

# Stochastic modelling of phase transformations using HPC infrastructure

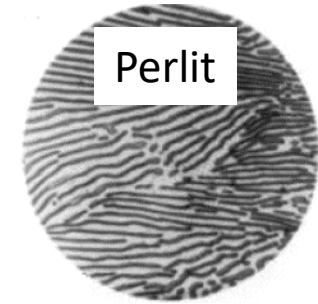
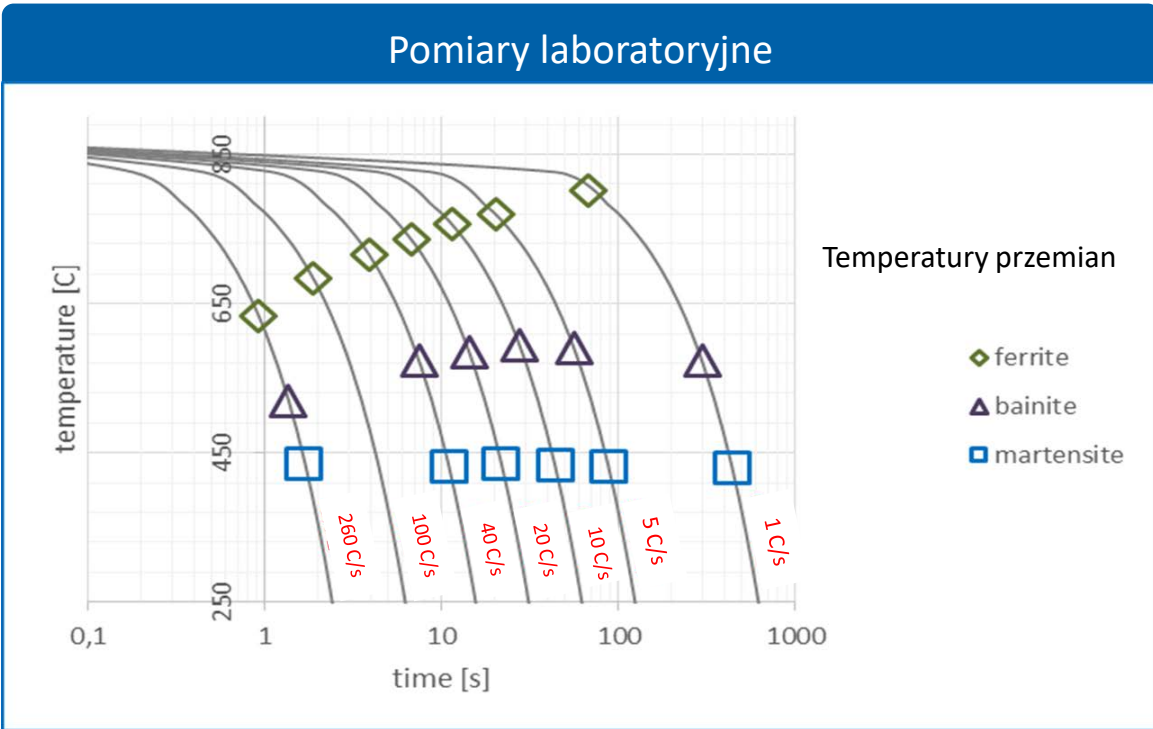
(Stochastyczne modelowanie przemian fazowych z wykorzystaniem komputerów wysokiej wydajności)

---

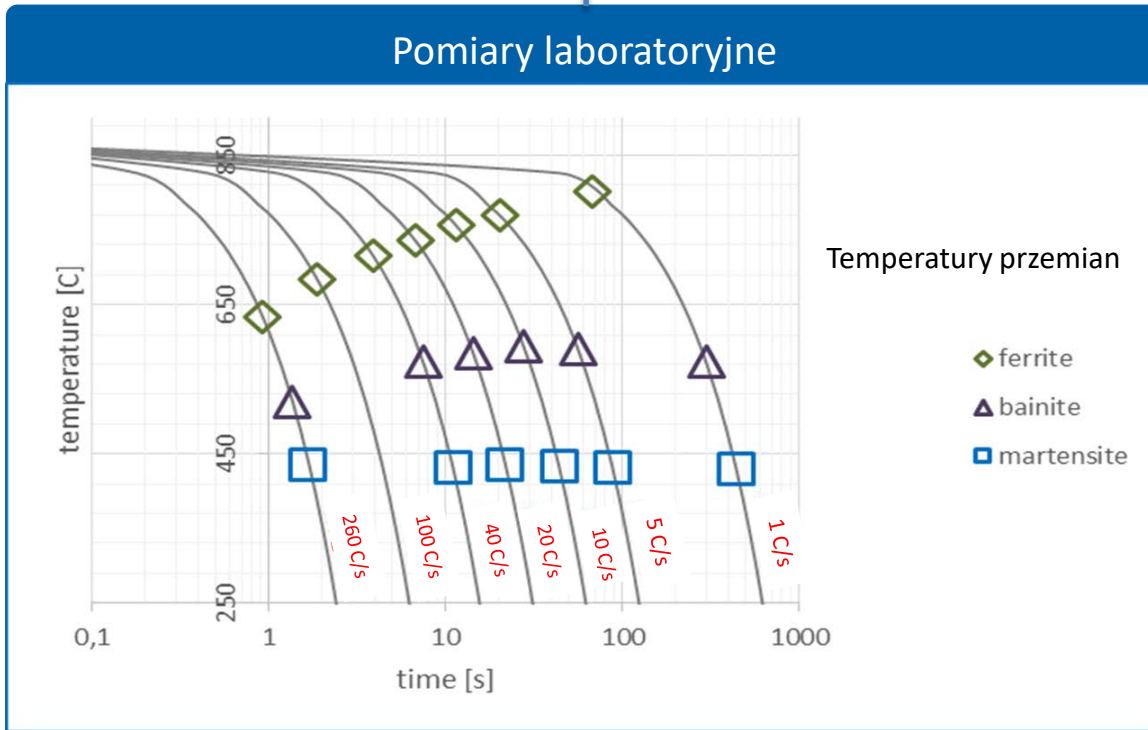
Daniel Bachniak, Łukasz Rauch, Danuta Szeliga, Maciej Pietrzyk

*Akademia Górniczo Hutnicza  
Wydział Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej*





poszukiwanie modelu



**Model przemian**  
wartości współczynników

Prawdopodobieństwo poprawności  
?

Błędy pomiarów

wpływają na

**Model przemian**  
poprawny ?



1. Model przemian fazowych.
2. Identyfikacja współczynników modelu.
3. Badania niepewności dla stałej prędkości chłodzenia.
4. Badania niepewności dla wieloetapowego cyklu chłodzenia.
5. Obliczenia za pomocą HPC.
6. Podsumowanie i wnioski.

# Upgrade of the JMAK model (Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov)

Model bazuje na równaniu Avramiego, opisuje kinetykę krystalizacji.

Zmiana objętości nowej fazy:

$$X = 1 - \exp(-kt^n)$$

Współczynnik  $k$  został wprowadzony jako funkcja zależna od temperatury:

- Ferrytyczna przemiana – zastosowano zmodyfikowaną funkcję rozkładu gausa  $k(T)$ :

$$k = k_{\max} \exp\left[-\left(\frac{T - T_{\text{nose}}}{a_7}\right)^{a_8}\right]$$

$$k_{\max} = \frac{a_5}{D_\gamma} \quad T_{\text{nose}} = Ae_3 + \frac{400}{D_\gamma} - a_6$$

- Perlityczna przemiana – zależność od wielkości ziarna:

$$k = \frac{k_3}{D_\gamma^{k_4}} \exp(k_2 - k_1 T)$$

- Bainityczna przemiana:

$$k = k_3 \exp(k_2 - k_1 T)$$

# Czas inkubacji pearlit & bainit

Czas inkubacyjny  
tworzenie się zarodków



Perlit

pearlite

$$\tau_P = \frac{a_1}{(Ae_1 - T)^{a_3}} \exp \left[ \frac{a_2 \times 10^3}{R(T + 273)} \right]$$

Czas inkubacyjny  
tworzenie zarodków



Bainit

bainite

$$\tau_b = \frac{a_9}{(B_s - T)^{a_{11}}} \exp \left[ \frac{a_{10} \times 10^3}{R(T + 273)} \right]$$

**Początek przemiany bainitycznej i martenzytycznej**  
 - zależność od składu chemicznego:

$$B_s [^{\circ} \text{C}] = a_{20} - 425[\text{C}] - 42.5[\text{Mn}] - 31.5[\text{Ni}]$$

$$M_s [^{\circ} \text{C}] = a_{25} - a_{26} C_{\gamma}$$

**Ułamek austenitu, który transformuje do martenzytu**

Koistinen –Margburger model:

$$X_m = 1 - \exp[-0.011(M_s - T)]$$

$$F_m = (1 - F_f - F_p - F_b) \left\{ 1 - \exp[-a_{27}(M_s - T)] \right\}$$

**Warunki równowagi obliczone za pomocą oprogramowania ThermoCalc**

**23 współczynników**

$C_{\gamma}$  - zawartość węgla w aust.  
 $X_{\gamma}$  - ułamek objętości w odniesieniu do maksymalnego możliwego ułamka objętości w danej temperaturze  
 $F$  - ułamek objętości w odniesieniu do całkowitej objętości

$$C_{\gamma\alpha} = C_{\gamma\alpha 1} + C_{\gamma\alpha 2} T$$

$$C_{\gamma\beta} = C_{\gamma\beta 1} + C_{\gamma\beta 2} T$$

## Dilatometric data table

Cooling rate	Ferrite start	Ferrite finish	Pearlite start	Pearlite finish	Bainite start	Bainite finish	Martensite start
1,00	802,00		670,00		573,00		429,00
5,00	769,00		645,00		590,00		432,00
10,00	756,00				595,00		434,00
20,00	736,00				585,00		436,00
40,00	715,00				573,00		432,00
100,00	684,00				550,00		436,00
260,00	634,00				519,00		436,00

### Chemical composition

Carbon:	0,095
Nitrogen:	0,0039
Manganese:	1,51
Silicon:	0,23
Chrome:	0,41
Nickel:	0,05
Phosphorus:	0,007

### ThermoCalc calculations

Ca1:	0,0349
Ca2:	-4,03E-05
Cga1:	4,779683701
Cga2:	-0,005782346545
Cgb1:	-0,856330359
Cgb2:	0,002166897544

### Austenite

Grain size:

14

Poszukiwanie  
współczynników  
modelu  
(a4 – a26)



Model  
przemian fazowych



Funkcja celu dla identyfikacji parametrów modelu:

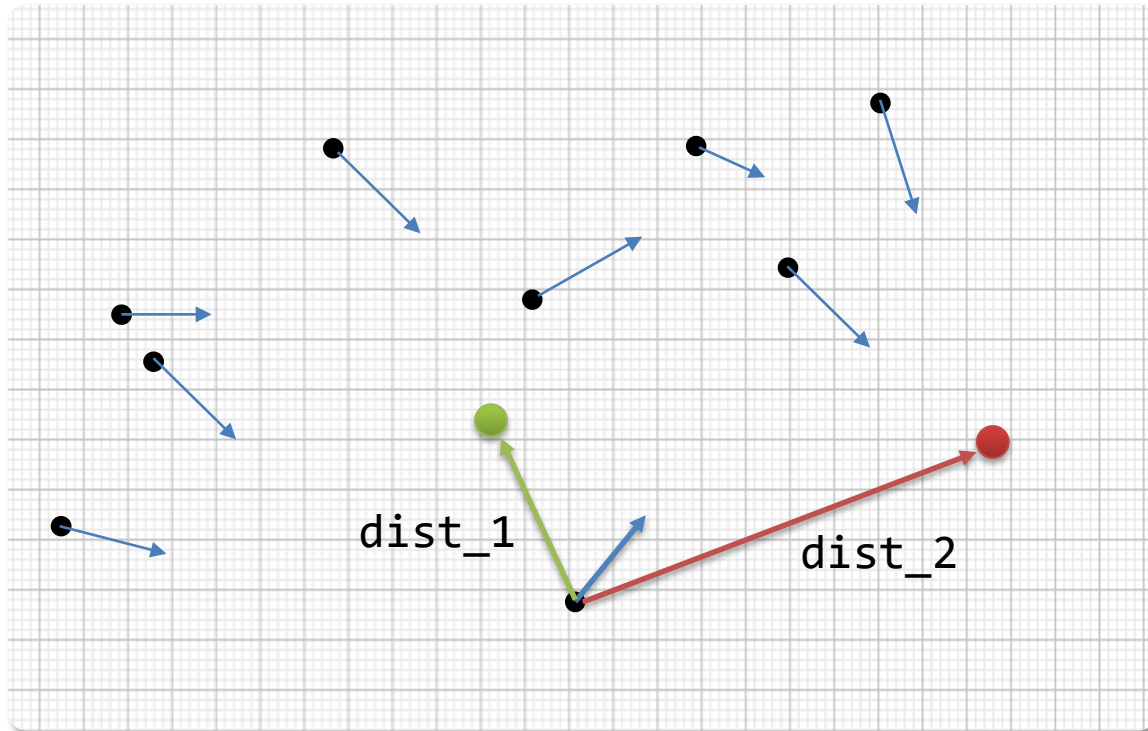
$$\varphi = \sqrt{\sum_{i=1}^N \left( \frac{T_{i,pomiar} - T_{i,model}}{T_{i,pomiar}} \right)^2}$$




gdzie:

N – ilość pomiarów – temperatur przemian,

T<sub>i</sub> – temperatura przemiany zmierzona/obliczona.

# Metoda roju cząstek (PSO)



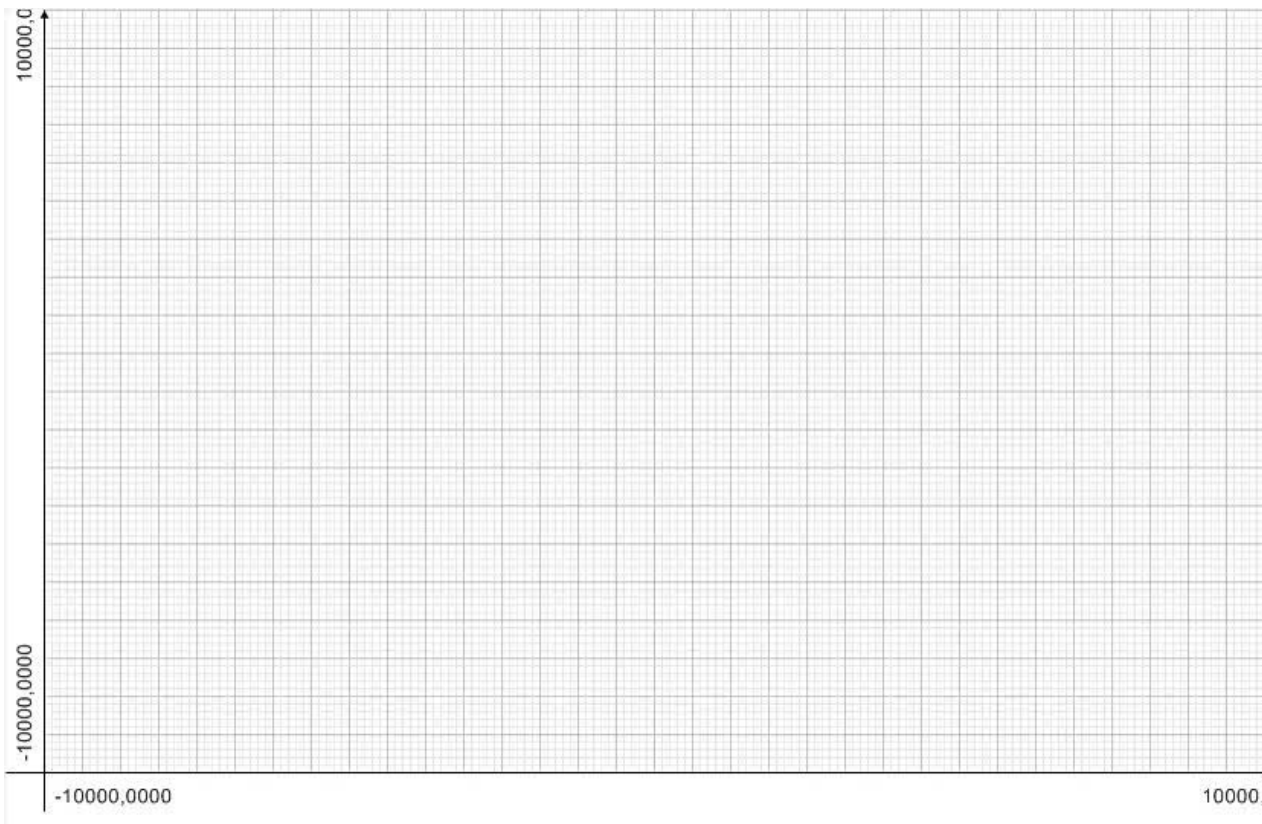
-  cząstka i jej wektor prędkości
-  globalne minimum
-  lokalne minimum




$$V = \underbrace{w * V}_{\text{bezwładność}} + \underbrace{q1 * r1 * dist_1}_{\text{lokalny wpływ}} + \underbrace{q2 * r2 * dist_2}_{\text{globalny wpływ}};$$

$w=0.729$

$q1 = q2 = 1.49445$ ,  $r1$  and  $r2$  - random  $(0, 1)$

# Metoda roju cząstek (PSO)



-  cząstka i jej wektor prędkości
-  globalne minimum
-  lokalne minimum

$$V = \underbrace{w * V}_{\text{bezwładność}} + \underbrace{q1 * r1 * \text{dist}_1}_{\text{lokalny wpływ}} + \underbrace{q2 * r2 * \text{dist}_2}_{\text{globalny wpływ}}$$

$w=0.729$        $q1 = q2 = 1.49445$ ,  $r1$  and  $r2$  - random (0, 1)

Phase Transformations
DP 1398

Selected steel:

SteelDP1398
▼

**STEEL INFORMATION**

- Chemical composition
- Dilatometric data

**STEEL MODELS**

- Cooling model
- Heating model

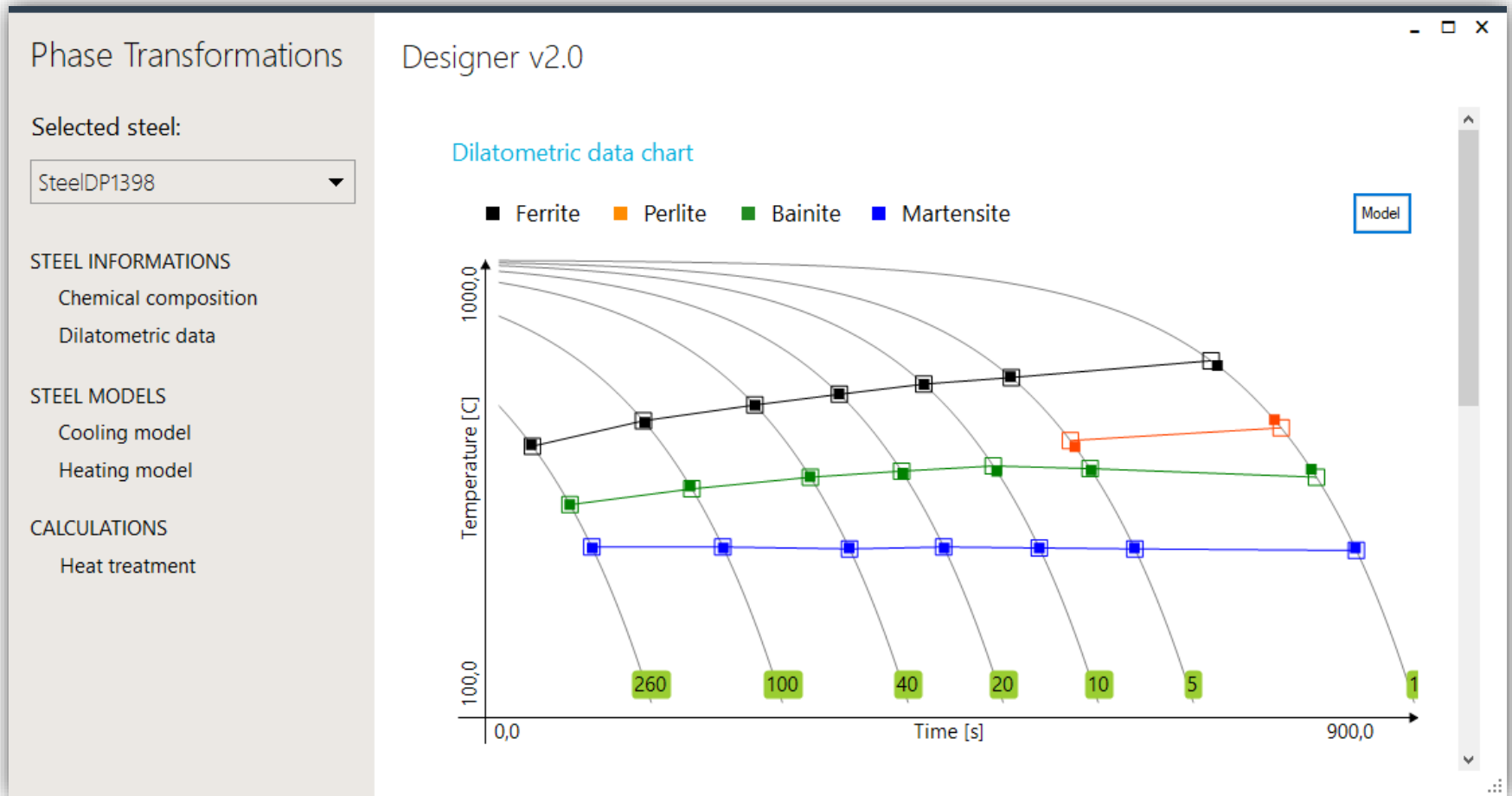
**CALCULATIONS**

- Heat treatment

Chemical composition

Carbon:	0,095
Nitrogen:	0,0039
Manganese:	1,51
Silicon:	0,23
Chrome:	0,41
Nickel:	0,05
Phosphorus:	0,007
Aluminium:	0,037
Copper:	0,02
Sulphur:	0,008
Niob:	0,005
Vanadium:	0,045
Titanium:	0,006

*Oprogramowanie do identyfikacji parametrów modelu przemian fazowych.*

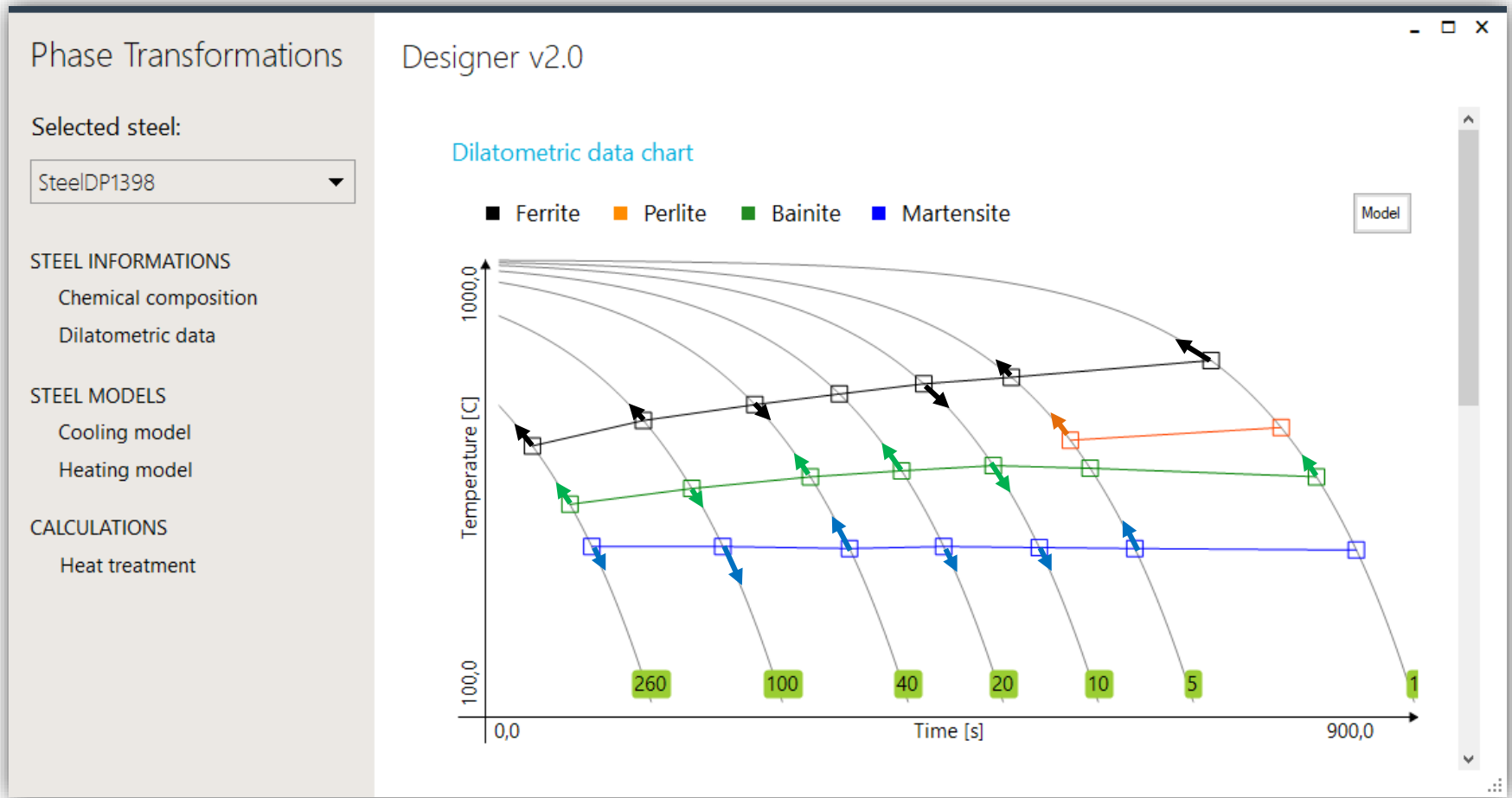


*Oprogramowanie do identyfikacji parametrów modelu przemian fazowych.*

# Badania wstępne – niepewność współczynników

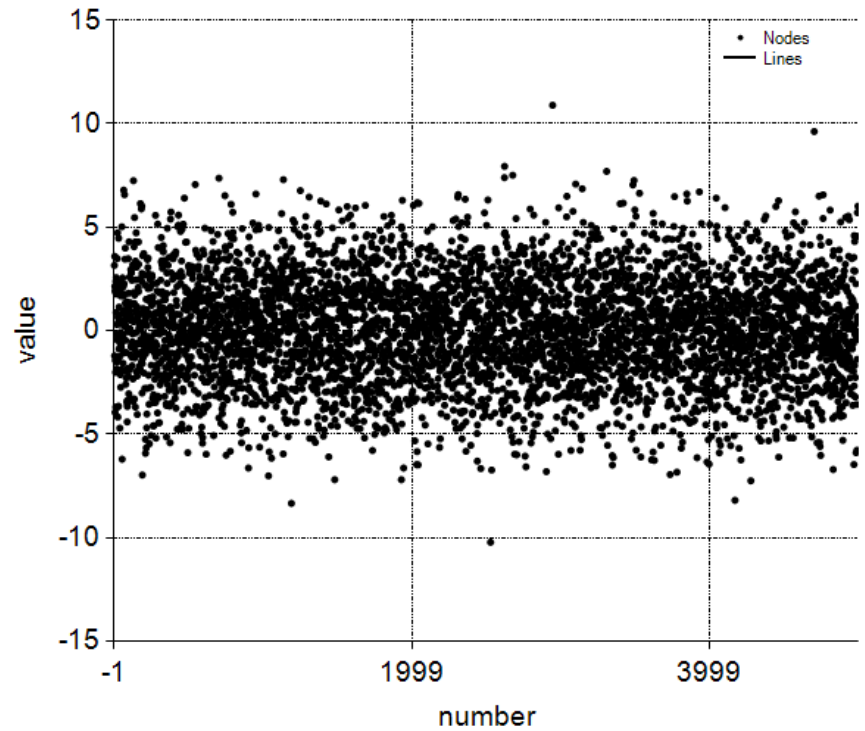
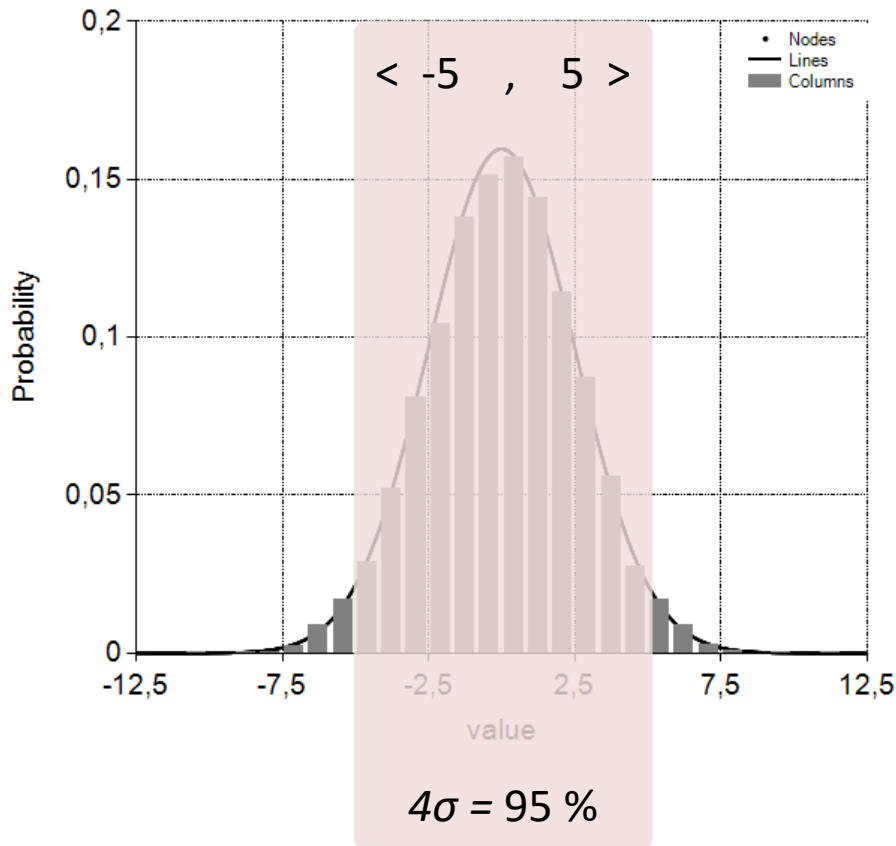
Jak błędy pomiarów decydują  
o wartościach parametrów?

---



*Oprogramowanie do identyfikacji parametrów modelu przemian fazowych.*

1. Rozkład równomierny z zakresu  $\langle -5, 5 \rangle$  °C
2. Rozkład gaussa, standard deviation ( $\sigma$ ) = 2.5 °C, mean value ( $\mu$ ) = 0 °C



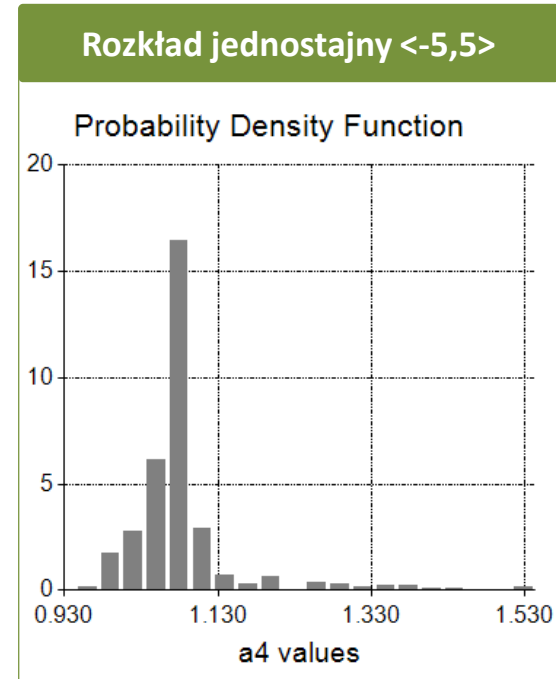
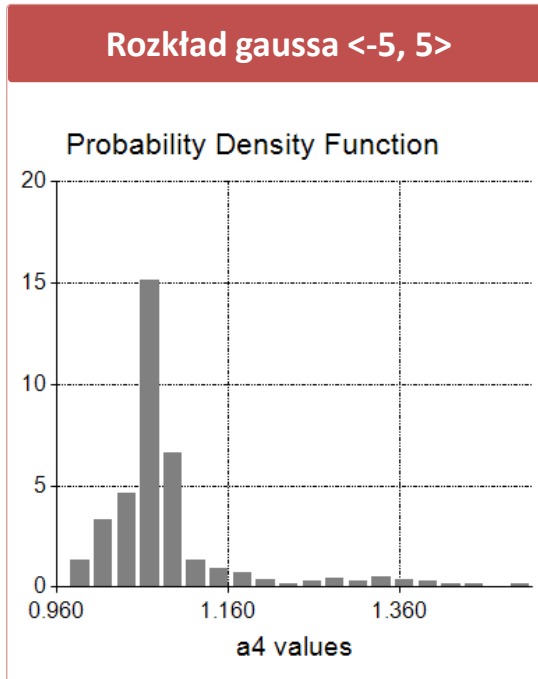


1000 optymalizacji

1000 optymalizacji

Rozkład gaussa <-5, 5>

Rozkład jednostajny <-5,5>



Parametr a4 oraz pozostałe parametry posiadają prawie identyczny rozkład wartości dla scenariusza z błędami gaussa i normalnymi.

# Badania wstępne – niepewność składu fazowego

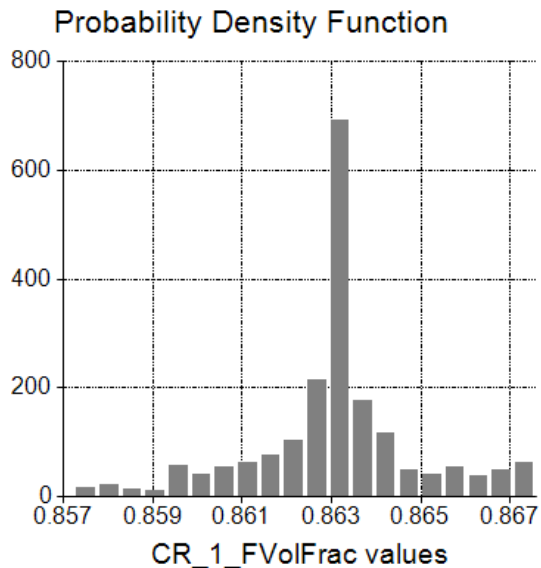
Czy model przewiduje skład fazowy jednoznacznie?

---

1000 optymalizacji

**Prędkość chłodzenia 1 °C / s**

zawartość  $\langle 0.85, 0.87 \rangle$   
 prawdopodobieństwo 100 %



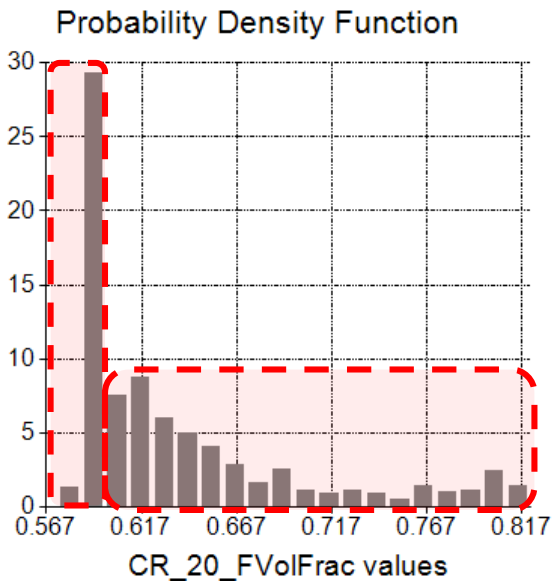
1000 optymalizacji

**Prędkość chłodzenia 20 °C / s**

zawartość  $\langle 0.55, 0.60 \rangle$   
 prawdopodobieństwo 25 %

-----

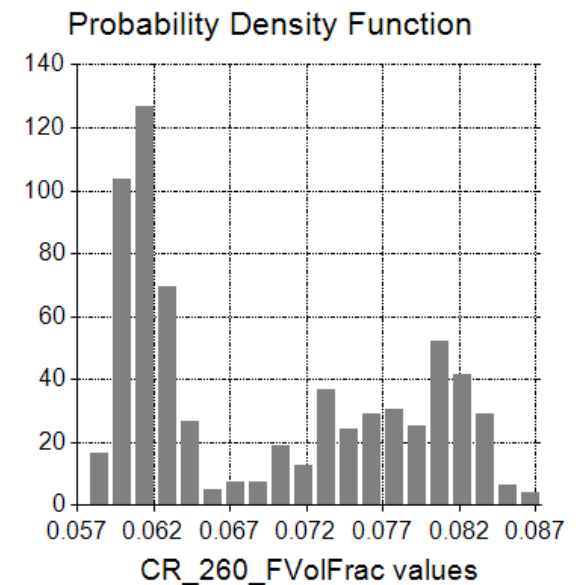
zawartość  $\langle 0.60, 0.82 \rangle$   
 prawdopodobieństwo 75 %



1000 optymalizacji

**Prędkość chłodzenia 260 °C / s**

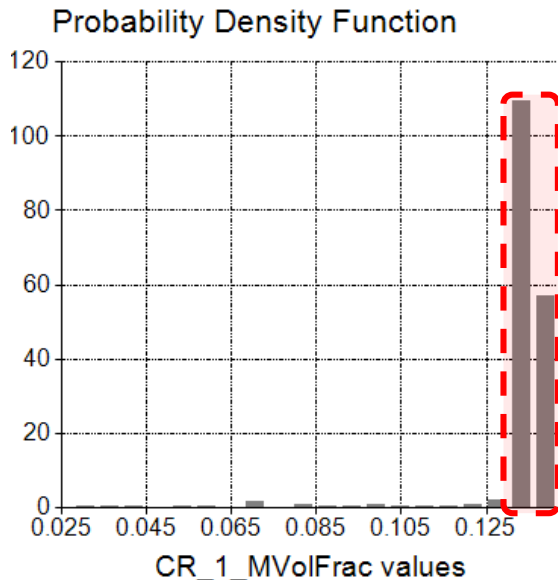
zawartość  $\langle 0.05, 0.09 \rangle$   
 prawdopodobieństwo 100 %



1000 optymalizacji

**Prędkość chłodzenia 1 °C / s**

zawartość <0.135, 0.145>  
 prawdopodobieństwo 99 %

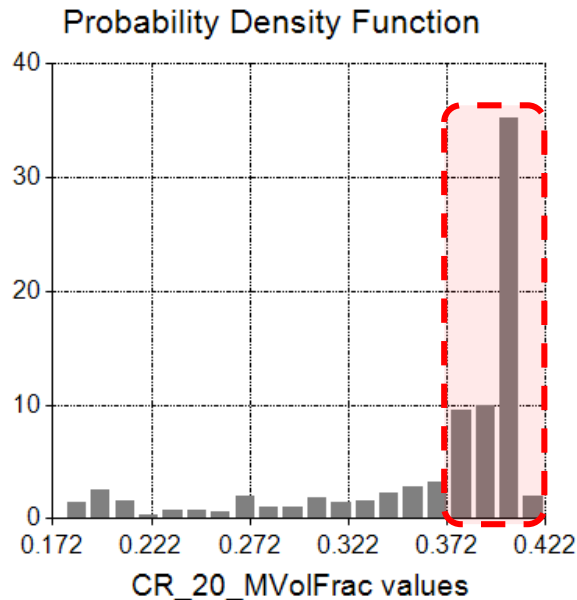


1000 optymalizacji

**Prędkość chłodzenia 20 °C / s**

zawartość <0.37, 0.42>  
 prawdopodobieństwo 90 %

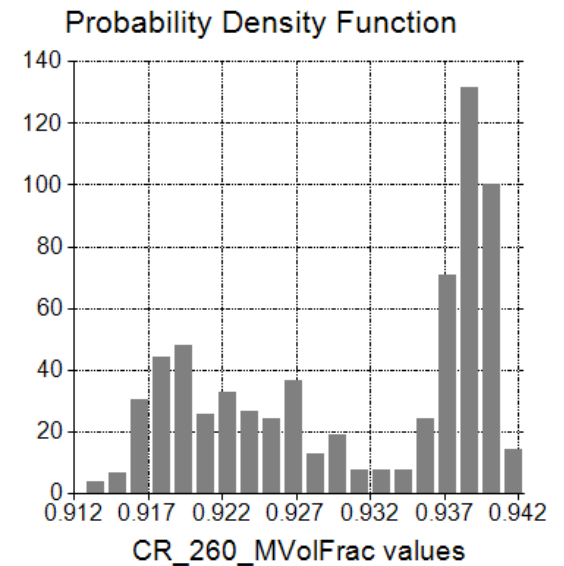
-----  
 zawartość <0.10, 0.37>  
 prawdopodobieństwo 10 %



1000 optymalizacji

**Prędkość chłodzenia 260 °C / s**

zawartość <0.90, 0.94>  
 prawdopodobieństwo ~100 %



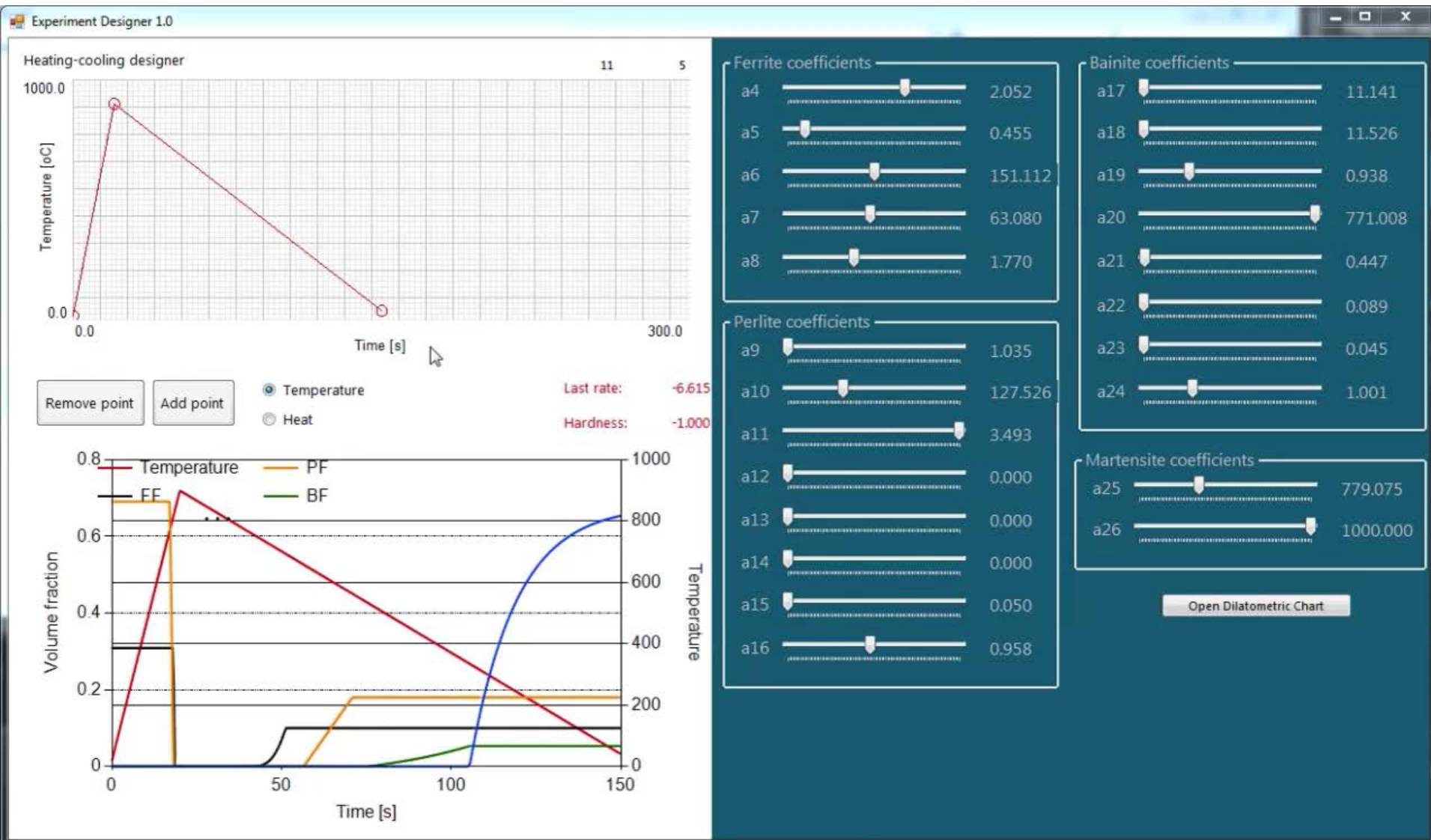
## Wnioski dla przewidywania faz:

---

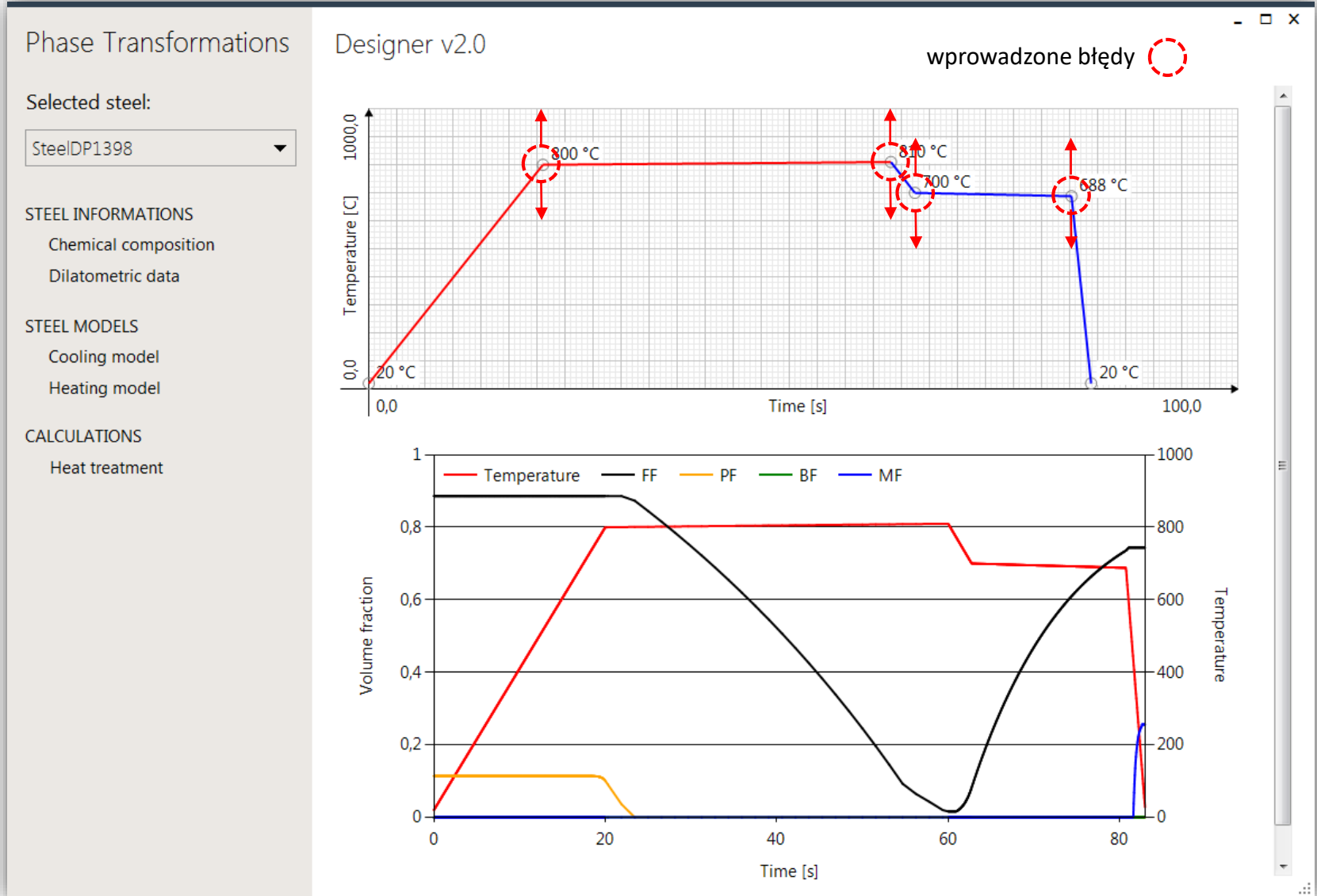
1. Dla małych prędkości chłodzenia gdzie powstaje większość ferrytu oraz dla dużych prędkości chłodzenia gdzie powstaje większość martenzytu model przewiduje skład z dużym prawdopodobieństwem.
2. Dla prędkości pomiędzy, skład fazowy jest niejednoznaczny.

# Badanie niepewności dla wieloetapowego chłodzenia

---



- wykorzystano modele obarczone błędem pomiaru
- oraz wprowadzono błędy podczas wieloetapowego chłodzenia

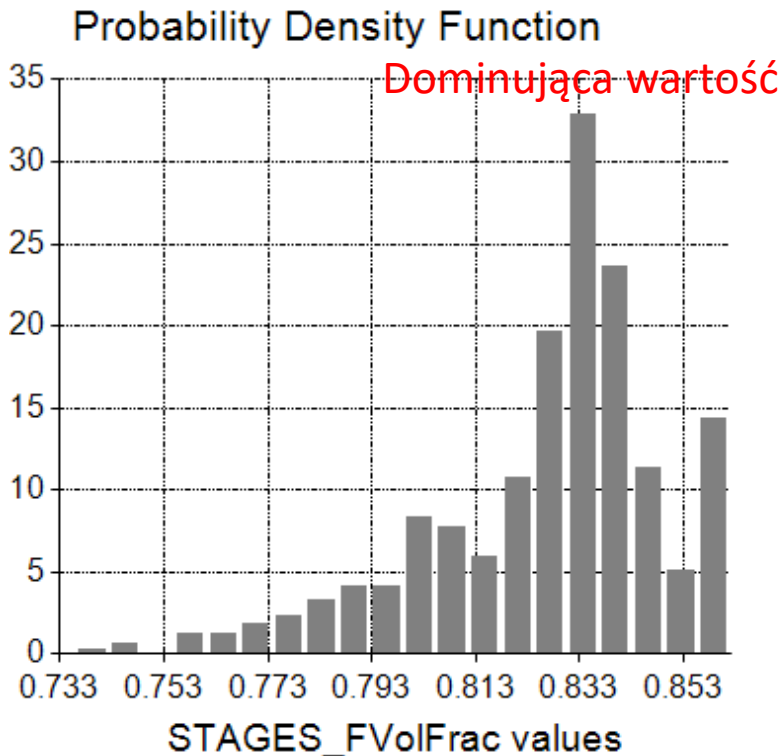


Oprogramowanie do projektowania chłodzenia wieloetapowego.

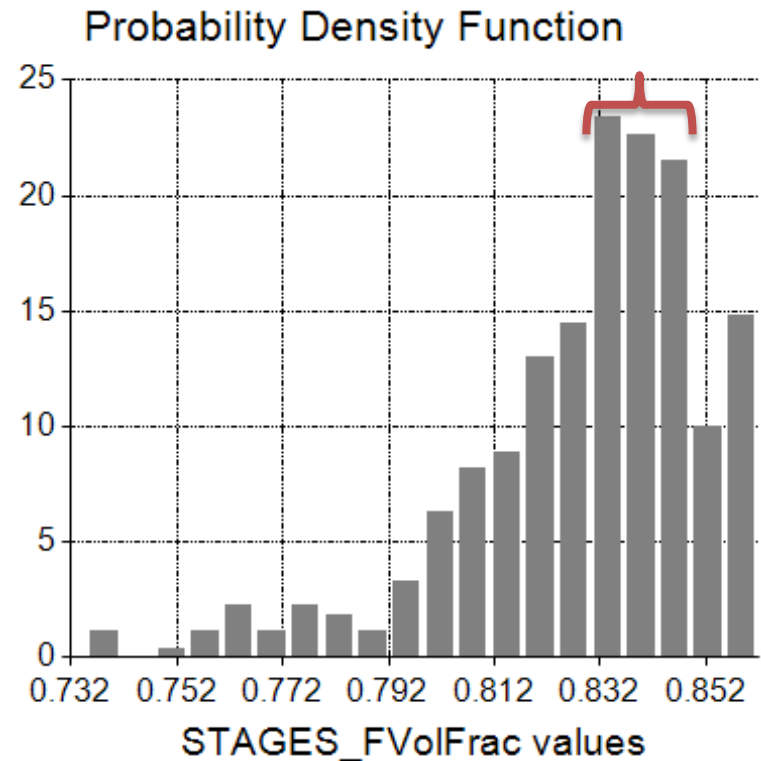


Model (błędy gaussa)  
+ etapy (błędy gaussa)

Model (błędy normalne)  
+ etapy (błędy normalne)



Dominująca wartość  
83%



Dominująca wartość  
<82%, 84%>



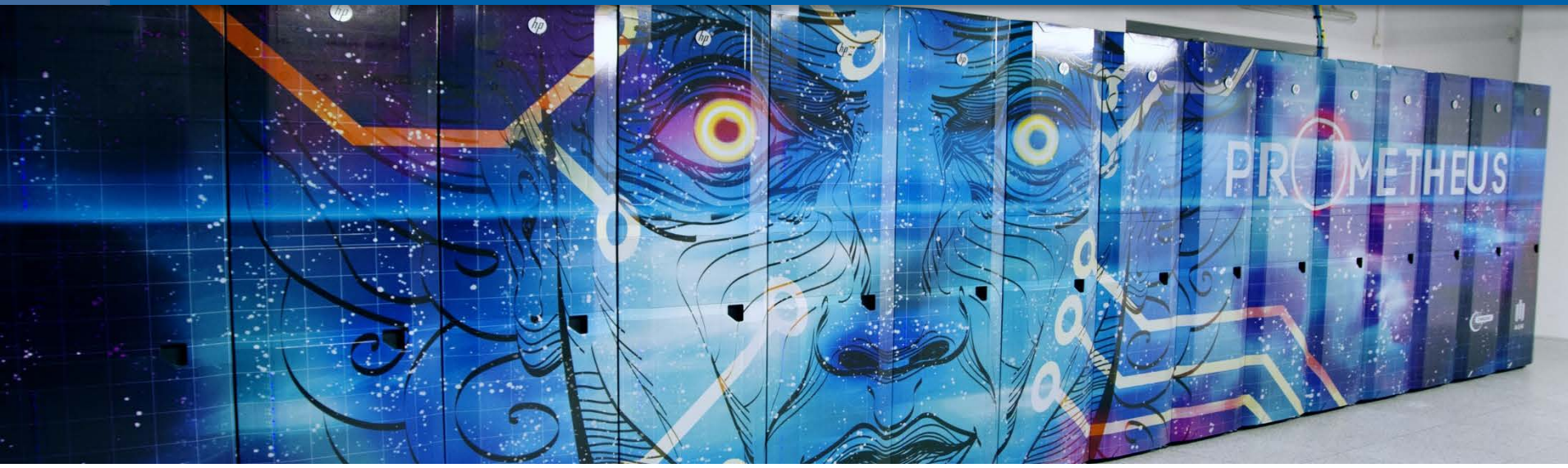
```
#!/usr/bin/bash -l
## Nazwa zlecenia
#SBATCH -J "PhaseTrans,,
# Ilość wykorzystywanej pamięci
#SBATCH --mem 128
## Ilość procesorów na zadanie
#SBATCH --cpus-per-task=24
## Maksymalny czas trwania zlecenia
#SBATCH --time=0:15:00
## Nazwa grantu
#SBATCH -A annopt6
```

## Wymagania do uruchomienia:

- Język programowania: C#
- module load plgrid/tools/mono/4.8.0

## Informacje o uruchomieniu:

- Wykorzystanie procesorów: średnio 90%.



## Cyfronet

### Pojedyncza optymalizacja

- 96 cząstki x 1250 iteracji
- **120 000 uruchomień modelu**

### 3000 optymalizacji - Cyfronet

- 360 milionów uruchomień modelu
- **12 godzin** (250 węzłów \* 24 wątki)

### 3000 optymalizacji - PC

- 12 godzin \* 250 uruchomień = **125 dni**

Komputer osobisty

1. Nie jest możliwe dokładne przewidzenie składu fazowego, a więc i własności materiału.
2. Wynik można podać jedynie z pewnym prawdopodobieństwem.
3. Wykorzystanie infrastruktury HPC pozwoliło skrócić czas obliczeń ze 125 dni do 12 godzin.

**Dziękuję za uwagę**