych oraz metod uczenia maszynowego uwzględniających prawa fizyki. Cel ten wynika z potrzeby opisu ewolucji mikrostruktury podczas obróbki laserowej nie tylko za pomocą pojedynczych wielkości skalarnych, takich jak maksymalna temperatura czy głębokość jeziora ciekłego metalu, lecz z wykorzystaniem pełnych pól przestrzenno-czasowych. W rozprawie analizowane są zatem takie zmienne polowe, jak temperatura, rozkład fazowy, skład chemiczny, parametry porządku, prędkość przepływu w jeziorze ciekłego metalu, wzrost faz międzymetalicznych oraz morfologia granic międzyfazowych. Zmienne te są wyznaczone za pomocą symulacji wielofizycznych, zapisywane w postaci tensorowej oraz wykorzystywane jako dane zachowujące interpretowalność fizyczną w procesie prognozowania ewolucji mikrostruktury.

2.1 Cele szczegółowe i teza rozprawy

W realizacji celu głównego rozprawy szczególną uwagę poświęcono modelowaniu laserowo indukowanego rozdziału faz, wzajemnej dyfuzji składników, wzrostu faz międzymetalicznych, ewolucji jeziora ciekłego metalu oraz przemian fazowych z wykorzystaniem metody pola fazowego i metody elementów skończonych. Istotnym elementem badań była również reprezentacja uzyskanych pól przestrzenno-czasowych w postaci danych tensorowych przeznaczonych do kompresji,

rekonstrukcji i analizy. Ponadto przeprowadzono ilościową charakterystykę cech międzyfazowych i morfologicznych z wykorzystaniem deskryptorów podobieństwa, kształtu, geometrii jeziorka ciekłego metalu, grubości warstw międzymetalicznych, liczby Lewisa oraz pozycyjnego opóźnienia czasowego. Opracowano również modele uczenia maszynowego przeznaczone do prognozowania mikrostruktury, stanu fazowego oraz pól prędkości przepływu w jeziorku ciekłego metalu bezpośrednio w domenie przestrzennej.

Teza rozprawy zakłada, że termodynamicznie spójne dane pochodzące z symulacji wielofizycznych, zapisane w postaci tensorowej i wykorzystane w modelach uczenia maszynowego, mogą zachowywać oraz umożliwiać prognozowanie przestrzennych, czasowych i międzyfazowych cech laserowo indukowanej ewolucji mikrostruktury. Takie zintegrowane podejście stanowi podstawę rozwoju modeli cyfrowych bliźniaków przeznaczonych do opisu i prognozowania sprzężenia laser-mikrostruktura w wieloskładnikowych układach stopowych.

3 Opis przedmiotu badań

3.1 Interfejs laser-mikrostruktura ($\mathcal{L}$ - $\mathcal{M}$)

Przedmiotem badań rozprawy jest obszar interakcji $\mathcal{L}$ - $\mathcal{M}$ w układach stopowych, obejmujący sprzężone oddziaływanie pola laserowego, pola temperatury oraz ewoluującej mikrostruktury. Obszar ten powstaje i ulega ciągłej transformacji podczas obróbki laserowej, gdy poruszające się źródło ciepła generuje lokalne, silnie niejednorodne pole temperatury, inicjując tworzenie, wzrost, rozpuszczanie oraz migrację granic fazowych. W niniejszej rozprawie obszar interakcji $\mathcal{L}$ - $\mathcal{M}$ rozumiany jest jednocześnie jako układ fizyczny oraz jako obiekt reprezentacji danych. W sensie fizycznym obejmuje on strefę koncentracji granic międzyfazowych, gradientów składu chemicznego, gradientów temperatury oraz reakcji międzyfazowych. W sensie informacyjnym stanowi natomiast fragment układu, którego morfologia i dynamika muszą zostać zachowane w danych obliczeniowych, a następnie poprawnie odwzorowane i przewidywane przez modele predykcyjne. Podczas obróbki laserowej pole temperatury jest pierwszym polem bezpośrednio kształtowanym przez zewnętrzne parametry procesu, takie jak moc lasera, gęstość mocy, prędkość skanowania, promień wiązki oraz jej rozkład przestrzenny. Odpowiedź mikrostrukturalna nie następuje jednak natychmiastowo po zmianie pola cieplnego. Ewolucja faz, dyfuzja chemiczna, tworzenie faz międzymetalicznych oraz ruch jeziorka ciekłego metalu mogą być przesunięte względem propagującego się frontu cieplnego. Z tego względu istotną część rozprawy stanowi ilościowa ocena różnic pomiędzy frontem cieplnym a frontem fazowym lub chemiczno-dyfuzyjnym. Zjawisko wyprzedzania i opóźnienia pomiędzy frontami cieplnymi i fazowymi, kwantyfikowane za pomocą liczby Lewisa oraz pozycyjnego opóźnienia czasowego, przedstawiono Rysunku 1.

zachowane, takie jak skład, są opisywane równaniami typu konwekcyjno-dyfuzyjnego lub Cahn-Hilliarda, natomiast zmienne niezachowane, takie jak parametry porządku, są opisywane równaniami typu Allena-Cahna. Siłą napędową ewolucji jest energia swobodna układu, zależna od składu, temperatury, stanu fazowego i energii międzyfazowej.

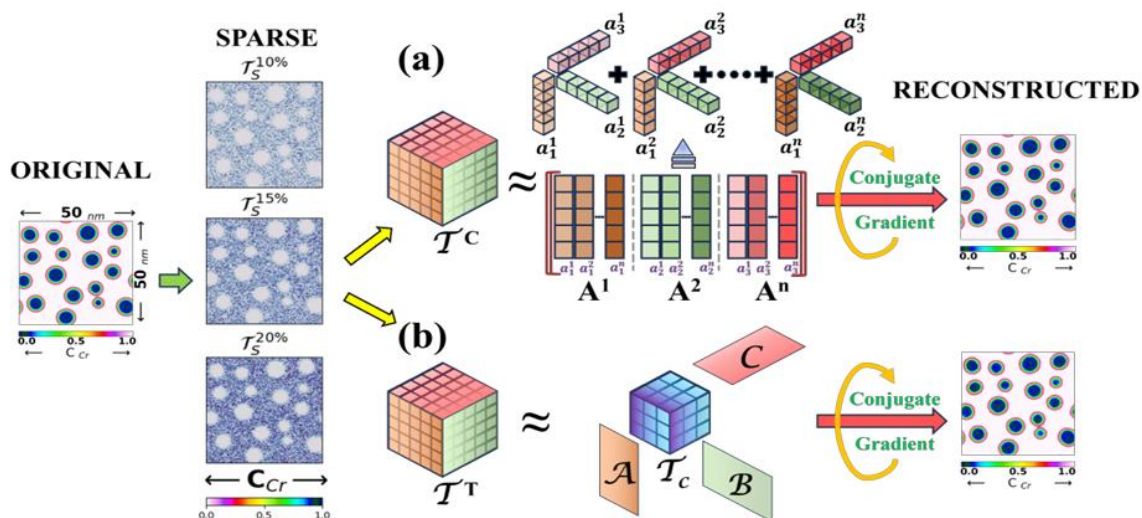
W układzie Ti-Cr symulacje pola fazowego wykorzystano do generowania danych opisujących ewolucję mikrostruktury związaną z rozdziałem faz oraz efektami elasto-chemicznymi. Otrzymane pola mikrostrukturalne potraktowano jako wysokowymiarowe tensory, które następnie poddano rozrzedzaniu, dekompozycji oraz rekonstrukcji. W układzie $\text{Cu}_x(\text{Ti-6Al-4V})_y$ analizę przepływu ciepła metodą elementów skończonych sprzężono z modelowaniem pola fazowego w celu określenia warunków termodynamicznych sprzyjających wzrostowi fazy międzymetalicznej Ti_2Cu . W układzie Ti-Au opracowano nieizotermiczny, wielofazowy model pola fazowego umożliwiający analizę sprzężenia pomiędzy tworzeniem jeziora ciekłego metalu, interdyfuzją, wzrostem ziaren Ti_3Au , transportem ciepła oraz przepływem płynu. Z kolei w jednoskładnikowym układzie Au model pola fazowego sprzężono z transportem ciepła i przepływem w jezioru ciekłego metalu, aby porównać wpływ różnych profili wiązki laserowej: Gaussian, Flat-Top, Ring oraz Bessel.

Wspólną cechą przeprowadzonych badań jest wykorzystanie zależnych od temperatury, a w uzasadnionych przypadkach również zależnych od składu chemicznego, informacji termodynamicznych. Energia swobodna układu nie jest w rozprawie traktowana jako wyłącznie matematyczne uproszczenie, lecz jako fizycznie uzasadniona siła napędowa determinująca stabilność faz, kinetykę przemian oraz ruch granic międzyfazowych. Ogólne powiązanie metodologiczne pomiędzy termodynamiką, wielofizycznym modelowaniem metodą pola fazowego, reprezentacją tensorową, uczeniem maszynowym oraz rozwojem cyfrowych bliźniaków podsumowano na Rysunku 2.

3.3 Termodynamiczna reprezentacja tensorowa

Termodynamiczny Model Tensorowy stanowi reprezentacyjny komponent rozprawy, łączący wyniki wielofizycznych symulacji z ich zwartą, wielowymiarową reprezentacją danych. Symulacje pola fazowego generują duże czasowo-przestrzenne zbiory danych, których bezpośrednie przechowywanie, przesyłanie, rekonstrukcja oraz ponowne wykorzystanie są obliczeniowo wymagające. Zbiory te obejmują zmienne polowe zmieniające się w czasie i przestrzeni, takie jak stan fazowy, skład chemiczny, temperatura, odkształcenie czy prędkość przepływu. Traktowanie ich wyłącznie jako sekwencji obrazów lub niezależnych tablic prowadziłoby do utraty części informacji o ich naturalnej strukturze wielowymiarowej oraz wzajemnych zależnościach pomiędzy wymiarami fizycznymi, przestrzennymi i czasowymi.

Reprezentacja tensorowa pozwala ograniczyć to niedopasowanie poprzez kodowanie ewolucji mi-



Rysunek 3. Rozrzadzanie, dekompozycja i rekonstrukcja danych mikrostrukturalnych pola fazowego [1].

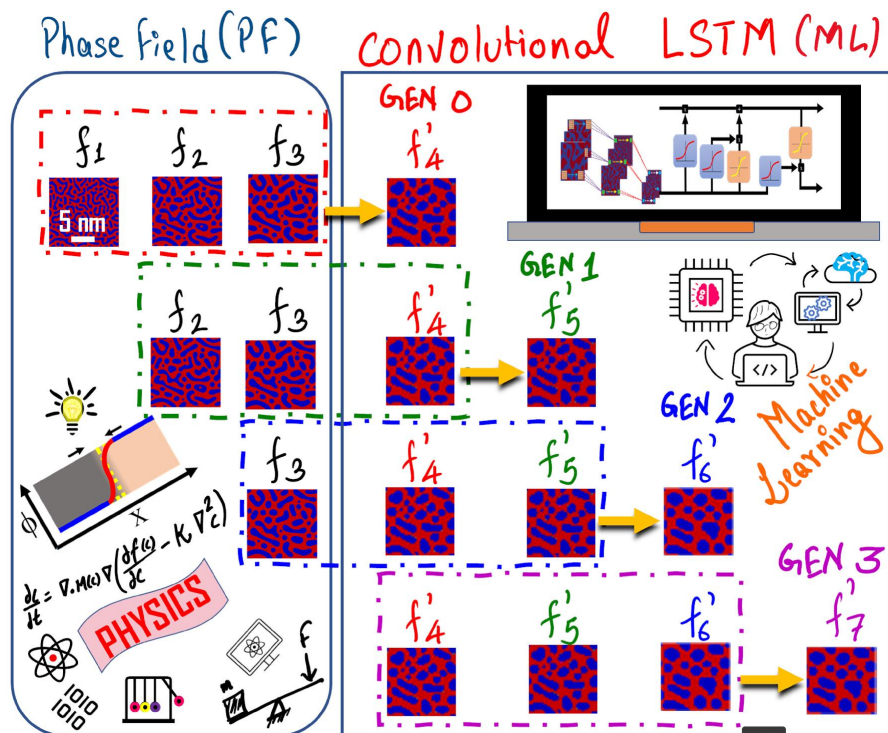
rostruktury w postaci uporządkowanych, wielowymiarowych tablic zachowujących zależności przestrzenne, czasowe i fizyczne. W [Artykule I](#) dane opisujące ewolucję mikrostruktury w układzie Ti-Cr, wygenerowane metodą pola fazowego, przekształcono w tensory gęste, które następnie poddano kontrolowanemu rozrzadzaniu. Metody dekompozycji i rekonstrukcji tensorów, w tym dekompozycje Canonical Polyadic oraz Tucker, oceniono pod kątem możliwości odzyskania morfologii mikrostruktury oraz informacji międzyfazowej z danych niekompletnych. Przepływ pracy obejmujący rozrzadzanie, dekompozycję i rekonstrukcję tensorową przedstawiono na Rysunku 3. Wyniki wykazały, że rekonstrukcja tensorowa może znacząco zmniejszyć rozmiar danych przy jednoczesnym zachowaniu istotnych informacji mikrostrukturalnych. W kontekście tytułu rozprawy termin **Termodynamiczny Model Tensorowy** odnosi się do szerszej koncepcji, zgodnie z którą pola termodynamiczne i mikrostrukturalne mogą być reprezentowane jako obiekty tensorowe zachowujące relacje przestrzenne, czasowe oraz fizyczne. Dzięki temu obszerne wyniki symulacji stają się zwartymi, przenośnymi i możliwymi do uczenia strukturami danych, przydatnymi w rozwoju cyfrowych bliźniaków. Model tensorowy pełni zatem funkcję pomostu pomiędzy szczegółowymi symulacjami opartymi na fizyce i skalowalną predykcją opartą na danych.

3.4 Uczenie maszynowe oparte na fizyce

Ostatnim komponentem badawczym rozprawy jest uczenie maszynowe oparte na fizyce, służące do predykcji ewolucji mikrostruktury oraz geometrii jeziora ciekłego metalu. Konwencjonalne podejścia uczenia maszynowego często prowadzą do utraty informacji na poziomie granic międzyfazowych, co ogranicza fizyczną interpretowalność uzyskiwanych predykcji. W rozprawie nacisk położono natomiast na **uczenie w jawnej przestrzeni pól**, w której model bezpośrednio przewi-

duże przestrzenne rozkłady zmiennych mikrostrukturalnych.

[Artykuł III](#) rozwija ramy Conv-LSTM do wielogeneracyjnej predykcji ewolucji mikrostruktury. Model wykorzystuje sekwencje obrazów wygenerowane metodą pola fazowego i przewiduje kolejne klatki, zachowując morfologię międzyfazową. Strategię wielogeneracyjnej predykcji, w której klatki symulacyjne są stopniowo zastępowane klatkami przewidzianymi, przedstawiono na Rysunek 4. Predykcje oceniono za pomocą miar podobieństwa, analizy indeksu kształtu, detekcji obiektów i deskryptorów histogramowych w celu potwierdzenia zachowania informacji na poziomie interfejsu.



Rysunek 4. Wielogeneracyjna predykcja mikrostruktury z wykorzystaniem Conv-LSTM [3].

W [Artykule V](#) rozwinięto dwuetapową architekturę opartą na U-Net, przeznaczoną do predykcji geometrii i dynamiki laserowego jeziora ciekłego metalu. Pierwszy model, **MicroTwin**, przewiduje rozkład faz na podstawie pola temperatury. Drugi model, **FlowTwin**, przewiduje pola prędkości, wykorzystując zarówno temperaturę, jak i przewidzianą informację fazową. Takie podejście tworzy fizycznie uzasadniony łańcuch predykcji, w którym pole temperatury zostaje powiązane ze stanem fazowym oraz przepływem w jeziorce ciekłego metalu. Wirtualny przepływ pracy cyfrowego bliźniaka, oparty na modelach MicroTwin i FlowTwin, przedstawiono na Rysunku 5.

4 Główna metodologia

Metodologia rozprawy obejmuje **cztery poziomy modelowania i analizy**. **Pierwszy poziom** stanowią symulacje wielofizyczne. Modele pola fazowego służą do opisu rozdziału faz, przemian fazowych, ruchu granic międzyfazowych oraz wzrostu faz międzymetalicznych. Równania trans-

portu ciepła opisują przejściowe pole temperatury generowane przez wiązkę laserową, natomiast równania przepływu płynu pozwalają odwzorować ruch jeziorka ciekłego metalu w obszarach fazy ciekłej. Dane termodynamiczne są uwzględniane poprzez opis energii swobodnej, diagramy fazowe, zależne od temperatury właściwości materiałowe oraz zależności dopasowane do danych lub pochodzące bezpośrednio z baz termodynamicznych.

Drugim poziomem metodologii jest reprezentacja danych. Wyniki symulacji są przekształcane w uporządkowane dane czasowo-przestrzenne, zachowujące relacje pomiędzy wymiarami fizycznymi, przestrzennymi i czasowymi. W badaniu układu Ti-Cr ewolucja mikrostruktury została zapisana w postaci tensorowej, a następnie poddana kontrolowanemu rozrzedzaniu i rekonstrukcji z wykorzystaniem dekompozycji CP oraz Tucker. Pozwoliło to ocenić, w jakim stopniu skompresowana reprezentacja danych zachowuje morfologię mikrostruktury oraz informację na poziomie granic międzyfazowych.

Trzecim poziomem metodologii jest kwantyfikacja czuła na granice międzyfazowe. Zamiast oceniać wyniki symulacji i predykcji wyłącznie za pomocą miar globalnych, w rozprawie zastosowano deskryptory ukierunkowane na zachowanie morfologii, geometrii i dynamiki obszaru międzyfazowego. Obejmują one miary podobieństwa i błędu, takie jak indeks podobieństwa mikrostrukturalnego oraz błąd średniokwadratowy, deskryptory morfologiczne, w tym detekcję obiektów i indeks kształtu, a także wielkości fizyczne związane z polem fazowym, geometrią jeziorka ciekłego metalu, grubością warstwy międzymetalicznej, temperaturą, prędkością przepływu, liczbą Lewisa oraz pozycyjnym opóźnieniem czasowym.

Czwartym poziomem metodologii jest predykcja z wykorzystaniem uczenia maszynowego. Modele Conv-LSTM trenowane są do wielokrokowego prognozowania ewolucji mikrostruktury, natomiast modele U-Net służą do przewidywania pól fazowych i pól prędkości na podstawie danych temperaturowych. Modele te pełnią funkcję przyspieszonych modeli zastępczych, uczonych na danych symulacyjnych uwarunkowanych termodynamicznie i fizycznie, a tym samym wspierają rozwój cyfrowych bliźniaków procesów laserowych.

5 Główne wyniki i dyskusja

5.1 Rekonstrukcja tensorowa ewolucji mikrostruktury

W [Artykule I](#) wykazano, że dane opisujące ewolucję mikrostruktury, wygenerowane metodą pola fazowego, mogą być skutecznie reprezentowane w postaci tensorowej, kompresowane oraz rekonstruowane przy zachowaniu istotnych informacji morfologicznych. W układzie Ti-Cr rozdział faz zasymulowano metodą pola fazowego, a uzyskane dane czasowo-przestrzenne przekształcono w wysokowymiarowe tensory. Następnie zastosowano kontrolowane rozrzedzanie danych oraz ich

rekonstrukcję z wykorzystaniem dekompozycji CP i Tucker.

Wyniki pokazały, że pierwotny zbiór danych pola fazowego może zostać znacząco zredukowany bez utraty podstawowych cech mikrostruktury. Dekompozycja Tucker wykazała większą skuteczność niż dekompozycja CP w zachowaniu podobieństwa mikrostrukturalnego oraz cech związanych z odkształceniem sprężystym. Uzyskano 28-krotne zmniejszenie rozmiaru danych przy zachowaniu zasadniczej struktury mikrostruktury. Wynik ten potwierdza przydatność reprezentacji tensorowej jako zwartej i rekonstruowalnej formy danych dla informatyki mikrostrukturalnej oraz przepływów pracy ukierunkowanych na rozwój cyfrowych bliźniaków.

5.2 Laserowo indukowany wzrost fazy międzymetaliczne Ti_2Cu w $Cu_x(Ti-6Al-4V)_y$

W [Artykule II](#) analizowano laserowe stopowanie powierzchniowe stopu Ti-6Al-4V miedzią oraz proces tworzenia fazy międzymetalicznej Ti_2Cu . Badanie łączyło obserwacje eksperymentalne z obliczeniową analizą przepływu ciepła oraz modelowaniem metodą pola fazowego. Model elementów skończonych wykorzystano do odtworzenia przejściowej historii cieplnej generowanej podczas obróbki laserowej, natomiast model pola fazowego posłużył do opisu wzrostu fazy międzymetalicznej w osnowie stopu Ti-6Al-4V. Wyniki obliczeniowe wykazały, że w symulowanych warunkach cieplnych wzrost fazy Ti_2Cu jest termodynamicznie korzystny. Lokalne pole temperatury zapewniało warunki sprzyjające interdyfuzji składników oraz tworzeniu fazy międzymetalicznej. Wyniki modelowania pola fazowego wskazały ponadto na niejednorodny charakter wzrostu ziaren, zależny między innymi od efektów krzywizny występujących pomiędzy sąsiednimi ziarnami. W kontekście rozprawy [Artykuł II](#) stanowi eksperymentalnie powiązany przykład analizy zjawisk zachodzących w obszarze interakcji laser-materiał w wieloskładnikowym układzie materiałowym. Praca ta rozszerza zakres rozprawy o powiązanie modelowania cieplnego, przemian fazowych oraz obserwacji mikrostrukturalnych w warunkach laserowego modyfikowania powierzchni stopu tytanu.

5.3 Predykcja ewolucji mikrostruktury w przestrzeni jawnej

W [Artykule III](#) opracowano ramy obliczeniowe oparte na architekturze Conv-LSTM, przeznaczone do predykcji ewolucji mikrostruktury bezpośrednio w domenie przestrzennej. Model trenowano na sekwencjach mikrostrukturalnych wygenerowanych metodą pola fazowego. W odróżnieniu od podejść wykorzystujących przestrzeń ukrytą, zaproponowany model operował bezpośrednio na polach mikrostrukturalnych reprezentowanych w postaci obrazów, zachowując przestrzenny układ faz oraz granic międzyfazowych. Model umożliwił predykcję wielokrokową, w której przewidziane klatki były kolejno wykorzystywane jako dane wejściowe do prognozowania następnych stanów mikrostruktury. Uzyskane wyniki wykazały wysokie podobieństwo przewidywanych mikrostruk-

tur do rezultatów otrzymanych metodą pola fazowego, osiągając wartości indeksu podobieństwa wynoszące 0,994, 0,987, 0,980 i 0,967 dla czterech kolejnych kroków predykcji. Analiza indeksu kształtu, detekcja obiektów, porównanie histogramów oraz zastosowane miary podobieństwa potwierdziły zachowanie istotnych cech morfologicznych, w tym cech związanych z przebiegiem granic międzyfazowych. Opracowane ramy zastosowano również do układów Pd-Rh i Cu-Mn, potwierdzając ich przydatność do czasowo świadomej predykcji ewolucji mikrostruktury w wybranych stopach inżynierskich. W kontekście rozprawy [Artykuł III](#) stanowi istotny etap przejścia od klasycznego modelowania pola fazowego do metod uczenia maszynowego wspierających predykcję zmian mikrostrukturalnych w czasie.

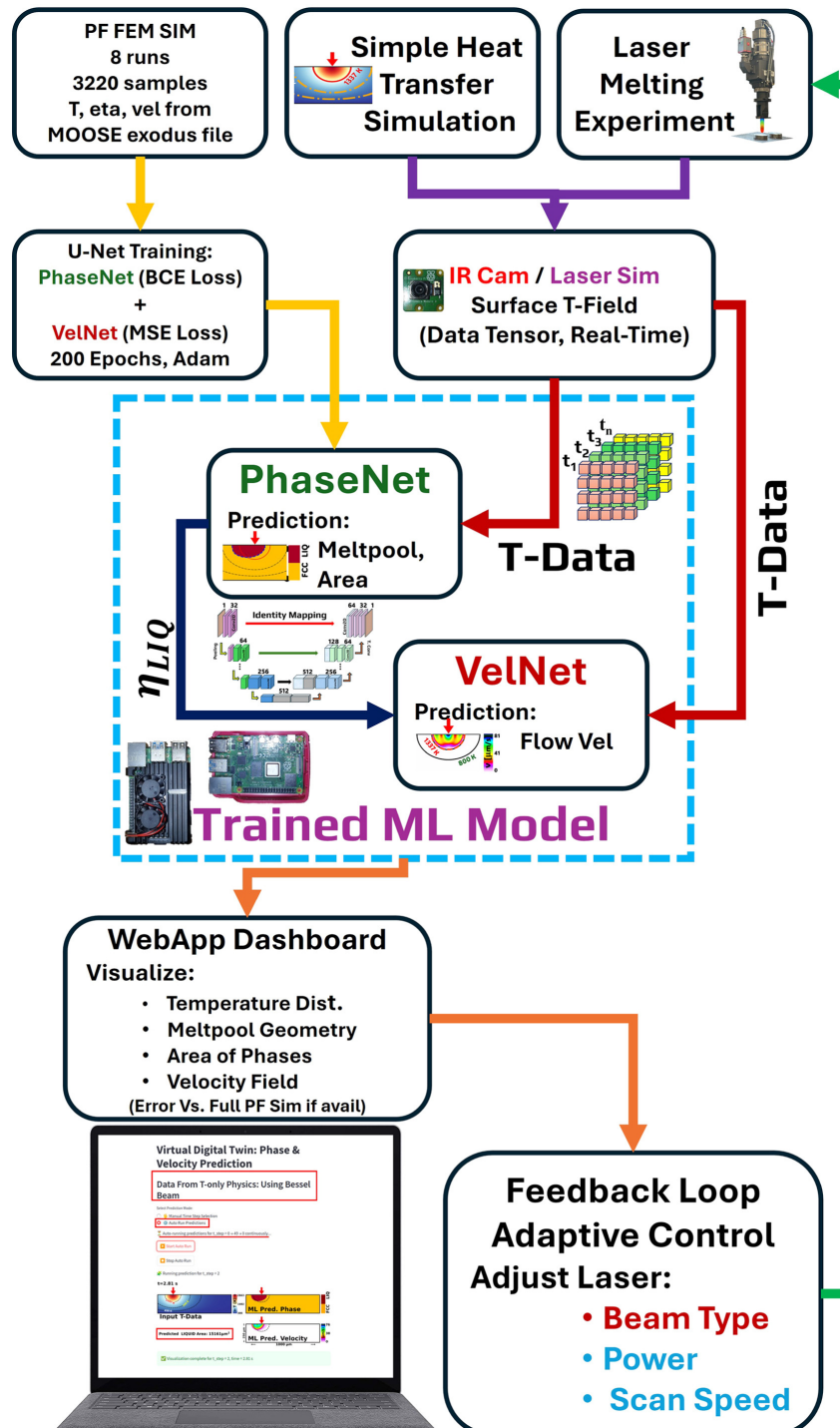
5.4 Nieizotermiczne wielofazowe modelowanie pola fazowego

W [Artykule IV](#) opracowano nieizotermiczny, wielofazowy model pola fazowego dla układu Ti-Au, obejmujący transport ciepła, ewolucję pola fazowego, interdyfuzję składników, tworzenie jeziora ciekłego metalu, wzrost fazy Ti_3Au oraz efekty przepływu płynu. Zależny od temperatury i składu chemicznego opis energii swobodnej wykorzystano do określenia stabilności termodynamicznej faz HCP, FCC, ciekłej oraz fazy międzymetalicznej Ti_3Au . Wyniki wykazały, że gęstość mocy lasera oraz prędkość skanowania istotnie wpływają na geometrię jeziora ciekłego metalu, warunki transportu ciepła i wzrost fazy międzymetalicznej. Przy większym strumieniu ciepła głębokość jeziora wzrosła z 158 do 180 nm, natomiast grubość warstwy Ti_3Au osiągnęła 364 nm, co odpowiada wzrostowi o 25% w porównaniu z warunkami niższej gęstości mocy. Kluczowym wynikiem pracy była identyfikacja zjawiska wyprzedzania i opóźnienia pomiędzy frontem cieplnym i frontem fazowym, przedstawionego wcześniej na rysunku 1. Wykazano tym samym, że same izotermy temperatury nie są wystarczające do pełnego opisu ruchu frontu fazowego, ewolucji granic międzyfazowych oraz lokalnych przemian zachodzących podczas laserowego przetwarzania układu Ti-Au. W kontekście rozprawy [Artykuł IV](#) stanowi istotne rozszerzenie modelowania pola fazowego w kierunku sprzężonego opisu zjawisk cieplnych, dyfuzyjnych, fazowych i hydrodynamicznych w obszarze interakcji laser-materiał.

5.5 Wirtualne ramy cyfrowego bliźniaka oparte na U-Net

W [Artykule V](#) rozszerzono zakres rozprawy w kierunku rozwoju cyfrowych bliźniaków wspomaganych metodami uczenia maszynowego. Badanie obejmowało porównanie laserowej obróbki jednoskładnikowego Au z zastosowaniem czterech profili wiązki laserowej: Gaussian, Flat-Top, Ring oraz Bessel. Rozważono dwa opisy energii swobodnej: funkcję dopasowaną oraz termodynamicznie spójną funkcję pochodzącą z bazy TDB. Symulacje pola fazowego obejmowały obli-

czenia rozkładu temperatury, ewolucji faz, morfologii jeziora ciekłego metalu oraz pól prędkości. Przeprowadzone porównanie wykazało, że zarówno profil wiązki laserowej, jak i opis energii swobodnej istotnie wpływają na maksymalną temperaturę, geometrię jeziora ciekłego metalu, ewolucję faz oraz charakter przepływu. Opis energii swobodnej oparty na bazie TDB wyraźniej



Rysunek 5. Wirtualny cyfrowy bliźniak wykorzystujący MicroTwin i FlowTwin [5].

odtworzył zjawisko wyprzedzania i opóźnienia pomiędzy frontem cieplnym i frontem fazowym niż funkcja dopasowana. Wynik ten podkreśla znaczenie spójności termodynamicznej w nieizotermicznym modelowaniu metodą pola fazowego. Dane symulacyjne wykorzystano następnie do

trenowania modeli surogatowych opartych na architekturze U-Net. Model MicroTwin przewidywał ewolucję faz na podstawie pola temperatury, osiągając dokładność dla zbiorów treningowego, walidacyjnego i testowego odpowiednio 0,9992, 0,9989 i 0,9979. Model FlowTwin przewidywał prędkość przepływu w jeziorku ciekłego metalu z wykorzystaniem pola temperatury oraz informacji fazowej, uzyskując testową wartość współczynnika R^2 równą 0,999. Opracowane ramy łączą termodynamicznie uwarunkowane symulacje pola fazowego z szybką predykcją ewolucji faz oraz pól prędkości. W kontekście rozprawy [Artykuł V](#) stanowi końcowy etap integracji modelowania fizycznego i uczenia maszynowego, wskazując ścieżkę do reprezentacji obszaru interakcji laser-materiał w postaci cyfrowego bliźniaka. Zależność tę podsumowano schematycznie na Rysunku [5](#).

6 Publikacje autora i szczegóły wkładu

Rozprawa doktorska opiera się na pięciu tematycznie powiązanych publikacjach naukowych. W [Artykułach I, III, IV i V](#) autor rozprawy jest **pierwszym** oraz **korespondencyjnym autorem**. W publikacjach tych zrealizował zasadniczą część pracy naukowej, obliczeniowej i analitycznej, obejmującą konceptualizację badań, rozwój modeli, projektowanie symulacji, implementację kodu, generowanie danych, analizę formalną, walidację, wizualizację, interpretację wyników oraz przygotowanie pierwotnych wersji manuskryptów. Nadzór naukowy, administracja projektem, pozyskanie finansowania oraz końcowy przegląd merytoryczny zostały zrealizowane przy udziale współautorów. W [Artykule II](#) wkład autora koncentrował się przede wszystkim na części obliczeniowej, w szczególności na symulacjach metodą pola fazowego, rozwoju kodu, wizualizacji, analizie formalnej oraz interpretacji wyników numerycznych.

Artykuł I

U. Subedi, N. Moelans, T. Tański and A. Kunwar, “Rapid portabilization of elasto-chemical evolution data for dental Ti-Cr alloy microstructure through sparsification and tensor computation.” *Scripta Materialia*, 2024, [1]. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2024.116027>.

Wkład autora – 71 %

Autor rozprawy był **pierwszym i korespondencyjnym autorem** publikacji, a jego deklarowany wkład wynosił 71%. Odpowiadał za główną koncepcję naukową pracy, obejmującą reprezentację danych opisujących ewolucję mikrostruktury układu Ti-Cr, wygenerowanych metodą pola fazowego, w postaci tensorowej oraz zastosowanie rozrzedzania, dekompozycji i rekonstrukcji tensorowej w informatyce mikrostrukturalnej. Autor opracował i przeprowadził symulacje rozdziału faz w układzie Ti-Cr, przygotował zbiory danych mikrostrukturalnych, przekształcił wyniki symulacji w gęste i rozrzedzone reprezentacje tensorowe, zaimplementował przepływ pracy obejm-

mujący dekompozycję i rekonstrukcję tensorową oraz wykonał porównanie metod CP i Tuckera. Ponadto przeprowadził analizę formalną i walidację zrekonstruowanych mikrostruktur z wykorzystaniem deskryptorów ilościowych, takich jak podobieństwo mikrostrukturalne, RMSE, detekcja obiektów oraz analiza indeksu kształtu. Przygotował również wizualizacje wyników symulacji pola fazowego, przepływu pracy tensorowej, zrekonstruowanych mikrostruktur oraz wykresów porównawczych. Autor interpretował uzyskane wyniki w odniesieniu do zachowania informacji o odkształceniu sprężystym, rekonstrukcji morfologii mikrostruktury oraz możliwości wykorzystania tensorowo skompresowanych danych w cyfrowej inżynierii materiałowej. Pierwotna wersja manuskryptu została przygotowana przez autora rozprawy.

Artykuł II

H.B. Mamo, U. Subedi, T. Poloczek, M. Adamiak, A.N.S. Appiah, M. Skonieczna, P.M. Nuckowski, Y. Geng, B. Haldar, and A. Kunwar “Prototyping Ti₂Cu intermetallic grain growth heterogeneously in Ti6Al4V matrix through laser additive manufacturing” *Materials & Design*, 2024, [2]. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2024.113312>.

Wkład autora – 16%

Autor rozprawy wniósł 16% wkładu w publikację. Jego udział dotyczył przede wszystkim modelowania obliczeniowego oraz analizy numerycznej. Autor opracował i zaimplementował ramy symulacji metodą pola fazowego, służące opisowi wzrostu fazy międzymetalicznej Ti₂Cu w osnowie stopu Ti-6Al-4V w warunkach obróbki laserowej. Zakres ten obejmował rozwój kodu, implementację modelu, wykonanie symulacji, wizualizację ewolucji ziaren fazy międzymetalicznej oraz analizę formalną wyników obliczeniowych. Autor uczestniczył także w interpretacji termodynamicznych i fazowo-polowych aspektów pracy, w szczególności zależności pomiędzy siłą napędową wynikającą z energii swobodnej, interdyfuzją składników, efektami krzywizny oraz niejednorodnym wzrostem ziaren fazy Ti₂Cu. Wkład autora obejmował również walidację i wizualizację wyników numerycznych, a także udział w przeglądzie oraz redakcji manuskryptu. Laserowe stopowanie powierzchniowe, charakterystyka mikrostrukturalna, badania mikrobiologiczne oraz analiza eksperymentalna zostały wykonane przez pozostałych współautorów. Wkład autora rozprawy, w tym artykule dotyczył zatem głównie obliczeniowego modelowania metodą pola fazowego oraz analizy mechanizmu wzrostu fazy międzymetalicznej Ti₂Cu.

Artykuł III

U. Subedi, N. Moelans, T. Tański and A. Kunwar, “Foretelling microstructural interface with multi-generational convolutional-LSTM framework.” *Engineering with Computers*, 2025, [3]. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00366-025-02117-z>.

Wkład autora – 72%

Autor rozprawy jest **pierwszym i korespondencyjnym autorem** publikacji, a jego deklarowany wkład wynosił 72%. Odpowiadał za główną koncepcję opracowania ram uczenia maszynowego działających bezpośrednio w domenie przestrzennej, przeznaczonych do prognozowania ewolucji mikrostruktury na podstawie danych wygenerowanych metodą pola fazowego. Autor zaprojektował sposób realizacji obliczeń oraz przygotowania danych do uczenia modeli sieci neuronowych, wygenerował zbiory danych z symulacji pola fazowego dla rozdziału faz w stopach binarnych, wyodrębnił i przetworzył czasowo-przestrzenne sekwencje obrazów oraz przygotował zbiory treningowe, walidacyjne i testowe dla modeli sieci neuronowych. Autor opracował i wytrenował architektury Conv-LSTM wykorzystane do wielokrokowej predykcji ewolucji mikrostruktury. Zakres ten obejmował projektowanie i porównanie różnych struktur wejścia-wyjścia, implementację procesu uczenia, predykcję kolejnych stanów mikrostruktury oraz ocenę jakości modeli. Ponadto przeprowadził pełną analizę formalną przewidzianych mikrostruktur z wykorzystaniem miar podobieństwa, porównania histogramów, detekcji obiektów oraz analizy indeksu kształtu, w celu weryfikacji zachowania istotnych cech morfologicznych, w tym informacji związanych z przebiegiem granic międzyfazowych. Autor zastosował również wytrenowany model do wybranych przykładów stopów inżynierskich oraz zinterpretował wyniki w kontekście redukcji kosztu obliczeniowego i predykcji mikrostruktury z zachowaniem informacji przestrzennej. Wszystkie główne wizualizacje, w tym schematy przepływu pracy sieci neuronowej, przygotowania danych pola fazowego, wyniki predykcji oraz wykresy walidacji ilościowej, zostały przygotowane przez autora. Pierwotna wersja manuskryptu została napisana przez autora rozprawy.

Artykuł IV

U. Subedi, N. Moelans, T. Tański and A. Kunwar, “A non-isothermal multi-phase field approach to model the meltpool and IMC grains interaction in Ti-Au material” *Computational Materials Science*, 2025, [4]. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2025.113875>.

Wkład autora – 70%

Autor rozprawy był **pierwszym i korespondencyjnym autorem** publikacji, a jego deklarowany wkład wynosił 70%. Odpowiadał za opracowanie głównej koncepcji badawczej oraz ram obliczeniowych do modelowania zjawisk zachodzących podczas laserowej obróbki układu Ti-Au, w szczególności tworzenia jeziora ciekłego metalu oraz wzrostu ziaren fazy międzymetalicznej Ti_3Au . Autor sformułował i zaimplementował nieizotermiczny, wielofazowy model pola fazowego, obejmujący zależny od temperatury i składu chemicznego opis energii swobodnej, równania pola fazowego, sprzężenie z transportem ciepła, reprezentację jeziora ciekłego metalu oraz wzrost fazy

międzymetalicznej napędzany dyfuzyjnym transportem składników. Autor wykonał symulacje obliczeniowe dla różnych poziomów gęstości mocy lasera oraz prędkości skanowania. Przeprowadził również analizę formalną ewolucji faz, geometrii jeziora ciekłego metalu, wzrostu fazy międzymetalicznej, stabilności faz oraz zmian energii swobodnej. Opracował i zastosował analizę ilościową zjawiska wyprzedzania i opóźnienia pomiędzy frontem cieplnym a frontem fazowym, wykorzystując liczbę Lewisa oraz opóźnienie czasowe określane na podstawie położenia frontów. Analizy te posłużyły do interpretacji różnic pomiędzy propagacją ciepła i ewolucją chemiczną i fazową podczas obróbki laserowej. Autor przygotował zbiory danych symulacyjnych, przeprowadził walidację i interpretację numeryczną oraz opracował wizualizacje domeny obliczeniowej, ewolucji faz, pól cieplnych, zachowania jeziora ciekłego metalu, wzrostu fazy międzymetalicznej oraz miar opóźnienia. Pierwotna wersja manuskryptu została przygotowana przez autora rozprawy.

Artykuł V

U. Subedi, A. Bhattarai, N. Moelans, T. Tański and A. Kunwar, “Spatiotemporally learning the morphological and dynamic features of Au meltpool under different heat source types with phase-field informed U-Net framework” *Computational Materials Science*, 2025, [5].

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2025.114456>.

Wkład autora – 60%

Autor rozprawy był **pierwszym i korespondencyjnym autorem** publikacji, a jego deklarowany wkład wynosił 60%. Odpowiadał za opracowanie głównej koncepcji naukowej pracy, polegającej na połączeniu symulacji metodą pola fazowego z uczeniem maszynowym opartym na architekturze U-Net w celu przewidywania ewolucji faz, morfologii jeziora ciekłego metalu oraz pól prędkości. Autor sformułował i zaimplementował ramy symulacji pola fazowego dla jednoskładnikowego Au przy różnych profilach wiązki laserowej, obejmujących profile Gaussian, Flat-Top, Ring oraz Bessel. Zaimplementował i porównał również dwa opisy energii swobodnej: funkcję dopasowaną oraz termodynamicznie spójną funkcję opartą na bazie TDB. Celem tego porównania była ocena wpływu opisu energii swobodnej na ewolucję faz oraz zjawisko wyprzedzania i opóźnienia pomiędzy frontem cieplnym i frontem fazowym. Autor wygenerował zbiory danych symulacyjnych oraz przeanalizował pola temperatury, ewolucję faz, morfologię jeziora ciekłego metalu, prędkość przepływu, odpowiedź cieplną zależną od profilu wiązki laserowej oraz różnice wynikające z zastosowanego opisu energii swobodnej. Uczestniczył także w opracowaniu procedury uczenia maszynowego informowanej wynikami symulacji pola fazowego, w której pierwszy model przewidywał morfologię fazy i jeziora ciekłego metalu na podstawie pola temperatury, natomiast drugi model przewidywał pola prędkości na podstawie pola temperatury oraz informacji fazowej. Autor

przeprowadził analizę formalną, walidację, interpretację oraz wizualizację wyników symulacyjnych i wyników uczenia maszynowego. Autor przygotował również interpretację pracy ukierunkowaną na rozwój cyfrowego bliźniaka, łącząc wytrenowane modele U-Net z możliwością szybkiej predykcji fazy i prędkości na podstawie danych temperaturowych. Rysunki, schematy procedur obliczeniowych, wizualizacje wyników symulacyjnych, wykresy porównujące opisy energii swobodnej, analizy profili wiązki laserowej oraz schematy cyfrowego bliźniaka zostały przygotowane pod kierunkiem autora. Pierwotna wersja manuskryptu została napisana przez autora rozprawy. Całościowo wkład autora w pięć publikacji można podsumować jako opracowanie spójnych ram obliczeniowych do ilościowego opisu obszaru interakcji laser-mikrostruktura. Autor wykonał zasadniczą część pracy związanej z modelowaniem metodą pola fazowego, implementacją termodynamiczną, tensorową reprezentacją mikrostruktury, generowaniem danych symulacyjnych, rozwojem modeli uczenia maszynowego, walidacją ilościową oraz wizualizacją naukową. Role związane z nadzorem naukowym, pozyskaniem finansowania, administracją projektu oraz końcowym przeglądem manuskryptów zostały zapewnione przez współautorów. Łączny wkład autora stanowi naukową podstawę rozprawy, łącząc termodynamicznie spójne symulacje wielofizyczne, obliczenia tensorowe oraz uczenie maszynowe wspierane wiedzą fizyczną w celu modelowania stopów przetwarzanych laserowo i rozwoju ich reprezentacji w postaci cyfrowych bliźniaków.

7 Główne wnioski

Rozprawa wykazuje, że obszar interakcji laser-mikrostruktura w układach stopowych może być opisywany jako sprzężony układ termodynamiczny, kinetyczny, morfologiczny i informacyjny. Jego ewolucja tego obszaru zależy od przebiegu zmian temperatury, składu chemicznego, rozkładu energii swobodnej, dyfuzji, reakcji międzyfazowych oraz przepływu w jeziorce ciekłego metalu. Z tego względu dokładna predykcja laserowo indukowanej ewolucji mikrostruktury wymaga modeli zachowujących sprzężenia pomiędzy tymi polami.

- (i) Pierwszy główny wniosek, który nasuwa się z badań wskazuje, że termodynamicznie uwarunkowane modele pola fazowego mogą odtwarzać istotne mechanizmy laserowo indukowanej ewolucji mikrostruktury i granic międzyfazowych. W układach $\text{Cu}_x(\text{Ti-6Al-4V})_y$ oraz Ti-Au wykazano, że tworzenie i wzrost faz międzymetalicznych zależą od lokalnych warunków cieplnych, stabilności termodynamicznej, kinetyki dyfuzji oraz morfologii granic międzyfazowych. W układzie Au porównanie opisów energii swobodnej wykazało, że termodynamiczne sformułowanie siły napędowej może istotnie wpływać na przewidywaną relację pomiędzy frontem cieplnym i frontem fazowym.
- (ii) Drugi główny wniosek wskazuje, że front cieplny i front fazowy nie powinny być utożsa-

miane. Badania układów Ti-Au i Au wykazały, że ewolucja fazowa może być opóźniona względem propagacji pola temperatury. Zjawisko to skwantyfikowano za pomocą liczby Lewisa oraz opóźnienia czasowego określanego na podstawie położenia frontów. Wynik ten jest istotny, ponieważ pokazuje, że samo pole temperatury nie wystarcza do pełnego opisu ewolucji mikrostruktury podczas obróbki laserowej.

- (iii) Trzeci główny wniosek wskazuje, że reprezentacja tensorowa stanowi zwartą i fizycznie znaczącą metodę obsługi dużych zbiorów danych mikrostrukturalnych. Badanie układu Ti-Cr pokazało, że dane z symulacji pola fazowego mogą być rozrzedzane, dekomponowane i rekonstruowane ze znaczącą redukcją rozmiaru danych, przy zachowaniu morfologii mikrostruktury oraz informacji związanych z granicami międzyfazowymi. Wspiera to wykorzystanie reprezentacji tensorowej jako podstawy przenośnej informatyki mikrostrukturalnej.
- (iv) Czwarty główny wniosek wskazuje, że uczenie maszynowe może przewidywać ewolucję mikrostruktury bezpośrednio w domenie przestrzennej, jeżeli jest trenowane na fizycznie znaczących danych symulacyjnych. Ramy Conv-LSTM umożliwiły wielokrokową predykcję ewolucji mikrostruktury z wysokim podobieństwem do wyników uzyskanych metodą pola fazowego, przy zachowaniu istotnych cech morfologicznych oraz przebiegu granic międzyfazowych. Modele MicroTwin i FlowTwin, oparte na architekturze U-Net, połączyły pola temperatury z predykcją fazy i prędkości przepływu, umożliwiając szybkie modelowanie surogatowe zjawisk zachodzących w jeziorku ciekłego metalu.
- (v) Piąty główny wniosek wskazuje, że integracja modelowania wielofizycznego, reprezentacji tensorowej oraz uczenia maszynowego wspieranego wiedzą fizyczną zapewnia praktyczną ścieżkę rozwoju cyfrowych bliźniaków dla laserowo przetwarzanych stopów wieloskładnikowych. Rozprawa nie przedstawia kompletnego przemysłowego cyfrowego bliźniaka, lecz ustanawia jego kluczowe elementy obliczeniowe: modelowanie uwzględniające podstawowe zjawiska fizyczne, uporządkowaną reprezentację danych, kwantyfikację czułą na zmiany morfologii mikrostruktury oraz szybkie modelowanie predykcyjne.

8 Perspektywy dalszych badań

Ramy opracowane w rozprawie mogą zostać w przyszłości rozszerzone na większe domeny symulacyjne, dłuższe czasy procesu, szersze zakresy parametrów oraz bardziej złożone układy stopowe. Istotnym kierunkiem dalszych prac jest rozwój cyfrowych bliźniaków uwzględniających skład chemiczny, szczególnie dla stopów wysokoentropowych, w których odpowiedź mikrostrukturalna zależy nie tylko od parametrów obróbki laserowej, lecz także od termodynamiki oraz właściwości

transportowych zależnych od składu. Przyszłe prace powinny również obejmować integrację modeli symulacyjnych z danymi eksperymentalnymi oraz metodami aktywnego uczenia. Połączenie reprezentacji tensorowej z danymi eksperymentalnymi może zwiększyć odporność i wiarygodność systemów cyfrowego bliźniaka, natomiast błędy rekonstrukcji tensorowej oraz deskryptory morfologii mikrostruktury i granic międzyfazowych mogą wspierać wybór kolejnych symulacji metodą pola fazowego. W ten sposób opracowane w rozprawie ramy stanowią podstawę elastycznych, predykcyjnych narzędzi obliczeniowych, uwzględniających skład chemiczny i przeznaczonych do analizy oraz optymalizacji laserowego przetwarzania stopów wieloskładnikowych.

LITERATURA

Publikacje składowe tworzące naukowe ramy rozprawy:

- [1] U. Subedi, N. Moelans, T. Tański, A. Kunwar, [Rapid portabilization of elasto-chemical evolution data for dental Ti-Cr alloy microstructure through sparsification and tensor computation](#), Scripta Materialia 244 (2024) 116027. doi:10.1016/j.scriptamat.2024.116027.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359646224000629>
- [2] H. B. Mamo, U. Subedi, T. Poloczek, M. Adamiak, A. N. S. Appiah, M. Skonieczna, P. M. Nuckowski, Y. Geng, B. Haldar, A. Kunwar, [Prototyping Ti2Cu intermetallic grain growth heterogeneously in Ti6Al4V matrix through laser additive manufacturing](#), Materials & Design 246 (2024) 113312. doi:10.1016/j.matdes.2024.113312.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0264127524006877>
- [3] U. Subedi, N. Moelans, T. Tański, A. Kunwar, [Foretelling microstructural interface with multi-generational convolutional-LSTM framework](#), Engineering with Computers 41 (4) (2025) 2593–2617. doi:10.1007/s00366-025-02117-z.
URL <https://link.springer.com/article/10.1007/s00366-025-02117-z>
- [4] U. Subedi, N. Moelans, T. Tański, A. Kunwar, [A non-isothermal multi-phase field approach to model the meltpool and IMC grains interaction in Ti-Au material](#), Computational Materials Science 255 (2025) 113875. doi:10.1016/j.commatsci.2025.113875.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025625002186>
- [5] U. Subedi, A. Bhattarai, N. Moelans, T. Tański, A. Kunwar, [Spatiotemporally learning the morphological and dynamic features of Au meltpool under different heat source types with phase-field informed U-Net framework](#), Computational Materials Science 263 (2026) 114456. doi:10.1016/j.commatsci.2025.114456.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025625007992>