مهندسی مکانیک شریف، (پاییز ۱۳۹۶)
دوره‌ی ۳ - ۳۳، شماره‌ی ۲، ص. ۱۱۵-۱۲۱

Original Article

بازسازی سه‌بعدی ریزساختار ناهمگن دو فازی بر اساس تک مقطع دوبعدی به‌کمک توابع همبستگی دونقطه‌یی و الگوریتم بازیابی فاز

علی حسن‌آبادی * **(دانشجوی دکتری)**
مجید بنی‌اسدی (استادیار)
کارن ابری‌نیا (استاد)
دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران

سه‌بعدی‌سازی ریزساختار و استخراج خواص، بر اساس اطلاعات مقاطع دوبعدی از موضوعات مورد توجه در طراحی ریزساختار است. در این پژوهش روشی جدید و قدرتمند برای بازسازی سه‌بعدی ریزساختار، تنها با استفاده از یک تک‌مقطع دو بعدی، ارائه می‌شود. پایه‌گذاری روش بر اساس توابع همبستگی است. در ابتدا توابع همبستگی برای مقطع مبنا محاسبه و در ادامه این توابع برای سه بعد، تخمین زده می‌شود. سپس به‌کمک الگوریتم بازیابی فاز، بر اساس توابع همبستگی تخمین زده شده، ریزساختار سه‌بعدی بازسازی می‌شود. این روش برای ساختارهای غیرهمسانگرد به‌طور عرضی همسانگرد (مشابه مقاطع اکسترود شده) نیز قابلیت استفاده دارد. پس از بازسازی سه‌بعدی، ضریب هدایت حرارتی مؤثر ریزساختار، بر اساس ضرایب هدایت حرارتی فازهای تشکیل‌دهنده محاسبه و با مقادیر مربوط به نمونه‌ی شاهد مقایسه می‌شود.

واژگان کلیدی: بازسازی سه بعدی، توابع همبستگی دو نقطه‌یی، الگوریتم بازیابی فاز، مواد ناهمگن دو فازی.

ali.hasanabadi@gmail.com
m.baniassadi@ut.ac.ir
cabrinia@ut.ac.ir

۱. مقدمه

برای عکس برداری دوبعدی از ریزساختار تکنیک‌های متنوعی وجود دارد انواع تکنیک‌های عکس‌برداری وجود دارد اما تهیه‌ی ریزساختار سه‌بعدی به‌طور مستقیم به‌کمک روش‌هایی نظیر توموگرافی به‌کمک اشعه‌ی ایکس یا اسکن سه‌بعدی به‌کمک لیزر، پرهزینه و وقت‌گیر است و به‌صرفه نیست.[۱و۲] از آنجا که وجود ریزساختار سه‌بعدی، اولین گام در تحلیل انواع خواص ریزساختار ناهمگن است نیاز به روشی که بتوان براساس مقاطع دوبعدی، ریزساختار سه‌بعدی را بازسازی کرد، اجتناب‌ناپذیر است.

اولین گام در بازسازی ریزساختار، انتخاب روشی مناسب برای بیان و توصیف آن است. روش‌های متداول توصیف ریزساختار که عمدتاً به‌صورت آماری‌اند عبارت‌اند از: توابع همبستگی[۱] چندنقطه‌یی، توابع توصیف خوشه‌یی[۲]، روش مسیر خطی[۳] و روش‌های دیگر که ترکاتو[۳] به‌طور مفصل آنها بررسی کرده است. به‌دلیل قابلیت محاسبه‌ی توابع همبستگی به‌کمک سری فوریه و همچنین سازگاری آن با روش بازیابی فاز،[۴] روش مورد استفاده در این پژوهش، توابع همبستگی چندنقطه‌یی به‌طورکلی و به‌طور خاص دو نقطه‌یی است. پژوهشگران توابع چندنقطه‌یی را به‌منظور بررسی انواع خواص ساختار به‌کار گرفته‌اند.[۵-۱۲]

پایین‌ترین مرتبه‌ی توابع همبستگی، تابع یک نقطه‌یی است که عبارت‌است از احتمال تعلق یک نقطه‌ی تصادفی به یک فاز مشخص. این احتمال همان درصد حجمی فاز مفروض است و در آن اطلاعات مربوط به چیدمان هندسی ریزساختار وجود ندارد. مرتبه‌ی بالاتر توابع همبستگی که به‌صورت دو نقطه‌یی می‌باشد، عبارت‌است از احتمال تعلق دو سر یک بردار تصادفی، به فازهای مفروض. با بالارفتن تعداد مراتب و نقاط در نظر گرفته‌شده، دقت توصیف ریزساختار بالاتر می‌رود و در نهایت با میل تعداد نقاط به بی‌نهایت، توصیف منحصر به فردی از ریزساختار ارائه می‌شود.[۹،۱۳و۱۴] برای ریزساختارهای ویژه[۴]، فولوود[۱۵] ادعا کرده است که استفاده از توابع دو نقطه‌یی، توصیف منحصر به‌فردی از ریزساختار ارائه می‌کند. منظور از ریزساختارهای ویژه، ریزساختارهایی‌اند که هر نقطه (یا مکعب مفروض در حالت گسسته) فقط متعلق به یک فاز باشد.

بازسازی سه بعدی ریزساختار بر اساس مقاطع دو بعدی، به نوعی مهندسی معکوس ریزساختار براساس اطلاعات محدود است. کیبلبیر[۱۶] با استفاده از روش میدان تصادفی گاوسی توانست براساس مقاطع دوبعدی، خواص ساختار سه بعدی متخلخل را بررسی کند. سپس افرادی نظیر آدلر[۱۷] و لنزینی[۱۸] نیز با استفاده از روش میدان تصادفی گاوسی و استفاده از فیلترهای خطی و غیرخطی به بازسازی ریزساختار بر اساس اطلاعات محدود پرداختند.

---

* نویسنده مسئول
تاریخ: دریافت ۱۳۹۵/۳/۳، اصلاحیه ۱۳۹۵/۶/۲۷، پذیرش ۱۳۹۵/۷/۴.

یونگ و ترکاتو[۱۹] و نیز کِلَی و ترکاتو[۲۰] با استفاده از روش‌های بهینه‌سازی توانستند ریزساختار سه‌بعدی را بر اساس مجموعه‌هایی مشخص از توابع همبستگی دو بعدی بازسازی کنند. آنها با استخراج توابع همبستگی بر اساس مقطع دوبعدی و یکسان‌گرفتن آن برای حالت سه‌بعدی و استفاده از روش بهینه‌سازی بازپخت شبیه‌سازی‌شده[۵] توانستند این بازسازی را انجام دهند. بوچنک و پیرز[۲۱] نیز از روش آنیلینگ شبیه‌سازی‌شده به همراه تعدادی قید اضافی مربوط به مرزهای مشترک برای بازسازی بهتر استفاده کردند ساندارلاقاوان و زاباراس[۲۲] روش دیگری را بر مبنای پردازش تصویر و استفاده از توابع دونقطه‌یی و سه‌نقطه‌یی ارائه کردند. در این روش ابتدا تعداد زیادی از ریزساختارهای سه‌بعدی به‌صورت یک کتابخانه، فراهم و سپس توسط یک طبقه‌بندی‌کننده موسوم به SVM [۶] اجزای اصلی هر کدام استخراج می‌شود. سپس با ورود یک سطح مقطع جدید، بررسی می‌شود که توابع دونقطه‌یی و سه‌نقطه‌یی آن به کدام اجزا نزدیک است و بر این مبنا ریزساختار سه‌بعدی بازسازی می‌شود.

اخیراً بنی‌اسدی و همکاران[۲۳] بر اساس روش مونت‌کارلو روشی را برای بازسازی سه‌بعدی مواد ناهمگن چندفازی بر اساس مقاطع به‌دست آمده از میکروسکوپ الکترونی برای آند پیل سوختی ارائه کرده‌اند. در این روش ابتدا به‌کمک الگوریتم‌های رشد دانه‌ها، ریزساختار ایجاد و سپس با مقایسه‌ی توابع همبستگی مبنا و ریزساختار ساخته‌شده، میزان خطا محاسبه و درباره‌ی ادامه‌ی الگوریتم یا توقف آن تصمیم‌گیری می‌شود.

در این پژوهش، در ادامه‌ی کار،[۲۴] بازسازی سه‌بعدی ریزساختار تنها به‌کمک یک مقطع، بحث و بررسی می‌شود. با توجه به قابلیت روش، امکان بازسازی ریزساختارهای ناهمسانگرد به‌طور عرضی همسانگرد[۷]، حتی به‌کمک یک مقطع نیز وجود دارد. بازسازی ریزساختار شامل دو مرحله‌ی اصلی است. در ابتدا توابع همبستگی دوبعدی بر اساس سطح مقطع مبنا، محاسبه و سپس روشی برای تقریب توابع همبستگی برای کل فضای سه‌بعدی توسعه داده می‌شود. مرحله‌ی دوم، بازسازی ریز ساختار به‌کمک روش بازیابی فاز است. این روش که در اصل برای پردازش سیگنال ارائه شده است[۲۵] که فولوود،[۱۵] به‌منظور بازسازی ریزساختار به‌کار برده است و در این پژوهش نیز به‌عنوان ابزار بازسازی، استفاده می‌شود. علاوه‌بر این، پس از بازسازی قابلیت محاسبه‌ی خواص مؤثر نیز وجود دارد که برای ضریب هدایت حرارتی مؤثر محاسبه و مقایسه‌ی نتایج صورت خواهد گرفت.

۲. توصیف ریاضی ریزساختار

۱.۲. توابع چندنقطه‌یی

اولین گام برای توصیف ریزساختار، گسسته‌سازی آن و سپس تعیین وضعیت تمام نقاط به‌کمک معادله‌ی مشخصه‌ی زیر است:

$$\chi^i(x)=\begin{cases}1 & x \text{ in phase } i\\ 0 & \text{otherwise}\end{cases} \qquad (1)$$

بر این اساس تابع همبستگی N نقطه‌یی که عبارت‌است از احتمال تعلق‌داشتن هم‌زمان N نقطه به فازهای از پیش‌تعیین‌شده، به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$C_N^{ij\ldots n}\left(x_1^i,x_2^j,\ldots,x_N^n\right)=\left\langle \chi^i(x_1),\chi^j(x_2),\ldots,\chi^n(x_N)\right\rangle,\quad i,j,\ldots,n\in \text{Set of Phases} \qquad (2)$$

علامت $\langle\ldots\rangle$ به‌معنی میانگین‌گیری است. با این تعریف، تابع دو نقطه‌یی به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$C_N^{ij}\left(x_1^i,x_2^j\right)=\left\langle \chi^i(x_1),\chi^j(x_2)\right\rangle,\quad i,j,\ldots,n\in \text{Set of Phases} \qquad (3)$$

این تعریف به این معنی است که برای محاسبه‌ی مقدار احتمال، باید تعداد زیادی بردار تصادفی که نقاط ابتدا و انتهای آنها با x_1^i و x_2^j مشخص شده‌اند برای فازهای i و j طبق معادله‌ی ۳ محاسبه شوند تا مقدار $C_2^{ij}\left(x_1^i,x_2^j\right)$ معلوم شود.

در ریزساختارهایی که به‌طور آماری همگن هستند، موقعیت مطلق نقاط مهم نیست و فاصله‌ی نسبی آنها که به‌صورت بردار $\mathbf{r}$ بیان می‌شود، اهمیت دارد.

برای یک ریزساختار دو فازی، بسته به اینکه دو سر بردار مفروض در چه فازی قرار بگیرند، چهار نوع تابع همبستگی، به‌صورت C_2^{11}، C_2^{12}، C_2^{21} و C_2^{22} قابل تصور است. این توابع از هم مستقل نیستند و روابط زیر بین آنها حاکم است:[۲۶]

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}C_2^{ij}(\mathbf{r})=1,\qquad \mathbf{r}=x_2^j-x_1^i, \qquad (4)$$

$$\sum_{j=1}^{n}C_2^{ij}(\mathbf{r})=v_i, \qquad (5)$$

$$C_2^{ij}(\vec{\mathbf{r}})=C_2^{ji}(-\vec{\mathbf{r}}). \qquad (6)$$

که v_i، درصد حجمی فاز i است. بنابراین، برای بیان یک ریزساختار دوفازی تنها معلوم‌بودن یک تابع همبستگی کافی است و بقیه‌ی توابع، از روی آن معلوم خواهند شد.

همچنین شرایط مرزی موجود برای این توابع به‌صورت زیر است:

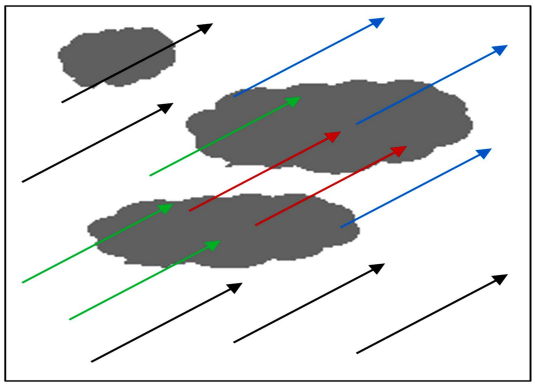
$$\lim_{x_2^j\to x_1^i}C_2^{ij}\left(x_1^i,x_2^j\right)=\begin{cases}v_i & \text{if } i=j\\ 0 & \text{if } i\neq j\end{cases}, \qquad (7)$$

$$\lim_{(x_2^j-x_1^i)\to\infty}C_2^{ij}\left(x_1^i,x_2^j\right)=\begin{cases}v_i^2 & \text{if } i=j\\ v_iv_j & \text{if } i\neq j\end{cases}. \qquad (8)$$

تعبیر معادله‌ی ۷ به این صورت است که با یکی‌شدن دو نقطه‌ی ابتدا و انتهای بردار، تابع دو نقطه‌یی به تک‌نقطه‌یی تبدیل می‌شود و مقدار احتمال نیز در صورتی‌که دو نقطه از یک فاز باشند برابر با درصد حجمی و در غیر این صورت صفر خواهد بود. معادله‌ی ۸ نیز به این معنی است که در حالتی‌که بردار بسیار بزرگ شود، دو نقطه‌ی ابتدا و انتهای آن به‌صورت مستقل از هم عمل خواهند کرد و مقدار احتمال دو نقطه‌یی برابر با حاصل ضرب مقادیر متناظر تک نقطه‌یی خواهد بود.

۲.۲. محاسبه‌ی توابع دو نقطه‌یی به‌کمک تبدیل فوریه

به‌منظور محاسبه‌ی توابع دو نقطه‌یی، برای یک بردار مفروض، کافی است تعداد زیادی از آن بردار را به طور تصادفی روی سطح مقطع ریزساختار مورد نظر انداخت و سپس مقدار تابع احتمال را از تقسیم تعداد بردارهایی که ابتدا و انتهای آنها در



شکل ۱. نحوه‌ی محاسبه‌ی مقادیر همبستگی با انداختن تعداد زیادی بردار و شمردن تعداد بردارهای مطلوب و تقسیم آن به تعداد کل بردارها.

فازهای مورد نظر هستند به تعداد کل بردارهای درنظرگرفته‌شده به‌دست آورد. مثلاً مطابق شکل ۱ اگر فاز خاکستری فاز ۱ درنظرگرفته شود $C_2^{11}(\vec{\mathbf{r}})$ از تقسیم تعداد بردارهای قرمزرنگ به تعداد کل بردارها به‌دست خواهد آمد. به‌همین‌صورت برای $C_2^{12}(\vec{\mathbf{r}})$، $C_2^{21}(\vec{\mathbf{r}})$ و $C_2^{22}(\vec{\mathbf{r}})$ رنگ‌های مشکی، آبی، و سبز بردارهای مربوطه را نمایش می‌دهند. این روش برای وضعیتی که ابعاد نمونه‌ی در نظرگرفته‌شده نسبت به طول بردار، بزرگ باشد، مناسب است. دقت مقادیر احتمال نیز به تعداد بردارهای انداخته‌شده بستگی خواهد داشت.

روشی که ادمز و دیگران،[۴] برای محاسبه‌ی مقادیر توابع همبستگی استفاده کرده‌اند مبتنی بر گسسته‌سازی فضا و استفاده از تبدیل فوریه و فرض متناوب‌بودن کل فضای ریزساختار با دوره‌ی تناوب «المان حجمی نماینده[۸]» است. المان حجمی نماینده، در واقع یک زیرفضا از کل فضای ریزساختار است که به‌عنوان نماینده‌ی کل فضا بررسی می‌شود.

به‌این‌منظور ابتدا کل فضا به S مکعب گسسته می‌شود و تابع مشخصه برای تمام مکعب‌ها، که هر مکعب با شماره‌ی x معلوم شده است، مشخص می‌شود. طبق معادله‌ی ۲ تابع تک نقطه‌یی C_1^i به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$C_1^i = \frac{1}{S}\sum_{x=0}^{S-1}\chi^i(x) \qquad (۹)$$

تبدیل فوریه‌ی گسسته‌ی معادله‌ی ۹ به‌صورت زیر است:

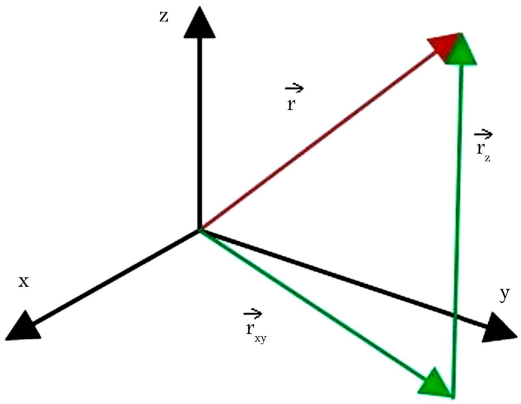
$$F_k^i = \mathcal{F}\left(\chi^i(x)\right) = \frac{1}{S}\sum_{x=0}^{S-1}\chi^i(x)\mathrm{e}^{2\pi mxk/S} = \frac{1}{S}\left|F_k^i\right|\mathrm{e}^{m\theta_k^i},$$
$$m=\sqrt{-1} \qquad (۱۰)$$

که $\left|F_k^i\right|$، دامنه و θ_k^i، فاز تبدیل فوریه است. به‌همین‌صورت برای تابع دو نقطه‌یی، مقدار $C_2^{ij}(\vec{\mathbf{r}})$ به‌صورت‌زیر محاسبه می‌شود:

$$C_2^{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{S}\sum_{x=0}^{S-1}\chi^i(x)\chi^j(x+\mathbf{r}), \qquad (۱۱)$$

در اینجا x، شماره‌ی هر مکعب و $\mathbf{r}$، برداری است که تابع همبستگی برای آن محاسبه می‌شود. مشابه معادله‌ی ۱۰ تبدیل فوریه‌ی تابع دو نقطه‌یی با فرض متناوب بودن فضای ریزساختار به‌صورت زیر به دست می‌آید:[۱۵]

$$F_k^{ij} = \mathcal{F}\left(C_2^{ij}(\mathbf{r})\right) = \frac{1}{S}\left|F_k^i\right|\mathrm{e}^{-m\theta_k^i}\left|F_k^j\right|\mathrm{e}^{m\theta_k^j} \qquad (۱۲)$$



شکل ۲. تجزیه‌ی بردار مفروض بر صفحه و راستایی که مقادیر توابع در آنها معلوم است.

درصورتی‌که i و j یکسان باشند، معادله‌ی ۱۲ به معادله‌ی کلیدی زیر تبدیل می‌شود:

$$F_k^{ii} = \frac{1}{S}\tilde{F}_k^i * F_k^i = \frac{1}{S}\left|F_k^i\right|^2 \Rightarrow \left|F_k^i\right| = \sqrt{SF_k^{ii}} \qquad (۱۳)$$

از این معادله می‌توان برای محاسبه‌ی مقادیر تابع همبستگی به‌صورت سریع و دقیق استفاده کرد. همچنین، این معادله ارتباط بین مقادیر دامنه‌ی تابع تک‌نقطه‌یی و تبدیل فوریه‌ی تابع دونقطه‌یی را برقرار می‌کند که مبنای روش الگوریتم بازیابی فاز است که در بخش ۳ توضیح داده خواهد شد.

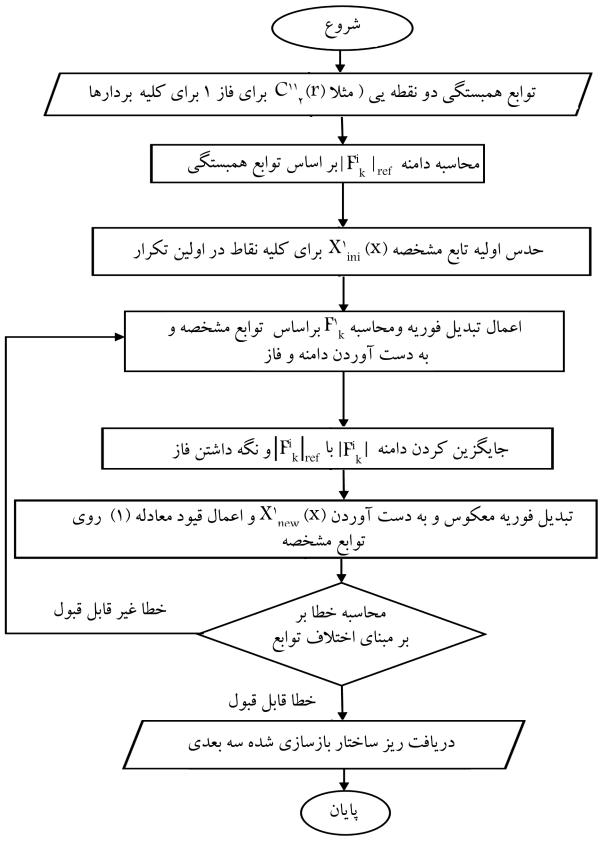
۳.۲. محاسبه‌ی کل توابع همبستگی المان حجمی نماینده

حسن‌آبادی و دیگران[۲۴] ثابت کردند در صورتی‌که توابع همبستگی برای یک صفحه و راستای عمود بر صفحه معلوم باشند، می‌توان تقریبی از کل توابع همبستگی برای همه‌ی بردارهای المان حجمی نماینده به‌دست آورد. برای یک بردار مفروض $\mathbf{r}$، کافی است مطابق شکل ۲ تصویر این بردار بر صفحه و عمود بر صفحه را به دست آورد. در این‌صورت تقریب تابع همبستگی بردار مفروض به‌صورت زیر خواهد بود:[۲۴]

$$C_2^{11}(\vec{\mathbf{r}}) \approx \frac{C_2^{11}(\vec{\mathbf{r}}_{xy})C_2^{11}(\vec{\mathbf{r}}_z)}{v_1} + \frac{C_2^{12}(\vec{\mathbf{r}}_{xy})C_2^{21}(\vec{\mathbf{r}}_z)}{1-v_1} \qquad (۱۴)$$

۳. بازسازی به‌کمک الگوریتم بازیابی فاز

بازسازی ریزساختار به این معنی است که با در دست داشتن اطلاعاتی محدود، مثلاً تابع دونقطه‌یی ریزساختار، بتوان آن را مجدداً بازسازی کرد. در همه‌ی روش‌های مورد استفاده، ابتدا یک تابع هدف تشکیل می‌شود و با در نظرگرفتن یک سری قیود، مسئله به یک مسئله‌ی بهینه‌سازی تبدیل می‌شود، به این‌صورت‌که در ابتدا یک ریزساختار فرض و مقادیر تابع همبستگی محاسبه می‌شود و با مقدار اولیه مقایسه می‌گردد و بر اساس نوع الگوریتم، مجدداً ساختار تغییر و کار ادامه پیدا می‌کند تا الگوریتم به‌سطح قابل قبولی از خطا دست پیدا کند و در آنجا متوقف شود. روش‌های متنوعی در این زمینه استفاده می‌شود که از آن جمله می‌توان به روش بازپخت شبیه‌سازی‌شده،[۱۹و۲۰] روش‌های مبتنی بر گرادیان،[۲۷] روش میدان تصادفی گاوسی[۲۸] و روش بازیابی فاز[۱۵] اشاره کرد. روش بازیابی فاز که در این پژوهش نیز به‌کارگرفته شده است از نظر کارایی، دقت، و سرعت محاسبات، به‌ویژه در موارد ناهمسانگرد چندفازی بسیار بهتر از روش‌های بیان‌شده عمل می‌کند.[۱۵]



شکل ۳. الگوریتم بازیابی فاز.

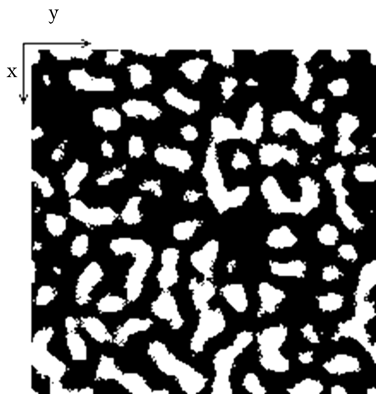
الگوریتم اولیه‌ی بازیابی فاز توسط گرچبرگ و ساکسون[۲۵] به‌منظور پردازش سیگنال ارائه شده است. الگوریتم استفاده‌شده در این پژوهش مطابق با نسخه ارائه‌شده توسط فاین‌آپ[۲۹] است (شکل ۳).

مطابق فلوچارت شکل ۳، الگوریتم با دریافت اطلاعات تابع همبستگی دونقطه‌یی شروع می‌شود. در اولین گام مقادیر دامنه‌ی تبدیل فوریه، $|F^i_k|_{ref}$، محاسبه می‌شود. سپس یک ریزساختار برای اولین گام حدس زده‌می‌شود و تبدیل فوریه‌ی آن محاسبه می‌شود. در ادامه مقادیر دامنه با $|F^i_k|_{ref}$، جایگزین و مقادیر فاز حفظ می‌شوند. سپس تبدیل معکوس فوریه گرفته می‌شود و قیود معادله‌ی ۱ روی مقادیر تابع مشخصه اعمال می‌شوند و این روند تا جایی ادامه پیدا می‌کند که مقدار خطا به میزان قابل قبولی برسد.

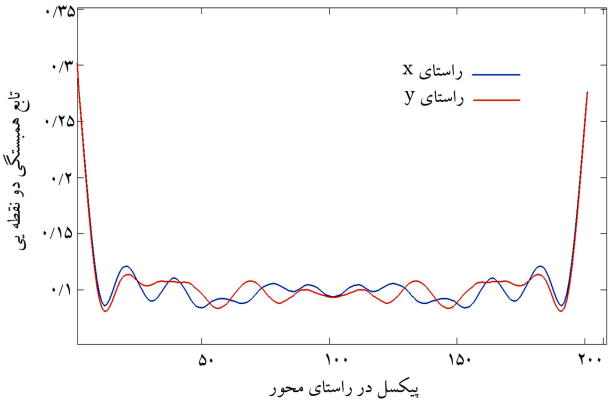
۴. نتایج

۱.۴. بازسازی ریزساختار همسانگرد

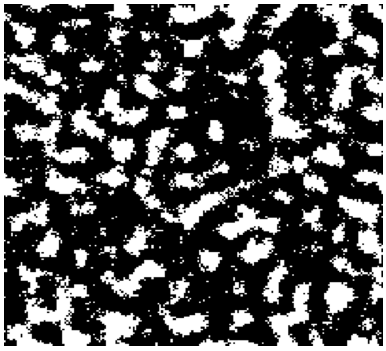
در شکل ۴ مقطعی از یک ریزساختار سه‌بعدی دو فازی همسانگرد با درصد حجمی فاز سفید برابر با $v_1 = 0.3$ با ابعاد ۲۰۰ × ۲۰۰ × ۲۰۰ پیکسل که به‌طور مصنوعی ایجاد شده، نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که مطابق شکل ۵ مقادیر توابع همبستگی دونقطه‌یی در راستای محورهای x و y تقریباً یکسان است. با توجه به همسانگردی موجود، فرض می‌شود مقادیر توابع همبستگی در راستای محور z ($\vec{\mathbf{r}}_z$) نیز برابر با محور x یا y باشد. مقادیر توابع همبستگی در صفحه، ($\vec{\mathbf{r}}_{xy}$) نیز با استفاده از مقطع موجود محاسبه می‌شوند. بنابراین، با استفاده از معادله‌ی ۱۴ کل توابع همبستگی، محاسبه و سپس با استفاده از الگوریتم بازیابی فاز، مطابق با



شکل ۴. مقطع استفاده‌شده به‌عنوان مبنا برای سه‌بعدی‌سازی ریزساختار.



شکل ۵. مشابهت توابع همبستگی ریزساختار همسانگرد در راستاهای مختلف (x, y).



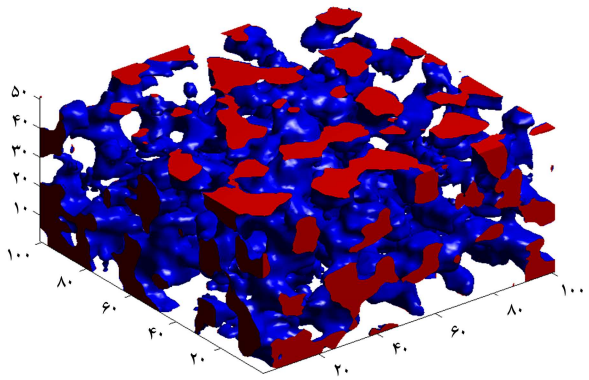
شکل ۶. مقطعی از ریزساختار بازسازی‌شده.

فلوچارت شکل ۳، ریزساختار سه بعدی بازسازی می‌شود.

در شکل ۶ مقطعی از ریزساختار بازسازی‌شده و در شکل ۷ برشی سه‌بعدی از آن نمایش داده شده است.

۲.۴. محاسبه‌ی هدایت گرمایی مؤثر

برای محاسبه‌ی هدایت گرمایی مؤثر ریزساختار مورد بحث در بخش قبل در یک راستای دلخواه، دو صفحه‌ی متقابل عمود بر آن راستا، در دو دمای متفاوت T_1 و T_2 انتخاب می‌شود و بقیه‌ی سطوح، عایق فرض می‌شوند. با حل مسئله‌ی انتقال حرارت، میزان شار حرارتی در واحد سطح در آن راستا، q، به‌دست می‌آید. با استفاده



شکل ۷. برشی به ابعاد ۵۰ × ۱۰۰ × ۱۰۰ پیکسل از فضای بازسازی‌شده.

از معادله‌ی ۱۵، مقدار ضریب هدایت حرارتی مؤثر، محاسبه می‌شود:

$$q = -k_{eff}\left(T_1 - T_2\right) \qquad (۱۵)$$

حدود بالا و پایین، به‌ترتیب بر اساس میانگین حسابی و هندسی ضریب به‌دست می‌آید. در صورتی‌که k_1 و k_2 مقادیر ضرایب هدایت فاز یک و دو و v_1 درصد حجمی فاز یک باشد، حد بالا و پایین از معادلات ۱۶ و ۱۷ به‌دست می‌آیند:[۳]

$$k_{eff_upp} = v_1 k_1 + \left(1 - v_1\right) k_1 \qquad (۱۶)$$

$$k_{eff_low} = \left(v_1/k_1 + \left(1 - v_1\right)/k_1\right)^{-1} \qquad (۱۷)$$

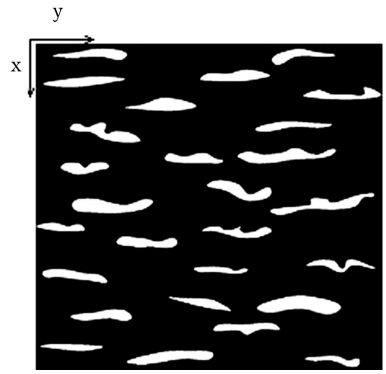
با استفاده از معادلات ۱۶ و ۱۷، با این فرض که ضریب هدایت حرارتی برای فاز یک برابر ۱ و برای فاز دو برابر ۰٫۵ باشد، مقدار حد بالا $k_{eff_upp} = ۰٫۶۵$ و مقدار حد پایین $k_{eff_low} = ۰٫۵۹$ به‌دست می‌آید.

مقدار دقیق ضرایب هدایت حرارتی مؤثر به‌کمک نرم‌افزار Avizo Fire ۸٫۱ محاسبه می‌شود. جدول ۱ میانگین مقدار ضریب هدایت حرارتی مؤثر در سه راستا را برای نمونه‌ی شاهد و نمونه‌ی بازسازی‌شده، نشان می‌دهد.

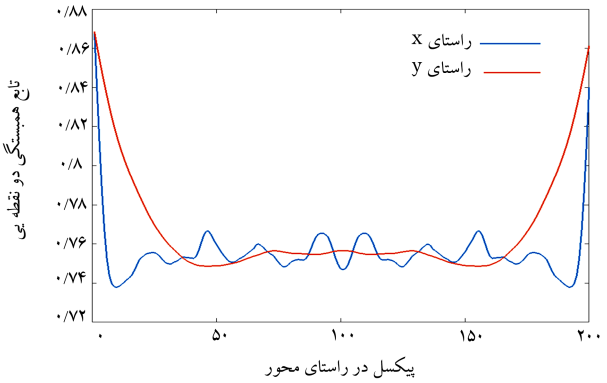
درصد خطای پایین بین مقادیر ضرایب هدایت حرارتی نمونه‌ی شاهد و نمونه‌ی بازسازی‌شده، نشان‌دهنده‌ی قدرت بالای روش پیشنهادشده در بازسازی ریزساختار بر اساس اطلاعات محدود است. قابل ذکر است که بیشترین میزان خطا توسط معادله‌ی ۱۴ ایجاد می‌شود که میانگین مقدار آن برای نمونه‌های مختلف در حدود ۸ درصد است.[۲۴]

۳.۴. بازسازی ریزساختار ناهمسانگرد

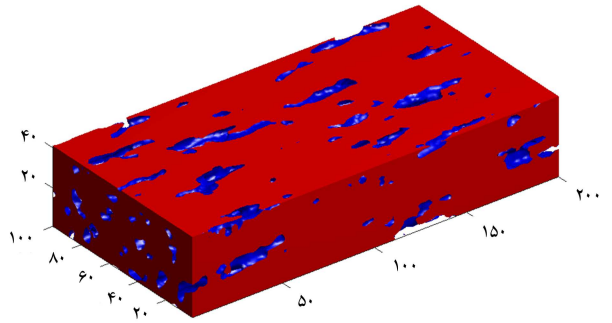
برای ریزساختارهایی نظیر شکل ۸ که مقطع در دسترس مربوط به ماده‌ی ناهمسانگرد به‌طور عرضی همسانگرد است و این مقطع شامل محور تقارن و در راستای طول (y) است، بازسازی سه‌بعدی را می‌توان با یک مقطع نیز انجام داد. با توجه به ناهمسانگردی موجود در ریزساختار، مطابق شکل ۹ مقادیر توابع همبستگی در دو راستا از نظر میزان نوسانات و شکل تابع با هم فرق دارند. در این حالت می‌توان توابع همبستگی در راستای محور z را برابر با مقادیر نظیر در راستای محور x در



شکل ۸. مقطع طولی برای ریزساختار ناهمسانگرد به‌طور عرضی همسانگرد با ابعاد ۲۰۰ × ۲۰۰ و درصد حجمی $v_2 = ۰٫۸۷$.



شکل ۹. مقادیر توابع همبستگی در راستای x و y برای فاز سیاه.



شکل ۱۰. زیرمجموعه‌یی از ریزساختار سه‌بعدی بازسازی‌شده با ابعاد ۱۰۰ × ۴۰ × ۲۰۰.

نظر گرفت و به‌کمک معادله‌ی ۱۴ مقادیر توابع همبستگی را برای کل المان حجمی نماینده به دست آورد.

مطابق با شکل ۳، با معلوم بودن توابع همبستگی برای کل المان حجمی، می‌توان بازسازی ریزساختار را انجام داد. شکل ۱۰، زیرمجموعه‌یی از ریزساختار بازسازی‌شده را نمایش می‌دهد.

جدول ۱. محاسبه‌ی ضریب هدایت حرارتی مؤثر برای نمونه‌ی شاهد و نمونه بازسازی‌شده.

درصد حجمی	ضریب هدایت حرارتی		ضریب هدایت مؤثر		درصد
فاز سفید	فاز سفید	فاز سیاه	نمونه شاهد	نمونه بازسازی‌شده	خطا
$v_1 = ۰٫۳$	$k_1 = ۱$	$k_2 = ۰٫۵$	$k_{eff_ori} = ۰٫۶۲۸$	$k_{eff_rec} = ۰٫۶۲۱$	۱٫۱

۵. نتیجه‌گیری

در این پژوهش بازسازی سه‌بعدی ریزساختارهای دوفازی ناهمگن همسانگرد و ناهمسانگرد به‌کمک روش بازیابی فاز و بر اساس مقاطع دوبعدی انجام گرفت. بازسازی با استفاده از توابع همبستگی دونقطه‌یی مقاطع صورت پذیرفت به‌این‌صورت که ابتدا این توابع برای صفحه‌ی دوبعدی و محور عمود بر این صفحه، محاسبه و سپس برای فضای سه‌بعدی تقریب زده شد. همچنین، برای ریزساختارهای ناهمسانگرد به‌طور عرضی همسانگرد، در صورتی‌که مقطع مورد استفاده در راستای محور تقارن ریزساختار (عمود بر صفحه‌ی همسانگرد) باشد، استفاده از یک مقطع برای بازسازی سه‌بعدی کافی خواهد بود. عمده خطای موجود در روش، در هنگام تقریب توابع همبستگی سه‌بعدی ایجاد می‌شود و میانگین این خطا در حدود ۸ درصد است. همچنین، کارایی روش بر اساس خواص نمونه‌ی شاهد و نمونه‌ی بازسازی‌شده بر اساس ضریب هدایت حرارتی مؤثر نیز بررسی شد که میزان خطا برای نمونه‌ی مورد بررسی حدود ۱٫۱ درصد به دست آمد. در مواردی که این میزان خطا قابل قبول باشد می‌توان به نحو مؤثری از این روش برای سه‌بعدی‌سازی و سپس محاسبه‌ی خواص ریزساختار بر اساس داده‌های محدود دوبعدی استفاده کرد.

پانوشت‌ها

1. N-point correlation function
2. cluster function
3. lineal path method
4. eigen
5. simulated annealing
6. support vector machine (SVM)
7. transversely isotropic
8. representative volume element (RVE)

منابع (References)

1. Cronin, J.S., Chen-Wiegart, Y.-C.K., Wang, J., and Barnett, S.A. "Three-dimensional reconstruction and analysis of an entire solid oxide fuel cell by full-field transmission X-ray microscopy", *Journal of Power Sources*, **233**, pp. 174-179 (2013).
2. Talukdar, M.S. Torsaeter, O. Ioannidis, M.A. and Howard, J.J. "Stochastic reconstruction, 3D characterization and network modeling of chalk", *J. Petrol. Sci. Eng.*, **35**, pp. 1-21 (2002).
3. Torquato, S., *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*, New York, Springer-Verlag (2002).
4. Adams, B.L., Kalidindi, S.R. and Fulwood, D.T., *Microstructure-Sensitive Design for Performance Optimization*, Waltham, MA 02451: Butterworth-Heinemann (2013).
5. Beran, M.J., *Statistical Continuum Theories, Monographs in Statistical Physics and Thermodynamics*, New York, Interscience (1968).
6. Kröner, E. "Bounds for effective elastic moduli of disordered materials", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **25**, pp. 137-155 (1977).
7. Torquato, S. and Stell, G. "Microstructure of two-phase random media. I. the n-point probability functions", *Journal of Chemical Physics*, **77**, pp. 2071-2077 (1982).
8. Torquato, S. and Stell, G. "Microstructure of two-phase random media. II. the mayer-montroll and kirkwood-salsburg hierarchies", *Journal of Chemical Physics*, **78**, pp. 3262-3272 (1983).
9. Torquato, S. "Effective stiffness tensor of composite media – I. exact series expansion", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **45**, pp. 1421-1448 (1997).
10. Saheli, G., Garmestani, H. and Adams, B.L. "Microstructure design of a two phase composite using two-point correlation functions", *Int. J. Comput. Aid Des.*, **11**, pp. 103-115 (2004).
11. Safdari, M., Baniassadi, M., Garmestani, H. and Al-Haik, M.S. "A modified strong-contrast expansion for estimating the effective thermal conductivity of multiphase heterogeneous materials", *Journal of Applied Physics*, **112**, pp. 114318-114318 (2012).
12. Rémond, Y., Ahzi, S., Baniassadi, M. and Garmestani, H., *Applied RVE Reconstruction and Homogenization of Heterogeneous Materials*, Great Britain: Wile-ISTE (2016).
13. Sheehan, N. and Torquato, S. "Generating microstructures with specified correlation function", *Journal of Applied Physics*, **89**, pp. 53-60 (2001).
14. Adams, B.L., Gao, X. and Kalidindi, S.R. "Finite approximations to the second-order properties closure in single phase polycrystals", *Acta Materialia*, **53**, pp. 3563-3577, (2005).
15. Fullwood, D.T., Niezgoda, S.R. and Kalidindi, S.R. "Microstructure reconstructions from 2-point statistics using phase recovery algorithms", *Acta Materialia*, **52**, pp. 942-948 (2008).
16. Quiblier, J.A. "A new three-dimensional modeling technique for studying porous media", *Journal of Colloid and Interface Science*, **98**, pp. 84-102 (1984).
17. Adler, P.M., Jacquin, C.G. and Quiblier, J.A. "Flow in simulated porous media", *International Journal of Multiphase Flow*, **16**, pp. 691-712 (1990).
18. Lanzini, A., Leone, P. and Asinari, P. "Microstructural characterization of solid oxide fuel cell electrodes by image analysis technique", *Journal of Power Sources*, **194**, pp. 408-422 (2009).

19. Yeong, C.L.Y. and Torquato, S. "Reconstructing random media II. three-dimensional media from two-dimensional cuts", *Physical Review E*, **58**, pp. 224-233 (1998).

20. Cule, D. and Torquato, S. "Generating random media from limited microstructural information via stochastic optimization", *Journal of Applied Physics*, **86**, pp. 3428-3428 (1999).

21. Bochenek, B. and Pyrz, R. "Reconstruction of random microstructures – a stochastic optimization problem", *Computational Materials Science*, **31**, pp. 93-112 (2004).

22. Sundararaghavan, V. and Zabaras, N. "Classification and reconstruction of three-dimensional microstructures using support vector machines", *Computational Materials Science*, **32**, pp. 223-239 (2005).

23. Baniassadi, M., Garmestani, H., Li, D.S., Ahzi, S., Khaleel, M. and Sun, X. "Three-phase solid oxide fuel cell anode microstructure realization using two-point correlation functions", *Acta Materialia,* **59**, pp. 30-43 (2011).

24. Hasanabadi, A., Baniassadi, M., Abrinia, K., Safdari, M. and Garmestani, H. "3D microstructural reconstruction of heterogeneous materials from 2D cross sections: A modified phase-recovery algorithm", *Computational Materials Science*, **111**, pp. 107-115 (2016).

25. Gerchberg, R.W. and Saxton, W.O. "A practical algorithm for the determination of phase from image and diffraction plane pictures", *OPTIK,* **35**, pp. 237-246 (1972).

26. Gokhale, A.M., Tewari, A. and Garmestani, H. "Constraints on microstructural two-point correlation functions", *Scripta Materialia,* **53**, pp. 989-993 (2005).

27. Fullwood, D.T., Kalidindi, S.R., Niezgoda, S.R., Fast, A. and Hampson, N. "Gradient-based microstructure reconstructions from distributions using fast Fourier transforms", *Materials Science and Engineering A*, **494**, pp. 68-72 (2008).

28. Jiang, Z., Chen, W. and Burkhart, C. "Efficient 3D porous microstructure reconstruction via Gaussian random field and hybrid optimization", *Journal of Microscopy*, **252**, pp. 135-148 (2013).

29. Fienup, J.R. "Reconstruction of an object from the modulus of its Fourier transform", *Optics Letters*, **3**, pp. 27-29 (1978).