

# Manuál: Charakterizace materiálové mikrostruktury

MPO FV 10202: Databáze materiálových mikrostruktur pro aditivní výrobu

Ver. 1.1 (poslední aktualizace: prosinec 2019)

Martin Doškář

## Obsah

Úvod .....	1
Teorie.....	1
Popis řešení .....	2
Konzolové rozhraní.....	3
1. Povinné parametry .....	3
2. Volitelné/podmíněně povinné parametry .....	4
Grafické rozhraní .....	4

## Úvod

Běžně se vyskytující materiály vykazují náhodnost ve své mikrostruktuře. Pro numerické modely zahrnující vliv mikrostruktury do výpočtů je tak důležité zachytit podstatné charakteristiky dané materiálové mikrostruktury a odhlédnout od jedné specifické realizace dané mikrostruktury. Pro kvantifikaci materiálové mikrostruktury se tak často využívají prostorové statistiky, z nichž nejčastěji používané jsou dvou-bodové pravděpodobnosti díky množství informace, které zachycují, a zároveň díky jejich relativně snadnému výpočtu a interpretaci (v porovnání s prostorovými statistikami vyšších řádů).

## Teorie

Každý konečně rozměrný záznam mikrostruktury  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  lze chápat jako jednu instanci  $\alpha$  ze souboru  $\zeta$  všech možných realizací mikrostruktury daného materiálu. Každá instance  $\alpha$  má přiřazenou pravděpodobnost výskytu  $p(\alpha)$ , pro níž platí

$$0 \leq p(\alpha) \leq 1, \quad \forall \alpha \in \zeta, \\ \sum_{\alpha \in \zeta} p(\alpha) = 1.$$

Jednotlivé materiálové fáze  $i$  ve vybrané realizaci  $\alpha$  je možné formálně popsat pomocí *charakteristické funkce*  $\chi(x, \alpha)$  definované

$$\chi^i(x, \alpha) = \begin{cases} 1, & x \in \Omega^i \\ 0, & x \notin \Omega^i \end{cases}$$

kde  $\Omega^i \subset \Omega$  značí podoblast příslušející fázi  $i$ . Pro libovolnou funkci  $f(x_1, \dots, x_n, \alpha)$  je tak možné definovat dva průměry:

- Průměr přes jednotlivé realizace -  $E[f](x_1, \dots, x_n) = \sum_{\alpha \in \zeta} f(x_1, \dots, x_n, \alpha)p(\alpha)$
- Průměr přes objem realizace -  $\langle f(x_1, \dots, x_n, \alpha) \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} f(x_1 + y, \dots, x_n + y, \alpha) dy$

Pro praktické aplikace je vhodné dále zavést zjednodušující (nicméně málo restriktivní) předpoklady platící pro  $\zeta$  a  $p(\alpha)$ :

- Statistická homogenita -  $E[f](x_1, x_2) = \tilde{f}(x_1 - x_2)$
- Statistická isotropie -  $E[f](x_1, x_2) = \hat{f}(\|x_1 - x_2\|)$
- Ergodicita -  $E[f](x_1, x_2) = \langle f(x_1, x_2) \rangle$

Za předpokladu statistické homogenity lze definovat rodinu  $n$ -bodových pravděpodobnostních funkcí  $S_n$  definovaných jako průměr přes jednotlivé realizace ze součinu  $n$  charakteristických funkcí.

Nejjednodušší z této rodiny je *jednobodová pravděpodobnostní funkce*  $S_1^{(i)} = E[\chi^i](x)$ . Za předpokladu ergodicity platí

$$S_1^{(i)} = E[\chi^i](x) = \langle \chi^i \rangle = \frac{|\Omega^i|}{|\Omega|} = \phi^i,$$

kde  $\phi^i$  značí objemové zastoupení fáze  $i$ .

Ač úplný popis mikrostruktury je možný jen v případě znalosti všech  $n$ -bodových pravděpodobnostních funkcí, *dvoubodová pravděpodobnostní funkce*  $S_2^{(rs)}$  je v současné době nejhojněji využívanou prostorovou statistikou pro popis mikrostruktury.

$$S_2^{(rs)}(x) = E[\chi^r \chi^s](x_1, x_2) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \chi^r(x_1 + y) \chi^s(x_2 + y) dy$$

Volně řečeno se jedná o pravděpodobnost nalezení dvou bodů vzdálených o  $x$  s prvním bodem ve fázi  $r$  a druhým ve fázi  $s$ . Pro  $r = s$  platí  $S_2^{(rr)}(0) = \phi^r$ . V případě, že mikrostruktura zkoumaného materiálu nevykazuje korelaci na delších měřících, dále platí  $S_2^{(rs)}(x) \xrightarrow{\|x\| \rightarrow \infty} \phi^r \phi^s$ . Odchylka od této hodnoty tak může sloužit jako indikátor vnitřního uspořádání mikrostruktury. Pokud tato statistika pro  $r = s$  vykazuje isotropii/rotační symetrii, lze z její derivace v počátku stanovit i specifický povrch zvolené fáze.

Ač dvoubodová pravděpodobnostní funkce obsahuje informace o rozložení materiálové fáze, nerozlišuje mezi jednotlivými inkluzemi, tj. částmi zvolené fáze, které jsou dosažitelné z jednoho zvoleného bodu dané fáze spojitě bez přestupu přes jinou fázi. Spojitost zvolené fáze ale hraje významnou roli v určování makroskopických vlastností daného materiálu. Uvažujme nyní, že každá fáze  $\Omega^i$  může být rozdělena do  $n^i$  spojitých inkluzí  $\Omega^i = \bigcup_{k=1}^{n^i} \omega_k^i$ . Obdobně k charakteristické funkci je možné definovat agregátovou charakteristickou funkci

$$\tilde{\chi}^{i,k}(x, \alpha) = \begin{cases} 1, & x \in \omega_k^i \\ 0, & x \notin \omega_k^i \end{cases}$$

Za předpokladu statistické homogenity a ergodicity je možné definovat *dvoubodovou agregátovou funkci*

$$C_2^{(r)}(x) = \frac{1}{n^r} \sum_{k=1}^{n^r} \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \tilde{\chi}^{r,k}(x + y) \tilde{\chi}^{r,k}(y) dy$$

Tuto funkci je možné chápat jako specifický případ  $S_2^{(rr)}$  udávající pravděpodobnost nalezení dvou bodů nejen ve stejné fázi, ale přímo ve stejné inkluzi dané fáze. Dvoubodová agregátová funkce poskytuje statistickou charakterizaci tvarů jednotlivých inkluzí. Tato funkce má stejné chování jako  $S_2^{(rs)}$  v okolí počátku. Její hodnoty se mohou lišit dále od počátku v případě, že daná fáze není spojitá, tj. existuje více inkluzí této fáze.

## Popis řešení

Nástroj je napsán v jazyce C++ dle poslední revize standardu ISO/IEC 14882:2017 (častěji uváděné jako C++17) s využitím algoritmů standardní knihovny (včetně paralelizace). Nástroj je řešen jako konzolová aplikace. Grafické rozhraní je dodáno v rámci webového rozhraní celé platformy, které tento nástroj volá externě.

Z praktického hlediska je výhodné uvažovat reprezentaci informace o materiálové mikrostrukturu ve formě multidimenzionálního (dvou či třídimeznionálního) pole obsahující indexy materiálové fáze zastoupené v daném bodě. Tato reprezentace přímo odpovídá pixelové či voxelové informaci o materiálu (získané např. skenováním či pomocí tomografie), která byla následně prahována na jednotlivé fáze. Tato reprezentace umožňuje využít pro výpočet konvoluce při stanovování  $S_2^{(rs)}$  rychlé Fourierovy transformace (FFT) namísto dříve hojně aplikovaného vzorkování. Periodické okrajové

podmínky implicitně uvažované při použití FFT vykazují zanedbatelný vliv na výslednou statistiku již pro relativně malé vzorky mikrostruktury.

Výpočet dvoubodové agregátové funkce, C2, je založen na identifikaci jednotlivých inkluzí dané fáze v zadané reprezentaci materiálu. Inkluze zvolené fáze jsou identifikovány metodou „flood fill“, kdy je sekvenčně procházeno pole indexů a pro každý dosud neidentifikovaný bod zvolené fáze je identifikováno jeho spojitě rozšíření standardním algoritmem "breadth first search" z teorie grafů. Spojitost je definována vstupním parametrem `connectivity`.

Výstupem nástroje je datový soubor obsahující hodnoty zvolené statistiky na pravidelné síti v jednom ze dvou následujících formátů:

1. Jednoduchý \*.txt soubor  
Přístupný formát, kdy na prvním řádku je určen typ statistiky (S2 nebo C2). S řádkovou mezerou je na dalších řádcích uvedeno rozlišení. Po další mezeře jsou uvedeny hodnoty v každém bodu v textové podobě na jednom řádku; d-dimenzionální pole je zapsáno s prvním indexem jako nejrýchleji se měnící proměnnou.
2. Datový \*.json soubor  
Jedná se o základní formát pro předávání dat v rámci vyvíjené platformy. Samotný JSON soubor obsahuje 3 základní pole: `dimensions` – d-dimenzionální pole určující rozlišení výstupní sítě, `datumType` – určující typ uložených dat (např. `double`), `data` – pole obsahující vlastní hodnoty výstupního pole zakódovaná pomocí base64 kódování
3. Soubor ve formátu VTK  
Konkrétně se jedná o XML typ \*.vti vhodný pro zobrazování hodnot na pravidelné síti. Jedná se o jeden ze základních formátů VTK a je možné ho zobrazit např. pomocí programu Paraview. Data jsou komprimována za pomoci base64 kódování.

S ohledem na plánovanou funkcionalitu platformy, umožňuje nástroj i druhý mód výstupu (pouze v konzolovém rozhraní), kdy jsou uloženy informace o identifikovaných inkluzích pomocí charakteristik ekvivalentní eliptické/elipsoidní inkluze v jednoduchém textovém souboru. Každý řádek obsahuje následující informace oddělené tabulátorem:

1. Objem ekvivalentní inkluze
2. Střed ekvivalentní inkluze (3 souřadnice x, y, z)
3. Souřadnice jednoho vrcholu obalového kvádra (3 souřadnice x, y, z)
4. Souřadnice protilehlého vrcholu obalového kvádra (3 souřadnice x, y, z)
5. Velikost poloos ekvivalentní inkluze (seřazeno od největší po nejmenší)
6. Báze lokálního souřadnicového systému určujícího natočení ekvivalentní inkluze (3x3 matice zapsaná do řádku expanzí po sloupcích)

## Konzolové rozhraní

Vstupním parametrem nástroje je cesta k JSON souboru obsahujícímu následující parametry nástroje:

### 1. Povinné parametry

`mode`..... Celočíselný kód módu nástroje (statistiky = 2, identifikace inkluzí = 4)  
`inputType`..... Celočíselný kód vstupního typu (obrazová data = 0, JSON datový soubor = 1)  
`inputFile`..... Cesta (vč. jména) ke vstupnímu souboru relativně k `inputFolder` adresáři

## 2. Volitelné/podmíněně povinné parametry

- `conversionMap`..... Pole obsahující hranice ve světlosti pixelu/voxelu, rozdělující jednotlivé fáze
- `statisticsType`..... Celočíselný kód zvolené statistiky (C2 = 0, S2 = 1)
- `phaseOfInterest` ..... Index materiálové fáze, pro níž má být spočítána statistika
- `matrixPhaseIndex` ..... Index materiálové fáze matrice
- `inputFolder` ..... Cesta (absolutní/relativní) k adresáři se vstupními daty
- `outputFolder` ..... Cesta (absolutní/relativní) k adresáři s výstupními daty
- `connectivity` ..... Celočíselný kód určující konektivitu spojitě fáze (konektivita i přes vrcholy voxelů/pixelů = 0, konektivita vyjma hran = 1, konektivita vyjma vrcholů = 2)
- `saveInclusionApproximations` Logická hodnota (true/false) umožňující uložit informace o inkluzích
- `centredStatistics` ..... Logická hodnota (true/false) určující, zda má být výstupem centrovaná statistika
- `statisticsTrimRatio` .... Číslo ( $> 0,0$  &  $< 1,0$ ) určující, jaká část plné statistiky má být uložena
- `statisticsOutputFormat` Celočíselný kód typu výstupního souboru (JSON = 0, VTK = 1, TXT = 2)
- `statisticsOutputFile` .... Cesta (vč. jména) výstupního souboru relativně k `outputFolder` adresáři

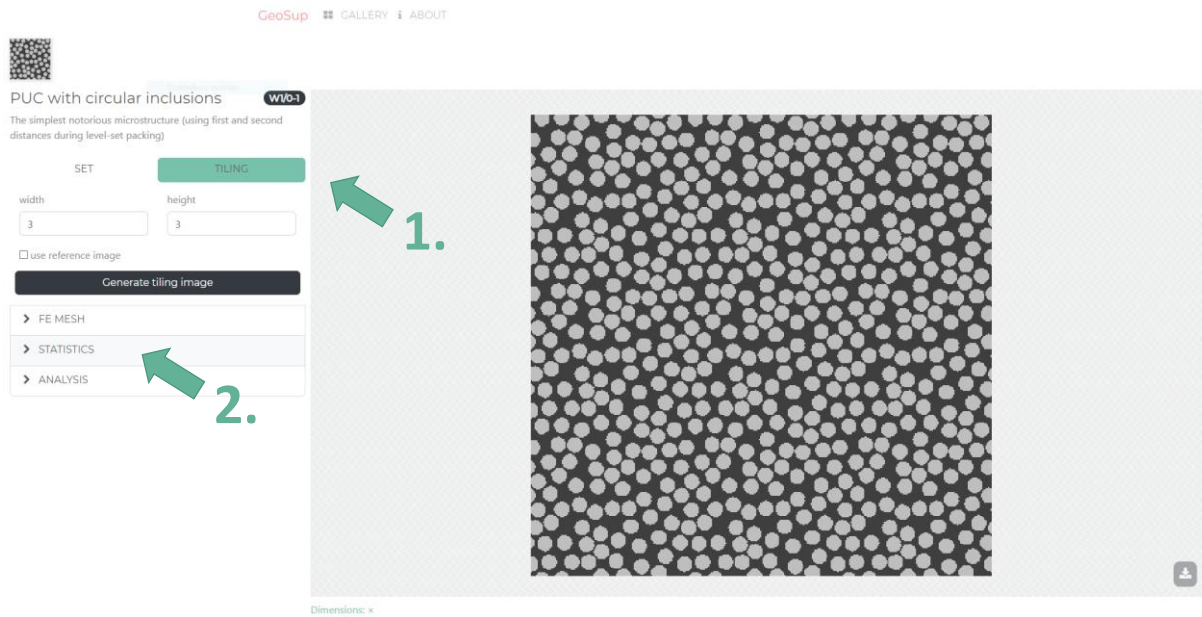
### Grafické rozhraní

Grafické rozhraní přístupné na webové platformě dovoluje pouze podmnožinu funkcionality nástroje (některé možnosti jsou určeny pro spolupráci s jinými nástroji). Jednotlivé kroky jsou ilustrovány níže přiloženými snímky obrazovky s šipkami, u nichž je uvedeno číslo kroku, ke kterému se daný element vztahuje.

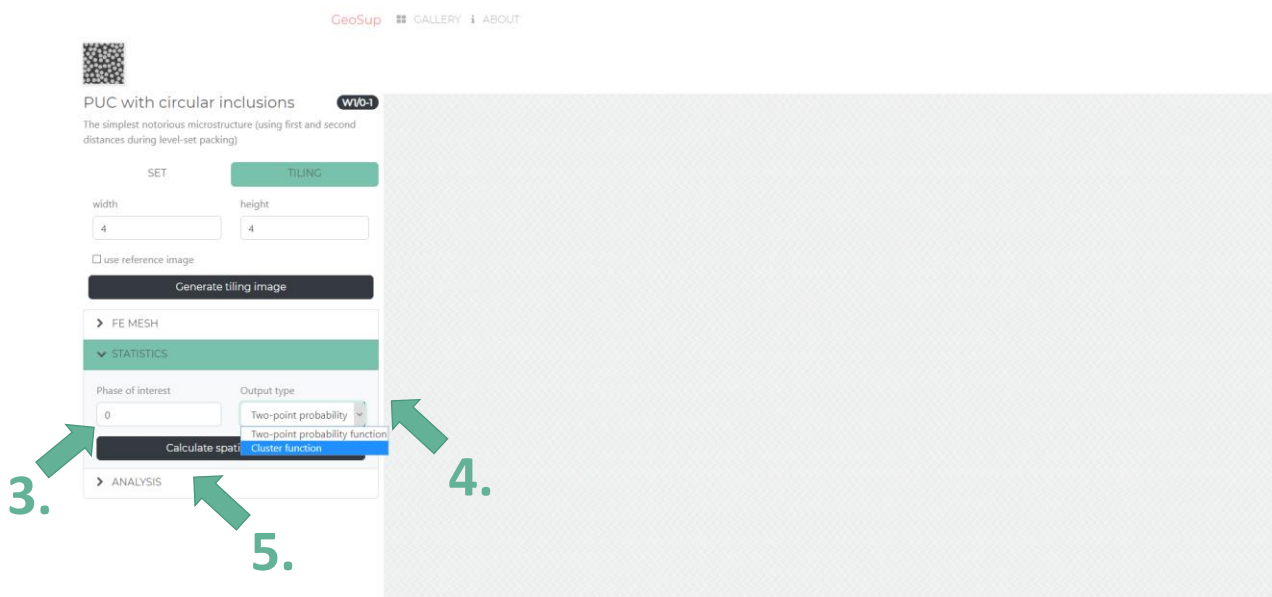
Postup při využití grafického rozhraní by měl být následující:

1. Volba vstupních dat (buď pro jednotlivé dlaždice či pro nově vygenerované dláždění)
2. Přepnutí se do záložky Statistics
3. Volba indexu materiálové fáze, pro níž má být statistika spočítána
4. Volba typu statistiky
5. Spuštění výpočtu
6. Zobrazení spočítané statistiky v interaktivní módu umožňující odečítání lokálních hodnot
7. Možnost uložení spočítané statistiky

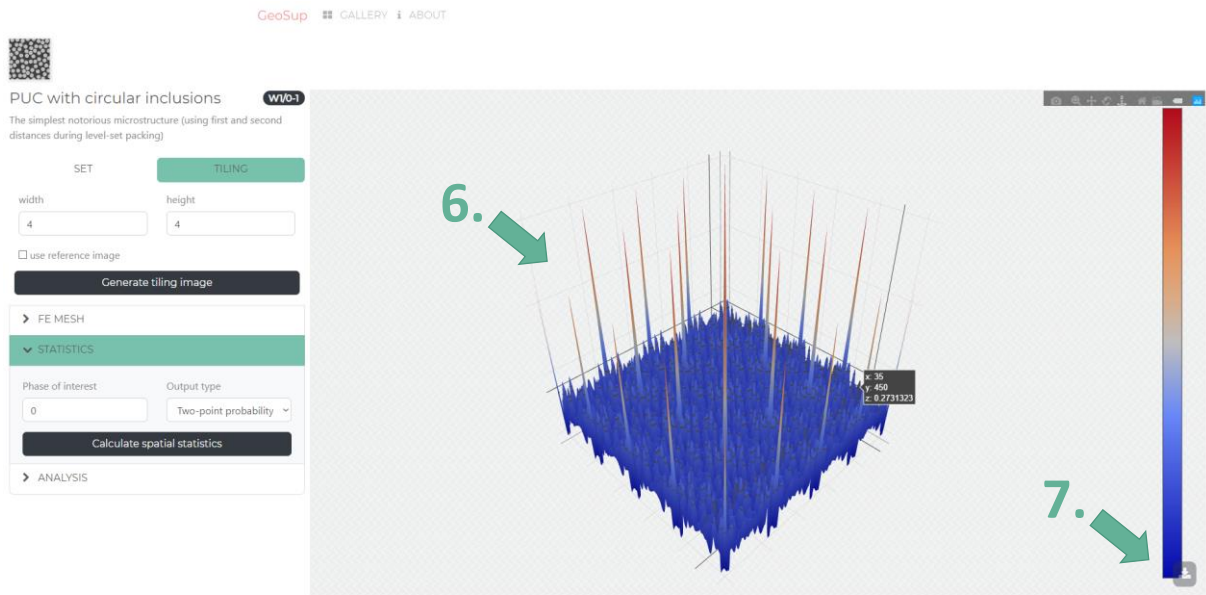
# Manuál: Charakterizace materiálové mikrostruktury



Obrázek 1: Výběr/generování vstupních dat pro nástroj



Obrázek 2: Volba parametrů nástroje



Obrázek 3: Zobrazení výstupní statistiky