

بهینه‌سازی خواص نانوکامپوزیت زمینه آلومینیم به روش الگوریتم ژنتیک

محمدرضا دشت بیاض* و رضا اسماعیلی

بخش مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه شهید باهنر کرمان

(دریافت مقاله: ۱۳۹۲/۰۷/۱۷ - دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۲/۱۲/۲۵)

چکیده - در این پژوهش بر اساس نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، مدلی برای پیش‌بینی خواص الاستیک نانوکامپوزیت زمینه آلومینیم تقویت‌شده با ذرات کاربید سیلیسیم ایجاد شد. هم‌چنین دو مدل برای پیش‌بینی چگالی و قیمت نانوکامپوزیت پیشنهاد شد. سپس با استفاده از روش الگوریتم ژنتیک برای کمترین چگالی و قیمت و بیشترین خواص الاستیک، درصد بهینه کسر حجمی تقویت‌کننده به‌دست آمد. بر اساس نتایج به‌دست آمده از بهینه‌سازی، کسر حجمی بهینه تقویت‌کننده ۰/۴۴ به‌دست آمد. برای این کسر حجمی بهینه، به‌ترتیب مدول یانگ بهینه ۱۶۵/۸۹ گیگاپاسکال، مدول برشی بهینه ۱۱۱/۳۷ گیگاپاسکال، قیمت بهینه ۸/۷۵ دلار بر پوند و چگالی بهینه ۲/۹۲ گرم بر سانتی‌متر مکعب به‌دست آمد.

واژگان کلیدی: بهینه‌سازی، خواص الاستیک، نانوکامپوزیت، دینامیک مولکولی، الگوریتم ژنتیک

Optimizing Properties of Aluminum-Based Nanocomposites by Genetic Algorithm Method

M.R. Dashtbayazi* and R. Esmaeili

Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran

Abstract: Based on molecular dynamics simulation results, a model was developed for determining elastic properties of aluminum nanocomposites reinforced with silicon carbide particles. Also, two models for prediction of density and price of nanocomposites were suggested. Then, optimal volume fraction of reinforcement was obtained by genetic algorithm method for the least density and price, and the highest elastic properties. Based on optimization results, the optimum volume fraction of reinforcement was obtained equal to 0.44. For this optimum volume fraction, optimum Young's modulus, shear modulus, the price and the density of the nanocomposite were obtained 165.89 GPa, 111.37 GPa, 8.75 \$/lb and 2.92 gr/cm³, respectively.

Keywords: Optimization, Elastic Properties, Nanocomposite, Molecular Dynamics, Genetic Algorithm

*مسئول مکاتبات، پست الکترونیکی: dashtbayazi@uk.ac.ir

۱- مقدمه

نانوکامپوزیت‌ها^۱ مواد مرکبی هستند که حداقل یکی از فازهای تشکیل دهنده‌شان در ابعاد نانومتر باشد [۱]. این مواد با غلبه بر محدودیت‌های مواد مرکب سنتی (اجزاء در ابعاد میکرومتر) و مواد مرسوم یک پارچه، توانسته‌اند جایگزین مناسبی در صنایع مختلف به‌شمار آیند [۲]. نانوکامپوزیت‌های زمینه فلزی^۲ تقویت‌شده با ذرات سرامیکی به‌خاطر خواص مکانیکی عالی و قیمت مناسب مورد توجه پژوهشگران قرار دارند [۳]. ذرات کاربید سیلیسیم^۳ در مقیاس نانومتر، به‌عنوان تقویت‌کننده‌های بسیار مناسب برای ساخت انواع نانوکامپوزیت‌ها شناخته شده‌اند [۴]. از جمله دلایل مهم استفاده از ذرات نانومتری کاربید سیلیسیم می‌توان به ارزان بودن، در دسترس بودن، ایجاد خواص مکانیکی مطلوب، عدم واکنش غیر مطلوب با زمینه نانوکامپوزیت و تولید آسان نانوکامپوزیت با انواع روش‌های موجود اشاره نمود. از میان انواع نانوکامپوزیت‌های زمینه فلزی، نانوکامپوزیت‌های آلومینیم- کربید سیلیسیم دارای مقاومت به سایش بسیار بالا، استحکام، سفتی و سختی بالا هستند. پژوهش‌های مختلف نشان داده‌اند که در صورت استفاده بهینه از ذرات تقویت‌کننده در ابعاد زیر ۱۰۰ نانومتر و پراکندگی مناسب آن‌ها می‌توان به‌صورت هم‌زمان خواص مکانیکی را با انعطاف‌پذیری و چقرمگی افزایش داد [۵]. بیشتر صنایع مصرف‌کننده این نوع نانوکامپوزیت‌ها صنایع خودروسازی و هوافضا هستند [۶]. به‌طور نمونه از آن‌ها در تولید قطعاتی مانند دیسک ترمز، پوسته سیلندر، پیستون و شاتون استفاده شده است [۷].

خواص مختلف نانوکامپوزیت‌ها متأثر از روش تولید و اجزای سازنده‌ی آن‌هاست [۸]. ساخت نانوکامپوزیت‌ها با مشکلاتی همراه است و نیاز به صرف هزینه و زمان فراوان دارد در نتیجه به‌تنهایی بررسی تجربی رفتار فیزیکی و مکانیکی آن‌ها مقرون به‌صرفه نیست [۹]. در عمل، درک درست از ساختار این مواد و مدل‌کردن خواص آن‌ها پیش از ساخت، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است و می‌تواند در کاهش هزینه و زمان و

هم‌چنین هماهنگی با نیازهای کاربردی نقش به‌سزایی داشته باشد. از این‌روست که شبیه‌سازی رفتار فیزیکی و مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها، پیش از ساخت آن‌ها مورد توجه ویژه‌ای قرار دارد [۱۰]. روش‌های بسیاری برای پیش‌بینی رفتار مکانیکی نانومواد^۴ وجود دارند که یکی از آن‌ها روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی^۵ است. در سال‌های اخیر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌وفور در پیش‌بینی خواص مکانیکی، از جمله نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده با نانولوله‌های کربن و صفحات گرافن [۱۱ و ۱۲]، نانوکامپوزیت‌های گرافیت-اپوکسی [۱۳ و ۱۴] و نانوکامپوزیت‌های دیگر [۱۵ و ۱۶] استفاده شده است.

خواص نانوکامپوزیت‌ها تحت تأثیر عوامل بسیاری قرار دارد و بهینه‌سازی چندهدفه این خواص، کاری پیچیده است. از جمله روش‌های مرسوم که برای بهینه‌سازی خواص نانوکامپوزیت‌ها استفاده شده است می‌توان به روش الگوریتم ژنتیک اشاره نمود [۱۷ و ۱۸]. با توجه به قابلیت‌های روش الگوریتم ژنتیک در بهینه‌سازی چند هدفه، این روش برای حل مسائل بهینه‌سازی پیچیده از توانایی بالایی برخوردار است [۱۹]. به‌همین خاطر، در پژوهش کنونی از ترکیب یک مدل شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، که در پژوهش پیشین توسط نویسندگان [۲۰] برای سنجش خواص الاستیک استفاده شده بود، و هم‌چنین دو مدل برای سنجش قیمت و چگالی نانوکامپوزیت آلومینیم- کربید سیلیسیم، درصد بهینه تقویت‌کننده با هدف کمترین قیمت و چگالی، و بیشترین خواص الاستیک توسط روش الگوریتم ژنتیک به‌دست آمد.

۲- تشریح مساله

برای بهینه‌سازی خواص نانوکامپوزیت آلومینیم- کربید سیلیسیم، چهار عامل مدول یانگ (E)، مدول برشی (G)، چگالی (W) و قیمت (P) انتخاب شدند. برای پیش‌بینی تغییرات هر کدام از این عوامل با کسر حجمی فاز تقویت‌کننده کربید سیلیسیم، یک مدل پیشنهاد شده است. در ادامه با ترکیب

مدل‌های مربوط به پیش‌بینی چهار عامل مورد نظر در قالب یک تابع هزینه چندهدفه^۶ و به کمک روش الگوریتم ژنتیک، درصد بهینه کسر حجمی تقویت‌کننده به گونه‌ای پیدا شد که به‌طور هم‌زمان مدول یانگ و مدول برشی حداکثر و در مقابل چگالی و قیمت حداقل شوند.

۲-۱- مدل پیش‌بینی خواص الاستیک

برای استخراج روابط موجود بین مدول‌های یانگ و برشی و درصد کسر حجمی کاربید سیلیسیم، از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شد. جزئیات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به تفصیل در گزارش فعالیت‌های پژوهشی نویسندگان آمده است [۲۰ و ۲۱] که در این بخش برای روشن شدن روند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، جزئیات آن با استفاده از مقاله پیشین [۲۰] به اختصار گزارش می‌شود. در ابتدا، یک المان حجمی نمونه^۷ از اتم‌های ماده‌ی نانوکامپوزیت برای کسرهای حجمی مختلف کاربید سیلیسیم شبیه‌سازی شد. برای شبیه‌سازی از بسته نرم‌افزاری متن باز لمپس^۸ که در محیط برنامه‌نویسی به زبان C توسعه داده شده، استفاده شد [۲۲]. نمونه نانوکامپوزیت به صورت یک مکعب آلومینیوم تک بلور^۹ در نظر گرفته شد که درون آن مکعبی کوچک‌تر از کاربید سیلیسیم قرار داده شده است. علت انتخاب هندسه مکعبی برای المان حجمی نمونه، مکعبی بودن سلول واحد آلومینیوم و کاربید سیلیسیم بود. با تغییر ابعاد مکعب درونی از جنس کاربید سیلیسیم، درصد کسر حجمی تقویت‌کننده تغییر داده شد. از آنجا که خواص الاستیک مواد، جزو خواص شدتی^{۱۰} است، مستقل از حجم و اندازه بوده، غیرحساس به عیوب ریزساختاری مواد است و با مشتق دوم انرژی پتانسیل^{۱۱} پیوند بین اتم‌ها متناسب است [۲۳]. هم‌چنین با فرض این که ساختار بلوری نانوکامپوزیت به صورت کامل و بدون عیب^{۱۲} ساخته شده باشد می‌توان با تقریب مناسبی خواص الاستیک مکعب یا همان المان حجمی نمونه مدل‌شده را به ابعاد بزرگ تعمیم داد. هدف از شبیه‌سازی خواص الاستیک نانوکامپوزیت،

$$\begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \\ t_{23} \\ t_{31} \\ t_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ g_{23} \\ g_{31} \\ g_{12} \end{bmatrix} \quad (1)$$

آرایه سمت چپ عناصر تانسور تنش (s_{ij}) است و در سمت راست، ماتریس سفتی (C_{ij}) و عناصر تانسور کرنش شامل ϵ و γ نشان داده شده‌اند. در حالت کلی ماتریس سفتی دارای ۲۱ ثابت مستقل است. پس از قرار دادن اتم‌ها در جای خود در نرم‌افزار لمپس، المان مکعبی نمونه در سه جهت x ، y ، z و در سه صفحه‌ی xy ، xz ، yz و به ترتیب تحت تغییرشکل‌های فشاری، کششی و برشی قرار داده شدند. پس از اعمال تنش در جهت‌های مربوطه، روش حداقل انرژی پتانسیل بر روی سیستم اعمال شده تا سیستم به حالت تعادل خود برسد. در این روش اندازه و شکل سیستم در گام‌های زمانی تغییر کرده‌اند. بنابراین چیدمان نهایی سیستم در حالت کمترین انرژی پتانسیل اتم‌ها قرار گرفته است. در هرجهتی که تغییر شکل اعمال شده، تنش‌های وارد بر نمونه توسط نرم‌افزار محاسبه می‌شود. نرم‌افزار لمپس قادر است در هر لحظه مولفه‌های تانسور تنش را محاسبه و فراخوانی کند. سپس با تقسیم کردن تانسور تنش بر کرنش اعمال شده، ثابت‌های ماتریس سفتی در یک ستون محاسبه می‌شود. بدین ترتیب با هر شش بار تغییر شکل، شش ستون ماتریس سفتی محاسبه می‌شود. به عنوان مثال برای جهت x ، رابطه ۱ به صورت خلاصه به شکل رابطه ۲ نوشته می‌شود.

$$\begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \\ t_{23} \\ t_{31} \\ t_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & & & & & \\ C_{21} & \dots & & & & \\ C_{31} & \dots & & & & \\ C_{41} & \dots & & & & \\ C_{51} & & & & & \\ C_{61} & & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2)$$

می‌شود [۲۴].

$$[S] = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{n}{E} & -\frac{n}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{n}{E} & \frac{1}{E} & -\frac{n}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{n}{E} & -\frac{n}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} \end{bmatrix} \quad (۷)$$

در پایان خواص الاستیک ماده از روی ثابت‌های ماتریس نرمی به صورت زیر استخراج شده‌اند:

$$E = 1/S_{11} \quad (۸)$$

$$G = 1/S_{44}$$

$$n = -S_{12} \times S_{11}$$

در ادامه مدل تخمین مدول یانگ (E) با استفاده از نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به این صورت رابطه ۹ بیان شده است [۲۰].

$$E = 210.8V_f + 73.14 \quad (۹)$$

که V_f کسر حجمی تقویت کننده است.

مدل پیش‌بینی مدول برشی (G) با استفاده از نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در شکل ۵ به صورت رابطه ۱۰ بیان شده است [۲۰].

$$G = 177.7V_f + 33.19 \quad (۱۰)$$

۲-۲- مدل‌های پیش‌بینی چگالی و قیمت

برای ساده‌سازی مساله فرض شده است که قیمت نانوکامپوزیت در همه کسرهای حجمی تقویت کننده، جمع قیمت مواد اولیه تشکیل دهنده آن بوده است. چگالی و قیمت انتخابی برای آلومینیم و کاربید سیلیسیم در جدول ۱ نشان داده شده است. به دلیل این که تغییرات چگالی و قیمت برای مواد، ماهیتی خطی دارند تغییرات چگالی و قیمت ماده نانوکامپوزیت نسبت به کسر حجمی تقویت کننده نیز خطی است. بنابر این چگالی (W) یک واحد حجمی نانوکامپوزیت با کسر حجمی تقویت کننده‌ی V_f به صورت رابطه ۱۱ به دست

پس از اعمال کرنش در جهت x، شش تنش موجود بر روی نمونه محاسبه شده، ثابت‌های ستون اول ماتریس سفتی به شکل رابطه ۳ به دست آمده است.

$$\begin{aligned} C_{11} &= s_1/e_1 \\ C_{21} &= s_2/e_1 \\ C_{31} &= s_3/e_1 \\ C_{41} &= t_{23}/e_1 \\ C_{51} &= t_{31}/e_1 \\ C_{61} &= t_{12}/e_1 \end{aligned} \quad (۳)$$

سپس از ماتریس سفتی (C) معکوس گرفته شده تا این که ماتریس نرمی 14 (S) از رابطه ۴ به دست آمده است.

$$[S] = [C]^{-1} \quad (۴)$$

با توجه به این که ثابت‌های ماتریس نرمی، به مدول یانگ (E)، مدول برشی (G) و ضریب پواسون (ν) وابسته هستند می‌توان ثابت‌های ماتریس نرمی را برای نمونه نانوکامپوزیت محاسبه نمود. ارتباط ماتریس نرمی یک ماده‌ی اورتوتروپیک^{۱۵} با ثابت‌های الاستیک در جهت‌های مختلف، در رابطه ۵ نشان داده شده است [۲۴].

$$[S] = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_1} & -\frac{n_{21}}{E_2} & -\frac{n_{31}}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{n_{12}}{E_1} & \frac{1}{E_2} & -\frac{n_{32}}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{n_{13}}{E_1} & -\frac{n_{23}}{E_2} & \frac{1}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{31}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} \end{bmatrix} \quad (۵)$$

چیدمان اتم‌ها در المان حجمی مکعبی نمونه در سه جهت اصلی x، y، و z یکسان است. بنابراین خواص الاستیک ماده در این سه جهت، به دلیل تقارن بلوری یکسان است. در نتیجه خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} E_1 &= E_2 = E_3 = E \\ G_{23} &= G_{31} = G_{12} = G \\ n_{21} &= n_{12} = n_{31} = n_{13} = n_{32} = n_{23} = n \end{aligned} \quad (۶)$$

این حالت، حالت خاصی از مواد به نام اورتوتروپیک مکعبی^{۱۶} است. بنابراین رابطه ۵ به شکل رابطه ۷ نوشته

جدول ۱- چگالی و قیمت آلومینیم و کاربید سیلیسیم

جز	چگالی (gr/cm ³)	قیمت (\$/lb)	مرجع
آلومینیم	۲/۷	۱/۱۵	[۲۵]
کاربید سیلیسیم	۳/۲۱	۴	[۲۶]

جدول ۲- دامنه تغییرات مدول یانگ، مدول برشی، وزن و قیمت

متغیر	دامنه
مدول یانگ (GPa)	[۷۳/۱۴ ، ۲۸۳/۹۴]
مدول برشی (GPa)	[۳۳/۱۹ ، ۲۱۰/۸۹]
وزن (gr)	[۲/۷ ، ۳/۲۱]
قیمت (\$)	[۳/۱۰۵ ، ۱۵/۹۴۵]

آمده است:

$$W = 3.21V_f + 2.7(1 - V_f) \quad (۱۱)$$

همچنین برای تخمین قیمت نانوکامپوزیت (P) از مدول زیر استفاده شده است.

$$P = V_f \times 3.21 \times 4 + (1 - V_f) \times 2.7 \times 1.15 \quad (۱۲)$$

با ساده سازی روابط ۱۱ و ۱۲، مدول های تخمین چگالی و قیمت به صورت روابط ۱۳ و ۱۴ به دست آمده است.

$$W = 0.51V_f + 2.7 \quad (۱۳)$$

$$p = 12.84V_f + 3.105 \quad (۱۴)$$

لازم به ذکر است که واحد چگالی، گرم بر سانتیمتر مکعب و واحد قیمت، دلار بر پوند انتخاب شده است (داده های جدول ۱ می توانند هر نوع ابعاد و قیمتی داشته باشند، بدون اینکه در شکل کلی مدل مشکلی ایجاد نماید). از آنجایی که تبدیل پوند به گرم یک تبدیل خطی است و از طرفی برای بهینه سازی لازم بوده که نسبت چگالی و قیمت های آلومینیم و کاربید سیلیسیم محاسبه شوند، می توان فرض معادل زیر را پذیرفت:

$$\frac{4 \text{ \$/lb SiC}}{1.15 \text{ \$/lb Al}} = \frac{4 \text{ \$/gr SiC}}{1.15 \text{ \$/gr Al}} \quad (۱۵)$$

۲-۳- تعریف تابع هزینه چند هدفه

برای جست و جوی درصد بهینه ی کسر حجمی تقویت کننده V_f ، برای هر کدام از مدل های E ، G ، W و P مقادیر هدف به ترتیب E_t ، G_t ، W_t و P_t در نظر گرفته شده اند. کسر حجمی بهینه در جایی رخ می دهد که چهار مدل روابط ۹، ۱۰، ۱۳ و ۱۴ برای آن کسر حجمی، با مقادیر هدفشان کمترین اختلاف را داشته باشند. به همین خاطر تابع هزینه چند هدفه (C) به صورت مجموع مربع تفاضل مقدار حاصل از مدل و مقدار بهینه به صورت رابطه ۱۶ تعریف شده است.

$$C = (E - E_t)^2 + (G - G_t)^2 + (W - W_t)^2 + (P - P_t)^2 \quad (۱۶)$$

برای مثبت شدن مقادیر تبدیل تفاضلات در عبارات رابطه ۱۶ از توان دوم استفاده شده است. با توجه به روابط ۹، ۱۰، ۱۳ و ۱۴ مشاهده می شود که دامنه تغییرات مقادیر E ، G ، W و P هم مرتبه و نرمال نیستند. بازه تغییرات E ، G ، W و P در جدول ۲ نشان داده شده است. اگر مقادیر این چهار متغیر به همان صورت بدون تغییر در رابطه ی ۱۶ قرار داده می شدند خطای حاصل از محاسبه E و G ، خطای حاصل از W و P را تحت تاثیر قرار می داد و فرایند بهینه سازی با مشکل مواجه می شد. بنابراین، برای نرمال سازی روابط ۹، ۱۰، ۱۳ و ۱۴، روابط ۹ و ۱۰ بر عدد ۱۰۰ و نیز رابطه ۱۳ بر عدد ۵ تقسیم شدند و رابطه چگالی ۱۴ بدون تغییر باقی مانده است. جدول ۳ مقادیر اولیه ی E ، G ، W و P پیش و پس از نرمال سازی برای اجزای آلومینیم و کاربید سیلیسیم را نشان می دهد. در پایان مدل های پیش بینی مدول یانگ، مدول برشی، چگالی و قیمت بیان شده در روابط ۱۱، ۱۲، ۱۴ و ۱۵ پس از نرمال سازی به صورت رابطه ۱۷ به دست آمده اند.

$$E = 2.108V_f + 0.7314$$

$$G = 1.777V_f + 0.3319$$

$$W = 0.51V_f + 2.7$$

$$p = 2.56V_f + 0.624 \quad (۱۷)$$

جدول ۳- مقادیر E، G، W و P پیش و پس از نرمال سازی

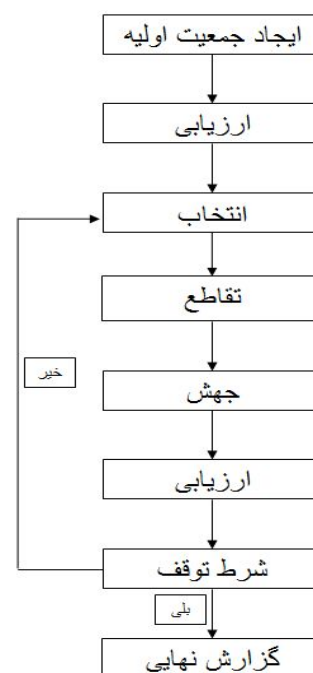
متغیر	E (Gpa)		G (Gpa)		P (\$)		W (gr)	
	پیش	پس	پیش	پس	پیش	پس	پیش	پس
آلومینیم	۷۰	۰/۷	۲۶	۰/۲۶	۳/۱۰۵	۰/۶۲۱	۲/۷	۲/۷
کارباید سیلیسیوم	۲۸۸/۶	۲/۸۸۶	۲۲۵	۲/۲۵	۱۲/۸۴	۲/۵۶۸	۳/۲۱	۳/۲۱
دامنه	۲۱۸/۶	۲/۱۸۶	۱۹۹	۱/۹۹	۹/۷۳۵	۱/۹۴۷	۰/۵۱	۰/۵۱

۳- تشریح روش الگوریتم ژنتیک

شکل ۱ جریان‌نمای^{۱۷} روش الگوریتم ژنتیک را نشان می‌دهد. در شکل ۲ در هر کدام از ژن‌های کروموزوم انتخابی مقادیر E، G، W و P قرار گرفته‌اند. برای ارزیابی هر کروموزوم مقادیر عددی روابط ۱۷ در رابطه ۱۶ به‌عنوان تابع هزینه چند هدفه قرار داده می‌شود. برای اجرای کامل الگوریتم ژنتیک و تولید جمعیت جدید از هر نسل، از سه عملگر انتخاب^{۱۸}، تقاطع^{۱۹} و جهش^{۲۰} استفاده شده است. در مرحله انتخاب، افراد شایسته انتخاب می‌شوند. هم‌چنین در مورد تعداد فرزندان جدید و تعداد افرادی که باید از جمعیت خارج شوند و تعداد کروموزوم‌های انتخابی برای تقاطع تصمیم‌گیری می‌شود. روش‌های زیادی برای انتخاب وجود دارد که یکی از پرکاربردترین آن‌ها انتخاب به‌روش چرخ رولت است [۲۷]. در این روش قسمتی از چرخ رولت، متناسب با شایستگی آن کروموزوم، به هر کروموزوم اختصاص داده شده، سپس چرخ چرخانده شده است تا والدین برای تولید فرزندان انتخاب شوند. بنابراین کروموزوم‌های بهتر، به دلیل داشتن سهم بیش‌تری از چرخ، شایستگی بیش‌تری برای انتخاب داشته‌اند. بنابراین اگر تابع برازندگی کروموزوم f_i با f_i نشان داده شود، احتمال انتخاب آن کروموزوم یعنی p_i به این صورت رابطه ۱۸ محاسبه شده است [۲۵].

$$p_i = \frac{f_i}{\sum_{i=1}^n f_i} \quad (18)$$

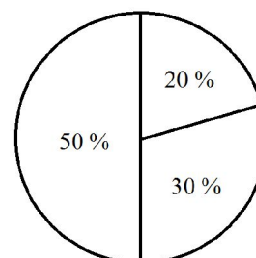
که n تعداد کروموزوم‌های جمعیت است. با داشتن سه کروموزوم با برازندگی ۲۰، ۳۰ و ۵۰ درصد، چرخ رولت مورد استفاده برای این سه کروموزوم در شکل ۳ نشان داده شده



شکل ۱- جریان‌نمای روش الگوریتم ژنتیک

E	G	W	P
---	---	---	---

شکل ۲- کروموزوم استفاده شده در بهینه‌سازی



شکل ۳- چرخ رولت

جدول ۴- عوامل انتخابی الگوریتم ژنتیک

عامل	مشخصات
طول کروموزوم	۴
تعداد جمعیت (نسل)	۱۲
تعداد فرزند جدید	۶
نرخ جهش	۰/۲
کروموزوم‌های جهش یافته	۱۰
روش انتخاب	چرخ رولت

است. در مورد این پژوهش چون از تابع هزینه چند هدفه رابطه ۱۶ استفاده شده است یعنی کروموزوم با هزینه‌ی (C) کم‌تر مورد توجه بوده است در نتیجه تابع احتمال انتخاب شدن p_i به صورت رابطه ۱۹ مورد استفاده قرار گرفته است.

$$p_i = \frac{1/C_i}{\sum_{i=1}^n 1/C_i} \quad (19)$$

عملگر تقاطع یک عملگر دوتائی^{۲۱} است یعنی به دو کروموزوم به‌عنوان والدین نیاز دارد تا با ترکیب آن‌ها بعضی از ویژگی‌های آن‌ها را به فرزندان انتقال دهد. از میان روش‌های موجود برای عملگر تقاطع، روش اختلاط^{۲۲} مورد استفاده قرار گرفته است [۲۸]. در این روش دو کروموزوم جدید از ترکیب ژن‌های والدین تولید می‌شوند. بدین ترتیب که یک ژن مشترک از پدر و مادر به‌صورت تصادفی انتخاب می‌شود و ژن فرزند که p_{new} نامیده شده است توسط همان ژن از والدین به‌صورت رابطه ۲۰ محاسبه می‌شود [۲۶].

$$p_{new} = b p_{nm} + (1-b) p_{nf} \quad (20)$$

که β یک عدد تصادفی در بازه $[0, 1]$ ، p_{nm} ژن n ام کروموزوم مادر و p_{nf} ژن n ام کروموزوم پدرند. فرزند دوم مکمل فرزند اول است و به‌سادگی با جایگزین کردن $1-\beta$ به‌جای β قابل محاسبه است. سه مقدار β مساوی ۰، ۱ و ۰/۵ هستند. اگر $\beta = 1$ باشد ژن پدر (p_{nf}) ناپدید می‌شود و ژن مادر (p_{nm}) تمام خواصش را به فرزند انتقال می‌دهد و بر عکس. اگر $\beta = 0/5$ باشد نتیجه فقط میانگین دو ژن پدر و مادر خواهد بود و هر دو

فرزند یکسان خواهند شد.

عملگر جهش بر روی یک کروموزوم عمل می‌کند. بدین ترتیب که یک تغییر محلی در آن کروموزوم ایجاد می‌کند به این امید که به یک جواب بهتر منتهی شود [۲۹]. عامل مهم در جهش، p_m یا نرخ جهش^{۲۳} است که احتمال جهش بر روی تمامی ژن‌های کروموزوم‌های جمعیت را نشان می‌دهد. در این پژوهش مقدار $p_m = 0/2$ انتخاب شده است. بنابراین با داشتن ۱۲ عضو در هر نسل که هر عضو یا کروموزوم، خود دارای ۴ ژن بوده است تعداد ژن‌های مورد جهش قرار گرفته در هر نسل $10 \approx 4 \times 12 \times 0/2$ خواهد بود. عوامل الگوریتم ژنتیک و مقادیر انتخابی برای هر عامل در جدول ۴ نشان داده شده‌اند.

۳-۱- اعمال روش الگوریتم ژنتیک

در مسئله حاضر، هر کروموزوم ۴ ژن داشته است که در واقع همان مقادیر E, G, W و P هستند. برای ارزیابی یک کروموزوم، مقدار کسر حجمی تقویت‌کننده V_f در یک حلقه از ۰ تا ۱ تغییر داده شده‌اند و برای هر مقدار V_f ، مقادیر E, G, W و P از روابط ۱۷ محاسبه شده‌اند. سپس مقادیر محاسبه شده از روابط ۱۷ در رابطه‌ی ۱۶ به‌عنوان تابع هزینه چند هدفه قرار داده شده است. هدف از بهینه‌سازی، پیدا کردن ترکیب بهینه‌ی E, G, W و P بوده که برای آن مقدار تابع هزینه نسبت به مقدار کسر حجمی تقویت‌کننده V_f حداقل می‌شود. هر جمعیت ۱۲ عضو داشته است که در هر نسل ۶ فرزند تولید شده‌اند. سپس ۶ فرزند جدید به‌همراه ۱۲ عضو حاضر وارد تابع هزینه و ارزش‌گذاری می‌شوند و به‌ترتیب از بهتر (تابع هزینه کم‌تر) به بدتر (تابع هزینه بیش‌تر) مرتب می‌گردند. ۶ عضو آخر که هزینه‌های بیش‌تری دارند از جمعیت حذف می‌شوند.

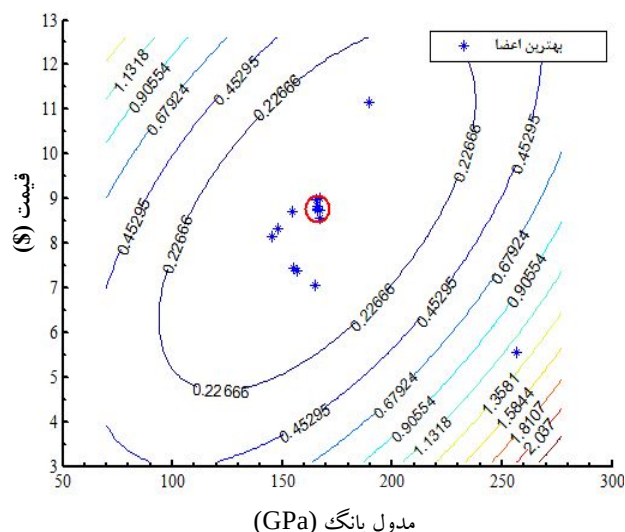
۴- نتایج و بحث

از آنجایی که در این پژوهش هر کروموزوم ۴ ژن دارد، فضای جست‌وجو یک فضای ۴ بعدی است و امکان نمایش هم‌زمان

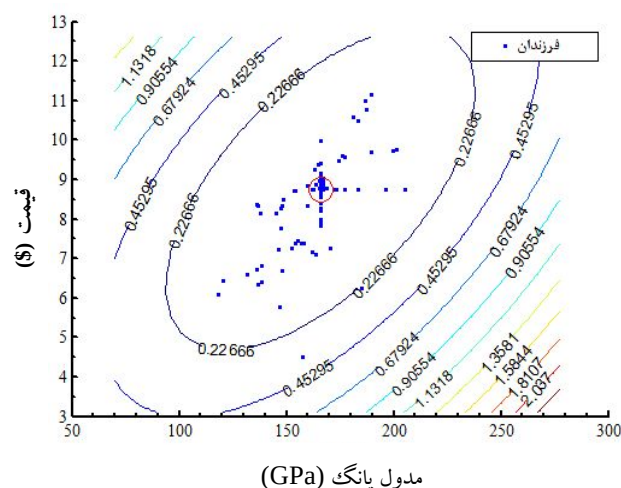
هر ۴ بعد ممکن نیست. ضمن این که هر نقطه در این فضای ۴ بعدی مربوط به یک نقطه در بعد پنجم یعنی بعد تابع هزینه چند هدفه است. شکل ۴، بهترین اعضای هر نسل به همراه کانتورهای سطوح مدول یانگ و قیمت بر حسب تابع هزینه چند هدفه (C) را نشان می‌دهد. همان‌گونه که در نمودار شکل ۴ مشاهده می‌شود در صورتی یک کروموزوم جهش پیدا نکرده است که از بهترین کروموزوم نسل خود بهتر بوده باشد. از این‌روست که مشاهده می‌شود که بهترین کروموزوم‌ها دچار فراز و نشیب نمی‌شوند و فقط هنگامی جای خود را به کروموزوم دیگری داده‌اند که کروموزوم جدید از آن‌ها به جواب بهینه نزدیک‌تر بوده است.

شکل ۵ فرزندان تولید شده در صفحه مدول یانگ و قیمت را نشان می‌دهد. همان‌گونه که از نمودار شکل ۵ مشاهده می‌شود چرخ رولت برای والدین شدن کروموزوم‌های ضعیف‌تر، شانس کم‌تری در نظر گرفته است. بنابراین از والدین قوی‌تر، فرزندان بیش‌تری تولید شده است. از طرفی، چون والدین قوی‌تر به دره‌های فضای جست‌وجو (تابع هزینه کم‌تر) نزدیک‌ترند فرزندان متولد شده در دره‌ها حضور بیش‌تری دارند.

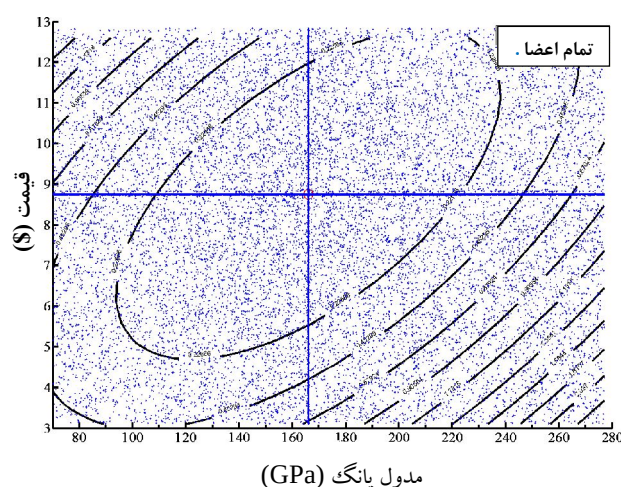
شکل ۶ تمام اعضای جمعیت به‌کار رفته در حین اجرای الگوریتم بهینه‌سازی را نشان می‌دهد. همان‌گونه که در نمودار شکل ۶ مشاهده می‌شود جمعیت بر روی قسمت‌های پائین‌تر سطح جواب، تراکم بیش‌تری دارد. تراکم مذکور به شکل صلیب در شکل ۶ نشان داده شده است. در واقع این صلیب حداقل‌های محلی را نشان می‌دهد. هم‌چنین اهمیت عملگر جهش در نمودار شکل ۶، مشاهده می‌شود، زیرا همان‌گونه که در نمودار شکل ۵ مشاهده می‌شود بیش‌تر فرزندان در مکان‌های عمیق تولید شده‌اند و این عملگر جهش است که از هم‌گرا شدن به حداقل‌های محلی جلوگیری کرده است و در صورتی که دره‌ها یا قله‌های بهینه‌تری وجود داشته باشد می‌تواند آن‌ها را پیدا نماید.



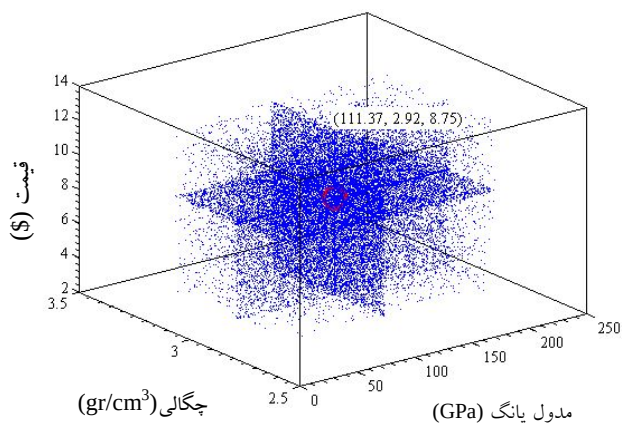
شکل ۴- بهترین اعضای هر نسل در صفحه مدول یانگ و قیمت



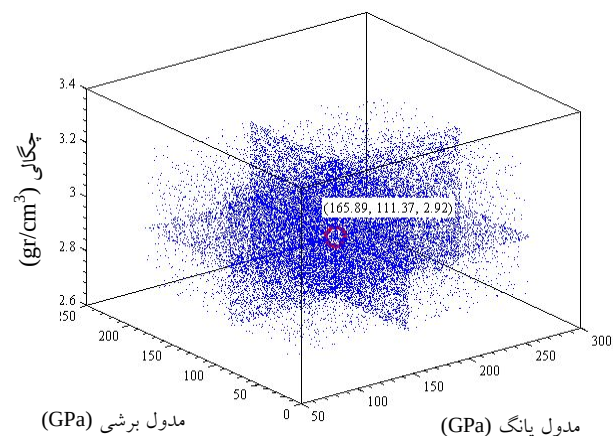
شکل ۵- فرزندان تولید شده در صفحه مدول یانگ و قیمت



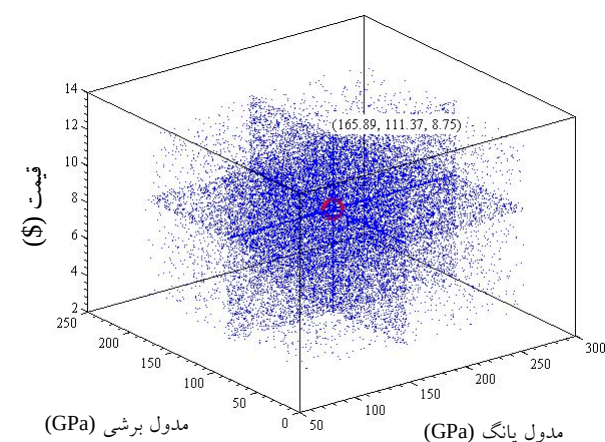
شکل ۶- تمام اعضای جمعیت در صفحه مدول یانگ و قیمت



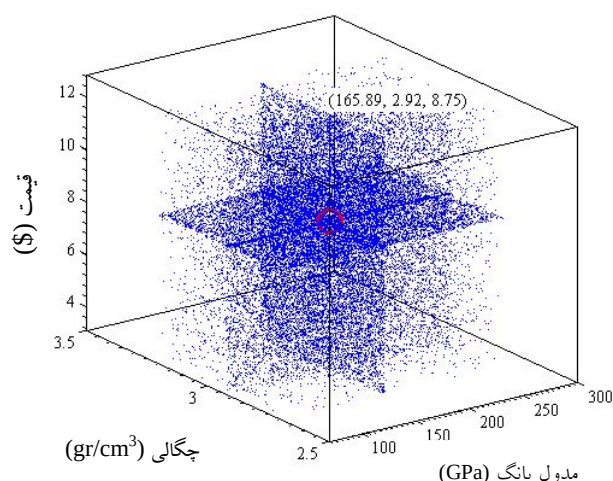
شکل ۱۰- اعضای همه نسل‌ها در فضای مدول برشی، چگالی و قیمت



شکل ۷- اعضای همه نسل‌ها در فضای مدول یانگ، مدول برشی و چگالی



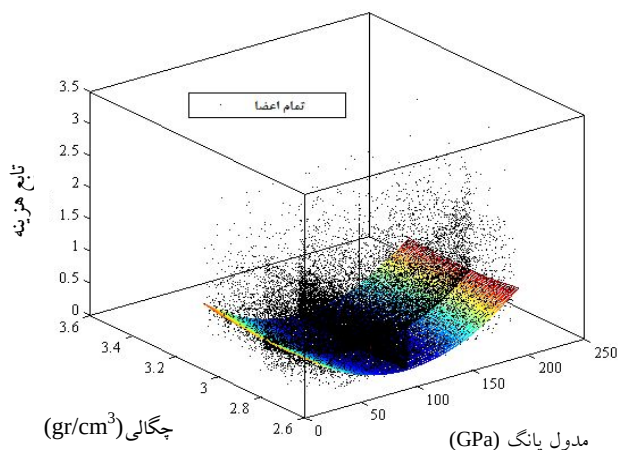
شکل ۸- اعضای همه نسل‌ها در فضای مدول یانگ، مدول برشی و قیمت



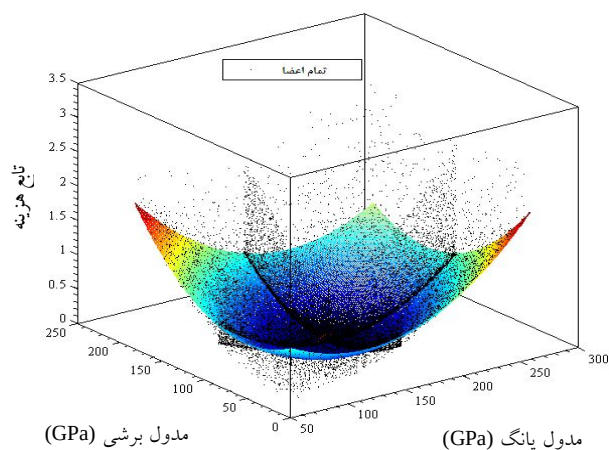
شکل ۹- اعضای همه نسل‌ها در فضای مدول یانگ، چگالی و قیمت

نمودارهای شکل‌های ۷ تا ۱۰ تمام اعضای جمعیت در همه نسل‌ها از ابتدای اجرای برنامه بهینه‌سازی تا انتهای آن را در فضای ۳ بعدی نمایش می‌دهند. در این شکل‌ها فقط مکان کروموزوم‌ها در فضای سه بعدی نمایش داده شده است. از روی تراکم نقاط در نمودارهای شکل‌های ۷ تا ۱۰ می‌توان ارزش کروموزوم‌ها را دریافت. هر چه تراکم نقاط بیشتر باشد، کروموزوم‌های آن منطقه با ارزش‌ترند. هم‌چنین نقطه بهینه نهایی در نمودارهای شکل‌های ۷ تا ۱۰ با یک حلقه قرمز رنگ نمایش داده شده است.

نمودارهای شکل‌های ۱۱ تا ۱۴ تمامی اعضای تمام نسل‌ها از ابتدای اجرای برنامه بهینه‌سازی تا انتهای آن را در فضای سه بعدی نشان می‌دهد. در این حالت دو بعد اول از ژن‌ها انتخاب شده‌اند و بعد سوم ارزش کروموزوم‌ها است. سطوح نمایش داده شده در شکل‌های ۱۱ تا ۱۴، با ثابت نگاه داشتن ۲ ژن دیگر که نمایش داده نشده‌اند در مقدار بهینه، رسم شده‌اند. مثلاً برای نمودار شکل ۱۱ بدین ترتیب عمل شده است که مقادیر چگالی W ، و قیمت P ، در مقدار بهینه ثابت نگه داشته شده، با تغییر مدول یانگ E ، و مدول برشی G ، مقادیر تابع هزینه چند هدفه، محاسبه و به صورت یک سطح رسم شده است. در نتیجه همه کروموزوم‌ها بر روی این سطح قرار نگرفته‌اند، چون سطح برای E و G های مختلف و P و W های بهینه رسم شده است.



شکل ۱۴- سطح تغییرات مدول یانگ، چگالی و تابع هزینه به همراه اعضای همه نسل‌ها



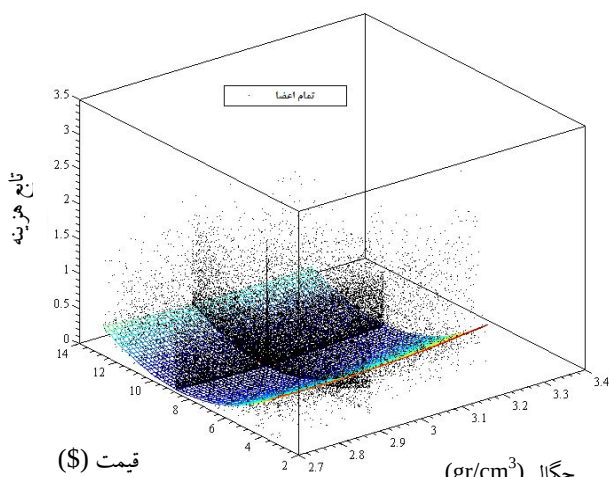
شکل ۱۱- سطح تغییرات مدول یانگ، مدول برشی و تابع هزینه به همراه اعضای همه نسل‌ها

به هر حال، کروموزوم‌ها در نمودارهای شکل‌های ۱۱ تا ۱۴، مسیر تکامل را نشان می‌دهند و W و P در طول مسیر تکامل کروموزوم‌ها هنوز بهینه نیستند و از ژن‌های مختلفی غیر از مقادیر بهینه تشکیل شده‌اند. تراکم کروموزوم‌ها در شکل‌های ۱۱ تا ۱۴ شبیه به یک دیواره شده است. هم‌چنین در نمودارهای ۱۱ تا ۱۴ مشاهده می‌شود که دیواره‌ها، همان حداقل‌های محلی هستند که کروموزوم‌ها را به سمت خود کشانده‌اند.

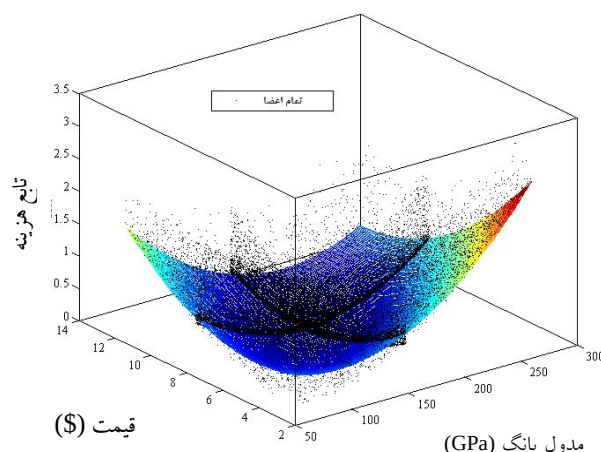
در نمودار شکل ۱۵ بهترین کروموزوم‌ها و دومین کروموزوم در هر نسل و مقدار تابع هزینه‌ی آن‌ها نمایش داده شده است. در نهایت مقادیر بهینه‌ی E، G، W و P در جدول ۵ نشان داده شده‌اند. نتیجه نهایی بهینه‌سازی نشان می‌دهد که کسر حجمی تقویت‌کننده‌ی مربوط به مقادیر بهینه، ۰/۴۴ است.

۵- نتیجه‌گیری

در پژوهش حاضر، خواص الاستیک ماده نانوکامپوزیت آلومینیم- کاربید سیلیسیم با کسرهای حجمی مختلف تقویت‌کننده کاربید سیلیسیم، به روش دینامیک مولکولی شبیه‌سازی و سپس یک مدل برای پیش‌بینی خواص الاستیک ارائه شد. برای تخمین چگالی و قیمت نانوکامپوزیت دو مدل



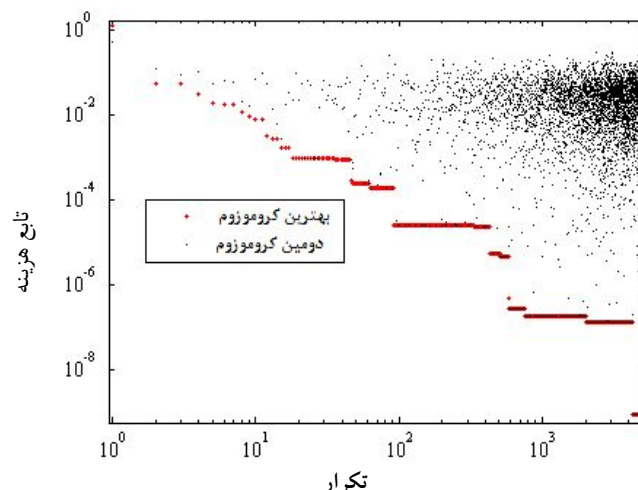
شکل ۱۲- سطح تغییرات چگالی، قیمت و تابع هزینه به همراه اعضای همه نسل‌ها



شکل ۱۳- سطح تغییرات مدول یانگ، قیمت و تابع هزینه به همراه اعضای همه نسل‌ها

جدول ۵- نتایج نهایی بهینه‌سازی با استفاده از الگوریتم ژنتیک

مقدار	مولفه
۱۶۵/۸۹	مدول یانگ (GPa)
۱۱۱/۳۷	مدول برشی (GPa)
۲/۹۲	چگالی (g/cm^3)
۸/۷۵	یمت (\$/lb)
۴۴	کسر حجمی تقویت‌کننده (%)
$۷/۵۵ \times ۱۰^{-۹}$	تابع هزینه چند هدفه (C)
۵۰۰۰	تعداد تکرارها



شکل ۱۵- بهترین کروموزوم و دومین کروموزوم در هر نسل

بیشترین مدول یانگ و مدول برشی بوده است. مقادیر بهینه برای چهار عامل مدول یانگ، مدول برشی، چگالی و قیمت به ترتیب $E = ۱۶۵/۸۹ \text{ GPa}$ ، $G = ۱۱۱/۳۷ \text{ GPa}$ ، $W = ۲/۹۳ \text{ gr/cm}^3$ و $P = ۸/۷۵ \text{ $/lb}$ به دست آمدند. کسر حجمی مورد نظر برای رسیدن به مقادیر بهینه $V_f = ۰/۴۴$ به دست آمد.

پیشنهاد شد. سپس برای بهینه‌سازی با ترکیب چهار مدل مدول یانگ، مدول برشی، چگالی و قیمت، یک تابع هزینه چند هدفه تعریف شد. با استفاده از تابع چند هدفه و روش الگوریتم ژنتیک مقدار بهینه کسر حجمی تقویت‌کننده به دست آمد. هدف از بهینه‌سازی، دستیابی به کمترین چگالی و قیمت در برابر

واژه‌نامه

1. nano-composites
2. metal matrix nano-composites
3. silicon carbide (SiC)
4. nano-materials
5. molecular dynamic simulation
6. multi-objective cost function
7. RVE (Representative Volume Element)
8. LAMMPS (Large-scale Atomic/ Molecular Massively Parallel Simulator)
9. single crystal
10. intensive property
11. potential energy

12. defect free
13. elastic stiffness matrix
14. elastic compliance matrix
15. orthotropic
16. cubic orthotropic
17. flowchart
18. selection
19. cross over
20. mutation
21. binary operator
22. blending method
23. mutation rate

مراجع

1. Reddy, B.S.R., *Advances in Nanocomposites-Synthesis, Characterization and Industrial Applications*, pp. 61-84, InTech Open Access Publisher, India, 2011.
2. Camargo, P.H.C., Satyanarayana, K.G. and Wypych, F., "Nanocomposites: Synthesis, Structure, Properties

- and New Application Opportunities", *Materials Research*, Vol. 12, No. 1, pp. 1-39, 2009.
3. Rohatgi, P.K. and Schultz B., "Lightweight Metal Matrix Nanocomposites- Stretching the Boundaries of Metals", *Material Matters*, Vol. 2, No. 4, pp. 16-21, 2007.

4. El-Daly, A.A., Abdelhameed, M., Hashish, M. and Daoush, W.M., "Fabrication of Silicon Carbide Reinforced Aluminum Matrix Nanocomposites and Characterization of its Mechanical Properties using Non-Destructive Technique", *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 559, pp. 384-393, 2013.
5. El-Eskandarany, M.S., "Mechanical Solid State Mixing for Synthesizing of SiCp/Al Nanocomposites", *Journal of Alloys and Compounds*, Vol. 279, pp. 263-271, 1998.
6. Garces, J.M., Moll, D.J., Bicerano, J., Fibiger, R. and McLeod, D.G., "Polymeric Nanocomposites for Automotive Applications", *Advanced Materials*, Vol. 12, No. 23, pp. 1835-1839, 2000.
7. Zeng, L., Zhou, Q., De Cicco, M.P., Li, X. and Zhou, S., "Quantifying Boundary Effect of Nanoparticles in Metal Matrix Nanocomposite Fabrication Processes", *IIE Transactions*, Vol. 44, pp. 551-567, 2012.
8. El-Eskandarany, M.S., *Mechanical Alloying for Fabrication of Advanced Engineering Materials*, Noyes Publications, New York, pp. 48-58, 2001.
9. Ajayan, P.M., Schadler, L.S. and Braun, P.V., *Nanocomposite Science and Technology*, Weinheim, Wiley-VCH GmbH, pp. 14-18, 2003.
10. Zeng, Q.H., Yu, A.B. and Lu, G.Q., "Multiscale Modeling and Simulation of Polymer Nanocomposites", *Progress in Polymer Science*, Vol. 33, pp. 191-269, 2008.
11. Zhu, R., Pan, E. and Roy A.K., "Molecular Dynamics Study of the Stress-Strain Behavior of Carbonnanotube Reinforced Epon 862 Composites", *Material Science Engineering*, Vol. 447, pp. 51-57, 2007.
۱۲. هادی‌زاده خیرخواه، ع.ا. و ساعی‌ور ایرانی‌زاد، ا.، "بررسی خواص مکانیکی گرافین عامل‌دار شده با هیدروژن با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی"، *مهندسی مکانیک مدرس*، دوره ۱۳، شماره ۲، صص. ۹۳-۹۹، ۱۳۹۲.
13. Scarpa, F., Adhikari, S. and Phani, A.S., "Effective Elastic Mechanical Properties of Single Layer Graphene Sheets", *Nanotechnology*, Vol. 20, pp. 1-11, 2009.
14. Cho, J., Luo, J.J. and Danial, I.M., "Mechanical Characterization of Graphite/Epoxy Nanocomposites by Multi-Scale Analysis", *Composite Science Technology*, Vol. 67, pp. 2399-2407, 2007.
15. Ward, D.K., Curtin, W.A. and Qi, Y., "Mechanical Behavior of Aluminum-Silicon Nanocomposites: A Molecular Dynamics Study", *Acta Materialia*, Vol. 54, pp. 4441-4451, 2006.
16. Sen, T.Z., Sharaf, M.A., Mark, J.E. and Kloczkowski, A., "Modeling the Elastomeric Properties of Stereoregular Polypropylenes in Nanocomposites with Spherical Fillers", *Polymer*, Vol. 46, pp. 7301-7308, 2005.
17. Nazari, A. and Abdinejad, V., "Modeling Charpy Impact Behavior of Al6061/SiCp Laminated Nanocomposites by Genetic Programming", *Ceramics International*, Vol. 39, pp. 1991-2002, 2013.
18. Luo, Q. and Ren, Q.L., "Application of Improved Back-Propagation Neural Network and Genetic Algorithm to the Preparation Processing of the Mg, Al-Hydrotalcite/Polymer Nanocomposite", *Key Engineering Materials*, Vol. 368-372, pp. 1680-1682, 2008.
19. Coello, C.A.C. and Lamont, G.B., *Applications of Multi-Objective Evolutionary Algorithms*, *Advances In Natural Computation*, Vol. 1, World Scientific Publishing, Singapore, pp. 1-9, 2004.
۲۰. اسماعیلی، ر. و دشت بیاض، م.ر.، "شبیه‌سازی خواص الاستیک نانو کامپوزیت آلومینیم-کاربید سیلیکون با استفاده از روش دینامیک مولکولی"، *مواد پیشرفته در مهندسی*، سال ۳۲، شماره ۲، صص. ۵۴-۴۳، پاییز ۱۳۹۲.
۲۱. اسماعیلی، ر.، "شبیه‌سازی و بهینه‌سازی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها با استفاده از الگوریتم‌های تکاملی"، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، بیرجند، دانشگاه بیرجند، ۱۳۹۰.
22. <http://lammps.sandia.gov/> [last accessed on 3.10.2010].
23. Dieter, G.E., *Mechanical Metallurgy*, McGraw-Hill book Company, London, pp. 53-54, 1988.
24. Lai, W.M., Rubin, D. and Krempl, E., *Introduction to Continuum*, Elsevier, pp. 319-333, 2010.
25. <http://www.ask.com/questions-about/Aluminum-Price-Per-Pound> [last accessed on 1.12.2011].
26. http://wiki.answers.com/Q/What_is_the_approx_scrap_value_of_silicon_carbide [last accessed on 1.12.2011].
27. Srinivas, M. and Patnaik, L.M., "Genetic Algorithms: A Survey", *IEEE Computer*, Vol. 27, pp. 17-26, 1994.
28. Haupt, R.L. and Haupt S.E., *Practical Genetic Algorithms*, John Wiley & Sons, New Jersey, pp. 56-62, 2004.
29. Roy S.S., "Design of Genetic-Fuzzy Expert System for Predicting Surface Finish in Ultra-Precision Diamond Turning of Metal Matrix Composite", *Journal of Materials Processing Technology*, Vol. 173, pp. 337-344, 2006.