

STRESZCZENIE

Procesy laserowego obróbki materiałów prowadzą do złożonych zmian mikrostrukturalnych wynikających ze współoddziaływania transportu ciepła, przemian fazowych, dyfuzji składników stopowych, reakcji międzyfazowych oraz zjawisk zachodzących w jeziorku ciekłego metalu. Zrozumienie mechanizmów odpowiedzialnych za przebieg tych procesów oraz ich ilościowy opis mają kluczowe znaczenie dla projektowania nowoczesnych materiałów i technologii wytwarzania. Głównym celem rozprawy było opracowanie metod opisu, analizy i prognozowania ewolucji mikrostruktury podczas laserowej obróbki stopów metali z wykorzystaniem modeli obliczeniowych, obliczeń termodynamicznych oraz metod uczenia maszynowego. Szczególną uwagę poświęcono opracowaniu termodynamicznego modelu tensorowego umożliwiającego efektywne odwzorowanie, przechowywanie oraz odtwarzanie informacji o ewolucji mikrostruktury i jej wykorzystanie w modelach predykcyjnych. W pierwszej części pracy rozwinięto metodykę opartą na modelowaniu pola fazowego oraz termodynamicznym modelem tensorowym. Wyniki symulacji mikrostruktury zapisano w postaci wielowymiarowych struktur danych, które poddano procesom redukcji, dekompozycji i rekonstrukcji przy zachowaniu najważniejszych cech morfologicznych oraz informacji o granicach międzyfazowych. Pozwoliło to na opracowanie zwartego i fizycznie uzasadnionego sposobu reprezentacji danych generowanych w obliczeniach wielkoskalowych. W dalszej części rozprawy opracowaną metodykę zastosowano do analizy stopów poddawanych obróbce laserowej. Dla układu $Cu_x(Ti-6Al-4V)_y$, przeprowadzono modelowanie wymiany ciepła oraz wzrostu faz międzymetalicznych indukowanych oddziaływaniem wiązki laserowej. Dla układu $Ti-Au$ opracowano nieizotermiczny wielofazowy model umożliwiający opis tworzenia jeziorka ciekłego metalu, wzrostu fazy Ti_3Au , procesów dyfuzji oraz wzajemnego oddziaływania pól cieplnych i obszarów chemicznych. W układzie Au przeanalizowano wpływ parametrów wiązki laserowej oraz opisu termodynamicznego materiału na geometrię jeziorka, przebieg przemian fazowych i przepływy wywołane efektem Marangoniego. Ostatnią część pracy poświęcono wykorzystaniu metod uczenia maszynowego do przyspieszenia obliczeń. Opracowane modele Conv-LSTM umożliwiły prognozowanie ewolucji mikrostruktury w wybranych układach stopowych, natomiast modele MicroTwin i FlowTwin bazujące na architekturze U-Net pozwoliły na przewidywanie rozkładów faz oraz pól prędkości na podstawie danych temperaturowych. Trafność prognoz oceniano z wykorzystaniem parametrów opisujących podobieństwo mikrostruktur, geometrię jeziorka ciekłego metalu oraz charakterystykę pól przepływu. Uzyskane wyniki potwierdzają możliwość integracji modeli wielofizycznych, obliczeń termodynamicznych oraz algorytmów uczenia maszynowego w ramach jednolitego środowiska obliczeniowego. Opracowana metodyka stanowi podstawę do budowy cyfrowych bliźniaków procesów laserowego przetwarzania wieloskładnikowych stopów metali.