



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

مصطفی مهدوی^۱، مجید بنی اسدی^{۲*} و مصطفی باغانی^۲

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک، پردیس دانشکده های فنی، دانشگاه تهران

^۲ استادیار دانشکده مهندسی مکانیک، پردیس دانشکده های فنی، دانشگاه تهران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۴/۰۴/۲۵؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۵/۰۳/۱۶

چکیده

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 می‌توان کامپوزیت‌های 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 می‌گیرد و به راحتی می‌توان در کارهایی مورد استفاده قرار گیرد که نیاز به شبیه‌سازی و به دست آوردن خواص کامپوزیت‌های نانو لوله ای است.

کلمات کلیدی: تابع آماری؛ تابع آماری دو نقطه‌ای؛ بازسازی ساختاری؛ نانولوله کربنی.

3D Reconstruction of Carbon Nanotube Composite Using Statistical Correlation Functions

M. Mahdavi¹, M. Baniassadi^{2,*}, M. Baghani²

¹ Master Student, Mechanical Engineering, Tehran University, Tehran, Iran.

² 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: ۰۲۱-۸۲۰۹۴۰۳۵

آدرس پست الکترونیک: m.baniassadi@ut.ac.ir

۱- مقدمه

هدف بازسازی ساختاری، ایجاد ساختار شبیه‌سازی شده برای نمایش آماری ساختار با استفاده از گروهی از توصیف‌گرهای 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 آزمایش‌های 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 المان‌های 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، انحنای نانولوله‌ها و نحوه توزیع نانولوله‌ها درون ساختار است. این توصیف‌گرها ممکن است، در سلسله ترتیب‌های توابع آماری همبستگی، یا توابع آماری چند نقطه‌ای ذخیره شوند. در نهایت ساختار با توصیف‌گرهای مواد نمایش داده می‌شود که از ویژگی‌های گفته شده استفاده می‌شود.

انگیزه دیگر برای بازسازی ساختار، اجرای شبیه‌سازی‌هایی است که برای به دست آوردن خواص نیاز است [۱-۴]. از توصیف‌گرهایی همانند توابع آماری چند نقطه‌ای، خواص مکانیکی، مغناطیسی، الکتریکی و گرمایی ممکن است، به طور مستقیم شبیه‌سازی انجام شود. نکته دیگر، بازسازی ساختار از توصیف‌گرها و سپس با استفاده از روش اجزای محدود، خواص موثر ممکن است، شبیه‌سازی شود. این روش 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 آن‌ها از اطلاعات آماری بر پایه تابع یک نقطه‌ای، همانند ساینز 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^۱ [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 فرمول‌بندی ریاضی دقیق از الگوریتم بازسازی بیان شده است. تورکاتو، 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 شرایط اولیه فقط توابع آماری مرتبه پایین باشند، یکسان نخواهند بود. توابع آماری از دو ترم اندازه و جهت تشکیل می‌شوند، اگر فقط یک جهت ملاحظه شود، ممکن است غیر ایزوتروپی ساختگی حتی اگر ساختار آزمایشی تصادفی باشد، صورت گیرد، برای حل این مشکل، شیهان^۲ و تورکاتو بعداً جهت‌های بیشتری در توابع آماری معرفی کردند که به طور موثری نایزوتروپی‌های ساختگی را حذف می‌کند. همه اطلاعات ورودی از عکس‌های دوبعدی به دست می‌آیند. تورکاتو، یک روش جدید برای بازسازی اشکال سه بعدی تصادفی با استفاده از اطلاعات قطعات دوبعدی توسعه داد [۶]. روش بازسازی تصادفی هیبرید برای بهینه‌سازی 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^۳ 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 نایزوتروپی شکل دانه لحاظ می‌شوند.

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

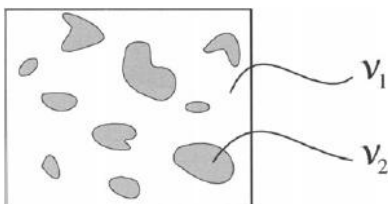
¹ Torquato² Sheehan³ St-Pierre

حجمی Φ_2 را در نظر بگیرید. با توجه به اینکه این دو ناحیه مکمل یکدیگر می‌باشند پس $v_1(\omega) \cup v_2(\omega) = 1$ و $v_1(\omega) \cap v_2(\omega) = \phi$. شکل ۱ یک نمونه دو بعدی دو فازی را نشان می‌دهد، در اینجا با معرفی تابع نشانگر $I^{(i)}(x; \omega)$ که برای فاز i برای $x \in v$ به صورت رابطه (۱) تعریف می‌شود [۶].

$$I^{(i)}(x; \omega) = \begin{cases} 1 & \text{اگر } x \in v \\ 0 & \text{در غیر اینصورت} \end{cases} \quad (1)$$

برای $i=1,2$ داریم:

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



شکل ۱- تصویر دو بعدی دو فازی که فاز ۱، فاز سفید رنگ با ناحیه v_1 ، و فاز ۲، فاز خاکستری رنگ با ناحیه v_2 می‌باشد [۶].

۲-۲- توابع احتمال n نقطه‌ای

برای X با اندازه ثابت، تابع نشانگر $I^{(i)}(x; \omega)$ فقط دو مقدار ممکن دارد، به عنوان مثال، برای بعضی مقادیر ω مقدار تابع نشانگر صفر و برای بعضی دیگر از مقادیر ω ، مقدار تابع نشانگر ۱ است. توصیف احتمالی از $I^{(i)}(x; \omega)$ به سادگی از احتمال اینکه $I^{(i)}(x; \omega) = 1$ باشد به دست می‌آید که به صورت رابطه (۳) نوشته می‌شود

$$P\{I^{(i)}(x; \omega) = 1\} \quad (3)$$

و به اینصورت احتمال به دست می‌آید. در ادامه داریم

$$P\{I^{(i)}(x; \omega) = 0\} = 1 - P\{I^{(i)}(x; \omega) = 1\} \quad (4)$$

متغیر تصادفی گسسته X می‌تواند به طور معادل با تابع توزیع متراکم $F(x)$ آن مشخص شود که به صورت رابطه (۵) تعریف می‌شود:

$$F(x) = P\{X \leq x\} \quad (5)$$

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

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

یک کار بازسازی جذاب دیگر توسط فولوود^۴ و همکارانش انجام شده است [۹]. یک مطلب ذاتی توابع دو نقطه‌ای و مرتبه‌های بالاتر آماری چند نقطه‌ای تلاش زیاد شامل، محاسبه کردن و مهارت محاسبه کردن است. در نمونه‌های 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 می‌کردند. بیشتر تحقیق روی ساختار تصادفی بود تا زمانی که توابع همبستگی کامل، در جهت‌های مختلف یکی نمی‌شدند. در بیشتر نمونه‌ها، تنها فقط یک تابع جهت خاص استفاده می‌گردید که با راستای تصادفی نمایش داده می‌شد. 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 می‌آید. 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 حجم را اشغال کرده است، فاز ۱ با ناحیه $v_1(\omega)$ با نسبت حجمی Φ_1 و فاز ۲ با ناحیه $v_2(\omega)$ و با نسبت

¹ Suzue

² Shikaono

³ Kasagi

⁴ Fullwood

۲-۳- تابع احتمال یک نقطه ای

برای اندازه‌گیری توابع همبستگی یک نقطه‌ای 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 فاز، روابط ریاضی بین توابع همبستگی یک نقطه‌ای و نسبت‌های حجمی مطابق رابطه (۱۰) بیان می‌شود [۶]:

$$P_i = \frac{N_i}{N} |_{N \rightarrow \infty} = v_i \quad (10)$$

در ادامه، رابطه (۱۱) برقرار است.

$$\sum P_i = 1 \quad (11)$$

۲-۴- تابع احتمال دو نقطه ای (TPCF)^۲

توابع احتمال دو نقطه‌ای با انتخاب تعدادی از بردارهای تصادفی مانند \vec{r} با طول مشخص $r = |\vec{r}|$ 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 فاز K^2 احتمال وجود خواهد داشت، به طور ریاضی بیان می‌شود:

$$P_{ij}(\vec{r}) = \frac{N_{ij}}{N} |_{N \rightarrow \infty} \{ \vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1, (S_1 \in \phi_i) \cap (S_2 \in \phi_j) \} \quad (12)$$

که N_{ij} تعداد بردارهایی است که از فاز i شروع می‌شوند، و نقطه انتهایی آن‌ها در فاز j است، ϕ_j ، با $i, j = 1, 2, \dots, k$ ، \vec{r}_1 و \vec{r}_2 ، نمایشگر بردارهایی هستند که ناحیه زمینه مرجع، به ترتیب، S_1 و S_2 را متصل می‌کنند. ذکر این نکته ضروری است که طبق تعریف، TPCF هر ساختار ایزوتروپیک از جهت بردار قرار گرفته مستقل است [۶].

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].

ذکر شود که مقدار پیش بینی یا میانگین هر تابعی از $f[I^{(i)}(x; \omega)]$ می‌تواند به صورت رابطه (۶) بیان شود

$$\langle f[I^{(i)}(x; \omega)] \rangle = P\{I^{(i)}(x; \omega) = 1\}f(1) + P\{I^{(i)}(x; \omega) = 0\}f(0) \quad (6)$$

براکت‌های شکسته به معنی مجموع میانگین است. در عمل وقتی $f[I^{(i)}(x; \omega)] = I^{(i)}(x)$ ، این بیانگر رابطه (۷) است:

$$S_1^{(i)}(x) = \langle I^{(i)}(x) \rangle = P\{I^{(i)}(x) = 1\} \quad (7)$$

بنابراین، بر طبق طبیعت ۰ و ۱ تابع نشانگر $I^{(i)}(x)$ ، عملکرد آن دقیقاً شبیه تابع احتمال $P\{I^{(i)}(x) = 1\}$ است. تورگاتو و استل^۱ (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 می‌شود.

دانستن مفهوم $v_i(\omega)$ شبیه دانستن $I^{(i)}(x)$ برای همه x ها در v است؛ بنابراین ممکن است از دسته‌ای تصادفی از $v_i(\omega)$ به جای همه متغیرهای $I^{(i)}(x; \omega)$ برای $x \in v$ استفاده شود؛ در نتیجه قانون احتمال برای $v_i(\omega)$ با توزیع بعد-محدود فرآیندهای تصادفی $x \in v$: $I^{(i)}(x)$ توصیف می‌شود. به عبارت دیگر، توصیف احتمالی از $v_i(\omega)$ با توزیع اتصالی از $I^{(i)}(x_1)I^{(i)}(x_2) \dots I^{(i)}(x_n)$ به ازای $n \geq 1$ که متغیری عدد صحیح است و x_1, x_2, \dots, x_n روی v تغییر می‌کنند؛ چون $I^{(i)}(x)$ مقداری ۰ یا ۱ دارد، این مشخص کردن احتمالات را به دست می‌آورد.

$$P\{I^{(i)}(x_1) = j_1, I^{(i)}(x_2) = j_2, \dots, I^{(i)}(x_n) = j_n\} \quad (8)$$

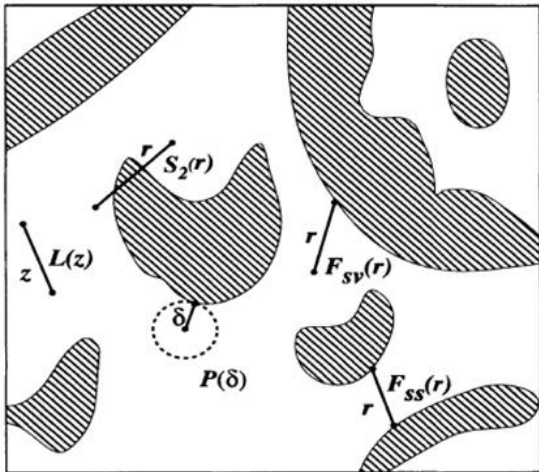
که هر کدام از j_k ها مقداری ۰ یا ۱ دارند. پیش‌بینی حاصل $I^{(i)}(x_1)I^{(i)}(x_2) \dots I^{(i)}(x_n)$ یک میانگین مهم است. در ادامه:

$$S_n^{(i)}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \langle I^{(i)}(x_1)I^{(i)}(x_2) \dots I^{(i)}(x_n) \rangle = P\{I^{(i)}(x_1) = 1, I^{(i)}(x_2) = 1, \dots, I^{(i)}(x_n) = 1\} = \text{احتمال اینکه } n \text{ نقطه در مکان‌های } x_1, x_2, \dots, x_n \text{ در فاز } i \text{ باشند.} \quad (9)$$

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

²Two Point Correlation Function¹Stell

می‌باشند، $S_2(r)$ برای Γ 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 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 می‌شود [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 می‌سازد: 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.

$$P_{ij}(\vec{r}) = P\{(S_1 \in \phi_i) | (S_2 \in \phi_j)\}P(S_2 \in \phi_j) \quad (13)$$

برای طول بردار خیلی بزرگ، $r \rightarrow \infty$ ، احتمال وقوع S_2 بر S_1 تاثیر نمی‌گذارد. به عبارت دیگر، وقتی $r \rightarrow \infty$ تابع احتمال شرطی به تابع همبستگی یک نقطه‌ای کاهش می‌یابد، به معنی رابطه (۱۴) است:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} P\{(S_1 \in \phi_i) | (S_2 \in \phi_j)\} = P(S_1 \in \phi_i) \quad (14)$$

در نتیجه، بازنویسی فرمول (۱۳) رابطه (۱۵) می‌دهد:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} P_{ij}(\vec{r}) = P(S_1 \in \phi_i) | (S_2 \in \phi_j) = v_i v_j \quad (15)$$

تعمیم استدلال بالا را برای توابع n نقطه‌ای را می‌توان در [۶] مشاهده کرد. برای نتیجه‌گیری این بخش، این نکته گفته می‌شود که TPCF های هر ساختار k فازی به هم وابسته می‌باشند.

برای مثال، در کامپوزیت سه فازی ۹ TPCF متشکل از $P_{11}, P_{12}, P_{13}, P_{21}, P_{22}, P_{23}, P_{31}, P_{32}, P_{33}$ وجود دارد. به علت شرایط تعامد روابط (۱۶-۱۷) فوراً ارضا می‌شوند [۶].

$$\sum_{j=1,3} P_{ij}(\vec{r}) = v_i \quad (16)$$

$$\sum_{i=1,3} \sum_{j=1,3} P_{ij}(\vec{r}) = 1 \quad (17)$$

برای TPCF هایی که متقارن می‌باشند، برای مثال $P_{ij} = P_{ji}$ ، تنها سه TPCF مستقل برای مثال ساختار سه فازی بالا باقی می‌ماند. در حالت کلی، برای ساختار k فازی وقتی که $\frac{1}{2}(k^2 - k)$ ، $k \geq 3$ ، TPCF مستقل باقی می‌ماند. همچنین به طور مستقیم آشکار است که وقتی $r \rightarrow 0$ P_{ii} تابع همبستگی یک نقطه‌ای را به دست می‌دهد، $P_i = v_i$.

تابع دو نقطه‌ای $S_2(r) = S_2^{(1)}(r)$ برای ساختار همگن آماری می‌تواند با انداختن تصادفی یک قطعه پاره خط با طول $|r|$ با جهت خاص و محاسبه تعداد دفعاتی انجام شود که نقاط انتهایی خط درون فاز ۱ قرار می‌گیرند (شکل ۲). برای ساختارهای ایزوتروپیک، $S_2(r)$ مقدار ماکزیممش به Φ_1 در $r=0$ می‌رسد و سرانجام با ادامه افزایش طول پاره‌خط به صورت نمایی به مقدار Φ_1^2 می‌رسد.

شکل $S_2(r)$ ، 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 دیسک‌های درون ساختار هم پوشانی ندارند و جدا از هم

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 کاملاً تصادفی بدون قرار گرفتن در یک مکعب فرضی درون ساختار در حال شبیه‌سازی تولید شده‌اند.

۳-۲- محاسبه مونت کارلو تابع همبستگی دو نقطه‌ای

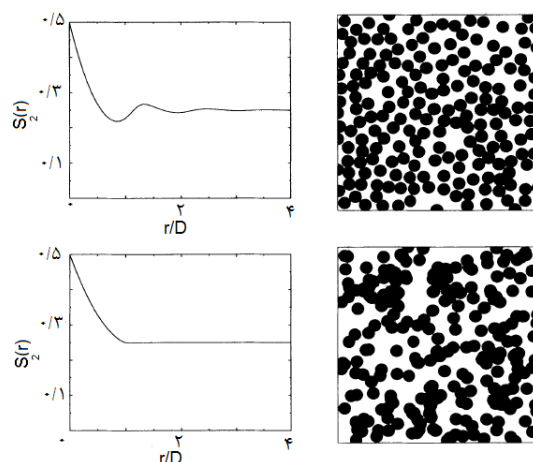
بعد از تولید ساختار اولیه، یک تابع همبستگی آماری با استفاده از داده‌های ساختار محاسبه شده است. در این مطالعه، داده‌های ساختار شامل، مکان نقطه‌های شروع و پایان هر استوانه و قطر استوانه است. همه نقاط درون استوانه به فاز نانولوله مربوط است و نقاط بیرون استوانه مربوط به فاز ماتریس پلیمری است. با ذخیره کردن اطلاعات به این صورت، محاسبات زمانی و حافظه مورد نیاز به شدت کاهش پیدا می‌کند.

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 روش‌هایی 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



شکل ۳- تابع احتمال دو نقطه‌ای $S_2(r)$ برای فاز ۱ (ناحیه سیاه رنگ) برای دو سیستم مختلف در $\Phi_1 = \Phi_2 = 1/2$ ، 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- تولید 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 هم 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 می‌شود که مانند نقاط شروعی برای نانولوله‌ها عمل می‌کنند. بعد از آن تکه‌های زنجیره‌های نانولوله به عنوان استوانه‌هایی با توجه به مقدار انحنای مورد نیاز رشد پیدا می‌کنند.

برای جلوگیری از اینکه بیشتر از نصف استوانه تولیدکننده نانولوله درون مرزهای ساختار در حال شبیه‌سازی قرار می‌گیرد، بعضی محققان مرکز استوانه‌ها را در فضایی کوچکتر از ساختار در حال شبیه‌سازی محدود به قرارگیری کرده‌اند [۱۱]. 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 [۱۲]. این روش توزیع ایزوتروپیک تصادفی از نانولوله‌های کربنی را ضمانت می‌کند و از اشتباهات قدیمی جلوگیری می‌کند [۱۳].

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^۱ (RVE) مشخص می‌شود و در ادامه نانولوله‌ها در آن ایجاد می‌شوند، در دو مرحله‌ای که VF و TPCF نمونه‌های بازسازی شده با نمونه‌های آزمایشگاهی مقایسه می‌شود، اگر تفاوتی بین آن‌ها باشد، همانطور که در دیاگرام مشخص گردیده است، کار بازسازی از محل نشان داده شده از سر گرفته می‌شود، 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 می‌رسد 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 می‌انجامد، به TPCF مورد نظر می‌توان دست یافت که در پایان باید نسبت حجمی نانولوله‌ها^۲ (VF) و TPCF نمونه شبیه سازی شده باید با نمونه اصلی یکسان باشد تا کار شبیه‌سازی به پایان برسد.

۴-۲- مواد

ماتریس پلیمر مورد استفاده در این نمونه‌ها PMMA^۳ می‌باشد که با نانولوله‌های کربن چند لایه، تقویت شده است، طیف ابعاد نانولوله‌های چند لایه‌ای از ۱۰ تا ۱۵ نانومتر برای قطر آن‌ها و از ۰/۱ تا ۱۰ میکرومتر برای طول آن‌ها است.

۴-۳- به دست آوردن اطلاعات آماری توابع همبستگی

از عکس‌های 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 هر کدام از نمونه‌ها به صورتی است که در شکل ۶ و شکل ۷ مشاهده می‌شود:

¹ Representative Volume Element

² Volume Fraction

³ Poly Methyl Methacrylate

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

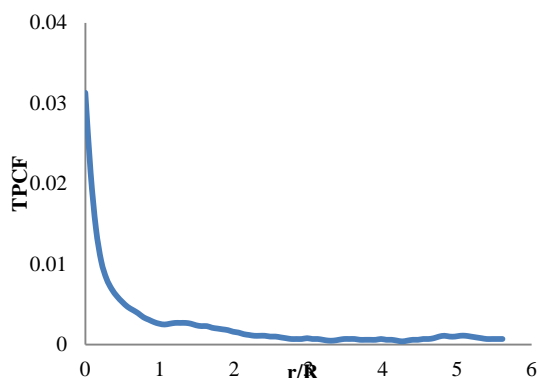
انتخاب نقطه‌ای به طور تصادفی درون مکعب ایجاد شده و تولید اولیت تکه استوانه‌ای مربوط به اولین نمونه نانولوله

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.

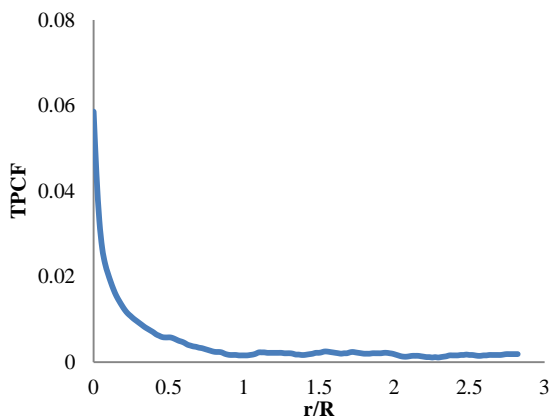
با اتمام تکه استوانه‌های نانولوله قبلی، برای تولید تکه‌های نانولوله جدید، نقطه دیگری درون RVE به صورت رندم انتخاب می‌شود و مراحل ساخت نانولوله جدید آغاز می‌شود، قابل ذکر است، در صورتی که در مراحل تولید هر یک از تکه‌های یک نانولوله از RVE بیرون بزند، مرحله تولید آن نانولوله متوقف می‌شود و تکه بیرون رفته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

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.

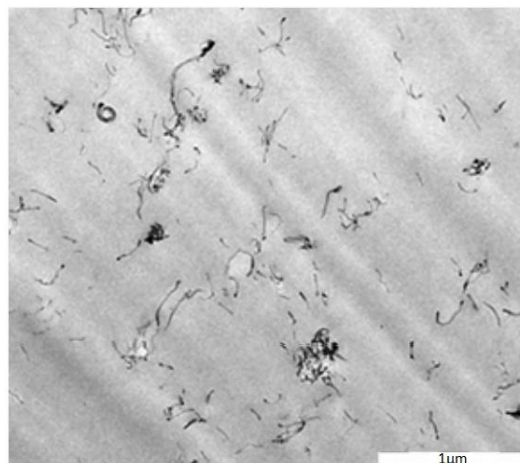
محاسبه TPCF، در صورت مطابقت داشتن با نمونه‌های آزمایش، کار مدلسازی RVE به اتمام می‌رسد؛ در غیر اینصورت باید با تغییر زوایای فضایی به نمودارهای TPCF بهتری دست یافت.



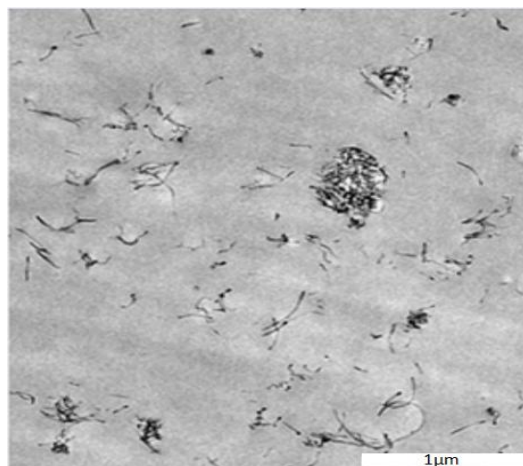
شکل ۶- نمودار تابع همبستگی دونقطه‌ای برای تصویر تجربی نمونه ۲ درصد، r طول برداری که روی عکس انداخته می‌شود و R شعاع همگرایی می‌باشد که از این شعاع به بعد نمودار به همگرایی می‌رسد.



شکل ۷- نمودار تابع همبستگی دونقطه‌ای برای تصویر تجربی نمونه ۵ درصد، r طول برداری که روی عکس انداخته می‌شود و R شعاع همگرایی می‌باشد که از این شعاع به بعد نمودار به همگرایی می‌رسد.



شکل ۴- عکس آزمایشگاهی پلیمر PMMA با ۲ درصد نانولوله چند لایه [۱۰]

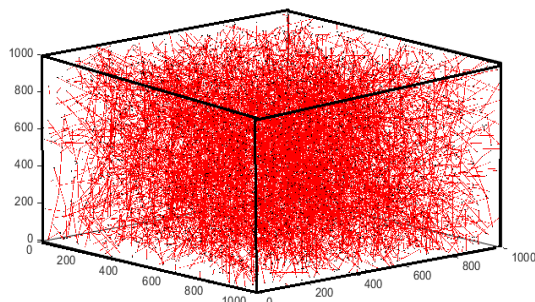


شکل ۵- عکس آزمایشگاهی پلیمر PMMA با ۵ درصد نانولوله چند لایه [۱۰]

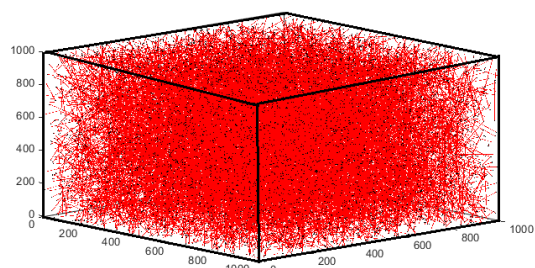
۵- نتایج و بحث

در این شبیه‌سازی‌ها، اطلاعات نانولوله به این صورت است: طول میانگین نانولوله‌ها ۵ میکرومتر و قطر میانگین نانولوله‌ها ۱۲.۵ نانومتر است؛ در نتیجه نسبت طول به قطر نانولوله‌ها 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 انحنای نانولوله و تراکم آن‌ها به ساختاری دست یافتیم که کمترین خطا را نسبت به توابع آماری دو نقطه‌ای نمونه‌ای آزمایشگاهی دارند، برای نمونه، ۲ درصد ساختار شبیه‌سازی شده، ۴۰۰۰۰ تکه

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 نانولوله‌های نمونه‌های تجربی و



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.



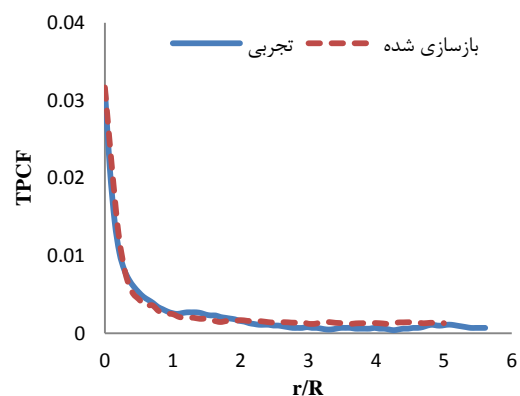
شکل ۱۱- ساختار بازسازی شده سه بعدی برای نمونه تجربی ۵ درصد با تابع همبستگی دو نقطه‌ای مشابه با تابع همبستگی دو نقطه‌ای که از نمونه تجربی به دست آمده بود.

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 $1000 \times 1000 \times 1000$ ، طول نانولوله‌ها با ملاحظه به نسبتی که نمونه‌های اصلی دارند محاسبه شده، سپس 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.

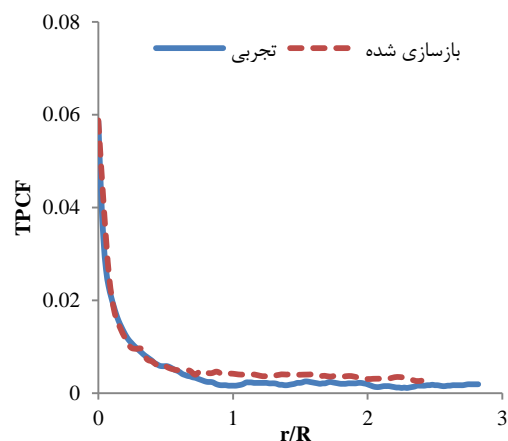
۶- نتیجه‌گیری

مشاهده گردید که در این مقاله با روش ارائه شده می‌توان، 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،

استوانه‌ایی مورد استفاده قرار گرفت که نانولوله‌ها را تشکیل می‌دهند که زوایای انحرافی فضایی برای هر دو استوانه نسبت به هم ۱ رادیان بود و برای نمونه ۵ درصد، 850000 تکه استوانه‌ای وجود دارد که نانولوله‌ها را تشکیل می‌دهند 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 می‌دهد و شکل های ۱۰ و ۱۱، ساختارهای شبیه سازی شده سه بعدی را برای هر دو نمونه نشان می‌دهد.



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

- [7] St-Pierre L, Héripé 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, Niezgodá 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

- [1] Lin S, Garmestani H (2000) Statistical continuum mechanics analysis of an elastic two-isotropic-phase 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 two-phase medium. *Int J Plasticity* 14(8): 719-731.
- [4] Lin S, Garmestani H, Adams B (2000) The evolution of probability functions in an inelastically 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)