



بررسی نظری و تجربی استحکام رشته نانوکامپوزیتی

رهام رفیعی^{1*}، هیراد اموحاجی²

1-استاد، دانشکده‌گان علوم و فناوری‌های میان‌رشته‌ای، دانشگاه تهران، تهران

2- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده‌گان علوم و فناوری‌های میان رشته‌ای، دانشگاه تهران، تهران

* تهران، کد پستی 14399-57131، Roham.Rafiee@ut.ac.ir

اطلاعات مقاله:

دریافت: 1402/12/21

پذیرش: 1403/03/30

چکیده

در این مقاله به بررسی استحکام رشته تولیدشده به روش اکستروژن پرداخته شده است. برای این منظور نمونه‌های آزمایشگاهی با استفاده از ABS و نانولوله کربن به عنوان رشته نانوکامپوزیت قابل چاپ در چاپگر سه‌بعدی تولید گردید. ابتدا، با ترکیب ذرات نانو و ABS، رشته نانوکامپوزیتی تولید و استحکام آن‌ها اندازه‌گیری شد. به منظور پیش‌بینی استحکام رشته، مدل چندمقیاسی مناسب توسعه داده شد. مدل مذکور از مقیاس میکرو آغاز گشته و پس از گذار از مقیاس میانی مزو به مقیاس نهایی ماکرو ختم شده است. برای هر مقیاس، المان حجمی معرف مناسب تعریف و استحکام آن پیش‌بینی شده است. در این تحقیق، دو پارامتر طول و جهت‌گیری نانولوله کربن در مقیاس میکرو و توزیع یا تفرق نانولوله کربن، در مقیاس مزو بررسی شده است. در نهایت در مقیاس ماکرو به کمک الگوریتم ژنتیک استحکام نهایی رشته محاسبه شده است. در این پژوهش استحکام نانوکامپوزیت با دو کسر وزنی 0.1 و 0.5 درصد محاسبه گردید و مشاهده شد که استحکام نهایی نانوکامپوزیت با کسر وزنی 0.1 و 0.5 درصد به ترتیب 14 و 20 درصد افزایش یافتند و همچنین مقادیر به‌دست‌آمده از آزمون کشش همخوانی بسیار خوبی با نتایج به‌دست‌آمده از مدل‌سازی عددی داشتند.

کلیدواژگان:

مدل‌سازی چندمقیاسی،
الگوریتم ژنتیک،
نانولوله کربن،
استحکام،
مدل‌سازی تصادفی،
رشته

Theoretical and experimental investigation of nanocomposite filament strength

Roham Rafiee^{1*}, Hiran Amohaji²

1, 2- College of Interdisciplinary Science and Technologies, University of Tehran, Tehran, Iran

*Postal Code: 1439957131, Tehran, Iran, roham.rafiee@ut.ac.ir

Keywords

Multiscale modeling,
Genetic algorithm,
Carbon nanotube,
Strength,
Stochastic modeling,
Filament

Abstract

In this article, the strength of the filament produced by the extrusion method has been investigated. For this purpose, testing samples were produced using ABS and carbon nanotubes as printable nanocomposite filaments in 3D printer. Carbon nanotubes were incorporated into ABS, and nanocomposite filaments were produced and their strengths were measured. In order to predict the strength of a nanocomposite filament, a suitable multi-scale model was developed. This model started from the microscale and after passing the in-between scale of meso, ended at the macroscale. For each scale, a suitable and separate representative volume element was defined, and its strength was predicted. Two parameters, CNT length and orientation, were captured at the microscale, and CNT agglomeration was taken into account at the mesoscale. Finally, at the macroscale, the strength of the nanocomposite filament was estimated using a genetic algorithm. In this study, the strength of the nanocomposite was calculated with two weight fractions of 0.1% and 0.5%, and it was observed that the final strength of the nanocomposite with weight fractions of 0.1% and 0.5% increased by 14% and 20%, respectively. The outputs of the modeling procedure were in very good agreement with experimental observations.

1- مقدمه

سهولت ساخت و هزینه کم، در کاربردهای متنوع و گسترده مورد استفاده قرار می‌گیرند [2].

توسعه روش‌های ساخت و از جمله شیوه ساخت افزودنی، افق جدیدی در برابر دید صنایع و محققین برای تولید اشکال پیچیده هندسی فراهم نموده است.

کامپوزیت‌ها، از جمله مواد مهندسی هستند که به دلیل دارا بودن خواص مهمی نظیر نسبت استحکام به وزن بالا، مقاومت به خوردگی و دامنه گسترده تغییر در خواص فیزیکی و مکانیکی، مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته‌اند [1]. مواد کامپوزیتی با زمینه پلیمری یکی از پرمصرف‌ترین مواد در صنایع پیشرو هستند که به دلیل دارا بودن ویژگی‌های خاص همانند نسبت استحکام به وزن بالا،

سختی را به ترتیب 90، 153 و 99 درصد افزایش می‌دهد [12]. دوریگاتو و همکاران نشان دادند که به‌کارگیری نانولوله‌های کربنی در ABS باعث افزایش استحکام کششی، هدایت الکتریکی و حرارتی می‌شود [13].

گسترش استفاده از نانوکامپوزیت‌ها در روش ساخت افزایشی در گرو شناخت صحیح از رفتار ماده نانوکامپوزیت و پیش‌بینی خواص مکانیکی آن با استفاده از ابزارهای مناسب می‌باشد. تا کنون مطالعات مختلفی به منظور پیش‌بینی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها بر اساس شیوه‌های مختلف مدل‌سازی صورت پذیرفته است. مطالعات مختلفی تا کنون در حوزه پیش‌بینی خواص نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربن انجام شده است [14-27]. علیرغم توسعه مدل‌های مختلف برای پیش‌بینی مدول، موارد بسیار کمی به پیش‌بینی استحکام نانوکامپوزیت پرداخته‌اند [28-32].

آصف و همکاران یک المان حجمی معرف سه‌بعدی از نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده سیلیس چاپ‌شده سه‌بعدی در یک بسته تجاری اجزا محدود ایجاد کرده‌اند و بر این اساس منحنی تنش-کرنش را پیش‌بینی کرده‌اند. مدل محاسباتی با در نظر گرفتن نانو ساختار و پراکندگی نانوذرات توسعه یافت [28]. یائو و همکاران یک مدل استحکام تعمیم‌یافته جدید برای پیش‌بینی استحکام شکست کششی بین لایه‌ای برای مواد افزوده‌شده به پلی‌لاکتیک‌اسید⁴ در روش ساخت رشته ذوب‌شده⁵ را ارائه دادند. مشاهده شد که مقدار خطا بین نتایج و داده‌های تجربی کمتر از 10 درصد است [29]. رحمتی و همکاران یک مدل شکست محافظه‌کارانه جدید برای تولید به روش مدل‌سازی رسوب ذوب‌شده ارائه دادند. نتایج نشان داد که مدل شکست در 95.2 درصد از موارد استحکام کششی نهایی را درست پیش‌بینی نمی‌کند و به این معنی است که حتی اگر مدل نتواند یک مقدار محافظه‌کارانه را برای استحکام کششی پیش‌بینی کند؛ با این وجود مقدار خطا کمتر از 5 درصد است [30]. ژائو و همکاران دو مدل نظری جدید برای پیش‌بینی استحکام کششی و مدول یانگ مواد افزودنی به پلی‌لاکتیک‌اسید در روش مدل‌سازی رسوب ذوب‌شده ارائه کردند و مشاهده شد که مدول یانگ و استحکام کششی را با زوایای چاپ متفاوت و ضخامت‌های مختلف لایه به‌طور دقیق پیش‌بینی می‌کند [31]. رفیعی و ذهاب‌زاده یک مدل‌سازی چند مقیاسی پایین به بالا به‌منظور تخمین استحکام نانوکامپوزیت حاوی نانولوله کربن را توسعه دادند که عدم قطعیت‌های ناشی از فرآیند تولید را با مدل‌سازی تصادفی لحاظ می‌نماید. مدل‌سازی از مقیاس میکرو⁶ آغاز گردیده و پس از گذار از مقیاس مزو⁵ به مقیاس نهایی ماکرو ختم می‌گردد. در این تحقیق مشاهده شد که مقدار خطای بین نتایج تجربی با مدل توسعه داده شده در حدود 5 درصد است [32].

هدف اصلی این تحقیق، بررسی استحکام رشته نانوکامپوزیتی مورد استفاده در چاپگر سه‌بعدی به‌منظور ساخت افزایشی مبتنی بر فرآیند ساخت رشته ذوب‌شده می‌باشد. برای این منظور علاوه بر اندازه‌گیری استحکام نمونه رشته نانوکامپوزیتی تولیدشده، به توسعه مدل چند مقیاسی مناسب برای تخمین استحکام آن پرداخته خواهد شد. با توجه به ماهیت تصادفی برخی پارامترهای حاکم بر مسئله همانند جهت‌گیری، طول و میزان تفرق آن در ماده زمینه رزین، مدل‌سازی به‌صورت تصادفی با شیوه نوینی مبتنی بر الگوریتم ژنتیک تحقق خواهد یافت که در آن با تولید داده‌های تصادفی استحکام نهایی نانوکامپوزیت تخمین زده می‌شود.

از کاربردهای چاپ افزودنی می‌توان به پانل‌های ساندویچی که از ساختار سبک و مقاوم به منظور کاهش وزن و افزایش کارایی سازه در صنعت هوافضا، ساختمان‌سازی، صنایع دریایی و همچنین خودروسازی اشاره کرد. در ضمن اینکه این شیوه ساخت حتی در پزشکی و دندان‌پزشکی نیز کاربرد دارد و به‌طور مثال در تولید ایمپلنت‌های سفارشی با دقت بالا و ساختار پیچیده نیز استفاده می‌شود [3-4].

به‌منظور کاهش وزن قطعات مختلف تولیدشده به روش ساخت افزایشی، استفاده از پلیمرها در این حوزه رونق فراوانی پیدا کرده است. خواص مکانیکی قطعات پلیمری تولیدشده به روش ساخت افزایشی عموماً پایین‌تر از قطعات تولیدشده با روش قالب‌گیری می‌باشد [5-6]. به همین دلیل، افزودن نانوذرات به پلیمرهای رایج در صنعت برای چاپ سه‌بعدی قطعات نانوکامپوزیتی نه‌تنها برای افزایش خواص مکانیکی؛ بلکه به‌منظور ایجاد قابلیت‌های بیشتر عملکردی، پلیمرهای مورد استفاده در فرآیند ساخت افزایشی، مورد توجه قرار گرفته است. افزودن نانولوله کربن به رزین‌های مرسوم نوع گرم‌نرم برای افزایش خواص مکانیکی آن‌ها به جهت چاپ سه‌بعدی قطعات نانوکامپوزیتی با خواص مناسب، یکی از زمینه‌های نوظهور در حوزه فناوری نانوکامپوزیت و فرآیند ساخت افزایشی می‌باشد [6].

نانولوله‌های کربنی، استحکام فوق‌العاده و مدول کشسانی بسیار قابل‌توجهی نسبت به سایر مواد دارند. این خواص فوق‌العاده و منحصربه‌فرد، برگرفته از پیوندهای کووالانسی در ساختار اتمی آن‌ها می‌باشد. مدول یانگ نانولوله‌های کربنی در راستای محورشان بسیار زیاد است. نانولوله‌ها به دلیل طول بسیار زیادشان از قابلیت انعطاف‌پذیری بالایی برخوردارند. مقاومت کششی نانولوله کربن برابر 63 گیگاپاسکال و مدول الاستیک نانولوله کربن بالغ بر یک تریاپاسکال گزارش شده است [7]. با در نظر گرفتن این که نانولوله‌های کربنی چگالی وزنی پایینی دارند³ $1.3-1.4 \text{ gr/cm}^3$ ، استحکام ویژه آن‌ها در میان تمام مواد شناخته‌شده، بهترین است [7-8].

شوفنر و همکاران نانولوله کربن چند جداره با کسر وزنی 10 درصد را به ABS اضافه کردند و گزارش کردند که 7.5 درصد افزایش در استحکام کششی قطعه چاپی در مقایسه با پلیمر خالص دیده شد؛ درحالی‌که رفتار ترد بیشتری نیز مشاهده شد. رشد 13.2 درصدی در استحکام کششی کامپوزیت‌های چاپ‌شده به روش مدل‌سازی رسوب ذوب‌شده¹ در مقایسه با پلیمر خالص توسط پرز و همکاران مشاهده شد [9]. نانسکرن و همکاران نانوکامپوزیت‌های نانولوله کربن چند جداره و پلی‌بوتیلن‌ترفتالات تقویت‌شده با گرافن (PBT) را با استفاده از مدل‌سازی رسوب ذوب‌شده چاپ کردند. گزارش شده است که PBT تقویت‌شده با نانولوله کربن خواص کشسانی و رسانایی بالاتر و همچنین چاپ‌پذیری بهتری نسبت به PBT تقویت‌شده با گرافن نشان می‌دهد [10]. دیور و همکاران نانولوله کربن را به کامپوزیت‌های پلیمری اضافه کرده و رشته‌های نانوکامپوزیت را از طریق اکستروژن تولید کردند. رشته‌های اکستروژن شده به روش مدل‌سازی رسوب ذوب‌شده چاپ شدند. آن‌ها خواص مکانیکی کمتری را برای نمونه‌های چاپ‌شده سه‌بعدی نسبت به نمونه‌های قالب‌گیری فشرده مشاهده کردند، درحالی‌که رسانایی الکتریکی یکسانی برای هر دو نمونه مشاهده شد [11]. کاپور و همکاران اثر افزودن نانولوله‌های کربنی به ABS را بر خواص مکانیکی و حرارتی مطالعه کردند و نشان دادند که به‌کارگیری 5 درصد وزنی نانولوله کربن در ABS، مقادیر مدول الاستیک، مدول ذخیره و

¹ Fused Deposition Modeling (FDM)

² Polylactic acid

³ Fused Filament Fabrication (FFF)

⁴ Micro
⁵ Meso

2- مطالعه تجربی

1-2- مواد مورد استفاده

در این تحقیق از پلیمر ABS (اکریلونیتریل- بوتادین- استایرن) به دلیل برخوردار بودن از خواص نسبتاً خوب مکانیکی و کاربردهای فراوان آن در صنایع مختلف، استفاده شده است [35-33]. رزین ABS با چگالی 1.06 الی 1.08 گرم بر سانتی متر مکعب، دمای انتقال شیشه‌ای 108-109 °C و وزن مولکولی 251.105 g/mol استفاده و نانولوله کربن نیز با خلوصی بیش از 95 درصد وزنی که بیش از 98 درصد آن نانوذره تک دیواره است؛ استفاده شده است. نانولوله‌ها دارای قطر بیرونی 1-3nm، قطر داخلی 0.9-2 nm میانگین قطر 1.1 nm، طول 30-5 nm، چگالی 1.4 g/cm³، رسانایی الکتریکی 100 S/cm و هدایت گرمایی 200 W/m.K 50- می‌باشند.

2-2- تولید رشته

نانولوله کربن در کسر وزنی‌های مختلف به‌طور جداگانه به محلول آب مقطر که حاوی گرانول ABS است؛ اضافه می‌شود. سپس با استفاده از دستگاه التراسونیک، نانولوله به‌خوبی در محلول توزیع می‌گردد. در ادامه نمونه‌ها به‌طور جداگانه در دستگاه مخلوط‌کن قرار می‌گیرد. مخلوط کردن در دمای 190 درجه سانتی‌گراد و سرعت دوران 90 دور بر دقیقه و به مدت 10 دقیقه انجام شده است. سپس، مخلوط وارد دستگاه پرس داغ شده و به‌وسیله خردکن به تکه‌های کوچک تقسیم می‌شود. برای اینکه به تکه‌ها آسیبی وارد نشود؛ در این مدت دمای پرس روی 180 درجه سانتی‌گراد تنظیم می‌گردد. در نهایت تکه‌ها را در دستگاه اکسترودر تک‌پیچ قرار داده و با تنظیم سرعت و دمای مناسب رشته تولید می‌شود. دما برای فیلامنت نانوکامپوزیت‌های حاوی 0.1 درصد وزنی و 0.5 درصد وزنی نانولوله‌های کربنی (CNTs) به ترتیب در محدوده 215 تا 220 درجه سانتی‌گراد و 230 تا 240 درجه سانتی‌گراد تنظیم می‌شود. دلیل انتخاب این محدوده‌های دمایی این است که ماده به‌طور کامل ذوب شود بدون اینکه بیش از حد گرم شود و از سوختن و تغییر شکل نامناسب جلوگیری شود. همچنین، تنظیم دمای مناسب باعث ایجاد خواص فیزیکی و مکانیکی بهینه در فیلامنت نهایی می‌شود. رشته تولیدشده در شکل 1 قابل مشاهده است. شایان ذکر است که تنظیم پارامترهای تولید با هدف دستیابی به رشته‌های قابل چاپ در فرآیند مدل‌سازی رسوب ذوب‌شده صورت پذیرفته است و از امکان چاپ آن‌ها در چاپگر سه‌بعدی موردنظر اطمینان حاصل شده است.



Fig.1 Produced filaments

شکل 1 رشته‌های تولیدشده

2-3- آزمون کشش

آزمون کشش با دستگاه SANTAM مدل STM-150 و با بارگذاری 1 میلی‌متر بر دقیقه انجام شده است. برای هر کدام از رشته از جنس ABS و رشته نانوکامپوزیتی با دو کسر وزنی مختلف نانولوله کربن، 4 نمونه و مجموعاً 12 نمونه تهیه و آزمون کشش بر روی آن‌ها صورت پذیرفت (شکل 2). میانگین استحکام‌های اندازه‌گیری شده برای رشته‌های مختلف در جدول 1 ارائه شده است.

علاوه بر استحکام‌های اندازه‌گیری شده و ذکر شده در جدول 1، مدول الاستیک رشته خالص ABS نیز که برای مراحل بعدی مدل‌سازی مورد نیاز است؛ اندازه‌گیری گردید و مقدار 1.967 گیگاپاسکال برای آن به دست آمد.



Fig. 2 A sample of the tensile test piece with the device

شکل 2 نمونه رشته آزموده شده با دستگاه

جدول 1 استحکام رشته از جنس پلیمر خالص ABS و CNT/ABS

Table 1 Strength of pure ABS and CNT/ABS filaments

نوع رشته	کسر وزنی نانولوله کربن %	استحکام (MPa)
ABS	0	32.2
CNT/ABS	0.1	35.7
CNT/ABS	0.5	37.17

3- مدل‌سازی چند مقیاسی

با توجه به اینکه نانولوله کربنی در مقیاس نانو می‌باشد و استحکام نهایی در بالاترین مقیاس مادی، یعنی مقیاس ماکرو اندازه‌گیری می‌شوند؛ توسعه یک مدل چند مقیاسی مدنظر قرار می‌گیرد. مدل دربرگیرنده سه مقیاس میکرو، مزو و ماکرو می‌باشد و خروجی مدل‌سازی هر مقیاس به‌عنوان ورودی مقیاس بعدی لحاظ می‌گردد. در مقیاس میکرو، برهمکنش بین نانولوله و رزین موردنظر قرار گرفته و استحکام فاز میانی (فاز واسط بین رزین و نانولوله) مشخص

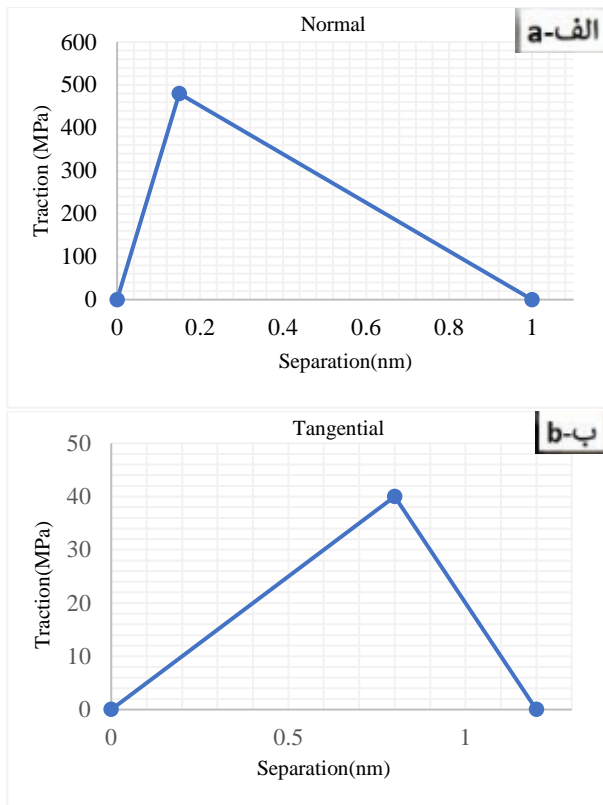


Fig. 3 traction-separation diagrams in a) vertical and b) tangential direction

شکل 3 نمودار کشش - جدایش در راستای الف) عمودی و ب) مماسی

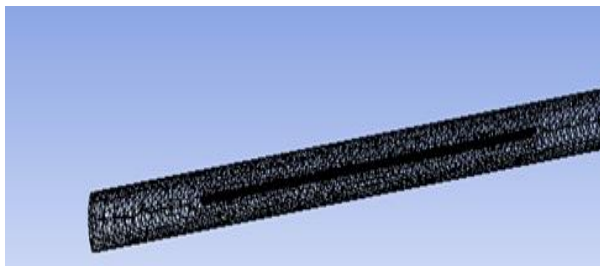


Fig. 4 Meshed RVE

شکل 4 المان حجمی معرف مش بندی شده

با توجه به مقادیر گفته شده در بخش 1-2 و مقدار کسر وزنی نانولوله که در دو حالت 0.5 و 0.1 درصد است. مقدار کسر حجمی برابر با 0.07 و 0.27 درصد برای المان حجمی معرف در این مقیاس محاسبه شده است. برای محاسبه استحکام کششی المان حجمی معرف، یک طرح مدل تحت بارگذاری محوری قرار گرفته است و درجه آزادی حرکتی طرف مقابل در امتداد بارگذاری مقید و سایر درجات آزادی دورانی نیز مقید گردیدند. نمودار تنش - کرنش المان حجمی معرف مقیاس ماکرو برای طول های مختلف نانولوله کربن، بر اساس خروجی تحلیل المان محدود در شکل 5 نمایش داده شده است. همان طور که در شکل 5 مشاهده می شود، با افزایش طول نانولوله مقدار استحکام نیز افزایش می یابد. همچنین مشاهده می شود که نمودار تنش - کرنش نانوکامپوزیت غیرخطی است و هرچقدر که این طول بلندتر شود، این رفتار بیشتر خود را نشان می دهد. با توجه به اینکه رفتار نانولوله و رزین به صورت خطی در نظر گرفته شده است؛ روند غیرخطی در نمودارهای شکل 5، ناشی از رخداد جدایش بین نانولوله و رزین در ناحیه صفحه واسط می باشد.

می شود. سپس در مقیاس مزو، المان حجمی معرف حاوی چند نانولوله مدل سازی می گردد و استحکام آن پیش بینی می گردد. در نهایت در مقیاس نهایی ماکرو، مقادیر خروجی از مقیاس های میکرو و مزو تحت عنوان ورودی در نظر گرفته شده و استحکام نهایی رشته نانوکامپوزیتی تخمین زده می شود.

1-3- مقیاس میکرو

برهمکنش بین نانولوله و ماتریس نقش بسیار زیادی بر استحکام نهایی دارد. بنابراین در نظر گرفتن برهمکنش بین نانولوله و رزین بسیار قابل اهمیت است. در صورت استفاده از نانولوله عادی (نانولوله عامل دار نشده)، برهمکنش بین نانولوله و رزین از طریق پیوندهای ضعیف واندروالسی صورت می گیرد [36]. پژوهشگران با مدل سازی دینامیک مولکولی و یا از طریق بیرون کشیدگی تجربی نانولوله از رزین به مطالعه انرژی شکست و استحکام برشی فاز میانی بین نانولوله و رزین پرداخته اند. مدل ناحیه چسبیده در دسته ای از روش ها است که توانایی بالایی از منظر دقت و سرعت تحلیل بر روی بررسی برهمکنش بین نانولوله و رزین دارد. در این تحقیق نیز برای مدل سازی برهمکنش بین نانولوله و رزین از مدل سازی ناحیه چسبیده استفاده شده است. المان حجمی معرف مقیاس میکرو دربرگیرنده نانولوله، رزین و صفحه واسط بین نانولوله و رزین می باشد. برای مدل سازی المان حجمی معرف در مقیاس میکرو، از نرم افزار المان محدود انسیس استفاده شده است. برای این منظور، نانولوله به صورت یک ماده پیوسته و با مدول الاستیک یک تراپاسکال و ضریب پواسون 0.3 در نظر گرفته می شود. رزین احاطه کننده نانولوله نیز به صورت یک ماده پیوسته و با مدول الاستیک 1.967 گیگاپاسکال و ضریب پواسون 0.38 مدل می گردد. برهمکنش بین نانولوله و رزین نیز با استفاده از ناحیه چسبیده با ضخامت صفر و به صورت صفحه واسط بین نانولوله و رزین مدل می گردد. رفتار ساختاری ناحیه چسبیده صفحه واسط، با قانون دوخطی نمایش داده شده در شکل 3 مدل گردیده است. حداکثر تنش مماسی بین نانولوله کربن و ABS، 40 MPa گزارش شده است [37]. در تحقیق دیگری جدایش متناظر با حداکثر تنش برشی 0.8 nm و جدایش کامل را 1.2 nm محاسبه کرده اند [38-39]. همچنین تان و همکاران مقدار حداکثر تنش قائم را 480 MPa و جدایش متناظر با آن را 0.15 nm و جدایش کامل را 1 nm به دست آورده اند [40]. شکل 4 هندسه مش زده شده مدل المان حجمی معرف مقیاس میکرو را نشان می دهد. به منظور بررسی تأثیر طول بر روی استحکام نهایی در المان معرف، مدل های مختلفی حاوی نانولوله های با طول های 150 تا 500 نانومتر ساخته شدند.

ابعاد نانولوله و رزین، به گونه ای در نظر گرفته می شود که بیان کننده کسر حجمی در تطابق کامل با مطالعه آزمایشگاهی باشد. با توجه به اینکه در آزمون تجربی از دو کسر وزنی 0.5 و 0.1 درصد استفاده شده است؛ کسر وزنی نانولوله کربن به کسر حجمی با استفاده از رابطه ذیل تبدیل می گردد

$$v_f = \frac{M_f / \rho_f}{M_f / \rho_f + M_m / \rho_m} \quad (1)$$

که در آن M_f و M_m به ترتیب کسر وزنی نانولوله و کسر وزنی رزین و ρ_f و ρ_m چگالی نانولوله و چگالی رزین هستند.

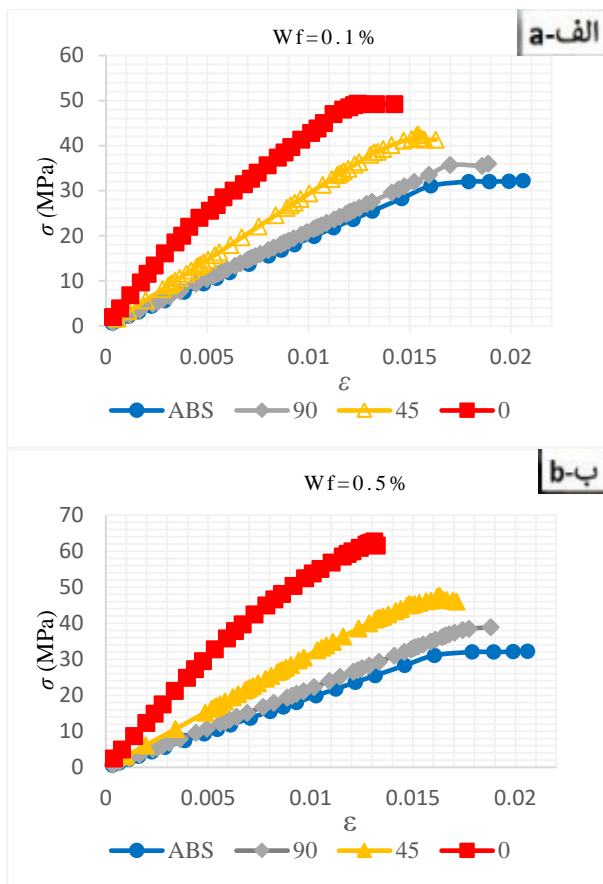


Fig. 6 The effect of nanotube orientation on the final strength of nanocomposite. a) weight fraction 0.1% and b) weight fraction 0.5%
 شکل 6 تأثیر جهت‌گیری نانولوله بر استحکام نهایی المان حجمی معرف مقیاس میکرو. الف) کسر وزنی 0.1 درصد و ب) کسر وزنی 0.5 درصد

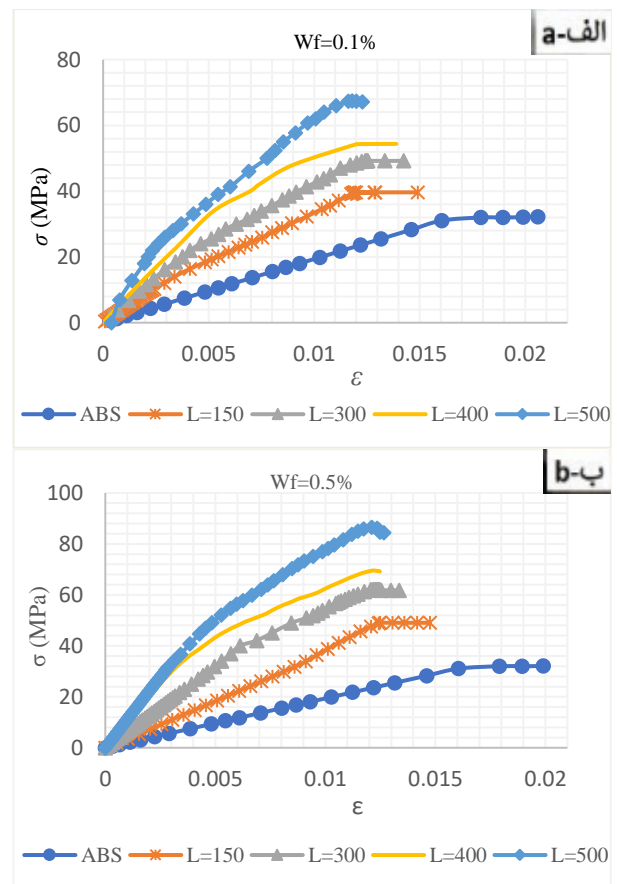


Fig. 5 The effect of nanotube length on the final strength of nanocomposite. a) weight fraction 0.5% and b) weight fraction 0.1%
 شکل 5 تأثیر طول نانولوله بر استحکام نهایی المان حجمی معرف مقیاس میکرو. الف) کسر وزنی 0.1 درصد و ب) کسر وزنی 0.5 درصد

شایان ذکر است که در این تحقیق از بررسی موج‌دار بودن نانولوله صرف‌نظر شده است. علت این امر این است که در طی تحقیق انجام‌شده توسط رفیعی نشان داده شده است که انحنای نانولوله در رزین، بین حالت‌های جهت‌گیری نانولوله مستقیم با زاویای 0 و 90 قرار دارد [41]. لذا بررسی قرارگیری نانولوله کربن مستقیم در زاویای 0، 45 و 90 درجه که در این بخش بررسی گردید؛ معادل اثر شکل موج‌دار نانولوله می‌باشد. از این مطلب در مدل‌سازی مقیاس ماکرو متعاقباً استفاده خواهد شد.

2-3- مقیاس مزو

المان حجمی معرف مقیاس میکرو که در بخش قبل مورد تحلیل قرار گرفت؛ تنها دربرگیرنده یک نانولوله کربن می‌باشد. لذا این مدل فرض می‌کند که هر رخدادی در این المان مانند جدایش دو فاز از یکدیگر، به‌صورت مشابه در تمامی بخش‌های دیگر تکرار می‌گردد. این پیش‌بینی ساده، تنها در حالتی معتبر است که نانولوله‌ها به‌صورت کاملاً منظم و با فواصل مشخص از هم قرار گرفته باشند یا به‌عبارت‌دیگر به‌صورت کاملاً ایده‌آل در رزین پراکنده شده باشند. درحالی‌که، توزیع نانولوله در داخل رزین از الگوی یکسانی تبعیت نمی‌نماید و نانولوله‌ها تمایل شدیدی به تجمع موضعی و کلوخه‌ای شدن دارند. در این راستا، انتخاب ابعاد المان حجمی با ابعادی بزرگ‌تر، باید نمایشگر حدودی این موضوع باشد و توزیع متفاوت و نامنظم تنش را نشان می‌دهد. با توجه به این امر که در این حالت، به‌جای یک نانولوله، تعداد بیشتری مورد تحلیل واقع می‌شوند، می‌توان عنوان نمود که مدل‌سازی در مقیاس مزو صورت می‌گیرد. مقیاس مزو مقیاسی واسط میان مقیاس میکرو و ماکرو می‌باشد.

حال در طول ثابت 300 نانومتر و در همان دو کسر وزنی، تأثیر جهت‌گیری نانولوله در رزین بر استحکام نهایی بررسی می‌شود. برای این منظور، مدل‌هایی با جهت‌گیری نانولوله در زوایای 45 و 90 نیز ساخته و تحلیل می‌گردد. نمودار تنش-کرنش آن‌ها در شکل 6 قابل مشاهده است. با توجه به شکل واضح است که هر چقدر از زاویه صفر درجه به سمت زاویه 90 درجه جهت‌گیری نانولوله تغییر پیدا کند، استحکام نهایی آن کاهش می‌یابد؛ تا جایی که می‌توان دید که در زاویه 90 درجه نمودار تنش-کرنش تقریباً با رزین خالص منطبق است. زمانی که نانولوله در راستای 90 درجه واقع می‌گردد؛ قبل از اینکه بار به نانولوله منتقل شود؛ رزین دچار تخریب می‌شود. با توجه به این امر که استحکام مماسی صفحه واسط از استحکام قائم به‌مراتب کمتر است (شکل 3)، در زاویه 45 درجه نیز، صفحه واسط زودتر از حالتی که نانولوله در زاویه صفر درجه قرار گرفته است، تخریب می‌گردد.

در شکل 7 کانتور تنش برای نانولوله قرار گرفته در راستای 45 و 90 درجه و کسر وزنی 0.5 درصد قابل‌مشاهده است. همان‌طور که در شکل 7-الف مشاهده می‌شود؛ بار متحمل توسط نانولوله در حالتی که نانولوله با راستای بارگذاری زاویه 90 درجه بسازد با رزین اطراف برابر است و قبل از شروع انتقال بار، رزین دچار تخریب می‌گردد. عامل اصلی کاهش استحکام نهایی، تغییر الگوی انتقال بار به نانولوله است. توزیع تنش و فرآیند انتقال بار به نانولوله با چرخش نانولوله تحت تأثیر قرار می‌گیرد. با توجه به شکل 7-ب مشاهده می‌شود که تمرکز تنش در دو انتهای نانولوله در جهت‌گیری 45 درجه بیشترین میزان است.

برای حالت توزیع کاملاً پراکنده (الف)، همان المان حجمی معرف مقیاس میکرو در کنار همدیگر تکثیر شده‌اند. از آنجایی که المان حجمی معرف مقیاس میکرو با فرض عدم رخداد تجمع موضعی به علت ماهیت خود استوار گردیده است؛ المان حجمی معرف مقیاس مزو که از تکثیر المان حجمی معرف مقیاس میکرو ایجاد می‌گردد نیز، بر اساس همان فرض توزیع کاملاً پراکنده استوار می‌گردد. فواصل نانولوله‌های کربن در المان حجمی معرف مقیاس مزو نوع (الف)، به میزان مختلف کاهش داده می‌شود تا حالت‌های دیگر توزیع نانولوله و رخداد پدیده تجمع موضعی برای حالت‌های (ب)، (ج) و (د) به وجود آید.

نمودارهای تنش-کرنش در حالت‌های مختلف توزیع نانولوله در رزین برای 2 کسر وزنی مختلف در شکل 9 نشان داده شده است. با توجه به شکل 9 مشاهده می‌گردد که هرچقدر نانولوله‌ها از هم فاصله بیشتری داشته باشند؛ استحکام نهایی نانوکامپوزیت بیشتر شده، هرچقدر که نانولوله‌ها به هم نزدیک شوند؛ به علت تمرکز تنش ایجاد شده در بین آن‌ها استحکام نهایی کاهش می‌یابد. به طوری که در حالت کاملاً متراکم با استحکام رزین خالص تقریباً برابر شد و کرنش نهایی آن نیز کاهش یافته است. در حقیقت در این حالت، نانولوله کربن نقشی در تقویت ماده زمینه ایفا نمی‌نماید.

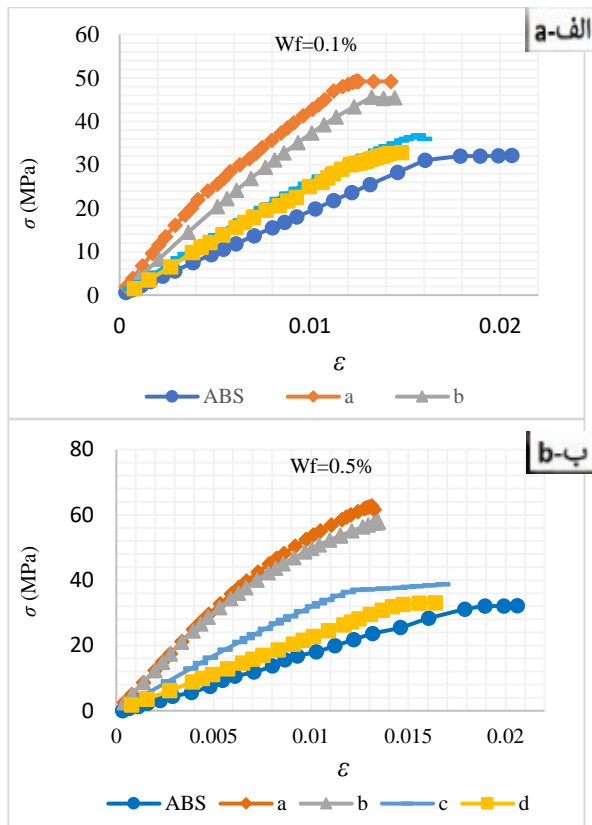


Fig. 9 The effect of nanotube agglomeration on the final strength of nanocomposite. a) weight fraction 0.1% and b) weight fraction 0.5%
 شکل 9 تأثیر توزیع نانولوله بر استحکام نهایی نانوکامپوزیت. الف) کسر وزنی 0.1 درصد و ب) کسر وزنی 0.5 درصد

شایان ذکر است که برای تمامی مدل‌های المان محدود ساخته شده در این تحقیق، مطالعه همگرایی صورت پذیرفته است و چگالی المان بندی به نحوی انتخاب شده است که پاسخ مستقل از چگالی المان باشد. با توجه به اینکه برای هر حالت، تعداد المان متفاوتی استفاده شده است؛ به منظور پرهیز از طولانی شدن مطلب، از ذکر جزئیات آن خودداری می‌گردد.

در مقیاس میکرو تأثیرات طول و جهت‌گیری نانولوله در رزین بررسی و در مورد تأثیر آن بر روی استحکام نهایی بحث شد. حال در این مقیاس، تأثیر توزیع نانولوله در رزین بر روی استحکام نهایی بررسی شود. برای این منظور، چهار حالت توزیع مطابق شکل 8 مورد بررسی قرار گرفته است که معرف حالت‌های توزیع کاملاً پراکنده (الف)، توزیع تقریباً پراکنده (ب)، توزیع نسبتاً متراکم (ج) و توزیع کاملاً متراکم (د) تغییر می‌کند.

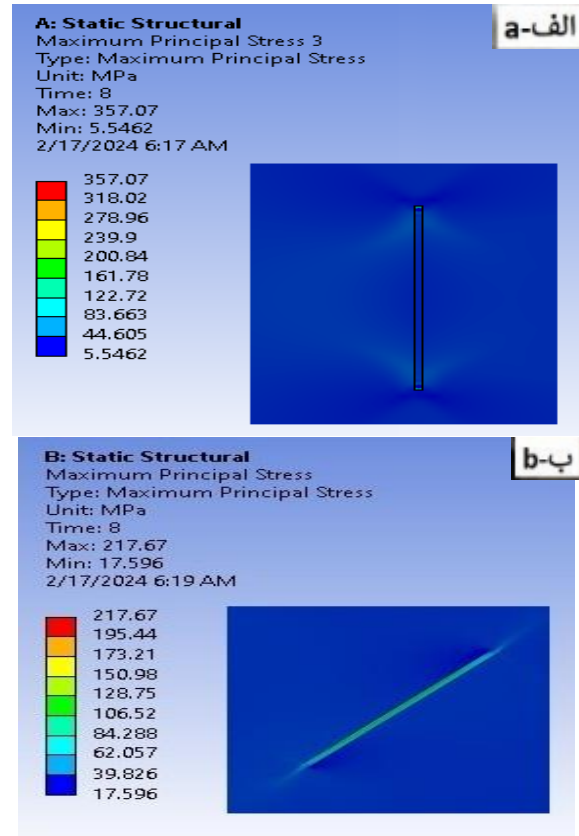


Fig.7 Stress distribution in the weight fraction of 0.5% in the orientation angle of a) 90 and b) 45 degrees of nanotubes in resin
 شکل 7 توزیع تنش در کسر وزنی 0.5% در زاویه جهت‌گیری الف) 90 و ب) 45 درجه نانولوله در رزین

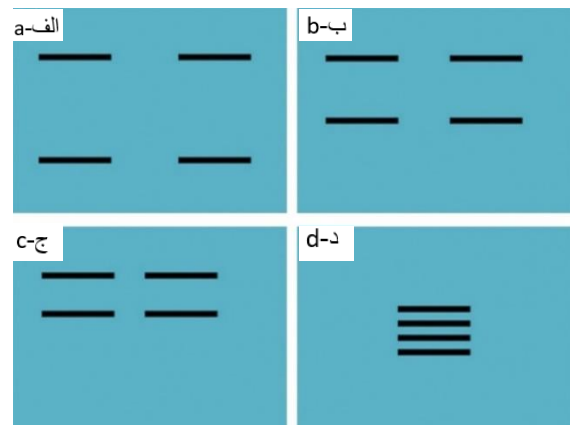


Fig. 8 Different modes of nanotube agglomeration in the volume element representative of the meso scale a) fully dispersed, b) partially dispersed, c) moderately agglomerated, d) highly agglomerated

شکل 8 حالت‌های مختلف توزیع نانولوله در المان حجمی معرف مقیاس مزو الف) توزیع کاملاً پراکنده، ب) توزیع تقریباً پراکنده، ج) توزیع نسبتاً متراکم، د) توزیع کاملاً متراکم

3-3- مقیاس ماکرو

در این قسمت تمرکز بر روی آخرین مقیاس مادی یا همان مقیاس ماکرو است. المان حجمی معرف در این مقیاس، خود محیط مادی مورد بررسی می‌باشد. در مقیاس میکرو تأثیر طول و جهت‌گیری نانولوله بر روی استحکام نهایی در حالی که هربار یکی از این پارامترها ثابت در نظر گرفته شد؛ مورد بررسی قرار گرفت. در مقیاس بعدی یعنی مزو، تأثیر توزیع نانولوله بر استحکام نهایی نانوکامپوزیت در حالی که پارامترهای طول و جهت‌گیری ثابت در نظر گرفته شدند محاسبه شد. حال از آنجایی که طول، جهت‌گیری و توزیع نانولوله پارامترهای تصادفی هستند؛ در این مقیاس تأثیر هم‌زمان این پدیده‌ها به‌صورت تعاملی و همچنین به‌صورت تصادفی مدنظر قرار می‌گیرد. برای پیش‌بینی استحکام در این مقیاس نیازمند به مدل‌سازی تصادفی می‌باشد. در این مقیاس از روش سطح پاسخ¹ که شاخه‌ای مهم از روش‌های ریاضی و آماری است و در توسعه روش‌های جدید بهینه‌سازی و مدل‌سازی تصادفی به‌صورت مؤثر عمل می‌کند [42-43]؛ استفاده شده است. این روش به دلیل دقت بالا، هزینه کم

تحلیل و سادگی، انتخاب بسیار مناسبی است. در مرحله اول برای این روش باید پارامترهای ورودی و خروجی تعیین شوند. با توجه به مدل‌سازی و تحلیل انجام‌شده در این پژوهش، پارامترهای طول، جهت‌گیری و توزیع به‌عنوان پارامتر ورودی یا متغیر و استحکام نهایی به‌عنوان پارامتر خروجی یا هدف انتخاب می‌شود. در مرحله بعد یک شبیه‌سازی پارامتری/عددی برای یافتن پاسخ‌های تعیین‌شده به‌عنوان تابعی از پارامتر ورودی برای ساخت ماتریس طراحی انجام می‌شود. در این مرحله با توجه به شبیه‌سازی اصلی که در نرم‌افزار انسیس انجام شده است؛ بدون انجام شبیه‌سازی مستقیم پاسخ‌های طیف‌های وسیع‌تری از پارامترهای ورودی پیش‌بینی می‌شود. به‌طور معمول ارتباط بین پاسخ و متغیرهای مستقل مشخص نیست و برازش مدل در روش سطح پاسخ، مستلزم یک تقریب مناسب از رابطه دقیق بین پاسخ و پارامترهای ورودی است. برخی از روش‌های تخمین این رابطه عبارتند از: الگوریتم ژنتیک، چندجمله‌ای مرتبه دو، شبکه عصبی، رگرسیون ناپارامتری. در این تحقیق از الگوریتم ژنتیک به دلیل دقت قابل‌قبول در فرآیندهای بهینه‌سازی و مدل‌سازی تصادفی استفاده شده است.

الگوریتم ژنتیک یک روش جستجوی مؤثر در فضاها بسیار وسیع برای پیدا کردن جواب است. در این الگوریتم‌ها باید فضای طراحی به فضای ژنتیک تبدیل شود. اصول الگوریتم ژنتیک بر پایه پردازش تصادفی یا به عبارت بهتر پردازش تصادفی هدایت‌کننده استوار است [44-46]. از دلایل دیگر استفاده از الگوریتم ژنتیک در این تحقیق ماهیت تصادفی پارامترهای متغیر است. مزیت استفاده از الگوریتم ژنتیک در مدل‌سازی تصادفی نسبت به سایر روش‌های مدل‌سازی تصادفی این است که این الگوریتم می‌تواند در فضاها بسیار وسیع با استفاده از عملگرهای انتخاب، ترکیب و جهش بهترین جواب‌ها را در فضای جستجوی مسئله پیدا کند؛ زیرا که قابلیت تطبیق با تغییرات مسئله را دارد و زمانی که شرایط مسئله تغییر کند این الگوریتم می‌تواند با تغییر جمعیت و اجرای مراحل تکاملی بهترین جواب را تخمین بزند. همچنین این الگوریتم نیاز کمتری به اطلاعات و داده‌های قبلی برای مدل‌سازی تصادفی نسبت به سایر روش‌های معمول دارد و می‌تواند با اجرای تکاملی به‌صورت خودکار پارامترها و ساختارهای مدل را تنظیم کند و بهترین عملکرد را بر اساس خصوصیات داده‌ها بگیرد. در نهایت این الگوریتم به دلیل قابلیت اجرای موازی باعث افزایش سرعت محاسبه در فضاها بزرگ و پیچیده می‌گردد [47-49]. در این تحقیق مقادیر

تراکم و جهت‌گیری نانولوله در رزین؛ استحکام نهایی را تخمین می‌زند. در این تحقیق داده‌های تصادفی برای پارامتر طول در محدوده 150 تا 500 نانومتر و پارامتر جهت‌گیری از زاویه صفر تا 90 درجه و در 4 حالت مختلف توزیع نانولوله در رزین تولید شده، استحکام آن‌ها تخمین زده می‌شود. با توجه به ماهیت تصادفی مدل‌سازی، برای تولید کافی نمونه تصادفی جهت تکمیل جامعه آماری، بایستی معیار همگرایی تعریف گردد. در این تحقیق، معیار همگرایی بدین صورت تعریف می‌گردد که روند تغییرات² استحکام پیش‌بینی‌شده رصد می‌گردد و مقدار آن بر حسب تعداد نمونه تولیدشده، ترسیم می‌گردد. زمانی که این نمودار به‌صورت هموار نمایان گردد؛ همگرایی صورت پذیرفته است. پس از احراز شرط همگرایی، میانگین استحکام و همچنین مقدار غالب³ استحکام محاسبه و گزارش می‌گردد.

با توجه به متغیرهای تصادفی در نظر گرفته شده، استحکام نهایی تخمین زده شده برای رشته نانوکامپوزیتی در مقیاس ماکرو، بین دو حد بالا و پایین تخمین زده می‌شود. در صورتی که نانولوله در رزین دارای بیشترین طول یعنی 500 نانومتر، هم‌راستا با بارگذاری یعنی زاویه صفر درجه و در حالت توزیع کاملاً پراکنده باشد؛ بیشترین استحکام نهایی قابل حصول است. از طرفی، در حالی که نانولوله دارای کمترین طول یعنی 150 نانومتر، با جهت‌گیری 90 درجه در رزین و در حالت کاملاً متراکم باشد؛ دارای کمترین استحکام نهایی می‌باشد. با توجه به شبیه‌سازی انجام‌شده در نرم‌افزار انسیس، کران بالای استحکام نهایی نانوکامپوزیت برای کسر وزنی 0.1 و 0.5 درصد به ترتیب برابر 67 و 86 مگاپاسکال و کران پایین استحکام نهایی نیز برای کسر وزنی 0.1 و 0.5 درصد به ترتیب برابر 25.34 و 26.32 مگاپاسکال است. الگوریتم ژنتیک در مقیاس ماکرو، بر اساس متغیرهای ورودی تصادفی، استحکام نهایی رشته نانوکامپوزیتی را پیش‌بینی می‌نماید که بین مقادیر حد بالا و پایین ذکر شده قرار می‌گیرند.

4- بحث و نتایج

قبل از اینکه به نتایج حاصل از مدل‌سازی تصادفی با استفاده از الگوریتم ژنتیک پرداخته شود؛ ابتدا باید صحت این مدل‌سازی بررسی شود. دقت مقادیر تخمین زده شده از مدل مبتنی بر الگوریتم ژنتیک را می‌توان از مقایسه مقادیر محاسبه شده از شبیه‌سازی در نرم‌افزار انسیس و داده‌های پیش‌بینی‌شده توسط مدل چند مقیاسی توسعه داده شده مبتنی بر الگوریتم ژنتیک نشان داد. برای انجام این کار در نرم‌افزار انسیس برای 30 حالت مختلف طول، جهت‌گیری و توزیع نانولوله در رزین، مقدار استحکام نهایی پیش‌بینی می‌گردد و مقادیر محاسبه شده در نرم‌افزار انسیس تحت عنوان داده‌های واقعی با مقادیر پیش‌بینی‌شده توسط مدل مبتنی بر الگوریتم ژنتیک مقایسه می‌گردد. همان‌طور که در شکل‌های 10، 11 و 12 مشاهده می‌شود مدل با دقت بسیار خوبی می‌تواند حالت‌های مختلف پارامترهای متغیر یعنی: طول، جهت‌گیری و توزیع نانولوله در رزین را در نظر گرفته و استحکام نهایی را تخمین بزند.

³ Mode value¹ Response Surface Method (RSM)² Coefficient of Variation (CoV)

صورت منفی بودن به معنی رابط عکس در پارامترها می‌باشد. هرچقدر که این مقدار به 1 نزدیک‌تر باشد به معنی ارتباط بیشتر یا همبستگی بیشتر بین داده‌های اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده است. همان‌طور که در شکل 12 مشاهده می‌شود، مقدار ضریب همبستگی در کسر وزنی 0.1 و 0.5 درصد به ترتیب برابر با 0.9964 و 0.9962 و همچنین مقدار ریشه میانگین مربعات خطا به ترتیب برابر با 3.028 و 4.63 است. همان‌طور که مشاهده می‌شود مدل در کسر وزنی 0.1 درصد با دقت بالاتری داده‌ها را پیش‌بینی می‌کند اما به‌طور کل با توجه از مقادیر به دست آمده برای ضریب همبستگی و ریشه میانگین مربعات خطا در شکل 12 می‌توان گفت که مدل در هر دو کسر وزنی دارای دقت بالایی است. بنابراین با توجه به شکل‌های 10-12 می‌توان نتیجه گرفت که مدل با دقت بالایی استحکام نهایی رشته نانوکامپوزیت را در حالت‌های مختلف برای پارامترهای تصادفی طول، جهت‌گیری و توزیع نانولوله در رزین تخمین می‌زند.

حال پس از آنکه دقت مدل سنجیده شد، میزان تولید نمونه تصادفی بر اساس معیار همگرایی تبیین شده، بررسی می‌گردد. همان‌طور که در شکل 13 مشاهده می‌شود، برای کسر وزنی 0.1% بعد از 400 داده تصادفی، همگرایی حاصل شده است. برای کسر وزنی 0.5% نیز بعد از 408 داده تصادفی، شرط همگرایی احراز گردیده است. در شکل 13، n به معنی تعداد داده‌های تصادفی انتخاب شده می‌باشد.

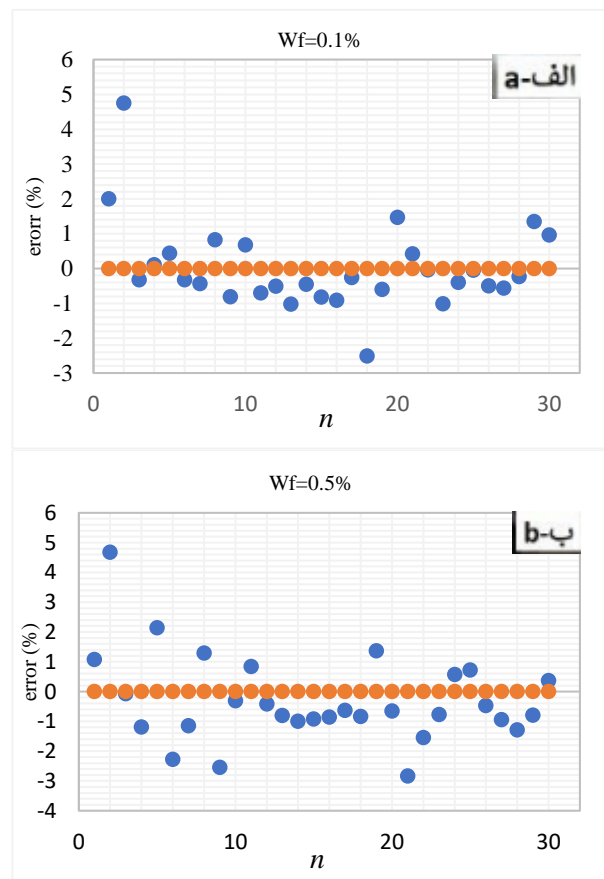


Fig. 11 Relative error diagram of observed and predicted strength values. a) weight fraction 0.1% and b) weight fraction 0.5%

شکل 11 نمودار خطای نسبی مقادیر استحکام محاسبه‌شده و پیش‌بینی‌شده. الف) کسر وزنی 0.1 درصد و ب) کسر وزنی 0.5 درصد

با توجه به شکل 10 مشاهده می‌شود مقدارهای اصلی و محاسبه‌شده با نرم‌افزار انسیس با مقادیر پیش‌بینی‌شده استحکام توسط مدل چند مقیاسی مبتنی بر الگوریتم ژنتیک کاملاً منطبق است. این بدان معنی است که به‌جای اینکه تعداد بسیار زیادی از حالت مختلف در نرم‌افزار تحلیل شود و استحکام آن‌ها پیش‌بینی شود، می‌توان چند حالت مختلف را در نرم‌افزار شبیه‌سازی کرده، مابقی را به کمک مدل مبتنی بر الگوریتم ژنتیک پیش‌بینی کرد. این کار باعث صرفه‌جویی زیادی در هزینه محاسباتی می‌شود.

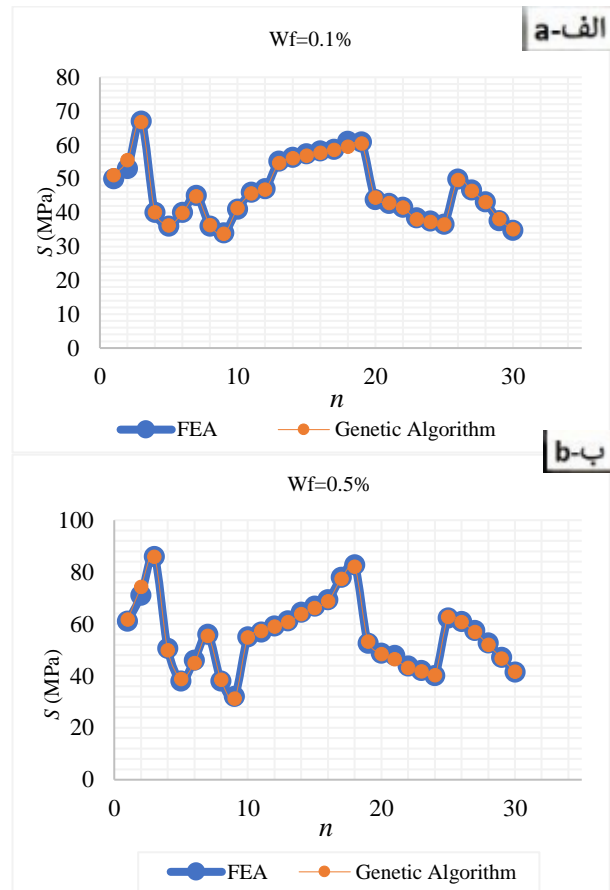


Fig. 10 Chart of observed and predicted strength values. a) weight fraction 0.1% and b) weight fraction 0.5%

شکل 10 نمودار مقادیر استحکام محاسبه‌شده و پیش‌بینی‌شده. الف) کسر وزنی 0.1 درصد و ب) کسر وزنی 0.5 درصد

همچنین مقدار اختلاف بین مقادیر واقعی (محاسبه شده در انسیس) و مقادیر پیش‌بینی‌شده توسط مدل ناچیز است. همان‌طور که در شکل 11 مشاهده می‌شود مقدار خطا در هر دو کسر وزنی از 5 درصد تجاوز نمی‌کند که این به این معنی است که مدل چندمقیاسی مبتنی بر الگوریتم ژنتیک توانایی خوبی در تخمین و پیش‌بینی استحکام نانوکامپوزیت دارد.

در ادامه ضریب همبستگی و مقدار ریشه میانگین مربعات خطا¹ بین داده‌های واقعی و داده‌های پیش‌بینی شده محاسبه می‌گردد که در شکل 12 ارائه گردیده است. ریشه میانگین مربعات خطا میزان خطای بین دو مجموعه داده را اندازه‌گیری می‌کند. همچنین ضریب همبستگی نیز، یکی از معیارهای مورد استفاده در تعیین همبستگی و ارتباط دو متغیر است. مقدار این ضریب از 1- تا 1 تغییر می‌کند؛ اگر این مقدار مثبت باشد به معنی ارتباط مستقیم و در

¹ root-mean-square error

توزیع فراوانی استحکام‌های پیش‌بینی‌شده، برای استخراج مقدار استحکام غالب در شکل 14 نمایش داده شده است. منظور از استحکام غالب، استحکامی است که بیشترین فراوانی را در داده‌های موجود داشته است. شکل 14 نشان می‌دهد که توزیع خروجی‌ها وسعت محدودی دارد و این از خصوصیات مثبت مدل‌سازی است. چنانچه قله‌ی نمودار فراوانی در حوزه‌ی میانگین استاندارد نباشد، نتایج دور از حدود قابل‌قبول قرار خواهند گرفت. در مدل‌سازی صورت گرفته، محدوده‌ی متوسط و غالب نتایج به یکدیگر نزدیک می‌باشند. با توجه به شکل 14 مشاهده می‌شود که مقدار استحکام غالب در کسر وزنی 0.1 و 0.5 درصد به ترتیب برابر 36.84 و 37.40 مگاپاسکال می‌باشد. همچنین مشاهده می‌شود که در کسر وزنی 0.1 درصد در حدود 90 درصد داده‌ها بین 35.18 و 37.67 مگاپاسکال و در کسر وزنی 0.5 درصد در حدود 94 درصد داده‌ها بین 34.80 و 38.70 مگاپاسکال است.

شایان‌ذکر است که این محاسبه با رایانه‌ای مجهز به پردازنده با سرعت 3.2 گیگاهرتز انجام پذیرفته است. و حدود 20 دقیقه برای کسر وزنی 0.1% و در حدود 21 دقیقه برای کسر وزنی 0.5% زمان برده است.

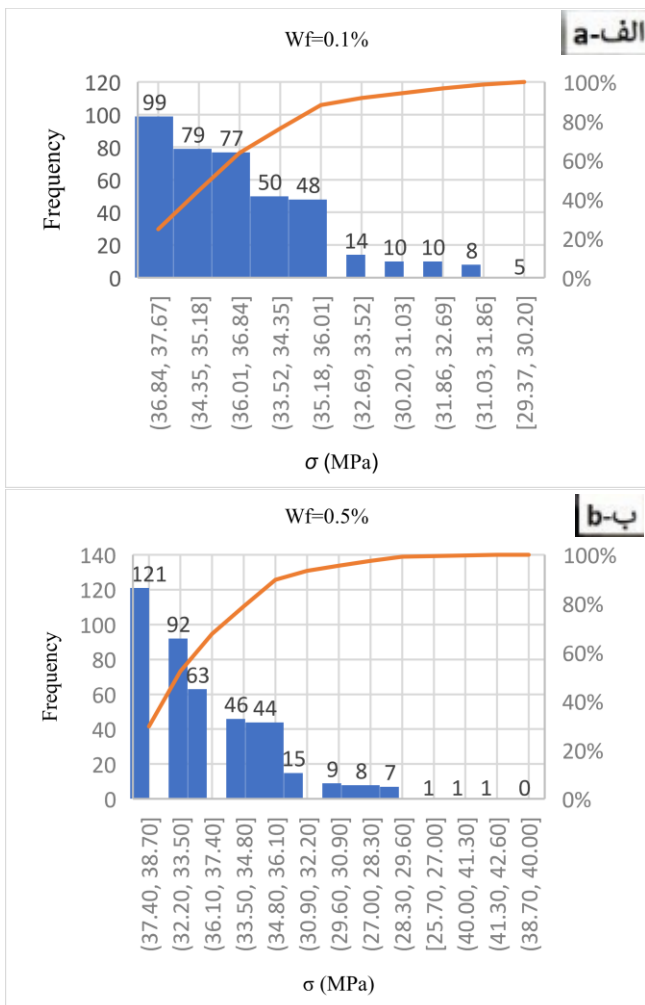


Fig. 14 Frequency distribution of modeling results for robustness. a) weight fraction 0.1% and b) weight fraction 0.5%
 شکل 14 توزیع فراوانی نتایج مدل‌سازی برای استحکام نهایی. الف) کسر وزنی 0.1 درصد و ب) کسر وزنی 0.5 درصد

در نهایت در جدول 2 مقادیر استحکام غالب و میانگین همراه با درصد اختلاف آن‌ها با داده‌های تجربی مشخص شده است. همان‌طور که مشاهده

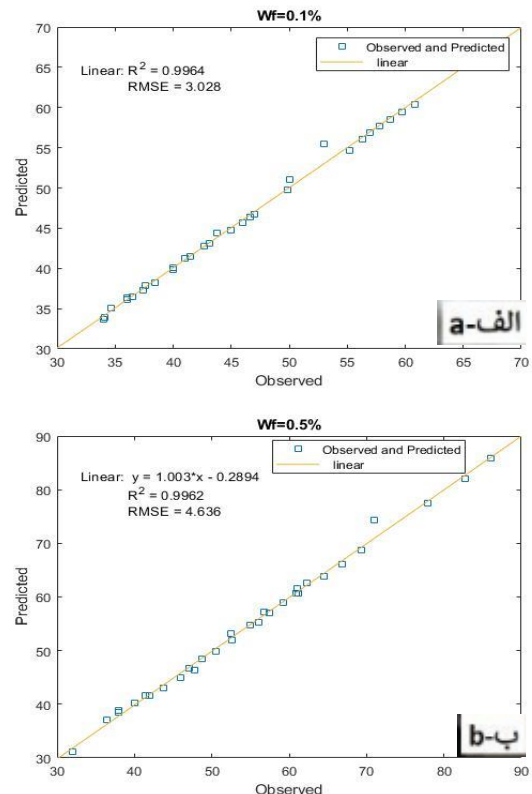


Fig. 12 Correlation coefficient between the observed values and the predicted values. a) weight fraction 0.1% and b) weight fraction 0.5%
 شکل 12 ضریب همبستگی بین مقادیر محاسبه‌شده و مقادیر پیش‌بینی‌شده. الف) کسر وزنی 0.1 درصد و ب) کسر وزنی 0.5 درصد

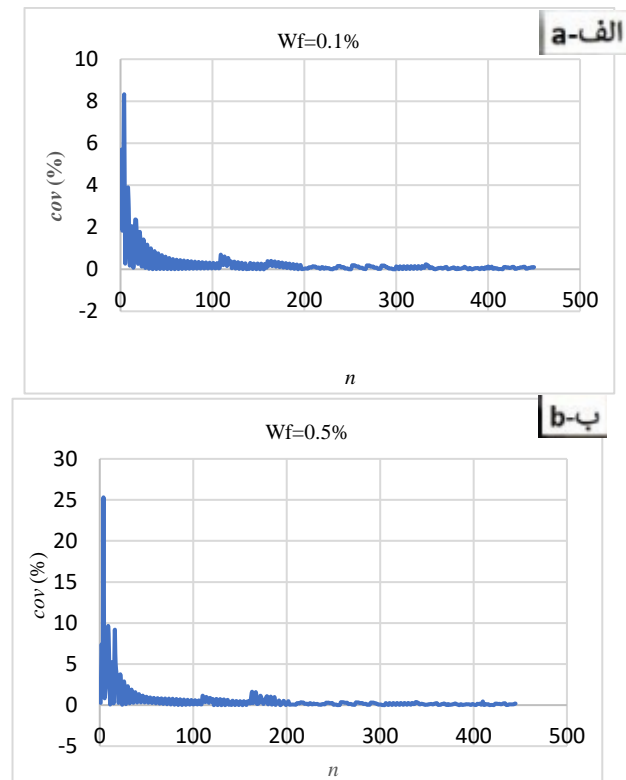


Fig. 13 Convergence trend of stochastic modeling. a) weight fraction 0.1% and b) weight fraction 0.5%
 شکل 13 همگرایی مدل‌سازی تصادفی. الف) کسر وزنی 0.1 درصد و ب) کسر وزنی 0.5 درصد

6-مراجع

- [1] Babazade, A., Hadad, M.J., Safarabadi, M., "Investigation of the Effect of Graphene Nano Plates and Carbon Nanotubes on the Improvement of Mechanical Properties of Aluminum Matrix Nanocomposites," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 7, No. 4, pp. 1197-1206, 2021.
- [2] Bavafa Bigdilou, M. Eslami-Farsani, R. and Ebrahimzhad-Khaljiri, H., "The Effect of Carbon Nanotubes on High Velocity Impact Behavior of Hybrid Kevlar- Ultrahigh Molecular Weight Polyethylene Fibers Composite with Interlayer Configuration," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 6, No. 4, pp. 533-540 2020.
- [3] Shahkarami, M. and Zeinedini, A., "Flexural Properties of 3d-Printed Hierarchical-Sinusoidal Corrugated Core Sandwich Panels with Natural Fiber Reinforced Skins," Polymers and Polymer Composites, Vol. 30, pp. 09673911221101299, 2022.
- [4] Pirouzfard, S. and Zeinedini, A., "Effect of Geometrical Parameters on the Flexural Properties of Sandwich Structures with 3d-Printed Honeycomb Core and E-Glass/Epoxy Face-Sheets," in Proceeding of Elsevier, pp. 2724-2738.
- [5] Espalin, D., Muse, D. W., MacDonald, E. and Wicker, R. B., "3d Printing Multifunctionality: Structures with Electronics," The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, Vol. 72, pp. 963-978, 2014.
- [6] Penumakala, P. K., Santo, J. and Thomas, A., "A Critical Review on the Fused Deposition Modeling of Thermoplastic Polymer Composites," Composites Part B: Engineering, Vol. 201, pp. 108336, 2020.
- [7] Niyogi, S., "Chemistry of Single-Walled Carbon Nanotubes," Accounts of Chemical Research, vol. 35, no. 12, pp. 1105-1113, 2002.
- [8] Sun, C., Liu, K., "Dynamic Torsional Buckling of a Double Walled Carbon Nanotube Embedded in an Elastic Medium," European Journal of Mechanics-A/Solids, Vol. 27, No. 1, pp. 40- 49, 2008.
- [9] Shofner, M., Lozano, K., Rodríguez-Macías, F. and Barrera, E., "Nanofiber-Reinforced Polymers Prepared by Fused Deposition Modeling," Journal of applied polymer science, Vol. 89, No. 11, pp. 3081-3090, 2003.
- [10] Gnanasekaran, K., Heijmans, T., Van Bennekom, S., Woldhuis, H., Wijnia, S., De With, G. and Friedrich, H., "3d Printing of Cnt-and Graphene-Based Conductive Polymer Nanocomposites by Fused Deposition Modeling," Applied materials today, Vol. 9, pp. 21-28, 2017.
- [11] Daver, F., Baez, E., Shanks, R. A. and Brandt, M., "Conductive Polyolefin-Rubber Nanocomposites with Carbon Nanotubes," Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, Vol. 80, pp. 13-20, 2016.
- [12] Kapoor, S., Goyal, M. and Jindal, P., "Enhanced Thermal, Static, and Dynamic Mechanical Properties of Multi-Walled Carbon Nanotubes-Reinforced Acrylonitrile Butadiene Styrene Nanocomposite," Journal of Thermoplastic Composite Materials, Vol. 35, No. 2, pp. 216-280, 2022.
- [13] Dorigato, A., Moretti, V., Dul, S., Unterberger, S. and Pegoretti, A., "Electrically Conductive Nanocomposites for Fused Deposition Modelling," Synthetic Metals, Vol. 226, pp. 7 -14, 2017.
- [14] Shokrieh, M. M. and Moshrefzadeh-Sani, H., "A Novel Laminate Analogy to Calculate the Strength of Two-Dimensional Randomly Oriented Short-Fiber Composites," Composites Science and Technology, vol. 147, pp. 22-29, Jul. 2017.
- [15] Shokrieh, M. M. and Moshrefzadeh-Sani, H., "On the Constant Parameters of Halpin-Tsai Equation," Polymer, vol. 106, pp. 14-20.
- [16] Rafiee, R., Zehtabzadeh, H. and Amini, M. R., "Predicting Mechanical Properties of 3d Printed Nanocomposites Using Multi-Scale Modeling," Additive Manufacturing, pp. 104055, 2024.
- [17] Esbati, A. H. and Irani, S., "Multiscale Modeling of Fracture in Polymer Nanocomposite Reinforced by Intact and Functionalized CNTs," In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 4, No. 1, pp. 35-46, 2017.

می‌شود؛ درصد خطا استحکام نهایی پیش‌بینی‌شده با کمک الگوریتم ژنتیک با داده‌های تجربی بسیار کم است. در کسر وزنی 0.1 درصد، مقادیر استحکام میانگین و استحکام غالب به ترتیب 2.8 و 3.19 درصد، با مقدار تجربی اختلاف دارند و در کسر وزنی 0.5 درصد مقادیر استحکام میانگین و استحکام غالب به ترتیب 3.3 و 0.61 درصد با مقدار تجربی اختلاف دارند.

جدول 2 مقایسه نتایج نظری و تجربی به دست آمده برای استحکام نهایی

Table 2 Comparison of theoretical and experimental results obtained for ultimate strength

کسر وزنی نانولوله کربنی (درصد)	استحکام (مگاپاسکال)	میانگین (درصد خطا)	مقدار غالب (درصد خطا)
0.1	35.70	36.70 (2.8%)	36.84 (3.19%)
0.5	37.17	38.40 (3.3%)	37.40 (0.61%)

5-جمع‌بندی

در این پژوهش استحکام رشته نانوکامپوزیت مناسب برای استفاده در روش ساخت افزایشی، به دو روش تئوری و تجربی مورد تحلیل قرار گرفته است. ابتدا رشته رزین خالص ABS و رشته نانوکامپوزیتی با 2 کسر وزنی مختلف، تولید شد. سپس رشته از جنس رزین خالص ABS تحت آزمون کشش قرار گرفت و خواص مکانیکی آن محاسبه شد. در ادامه رشته‌های نانوکامپوزیتی در 2 کسر وزنی مختلف تحت آزمون کشش قرار گرفته و استحکام آن‌ها محاسبه شد. در بخش مدل‌سازی، یک مدل چند مقیاسی توسعه یافت که دربرگیرنده سه مقیاس مایکرو، مزو و ماکرو می‌باشد. در مقیاس مایکرو تأثیر طول و جهت‌گیری نانولوله در رزین بر استحکام نهایی بررسی شد. در مقیاس مزو تأثیر توزیع نانولوله در رزین بر استحکام نهایی بررسی شد. در نهایت در مقیاس ماکرو با توجه به اینکه پارامترهای متغیر در مقیاس قبلی تصادفی بودند یک مدل‌سازی تصادفی با کمک الگوریتم ژنتیک انجام شد؛ همچنین با توجه به ماهیت تصادفی پارامترها و الزام به اینکه استحکام نهایی مستقل از تعداد داده‌های تصادفی باشد یک معیار همگرایی مناسب نیز تعریف شد و استحکام نهایی میانگین و غالب رشته نانوکامپوزیتی تخمین زده شد. ابتدا برای اینکه دقت مدل سنجیده شود؛ مقادیر استحکام نهایی تخمین زده شده توسط مدل مبتنی بر الگوریتم ژنتیک برای 30 حالت دلخواه دستی، در نرم‌افزار انسیس شبیه‌سازی شده‌اند. از مقایسه نتایج مقادیر اصلی و پیش‌بینی‌شده، مشاهده شد که مدل با دقتی بالا مقادیر استحکام نهایی را پیش‌بینی کرده است. در نهایت برای صحت‌سنجی نتایج به دست آمده از مدل‌سازی نظری، مقادیر استحکام نهایی به دست آمده از طریق مدل با نتایج تجربی مقایسه شدند؛ با توجه به درصد خطای ناچیز بین نتایج روش تجربی و نظری می‌توان گفت که مدل توسعه داده‌شده از دقت بسیار بالایی برخوردار است. مدل چندمقیاسی توسعه‌یافته بر مبنای الگوریتم ژنتیک علاوه بر دقت بسیار مناسب در تخمین استحکام رشته نانوکامپوزیت، از لحاظ زمان اجرا نسبت به مدل‌های تصادفی متداول بسیار مقرون به‌صرفه می‌باشد. از مزیت‌های بسیار مهم مدل توسعه داده‌شده، در نظر گرفتن ماهیت تصادفی پارامترهای غیرقطعی ناشی از فرآیند ساخت و در نظر گرفتن اثر تعاملی بین آن‌ها می‌باشد.

- [36] Lordi, V., Yao, N., , "Molecular Mechanics of Binding in Carbon-Nanotube-Polymer Composites," *Journal of Materials Research*, Vol. 15, No. 12, pp. 2770-2779, 2000.
- [37] Al-Saleh, M. H., Al-Saidi, B. A. and Al-Zoubi, R. M., "Experimental and Theoretical Analysis of the Mechanical and Thermal Properties of Carbon Nanotube/Acrylonitrile-Styrene-Butadiene Nanocomposites," *Polymer*, Vol. 89, pp. 12-17, 2016.
- [38] Kulkarni, M., Carnahan, D., Kulkarni, K., Qian, D. and Abot, J. L., "Elastic Response of a Carbon Nanotube Fiber Reinforced Polymeric Composite: A Numerical and Experimental Study," *Composites Part B: Engineering*, Vol. 41, No. 5, pp. 414-421, 2010.
- [39] Needleman, A., Borders, T., Brinson, L., Flores, V. and Schadler, L., "Effect of an Interphase Region on Debonding of a Cnt Reinforced Polymer Composite," *Composites Science and Technology*, Vol. 70, No. 15, pp. 2207-2215, 2010.
- [40] Tan, H., Jiang, L., Huang, Y., Liu, B. and Hwang, K., "The Effect of Van Der Waals-Based Interface Cohesive Law on Carbon Nanotube-Reinforced Composite Materials," *Composites Science and Technology*, Vol. 67, No. 14, pp. 2941-2946, 2007.
- [41] Rafiee, R., "Influence of Carbon Nanotube Waviness on the Stiffness Reduction of Cnt/Polymer Composites," *Composite Structures*, Vol. 97, pp. 304-309, 2013.
- [42] Allen, D. M., "Mean Square Error of Prediction as a Criterion for Selecting Variables," *Technometrics*, Vol. 13, pp. 469-475, 1971.
- [43] Allen, D. M., "The Relationship between Variable Selection and Data Augmentation and a Method for Prediction," *Technometrics*, Vol. 16, pp. 125-127, 1974.
- [44] Taguchi, G. "Introduction to Quality Engineering," *Asian Productivity Organization*, White Plains, New York, Vol. 198-210, 1986.
- [45] Taguchi, G. "System of Experimental Design: Engineering Methods to Optimize Quality and Minimize Cost," *White Plains, New York*, pp. 52-59, 1987.
- [46] Falkenauer, E., *Genetic Algorithms and Grouping Problems*, Chichester, England: John Wiley & Sons Ltd. New York, 1998.
- [47] Immanuel, S. D. and Chakraborty, U. K., "Genetic Algorithm: An Approach on Optimization," 2019 International Conference on Communication and Electronics Systems (ICCES), pp. 701-708, 2019.
- [48] Eklund, S. E., "A Massively Parallel Architecture for Distributed Genetic Algorithms," *Parallel Comput.*, Vol. 30, pp. 647-676, 2004.
- [49] Ghazfan, D. F., Srinivasan, B. and Nolan, M., "Massively Parallel Genetic Algorithms," *Citeseer*, 1994.
- [18] Arasteh, M., Ojaghnezhad, F., "Young Modulus and Longitudinal Damping Coefficient of the Composite Copper Reinforced by Carbon Nanotubes," *In Persian, Journal of Science and Technology of Composites*, Vol. 2, No.7, pp. 931-940, 2020.
- [19] Mozaffari, S., Panahizadeh, V., "Experimental Analysis of Impact Strength, Tensile Strength and Elastic Modulus of Polyamide 6 / Polyolefin Elastomer / Carbon Nanotubes / Carbon Nanotubes," *In Persian, Journal of Science and Technology of Composites*, Vol. 8, No. 3, pp. 1668-1676, 2022.
- [20] Bashiri Goodarzi, H. and Yarmohammad Tooski, M., "An Experimental Study of the Effects of Carbon Nanotube and Graphene Addition on the Impact Strength of Epoxy/Basalt Fiber Composite," *In Persian, Journal of Science and Technology of Composites*, Vol. 6, No.3, pp. 411-418, 2019.
- [21] Setoodeh, A.R. Sokhandani, N. and Zebarjad, S.M., "Theoretical and Experimental Study on the Effect of Multi-walled Carbon Nanotubes on Improving the Tensile Properties and Toughness of Vinyl Ester Resin," *In Persian, Journal of Science and Technology of Composites*, Vol. 5, No. 4, pp. 539-550, 2019.
- [22] Eslami-Farsani, R. Shahrabi-Farahani, A. Khosravi, H. and Zamani, M. R., "A Study on the Flexural Response of Grid Composites Containing Multi-Walled Carbon Nanotubes," *In Persian, Journal of Science and Technology of Composites*, Vol. 4, No. 1, pp. 101-108, 2017.
- [23] Akar, A. O., Yildiz, U. H., Tirkes, S., Tayfun, U. and Hacivelioglu, F., "Influence of Carbon Nanotube Inclusions to Electrical, Thermal, Physical and Mechanical Behaviors of Carbon-Fiber-Reinforced Abs Composites," *Carbon Letters*, Vol. 32, No. 4, pp. 987-998, 2022.
- [24] Tambrallimath, V., Keshavamurthy, R., Saravanabavan, D., Koppad, P. G. and Sethuram, D., "Mechanical Characterization of Pc-Abs Reinforced with Cnt Nanocomposites Developed by Fused Deposition Modelling," *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 1455, No. 1, pp. 012003, 2020.
- [25] Dul, S., Fambri, L. and Pegoretti, A., "Filaments Production and Fused Deposition Modelling of Abs/Carbon Nanotubes Composites," *Nanomaterials*, Vol. 8, No. 1, pp. 49, 2018.
- [26] Yang, L., Li, S., Zhou, X., Liu, J., Li, Y., Yang, M., Yuan, Q. and Zhang, W., "Effects of Carbon Nanotube on the Thermal, Mechanical, and Electrical Properties of Pla/Cnt Printed Parts in the Fdm Process," *Synthetic Metals*, Vol. 253, pp. 122-130, 2019.
- [27] Pinto, V., Ramos, T., Alves, S., Xavier, J., Tavares, P., Moreira, P. and Guedes, R. M., "Comparative Failure Analysis of Pla, Pla/Gnp and Pla/Cnt-CooH Biodegradable Nanocomposites Thin Films," *Procedia Engineering*, Vol. 114, pp. 635-642, 2015.
- [28] Asif, M., Ramezani, M., Khan, K. A., Khan, M. A. and Aw, K. C., "Experimental and Numerical Study of the Effect of Silica Filler on the Tensile Strength of a 3d-Printed Particulate Nanocomposite," *Comptes Rendus Mécanique*, Vol. 347, No. 9, pp. 615-625, 2019.
- [29] Yao, T., Zhang, K., Deng, Z. and Ye, J., "A Novel Generalized Stress Invariant-Based Strength Model for Inter-Layer Failure of Fff 3d Printing Pla Material", *Materials & Design*, Vol. 193, pp. 108799, 2020.
- [30] Rahmati, A., Heidari-Rarani, M. and Lessard, L., "A Novel Conservative Failure Model for the Fused Deposition Modeling of Polylactic Acid Specimens," *Additive Manufacturing*, Vol. 48, pp. 102460, 2021.
- [31] Zhao, Y., Chen, Y. and Zhou, Y., "Novel Mechanical Models of Tensile Strength and Elastic Property of Fdm Am Pla Materials: Experimental and Theoretical Analyses," *Materials & Design*, Vol. 181, pp. 108089, 2019.
- [32] Rafiee, R. and Zehtabzadeh, H., "Predicting the Strength of Carbon Nanotube Reinforced Polymers Using Stochastic Bottom-up Modeling," *Applied Physics A*, Vol. 126, No. 8, pp. 595, 2020.
- [33] Prasad, P. N., Mark, J. E. and Fai, T., "Polymers and Other Advanced Materials," *Plemun Press*, New York, 1995.
- [34] Richardson, T. L. and Lokensgard, E., "Industrial Plastics: Theory and Applications," *Cengage Learning*, 2004.
- [35] Kulich, D. M., Gaggari, S., Lowry, V. and Stepien, R., "Acrylonitrile-Butadiene-Styrene Polymers," *Encyclopedia of Polymer Science and Technology*, Vol. 1, 2002.