



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΜΕΤΑΛΛΕΙΩΝ-ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑΣ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ

*Σύνδεση Τεχνολογιών Τεχνητής Ευφυΐας  
με Τεχνολογία Υλικών*



Διπλωματική Εργασία

του

Μιχαήλ Παλαιού

Επιβλέπων: Dr.-Ing. Σπύρος Παπαευθυμίου  
Αναπληρωτής Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Ιούλιος 2022







ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΜΕΤΑΛΛΕΙΩΝ-ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑΣ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ

*Σύνδεση Τεχνολογιών Τεχνητής Ευφυΐας  
με Τεχνολογία Υλικών*

Διπλωματική Εργασία

του

Μιχαήλ Παλαιού

Επιβλέπων: Dr.– Ing. Σπύρος Παπαευθυμίου  
Αναπληρωτής Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή επιτροπή στις 20 Ιουλίου, 2022.

Άνθιμος Ξενίδης, Καθηγητής ..... (Υπογραφή)

Δημήτριος Πάνιας, Καθηγητής ..... (Υπογραφή)

Σπυρίδων Παπαευθυμίου, Αν. Καθηγητής ..... (Υπογραφή)

Αθήνα, Ιούλιος 2022

(Υπογραφή)

.....

Μιχαήλ Παλαιός

Διπλωματούχος Μηχανικός Μεταλλείων – Μεταλλουργός Ε.Μ.Π.

Copyright © – All rights reserved Μιχαήλ Παλαιός, 2022.

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ' ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν το συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.



*In God We Trust*

# Ευχαριστίες

Αισθάνομαι ευγνωμοσύνη για πολλά πρόσωπα που βοήθησαν, είτε άμεσα είτε έμμεσα, κατά τη διάρκεια της εκπόνησης της εργασίας. Καταρχάς, ευχαριστώ βαθύτατα τον καθηγητή μου, κ. Σπύρο Παπαευθυμίου. Η καθοδήγησή του και τα ερεθίσματα που μου προσέφερε τα τελευταία έτη της φοίτησής μου ήταν κρίσιμα για την ολοκλήρωση της εργασίας και για τη διαμόρφωση των ερευνητικών μου ενδιαφερόντων. Τον ευχαριστώ για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε. Επίσης, ευχαριστώ τον υποψήφιο διδάκτορα κ. Βασίλη Λουκαδάκη για όλες τις συζητήσεις και τη βοήθειά του.

Είμαι ευγνώμων για την ευκαιρία που μου δόθηκε να εκπονήσω ένα σημαντικό μέρος της εργασίας στο *Ελληνικό Κέντρο Ερεύνης Μετάλλων*. Θα ήθελα, έτσι, να ευχαριστήσω τη διοίκηση του ΕΛΚΕΜΕ για αυτή την ευκαιρία και για την πολύτιμη εμπειρία που έλαβα. Ευχαριστώ, επίσης, τον κ. Απόστολο Φυσικόπουλο για την καθοδήγηση και την ελευθερία που μου έδωσε αναφορικά με την προσέγγιση του ερευνητικού θέματος, αλλά και τον κ. Ευάγγελο Γαβαλά για τις ενδιαφέρουσες συζητήσεις. Έπειτα, ευχαριστώ την κ. Ελένη Αϊβαζόγλου για την υπερβολικά ομαλή συνεργασία και για τις θυσίες που έκανε στον χρόνο της.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω, τώρα, τους πιο σημαντικούς ανθρώπους στη ζωή μου. Ευχαριστώ τους φίλους μου για την στήριξή τους όλα αυτά τα χρόνια. Έχουν διαμορφώσει έντονα τον χαρακτήρα μου και δεν θα τους ξεχάσω ποτέ. Τέλος, εκφράζω το πιο μεγάλο ευχαριστώ στους γονείς μου, Μανώλη και Παναγιώτα, και στον αδερφό μου, Γιάννη. Ήταν πάντα δίπλα μου, χωρίς προϋποθέσεις, και υποστήριζαν τους στόχους μου θυσιάζοντας πολλά. Είμαι πραγματικά ευγνώμων που είναι η οικογένειά μου. Αφιερώνω την εργασία σε αυτούς.

Μιχαήλ Παλαιός  
Αθήνα, Ιούλιος 2022



# Περίληψη

Η δημιουργία και κατανόηση των συνδέσεων μεταξύ της κατεργασίας, της μικροδομής και των ιδιοτήτων, για τον σχεδιασμό διεργασιών και προϊόντων, βρίσκεται στο επίκεντρο της μηχανικής των υλικών. Προς αυτή την κατεύθυνση, η μέθοδος «phase-field» εφαρμόζεται κατά κόρον για τη μοντελοποίηση της εξέλιξης της μικροδομής στη μεσοκλίμακα. Δημιουργούνται, με αυτό τον τρόπο, συνδέσεις μεταξύ των κατεργασιών και της μικροδομής, οι οποίες μπορούν να επεκταθούν προς τις ιδιότητες του αντίστοιχου υλικού. Η μέθοδος «phase-field», ωστόσο, εκτός του σημαντικού υπολογιστικού κόστους της, πραγματεύεται το ευθύ πρόβλημα της πρόβλεψης της εξέλιξης της μικροδομής. Για την αντιστροφή των συνδέσεων και για τη βελτιστοποίηση των παραμέτρων επεξεργασίας που οδηγούν στις επιθυμητές μικροδομές και ιδιότητες, η προσέγγιση θα πρέπει να αλλάξει. Στη συγκεκριμένη εργασία, η μικροδομή συνδέεται με την κατεργασία της ανόπτησης μέσω της υποκατάστατης μοντελοποίησης της μεθόδου «phase-field», η οποία αφορά στο φαινόμενο της ανακρυστάλλωσης στα κράματα χαλκού-νικελίου. Το φαινόμενο, αρχικά, προσομοιώνεται σε στρατηγικά τοποθετημένα σημεία του χώρου των παραμέτρων επεξεργασίας (θερμοκρασία και διάρκεια ανόπτησης). Έτσι, προκύπτουν οι τελικές μικροδομές, που θα αποτελέσουν και τη βάση για τα δεδομένα που θα αξιοποιηθούν από τα υποκατάστατα μοντέλα μηχανικής μάθησης. Στη συνέχεια, το σύνολο των τελικών μικροδομών ποσοτικοποιείται μέσω των «two-point statistics» και της «principal component analysis». Ως αποτέλεσμα, προκύπτει ένα σύνολο δεδομένων λίγων διαστάσεων που μπορεί να αξιοποιηθεί πλέον από μοντέλα μηχανικής μάθησης. Δύο μοντέλα παλινδρόμησης με βάση τις Γκαουσιανές διαδικασίες προπονούνται με δεδομένα εισόδου τις παραμέτρους επεξεργασίας και με δεδομένα εξόδου τα μεγέθη που προκύπτουν από την εφαρμογή της «principal component analysis». Δημιουργούνται, με αυτό τον τρόπο, εύκολα προσβάσιμες συνδέσεις μεταξύ της ανόπτησης και των μικροδομών των συγκεκριμένων κραμάτων. Αυτές μπορούν να επεκταθούν προς τις ιδιότητες και να αντιστραφούν μέσω της Μπεϋζιανής βελτιστοποίησης.

## Λέξεις κλειδιά

Εξέλιξη της Μικροδομής, Μέθοδος Phase-Field, Στατιστική Μικροδομών, Μηχανική Μάθηση, Γκαουσιανές Διαδικασίες

# Abstract

From a materials engineering standpoint, the development and understanding of process-microstructure-properties relationships is crucial for the design of both processes and products. To this end, phase-field modeling is widely used to simulate the microstructural evolution at the mesoscale. As a result, linkages are formed between the process and the microstructure, which can also expand towards the properties and performance of the respective material. However, besides its significant computational cost, phase-field modeling primarily deals with the forward problem of microstructural evolution prediction. For the inversion of the linkages, and towards the optimization of the process parameters that lead to desirable microstructures and properties, the approach has to change. Here, the microstructure is linked with the process of annealing through the surrogate (or reduced-order) modeling of the phase-field simulation of recrystallization in copper-nickel alloys. First, we simulate the phenomenon for several strategically defined points in the process parameter space of annealing temperature and duration. Thus, we obtain the final microstructures, which form the basis for the dataset that will be used for the training and evaluation of the machine learning surrogate models. We then use two-point spatial correlations to effectively quantify the ensemble of final microstructures and principal component analysis to derive their low-dimensional representations, which can be used by machine learning models. Two Gaussian process regression models are trained by treating the process parameters as inputs and the final low-dimensional representations of the microstructures as outputs. By implementing this methodology, we develop easily accessible linkages between the process of annealing and the microstructures of these specific alloys. These can be expanded towards the properties and inverted through Bayesian optimization.

## **Keywords**

Microstructural Evolution, Phase-Field Modeling, Microstructure Statistics, Machine Learning, Gaussian Processes



# Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1
1.1	Σχεδιασμός Υλικών ως Αντίστροφο Πρόβλημα	1
1.2	Στόχος και Δομή της Εργασίας	4
2	Θεωρητικό Υπόβαθρο	7
2.1	Μεταλλουργικά Στοιχεία	7
2.1.1	Χαλκός και Κράματα	7
2.1.2	Σύστημα Cu-Ni και Κράμα C70600	9
2.2	Μέθοδος Phase-Field	12
2.2.1	Αρχές Μεθόδου Phase-Field	12
2.2.2	Multi Phase-Field Μοντέλο	14
2.2.3	Χαρακτηριστικά, Επίλυση και Εφαρμογές	16
2.3	Στατιστική Περιγραφή Μικροδομών	18
2.3.1	Local States και Συνάρτηση Μικροδομής	19
2.3.2	n-Point Statistics	23
2.3.3	Principal Component Analysis	26
2.4	Υποκατάστατη Μοντελοποίηση	31
2.4.1	Επιβλεπόμενη Μηχανική Μάθηση	31
2.4.2	Gaussian Process Regression	35
2.4.3	Υποκατάστατη Μοντελοποίηση Phase-Field	38
3	Πειραματικό Μέρος	46

3.1	Μοντέλο Phase-Field	46
3.1.1	Αρχική Μικροδομή	46
3.1.2	Υπολογιστικές Παράμετροι	47
3.1.3	Latin Hypercube Sampling	51
3.2	Υπολογισμός Στατιστικών της Μικροδομής	54
3.3	Gaussian Process Regression	57
3.3.1	Επεξεργασία Δεδομένων	57
3.3.2	Συνάρτηση Συνδιασποράς	59
4	Αποτελέσματα & Συζήτηση	65
4.1	Phase-Field Modeling	65
4.1.1	Εξέλιξη της Μικροδομής	65
4.1.2	Τελικές Μικροδομές	69
4.2	Microstructure Statistics	71
4.2.1	Segmentation	71
4.2.2	Two-Point Statistics	73
4.2.3	Principal Components	76
4.3	Reduced-Order Models	81
5	Συμπεράσματα	92
5.1	Συνεισφορά	92
5.2	Μελλοντική Έρευνα	93
	Βιβλιογραφία	96



# Κατάλογος Σχημάτων

Σχήμα 1: Απεικόνιση της προσέγγισης του σχεδιασμού υλικών ως αντίστροφο πρόβλημα βελτιστοποίησης. Οι περιοχές με την έντονη πορτοκαλί απόχρωση αφορούν στα υποσύνολα των χώρων κατεργασιών-μικροδομής-ιδιοτήτων που είναι πιο πιθανό να πληρούν τις προϋποθέσεις σχεδιασμού.-----	2
Σχήμα 2: Διμερές διάγραμμα φάσεων του συστήματος Cu-Ni, που παράχθηκε με το λογισμικό Thermo-Calc.-----	10
Σχήμα 3: Ψευδο-διμερές διάγραμμα φάσεων του κράματος C70600, που παράχθηκε με το λογισμικό Thermo-Calc.-----	11
Σχήμα 4: Απεικόνιση της μεθόδου «phase-field». (α) Προσομοίωση ανάπτυξης των κόκκων, όπου τέσσερις μη διατηρούμενες μεταβλητές αντιπροσωπεύουν δέκα κόκκους. Οι τέσσερις εικόνες απεικονίζουν την ίδια περιοχή της μικροδομής, αλλά η κάθε μια αφορά και διαφορετική μη διατηρούμενη μεταβλητή. (β) Παράδειγμα διμερούς κράματος με τρεις φάσεις που αντιπροσωπεύονται από μια διατηρούμενη συγκέντρωση και τρεις μη διατηρούμενες μεταβλητές. Κάθε εικόνα αφορά στο ένα τέταρτο της συγκεκριμένης περιοχής της μικροδομής και σε μια ξεχωριστή μεταβλητή. [15]-----	14
Σχήμα 5: Απεικόνιση των $s$ και $r$ στον διακριτοποιημένο διανυσματικό χώρο. [27]-----	24
Σχήμα 6: Τρεις συνθετικές μικροδομές και τα αντίστοιχα «two-point statistics» τους.-----	25
Σχήμα 7: Απεικόνιση των αποτελεσμάτων της PCA που εφαρμόστηκε στο σύνολο δεδομένων MNIST και, πιο συγκεκριμένα, σε ένα υποσύνολό του που αποτελείται από εικόνες του διαφορετικά γραμμένου ψηφίου 9. Η εικόνα αναπαράγεται από το [37].-----	29
Σχήμα 8: Τα «two-point statistics» τριών κατηγοριών μικροδομής και η οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων της PCA που εφαρμόστηκε σε αυτά.-----	30
Σχήμα 9: Προσαρμογή μιας γραμμικής συνάρτησης στα δεδομένα, μέσω της γραμμικής παλινδρόμησης.-----	32
Σχήμα 10: Διάγραμμα Venn για τις διαφορετικές βασικές τεχνολογίες της τεχνητής νοημοσύνης. [44]-----	33
Σχήμα 11: Απεικόνιση μιας GP που μοντελοποιεί μια μονοδιάστατη συνάρτηση. Στο πάνω αριστερά σχήμα, η GP δεν έχει προσαρμοστεί σε κανένα σημείο δεδομένων. Σε κάθε ένα από τα υπόλοιπα σχήματα, η GP προσαρμόζεται σε ένα περισσότερο σημείο κάθε φορά. Τα σχήματα λαμβάνονται από το [86].-----	37

Σχήμα 12: Η αρχική μικροδομή όπως οπτικοποιείται μέσω του λογισμικού Paraview (αριστερά) και του λογισμικού DP_MICRESS (δεξιά).-----	47
Σχήμα 13: Το ανακρυσταλλωμένο κλάσμα όγκου της μικροδομής ως συνάρτηση του λογαρίθμου του χρόνου σε μια συνηθισμένη περίπτωση ισοθερμοκρασιακής ανακρυστάλλωσης. Το σχήμα προσαρμόζεται από το [69].-----	49
Σχήμα 14: Τα σημεία στον παραμετρικό χώρο της θερμοκρασίας και της διάρκειας της ανόπτησης, που προκύπτουν από την εφαρμογή της μεθόδου LHS. Το πάνω διάγραμμα αφορά αποκλειστικά στα σημεία των δεδομένων προπόνησης, με τα πορτοκαλί να είναι αυτά που προστέθηκαν εκ των υστέρων, ενώ το κάτω διάγραμμα αφορά και στα δεδομένα ελέγχου (μαύρο). -----	53
Σχήμα 15: Απεικόνιση των δεδομένων προπόνησης και ελέγχου. Στο πάνω διάγραμμα, το πρώτο «principal component» αντιστοιχίζεται με τις θερμοκρασίες στο σύνολο δεδομένων ενώ, στο δεύτερο, αντιστοιχίζεται με τις διάρκειες της ανόπτησης. -----	56
Σχήμα 16: Απεικόνιση των δεδομένων προπόνησης και ελέγχου. Στο πάνω διάγραμμα, το δεύτερο «principal component» αντιστοιχίζεται με τις θερμοκρασίες στο σύνολο δεδομένων ενώ, στο δεύτερο, αντιστοιχίζεται με τις διάρκειες της ανόπτησης. -----	56
Σχήμα 17: Απεικόνιση των τελικών δεδομένων προπόνησης και ελέγχου για το πρώτο «principal component». -----	58
Σχήμα 18: Απεικόνιση των τελικών δεδομένων προπόνησης και ελέγχου για το δεύτερο «principal component». -----	59
Σχήμα 19: Τρεις από τους αρχικούς πυρήνες που θα βελτιστοποιηθούν στη συνέχεια: (a) SE-ARD, (b) Matern ( $\nu = 3/2$ ), (c) SE-ARD x Periodic. -----	62
Σχήμα 20: Η εξέλιξη της μικροδομής κατά την ανακρυστάλλωση στους 978 K. Η μικροδομή παρουσιάζεται για τα time steps: 0, 1000, 2000, 3000, 4000, 5000 seconds. -----	66
Σχήμα 21: Η εξέλιξη της μικροδομής κατά την ανακρυστάλλωση στους 978 K. Η μικροδομή παρουσιάζεται για τα time steps: 6000, 7000, 8000, 9000, 10000 seconds. -----	67
Σχήμα 22: Η μεταβολή της αποθηκευμένης ενέργειας κατά τη διάρκεια της ανακρυστάλλωσης στους 978 K.-----	68
Σχήμα 23: Τρεις ενδεικτικές μικροδομές, αποτέλεσμα της ανόπτησης σε διαφορετικές θερμοκρασίες: (a) 1016 K-10000 s, (b) 1067 K- 9500 s, (c) 1118 K-5400 s -----	69
Σχήμα 24: Οι μικροδομές για έξι συνδυασμούς των παραμέτρων: (a) 876 K-8025 s, (b) 1029 K- 6855 s, (c) 927 K-3735 s, (d) 1093 K-7635 s, (e) 978 K - 5685 s, (f) 1042 K -2565s. -----	70



Σχήμα 25: Οι μικροδομές του σχήματος 22 έπειτα από τη διαδικασία της τμηματοποίησης. -----	72
Σχήμα 26: (α) Ενδεικτικές δυαδικές μικροδομές και (β) τα αντίστοιχα «two-point statistics» τους. --	73
Σχήμα 27: Η εξέλιξη του ποσοστού της ανακρυστάλλωσης, όπως αυτό υπολογίζεται μέσω των «two-point statistics». -----	74
Σχήμα 28: Σύγκριση των υπολογισμένων ποσοστών της ανακρυστάλλωσης μέσω του μοντέλου «phase-field» και μέσω των «two-point statistics». -----	75
Σχήμα 29: Ποσοστά της διασποράς που αποτυπώνει το εκάστοτε «principal component». -----	76
Σχήμα 30: Εξέλιξη των «principal components», τα οποία αφορούν στις δυαδικές μικροδομές του συνόλου της εξέλιξης.-----	77
Σχήμα 31: Τα «principal components» που αντιστοιχούν στις δυαδικές μικροδομές των δεδομένων προπόνησης και ελέγχου του υποκατάστατου μοντέλου. -----	79
Σχήμα 32: Οπτικοποίηση των: (α) αρχικών στατιστικών, (β) των στατιστικών που αναδομούνται χρησιμοποιώντας και τα δύο «principal components», (c) των στατιστικών που αναδομούνται μόνο μέσω του πρώτου «principal component».-----	80
Σχήμα 33: Ο βελτιστοποιημένος SE-ARD πυρήνας (PC1 Model). -----	83
Σχήμα 34: Ο βελτιστοποιημένος Matern-ARD πυρήνας (PC2 Model). -----	83
Σχήμα 35: Οι βελτιστοποιημένοι πυρήνες για το μοντέλο που αντιστοιχεί στο πρώτο PC: (a) SE-ARD, (b) Matern32 – ARD, (c) SE[0] * Matern32[1], (d) SE[1] * Matern32[0], (e) SE * Exponential, (f) Matern32 * Exponential, (g) SE * Periodic, (h) Matern * Periodic -----	84
Σχήμα 36: Σύγκριση της απόδοσης των οκτώ μοντέλων (για κάθε PC), που προκύπτουν από τους βελτιστοποιημένους πυρήνες. -----	85
Σχήμα 37: Προβλεπόμενη μέση τιμή (πάνω) και διασπορά (κάτω) για τις προβλέψεις του πρώτου μοντέλου για το PC1. -----	87
Σχήμα 38: Προβλεπόμενη μέση τιμή (πάνω) και διασπορά (κάτω) για τις προβλέψεις του δεύτερου μοντέλου για το PC2. -----	89
Σχήμα 39: Οι επιφάνειες των προβλεπόμενων μέσων από (α) το μοντέλο με έξοδο το PC1 και (b) το μοντέλο με έξοδο το PC2. -----	90

# Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 1: Συνηθισμένες ιδιότητες του κράματος 90-10 (C70600) [11].....	11
Πίνακας 2: Βασικές παράμετροι εισόδου για το μοντέλο «phase-field». [69], [72], [76].....	51
Πίνακας 3: Οι πυρήνες που ορίζονται και θα βελτιστοποιηθούν στη συνέχεια. ....	62
Πίνακας 4: Παράμετροι του SE-ARD πυρήνα για το πρώτο μοντέλο (PC1).....	81
Πίνακας 5: Παράμετροι του Matern-ARD πυρήνα για το δεύτερο μοντέλο (PC2).....	82
Πίνακας 6: Τιμές MSE για τα δύο μοντέλα GPR. ....	86



# 1 Εισαγωγή

---

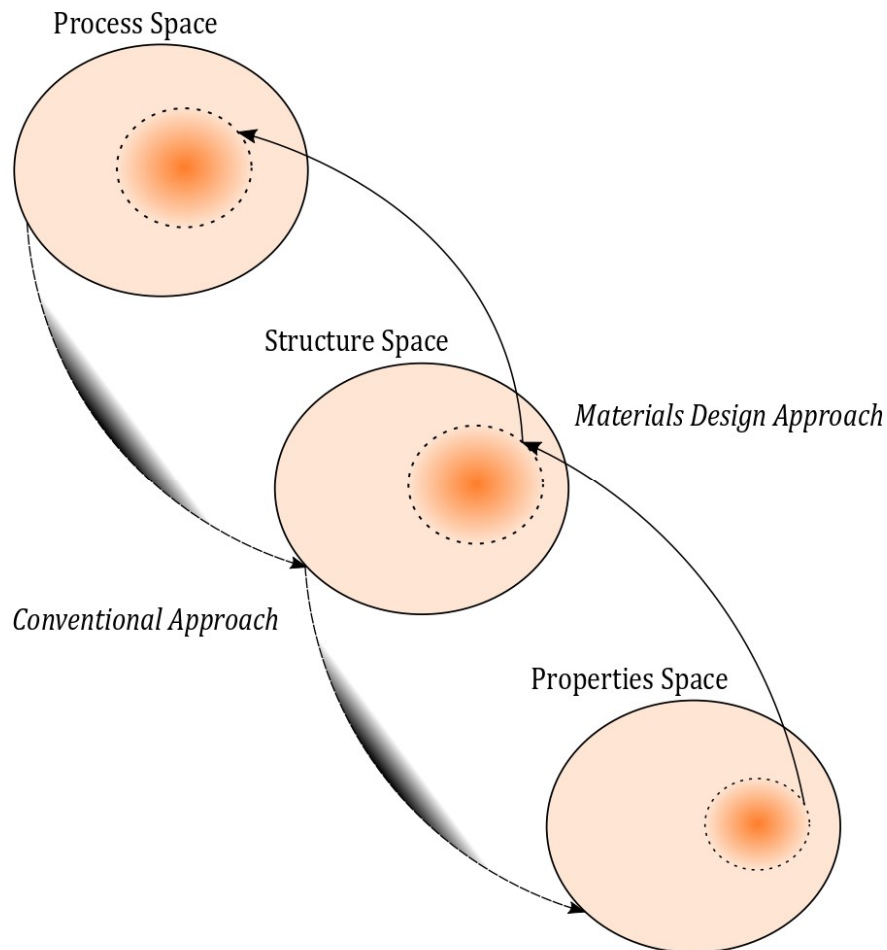
## 1.1 Σχεδιασμός Υλικών ως Αντίστροφο Πρόβλημα

Στο επίκεντρο της επιστήμης και μηχανικής των υλικών, βρίσκονται οι συνδέσεις μεταξύ των κατεργασιών, της μικροδομής και των ιδιοτήτων. Η δημιουργία αυτών των συνδέσεων αποσκοπεί κυρίως στον σχεδιασμό προηγμένων υλικών με καλύτερη απόδοση υπό ορισμένες συνθήκες. Όλες οι κατεργασίες διαμόρφωσης και θερμικής επεξεργασίας στις οποίες υπόκειται ένα υλικό καθορίζουν τη δομή του σε κάθε κλίμακα μεγέθους. Η δομή και τα φαινόμενα που την αφορούν σε κάθε κλίμακα επηρεάζουν, με τη σειρά τους, τις ιδιότητες του υλικού. Ορισμένες υπολογιστικές μέθοδοι μπορούν να επιταχύνουν τη δημιουργία αξιόπιστων συνδέσεων κατεργασιών-μικροδομής-ιδιοτήτων, μέσω της σύμπτυξης μοντέλων και πειραμάτων στις διαφορετικές κλίμακες. Ουσιαστικά, πληροφορίες που σχετίζονται άμεσα με τις συνδέσεις ενδιαφέροντος μεταφέρονται μέσω ξεχωριστών μοντέλων [1]. Ο στόχος, βέβαια, του υπολογιστικού σχεδιασμού υλικών δεν είναι η πλήρης αντικατάσταση των πειραμάτων, αλλά η μείωσή τους. Τα εφαρμοζόμενα μοντέλα, κάθε λογής, ελέγχουν τις παραμέτρους σχεδιασμού και διευκολύνουν το σχεδιασμό πιο στοχευμένων πειραμάτων [2]. Η μεθοδολογία αυτή, έτσι, αποτελεί μια γέφυρα ανάμεσα στις ρασιοναλιστικές και στις εμπειρικές προσεγγίσεις στην ανάπτυξη υλικών, ανάμεσα στην επιστημονική πρόβλεψη και στα πειράματα.

Σε μεγάλο βαθμό, η επιστήμη των υλικών αφορά στον προσδιορισμό των ιδιοτήτων που προκύπτουν από τη χημική σύσταση, τη δομή και τις κατεργασίες στις οποίες υπόκειται ένα υλικό. Υπό το πρίσμα του σχεδιασμού υλικών, η παραπάνω μεθοδολογία αντιστρέφεται [3]. Δηλαδή, αντιμετωπίζοντας ως δεδομένα ορισμένα κριτήρια για την απόδοση και τις ιδιότητες του υλικού υπό ορισμένες συνθήκες, προσδιορίζονται οι συστάσεις και οι κατεργασίες που θα οδηγήσουν στις κατάλληλες μικροδομές. Ο χώρος των πιθανών κατεργασιών, των παραμέτρων τους, αλλά και των συνδυασμών τους είναι τεράστιος. Τα διαφορετικά σημεία του χώρου αυτού μπορούν να οδηγήσουν σε δραστικά διαφορετικές μικροδομές. Αν η μικροδομή ποσοτικοποιηθεί, τότε ο χώρος των πιθανών μικροδομών ενός υλικού είναι, επίσης, τεράστιος. Έχοντας στόχο τον σχεδιασμό προηγμένων κραμάτων, θα

πρέπει να αξιοποιήσουμε μεθόδους που μπορούν να εξερευνήσουν τον τεράστιο χώρο των κατεργασιών και των συστάσεων ελέγχοντας με υπολογιστικά συνετό τρόπο τις πιθανές παραμέτρους σχεδιασμού. Μέσω αυτού του ελέγχου, μπορούν να προσδιοριστούν χώροι υποσύνολα του αρχικού, οι τιμές των οποίων είναι πιθανό να οδηγήσουν στη βελτιστοποίηση της μικροδομής και, συνεπώς, των ιδιοτήτων [4].

Έως τώρα, η εξερεύνηση του χώρου κατεργασιών είναι, ως επί το πλείστον, πειραματικού χαρακτήρα, καθώς η ανάπτυξη υπολογιστικών συνδέσεων κατεργασίας και μικροδομής είναι μια σύνθετη διαδικασία. Οι συνδέσεις αυτές επηρεάζονται σημαντικά από μικρές μεταβολές στην επεξεργασία του υλικού, για την οποία συχνά λείπουν σημαντικές πληροφορίες. Παράλληλα, στην πλειοψηφία των προσπαθειών σχεδιασμού υλικών, πληροφορίες, που αφορούν στη μικροδομή και στα χαρακτηριστικά της, είναι απύσυχες [5]. Η



Σχήμα 1: Απεικόνιση της προσέγγισης του σχεδιασμού υλικών ως αντίστροφο πρόβλημα βελτιστοποίησης. Οι περιοχές με την έντονη πορτοκαλί απόχρωση αφορούν στα υποσύνολα των χώρων κατεργασιών-μικροδομής-ιδιοτήτων που είναι πιο πιθανό να πληρούν τις προϋποθέσεις σχεδιασμού.

γνώση της μικροδομής μπορεί να αξιοποιηθεί συνεργατικά με διάφορες υπολογιστικές μεθόδους, για να μειώσει τα απαιτούμενα πειράματα. Μία από αυτές, είναι η μέθοδος «phase-field», που προσομοιώνει την εξέλιξη της μικροδομής ενός υλικού κατά τη διάρκεια διάφορων κατεργασιών και φαινομένων (π.χ. μετασχηματισμοί φάσης, ανακρυστάλλωση). Η μέθοδος αυτή, βέβαια, αφορά στο ευθύ πρόβλημα της πρόβλεψης της μικροδομής, και όχι το αντίστροφο πρόβλημα της βελτιστοποίησης των παραμέτρων σχεδιασμού. Συχνά, επίσης, το υπολογιστικό κόστος της μεθόδου «phase-field» είναι απαγορευτικό για την εξερεύνηση του χώρου κατεργασιών και συστάσεων. Εδώ, η υποκατάστατη μοντελοποίηση και η Μπεϋζιανή βελτιστοποίηση μπορούν να αποδειχθούν χρήσιμες για τη διευκόλυνση της δημιουργίας και της αντιστροφής των συνδέσεων κατεργασίας-μικροδομής σε έναν μεγάλο σχετικά χώρο [6].

Ο βασικός στόχος ενός υποκατάστατου μοντέλου είναι η προσέγγιση της πολυπαραμετρικής λειτουργίας ενός υπολογιστικά ακριβούς μοντέλου  $f(x): R^p \rightarrow R$  και η βελτιστοποίηση των παραμέτρων σχεδιασμού. Επίσης, τα υποκατάστατα μοντέλα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να καλύψουν τα κενά σε ένα σύνολο δεδομένων και να αποκαλύψουν γενικές τάσεις και σχέσεις ανάμεσα στις μεταβλητές ενδιαφέροντος [7]. Η μηχανική μάθηση έχει αποδειχθεί χρήσιμη στη δημιουργία υποκατάστατων μοντέλων σε μια μεγάλη ποικιλία εφαρμογών, με την εξέλιξη της μικροδομής να είναι μία από εκείνες. Όπως αναλύεται στο υποκεφάλαιο 2.4.3, η υποκατάστατη μοντελοποίηση της μεθόδου «phase-field» για τον αντίστροφο σχεδιασμό της μικροδομής είναι ένα πολλά υποσχόμενο ερευνητικό πεδίο, που μπορεί να ενισχύσει τον υπολογιστικό σχεδιασμό των υλικών.

Η γνώση της μικροδομής, βέβαια, πρέπει να μπορεί να αξιοποιηθεί εύκολα από υποκατάστατα μοντέλα. Η διαδικασία της μαθηματικής περιγραφής της δομής του υλικού συναντά αρκετές προκλήσεις, κυρίως διότι η δομή αυτή αποτελείται από πολλές κλίμακες (από την ατομική ως την μακροκλίμακα). Στις διαφορετικές αυτές κλίμακες, η δομή του υλικού αποτελείται από ένα τεράστιο πλήθος παραμέτρων που μπορούν να επηρεάσουν τις ιδιότητές του στη μακροκλίμακα. Αν αντιμετωπιστούν οι παράμετροι αυτές ως διαστάσεις, τότε το πρόβλημα της περιγραφής της δομής του υλικού είναι ένα πρόβλημα ακραία πολλών διαστάσεων. Μια μεθοδολογία που μπορεί να αντιμετωπίσει αυτή την πρόκληση είναι η «Materials Knowledge Systems» (MKS). Η κεντρική ιδέα πίσω από αυτή είναι η ποσοτικοποίηση της μικροδομής μέσω της στατιστικής χαρτογράφησης ενός «local state» (π.χ. φάση) του υλικού. Η μεθοδολογία MKS βασίζεται, ακόμη, στα «n-point spatial correlations» (ή αλλιώς «n-point statistics») και στην «Principal Component Analysis» (PCA), μια τεχνική μείωσης των διαστάσεων ενός προβλήματος, για τον προσδιορισμό διάφορων

χαρακτηριστικών της μικροδομής. Τα μεγέθη που προκύπτουν ως αποτέλεσμα της PCA μπορούν να αντιπροσωπεύσουν τη μικροδομή και να χρησιμοποιηθούν για τη προπόνηση υποκατάστατων μοντέλων.

## 1.2 Στόχος και Δομή της Εργασίας

Ο κύριος στόχος της εργασίας είναι η διευκόλυνση του αντίστροφου σχεδιασμού της μικροδομής, στην περίπτωση μας, κραμάτων χαλκονικελίου μέσω της υποκατάστατης μοντελοποίησης της μεθόδου «phase-field». Αξιοποιούνται εργαλεία που προήλθαν από τα ερευνητικά πεδία της υπολογιστικής επιστήμης των υλικών και της μηχανικής μάθησης, ώστε να αντιμετωπιστούν τα μειονεκτήματα του καθ' ενός υπό το πρίσμα του υπολογιστικού σχεδιασμού των υλικών.

Αρχικά, μοντελοποιείται η εξέλιξη της μικροδομής του υλικού κατά τη διάρκεια της στατικής ανακρυστάλλωσης μέσω της μεθόδου «phase-field». Η ανακρυστάλλωση είναι ένα από τα σημαντικότερα φαινόμενα, που πραγματοποιούνται κατά την ανόπτηση των παραμορφωμένων μεταλλικών υλικών, με την μοντελοποίησή της να μην είναι τετριμμένο εγχείρημα. Η μέθοδος, όμως, «phase-field» μπορεί να αντεπεξέλθει και να οδηγήσει στη δημιουργία ευθέων συνδέσεων κατεργασίας-μικροδομής. Αυτό θα γίνει και για τα κράματα χαλκονικελίου σε αυτή την εργασία. Ένα χαρακτηριστικό μέγεθος που χρησιμοποιείται για την περιγραφή του φαινομένου είναι το ποσοστό της ανακρυστάλλωσης, δηλαδή το ποσοστό των νέων ανακρυσταλλωμένων κόκκων στη μικροδομή. Η γνώση αυτού μπορεί να αξιοποιηθεί για την εύρεση συσχετίσεων μεταξύ της μικροδομής και των μηχανικών ιδιοτήτων. Δεδομένης της σημασίας του ποσοστού αυτού, θα ληφθεί υπόψη τόσο για τις τελικές μικροδομές όσο και κατά την εξέλιξη της μικροδομής υπό συγκεκριμένες συνθήκες θερμοκρασίας και διάρκειας της ανόπτησης.

Στο σύνολο των μικροδομών που θα προκύψει από τα υπολογιστικά πειράματα διαφορετικών διαρκειών και θερμοκρασιών, εφαρμόζεται η μεθοδολογία MKS για την απόκτηση ενός συνόλου δεδομένων λίγων διαστάσεων. Το σύνολο αυτό θα εμπεριέχει σημαντικές πληροφορίες για τις μικροδομές, συμπεριλαμβανομένου και του ποσοστού ανακρυστάλλωσης. Λαμβάνοντας υπόψη τις πληροφορίες αυτές, διευκολύνεται η ταχεία σύνδεση των θερμικών κατεργασιών και των μηχανικών ιδιοτήτων για τα συγκεκριμένα κράματα χαλκονικελίου που αντιμετωπίζονται ως μια μελέτη περίπτωσης μεταλλικών κραμάτων που κρυσταλλώνονται στο εδροκεντρωμένο κυβικό σύστημα (FCC). Επίσης, οι

εφαρμογές της μεθοδολογίας MKS στο φαινόμενο της στατικής ή δυναμικής ανακρυστάλλωσης είναι περιορισμένες. Η επιτυχής εφαρμογή της θα διευκολύνει και την περαιτέρω εδραίωση της μεθοδολογίας στον υπολογιστικό σχεδιασμό των μεταλλικών υλικών.

Μετά το πέρας των στοχευμένων υπολογιστικών πειραμάτων «phase-field» και μετά την επιτυχή εφαρμογή της μεθοδολογίας MKS, το τελικό σύνολο δεδομένων θα χρησιμοποιηθεί για την προπόνηση ενός υποκατάστατου μοντέλου βασισμένου στη μηχανική μάθηση και, πιο συγκεκριμένα, στη μέθοδο «Gaussian process regression». Η μέθοδος αυτή ανταποκρίνεται σε περιορισμένα σύνολα δεδομένων, υπολογίζει την αβεβαιότητα στις προβλέψεις και μπορεί να αξιοποιήσει την *εκ των προτέρων* γνώση για τα αποτελέσματα του μοντέλου. Ως δεδομένα εισόδου ορίζονται οι διάρκειες και οι θερμοκρασίες της ανόπτησης και, ως δεδομένα εξόδου, ορίζονται τα μεγέθη που προκύπτουν από την εφαρμογή της μεθοδολογίας MKS (principal components). Με την προπόνηση του μοντέλου, ενεργοποιείται η δυνατότητα του αντίστροφου σχεδιασμού της μικροδομής, με βάση το φαινόμενο της ανακρυστάλλωσης στα κράματα χαλκονικελίου.

Η διάρθρωση της διπλωματικής εργασίας έχει ως εξής:

- Στο Κεφάλαιο 2, παρουσιάζεται το θεωρητικό υπόβαθρο των μεθόδων που εφαρμόζονται συνεργατικά. Αναλύονται εκτεταμένα οι έννοιες που αποτελούν τη βάση της μεθόδου «phase-field», της μεθοδολογίας MKS και της υποκατάστατης μοντελοποίησης. Παράλληλα, οπτικοποιούνται συγκεκριμένα αποτελέσματα της εφαρμογής των μεθόδων για την κατανόηση της χρησιμότητάς τους.
- Στο Κεφάλαιο 3, αναλύονται η πειραματική διάταξη και οι σημαντικές λεπτομέρειες της εφαρμογής των ιδεών που αναπτύχθηκαν στο προηγούμενο Κεφάλαιο.
- Στο Κεφάλαιο 4, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των υπολογιστικών πειραμάτων και παρατίθενται οι παρατηρήσεις και οι προβληματισμοί μας αναφορικά με αυτά. Αξιολογείται η ενοποίηση των εφαρμοσμένων μεθοδολογιών με βάση το τελικό υποκατάστατο μοντέλο.
- Στο Κεφάλαιο 5, τέλος, η εργασία ολοκληρώνεται με ορισμένα συμπεράσματα και με τη σύνοψη της συνεισφοράς της στο ερευνητικό πεδίο του υπολογιστικού σχεδιασμού μεταλλικών υλικών. Γίνεται αναφορά, επίσης, και στις πιθανές ερευνητικές κατευθύνσεις για την επέκταση του έργου.





# 2 Θεωρητικό Υπόβαθρο

---

## 2.1 Μεταλλουργικά Στοιχεία

Ακολουθεί μια σύντομη εισαγωγή στον χαλκό και στα κράματά του για την εξοικείωση του αναγνώστη με τα βασικά χαρακτηριστικά τους. Στη συνέχεια, αναλύεται το σύστημα χαλκού – νικελίου (Cu – Ni) και, στο τέλος του υποκεφαλαίου, το κράμα C70600. Αυτό είναι και το υλικό του οποίου η ανακρυστάλλωση θα μοντελοποιηθεί, με σκοπό την ευθεία σύνδεση κατεργασίας και μικροδομής.

### 2.1.1 Χαλκός και Κράματα

Ο χαλκός και τα κράματά του είναι μια βασική κατηγορία των μεταλλικών υλικών και βρίσκονται σε σημαντικά προϊόντα καθημερινής χρήσης. Στον περιοδικό πίνακα, ο χαλκός (Cu) βρίσκεται στην τέταρτη περίοδο και στην εντέκατη ομάδα με ατομικό αριθμό 29. Έχει ατομικό βάρος 63.54 και σημείο τήξης στους 1083 °C , ενώ κρυσταλλώνεται στο εδροκεντρωμένο κυβικό σύστημα (FCC) [8]. Οι βασικές ιδιότητες που οδηγούν στην επιλογή του χαλκού και των κραμάτων του για μια συγκεκριμένη εφαρμογή είναι:

- Μηχανική αντοχή
- Αντοχή στην κόπωση
- Αντοχή στη διάβρωση
- Θερμική αγωγιμότητα
- Ηλεκτρική αγωγιμότητα
- Επιδεκτικότητα κατεργασίας

Η σημαντική επιδεκτικότητα κατεργασίας προκύπτει από την ύπαρξη των αρκετών συστημάτων ολίσθησης στις FCC κρυσταλλικές δομές, ενώ οι αντιδιαβρωτικές ιδιότητες αποδίδονται στην αδρανή φύση του χαλκού [8], [9].

Τα στοιχεία με τα οποία κραματώνεται πιο συχνά ο χαλκός είναι το αλουμίνιο, το νικέλιο, το πυρίτιο, ο κασσίτερος, και ο ψευδάργυρος. Βέβαια, άλλα στοιχεία προστίθενται για

να βελτιώσουν συγκεκριμένες ιδιότητες για συγκεκριμένες εφαρμογές. Ο χαλκός και τα κράματά του διαχωρίζονται σε εννέα βασικές κατηγορίες. Αυτές έχουν ως εξής [8]:

- Εμπορικά καθαρός χαλκός, με περιεκτικότητα τουλάχιστον 99.3% Cu.
- Κράματα μεγάλου ποσοστού χαλκού, με περιεκτικότητα τουλάχιστον 95% Cu.
- Κράματα χαλκού - ψευδαργύρου (ορείχαλκοι), με έως 40% Zn.
- Κράματα χαλκού - κασσιτέρου (μπρούντζοι), με έως 10% Sn και έως 0.2% P.
- Κράματα χαλκού – αλουμινίου, με έως 10 % Al.
- Κράματα χαλκού – νικελίου, με έως 30% Ni.
- Κράματα χαλκού – ψευδάργυρου – νικελίου, με έως 27% Zn και 18% Ni.
- Ειδικά κράματα, με συγκεκριμένα στοιχεία για ειδικές εφαρμογές.

Τα κράματα των παραπάνω κατηγοριών ακολουθούν την ονοματολογία του Unified Numbering System (UNS). Κάθε ονοματολογία εμπεριέχει πέντε αριθμούς μετά το γράμμα “C”. Τα κράματα διαμόρφωσης συμβολίζονται με C1xxxx έως C7xxxx, ενώ τα κράματα χύτευσης με C8xxxx έως C9xxxx [10]. Βέβαια, γίνονται αναφορές στα κράματα χαλκού που δεν ακολουθούν το συγκεκριμένο σύστημα.

Η κραμάτωση του χαλκού, εκτός του ότι στοχεύει στη βελτίωση της μηχανικής αντοχής χωρίς τη δραστική μείωση της ολκιμότητας, οδηγεί στη μείωση της ηλεκτρικής και της θερμικής αγωγιμότητας. Η μείωση αυτή εξαρτάται από το κραματικό στοιχείο, τη συγκέντρωση και τη θέση του στη μικροδομή. Η επιλογή της σύστασης βασίζεται κυρίως στο κατά πόσο χρειάζεται η *θυσία* της υψηλής μηχανικής αντοχής για την υψηλή αγωγιμότητα. Αυτές οι επιδράσεις, δηλαδή, αντισταθμίζονται ανάλογα με την εφαρμογή για την οποία προορίζεται το υλικό. Η ιδανική περίπτωση όπου έχουμε και υψηλή αντοχή και υψηλή αγωγιμότητα προκύπτει όταν το υλικό υπόκειται σκλήρυνση με κατακρήμνιση. Το κόστος, όμως, για να καταλήξουμε σε αυτή την περίπτωση είναι συνήθως απαγορευτικό, λόγω των συνθηκών κραμάτωσης ή της ανάγκης για περαιτέρω κατεργασίες [8], [11]. Σε περίπτωση που υπάρχουν προϋποθέσεις για ιδιότητες, όπως η αντοχή στη διάβρωση, ο σχεδιασμός του υλικού γίνεται πιο σύνθετος.

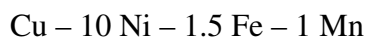
Τα κράματα του χαλκού εφαρμόζονται σε εναλλάκτες θερμότητας, ηλιακά πάνελ, συστήματα οικιακής θέρμανσης και όπου σχεδόν απαιτείται ταχεία αγωγή θερμότητας. Επίσης, λόγω της άριστης αντοχής στη διάβρωση, συγκεκριμένα κράματα χρησιμοποιούνται σε σωλήνες, βαλβίδες και συστήματα μεταφοράς νερού ή βιομηχανικών υγρών. Πολλά από τα κράματα του χαλκού, ακόμη, μπορούν να σκοτώσουν σχεδόν όλα τα βακτήρια πάνω σε μια

επιφάνεια. Γι' αυτό, μπορούν να εφαρμοστούν σε επιφάνειες που πολλοί χρησιμοποιούν καθημερινά, όπως επιφάνειες σε νοσοκομεία, σχολεία, γραφεία και αλλού. Οι εφαρμογές των κραμάτων του χαλκού δεν περιορίζονται στις παραπάνω. Για μια ολοκληρωμένη παρουσίαση των εφαρμογών, παραπέμπουμε τον αναγνώστη στο [8].

## 2.1.2 Σύστημα Cu-Ni και Κράμα C70600

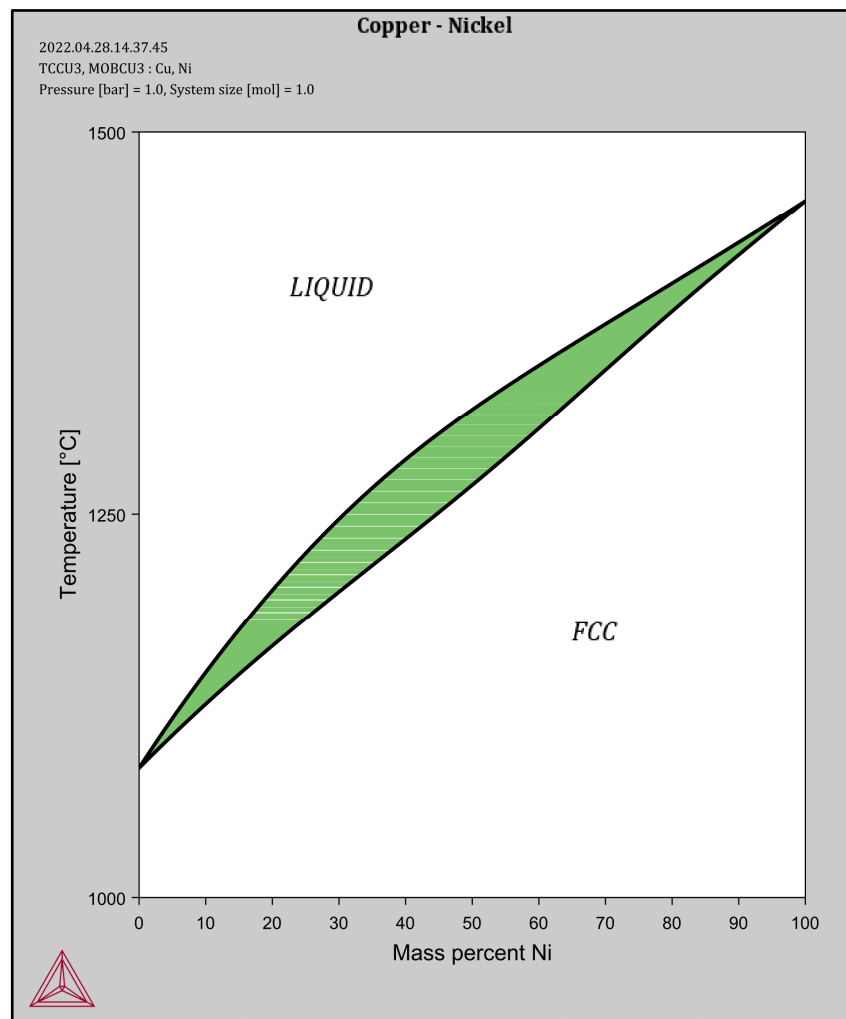
Το νικέλιο και ο χαλκός σχηματίζουν στερεό διάλυμα, έχοντας παρόμοιες ατομικές ακτίνες και παραμέτρους πλέγματος. Συνεπώς, το διάγραμμα φάσεων είναι σχετικά απλό (Σχήμα 2). Όλες οι συστάσεις οδηγούν σε μονοφασική μικροδομή, εκτός αν προστεθούν άλλα συγκεκριμένα κραματικά στοιχεία. Η προσθήκη του νικελίου στο χαλκό, σε ποσοστό από 2 έως 30%, βελτιώνει τη μηχανική αντοχή και την αντοχή στη διάβρωση, ενώ η ολκιμότητα του υλικού μπορεί να διατηρηθεί [8]. Διαφορετικά στοιχεία, όπως ο σίδηρος και το μαγγάνιο, μπορούν να προστεθούν στο χαλκονικέλιο για τη βελτίωση συγκεκριμένων ιδιοτήτων. Τα κράματα με υψηλότερο ποσοστό νικελίου είναι γνωστά για την εξαιρετική αντοχή στη διάβρωση που προκαλείται από θαλασινό νερό και για την αντιμετώπιση του marine biofouling. Τα κράματα με χαμηλότερο ποσοστό νικελίου (2 έως 4%) χρησιμοποιούνται σε ηλεκτρονικά προϊόντα όπου και απαιτούνται η αντοχή, η θερμική σταθερότητα και η κατεργασιμότητα [12]. Επίσης, η μονοφασική μικροδομή οδηγεί σε καλή ολκιμότητα και αντοχή στην κρούση, ακόμα και σε θερμοκρασίες χαμηλότερες των 0 °C [13].

Το 90-10 κράμα χαλκονικελίου (C70600, CW352H) είναι ένα από τα πιο διαδεδομένα κράματα Cu-Ni, κυρίως λόγω των εξαιρετικών αντιδιαβρωτικών ιδιοτήτων. Η ονομαστική χημική σύσταση του κράματος το οποίο πραγματεύεται η εργασία είναι η εξής:



Η προσθήκη του μαγγανίου αποσκοπεί κυρίως στη διευκόλυνση της τήξης και στη σκλήρυνση με στερεό διάλυμα, ενώ αυξάνει και την αντοχή στη διάβρωση. Ωστόσο, ο σίδηρος είναι πολύ πιο αποδοτικός όσον αφορά στην αύξηση των αντιδιαβρωτικών ιδιοτήτων, έως ένα ποσοστό περίπου 2% κατά βάρος. Γι' αυτό και επιλέγεται ως ένα ακόμη κραματικό στοιχείο. Σε ποσοστό νικελίου 30%, ο σίδηρος διαλύεται μέχρι ένα μεγάλο ποσοστό. Σε ποσοστό 10%, όμως, η διαλυτότητα του σιδήρου σε θερμοκρασία δωματίου είναι περίπου 1%. Οπότε, τα κράματα 90-10 με σίδηρο σε ποσοστό μεγαλύτερο ή ίσο του 1.5% πρέπει να υπόκεινται βαφή

από θερμοκρασία ανόπτησης περίπου 900 °C ώστε ο σίδηρος να διατηρηθεί στο διάλυμα. Αν αυτό δε γίνει, η αντοχή στη διάβρωση θα μειωθεί δραστικά [12].

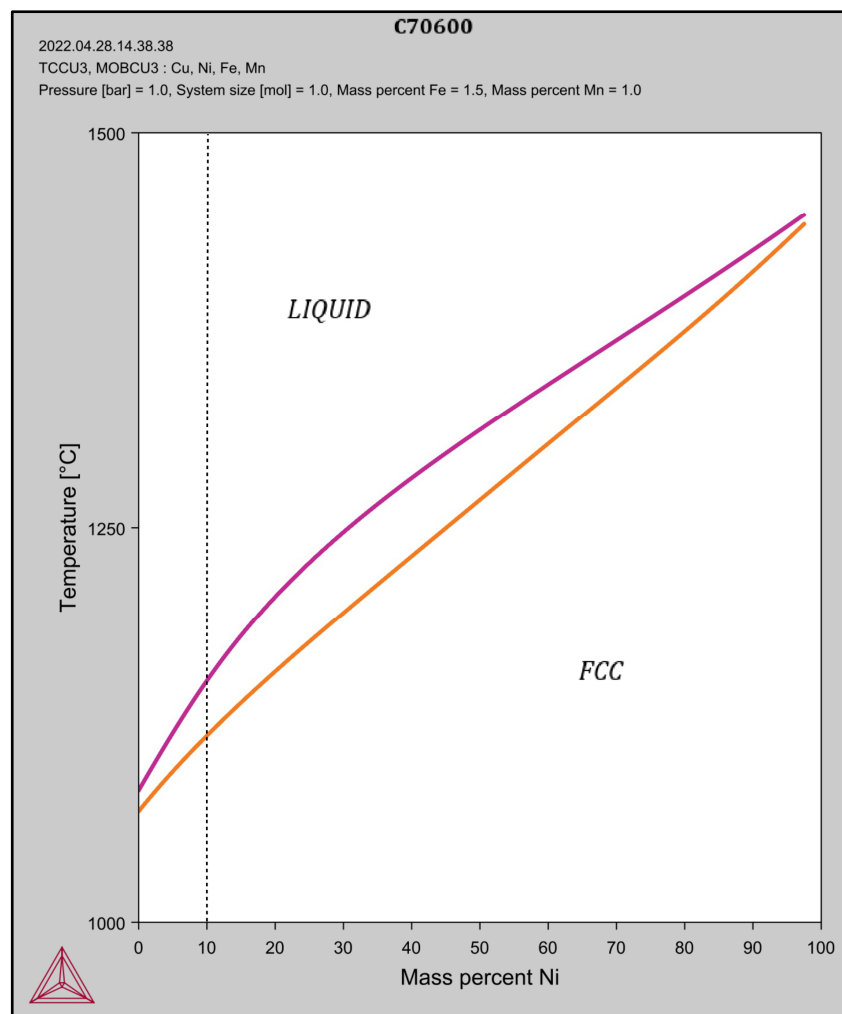


Σχήμα 2: Διμερές διάγραμμα φάσεων του συστήματος Cu-Ni, που παράχθηκε με το λογισμικό Thermo-Calc.

Το κράμα 90-10 έχει καλές μηχανικές ιδιότητες, με την προσθήκη περαιτέρω νικελίου τις βελτιώνει σε όλες το θερμοκρασιακό εύρος. Ωστόσο, η αύξηση της θερμοκρασίας οδηγεί στη δραστική μείωση της μηχανικής αντοχής και της αντοχής σε ερπυσμό. Στον Πίνακα 1 φαίνονται ορισμένες τυπικές φυσικές και μηχανικές ιδιότητες του κράματος. Βέβαια, ανάλογα με τις κατεργασίες στις οποίες υπόκειται, οι ιδιότητες αυτές μπορούν να αλλάξουν έντονα. Το κράμα 90-10 είναι το πιο διαδεδομένο κράμα χαλκού για θαλάσσιες εφαρμογές. Σχετικά με αυτές, χρησιμοποιείται σε διάφορα σημεία στα πλοία, σε θαλάσσιες πλατφόρμες διύλισης, σε δομές αφαλάτωσης και σε σωληνώσεις για θαλάσσιο νερό. Γενικά, χρησιμοποιούνται σε εναλλάκτες θερμότητας, φρένα αυτοκινήτων, δομές χημικών διεργασιών και κλιματιστικά [11], [13].

Πίνακας 1: Συνηθισμένες ιδιότητες του κράματος 90-10 (C70600) [11]

Σημείο τήξης	Πυκνότητα	Ηλεκτρική αγωγιμότητα	Αντοχή εφελκυσμού	Σκληρότητα
1075 °C	8.91 g/cm <sup>3</sup>	10% IACS	290 – 520 N/mm <sup>2</sup>	80-160 HV



Σχήμα 3: Ψευδο-διμερές διάγραμμα φάσεων του κράματος C70600, που παράχθηκε με το λογισμικό Thermo-Calc.

Η εδροκεντρωμένη κυβική δομή του κράματος σε όλο το θερμοκρασιακό εύρος της στερεάς κατάστασης φαίνεται στο διάγραμμα φάσεων του Σχήματος 3, με τη διακεκομμένη γραμμή να αφορά τη χημική σύσταση του υπό μελέτη κράματος. Οι ιδιότητες του κράματος μπορούν να βελτιωθούν με τη ρύθμιση και βελτιστοποίηση της μικροδομής. Μπορούμε να ρυθμίσουμε το ποσοστό της ανακρυστάλλωσης και τη μορφολογία της τελικής εν μέρη ή πλήρως ανακρυσταλλωμένης μικροδομής, ρυθμίζοντας τις παραμέτρους της ανόπτησης, όπως τη θερμοκρασία και τη διάρκειά της.

## 2.2 Μέθοδος Phase-Field

Ο έλεγχος της μικροδομής και της εξέλιξής της κατά τη διάρκεια διάφορων κατεργασιών είναι ένα σημαντικό μέρος του σχεδιασμού νέων υλικών. Αυτό διότι οι ιδιότητες των υλικών εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό από τη μορφολογία, το μέγεθος και τη διάταξη στο χώρο των κόκκων (ή άλλων σχηματισμών) που απαρτίζουν το υλικό στη μεσοκλίμακα. Συνεπώς, έχει αξία η πρόβλεψη της εξέλιξης υπό διάφορες συνθήκες και κατά τη διάρκεια διάφορων κατεργασιών. Η μέθοδος «phase-field» εφαρμόζεται για αυτόν ακριβώς τον σκοπό.

### 2.2.1 Αρχές Μεθόδου Phase-Field

Σύμφωνα με τη μέθοδο «phase-field», η μικροδομή ενός υλικού σε μια συγκεκριμένη στιγμή εκφράζεται στο χώρο από ορισμένες μεταβλητές. Η εξέλιξη της μικροδομής, λοιπόν, ορίζεται από την εξέλιξη των μεταβλητών αυτών που μεταβάλλονται για να ελαχιστοποιήσουν την ελεύθερη ενέργεια του συστήματος με τη συνολική μάζα των συστατικών να διατηρείται [14]. Οι τιμές τους αλλάζουν ελάχιστα στο εσωτερικό των κόκκων και έντονα κατά μήκος και κοντά στις διεπιφάνειες, όπου και έχουν βαθμιαία μεταβολή (diffuse interface approach). Το πάχος των διεπιφανειών στο μοντέλο είναι, βέβαια, αρκετά μεγαλύτερο του πάχους μιας πραγματικής διεπιφάνειας [15].

Οι μεταβλητές διακρίνονται σε δύο τύπους. Αρχικά είναι οι *διατηρούμενες μεταβλητές* (conserved variables)  $c_i$  που αφορούν ποσότητες που διατηρούνται, όπως συγκεντρώσεις και ειδικά βάρη, και περιέχουν πληροφορίες για τον αριθμό και τον τύπο των ατόμων σε ένα συγκεκριμένο σημείο. Η εξέλιξή τους σε χρόνο  $t$  υπολογίζεται από την εξίσωση Cahn-Hilliard:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot M_i \nabla \frac{\delta F}{\delta c_i} \quad (1)$$

όπου  $M_i$  είναι η κινητικότητα που ορίζει την κινητική του  $c_i$ . Οι *μη διατηρούμενες μεταβλητές*  $\phi_j$  αφορούν συγκεκριμένους σχηματισμούς, όπως φάσεις και κόκκους, σε ξεχωριστά σημεία του υλικού. Η εξέλιξή τους στο χρόνο υπολογίζεται από την εξίσωση Allen-Cahn, που εγγυάται ότι η συνάρτηση της συνολικής ελεύθερης ενέργειας του συστήματος θα είναι γνησίως φθίνουσα:

$$\frac{\partial \phi_j}{\partial t} = -L_j \cdot \frac{\delta F}{\delta \phi_j} \quad (2)$$

όπου  $L_j$  είναι η κινητικότητα που ορίζει την κινητική του  $\varphi_j$ . Σε κάθε μοντέλο «phase-field», οι διατηρούμενες και μη διατηρούμενες μεταβλητές χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν και να απεικονίσουν την μικροδομή του συστήματος [15].

Η εξέλιξη της μικροδομής εξαρτάται άμεσα από τις παραγώγους της συνάρτησης ελεύθερης ενέργειας  $F$  με την κινητική της εξέλιξης να ορίζεται από τους όρους κινητικότητας  $M_i$  και  $L_j$ . Οι τύποι αυτών των όρων, της συνάρτησης και των όρων κινητικότητας, αλλάζουν ανάλογα με το εκάστοτε φαινόμενο υπό μελέτη. Το συναρτησιακό της ελεύθερης ενέργειας  $F$  έχει την εξής μορφή:

$$F = \int f(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n, c_1, c_2, \dots, c_n, \nabla\phi_1, \nabla\phi_2, \dots, \nabla\phi_n, \nabla c_1, \nabla c_2, \dots, \nabla c_n, p, T) dV \quad (3)$$

ή, πιο συγκεκριμένα:

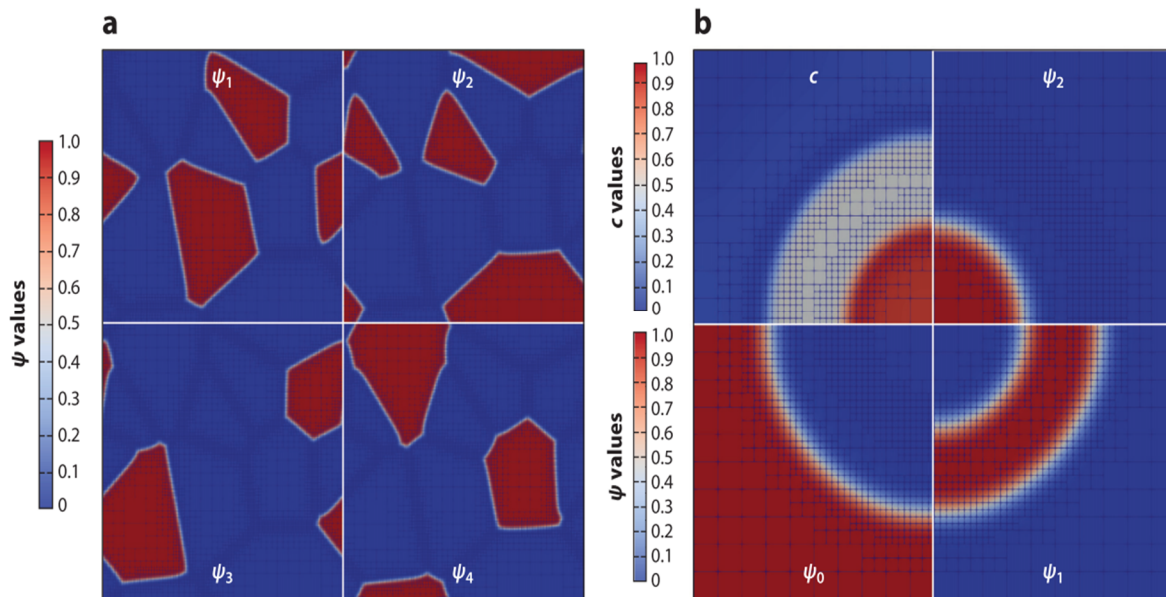
$$F = \int [f_{loc}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\phi}, T) + (f_{grad} \nabla \mathbf{c}, \nabla \{\boldsymbol{\phi}\}) + f_{add}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\phi})] dV \quad (4)$$

όπου  $\mathbf{c}$  και  $\boldsymbol{\phi}$  είναι διανύσματα που περιέχουν όλα τα  $c_i$  και  $\varphi_j$  που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο,  $T$  είναι η θερμοκρασία, η  $f_{loc}$  περιγράφει την πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας στη περιοχή του υλικού υπό μελέτη, η  $f_{grad}$  συμμετέχει ενεργειακά μέσω των παραγώγων των μεταβλητών και η  $f_{add}$  εμπεριέχει λοιπές πηγές ενέργεια [14], [15]. Επίσης, η  $f_{grad}$  έχει αριθμητικό και φυσικό ρόλο. Αριθμητικά, εγγυάται ότι οι μεταβλητές θα έχουν βαθμιαία μεταβολή στις διεπιφάνειες με το να θέτει ενεργητικά εμπόδια στις απότομες μεταβολές κοντά στις διεπιφάνειες. Ο φυσικός της ρόλος είναι η επιρροή στις διεπιφανειακές ενέργειες. Η μορφή του συναρτησιακού της ελεύθερης ενέργειας ποικίλλει από μοντέλο σε μοντέλο.

Μια προσέγγιση για τη μοντελοποίηση της ανάπτυξης των κόκκων είναι η χρήση μη διατηρούμενων μεταβλητών, που ορίζουν τη θέση των διεπιφανειών και, συνεπώς, ορίζουν τους κόκκους (Σχήμα 4α). Στο εσωτερικό ενός κόκκου, μια μεταβλητή  $\psi_a = 1$  και οι υπόλοιπες είναι ίσες με μηδέν. Στα όρια του κόκκου, η μεταβλητή  $\psi_a$  μεταβάλλεται σταδιακά προς το 0 και μια άλλη μεταβλητή μεταβάλλεται σταδιακά από το 0 στο 1. Για την περιγραφή ενός διμερούς κράματος με τρεις πιθανές φάσεις, χρησιμοποιείται μια διατηρούμενη μεταβλητή  $c$ , που αφορά στη συγκέντρωση του συστατικού  $a$  (οπότε και του άλλου αφού  $c_b = 1 - c$ ), και τρεις μη διατηρούμενες μεταβλητές  $\psi_0, \psi_1, \psi_2$  (Σχήμα 4β). Στο εσωτερικό της μιας φάσης, έχουμε  $\psi_0 = 1$  και  $\psi_1 = \psi_2 = 0$  με τη συγκέντρωση  $c$  να τείνει προς την τιμή θερμοδυναμικής ισορροπίας. Οπότε, το κόκκινο χρώμα αντιστοιχίζεται στη φάση που



οπτικοποιείται κάθε φορά, το μπλε αποτυπώνει την απουσία της φάσης και το άσπρο, που μεταβάλλεται σταδιακά προς το μπλε και το κόκκινο, αφορά τις διεπιφάνειες.



Σχήμα 4: Απεικόνιση της μεθόδου «phase-field». (α) Προσομοίωση ανάπτυξης των κόκκων, όπου τέσσερις μη διατηρούμενες μεταβλητές αντιπροσωπεύουν δέκα κόκκους. Οι τέσσερις εικόνες απεικονίζουν την ίδια περιοχή της μικροδομής, αλλά η κάθε μια αφορά και διαφορετική μη διατηρούμενη μεταβλητή. (β) Παράδειγμα διμερούς κράματος με τρεις φάσεις που αντιπροσωπεύονται από μια διατηρούμενη συγκέντρωση και τρεις μη διατηρούμενες μεταβλητές. Κάθε εικόνα αφορά στο ένα τέταρτο της συγκεκριμένης περιοχής της μικροδομής και σε μια ξεχωριστή μεταβλητή. [15]

## 2.2.2 Multi Phase-Field Μοντέλο

Η διάκριση μεταξύ των μοντέλων «phase-field» αφορά, πέρα από το συναρτησιακό της ελεύθερης ενέργειας, στα διαφορετικά σύνολα μεταβλητών που χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν το εκάστοτε πρόβλημα και στους διαφορετικούς παράγοντες που συνεισφέρουν αριθμητικά στη συνολική ελεύθερη ενέργεια [16]. Για την προσομοίωση της ανακρυστάλλωσης, χρησιμοποιείται το λογισμικό MICRESS [17], που βασίζεται στο «multi phase-field» μοντέλο το οποίο συνδέεται με θερμοδυναμικές βάσεις δεδομένων [18], [19]. Σε αυτό, οι διαφορετικές παράμετροι  $\phi_\alpha(\vec{x}, t)$  περιγράφουν την κατανομή των κόκκων στο χώρο της μικροδομής. Η χρονική εξέλιξη των παραμέτρων αυτών προκύπτει από το συναρτησιακό της ελεύθερης ενέργειας  $F$ , που έχει ως εξής:

$$F(\{\phi_\alpha\}, \{c_a\}) = \int_{\Omega} f(\{\phi_\alpha\}, \{c_a\}) \quad (5)$$

Ο όρος  $c_a$  αφορά στις συγκεντρώσεις των φάσεων. Το συναρτησιακό  $f$  μπορεί να διαχωριστεί στην πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας διεπιφανειών  $f^{int}$  και στην πυκνότητα χημικής ελεύθερης ενέργειας  $f^{chem}$ . Και οι δύο είναι συναρτήσεις των μεταβλητών «phase-field»  $\Phi_{\alpha=1,\dots,v}(\vec{x}, t)$  του συστήματος με τον περιορισμό ότι  $\sum_{\alpha} \Phi_{\alpha} = 1$  [20].

$$f = f^{intf}(\{\Phi_{\alpha}\}) + f^{chem}(\{\Phi_{\alpha}\}, \{\bar{c}_{\alpha}\}) \quad (6)$$

$$= \sum_{\alpha=1}^v \sum_{\beta \neq \alpha}^v \frac{4\sigma_{\alpha\beta}}{v\eta} \left( -\frac{\eta^2}{\pi^2} \nabla \Phi_{\alpha} \nabla \Phi_{\beta} + \Phi_{\alpha} \Phi_{\beta} \right) + \sum_{\alpha=1}^v \Phi_{\alpha} f_{\alpha}(\bar{c}_{\alpha})$$

Ο όρος  $\sigma_{\alpha\beta}$  αφορά στην ενέργεια της διεπιφάνειας μεταξύ των  $\alpha$  και  $\beta$ , το  $\eta$  αφορά στο πάχος των ορίων κόκκων που είναι το ίδιο σε όλο τον χώρο, και  $v$  είναι ο αριθμός των φάσεων που συνυπάρχουν σε ένα υποσύνολο του χώρου [18].

Η εξίσωση που περιγράφει την εξέλιξη της  $\phi_{\alpha}(\vec{x}, t)$  έχει ως εξής:

$$\dot{\phi}_{\alpha} = - \sum_{\beta=1}^v \widetilde{M}_{\alpha\beta}(\vec{n}) \left( \frac{\delta F}{\delta \phi_{\alpha}} - \frac{\delta F}{\delta \phi_{\beta}} \right) \quad (7)$$

όπου  $\widetilde{M}_{\alpha\beta}(\vec{n})$  είναι ανισοτροπικές κινητικές σταθερές. Έτσι, προκύπτει η τελική μορφή της γενικής εξίσωσης «phase-field»:

$$\dot{\phi}_{\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha}^v M_{\alpha\beta} \left[ \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{v} \left( \frac{1}{2} (\nabla^2 \phi_{\alpha} - \nabla^2 \phi_{\beta}) + \frac{\pi^2}{2\eta^2} (\phi_{\beta} - \phi_{\alpha}) \right) + \sum_{\alpha \neq \beta \neq \gamma}^n J_{\alpha\beta\gamma} \right. \quad (8)$$

$$\left. + |\nabla \phi| \Delta G_{\alpha\beta} \right]$$

όπου  $J_{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{2} (\sigma_{\beta\gamma} - \sigma_{\alpha\gamma}) \left( \frac{\pi^2}{\eta^2} \phi_{\gamma} + \nabla^2 \phi_{\gamma} \right)$  και  $M_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) = \widetilde{M}_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) \frac{8\eta}{\pi^2}$ . Ο όρος  $\Delta G_{\alpha\beta}$  είναι η θερμοδυναμική ωθούσα δύναμη και αποτελεί συνάρτηση της θερμοκρασίας  $T$  και της συγκέντρωσης  $c$  [18]. Από τις εξισώσεις (2) και (3) έχουμε ότι:

$$\Delta G_{\alpha\beta} = g_{\beta} - g_{\alpha} - \sum_k \widetilde{\mu}^k (c_{\beta}^k - c_{\alpha}^k) \quad (9)$$

Ωστόσο, οι πολλαπλασιαστές Lagrange  $\widetilde{\mu}^k$  δεν μπορούν να προσδιοριστούν χωρίς αόριστες υποθέσεις. Στην εξίσωση (8), οι πυκνότητες ελεύθερης ενέργειας  $f_a$  αντικαταστάθηκαν από τις γραμμομοριακές πυκνότητες ελεύθερης ενέργειας Gibbs  $g_a$ . Αυτή η αντικατάσταση είναι αποδεκτή σε περίπτωση σταθερών γραμμομοριακών όγκων, που είναι και μια συνηθισμένη υπόθεση στα μοντέλα «phase-field». Οι πυκνότητες ελεύθερης ενέργειας Gibbs μπορούν να

βρίσκονται σε θερμοδυναμικές βάσεις δεδομένων Calphad. Η  $\Delta G_{\alpha\beta}$  ενώνει τις εξισώσεις «multi phase-field» με τις εξισώσεις διάχυσης για  $n$  στοιχεία ως εξής:

$$\dot{C}^k = \nabla \sum_{\alpha=1}^v \sum_{l=1}^{n-1} \phi_{\alpha} D_{\alpha}^{kl} \nabla c_{\alpha}^l \quad (10)$$

όπου  $D_{\alpha}^{kl} = D_{\alpha}^{kl,0} \exp\left(\frac{Q_{\alpha}^{kl}}{RT}\right)$ . Η εξίσωση (10) επιλύεται για  $n - 1$  στοιχεία, με τα  $D_{\alpha}^{kl,0}$  και  $Q_{\alpha}^{kl}$  να προσδιορίζονται από βάσεις δεδομένων κινητικής [19].

### 2.2.3 Χαρακτηριστικά, Επίλυση και Εφαρμογές

Η μέθοδος «phase-field» προσφέρει μια ευελιξία ως προς τον ορισμό των μεγεθών που αναλύσαμε στα προηγούμενα υποκεφάλαια και, ειδικά, ως προς το συναρτησιακό της ελεύθερης ενέργειας. Αυτό αποτελεί ένα από τα βασικά πλεονεκτήματα της μεθόδου, αφού επιτρέπει τη μελέτη μιας μεγάλης ποικιλίας φαινομένων διαφορετικής φύσεως. Ένα άλλο σημαντικό πλεονέκτημα της μεθόδου είναι το ότι μπορεί να περιγράψει με έναν υπολογιστικά συνετό τρόπο συστήματα μεγάλων διαστάσεων στη μεσοκλίμακα, σε αντίθεση με τις μεθόδους ατομικής κλίμακα [21]. Επίσης, δεν προσπαθεί να εντοπίζει συνεχώς τις θέσεις των διεπιφανειών, αλλά προσεγγίζει την εξέλιξη της μικροδομής αριθμητικά μέσω των προαναφερθέντων μεταβλητών. Η μέθοδος «phase-field», ακόμη, συνδέεται άμεσα με τις διάφορες φυσικές ιδιότητες ενδιαφέροντος του υλικού υπό μελέτη. Αυτές μπορεί να έχουν προκύψει από πειράματα ή από υπολογισμούς και εκφράζονται μέσα από τις μεταβλητές του συναρτησιακού ελεύθερης ενέργειας. Οι μεταβολές, όμως, των μεταβλητών καθορίζονται από την επίλυση ενός συστήματος μερικών διαφορικών εξισώσεων (μία εξίσωση για κάθε μεταβλητή). Επίσης, το πλέγμα χρειάζεται να είναι αρκετά πυκνό κοντά και πάνω στις διεπιφάνειες [14], [15]. Έτσι προκύπτει και το σημαντικό υπολογιστικό κόστος της μεθόδου.

Η επίλυση του συστήματος των μερικών διαφορικών εξισώσεων απαιτεί μια αριθμητική προσέγγιση. Οι εξισώσεις «phase-field» είναι αρκετά σύνθετες και καθιστούν, έτσι, την αναλυτική επίλυση μη εφικτή. Αρχικά, τα περισσότερα μοντέλα «phase-field» δε χαρακτηρίζονταν από συγκεκριμένες διαστάσεις και μελετούσαν την εξέλιξη της μικροδομής του υλικού ποιοτικά. Ύστερα, πραγματοποιήθηκε η μετάβαση προς τα ποσοτικά μοντέλα. Στην αριθμητική, λοιπόν, επίλυση του συνεχούς συστήματος, αυτό μεταφέρεται σε ένα πλέγμα διακριτών σημείων. Οι εξισώσεις «phase-field» επίσης διακριτοποιούνται, έχοντας ως αποτέλεσμα ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων [14]. Τα μοντέλα έχουν διακριτοποιηθεί στο

χώρο με την εφαρμογή μεθόδων όπως οι μέθοδοι πεπερασμένων διαφορών, πεπερασμένων στοιχείων, πεπερασμένων όγκων και η μέθοδος «spectral». Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών επιλύει τις μερικές διαφορικές εξισώσεις σε συγκεκριμένα σημεία του πλέγματος παράλληλα με την εφαρμογή αριθμητικών μεθόδων προσέγγισης των παραγόντων. Αναφορικά με το λογισμικό MICRESS, η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών είναι η μέθοδος που προτιμήθηκε για τη βελτίωση των αποτελεσμάτων [22]. Η εφαρμογή της είναι απλή, αλλά υπάρχουν περιορισμοί σχετικά με τις οριακές τιμές που μπορούν να χρησιμοποιηθούν. Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων διακριτοποιεί το χώρο σε στοιχεία και υπολογίζει τιμές σε συγκεκριμένους κόμβους, με την επίλυση να έχει συνεχή χαρακτήρα στον υπόλοιπο χώρο. Αυτή μπορεί να μοντελοποιήσει οποιοδήποτε σχηματισμό αλλά μπορεί να είναι υπολογιστικά ακριβή. Η μέθοδος πεπερασμένων όγκων διακριτοποιεί το χώρο σε μικρούς όγκους με το να ορίζει παράλληλα τις ροές στις επιφάνειες των όγκων αυτών. Μπορεί να μοντελοποιήσει και αυτή οποιοδήποτε σχηματισμό, αλλά συνήθως μπορεί να εφαρμοστεί σε αρκετά περιορισμένες οριακές συνθήκες. Η μέθοδος «spectral» είναι υπολογιστικά συνετή, αλλά υπάρχουν σημαντικοί περιορισμοί στο μέγεθος και σχήμα των σχηματισμών και στις οριακές συνθήκες. Τα μοντέλα «phase-field» ενσωματώνουν τον χρόνο και άμεσα και έμμεσα. Και οι δύο μέθοδοι αφορούν στην αριθμητική επίλυση με βήματα χρόνου. Διαφέρουν στα σημεία, όμως, του χρόνου όπου υπολογίζεται η παράγωγος του χρόνου [15].

Η μέθοδος «phase-field» έχει βασικό ρόλο στον υπολογιστικό σχεδιασμό υλικών. Αναπτύχθηκε, αρχικά, για την προσομοίωση της στερεοποίησης σε δύο ή τρεις διαστάσεις με σχετική επιτυχία [23]. Έπειτα, επεκτάθηκε σε μετασχηματισμούς στερεάς κατάστασης. Έχει εφαρμοστεί για τη μοντελοποίηση της κατακρήμνισης, του μαρτενσιτικού μετασχηματισμού, της ανάπτυξης των κόκκων και άλλων [16]. Εκτός των παραπάνω, έχει εφαρμοστεί για τη προσομοίωση της ψαθυρής θραύσης [24], ορισμένων φαινομένων σχετικών με τα υλικά που εφαρμόζονται σε πυρηνικούς αντιδραστήρες (όπως η ζημιά που επιδέχονται λόγω της ακτινοβολίας) [25] και ορισμένων φαινομένων σχετικών με τις μπαταρίες ιόντων λιθίου (όπως η ανάπτυξη δενδριτών και ο διαχωρισμός φάσεων) [21], [26]. Αντιλαμβανόμαστε, λοιπόν, την έντονη ευελιξία της μεθόδου και τη δυνατότητα εφαρμογής της για τη μοντελοποίηση φαινομένων διαφορετικής φύσεως στη μεσοκλίμακα. Αναμένουμε την εφαρμογή της σε ακόμη περισσότερα φαινόμενα, που αφορούν στην ανακάλυψη και τον σχεδιασμό των υλικών, αλλά και την περαιτέρω εδραίωση της στη μοντελοποίηση διεργασιών όπως η τρισδιάστατη εκτύπωση.

## 2.3 Στατιστική Περιγραφή Μικροδομών

Η μικροδομή ενός υλικού εμπεριέχει σημαντικές πληροφορίες που μπορούν να οδηγήσουν στη δημιουργία αξιόπιστων συνδέσεων μεταξύ των κατεργασιών και των ιδιοτήτων ενδιαφέροντος. Μικρές μεταβολές στη μέση χημική σύσταση ενός υλικού οδηγούν συχνά σε μεγάλες μεταβολές στις ιδιότητές του. Ωστόσο, έχουμε διαπιστώσει ότι μεγάλες μεταβολές στις ιδιότητες μπορούν να συμβούν ακόμη και όταν η χημική σύσταση του υλικού παραμένει ίδια. Οι μεταβολές αυτές είναι αποτέλεσμα των θερμομηχανικών κατεργασιών που επηρεάζουν τη μικροδομή του υλικού σε διαφορετικές κλίμακες (από την ατομική στην μακροκλίμακα) [27]. Θεωρητικά, ο σχεδιασμός νέων υλικών πραγματοποιείται αντιστρέφοντας τις συνδέσεις κατεργασίας-μικροδομής-ιδιοτήτων. Οι ιδιότητες-στόχοι συνδέονται με την αντίστοιχη κατεργασία, με τη γνώση της μικροδομής να μεσολαβεί. Πιο αναλυτικά, έχοντας προσδιορίσει τις ιδιότητες που σκοπεύουμε να βελτιστοποιήσουμε, αναζητούμε τις τιμές στους χώρους κατεργασίας-μικροδομής και μικροδομής-ιδιοτήτων που μπορούν να οδηγήσουν σε αυτή τη βελτιστοποίηση [1], [4]. Όμως, πρακτικά, οι υπολογιστικές κυρίως προσπάθειες τείνουν να αγνοούν τη μικροδομή και τη βελτιστοποίησή της. Πρόσφατα, ωστόσο, αποδείχθηκε ότι η χρήση χαρακτηριστικών της μικροδομής επιταχύνει την υπολογιστικό σχεδιασμό των υλικών και βελτιώνει το αποτέλεσμα των προσπαθειών βελτιστοποίησης των ιδιοτήτων [5]. Η μηχανική και βαθιά μάθηση έχουν αποδείξει ότι έχουν τεράστιες δυνατότητες στην ανακάλυψη υλικών [28]–[30], με τις εφαρμογές τους όλο και να διευρύνονται. Πολλές φορές, όμως, αποδεικνύονται κατώτερες των προσδοκιών, κυρίως διότι δεν εφαρμόζονται συνεργατικά με την προϋπάρχουσα γνώση στο αντικείμενο. Η γνώση της μικροδομής μπορεί να αντιπροσωπεύσει τη γνώση αυτή και να βελτιώσει τα αποτελέσματα των προσπαθειών βελτιστοποίησης μέσω των υποκατάστατων μοντέλων. Αντιλαμβανόμαστε, λοιπόν, ότι πρέπει να αξιοποιήσουμε την μικροδομή στις διάφορες κλίμακες ενδιαφέροντος.

Η μικροδομή, όμως, του υλικού αποτελείται από ένα τεράστιο πλήθος παραμέτρων που μπορούν να επηρεάσουν τις ιδιότητές του στη μακροκλίμακα. Οι μικροδομές των περισσότερων κραμάτων στη μεσοκλίμακα αποτελούνται από πολλά διαφορετικά κλάσματα όγκου διαφορετικών φάσεων με διαφορετικές μορφολογίες και κατανομές στο χώρο. Διαφορετικής φύσεως φαινόμενα επηρεάζουν με διαφορετικό τρόπο τις ιδιότητες του υλικού στις υπόλοιπες κλίμακες. Σε χαμηλότερες κλίμακες, για παράδειγμα, παρατηρούμε μια μεγάλη ποικιλία από ατέλειες. Αν αντιμετωπίσουμε τις παραμέτρους που επηρεάζουν τις ιδιότητες ως διαστάσεις, τότε το πρόβλημα της περιγραφής της δομής του υλικού είναι ένα πρόβλημα

ακραία πολλών διαστάσεων [4]. Κρίνεται, έτσι, αναγκαία η ανάπτυξη και η εφαρμογή μιας αξιόπιστης μεθοδολογίας για την ιεραρχική (σε πολλές κλίμακες) περιγραφή της μικροδομής.

Μια πρόσφατα αναπτυγμένη τέτοια μεθοδολογία είναι αυτή των «Materials Knowledge Systems» (MKS). Η κεντρική ιδέα πίσω από αυτή είναι η ποσοτικοποίηση της μικροδομής μέσω της μαθηματικής χαρτογράφησης ενός «local state» (ή σχηματισμού) και της *συνάρτησης της μικροδομής*. Σε προέκταση αυτών, η μεθοδολογία εφαρμόζει τα «n-point spatial correlations» (ή «n-point statistics») και την «Principal Component Analysis» (PCA) για την απόκτηση μεγεθών που εμπεριέχουν πληροφορίες για σημαντικά χαρακτηριστικά της μικροδομής [27]. Με την ολοκλήρωσή τους, αυτοί οι υπολογισμοί μπορούν να εφαρμοστούν για την δημιουργία υποκατάστατων μοντέλων. Αυτά μπορεί να αφορούν στη δημιουργία ενιαίου συστήματος *ομογενοποίησης* των διάφορων κλιμάκων του υλικού (μεταφορά πληροφοριών από τις μικρότερες κλίμακες στις μεγαλύτερες) και της *τοπικοποίησης* (μεταφορά πληροφοριών από τις μεγαλύτερες στις μικρότερες) [6]. Η δυνατότητα εφαρμογής μεθοδολογίας MKS έχει αποδειχθεί σε πολλά είδη υλικών και σε πολλές κλίμακες μεγέθους (από την ατομική στην μεσοκλίμακα και την μικροκλίμακα) [31].

Στο υποκεφάλαιο αυτό, θα αναλύσουμε το θεωρητικό υπόβαθρο πίσω από τη μεθοδολογία MKS. Παρουσιάζουμε, αρχικά, έναν εκτενή ορισμό για τις έννοιες των «local states» και της *συνάρτησης μικροδομής*, συνεχίζουμε με τη μαθηματική περιγραφή των «n-point spatial correlations», και ειδικά των «two-point statistics», και τελειώνουμε με μια συνοπτική ανάλυση της PCA, που εφαρμόζεται για τη μείωση των διαστάσεων του προβλήματος της ποσοτικοποίησης της μικροδομής. Έπειτα από την ανάγνωση αυτού του υποκεφαλαίου, ο αναγνώστης θα αντιλαμβάνεται τόσο από μαθηματική όσο και από πρακτική σκοπιά τις παραπάνω έννοιες.

### **2.3.1 Local States και Συνάρτηση Μικροδομής**

Ενώ υπάρχει μια συγκεκριμένη τάξη σε κάθε κλίμακα ενός μεταλλικού υλικού, η δομή συνήθως διαφέρει από δείγμα σε δείγμα και από χωρίο σε χωρίο του ίδιου δείγματος. Μια μικρογραφία, έτσι, πρέπει να αντιμετωπίζεται ως *μια* μικροδομή και όχι *η* μικροδομή. Προς αυτή την κατεύθυνση, ως στοιχειώδης μικροδομή αντιμετωπίζεται ένα «Representative Volume Element» (RVE) αντιπροσωπευτικό της πραγματικής μικροδομής. Αυτό μπορεί να οριστεί ως ο ελάχιστος όγκος υλικού που μπορεί να αντιπροσωπεύσει τις ιδιότητες και τη συμπεριφορά του συνολικού όγκου του υλικού. Μπορεί, επίσης, να οριστεί σε πολλές

διαφορετικές κλίμακες μεγέθους χρησιμοποιώντας κατάλληλες μεθόδους. Η τυχαία αυτή διασπορά (variance) της μικροδομής έχει κεντρικό ρόλο στην επιστήμη και μηχανική των υλικών [32]. Ωστόσο, η εφαρμογή της στατιστικής για την ανάπτυξη μεγεθών που μπορούν να αντιπροσωπεύσουν τη μικροδομή λαμβάνοντας υπόψη την τυχαία διασπορά των υλικών έχει μόλις ξεκινήσει.

Οι ορισμοί των «local states» και της συνάρτησης μικροδομής αποτελούν τη βάση της ποσοτικοποίησης της στοχαστικής μικροδομής κατά τη μεθοδολογία MKS. Κάθε σχηματισμός που κατέχει μια ξεχωριστή δομή, και συνεπώς ιδιότητες, μπορεί να αντιμετωπιστεί ως ένα «local state». Επειδή σε διαφορετικές κλίμακες υπάρχουν διαφορετικές δομές ενδιαφέροντος, το τι ορίζουμε ως «local state» εξαρτάται αρχικά από την κλίμακα ενδιαφέροντος [33]. Στην πλειοψηφία των περιπτώσεων, ένα «local state» εμπεριέχει έμμεσα πληροφορίες για άλλα μεγέθη, που αφορούν συνήθως στις χαμηλότερες κλίμακες. Ορίζουμε, λοιπόν, ως  $h$  το «local state» που βρίσκεται στη θέση  $x$  μέσα σε ένα ορισμένο RVE της μικροδομής. Η θέση  $x$  αντιστοιχίζεται με έναν ορισμένο όγκο, καθώς, αν αποτελούσε απλά ένα σημείο στο χώρο, δε θα μπορούσαμε να συνδέσουμε με αυτό τις ιδιότητες [6]. Το  $h$  είναι ένα στοιχείο του χώρου των «local states»  $H$ , όπου εμπεριέχονται όλα τα ξεχωριστά «local states» που μπορούν θεωρητικά να χρησιμοποιηθούν. Για παράδειγμα, στη μεσοκλίμακα, το «local state» ενός σημείου του υλικού θα μπορούσε να εμπεριέχει μια ξεχωριστή φάση  $\alpha$ , τη χημική σύσταση της φάσης  $c$ , τον κρυσταλλογραφικό προσανατολισμό  $g$  ή την πυκνότητα διαταραχών  $p$ . Το «local state», έτσι, θα μπορούσε να αποτελεί ένα διάνυσμα  $\mathbf{h}(x) = (\alpha, c, g, p)$ . Η κατανομή  $f_h(h)$  υπολογίζεται ως η πυκνότητα όγκου των σημείων του υλικού που περιγράφονται από το «local state»  $h$  στο χώρο  $H$ . Έτσι:

$$f_h(h)dh = \frac{V_{h \pm dh/2}}{V} \quad (11)$$

όπου  $\frac{V_{h \pm dh/2}}{V}$  είναι το κλάσμα όγκου της μικροδομής που περιγράφεται από τα «local states» που βρίσκονται σε απόσταση  $dh$  από το  $h$  [6], [32]. Με αυτό τον τρόπο, ορίζουμε το «local state» σε ένα ομοιόμορφα διακριτοποιημένο δισδιάστατο ή τρισδιάστατο πλέγμα και περιγράφουμε τη μικροδομή σε κάθε κλίμακα ενδιαφέροντος. Αυτή η περιγραφή συμφωνεί με τις τεχνικές χαρακτηρισμού υλικών, οι οποίες έχουν και αυτές μια χωρική ανάλυση που καθορίζεται από τους περιορισμούς που θέτει η κάθε τεχνική.

Η κατανομή ενός «local state» είναι το πιο διαδεδομένο στατιστικό μέγεθος για την περιγραφή της μικροδομής. Συνήθη μεγέθη, όπως οι κατανομές του μεγέθους κόκκου και οι

πυκνότητες διαταραχών, μπορούν να περιγραφούν μαθηματικά ως κατανομές του «local state». Μια από τις πιο συνήθεις κατανομές αυτές στα μεταλλικά υλικά είναι η «orientation distribution function» (ODF), που περιγράφει τον κρυσταλλογραφικό ιστό [4]. Παρατηρούμε, επίσης, ότι το  $h$  στην πλειοψηφία των προηγμένων υλικών απαιτεί μια πολυπαραμετρική περιγραφή. Οι βασικές παράμετροι εξαρτώνται και αυτές από αρκετές άλλες παραμέτρους. Στον παραπάνω ορισμό  $\mathbf{h}(x) = (\mathbf{a}, \mathbf{c}, \mathbf{g}, \mathbf{p})$ , για παράδειγμα, ο κρυσταλλογραφικός προσανατολισμός  $\mathbf{g}$  μπορεί να περιγραφεί με τη σειρά του από τις γωνίες *Euler*. Εκτός από τον ορισμό αυτό, μπορούμε να ορίσουμε ευθέως το «local state» ως τις ιδιότητες ενδιαφέροντος στην εκάστοτε κλίμακα [6]. Αυτός ο ορισμός ίσως οδηγήσει στην πιο άμεση δημιουργία συνδέσεων μεταξύ κατεργασιών, μικροδομών, και ιδιοτήτων για εύρη με διαφορετικές συστάσεις και φάσεις ισορροπίας.

Συμπεραίνουμε ότι η ποσοτικοποίηση της μικροδομής μέσω του «local state»  $h$  μπορεί να εφαρμοστεί σε μια μεγάλη ποικιλία από συστήματα και να συμπεριλάβει τις ιδιότητες ενδιαφέροντος. Θεωρητικά, η περιγραφή μιας μικροδομής μέσω του ορισμού ενός «local state» σε κάθε σημείο  $x$  του υλικού είναι δυνατή. Ωστόσο, τα «local states» ενδιαφέροντος βρίσκονται σε αρκετές διαφορετικές κλίμακες και, αν λάβουμε υπόψη μας και την εξέλιξη της μικροδομής, τότε βρίσκονται και σε διαφορετικές χρονικές κλίμακες. Πρακτικά, λοιπόν, το αποτέλεσμα των αντίστοιχων υπολογισμών είναι πολυδιάστατο, και δε μπορεί εύκολα να χρησιμοποιηθεί από τις υπάρχουσες μεθόδους μοντελοποίησης [4], [32]. Για να ποσοτικοποιηθεί στατιστικά η μικροδομή σε αυτές τις κλίμακες, δημιουργήθηκε η έννοια της συνάρτησης της μικροδομής  $m(x, h)$  [34]. Αυτή είναι μια συνεχώς μεταβαλλόμενη συνάρτηση που μπορεί να αντιπροσωπεύσει τη μικροδομή σε μια περιοχή  $\Omega$  στους υπολογισμούς μας.

Η  $m(h, x)$  είναι μια συνεχώς μεταβαλλόμενη συνάρτηση που μπορεί να αντιπροσωπεύσει τη μικροδομή σε μια περιοχή  $\Omega$  στους υπολογισμούς μας. Αυτή βρίσκεται στον καρτεσιανό χώρο  $f: \Omega \times H \rightarrow \mathfrak{R}$  και ο ορισμός της ξεκινά με τη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (PDF) στο χώρο  $H$ :

$$m(h, x) = p(a \leq h(x) \leq b) \quad (12)$$

που υπολογίζεται σε κάθε σημείο του RVE. Υπολογίζεται ουσιαστικά η πυκνότητα πιθανότητας του ενδεχομένου όπου το «local state»  $h$  βρίσκεται στη θέση  $x$ . Λόγω των ιδιοτήτων της PDF, υπάρχει ο εξής περιορισμός [6], [27]:



$$\int_H m(h, \mathbf{x}) dh = 1 \quad (13)$$

Εναλλακτικά, βέβαια, μπορεί να οριστεί ως το κλάσμα όγκου του υλικού στη θέση  $\mathbf{x}$  που συνδέεται με το ορισμένο «local state» στην περιοχή όγκου  $V$  με κέντρο το σημείο  $\mathbf{x}$ . Δηλαδή:

$$m(h, \mathbf{x}) dh = \frac{dV}{V} \Big|_{\mathbf{x}, h}. \quad [4]$$

Επειδή η μικροδομή σχεδόν πάντα απεικονίζεται ψηφιακά σε ένα διακριτοποιημένο πλέγμα, η διακριτοποιημένη μορφή της  $m(h, \mathbf{x})$  είναι η πιο χρήσιμη μορφή της. Αυτή η μορφή της ορίζεται από τον πίνακα  $m(h, \mathbf{s})$ , όπου το  $\mathbf{s} \in \mathbf{S}$  είναι ένα πολυδιάστατο σύνολο ακεραίων που εμπεριέχει τα «voxels» στον διακριτοποιημένο όγκο του υλικού. Σε τρισδιάστατες μικροδομές, το σύνολο αυτό είναι της μορφής  $\mathbf{s} = s_1, s_2, s_3$ . Στην περίπτωση όπου υπάρχει ένας πεπερασμένος αριθμός «local states», η  $m(h, \mathbf{s})$  απλά περιγράφει το κλάσμα όγκου του «local state»  $h$  σε ένα «voxel» που περιγράφεται από το  $\mathbf{s}$ . Η διακριτοποιημένη συνάρτηση  $m(h, \mathbf{s})$  έχει τις εξής ιδιότητες:

$$0 \leq m(h, \mathbf{s}) \leq 1, \quad \sum_{h=1}^H m(h, \mathbf{s}) = 1, \quad \sum_{\mathbf{s}} m(h, \mathbf{s}) = V(h)|\mathbf{S}| \quad (14)$$

όπου το  $V(h)$  είναι το κλάσμα όγκου του  $h$  σε όλη τη δομή και το  $|\mathbf{S}|$  είναι το πλήθος των «voxels» [6]. Η  $m(h, \mathbf{s})$  προσεγγίζει τη συνεχή συνάρτησης μικροδομής μέσω μιας αναπαράστασης *Fourier* [4], [27].

Η ουσία της συνάρτησης μικροδομής είναι στην ικανότητά της να περιγράφει ένα σύνολο από σχηματισμούς ή χαρακτηριστικά του υλικού σε πολλές κλίμακες ταυτόχρονα. Αν, επίσης, γίνουν διαθέσιμες περισσότερες πληροφορίες για τα «local states», μπορούν να εισαχθούν με σχετική ευκολία στη συνάρτηση. Τότε, αυτή θα δέχεται διαφορετικές εισόδους αλλά η μορφή της εξόδου παραμένει μια τιμή πιθανότητας [35]. Ωστόσο, η έλλειψη μιας σταθερής αρχής των αξόνων για τον ορισμό του  $\mathbf{s}$  στις μικρογραφίες που λαμβάνονται από διαφορετικές σκοπιές στα ίδια δείγματα δυσκολεύει την εφαρμογή της  $m(h, \mathbf{x})$ . Σε τέτοιες περιπτώσεις, αυτή δέχεται διαφορετικές τιμές ανάλογα με την οπτική της λήψης. Όμως, η μικροδομή παραμένει ίδια. Οι μέχρι τώρα υπολογισμοί εμπεριέχουν πληροφορίες μόνο για την αναλογία των «local states», και όχι για την κατανομή τους στο χώρο [33]. Η τοπολογία αυτή της μικροδομής μπορεί να περιγραφεί με υπολογιστικά συνετό τρόπο μέσω των «n-point spatial correlations» (ή «n-point statistics»), τα οποία λύνουν και το πρόβλημα της μη ύπαρξης σταθερής σκοπιάς.

## 2.3.2 n-Point Statistics

Μια στατιστική μεθοδολογία για την ποσοτικοποίηση της μικροδομής είναι αυτή των «n-point statistics». Τα «one-point statistics», η πιο απλή μορφή των «n-point statistics», είναι κατανομές πιθανοτήτων στο χώρο των «local states»  $H$  μέσω των οποίων υπολογίζεται η πυκνότητα πιθανότητας του ενδεχομένου όπου ένα συγκεκριμένο «local state» βρίσκεται σε ένα τυχαίο σημείο της μικροδομής [4]. Ορίζουμε τα «one-point statistics» μέσω της συνάρτησης μικροδομής. Έστω  $^{(k)}m_s^n$  η τιμή της συνάρτησης στο  $k$ -οστό στοιχείο του συνόλου μικρογραφιών  $\Sigma = 1, 2, \dots, K$ . Ο συμβολισμός  $m_s^n$  αφορά απλά το κλάσμα όγκου του «local state»  $n$  που ανήκει στο χωρίο  $s$ . Τότε μπορούμε να υπολογίσουμε ορισμένα στατιστικά μεγέθη όπως η μέση τιμή  $f_s^n = \frac{1}{J} \sum_{k=1}^K m_s^n$ . Προκύπτει, έτσι, η αναμενόμενη τιμή για το κλάσμα όγκου στο σύνολο των μικροδομών. Αν η μικροδομή είναι *στατιστικά ομοιογενής*, η  $f_s^n$  είναι ανεξάρτητη του  $s$  και μπορεί να γραφτεί ως  $f^n$ . Υποθέτοντας ότι πράγματι είναι ομοιογενής, έχουμε ότι:

$$f^n = \frac{1}{S} \frac{1}{J} \sum_s \sum_{k=0}^K {}^{(k)}m_s^n \quad (15)$$

όπου  $S$  το πλήθος των χωρίων.

Ο όρος  $f^n$  στην εξίσωση είναι η «one-point spatial correlation», που εμπεριέχει πληροφορίες για το ποιο «local state» μπορεί να βρίσκεται σε ένα συγκεκριμένο χωρίο της μικροδομής, αλλά όχι για την τοπολογία των πιθανών «local states» [27], [33].

Αν επεκτείνουμε την παραπάνω προσέγγιση για τον υπολογισμό συσχετίσεων δύο τυχαίων σημείων της μικροδομής, μπορούμε να ορίσουμε και τα «two-point statistics». Έστω ότι τα δύο αυτά τυχαία σημεία έχουν απόσταση που ορίζεται από το διάνυσμα  $\mathbf{r}$ , τα συστατικά του οποίου μπορούν να δεχθούν μόνο ακέραιες τιμές. Η διαφορά μεταξύ του  $s$  και του  $\mathbf{r}$  είναι ότι το  $s$  κατηγοριοποιεί τα χωρία της διακριτοποιημένης μικροδομής ενώ το  $\mathbf{r}$  κατηγοριοποιεί τις διαφορετικούς συνδυασμούς μεταξύ των χωρίων. Αν υποθέσουμε ξανά ότι η μικροδομή είναι στατιστικά ομοιογενής, τότε η «two-point spatial correlation» μπορεί να οριστεί ως εξής:

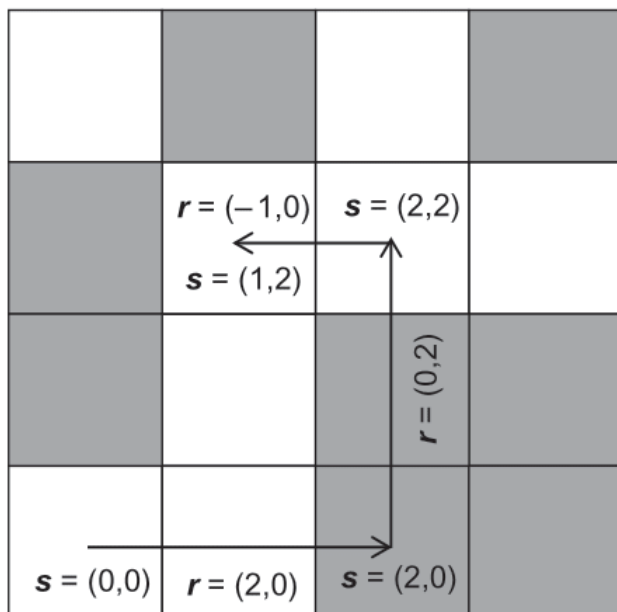
$$f^n = \frac{1}{S_r} \frac{1}{K} \sum_s \sum_{k=1}^K {}^{(k)}m_s^n {}^{(k)}m_{s+\mathbf{r}}^p \quad (16)$$

όπου το  $S_r$  είναι το πλήθος των χωρίων που επιτρέπουν την τοποθέτηση και του  $s$  και του  $s+\mathbf{r}$ . Δηλαδή, αν η μικροδομή είναι περιοδική, τότε έχουμε ότι  $S_r = S$ . Αν όχι, ισχύει ότι  $S_r \leq S$ .

Μια απλή ερμηνεία της εξίσωσης είναι ότι το μέγεθος  $S_r * K$  είναι το πλήθος των δοκιμών που γίνονται για να ελέγξουν ποια «local states» βρίσκονται στα χωρία  $s$  και  $s+r$ , και το άθροισμα είναι το πλήθος των πετυχημένων δοκιμών όπου τα «local states»  $n$  και  $p$  βρίσκονται στα δύο χωρία αντίστοιχα [27].

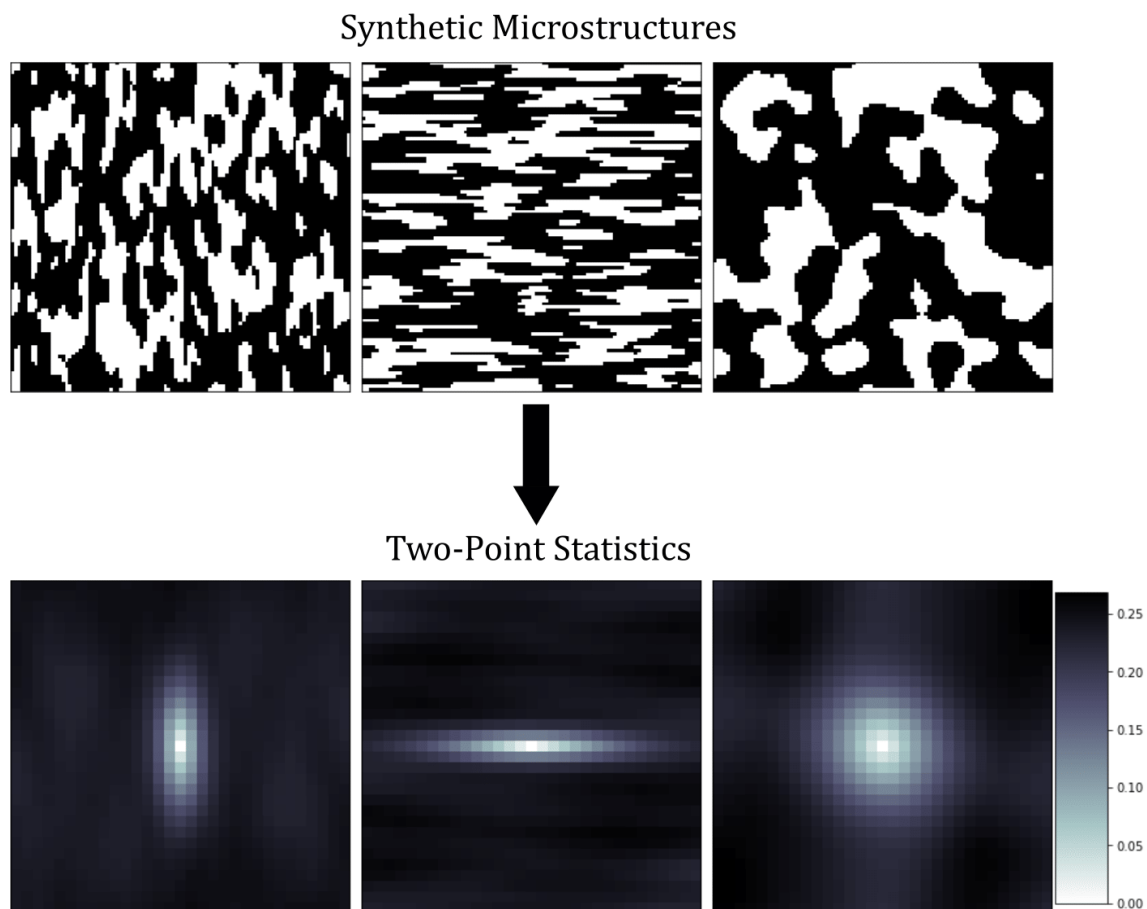
Τα «two-point statistics» είναι οι χαμηλότερης τάξης συσχετίσεις που εμπεριέχουν πληροφορίες για την τοπολογία των διάφορων «local states». Οι πληροφορίες, επίσης, που εμπεριέχονται στις χαμηλότερων τάξεων συσχετίσεις μεταφέρονται σε αυτές των υψηλότερων τάξεων. Το γεγονός αυτό φαίνεται στην περίπτωση όπου  $r = 0$ . Τότε, από την δεύτερη εξίσωση, μπορεί να προκύψει η πρώτη [27]. Παρόλο που μπορούν να οριστούν μεγαλύτερης τάξης συσχετίσεις, όπως «three-point spatial correlations», τα «two-point statistics» εμπεριέχουν αρκετές πληροφορίες για τη μικροδομή, εφόσον λαμβάνονται υπόψη όλοι οι συνδυασμοί των  $n$  και  $p$  σε ένα μεγάλο εύρος τιμών για τα συστατικά του διανύσματος  $r$ . Τα «two-point statistics» έχουν εφαρμοστεί επιτυχώς για να ποσοτικοποιήσουν αποδοτικά τη μικροδομή πολλών κλάσεων υλικών και σε πολλές κλίμακες μεγέθους [6], [31]. Αυτό συνέβη κυρίως διότι προσφέρουν μια στατιστική *περίληψη* της περιοχής ενός «voxel» που μπορεί να αξιοποιηθεί εύκολα από άλλες μεθόδους μοντελοποίησης και μηχανικής μάθησης.

Για την κατανόηση του πως τα «two-point statistics» αποτυπώνουν ορισμένα χαρακτηριστικά της μικροδομής, θα σχολιάσουμε το Σχήμα 6 όπου διακρίνονται τρεις συνθετικές μικροδομές με τα αντίστοιχα «two-point statistics» τους. Οι μικροδομές αυτές



Σχήμα 5: Απεικόνιση των  $s$  και  $r$  στον διακριτοποιημένο διανυσματικό χώρο. [27]

απαρτίζονται από κόκκους δύο φάσεων (άσπρη και μαύρη) με την κάθε μία να χαρακτηρίζεται από διαφορετικές μέσες μορφολογίες κόκκων και κατανομές των κόκκων στο χώρο. Παράχθηκαν με σχεδόν ντετερμινιστικό τρόπο μέσω της βιβλιοθήκης PyMKS [36], με όλες να έχουν τα ίδια κλάσματα όγκου των δύο φάσεων. Οι κόκκοι της άσπρης φάσης στις δύο πρώτες από τα αριστερά μικρογραφίες έχουν μια ξεκάθαρη κατεύθυνση και μορφολογία. Στην πρώτη, είναι πεπλατυσμένοι ως προς την κατακόρυφη κατεύθυνση, ενώ, στην δεύτερη, ως προς την οριζόντια κατεύθυνση. Στην τρίτη μικροδομή, οι κόκκοι πάλι της άσπρης φάσης είναι κατά μέσο όρο ισαξονικοί. Η μέση μορφολογία αυτή των φάσεων στις τρεις μικροδομές απεικονίζεται για την κάθε μια στα αντίστοιχα «two-point statistics» τους. Είναι το έντονο μοτίβο στο κέντρο της αυτοσυσχέτισης. Ένα από τα πιο σημαντικά μεγέθη για τα οποία εμπεριέχονται πληροφορίες στα «two-point statistics» είναι το κλάσμα όγκου που αντιστοιχεί σε ένα συγκεκριμένο «local state». Αυτό αφορά το μηδενικό διάνυσμα, οπότε είναι η τιμή που αντιστοιχεί στο κέντρο του χάρτη αυτοσυσχέτισης, όπου απεικονίζονται τα «two-point statistics». Μπορούμε, επίσης, να διακρίνουμε και άλλα μοτίβα πέρα από το κεντρικό. Αυτά δίνουν πληροφορίες για την κατανομή των κόκκων στη μικροδομή [4]. Για παράδειγμα, οι



Σχήμα 6: Τρεις συνθετικές μικροδομές και τα αντίστοιχα «two-point statistics» τους.

οριζόντιοι σχηματισμοί εκτός της κεντρικής έλλειψης στο χάρτη αυτοσυσχέτισης της δεύτερης μικροδομής υπονοούν ότι η μικροδομή απαρτίζεται κατά ένα σημαντικό ποσοστό από ευθυγραμμισμένα προς την οριζόντια κατεύθυνση επίπεδα της πορτοκαλί φάσης. Αυτό επιβεβαιώνεται πράγματι από τη μικροδομή.

Τα «two-point statistics» είναι, βέβαια, μια στατιστική αναπαράσταση της μικροδομής αρκετά πολλών διαστάσεων. Κάθε μία πιθανή διάταξη των «local states» αποτελεί και μια διάσταση στο σύνολο των δεδομένων. Γι' αυτό, η αξιοποίηση τους για την ανάπτυξη και την αντιστροφή υπολογιστικών συνδέσεων κατεργασίας, μικροδομής, και ιδιοτήτων θα γίνει δυνατή μόνο μέσω τεχνικών μείωσης των διαστάσεων [6]. Η PCA, είναι μια από τις τεχνικές αυτές που ανήκουν στην κατηγορία της μη υποβλεπόμενης μηχανικής μάθησης.

### 2.3.3 Principal Component Analysis

Ένα σημαντικό μέρος της μη υποβλεπόμενης μηχανικής μάθησης είναι η *μείωση των διαστάσεων* (dimensionality reduction). Μέσω αυτής, δημιουργούμε τη σύνδεση μεταξύ ενός χώρου πολλών διαστάσεων,  $x \in R^D$ , με έναν *κρυφό* χώρο λίγων διαστάσεων,  $z \in R^L$ , όπου  $L < D$ . Αυτή η σύνδεση μπορεί, πρώτον, να δημιουργηθεί μέσω ενός παραμετρικού μοντέλου,  $z = f(x; \theta)$ , που μπορεί να εφαρμοστεί για οποιαδήποτε τιμή εισόδου. Υπάρχει η δυνατότητα να δημιουργηθεί, όμως, και μέσω ενός μη παραμετρικού μοντέλου, το οποίο μπορεί να εφαρμοστεί μόνο για τις εισόδους στο σύνολο δεδομένων [37]. Η δεύτερη προσέγγιση χρησιμοποιείται κυρίως για την οπτικοποίηση των δεδομένων, ενώ η πρώτη αποτελεί συνήθως μια μέθοδο προετοιμασίας των δεδομένων για τη χρήση τους στην προπόνηση ενός μοντέλου μηχανικής μάθησης. Ο σκοπός μας είναι να μεταφέρουμε τα δεδομένα μας από ένα πολυδιάστατο χώρο σε ένα χώρο λίγων διαστάσεων χωρίς να χάσουμε χρήσιμες πληροφορίες. Αποφεύγουμε, έτσι, την τάση ενός μοντέλου να μην ανταποκρίνεται σε πολυδιάστατους χώρους.

Η PCA είναι η πιο διαδεδομένη μέθοδος μείωσης των διαστάσεων. Επειδή έχει αποδειχθεί ότι μπορεί να μειώσει αποδοτικότερα τις διαστάσεις ενός συνόλου δεδομένων με «two-point statistics» [6], επιλέγεται για αυτή τη μελέτη. Σε αυτό το σημείο, είναι σοφό να αναρωτηθούμε για το αν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την PCA στο σύνολο δεδομένων πριν από τον υπολογισμό των «two-point statistics», δηλαδή στο σύνολο δεδομένων των δυαδικών εικόνων που περιγράφουν τις μικροδομές ενδιαφέροντος. Αν μπορούμε, τότε δεν αξίζει ουσιαστικά ο υπολογισμός τους. Αυτό το ενδεχόμενο έχει ερευνηθεί ήδη [38]. Ωστόσο,

η εφαρμογή της PCA στο αρχικό σύνολο δεδομένων είχε ως αποτέλεσμα την μη αποδοτική διάκριση και κατηγοριοποίηση των μικροδομών. Σε αυτή την περίπτωση, θα χρειαζόμασταν πάρα πολλά μεγέθη που περιγράφουν την μικροδομή και μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως είσοδοι ή έξοδοι σε υποκατάστατα μοντέλα. Το γεγονός ότι τα «n-point spatial correlations» χαρακτηρίζονται από τη σταθερή σκοπιά, που συζητήσαμε στα προηγούμενα υποκεφάλαια, καθιστά το αποτέλεσμα της PCA χρήσιμο για συνδέσεις κατεργασίας-μικροδομής-ιδιοτήτων μέσω υποκατάστατων μοντέλων. Αυτές οι συνδέσεις αναπτύσσονται μέσω μοντέλων που αφορούν και τη διαδικασία της ομογενοποίησης των κλιμάκων μεγέθους (μεταφορά πληροφοριών από τις μικρότερες κλίμακες στις μεγαλύτερες) και της τοπικοποίησης (μεταφορά πληροφοριών από τις μεγαλύτερες στις μικρότερες).

Η PCA είναι μία γραμμική μέθοδος συμπίεσης δεδομένων, που αποτελείται από γραμμικούς μετασχηματισμούς για τους οποίους το τελικό σύνολο δεδομένων διαφέρει το λιγότερο από το αρχικό. Στο τέλος των υπολογισμών, προκύπτουν τα «principal components» (PCs) ως γραμμικοί συνδυασμοί των μεταβλητών του αρχικού συνόλου δεδομένων. Το πρώτο PC εμπεριέχει τις περισσότερες πληροφορίες για τα δεδομένα, συγκριτικά με τα υπόλοιπα, αφού αφορά τη μεγαλύτερη δυνατή διασπορά. Κάθε επόμενο PC αφορά τη μεγαλύτερη δυνατή διασπορά, οπότε ορίζεται ορθογώνια προς τα προηγούμενα. Γι' αυτό, τα PCs δε συσχετίζονται [37]. Ακολουθεί μια συνοπτική μαθηματική περιγραφή της PCA.

Έστω  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m$  διανύσματα σε ένα διανυσματικό χώρο  $d$  διαστάσεων με μέσο 0, δηλαδή  $\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbf{x}_i = \mathbf{0}$ . Ο σκοπός μας είναι να μειώσουμε τις διαστάσεις μέσω ενός γραμμικού συνδυασμού  $\mathbf{x} \mapsto W\mathbf{x}$  όπου το  $\mathbf{y} = W\mathbf{x}$  είναι ένα διάνυσμα διαστάσεων  $d' \ll d$ . Επίσης, ψάχνουμε έναν πίνακα  $U$ , με τον οποίο έχουμε ότι το  $\tilde{\mathbf{x}} = U\mathbf{y}$  είναι  $d$  διαστάσεων και η απόσταση ελάχιστων τετραγώνων ελαχιστοποιείται. Ο στόχος, λοιπόν, της PCA είναι η εύρεση των  $W \in R^{d,d'}$  και  $U \in R^{d',d}$  για τους οποίους ελαχιστοποιείται το μέγεθος:

$$L_{PCA}(U, W) = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{x}_i - \tilde{\mathbf{x}}_i\|_2^2 = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{x}_i - UW\mathbf{x}_i\|_2^2 \quad (17)$$

Έχουμε ότι  $W = U^T$  και  $U^T U = I$ , αφού αν τα  $U, W$  είναι σταθερά και ισχύει ότι  $R = \{UW\mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in R^d\}$ , τότε τα διανύσματα του  $R$  μπορούν να γραφτούν ως  $V\mathbf{y}$ , όπου  $V^T V = I$  και  $\mathbf{y} \in R^{d'}$ . Οπότε:

$$\|\mathbf{x} - V\mathbf{y}\|_2^2 = \|\mathbf{x}\|_2^2 + \|\mathbf{y}\|_2^2 - 2\mathbf{y}^T(V^T \mathbf{x}) \quad (18)$$

Θέτοντας το διαφορικό του  $y$  ως 0, προκύπτει ότι  $y = V^T \mathbf{x}$ . Έτσι, για κάθε  $\mathbf{x}$ , το διάνυσμα που εγγυάται ότι το  $L_{PCA}$  ελαχιστοποιείται είναι το  $VV^T \mathbf{x}$ . Αφού αυτό ισχύει για όλους τους  $U$  και  $W$ , ισχύει και ότι  $U^T U = I$  και  $W = U^T$ . Το μέγεθος  $L_{PCA}$ , τότε, απλοποιείται ως εξής:

$$L_{PCA}(U) = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{x}_i - \widetilde{\mathbf{x}}_i\|_2^2 = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{x}_i - UU^T \mathbf{x}_i\|_2^2 \quad (19)$$

Αναλύοντας την ταυτότητα  $\|\mathbf{x}_i - UU^T \mathbf{x}_i\|_2^2$ , παίρνουμε:

$$\|\mathbf{x} - UU^T \mathbf{x}\|_2^2 = \|\mathbf{x}\|_2^2 - \text{tr}(U^T \mathbf{x} \mathbf{x}^T U) \quad (20)$$

Οπότε το πρόβλημα ελαχιστοποίησης του  $L_{PCA}$  μετατρέπεται σε ένα πρόβλημα μεγιστοποίησης:

$$\max_{U^T U = I} \text{tr} \left( U^T \sum_{i=1}^m \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T U \right) \quad (21)$$

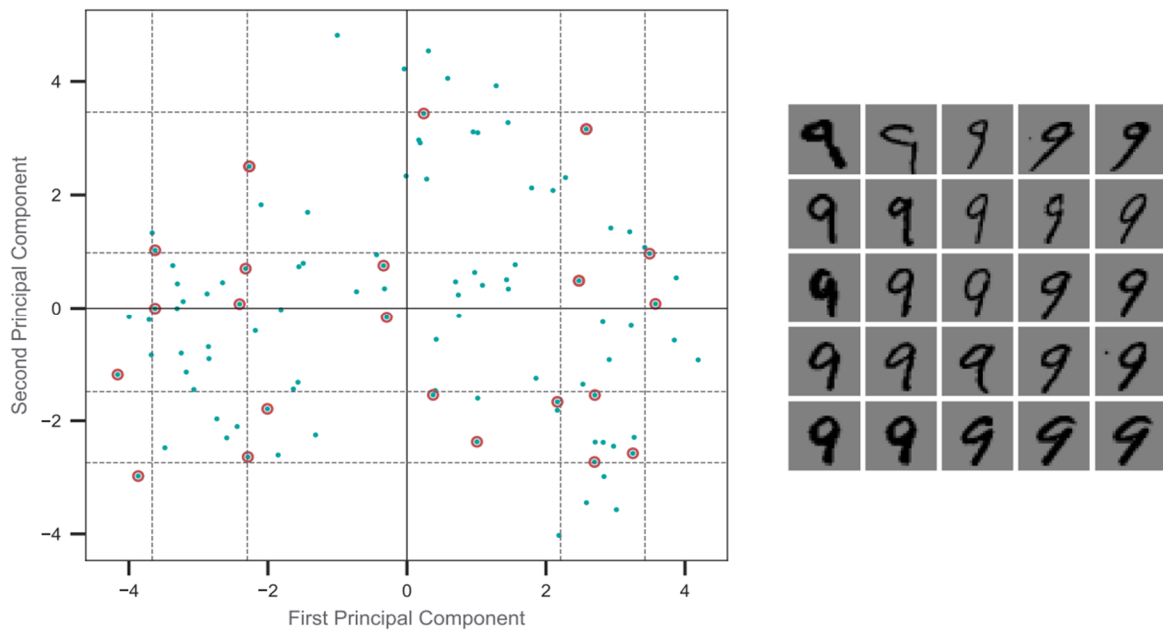
Τώρα, έστω ότι  $A = \sum_{i=1}^m \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T$  συμμετρικός πίνακας που μπορεί να αποσυντεθεί ως  $A = VDV^T$  όπου  $VV^T = I$ , τα στοιχεία στη διαγώνιο του  $D$  είναι οι ιδιοτιμές (eigenvalues) του  $A$ , και οι στήλες του  $V$  είναι τα ιδιοδιανύσματα (eigenvectors) του  $A$ . Έτσι:

$$\text{tr}(U^T A U) = \text{tr}(U^T V D V^T U) = \text{tr}(B^T D B) = \sum_{i=1}^d \lambda_j \sum_{j'=1}^{d'} b_{jj'}^2 \quad (22)$$

Όμως  $B^T B = I$ , οπότε το πρόβλημα απλοποιείται περαιτέρω στο πρόβλημα εύρεσης των  $d'$  μεγαλύτερων ιδιοτιμών του  $A$  και των αντίστοιχων ιδιοδιανυσμάτων  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{d'}$  που θα είναι και οι στήλες του  $U$ . Τέλος, έχουμε ότι  $W = U^T$ . [39] Συμπερασματικά, υπολογίζουμε αρχικά τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα. Στη συνέχεια, ταξινομούμε τις ιδιοτιμές σε φθίνουσα σειρά και κατασκευάζουμε τον πίνακα  $U$ , αντιστοιχίζοντας τα ιδιοδιανύσματα με τις ιδιοτιμές. Διαγωνοποιούμε, έτσι, τον πίνακα  $W$ . Τα PCs είναι οι στήλες του  $U$  και το πρώτο στοιχείο στη διαγώνιο του  $D$  είναι το ποσοστό της διασποράς του πρώτου PC, που είναι και το μεγαλύτερο από αυτά των υπόλοιπων PCs.

Στο Σχήμα 7 απεικονίζονται τα αποτελέσματα της εφαρμογής της PCA σε εικόνες του ψηφίου 9 που βρίσκονται στο σύνολο MNIST [40]. Οι εικόνες αυτές μεταφέρονται από ένα χώρο 784(28x28) διαστάσεων σε ένα χώρο 2 διαστάσεων. Μερικές φορές, μπορεί να είναι δύσκολο να ερμηνεύσουμε τα PCs και να διακρίνουμε το τι πληροφορίες τείνει να εμπεριέχει το καθ' ένα. Ωστόσο, παρατηρώντας το πως κάθε σημείο αντιστοιχίζεται με μια εικόνα (αν γνωρίζαμε πράγματι την αντιστοίχιση της κάθε εικόνας), μπορούμε να διακρίνουμε ότι το

πρώτο PC εμπεριέχει πληροφορίες για την κατεύθυνση στην οποία είναι γραμμένο το ψηφίο, ενώ το δεύτερο PC εμπεριέχει πληροφορίες για το πάχος των γραμμών που το απαρτίζουν [37].



Σχήμα 7: Απεικόνιση των αποτελεσμάτων της PCA που εφαρμόστηκε στο σύνολο δεδομένων MNIST και, πιο συγκεκριμένα, σε ένα υποσύνολό του που αποτελείται από εικόνες του διαφορετικά γραμμένου ψηφίου 9. Η εικόνα αναπαράγεται από το [37].

Όσον αφορά στα «two-point statistics», είναι συνετό να συγκεντρώνουμε όλα αυτά που κρίνουμε σημαντικά σε ένα πίνακα  $f[k, r]$ , όπου τα  $k = 1, 2, \dots, K$  αριθμούν όλες τις μικροδομές στο σύνολο δεδομένων. Στο χώρο των PCs, τα «two-point statistics» είναι:

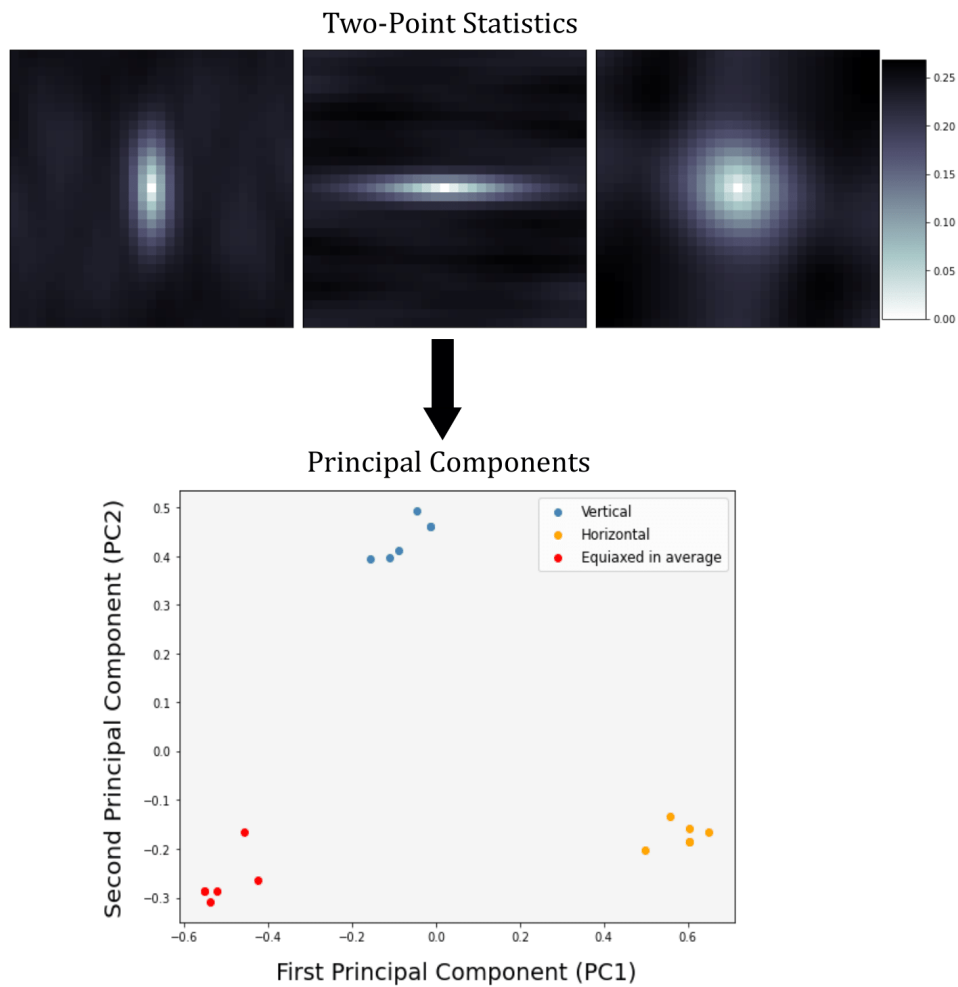
$$f[k, r] \approx \sum_{i=1}^{R^*} \alpha[k, i] \psi[i, r] + \bar{f}[r] \quad (23)$$

όπου  $R^*$  τα ανακτημένα components»,  $\bar{f}[r]$  είναι το μέσο του συνόλου. Τα  $\psi[i, r]$  είναι τα διανύσματα βάσης (basis vectors), τα οποία εμπεριέχουν πληροφορίες για τα μοτίβα στο χώρο των μικροδομών. Τα  $\alpha[k, i]$  είναι τα PC scores που αφορούν στην  $k$ -οστή μικροδομή στο χώρο των PCs [6], [27]. Κάθε σειρά, έτσι, του πίνακα παρέχει μια λίγων διαστάσεων αναπαράσταση κάθε μικροδομής σε ένα σύνολο, που μπορεί να χρησιμοποιηθεί εύκολα σε υποκατάστατα μοντέλα. Υπάρχει, επίσης, η δυνατότητα ανάκτησης των αρχικών στατιστικών μέσων των διανυσμάτων βάσης και του μέσου του συνόλου.

Το αποτέλεσμα της εφαρμογής της PCA στο σύνολο δεδομένων των «two-point statistics» απεικονίζεται στο Σχήμα 8. Τα «two-point statistics» μεταφέρονται από ένα πολυδιάστατο χώρο σε έναν δισδιάστατο χώρο χωρίς να χάνονται πολλές πληροφορίες. Κάθε χρώμα αφορά και μία κατηγορία μικροδομών, ενώ κάθε σημείο αφορά μια από τις μικροδομές



του συνόλου. Για κάθε κατηγορία μικροδομών, παράχθηκαν πέντε συνθετικές μικροδομές με μικρές αποκλίσεις μεταξύ τους. Κάθε κατηγορία χαρακτηρίζεται από διαφορετικά PCs, τα οποία μπορούν να ερμηνευτούν με διαφορετικό τρόπο ανάλογα με το σύνολο των μικροδομών.



Σχήμα 8: Τα «two-point statistics» τριών κατηγοριών μικροδομής και η οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων της PCA που εφαρμόστηκε σε αυτά.

## 2.4 Υποκατάστατη Μοντελοποίηση

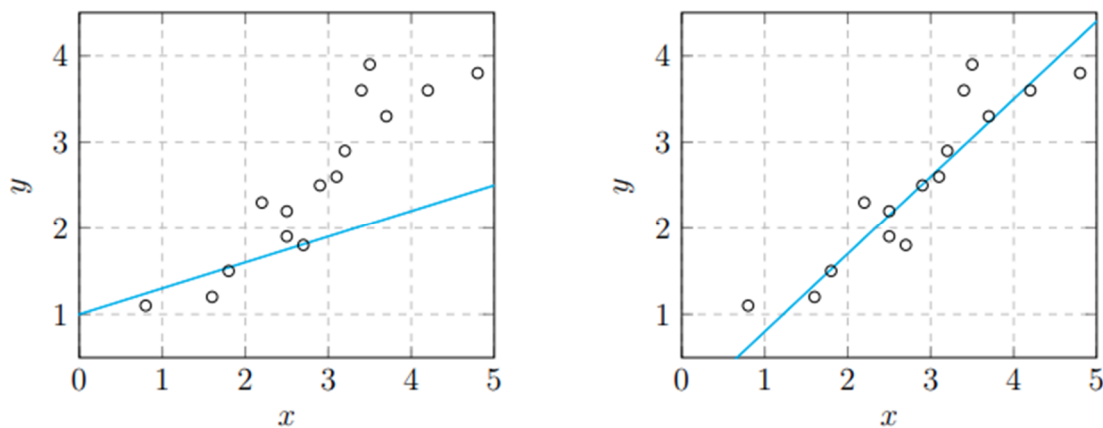
### 2.4.1 Επιβλεπόμενη Μηχανική Μάθηση

Ο βασικός στόχος της μηχανικής μάθησης είναι η εξαγωγή χρήσιμων πληροφοριών από ένα σύνολο δεδομένων. Αυτό γίνεται προσεγγίζοντας το μοντέλο (ή τη συνάρτηση) που συνδέει τα δεδομένα εκπαίδευσης με τα δεδομένα ελέγχου και αξιολογώντας το κατά πόσο το μοντέλο επαφίεται της πραγματικότητας. Εάν η απόδοση του μοντέλου βρίσκεται σε ικανοποιητικά επίπεδα, τότε μπορεί να εφαρμοστεί για την πρόβλεψη μεταβλητών εξόδου παρόμοιων με αυτών του συνόλου εκπαίδευσης [41]. Ανάλογα με τη φύση και τις προκλήσεις του εκάστοτε προβλήματος, η μηχανική μάθηση μπορεί να το προσεγγίσει με διαφορετικούς τρόπους. Οι κύριες κατηγορίες προβλημάτων που καλείται να επιλύσει είναι τα προβλήματα επιβλεπόμενης και μη επιβλεπόμενης μάθησης.

Στην περίπτωση της επιβλεπόμενης μάθησης, που αφορά και την υποκατάστατη μοντελοποίηση, τα σημεία των δεδομένων αντιστοιχίζονται με μια τιμή ή έναν χαρακτηρισμό. Οι αλγόριθμοι καλούνται, ουσιαστικά, να τα προβλέψουν κάνοντας χρήση των επιμέρους χαρακτηριστικών των δεδομένων. Ανάλογα με τη φύση της εξόδου, η επιβλεπόμενη μάθηση μπορεί να χαρακτηριστεί ως παλινδρόμηση (regression) για τις εξόδους που είναι συνεχείς μεταβλητές και ως ταξινόμηση (classification) για τις εξόδους που είναι διακριτές μεταβλητές [37]. Ας πάρουμε ως παράδειγμα την περίπτωση όπου ο αλγόριθμος καλείται να προβλέψει την τιμή σπιτιών με βάση τα χαρακτηριστικά τους (π.χ. περιοχή, μέγεθος, αριθμός δωματίων). Αυτό είναι ένα κλασικό πρόβλημα παλινδρόμησης. Σε αυτές τις περιπτώσεις, ο αλγόριθμος επεξεργάζεται αριθμητικά τα διαθέσιμα χαρακτηριστικά, αποδίδοντας τους βαρύτητα, με σκοπό να προβλέψει μια συγκεκριμένη τιμή.

Γενικά, η είσοδος του μοντέλου συμβολίζεται ως  $x$  και η έξοδος ως  $y$ . Η είσοδος ορίζεται ως διάνυσμα καθώς, γενικά, υπάρχουν πολλές μεταβλητές εισόδου. Έχουμε ένα σύνολο δεδομένων  $D$  που αποτελείται από  $n$  παρατηρήσεις. Δηλαδή  $D = \{(x_i, y_i) \mid i = 1, \dots, n\}$ . Εφόσον το μοντέλο μηχανικής μάθησης προπονηθεί με βάση το  $D$ , θα μπορεί να προβλέψει την έξοδο για διαφορετικές εισόδους  $x_*$  [42]. Για να οδηγηθούμε σε μια συνάρτηση  $f$  που θα μπορεί να προβλέπει με ακρίβεια, θα πρέπει να κάνουμε ορισμένες υποθέσεις για αυτή. Υπάρχουν δύο βασικές προσεγγίσεις σχετικά με αυτό, που καλούνται συχνά ως «restriction» και «preference biases» [43]. Σύμφωνα με την πρώτη, περιορίζουμε το

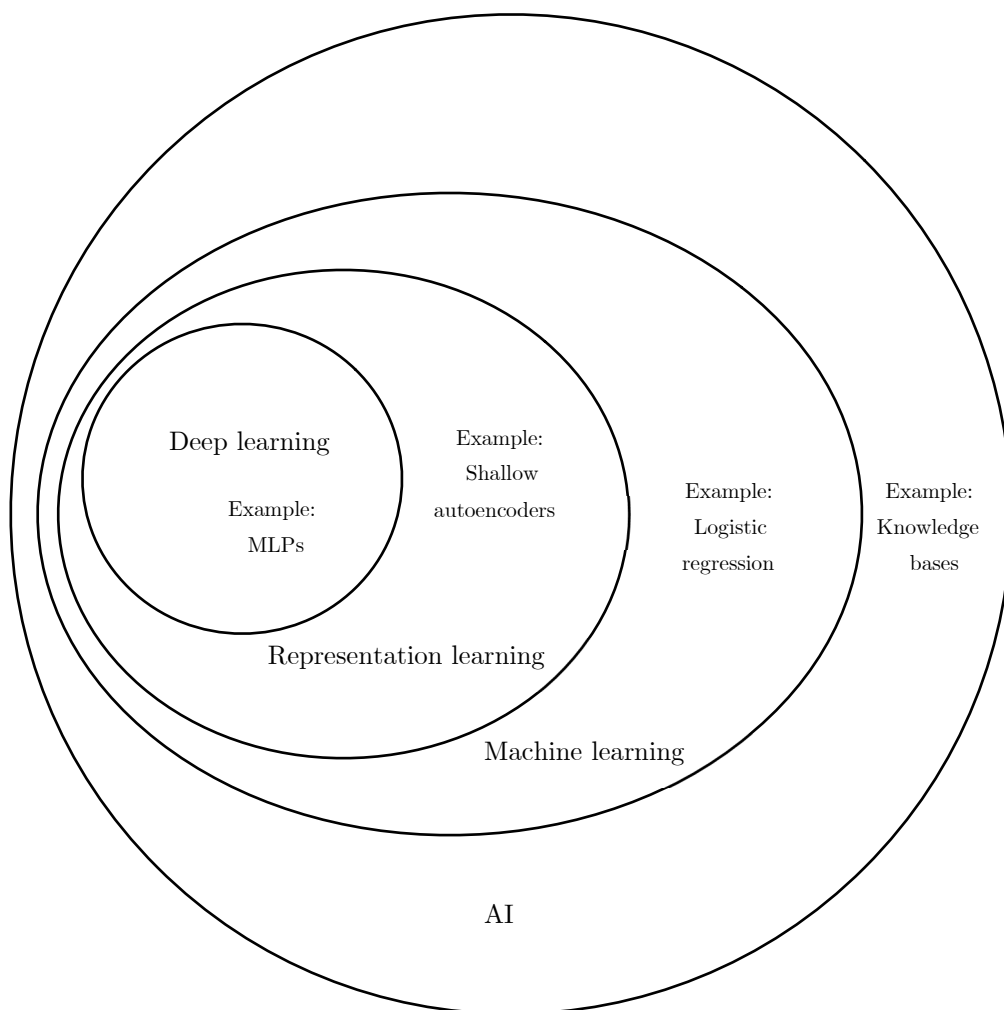
σύνολο των συναρτήσεων. Για παράδειγμα, μπορούμε να το περιορίσουμε λαμβάνοντας υπόψη μόνο γραμμικές συναρτήσεις. Τότε, προκύπτει το πρόβλημα της επιλογής της κατηγορίας των συναρτήσεων. Ακόμα και σε περίπτωση που επιλεγεί μια ευέλικτη κατηγορία, τότε είναι πολύ πιθανό το ενδεχόμενο της υπερπροσαρμογής του μοντέλου στο σύνολο δεδομένων προπόνησης, η οποία οδηγεί σε μειωμένη ακρίβεια. Η δεύτερη προσέγγιση αφορά στην πρόσδοση εκ των προτέρων πιθανοτήτων σε όλες τις πιθανές συναρτήσεις, όπου μεγαλύτερες πιθανότητες προσδίδονται στις συναρτήσεις που θεωρούμε πιο πιθανές ή ακριβείς. Βέβαια, υπάρχουν άπειρες πιθανές συναρτήσεις και ο χρόνος υπολογισμού είναι πεπερασμένος. Οι Γκαουσιανές διαδικασίες μπορούν να αντιμετωπίσουν το συγκεκριμένο πρόβλημα [42]. Η παλινδρόμηση μέσω Γκαουσιανών διαδικασιών (Gaussian process regression) θα αναλυθεί στο επόμενο υποκεφάλαιο.



Σχήμα 9: Προσαρμογή μιας γραμμικής συνάρτησης στα δεδομένα, μέσω της γραμμικής παλινδρόμησης.

Ένα υποπεδίο της μηχανικής μάθησης είναι τα νευρωνικά δίκτυα. Αλγόριθμοι δημιουργούνται και βελτιώνονται, αλλά σε αυτή την περίπτωση αποτελούνται από ένα ή περισσότερα στρώματα επεξεργασίας. Το κάθε ένα από τα στρώματα εμπεριέχει ορισμένα στοιχεία επεξεργασίας που καλούνται *νευρώνες*, με τον κάθε νευρώνα να επηρεάζει με έναν ξεχωριστό τρόπο τον αλγόριθμο. Η επιρροή αυτή εξαρτάται από την ισχύ με την οποία συνδέεται ο κάθε νευρώνας με τους νευρώνες του προηγούμενου και του επόμενου στρώματος, δηλαδή από τις τιμές των *βαρών*. Ένα νευρωνικό δίκτυο αξιολογείται με βάση την ικανότητά του να προβλέψει, χωρίς ανθρώπινη βοήθεια, μια ή περισσότερες εξόδους, αφού δεχθεί μία ή περισσότερες εισόδους. Αυτό το καταφέρνει εφόσον έχει εκπαιδευθεί με τον κατάλληλο τρόπο. Η εκπαίδευση, αυτή αποτελεί και το βήμα της εφαρμογής του δικτύου με τις σημαντικότερες προκλήσεις. Η βαθιά μάθηση αφορά στην εφαρμογή βαθιών νευρωνικών δικτύων, δηλαδή δικτύων με πολλά στρώματα επεξεργασίας, σε αντίθεση με τα απλά

νευρωνικά δίκτυα. Τα βαθιά νευρωνικά δίκτυα δίνουν τη δυνατότητα αξιοποίησης ενός μεγάλου συνόλου δεδομένων. Αυτό το καταφέρνουν με το να αναγνωρίζουν περίπλοκα μοτίβα, χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο οπισθοδιάδοσης για την αλλαγή των εσωτερικών παραμέτρων τους και την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης σφάλματος [44]. Έτσι, προσεγγίζουν ευέλικτα μια συνάρτηση της μορφής  $f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta})$ , όπου οι διαστάσεις του  $\boldsymbol{\theta}$ , δηλαδή το πλήθος των παραμέτρων, είναι σταθερές και ανεξάρτητες του μεγέθους  $N$  του συνόλου δεδομένων προπόνησης. Ωστόσο, αυτά τα παραμετρικά μοντέλα μπορεί να υπερπροσαρμοστούν στο  $N$  αν αυτό είναι μικρό και να υποπροσαρμοστούν όταν είναι μεγάλο [45]. Για να κατασκευάσουμε μοντέλα τα οποία θα μπορούν να προσαρμοστούν στο  $N$  και στη μεταβολή του, θα πρέπει να οδηγηθούμε στα μη παραμετρικά μοντέλα (όπως οι Γκαουσιανές διαδικασίες).



Σχήμα 10: Διάγραμμα Venn για τις διαφορετικές βασικές τεχνολογίες της τεχνητής νοημοσύνης. [44]

Η υποκατάστατη μοντελοποίηση είναι μια ειδική περίπτωση επιβλεπόμενης μηχανικής μάθησης που εφαρμόζεται στο πεδίο του τεχνικού σχεδιασμού (engineering design). Η βασική λειτουργία τους είναι η προσέγγιση της πολυπαραμετρικής συμπεριφοράς ενός υπολογιστικά ακριβούς μοντέλου  $f(x): R^p \rightarrow R$ . Έχοντας ορίσει ένα εύρος τιμών  $X_n = \{x_1, \dots, x_n\}$  σε ένα  $m$ -διάστατο χώρο, όπου  $m$  το πλήθος των μεταβλητών εισόδου, εφαρμόζουμε το μοντέλο που θέλουμε να αντικαταστήσουμε στο σύνολο τιμών  $(x_i, y_i)$ , όπου  $y_i \sim f(x_i)$  για  $i = 1, \dots, n$ . Συλλέγουμε, λοιπόν, τα  $n$  ζεύγη δεδομένων  $D_n = (X_n, Y_n)$ , όπου το  $X_n$  ένας πίνακας διαστάσεων  $n \times m$  και το  $Y_n$  ένα  $n$ -διάνυσμα. Τέλος, κατασκευάζουμε ένα μοντέλο παλινδρόμησης  $\hat{f}_n \equiv \hat{f} | D_n$  που προπονείται σε αυτά τα δεδομένα και, έτσι, μπορεί να παραγάγει υποκατάστατες για τις  $f(x')$  προβλέψεις  $\hat{f}_n(x')$  σε σημεία  $x'$  στον  $m$ -διάστατο χώρο [7]. Το υποκατάστατο μοντέλο που κατασκευάζεται θα πρέπει να οδηγεί σε σημαντική μείωση του κόστους και, παράλληλα, να έχει χρήσιμη ακρίβεια. Στην πλειονότητα των περιπτώσεων, η έξοδος ενός υποκατάστατου είναι μια κατανομή της οποίας το μέσο μπορεί να αντικαταστήσει την έξοδο του αρχικού μοντέλου και της οποίας η διασπορά αντιπροσωπεύει την αβεβαιότητά του στην πρόβλεψη. Επίσης, όπως θα εξηγήσουμε στο επόμενο κεφάλαιο, αν η προπόνηση του υποκατάστατου μοντέλου είναι επιτυχής, αυτό θα μπορέσει να εφαρμοστεί για σκοπούς βελτιστοποίησης.

Εκτός των παραπάνω, τα υποκατάστατα μοντέλα μπορούν να αντιμετωπίσουν το «θόρυβο» των πειραμάτων και την έλλειψη δεδομένων, καλύπτοντας τα κενά σε ένα σύνολο δεδομένων που μπορεί να έχει προκύψει πειραματικά. Επίσης, μπορούν να ανακαλύψουν γενικές τάσεις και σχέσεις ανάμεσα στις μεταβλητές ενδιαφέροντος, αλλά και την πραγματική επιρροή τους στο πρόβλημά μας. Μια άλλη πιθανή εφαρμογή είναι η σύμπτυξη μοντέλων διαφορετικής ακρίβειας (προσέγγιση multi-fidelity) [46]. Για παράδειγμα, ένα υποκατάστατο μοντέλο θα μπορούσε να προπονηθεί με δεδομένα που προέκυψαν από ορισμένα απλά υπολογιστικά πειράματα μικρότερης ακρίβειας και από μερικά αργά υπολογιστικά πειράματα υψηλής ακρίβειας, ή και από κανονικά πειράματα.

Μια σημαντική έννοια στο πεδίο της υποκατάστατης μοντελοποίησης είναι η *ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας* (uncertainty quantification). Αυτή αφορά στην ποσοτικοποίηση, στον χαρακτηρισμό, στον εντοπισμό και στη διαχείριση της αβεβαιότητας σε ψηφιακά και φυσικά συστήματα [47]. Αυτές οι λειτουργίες είναι ιδιαίτερα σημαντικές στον σχεδιασμό των υλικών [6], [48]. Όσον αφορά στην περιγραφή της μικροδομής, η αβεβαιότητα που προκύπτει πηγάζει από τους περιορισμούς του εργαστηριακού εξοπλισμού στον χαρακτηρισμό της, από τη μεταβολή της δομής κατά την προετοιμασία των δειγμάτων για

χαρακτηρισμό και από τα περιορισμένα σύνολα δεδομένων, λόγω αποκλειστικά δισδιάστατων απεικονίσεων της μικροδομής και λίγων διαθέσιμων μικρογραφιών [49].

## 2.4.2 Gaussian Process Regression

Αναλύεται μια Μπεϋζιανή προσέγγιση στην παλινδρόμηση όπου η αβεβαιότητα στη σύνδεση  $f$  της εισόδου με την έξοδο προσεγγίζεται ορίζοντας μια εκ των προτέρων κατανομή  $p(f)$  στο χώρο των συναρτήσεων και μεταβάλλοντάς τη με βάση τα δεδομένα ώστε να προκύψει η εκ των υστέρων κατανομή  $p(f | \mathcal{D})$ , μέσω του θεωρήματος Μπέϋζ. Οι κατανομές αυτές είναι κατανομές Γκαουσιανών διαδικασιών. Συγκεκριμένα, μια *Γκαουσιανή διαδικασία* (Gaussian Process – GP) είναι μια συλλογή τυχαίων μεταβλητών, για την οποία κάθε πεπερασμένο σύνολο των μεταβλητών έχει μια κοινή κανονική κατανομή. Στον χώρο των συναρτήσεων,  $f: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{R}$  είναι μια κατανομή πιθανοτήτων για την οποία κάθε πεπερασμένο σύνολο τιμών  $\mathbf{f}_X = [f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_N)]$  έχει μια κοινή κανονική κατανομή. Έχουμε ότι  $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_n \in \mathcal{X}\}_{n=1}^N$  για  $N \geq 1$  σημεία. Πριν προσαρμοστεί στα δεδομένα, ένα μοντέλο GP περιγράφεται πλήρως από τη συνάρτηση του μέσου:

$$\mu(\mathbf{x}) = E[f(\mathbf{x})] \quad (24)$$

και τη συνάρτηση συνδιασποράς, η οποία καλείται και *πυρήνας* (kernel):

$$\text{Cov}[f(\mathbf{x}), f(\mathbf{x}')] = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \geq 0 \quad (25)$$

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = E \left[ (f(\mathbf{x}) - m(\mathbf{x}))(f(\mathbf{x}') - m(\mathbf{x}'))^\top \right] \quad (26)$$

Μια GP συμβολίζεται ως εξής:

$$f(\mathbf{x}) \sim GP(m(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')) \quad (27)$$

Για κάθε πεπερασμένο σύνολο σημείων  $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ , ισχύει:

$$p(\mathbf{f}_X | \mathbf{X}) = \mathcal{N}(\mathbf{f}_X | \boldsymbol{\mu}_X, \mathbf{K}_{X,X}) \quad (28)$$

όπου  $\boldsymbol{\mu}_X = (m(\mathbf{x}_1), \dots, m(\mathbf{x}_N))$  και  $\mathbf{K}_{X,X}(i, j) = \mathcal{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ . [42], [45]

Η συνάρτηση του μέσου συνηθίζεται να θεωρείται μηδενική, καθώς η αβεβαιότητα της μπορεί να ληφθεί υπόψη προσθέτοντας απλώς έναν επιπλέον όρο στον πυρήνα. Έχοντας ορίσει τη συνάρτηση του μέσου, η δομή και η απόδοση του GP μοντέλου εξαρτάται ως επί το πλείστον από τον πυρήνα. Αυτός καθορίζει, επίσης, το πως το μοντέλο θα αντεπεξέλθει σε σημεία εκτός των δεδομένων προπόνησης. Υπάρχουν πολλές επιλογές για τη συνάρτηση της συνδιασποράς. Πράγματι, μπορούμε να ορίσουμε μια τεράστια ποικιλία από GP μοντέλα

αλλάζοντας μόνο αυτή. Για παράδειγμα, η γραμμική παλινδρόμηση και άλλες κλασσικές μέθοδοι μηχανικής μάθησης μπορούν να περιγραφούν ως GP μοντέλα με διαφορετικούς πυρήνες [7]. Μια από τις βασικές προκλήσεις στην ανάπτυξη μοντέλων GP είναι η κατασκευή ενός πυρήνα που θα αντιπροσωπεύει σε μεγάλο βαθμό τη δομή των δεδομένων και την *εκ των προτέρων* γνώση που έχουμε για αυτά.

Η κύρια ιδιότητα των GPs που επιτρέπει την αυτόματη κατασκευή μοντέλων είναι η δυνατότητα υπολογισμού της *οριακής πιθανότητας* (marginal likelihood) ενός συνόλου δεδομένων με βάση ένα συγκεκριμένο μοντέλο. Η οριακή πιθανότητα για ένα σύνολο δεδομένων  $[f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2), \dots, f(\mathbf{x}_N)] := \mathbf{f}(\mathbf{X})$  στα σημεία  $\mathbf{X}$  είναι:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{f}(\mathbf{X}) | \mathbf{X}, \mu(\cdot), k(\cdot, \cdot)) &= \mathcal{N}(\mathbf{f}(\mathbf{X}) | \mu(\mathbf{X}), k(\mathbf{X}, \mathbf{X})) \\ &= (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \times |k(\mathbf{X}, \mathbf{X})|^{-\frac{1}{2}} \\ &\quad \times \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{f}(\mathbf{X}) - \mu(\mathbf{X}))^\top k(\mathbf{X}, \mathbf{X})^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{X}) - \mu(\mathbf{X}))\right\} \end{aligned} \quad (29)$$

Το μοντέλο μπορεί τώρα να προβλέψει τις συναρτησιακές τιμές σε οποιοδήποτε σημείο του χώρου, με βάση τις μέχρι τώρα παρατηρήσεις. Η προβλεπόμενη κατανομή της συναρτησιακής τιμής  $f(\mathbf{x}^*)$  σε ένα σημείο ελέγχου  $\mathbf{x}^*$  έχει ως εξής [42], [45]:

$$\begin{aligned} p(f(\mathbf{x}^*) | \mathbf{f}(\mathbf{X}), \mathbf{X}, \mu(\cdot), k(\cdot, \cdot)) & \\ &= \mathcal{N}(f(\mathbf{x}^*) | \mu(\mathbf{x}^*) + k(\mathbf{x}^*, \mathbf{X})k(\mathbf{X}, \mathbf{X})^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{X}) - \mu(\mathbf{X})), \\ &\quad k(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^*) - k(\mathbf{x}^*, \mathbf{X})k(\mathbf{X}, \mathbf{X})^{-1}k(\mathbf{X}, \mathbf{x}^*)) \end{aligned} \quad (30)$$

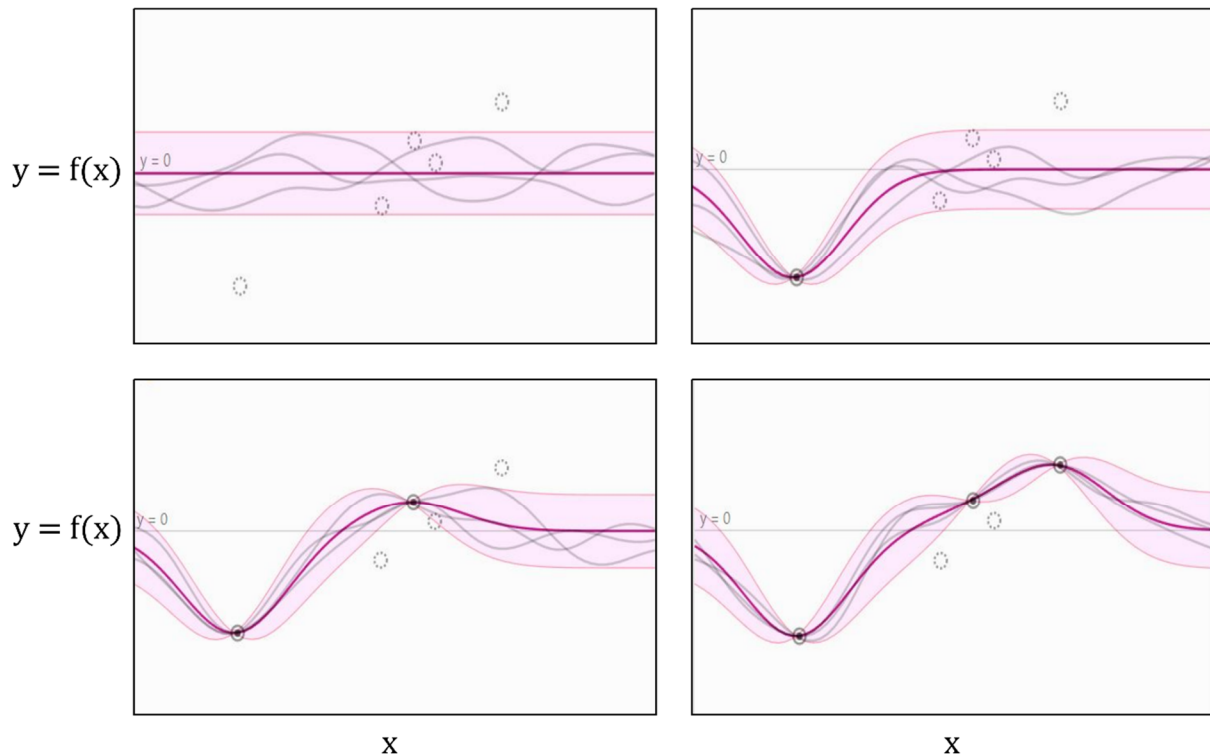
Οι εξισώσεις αυτές μπορεί να φαίνονται σύνθετες, αλλά επιλύονται εύκολα με λίγες πράξεις γραμμικής άλγεβρας [50]. Η δειγματοληψία μιας συνάρτησης από την GP είναι επίσης απλή. Ένα δείγμα της GP σε ένα πεπερασμένο σύνολο σημείων είναι απλώς ένα δείγμα μιας πολυμεταβλητής κανονικής κατανομής, που δίνεται από την εξίσωση (30). Με αυτό τον τρόπο, λαμβάνει χώρα η παλινδρόμηση μέσω των Γκαουσιανών διαδικασιών (Gaussian Process Regression ή GPR).

Υπάρχουν αρκετοί λόγοι για τους οποίους μπορούμε να προτιμήσουμε τις Γκαουσιανές διαδικασίες από ένα συνηθισμένο μοντέλο μηχανικής μάθησης. Γνωρίζοντας για το μαθηματικό υπόβαθρό τους, μπορούμε πλέον να τους αναγνωρίσουμε [42], [45]:

- Η υπολογιστική προσέγγιση της αβεβαιότητας του μοντέλου (epistemic uncertainty), μέσω των προβλεπόμενων κατανομών, είναι ένα βασικό χαρακτηριστικό των GPs. Αυτό το είδος αβεβαιότητας προκύπτει από την άγνοιά μας για το ποια από τις πολλές

λύσεις είναι σωστή. Όσο απομακρυνόμαστε από τα σημεία των παρατηρήσεων, αυτή η αβεβαιότητα αυξάνεται. Οι GPs μπορούν να ανταποκριθούν σε αυτή τη μεταβολή.

- Μέσω του ορισμού κατάλληλου πυρήνα, αξιοποιούμε τη προϋπάρχουσα γνώση που έχουμε για τη δομή των δεδομένων. Στην περίπτωσή μας, αξιοποιούμε ορισμένες αρχές της επιστήμης των υλικών και της θεωρίας της ανακρυστάλλωσης.
- Επίσης, οι GPs είναι εξαιρετικά αποδοτικές σε μικρά σύνολα δεδομένων. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό σε πεδία όπου η συλλογή των δεδομένων είναι δύσκολη (κάτι που ισχύει στη μηχανική των υλικών). Ωστόσο, μπορούν να προσαρμοστούν και σε μεγάλα σύνολα δεδομένων, προσαρμόζοντας βέβαια τα μοντέλα [51].
- Κατά την κατασκευή ενός μοντέλου GP, προσδιορίζονται λιγότερες παράμετροι σε σχέση με άλλες κατηγορίες μοντέλων. Επίσης, η υπερπροσαρμογή στα δεδομένα είναι αδύνατη λόγω της προβλεπόμενης εκ των υστέρων κατανομής GP.



Σχήμα 11: Απεικόνιση μιας GP που μοντελοποιεί μια μονοδιάστατη συνάρτηση. Στο πάνω αριστερά σχήμα, η GP δεν έχει προσαρμοστεί σε κανένα σημείο δεδομένων. Σε κάθε ένα από τα υπόλοιπα σχήματα, η GP προσαρμόζεται σε ένα περισσότερο σημείο κάθε φορά. Τα σχήματα λαμβάνονται από το [86].

Οι Γκαουσιανές διαδικασίες εφαρμόζονται συχνά ως υποκατάστατα μοντέλα σε διάφορα πεδία μηχανικής κυρίως για τους παραπάνω λόγους. Σε προέκταση αυτών, η εγγενής δυνατότητα υπολογισμού της αβεβαιότητας διευκολύνει δραστικά τη βελτιστοποίηση, μέσω της *Μπεϋζιανής βελτιστοποίησης* (Bayesian optimization). Σύμφωνα με αυτή, για να



μεγιστοποιήσουμε ένα μέγεθος, θα πρέπει να κατευθυνθούμε προς ένα σημείο όπου αναμένουμε να υπάρχει μια υψηλή τιμή, ενώ θα πρέπει και να εξερευνήσουμε τον παραμετρικό χώρο όπου υπάρχει υψηλή αβεβαιότητα [52]. Μια σχετική μέθοδος είναι η *ενεργή μάθηση* (active learning). Σε αυτή την ιδιαίτερη περίπτωση, ο αλγόριθμος μάθησης επιλέγει ενεργά τα σημεία δεδομένων της εκπαίδευσής του. Δημιουργείται, έτσι, ένας κύκλος μεταξύ της απόκτησης δεδομένων και της εκπαίδευσης/πρόβλεψης. Ενώ κατά τη Μπεϋζιανή βελτιστοποίηση ο στόχος είναι η προσέγγιση ενός ολικού ακρότατου μιας συγκεκριμένης συνάρτησης, στην περίπτωση της ενεργής μάθησης, ο στόχος είναι η προσέγγιση της συνάρτησης αυτής καθ' αυτής με όσο το δυνατό λιγότερες δειγματοληψίες στον παραμετρικό χώρο [53]. Έτσι, ελαχιστοποιείται το (υπολογιστικό ή όχι) κόστος που θα υποφέρει ο μηχανικός κατά τη διαδικασία συλλογής δεδομένων. Η ενεργή μάθηση και η Μπεϋζιανή βελτιστοποίηση έχουν αρχίσει να εφαρμόζονται και στο πεδίο της επιστήμης των υλικών με ενδιαφέροντα αποτελέσματα [54]–[56].

### 2.4.3 Υποκατάστατη Μοντελοποίηση Phase-Field

Η μεθοδολογία MKS έχει εφαρμοσθεί επιτυχώς για την επίτευξη ταχέων και αξιόπιστων συνδέσεων κατεργασιών-μικροδομής μέσω της υποκατάστατης μοντελοποίησης του μοντέλου «phase-field». Αυτές οι εφαρμογές έως τώρα ακολουθούν μια συγκεκριμένη πειραματική πορεία. Αρχικά, καθορίζεται η κατεργασία και οι σχετικές παράμετροι ενδιαφέροντος. Έπειτα, πραγματοποιούνται τα υπολογιστικά πειράματα μέσω του «phase-field» για την παραγωγή των αντίστοιχων μικροδομών. Εν συνεχεία, ακολουθεί η ποσοτικοποίηση των μικροδομών με τα «two-point statistics», οι διαστάσεις των οποίων μειώνονται με την τεχνική PCA χωρίς την απώλεια σημαντικών πληροφοριών. Τέλος, τα σημεία του εύρους των παραμέτρων επεξεργασίας και τα PCs δρουν ως δεδομένα προπόνησης για ένα ή περισσότερα μοντέλα μηχανικής μάθησης. Με αυτό τον τρόπο, κατασκευάζονται γρήγορες συνδέσεις κατεργασίας-μικροδομής για διάφορα συστήματα υλικών.

Η παραπάνω ακολουθία βημάτων εφαρμόστηκε επιτυχώς για πρώτη φορά στην υποκατάστατη μοντελοποίηση «phase-field» της κατευθυνόμενης στερεοποίησης τριμερών ευτηκτικών κραμάτων Al-Ag-Cu [57]. Ως παράμετροι ενδιαφέροντος τέθηκαν η ταχύτητα του διαφορικού της θερμοκρασίας και η συγκέντρωση του Ag (ή του Cu) στο τήγμα. Πέρα από τις δύο παραμέτρους, θα μπορούσαν να συμπεριληφθούν περισσότερες, χρησιμοποιώντας βέβαια περισσότερα δεδομένα προπόνησης και, συνεπώς, υπολογιστικά πειράματα «phase-field». Πραγματοποιήθηκαν 37 πειράματα με το κάθε ένα να παράγει 211 μικροδομές διαστάσεων

800x800 κελιών παράλληλα στο μέτωπο στερεοποίησης. Τα αποτελέσματα αποδεικνύουν την ακρίβεια του υποκατάστατου μοντέλου και την ικανότητά του να αποτυπώνει τις σημαντικότερες πληροφορίες των μικροδομών. Επιπλέον, παρατηρήθηκε ότι το μοντέλο είναι ανεξάρτητο των διαφορετικών αρχικών μικροδομών (κάτι που μπορεί να μην προκύψει σε διαφορετικά φαινόμενα υπό μελέτη). Το εύρος των παραμέτρων που καλύπτει το υποκατάστατο μοντέλο μπορεί να αυξηθεί λαμβάνοντας υπόψη περισσότερες τιμές παραμέτρων στα δεδομένα προπόνησης, ενώ η απόδοσή του μπορεί να αυξηθεί πραγματοποιώντας περισσότερα υπολογιστικά πειράματα και προπονώντας το μοντέλο με περισσότερα PCs. Γίνεται σαφές ότι η μεθοδολογία αυτή μπορεί να εφαρμοστεί σε διαφορετικά φαινόμενα με διαφορετικές παραμέτρους.

Έτσι και έγινε με την μετέπειτα προσπάθεια υποκατάστατης μοντελοποίησης της μεθόδου «phase-field» για την περίπτωση της πυροσυσσωμάτωσης [58]. Η μεθοδολογία MKS εφαρμόστηκε για την ποσοτικοποίηση των ψηφιακών μικροδομών που προέκυψαν από τα υπολογιστικά πειράματα «phase-field» τα οποία, σε αυτή την περίπτωση, αφορούσαν στο φαινόμενο της πυροσυσσωμάτωσης πολυκρυσταλλικών κεραμικών. Οι βασικές διαφοροποιήσεις, σε σχέση με την μεθοδολογία που εφαρμόστηκε στη στερεοποίηση, είναι:

- ο η εφαρμογή ενός καινοτόμου μοντέλου, που προέκυψε από τη συνένωση της GPR με τη λειτουργία του «autoregression» (GPAR) [59] για την πρόβλεψη της εξέλιξης των PCs που περιέχουν τις πληροφορίες για την εξέλιξη της μικροδομής.
- ο η εφαρμογή διαφορετικής μεθόδου για την ποσοτικοποίηση της μικροδομής. Επειδή, σε αυτή την μελέτη, τα μεγέθη ενδιαφέροντος είναι οι κατανομές των μεγεθών των κόκκων και των πόρων, χρησιμοποιούνται τα «chord length distributions» (CLDs). Βέβαια, η ποσοτικοποίηση μπορεί να γίνει και εδώ μέσω των «two-point statistics».

Πιο συγκεκριμένα, πραγματοποιήθηκαν 36 υπολογιστικά πειράματα με 50 χρονικά βήματα το καθ' ένα (1800 μικροδομές). Μετά τον υπολογισμό των στατιστικών της μικροδομής, χρησιμοποιήθηκαν τα πρώτα 5 PCs καθώς αυτά περιέχουν το 97% των πληροφοριών (ή της διασποράς). Αποδεικνύεται, για άλλη μια φορά, ότι μπορούμε να δημιουργήσουμε ακριβείς υποκατάστατες συνδέσεις για την πρόβλεψη των στατιστικών της μικροδομής σε κάθε χρονικό βήμα της εξέλιξής τους.

Με μερικές παραλλαγές, η ίδια μεθοδολογία εφαρμόστηκε για την πρόβλεψη των τελικών στατιστικών των μικροδομών υπερκραμάτων νικελίου έπειτα από την κατεργασία της γήρανσης [60]. Αναφορικά με το μοντέλο της μηχανικής μάθησης, εφαρμόστηκε η GPR, λόγω

των πλεονεκτημάτων που αναλύσαμε προηγουμένως. Εφόσον οι μικρογραφίες ήταν πειραματικές, και όχι ψηφιακές (ως έξοδοι του μοντέλου «phase-field»), ήταν αναγκαία η περαιτέρω επεξεργασία τους (μέσω της διαδικασίας της *τμηματοποίησης*). Σχετικά με τα στατιστικά, ήταν προτιμότερος ο υπολογισμός των «rotationally invariant two-point statistics», καθώς αυτά δεν εξαρτώνται από τη θέση του παρατηρητή (του μικροσκοπίου). Ως χαρακτηριστικά εισόδου για το μοντέλο GPR χρησιμοποιήθηκαν η θερμοκρασία και η διάρκεια της γήρανσης για 27 δείγματα. Ως δεδομένα εξόδου αντιμετωπίστηκαν τα PCs μετά την εφαρμογή της PCA στα στατιστικά των τελικών μικροδομών. Τα προβλεπόμενα χαρακτηριστικά της μικροδομής, κυρίως η μορφολογία των κατακρημνισμάτων  $\gamma'$ , συμφωνούσαν έντονα με τα πραγματικά και η εφαρμογή της παραπάνω μεθοδολογίας στη κατεργασία της γήρανσης υπερκραμάτων νικελίου ήταν επιτυχής. Αποδείχθηκε, έτσι, ότι η μεθοδολογία MKS και το μοντέλο GPR μπορούν να εφαρμοστούν σε πειραματικά δεδομένα.

Σε μια παρόμοια περίπτωση με την παρούσα εργασία, η γενική μεθοδολογία αυτή εφαρμόστηκε στο φαινόμενο της στατικής ανακρυστάλλωσης, όπως αυτό μοντελοποιείται μέσω «cellular automata» μοντέλων [61]. Βέβαια, αυτή η εφαρμογή δεν αφορά σε συγκεκριμένο υλικό, αλλά γενικεύεται σε μέταλλα που κρυσταλλώνονται στο FCC σύστημα. Δημιουργήθηκαν 12 μοντέλα GPAR για την αποτύπωση των 12 εξελισσόμενων PCs. Τα αποτελέσματα της συνεργατικής εφαρμογής της MKS και μεθόδων που βασίζονται στις Γκαουσιανές διαδικασίες είναι ξανά ενθαρρυντικά. Ωστόσο, η κατασκευή τόσο πολλών μοντέλων δεν είναι πάντα αναγκαία και επιθυμητή, ειδικά αν το σύνολο δεδομένων των στατιστικών είναι πολύ μικρότερο. Σε αυτό το ενδεχόμενο οδηγούμαστε αν αντιμετωπίσουμε τη μοντελοποίηση της ανακρυστάλλωσης ως ένα πρόβλημα πρόβλεψης της τελικής μικροδομής για συγκεκριμένες παραμέτρους επεξεργασίας.

Μια πρόσφατη μελέτη [56] αντιμετώπισε το πρόβλημα της αντιστροφής των συνδέσεων κατεργασίας-μικροδομής που έχουν αναπτυχθεί με τη μέθοδο «phase-field», μέσω μιας παραλλαγής της Μπεϋζιανής βελτιστοποίησης [52], [62]. Αυτή διευκολύνει την εύρεση ενός ολικού ακρότατου στο χώρο των παραμέτρων επεξεργασίας, το οποίο θα πληροί ορισμένες προϋποθέσεις που έχουν τεθεί. Έτσι, ελαχιστοποιούνται τα πειράματα που χρειάζονται για να καταλήξουμε στις παραμέτρους που οδηγούν στο αποδεκτό ή βέλτιστο αποτέλεσμα. Πράγματι, η «batch Bayesian optimization» αποδείχθηκε ανώτερη της κανονικής, κυρίως λόγω της ικανότητας *παραλληλοποίησης* των διαδικασιών βελτιστοποίησης. Η προσέγγιση αυτή εφαρμόζεται σε δύο μελέτες περίπτωσης. Η πρώτη αφορά σε ένα υπολογιστικά απλοϊκό πρόβλημα μοντελοποίησης του φαινομένου «spinodal decomposition»

σε δύο φάσεις. Πέρα από το κλάσμα όγκου των δύο φάσεων, αποδείχθηκε ότι πρέπει να ληφθούν υπόψη και ορισμένα χαρακτηριστικά μεγέθη αυτών ως ένα περαιτέρω κριτήριο βελτιστοποίησης. Η δεύτερη μελέτη περίπτωσης αφορά σε ένα υπολογιστικά σύνθετο πρόβλημα μοντελοποίησης του «spinodal decomposition» με τρεις παρούσες φάσεις. Σε αυτή, η απόδοση άνισων, αντί για ίσων, συντελεστών βαρύτητας σε κάθε κριτήριο βελτιστοποίησης αποδείχθηκε η καλύτερη προσέγγιση. Η μεθοδολογία που παρουσιάστηκε, σε συνδυασμό με μια πιο σύνθετη αξιοποίηση της γνώσης της μικροδομής, έχει εκπληκτικές δυνατότητες σχετικά με την επιτάχυνση του υπολογιστικού σχεδιασμού υλικών.

Η βαθιά μάθηση και τα νευρωνικά δίκτυα επίσης εμφανίζονται στη βιβλιογραφία της υποκατάστατης μοντελοποίησης του μοντέλου «phase-field». Στην πρώτη μελέτη που θα αναλύσουμε, δημιουργείται ένα υποκατάστατο μοντέλο με βάση ξανά την μεθοδολογία MKS [63]. Η εξέλιξη της μικροδομής, σε αυτή την περίπτωση αντιμετωπίζεται ως ένα πρόβλημα χρονοσειρών. Γι' αυτό, εφαρμόζονται τα «Long Short-Term Memory» (LSTM) νευρωνικά δίκτυα, τα οποία είναι υποσύνολο των «Recurrent Neural Networks» (RNNs). Αυτά ενδείκνυνται για την επεξεργασία και την πρόβλεψη δεδομένων διαδοχικού χαρακτήρα (όταν τα δεδομένα σε ένα σύνολο δεδομένων αλληλεξαρτώνται) [44]. Τα δεδομένα που προκύπτουν από τη μοντελοποίηση «phase-field» έχουν ακριβώς αυτόν τον χαρακτήρα. Αποτελούνται από χρονοσειρές εικόνων που περιγράφουν την εξέλιξη της μικροδομής. Παρουσιάζεται, λοιπόν, μια μεθοδολογία υποκατάστατης μοντελοποίησης που αντιμετωπίζει το φαινόμενο του «spinodal decomposition» ενός διφασικού μίγματος ως μελέτη περίπτωσης. Η ποσοτικοποίηση των μικροδομών γίνεται και πάλι μέσω των «two-point statistics», με τις διαστάσεις τους να μειώνονται μέσω της PCA. Οι παράμετροι εισόδου του δικτύου ήταν η συγκέντρωση της μίας φάσης, οι κινητικότητες των δύο φάσεων και η χρονοσειρά των PCs των προηγούμενων μικροδομών. Τα δεδομένα προπόνησης είναι πολύ περισσότερα από τις προηγούμενες προσεγγίσεις ( 5000 προσομοιώσεις με 60 μικροδομές η κάθε μία). Τα PCs που χρησιμοποιούνται είναι, επίσης, περισσότερα (10 σε σχέση με τα 2-3 των προηγούμενων προσεγγίσεων). Η ακρίβεια του υποκατάστατου μοντέλου είναι σχετικά μεγάλη με μόλις 5% μείωση συγκριτικά με το κανονικό μοντέλο. Το βασικό πλεονέκτημα, βέβαια, είναι η μείωση του υπολογιστικού κόστους. Το υποκατάστατο μοντέλο μπορεί να προβλέψει μια σειρά από μεταβαλλόμενα PCs σε 0.01 s, ενώ το αρχικό μοντέλο χρειαζόταν 12 λεπτά σε 8 κόμβους με 16 επεξεργαστές ο καθ' ένας. Η συγκεκριμένη μεθοδολογία ενδείκνυται για μεγάλα εύρη τιμών των παραμέτρων όπου δεν υπάρχει κάποια εκ των προτέρων γνώση για το υπο-εύρος με τις βέλτιστες ιδιότητες. Βέβαια, η προσέγγιση αυτή έχει ορισμένα μειονεκτήματα τα οποία

μοιράζεται με την επόμενη μεθοδολογία βαθιάς μάθησης. Αυτά αναλύονται στο τέλος του υποκεφαλαίου.

Μια διαφορετική προσέγγιση παρουσιάστηκε με βάση την εφαρμογή της βαθιάς μάθησης για την υποκατάστατη μοντελοποίηση μέσω της προσέγγισης του μηχανισμού που οδηγεί στις τελικές μορφολογίες ισορροπίας, δηλαδή την ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας [64]. Ένα βαθύ νευρωνικό δίκτυο προπονείται με δεδομένα εισόδου διάφορες υπολογιστικές παραμέτρους και με δεδομένα εξόδου τις διαφορετικές ελάχιστες ενέργειες για κάθε συνδυασμό παραμέτρων. Στη συνέχεια, με επαναληπτικό τρόπο, δοκιμάζονται υπολογιστικές παράμετροι που μπορούν να οδηγήσουν σε αυτή την ελαχιστοποίηση. Αν δεν οδηγήσουν, προστίθενται στα δεδομένα προπόνησης ενός ενημερωμένου πλέον υποκατάστατου μοντέλου. Η μεθοδολογία αυτή εφαρμόζεται στην περίπτωση μελέτης της γήρανσης κραμάτων Mg-Y για την πρόβλεψη της μορφολογίας ισορροπίας των β' κατακρημνισμάτων. Πράγματι, οι διαφορές μεταξύ των μορφολογιών που προκύπτουν από το μοντέλο «phase-field» και από το υποκατάστατο είναι πολύ μικρές.

Σε μια πρόσφατη εφαρμογή της βαθιάς μάθησης, προτάθηκαν ξανά τα αναδρομικά νευρωνικά δίκτυα (RNNs) ως υποκατάστατα μοντέλα [65]. Αυτή η προσπάθεια αφορά στη μοντελοποίηση τεσσάρων σημαντικών φαινομένων εξέλιξης της μικροδομής: (a) «plane wave propagation», (b) «grain growth», (c) «spinodal decomposition», και (d) «dendritic crystal growth». Εφαρμόζεται ένα καινοτόμο μοντέλο, το Eidetic 3D LSTM [66], που ενσωματώνει τις τρισδιάστατες συνελίξεις (λειτουργία των συνελκτικών νευρωνικών δικτύων, τα οποία εφαρμόζονται ευρέως στην υπολογιστική όραση) στα LSTMs. Η αρχιτεκτονική αυτού του μοντέλου σχεδιάστηκε με κύριο στόχο την αύξηση της απόδοσης στην πρόβλεψη βίντεο, και έτσι κρίθηκε ιδανικό και για τη συγκεκριμένη περίπτωση. Το δίκτυο καλείται σκόπιμα να προβλέψει την πολύ πιο αργή εξέλιξη σε μεγαλύτερα χρονικά διαστήματα από αυτά των δεδομένων προπόνησης (εώς 10 φορές μεγαλύτερα). Οι οπτικές διαφορές μεταξύ των προβλέψεων του δικτύου και του «phase-field» ήταν ελάχιστες νωρίς. Όσον αφορά στα φαινόμενα του «grain growth» και του «spinodal decomposition», το μοντέλο κατάφερε να προβλέψει με σχετική ακρίβεια την πολύ πιο αργή εξέλιξη αργά στο εκάστοτε φαινόμενο, αν και οι διαφορές ήταν σίγουρα πιο έντονες από νωρίς στην εξέλιξη. Στην ανάπτυξη των κόκκων, για παράδειγμα, η μέση απόδοση RMSE αυξάνεται και σταθεροποιείται στο 20%, ενώ η SSIM μειώνεται εώς το 0.4. Οι διαφορές αργά στην εξέλιξη ήταν ιδιαίτερα σημαντικές στην περίπτωση του «dendrite growth». Ωστόσο, αυτές οι διαφορές μπορούν να μειωθούν αν συμπεριληφθούν αντίστοιχα δεδομένα στην εκπαίδευση. Η εφαρμογή αυτή του

υποκατάστατου μοντέλου είναι πιο υπολογιστικά συνετή από το μοντέλο «phase-field». Πραγματοποιήθηκαν, επίσης, σχετικά επιτυχημένες προσπάθειες εφαρμογής του δικτύου για την πρόβλεψη της εξέλιξης σε συστήματα μεγαλύτερων διαστάσεων (από 64x64 σε 256x256) και διαφορετικών αρχικών μικροδομών από αυτές με τις οποίες έχει προπονηθεί. Μπορεί, ακόμη, να εφαρμοστεί με χρονικά βήματα από 7 φορές (στην περίπτωση της δενδριτικής ανάπτυξης) μέχρι 370 φορές (στην περίπτωση του «spinodal decomposition») μεγαλύτερα από αυτά των κλασικών υπολογιστικών τεχνικών. Αποδείχθηκε, βέβαια, ότι η αύξηση των time steps στα δεδομένα προπόνησης πέρα από τις 20 εικόνες ανά χρονοσειρά δεν αυξάνει την απόδοση του δικτύου. Το δίκτυο μπορεί επίσης να προβλέψει τις στατιστικές ιδιότητες των μικροδομών έως αργά στην εξέλιξη. Η μεθοδολογία που παρουσιάστηκε αποδεικνύει τις δυνατότητες της βαθιάς μάθησης στην πρόβλεψη της εξέλιξης της μικροδομής.

Ωστόσο, οι μεθοδολογίες με βάση τη βαθιά μάθηση έχουν ορισμένα μειονεκτήματα. Για να αξιοποιηθεί, αρχικά, μια τέτοια μεθοδολογία από επιστήμονες και μηχανικούς, θα πρέπει:

- ο να μπορεί να εφαρμοστεί για τη δημιουργία ενός μοντέλου που θα ανταποκρίνεται σε πολλά διαφορετικά προβλήματα «phase-field», με διαφορετικές παραμέτρους και αρχικές μικροδομές, ή
- ο να καθίσταται τόσο επαναλήψιμη που να μπορεί να εφαρμόζεται για την υποκατάστατη μοντελοποίηση συγκεκριμένων προβλημάτων «phase-field», με συγκεκριμένες παραμέτρους και αρχικές μικροδομές.

Το πρώτο ενδεχόμενο συναντά πολλαπλές προκλήσεις, κυρίως επειδή το εύρος των πιθανών υπολογιστικών ή πειραματικών παραμέτρων, αρχικών μικροδομών και φαινομένων είναι τεράστιο. Η δημιουργία μοντέλων βαθιάς μάθησης που θα αφορούν σε ένα συγκεκριμένο φαινόμενο σε μια συγκεκριμένη κατηγορία υλικών δεν είναι αδύνατη, αλλά απαιτούνται σημαντικοί υπολογιστικοί πόροι και ανθρώπινο δυναμικό [67]. Επίσης, η μέθοδος «phase-field» δε βρίσκεται σε επίπεδα ωριμότητας που θα επέτρεπαν τη συνετή εφαρμογή της σε ένα τόσο μεγάλο εύρος παραμέτρων για την παραγωγή των δεδομένων προπόνησης. Αναφορικά με την τρίτη προσέγγιση βαθιάς μάθησης που αναλύθηκε [65], παρόλο που υπάρχουν σοβαρές ενδείξεις ότι το δίκτυο μπορεί να εφαρμοστεί σε συστήματα διαφορετικών αρχικών μικροδομών από αυτά των δεδομένων εκπαίδευσης, η επιτυχημένη εφαρμογή του σε προβλήματα μοντελοποίησης «phase-field» με διαφορετικές παραμέτρους είναι σχετικά απίθανη (για παράδειγμα, στην περίπτωση του grain growth προπονήθηκε με τις ίδιες παραμέτρους για κάθε χρονοσειρά). Βέβαια, αυτά τα αποτελέσματα δε μπορούν να

γενικευθούν για όλες τις πιθανές προσεγγίσεις με βάση τη βαθιά μάθηση. Όσον αφορά στο δεύτερο ενδεχόμενο, μια μέθοδος βασισμένη στη βαθιά μάθηση ενδείκνυται για μεγάλα εύρη (κυρίως υπολογιστικών) παραμέτρων, όπου το μοντέλο «phase-field» θα είναι αξιόπιστο. Τα περισσότερα προβλήματα «phase-field» σχετίζονται, όμως, με ένα περιορισμένο εύρος παραμέτρων. Ακόμη, η συλλογή των δεδομένων προπόνησης, σε αυτή την περίπτωση, μπορεί να καθίσταται υπολογιστικά αφόρητη. Λαμβάνοντας υπόψη και το υπολογιστικό κόστος της προπόνησης του δικτύου, η βαθιά μάθηση δεν ενδείκνυται για την πλειοψηφία των προβλημάτων «phase-field». Για περιορισμένα εύρη παραμέτρων, η GPR είναι η ιδανική προσέγγιση, καθώς εκεί δεν απαιτείται η παραγωγή πολλών σημείων δεδομένων. Επίσης, ο υπολογισμός της αβεβαιότητας είναι σημαντικός στον τομέα του σχεδιασμού υλικών [49]. Οι μεθοδολογίες που παρουσιάστηκαν δεν τον διευκολύνουν. Μπορούν, βέβαια, να εφαρμοστούν τα Μπεϋζιανά νευρωνικά δίκτυα, που έχουν τη δυνατότητα υπολογισμού της αβεβαιότητας. Όμως, αυτά είναι πιο υπολογιστικά ακριβά και η απόδοσή τους μειώνεται με την αύξηση του μεγέθους του συνόλου δεδομένων προπόνησης. Αντιλαμβανόμαστε, λοιπόν, τα βασικά μειονεκτήματα των μεθόδων βαθιάς μάθησης συγκριτικά με μεθόδους όπως η GPR αναφορικά με την υποκατάστατη μοντελοποίηση «phase-field».





# 3 Πειραματικό Μέρος

---

## 3.1 Μοντέλο Phase-Field

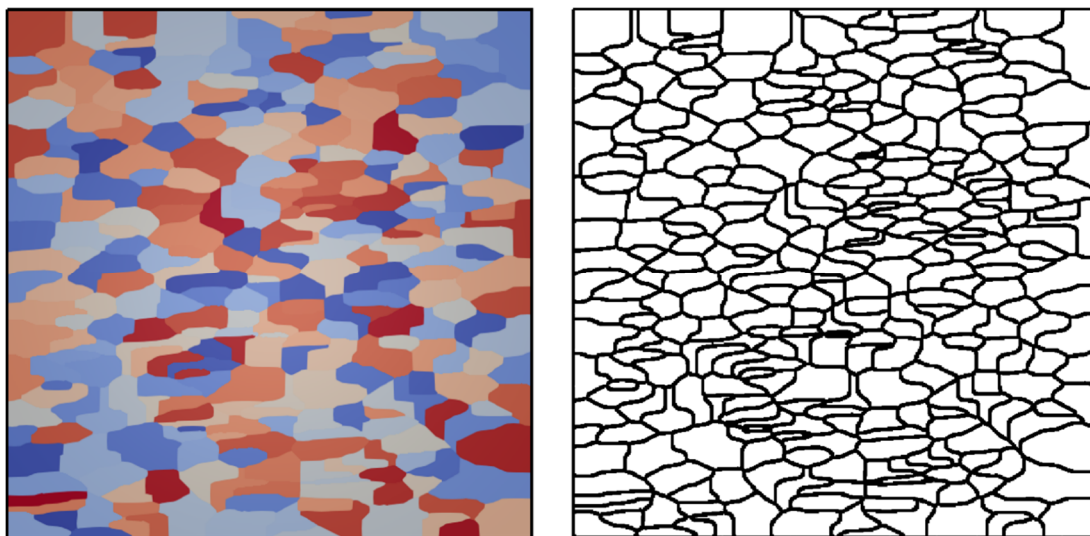
Για τη μοντελοποίηση της ανακρυστάλλωσης μέσω του λογισμικού Micress, συντάσσουμε ένα αρχείο που καλείται «driving file» και είναι ένα αρχείο κειμένου. Αυτό εμπεριέχει όλα τα δεδομένα εισόδου της προσομοίωσης. Επίσης, μπορεί να διαχωριστεί σε μέρη που αφορούν σε συγκεκριμένες πτυχές της προσομοίωσης. Αναλύουμε την πειραματική διάταξη του μοντέλου «phase-field», παρουσιάζοντας τις πιο σημαντικές πτυχές του.

### 3.1.1 Αρχική Μικροδομή

Τα χαρακτηριστικά του πλέγματος έχουν σημαντική επιρροή στο αποτέλεσμα της προσομοίωσης. Τα μεγέθη που πρέπει να οριστούν είναι κυρίως οι διαστάσεις του πλέγματος και η αντιστοίχισή τους με την περιοχή της μικροδομής. Η αντιστοίχιση αυτή δεν αφορά μόνο την οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων, αλλά καθορίζει και την επιρροή διάφορων κινητικών παραμέτρων στο αποτέλεσμα. Στην περίπτωση μας, και αφού πρόκειται για δισδιάστατη προσομοίωση, ορίζουμε ένα πλέγμα διαστάσεων  $600 \times 1 \times 600$  κελιών με  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.72 \mu m$ . Οπότε, το χωρίο που προκύπτει έχει διαστάσεις  $430 \times 430 \mu m$ . Φυσικά, η ανάλυση του πλέγματος θα πρέπει να ισορροπηθεί με το χρόνο που απαιτείται για μια ολοκληρωμένη προσομοίωση, θυσιάζοντας την υπολογιστική ακρίβεια για γρήγορα αλλά χρήσιμα αποτελέσματα.

Η αρχική μικροδομή κατασκευάζεται μέσω του λογισμικού DREAM.3D [68], εμπεριέχει 144 κόκκους της FCC φάσης του κράματος και προσεγγίζει τη μικροδομή ενός παραμορφωμένου μονοφασικού υλικού. Το αρχείο που απαιτείται για τον ορισμό της αρχικής μικροδομής είναι αρχείο VTK της μορφής ASCII. Αυτό μεταφέρει στο λογισμικό MICRESS τις πληροφορίες σχετικά με τον αριθμό, τη θέση και το σχήμα των κόκκων που απαρτίζουν τη μικροδομή. Ορίζουμε, επίσης, τη μέση πυκνότητα διαταραχών ως  $10^{16} m^{-2}$  [69] και τις αρχικές συγκεντρώσεις των Cu, Ni και Fe ως 10, 1.5 και 1 w. t. % αντίστοιχα. Οι τιμές των μεταβλητών στα όρια του χωρίου της μικροδομής να ισούνται με αυτές στα αντίθετα όρια. Το πάχος των ορίων των κόκκων ορίζεται ίσο με 5.5 υπολογιστικά κελιά, δηλαδή αρκετά

μεγαλύτερο από το πραγματικό, για χάρη της αριθμητικής ακρίβειας και για τη διευκόλυνση της μετέπειτα τμηματοποίησης των μικροδομών.



Σχήμα 12: Η αρχική μικροδομή όπως οπτικοποιείται μέσω του λογισμικού Paraview (αριστερά) και του λογισμικού DP\_MICRESS (δεξιά).

### 3.1.2 Υπολογιστικές Παράμετροι

Οι δύο φάσεις που είναι τεχνικά παρούσες στην προσομοίωση είναι το τήγμα και η FCC\_A1, οι οποίες αντιστοιχίζονται με τις αντίστοιχες φάσεις των θερμοδυναμικών και κινητικών βάσεων δεδομένων που αξιοποιούμε. Στις θερμοδυναμικές βάσεις δεδομένων «Calphad» περιέχονται πληροφορίες για τις πυκνότητες μοριακών ελεύθερων ενεργειών Gibbs και για τους γραμμομοριακούς όγκους των φάσεων. Έτσι, παρέχουν μια βάση για τη ρεαλιστική μοντελοποίηση των θερμοδυναμικά εξαρτημένων κατεργασιών, όπως η ανακρυστάλλωση. Στην παρούσα μελέτη, χρησιμοποιούμε τις βάσεις δεδομένων TCCU3 και MOBCU3, που προσφέρονται μέσω του λογισμικού Thermo-Calc [70], [71]. Δημιουργείται το αρχείο GES, το οποίο περιέχει τις πληροφορίες για το σύστημα Cu-Ni-Fe-Mn. Προσδιορίζουμε τους γραμμομοριακούς όγκους των δύο φάσεων (τυπικά για τη φάση του τήγματος, εφόσον είναι απύσα σε όλες τις συνθήκες προσομοίωσης). Αυτοί χρησιμοποιούνται για την μετατροπή των θερμοδυναμικών δεδομένων από μονάδες που αφορούν moles σε μονάδες που αφορούν όγκους. Επίσης, συνδυάζοντας τις δύο βάσεις, έχουμε πρόσβαση σε δεδομένα που αφορούν τους συντελεστές διάχυσης για όλα τα συστατικά σε κάθε φάση, και για κάθε θερμοκρασία. Το χρονικό διάστημα για την ενημέρωση των συντελεστών από τη βάση δεδομένων ορίζεται στα 50 seconds.

Όταν τα μέταλλα παραμορφώνονται πλαστικά, οι διαταραχές που βρίσκονται στη μικροδομή αυξάνονται δραστικά. Με την εφαρμογή μιας τάσης, και τη μετακίνηση των διαταραχών, προκύπτει ότι αυτές παράλληλα αυξάνονται. Η αποθηκευμένη ενέργεια, τότε, της μικροδομής προσεγγίζεται από τη σχέση:

$$E_{RX} = \alpha \cdot G \cdot b^2 \cdot \rho \quad (31)$$

όπου  $\alpha$  είναι ο συντελεστής αλληλεπίδρασης των διαταραχών,  $G$  είναι το μέτρο διάτμησης,  $b$  είναι το μέτρο του διανύσματος Burgers και  $\rho$  είναι η πυκνότητα των διαταραχών [69]. Συνήθως, έχουμε ότι  $\alpha = 0.5$ , όπως και στην περίπτωση μας. Κατά τη μετέπειτα θερμική κατεργασία, συνήθως λαμβάνει χώρα το φαινόμενο της ανακρυστάλλωσης. Σχηματίζονται νέοι κόκκοι με σημαντικά μειωμένες πυκνότητες διαταραχών. Για να διαχωρίσουμε τους νέους ανακρυσταλλωμένους κόκκους, στην περίπτωση μας, από τους αρχικούς, θέτουμε το όριο των  $10^{12}$  διαταραχών ανά  $m^2$  [72]. Οι κόκκοι με μικρότερη πυκνότητα διαταραχών από αυτή θεωρούνται νέοι. Η μείωση της αποθηκευμένης ενέργειας, μέσω της ανάπτυξης των νέων κόκκων, αποτελεί τη βασική κινούσα δύναμη του φαινομένου, εκτός της καμπυλότητας των ορίων των κόκκων [73].

Αξιοποιούμε την εξίσωση (31) ορίζοντας μια μέση πυκνότητα διαταραχών στη μικροδομή ίση με  $10^{16}$  διαταραχές ανά  $m^2$ , καθώς προσεγγίζουμε τη μέση εξέλιξη της μικροδομής χωρίς να επικεντρωνόμαστε σε συγκεκριμένα σημεία της. Η μέση πυκνότητα αντιστοιχίζεται με τη μέση αποθηκευμένη ενέργεια. Θέτουμε το  $G$  ίσο με  $47000 \text{ MPa}$  [74] και το  $b$  ίσο με  $0.255625$  [75]. Επίσης, ενεργοποιούμε την κίνηση των ορίων των αρχικών κόκκων, λαμβάνοντας υπόψη τη διαφορά ενέργειας μεταξύ τους στην ολική κινούσα δύναμη. Αναφορικά με την ανισοτροπία του υλικού, θεωρούμε κυβική συμμετρία λόγω της εδροκεντρωμένης κυβικής δομής του μονοφασικού υλικού.

Η ανακρυστάλλωση είναι ένα φαινόμενο που εξαρτάται και από τη θερμοκρασία και από τη διάρκεια της ανόπτησης. Η πρόοδος της περιγράφεται συχνά από τη σχέση Avrami που συνδέει το κλάσμα της μικροδομής που έχει ανακρυσταλλωθεί ( $X$ ) με τη διάρκεια της ανόπτησης ( $t$ ). Πιο συγκεκριμένα, αυτή έχει ως εξής:

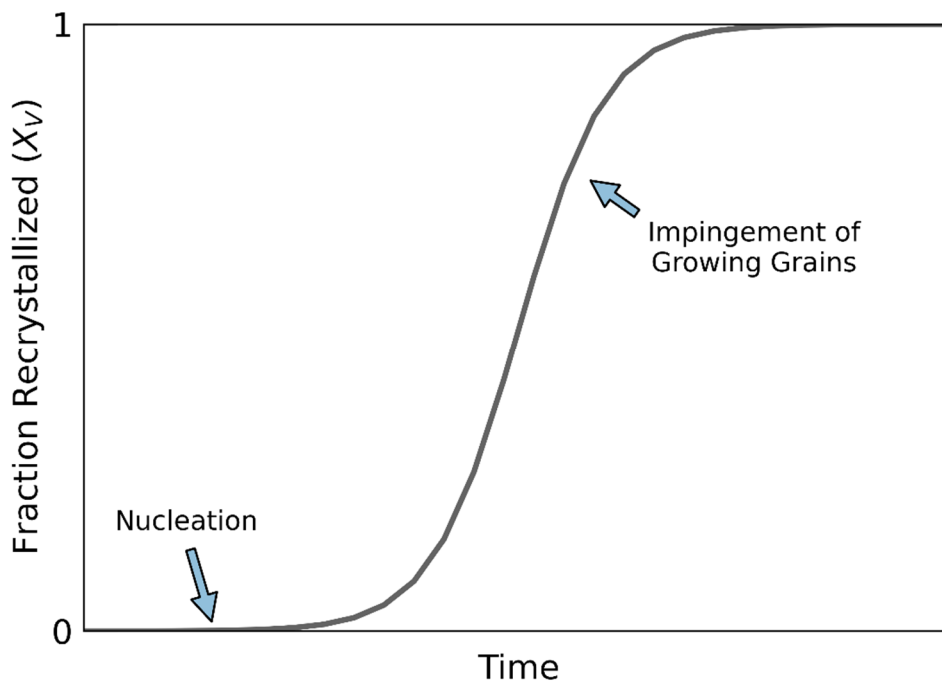
$$X = 1 - \exp\left(-\beta \left(\frac{t}{t_{0.5}}\right)^n\right) \quad (32)$$

όπου  $\beta = -\ln(0.5)$ ,  $t_{0.5}$  είναι ο χρόνος που απαιτείται για να προκύψει μια 50% ανακρυσταλλωμένη μικροδομή και  $n$  είναι ο εκθέτης Avrami ( $n = 2$  για τη δυσδιάστατη θεώρηση). Η οπτικοποίηση της προόδου της ανακρυστάλλωσης γίνεται μέσω ενός

γραφήματος που παρουσιάζει το ανακρυσταλλωμένο κλάσμα όγκου του υλικού ( $X_V$ ) ως συνάρτηση του χρόνου, όπως παρατηρούμε στο Σχήμα 13. Η συνάρτηση συνήθως προσεγγίζει τη σιγμοειδή συνάρτηση. Υπάρχει, αρχικά, ένα χρονικό διάστημα πριν ανιχνευτεί οποιαδήποτε ανακρυστάλλωση. Έπειτα, ακολουθεί μια αύξηση του ρυθμού της ανακρυστάλλωσης (αυξημένη κλίση της καμπύλης), μια γραμμική μεταβολή του ανακρυσταλλωμένου κλάσματος όγκου και, τέλος, μια μείωση του ρυθμού που ακολουθείται από το πέρας του φαινομένου.

Οι πυρήνες των κόκκων ανακρυστάλλωσης της fcc φάσης τοποθετούνται στην μικροδομή με βάση το γεγονός ότι η πιθανότητα πυρήνωσης στα όρια των κόκκων είναι υψηλότερη από αυτή στο εσωτερικό των κόκκων. Επίσης, έχουν παρατηρηθεί νέοι ανακρυσταλλωμένοι κόκκοι και στα τριμερή σημεία των ορίων κόκκων οπότε, γι' αυτό, λαμβάνονται υπόψη. Βέβαια, η πυρήνωση κατά την ανακρυστάλλωση δε συμβαδίζει με την πυρήνωση υπό την κλασσική θερμοδυναμική θεώρηση. Ο πυρήνας ενός νέου κόκκου κατά την ανακρυστάλλωση δε σχηματίζεται στην έναρξη του φαινομένου, αλλά προϋπάρχει ήδη στην παραμορφωμένη μικροδομή [69].

Ως φάση αναφοράς, δηλαδή φάση στα όρια κόκκων της οποίας θα γίνει η πυρήνωση, ορίζεται η fcc φάση. Ακόμη, οι μετασταθείς πυρήνες αγνοούνται πλήρως, καθώς δεν αφορούν στο φαινόμενο της ανακρυστάλλωσης. Για να διευκολύνουμε την προπόνηση ενός ανθεκτικού



Σχήμα 13: Το ανακρυσταλλωμένο κλάσμα όγκου της μικροδομής ως συνάρτηση του λογαρίθμου του χρόνου σε μια συνηθισμένη περίπτωση ισοθερμοκρασιακής ανακρυστάλλωσης. Το σχήμα προσαρμόζεται από το [69].

στην τύχη υποκατάστατου μοντέλου, προσθέτουμε θόρυβο κατά την πυρήνωση σύμφωνα με την εξής σχέση:

$$\Delta G \leftarrow [1 + k(\text{random} - 0.5)]\Delta G \quad (33)$$

όπου  $k = 10^{-3}$ ,  $0 \leq \text{random} \leq 1$  μια τυχαία τιμή και  $\Delta G$  η κινούσα δύναμη για την πυρήνωση. Το θερμοκρασιακό εύρος της κυμαίνεται από  $870K$  έως  $1125 K$ . Προσεγγίζει, δηλαδή, το εύρος των τιμών για τις οποίες μοντελοποιούμε την ανακρυστάλλωση. Η πυκνότητα των διαταραχών για τους νέους κόκκους θέτεται ίση με  $10^{12} m^{-2}$  [72], ενώ η αρχική ακτίνα ίση με  $0.5 \mu m$ . Ωστόσο, όσον αφορά στην γενική πορεία της πυρήνωσης, τα σημεία της και οι ρυθμοί της δεν μπορούν να προσδιοριστούν με ακρίβεια πειραματικά. Έτσι, έχουμε ελλιπή εικόνα για τον αριθμό των πυρήνων και για τη μεταβολή του αριθμού αυτού με το πέρασμα του χρόνου.

Στη συνέχεια, προσδιορίζουμε τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των φάσεων που έχουν οριστεί προηγουμένως. Εφόσον η φάση του τήγματος δεν είναι παρούσα σε καμιά από τις συνθήκες προσομοίωσης, επιλέγουμε να αγνοήσουμε την αλληλεπίδρασή της με την fcc φάση. Οπότε η μόνη αλληλεπίδραση που ορίζεται είναι αυτή της fcc φάσης με την ίδια. Η ενέργεια των ορίων των κόκκων θεωρείται ίση με  $0.625 * 10^{-4} J/m^2$  [76], ενώ η κινητικότητά τους είναι αύξουσα συνάρτηση της θερμοκρασίας και κυμαίνεται στο εύρος από  $0.3 * 10^{-6}$  έως  $0.8 * 10^{-6} cm^4/(J * s)$ . Η ταχύτητα ενός ορίου κόκκου μεγάλης κλίσης προσδιορίζεται από τη σχέση:

$$v = \dot{M} \cdot P \quad (34)$$

όπου  $M$  η κινητικότητα του ορίου και  $P$  η κινούσα δύναμη της ανακρυστάλλωσης που είναι περίπου ίση με την αποθηκευμένη ενέργεια  $E_{RX}$  [69].

Όσον αφορά στα σημεία στον άξονα του χρόνου, στα οποία προσδιορίζουμε τη μικροδομή και τα υπόλοιπα σχετικά μεγέθη, αυτά προσαρμόζονται στη διάρκεια της ανόπτησης στην εκάστοτε προσομοίωση. Γενικά, τα χρονικά βήματα στην αρχή της προσομοίωσης είναι περισσότερα, ώστε να ελέγξουμε την ποιότητά της. Στη συνέχεια, θεωρούμε ένα χρονικό διάστημα  $100$  ή  $200 seconds$  ανάμεσα στα χρονικά βήματα. Όταν πλησιάζουμε όμως τη συνολική διάρκεια της ανόπτησης, το διάστημα αυτό μειώνεται στα  $5$  ή  $10 seconds$ , ώστε να έχουμε καλύτερη εικόνα για την κατάσταση της μικροδομής στο χρονικό εκείνο σημείο. Η αριθμητική επίλυση της εξίσωσης (8) βασίζεται στις πεπερασμένες διαφορές, οπότε προκύπτει ένα σφάλμα λόγω της διακριτοποίησης του πλέγματος. Αυτό μπορεί να

επηρεάσει αρνητικά τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, μειώνοντας τις ταχύτητες των ορίων κόκκων. Το μέγεθος του σφάλματος, επίσης, είναι αντιστρόφως ανάλογο του αριθμού των κελιών που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της διεπιφάνειας. Ωστόσο, ο ορισμός πολλών κελιών αυξάνει το υπολογιστικό κόστος. Γι' αυτό, χρησιμοποιούμε μια βελτιωμένη μεθοδολογία επίλυσης της εξίσωσης «phase-field» που αντιμετωπίζει το παραπάνω πρόβλημα [22]. Για τη μείωση του υπολογιστικού κόστους των προσομοιώσεων, αξιοποιείται μερικώς η δυνατότητα για παράλληλους υπολογισμούς με την μνήμη να κατανέμεται σε διαφορετικές υπολογιστικές διεργασίες ταυτόχρονα.

Πίνακας 2: Βασικές παράμετροι εισόδου για το μοντέλο «phase-field». [69], [72], [76]

Παράμετρος εισόδου	Τιμή
Διαστάσεις χωρίου	600x600 κελιά (430x430 $\mu m$ )
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	0.72 $\mu m$
Θερμοκρασία	870 – 1125 <i>Kelvin</i>
Διάρκεια ανόπτησης	1200 – 9000 <i>seconds</i>
Αρχική πυκνότητα διαταραχών	$10^{16} m^{-2}$
Πυκνότητα διαταραχών νέων κόκκων	$10^{12} m^{-2}$
Μέτρο διάτμησης	47 <i>GPa</i>
Μέτρο διανύσματος Burgers	0.255625
Ενέργεια διεπιφανειών	$0.625 * 10^{-4} J/m^2$
Συντελεστής κινητικής διεπιφανειών	$0.3 * 10^{-6}$ έως $0.8 * 10^{-6} cm^4/(J * s)$
Πάχος διεπιφανειών	5.5 κελιά

Όλα τα υπολογιστικά πειράματα της μοντελοποίησης «phase-field» λαμβάνουν χώρα σε έναν υπολογιστή με ένα πυρήνα επεξεργαστή 3.10GHz Inter® Core™ i9-7940X (CPU) και 128 GB RAM μνήμη RAM. Η κοινή μνήμη κατανέμεται μέσω του OpenMP [77], ενός πρότυπου API για την ανάπτυξη παράλληλων εφαρμογών, σε 5 κοινά υπολογιστικά νήματα.

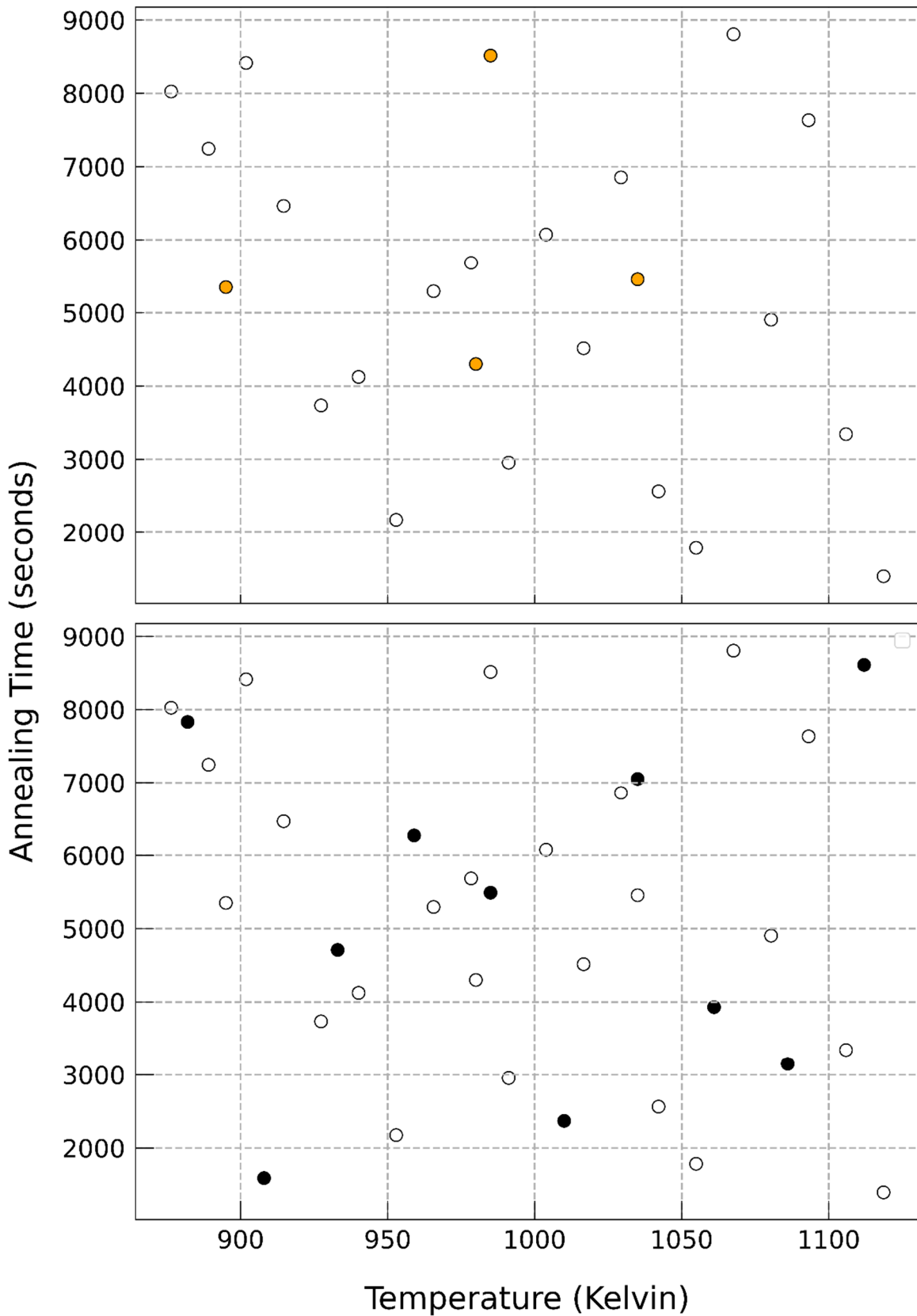
### 3.1.3 Latin Hypercube Sampling

Προσδιορίζουμε, αρχικά, τα σημεία του χώρου των παραμέτρων στα οποία θα προβλέψουμε την τελική μικροδομή, μέσω της μεθόδου «phase-field», και θα προπονήσουμε το υποκατάστατο μοντέλο. Μια καλή κατανομή των σημείων στο χώρο θα διευκολύνει τη δημιουργία ενός χρήσιμου υποκατάστατου μοντέλου με σχετικά λίγα δεδομένα προπόνησης

[7]. Γι' αυτό το σκοπό, εφαρμόζονται ευρέως οι μέθοδοι δειγματοληψίας (sampling). Στη συγκεκριμένη εργασία, αξιοποιούμε τη μέθοδο «Latin Hypercube Sampling» (LHS), όπως αυτή εφαρμόζεται στο υπολογιστικό πακέτο Surrogate Modeling Toolbox (SMT) [78]. Είναι μια δημοφιλής στατιστική μέθοδος που δημιουργεί μια ψευδοτυχαία κατανομή σημείων δειγματοληψίας. Η ευρεία εφαρμογή της σε προβλήματα υποκατάστατης μοντελοποίησης πηγάζει από την απλότητά της και την ικανότητά της να ανταποκρίνεται σε πολυδιάστατους παραμετρικούς χώρους. Έχοντας ορίσει τον παραμετρικό χώρο και τον αριθμό των σημείων που επιθυμούμε ως αποτέλεσμα, σύμφωνα με τη μέθοδο LHS, ακολουθούνται τα εξής βήματα:

- Τα σημεία τοποθετούνται στο κέντρο των διαστημάτων δειγματοληψίας,
- Η ελάχιστη απόσταση μεταξύ των σημείων μεγιστοποιείται και το κάθε ένα τοποθετείται τυχαία στο αντίστοιχο διάστημα,
- Η ελάχιστη απόσταση μεταξύ των σημείων μεγιστοποιείται και το κάθε ένα τοποθετείται στο κέντρο του τωρινού του διαστήματος,
- Ο μέγιστος συντελεστής συσχέτισης ελαχιστοποιείται και
- Η κατανομή των σημείων βελτιστοποιείται μέσω του αλγόριθμου ESE [79].

Εφαρμόζουμε, λοιπόν, τη μέθοδο LHS στο δυσδιάστατο χώρο της θερμοκρασίας και της διάρκειας της ανόπτησης. Συγκεκριμένα, το διάστημα που αφορά τη θερμοκρασία είναι το [870, 1125] (Kelvin) και το διάστημα που αφορά τη διάρκεια είναι το [1200, 9000] (seconds). Στα σημεία που θα προσδιοριστούν από την LHS, θα προβλεφθεί η τελική μικροδομή μέσω της μεθόδου «phase-field». Για τα δεδομένα προπόνησης, αρχικά, προσδιορίζονται 20 σημεία., ενώ προστίθενται άλλα 4 εκ των υστέρων στα σημεία που το μοντέλο μηχανικής μάθησης έχει μεγαλύτερη αβεβαιότητα. Στη συνέχεια, εφαρμόζουμε και πάλι τη μέθοδο LHS στις ίδιες διαστάσεις για 10 σημεία έτσι ώστε να προκύψει ένα ομοιόμορφα κατανεμημένο σύνολο από σημεία για τα δεδομένα ελέγχου. Όλα τα σημεία απεικονίζονται στο Σχήμα 14. Οι ποσότητες αυτές ορίστηκαν έτσι ώστε να προκύψει μια αναλογία περίπου 3/7 των δεδομένων ελέγχου ως προς τα δεδομένα προπόνησης. Τα σημεία έχουν κατανεμηθεί με τέτοιο τρόπο, ώστε η προπόνηση ενός μοντέλου μηχανικής μάθησης μιας δεδομένης απόδοσης να γίνει με τα ελάχιστα δυνατά δεδομένα. Εκτός αυτού, η επανάληψη της μεθόδου για τα σημεία ελέγχου διευκολύνει την αντιπροσωπευτική αξιολόγηση του μοντέλου, καθώς παραγάγει ένα «nested» σύνολο LHS [80]. Έτσι, αντιμετωπίζεται η τυχαιότητα του LHS για να προκύψει ένα αντιπροσωπευτικό σύνολο.



Σχήμα 14: Τα σημεία στον παραμετρικό χώρο της θερμοκρασίας και της διάρκειας της ανόπτησης, που προκύπτουν από την εφαρμογή της μεθόδου LHS. Το πάνω διάγραμμα αφορά αποκλειστικά στα σημεία των δεδομένων προπόνησης, με τα πορτοκαλί να είναι αυτά που προστέθηκαν εκ των υστέρων, ενώ το κάτω διάγραμμα αφορά και στα δεδομένα ελέγχου (μαύρο).



## 3.2 Υπολογισμός Στατιστικών της Μικροδομής

Τα «two-point statistics» θα υπολογιστούν για το σύνολο των μικροδομών που προκύπτουν από τις προσομοιώσεις «phase-field» στα σημεία της LHS. Στη συνέχεια, η PCA εφαρμόζεται στο σύνολο των «two-point statistics» ώστε να προκύψουν τα μεγέθη που θα χρησιμοποιηθούν ως δεδομένα εξόδου. Η μεθοδολογία MKS εφαρμόζεται και σε ένα σύνολο μικροδομών που αφορά στην εξέλιξη της μικροδομής υπό ένα συγκεκριμένο συνδυασμό των παραμέτρων επεξεργασίας. Θα αξιολογηθεί, έτσι, το επίπεδο στο οποίο η μεθοδολογία αυτή μπορεί να αποτυπώσει χρήσιμες πληροφορίες για τις μικροδομές κατά το φαινόμενο της ανακρυστάλλωσης.

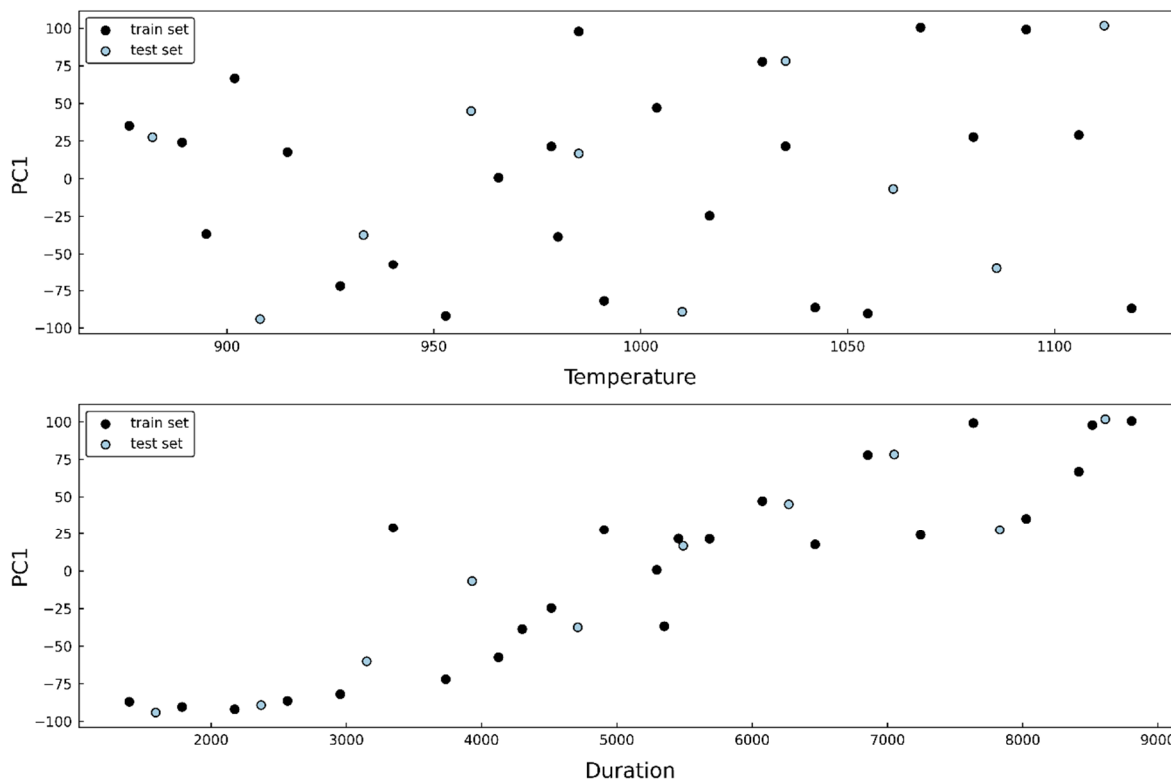
Οι μικροδομές της συγκεκριμένης μελέτης χαρακτηρίζονται από διαφορετικά ποσοστά ανακρυστάλλωσης. Το «local state» ορίζεται με τρόπο ώστε να αντιστοιχεί τον κάθε κόκκο με ένα δείκτη που τον χαρακτηρίζει ως ανακρυσταλλωμένο ή μη. Δηλαδή  $h = \alpha$ , όπου  $\alpha$  ο δείκτης που κατηγοριοποιεί τους κόκκους στις δύο κατηγορίες, με  $\alpha = 1$  για τους νέους ανακρυσταλλωμένους κόκκους και  $\alpha = 2$  για τους κόκκους της παραμορφωμένης μικροδομής. Το μέγεθος  $m_s^h$  αφορά το ποσοστό των ανακρυσταλλωμένων ή μη κόκκων σε μια συγκεκριμένη μικροδομή. Εφαρμόζεται, έτσι, η εξίσωση (16) για τον υπολογισμό των «two-point statistics» στο εκάστοτε σύνολο των περιοδικών μικροδομών.

Αρχικά, οι δυαδικές εικόνες διαστάσεων 600x600 pixels συγκεντρώνονται σε έναν πίνακα που, συγκεκριμένα για τα δεδομένα προπόνησης, έχει διαστάσεις 24x600x600, καθώς οι μικροδομές που αφορούν τα δεδομένα προπόνησης είναι 24. Στη συνέχεια, δημιουργείται ένας πίνακας διαστάσεων 24x600x600x2. Η πρώτη διάσταση αφορά στην εκάστοτε μικροδομή, η δεύτερη διάσταση είναι ο οριζόντιος άξονας, η τρίτη διάσταση είναι ο κάθετος άξονας και η τέταρτη διάσταση είναι ο άξονας της φάσης που σχετίζεται άμεσα με το «local state». Μετά από αυτές τις αλλαγές στον πίνακα των δεδομένων, μπορεί να ακολουθήσει ο υπολογισμός των «two-point statistics». Το μέτρο του διανύσματος που χρησιμοποιείται για τους υπολογισμούς, όπως αναλύθηκε στο υποκεφάλαιο 2.3.2, δε ξεπερνά τα 130 pixels, που ισοδυναμούν με 93.16  $\mu\text{m}$  της κάθε μικροδομής. Επιλέχθηκε το συγκεκριμένο μέγεθος διότι ξεπερνά για λίγο το μέγεθος των μεγαλύτερων ανακρυσταλλωμένων κόκκων, οπότε μπορεί να αποτυπώσει τα χαρακτηριστικά τους. Οι οριακές συνθήκες ορίζονται και εδώ ως περιοδικές. Ως αποτέλεσμα, προκύπτει ένας πίνακας διαστάσεων 24x261x261x2, με το δεύτερο και τρίτο

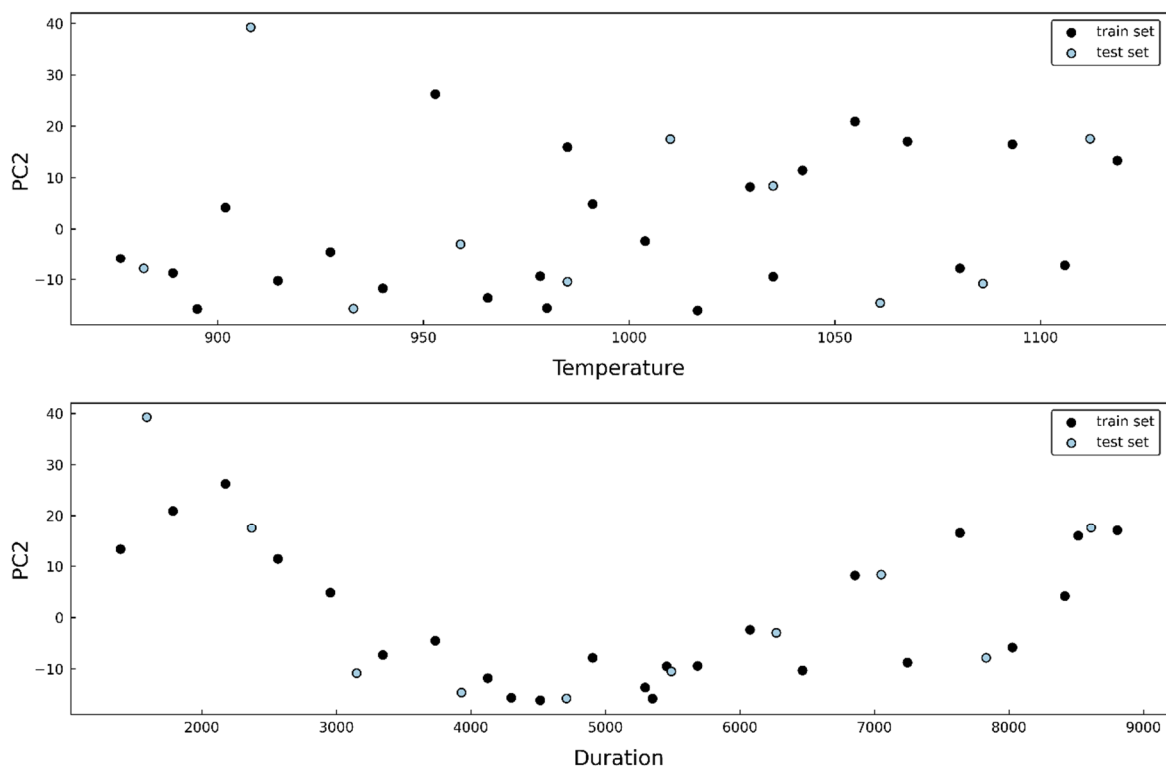
άξονα πάλι να αφορούν τον οριζόντιο και κάθετο άξονα λόγω του μέγιστου μέτρου του διανύσματος.

Αυτή τη στιγμή, τα δεδομένα μας χαρακτηρίζονται από πολλές διαστάσεις. Για τη μείωσή τους και την ταυτόχρονη συγκράτηση των πληροφοριών που εμπεριέχονται στα δεδομένα, εφαρμόζεται η PCA. Ο πίνακας ανασχηματίζεται σε έναν πίνακα διαστάσεων  $24 \times 136242$ , έτσι ώστε να αποτελέσει είσοδο για τη PCA. Η PCA εφαρμόζεται για την αποτύπωση όλης της διασποράς του συνόλου, εφόσον αυτή δεν είναι απαγορευτικά μεγάλη. Επίσης, ο αριθμός των PCs ορίζεται στα 3, οπότε θα προκύψει ένας πίνακας διαστάσεων  $24 \times 3$ , οι δύο πρώτες στήλες του οποίου εμπεριέχουν τελικά και τα δεδομένα εξόδου προπόνησης των δύο μοντέλων. Για την αξιολόγηση αυτών, θα προκύψει αναλόγως ένας πίνακας  $10 \times 3$ , οι πρώτες δύο πάλι στήλες του οποίου θα εμπεριέχουν τα δεδομένα ελέγχου των μοντέλων. Η μόνη διαφορά στη μεθοδολογία για τα δύο διαφορετικά σύνολα δεδομένων είναι ότι η PCA, ενώ εφαρμόζεται και στα δύο, προσαρμόζεται μόνο στα δεδομένα προπόνησης. Με το τρόπο αυτό, επιδεικνύεται η αξία της μεθόδου στην μείωση των διαστάσεων ενός προβλήματος. Επίσης, μετά από τους παραπάνω υπολογισμούς και μετασχηματισμούς πινάκων, τα δεδομένα μπορούν να επιστρέψουν στον αρχικό τους χώρο με τις αρχικές τους διαστάσεις.

Για τους υπολογισμούς, αξιοποιούνται ορισμένες ψηφιακές βιβλιοθήκες σε ένα περιβάλλον της προγραμματιστικής γλώσσας Python. Αρχικά, για τους μετασχηματισμούς πινάκων και τους υπολογισμούς γραμμικής άλγεβρας, εφαρμόζεται η βιβλιοθήκη NumPy [81], κυρίως λόγω της απλότητας των μεθόδων της. Όσον αφορά στην PCA, αυτή εφαρμόζεται μέσω της βιβλιοθήκης scikit-learn [82], μιας από τις δημοφιλέστερες στον τομέα της μηχανικής μάθησης. Για τον υπολογισμό των «two-point statistics», την οπτικοποίησή τους και για συγκεκριμένους μετασχηματισμούς πινάκων, εφαρμόζεται η βιβλιοθήκη PyMKS [36]. Αυτή βασίζεται στις προηγούμενες για πολλές από τις μεθόδους της έτσι ώστε να εφαρμόσει με υπολογιστικά συνετό τρόπο τις έννοιες στις οποίες βασίζεται η μεθοδολογία MKS. Εφαρμόζοντας συνεργατικά, λοιπόν, αυτές τις βιβλιοθήκες προκύπτουν τα δεδομένα προπόνησης και ελέγχου των δύο μοντέλων, που φαίνονται στα Σχήματα 15 και 16. Στο Σχήμα 15 φαίνονται τα δεδομένα του πρώτου μοντέλου που αντιμετωπίζει το πρώτο PC ως έξοδο, ενώ στο Σχήμα 16 φαίνονται αυτά του δεύτερου μοντέλου που αντιμετωπίζει το δεύτερο PC ως έξοδο.



Σχήμα 15: Απεικόνιση των δεδομένων προπόνησης και ελέγχου. Στο πάνω διάγραμμα, το πρώτο «principal component» αντιστοιχίζεται με τις θερμοκρασίες στο σύνολο δεδομένων ενώ, στο δεύτερο, αντιστοιχίζεται με τις διάρκειες της ανόπτησης.



Σχήμα 16: Απεικόνιση των δεδομένων προπόνησης και ελέγχου. Στο πάνω διάγραμμα, το δεύτερο «principal component» αντιστοιχίζεται με τις θερμοκρασίες στο σύνολο δεδομένων ενώ, στο δεύτερο, αντιστοιχίζεται με τις διάρκειες της ανόπτησης.

## 3.3 Gaussian Process Regression

Μια Γκαουσιανή διαδικασία προσδιορίζεται πλήρως μέσω της συνάρτησης του μέσου και της συνάρτησης της συνδιασποράς. Η συνάρτηση του μέσου θεωρείται τυπικά μηδενική, οπότε απομένουν ο ορισμός των δύο πυρήνων (για τα δύο ξεχωριστά μοντέλα) και η βελτιστοποίηση των παραμέτρων τους. Η απόδοση ενός μοντέλου GPR επηρεάζεται, εκτός από τη δομή του μοντέλου, και από τα δεδομένα και την προεπεξεργασία τους. Εφόσον βρισκόμαστε σκόπιμα σε μια κατάσταση με λίγα δεδομένα, η διαχείρισή τους έχει ακόμη μεγαλύτερη σημασία. Αναλύονται, στη συνέχεια, και οι δύο πτυχές της κατασκευής των μοντέλων μηχανικής μάθησης.

### 3.3.1 Επεξεργασία Δεδομένων

Αρχικά, ο βασικός ρόλος της προεπεξεργασίας των δεδομένων είναι η διευκόλυνση της διαδικασίας της *μάθησης*, που είναι το αποτέλεσμα της προπόνησης του μοντέλου. Για να αποφύγουμε την εξάρτηση της απόδοσης του μοντέλου από τις διαφορετικές κλίμακες των *χαρακτηριστικών* (features), ή παραμέτρων, των δεδομένων, ακολουθούνται οι διαδικασίες της *κανονικοποίησης* (normalization) ή *τυποποίησης* (standardization) των δεδομένων. Το αποτέλεσμα αυτών είναι τα τελικά σύνολα δεδομένων προπόνησης και ελέγχου, που έχουν μετασχηματιστεί.

Αναφορικά με τα δεδομένα εισόδου, τα χαρακτηριστικά (διάρκεια και θερμοκρασία ανόπτησης) βρίσκονται σε διαφορετικές κλίμακες. Αυτό θα αρκούσε ως επιχείρημα υπέρ της κανονικοποίησης. Εκτός αυτού, όμως, θα ακολουθήσει και η βελτιστοποίηση των παραμέτρων της συνάρτησης συνδιασποράς, η οποία αναλύεται στη συνέχεια. Η κανονικοποίηση των δεδομένων εισόδου, όχι απλά διευκολύνει τη βελτιστοποίηση, αλλά την ενεργοποιεί. Παρατηρείται πως ένα μη κανονικοποιημένο σύνολο δεδομένων την καθιστά αδύνατη. Η μέθοδος κανονικοποίησης που εφαρμόζεται είναι η *min-max κανονικοποίηση*, η οποία πραγματοποιεί έναν γραμμικό μετασχηματισμό στα αρχικά δεδομένα. Έστω ότι  $min_A$  και  $max_A$  είναι οι ελάχιστες και μέγιστες τιμές αντίστοιχα ενός χαρακτηριστικού  $A$ . Η min-max κανονικοποίηση αντιστοιχεί μια τιμή  $v_i$  του  $A$  με μια τιμή  $v'_i$  σε μια νέα κλίμακα  $[min'_A, max'_A]$  όπου:

$$v'_i = (v_i - min_A)/(max_A - min_A) * (max'_A - min'_A) + min'_A \quad (35)$$

Έχουμε  $min'_A = 0$  και  $max'_A = 1$ , οπότε:

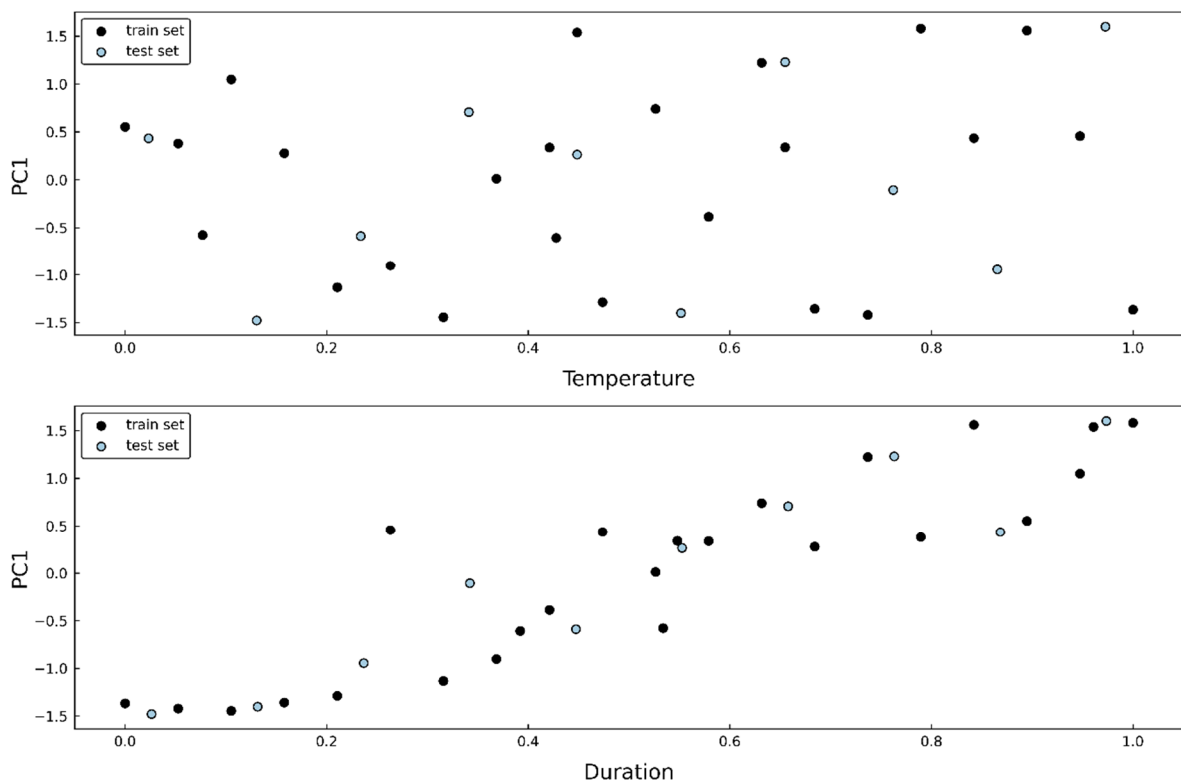
$$v'_i = (v_i - min_A)/(max_A - min_A) \quad (36)$$

σε μια νέα κλίμακα  $[0,1]$ . Επίσης, οι σχέσεις μεταξύ των αρχικών τιμών των δεδομένων συντηρούνται. Η μέθοδος προσαρμόζεται και εφαρμόζεται στα δεδομένα εισόδου προπόνησης και, στη συνέχεια, εφαρμόζεται στα δεδομένα εισόδου ελέγχου.

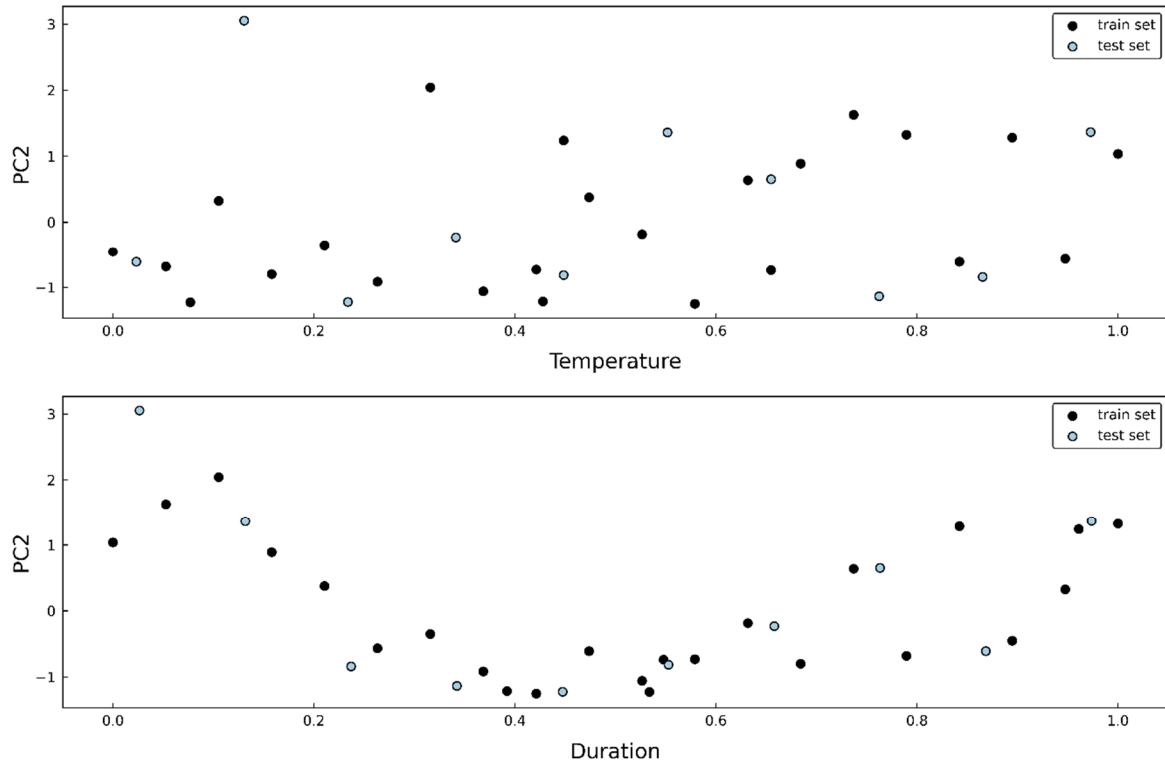
Επειδή στην πλειοψηφία των μοντέλων GPR γίνεται η υπόθεση ότι η έξοδος έχει μηδενικό μέσο, θα πρέπει να ακολουθήσει η τυποποίηση των δεδομένων εξόδου. Αυτή αφορά στην αφαίρεση του μέσου από τη κάθε τιμή και την αλλαγή της κλίμακας έτσι ώστε τα δεδομένα να έχουν διασπορά ίση με τη μονάδα. Πιο συγκεκριμένα, μια τιμή  $z$  ενός χαρακτηριστικού υπολογίζεται ως εξής:

$$z = (x - u)/s \quad (37)$$

όπου  $u$  είναι το μέσο των δεδομένων για το αντίστοιχο χαρακτηριστικό και  $s$  είναι η τυπική απόκλιση των δεδομένων. Η μέθοδος προσαρμόζεται και εφαρμόζεται στα δεδομένα εξόδου προπόνησης και, στη συνέχεια, εφαρμόζεται στα δεδομένα εξόδου ελέγχου. Τα τελικά δεδομένα προπόνησης και ελέγχου οπτικοποιούνται στα Σχήματα 17 και 18. Όλη η παραπάνω διαδικασία λαμβάνει χώρα αποκλειστικά μέσω της βιβλιοθήκης scikit-learn [82].



Σχήμα 17: Απεικόνιση των τελικών δεδομένων προπόνησης και ελέγχου για το πρώτο «principal component».



Σχήμα 18: Απεικόνιση των τελικών δεδομένων προπόνησης και ελέγχου για το δεύτερο «principal component».

### 3.3.2 Συνάρτηση Συνδιασποράς

Ο προσδιορισμός της συνάρτησης συνδιασποράς  $k(x, x')$ , ή του *πυρήνα*, είναι ίσως το σημαντικότερο κομμάτι της κατασκευής ενός μοντέλου GPR. Οι πυρήνες είναι αυτοί που ορίζουν την ομοιότητα μεταξύ δύο τιμών μιας συνάρτησης στα  $x, x'$  και, έτσι, κωδικοποιούν την εκ των προτέρων γνώση μας για τη συνάρτηση που ψάχνουμε. Η έννοια της ομοιότητας είναι βασική στην υποβλεπόμενη μηχανική μάθηση. Μια βασική υπόθεση ομοιότητας είναι ότι η τιμή της συνάρτησης σε ένα σημείο  $x_i$ , κοντά στο  $x_j$ , είναι παραπλήσια της τιμής της συνάρτησης στο  $x_j$ . Έτσι, η πρόβλεψη στα σημεία (ίσως σημεία δεδομένων ελέγχου) που είναι κοντά στα σημεία των δεδομένων προπόνησης εξαρτάται από τις τιμές της συνάρτησης εκεί [42]. Εκτός από την ομοιότητα των κοντινών σημείων, ο πυρήνας μπορεί να κωδικοποιήσει και την ομοιότητα μακρινών σημείων προσδίδοντας στη συνάρτηση, για παράδειγμα, περιοδικά χαρακτηριστικά. Στη συγκεκριμένη εργασία, κατασκευάζονται 8 πυρήνες οι οποίοι οδηγούν σε οκτώ ξεχωριστά μοντέλα για κάθε περίπτωση (PC1 και PC2). Τα μοντέλα αυτά θα συγκριθούν με στόχο την επιλογή εκείνου με την καλύτερη ακρίβεια. Ακολουθούν οι

πληροφορίες και η διαδικασία κατασκευής των πυρήνων, δίνοντας βάση στους πυρήνες που αποτελούν τη βάση για τη δημιουργία των υπόλοιπων (μέσω του συνδυασμού τους).

Εφόσον ο χώρος των χαρακτηριστικών εισόδου είναι δισδιάστατος, αναλόγως, θα πρέπει να οριστεί και δισδιάστατος πυρήνας. Είναι, επίσης, σκόπιμο να προσδώσουμε στο κάθε μοντέλο την ομοιότητα μεταξύ των κοντινών σημείων που αναλύσαμε προηγουμένως. Ο «squared exponential» (SE) πυρήνας είναι ο πιο διαδεδομένος και ορίζεται ως εξής:

$$\mathcal{K}(r; l) = \exp\left(-\frac{r^2}{2l^2}\right) \quad (38)$$

όπου  $r = x - x'$  και  $l$  η κλίμακα μεγέθους (length-scale) του πυρήνα, δηλαδή η απόσταση στην οποία υπάρχει ομοιότητα. Οι υψηλές τιμές της κλίμακας μεγέθους έχουν ως αποτέλεσμα τη δυνατότητα πρόβλεψης σε μεγάλες αποστάσεις ανάμεσα στα δεδομένα προπόνησης. Οι μικρές περιορίζουν αυτή τη δυνατότητα.

Ο SE πυρήνας μπορεί να γενικευθεί και για περισσότερες από μια διαστάσεις ως εξής:

$$\mathcal{K}(r; \Sigma, \sigma^2) = \sigma^2 \exp\left(-\frac{1}{2}r^T \Sigma^{-1}r\right) \quad (39)$$

Αν ο πίνακας  $\Sigma$  είναι διαγώνιος, προκύπτει ότι:

$$\mathcal{K}(r; l, \sigma^2) = \sigma^2 \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{d=1}^D \frac{1}{l_d^2} r_d^2\right) = \prod_{d=1}^D \mathcal{K}(r_d; l_d, \sigma^{2/d}) \quad (40)$$

όπου:

$$\mathcal{K}(r; l, \tau^2) = \tau^2 \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{1}{l^2} r^2\right) \quad (41)$$

Ο όρος  $\sigma^2$  είναι η ολική διασπορά και ο όρος  $l_d$  είναι η κλίμακα μεγέθους για τη διάσταση  $d$  [45]. Οι υψηλές τιμές της διασποράς έχουν ως αποτέλεσμα ένα μοντέλο που μπορεί να ανταπεξέλθει σε ακραίες τιμές της συνάρτησης που μοντελοποιείται. Παράλληλα, όμως, αυξάνεται και ο θόρυβος στις προβλέψεις του. Ο παραπάνω ονομάζεται «SE-ARD» πυρήνας και επιλέγεται ως ένας από τους υπο-πυρήνες που θα δοκιμάσουμε. Είναι ο πιο δημοφιλής πυρήνας για πολυδιάστατα προβλήματα, κυρίως λόγω των λίγων και ερμηνεύσιμων παραμέτρων του. Προσδιορίζοντας τις κλίμακες μεγέθους  $l_1, l_2, \dots, l_D$ , προσεγγίζεται έμμεσα η επιρροή της κάθε διάστασης, δηλαδή του κάθε χαρακτηριστικού, στην έξοδο. Στην περίπτωσή μας, από την αναλογία των  $l_1$  και  $l_2$  μπορεί να προσεγγιστεί η επιρροή της θερμοκρασίας της ανόπτησης σε σχέση με την επιρροή της διάρκειας στο αποτέλεσμα, δηλαδή στην τελική μικροδομή.

Ο πυρήνας SE οδηγεί σε άπειρα παραγωγίσιμες συναρτήσεις και, έτσι, αρκετά ομαλές. Σε πολλές περιπτώσεις, είναι προτιμότερη η αξιοποίηση του πυρήνα «Matern», που οδηγεί σε πιο «απότομες» συναρτήσεις. Έτσι, μπορούν να μοντελοποιηθούν απότομες μεταβολές στις τιμές της συνάρτησης, χωρίς την κλίμακα μεγέθους να γίνεται πολύ μικρή (όπως θα γινόταν για τον πυρήνα SE). Ο πυρήνας «Matern» έχει ως εξής:

$$\mathcal{K}(r; \nu, l) = \frac{2^{1-\nu}}{\Gamma(\nu)} \left( \frac{\sqrt{2\nu}r}{l} \right)^\nu K_\nu \left( \frac{\sqrt{2\nu}r}{l} \right) \quad (42)$$

όπου  $K_\nu$  μια συνάρτηση Μπέσελ και  $l$  η κλίμακα μεγέθους. Οι συναρτήσεις που προκύπτουν από αυτόν τον πυρήνα είναι  $k$ -φορές παραγωγίσιμες αν και μόνο αν  $\nu > k$ . Αν το  $y \rightarrow \infty$ , τότε προσεγγίζεται ο SE πυρήνας [45]. Στην περίπτωση μας, θέτουμε  $\nu = 3/2$  όποτε η εξίσωση (42) απλοποιείται ως εξής:

$$\mathcal{K}\left(r; \frac{3}{2}, l\right) = \left(1 + \frac{\sqrt{3}r}{l}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{3}r}{l}\right) \quad (43)$$

Ένας από τους πυρήνες που προσδίδουν περιοδικά χαρακτηριστικά σε μια συνάρτηση έχει ως εξής:

$$k_{\text{Per}}(x, x') = \sigma^2 \exp\left(-\frac{2 \sin^2(\pi|r|/p)}{l^2}\right) \quad (44)$$

όπου  $p$  είναι η περίοδος και  $l$  η κλίμακα μεγέθους [83]. Οι παράμετροι αυτές είναι ερμηνεύσιμες. Η περίοδος  $p$  προσδιορίζει την απόσταση μεταξύ των επαναλήψεων της συνάρτησης και η κλίμακα μεγέθους επηρεάζει τη συνάρτηση με τον ίδιο τρόπο που κάνει μέσω του πυρήνα SE. Αυτός είναι ο *περιοδικός πυρήνας* και επιλέγεται ως ένας ακόμη από τους υπο-πυρήνες που θα συνδυαστούν. Στην περίπτωση μας, ο ορισμός του είναι ίσως χρήσιμος, δεδομένου ότι η συνάρτηση που μοντελοποιείται, δηλαδή το μοντέλο «phase-field» της ανακρυστάλλωσης στα κράματα χαλκονικελίου, μπορεί να έχει ορισμένα περιοδικά χαρακτηριστικά. Μια υπόθεση είναι ότι τα χαρακτηριστικά αυτά προκύπτουν από το γεγονός (που γενικοποιείται) ότι η τελική μικροδομή μετά την ανόπτηση σε χαμηλή θερμοκρασία αλλά για μεγάλο χρονικό διάστημα είναι παρόμοια με τη μικροδομή ανόπτησης σε υψηλή θερμοκρασία αλλά για μικρό χρονικό διάστημα. Έτσι, τα πρώτα PCs που αντιστοιχούν στις δύο αυτές τελικές μικροδομές θα ήταν και αυτά παρόμοια. Αυτά τα χαρακτηριστικά, όμως, θα μπορούσαν να καλυφθούν ίσως από τον SE πυρήνα, αν οι κλίμακες μεγέθους του είναι αρκετά μεγάλες για να *επιβληθούν* στον περιοδικό.



Επειδή τα επιθυμητά χαρακτηριστικά της συνάρτησης δε μπορούν πάντοτε να προσδοθούν αποκλειστικά με έναν πυρήνα, αξιοποιείται η δυνατότητα κατασκευής πυρήνων μέσω του συνδυασμού άλλων. Ο κάθε πυρήνας προσδίδει τις δικές του ιδιότητες στο μοντέλο, το οποίο, με αυτό τον τρόπο, αποκτά μια πιο σύνθετη δομή. Οι πυρήνες μπορούν να προστεθούν ή να πολλαπλασιαστούν μεταξύ τους:

$$k_a + k_b = k_a(x, x') + k_b(x, x') \quad (45)$$

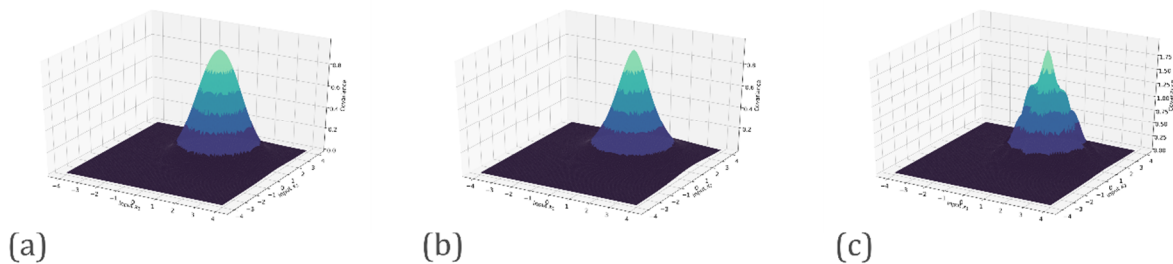
$$k_a \times k_b = k_a(x, x') \times k_b(x, x') \quad (46)$$

Στη συγκεκριμένη περίπτωση, πολλαπλασιάζουμε ορισμένους πυρήνες (μερικούς από τους παραπάνω) καταλήγοντας σε οκτώ διδιάστατους άλλους. Αυτοί φαίνονται στον Πίνακα 3.

Πίνακας 3: Οι πυρήνες που ορίζονται και θα βελτιστοποιηθούν στη συνέχεια.

Kernel_1	SE - ARD
Kernel_2	Matern32 - ARD
Kernel_3	SE[0] * Matern32[1]
Kernel_4	SE[1] * Matern32[0]
Kernel_5	SE * Exponential
Kernel_6	Matern32 * Exponential
Kernel_7	SE * Periodic
Kernel_8	Matern * Periodic

Ο όρος «ARD» αναφέρεται στην ικανότητα του πυρήνα να έχει ξεχωριστές κλίμακες μεγέθους για τις διαφορετικές διαστάσεις. Μετά των δύο πρώτων, ο όρος δε σημειώνεται για λόγους συντομίας, αλλά αφορά και τους τέσσερις τελευταίους.



Σχήμα 19: Τρεις από τους αρχικούς πυρήνες που θα βελτιστοποιηθούν στη συνέχεια: (a) SE-ARD, (b) Matern ( $\nu = 3/2$ ), (c) SE-ARD x Periodic.

Οι αρχικές παράμετροι των πυρήνων θα πρέπει να βελτιστοποιηθούν έτσι ώστε τα μοντέλα να βελτιωθούν μέσω της προσαρμογής τους στα δεδομένα προπόνησης. Αυτό θα γίνει αν οι τιμές των παραμέτρων κάνουν το μοντέλο να αντιλαμβάνεται τις παρατηρήσεις, δηλαδή τις τιμές του πρώτου PC, περισσότερο πιθανές ή αληθείς. Η μεγιστοποίηση της οριακής πιθανότητας της GP μπορεί να οδηγήσει σε αυτό το αποτέλεσμα. Ορίζεται ανάδελτα για αυτήν ως προς τις παραμέτρους και, μέσω αυτού, μεγιστοποιείται. Επειδή η οριακή πιθανότητα έχει πιθανώς πολλαπλά τοπικά μέγιστα, οι προσπάθειες μεγιστοποίησής της πρέπει να γίνουν επαναληπτικά. Οι αρχικές παράμετροι των πυρήνων, πριν τη βελτιστοποίηση, ορίζονται όλες ίσες με τη μονάδα, εφόσον τα δεδομένα έχουν κανονικοποιηθεί και τυποποιηθεί.

Για όλη την παραπάνω μεθοδολογία, αξιοποιείται το πακέτο GPY [84]. Αυτό παρέχει τις μεθόδους που διευκολύνουν την μηχανική μάθηση με βάση τις Γκαουσιανές διαδικασίες στην προγραμματιστική γλώσσα Python.



# 4 Αποτελέσματα & Συζήτηση

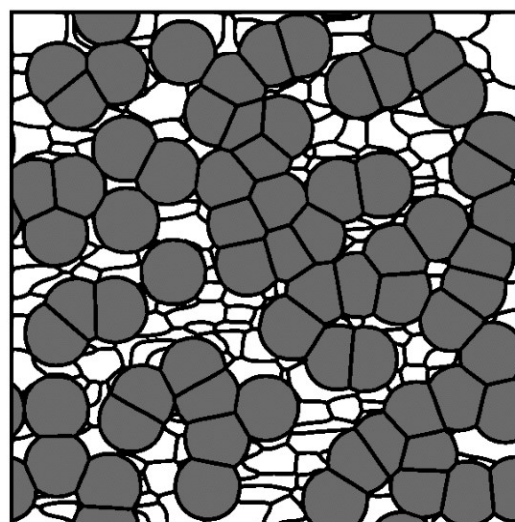
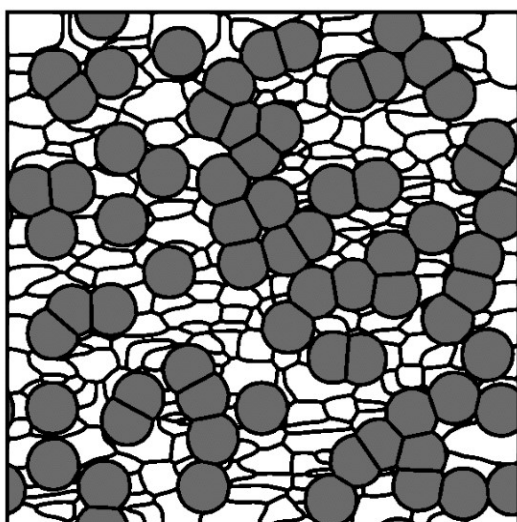
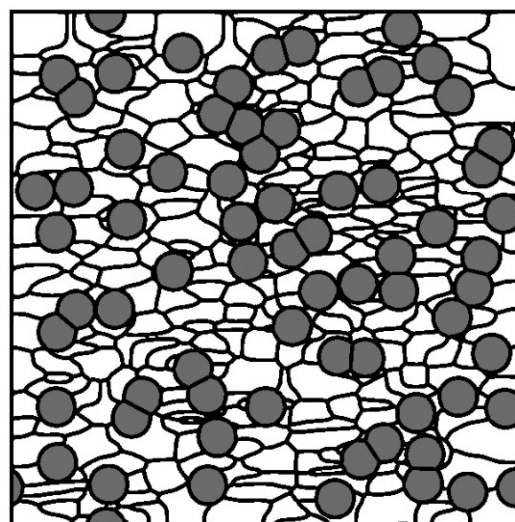
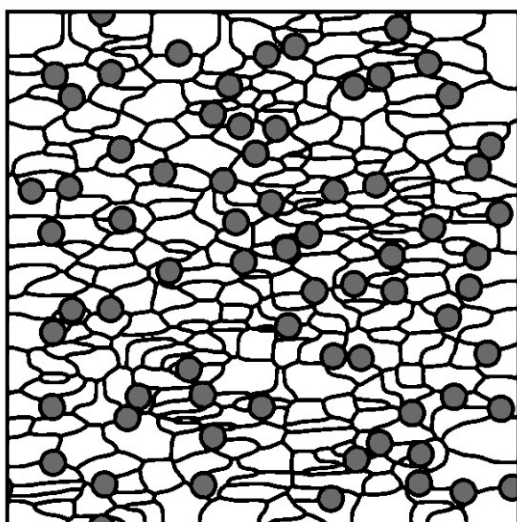
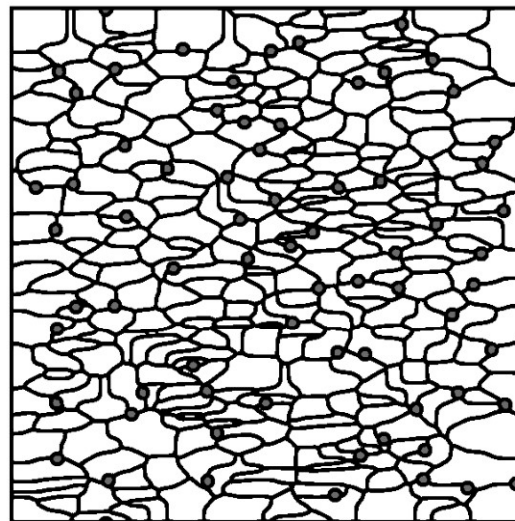
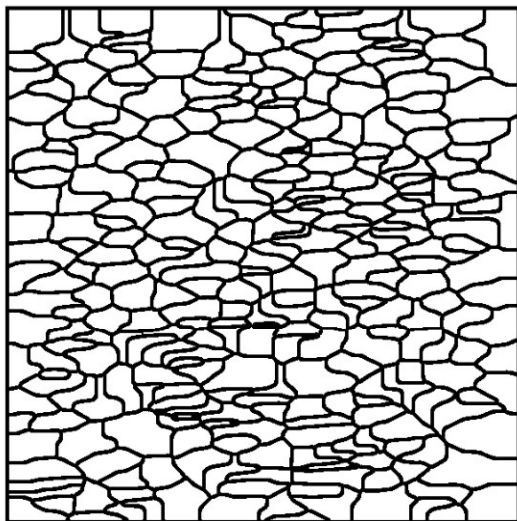
---

## 4.1 Phase-Field Modeling

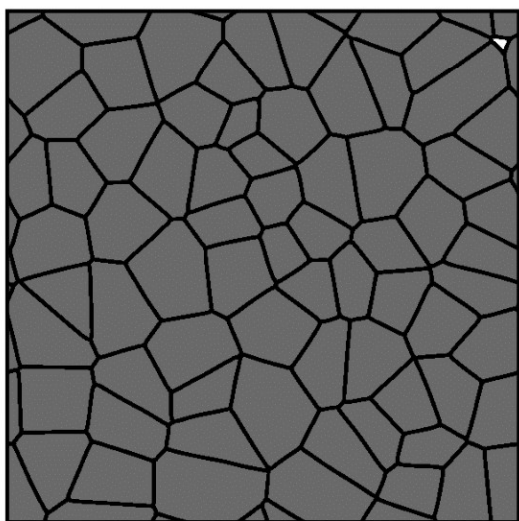
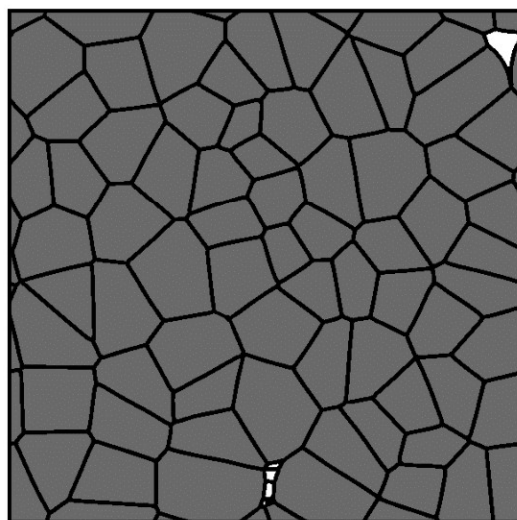
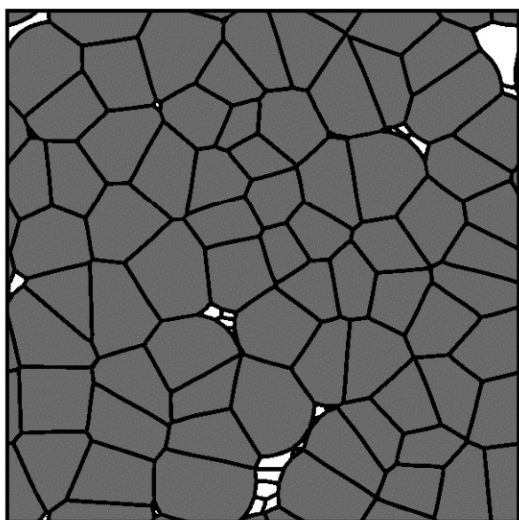
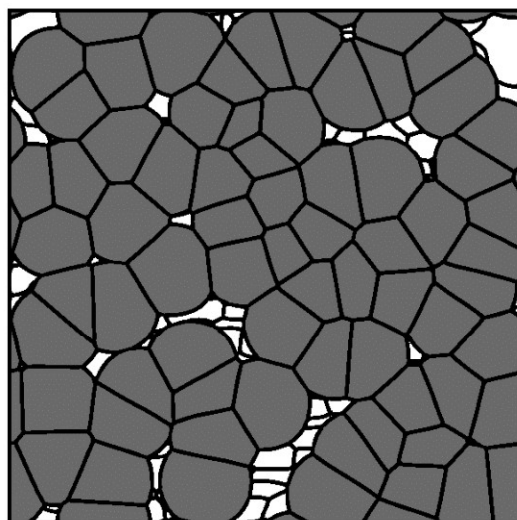
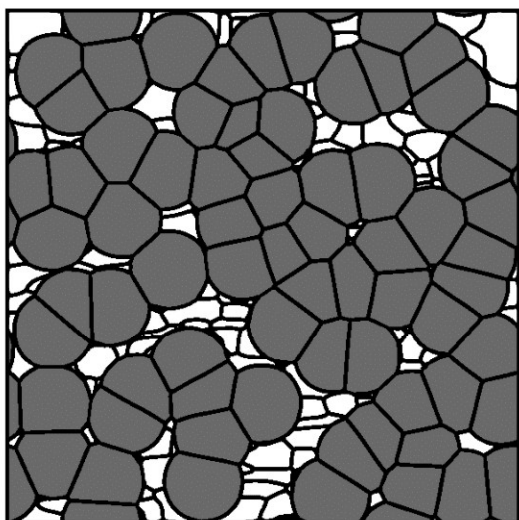
Για την κατανόηση όλου του φαινομένου της ανακρυστάλλωσης που μοντελοποιείται μέσω της μεθόδου «phase-field», το υποκεφάλαιο πραγματεύεται, αρχικά, την εξέλιξη της μικροδομής για μια συγκεκριμένη θερμοκρασία. Στη συνέχεια, ακολουθούν τα αποτελέσματα σχετικά με τα υπολογιστικά πειράματα για τις τιμές των παραμέτρων επεξεργασίας που έχουν καθοριστεί μέσω της μεθόδου LHS.

### 4.1.1 Εξέλιξη της Μικροδομής

Η εξέλιξη της μικροδομής για τη συγκεκριμένη θερμοκρασία των 978 K απεικονίζεται στα Σχήματα 18 και 19. Οι άσπροι κόκκοι είναι οι αρχικοί κόκκοι της παραμορφωμένης μικροδομής με τη μεγάλη πυκνότητα διαταραχών, ενώ οι γκρι είναι οι νέοι κόκκοι με την μειωμένη πυκνότητα διαταραχών, που αναπτύσσονται σε βάρος των παραμορφωμένων. Η πρώτη μικροδομή είναι και η αρχική, δηλαδή λίγο πριν την «πυρήνωση» των νέων κόκκων. Η δεύτερη είναι λίγο μετά. Οι ανακρυσταλλωμένοι κόκκοι, στην αρχή, είναι ισαξονικοί. Όταν συναντώνται, όμως, η ενέργεια των ορίων των κόκκων αρχίζει και έχει σημαντικότερο ρόλο. Εώς το τέλος της ανακρυστάλλωσης, οι κόκκοι που συναντώνται αλληλοεπιδρούν με μερικούς να αναπτύσσονται περισσότερο σε βάρος των άλλων. Το γεγονός αυτό οφείλεται στο ότι ορισμένοι κόκκοι έχουν προλάβει να αναπτυχθούν περισσότερο πριν συναντηθούν με έναν άλλο νέο κόκκο. Επειδή όσο ένας κόκκος μεγαλώνει εις βάρος ενός άλλου, το συνολικό εμβαδό των ορίων τους μειώνεται με τη συνολική ελεύθερη ενέργεια και αυτή να μειώνεται. Έτσι, οδηγούμαστε σε ένα φαινόμενο που προσεγγίζει την ανάπτυξη των κόκκων κατά τη διάρκεια της ανακρυστάλλωσης. Η επιρροή αυτού δεν είναι τόσο μεγάλη, αλλά επηρεάζει την τελική μικροδομή. Ωστόσο, οι κόκκοι στο τέλος της ανακρυστάλλωσης είναι κατά μέσο όρο ισαξονικοί. Φυσικά, ο ρυθμός της προόδου της ανακρυστάλλωσης αλλάζει ανάλογα με τη θερμοκρασία. Σε υψηλότερη θερμοκρασία, ο ρυθμός είναι μεγαλύτερος και η ανακρυστάλλωση ολοκληρώνεται πριν τα 10000 seconds, με όλα τα στάδιά της να λαμβάνουν χώρα πιο σύντομα. Το αντίθετο γίνεται σε μικρότερη θερμοκρασία.

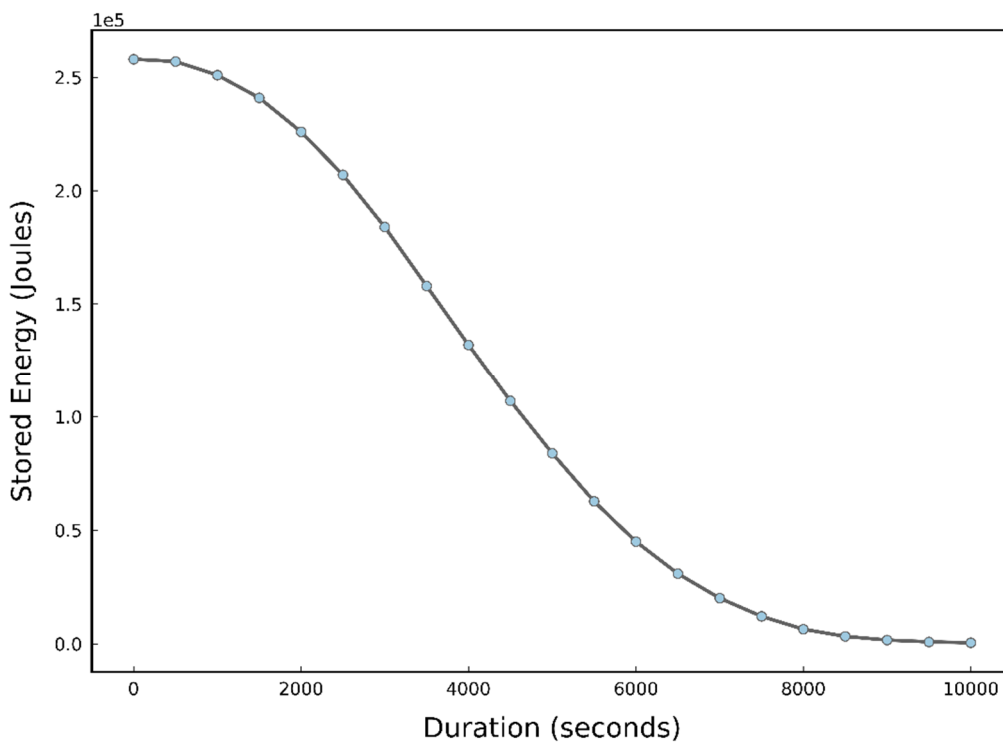


Σχήμα 20: Η εξέλιξη της μικροδομής κατά την ανακρυστάλλωση στους 978 K. Η μικροδομή παρουσιάζεται για τα time steps: 0, 1000, 2000, 3000, 4000, 5000 seconds.



Σχήμα 21: Η εξέλιξη της μικροδομής κατά την ανακρυστάλλωση στους 978 K. Η μικροδομή παρουσιάζεται για τα time steps: 6000, 7000, 8000, 9000, 10000 seconds.

Όπως αναλύσαμε στο υποκεφάλαιο 3.1.2, η αποθηκευμένη ενέργεια της μικροδομής αποτελεί την κύρια οδηγούσα δύναμη της ανακρυστάλλωσης, που είναι συνάρτηση της πυκνότητας των διαταραχών. Εφόσον η πυκνότητα αυτή αναμένουμε να μειώνεται όσο προχωρά η ανακρυστάλλωση, η αποθηκευμένη ενέργεια θα πρέπει και αυτή να μειώνεται με τον ίδιο τρόπο. Αν η αποθηκευμένη ενέργεια είναι πραγματικά η οδηγούσα δύναμη του φαινομένου, η πρόοδος της θα πρέπει να ακολουθεί αντιστρόφως ανάλογη πορεία με το ποσοστό της ανακρυστάλλωσης, το οποίο είναι επίσης ένα μέγεθος που περιγράφει σε μεγάλο βαθμό το φαινόμενο.



Σχήμα 22: Η μεταβολή της αποθηκευμένης ενέργειας κατά τη διάρκεια της ανακρυστάλλωσης στους 978 K.

Πράγματι, η ενέργεια μειώνεται ακολουθώντας μια αντιστρόφως σιγμοειδή πορεία (Σχήμα 22), δηλαδή αντίθετη της πορείας που ακολουθεί, αν η ανακρυστάλλωση έχει μοντελοποιηθεί σωστά, το ανακρυσταλλωμένο ποσοστό της μικροδομής σε συνάρτηση με τον χρόνο, όπως οπτικοποιείται και στο Σχήμα 13. Το ποσοστό αυτό υπολογίζεται μέσω των two-point statistics για την εξέλιξη της μικροδομής στη συγκεκριμένη θερμοκρασία στο υποκεφάλαιο 4.2.2, στη συνέχεια, ώστε να αποδειχθεί ότι τα μεγέθη αυτά μπορούν να αποτυπώσουν την εξέλιξη της μικροδομής.

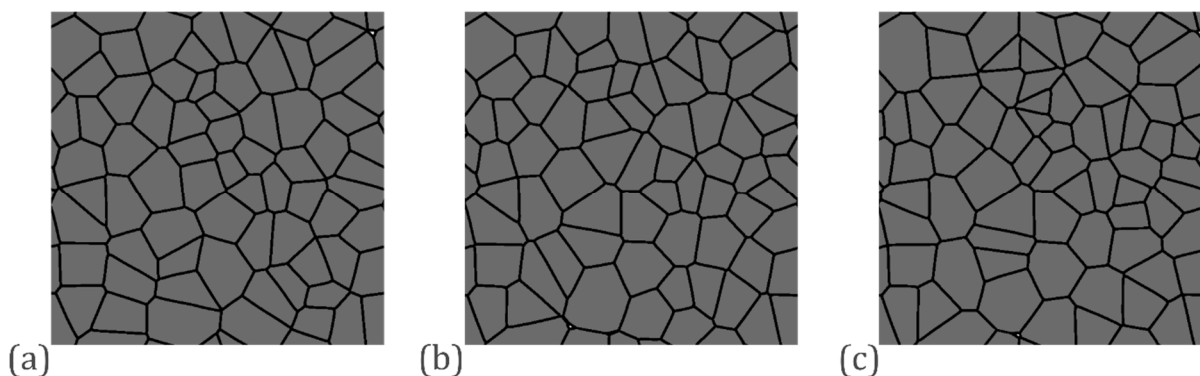
## 4.1.2 Τελικές Μικροδομές

Ακολουθεί ο προσδιορισμός των τελικών μικροδομών για τους συνδυασμούς των τιμών των παραμέτρων επεξεργασίας, που καθορίστηκαν μέσω της μεθόδου LHS. Το σύνολο των μικροδομών είναι τόσο ευρύ, που προσεγγίζει την εξέλιξη της μικροδομής υπό συγκεκριμένες συνθήκες επεξεργασίας. Αυτό, αν η εφαρμογή της PCA έχει γίνει με σωστό τρόπο, μπορεί να φανεί από την απεικόνιση των PCs, στη συνέχεια. Οι παρατηρήσεις, λοιπόν, που έγιναν για την εξέλιξη της μικροδομής υπό συγκεκριμένες συνθήκες, προηγουμένως, μπορεί να μεταφερθούν αναλόγως και σε αυτό το σύνολο.

Οι μικροδομές που δεν έχουν ανακρυσταλλωθεί σε μεγάλο ποσοστό είναι παρόμοιες μεταξύ τους, ενώ αυτές που έχουν διαφέρουν. Δηλαδή, όσο πλησιάζει η ανακρυστάλλωση το πέρας της, οι μικροδομές διαφέρουν όλο και περισσότερο μεταξύ τους, λόγω της επιρροής της ενέργειας των ορίων των κόκκων που επηρεάζει με διαφορετικό τρόπο την εξέλιξη της μικροδομής και, πιο συγκεκριμένα, τις αλληλεπιδράσεις των ορίων.

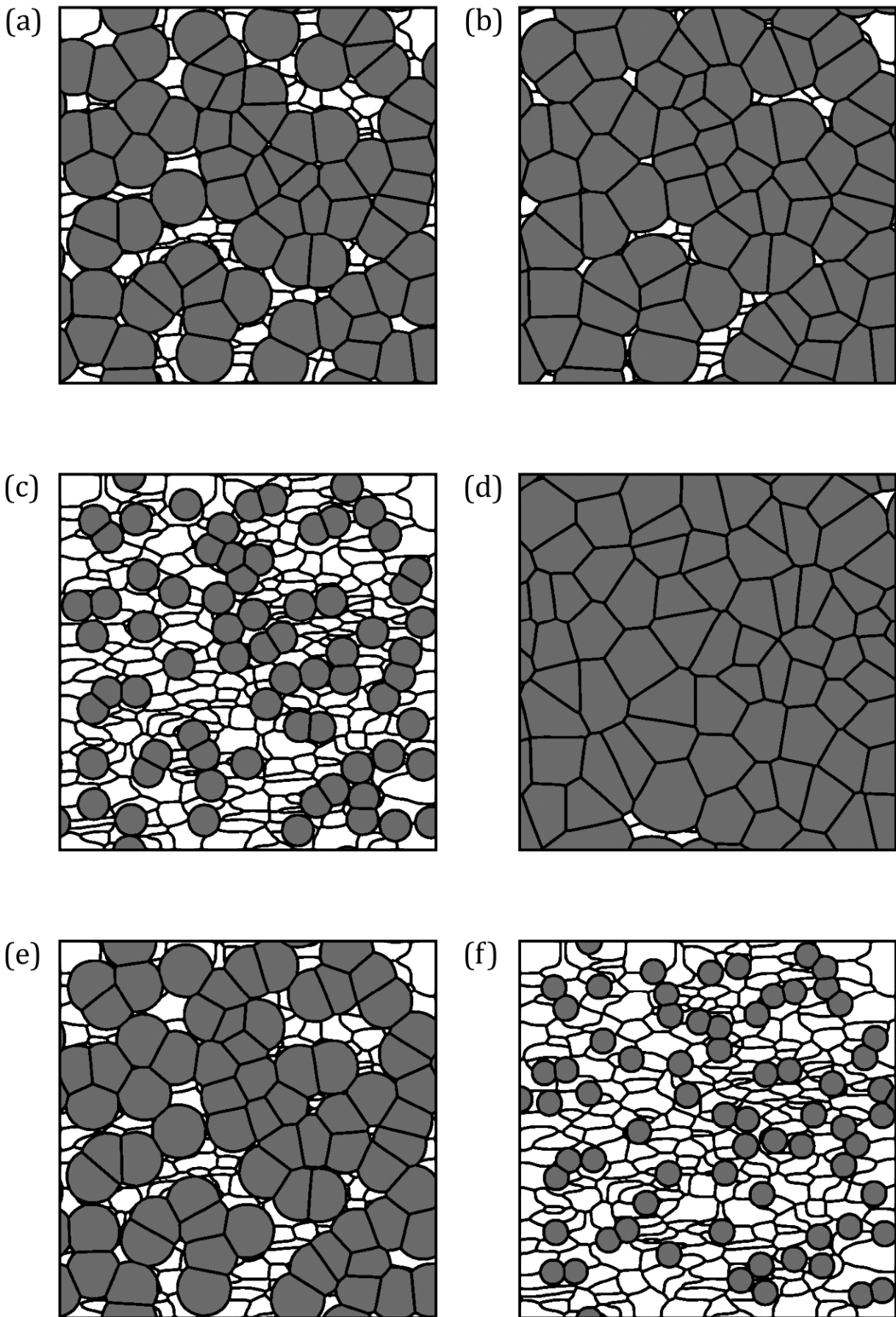
Η σημασία της θερμοκρασίας της ανόπτησης ως παραμέτρου επεξεργασίας είναι γνωστή εκ των προτέρων και, γι' αυτό, επιλέγεται ως ένα από τα χαρακτηριστικά για τα δεδομένα προπόνησης και ελέγχου του υποκατάστατου μοντέλου. Ωστόσο, η επιρροή της δεν αφορά μόνο στην ταχύτητα της ανακρυστάλλωσης αλλά και στην τελική μικροδομή και στα χαρακτηριστικά της, ανεξαρτήτως του χρονικού διαστήματος που χρειάστηκε για να ολοκληρωθεί το φαινόμενο. Στο Σχήμα 23, απεικονίζονται τρεις σχεδόν τελικές μικροδομές από υπολογιστικά πειράματα σε διαφορετικές θερμοκρασίες. Η μέση μορφολογία είναι περίπου η ίδια, αλλά τα συγκεκριμένα χαρακτηριστικά τους διαφέρουν.

Στο Σχήμα 24, απεικονίζονται έξι ενδεικτικές τελικές μικροδομές που προκύπτουν από έξι διαφορετικούς συνδυασμούς των παραμέτρων επεξεργασίας.



Σχήμα 23: Τρεις ενδεικτικές μικροδομές, αποτέλεσμα της ανόπτησης σε διαφορετικές θερμοκρασίες: (a) 1016 K – 10000 s, (b) 1067 K – 9500 s, (c) 1118 K – 5400 s





Σχήμα 24: Οι μικροδομές για έξι συνδυασμούς των παραμέτρων: (a)  $876 K - 8025 s$ , (b)  $1029 K - 6855 s$ , (c)  $927 K - 3735 s$ , (d)  $1093 K - 7635 s$ , (e)  $978 K - 5685 s$ , (f)

## 4.2 Microstructure Statistics

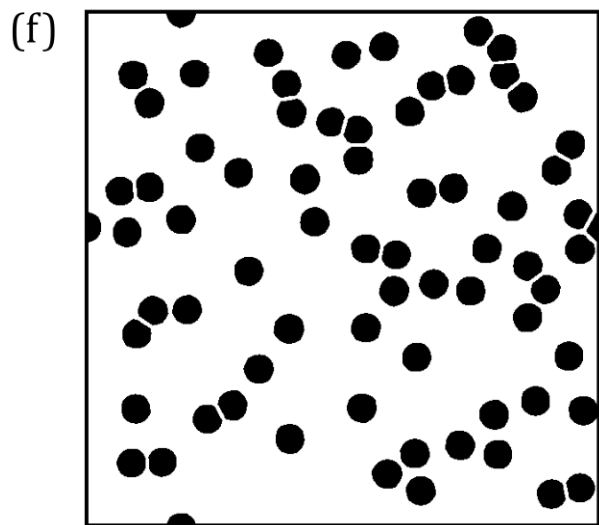
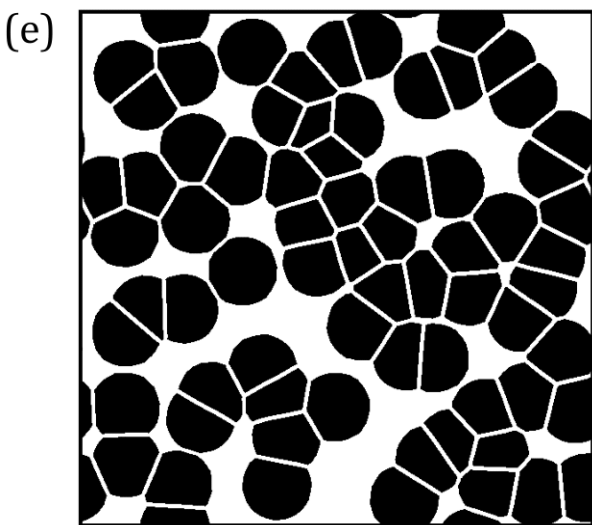
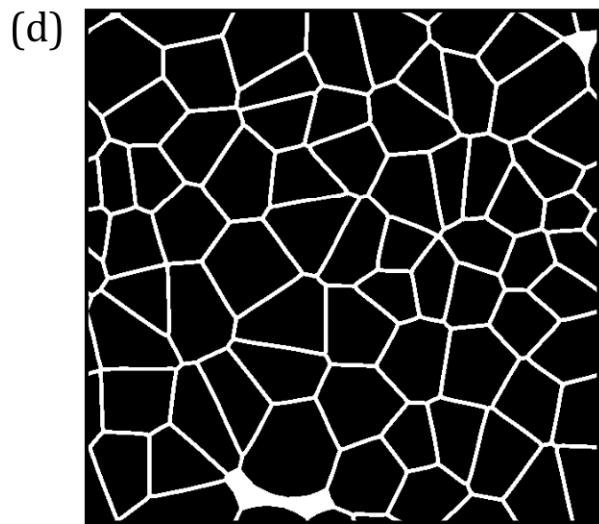
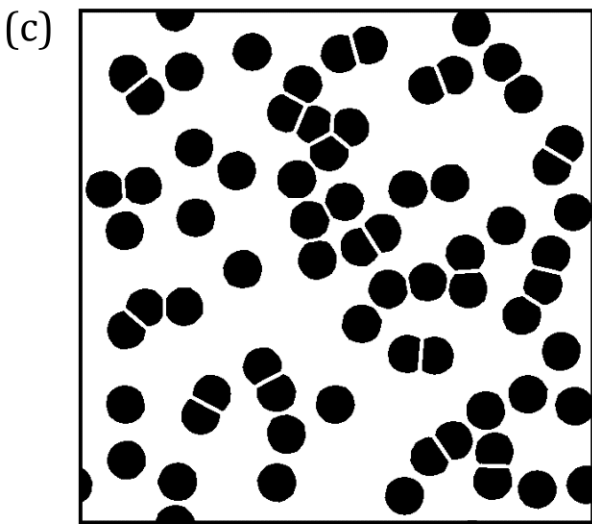
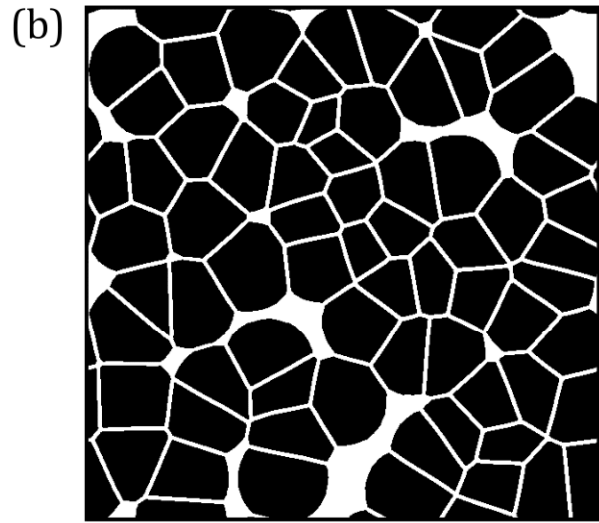
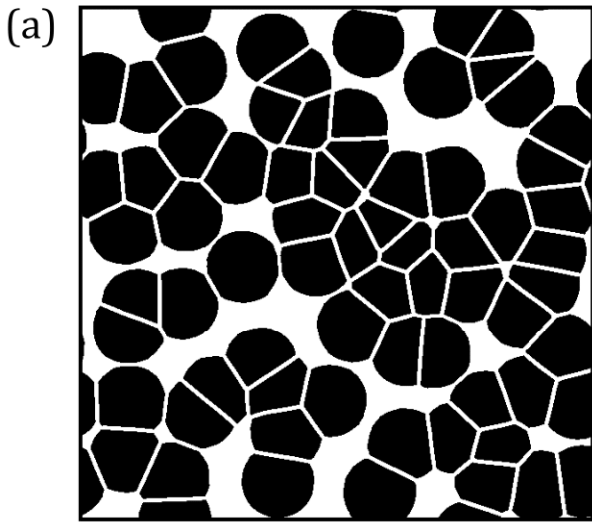
Σε αυτό το σημείο, προκύπτει η ανάγκη για την ποσοτικοποίηση των τελικών μικροδομών, ορισμένες από τις οποίες παρουσιάστηκαν προηγουμένως. Παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της εφαρμογής των «two-point statistics» και της PCA. Πριν, όμως, από την εφαρμογή τους, το σύνολο των μικροδομών θα πρέπει να ακολουθήσει μια διαδικασία προεπεξεργασίας, την τμηματοποίηση.

### 4.2.1 Segmentation

Η τμηματοποίηση εικόνων αφορά στον διαμερισμό της εικόνας σε ένα σύνολο από τμήματα που έχουν ενδιαφέρον ή αξία. Πιο αναλυτικά, κάθε pixel της εικόνας αντιστοιχίζεται με έναν χαρακτηρισμό, ο οποίος αφορά και συγκεκριμένα χαρακτηριστικά. Οπότε, τα pixels με τον ίδιο χαρακτηρισμό, ομαδοποιούνται και διαχωρίζονται από τα υπόλοιπα. Ένα ενδεχόμενο είναι ότι αυτά τα τμήματα χρήζουν περαιτέρω επεξεργασίας. Ένα άλλο ενδεχόμενο είναι η ανάγκη για αλλαγή της αναπαράστασης, έτσι ώστε να καταλήξουμε σε μια απεικόνιση με νόημα. Η πιο συνηθισμένη εφαρμογή της τμηματοποίησης είναι ο εντοπισμός και διαχωρισμός αντικειμένων και ορίων μεταξύ των αντικειμένων.

Οι μικροδομές στο σύνολο δεδομένων βρίσκονται σκόπιμα σε γκρι κλίμακα, κάτι που διευκολύνει την τμηματοποίηση. Τα pixels, γενικά, λαμβάνουν τιμές από το 0 έως το 255, ενώ το γκρι, στη συγκεκριμένη περίπτωση, αντιστοιχεί στην τιμή 106. Επίσης το περιβάλλον των τμημάτων είναι σχετικά απλό, οπότε η τμηματοποίηση διευκολύνεται περαιτέρω. Αυτό δε θα ίσχυε στην περίπτωση πειραματικών μικρογραφιών. Οι αρχικοί παραμορφωμένοι κόκκοι είναι άσπροι, με τα όριά τους να είναι μαύρα. Θέτουμε, λοιπόν, ένα εύρος τιμών ανάμεσα στις οποίες τα pixels ομαδοποιούνται και διαχωρίζονται από τα άλλα. Ορίζεται το διάστημα [70, 140], που περιλαμβάνει αφορά μόνο στους ανακρυσταλλωμένους κόκκους. Ως αποτέλεσμα, προκύπτει το τελικό σύνολο των δυαδικών μικροδομών, όπου κάθε pixel αφορά και μια ξεχωριστή κατάσταση. Τα άσπρα αντιστοιχίζονται με τους παραμορφωμένους κόκκους και τα μαύρα με τους ανακρυσταλλωμένους. Για αυτό το σύνολο, θα υπολογιστούν τα «two-point statistics». Στο Σχήμα 25, απεικονίζονται οι τμηματοποιημένες μικροδομές που αφορούν σε αυτές του Σχήματος 22.

Όλη η παραπάνω διαδικασία έλαβα χώρα αξιοποιώντας το λογισμικό Fiji [85], ένα λογισμικό για την ανάλυση και την επεξεργασία εικόνων.

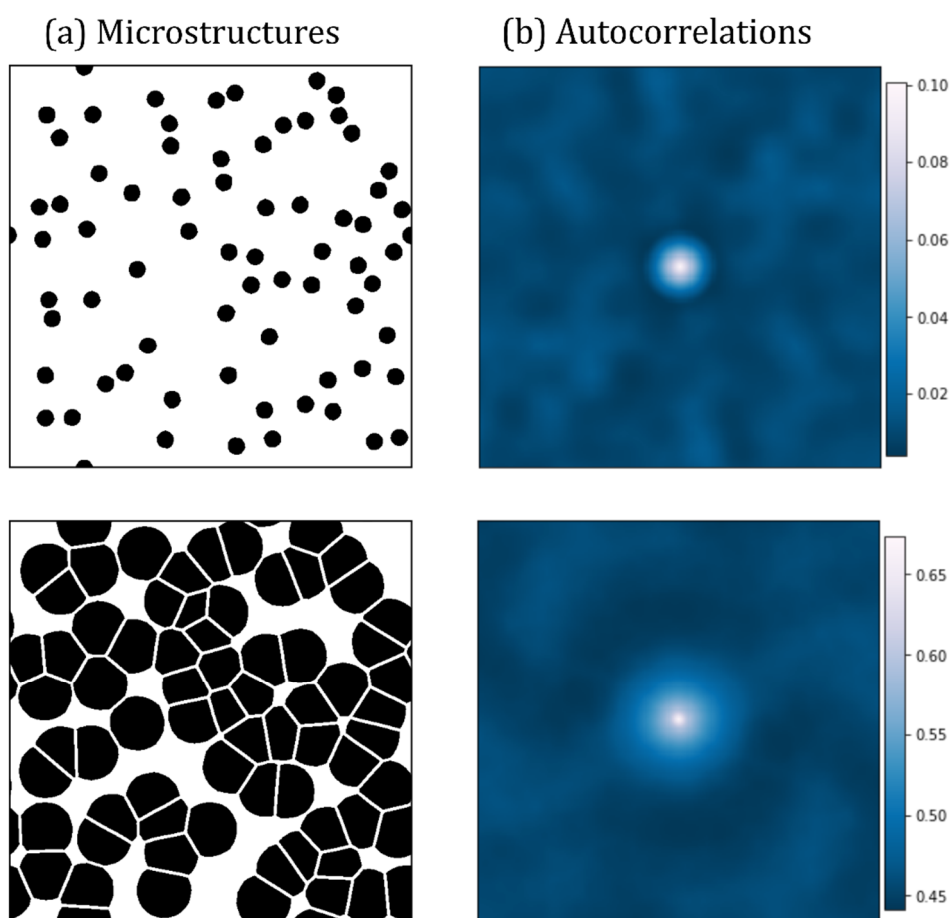


Σχήμα 25: Οι μικροδομές του σχήματος 22 έπειτα από τη διαδικασία της τμηματοποίησης.

## 4.2.2 Two-Point Statistics

Εφαρμόζονται τα «two-point statistics» στα σύνολα των δυαδικών μικροδομών που αφορούν και στην εξέλιξη της μικροδομής υπό συγκεκριμένες συνθήκες επεξεργασίας και στους συνδυασμούς που προέκυψαν από την LHS. Τα μεγέθη αυτά αποτυπώνουν σημαντικές πληροφορίες για τις μικροδομές. Αυτές είναι η μέση μορφολογία των ανακρυσταλλωμένων κόκκων που είναι σχεδόν ισαξονικοί, την κατανομή τους στο χώρο και το ποσοστό τους, δηλαδή το ποσοστό της ανακρυστάλλωσης.

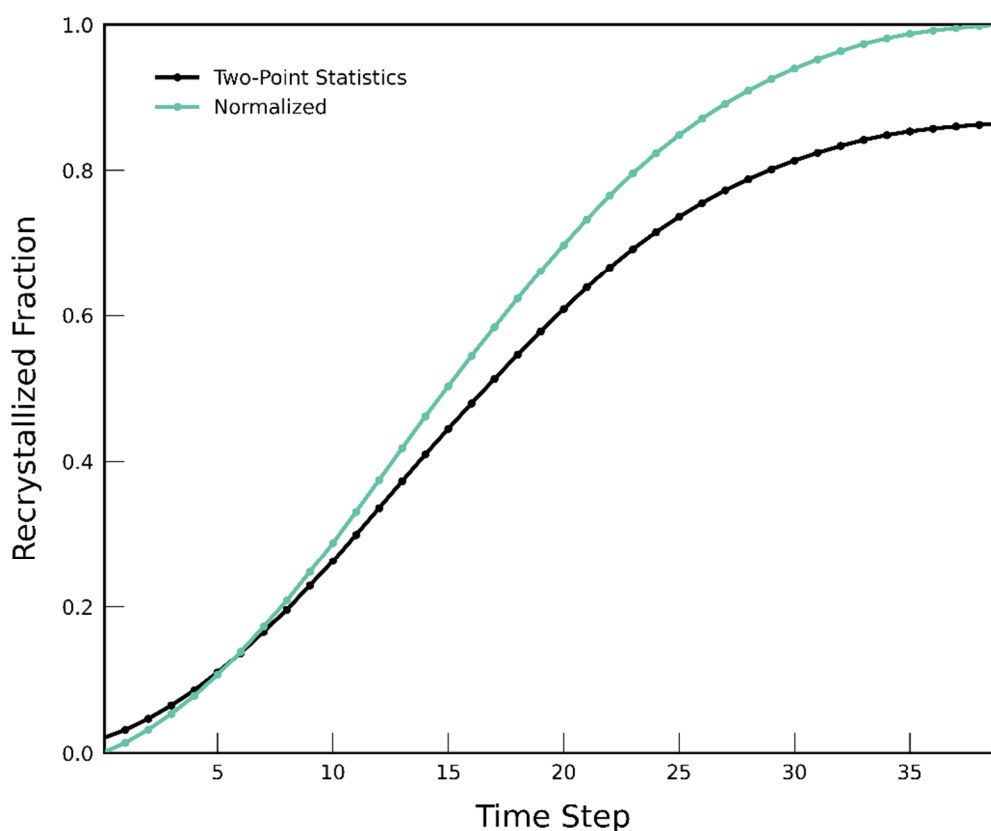
Στο Σχήμα 26, απεικονίζονται δύο ενδεικτικές δυαδικές μικροδομές και τα αντίστοιχα «two-point statistics» τους, τα οποία οπτικοποιούνται μέσω των χαρτών αυτοσυσχέτισης δεξιά. Στο κέντρο των χαρτών αυτοσυσχέτισης φαίνεται η μέση μορφολογία των νέων κόκκων. Η μικρή μεταβολή της φαίνεται μέσω της σύγκρισης των δύο χαρτών. Επίσης, ο δείκτης στο πάνω άκρο της κλίμακας χρωμάτων υποδεικνύει το εμβαδό των ανακρυσταλλωμένων κόκκων. Οι σχηματισμοί πέραν του κεντρικού μοτίβου υποδεικνύουν τη διασπορά ή κατανομή των



Σχήμα 26: (α) Ενδεικτικές δυαδικές μικροδομές και (β) τα αντίστοιχα «two-point statistics» τους.

φάσεων στο χώρο. Παρόλο που δεν είναι πάντοτε εύκολα ερμηνεύσιμοι από τον άνθρωπο, ένα υποκατάστατο μοντέλο μηχανικής μάθησης, δε θα αντιμετωπίσει πρόβλημα στο να τις αξιοποιήσει για τη δημιουργία και επέκταση των συνδέσεων ενδιαφέροντος.

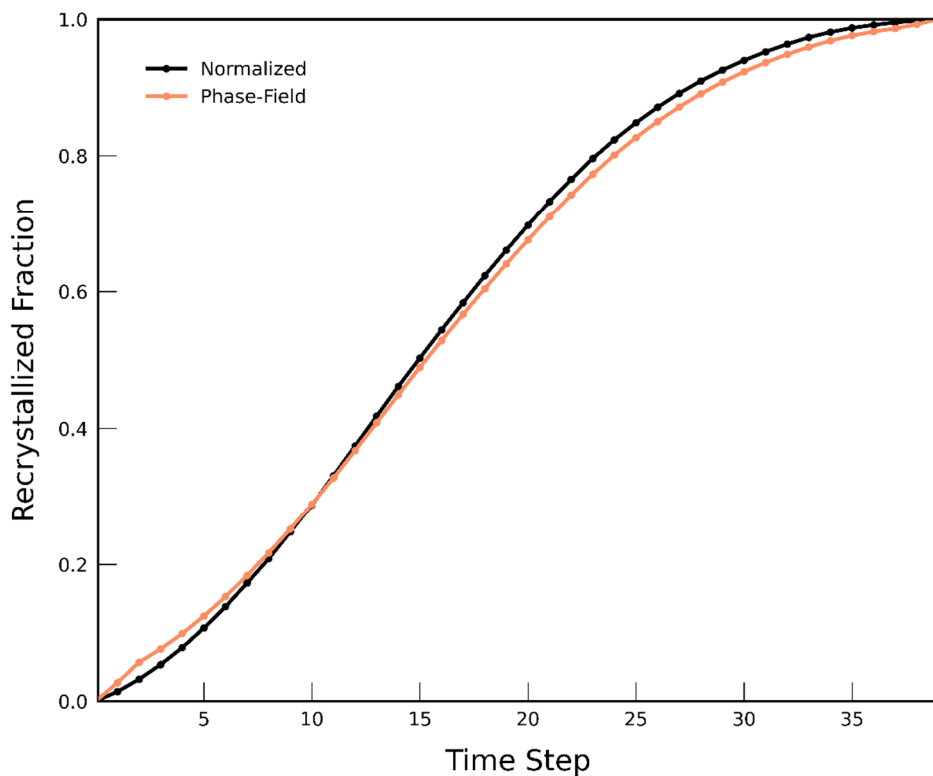
Αναγνωρίζοντας ότι το ποσοστό της ανακρυστάλλωσης είναι το βασικότερο γνώρισμα της προόδου του φαινομένου της ανακρυστάλλωσης, ελέγξαμε το ότι τα μεγέθη αυτά μπορούν να το αποτυπώσουν με ακρίβεια. Στο σύνολο των δυαδικών μικροδομών που αφορούν στην εξέλιξη της μικροδομής στους 978 K, εξάγουμε την τιμή από το κέντρο του χάρτη αυτοσυσχέτισης, η οποία αντιστοιχεί στο ποσοστό των νέων κόκκων. Στο Σχήμα 27, απεικονίζεται η μεταβολή του ποσοστού σε συνάρτηση με τα βήματα χρόνου στην εξέλιξη της μικροδομής. Είναι εμφανές ότι ακολουθεί μια σιγμοειδή πορεία, συμφωνώντας με τη γνωστή θεώρηση. Ωστόσο, η μέγιστη τιμή που φθάνει στο τέλος της εξέλιξης είναι ίση με μόλις 86%, καθότι η τμηματοποίηση ήταν αδύνατη και για τα όρια των κόκκων που, σε υπολογιστικό περιβάλλον, έχουν σημαντικό εμβαδό. Απεικονίζεται, λοιπόν, και η μεταβολή του κανονικοποιημένου ποσοστού, το οποίο ακολουθεί πλήρως τη γνωστή σιγμοειδή πορεία.



Σχήμα 27: Η εξέλιξη του ποσοστού της ανακρυστάλλωσης, όπως αυτό υπολογίζεται μέσω των «two-point statistics».

Το λογισμικό Micress, ωστόσο, προσφέρει και αυτό μετρήσεις για το ποσοστό της μικροδομής που έχει ανακρυσταλλωθεί. Αυτό είναι το μέγεθος που προσεγγίζει πιο πολύ την «αλήθεια», εφόσον προκύπτει παράλληλα με τους υπολογισμούς. Αν υπάρχει συσχέτιση μεταξύ των μεταβολών αυτού και του ποσοστού που προκύπτει από τα κέντρα των χαρτών αυτοσυσχέτισης, θα μπορούμε να συμπεράνουμε ότι τα μεγέθη στα οποία βασίζονται τα δεδομένα του υποκατάστατου μοντέλου αποτυπώνουν σε μεγάλο βαθμό την εξέλιξη της μικροδομής. Αυτό είναι ενθαρρυντικό διότι τα δεδομένα προπόνησης και ελέγχου του μοντέλου προσεγγίζουν σε μεγάλο βαθμό αυτά της εξέλιξης.

Πράγματι, η μεταβολή του προσεγγισμένου ποσοστού ακολουθεί μια σχεδόν όμοια πορεία με αυτή που υπολογίζεται κατευθείαν από το μοντέλο «phase-field» (Σχήμα 28). Παρόλο που οι τιμές του αρχικού ποσοστού δεν είναι ίσες με αυτές του ποσοστού από το Micress, ένα μοντέλο μηχανικής μάθησης δεν επηρεάζεται από τις τιμές αυτές καθ' αυτές αλλά από τις σχέσεις μεταξύ των τιμών στα σημείων δεδομένων. Οπότε, δεδομένου ότι η σχέση αυτή παραμένει ίδια κατά την κανονικοποίηση, το υποκατάστατο μοντέλο δε θα αντιμετωπίσει πρόβλημα στην ανακάλυψη συσχετίσεων.

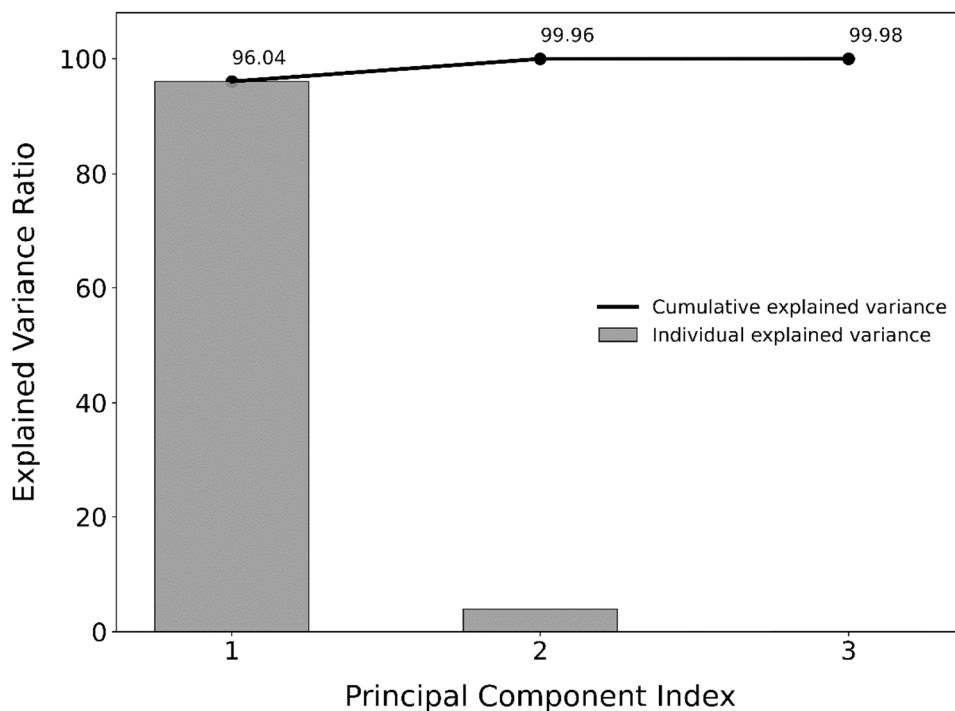


Σχήμα 28: Σύγκριση των υπολογισμένων ποσοστών της ανακρυστάλλωσης μέσω του μοντέλου «phase-field» και μέσω των «two-point statistics».

## 4.2.3 Principal Components

Η PCA εφαρμόζεται και στο σύνολο των στατιστικών των δεδομένων προπόνησης και στο σύνολο των στατιστικών των δεδομένων ελέγχου. Προσαρμόζεται, όμως, αποκλειστικά στο πρώτο, ώστε η αξιολόγηση του μοντέλου να είναι πιο αντικειμενική. Ως αποτέλεσμα, προκύπτουν τρία PCs, τα οποία κατατάσσονται ανάλογα με τη διασπορά των δεδομένων που αποτυπώνουν. Το ποσοστό της διασποράς αναλογεί και στο ποσοστό των πληροφοριών, που εμπεριέχονται στο καθ' ένα.

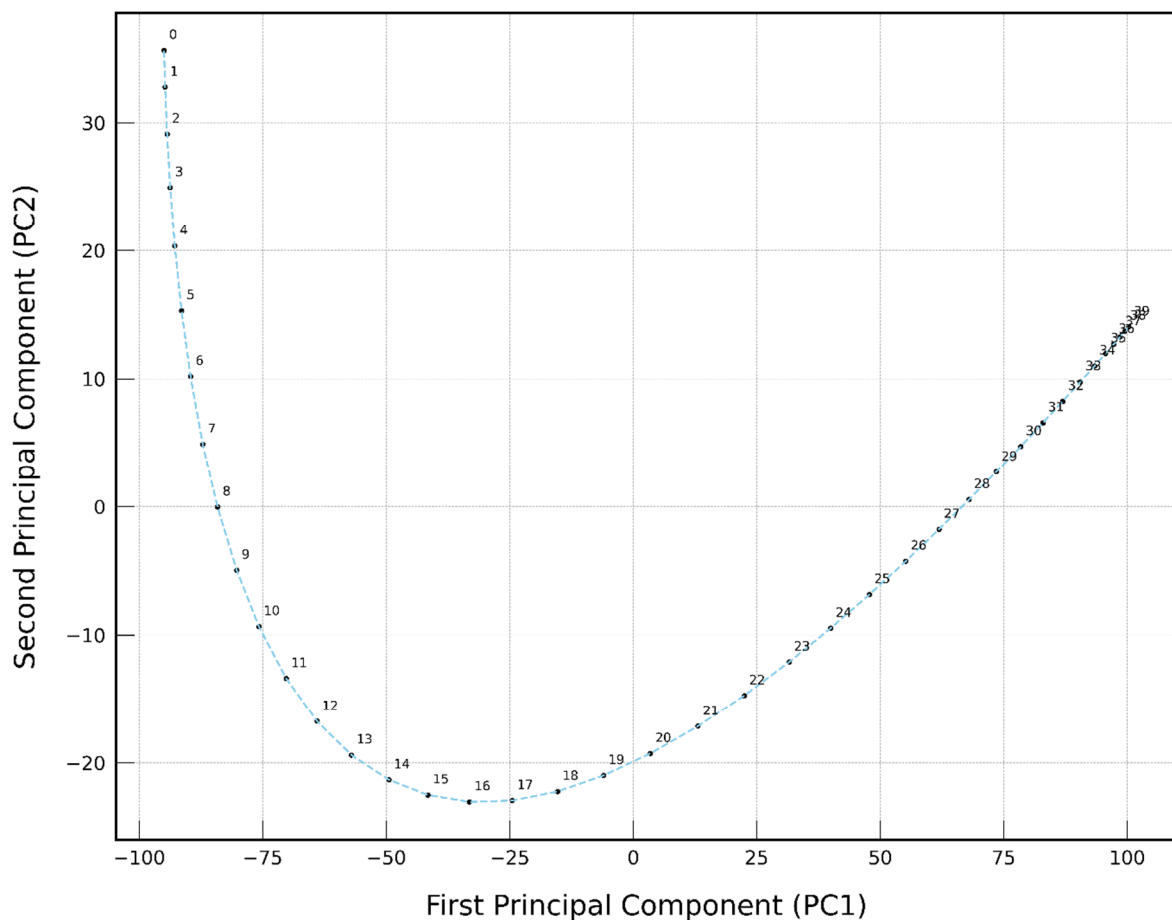
Οι πληροφορίες που μπορούν να μεταφερθούν αποκλειστικά μέσω του πρώτου PC αντιστοιχούν στο 96% των πληροφοριών που βρίσκονται σε όλο το σύνολο των στατιστικών της μικροδομής (Σχήμα 29). Αν ληφθεί υπόψη και το δεύτερο, πρακτικά λαμβάνονται υπόψη όλες σχεδόν οι πληροφορίες των δεδομένων προπόνησης για την έξοδο του υποκατάστατου μοντέλου. Εφόσον το κόστος κατασκευής δεύτερη όμοιου μοντέλου δεν είναι σημαντικό και επειδή το ποσοστό που αντιστοιχεί στο δεύτερο principal component, παρόλο που είναι σχετικά μικρό, προστίθεται στο συνολικό σφάλμα του υποκατάστατου μοντέλου, δημιουργούνται δύο ξεχωριστά μοντέλα. Το ένα αντιμετωπίζει το πρώτο PC ως την έξοδό του, ενώ το άλλο αντιμετωπίζει το δεύτερο.



Σχήμα 29: Ποσοστά της διασποράς που αποτυπώνει το εκάστοτε «principal component».

Η εξέλιξη, επίσης, αυτών των μεγεθών μπορεί έμμεσα να αποτυπώσει και την εξέλιξη της μικροδομής, όπως αυτή προσομοιώνεται από το μοντέλο «phase-field». Προηγουμένως, αναλύθηκε ένα σύνολο δεδομένων που αφορά στην εξέλιξη της μικροδομής υπό συγκεκριμένες συνθήκες. Θα ήταν ενδιαφέρουσα η οπτικοποίηση της πορείας της εξέλιξης των τιμών των PCs σε εκείνη την περίπτωση.

Στο Σχήμα 30 φαίνεται η εξέλιξη των δύο PCs, με κάθε σημείο να αντιστοιχεί και σε μία μικροδομή από τις σαράντα που βρίσκονται στο σύνολο της εξέλιξης. Παρατηρείται μια ξεκάθαρη πορεία, με τα σημεία να ακολουθούν την ίδια σειρά με αυτήν της εξέλιξης, όπως φαίνεται από τη διαδοχικότητα των σημείων. Νωρίς στον άξονα του χρόνου, δηλαδή με αρχή το σημείο με δείκτη 0, οι διαφορές μεταξύ των σημείων δεν είναι τόσο μεγάλες. Όσο η εξέλιξη προχωρά, οι διαφορές αυξάνονται, έως ένα σημείο. Η αύξηση αυτή υποδεικνύει ότι, ενώ περνάει το ίδιο χρονικό διάστημα από σημείο σε σημείο, οι διαφορές μεταξύ των αντίστοιχων μικροδομών μεγαλώνουν. Ωστόσο, μετά από ένα σημείο (περίπου το 26<sup>ο</sup> στη σειρά), οι διαφορές όλο και μειώνονται μέχρι να ελαχιστοποιηθούν, υποδεικνύοντας ότι και οι διαφορές



Σχήμα 30: Εξέλιξη των «principal components», τα οποία αφορούν στις δυαδικές μικροδομές του συνόλου της εξέλιξης.

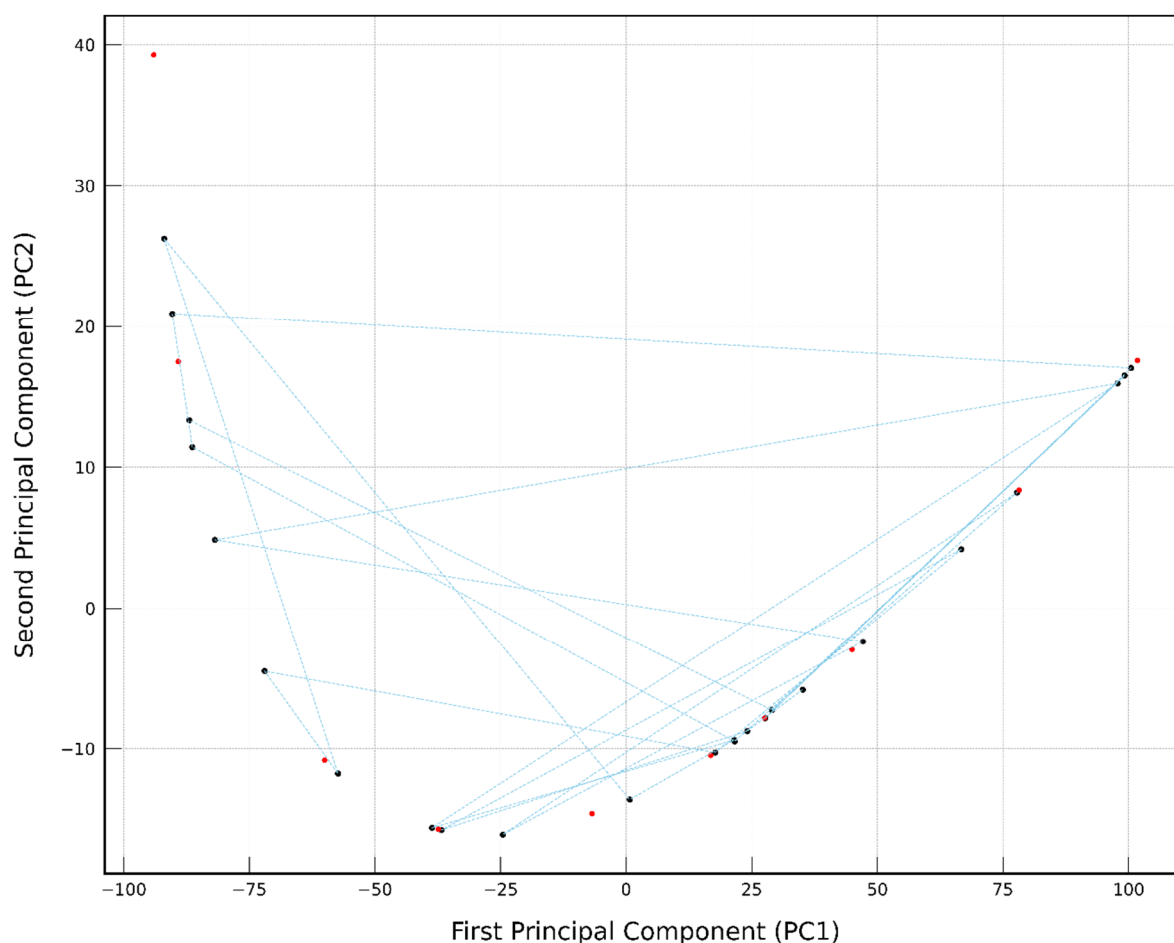


μεταξύ των αντίστοιχων μικροδομών ελαχιστοποιούνται. Αυτές οι παρατηρήσεις βρίσκονται σε πλήρη συμφωνία με τη θεώρηση για την πρόοδο του φαινομένου της ανακρυστάλλωσης και τη μεταβολή του ποσοστού αυτής. Επίσης, επιβεβαιώνεται η σιγμοειδής πορεία του ποσοστού, αφού αυτή υπονοεί την επιτάχυνση του φαινομένου νωρίς την εξέλιξη και την επιβράδυνση του μετά από ένα σημείο.

Το πρώτο PC αυξάνεται συνεχώς όσο η ανακρυστάλλωση προχωρά. Συνεπώς, αυτό συσχετίζεται σημαντικά με το ποσοστό των νέων κόκκων στη μικροδομή. Βέβαια, αυτό δεν είναι το μόνο χαρακτηριστικό που αποτυπώνεται σε αυτό το μέγεθος, αποτέλεσμα της εξαιρετικής μείωσης των διαστάσεων. Όσον αφορά στο δεύτερο PC, αυτό μεταβάλλεται με διαφορετικό τρόπο. Ξεκινά από μια πολύ υψηλή τιμή και μειώνεται μέχρι να ελαχιστοποιηθεί περίπου στη μέση της εξέλιξης, απ' όπου ξεκινά να αυξάνεται έως το τέλος της. Αυτό υποδεικνύει ότι, για παράδειγμα, η τελική μικροδομή έχει ορισμένα παρόμοια χαρακτηριστικά με μια που αφορά στην αρχή του φαινομένου. Αυτά τα χαρακτηριστικά θα πρέπει να αποτυπώνονται και στα «two-point statistics», εφόσον σε αυτά εφαρμόζεται η PCA. Η ερμηνευσιμότητα των αποτελεσμάτων, όμως, της PCA, είναι ένα δύσκολο εγχείρημα μεγάλης υποκειμενικότητας. Όπως στην περίπτωση της κανονικοποίησης, η PCA μετασχηματίζει τα δεδομένα στον αρχικό χώρο τους, αλλά συγκρατεί τις μεταξύ τους αποστάσεις. Έτσι, ένα μοντέλο μηχανικής μάθησης, ξανά, δε θα αντιμετωπίσει πρόβλημα στη δημιουργία συσχετίσεων ανάμεσα στις παραμέτρους επεξεργασίας και στα PCs, ή ανάμεσα σε αυτά και στις ιδιότητες. Οπότε, παρόλο που δε λαμβάνεται υπόψη το δεύτερο PC στην προπόνηση του μοντέλου, αυτό θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί, με θυσία στο υπολογιστικό και μη κόστος.

Συμπερασματικά, τα μεγέθη αυτά αποτυπώνουν την πορεία της εξέλιξης της μικροδομής σε δύο διαστάσεις, πολύ λιγότερες των αρχικών στατιστικών. Το γεγονός αυτό είναι ενθαρρυντικό, αφού τα δεδομένα προπόνησης και ελέγχου του υποκατάστατου μοντέλου προσεγγίζουν, όπως προειπώθηκε, την εξέλιξη της μικροδομής.

Στη συνέχεια, η PCA εφαρμόζεται στο σύνολο των στατιστικών της μικροδομών που προέκυψαν από τα υπολογιστικά πειράματα του «phase-field» με τις τιμές που ορίστηκαν από την LHS. Στο Σχήμα 31 απεικονίζονται τα σημεία στον δισδιάστατο χώρο των PCs. Τα μαύρα σημεία αφορούν στα σημεία των δεδομένων προπόνησης, ενώ τα κόκκινα σημεία στα σημεία των δεδομένων ελέγχου.



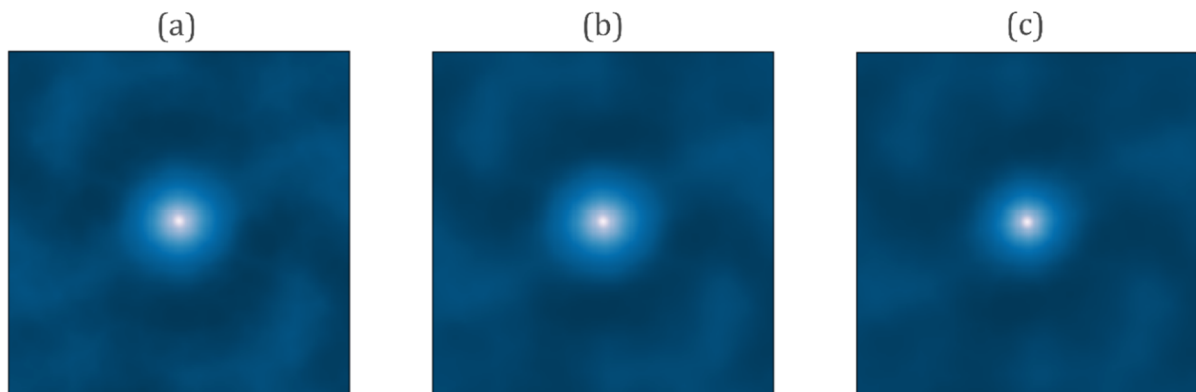
Σχήμα 31: Τα «principal components» που αντιστοιχούν στις δυαδικές μικροδομές των δεδομένων προπόνησης και ελέγχου του υποκατάστατου μοντέλου.

Όπως παρατηρείται, τα σημεία ακολουθούν την ίδια πορεία με αυτά του Σχήματος 28, προσεγγίζοντας την εξέλιξη. Για άλλη μια φορά, αποδεικνύεται η ισχύς της μεθόδου δειγματοληψίας LHS για τον προσδιορισμό των κατάλληλων σημείων στο χώρο των παραμέτρων ενδιαφέροντος. Τα χαρακτηριστικά εισόδου, η θερμοκρασία και διάρκεια της ανόπτησης, είναι διαφορετικά. Ωστόσο, πολλά από τα σημεία προσεγγίζουν κάποια άλλα. Εφόσον τα σημεία που βρίσκονται κοντά μεταξύ τους υποδυκνύουν παρόμοιες μικροδομές, αναδεικνύεται το γεγονός ότι διαφορετικές παράμετροι επεξεργασίας μπορούν να οδηγήσουν σε παρόμοιες μικροδομές. Αυτό είναι ένα χαρακτηριστικό, το οποίο θα πρέπει να ανακαλυφθεί από το υποκατάστατο μοντέλο. Ο ορισμός ενός περιοδικού πυρήνα μπορεί να βοηθήσει στην «προδιάθεση» του μοντέλου να το αναγνωρίσει.

Η ισχύς της PCA αποδεικνύεται αν ληφθεί υπόψη ότι τα αρχικά δεδομένα των στατιστικών των μικροδομών χαρακτηρίζονταν από 136242 διαστάσεις ανά μικροδομή, ενώ τώρα αντιστοιχίζονται ένα ή δύο μεγέθη με την κάθε μία. Αυτό διευκολύνει σε τεράστιο βαθμό τη μετέπειτα προπόνηση του μοντέλου.

Ο ορθογώνιος μετασχηματισμός, που λαμβάνει χώρα κατά την εφαρμογή της PCA, επιτρέπει την επιστροφή στο χώρο των αρχικών διαστάσεων. Δηλαδή υπάρχει η δυνατότητα αναδόμησης των στατιστικών από τα λίγα PCs. Στο Σχήμα 32 απεικονίζονται και συγκρίνονται τρεις χάρτες αυτοσυσχέτισης που αφορούν τα ίδια «two-point statistics» για την ίδια μικροδομή. Τα αρχικά στατιστικά οπτικοποιούνται στο 30(a). Το 30(b) πρόκειται για τα στατιστικά που προήλθαν από τα PCs, αξιοποιώντας και τα δύο, ενώ το 30(c) αφορά στα στατιστικά που αναδομήθηκαν μόνο από το πρώτο PC. Και στα τρία, το κεντρικό μοτίβο είναι πρακτικά το ίδιο, με το τρίτο να έχει μια μικρή απόκλιση στο μέγεθος. Όσον αφορά στους υπολοίπους σχηματισμούς, και αυτοί είναι σχεδόν όμοιοι. Ο τρίτος χάρτης είναι και αυτός με τη λιγότερο εμφανή απόκλιση, αφού αναδομήθηκε μόνο με το 96% των πληροφοριών που βρίσκονται στα στατιστικά, ενώ ο δεύτερος με σχεδόν το 100%.

Γίνεται εμφανής η απόδοση και ακρίβεια της PCA, τόσο για τη μείωση των διαστάσεων του συνόλου δεδομένων, όσο και για την αναδόμηση των αρχικών. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, εφόσον η PCA εφαρμόστηκε με επιτυχία, τα δύο πρώτα PCs μπορούν να αντιμετωπιστούν ως οι παράμετροι εξόδου για τα δύο ξεχωριστά (αλλά παρόμοια μοντέλα). Κάθε μοντέλο θα αφορά και ένα PC, με τα στατιστικά να αναδομούνται από τις προβλεπόμενες τιμές τους. Τα δύο PCs είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους, κάτι που είναι εγγενές χαρακτηριστικό της PCA, οπότε η κατασκευή δύο ξεχωριστών μοντέλων έχει αξία.



Σχήμα 32: Οπτικοποίηση των: (a) αρχικών στατιστικών, (b) των στατιστικών που αναδομούνται χρησιμοποιώντας και τα δύο «principal components», (c) των στατιστικών που αναδομούνται μόνο μέσω του πρώτου «principal component».

## 4.3 Reduced-Order Models

Μετά την παραγωγή και την προετοιμασία των δεδομένων προπόνησης και ελέγχου, μπορεί να ακολουθήσει η κατασκευή των δύο μοντέλων. Η συνάρτηση του μέσου θεωρείται μηδενική και για τα δύο, ώστε να συμφωνούν με τα δεδομένα εξόδου που έχουν τυποποιηθεί. Οπότε, πρέπει τώρα να οριστούν οι κατάλληλοι πυρήνες με τις κατάλληλες παραμέτρους. Αρχικά, συγκρίνουμε αρκετούς υποψήφιους πυρήνες και επιλέγουμε τον καλύτερο (για κάθε μοντέλο GPR) με κριτήριο την απόδοση.

Ορίζοντας τους δύο πυρήνες, ορίζονται και τα αντίστοιχα μοντέλα. Ορίστηκαν οι οκτώ αρχικοί υποψήφιοι πυρήνες, οπότε κατασκευάστηκαν και οκτώ αρχικά υποψήφια μοντέλα GPR για κάθε PC. Αυτά θα είναι και τα μοντέλα που θα συγκριθούν για την επιλογή του πιο αποδοτικού, με την έμμεση επιλογή του καλύτερου πυρήνα. Στο υποκεφάλαιο 3.3.2, αναφερθήκαμε στην αυτόματη βελτιστοποίηση των παραμέτρων ενός πυρήνα, μέσω της μεγιστοποίησης της οριακής πιθανότητας. Λαμβάνοντας υπόψη αυτή την αρχή, ακολουθεί η βελτιστοποίηση των διαφορετικών παραμέτρων για τους οκτώ πυρήνες.

Στον Πίνακα 4 φαίνονται οι τέσσερις βελτιστοποιημένοι παράμετροι του πιο απλού πυρήνα, του πυρήνα SE-ARD για την περίπτωση του μοντέλου που αντιστοιχεί στο PC1. Οι τιμές αυτές είναι, ως ένα βαθμό, ερμηνεύσιμες. Οι παραπλήσιες τιμές των κλιμάκων μεγέθους του υπονοούν ότι οι παράμετροι επεξεργασίας έχουν αναλόγως παραπλήσιες επιρροές στην έξοδο και, συνεπώς, στην τελική μικροδομή. Στον Πίνακα 5 φαίνονται οι αντίστοιχες παράμετροι του πυρήνα Matern-ARD για το μοντέλο του PC2. Η μικρότερη κλίμακα μεγέθους της δεύτερης διάστασης, συγκριτικά με την πρώτη, μεταφράζεται στο ότι η επιρροή της διάρκειας της ανόπτησης στην έξοδο (PC2) είναι μεγαλύτερη από αυτήν της θερμοκρασίας. Η διασπορά υποδεικνύει τη μέση απόσταση των τιμών της συνάρτησης από το μέσο της, οπότε είναι απλώς μια παράμετρος που μετατρέπει την έξοδο στην κατάλληλη κλίμακα.

Πίνακας 4: Παράμετροι του SE-ARD πυρήνα για το πρώτο μοντέλο (PC1).

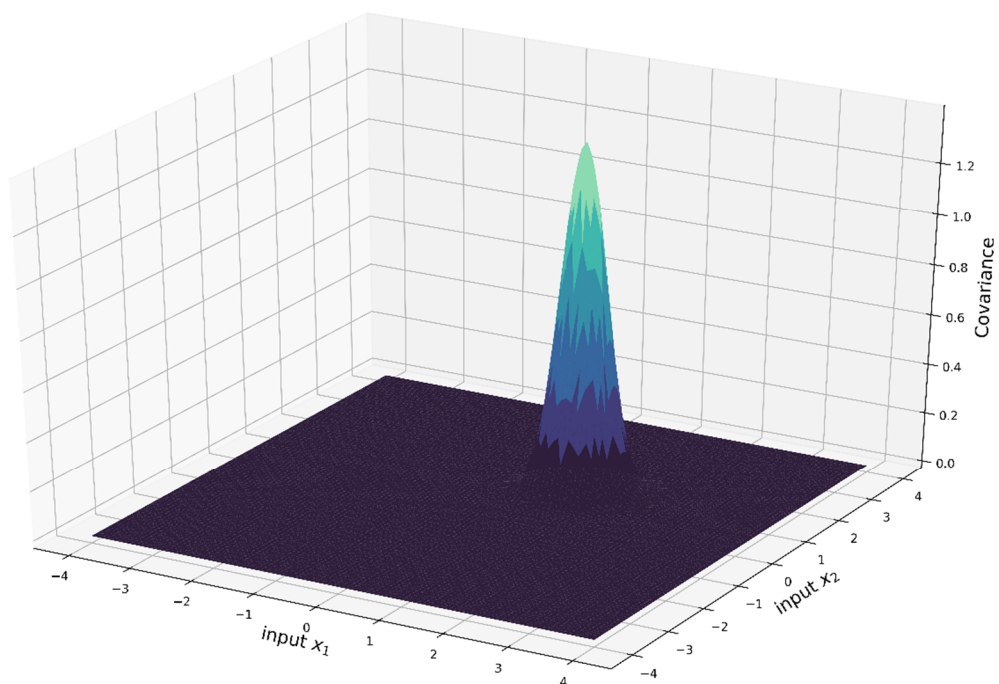
Κλίμακα μεγέθους (1 <sup>η</sup> διάσταση)	0.3319
Κλίμακα μεγέθους (2 <sup>η</sup> διάσταση)	0.3077
Διασπορά	1.3918
Διασπορά θορύβου	0.0004

Πίνακας 5: Παράμετροι του Matern-ARD πυρήνα για το δεύτερο μοντέλο (PC2).

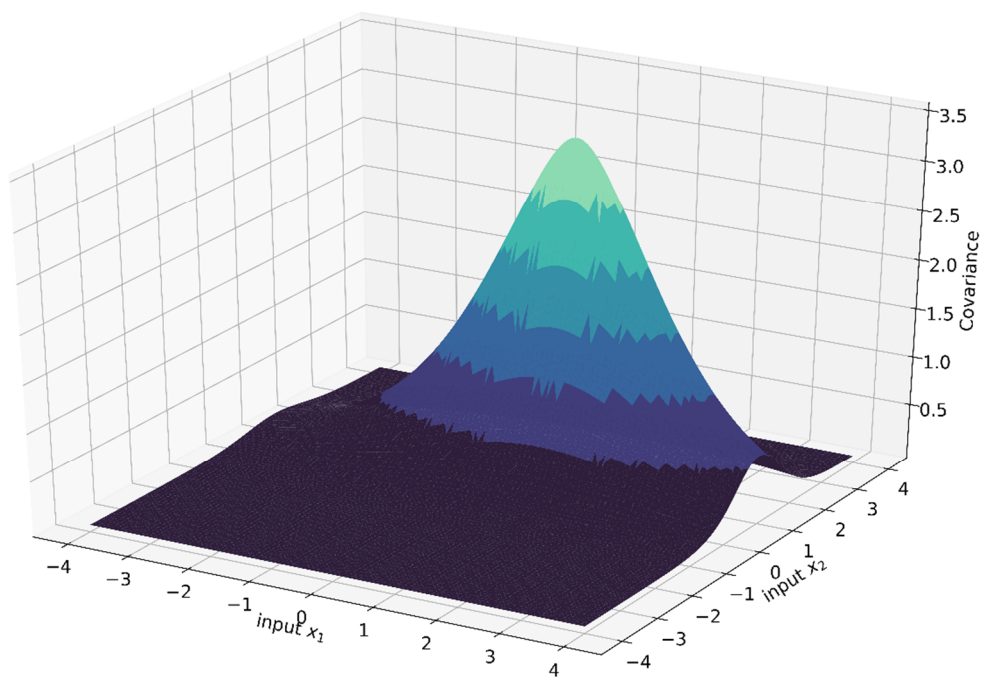
Κλίμακα μεγέθους (1 <sup>η</sup> διάσταση)	1.6680
Κλίμακα μεγέθους (2 <sup>η</sup> διάσταση)	0.5624
Διασπορά	3.5018
Διασπορά θορύβου	0.0000

Η τρισδιάστατη απεικόνιση του SE-ARD πυρήνα στο Σχήμα 33 μπορεί να μεταφέρει τις ίδιες πληροφορίες με τον Πίνακα 4. Παρατηρούμε ότι ο κώνος επεκτείνεται προς κάθε κατεύθυνση με σχεδόν τον ίδιο τρόπο. Αυτό υποδεικνύει ότι οι κλίμακες μεγέθους του είναι σχεδόν ίσες. Οι κλίμακες μεγέθους, επίσης, προσδιορίζουν και την απόσταση της αρχής των αξόνων από τα σημεία μηδενισμού του πυρήνα. Η διασπορά ορίζει την απόσταση στον z-άξονα που θα φθάσει η συνάρτηση. Εδώ παρατηρούμε ότι προσεγγίζει την τιμή 1.4. Η τρισδιάστατη απεικόνιση του Matern-ARD πυρήνα φαίνεται στο Σχήμα 34. Αυτός μηδενίζεται γρηγορότερα όταν μετακινούμαστε στη δεύτερη διάσταση (συγκριτικά με την πρώτη), δηλαδή στη διάσταση της διάρκειας. Αυτό προκύπτει από την μικρότερη κλίμακα μεγέθους της συγκεκριμένης διάστασης. Η διασπορά, τώρα, φαίνεται ότι προσεγγίζει την τιμή 3.5.

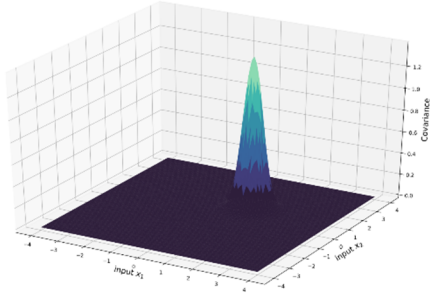
Το σύνολο των βελτιστοποιημένων πυρήνων για το πρώτο μοντέλο, που αντιμετωπίζει το PC1 ως έξοδο, φαίνεται στο Σχήμα 35, με ορισμένους να αποκλίνουν σημαντικά από τον SE-ARD. Στους πυρήνες (g) και (h), στους οποίους προσδόθηκαν αρχικά περιοδικά χαρακτηριστικά, διακρίνουμε ότι, στην βελτιστοποιημένη τους μορφή, αυτά δεν υπάρχουν. Η υπόθεση που έγινε στο υποκεφάλαιο 3.3.2 για την ύπαρξη περιοδικότητας, δε βοήθησε στην κατασκευή του μοντέλου, αφού τα χαρακτηριστικά αυτά αποτυπώνονται πλήρως μέσω ενός κανονικού πυρήνα. Παρατηρείται, επίσης, ότι και αυτοί και οι υπόλοιποι τείνουν προς μια παρόμοια μορφή με αυτή του SE-ARD, οπότε τα χαρακτηριστικά της συνάρτησης, του μοντέλου «phase-field», μπορούν να αποτυπωθούν ίσως πλήρως μέσω αυτού. Βέβαια, αυτό θα φανεί και στον έλεγχο των υποψήφιων μοντέλων. Παρόλο που αρκετοί πυρήνες μοιάζουν μεταξύ τους, άλλοι διαφέρουν αρκετά. Αυτό προκύπτει λόγω των διαφορετικών υποθέσεων που γίνονται από τον κάθε ένα για τη δομή των δεδομένων και τα χαρακτηριστικά της συνάρτησης. Οπότε, εφόσον ξεκινούν με διαφορετικές εκ των προτέρων *πεποιθήσεις*, δε μπορούν πάντοτε να καταλήξουν στο ίδιο *συμπέρασμα*.



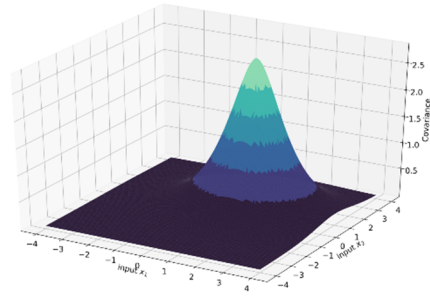
Σχήμα 33: Ο βελτιστοποιημένος SE-ARD πυρήνας (PC1 Model).



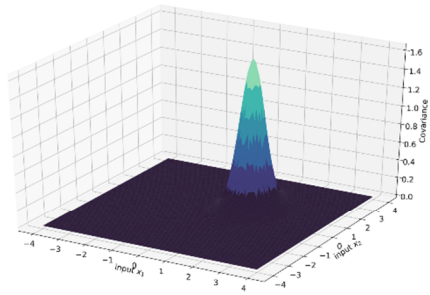
Σχήμα 34: Ο βελτιστοποιημένος Matern-ARD πυρήνας (PC2 Model).



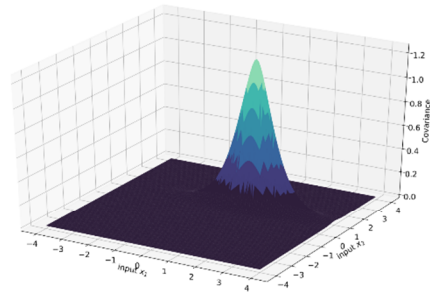
(a)



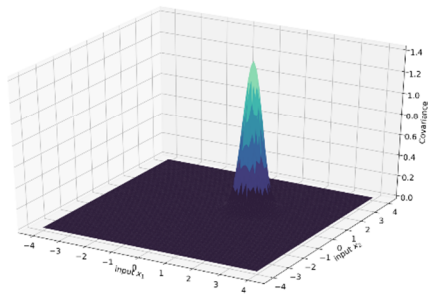
(b)



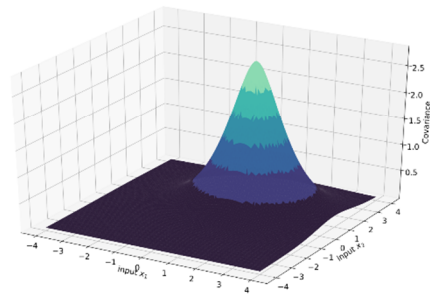
(c)



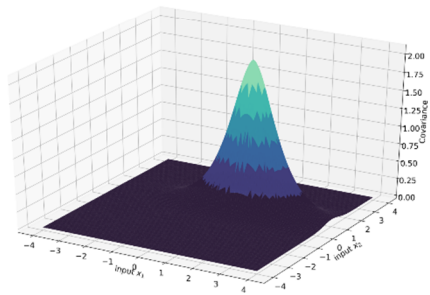
(d)



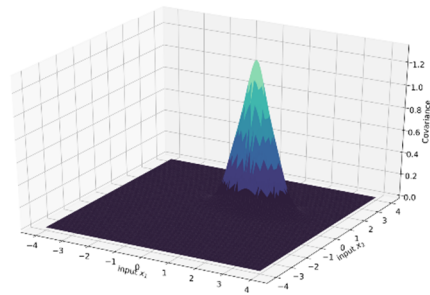
(e)



(f)



(g)



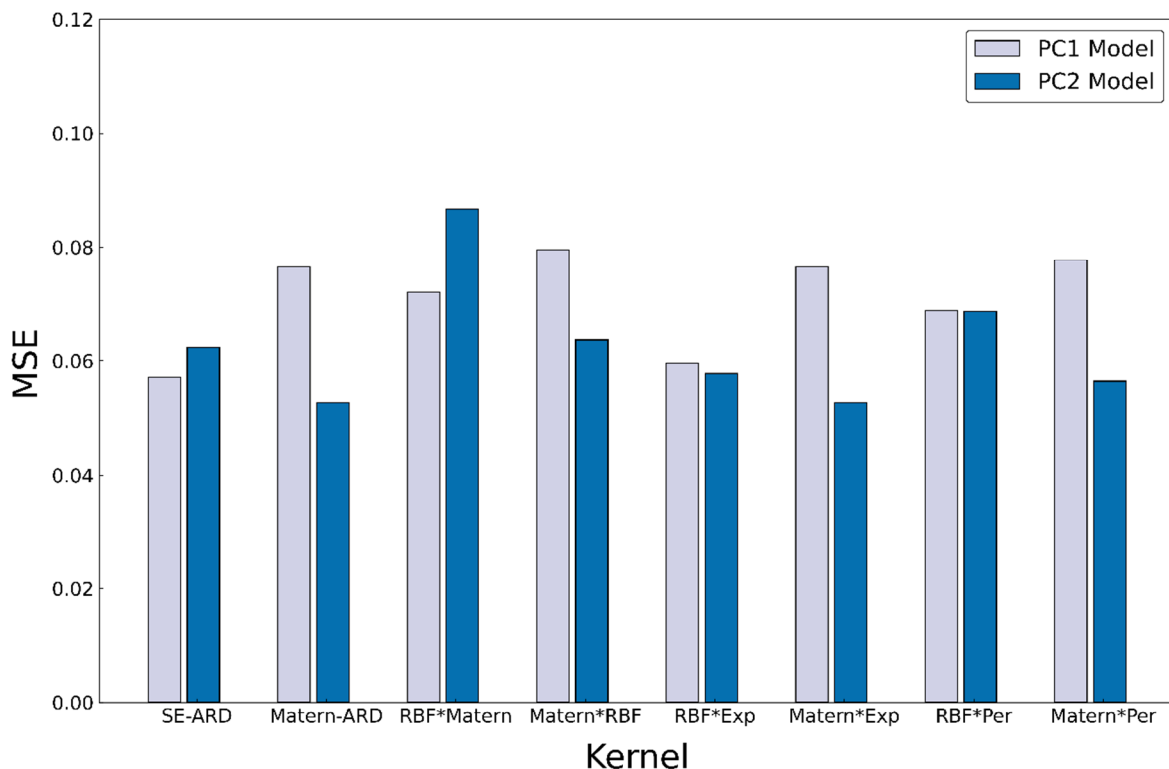
(h)

Σχήμα 35: Οι βελτιστοποιημένοι πυρήνες για το μοντέλο που αντιστοιχεί στο πρώτο PC: (a) SE-ARD, (b) Matern32 – ARD, (c) SE[0] \* Matern32[1], (d) SE[1] \* Matern32[0], (e) SE \* Exponential, (f) Matern32 \* Exponential, (g) SE \* Periodic, (h) Matern \* Periodic

Ακολουθεί ο προσδιορισμός της απόδοσης των οκτώ υποψήφιων μοντέλων για κάθε PC, με βάση ένα κριτήριο, το οποίο εφαρμόζεται συχνά σε προβλήματα παλινδρόμησης και για την αξιολόγηση μοντέλων GPR. Αυτό είναι το «mean squared error» (MSE). Αν  $\hat{y}_i$  είναι η προβλεπόμενη τιμή για το  $n$ -οστό σημείο των δεδομένων ελέγχου και  $y_i$  είναι η αντίστοιχη πραγματική τιμή, τότε το MSE για  $n$  σημεία δεδομένων έχει ως εξής:

$$MSE(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (47)$$

Τα αποτελέσματα του υπολογισμού του μεγέθους για τα 16 (8 για το κάθε PC) κατασκευασμένα μοντέλα, από τους 16 πυρήνες, φαίνονται στο Σχήμα 16. Οι τιμές του δείκτη MSE είναι, γενικά, παραπλήσιες και για τα δύο μοντέλα. Η γενική αυτή ομοιότητα των αποδόσεων μπορεί να γίνει κατανοητή εκ των υστέρων αν ληφθεί υπόψη η ομοιότητα στη δομή των τελικών πυρήνων, όπως αυτή φαίνεται και στο Σχήμα 35. Αν δύο πυρήνες έχουν παρόμοια δομή, τότε θα οδηγήσουν σε μοντέλα με παρόμοια ακρίβεια. Επίσης, οι ίδιοι πυρήνες οδηγούν σε μοντέλα με διαφορετικές τιμές MSE. Αυτό σημαίνει ότι τα δύο σύνολα δεδομένων για τα δύο ξεχωριστά μοντέλα έχουν διαφορετικά χαρακτηριστικά (που αφορούν αποκλειστικά στην έξοδο). Διαφορετικά σύνολα δεδομένα οδηγούν σε διαφορετικούς τελικούς πυρήνες.



Σχήμα 36: Σύγκριση της απόδοσης των οκτώ μοντέλων (για κάθε PC), που προκύπτουν από τους βελτιστοποιημένους πυρήνες.



Αρχικά, όσον αφορά στο μοντέλο που αντιμετωπίζει το PC1 ως έξοδο, το υποψήφιο μοντέλο με την καλύτερη απόδοση είναι αυτό με τον πιο απλό πυρήνα, τον SE-ARD (Σχήμα 33). Ενώ όλοι οι υπόλοιποι πυρήνες έκαναν εκλεπτυσμένες υποθέσεις για τη δομή και τα χαρακτηριστικά της συνάρτησης και, συνεπώς, για τα δεδομένα, αυτές δε βοήθησαν στη δημιουργία ενός αποδοτικού μοντέλου. Οι αποδόσεις είναι και χαμηλότερες και, για πολλούς από τους πυρήνες, οι παράμετροί τους δεν είναι ερμηνεύσιμες. Συνεπώς, επιλέγεται ο SE-ARD ως πυρήνας για το πρώτο μοντέλο GPR, αφού χαρακτηρίζεται και από ερμηνεύσιμες παραμέτρους και οδηγεί σε υψηλότερη απόδοση.

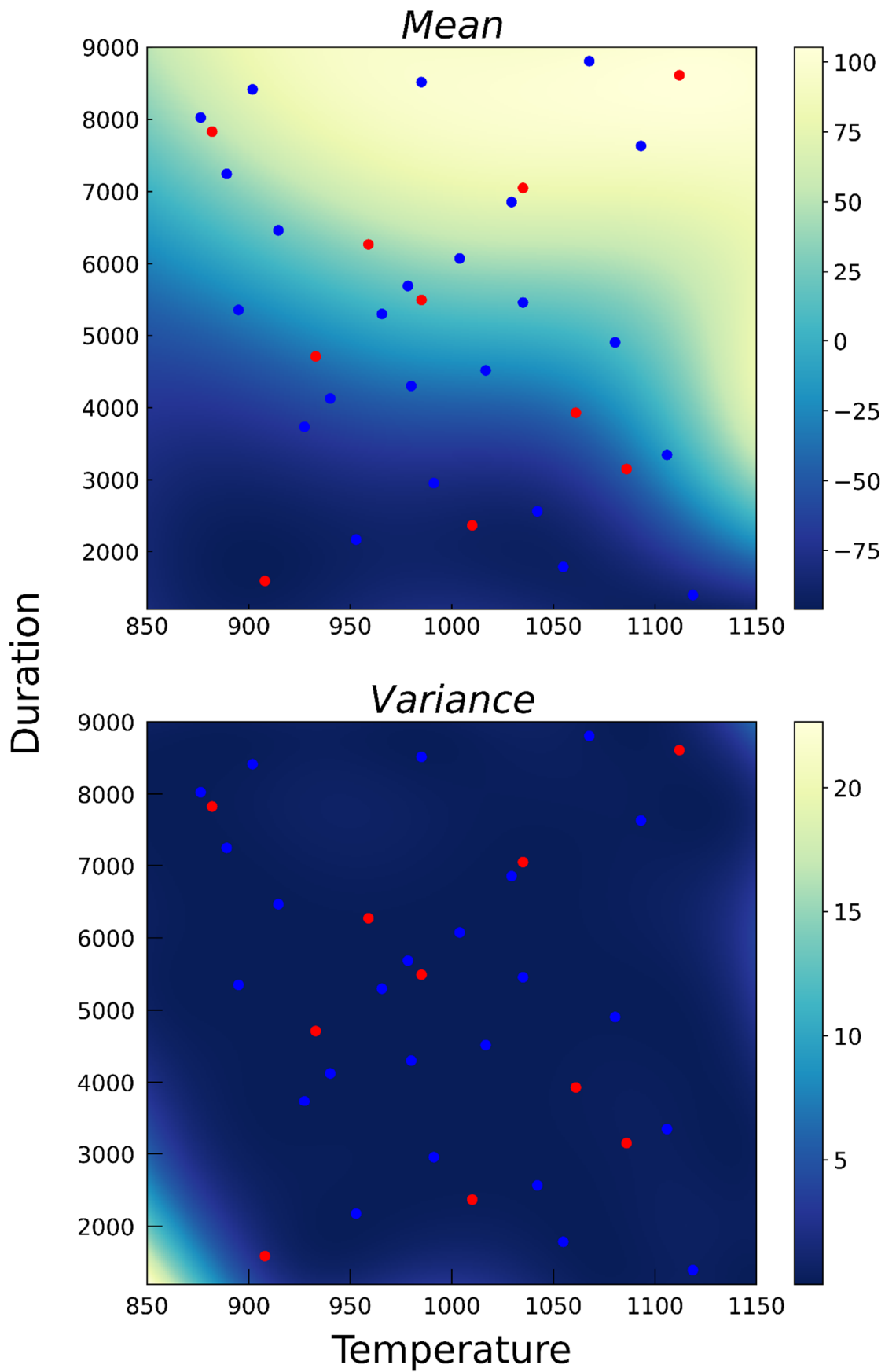
Όσον αφορά στο μοντέλο που αντιμετωπίζει το PC2 ως έξοδο, το υποψήφιο μοντέλο, τώρα, με την καλύτερη απόδοση είναι αυτό με τον πυρήνα Matern-ARD (Σχήμα 34). Αυτός είναι το ίδιο ερμηνεύσιμος με τον SE-ARD, αλλά διευκολύνει την προσέγγιση πιο απότομων συναρτήσεων. Τα δεδομένα, σε αυτή την περίπτωση, απαιτούν αυτή την προσέγγιση, οπότε επιλέγεται για τους ίδιους λόγους με τον προηγούμενο.

Πίνακας 6: Τιμές MSE για τα δύο μοντέλα GPR.

	PC1 Model	PC2 Model
MSE	0.0571	0.0623

Τα μοντέλα GPR έχουν προπονηθεί και ελεγχθεί, όπως αναλύσαμε προηγουμένως. Τώρα, δημιουργείται ένα δισδιάστατο πλέγμα στους κόμβους του οποίου θα υπολογιστεί η προβλεπόμενη μέση τιμή και η διασπορά, οι οποίες επιστρέφουν στις αρχικές κλίμακες, αφού αποκανονικοποιηθούν. Οι διαστάσεις του πλέγματος ορίζονται έτσι ώστε να εμπεριέχουν τα σημεία των δεδομένων και το πλήθος των κόμβων έτσι ώστε το πλέγμα να είναι σχετικά πυκνό για την οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων.

Τα αποτελέσματα της παραπάνω διάταξης φαίνονται στα Σχήματα 37 και 38. Το πάνω διάγραμμα αφορά στις προβλεπόμενες μέσες τιμές, που αντιμετωπίζονται ως οι προβλέψεις του μοντέλου, σε συνάρτηση των παραμέτρων επεξεργασίας. Το κάτω αφορά στην αντίστοιχη τιμή της διασποράς, που είναι ανάλογη της αβεβαιότητας του μοντέλου στην πρόβλεψη. Ο οριζόντιος άξονας αφορά στη θερμοκρασία και ο κάθετος στη διάρκεια της ανόπτησης και της ανακρυστάλλωσης. Τα μπλε σημεία είναι τα σημεία των δεδομένων προπόνησης, ενώ τα κόκκινα είναι αυτά των δεδομένων ελέγχου. Τα αποτελέσματα είναι ανεξάρτητα των δεδομένων ελέγχου, αφού το μοντέλο έχει προσαρμοστεί αποκλειστικά στα άλλα.

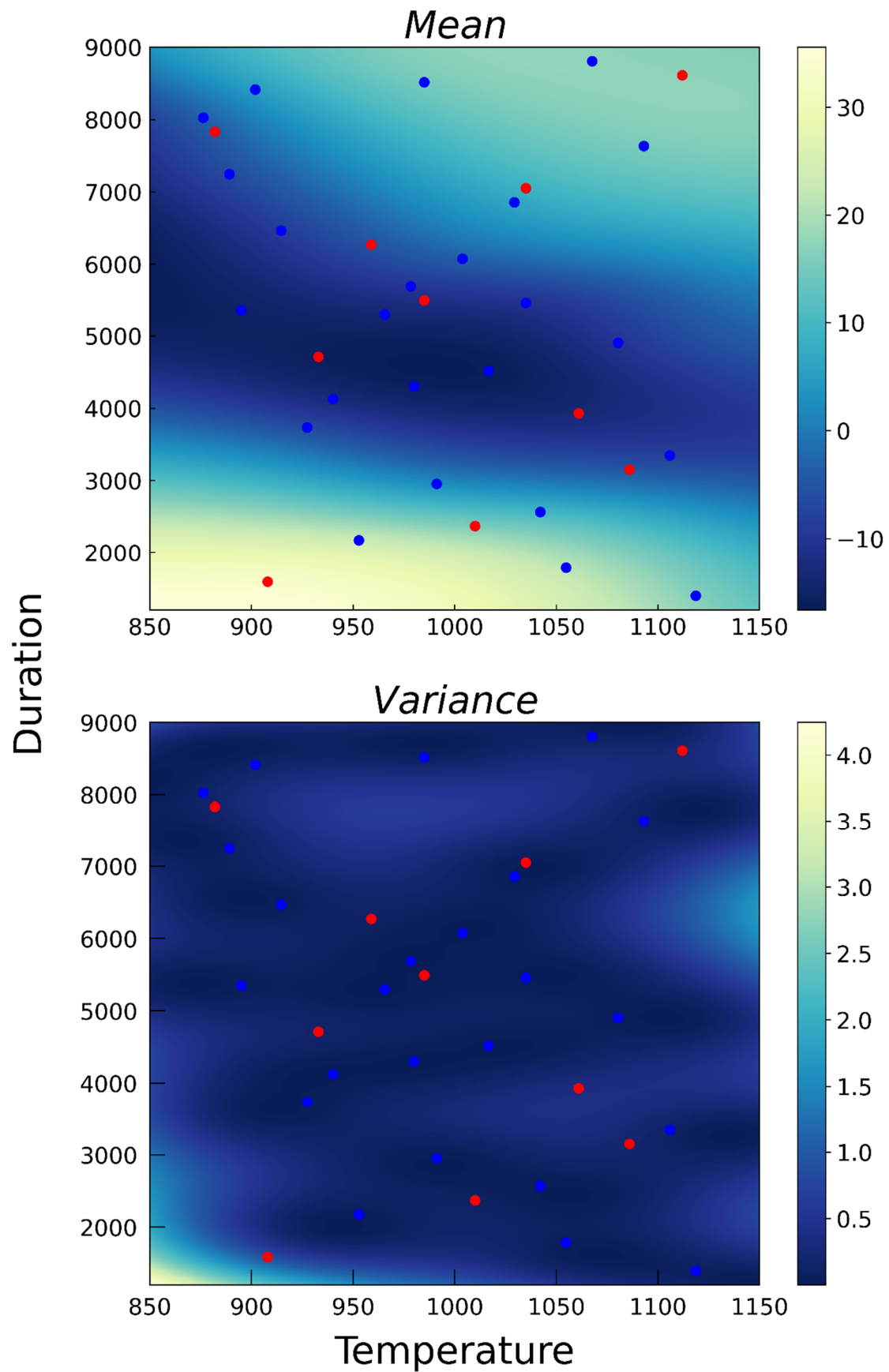


Σχήμα 37: Προβλεπόμενη μέση τιμή (πάνω) και διασπορά (κάτω) για τις προβλέψεις του πρώτου μοντέλου για το PC1.

Όσον αφορά στις προβλέψεις του μοντέλου, αυτές συμφωνούν πλήρως με τη γενική θεώρηση. Εφόσον η μέση τιμή αφορά την τιμή του πρώτου PC, και αυτό συσχετίζεται σε μεγάλο βαθμό με την πρόοδο της ανακρυστάλλωσης και της εξέλιξης της μικροδομής, είναι λογικό που η μέση τιμή μεγιστοποιείται για το συνδυασμό της μέγιστης θερμοκρασίας και της μέγιστης διάρκειας και ελαχιστοποιείται για τον συνδυασμό της ελάχιστης θερμοκρασίας και της ελάχιστης διάρκειας. Επίσης, μια μικροδομή που έχει ανακρυσταλλωθεί σε μεγάλη θερμοκρασία για μικρή διάρκεια θα είναι παρόμοια με μια που έχει ανακρυσταλλωθεί σε χαμηλή θερμοκρασία για μεγάλη διάρκεια, δεδομένου ότι το φαινόμενο λαμβάνει χώρα. Οπότε είναι επίσης λογική η *διαγώνια* μεταβολή της μέσης τιμής. Ωστόσο, απ' ότι φαίνεται και από την καμπύλη που δημιουργείται κοντά στο κέντρο του πάνω διαγράμματος, αυτή η παρατήρηση δεν είναι απόλυτος κανόνας. Ακόμη, το γεγονός ότι υπάρχει μεγαλύτερο μέρος της μπλε περιοχής (των χαμηλών τιμών) κοντά στον άξονα x και μικρότερο κοντά στον άξονα y, υποδεικνύει το γεγονός που υποδεικνύει και η λίγο μικρότερη κλίμακα μεγέθους της πρώτης διάστασης (της διάρκειας). Αυτό είναι το ότι η διάρκεια ίσως διαδραματίζει λίγο πιο σημαντικό ρόλο από τη θερμοκρασία.

Αναφορικά με το κάτω διάγραμμα της διασποράς, παρατηρείται ότι οι τιμές της διασποράς είναι πολύ χαμηλές σε όλο το εύρος των παραμέτρων, ακόμη και μακριά από τα σημεία των δεδομένων προπόνησης. Αυτό υποδεικνύει το ότι οι προβλέψεις του υποκατάστατου μοντέλου συνοδεύονται με πολύ μικρή αβεβαιότητα, κάτι που είναι σίγουρα ενθαρρυντικό. Ο τρόπος δειγματοληψίας, μέσω της μεθόδου LHS, συντέλεσε σε αυτό καθορίζοντας τα σημεία έτσι ώστε να είναι σωστά διεσπαρμένα στο χώρο και, έτσι, να είναι πιο πιθανή η ελαχιστοποίηση της συνολικής διασποράς. Παρατηρείται, βέβαια, η ελάχιστη και ομαλή αύξησή της μακριά από τα σημεία των δεδομένων, ενώ αυτή μεγιστοποιείται εκτός του εύρους των παραμέτρων. Η ομαλότητα αυτή προκύπτει από τον SE-ARD πυρήνα που διευκολύνει τη μοντελοποίηση ομαλών συναρτήσεων. Αυτό υποδεικνύει ότι η παλινδρόμηση μέσω Γκαουσιανών διαδικασιών είναι αποδοτική για προβλέψεις εντός του εύρους που καλύπτουν τα δεδομένα, αλλά η απομάκρυνση από αυτό είναι σχεδόν απαγορευτική.

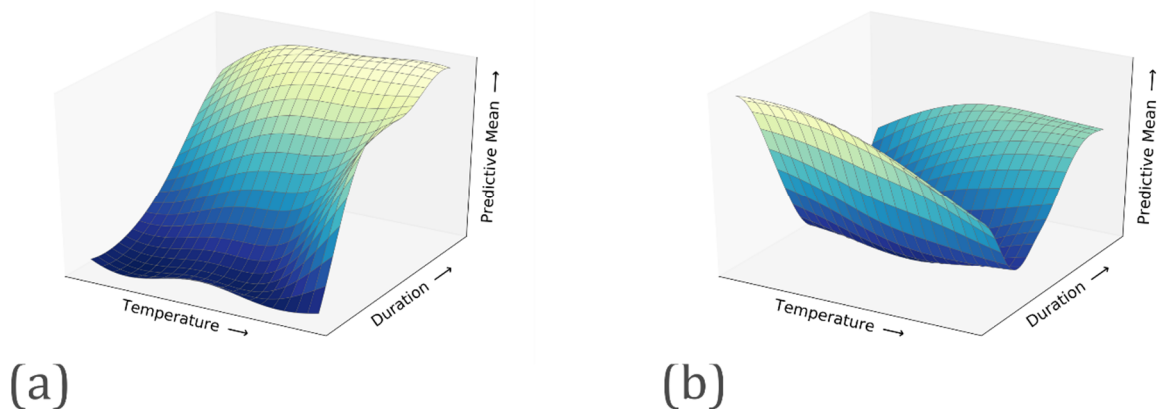
Συμπερασματικά, το πρώτο μοντέλο κατασκευάστηκε επιτυχώς με τις προβλέψεις του να αποτυπώνουν τη φύση της ανακρυστάλλωσης και να χαρακτηρίζονται από μικρή αβεβαιότητα. Το Σχήμα 38 είναι αντίστοιχο του Σχήματος 37, αλλά αφορά στο δεύτερο μοντέλο που αντιμετωπίζει το δεύτερο PC ως την έξοδό του.



Σχήμα 38: Προβλεπόμενη μέση τιμή (πάνω) και διασπορά (κάτω) για τις προβλέψεις του δεύτερου μοντέλου για το PC2.

Εδώ, τα αποτελέσματα είναι διαφορετικά λόγω των διαφορετικών δεδομένων προπόνησης για την έξοδο (PC2) και του διαφορετικού πυρήνα (Matern-ARD). Η προβλεπόμενη μέση τιμή ελαχιστοποιείται κοντά στο κέντρο και κοντά στον άξονα y, ενώ μεγιστοποιείται κοντά στο κάτω αριστερό άκρο, δηλαδή για μικρή θερμοκρασία και μικρή διάρκεια. Οι μικρές μεταβολές ως προς τον οριζόντια άξονα υποδεικνύουν την αρκετά μικρότερη επιρροή της θερμοκρασίας στην έξοδο, κάτι που υποδεικνύει και η μεγαλύτερη κλίμακα μεγέθους για την αντίστοιχη διάσταση. Εφόσον το PC2 δεν είναι απόλυτα ερμηνεύσιμο, οι προβλέψεις δεν είναι επίσης. Αυτό δεν είναι όμως πρόβλημα, αφού αυτό αντιστοιχεί σε μικρό ποσοστό της διασποράς (4%) και τα βασικά μεγέθη που έχουν σημασία είναι η ακρίβεια και η αβεβαιότητα, όπως αυτή προκύπτει από τη διασπορά.

Όσον αφορά στο κάτω διάγραμμα, παρατηρείται το γεγονός ότι οι τιμές της διασποράς είναι ξανά πολύ χαμηλές σε όλο το εύρος των παραμέτρων, κάτι που υποδεικνύει ότι οι προβλέψεις που οπτικοποιούνται στο πάνω διάγραμμα συνοδεύονται από μικρή αβεβαιότητα. Το γεγονός αυτό προέκυψε για τους ίδιους λόγους που αναφέρθηκαν και για το πρώτο μοντέλο. Η κύρια διαφορά, όμως, είναι η απότομη τώρα μεταβολή της διασποράς με την απομάκρυνση από τα δεδομένα προπόνησης. Αυτή είναι αποτέλεσμα του Matern-ARD πυρήνα που διευκολύνει τη μοντελοποίηση απότομων συναρτήσεων και που κρίθηκε ο πιο αποδοτικός για το συγκεκριμένο σύνολο δεδομένων. Άρα, και το δεύτερο μοντέλο κατασκευάζεται επιτυχώς.



Σχήμα 39: Οι επιφάνειες των προβλεπόμενων μέσων από (a) το μοντέλο με έξοδο το PC1 και (b) το μοντέλο με έξοδο το PC2.



# 5 Συμπεράσματα

---

## 5.1 Συνεισφορά

Η παρούσα εργασία πραγματοποιείται την υποκατάστατη μοντελοποίηση της μεθόδου «phase-field» μέσω της GPR, αντιμετωπίζοντας ως μελέτη περίπτωσης την ανακρυστάλλωση κατά την απόψηση στα κράματα χαλκού-νικελίου. Δημιουργήθηκε το αρχικό μοντέλο της εξέλιξης της μικροδομής για τα συγκεκριμένα υλικά κατά τη διάρκεια του φαινομένου. Η πρόοδος του φαινομένου διαφέρει σημαντικά ανάλογα με τις παραμέτρους επεξεργασίας, οι οποίες προσδιορίστηκαν εύστοχα μέσω της μεθόδου LHS. Οι νέοι ανακρυσταλλωμένοι κόκκοι αντικαθιστούν, όπως αναμενόταν, τους παραμορφωμένους με διαφορετικούς ρυθμούς και με διαφορετικά αποτελέσματα αναφορικά με τα χαρακτηριστικά της μικροδομής. Η ισχύς της μεθόδου LHS για τον σχεδιασμό πειραμάτων αποδεικνύεται, με τις τελικές μικροδομές να αντιπροσωπεύουν πολύ αποδοτικά το σύνολο των πιθανών εξόδων. Προέκυψε, δηλαδή, ένα σύνολο δεδομένων αντιπροσωπευτικό της προόδου της ανακρυστάλλωσης, παρόλο που οι υπολογισμοί ήταν σχετικά λίγοι.

Εφόσον έχει δημιουργηθεί η ευθεία σύνδεση μεταξύ της κατεργασίας και των μικροδομών, σε αυτό το σημείο, προέκυψε το θέμα της ποσοτικοποίησης των τελικών μικροδομών και της υπολογιστικά συνετής περιγραφής τους για την αξιοποίηση από ένα μοντέλο μηχανικής μάθησης. Προς αυτή την κατεύθυνση, υπολογίζονται τα «two-point statistics» για το αρχικό σύνολο δεδομένων των τμηματοποιημένων τελικών μικροδομών και για ένα σύνολο που αφορά στην πλήρη εξέλιξη της μικροδομής υπό συγκεκριμένες συνθήκες επεξεργασίας. Αποδεικνύεται η δυνατότητα της μεθοδολογίας να αποτυπώσει την πρόοδο της ανακρυστάλλωσης, μέσω της σωστής περιγραφής του ποσοστού της ανακρυστάλλωσης. Ωστόσο, το σύνολο των «two-point statistics» των τελικών μικροδομών αποτελείται από αρκετές διαστάσεις. Για τη μείωσή τους και για τη διευκόλυνση της προπόνησης του μοντέλου μηχανικής μάθησης, εφαρμόζεται η PCA στα δεδομένα προπόνησης και ελέγχου. Ως αποτέλεσμα, αποκτήθηκαν τα δύο πρώτα PCs για κάθε μικροδομή, μεγέθη που αποτυπώνουν σχεδόν το 100% των πληροφοριών που εμπεριέχονται στο αντίστοιχο σύνολο των «two-point statistics».

Έχοντας αντιστοιχήσει κάθε συνδυασμό των παραμέτρων επεξεργασίας με τα δύο PCs που αντιπροσωπεύουν υπολογιστικά τη μικροδομή, και έχοντας προεπεξεργαστεί τα δεδομένα, ακολουθεί η προπόνηση των δύο μοντέλων παλινδρόμησης GPR. Ορίζονται οκτώ αρχικοί πυρήνες για το καθ' ένα, οι οποίοι καθορίζουν τη δομή των μοντέλων και, συνεπώς, την απόδοσή τους. Έτσι, δημιουργούνται οκτώ αρχικά μοντέλα με διαφορετικούς πυρήνες για το κάθε PC. Μετά τη βελτιστοποίηση των παραμέτρων τους, τα μοντέλα συγκρίνονται ως προς την απόδοσή τους, για να επιλεγεί το πιο ακριβές. Μετά από αρκετές δοκιμές, ο πιο απλός πυρήνας (SE-ARD) ήταν και ο καλύτερος για το μοντέλο που αντιστοιχεί στο πρώτο PC, ενώ ο πυρήνας Matern-ARD ήταν ο καλύτερος για αυτό που αντιστοιχεί στο δεύτερο PC. Με την κατασκευή των δύο μοντέλων, που προσαρμόζονται στα δεδομένα, ολοκληρώνεται η υποκατάστατη μοντελοποίηση. Έτσι, διευκολύνεται η γρήγορη πρόσβαση και αντιστροφή των συνδέσεων κατεργασίας και μικροδομής.

## 5.2 Μελλοντική Έρευνα

Η δουλειά που παρουσιάστηκε μπορεί να συνεχιστεί προς αρκετές ερευνητικές κατευθύνσεις. Οι βασικότερες είναι οι ακόλουθες:

- Εκτός των παραμέτρων επεξεργασίας, η χημική σύσταση των κραμάτων μπορεί να αντιμετωπιστεί και αυτή ως μια ακόμη παράμετρος. Βέβαια, θα πρέπει να συλλεχθούν εύστοχα παραπάνω δεδομένα.
- Η μικροδομή μπορεί και αυτή να αποτελέσει μια μεταβλητή. Τα υποκατάστατα μοντέλα θα μπορούσαν να προπονηθούν σε δεδομένα που προέκυψαν από διαφορετικές αρχικές μικροδομές, διαφορετικών παραμορφώσεων και πυκνοτήτων διαταραχών.
- Η εισαγωγή πειραματικών δεδομένων στα σύνολα των δεδομένων προπόνησης και ελέγχου είναι, επίσης, μια ενδιαφέρουσα προοπτική. Με αυτό τον τρόπο, συγχέεται η πειραματική γνώση για το φαινόμενο της ανακρυστάλλωσης με τα αποτελέσματα της μοντελοποίησης. Οι δύο αυτές πηγές των δεδομένων θα μπορέσουν να συνδυαστούν έτσι ώστε να αντιμετωπίσουν τα μειονεκτήματα της κάθε μιας.
- Οι συνδέσεις της κατεργασίας και της μικροδομής που δημιουργήθηκαν μπορούν να επεκταθούν προς τις ιδιότητες των συγκεκριμένων κραμάτων χαλκού-νικελίου. Η επέκταση αυτή μπορεί, επίσης, να γίνει μέσω της μηχανικής μάθησης και της GPR.



- Μετά τη δημιουργία των συνδέσεων με τις ιδιότητες του υλικού, αυτές μπορούν να αντιστραφούν με σκοπό τη βελτιστοποίηση της κατεργασίας, της μικροδομής και, συνεπώς, των ιδιοτήτων. Η αντιστροφή μπορεί να γίνει μέσω της Μπεϋζιανής βελτιστοποίησης, η οποία βασίζεται στα μοντέλα των Γκαουσιανών διαδικασιών.



# Βιβλιογραφία

---

- [1] R. Arróyave and D. L. McDowell, Systems Approaches to Materials Design: Past, Present, and Future, *Annual Review of Materials Research*, vol. 49, pp. 103–126, 2019
- [2] M. F. Horstemeyer and P. Wang, Cradle-to-grave simulation-based design incorporating multiscale microstructure-property modeling: Reinvigorating design with science, *Journal of Computer-Aided Materials Design*, vol. 10, no. 1, pp. 13–34, 2003
- [3] G. B. Olson, Computational design of hierarchically structured materials, *Science*, vol. 277, no. 5330, pp. 1237–1242, 1997
- [4] D. T. Fullwood, S. R. Niezgod, B. L. Adams, and S. R. Kalidindi, Microstructure sensitive design for performance optimization, *Progress in Materials Science*, vol. 55, no. 6, pp. 477–562, 2010
- [5] A. Molkeri *et al.*, On the importance of microstructure information in materials design: PSP vs PP, *Acta Materialia*, vol. 223, p. 117471, 2022
- [6] S. R. Kalidindi, Feature engineering of material structure for AI-based materials knowledge systems, *Journal of Applied Physics*, vol. 128, no. 4, 2020
- [7] R. B. Gramacy, *Surrogates: Gaussian Process Modeling, Design and Optimization for the Applied Sciences*. Boca Raton, Florida: Chapman Hall/CRC, 2020.
- [8] J. R. Davis, Ed., *ASM Specialty Handbook: Copper and Copper Alloys*. ASM International, 2001.
- [9] I. R. Scholes and W. T. Elwell, *Analysis of Copper and its Alloys*, vol. 40. Pergamon Press, 1967.
- [10] Unified Numbering System (UNS) for Copper and Copper Alloys, 2021. [www.unscopperalloys.org](http://www.unscopperalloys.org)
- [11] P. Carol and P. Webster, *Copper Alloys for Marine Environments*, 2012.

- [12] R. Francis, *The Corrosion of Copper and its Alloys: a Practical Guide for Engineers*, vol. 46, no. 3. 2011.
- [13] W. Schleich, Application of Copper-Nickel Alloy UNS C70600 for Seawater Service, *Corrosion*, 2005
- [14] N. Moelans, B. Blanpain, and P. Wollants, An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution, *Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*, vol. 32, no. 2, pp. 268–294, 2008
- [15] M. R. Tonks and L. K. Aagesen, The Phase Field Method: Mesoscale Simulation Aiding Material Discovery, *Annual Review of Materials Research*, vol. 49, pp. 79–102, 2019
- [16] D. Tourret, H. Liu, and J. LLorca, Phase-field modeling of microstructure evolution: Recent applications, perspectives and challenges, *Progress in Materials Science*, vol. 123, no. March 2021, p. 100810, 2022
- [17] Micress 7.1, 2021. <https://micress.rwth-aachen.de/>
- [18] J. Eiken, B. Böttger, and I. Steinbach, Multiphase-field approach for multicomponent alloys with extrapolation scheme for numerical application, *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 73, no. 6, pp. 1–9, 2006
- [19] B. Böttger, J. Eiken, and M. Apel, Multi-ternary extrapolation scheme for efficient coupling of thermodynamic data to a multi-phase-field model, *Computational Materials Science*, vol. 108, pp. 283–292, 2015
- [20] I. Steinbach and F. Pezzolla, A generalized field method for multiphase transformations using interface fields, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 134, no. 4, pp. 385–393, 1999
- [21] S. DeWitt and K. Thornton, Phase Field Modeling of Microstructural Evolution, in *Computational Materials System Design*, 2018, pp. 67–87.
- [22] J. Eiken, Numerical solution of the phase-field equation with minimized discretization error, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, vol. 33, no. 1, 2012
- [23] I. Steinbach, Why solidification? Why phase-field?, *Jom*, vol. 65, no. 9, pp. 1096–1102, 2013

- [24] M. Ambati, T. Gerasimov, and L. De Lorenzis, A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation, *Computational Mechanics*, vol. 55, no. 2, pp. 383–405, 2015
- [25] M. R. Tonks, A. Cheniour, and L. Aagesen, How to apply the phase field method to model radiation damage, *Computational Materials Science*, vol. 147, pp. 353–362, 2018
- [26] Q. Wang, G. Zhang, Y. Li, Z. Hong, D. Wang, and S. Shi, Application of phase-field method in rechargeable batteries, *npj Computational Materials*, vol. 6, no. 1, pp. 1–8, 2020
- [27] S. R. Kalidindi, *Hierarchical Materials Informatics: Novel Analytics for Materials Data*. Elsevier, 2015.
- [28] K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright, O. Isayev, and A. Walsh, Machine learning for molecular and materials science, *Nature*, vol. 559, no. 7715, pp. 547–555, 2018
- [29] G. L. W. Hart, T. Mueller, C. Toher, and S. Curtarolo, Machine learning for alloys, *Nature Reviews Materials*, vol. 6, pp. 730–755, 2021
- [30] R. Vasudevan, G. Pilania, and P. V. Balachandran, Machine learning for materials design and discovery, *Journal of Applied Physics*, vol. 129, no. 7, 2021
- [31] S. R. Kalidindi, M. Buzzy, B. L. Boyce, and R. Dingreville, Digital Twins for Materials, *Frontiers in Materials*, vol. 9, no. March, pp. 1–15, 2022
- [32] S. R. Niezgoda, Y. C. Yabansu, and S. R. Kalidindi, Understanding and visualizing microstructure and microstructure variance as a stochastic process, *Acta Materialia*, vol. 59, no. 16, pp. 6387–6400, 2011
- [33] S. R. Kalidindi, S. R. Niezgoda, and A. A. Salem, Microstructure informatics using higher-order statistics and efficient data-mining protocols, *Jom*, vol. 63, no. 4, pp. 34–41, 2011
- [34] B. L. Adams, X. Gao, and S. R. Kalidindi, Finite approximations to the second-order properties closure in single phase polycrystals, *Acta Materialia*, vol. 53, no. 13, pp. 3563–3577, 2005
- [35] S. R. Kalidindi, A Bayesian framework for materials knowledge systems, *MRS*

- Communications*, vol. 9, no. 2, pp. 518–531, 2019
- [36] D. B. Brough, D. Wheeler, and S. R. Kalidindi, Materials Knowledge Systems in Python—a Data Science Framework for Accelerated Development of Hierarchical Materials, *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, vol. 6, no. 1, pp. 36–53, 2017
- [37] K. Murphy, *Probabilistic Machine Learning: An introduction*. MIT Press, 2022.
- [38] V. Sundararaghavan and N. Zabaras, Classification and reconstruction of three-dimensional microstructures using support vector machines, *Computational Materials Science*, vol. 32, no. 2, pp. 223–239, 2005
- [39] S. Shalev-Shwartz and S. Ben-David, *Understanding machine learning: From theory to algorithms*, vol. 9781107057. 2014.
- [40] L. Deng, The MNIST Database of Handwritten Digit Images for Machine Learning Research, *IEEE Signal Processing Magazine*, vol. 29, no. 6, pp. 141–142, 2012
- [41] T. Hastie, R. Tibshirani, and J. Friedman, *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction*. Springer, 2009.
- [42] C. E. Rasmussen and C. K. I. Williams, *Gaussian Processes for Machine Learning*. MIT Press, 2006.
- [43] T. M. Mitchell, *Machine Learning*. New York: McGraw-Hill, 1997.
- [44] I. Goodfellow, B. Yoshua, and A. Courville, *Deep Learning*. 2016.
- [45] K. P. Murphy, *Probabilistic Machine Learning: Advanced Topics*. MIT Press, 2023.
- [46] A. S. Keane Andy, Forrester Alexander, *Engineering Design via Surrogate Modelling: A Practical Guide*, 1st ed. Southampton, UK: John Wiley and Sons, 2008.
- [47] A. Der Kiureghian and O. Ditlevsen, Aleatory or epistemic? Does it matter?, *Structural Safety*, vol. 31, no. 2, pp. 105–112, 2009
- [48] R. Otis, Uncertainty reduction and quantification in computational thermodynamics, *Computational Materials Science*, vol. 212, no. April, p. 111590, 2022
- [49] P. Honarmandi and R. Arróyave, Uncertainty Quantification and Propagation in Computational Materials Science and Simulation-Assisted Materials Design,

- Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, vol. 9, no. 1, pp. 103–143, 2020
- [50] C. K. I. Williams and C. E. Rasmussen, Gaussian Processes for Regression, *Mathematical Social Sciences*, vol. 28, no. 3, pp. 224–225, 1994
- [51] J. Hensman, N. Fusi, and N. D. Lawrence, Gaussian Processes for Big Data, *CoRR*, vol. abs/1309.6, 2013
- [52] D. R. Jones, M. Schonlau, and W. J. Welch, Efficient Global Optimization of Expensive Black-Box Functions, *Journal of Global Optimization*, vol. 13, no. 4, pp. 455–492, 1998
- [53] B. Settles, From Theories to Queries: Active Learning in Practice, in *Active Learning and Experimental Design workshop In conjunction with AISTATS 2010*, 2011, vol. 16, pp. 1–18.
- [54] A. G. Kusne *et al.*, On-the-fly closed-loop materials discovery via Bayesian active learning, *Nature Communications*, vol. 11, no. 1, pp. 1–11, 2020
- [55] B. Lei *et al.*, Bayesian optimization with adaptive surrogate models for automated experimental design, *npj Computational Materials*, vol. 7, no. 1, pp. 1–12, 2021
- [56] P. Honarmandi, V. Attari, and R. Arroyave, Accelerated materials design using batch Bayesian optimization: A case study for solving the inverse problem from materials microstructure to process specification, *Computational Materials Science*, vol. 210, no. January, p. 111417, 2022
- [57] Y. C. Yabansu, P. Steinmetz, J. Hötzer, S. R. Kalidindi, and B. Nestler, Extraction of reduced-order process-structure linkages from phase-field simulations, *Acta Materialia*, vol. 124, pp. 182–194, 2017
- [58] Y. C. Yabansu, V. Rehn, J. Hötzer, B. Nestler, and S. R. Kalidindi, Application of Gaussian process autoregressive models for capturing the time evolution of microstructure statistics from phase-field simulations for sintering of polycrystalline ceramics, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 27, no. 8, 2019
- [59] J. Requeima, W. Tebbutt, W. Bruinsma, and R. E. Turner, The Gaussian process autoregressive regression model (GPAR), *AISTATS 2019 - 22nd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, vol. 89, 2020

- [60] Y. C. Yabansu, A. Iskakov, A. Kapustina, S. Rajagopalan, and S. R. Kalidindi, Application of Gaussian process regression models for capturing the evolution of microstructure statistics in aging of nickel-based superalloys, *Acta Materialia*, vol. 178, pp. 45–58, 2019
- [61] S. Hashemi and S. R. Kalidindi, A machine learning framework for the temporal evolution of microstructure during static recrystallization of polycrystalline materials simulated by cellular automaton, *Computational Materials Science*, vol. 188, no. November 2020, p. 110132, 2021
- [62] T. T. Joy, S. Rana, S. Gupta, and S. Venkatesh, Batch Bayesian optimization using multi-scale search, *Knowledge-Based Systems*, vol. 187, p. 104818, 2020
- [63] D. Montes de Oca Zapiain, J. A. Stewart, and R. Dingreville, Accelerating phase-field-based microstructure evolution predictions via surrogate models trained by machine learning methods, *npj Computational Materials*, vol. 7, no. 1, pp. 1–11, 2021
- [64] G. H. Teichert and K. Garikipati, Machine learning materials physics : Surrogate optimization and multi-fidelity algorithms predict precipitate morphology in an alternative to phase field dynamics
- [65] K. Yang *et al.*, Self-supervised learning and prediction of microstructure evolution with convolutional recurrent neural networks, *Patterns*, vol. 2, no. 5, 2021
- [66] Y. Wang, L. Jiang, M. H. Yang, L. J. Li, M. Long, and L. Fei-Fei, Eidetic 3D LSTM: A model for video prediction and beyond, *7th International Conference on Learning Representations, ICLR 2019*, pp. 1–14, 2019
- [67] R. Bommasani *et al.*, On the Opportunities and Risks of Foundation Models, *CoRR*, vol. abs/2108.0, pp. 1–212, 2021
- [68] M. A. Groeber and M. A. Jackson, DREAM.3D: A Digital Representation Environment for the Analysis of Microstructure in 3D, *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, vol. 3, no. 1, pp. 56–72, 2014
- [69] A. Rollett, G. S. Rohrer, and J. Humphreys, *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*. 2017.
- [70] J. O. Andersson, T. Helander, L. Höglund, P. Shi, and B. Sundman, Thermo-Calc & DICTRA, computational tools for materials science, *Calphad: Computer Coupling of*



- Phase Diagrams and Thermochemistry*, vol. 26, no. 2, pp. 273–312, 2002
- [71] Q. Chen, Y. Tang, and A. Engström, Developing Thermodynamic and Kinetic Databases for Cu–Based Alloy Design, *Journal of Japan Institute of Copper*, vol. 59, no. 1, pp. 7–12, 2020
- [72] P. Zhao, T. Song En Low, Y. Wang, and S. R. Niezgod, An integrated full-field model of concurrent plastic deformation and microstructure evolution: Application to 3D simulation of dynamic recrystallization in polycrystalline copper, *International Journal of Plasticity*, vol. 80, pp. 38–55, 2016
- [73] S. P. Gentry and K. Thornton, Sensitivity analysis of a phase field model for static recrystallization of deformed microstructures, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 28, no. 6, 2020
- [74] Copper-Nickel Cu-Ni 90/10 Alloy (UNS C70600). Heanjia Super-Metals Co., Ltd.
- [75] R. C. Weast, *Handbook Of Chemistry And Physics*, 55th ed. CRC Press, 1974.
- [76] L. E. Murr, *Interfacial phenomena in metals and alloys*. United States: Addison-Wesley Publishing Company., 1975.
- [77] L. Dagum and R. Menon, OpenMP: an industry standard API for shared-memory programming, *IEEE Computational Science and Engineering*, vol. 5, no. 1, pp. 46–55, 1998
- [78] M. A. Bouhleb, J. T. Hwang, N. Bartoli, R. Lafage, J. Morlier, and J. R. R. A. Martins, A Python surrogate modeling framework with derivatives, *Advances in Engineering Software*, vol. 135, no. July, p. 102662, 2019
- [79] R. Jin, W. Chen, and A. Sudjianto, An efficient algorithm for constructing optimal design of computer experiments, *Journal of Statistical Planning and Inference*, vol. 134, no. 1, pp. 268–287, 2005
- [80] P. Z. G. Qian, Nested Latin hypercube designs, *Biometrika*, vol. 96, no. 4, pp. 957–970, 2009
- [81] C. R. Harris *et al.*, Array programming with NumPy, *Nature*, vol. 585, no. 7825, pp. 357–362, 2020
- [82] F. Pedregosa *et al.*, Scikit-learn: Machine Learning in Python, *Journal of Machine*

- Learning Research*, vol. 12, pp. 2825--2830, 2011
- [83] D. J. C. MacKay, Introduction to Gaussian Processes, *NATO ASI Series F Computer and Systems Sciences*, vol. 168, pp. 133–166, 1998
- [84] GPpy, GPpy: A Gaussian process framework in python.  
<http://github.com/SheffieldML/GPy>
- [85] J. Schindelin *et al.*, Fiji: An open-source platform for biological-image analysis, *Nature Methods*, vol. 9, no. 7, pp. 676–682, 2012
- [86] J. Görtler, R. Kehlbeck, and O. Deussen, A Visual Exploration of Gaussian Processes, *Distill*, 2019

