Stochastické metody v krystalografii

Damián Kulich

16. března 2020

Osnova

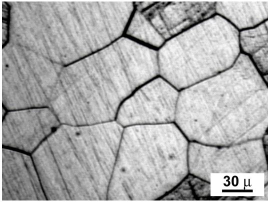
Cíl práce

- Simulovat možná rozdělení misorientací zrn v polykrystalu.

Polykrystal I

- Polykrystalický materiál se skládá z velkého množství malých krystalů.
- Těmto malým krystalům říkáme zrna.
- Krystalické mřížky jednotlivých zrn jsou vůči sobě různě natočené.

Polykrystal II



Obrázek: Struktura polykrystalu

Modelování polykrystalu I

Definice (Obecná poloha v $\mathbb{R}^3$)

Říkáme, že n-tice bodů v $\mathbb{R}^3$ je v obecné poloze, pokud žádné tři body neleží v jedné přímce, žádné čtyři v jedné rovině a žádných pět na sféře.

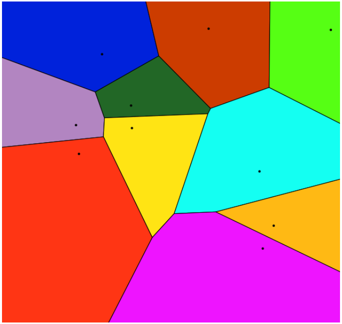
Definice (Voronoiova mosaika v $\mathbb{R}^3$)

Nechť $\{x_1, x_2 \dots x_n\}$ je n-tice bodů v obecné poloze v $\mathbb{R}^3$. Pak $C_i = \{x \in \mathbb{R}^3; \forall k \neq i \; |x - x_i| \leq |x - x_k|\}$ nazveme Voronoiovou buňkou a množinu $V = \{C_1 \dots C_n\}$ Voronoiovou mosaikou v $\mathbb{R}^3$. Dále definujeme stěnu mezi buňkami C_i, C_j jako $F_{i,j} = C_i \cap C_j$.

Modelování polykrystalu II

- Polykrystal representujeme Voronoiovou mosaikou
- Vnitřek zrn je tvořen krystalickou mřížkou s orientací M_i, zrna tedy representujeme dvojicí (C_i, M_i).
- Stěny representují hranice mezi zrny.
- Pokud $F_{i,j} \neq \emptyset$ pak říkáme, že buňky C_i a C_j spolu sousedí, značíme $C_i \sim C_j$.

Modelování polykrystalu III



Obrázek: Příklad Voronoiovy mosaiky v $\mathbb{R}^2$

Popis orientace

- Označme osy systému souřadnic v $\mathbb{R}^3$ x, y, z
- Osy souřadného systému buňky budeme značit X, Y, Z a považovat je za referenční.

Matice orientace I

- Označme G_s a G_c matice bází souřadného systému mosaiky a buňky respektive.

$$G_s = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad G_c = \begin{pmatrix} b_1, & b_2, & b_3 \end{pmatrix}$$

- b_1, b_2, b_3 jsou bázové vektory mosaiky vyjádřené vůči bázi buňky.

Matice orientace II

Definice (Matice orientace)

Matice orientace G je taková matice, že $G_c = GG_s$.

- Matice G se dá vyjádřit jako

$$\begin{pmatrix} cos(\alpha_1) & cos(\beta_1) & cos(\gamma_1) \\ cos(\alpha_2) & cos(\beta_2) & cos(\gamma_2) \\ cos(\alpha_3) & cos(\beta_3) & cos(\gamma_3) \end{pmatrix},$$

kde $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ jsou úhly mezi x, y, z a b_i.

Eulerovy úhly I

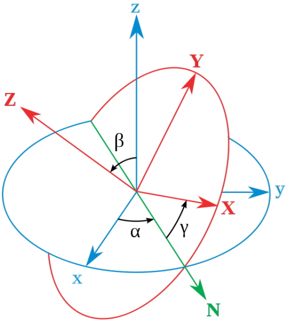
Definice (Eulerovy úhly)

Eulerovými úhly nazveme trojici $\psi = (\varphi_1, \phi, \varphi_2)$, kde $\varphi_1, \varphi_2 \in [0, 2\pi)$ a $\phi \in [0, \pi)$. Tyto tři úhly popisují rotace

$$G_{\varphi_1} = \begin{pmatrix} cos(\varphi_1) & sin(\varphi_1) & 0 \\ -sin(\varphi_1) & cos(\varphi_1) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, G_{\varphi_2} = \begin{pmatrix} cos(\varphi_2) & sin(\varphi_2) & 0 \\ -sin(\varphi_2) & cos(\varphi_2) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$G_{\phi} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & cos(\phi) & sin(\phi) \\ 0 & -sin(\phi) & cos(\phi) \end{pmatrix}.$$

Eulerovy úhly II



Obrázek: Eulerovy úhly

Úhel a osa rotace, misorientace

- Rotaci můžeme popsat pomocí jednotkového vektoru $\mathbf{n}$ a úhlu $\omega \in [-\pi, \pi)$, který popisuje úhel rotace okolo $\mathbf{n}$.
- Zavedeme misorientaci $M_{i,j} = G_i G_j^{-1}$, kde G_i, G_j jsou matice orientace buněk C_i, C_j.
- Misorientaci $M_{i,j}$ přísluší dovjice $(\mathbf{n}_{i,j}, \alpha_{i,j})$, $\alpha_{i,j}$ nazveme úhlem misorientace C_i, C_j.

Stavový prostor

- Dále uvažujme pevnou Voronoiovu mosaiku $\{C_1 \dots C_n\}$ a orientace (Eulerovy úhly) buněk náhodné.
- Nechť $S = \{(\varphi_1, \phi, \varphi_2); \varphi_1, \varphi_2 \in [0, 2\pi), \phi \in [0, \pi)\}$.
- Nechť $(\Omega, \mathcal{A}, P)$ je pravděpodobnostní prostor a $\mathcal{S}$ je sigma-algebra na S.
- $\mathbf{X} : (\Omega, \mathcal{A}) \to (S, \mathcal{S})$ je náhodný vektor $(X_1, \dots X_n)$ orientací jednotlivých buněk.

Hustota

- Chceme simulovat cílové rozdělení náhodného vektoru $\mathbf{X}$ s hustotou $f(\psi_1, \psi_2 \ldots \psi_n) \propto exp(\theta\varepsilon(\psi_1, \psi_2 \ldots \psi_n))$ vzhledem k Lebesguově míře na S^n.
- ε je tzv. funkce energie, v našem případě $\varepsilon(\psi_1, \psi_2 \ldots \psi_n) = \sum_{C_i \sim C_j} sin(\alpha_{i,j})$.
- $\theta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ je libovolně volený parametr.

Markovské řetězce

Definice (Stacionární rozdělení)

Nechť U je markovský řetězec. Stacionárním rozdělením U rozumíme takové rozdělení π, že pokud je π počátečním rozdělením U, potom marginální rozdělení stavů U v každém čase je π.

- Za určitých předpokladů je π limitním rozdělením markovského řetězce.

MCMC

- Algoritmus který budeme používat patří mezi tzv. Markov chain Monte Carlo algoritmy.
- Idea je taková, že navrhneme markovský řetězec, který bude mít hledanou hustotu f jako stacionární rozdělení a zároveň splňuje podmínky pro to, aby bylo stacionární rozdělení jeho limitním.
- Tento řetězec pak simulujeme po dostatečný počet iterací, měli bychom tím vygenerovat přibližně výběr z f.
- Náš algoritmus se nazývá hybridní algoritmus, jeho základem je Gibbsův výběrový plán, uvnitř jeho kroků se provadí Metropolis-Hastings.

Náčrt algoritmu I

- V jedné iteraci algoritmu postupně procházíme všechny buňky.
- Pro i-tou buňku známe plně podmíněné rozdělení $X_i | X_1 \dots X_{i-1}, X_{i+1} \dots X_n$.
- Navrhneme rovnoměrně náhodně novou orientaci buňky i: $\psi = (\psi_1, \Psi, \psi_2)$.
- Novou orientaci přijmeme s pravděpodobností $min(H, 1)$, kde $H = exp(\theta \sum_{C_j \sim C_i} (sin(\alpha_{i,j}) - sin(\bar{\alpha}_{i,j})))$. $\bar{\alpha}_{i,j}$ značí úhel misorientace buňky C_i s novou orientací ψ a buňky C_j.

Náčrt algoritmu II

Věta

Jednotlivé kroky algoritmu utváří markovský řetězec, jehož jednoznačné stacionární rozdělení má hustotu f. Toto rozdělení je zároveň jeho limitním rozdělením.

Vlastní přínos

- Implementace algoritmu
- Porovnávání výsledků pro různé volby θ.

Díky za pozornost!