

Výzkumná zpráva: Nástroje pro charakteristiku mikrostruktur

MPO FV 10202: Databáze materiálových mikrostruktur pro aditivní výrobu

Vypracovali: M. Doškář, L. Šimák, J. Freylich, J. Novák, J. Růžička

Poslední editace: 12/2020

Obsah

Stručná charakteristika úkolu	1
Stručný popis zvoleného technického řešení	1
Teoretické řešení	1
Implementace.....	1
Vstupy.....	1
Povinné vstupy	1
Volitelné/podmíněně povinné vstupy.....	1
Výstupy	2
Testování	3
Závěr	4
Literatura	4

Stručná charakteristika úkolu

Vyvíjený nástroj má za úkol zachytit pomocí statistických deskriptorů hlavní charakteristiky mikrostruktury, která může vykazovat náhodnost. Na základě předběžné rešerše dostupných a nejčastěji používaných metod byly identifikovány dvě základní statistiky, které budou implementovány. Konkrétně se jedná o:

- Dvoubodovou pravděpodobnostní funkci (dále jen S_2 statistika)
- Dvoubodovou agregátovou funkci (dále jen C_2 statistika)

Tyto dvě funkce se vzájemně doplňují. Zatímco S_2 zachycuje rozložení materiálové fáze i na delší vzdálenosti, C_2 kvantifikuje pravděpodobný tvar inkluze jednotlivých materiálových fází. Na základě znalosti těchto dvou funkcí lze dále usuzovat např. na perkolaci jednotlivých fází apod.

Stručný popis zvoleného technického řešení

Teoretické řešení

V dané verzi výpočtu S_2 představuje materiálová mikrostruktura multidimenzionální (dvou či třídimenzionální) pole obsahující indexy materiálové fáze zastoupené v daném bodě v prostoru. Tato reprezentace přímo odpovídá pixelové či voxelové informaci o materiálu (získané např. skenováním či pomocí tomografie), která je prahována na jednotlivé fáze. Tato reprezentace umožňuje využít pro stanovení S_2 konvoluce a rychlé Fourierovy transformace (FFT) (Torquato, 2002) namísto dříve hojně aplikovaného vzorkování (Zeman, 2003). Periodické okrajové podmínky implicitně uvažované při použití FFT vykazují zanedbatelný vliv již pro relativně malé vzorky mikrostruktury a byly tedy s výhodou aplikovány (Gajdošík et al., 2006).

Výpočet dvoubodové agregátové funkce, C_2 , 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 nezpracovaný bod zvolené fáze je identifikováno jeho spojitě rozšíření standardním algoritmem „breadth first search“ z teorie grafů (Sedgewick, 2002). Spojitost je definována vstupním parametrem `connectivity`.

Implementace

Modul byl implementován 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. Jako grafické rozhraní lze chápat webového rozhraní celé platformy GEOSUP, které tento nástroj volá externě. Z tohoto důvodu jsou dále v textu zprávy uvažovány pouze vstupy pro konzolové rozhraní modulu.

Vstupy

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

Povinné vstupy

`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

Volitelné/podmíněně povinné vstupy

`conversionMap`..... Pole obsahující hranice ve světlosti pixelu/voxelu, rozděluje jednotlivé fáze

<code>statisticsType</code>	 Celočíselný kód zvolené statistiky ($C_2 = 0$, $S_2 = 1$)
<code>phaseOfInterest</code>	 Index materiálové fáze, pro níž má být spočítána statistika
<code>matrixPhaseIndex</code>	 Index materiálové fáze matrice
<code>inputFolder</code>	 Cesta (absolutní/relativní) k adresáři se vstupními daty
<code>outputFolder</code>	 Cesta (absolutní/relativní) k adresáři s výstupními daty
<code>connectivity</code>	 Celočíselný kód určující konektivitu spojitě fáze (konektivita i přes vrcholy voxelů/pixelů = 0, konektivita vyjma hran = 1, konektivita vyjma vrcholů = 2)
<code>saveInclusionApproximations</code>	Logická hodnota (true/false) umožňující uložit informace o inkluzích
<code>centredStatistics</code>	 Logická hodnota (true/false) určující, zda má být výstupem centrovaná statistika
<code>statisticsTrimRatio</code>	 Číslo ($> 0,0$ & $< 1,0$) určující, jaká část plné statistiky má být uložena
<code>statisticsOutputFormat</code>	Celočíselný kód typu výstupního souboru (JSON = 0, VTK = 1, TXT = 2)
<code>statisticsOutputFile</code>	 Cesta (vč. jména) výstupního souboru relativně k <code>outputFolder</code> adresáři

Výstupy

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

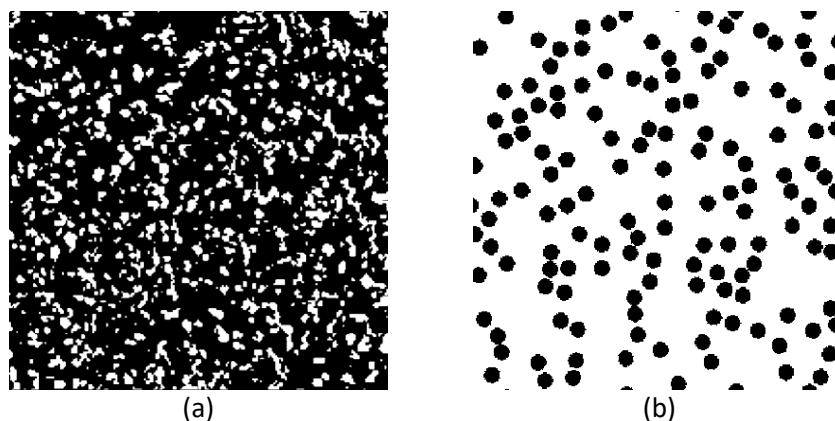
1. Jednoduchý *.txt soubor
Přístupný formát, kdy na prvním řádku je určen typ statistiky (S_2 nebo C_2). S řádkovou mezerou je na dalších řádcích uvedeno rozlišení. Po další mezeře jsou uvedeny hodnoty v každém bodu v textové podobě na jednom řádku; d-dimenzionální pole je zapsáno s prvním indexem jako nejrychleji 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.

Modul dále umožňuje 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)

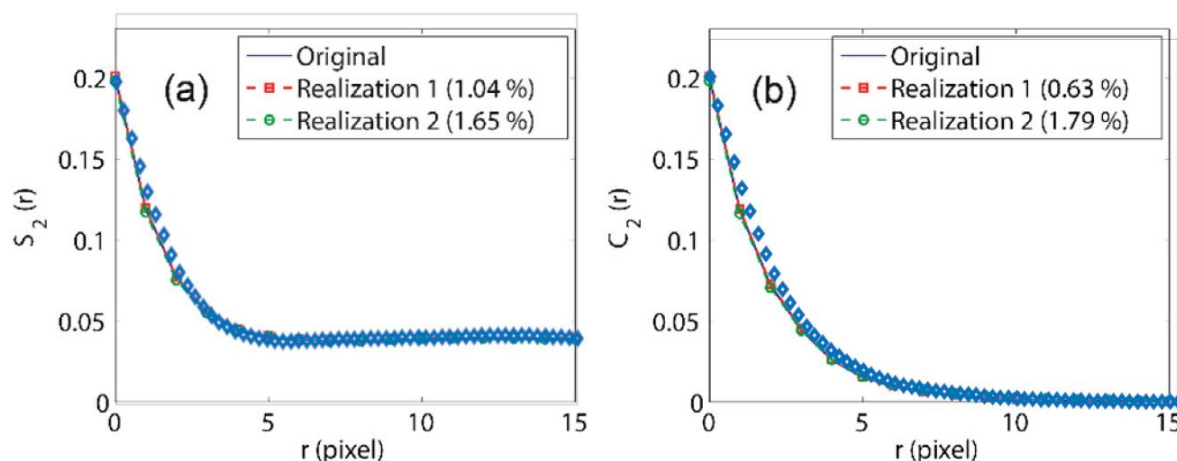
Testování

Test správnosti teoretické formulace modulu a jeho implementace byl proveden za pomoci reprodukce výsledků dostupných v (Bostanabad et al., 2016) a (Yeong and Torquato, 1998) a jejich porovnání s vypočtenými výsledky.



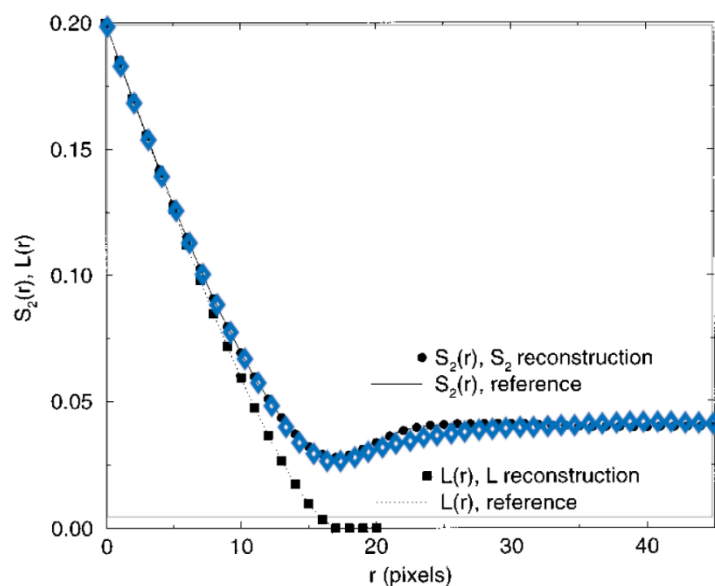
Obrázek 1: Vstupní mikrostruktury pro porovnání: a) EX1 z (Bostanabad et al., 2016) [200x200 px], b) Fig. 9a z (Yeong and Torquato, 1998) [400x400 px]

Porovnání pro mikrostruktury z Obrázku 1 je uvedeno v Obrázku 2 a Obrázku 3, kdy spočtené průběhy statistik jsou zobrazeny jako modré kosočtverce přes grafy dostupné ve výše uvedených publikacích. Průběhy funkcí si odpovídají až na drobné nepřesnosti, které jsou zapříčiněny nepřesnými vstupními údaji. Vstupní mikrostruktury byly získány jako výřez z elektronických verzí publikací a nemohlo tak být zaručeno přesné rozlišení. Vstupní mikrostruktury tak bylo nutné dále škálovat. V případě (Yeong and Torquato, 1998) byla dokonce vstupní mikrostruktura natočena.



Obrázek 2: Porovnání referenční a vypočtené statistiky pro Obrázek 1a.

U každé funkce byly dále ověřeny vlastnosti obou statistik, především pak jejich hodnota v počátku souřadnicového systému, která musí odpovídat objemovému zastoupení dané fáze, a u S_2 i limitní hodnota pro větší vzdálenosti, která v případě mikrostruktur bez vnitřního uspořádání odpovídá druhé mocnině objemového zastoupení. Dvoubodová agregátová funkce C_2 byla také kontrolována vůči S_2 . V případě plně propojené matrice by obě funkce měly být identické. Dále bylo testováno, že v opačném případě se hodnoty C_2 vždy nachází pod S_2 a průběh má správný tvar v případě inkluzí pevně daného tvaru.



Obrázek 3: Porovnání referenční a vypočtené statistiky pro Obrázek 1b.

Závěr

Teoretická formulace a programová implementace nástroje proběhla dle plánu. Výstupy nástroje byly testovány vůči známému řešení. Při implementaci byl nástroj průběžně testován integračními testy; nástroj je schopen spolupracovat s ostatními součástmi GEOSUP platformy. Nástroj je možné provozovat i jako samostatnou konzolovou aplikaci. Detailnější popis používání nástroje je možno nalézt v příslušném manuálu.

Literatura

- Bostanabad, R., Bui, A.T., Xie, W., Apley, D.W., Chen, W., 2016. Stochastic microstructure characterization and reconstruction via supervised learning. *Acta Materialia* 103, 89–102. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.09.044>
- Gajdošík, J., Zeman, J., Šejnoha, M., 2006. Qualitative analysis of fiber composite microstructure: Influence of boundary conditions. *Probabilistic Engineering Mechanics* 21, 317–329. <https://doi.org/10.1016/j.pro bengmech.2005.11.006>
- Sedgewick, R., 2002. *Algorithms in C++, Part 5: Graph Algorithms*, 3rd ed. ed. Addison-Wesley, Boston.
- Torquato, S., 2002. *Random heterogeneous materials: microstructure and macroscopic properties*, Interdisciplinary applied mathematics. Springer, New York.
- Yeong, C., Torquato, S., 1998. Reconstructing random media. *Physical Review E* 57, 495–506. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.57.495>
- Zeman, J., 2003. *Analysis of Composite Materials with Random Microstructure* (Doctoral Thesis). Czech Technical University in Prague, Prague.