مکانیک سازهها و شارهها/ سال ۱۳۹۵/ دوره ۶/ شماره ۳/ صفحه ۳۳–۴۲



## بازسازی سه بعدی کامیوزیت نانو لوله کربنی با استفاده از توابع آماری همبستگی

مصطفى مهدوى'، مجيد بني اسدى'َ \* و مصطفى باغاني ّ <sup>۱</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک، پردیس دانشکده های فنی، دانشگاه تهران <sup>۲</sup> استادیار دانشکده مهندسی مکانیک، پردیس دانشکده های فنی، دانشگاه تهران تاریخ دریافت: ۱۳۹۴/۰۴/۲۵؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۵/۰۳/۱۶

#### چکیدہ

بازسازی ساختاری از ساختارهای آماری به علت اهمیت در طراحی مواد، یک زمینه مورد علاقه زیاد است. یک روش جدید در این مقاله آورده شده است که در این روش، از تعداد زیادی المانهای حجمی برای بازسازی ساختار کامپوزیت استفاده شده است که با استفاده از این روش، به راحتی می توان کامیوزیتهای نانو لولهای را با استفاده از روشهای آماری بازسازی کرد و نمونههای بازسازی شده، به خوبی نمایشگر خواص و ویژگیهای کامپوزیتهای نانو لولهای میباشند. در این مقاله، از روش مونت کارلو برای بازسازی استفاده شده است. در این مقاله، با مشخص کردن و به دست آوردن توابع آماری همبستگی از عکسها و نمونههای آزمایشگاهی با استفاده از الگوریتمی که ارائه شده است، نمونههایی بازسازی شده است که دارای توابع آماری همبستگی مشابهی با نمونههای آزمایشگاهی میباشند. به جای استفاده از عکسهای مختلف، اطلاعات مربوط به توزیع نانولولهها در ماتریس، تمامی اطلاعات توزیع نانولولهها به صورت مختصات ابتدا و انتهای تکههای سیلندری ذخیره میشود که در نهایت با به هم پیوستن منجر به تشکیل نانو لوله میشود که با این کار کامپوزیت بازسازی شده برای استفاده در کارهای آینده مورد استفاده قرار می گیرد و به راحتی میتوان در کارهایی مورد استفاده قرار گیرد که نیاز به شبیهسازی و به دست آوردن خواص کامیوزیتهای نانو لوله ای است.

كلمات كلیدی: تابع آماری؛ تابع آماری دو نقطهای؛ بازسازی ساختاری؛ نانولوله كربنی.

#### 3D Reconstruction of Carbon Nanotube Composite Using Statistical Correlation Functions

M. Mahdavi<sup>1</sup>, M. Baniassadi<sup>2,\*</sup>, M. Baghani<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Master Student, Mechanical Engineering, Tehran University, Tehran, Iran. <sup>2</sup> Assoc. Prof., Mechanical Engineering, Tehran University, Tehran, Iran.

#### Abstract

Microstructure reconstruction from statistical microstructure descriptors is a strong field of interest for researchers worldwide, due to its importance in material design. A new methodology is presented in this paper to reconstruct microstructure with a large number of representative volume elements. The proposed methodology provides a stable input for a deterministic method which can be used to simulate performance and effective properties. The Monte Carlo technique is used as the basis of the reconstruction methodology in this work. In this paper statistical correlation functions are extracted from the images of the experimental samples. The proposed algorithm reconstructs new samples which has similar statistical correlation functions in comparison to the experimental samples. The information of the geometric distribution of the nanotubes of the composites is stored in a database of the node locations of the unit cylinder segments and the corresponding waviness, Instead of using a discrete image matrix. These node locations are attractive results which can be utilized in the simulation software in order to obtain the properties of the studied composite. In this way, robust microstructures with a large number of representative volume elements were reconstructed for the future evaluation.

Keywords: Statistical Correlation; Two-Point Function; Microstructure Reconstruction; Carbon Nanotube.

\* نویسنده مسئول؛ تلفن: ۲۱-۸۲۰۹۴۰۳۵

آدرس يست الكترونيك: m.baniassadi@ut.ac.ir

۳۴

مهدوی و همکاران

Archive of SID

#### ۱– مقدمه

هدف بازسازی ساختاری، ایجاد ساختار شبیهسازی شده برای نمایش آماری ساختار با استفاده از گروهی از توصیف گرهای ساختاری است. در زمینههای دیگر نیز، برای ساختن یک ساختار سه بعدی واقعی از دستهای از عکسهای دو بعدی استفاده میشود که از آزمایش به دست آمدهاند؛ مانند آزمایش های پرتو یون متمرکز شده. در این مقاله، روی چگونگی استفاده از اطلاعات آماری به دست آمده از دادههای آزمایشگاهی یا نتایج شبیهسازی برای ساختن ساختار مناسب و شبیه به ساختار اصلی کار شده است.

اهمیت روشهای بازسازی ساختار در دهههای اخیر به طور چشمگیری با توسعه طراحی مواد گوناگون افزایش یافته است. راهحلهای ریاضی برای ساختارها با خواص معین، نیازمند یک نمایش مناسب از ساختار با استفاده از گروهی از المان های قرار گرفته درون ساختار است. در کامپوزیت نانولوله کربنی توصیفگرهایی که میتوانند ساختار را به خوبی نمایش دهند شامل، نسبت حجمی نانولولهها، طول نانولولهها، نسبت طول به قطر نانولولهها، انحناهای نانولولهها و نحوه نسبت طول به قطر نانولولهها، انحناهای نانولولهها و نحوه آست، در سلسله ترتیبهای توابع آماری همبستگی، یا توابع آماری چند نقطه ای ذخیره شوند، در نهایت ساختار با توصیف گرهای مواد نمایش داده میشود که از ویژگیهای گفته شده استفاده میشود.

انگیزه دیگر برای بازسازی ساختار، اجرای شبیهسازی هایی است که برای به دست آوردن خواص نیاز است [۱-۴]. از توصیف گرهایی همانند توابع آماری چند نقطهای، خواص مکانیکی، مغناطیسی، الکتریکی و گرمایی ممکن است، به طور مستقیم شبیه سازی انجام شود. نکته دیگر، بازسازی ساختار از توصیف گرها و سپس با استفاده از روش اجزای محدود، خواص موثر ممکن است، شبیهسازی شده استفاده ممکن است، برای تایید ساختارهای شبیهسازی شده استفاده شود که نقش اصلی در طراحی مواد دارد.

بازسازی با تعداد بسیار زیادی از روشهای شبیهسازی دنبال شده است، بیشتر آن ها از اطلاعات آماری بر پایه تابع یک نقطهای، همانند سایز دانه، نسبت حجمی، شکل ایده آل شده، ساختار تصادفی و موارد دیگر استفاده کردهاند. اطلاعات مشخصههای غیر ایزوتروپی، توزیع جهتها، شکل و هندسه

ملاحظه نشدهاند، اگرچه این ویژگیها ممکن است، در توابع آماری ملاحظه شده باشند، شبیهسازی از توابع آماری مهم است؛ اما همزمان مشکلاتی را نیز معرفی میکند.

تورکاتو ([۵, ۶]، مطالعه بازسازی ساختارها را با استفاده از توابع آماری شروع کرد، ساختارهای ناهمگن تصادفی از توابع آماری مرتبه پایین با بهینهسازی تصادفی بازسازی شدند. چندین مثال از ساختارهای یک بعدی و دو بعدی نشان داده شدند که قابلیت روش بازسازی برای مرتبه طیف کوچک را نشان میدهد. یک فرمول بندی ریاضی دقیق از الگوریتم بازسازی بیان شده است. تورگاتو، همچنین نشان داد که توابع دو نقطهای به تنهایی نمیتوانند به طور کامل ماده دوفازی ناهمگن را معلوم کنند، بنا به این دلیل، جوابهای بازسازی اگر شرايط اوليه فقط توابع آماري مرتبه پايين باشند، يكسان نخواهند بود. توابع آماری از دو ترم اندازه و جهت تشکیل می شوند، اگر فقط یک جهت ملاحظه شود، ممکن است غیر ایزوتروپی ساختگی حتی اگر ساختار آزمایشی تصادفی باشد، صورت گیرد، برای حل این مشکل، شیهان ً و تورگاتو بعدا جهتهای بیشتری در توابع آماری معرفی کردند که به طور موثری ناایزوتروپیهای ساختگی را حذف میکرد. همه اطلاعات ورودی از عکسهای دوبعدی به دست میآیند. تورگاتو، یک روش جدید برای بازسازی اشکال سه بعدی تصادفی با استفاده از اطلاعات قطعات دوبعدی توسعه داد(۶). روش بازسازی تصادفی هیبرید برای بهینه سازی راه خطی تابع و توابع همبستگی دو بعدی در طول روش جوانه زنی توسعه یافت. همچنین شبیهسازی سه بعدی ساختار از ورقههای دو بعدی، توسط پییر و همکارانش مطالعه شد [۷]. اطلاعات آماری روی شکل شناسی و توزیع جهت کریستال از آنالیزهای پراش پراکندگی الکترون به دست میآیند. این اطلاعات دو بعدی آزمایشگاهی به عنوان ورودی برای تولید ساختار سه بعدی پلی کریستال استفاده میشوند که شکل مرزهای دانه و ناایزوتروپی شکل دانه لحاظ میشوند.

برای بهبود شبیهسازی، روش های بهینهسازی مختلف نیز اعمال و مقایسه شدهاند که روش تصادفی بیشتر رایج بوده، استفاده شده است. علاوه بر کارهای تورگاتو، کارهای

<sup>1</sup> Torquato

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Sheehan

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> St-Pierre

محققان دیگر، مانند بازسازی ساختار آند سلول سوختی توسط سوزو<sup>۱</sup> ، شیکانو<sup>۲</sup> و کاساگی<sup>۳</sup> [۸] انجام شده است که از این روش استفاده کرده اند.

یک کار بازسازی جذاب دیگر توسط فولوود<sup>4</sup> و همکارانش انجام شده است[۹]. یک مطلب ذاتی توابع دو نقطهای و مرتبه های بالاتر آماری چند نقطهای تلاش زیاد شامل، محاسبه کردن و مهارت محاسبه کردن است. در نمونه های زیادی توابع دو نقطهای، روی توابع تحلیلی به درستی قرار میگیرند. برای دقت بیشتر در نمایش توابع دو نقطهای فولوود از انتقال فوریه سریع، برای گسترش توابع دونقطهای استفاده کرد.

عموماً تحقیقهای قبلی روی بازسازی ساختار، از شبیهسازی ساختار با استفاده از اطلاعات آماری استفاده می کردند. بیشتر تحقیق روی ساختار تصادفی بود تا زمانی که توابع همبستگی کامل، در جهتهای مختلف یکی نمی شدند. در بیشتر نمونه ها، تنها فقط یک تابع جهت خاص استفاده می گردید که با راستای تصادفی نمایش داده می شد. همچنین اینکه طیف گستردهای از خواص موثر پیش بینی شده را حتی برای ساختارهایی توضیح میدهد که از توابع همبستگی یکسانی بازسازی شده بودند. علاوه بر این، بیشتر کار به دو بعد محدود میشد و قابل گسترش به سه بعد نبود. میکروساختارها و رفتار شبیهسازی شده در دو بعد خیلی با آنهایی که سه بعدی بودند، تفاوت خواهد داشت. دلیل دیگر برای ناپایداری ساختار بازسازی شده از تعداد کمی از ویژگیها در شکلهای شبیهسازی شده می آید. شبیهسازی رفتار با استفاده از روشهای جبری، نیازمند شکلهای زیاد با تعداد کافی زیاد المانهای نمایشگر حجم است.

# ۲– توابع همبستگی ۲–۱– معرفی توابع همبستگی

در ساختارهای دو فازی که هر فاز یک ناحیهای از  $v_1(\omega)$  حجم را اشغال کرده است، فاز ۱ با ناحیه  $v_2(\omega)$  با نسبت حجمی  $\Phi_1$  و فاز ۲ با ناحیه  $v_2(\omega)$  و با نسبت

حجمی  $\Phi_2$  را در نظر بگیرید. با توجه به اینکه این دو ناحیه مکمل یکدیگر میباشند پس  $1 = (w) \cup v_2(\omega) = q$  و مکمل یکدیگر میباشند پس  $v_1(\omega) \cap v_2(\omega) = \phi$ فازی را نشان میدهد، در اینجا با معرفی تابع نشانگر  $I^{(i)}(x;\omega)$  که برای فاز i برای x e v به صورت رابطه (۱) تعریف میشود[۶].

$$I^{(i)}(x;\omega) = \begin{bmatrix} 1 & x \in v \\ & &$$

برای i=1,2 داریم: (۲)

 $I^{(1)}(x;\omega) + I^{(2)}(x;\omega) = 1$ 



شکل ۱- تصویر دو بعدی دو فازی که فاز ۱، فاز سفید رنگ با ناحیه *۷*<sub>1</sub> ، و فاز ۲، فاز خاکستری رنگ با ناحیه *۷*<sub>2</sub> می باشد [۶].

#### r-۲- توابع احتمال n نقطهای

برای X با اندازه ثابت، تابع نشانگر  $(x; \omega)$  فقط دو مقدار ممکن دارد، به عنوان مثال، برای بعضی مقادیر  $\omega$  مقدار تابع نشانگر صفر و برای بعضی دیگر از مقادیر  $\omega$ ، مقدار تابع نشانگر ۱ است. توصیف احتمالی از  $(x; \omega)$  به سادگی از احتمال اینکه  $(x; \omega)$  ، ۱ باشد به دست میآید که به صورت رابطه (۳) نوشته میشود

$$P\{I^{(l)}(x;\omega) = 1\}$$
(7)

و به اینصورت احتمال به دست می آید. در ادامه داریم  

$$P\{I^{(i)}(x;\omega) = 0\} = 1 - P\{I^{(i)}(x;\omega) = 1\}$$
 (۴)  
متغیر تصادفی گسسته X می تواند به طور معادل با تابع توزیع  
متراکم (F(x) آن مشخص شود که به صورت رابطه (۵) تعریف  
 $F(x) = P\{X \le x\}$  (۵)

که ویژگیهایی از قبیل، غیر کاهشی بودن، تابعی پیوسته-راست از X که 0=(∞-)f و 1=(∞+)f است. این نکته نیز باید

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Suzue

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Shikaono

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Kasagi <sup>4</sup>Fullwood

www.SID.ir

ذکر شود که مقدار پیش بینی یا میانگین هر تابعی از f[I<sup>(i)</sup>(x; w)] میتواند به صورت رابطه (۴) بیان شود

 $I^{(i)}(x)$  بنابراین، بر طبق طبیعت و ۱ تابع نشانگر  $I^{(i)}(x)$  , عملکرد آن دقیقا شبیه تابع احتمال  $\{I^{(i)}(x) = 1\}$  به است. تورگاتو و استل<sup>(</sup>(۱۹۸۲)، در ادامه به  $S_1^{(i)}(x)$  به عنوان تابع احتمال یک نقطهای برای فاز i ارجاع دادند که اینکار احتمال یافتن فاز i را در مکان x میدهد. همچنین این، بعضی اوقات به عنوان تابع همبستگی یک نقطهای برای تابع نشانگر فاز ارجاع داده می شود.

دانستن مفهوم  $\mathcal{V}_i(\omega)$  شبیه دانستن  $(x)^{(i)}I$  برای همه X ها در  $\mathcal{V}$  است؛ بنابراین ممکن است از دستهای تصادفی از  $\mathcal{V}_i(\omega)$  به جای همه متغیرهای  $(x;\omega)$   $I^{(i)}(x;\omega)$  برای  $\mathcal{V} \in \mathcal{V}$ Intailes شود؛ در نتیجه قانون احتمال برای  $\mathcal{V}_i(\omega)$  با توزیع بعد-محدود فرآیندهای تصادفی  $x \in v$  : (x)  $I^{(i)}$  با توزیع می شود. به عبارت دیگر، توصیف احتمالی از  $\mathcal{V}_i(\omega)$  با توزیع Irollی از  $\mathcal{V}_i(\omega)$  ...  $I^{(i)}(x_2)$  ...  $I^{(i)}(x_1)$  به ازای  $1 \leq n$  که متغیری عدد صحیح است و  $X_1, X_2, ..., X_n$  روی  $\mathcal{V}$ ristance of the contraction of the co

 $P\{I^{(i)}(x_1) = j_1, I^{(i)}(x_2) = j_2, \dots, I^{(i)}(x_n) = j_n\}$  (۸) که هرکدام از  $j_k$  ها مقداری ۰ یا ۱ دارند.

یک  $I^{(i)}(x_1)I^{(i)}(x_2)\dots I^{(i)}(x_n)$ ییش بینی حاصل  $I^{(i)}(x_1)I^{(i)}(x_2)\dots I^{(i)}(x_n)$ میانگین مهم است. در ادامه :

$$\begin{split} S_n^{(i)}(x_1, x_2, \dots, x_n) &= \langle I^{(i)}(x_1) I^{(i)}(x_2) \dots I^{(i)}(x_n) \\ &= P\{I^{(i)}(x_1) = 1, I^{(i)}(x_2) = 1, \dots, I^{(i)}(x_n) = 1\} \\ \chi_1, \chi_2, \dots, \chi_n & \text{isometry } n \text{ isometry } n \text{ isometry$$

که  $S_n^{(i)}$  به عنوان تابع احتمال n نقطهای برای فاز i ارجاع داده می شود. همچنین این نیز می تواند درست باشد که به عنوان تابع همبستگی n نقطهای هم ارجاع داده شود [۶].

<sup>1</sup> Stell

۲-۳- تابع احتمال یک نقطه ای

برای اندازه گیری توابع همبستگی یک نقطه ای میکرو ساختارها یا نانوساختارها، تعداد n نقطه از نقاط تصادفی که در نانو ساختار یا میکرو ساختار پراکنده میشوند. زمانی که N به سمت بی نهایت میرود، سپس نسبت تعداد نقاطی که در فاز i قرار میگیرند،  $N_i$ ، به N نسبت حجمی آن فاز،  $v_i$ را مشخص میکند. برای ساختارهای چند فازی، روابط را مشخص میکند. برای ساختارهای چند فازی، روابط را مشخص میکند. برای ساختارهای چند فازی، ای روابط را ۹ بیان میشود [۶]:  $P_i = \frac{N_i}{v_i} = v_i$ 

در ادامه، رابطه (۱۱) برقرار است.
$$\Sigma P_i = 1$$

۲-۴- تابع احتمال دو نقطه ای (TPCF)

توابع احتمال دو نقطهای با انتخاب تعدادی از بردارهای تعادفی مانند  $\tilde{r}$  با طول مشخص  $|\tilde{r}| = r$  داخل نانوساختار یا میکروساختار و سپس مشخص کردن احتمال قرار گرفتن انتهای هر یک،  $S_1$  و  $S_2$ ، در فاز مشخص محاسبه میشود. بسته به مکان دو انتهای پاره خط، برای ساختار k فازی  $K^2$  احتمال وجود خواهد داشت، به طور ریاضی بیان میشود:

 $P_{ij}(\vec{r}) = \frac{N_{ij}}{N}|_{N \to \infty} \{ \vec{r} = \vec{r_2} - \vec{r_1}, (S_1 \in \phi_i) \cap (S_2 \in \phi_j) \}$  (۱۲) ( $S_2 \in \phi_j$ ) که از فاز i شروع می شوند،  $N_{ij}$  می شوند،  $N_{ij}$  می أو نقطه انتهایی آن ها در فاز j است،  $\phi_i$ , با  $\phi_i$ , و  $\phi_i$  i.i, j=1,2,...,k (i) مرجع، به ترتیب،  $I_c$  و  $S_c$  را متصل می کنند. Tick (Solution content) می ناحیه زمینه مرجع، به ترتیب ا

فرمول (۱۲)، تابع توزیع احتمال پیوسته برای حالتهایی نشان میدهد که دو نقطه ساخته میشوند،  $S_1$  و  $S_2$  به عنوان دو انتهای بردار دلخواه  $\vec{r}$  زمانی است که به طور تصادفی N بار در ساختار قرار میگیرند.

با جایگذاری فرمول (۱۲) به فرم تابع احتمال شرطی، به فرم (۱۳) میرسد[۱۰].

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Two Point Correlation Function

 $P_{ij}(\vec{r}) = P\{(S_1 \in \phi_i) \mid (S_2 \in \phi_j)\}P(S_2 \in \phi_j) \quad (17)$   $P_{ij}(\vec{r}) = P\{(S_1 \in \phi_i) \mid (S_2 \in \phi_j) \quad (17)$   $P_{ij}(S_2 \in r) \quad (17)$   $P_{ij}(T) = P\{(S_1 \in \phi_i) \mid (S_2 \in r) \quad (17)$   $P_{ij}(T) = P\{(S_1 \in \phi_i) \mid (S_2 \in F) \quad (17)$   $P_{ij}(T) = P\{(S_1 \in \phi_i) \mid (S_2 \in F) \quad (17)$   $P_{ij}(\vec{r}) = P\{(S_1 \in \phi_i) \mid (S_2 \in \phi_j) \mid (S_2 \in \phi_j) \quad (17)$   $P_{ij}(\vec{r}) = P\{(S_1 \in \phi_i) \mid (S_2 \in \phi_j) \mid (S_2 \in \phi_j) \mid (S_2 \in \phi_j) \quad (S_2 \in \phi_j)$ 

 $lim_{r \to \infty} P\{(S_1 \in \phi_i) | (S_2 \in \phi_j)\} = P(S_1 \in \phi_i)$  (۱۴) در نتیجه، بازنویسی فرمول (۱۳) رابطه (۱۵) میدهد:

 $\lim_{r\to\infty} P_{ij}(\vec{r}) = P(S_1 \in \phi_i) | (S_2 \in \phi_j) = v_i v_j$  (1۵) تعمیم استدلال بالا را برای توابع n نقطهای را میتوان در [۶] مشاهده کرد. برای نتیجه گیری این بخش، این نکته گفته می شود که TPCF های هر ساختار k فازی به هم وابسته میباشند.

برای مثال، در کامپوزیت سه فازی ۲۹ TPCF متشکل از برای مثال، در کامپوزیت سه فازی ۹ TPCF وجود دارد. به ایت شرایط تعامد روابط (۱۶–۱۷) فورا ارضا می شوند [۶].

$$\sum_{i=1,3} P_{ij}(\vec{r}) = v_i \tag{19}$$

$$\sum_{i=1,3} \sum_{j=1,3} P_{ij}(\vec{r}) = 1$$
 (1V)

برای TPCF هایی که متقارن میباشند، برای مثال برای مثال TPCF هایی که متقارن میباشند، برای مثال ساختار سه  $P_{ij} = P_{ji}$ ، تنها سه TPCF مستقل برای ساختار k فازی فازی بالا باقی میماند. در حالت کلی، برای ساختار k فازی وقتی که  $k \ge 3$  میماند.  $k \ge 3$  می ماند. همچنین به طور مستقیم آشکار است که وقتی می دهد.  $P_{ii}$   $r \to 0$  می دهد،  $p_i = v_i$ .

تابع دو نقطه ای  $(r) = S_2^{(1)}(r)$  برای ساختار همگن آماری میتواند با انداختن تصادفی یک قطعه پاره خط با طول |r| = r با جهت خاص و محاسبه تعداد دفعاتی انجام شود که نقاط انتهای خط درون فاز ۱ قرار می گیرند (شکل ۲). برای ساختارهای ایزوتروپیک،  $(r)_2 S_2$  مقدار ماکزیممش به  $\Phi_1$  در 0=r می رسد و سرانجام با ادامه افزایش طول پاره خط به صورت نمایی به مقدار  $\Phi_1^2$  می رسد.

شکل (r)، اطلاعاتی در مورد ویژگیهای ناخالصیها یا ذرات درون ساختار به دست میدهد، به عنوان مثال، دو نمونه توابع همبستگی برای سیستم ذره ایزوتروپیک و شکل سختاری هر دو در شکل ۳ آورده شده است. در نمونه اول که دیسک های درون ساختار هم پوشانی ندارند و جدا از هم

میباشند،  $S_2(r)$  برای r های کوچک نوسانی است؛ اما برای نمونه دوم که دیسکها هم پوشانی دارند و به هم پیوسته میباشند، دقیقا از r=D به بعد که D شعاع دیسکها است، کاملا خط صافی را مشاهده میکنیم و نوسانی نمیباشد و همچنین بیانگر این است که تعداد قابل چشمگیری از ناحیههای فاز دوم موجود است که بزرگتر از D میباشند [۶].



شکل ۲- شکل شماتیک برای تابع مرتبه پایین برای ساختار تصادفی یک ساختار دلخواه، که تابع احتمال دو نقطهای  $S_2(r) = S_2^{(1)}(r)$  برای فاز ۱ (ناحیه سفید رنگ) محاسبه می شود [۶].

## ۳- بازسازی ساختار با استفاده از روش مونت کارلو

در این مقاله، از روش مونت کارلو برای بازسازی ساختار کامپوزیت نانو لوله کربنی استفاده شده است. دو ویژگی کامپوزیت، نانو لوله کربنی را از بقیه کامپوزیتها مجزا می سازد: نسبت طول به قطر زیاد و انحناهای نانولولهها که در این مقاله نانولولههای کربنی به صورت گروهی از تکه استوانههای واحد به هم پیوسته فرض شدهاند. پارامترهای شبیهسازی در این مقاله شامل، جهت اتصالات، طول استوانه، قطر استوانه، تعداد استوانههای واحد و توزیع آنها است، شبیهسازی در سه قدم انجام شده است: تولید نمونه، محاسبه تابع همبستگی آماری و بهینهسازی ساختار. به عنوان مثال، از این الگوریتم برای بازسازی ساختار کامپوزیت پلیمر نانولوله کربنی از توابع همبستگی آماری در اینجا استفاده کردهایم.



شکل ۳- تابع احتمال دو نقطه ای  $S_2(r)$  برای فاز ۱ (ناحیه سیاه رنگ) برای دو سیستم مختلف در  $P_1 = \Phi_2 = 1/2$ ، برای سیستم دیسکهای غیر هم پوشان (نمونه بالا) و سیستم با دیسکهای هم پوشانی شده (نمونه پایین). در اینجا D قطر دیسک است[۶].

#### ۳-۱- توليد نمونه

قدم اول تولید ساختار اولیه از کامپوزیت، نانولوله کربنی تصادفی است. برای شبیهسازی نانولوله بزرگ منحنی وار، هر نانولوله به تعداد زیادی تکههای متصل شده تقسیم شدهاند. هر انحنا در نانولوله با شعاع و جهت زاویه بین استوانههای به اهم پیوسته مشخص شده است. هر نوع از انحناها ممکن است، با در کنار هم گذاشتن دو فاکتور زاویه و طول تکهها تولید شود. در طول تولید نمونه، ابتدا تعدادی از مکانها به طور تصادفی درون حجم طراحی شده داده می شود که مانند نقاط شروعی برای نانولولهها عمل می کنند. بعد از آن تکههای زنجیرههای نانولوله به عنوان استوانههایی با توجه به مقدار انحنای مورد نیاز رشد پیدا می کنند.

برای جلوگیری از اینکه بیشتر از نصف استوانه تولیدکننده نانولوله درون مرزهای ساختار در حال شبیهسازی قرار می گیرد، بعضی محققان مرکز استوانهها را در فضایی کوچکتر از ساختار در حال شبیهسازی محدود به قرارگیری کردهاند[11]. جهتها سپس با گرفتن مرکز جرم به عنوان مبدا کره واحد در حالی که نقطه به طور تصادفی روی سطحش تولید میشود، به دست آورده میشوند[17]. این روش توزیع ایزوتروپیک تصادفی از نانولولههای کربنی را ضمانت میکند و از اشتباهات قدیمی جلوگیری میکند[1۳].

#### مهدوی و همکاران ۲۸

بعضی سختیهای محاسباتی ممکن است، زمانی سر راه قرار گیرند که مجبور به استفاده از سلول به اندازه کافی بزرگ برای به دست آوردن دقت و قابل تصدیق بودن جوابها شویم. برای جلوگیری از این مشکلات و همچنین برای کاهش هزینه محاسبات، در این مقاله، نانولولههای کربنی به طور کاملا تصادفی بدون قرار گرفتن در یک مکعب فرضی درون ساختار در حال شبیهسازی تولید شدهاند.

۳–۲– محاسبه مونت کارلو تابع همبستگی دو نقطه ای بعد از تولید ساختار اولیه، یک تابع همبستگی آماری با استفاده از دادههای ساختار محاسبه شده است. در این مطالعه، داده های ساختار شامل، مکان نقطههای شروع و پایان هر استوانه و قطر استوانه است. همه نقاط درون استوانه به فاز نانولوله مربوط است و نقاط بیرون استوانه مربوط به فاز ماتریس پلیمری است. با ذخیره کردن اطلاعات به این صورت، محاسبات زمانی و حافظه مورد نیاز به شدت کاهش پیدا می کند.

#### ۳-۳- بهینهسازی ساختار

یک تابع آماری از ساختار تجربی به عنوان هدف برای الگوریتم استفاده شده است. ساختار بازسازی شده برای اطمینان از اینکه تابع همبستگی آماری با تابع همبستگی آماری هدف همخوانی دارد، بهینهسازی شده است. با اعمال فاکتورهای بهینهسازی مختلف برای شبیهسازیها، کمترین خطا برای تابع مختلفی در نظر گرفته شده است که برای تابع همبستگی دو نقطهای که از عکسهای شبیهسازی شده و تجربی به دست آمده است.

#### ۴- روش کار و کار انجام شده

هدف کار، بازسای ساختاری دو بعدی با استفاده از دادههای آماری که از عکسهای تجربی به دست آمده است، مطابق روش هایی که ذکر شده است، عکسهای دو بعدی که در اینجا مورد استفاده قرار گرفتهاند، از مقاله مجید بنی اسدی، بازسازی سه بعدی کامپوزیت نانولوله (۲۰۱۱)[۱۰] آورده شدهاند، همانطور که در شکلهای ۴ و ۵ ملاحظه میشود، دو نمونه از ساختارهای با نسبت حجمی ۲ و ۵ درصد در اینجا مورد استفاده قرار گرفتهاند و اطلاعات آماری از این دو عکس

## مهدوی و همکاران ۲۹

برای بازسازی ساختاری سه بعدی که توابع همبستگی مشابه با این موارد دارند را با الگوریتمهای گفته شده به دست آوردهایم.

### ۴-۱- دیاگرام مراحل الگوریتم برنامه نوشته شده

در دیاگرامی که ارائه شده است، در ابتدا مرزهای المان نماینده حجم (RVE) مشخص می شود و در ادامه نانولولهها در آن ایجاد می شوند، در دو مرحله ای که VF و TPCF نمونههای بازسازی شده با نمونههای آزمایشگاهی مقایسه می شود، اگر تفاوتی بین آن ها باشد، همانطور که در دیاگرام مشخص گردیده است، کار بازسازی از محل نشان داده شده از سر گرفته می شود، به عنوان مثال، وقتی که VF تفاوت داشته باشد با اضافه کردن یا کم کردن تعداد تکه استوانهها و در نهایت نانولولهها تغییر لازم در VF به وجود آمده، این مرحله به اتمام می رسد و بعد از این مرحله برای مقایسه TPCF نیز، در صورتی که با نمونههای آزمایشگاهی تفاوتی باشد، با تغییر اندازه زوایای فضایی بین تکه استوانهها که به تغییر انحنای نانولولهها می انجامد، به TPCF مورد نظر می توان دست یافت که در پایان باید نسبت حجمی نانولولهها<sup>۲</sup>(VF) و TPCF نمونه شبیه سازی شده باید با نمونه اصلی یکسان باشد تا کار شبیهسازی به پایان برسد.

#### ۲-۴- مواد

ماتریس بلیمر مورد استفاده در این نمونه ها PMMA می باشدکه با نانولوله های کربن چند لایه، تقویت شده است، طیف ابعاد نانولولههای چند لایهای از ۱۰ تا ۱۵ نانو متر برای قطر آنها و از ۲/۱ تا ۱۰ میکرومتر برای طول آن ها است.

# ۴-۳- به دست آوردن اطلاعات آماری توابع همبستگی از عکس های تجربی

از عکسهای تجربی شکل ۴ و شکل ۵ با پردازش روی آنها اطلاعات توابع همبستگی دو نقطهای برای این نمونهها را برای فاز سیاه رنگ که نانولولههای چندلایه میباشند را به دست آوردهایم و برای هرکدام از نمونهها به صورتی است که در شکل ۶ و شکل ۷ مشاهده می شود:

<sup>1</sup>Representative Volume Element

<sup>2</sup> Volume Fraction <sup>3</sup> Poly Methyl Methacry-late

مشخص کردن طول اضلاع المان حجم نماینده (RVE) با دادن مختصات گوشههای مکعب و دادن طول هر تکه استوانه تشکیلدهنده نمونه و تعداد تکه استوانههای مورد نیاز برای هر نمونه نانولوله شبیهسازی، دادن اندازه قطر تکه استوانهها

وارد کردن زوایای فضایی حداکثر بین تکه استوانههای سازنده نمونه نانولوله در حال شبیهسازی

انتخاب نقطهای به طور تصادفی درون مکعب ایجاد شده و تولید اولیت تکه استوانهای مربوط به اولین نمونه نانولوله

از نقطه انتهایی تکه استوانه قبلی در راستای جدیدی با زوایای رندمی بین صفر تا زوایای حداکثر وارد شده، تکه استوانه جدید تولید میشود و این کار تا ایجاد همه تکه استوانههای یک نمونه نانولوله در حال شبیهسازی انجام میشود.

با اتمام تکه استوانههای نانولوله قبلی، برای تولید تکههای نانولوله جدید، نقطه دیگری درون RVE به صورت رندم انتخاب می شود و مراحل ساخت نانولوله جدید آغاز می شود، قابل ذکر است، در صورتی که در مراحل تولید هر یک از تکههای یک نانولوله از RVE بیرون بزند، مرحله تولید آن نانولوله متوقف می شود و تکه بیرون رفته بریده می شود و مرحله تولید نانولوله جدید آغاز می شود و این کار تا تولید کامل همه نانولولهها انجام می شود.

محاسبه نسبت حجمی(VF) برای RVE تولید شده، چنانچه با آزمایش مطابقت نداشت، باید تعداد نانولولهها را افزایش داد و در صورت مطابقت مرحله بعد اجرا میشود که محاسبه TPCF است.

محاسبه TPCF، در صورت مطابقت داشتن با نمونههای آزمایش، کار مدلسازی RVE به اتمام میرسد؛ در غیر اینصورت باید با تغییر زوایای فضایی به نمودارهای TPCF بهتری دست یافت. مهدوی و همکاران ۴۰



شکل۴- عکس آزمایشگاهی پلیمر PMMA با ۲درصد نانولوله چند لایه[۱۰]



شکل ۵- عکس آزمایشگاهی پلیمر PMMA با ۵درصد نانولوله چند لایه[۱۰]

#### ۵- نتایج و بحث

با استفاده از الگوریتمهایی که بحث گردید، کدی به زبان برنامه نویسی Visual Basic نوشته شد که در این کد، اطلاعات آماری که مورد نظر است را در نظر گرفته، با تغییر پارامترهایی از قبیل، زاویه بین هر دو استوانه سازنده منحنی نانولوله و یا تراکم نانولولهها و با استفاده از پارامترهای نسبت طول به قطر نانولوله و نسبت حجم نانولوله به ماتریس پلیمر که مشابه نمونه اصلی است، ساختاری مشابه با توابع توجه همبستگی به دست آمده از عکسها به دست نسبت حجمی آنها میآوریم، با به اطلاعات نانو لولههای نمونههای تجربی و



شکل ۲- نمودار نابع همیستگی دونفطه آی برآی نصویر تجربی نمونه ۲ درصد، r طول برداری که روی عکس انداخته می شود و R شعاع همگرایی می باشد که از این شعاع به بعد نمودار به همگرایی میرسد.



شکل ۷- نمودار تابع همبستگی دونقطه ای برای تصویر تجربی نمونه ۵ درصد، r طول برداری که روی عکس انداخته می شود و R شعاع همگرایی می باشد که از این شعاع به بعد نمودار به همگرایی میرسد.

در این شبیه سازی ها، اطلاعات نانولوله به این صورت است: طول میانگین نانولوله ها ۵ میکرومتر و قطر میانگین نانولوله ها ۱۲.۵ نانومتر است؛ در نتیجه نسبت طول به قطر نانولوله ها ۴۰۰ است، با استفاده از این خواص تلاش برای ساختن ساختاری که این خواص را دارد انجام شد و با تغییر پارامترهایی از قبیل، زاویه بین انحناهای نانولوله و تراکم آنها به ساختاری دست یافتیم که کمترین خطا را نسبت به توابع آماری دو نقطه ای نمونه ای آزمایشگاهی دارند، برای نمونه، ۲ درصد ساختار شبیه سازی شده، ۲۰۰۰۰ تکه

#### مکانیک سازهها و شارهها/ سال ۱۳۹۵/ دوره ۶/ شماره ۳

استوانهایی مورد استفاده قرار گرفت که نانولولهها را تشکیل می دهند که زوایای انحرافی فضایی برای هر دو استوانه نسبت به هم ۱ رادیان بود و برای نمونه ۵ درصد، ۸۵۰۰۰۰ تکه استوانهای وجود دارد که نانولولهها را تشکیل می دهند که حداکثر زاویه بین هر دو تکه واحد نیز، ۱ رادیان است، قابل ذکر است، هر نانولوله در اینجا از ۴ تکه استوانهای تشکیل شده است. شکل ۸ و شکل ۹، اطلاعات آماری نمونههای بازسازی شده را در مقایسه با نمونههای تجربی نشان می دهد و شکل های ۱۰ و ۱۱، ساختارهای شبیه سازی شده سه بعدی را برای هر دو نمونه نشان می دهد.



شکل ۸- نمودار تابع همبستگی دو نقطه ای بازسازی شده برای نمونه تجربی ۲ درصد با استفاده از الگوریتم بازسازی آماری مونت کارلو در مقایسه با نمودار تجربی



شکل ۹- نمودار تابع همبستگی دو نقطه ای بازسازی شده برای نمونه تجربی ۲ درصد با استفاده از الگوریتم بازسازی آماری مونت کارلو در مقایسه با نمودار تجربی



مهدوی و همکاران

41

شکل ۱۰- ساختار بازسازی شده سه بعدی برای نمونه تجربی ۲ درصد با تابع همبستگی دو نقطهای مشابه با تابع همبستگی دو نقطهای که از نمونه تجربی به دست آمده بود.



شکل ۱۱- ساختار بازسازی شده سه بعدی برای نمونه تجربی ۵ درصد با تابع همبستگی دو نقطهای مشابه با تابع همبستگی دو نقطهای که از نمونه تجربی به دست آمده بود.

قابل ذکر است که در مدلهای بازسازی شده، نسبت طول نانولولهها به طول RVE، از نمونههای آزمایشگاهی در نظر گرفته شده است که مورد استفاده قرار گرفتهاند؛ در نتیجه در نمونههای بازسازی شده با در نظر گرفتن ابعاد RVE به صورت ۱۰۰۰×۱۰۰۰×۱۰۰۰، طول نانولولهها با ملاحظه به نسبتی که نمونههای اصلی دارند محاسبه شده، نسپس با استفاده از نسبت طول به قطر نمونههای اصلی قطر نانولولهها در مقیاس بندی نمونههای بازسازی شده محاسبه میشود و از این لحاظ، نسبت اندازههای نمونههای اصلی در نمونههای بازسازی شده لحاظ گردیدهاند.

### ۶- نتیجهگیری

مشاهده گردید که در این مقاله با روش ارائه شده می توان، یک ساختار با توزیع ذرات تصادفی را به صورت آماری با دقت قابل قبولی بازسازی کرد؛ در نتیجه در کارهایی که نیاز به شبیه سازی این ساختارها در نرمافزارهای شبیهسازی است،

#### مهدوی و همکاران ۴۲

- [7] St-Pierre L, Héripré E, Dexet M, Crépin J, Bertolino G, Bilger N (2008) 3D simulations of microstructure and comparison with experimental microstructure coming from O.I.M analysis. Int J Plasticity 24: 1516-1532.
- [8] Suzue Y, Shikazono N, Kasagi N (2008) Micro modeling of solid oxide fuel cell anode based on stochastic reconstruction. J Power Sources 184(1): 52-59.
- [9] Fullwood DT, Niezgoda SR, Kalidindi SR (2008) Microstructure reconstructions from 2-point statistics using phase-recovery algorithms. Acta Mat 56: 942-948.
- [10] Li D, Baniassadi M, Garmestani H, Ahzi S, Reda Taha M, Ruch D (2010) 3D reconstruction of carbon nanotube composite microstructure using correlation functions. Com Theo Nanoscience 7: 1462-1468.
- [11] Ounaies Z, Park C, Wise KE, Siochi EJ, Harrison JS (2003) Electrical properties of single wall carbon nanotube reinforced polyimide composites. Com Sci Tech 63: 1637-1646.
- [12] Marsaglia G (1972) Choosing a point from the surface of a sphere. Ann Math Statist 43(2): 645-646.
- [13] Néda Z, Florian R, Brechet Y (1999) Reconsideration of continuum percolation of isotropically oriented sticks in three dimensions. Physical Rev 59: 3717-3719.

با استفاده از این روش، از مدلی میتوان استفاده کرد که بازسازی شده است و خواص مورد نیاز و بررسی را به راحتی مورد تجزیه و تحلیل قرار داد.

#### ۷- منابع

- Lin S, Garmestani H (2000) Statistical continuum mechanics analysis of an elastic two-isotropicphase composite material. Compos Part B-Eng 31(1): 39-46.
- [2] Garmestani H, Lin S, Adams BL, Ahzi S (2001) Statistical continuum theory for large plastic deformation of polycrystalline materials. J Mech Phys Solids 49(3): 589-607.
- [3] Garmestani H, Lin S, Adams BL (1998) Statistical continuum theory for inelastic behavior of a twophase medium. Int J Plasticity 14(8): 719-731.
- [4] Lin S, Garmestani H, Adams B (2000) The evolution of probability functions in an inelasticly deforming two-phase medium. Int J Solids Struct 37: 423-434.
- [5] Yeong C, Torquato S (1998) Reconstructing random media. Phys Rev E vol. 57(1): 495.
- [6] Torquato S (2002) Random heterogeneous materials microstructure and macroscopic properties. Springer Science & Business Media. (v. 16)