



**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE
AND TECHNOLOGY**

Techniki wirtualizacji materiałów

Mateusz Sitko

**Faculty of Metals Engineering and Industrial Computer Science
Department of Applied Computer Science and Modelling**

Mateusz Sitko

B5*704

msitko@agh.edu.pl

<http://home.agh.edu.pl/~msitko/>

Konsultacje:

poniedziałek 09:00 – 10:00

- Implementacja CA/MC (0.8), Sprawozdanie (0.2)

Abaqus/CAE customization using Abaqus-Python and RSG
dialogue builder

- Każda składowa musi być pozytywna (min 3.0)



Kilka spraw technicznych

Sprawozdania:

<https://cloud.kisim.eu.org/s/TAscZAHs3Zo4RQCdtnsdq5JMF>

Kody (same źródła + projekt pycharm):

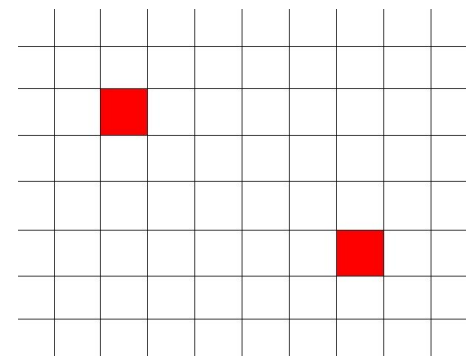
<https://classroom.github.com/a/Rsc8r7Eh>

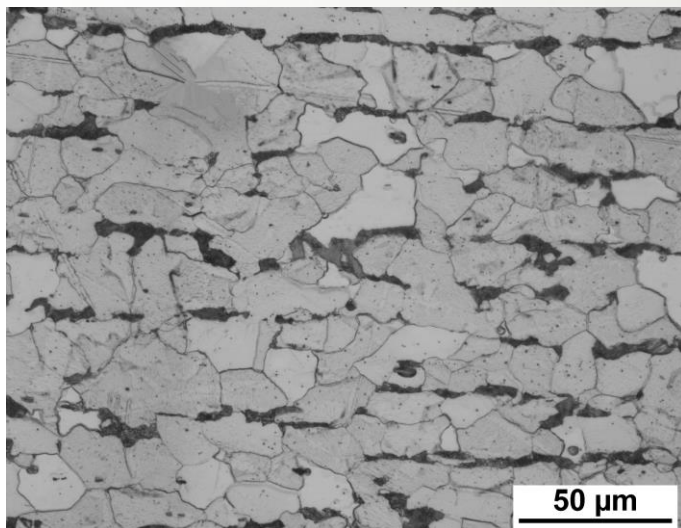
Zajęcia	Data	Temat	Uwagi
Zajęcia 4	20.04	Plugin Abaqus (KP) Plugin w komercyjnym programie obliczeniowym	Konrad Perzyński
Zajęcia 5	2022-12-06 18:30 : 20:00	CA , MC (MS) Modele cyfrowej reprezentacji mikrostruktury – implementacja dyskretnych metod rozrostu ziaren	Mateusz Sitko
Zajęcia 6	2022-12-13 18:30 : 20:00	Image Analysis (MM) Modele cyfrowej reprezentacji mikrostruktury – implementacja metody analizy obrazu	Mateusz Mojżeszko
Zajęcia 7	2022-12-20 18:30 : 20:00	Hybryda modele cyfrowej reprezentacji mikrostruktury – implementacja hybrydowych metod rozrostu ziaren	Mateusz Sitko
Zajęcia 8	2023-01-03 16:45 : 18:15	Obrona projektu + sprawozdanie	Mateusz Sitko

Automaty komórkowe

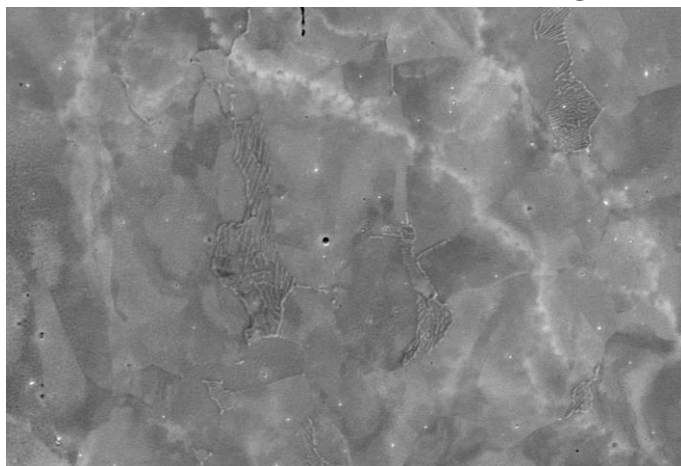
Idea automatów komórkowych polega na zastąpieniu zbioru skomplikowanych równań opisujących zachowanie się wielu układów fizycznych, przestrzenią komórek opisujących dany układ z jednoznacznie określonymi regułami interakcji między nimi.

- **Przestrzeń** – skończona liczba komórek, które posiadają wartości, określające stan komórki w danym czasie.
- **Sąsiedztwo** — określa najbliższych sąsiadów rozpatrywanej komórki. Może występować w 1D, 2D oraz 3D.
- **Reguły przejścia** — stan komórki w danym kroku czasowym obliczany jest na bazie stanów komórki oraz sąsiadów z poprzedniego kroku czasowego.





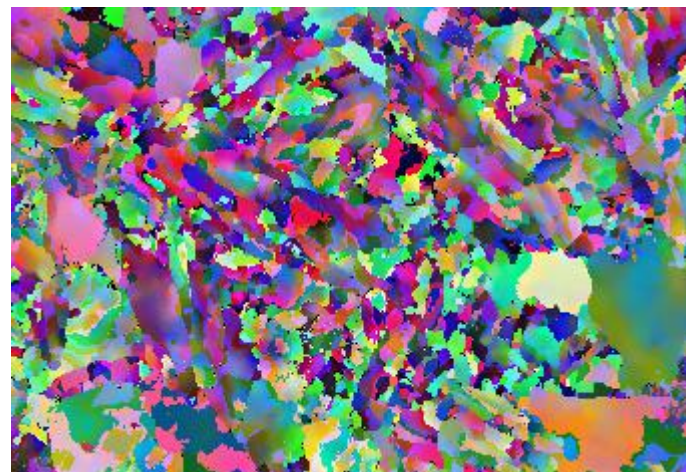
OPTI



SEM



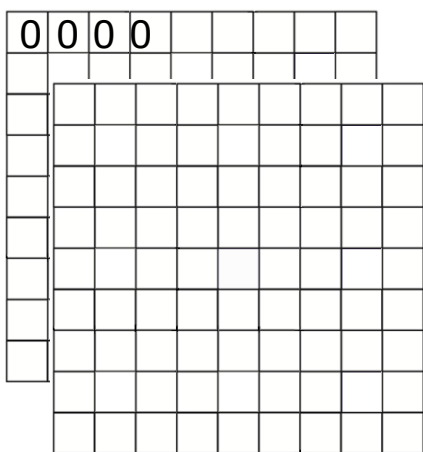
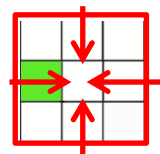
EBSD



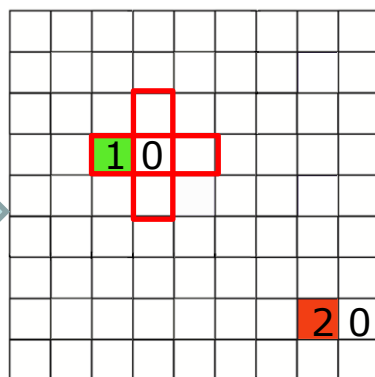
EBSD

2 zarodki

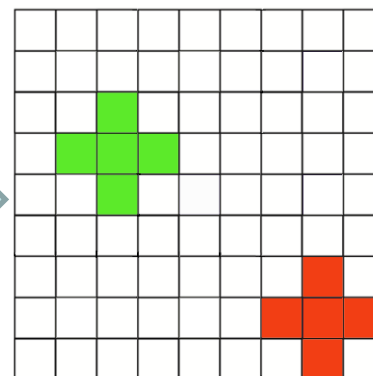
Sąsiedztwo Von Neumanna



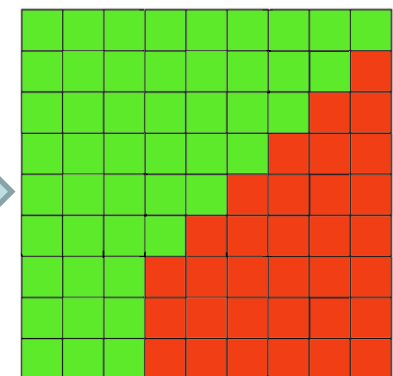
początkowa
przestrzeń



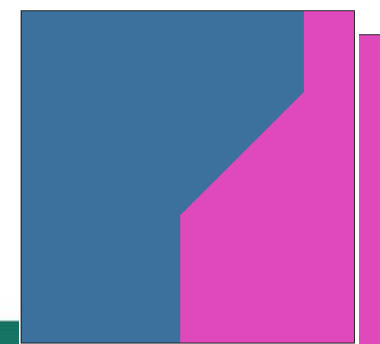
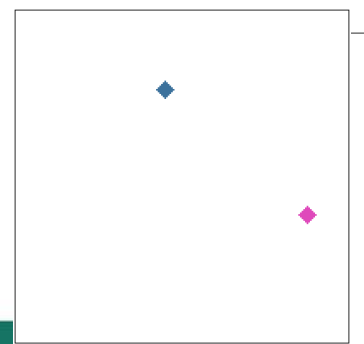
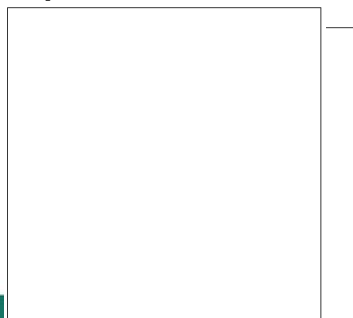
1 krok
zarodkowanie



1 iteracja

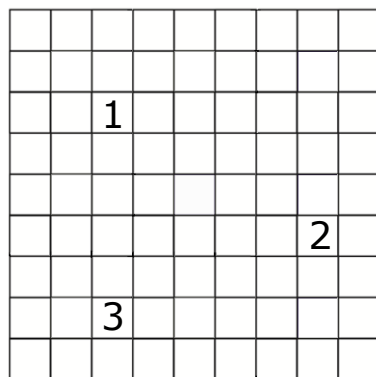


ostatni
krok

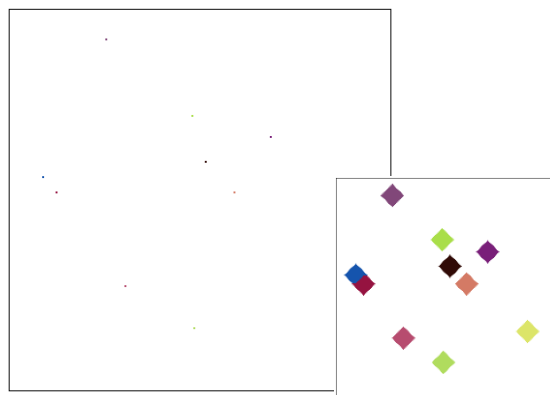


Zarodkowanie

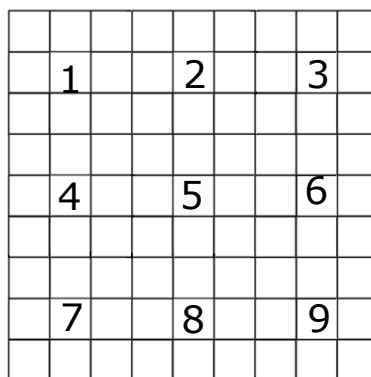
Losowe



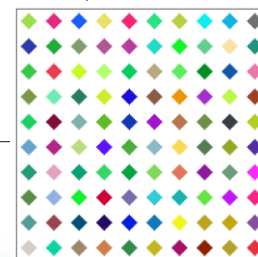
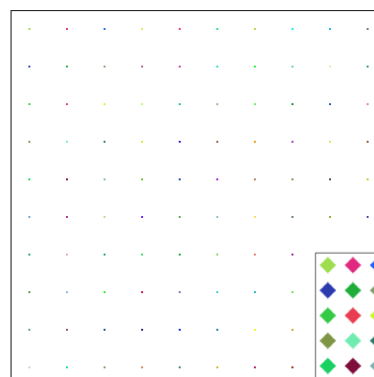
ilość



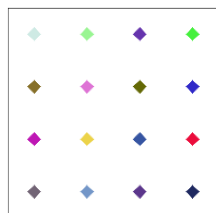
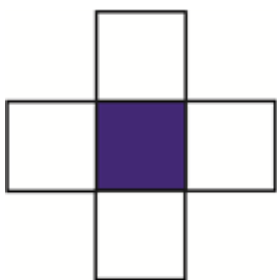
Jednorodne



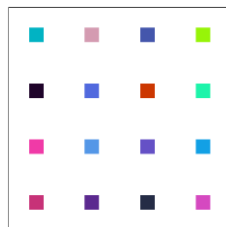
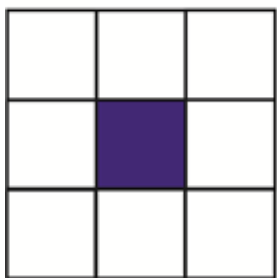
Ilość w wierszu, kolumnie



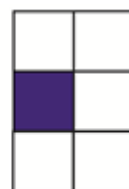
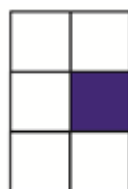
• Von Neumann



• Moore

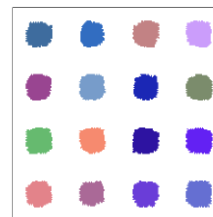
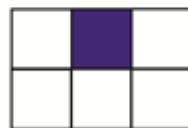


• Pentagonalne losowe

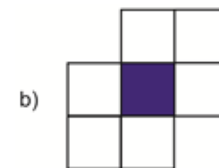


or

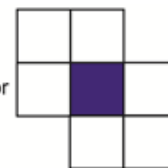
c)



• Heksagonalne losowe



or

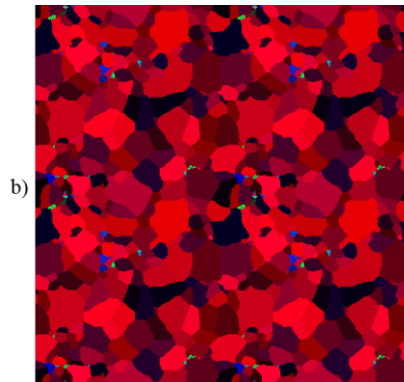
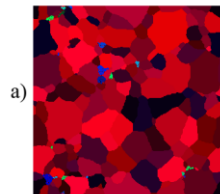


Wybieramy 1 sąsiedztwo klasyczne
i 1 sąsiedztwo losowe

Warunki brzegowe

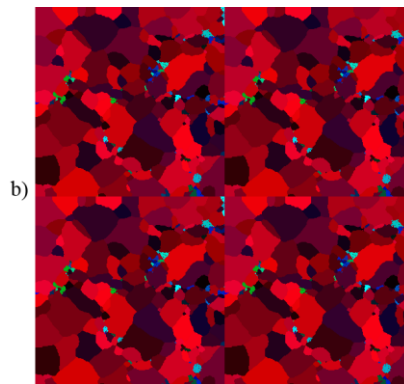
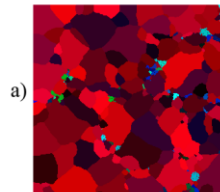
- **periodyczne**

9	3	6	9	3
7	1	4	7	1
8	2	5	8	2
9	3	6	9	3
7	1	4	7	1



- **absorbujące**

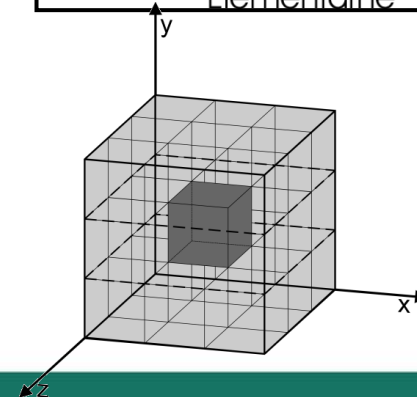
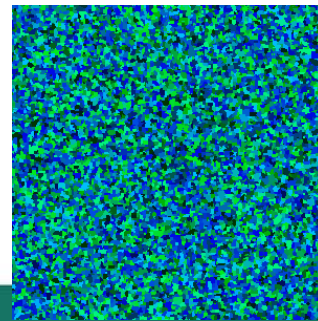
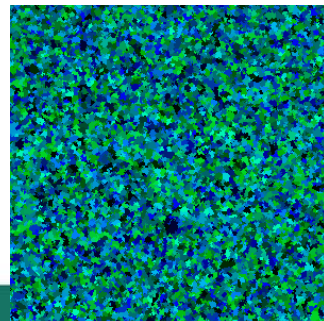
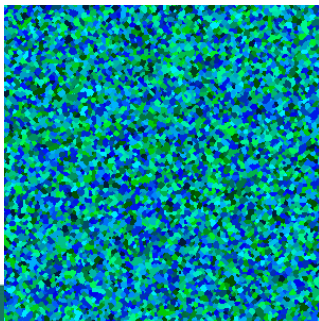
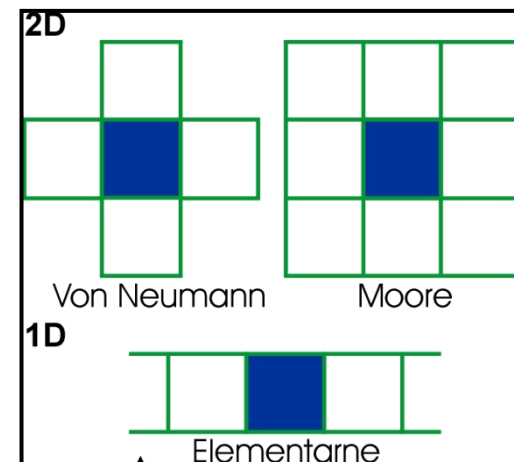
0	0	0	0	0
0	1	4	7	0
0	2	5	8	0
0	3	6	9	0
0	0	0	0	0



Założenia metody MC

Główną ideą metody Monte Carlo jest odwzorowanie fragmentu materiału skończoną ilością komórek (każda komórka posiada unikalny stan, kolor oraz wartość energii). Stan komórki wyznaczany jest na bazie sąsiadów, każda komórka dąży do minimalizacji energii. Próbkowanie przestrzeni odbywa się w sposób losowy.

- **Przestrzeń** – tak samo jak w CA ($X \times Y$)
- **Sąsiedztwo** – tak samo jak w CA
- **Reguły przejścia** – bazują na minimalizacji energii układu (w odróżnieniu od CA nie powielamy przestrzeni)



Kroki algorytmu rozrostu ziaren MC:

Krok 1: Utworzenie początkowej mikrostruktury algorytmem CA.

Krok 2: Losowy wybór komórki w przestrzeni (stan/id/Qi), losowanie bez zwracania.

Krok 3: Obliczenie, na bazie stanów sąsiadów, energii wylosowanej komórki. Do obliczenia energii wykorzystujemy następujące równanie:

$$E = J_{gb} \sum_{\langle i,j \rangle} (1 - \delta_{s_i, s_j})$$

↙
↘
↘

Energia granicy ziarna <1.0> Kolejni sąsiedzi <Moore, ...> Delta Kroneckera

Krok 4: Badamy możliwość zmiany stanu/id komórki, w tym celu rozważamy hipotetyczną sytuację, w której komórka przyjmuje tymczasowo stan/id jednego z sąsiadów (wybór losowy).

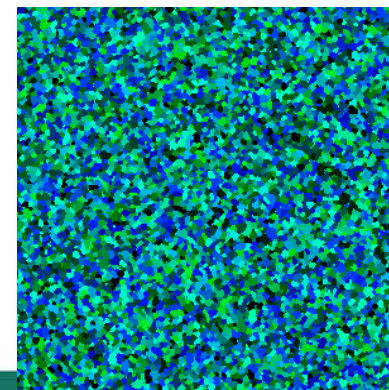
Krok 5: Obliczamy energię dla nowego stanu/id oraz zmianę energii w stosunku do wcześniejszego stanu/id

$$\Delta E = E_{after} - E_{before}$$

Krok 6: Akceptujemy zmianę z prawdopodobieństwem p:

$$p(\Delta E) = \begin{cases} 1 & \Delta E \leq 0 \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{kt}\right) & \Delta E > 0 \end{cases}$$

kt – stała <0.1 -6>



Przykłady wyliczania energii:

Początkowa energia
komórki

Q1	Q1	Q2
Q3	Q3	Q2
Q3	Q2	Q2

$$E = J_{gb} \sum_{\langle i,j \rangle} (1 - \delta_{S_i S_j}) = 6$$

Zmiana id na wartość spoza sąsiedztwa
zawsze podnosi wartość energii

Q1	Q1	Q2
Q3	Q4	Q2
Q3	Q2	Q2

$$E = J_{gb} \sum_{\langle i,j \rangle} (1 - \delta_{S_i S_j}) = 8$$

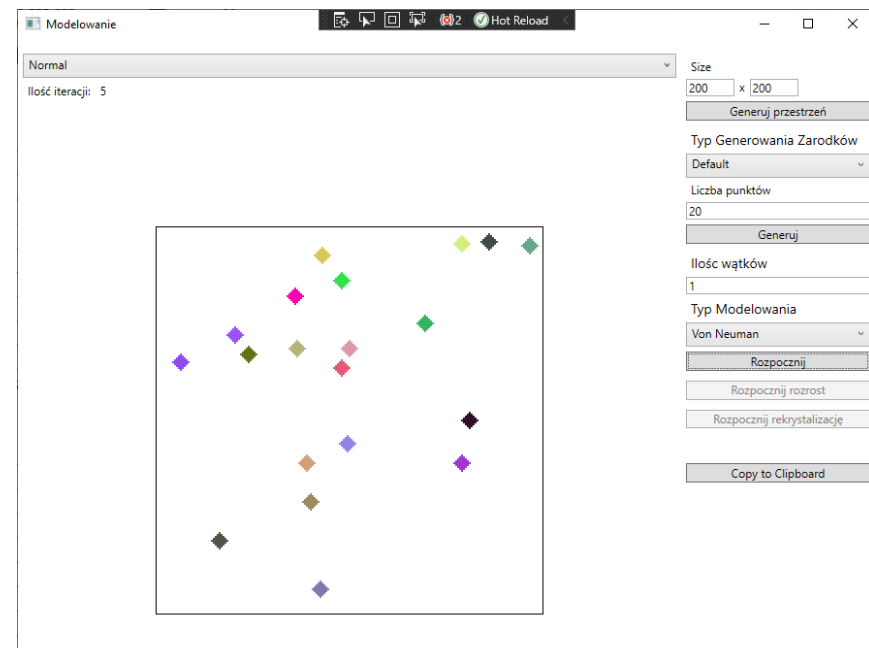
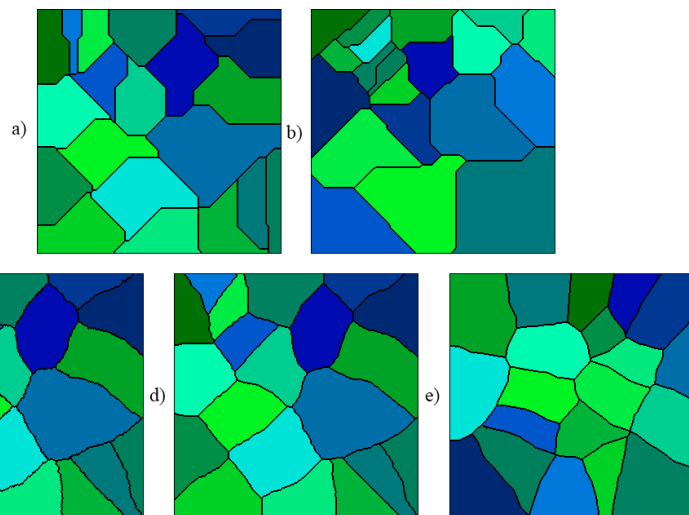
Zmiana id na Q2 zmniejszy
wartość energii

Q1	Q1	Q2
Q3	Q2	Q2
Q3	Q2	Q2

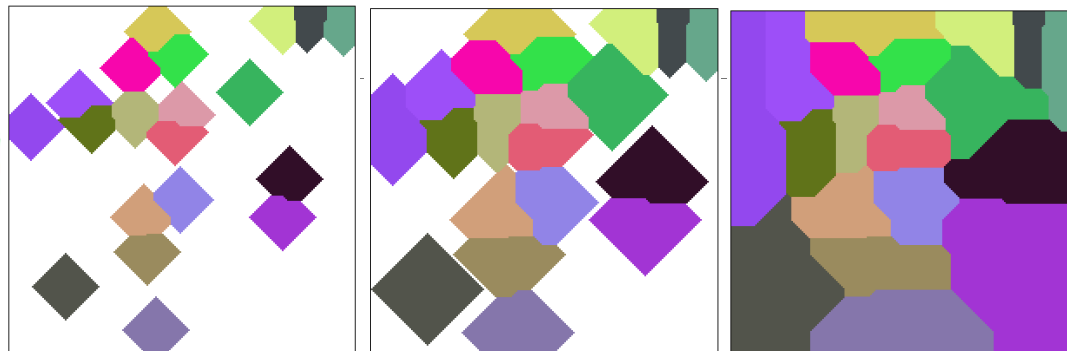
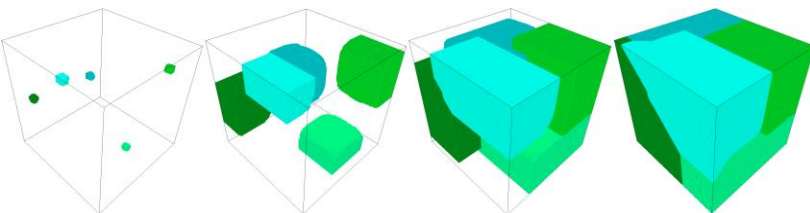
$$E = J_{gb} \sum_{\langle i,j \rangle} (1 - \delta_{S_i S_j}) = 4$$



Wpływ sąsiedztwa

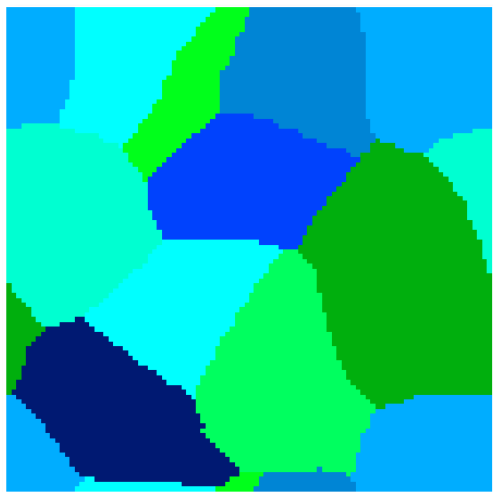


Kolejne etapy rozrostu



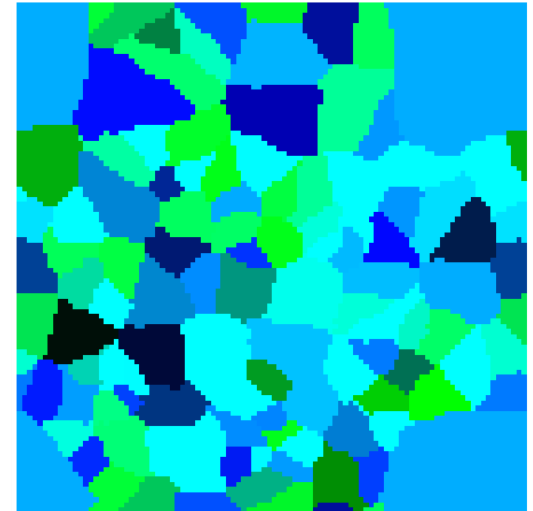
Substruktura CA->CA

Step 1: Naiwny rozrost CA



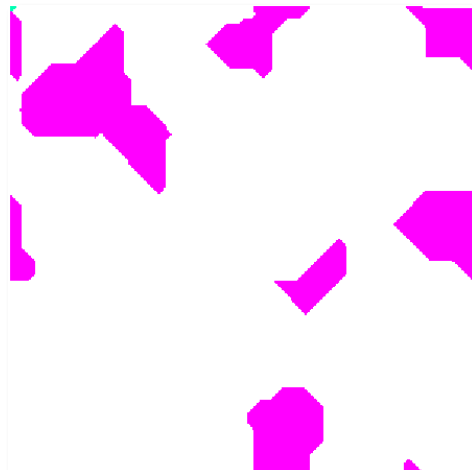
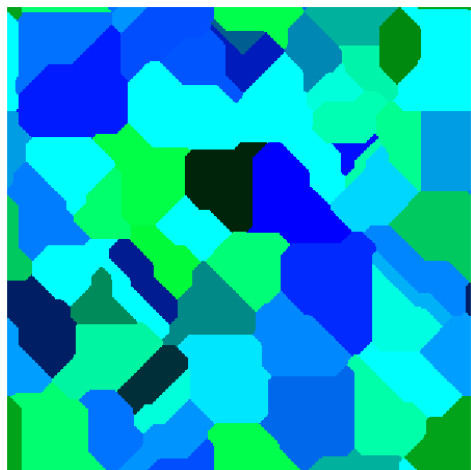
Step 2: Wybór ziaren

Step 3: Kolejny rozrost



Dual phase CA->CA

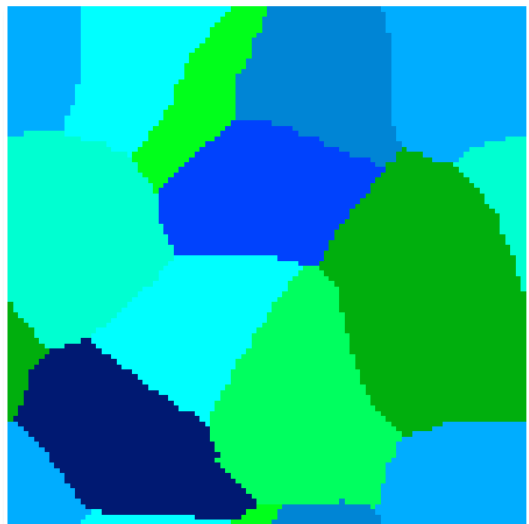
Step 1: Naiwny rozrost CA



Step 3: Kolejny rozrost

Step 2: Wybór ziaren +
przekolorowane na 1
kolor

Step 1: Rozrost CA

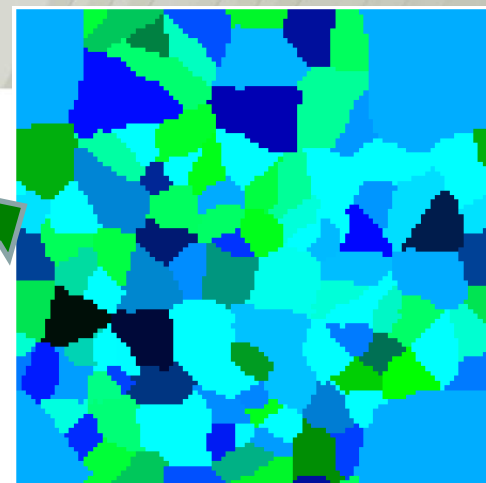


Step 2: Wybór ziaren

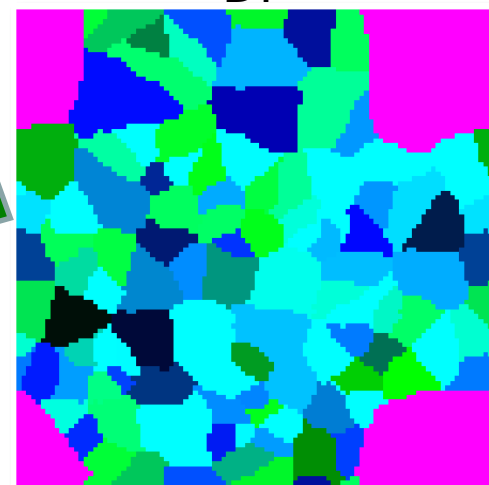


or

SUB



DP



id - size - %

5 - 1749 - 17.49

8 - 1664 - 16.64

10 - 1201 - 12.01

1 - 939 - 9.39

7 - 611 - 6.11

2 - 714 - 7.14

3 - 395 - 3.95

4 - 838 - 8.38

9 - 1085 - 10.85

6 - 804 - 8.04