

## Streszczenie

Mimo globalnego zainteresowania działaniami związanymi z procesami wytwarzania przyrostowego, wartość rynkowa produktów wytwarzanych techniką druku 3D stanowi niewielką część całkowitej produkcji na świecie. Brak wiedzy o podstawowych mechanizmach i oddziaływaniach zachodzących w strukturze materiału obrabianego laserowo, a w szczególności precyzyjnej oceny wpływu transferu energii na zmianę struktury i własności stopu wieloskładnikowego, identyfikuje się jako główną przeszkodę w szybszym rozwoju technologii AM (ang. additive manufacturing). Zrealizowane badania wstępne wskazują, że ewolucja mikrostruktury materiału obrabianego laserowo może być określona przez wiele nieliniowych zmiennych o niejednorodnym rozkładzie, których liczba wzrasta wraz ze zwiększaniem składników stopowych. Problemy związane z rozwojem materiałów wytwarzanych laserowo można rozwiązać jedynie poprzez badania mechanicznych aspektów tych wieloskalowych i wieloprosesowych zjawisk, a niniejszy projekt pt. Interpretacja oddziaływania między wiązką lasera a mikrostrukturą stopów wieloskładnikowych (DECLARMIMA) ma na celu opracowanie takiego rozwiązania. W niniejszym projekcie obliczenia wieloskalowe i uczenie maszynowe zostaną zastosowane do analizy procesów wytwarzania laserowego wieloskładnikowych stopów Sn-Ag-Cu-X oraz Al-Ni-Fe-Cr. Po określeniu numerycznych wzorców dla mikrostruktury materiałów obrabianych laserowo nastąpi klasyfikacja ich cechy obliczeniowych i eksperymentalnych. Wysokowymiarowe dane, takie jak zależna od temperatury i składu chemicznego energia swobodna Gibbsa dla stopów czteroskładnikowych i stopów o wysokiej entropii, zostaną przeanalizowane przy użyciu technik rozkładu tensorowego. Multiskalowy model obliczeniowy zostanie opracowany na podstawie symulacji dynamiki molekularnej oraz metody pola fazowego w mezoskali. Z kolei model mezoskalowy składa się głównie z równania adwekcji-dyfuzji dla pól stężeń, równania adwekcji Allena-Cahna dla pól fazowych reprezentujących różne fazy czy ziarna, równania Naviera-Stokesa, równania wymiany ciepła oraz elastoplastyczności. Na podstawie pochodzących z bazy termodynamicznej CALPHAD oraz obliczeń dynamiki molekularnej danych dotyczących własności stopów wieloskładnikowych w postaci litej lub proszkowej, zostaną rozwiązane sprzężone równania różniczkowe cząstkowe w układzie multifizycznym w mezoskali przy wykorzystaniu metody elementów skończonych. Dzięki zmianie wartości funkcji obliczeniowych, przeprowadzone zostaną liczne symulacje mezoskalowe w celu wygenerowania zestawu danych odpowiadającego zarówno mikrostrukturze ciała stałego poddanemu obróbce laserowej, jak i selektywnemu przetapianiu laserowemu. Oprócz rozkładu Gaussa, do opisu laserowego źródła ciepła w cząstkowych równaniach różniczkowych fizyki wymiany ciepła będą brane pod uwagę inne profile, m.in. takie jak odwrotna funkcja Gaussa, podwójna elipsoida. Aby porównać dane doświadczalne z wynikami uzyskanymi z symulacji obliczeniowych, planuje się wykonanie dużej liczby eksperymentów dot. oddziaływania wiązki lasera na stopy wieloskładnikowe przy zmiennych parametrach procesowych. Połączone zbiory danych eksperymentalnych oraz obliczeniowych zostaną wykorzystane nie tylko do określania parametrów obliczeniowych materiałów proszkowych, ale także do przeprowadzenia sekwencyjnych symulacji wielokrotnego skanowania wiązką laserową i wytwarzania wielu warstw materiału. Sztuczne sieci neuronowe oparte na regresji zostaną opracowane do predykcji współczynników rozkładu natężenia wiązki lasera, natomiast splotowe (konwolucyjne) sieci neuronowe zostaną wykorzystane do uzyskania teoretycznych informacji o kształcie ciekłego jeziora stopionego materiału. Istotne zmienne klasyfikujące występowanie porowatości, zagłębień i rozprysków podczas selektywnego przetapiania laserowego zostaną opracowane za pomocą metody lasu losowego. Natomiast w celu ilościowego określenia niepewności związanych z przewidywaniem absorpcji materiałów wykorzystane zostaną bayesowskie modele uczenia maszynowego. Bezpośrednim rezultatem realizacji projektu DECLARMIMA będzie zbiór deskryptorów geometrycznych, kinetycznych oraz własności stopów wieloskładnikowych obrabianych laserem stosowanych zarówno w skali atomowej, jak i w makroskali. Ostatecznym wynikiem projektu będą bliźniaki cyfrowe typu PIDT (ang. physics-informed digital twin) zbudowane na zbiorach danych tych deskryptorów. Po zebraniu danych pomiarowych z obróbki laserowej, dzięki wykorzystaniu wydajnych obliczeniowo bliźniaków cyfrowych PIDT będzie możliwa właściwa interpretacja mechanizmów ewolucji mikrostruktury stopów wieloskładnikowych. Dzięki możliwości określenia podatności wieloskładnikowych stopów na wytwarzanie przyrostowe oraz wspomaganie doboru optymalnych parametrów procesu selektywnego przetapiania laserowego, cyfrowe bliźniaki będą stanowić narzędzia do projektowania in-silico materiałów w sektorze AM.