



دانشگاه تهران  
پردیس دانشکده های فنی  
دانشکده مهندسی عمران



## توسعه روش تحلیل چند مقیاسی شبه پیوسته با استفاده از تکنیک های هوش مصنوعی در بررسی رفتار مواد در مقیاس نانو

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد  
در رشته مهندسی عمران گرایش سازه

نام دانشجو

حسن قهرمانی

استاد راهنما:

دکتر سهیل محمدی

شهریورماه ۱۴۰۴

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه تهران  
پردیس دانشکده های فنی  
دانشکده مهندسی عمران



## توسعه روش تحلیل چند مقیاسی شبه پیوسته با استفاده از تکنیک های هوش مصنوعی در بررسی رفتار مواد در مقیاس نانو

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد  
در رشته مهندسی عمران گرایش سازه

نام دانشجو

حسن قهرمانی

استاد راهنما:

دکتر سهیل محمدی

شهریورماه ۱۴۰۴

دانشگاه تهران  
پردیس دانشکده‌های فنی  
دانشکده مهندسی عمران

## گواهی دفاع از پایان‌نامه کارشناسی ارشد

هیأت داوران پایان‌نامه کارشناسی ارشد آقای حسن قهرمانی به شماره دانشجویی ۸۱۰۲۰۱۱۱۵ در رشته عمران گرایش سازه را در تاریخ ۱۴۰۴/۰۶/۱۴ با عنوان "توسعه روش تحلیل چند مقیاسی شبه پیوسته با استفاده از تکنیک‌های هوش مصنوعی در بررسی رفتار مواد در مقیاس نانو"

به عدد به حروف

|  |  |
|--|--|
|  |  |
|--|--|

با نمره نهایی

ارزیابی کرد.

و درجه

| ردیف                                             | مشخصات هیئت داوران                  | نام و نام خانوادگی    | مرتبه دانشگاهی                                   | دانشگاه          | امضاء |
|--------------------------------------------------|-------------------------------------|-----------------------|--------------------------------------------------|------------------|-------|
| ۱                                                | استاد راهنما                        | دکتر سهیل محمدی       | استاد                                            | دانشگاه تهران    |       |
| ۲                                                | استاد مشاور                         | دکتر امید علیزاده     |                                                  | دانشگاه تهران    |       |
| ۳                                                | استاد مدعو                          | دکتر علیرضا صادقی راد | استادیار                                         | دانشگاه امیرکبیر |       |
| ۴                                                | داور و نماینده شورای تحصیلات تکمیلی | دکتر مریم بیطرف       | استاد                                            | دانشگاه تهران    |       |
| نام و نام خانوادگی معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی |                                     |                       | نام و نام خانوادگی معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی |                  |       |
| دانشکده مهندسی عمران:                            |                                     |                       | پردیس دانشکده‌های فنی:                           |                  |       |
| تاریخ و امضاء:                                   |                                     |                       | تاریخ و امضاء:                                   |                  |       |



به نام خدا

## گواهی اصالت اثر

اینجانب حسن قهرمانی دانشجوی مقطع کارشناسی ارشد رشته مهندسی عمران گرایش سازه دانشکده مهندسی عمران دانشگاه تهران گواهی می‌دهم که:

۱- مطالب این پایان‌نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است؛

۲- محتوای این پایان‌نامه پیش از این برای دریافت هیچ مدرکی ارائه نشده است؛

۳- در انجام پژوهش و تهیه این پایان‌نامه، همه موازین اخلاق پژوهش رعایت شده است؛

۴- ارائه هرگونه دستاورد علمی یا صنعتی، همچون انتشار مقاله، چاپ کتاب، ثبت اختراع و مشابه آن،

که برگرفته از این پایان‌نامه باشد، منوط به تایید استاد راهنما، رعایت حقوق مالکیت مادی و

معنوی دانشگاه تهران (مطابق مقررات دانشگاه) و ذکر وابستگی به دانشگاه تهران است.

نام و نام خانوادگی دانشجو:

حسن قهرمانی

امضاء:

تقدیم به

پر پرواز،

رنگ خیال‌های دور،

یک رؤیای ایستاده،

آغوشی به وسعت خیال،

خانواده عزیزم،

که همواره با عشق، صبوری، و حمایت بی‌دریغ‌شان، مشوق من در مسیر زندگی و علم‌آموزی بوده‌اند.

این پایان‌نامه را با افتخار به شما تقدیم می‌کنم.

تشکر و قدردانی

سپاس و ستایش بی پایان، شایسته درگاه حضرت حق است که توفیق پیمودن این مسیر علمی را ارزانی ام داشت و با یاری و لطف بی دریغ خود، مرا در طی طریق دانش و پژوهش همراهی کرد. در گام‌های نخستین تا واپسین این پژوهش، راهنمایی‌ها و حمایت‌های ارزشمند جناب آقای دکتر سهیل محمدی، استاد ارجمند و فرهیخته‌ام، نقشی اساسی داشته است. دقت نظر و نگاه موشکافانه ایشان چراغ راه این مسیر بودند.

همچنین مراتب سپاس خود را به جناب آقای دکتر امید علیزاده، استاد مشاور گرامی، به پاس نگاه علمی، راهنمایی‌های دلسوزانه و همراهی صمیمانه‌شان ابراز می‌دارم.

از تمامی دانشجویان آزمایشگاه محاسبات سریع و اتاق دکتری که با تبادل تجربه، روحیه علمی و فضای صمیمی، مرا در انجام بهتر این تحقیق یاری رساندند، سپاسگزارم. همچنین وظیفه خود می‌دانم از سرکار خانم کاظمی، مسئول پرتلاش و محترم آزمایشگاه، به واسطه‌ی همکاری صمیمانه و پشتیبانی فنی‌شان در مسیر اجرای این پروژه، صمیمانه قدردانی نمایم.

و در پایان،

یاد مهندس شهاب امانت عزیز،

همواره با ماست و جای خالی‌اش در دل‌ها باقی.



## چکیده

نانوایندنتیشن<sup>۱</sup> ابزاری قدرتمند برای بررسی رفتار مکانیکی مواد در مقیاس نانو است، اگرچه دقت آن و مدل سازی عددی اش به شدت تحت تأثیر ویژگی های سطحی، هندسه نفوذگر و ساختار بلوری زیرین قرار دارد. در این مطالعه، از روش چندمقیاسی شبه پیوسته<sup>۲</sup> (QC) برای شبیه سازی فرایند نانوایندنتیشن در فیلم های نازک مسی استفاده شده است تا اثر زبری سطح (در بازه ۲ تا ۱۳ آنگستروم)، شکل های مختلف نفوذگر (استوانه ای، مستطیلی و برکویچ) با اندازه های گوناگون (۱۰ تا ۱۴۰ آنگستروم)، و دو راستای بلوری متفاوت بررسی شود. نتایج نشان می دهد نفوذگرهای کوچک تر حساسیت بیشتری به ناهمواری های سطحی دارند؛ ولی سختی یکنواخت تری ارائه می دهند، درحالی که نفوذگرهای بزرگ تر تأثیر زبری را کاهش می دهند؛ اما پراکندگی بیشتری در پاسخ بار-جابجایی از خود نشان می دهند.

برای پیش بینی مؤثر چنین پاسخ های پیچیده ای، چارچوبی بر پایه یادگیری عمیق توسعه داده شده و با استفاده از داده های حاصل از شبیه سازی QC آموزش داده شده است. سه معماری شبکه عصبی شامل دو مدل چند خروجی و مدل یادگیری چندوظیفه ای<sup>۳</sup> (MTL) تحت تکنیک های مختلف مانند تنظیم خودکار پارامترها و اعتبارسنجی تودرتو ارزیابی شده اند. مدل MTL بیشترین دقت و توان تعمیم را نشان داده و به خوبی روابط غیرخطی بین سختی، بارهای بحرانی، عمق نفوذ و انرژی جذب شده را استخراج می کند. دو مطالعه موردی نیز برای ارزیابی صحت مدل انجام شده که تطابق بالایی بین پیش بینی های مدل یادگیری عمیق و نتایج شبیه سازی QC نشان می دهند. این رویکرد یکپارچه، ترکیبی از شبیه سازی دقیق و مدل سازی داده محور ارائه می دهد و مسیری مؤثر برای پیشرفت تحلیل های مکانیکی در مقیاس نانو فراهم می سازد.

**کلمات کلیدی:** تحلیل چندمقیاسی، نانوایندنتیشن، روش شبه پیوسته، یادگیری چندوظیفه ای، اعتبارسنجی متقابل تودرتو، یادگیری عمیق.

---

<sup>1</sup> Nanoindentation

<sup>2</sup> Quasicontinuum

<sup>3</sup> Multi-Task Learning



## فهرست مطالب

|                                                |    |
|------------------------------------------------|----|
| فصل ۱: مقدمه.....                              | ۱  |
| ۱-۱- پیشگفتار.....                             | ۱  |
| ۲-۱- تعریف مسئله.....                          | ۳  |
| ۳-۱- اهداف تحقیق.....                          | ۴  |
| ۴-۱- نوآوری، اهمیت و ارزش تحقیق.....           | ۴  |
| ۵-۱- خلاصه فصل ها.....                         | ۵  |
| فصل ۲: مروری بر تحقیقات انجام شده.....         | ۷  |
| ۱-۲- مقدمه.....                                | ۷  |
| ۲-۲- ناواندنتیشن.....                          | ۷  |
| ۳-۲- روش شبه پیوسته (QC).....                  | ۱۵ |
| ۴-۲- یادگیری ماشین در تحلیل رفتار مکانیکی..... | ۱۸ |
| فصل ۳: روش تحقیق.....                          | ۲۱ |
| ۱-۳- مقدمه.....                                | ۲۱ |
| ۲-۳- روش شبه پیوسته.....                       | ۲۴ |
| ۱-۲-۳- معرفی المان های محلی.....               | ۲۹ |
| ۲-۲-۳- معرفی المان های غیر محلی.....           | ۳۰ |
| ۳-۲-۳- معیار های غیر محلی.....                 | ۳۳ |
| ۴-۲-۳- مش بندی تطبیقی.....                     | ۳۵ |
| ۳-۳- یادگیری عمیق.....                         | ۳۶ |
| ۱-۳-۳- بهینه سازی.....                         | ۳۸ |
| ۲-۳-۳- تکنیک های منظم سازی.....                | ۴۰ |
| ۳-۳-۳- پیش پردازش داده ها.....                 | ۴۲ |

|     |                                                                |
|-----|----------------------------------------------------------------|
| ۴۳  | تنظیم ابرپارامتر..... ۴-۳-۳                                    |
| ۴۴  | اعتبارسنجی متقابل تودرتو..... ۵-۳-۳                            |
| ۴۵  | یادگیری چندوظیفه‌ای (MTL)..... ۶-۳-۳                           |
| ۴۹  | <b>فصل ۴: نتایج و بحث..... ۴۹</b>                              |
| ۴۹  | ۱-۴- مقدمه..... ۴۹                                             |
| ۵۰  | ۲-۴- تعریف مسئله..... ۵۰                                       |
| ۵۲  | ۱-۲-۴- زبری سطح..... ۵۲                                        |
| ۵۳  | ۲-۲-۴- جهت‌گیری بلور..... ۵۳                                   |
| ۵۵  | ۳-۴- نتایج مدل‌سازی عددی..... ۵۵                               |
| ۵۵  | ۱-۳-۴- منحنی بار- نفوذ..... ۵۵                                 |
| ۶۸  | ۲-۳-۴- سختی..... ۶۸                                            |
| ۷۶  | ۴-۴- نتایج مدل‌های یادگیری ماشین و ارزیابی عملکرد آنها..... ۷۶ |
| ۸۰  | ۱-۴-۴- مدل چند خروجی با تمام اهداف..... ۸۰                     |
| ۸۳  | ۲-۴-۴- مدل چند خروجی با دو گروه هدف مجزا..... ۸۳               |
| ۸۵  | ۳-۴-۴- مدل چندوظیفه‌ای..... ۸۵                                 |
| ۹۲  | ۵-۴- مطالعه موردی..... ۹۲                                      |
| ۹۲  | ۱-۵-۴- مثال اول..... ۹۲                                        |
| ۹۴  | ۲-۵-۴- مثال دوم..... ۹۴                                        |
| ۹۶  | <b>فصل ۵: نتیجه‌گیری و پیشنهادها..... ۹۶</b>                   |
| ۹۶  | ۱-۵- مقدمه..... ۹۶                                             |
| ۹۷  | ۲-۵- نتیجه‌گیری..... ۹۷                                        |
| ۹۹  | ۳-۵- پیشنهاد تحقیقات آتی..... ۹۹                               |
| ۱۰۱ | <b>فصل ۶: مراجع..... ۱۰۱</b>                                   |

## فهرست شکل ها

- شکل ۱-۱- تصویر شماتیک مسئله نانوایندنتیشن..... ۲
- شکل ۱-۲- مدل سازی پیش بینی بار-نفوذ در فرایند نانوایندنتیشن با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی..... ۴
- شکل ۱-۲- ایجاد انباشتگی و فرورفتگی در تماس نفوذگر و بستر..... ۹
- شکل ۲-۲- عملکرد دستگاه AFM برای تست نانوایندنتیشن..... ۱۰
- شکل ۳-۲- بروز POP IN در نمودار بار-نفوذ و تاثیر زبری سطح بر سطح تماس نفوذگر و بستر..... ۱۱
- شکل ۴-۲- نمودار نیرو-نفوذ در سطح بدون لایه پوششی و سطح همراه با پوشش..... ۱۲
- شکل ۵-۲- تاثیر زبری سطح بر سختی ماده..... ۱۳
- شکل ۶-۲- بررسی تاثیر نقص های سطحی در تست نانوایندنتیشن..... ۱۴
- شکل ۷-۲- نواحی اتمی و پیوسته در روش QC..... ۱۶
- شکل ۸-۲- استفاده از روش QC برای تست نانوایندنتیشن..... ۱۸
- شکل ۹-۲- مقایسه نتایج آزمایش های تجربی و روش اجزا محدوده بر پایه یادگیری ماشین..... ۱۹
- شکل ۱۰-۲- مقایسه روش دینامیک مولکولی و چند مقیاسی بر پایه یادگیری ماشین..... ۲۰
- شکل ۱-۳- تقسیم دامنه به نواحی پیوسته و اتمی..... ۲۲
- شکل ۲-۳- یک مدل شماتیک از روش مقیاس پل زنی..... ۲۳
- شکل ۳-۳- یک مدل نمونه از تحلیل به روش چند مقیاسی QC..... ۲۵
- شکل ۴-۳- یک شبکه بدون اعوجاج با بردارهای شبکه A، با اعمال گرادیان تغییر شکل موضعی F به پیکربندی تغییر شکل یافته نگاشت می شود..... ۲۶
- شکل ۵-۳- گسسته سازی المان محدود (FEM) که المان، شبکه کریستالی زیرین و اتم نماینده را نشان می دهد..... ۲۷
- شکل ۶-۳- فرایند تطبیق با (الف) یک شبکه بدون تغییر شکل با یک المان هدف برای تطبیق آغاز می شود، در (ب) همان شبکه با المان های حذف شده نشان داده شده است، تطبیق در (ج) که گره های جدید اضافه شده اند و شبکه نهایی پس از مثلث بندی دلونی در (د) ارائه شده است، دنبال می شود..... ۳۶

- شکل ۳-۷- نمونه ای شبکه عصبی. .... ۳۷
- شکل ۳-۸- نمایش شماتیک تکنیک اعتبارسنجی متقابل تودرتو. .... ۴۵
- شکل ۳-۹- نمایش شماتیک شبکه MTL. .... ۴۷
- شکل ۴-۱- نمایش عمومی مسئله نانوایندنتیشن. .... ۵۱
- شکل ۴-۲- صفحه لغزش (۱۱۱) در شبکه بلوری مس و دو جهت گیری انتخاب شده برای ایندنتیشن. .... ۵۴
- شکل ۴-۳- چیدمان نمونه اتم‌ها برای (A) جهت‌گیری I و (B) جهت‌گیری II. .... ۵۵
- شکل ۴-۴- پاسخ بار-نفوذ لایه نازک مس (جهت‌گیری I) تحت اثر نفوذگربرکوییچ (زبری سطح ۶ آنگستروم). .... ۵۶
- شکل ۴-۵- کانتور جابه‌جایی در راستای Z برای نفوذگربرکوییچ (جهت‌گیری I و زبری ۶ آنگستروم). .... ۵۷
- شکل ۴-۶- پدیده‌های انباشته‌شدن و ایندنتیشن در ماده زیرلایه در اطراف نفوذگر. .... ۵۸
- شکل ۴-۷- پاسخ بار-نفوذ برای لایه نازک مس (جهت‌گیری II) تحت اثر نفوذگر برکوییچ (زبری سطح ۶ آنگستروم). .... ۵۹
- شکل ۴-۸- کانتور جابه‌جایی در راستای Z برای نفوذگر برکوییچ (جهت‌گیری II و زبری سطح ۶.۵ آنگستروم). .... ۶۰
- شکل ۴-۹- پاسخ‌های بار-نفوذ نفوذگر برکوییچ برای زبری ۱۰ آنگستروم. .... ۶۱
- شکل ۴-۱۰- پراکندگی منحنی‌های بار-نفوذ برای زبری‌های مختلف در دو جهت‌گیری I و II (نفوذگر برکوییچ). .... ۶۲
- شکل ۴-۱۱- کانتور جابه‌جایی و پاسخ بار-نفوذ برای نفوذگر مستطیلی با عرض ۶۰ آنگستروم (جهت‌گیری II و زبری سطح ۱۰ آنگستروم). .... ۶۳
- شکل ۴-۱۲- کانتور جابه‌جایی و پاسخ بار-نفوذ برای نفوذگر استوانه‌ای با عرض ۸۰ آنگستروم (جهت‌گیری II و زبری سطح ۱۰ آنگستروم). .... ۶۳
- شکل ۴-۱۳- پاسخ بار-نفوذ برای لایه نازک مس (جهت‌گیری II و زبری سطح ۱۰ آنگستروم) تحت اثر نفوذگرهای (الف) استوانه‌ای و (ب) مستطیلی. .... ۶۴

- شکل ۴-۱۴- پراکندگی بار بر اساس عمق نفوذ: (A) نفوذگر استوانه‌ای و (B) مستطیلی..... ۶۵
- شکل ۴-۱۵- تغییرات در میانگین بار بحرانی نسبت به عرض/قطر نفوذگر..... ۶۶
- شکل ۴-۱۶- نمونه‌ای از سازوکارهای ایندنتیشن پس از تماس کامل نفوذگر با زیرلایه..... ۶۷
- شکل ۴-۱۷- پاسخ‌های بار-نفوذ برای نفوذگر استوانه‌ای (قطر ۲۰ آنگستروم، جهت‌گیری II) با زبری‌های مختلف..... ۶۸
- شکل ۴-۱۸- مساحت تصویرشده تماس در لحظه‌ی آغاز جوانه‌زنی نابجایی..... ۶۹
- شکل ۴-۱۹- تغییرات سختی با زبری برای نفوذگر برکویچ در دو جهت‌گیری مختلف..... ۷۰
- شکل ۴-۲۰- تغییرات سختی با زبری برای دو اندازه‌ی مختلف نفوذگر استوانه‌ای (جهت‌گیری II) .. ۷۱
- شکل ۴-۲۱- موقعیت‌های مختلف نفوذگر نسبت به سطح موج‌دار..... ۷۲
- شکل ۴-۲۲- پاسخ‌های بار-نفوذ برای نفوذگر استوانه‌ای با قطر ۶۰ آنگستروم در موقعیت‌های مختلف..... ۷۳
- شکل ۴-۲۳- تغییرات سختی نسبت به قطر نفوذگر استوانه‌ای برای زبری‌ها و جهت‌گیری‌های مختلف..... ۷۴
- شکل ۴-۲۴- پراکندگی سختی برای جهت‌گیری I..... ۷۵
- شکل ۴-۲۵- پراکندگی میانگین سختی بر حسب زبری برای جهت‌گیری‌های I و II و همه نفوذگرها..... ۷۶
- شکل ۴-۲۶- یک مسیر برای تحلیل نانوایندنتیشن مبتنی بر روش QC با استفاده از یادگیری ماشین... ۷۹
- شکل ۴-۲۷- معماری مدل ANN..... ۸۱
- شکل ۴-۲۸- عملکرد پیش‌بینی و همگرایی مدل چندخروجی با همه اهداف..... ۸۲
- شکل ۴-۲۹- عملکرد پیش‌بینی و همگرایی مدل چندخروجی بدون D2,D1..... ۸۴
- شکل ۴-۳۰- عملکرد پیش‌بینی و همگرایی مدل چندخروجی برای پیش‌بینی فقط D2,D1..... ۸۵
- شکل ۴-۳۱- معماری مدل MTL..... ۸۸
- شکل ۴-۳۲- همگرایی آموزش و اعتبارسنجی در طول دوره‌ها برای مدل MTL..... ۸۹
- شکل ۴-۳۳- عملکرد پیش‌بینی مدل MTL..... ERROR! BOOKMARK NOT DEFINED.

شکل ۴-۳۴- مقایسه بین نتایج مدل‌های QC و MTL برای نفوذگر برکوییچ و زبری ۶.۵ آنگستروم. ۹۳

شکل ۴-۳۵- مقایسه نتایج مدل‌های QC و MTL برای نفوذگر استوانه‌ای و سطح صاف. ۹۴.....

## فهرست جدول‌ها

جدول ۴-۱- پارامترهای EAM برای مس..... ۵۲

جدول ۴-۱- مدل چند خروجی: یک شبکه واحد برای همه اهداف..... ۸۱

جدول ۴-۲- مدل چند خروجی: شبکه‌های جداگانه برای گروه‌های هدف مختلف..... ۸۳

جدول ۴-۳- مدل یادگیری چندوظیفه‌ای..... ۸۸

جدول ۴-۴- مقایسه مدل‌های QC و MTL برای نفوذگر برکوویچ روی سطح ناهموار..... **ERROR!**

**BOOKMARK NOT DEFINED.**

جدول ۴-۵- مقایسه مدل‌های QC و MTL برای نفوذگر استوانه ای روی سطح صاف..... **ERROR!**

**BOOKMARK NOT DEFINED.**



## فصل ۱: مقدمه

---

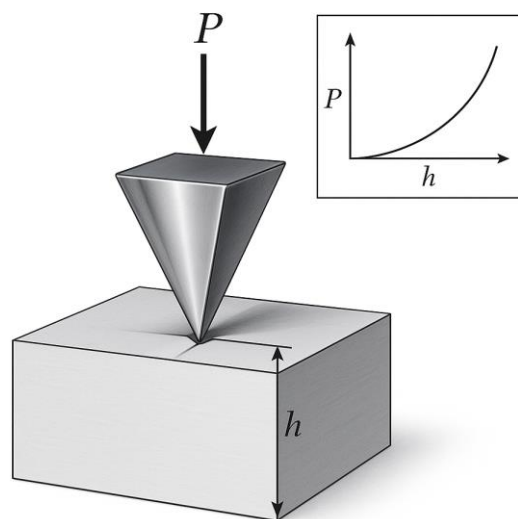
### ۱-۱- پیشگفتار

پیشرفت فناوری‌های نوین در مقیاس نانو موجب شده است که شناخت دقیق رفتار مکانیکی مواد در این ابعاد به یکی از موضوعات محوری در علوم و مهندسی مواد تبدیل شود. آزمون نانوایندنتیشن<sup>۱</sup> به عنوان یکی از مهم‌ترین روش‌های غیرمخرب جهت ارزیابی خواص مکانیکی نظیر سختی، مدول الاستیسیته و مقاومت به تغییر شکل پلاستیک در مقیاس نانو مطرح است. این آزمون که تصویر شماتیک آن در شکل ۱-۱ قابل مشاهده می‌باشد به واسطه‌ی قابلیت اعمال بار بسیار کوچک و ثبت دقیق تغییر شکل در ابعاد نانومتری، ابزار قدرتمندی برای تحلیل و طراحی مواد با کاربردهای پیشرفته فراهم می‌آورد. در آزمون تجربی نانوایندنتیشن، ابتدا نمونه موردنظر به دقت آماده‌سازی می‌شود تا سطح آن تاحد امکان صاف و تمیز باشد؛ چرا که زبری سطح می‌تواند نتایج تست را به طور قابل توجهی تحت تأثیر قرار دهد. سپس نمونه در دستگاه نانوایندنتیشن قرار می‌گیرد و با استفاده از یک میکروسکوپ نوری یا الکترونی، محل دقیق انجام نفوذ انتخاب می‌شود. نوع نفوذگر مورد استفاده در آزمون بر اساس نوع ماده و هدف آزمایش تعیین می‌گردد. پس از تنظیم پارامترهایی مانند حداکثر نیروی اعمالی، نرخ بارگذاری و نرخ باربرداری، دستگاه به طور خودکار فرایند اعمال نیرو و ثبت جابه‌جایی را انجام می‌دهد. داده‌های خروجی معمولاً به شکل یک منحنی بار-عمق نفوذ نمایش داده می‌شوند که از آن می‌توان

---

<sup>۱</sup> Nanoindentation test

سختی و مدول یانگ ماده را محاسبه کرد. در تجربه عملی، عوامل متعددی می‌توانند بر دقت نتایج تأثیرگذار باشند. از جمله این عوامل می‌توان به نویز دستگاه، انحراف در کالیبراسیون، پاسخ ویسکوالاستیک یا ویسکوپلاستیک ماده و تداخل اثرات سطحی اشاره کرد.



شکل ۱-۱- تصویر شماتیک مسئله نانوایندنتیشن.

در برخی از آزمایش‌ها مشاهده شده است که در ابتدای منحنی نفوذ، یک پرش ناگهانی در داده‌ها ظاهر می‌شود که نشان‌دهنده وقوع گسیختگی اولیه یا آغاز ناپیوستگی‌های بلوری است؛ پدیده‌ای که در مقیاس نانو بسیار حائز اهمیت است و می‌تواند اطلاعات ارزشمندی درباره رفتار مکانیکی ماده در مرحله اولیه تغییر شکل ارائه دهد. همچنین در طی انجام چندین تکرار آزمایش، دیده شده است که نتایج بسته به موقعیت نفوذ بر سطح نمونه کمی تغییر می‌کنند که این موضوع اهمیت یکنواختی ریزساختار سطح و کالیبراسیون دقیق دستگاه را یادآور می‌شود [۱].

با این حال، درک دقیق از پاسخ مکانیکی ماده در آزمون نانوایندنتیشن مستلزم شبیه‌سازی دقیق پدیده‌هایی نظیر هسته‌زایی نابجایی‌ها<sup>۱</sup>، تغییر ساختار بلوری و اثرات سطحی است. در این راستا، بهره‌گیری از روش‌های چندمقیاسی<sup>۲</sup> نقش بسزایی در کاهش هزینه‌های محاسباتی و افزایش دقت تحلیل ایفا می‌کند.

<sup>۱</sup> Nucleation dislocation

<sup>۲</sup> Multiscale method

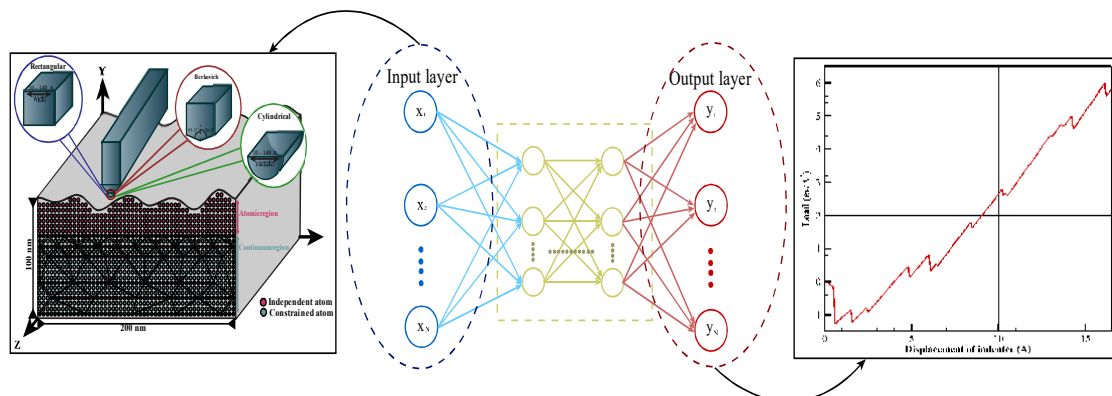
از سوی دیگر، پیچیدگی شبیه‌سازی‌های چند مقیاسی، هزینه زمانی و محاسباتی قابل توجهی را به همراه دارد و پیاده‌سازی آن‌ها برای تحلیل‌های پارامتریک وسیع و یا کاربردهای صنعتی، چالش برانگیز است. در این زمینه، استفاده از روش‌های یادگیری ماشین و به‌ویژه یادگیری عمیق، نویدبخش راهکاری سریع و دقیق جهت پیش‌بینی پاسخ مکانیکی مواد در شرایط مختلف نانوایندنتیشن است [۲].

## ۱-۲- تعریف مسئله

در آزمون نانوایندنتیشن، پارامترهایی چون شکل و ابعاد نفوذگر، زبری سطح ماده و جهت‌گیری بلوری تأثیر قابل توجهی بر پاسخ مکانیکی ماده دارند. در مطالعات عددی، بررسی جامع این عوامل مستلزم صرف زمان و هزینه محاسباتی بالایی است. روش‌های عددی ابزارهای قدرتمندی برای شبیه‌سازی تست نانوایندنتیشن فراهم کرده‌اند. این روش‌ها با مدل‌سازی دقیق رفتار ماده، هندسه نفوذگر، شرایط مرزی و تماس، امکان پیش‌بینی منحنی بار-نفوذ و استخراج پارامترهایی نظیر سختی، مدول الاستیسیته، و تنش تسلیم را فراهم می‌کنند. با این حال، دقت نهایی این مدل‌ها به عوامل متعددی بستگی دارد. به طور خاص، در ناحیه تماس نفوذگر با ماده که تمرکز تنش و کرنش بسیار بالا است، نیاز به مش‌های ریز و مدل‌سازی دقیق وجود دارد تا نتایج قابل اعتماد به دست آیند [۳], [۲].

از سوی دیگر، پراکندگی قابل توجه در پاسخ بار-نفوذ و سختی حاصل از این آزمون‌ها، به‌ویژه در حضور زبری سطح و تغییرات بلوری، موجب شده است تفسیر دقیق نتایج دشوار باشد. در چنین شرایطی، استفاده از روش چند مقیاسی<sup>۱</sup> (QC) جهت تولید داده‌های دقیق و استفاده از تکنیک‌های هوش مصنوعی برای مدل‌سازی و تحلیل داده‌ها، می‌تواند راهکاری مؤثر برای پیش‌بینی رفتار مواد در مقیاس نانو باشد. با این حال، چالش‌هایی نظیر انتخاب ویژگی‌های مؤثر، طراحی مدل یادگیری عمیق مناسب، و تنظیم بهینه پارامترهای شبکه نیز در این مسیر وجود دارد که در این پژوهش به آن‌ها پرداخته خواهد شد.

<sup>۱</sup> Quasicontinuum



شکل ۱-۲- مدل سازی پیش بینی بار-نفوذ در فرایند نانوایندنتیشن با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی.

### ۳-۱- اهداف تحقیق

- توسعه یک چارچوب محاسباتی ترکیبی از روش شبه پیوسته و یادگیری عمیق برای پیش بینی رفتار مکانیکی لایه های نازک مسی در آزمون نانوایندنتیشن.
- تحلیل اثر پارامترهایی چون زبری سطح، شکل و اندازه نفوذگر و جهت بلوری بر سختی و پاسخ بار-نفوذ.
- تولید پایگاه داده گسترده با استفاده از شبیه سازی های QC. با توجه به پیچیدگی های ذاتی رفتار مواد در مقیاس نانو و تأثیرپذیری شدید پاسخ مکانیکی آن ها از عواملی نظیر جهت گیری بلوری، زبری سطح، ابعاد و شکل نفوذگر، مدل سازی دقیق این پدیده ها مستلزم در اختیار داشتن داده های متنوع است.
- پیاده سازی مدل های یادگیری عمیق و ارزیابی دقت آنها.
- مقایسه عملکرد مدل های مختلف یادگیری ماشین برای پیش بینی خواص مکانیکی.

### ۴-۱- نوآوری، اهمیت و ارزش تحقیق

تکنیک های یادگیری ماشین، افق جدیدی در تحلیل و پیش بینی رفتار نانو مواد می گشاید. نوآوری این تحقیق در توسعه یک چارچوب یادگیری عمیق برای پیش بینی هم زمان چندین پارامتر مکانیکی از جمله

سختی، بار بحرانی، عمق نفوذ و انرژی جذب شده می‌باشد. نوآوری‌های کلیدی این پایان‌نامه را می‌توان به شرح زیر برشمرد:

- استفاده از روش QC جهت شبیه‌سازی دقیق اثر زبری سطح و راستای بلوری در نانوآیندنتیشن با بیش از ۴۰۰ تحلیل عددی.
- توسعه چارچوب یادگیری چندوظیفه‌ای<sup>۱</sup> (MTL) برای پیش‌بینی هم‌زمان پاسخ‌های مختلف ماده با بهره‌گیری از ساختار شبکه‌های مشترک و اختصاصی.
- پیاده‌سازی روش اعتبارسنجی تودرتو<sup>۲</sup> جهت ارزیابی دقیق عملکرد مدل‌های یادگیری.
- دستیابی به دقت بالای مدل MTL در پیش‌بینی پاسخ‌های مکانیکی و کاهش پراکندگی نتایج در مقایسه با مدل‌های سنتی.

## ۱-۵- خلاصه فصل‌ها

این پایان‌نامه در پنج فصل تنظیم شده است. پس از این فصل مقدماتی، در فصل دوم، مروری جامع بر مفاهیم نانوآیندنتیشن، روش شبه‌پیوسته و کاربردهای یادگیری ماشین در تحلیل رفتار مواد ارائه می‌شود. فصل سوم به تشریح فرایند تولید داده‌ها با استفاده از روش QC و تعریف پارامترهای فیزیکی اختصاص دارد. همچنین، مدل‌های یادگیری ماشین پیاده‌سازی شده، ساختار شبکه‌ها، تنظیمات بهینه‌سازی، و تکنیک‌های ارزیابی عملکرد توضیح داده می‌شود. در فصل چهارم، نتایج مدل‌های مختلف ارائه شده و مورد تحلیل قرار می‌گیرند. در نهایت، فصل پنجم به جمع‌بندی، نتیجه‌گیری و ارائه پیشنهاداتی برای تحقیقات آتی می‌پردازد.

---

<sup>۱</sup> Multi-Task learning

<sup>۲</sup> Nested Cross-Validation



## فصل ۲: مروری بر تحقیقات انجام شده

---

### ۲-۱- مقدمه

در این فصل، به بررسی ادبیات تحقیقاتی مرتبط با مدل‌سازی نانوایندنتیشن و استفاده از روش‌های عددی پیشرفته و هوش مصنوعی در تحلیل و پیش‌بینی ویژگی‌های مواد در این فرایند پرداخته می‌شود. در این راستا، شبیه‌سازی‌های عددی و مدل‌سازی چند مقیاسی<sup>۱</sup> به طور گسترده‌ای برای درک بهتر رفتار مواد تحت نیروهای محلی و دقیق‌تر کردن تحلیل‌ها استفاده می‌شوند.

در کنار روش‌های کلاسیک، به‌تازگی، استفاده از هوش مصنوعی و یادگیری ماشینی در تحلیل داده‌های آزمایشی و شبیه‌سازی‌های نانوایندنتیشن مورد توجه قرار گرفته است. روش‌هایی چون شبکه‌های عصبی عمیق توانسته‌اند دقت پیش‌بینی‌ها و تحلیل‌ها را به طور چشمگیری افزایش دهند. این فصل به مرور تحقیقات پیشین در این زمینه‌ها پرداخته و جایگاه هر یک از این روش‌ها را در تحلیل فرایند نانوایندنتیشن بررسی خواهد کرد.

### ۲-۲- نانوایندنتیشن

یکی از نخستین و بنیادین پژوهش‌ها در این حوزه توسط اولیویر و فار<sup>۲</sup> در سال ۱۹۹۲ انجام شد. این پژوهش، یکی از پایه‌های اصلی روش نانوایندنتیشن مدرن را پایه‌گذاری کرد. آن‌ها با ارائه مدل بار-نفوذ، روش کارائی برای محاسبه سختی و مدول یانگ معرفی کردند. نقطه قوت مدل، در محاسبه مساحت تماس واقعی بین نوک نفوذگر و نمونه بود که به طور مؤثری خطاهای ناشی از پدیده‌هایی

---

<sup>۱</sup> Multi-scale model

<sup>۲</sup> Oliver and Pharr

چون فرورفتگی<sup>۱</sup> را کاهش داد. این روش که بعدها به مدل Oliver-Pharr شهرت یافت، به دلیل دقت بالا و سادگی، در بسیاری از مطالعات بعدی مورد استفاده قرار گرفت [۴] و به عنوان مرجع جهانی تحلیل نانوایندنتیشن شناخته و در استانداردهای مختلف مورد استناد قرار گرفت. آنها در نهایت، ضمن بازنگری مدل کلاسیک، الگوریتم محاسبه سختی را بهبود دادند تا شامل رفتارهای کشسان-پلاستیک ترکیبی شود. آنها روابط محاسبه مدول یانگ و سختی را به موادی با پوشش، لایه‌های چندگانه و ساختارهای نامتجانس تعمیم دادند که مبنای استفاده دقیق از نانوایندنتیشن در موادی با ساختار پیچیده شده است [۴].

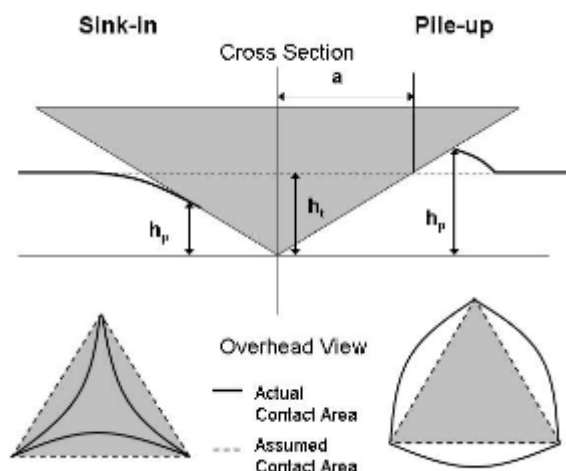
مطابق شکل ۲-۱ پدیده‌هایی مانند انباشتگی<sup>۲</sup> و فرورفتگی که ناشی از تغییر شکل پلاستیک موضعی در اطراف نوک نفوذگر هستند، دقت این روش را تحت تأثیر قرار می‌دهند. بولشاکو و فار<sup>۳</sup> نشان دادند که انباشتگی ماده در اطراف نفوذگر باعث افزایش غیرواقعی مساحت تماس می‌شود و در صورت بی‌توجهی، منجر به بیش‌برآوردی سختی می‌گردد. این مطالعه بر لزوم تصحیح هندسی یا تجربی مساحت تماس برای جلوگیری از خطای سیستماتیک تأکید نموده و به‌ویژه در مواد نرم با کرنش‌های پلاستیک بالا کاربرد دارد [۴].

---

<sup>1</sup> Sink-in

<sup>2</sup> Pile-up

<sup>3</sup> Bolshakov and Pharr



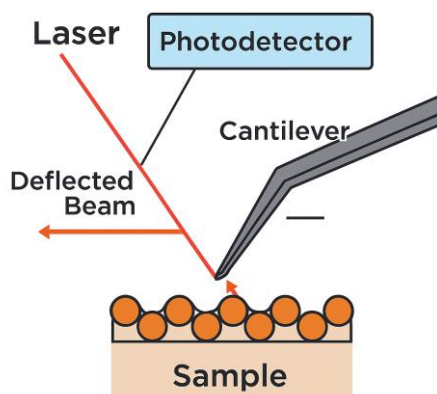
شکل ۲-۱- ایجاد انباشتگی و فرورفتگی در تماس نفوذگر و بستر [۴].

میکروسکوپ نیروی اتمی<sup>۱</sup> (AFM) یکی از ابزارهای کلیدی و پیشرفته در حوزه نانوفناوری است که امکان بررسی و تحلیل سطح مواد را در مقیاس نانومتری فراهم می‌کند. برخلاف میکروسکوپ‌های نوری و الکترونی که مبتنی بر تابش نور یا الکترون هستند، عملکرد AFM بر پایه تعامل نیروهای بین‌اتمی میان سطح نمونه و نوک یک کاوشگر بسیار ظریف بنا شده است که در شکل ۲-۲ نشان داده شده است. این ویژگی موجب شده تا بتواند تصویری سه‌بعدی و بسیار دقیق از توپوگرافی سطح مواد ارائه دهد، حتی در مقیاسی که دیگر روش‌های تصویربرداری قادر به ثبت آن نیستند.

سانگ وال و همکاران<sup>۲</sup>، از AFM برای انجام تست نانوایندنتیشن روی کریستال منیزیم اکسید استفاده نمودند. آن‌ها گزارش کردند که مقادیر سختی اندازه‌گیری شده به عمق نفوذ وابسته است و در عمق‌های کم‌تر، سختی به طور مصنوعی بیشتر اندازه‌گیری می‌شود. این پدیده به دلیل اثر سطحی و وابستگی به نسبت سطح/حجم در مقیاس نانو تحلیل شد. این تحقیق نقش مهمی در معرفی اثر مقیاس در مکانیک نانو ساختار داشته است [۵].

<sup>۱</sup> Atomic Force Microscope

<sup>۲</sup> Sangwal et al.



شکل ۲-۲- عملکرد دستگاه AFM برای تست نانوایندنتیشن.

نخستین گام برای هم‌راستا کردن نتایج عددی و تجربی توسط تای و همکاران<sup>۱</sup> انجام شد. در این مطالعه کلاسیک، تحلیل المان محدود دوبعدی و سه‌بعدی به‌منظور استخراج خواص مکانیکی از منحنی بار-نفوذ انجام شده است [۶]. در آزمون‌های نانوایندنتیشن، هندسه نوک نفوذگر از عوامل کلیدی در تحلیل دقیق پاسخ مکانیکی مواد به شمار می‌رود. هندسه نوک تأثیر مستقیمی بر ناحیه تماس، نحوه توزیع تنش، عمق نفوذ و در نتیجه استخراج خواص مکانیکی همچون سختی و مدول یانگ دارد. مطالعات نشان داده‌اند که انتخاب نوع نفوذگر می‌تواند منجر به تغییر محسوس در نتایج به‌دست‌آمده از نانوایندنتیشن شود [۹]، [۸]، [۷].

با پیشرفت روش‌های مدل‌سازی، مطالعات جدیدتر به بررسی اثر مقیاس در تست نانوایندنتیشن پرداختند. این پدیده که در آن خواص مکانیکی با کاهش عمق نفوذ تغییر می‌کند، در بسیاری از مواد بلوری مشاهده شده است و نقش تعیین‌کننده‌ای در درک مکانیزم‌های تغییر شکل پلاستیک در مقیاس نانو دارد [۱۰].

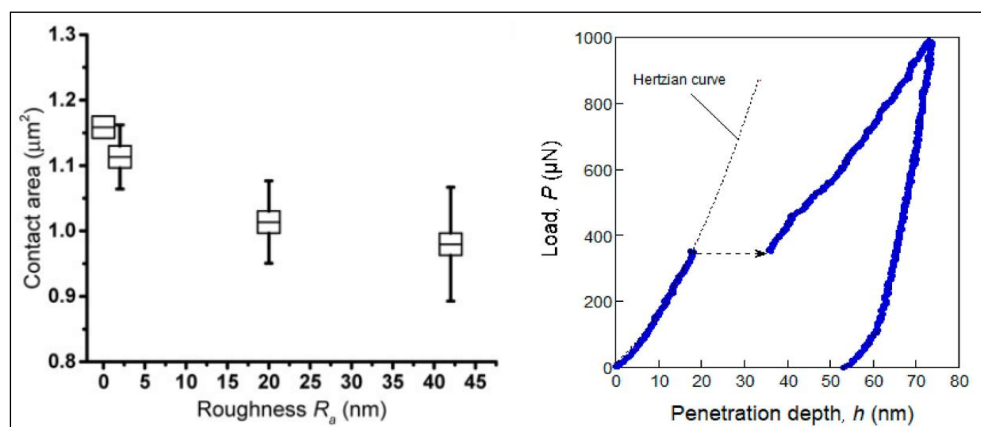
باگذشت زمان، پژوهشگران به بررسی پارامترهای پیچیده‌تری مانند زبری سطح و جهت‌گیری بلوری پرداختند. در سال ۲۰۰۷ یک مطالعه تجربی و شبیه‌سازی روی کریستال مس توسط تاکاهیتو و ماساتو<sup>۲</sup> انجام شد و نتایج بار-نفوذ را با داده‌های دینامیک مولکولی مقایسه کرد. آن‌ها مشاهده کردند که شروع

<sup>۱</sup> Tai et al.

<sup>۲</sup> Takahito and Masato.

## فصل ۲: پیشینه تحقیق

پلاستیسیته با جهشی ناگهانی<sup>۱</sup> مطابق شکل ۲-۳ در منحنی بار-نفوذ همراه است که نشان‌دهنده هسته زایی اولیه نابجایی‌ها<sup>۲</sup> است. همچنین نشان دادند که با افزایش قطر نفوذگر و زبری سطح، بار بحرانی برای pop-in افزایش می‌یابد [۱۱].



شکل ۲-۳- بروز pop in در نمودار بار-نفوذ و تاثیر زبری سطح بر سطح تماس نفوذگر و بستر [۱۳].

به‌منظور بررسی تأثیر زبری سطح، فرایند نانوایندنتیشن روی فیلم نازک مسی تک‌بلور دارای ناهمواری سطح توسط جیانگ و همکاران<sup>۳</sup> شبیه‌سازی شده است تا اثر مورفولوژی سطح بر اندازه‌گیری خواص مکانیکی بررسی شود. سختی نانو و مدول الاستیسیته با استفاده از روش Oliver-Pharr محاسبه شده و نتایج به‌دست‌آمده تطابق خوبی با داده‌های نظری و تجربی موجود نشان داده‌اند. یافته‌ها حاکی از آن است که ناهمواری سطح تأثیر قابل‌توجهی بر مقادیر سختی و مدول الاستیسیته استخراج‌شده از آزمون‌های نانوایندنتیشن دارد. در این تحقیق، همچنین اثر عواملی همچون اندازه نوک نفوذگر، عمق ایندنتیشن و ویژگی‌های سطح بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهند که برای حذف یا کاهش اثرات ناهمواری سطح، باید عمق ایندنتیشن به‌مراتب بزرگ‌تر از اندازه مشخصه ناهمواری باشد و اندازه مناسب نفوذگر انتخاب شود. این مطالعه می‌تواند راهنمای مناسبی برای طراحی دقیق‌تر آزمایش‌های نانوایندنتیشن در فیلم‌های نازک با سطح خشن و تفسیر دقیق‌تر داده‌های مکانیکی فراهم آورد [۱۲]. تلاش‌های دیگری نیز برای بررسی دقیق‌تر اثر زبری با مدل‌سازی عددی صورت گرفته است، چن و

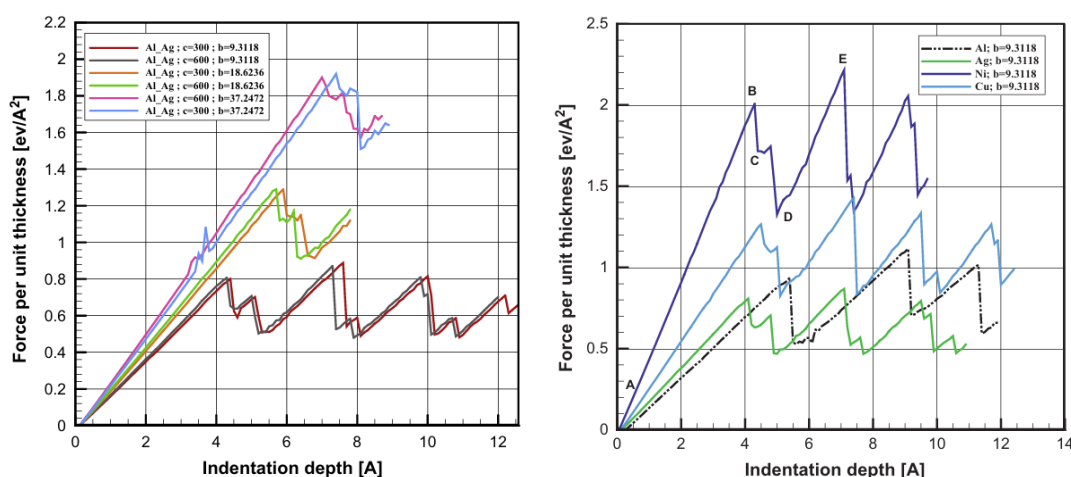
<sup>۱</sup> Pop-in

<sup>۲</sup> Dislocation nucleation

<sup>۳</sup> Jiang et al.

همکاران<sup>۱</sup> با استفاده از مدل سازی عددی سه بعدی روش اجزا محدود<sup>۲</sup> (FEM)، تأثیر زبری سطحی بر روی پاسخ مکانیکی را به صورت پارامتریک بررسی کردند. مشاهده شد که سطوح با زبری بیشتر، منجر به تغییر محل تماس اولیه نوک نفوذگر و افزایش پراکندگی در منحنی بار-نفوذ می شوند [۱۳]. در ادامه، پژوهش ها به سمت رفتار وابسته به نرخ تغییر شکل و ویسکو پلاستیسیته گسترش یافتند. در این راستا، با اعمال سرعت های مختلف بارگذاری در تست نانوایندنتیشن و مدل سازی عددی دقیق، ویژگی های ویسکو پلاستیک در مواد فلزی و پلیمری بادقت بالاتری شناسایی شدند [۱۴].

از سوی دیگر، در پاسخ به نیازهای صنعتی، استفاده از نانوایندنتیشن برای پوشش های نازک و مواد چندلایه ای نیز گسترش یافته است [۱۴]. عزیزاده و همکاران، با استفاده از شبیه سازی های دوبعدی و بهره گیری از پتانسیل های EAM، فرایند نانوایندنتیشن روی فیلم های نازک آلومینیومی با پوشش های نیکل، مس و نقره در ضخامت ها و عرض های مختلف نفوذگر را بررسی نمودند و نشان دادند که پوشش های سطحی در مقیاس نانو تأثیر قابل توجهی بر سختی ظاهری سطح دارند (شکل ۲-۴)؛ به طوری که پوشش های نیکل و مس موجب افزایش سختی و بار بحرانی آلومینیوم شده اند، اما پوشش نقره چنین اثری نداشته است. همچنین با کاهش ضخامت پوشش، عمق بحرانی افزایش یافته که نشان دهنده بروز پدیده نرم شدگی در فیلم های پوشش دار است [۱۴].

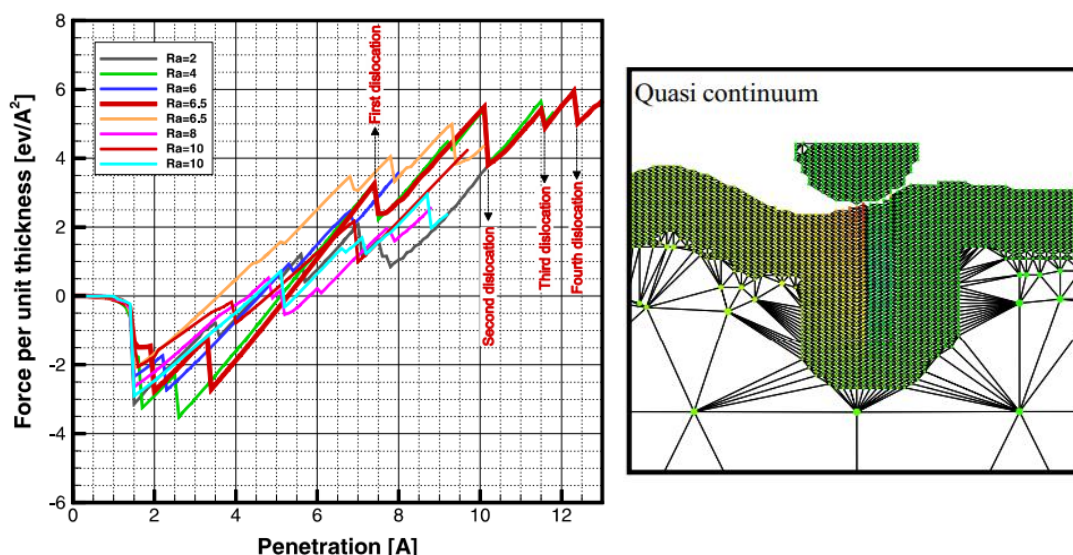


شکل ۲-۴- نمودار نیرو-نفوذ در سطح بدون لایه پوششی و سطح همراه با پوشش [۱۴].

<sup>1</sup> Chen et al.

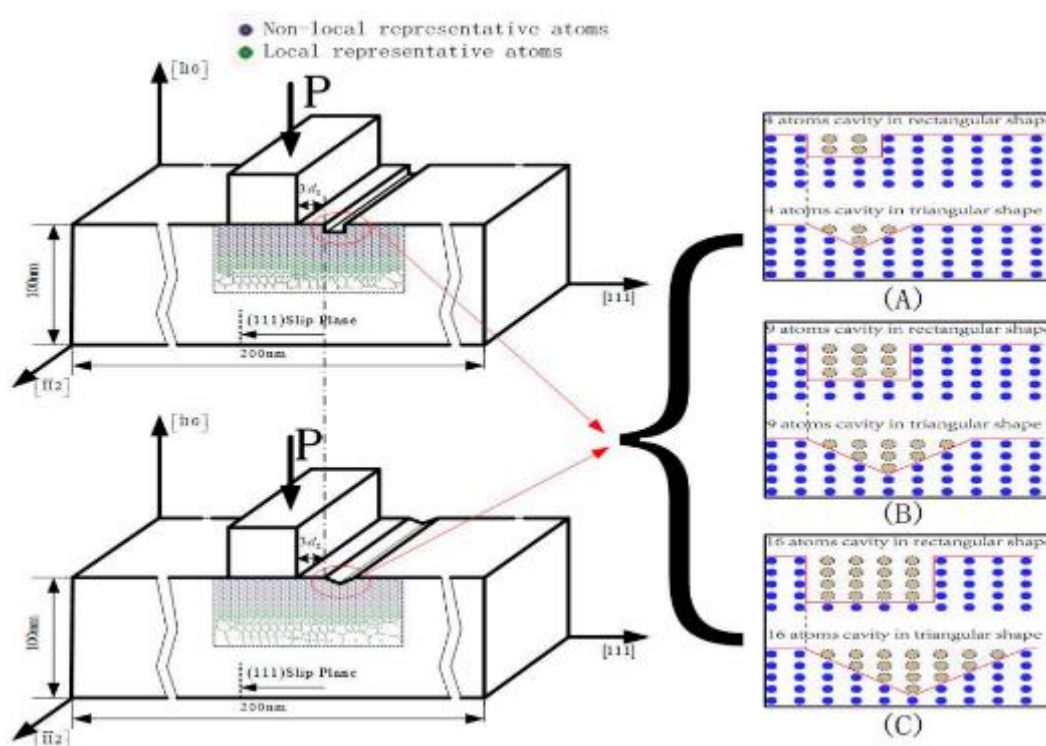
<sup>2</sup> Finite Element Method

ورود شبیه‌سازی‌های اتمی و چند مقیاسی در دهه‌های اخیر تحول بزرگی در درک بنیادی از فرایند نانوایندنتیشن ایجاد کرده است. این روش‌ها با اتصال مدل‌های اتمی (مانند دینامیک مولکولی) به مدل‌های ماکروسکوپی، توانستند جزئیاتی از جابه‌جایی نابجایی‌ها، تشکیل ترک و انتقال فاز را آشکار کنند که با روش‌های کلاسیک قابل مشاهده نبود [۱۷], [۱۶], [۱۵]. به منظور بررسی رفتار مکانیکی و پاسخ بار-نفوذ در سطوح زیر فلزات بلوری، شبیه‌سازی‌های نانوایندنتیشن با استفاده از روش QC دوبعدی بر روی مس تک‌بلور توسط مسلم زاده و همکاران انجام شده است. در این مطالعه، شاخص زبری در بازه ۲ تا ۱۳ آنگستروم برای توصیف ناهمواری سطح استفاده شده است. نتایج حاصل از ایندنتیشن در سطوح با زبری‌های مختلف، تطابق خوبی با مطالعات پیشین نشان می‌دهد. مطابق شکل ۲-۵ پراکندگی بار-نفوذ به دست آمده از زبری سطح، بیانگر تفاوت در مراحل ایجاد نابجایی‌ها، فواصل میان نابجایی‌های بعدی، و تغییر در سختی نمونه‌ها است، نتایج حاکی از آن‌اند که زبری سطح تأثیر چشمگیری بر ایجاد نخستین نابجایی دارد که به موقعیت نفوذگر و برهم‌کنش آن با سطح وابسته است. همچنین نشان داده شده است که با افزایش سطح تماس میان نفوذگر و سطح، عمق بحرانی نفوذ برای ایجاد نخستین نابجایی نیز افزایش می‌یابد [۱۸].



شکل ۲-۵- تأثیر زبری سطح بر سختی ماده [۱۴].

ژانگ و همکاران<sup>۱</sup> با استفاده از شبیه سازی QC، ساختارهایی با نقص های سطحی مثلثی و مستطیلی را مشابه شکل ۶-۲ مدل سازی کردند و دریافتند که نقص های مثلثی به دلیل تمرکز تنش بیشتر، منجر به سختی بالاتر می شوند. همچنین به بررسی جذب انرژی تا قبل از ایجاد نابجایی پرداختند و نشان دادند که توزیع تنش در اطراف نوک، تابعی از شکل نقص های سطحی است. این تحقیق به ویژه در تحلیل سطوح زبر یا معیوب اهمیت دارد [۱۹].



شکل ۶-۲- بررسی تاثیر نقص های سطحی در تست نانوایندنتیشن [۱۹].

همزمان با این توسعه، نیاز به تحلیل دقیق تر در موادی با رفتار ناهمسان گرد<sup>۲</sup> نیز احساس شد. به همین دلیل، مطالعاتی به بررسی این دسته از مواد تحت تست نانوایندنتیشن پرداختند و با در نظر گرفتن تانسورهای الاستیسیته جهت دار، دقت استخراج مدول الاستیک را بهبود بخشیدند [۲۰].

<sup>۱</sup> Zhang et al.

<sup>۲</sup> Anisotrop

## ۲-۳- روش شبه پیوسته (QC)

با توسعه فناوری‌های نانومقیاس و نیاز به تحلیل رفتار مکانیکی مواد در ابعاد بسیار کوچک، استفاده از روش‌های تحلیلی سنتی مبتنی بر فرض پیوستگی کامل، با چالش‌های متعددی مواجه شده است. مکانیک محاسباتی<sup>۱</sup> به عنوان شاخه‌ای از مکانیک کاربردی، نقش اساسی در مدل‌سازی دقیق رفتار مواد در مقیاس‌های مختلف ایفا می‌کند. با این حال، بسیاری از پدیده‌های مهم در مقیاس نانو نظیر هسته‌زایی نابجایی‌ها، ایجاد ترک‌ها و ناپیوستگی‌های سطحی، از طریق مدل‌سازی در مقیاس اتمی قابل مشاهده هستند. با توجه به هزینه فوق‌العاده تحلیل‌های اتمی، توسعه روش‌های مدل‌سازی چند مقیاسی مورد توجه قرار گرفته است، رویکردی که به صورت هم‌زمان یا ترتیبی، اطلاعات بین مقیاس‌های اتمی، میکرو و ماکرو را مبادله می‌کند [۲۱].

در میان روش‌های موجود، از جمله روش‌های  $DCMM^2$ ،  $BSM^3$ ،  $BDM^2$  و  $VNMM^5$ ، روش QC به عنوان یکی از پرکاربردترین روش‌های مدل‌سازی چند مقیاسی شناخته شده است [۲۴]، [۲۳]، [۲۲]. [۲۵].

روش QC نخستین بار توسط تادمور و همکاران<sup>۶</sup> با هدف کاهش پیچیدگی محاسباتی مدل‌های تمام اتمی، در عین حفظ دقت بالا در نواحی بحرانی ارائه گردید. ایده اصلی در این روش، ترکیب نواحی اتمی دقیق با نواحی پیوسته ساده شده است؛ به طوری که بخش‌هایی از ماده که دارای تغییرات شدید هستند (مانند زیر سوزن نفوذگر)، با جزئیات کامل اتمی مدل می‌شوند، و نواحی دورتر که تغییرات کمتری دارند، با تقریب‌های پیوسته مورد تحلیل قرار می‌گیرند که به صورت شماتیک در شکل ۲-۷

<sup>1</sup> Computational Mechanics

<sup>2</sup> Bridging Domain Method

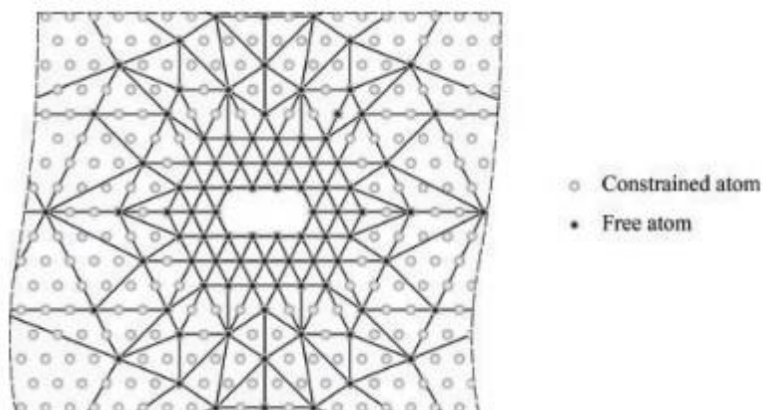
<sup>3</sup> Bridging Scale Method

<sup>4</sup> Disordered Concurrent Multiscale Method

<sup>5</sup> Variable Node Multiscale Method

<sup>6</sup> Tadmor et al.

نشان داده شده است [۲۶].



شکل ۲-۷- نواحی اتمی و پیوسته در روش QC [۱۴].

در سال ۲۰۰۰، یک مطالعه QC برای بررسی خواص سیلیکون تحت فشار توسط اسمیت و همکاران<sup>۱</sup> انجام شد. آن‌ها نشان دادند که رفتار الکترومکانیکی سیلیکون تحت فشار زیاد، از طریق مدل QC قابل پیش‌بینی است. به‌ویژه، تأثیر فشار بر تغییر رسانایی الکتریکی بررسی شد و مدل نتایج تجربی را به خوبی باز تولید کرد. اهمیت این پژوهش در تطابق QC با خواص چندفیزیکی مانند الکترومکانیکی بود [۲۷].

تادمور و میلر<sup>۲</sup> در سال ۲۰۰۲، ساختار کامل QC، از جمله فرمولاسیون انرژی، شرایط مرزی، و تکنیک‌های هموارسازی بین نواحی اتمی و پیوسته را ارائه دادند. نویسندگان علاوه بر تحلیل نظری، به کاربرد QC در مسائل مختلف مانند گسیختگی و انتشار ترک پرداختند و نشان دادند که این روش در تحلیل ناپیوستگی‌ها دقت بالایی دارد [۲۸].

روش QC به طور گسترده در تحلیل پدیده‌های مکانیکی در مقیاس نانو، به‌ویژه در مدل‌سازی تست نانوایندنتیشن به کار گرفته شده است. این روش قادر است فرایندهای پیچیده‌ای؛ چون آغاز تغییر شکل

<sup>۱</sup> Smith et al.

<sup>۲</sup> Miller and Tadmor

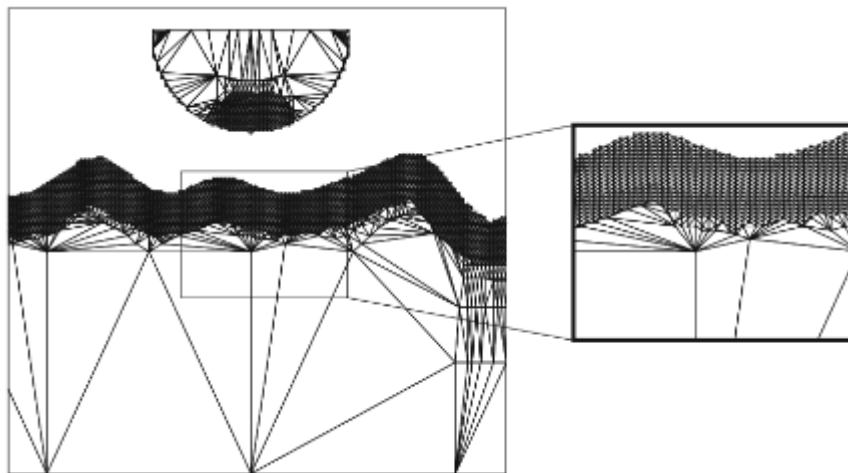
## فصل ۲: پیشینه تحقیق

پلاستیک و ایجاد نابجایی‌ها را به دقت مدل کند. استفاده از QC دوبعدی برای بررسی نانوایندنتیشن روی مرز دانه‌ها در مواد چند بلوری نشان داده است که موقعیت تماس نوک نفوذگر در نزدیکی مرز دانه‌ها منجر به ایجاد نابجایی زود هنگام و کاهش سختی می‌شود. این پژوهش نشان داد که QC توانایی تحلیل موضعی رفتار مکانیکی با وابستگی به ساختار بلوری را دارد [۲۸].

پژوهش علیزاده و همکاران یکی از نخستین کاربردهای QC در تحلیل لایه‌های پوشش دار بود. آن‌ها مدل QC را برای بررسی سختی و پاسخ بار-نفوذ یک لایه آلومینیوم با پوشش سخت استفاده کردند. نتایج نشان داد که پوشش نه تنها سختی را افزایش می‌دهد؛ بلکه باعث تأخیر در وقوع pop-in و گسترش نابجایی می‌شود. این تحقیق نشان داد که QC قابلیت تحلیل سیستم‌های چندلایه را با دقت بالا دارد [۲۹].

در سال ۲۰۱۹ یک نسخه مشابه از QC با عنوان VNMM ارائه شد. این روش با تعریف گره‌های تطبیقی، مرز بین نواحی اتمی و پیوسته را به صورت دینامیکی به روزرسانی می‌کند. نتایج مقایسه عددی VNMM با QC کلاسیک و FEM نشان داد که این مدل در تحلیل ترک و پدیده‌های ناپیوسته مانند ناپایداری‌ها عملکرد بهتری دارد [۲۵].

مسلم زاده و همکاران با ارائه یک مدل QC مطابق شکل ۲-۸ برای شبیه‌سازی نانوایندنتیشن با ترکیبات مختلفی از زبری سطح و قطر نفوذگر نشان دادند که افزایش قطر نفوذگر باعث افزایش پراکندگی و کاهش حساسیت پاسخ سختی به زبری سطح می‌شود [۱۸].



شکل ۲-۸- استفاده از روش QC برای تست نانوایندنتیشن [۱۴].

## ۲-۴- یادگیری ماشین در تحلیل رفتار مکانیکی

با رشد چشمگیر داده‌های حاصل از شبیه‌سازی‌های چندمقیاسی و افزایش پیچیدگی تحلیل رفتار مکانیکی مواد در مقیاس نانو، استفاده از روش‌های کلاسیک مدل‌سازی مبتنی بر روابط فیزیکی صریح، به‌تنهایی پاسخگوی نیازهای نوین تحلیل نیست. در این میان، هوش مصنوعی<sup>۱</sup> (AI) و به‌ویژه شاخه‌های آن شامل یادگیری ماشین<sup>۲</sup> (ML) و یادگیری عمیق<sup>۳</sup> (DL)، به‌عنوان ابزارهای مکمل و یا جایگزین برای شبیه‌سازی‌های محاسباتی معرفی شده‌اند. این روش‌ها با استخراج الگوهای پنهان از داده‌ها، توانایی بالایی در پیش‌بینی، طبقه‌بندی و تعمیم‌پذیری رفتار مواد تحت شرایط پیچیده دارند. در این راستا، مطالعات متعددی بر روی کاربرد AI در نانوایندنتیشن انجام شده است [۳۱]، [۳۰]. ژیانو و همکاران<sup>۴</sup> یک مدل سلسله‌مراتبی<sup>۵</sup> برای پیش‌بینی شکست و تنش در نانومواد با استفاده از

<sup>۱</sup> Artificial intelligence

<sup>۲</sup> Machine learning

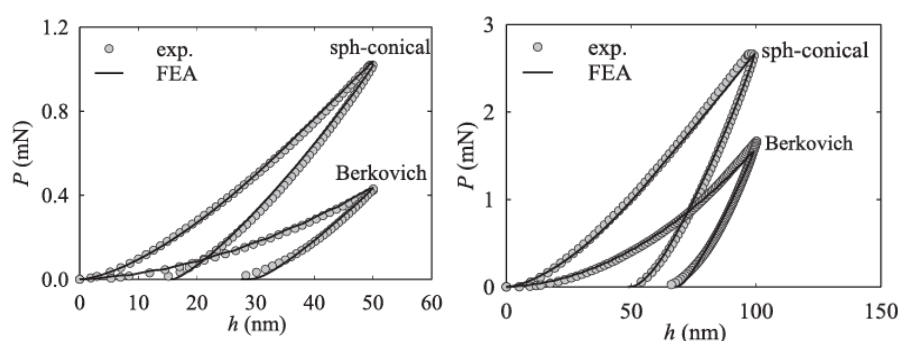
<sup>۳</sup> Deep learning

<sup>۴</sup> Xiao et al.

<sup>۵</sup> Sequential

## فصل ۲: پیشینه تحقیق

داده‌های حاصل از دینامیک مولکولی پیشنهاد دادند. آن‌ها مدل‌هایی از نوع طبقه‌بندی<sup>۱</sup> و رگرسیون<sup>۲</sup> را ترکیب کرده و دقت بالایی در پیش‌بینی رفتار شکست گزارش کردند [۳۲]. همچنین مطالعاتی بر توانایی شبکه‌های عصبی مصنوعی<sup>۳</sup> (ANN) برای استخراج سختی، مدول و بار بحرانی از داده‌های نانوایندنتیشن توسط محققان انجام شد. آن‌ها با داده‌های تجربی و شبیه‌سازی‌شده، مدل‌هایی با ساختارهای مختلف آموزش دادند و نشان دادند که ANN می‌تواند رفتار غیرخطی پیچیده را به خوبی مدل کند [۳۵], [۳۴], [۳۳]. همچنین پژوهش‌هایی برای مقایسه عملکرد الگوریتم‌های مختلف یادگیری ماشین برای پیش‌بینی سختی آلیاژهای آمورف در سال‌های اخیر انجام شده‌اند. شکل ۲-۹ مقایسه تعدادی از نتایج آزمایش‌های تجربی و روش اجزا محدود بر پایه یادگیری ماشین را ارائه می‌دهد [۳۶], [۳۷].



شکل ۲-۹- مقایسه نتایج آزمایش‌های تجربی و روش اجزا محدود بر پایه یادگیری ماشین [۱۴].

خویی و همکاران<sup>۴</sup> یک چارچوب یادگیری ماشین مبتنی بر المان نماینده حجمی<sup>۵</sup> (RVE) توسعه دادند که از داده‌های دینامیک مولکولی برای آموزش مدل استفاده می‌کرد. خروجی مدل شامل پیش‌بینی تنش- کرنش معادل برای نانوکریستال‌ها بود که با داده‌های مرجع مطابقت خوبی داشت [۳۸].

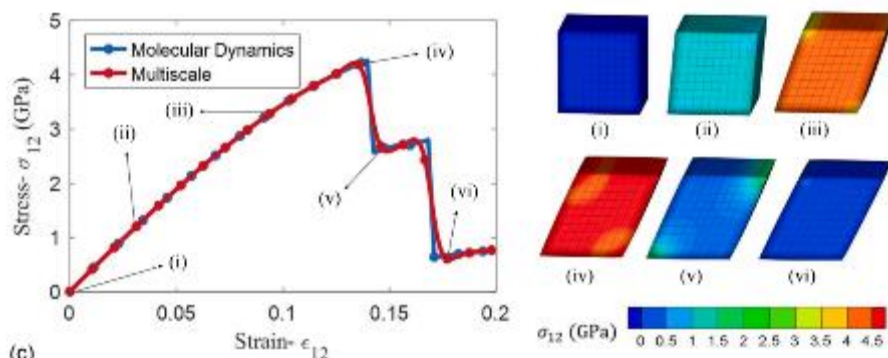
<sup>1</sup> Classification

<sup>2</sup> Regression

<sup>3</sup> Artificial neural network

<sup>4</sup> KhoeI et al.

<sup>5</sup> Representative Volumetric Element



شکل ۲-۱۰- مقایسه روش دینامیک مولکولی و چند مقیاسی بر پایه یادگیری ماشین [۱۴].

در این راستا، پژوهشگران روش‌های مبتنی بر شبیه‌سازی اجزای محدود و یادگیری ماشین را برای مدل‌سازی معکوس پیشنهاد داده‌اند. یکی از روش‌های نوظهور در این حوزه، بهره‌گیری از شبکه‌های عصبی فیزیک آگاه<sup>۱</sup> (PINN) است که قوانین فیزیکی حاکم بر پدیده (مانند معادلات تعادل و روابط مواد) را مستقیماً در فرایند یادگیری مدل لحاظ می‌کند. در مطالعه‌ای که توسط ماریموتو و لی<sup>۲</sup> انجام شد، یک شبکه PINN به منظور استخراج خواص مکانیکی از منحنی‌های بار-نفوذ در تست ایندنتیشن توسعه یافت [۳۹].

در مطالعه‌ای مکمل، ماریموتو و همکاران<sup>۳</sup> به مسئله‌ی حساسیت آزمون ایندنتیشن به زبری سطح پرداختند و یک تکنیک نوین به نام نفوذگر دوگانه تخت-کروی<sup>۴</sup> (DFSI) را معرفی کردند. این تکنیک متشکل از دو مرحله است: ابتدا یک نفوذگر تخت برای صاف‌سازی سطح زبر ماده انجام می‌شود و سپس یک نفوذگر کروی در مرکز ایندنتیشن تخت اعمال می‌گردد. در ادامه، با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی و همچنین مدل‌های PINN آموزش‌دیده بر پایه داده‌های تولید شده از شبیه‌سازی‌های اجزای محدود، خواص مکانیکی نمونه‌های زبر نظیر SS304 و SM45C با دقت قابل توجهی پیش‌بینی شدند [۴۰].

<sup>۱</sup> Physics-informed neural networks

<sup>۲</sup> Marimuthu and Lee

<sup>۳</sup> Marimuthu et al.

<sup>۴</sup> Dual Flat-Spherical Indentation

---

## فصل ۳: روش تحقیق

---

### ۳-۱- مقدمه

در راستای مدل‌سازی دقیق رفتار مکانیکی مواد در مقیاس نانو، نیاز به روش‌هایی احساس می‌شود که ضمن حفظ دقت در مقیاس اتمی، از پیچیدگی و هزینه‌های بالای محاسباتی روش‌های تمام اتمی اجتناب کنند. از جمله روش‌های معروف برای شبیه‌سازی نانوایندنتیشن، می‌توان به دینامیک مولکولی<sup>۱</sup> (MD)، روش اجزای محدود و مدل‌های چندمقیاسی<sup>۲</sup> مانند روش شبه‌پیوسته<sup>۳</sup> (QC) اشاره کرد. هرچند MD امکان بررسی دقیق ساختارهای اتمی و پدیده‌هایی مانند هسته‌زایی نابجایی و لغزش شبکه را فراهم می‌کند، اما محدودیت‌های شدیدی از نظر ابعاد سیستم، بازه‌ی زمانی شبیه‌سازی و هزینه محاسباتی دارد. از سوی دیگر، روش اجزای محدود علی‌رغم توانایی بالا در مدل‌سازی رفتار مواد در مقیاس ماکرو، فاقد قابلیت توصیف فرایندهای غیریوسته و گسسته در مقیاس اتمی است. در نتیجه، نیاز به یک رویکرد میانی که مزایای هر دو روش را تلفیق کند، منجر به توسعه روش‌های چندمقیاسی مانند QC شده است [۴۱].

مدل‌سازی چندمقیاسی به دنبال پیوند میان مقیاس‌های مختلف ماده (اتمی، میکرو و ماکرو) است. این

---

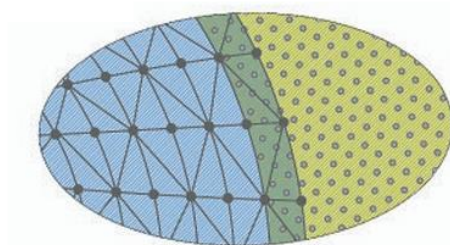
<sup>۱</sup> Molecular Dynamics

<sup>۲</sup> Multiscale Modeling

<sup>۳</sup> Quasicontinuum

روش‌ها به صورت ترتیبی<sup>۱</sup> یا هم‌زمان<sup>۲</sup> توسعه یافته‌اند و هر کدام مزایا و معایب خاص خود را دارند. روش‌های چندمقیاسی هم‌زمان برای کاهش زمان محاسبات و افزایش کارایی راه‌حل عددی با استفاده از روش‌های اتمی و پیوسته توسعه داده شده‌اند. در این روش‌ها، هر دو فرمول‌بندی اتمی و پیوسته، معادلات حاکم کوپل شده روش چندمقیاسی را تشکیل می‌دهند. آن‌ها ممکن است به صورت هم‌زمان برای توصیف پاسخ یک ناحیه خاص به کار گرفته شوند، یا ممکن است برای نواحی مختلف مسئله چندمقیاسی، با یک رابط یا ناحیه گذار برای اتصال نواحی، استفاده شوند [۴۱].

روش دامنه پل<sup>۳</sup> (BDM) توسط شیائو و بلیچکو با تقسیم دامنه به نواحی اتمی و پیوسته، که یک همپوشانی مشترک دارند، توسعه داده شد. شکل ۱-۳ یک توصیف رایج برای تقسیم یک دامنه به نواحی مقیاس درشت (پیوسته) و ریز (اتمی)، را نشان می‌دهد. ناحیه درشت معمولاً توسط روش اجزا محدود بررسی می‌شود، در حالی که ناحیه ریز اساساً توسط فرمول‌بندی اتمی کنترل می‌شود. ناحیه همپوشانی ممکن است برای تسهیل اعمال سازگاری بین دو ناحیه در نظر گرفته شود. در این ناحیه همپوشانی، پاسخ هر گره با ترکیبی از دو مدل تعیین می‌شود. این روش موجب پیوستگی مناسب بین نواحی مختلف می‌گردد. تعیین اندازه ناحیه گذار، ضرایب وزن‌دهی و حل ناپیوستگی‌های احتمالی، از چالش‌های اصلی آن است [۲۲].



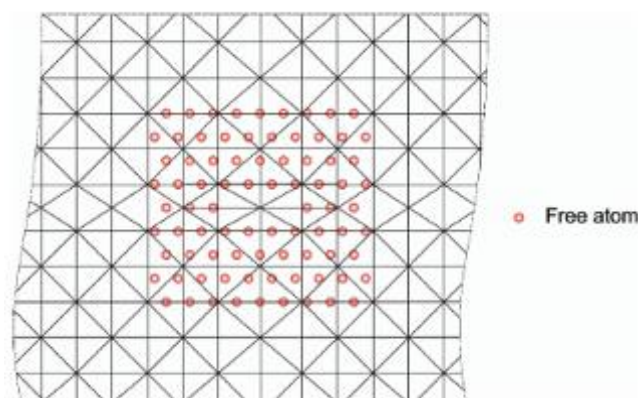
شکل ۱-۳- تقسیم دامنه به نواحی پیوسته و اتمی [۱۴].

<sup>1</sup> Sequential

<sup>2</sup> concurrent

<sup>3</sup> Bridging Domain Method

روش مقیاس پل<sup>۱</sup> (BSM)، درحالی که MD در نواحی با گرادیان بالا که نیاز به دقت اتمی دارند، استفاده می شود، FEM در کل دامنه استفاده می شود، همان طور که در شکل ۳-۲ نشان داده شده است. ناحیه مقیاس ریز به طور طبیعی توسط فرمول اتمی تعریف می شود. ناحیه پیوسته توسط جابه جایی های اجزا محدود مدیریت می شود. با این حال، نوعی اجزا محدود حتی در ناحیه مقیاس ریز نیز وجود دارند. سازگاری اجزا محدود با روش اتمی در داخل ناحیه مقیاس ریز با محدود کردن جابه جایی های اجزا محدود با جابه جایی های اتمی با استفاده از تکنیک حداقل مربعات انجام می شود. BSM یک رویکرد چند مقیاسی مبتنی بر انرژی است که مبتنی بر تجزیه میدان جابه جایی به میدان های مقیاس درشت و ریز می باشد [۲۲].



شکل ۳-۲- یک مدل شماتیک از روش مقیاس پل زنی [۱۴].

بسیاری از روش های چند مقیاسی مرسوم در حل ساختارهای اتمی نامنظم یا بی نظم ناتوان یا ناکارا هستند. روش چند مقیاسی هم زمان بی نظم<sup>۲</sup> (DCMM) برای شبیه سازی هرگونه شکل ساختاری نامنظم موجود در پلیمرها، شیشه ها، مواد آمورف، پروتئین ها و غیره طراحی شده است. در DCMM، نمونه با توزیع غیریکنواخت از نماینده های اتمی پوشش داده می شود. این روش برای مدل سازی

<sup>1</sup> Bridging Scale Method

<sup>2</sup> Disordered Concurrent Multiscale Method

ساختارهای ناهمگن و دارای نقص سطحی نیز مناسب است. در DCMM، مدل شامل مقیاس‌های ماکرو و اتمی به طور هم‌زمان است. در مناطقی با گرادیان کم، از فرمول‌بندی پیوسته برای تعریف معادلات حاکم بر اجزای محدود استفاده می‌شود و در مناطقی با گرادیان بالا، اجزا شامل مدل اتمی صریح ساختار آمورف هستند [۲۴].

روش چندمقیاسی گره متغیر ( $VNMM^1$ ) یک رویکرد چندمقیاسی هم‌زمان است که برخی از مفاهیم موجود در روش‌های چندمقیاسی قبلی را با تکنیک‌های بدون شبکه ترکیب می‌کند تا روشی با سازگاری قوی بین اتم‌ها و المان‌ها محدود ایجاد کند. VNMM با تغییر خودکار موقعیت اتم‌ها در داخل المان‌ها، از شبکه‌بندی تطبیقی پرهزینه جلوگیری می‌کند [۲۵].

### ۳-۲- روش شبه پیوسته

QC یک روش چندمقیاسی هم‌زمان با فرمول‌بندی ترکیبی اتمی و پیوسته است. این روش به دلیل کارایی‌اش برای موادی با ساختارهای اتمی ساده و سادگی فرمول‌بندی از جمله پرکاربردترین روش‌های هم‌زمان است. مدل شامل اتم‌ها و المان‌های محدود در کل مدل است، اما با ویژگی‌های متفاوت بر اساس سطح تغییر شکل یا گرادیان کرنش در هر ناحیه استفاده می‌کند [۴۱].

روش QC دامنه مسئله را به دو ناحیه تقسیم می‌کند؛ ناحیه اتمی که در آن‌ها جزئیات اتمی مهم هستند، مانند مناطق نزدیک به نقص‌های بلوری، و ناحیه پیوسته، نواحی دورتر از نقص‌ها که رفتار ماده به صورت همگن و پیوسته قابل توصیف است. با ترکیب این دو ناحیه، روش QC تعداد درجات آزادی را به طور قابل توجهی کاهش می‌دهد و به همین دلیل، محاسبات را بهینه می‌کند.

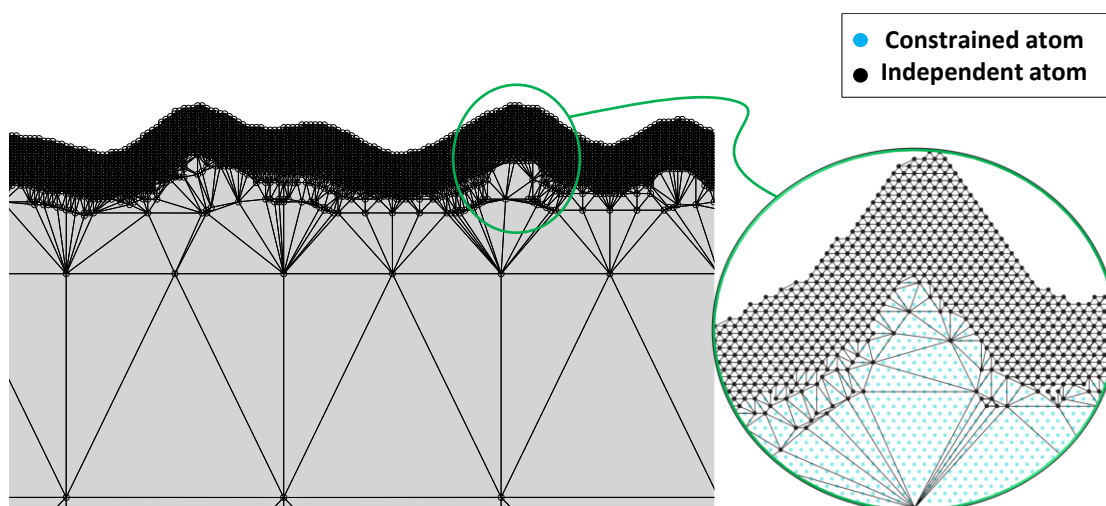
طبق شکل ۳-۳، دو نوع اتم را می‌توان در مدل QC در نظر گرفت. اتم‌های موجود در ناحیه گرادیان بالا، اتم‌های مستقل<sup>۲</sup> فرض می‌شوند که در معرض پاسخ اتمی قرار دارند. در واقع، هر اتم در این ناحیه درجه آزادی خاص خود را دارد تا بتواند هرگونه پدیده اتمی موجود را به طور دقیق ثبت کند. بقیه مدل با گرادیان‌های نسبتاً کوچک شامل اتم‌های مقید<sup>۳</sup> است که انتظار می‌رود الگوی مشابهی از

<sup>1</sup> Variable Node Multiscale Method

<sup>2</sup> Independent atoms

<sup>3</sup> Constrained atoms

پاسخ پیوسته را دنبال کنند و درجه آزادی آنها توسط میدان اجزا محدود مربوطه بر حسب اتم‌های مستقل قرار گرفته روی گره‌های اجزا محدود، کنترل و محدود می‌شود. چنین اتم‌های گره‌ای، اتم‌های نماینده<sup>۱</sup> نامیده می‌شوند [۱۴]، [۱۴]، [۱۴].



شکل ۳-۳- یک مدل نمونه از تحلیل به روش چند مقیاسی QC.

فرمول‌بندی QC با روش‌های استاندارد تفاوت دارد، زیرا انرژی هر المان را مستقیماً از محاسبات اتمی ساختار بلوری به دست می‌آورد. ابتدا، مدل پیوسته را به طور منحصربه‌فردی به یک ساختار بلوری فرضی در زیر آن مرتبط می‌کنیم. سپس مجموعه‌ای از اتم‌ها که نزدیک‌ترین فاصله را به نقاط انتگرال‌گیری<sup>۲</sup> المان دارند، به عنوان اتم‌های نماینده انتخاب می‌شوند. به این ترتیب، انرژی هر المان با انرژی یک اتم خاص (اتم نماینده) که در درون آن قرار دارد، نمایش داده می‌شود. برای محاسبه انرژی اتم‌های نماینده، هر اتم نماینده درون یک خوشه بلوری کوچک<sup>۳</sup> که شامل همسایگانش در شعاع کریستالی است ( $R_c$ )، قرار داده می‌شود. انرژی اتم‌های نماینده از مدل اتمی مناسب محاسبه می‌شود. برای محاسبه انرژی‌ها، باید تغییر شکل کریستال و میدان جابه‌جایی پیوسته در ارتباط قرار گیرند. این فرمولاسیون به نظریه پیوسته غیرمحلی مربوط می‌شود [۴۱]. رویکرد استاندارد که غالباً در نظریه‌های مولکولی الاستیسیته کریستال دنبال می‌شود، قانون کوشی-بورن<sup>۴</sup> است که در آن موقعیت‌های اتمی از

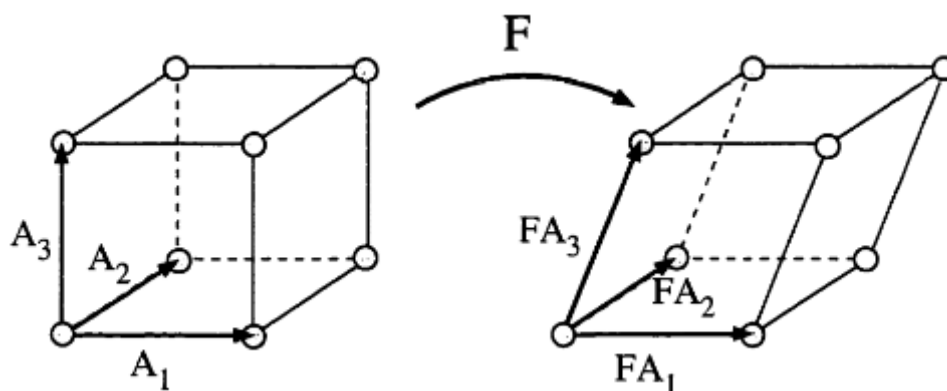
<sup>۱</sup> Representative atoms

<sup>۲</sup> Quadrature points

<sup>۳</sup> Crystallite

<sup>۴</sup> Cauchy-Born

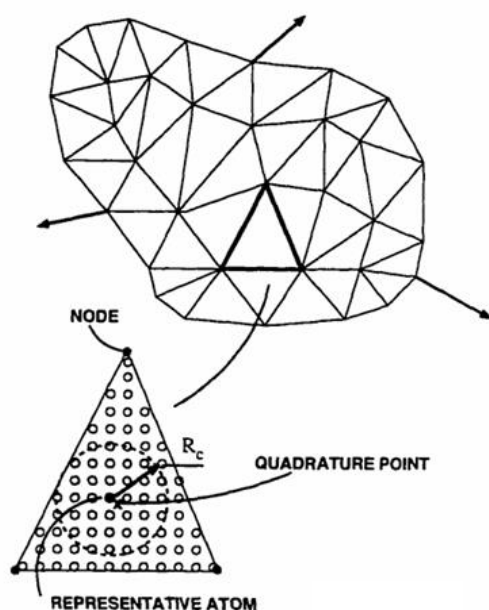
طریق گرادیان تغییر شکل محلی  $\bar{F}$  به میدان‌های پیوسته مرتبط می‌شود. ساختار کریستال تغییر شکل یافته با اعمال  $\bar{F}$  به پایه بلوری کریستال بدون تغییر و سپس بازسازی کریستال از بردارهای پایه تغییر یافته به دست می‌آید (شکل ۳-۴). به این ترتیب، هر ذره پیوسته به وسیله یک کریستال نامتناهی که دچار تغییر شکل همگن شده است، نمایان می‌شود. در نظریه QC، این محدودیت تحت عنوان فرمولاسیون محلی QC بیان شده است [۴۱]، [۴۱].



شکل ۳-۴ یک شبکه بدون اعوجاج با بردارهای شبکه  $A$ ، با اعمال گرادیان تغییر شکل موضعی  $F$  به پیکربندی تغییر شکل یافته نگاشت می‌شود [۴۱].

در فرمولاسیون غیرمحلی QC، هر اتم درون کریستال نماینده مطابق با میدان جابه‌جایی پیوسته واقعی در موقعیت آن جابه‌جا می‌شود. زمانی که اندازه المان کوچک‌تر از شعاع کریستال نماینده می‌شود، اعضای کریستال نماینده ممکن است درون المان‌های مختلف قرار گیرند و تغییر شکل غیرهمگن را تجربه کنند. در مدل‌سازی عددی، از ترکیبی از المان‌ها محلی و غیرمحلی استفاده می‌شود. مناطق دور از نقص‌ها و ناهنجاری‌ها با المان‌ها محلی مدل‌سازی می‌شوند، در حالی که نواحی نزدیک به نقص‌ها یا با ویژگی‌های پیچیده‌تر با المان‌ها غیرمحلی تحلیل می‌شوند [۴۱]. فرمولاسیون‌های محلی و غیرمحلی به شرطی که اندازه المان به اندازه کافی بزرگ باشد تا به طور کامل کریستال نماینده‌ای که در اطراف نقطه انتگرال‌گیری آن قرار دارد، را در بر بگیرد معادل می‌شوند. اما وقتی که اندازه المان کوچک‌تر از  $(R_c)$  می‌شود، اعضای کریستال نماینده ممکن است در داخل المان‌ها مختلف قرار بگیرند و میدان جابه‌جایی غیرهمگن را تجربه کنند.

برای توضیح فرمول QC، انرژی کل سیستم را می‌توان با جمع کردن انرژی تمام اتم‌های دامنه (اعم از اتم‌های مقید و مستقل) محاسبه کرد. به‌منظور ایجاد ارتباط بین مدل پیوسته و ساختار اتمی، ابتدا یک مبدأ مختصات کلی در پیکربندی اولیه تعریف می‌شود که به‌طور یکتا مدل پیوسته را به ساختار بلوری زیرین مرتبط می‌سازد (شکل ۳-۵). سپس در هر نقطه‌ی انتگرال‌گیری مش اجزای محدود، نزدیک‌ترین اتم در ساختار بلوری به‌عنوان اتم نمونه انتخاب می‌گردد. در ادامه، ناحیه‌ی بلوری مجاور این اتم در حالت اولیه، تحت تأثیر میدان تغییر شکل حاصل از حل مدل پیوسته، دچار تغییر شکل می‌شود. انرژی این ناحیه، با استفاده از مدل اتمی مناسب (نظیر پتانسیل EAM یا لئارد-جونز)، محاسبه شده و در روند کلی تحلیل مورد استفاده قرار می‌گیرد.



شکل ۳-۵- گسسته‌سازی المان محدود (FEM) که المان، شبکه کریستالی زیرین و اتم نماینده را نشان می‌دهد [۴۱].

در حالت کلی نوع رفتار تغییر شکل بسته به نوع المان متفاوت است. در المان‌های محلی (مطابق با بخش ۳-۲-۱)، تغییر شکل به‌صورت همگن و بر اساس گرادیان تغییر شکل محلی اعمال می‌شود. در مقابل، در المان‌های غیر محلی (مطابق با بخش ۳-۲-۲)، موقعیت هر اتم به‌صورت غیر همگن و متناسب با جابه‌جایی میان‌یابی شده در محل آن اتم به‌روزرسانی می‌گردد. در نتیجه، میدان تغییر شکل در این

نوع المان‌ها غیرهمگن خواهد بود. سپس، انرژی کل اتم نماینده با استفاده از مدل اتمی مناسب محاسبه شده و این انرژی و مشتق‌های آن (مانند نیرو و تانسور تنش) به مدل اجزای محدود در نقطه‌ی انتگرال‌گیری بازگردانده می‌شوند. با ریز کردن مش در نواحی با کرنش بالا و استفاده از مدل غیرمحلی در این مناطق، اثرات غیرخطی هسته‌های نقص (مانند نابجایی‌ها) به‌درستی بازتاب می‌یابند. در حالی که در نواحی با کرنش کم و دور از هسته، مدل محلی به‌خوبی رفتار الاستیک خطی را تقریب می‌زند. بدین ترتیب، پدیده‌های پیچیده‌ای که در آن‌ها چندین مقیاس طولی دخیل هستند را می‌توان با تعداد بسیار کمتری از درجات آزادی، در مقایسه با روش‌هایی چون استاتیک شبکه‌ای<sup>۱</sup> و دینامیک مولکولی<sup>۲</sup>، مدل‌سازی نمود. چراکه در روش QC، هر المان از مش، صرف‌نظر از اندازه‌اش، تنها با یک اتم نماینده توصیف می‌شود [۴۲].

در این پژوهش، برای نمایش سازوکار روش، از پتانسیل اتم جاسازی‌شده<sup>۳</sup> (EAM) که توسط داو و باسکس<sup>۴</sup> در سال ۱۹۸۳ توسعه یافته است، برای محاسبه انرژی کل سیستم استفاده شده است. در مدل EAM، انرژی کل یک کریستال از دو مؤلفه تشکیل می‌شود: (۱) انرژی جاسازی که برهم‌کنش بین هسته‌ها و گاز الکترونی پیرامون آن‌ها را مدل می‌کند، و (۲) یک مؤلفه دیگر که برهم‌کنش مستقیم بین هسته‌ها را (مانند دوجسمی) در نظر می‌گیرد. در این چارچوب، چگالی انرژی کرنش که با نماد  $W$  نمایش داده می‌شود، قابل استخراج و تحلیل خواهد بود [۴۳].

$$W = \frac{1}{V} \sum_i [U_i(\rho_i) + \Phi_i] \quad (1-3)$$

در این رابطه،  $V$  حجم کل کریستال است و نمایه  $i$  روی تمام اتم‌های شبکه بلوری تکرار می‌شود.  $\rho_i$  چگالی الکترونی محیطی در محل اتم  $i$  است که از تأثیر چگالی سایر اتم‌های مجاور حاصل می‌شود. تابع  $U_i(\rho_i)$  بیانگر انرژی لازم برای جاسازی اتم  $i$  در این چگالی الکترونی است و  $\Phi_i$  انرژی کل برهم‌کنش اتم  $i$  با هسته‌های اطراف می‌باشد. این مدل با در نظر گرفتن هم‌زمان برهم‌کنش‌های هسته‌ای و اثرات چگالی الکترونی، توصیفی دقیق و قابل اعتماد از رفتار انرژی در مواد فلزی ارائه می‌دهد و به‌ویژه در روش‌های چندمقیاسی مانند QC کاربرد گسترده‌ای دارد.

<sup>1</sup> Lattice statics

<sup>2</sup> Molecular Dynamics

<sup>3</sup> Embedded-Atom Method

<sup>4</sup> Daw and Baskes

### ۳-۲-۱- معرفی المان‌های محلی

در فرمول‌بندی محلی روش QC، برای هر نقطه انتگرال‌گیری در شبکه اجزای محدود، انرژی کرنشی و مشتقات آن با فرض همگن بودن میدان تغییر شکل محاسبه می‌شود. مطابق با تقریب کاشی-بورن، فرض می‌شود که هر نقطه در ماده با یک بلور بی‌نهایت که تحت کرنش همگن قرار گرفته است، مدل می‌شود. از آنجاکه کرنش همگن موجب از بین رفتن مرجع مکانی مطلق بین مش پیوسته و شبکه بلوری می‌شود، انتخاب اتم نماینده دلخواه خواهد بود و می‌توان فرض کرد که این اتم در مبدأ مختصات قرار دارد. موقعیت اتم‌ها در پیکربندی اولیه با استفاده از پایه‌های برداری شبکه بلوری تعریف شده و سپس با ضرب در گرادیان تغییر شکل  $F$  به پیکربندی تغییر شکل یافته منتقل می‌شود.

$$x(m) = FX(m), \quad m \in Z^3 \quad (2-3)$$

که در آن  $X(m)$  مختصات اتم می‌باشد.

بنابراین، به جای مدل‌سازی یک بلور بی‌نهایت، از یک بلورک نماینده با شعاع  $R_c$  استفاده می‌شود که باید به اندازه‌ای بزرگ باشد تا پس از تغییر شکل، تمامی اتم‌هایی که در محدوده تاثیر<sup>۱</sup> قرار می‌گیرند، در کریستال حضور داشته باشند. برای تضمین این شرط، شعاع تاثیرگذاری<sup>۲</sup> به صورت یک مسئله مقدار ویژه تعریف می‌شود که بزرگ‌ترین مقدار ویژه ماتریس  $F^{-T}F^{-1}$  تعیین‌کننده بیشترین فاصله‌ای است که یک اتم از مبدأ می‌تواند داشته باشد تا پس از اعمال تغییر شکل همچنان در محدوده تاثیر باقی بماند.

$$R_{inf} = R_c \sqrt{\lambda_{max}} \quad (3-3)$$

پس از تأیید کرنش بر اساس شرط  $R_{inf} < R_c$ ، انرژی کرنشی  $W$  بر پایه‌ی مدل اتمی محاسبه می‌شود. در اینجا از مدل EAM برای محاسبه انرژی استفاده می‌شود. در این مدل، انرژی کل به صورت مجموعی از انرژی جاسازی اتم در چگالی الکترونی محیطی و انرژی برهم‌کنش زوجی بین اتم‌ها تعریف می‌شود. برای بلور خالص تحت کرنش همگن، به دلیل تقارن انتقالی، تنها کافی است انرژی یک اتم و همسایگان در محدوده تاثیر محاسبه گردد. سهم محلی در نیروی نامتعادل باقیمانده و ماتریس سختی کلی به صورت زیر است:

<sup>1</sup> Cutoff

<sup>2</sup> Influence radius

$$\frac{\partial \Pi_h}{\partial \psi_a} = \sum_e^{local} \int_{\Omega_h^e} (\mathbf{P} \cdot \nabla_0 N_a) dV_0 - \int_{B_0} \rho_0 \mathbf{B} N_a dV_0 - \int_{\partial B_{02}} \mathbf{T} N_a dS_0 \quad (4-3)$$

$$\frac{\partial^2 \Pi_h}{\partial \psi_a \partial \psi_b} = \sum_e^{local} [\mathbf{C}: (\nabla_0 N_a \otimes \nabla_0 N_b)] dV_0 \quad (5-3)$$

که  $a$  و  $b$  شماره گره ها هستند. در ادامه، با مشتق گیری از تابع انرژی کرنشی نسبت به گرادیان تغییر شکل، تانسور تنش پایولا-کیرشهف<sup>۱</sup> مرتبه اول  $\mathbf{P} = \partial W / \partial F$  و تانسور سختی مماسی لاگرانژی  $\mathbf{C} = \partial^2 W / \partial F^2$  استخراج می شوند. این کمیت ها سپس در فرمول بندی اجزای محدود برای محاسبه نیروی باقیمانده و ماتریس سختی به کار گرفته می شوند. همچنین از نگاشت های استاندارد بین تانسورهای لاگرانژی و مقادیر در فضای اویلری استفاده می شود تا تنش کیرشهف و مدول های مماسی فضایی به دست آیند. تمامی این محاسبات در داخل هر المان محلی که  $F$  در آن ثابت فرض شده است انجام می شود، و نتایج آن به صورت وزنی وارد انتگرال گیری عددی در نقطه گوس می گردد. در نهایت، این فرمول بندی محلی، ساختار کامل روابط سازگاری برای مناطق با تغییر شکل همگن را فراهم می آورد [۴۳].

### ۳-۲-۲- معرفی المان های غیر محلی

در فرمول بندی غیر محلی QC، هر نقطه انتگرال گیری با یک اتم نماینده مدل می شود که موقعیت همسایگان آن مطابق با میدان جابه جایی پیوسته تغییر می کند. برخلاف حالت محلی، به دلیل ماهیت غیر همگن تغییر شکل، مبدأ شبکه بلوری حفظ می شود و موقعیت اتم ها در بلورک نماینده باید نسبت به مش پیوسته به صورت صریح در نظر گرفته شود. مختصات اتم های بلورک نماینده در المان  $e$  به صورت  $\mathbf{X}^e(m) = \mathbf{R}^e + m_I A_I$  تعریف می شود، که در آن  $\mathbf{R}^e$  مختصات کارتیزی کلی اتم نماینده و  $m_I$  مولفه های عدد صحیح بردار شاخص شبکه بلوری است که این بردار جهت شمارش اتم ها در شبکه بلوری براوه ای استفاده می شود و  $A_I$  پایه شبکه براوه<sup>۲</sup> است که جهت و اندازه فاصله های بین اتم ها در شبکه بلوری را مشخص می کنند.

<sup>1</sup> Piola-Kirchhoff

<sup>2</sup> Bravais lattice basis vectors

پس از آن، موقعیت تغییر شکل یافته اتم‌ها با استفاده از میان‌یابی میدان جابه‌جایی در مش اجزای محدود تعیین می‌شود:

$$\mathbf{x}^e(m) = \mathbf{X}^e(m) + \psi_a N_a(\mathbf{X}^e(m)) \quad (۶-۳)$$

که  $\psi_a$  و  $N_a$  به ترتیب بردار جابه‌جایی گره  $a$  از شبکه اجزای محدود و تابع شکل گره  $a$  در محل  $\mathbf{X}^e(m)$  می‌باشند.

شعاع بلورک نماینده  $R_c$  نیز باید مانند حالت محلی مشخص شود، اما به دلیل غیرخطی بودن تغییر شکل، تعیین شعاع تأثیرگذاری به صورت عددی انجام می‌گیرد. این کار با نمونه‌برداری از کره تأثیر در پیکربندی تغییر شکل یافته و معکوس‌سازی میدان جابه‌جایی انجام می‌شود و مقدار نهایی با روش درونیابی سهمی برنت<sup>۱</sup> محاسبه شده و به نزدیک‌ترین پوسته اتمی گرد می‌شود [۴۴].

در حالت غیرمحلی به دلیل عدم وجود کرنش همگن، تعریف تانسورهای تنش و سختی مانند حالت محلی ممکن نیست؛ بنابراین، نیروی باقی‌مانده برای اتم نماینده المان  $e$  به صورت ترکیب میدان جابه‌جایی، تابع چگالی الکترونی و پتانسیل برهم‌کنش محاسبه می‌شود و روابط مشتق‌گیری شامل مقادیر هندسی از میدان‌های شکل هستند.

$$\frac{\partial \Pi_h}{\partial \psi_a} = \sum_e^{nontlocal} \left\{ \frac{\omega^e}{\Omega} \sum_m \left[ \left( \sum_m [U'(\rho_e) f'(r_e^m) + \frac{1}{2} \phi'(r_e^m)] \right) \frac{\partial r_e^m}{\partial \psi_a} \right] \right\} \quad (۷-۳)$$

برای هر یک از این المان‌ها، وزن انتگرال‌گیری آن با نماد  $\omega$  مشخص می‌شود که معمولاً برابر با حجم مؤثر یا وزن گوس در آن نقطه است. این مقدار بر حجم اتمی  $\Omega$  تقسیم می‌شود تا چگالی انرژی به صورت نرمال شده درآید.

درون هر المان غیرمحلی، یک بلورک نماینده در نظر گرفته می‌شود که شامل مجموعه‌ای از اتم‌ها با اندیس  $m$  است. این اتم‌ها نسبت به اتم مرکزی در همان بلورک موقعیت مشخصی دارند و فاصله بین هر اتم  $m$  و اتم مرکزی با نماد  $r_e^m$  نمایش داده می‌شود. این فاصله پس از تغییر شکل محاسبه شده و معیاری از کشش یا فشردگی در اطراف اتم مرکزی است.

<sup>۱</sup> Brent

مشتق انرژی جای گذاری نسبت به چگالی الکترونی با نماد  $U'(\rho_e)$  و مشتق تابع چگالی الکترونی نسبت به فاصله اتمی با نماد  $f'(r_e^m)$  نمایش داده می شود. همچنین مشتق پتانسیل جفت نسبت به فاصله اتمی با نماد  $\phi'(r_e^m)$  مشخص می شود. این ترکیب از مشتق ها بیان گر حساسیت انرژی اتم به تغییر در موقعیت اطراف آن است [۴۴].

در نهایت، عبارت  $\frac{\partial r_e^m}{\partial \psi_a}$  مشتق فاصله بین اتم ها نسبت به جابه جایی گره  $a$  را نشان می دهد و مشخص می کند که چگونه جابه جایی گره های شبکه ای اجزای محدود روی موقعیت های اتمی تأثیر می گذارد. این مشتق از توابع شکل شبکه ای FEM به دست می آید و پل ارتباطی میان فضای پیوسته ای اجزای محدود و فضای گسسته ای اتمی است.

برای همخوانی نتایج نیرو با دینامیک شبکه ای، باید همه اتم ها در شعاع  $2R_c$  از اتم نماینده در محاسبات گنجانده شوند، زیرا نیروهای یک اتم به تمام اتم های موجود در شعاع تأثیر اطراف همسایگان آن وابسته است. این امر باعث می شود که در نواحی دارای نقص (مانند هسته نابجایی یا سطح آزاد)، المان های غیرمحلی باید در ناحیه ای به شعاع  $2R_c$  قرار گیرند تا دقت مدل حفظ شود.

در نهایت، ماتریس سختی غیرمحلی نیز به صورت مشابه با مشتق دوم انرژی نسبت به میدان جابه جایی و با استفاده از مشتقات میدان های شکل و جابه جایی تعیین می شود. ماتریس سختی کل در مش هایی که شامل المان های محلی و غیرمحلی هستند، به صورت برهم نهی روابط محلی و غیرمحلی حاصل می گردد [۴۴].

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Pi_h}{\partial \psi_a \partial \psi_b} = & \sum_e^{nonlocal} \frac{\omega_e}{\Omega} \left\{ U'''(\rho_e) \left[ \sum_m f'(r_e^m) \frac{\partial r_e^m}{\partial \psi_a} \right] \left[ \sum_n f'(r_e^n) \frac{\partial r_e^n}{\partial \psi_b} \right] \right. \\ & + \sum_m \left[ \left( U'(\rho_e) f''(r_e^m) + \frac{1}{2} \phi''(r_e^m) \right) \frac{\partial r_e^m}{\partial \psi_a} \frac{\partial r_e^m}{\partial \psi_b} \right. \\ & \left. \left. + \left( U'(\rho_e) f'(r_e^m) + \frac{1}{2} \phi'(r_e^m) \right) \frac{\partial^2 r_e^m}{\partial \psi_a \partial \psi_b} \right] \right\} \end{aligned} \quad (۸-۳)$$

$$\frac{\partial^2 \Pi_h}{\partial \psi_a \partial \psi_b} = \sum_e^{nonlocal} \frac{\omega^e}{\Omega} \left\{ U''(\rho_e) \left[ \sum_m f'(r_e^m) \frac{\partial r_e^m}{\partial \psi_a} \right] \left[ \sum_n f'(r_e^n) \frac{\partial r_e^n}{\partial \psi_b} \right] + \sum_m \left[ \left( U'(\rho_e) f''(r_e^m) + \frac{1}{2} \phi''(r_e^m) \right) \frac{\partial r_e^m}{\partial \psi_a} \frac{\partial r_e^m}{\partial \psi_b} + \left( U'(\rho_e) f'(r_e^m) + \frac{1}{2} \phi'(r_e^m) \right) \frac{\partial^2 r_e^m}{\partial \psi_a \partial \psi_b} \right] \right\} \quad (9-3)$$

در این معادله، مشتق دوم انرژی کل  $\partial^2 \Pi_h$  نسبت به جابه‌جایی‌های گره‌های  $\partial \psi_a$  و  $\partial \psi_b$  محاسبه می‌شود که در واقع همان ورودی‌های ماتریس سختی غیرمحملی هستند. جمع اول روی تمام المان‌هایی انجام می‌شود که به صورت غیرمحملی مدل شده‌اند. برای هر المان غیرمحملی  $e$ ، وزنی به نام  $\omega^e$  (حاصل از انتگرال‌گیری عددی، مثل وزن گوس یا حجم مؤثر) ضرب می‌شود که مقدار آن نشان‌دهنده اهمیت آن نقطه در محاسبات کلی است.

ترم اول نشان‌دهنده تأثیر مشتق دوم انرژی جای‌گذاری  $U''(\rho_e)$  در ارتباط با مشتق‌های فاصله بین اتم‌ها است. در اینجا، ابتدا روی تمام اتم‌ها جمعی از مشتق‌های فاصله  $r_e^m$  نسبت به مؤلفه جابه‌جایی گره‌ها انجام می‌شود و سپس حاصل ضرب آن‌ها وارد معادله می‌شود. ترم دوم شامل جمع روی هر اتم  $m$  بلورک نماینده است و ترکیبی از مشتق دوم انرژی جای‌گذاری و مشتق دوم پتانسیل جفتی  $\phi''(r_e^m)$  را شامل می‌شود. این عبارت در واقع اثر مستقیم هر اتم بر سختی موضعی را با توجه به تغییر فاصله‌اش از اتم مرکزی نسبت به جابه‌جایی دو گره موردنظر بررسی می‌کند. ترم سوم ترکیبی از مشتق اول انرژی جای‌گذاری و پتانسیل جفتی است که با مشتق دوم فاصله نسبت به دو مؤلفه جابه‌جایی ضرب شده است. این ترم بازتاب‌دهنده تأثیر غیرخطی تغییر موقعیت اتم‌ها بر سختی کلی سیستم است و در حالت‌های قوی‌تر کرنش غیرخطی اهمیت بیشتری پیدا می‌کند [۴۴].

### ۳-۲-۳- معیارهای غیرمحملی

یکی از مهم‌ترین مراحل، تشخیص اینکه کدام المان‌های شبکه محاسباتی باید به صورت محلی و کدام باید به صورت غیرمحملی مدل شوند، می‌باشد. در ابتدا، یک معیار هندسی ساده پیشنهاد می‌شود که بر

اساس آن، اگر شعاع بلورک نماینده  $R_c$  به طور کامل درون یک المان در پیکربندی تغییر شکل یافته جای گیرد، آن المان به صورت محلی و در غیر این صورت، به صورت غیر محلی در نظر گرفته می شود. اگرچه این معیار از نظر فیزیکی منطقی است، اما از لحاظ محاسباتی ممکن است ناکارآمد باشد، زیرا در بسیاری از نواحی غیر ضروری باعث استفاده از مدل غیر محلی می شود.

برای بهینه سازی انتخاب المان ها، از یک معیار سینماتیکی دقیق تر استفاده می شود که مبتنی بر دومین ثابت از تانسور کرنش لاگرانژی است. این معیار که مستقل از دستگاه مختصات است، به شکل زیر تعریف شده و اگر مقدار آن از یک حد بحرانی مشخص  $C_c$  بیشتر باشد، المان به عنوان غیر محلی در نظر گرفته می شود. با این حال، این معیار به تنهایی کافی نیست، چرا که ممکن است برخی المان ها در ظاهر دارای کرنش بالا باشند، ولی انرژی کرنشی واقعی آن ها ناچیز باشد [۴۴].

$$H_E = \frac{1}{2} [\mathbf{E} : \mathbf{E} - (tr \mathbf{E})^2] \quad (۱۰-۳)$$

برای رفع این مشکل، یک معیار ترمودینامیکی مکمل معرفی می شود که بر اساس آن تنها در صورتی که انرژی کرنشی المان از یک حد پایین مشخص (مثلاً  $W_{tol} = 10^{-3}$ ) بیشتر باشد، آن المان به عنوان غیر محلی کامل در نظر گرفته می شود. بنابراین، فقط المان هایی که هم کرنش بالا و هم انرژی قابل توجه دارند، با فرمول غیر محلی مدل سازی می شوند.

علاوه بر این، به منظور اطمینان از دقت در مدل سازی نواحی مجاور به عیوب و سطوح، المان هایی که در فاصله  $2R_c$  از المان های غیر محلی کامل قرار دارند، نیز به صورت غیر محلی (به دلیل مجاورت) در نظر گرفته می شوند. همچنین، المان های واقع در نواحی فصل مش ها یا سطوح آزاد، که ممکن است دچار کاهش در هماهنگی اتمی شوند (برخی از اتم ها دیگر تعداد همسایه کامل یعنی ۱۲ اتم ندارند)، باید به صورت غیر محلی مدل شوند.

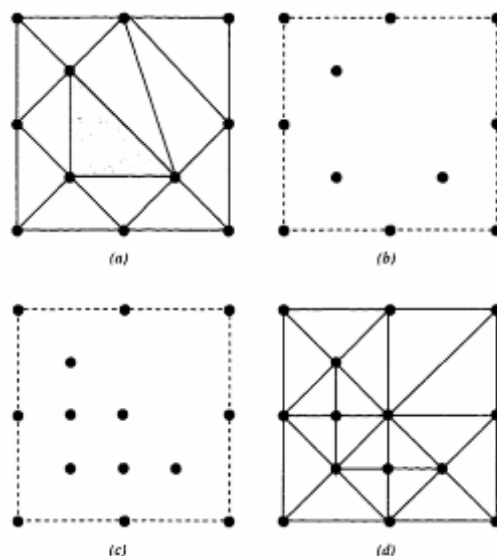
در پایان، فرایند تشخیص وضعیت المان ها (محلی یا غیر محلی) در ابتدای هر مرحله بارگذاری انجام می شود و تا پایان آن مرحله ثابت باقی می ماند تا از ناپیوستگی انرژی و اختلال در همگرایی حل عددی جلوگیری شود. این روش ترکیبی از دقت بالا در نواحی بحرانی و صرفه جویی در هزینه محاسباتی در سایر نواحی را فراهم می آورد.

### ۳-۲-۴- مش بندی تطبیقی

در عمل، فرایند تطبیق مش به صورت گام به گام انجام می شود. در هر گام بارگذاری، ابتدا شرایط مرزی به روزرسانی شده و سپس هر المان مش بررسی می شود تا مشخص شود که آیا با معیار تطبیق مش مطابقت دارد یا خیر. در تحلیل های QC که به پدیده های کریستالی مانند لغزش حساس اند، استفاده از معیار انرژی کرنشی ممکن است به دلیل وجود مؤلفه هیدروستاتیک قوی (مثلاً در زیر پانچ)، ناکارآمد باشد. از این رو، پیشنهاد می شود همان معیاری که برای تشخیص نواحی غیرموضعی به کار می رود، برای تطبیق مش نیز استفاده شود. پس از ارزیابی تمام المان ها، فرایند واقعی تطبیق آغاز می شود. گره های جدید در وسط اضلاع المان ها علامت گذاری شده ایجاد شده و سپس به نزدیک ترین مکان های اتمی منتقل می شوند. الزام حضور گره ها در مکان های اتمی باعث جلوگیری از ایجاد المان ها تهی می شود که از نظر عددی ناپایدار و فاقد معنا هستند. همچنین از تکرار گره ها جلوگیری می شود. این مکانیزم به طور طبیعی باعث تعیین یک طول مقیاس قطع متناسب با فاصله اتمی می شود. در حالی که در مدل های پیوسته این طول مقیاس باید به صورت دلخواه توسط تحلیل گر تعیین شود، در روش QC این مقدار به طور طبیعی از ساختار گسسته شبکه بلوری ناشی می شود [۴۴].

در ادامه، مش جدید با استفاده از الگوریتم سه ضلعی سازی دلونی<sup>۱</sup> ایجاد می شود. این الگوریتم مثلث هایی تولید می کند که تاحداً مکان به صورت متساوی الاضلاع هستند و از نظر هندسی خوش رفتارند. در این الگوریتم، هیچ گره ای نباید در داخل دایره محاطی مثلث های نهایی قرار گیرد. در نهایت، جابه جایی گره های جدید از روی مقادیر گره های همسایه موجود تخمین زده شده و انرژی پتانسیل کل مدل نسبت به درجات آزادی آزاد بهینه سازی می شود.

<sup>۱</sup> Delaunay triangulation



شکل ۳-۶- فرایند تطبیق با (الف) یک شبکه بدون تغییر شکل با یک المان هدف برای تطبیق آغاز می‌شود، در (ب) همان شبکه با المان‌های حذف شده نشان داده شده است، تطبیق در (ج) که گره‌های جدید اضافه شده‌اند و شبکه نهایی پس از مثلث‌بندی دلونی در (د) ارائه شده است، دنبال می‌شود [۴۱].

### ۳-۳- یادگیری عمیق

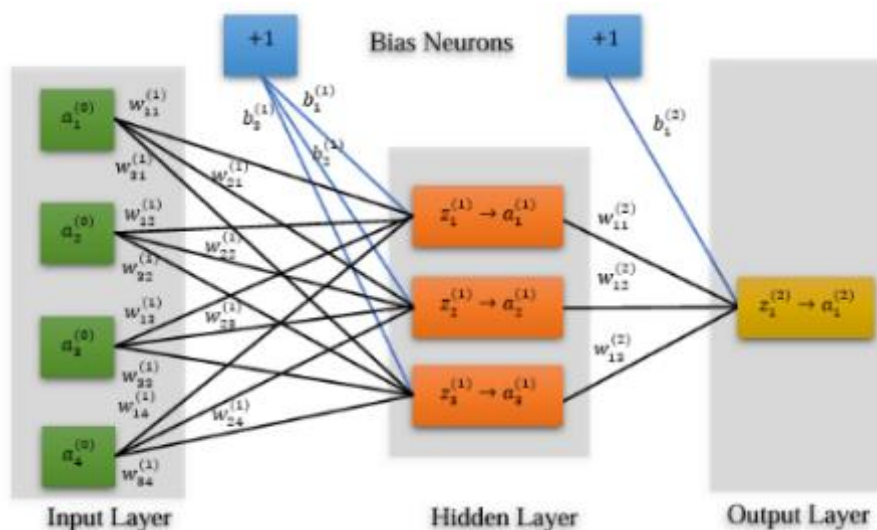
یادگیری عمیق شاخه‌ای از تکنیک‌های هوش مصنوعی است که در آن سیستم‌ها و مدل‌ها توانایی یادگیری از داده‌ها را بدون فرمول‌بندی فیزیکی صریح به دست می‌آورند. یک شبکه عصبی مصنوعی<sup>۱</sup> (ANN) یک مدل یادگیری ماشینی است که از ساختار مغز انسان الهام گرفته شده و از نورون‌ها (واحدهای پردازش) تشکیل شده است که در تعدادی لایه سازماندهی شده‌اند. هر نورون<sup>۲</sup> ورودی‌ها را دریافت می‌کند، آنها را از طریق وزن‌ها و بایاس‌ها<sup>۳</sup> پردازش می‌کند و یک خروجی تولید می‌کند [۴۵]. ANN از سه بخش اصلی تشکیل شده است: لایه ورودی، که مسئول دریافت داده‌های اولیه است؛ لایه‌های پنهان، که پردازش پیچیده‌ای را روی داده‌ها انجام می‌دهند؛ و لایه خروجی، که نتیجه نهایی را تولید می‌کند. این مدل‌ها به دلیل قدرت پیش‌بینی بالای آنها برای مسائل پیچیده و غیرخطی، سازگاری آنها برای حل مسائل مختلف مانند طبقه‌بندی و رگرسیون و توانایی آنها در یادگیری

<sup>۱</sup> Artificial Neural Network

<sup>۲</sup> Neuron

<sup>۳</sup> Bias

ویژگی‌های مهم از داده‌ها استفاده می‌شوند. برخلاف الگوریتم‌های سنتی، شبکه‌های عصبی ممکن است به طور خودکار الگوهای پنهان در داده‌ها را شناسایی کرده و نتایج دقیقی ارائه دهند [۴۷], [۴۶]. این شبکه‌ها از مجموعه‌ای از واحدهای به هم پیوسته که نورون شناخته می‌شوند، تشکیل شده‌اند. این نورون‌ها به صورت لایه‌ای سازمان‌دهی شده‌اند. هر نورون (همان‌طور که در شکل ۳-۷ نشان داده شده است)، یک واحد پردازشی پایه است که یک یا چند ورودی دریافت می‌کند، بر روی آن‌ها عملیات ریاضی انجام داده و یک خروجی تولید می‌کند. هر اتصال بین نورون‌ها دارای یک وزن است که نشان‌دهنده شدت اثر آن ورودی بر خروجی نورون می‌باشد. همچنین، هر نورون دارای یک بایاس است که نقش یک مقدار پایه یا شیفت‌دهنده را در محاسبات ایفا می‌کند. در طی فرایند آموزش، وزن‌ها و بایاس‌ها به گونه‌ای تنظیم می‌شوند که اختلاف بین خروجی پیش‌بینی شده شبکه و مقدار واقعی کاهش یابد.



شکل ۳-۷- نمونه ای شبکه عصبی [۴۱].

یک نرون تنها، یک بردار ورودی  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  دریافت می‌کند و یک خروجی عددی تولید می‌کند.

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} = \mathbf{w}, \quad \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \mathbf{x} \quad (۱۱-۳)$$

$$z = \sum_{i=1}^n w_i x_i + b = \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b = \langle \mathbf{w} | \mathbf{x} \rangle + b, \quad a = \sigma(z) \quad (۱۲-۳)$$

که در آن  $w_i$  وزن مرتبط با ورودی  $x_i$  است، و  $b$  نیز بایاس نرون می‌باشد. نرون ابتدا ترکیب خطی رابطه ۱۲-۳ را محاسبه می‌کند، سپس، خروجی نهایی  $a$  با اعمال یک تابع فعال‌سازی<sup>۱</sup> به مقدار  $z$  به دست می‌آید.

توابع فعال‌ساز نقش مهمی در شبکه‌های عصبی مصنوعی ایفا می‌کنند و به آنها اجازه می‌دهند روابط پیچیده بین ورودی‌ها و خروجی‌ها را مدل‌سازی کنند. برخی از این توابع فعال‌ساز مانند سیگموئید (Sigmoid)، تانژانت هایپربولیک (Tanh)، رلو (ReLU) و غیره در شبکه‌های عصبی بیشتر مورد استفاده قرار می‌گیرند. در مسائل رگرسیون که هدف پیش‌بینی یک مقدار عددی پیوسته است، تابع همانی معمولاً به عنوان تابع فعال‌ساز برای لایه خروجی استفاده می‌شود. این به شبکه اجازه می‌دهد تا مقادیر پیش‌بینی شده را مستقیماً و بدون هیچ تبدیلی خروجی دهد [۴۱].

توابع زیان که به عنوان توابع هزینه یا توابع هدف نیز شناخته می‌شوند، نقش حیاتی در آموزش شبکه‌های عصبی مصنوعی ایفا می‌کنند. این توابع با تعیین کمیت تفاوت بین مقادیر پیش‌بینی شده و مقادیر واقعی، میزان عملکرد مدل را اندازه‌گیری می‌کنند. زیان اساساً معیاری از خطای مدل است. انتخاب یک تابع زیان خاص به ماهیت مسئله‌ای که سعی در حل آن است بستگی دارد. وظایف مختلف، مانند رگرسیون یا طبقه‌بندی، ممکن است به توابع زیان متفاوتی نیاز داشته باشند [۴۱].

### ۳-۱-۳- بهینه‌سازی

در بهینه‌سازی مدل یادگیری ماشین، هدف اصلی کمینه‌سازی تابع زیان است که با به‌روزرسانی وزن‌ها و بایاس‌ها در شبکه عصبی حاصل می‌شود. این به‌روزرسانی بر اساس گرادیان تابع هزینه نسبت به پارامترها انجام می‌شود که معمولاً از طریق روش‌های گرادیان نزولی انجام می‌شود. در این فرایند، وزن‌ها در گام‌های کوچک در جهت منفی گرادیان به‌روزرسانی می‌شوند تا تابع هزینه کمینه شود. ساده‌ترین بهینه‌ساز، گرادیان نزولی است که در آن وزن‌ها در گام‌های ثابت در جهت منفی گرادیان در هر مرحله به‌روزرسانی می‌شوند. گرادیان نزولی تصادفی<sup>۲</sup> (SGD) در هر مرحله به جای استفاده از کل

<sup>۱</sup> Activation function

<sup>۲</sup> Stochastic Gradient Descent

مجموعه داده‌ها، از یک نمونه یا گروه کوچک از داده‌ها استفاده می‌کند که محاسبات را سرعت می‌بخشد. تخمین گشتاور تطبیقی<sup>۱</sup> (Adam) ترکیبی از مومنتوم و RMSProp<sup>۲</sup> است که نرخ یادگیری را به صورت تطبیقی تنظیم می‌کند و معمولاً برای شبکه‌های عصبی عمیق استفاده می‌شود. RMSProp از گرادین میانگین مربعات برای تنظیم پویای نرخ یادگیری استفاده می‌کند [۴۸]. در فرایند آموزش شبکه عصبی، ابتدا از الگوریتم پسانتشار برای محاسبه گرادین‌های تابع هزینه نسبت به وزن‌ها و بایاس‌ها استفاده می‌شود. این گرادین‌ها از لایه‌های خروجی به لایه‌های ورودی منتشر می‌شوند تا تغییرات لازم برای به‌روزرسانی پارامترها حاصل شود. سپس، هنگامی که از یک بهینه‌ساز مانند Adam یا SGD استفاده می‌شود، وزن‌ها و بایاس‌ها به تدریج تنظیم می‌شوند تا خطا به حداقل برسد:

$$w_{t+1} = w_t - \eta \nabla L(w_t) = w_t - \eta \frac{\partial L}{\partial w_t} \quad (۱۳-۳)$$

$$b_{t+1} = b_t - \eta \nabla L(b_t) = b_t - \eta \frac{\partial L}{\partial b_t} \quad (۱۴-۳)$$

که در آن  $w_{t+1}$  و  $b_{t+1}$  به ترتیب وزن‌ها و بایاس‌ها در مرحله  $t + 1$  هستند و  $\eta$  و  $\nabla L$  به ترتیب نرخ یادگیری و گرادین تابع زیان هستند. نرخ یادگیری یک ابرپارامتر است که نرخ تغییر وزن‌ها را در هر مرحله به‌روزرسانی تعیین می‌کند. انتخاب نرخ یادگیری مناسب برای هر مدلی بسیار مهم است. اگر نرخ یادگیری خیلی بالا باشد، مدل ممکن است نتواند به بهینه‌سازی صحیح دست یابد؛ اگر خیلی پایین باشد، فرایند یادگیری کند است و بهینه‌سازی ممکن است ناقص باشد [۴۹].

شبکه‌های عصبی به دلیل داشتن ظرفیت بالای مدل‌سازی، توانایی فراوانی در یادگیری جزئیات و ویژگی‌های ظریف موجود در داده‌های آموزشی دارند. با این حال، این قدرت زیاد می‌تواند به نقطه ضعف تبدیل شود؛ چرا که ممکن است شبکه به جای یادگیری الگوهای واقعی، به یادگیری نویزها و ناهنجاری‌های تصادفی در داده‌ها بپردازد. بیش‌برازش<sup>۳</sup> زمانی رخ می‌دهد که مدل به جای تعمیم‌دهی الگوهای کلی، صرفاً داده‌های آموزشی را حفظ می‌کند. در نتیجه، عملکرد مدل بر روی داده‌های آموزشی بسیار خوب خواهد بود، اما در مواجهه با داده‌های جدید و دیده‌نشده (مثلاً داده‌های آزمون)، عملکرد ضعیفی از خود نشان می‌دهد. در چنین شرایطی، اگرچه معیارهایی مانند دقت یا تابع هزینه در داده‌های

<sup>۱</sup> Adaptive Moment

<sup>۲</sup> Root Mean Square Propagation

<sup>۳</sup> Overfitting

آموزشی بسیار مناسب هستند، اما مدل در تعمیم این دانش به داده‌های واقعی و عملیاتی شکست می‌خورد. در نقطه مقابل، کم‌برازش<sup>۱</sup> زمانی رخ می‌دهد که مدل آن‌قدر ساده است که حتی نمی‌تواند الگوهای اصلی داده‌های آموزشی را نیز یاد بگیرد. در این شرایط، عملکرد مدل در هر دو مجموعه آموزش و آزمون ضعیف خواهد بود. دلایل رایج کم‌برازش عبارت‌اند از:

- تعداد کم نرون‌ها یا لایه‌ها
- زمان آموزش ناکافی
- انتخاب نادرست تابع فعال‌سازی یا ساختار مدل

همچنین استفاده از روش گرادیان نزولی مینی بچ<sup>۲</sup> می‌تواند به کاهش بیش‌برازش کمک کند. براین اساس، به جای استفاده از تمام داده‌ها یا فقط یک نمونه در هر مرحله، از زیرمجموعه کوچکی از داده‌ها استفاده می‌شود که باعث می‌شود مدل نسبت به نقاط داده خاص حساسیت کمتری داشته باشد. در نتیجه، به جلوگیری از یادگیری ویژگی‌های تصادفی یا غیرعادی در داده‌های آموزشی کمک می‌کند. با مینی بچ‌ها، نوسانات بیشتری در فرایند یادگیری وجود دارد که به مدل کمک می‌کند تا از گرافتادن در حداقل‌های محلی جلوگیری کند و به آن اجازه می‌دهد تا به سمت بهینه سراسری حرکت کند [۵۰].

### ۳-۲-۳- تکنیک‌های منظم‌سازی

در یادگیری ماشین، به‌ویژه در زمینه یادگیری عمیق، پیچیدگی مدل‌ها اغلب منجر به یک چالش مهم می‌شود. بیش‌برازش زمانی رخ می‌دهد که یک مدل جزئیات و نویز موجود در داده‌های آموزشی را تا حدی یاد می‌گیرد که بر عملکرد مدل در داده‌های جدید تأثیر منفی می‌گذارد. اساس منظم‌سازی، محدود کردن مدل ما به گونه‌ای است که از بیش‌برازش جلوگیری کند و بنابراین در مجموعه داده‌های دیده نشده عملکرد بهتری داشته باشد. این بخش، بررسی جامعی از استراتژی‌های مورد استفاده برای بهبود توانایی تعمیم شبکه‌های عصبی مصنوعی ارائه می‌دهد [۵۱].

### ۳-۲-۳-۱- منظم‌سازی مبتنی بر جریمه<sup>۳</sup>

<sup>۱</sup> Underfitting

<sup>۲</sup> Mini-batch gradient descent

<sup>۳</sup> Penalty-based regularization

منظم‌سازی مبتنی بر جریمه روشی است که شامل اصلاح تابع زیان با اضافه کردن یک عبارت جریمه به آن است. این روش مقادیر خاصی از پارامترهای مدل را جریمه می‌کند تا از پیچیدگی جلوگیری کند:

- منظم‌سازی  $L1$  با اضافه کردن جریمه‌ای معادل قدر مطلق ضرایب، پراکندگی را افزایش می‌دهد که می‌تواند تعداد ویژگی‌ها<sup>۱</sup> را در مدل کاهش دهد.
- منظم‌سازی  $L2$  جریمه‌ای معادل مربع بزرگی ضرایب اضافه می‌کند و پارامترهای مدل را به کوچک بودن و توزیع خطا بین آنها تشویق می‌کند.
- شبکه الاستیک<sup>۲</sup> جریمه‌های  $L1$  و  $L2$  را ترکیب می‌کند و زمانی مفید است که بین ویژگی‌ها همبستگی وجود داشته باشد.

این بخش از طریق فرمول‌های ریاضی نشان می‌دهد که چگونه این تکنیک‌ها دینامیک آموزش مدل را تغییر می‌دهند و به دستیابی به پیچیدگی کمتر و تعمیم بهتر کمک می‌کنند.

### ۳-۲-۳-۲- توقف زودهنگام<sup>۳</sup>

توقف زودهنگام، نوع متفاوتی از تکنیک منظم‌سازی می‌باشد که تابع زیان را تغییر نمی‌دهد، بلکه خود فرایند آموزش را تغییر می‌دهد. توقف زودهنگام شامل نظارت بر عملکرد مدل در یک مجموعه اعتبارسنجی و توقف آموزش به محض شروع کاهش عملکرد، علی‌رغم بهبود در مجموعه آموزش است. این روش نه تنها به جلوگیری از بیش‌برازش کمک می‌کند، بلکه با کاهش تکرارهای آموزشی غیرضروری، در منابع محاسباتی نیز صرفه‌جویی می‌کند [۵۲].

### ۳-۲-۳-۳- حذف<sup>۴</sup>

روش‌های گروهی (با تمرکز بر حذف)، یک تکنیک تنظیم قدرتمند است که به‌ویژه در آموزش شبکه‌ها محبوب است. برخلاف روش‌های مبتنی بر جریمه، حذف با غیرفعال کردن تصادفی زیرمجموعه‌ای از نورون‌ها در هر تکرار آموزشی کار می‌کند. این تصادفی بودن به تجزیه موقعیت‌هایی که لایه‌های شبکه

<sup>۱</sup> Features

<sup>۲</sup> Elastic Net

<sup>۳</sup> Early stopping

<sup>۴</sup> Dropout

برای اصلاح اشتباهات از لایه‌های قبلی با هم سازگار می‌شوند، کمک می‌کند و در نتیجه مدل را برای تعمیم‌پذیری بهتر توانمندتر می‌سازد. با ادغام این تکنیک‌های تنظیم، متخصصان یادگیری ماشین می‌توانند عملکرد مدل را به طور قابل توجهی افزایش دهند [۵۲].

### ۳-۳-۲-۴- کاهش وزن<sup>۱</sup>

تکنیک منظم‌سازی یا کاهش وزن، روشی مؤثر برای کاهش بیش‌برازش در الگوریتم‌های بهینه‌سازی است. این تکنیک، مدل را تشویق می‌کند تا وزن‌ها را به گونه‌ای تنظیم کند که از بزرگ شدن بیش از حد آنها جلوگیری شود و در نتیجه مدل ساده‌تر شود. کاهش وزن به عنوان یک پارامتر برای بهینه‌ساز انتخاب می‌شود. در کاهش وزن، یک مقدار کوچک به نام پارامتر منظم‌سازی ( $\lambda$ ) تعریف شده و به تابع زیان اضافه می‌شود:

$$L = \text{Loss} + \lambda \sum_i w_i^2 \quad (3-15)$$

### ۳-۳-۳- پیش پردازش داده‌ها

در فرایند آموزش شبکه‌های عصبی مصنوعی، یکی از مراحل کلیدی که تأثیر بسزایی بر عملکرد نهایی مدل دارد، پیش‌پردازش داده‌های ورودی است. این مرحله شامل اعمال تکنیک‌هایی برای آماده‌سازی ویژگی‌ها<sup>۲</sup> جهت ورود به مدل است. از جمله مهم‌ترین اقدامات پیش‌پردازشی می‌توان به مقیاس‌بندی ویژگی‌ها<sup>۳</sup> اشاره کرد که در تمامی الگوریتم‌های یادگیری ماشین، به ویژه روش‌های مبتنی بر گرادیان، نقش حیاتی ایفا می‌کند. در بسیاری از مسائل یادگیری ماشین، ویژگی‌های داده ممکن است مقیاس‌های متفاوتی داشته باشند. به عنوان مثال، یک ویژگی ممکن است در بازه ۱ تا ۱۰ و ویژگی دیگر در بازه ۱ تا ۱۰۰,۰۰۰ قرار داشته باشد. در چنین شرایطی، اگر بدون مقیاس‌بندی داده‌ها وارد مدل شوند، ویژگی‌هایی با مقادیر عددی بزرگ‌تر، اثر غالبی در فرایند آموزش خواهند داشت. این موضوع می‌تواند منجر به رفتار ناپایدار، همگرایی کند و یا حتی واگرایی الگوریتم بهینه‌سازی شود. مقادیر هر ویژگی طوری تغییر داده می‌شوند که میانگین آن صفر و واریانس آن یک شود. فرمول آن به صورت زیر است:

<sup>۱</sup> Weight decay

<sup>۲</sup> Features

<sup>۳</sup> Feature scaling

$$\frac{x - \mu}{\sigma} = x_{Scaled} \quad (۱۶-۳)$$

که در آن  $\mu$  میانگین و  $\sigma$  انحراف معیار ویژگی است. با انجام صحیح مقیاس‌بندی، الگوریتم بهینه‌سازی می‌تواند مؤثرتر عمل کند و مدل نهایی، در برابر داده‌های جدید و نادیده، عملکرد بهتری از خود نشان دهد [۵۳].

### ۳-۳-۴- تنظیم ابرپارامتر

در فرایند آموزش شبکه‌های عصبی، ابرپارامترها<sup>۱</sup> نقش اساسی در تعیین ساختار و عملکرد نهایی مدل ایفا می‌کنند. برخلاف پارامترهای داخلی مانند وزن‌ها و بایاس‌ها که طی فرایند آموزش یاد گرفته می‌شوند، ابرپارامترها پیش از آغاز آموزش تعیین شده و تأثیر مستقیمی بر کیفیت همگرایی، دقت مدل، و توانایی آن در تعمیم‌دهی به داده‌های دیده‌نشده دارند. از جمله ابرپارامترهای مهم می‌توان به نرخ یادگیری، تعداد لایه‌های مخفی، تعداد نورون‌ها در هر لایه، نوع تابع فعال‌سازی، batch size، epochs، نوع بهینه‌ساز، dropout rate و... اشاره کرد.

فرایند تنظیم بهینه این ابرپارامترها<sup>۲</sup>، یکی از مراحل مهم و گاه پرهزینه در طراحی شبکه‌های عصبی محسوب می‌شود. هدف این فرایند، یافتن مجموعه‌ای از مقادیر برای ابرپارامترهاست که منجر به بهترین عملکرد مدل روی داده‌های اعتبارسنجی<sup>۳</sup> گردد [۵۲].

یکی از کتابخانه‌های قدرتمند برای انجام بهینه‌سازی ابرپارامترها، آپتونا<sup>۴</sup> است که در سال‌های اخیر با استقبال گسترده‌ای روبه‌رو شده است. این کتابخانه متن‌باز به زبان پایتون طراحی شده و از ویژگی‌هایی مانند بهینه‌سازی بیزی، جستجوی تطبیقی، پشتیبانی از پارامترهای شرطی و قابلیت متوقف‌سازی زودهنگام<sup>۵</sup> برخوردار است.

در قلب فرایند جستجوی Optuna، الگوریتمی موسوم به TPE<sup>۶</sup> قرار دارد که نوعی روش بهینه‌سازی بیزی محسوب می‌شود. برخلاف روش‌های سنتی مانند Grid Search که به‌صورت تصادفی فضای

<sup>۱</sup> Hyperparameters

<sup>۲</sup> Hyperparameter tuning

<sup>۳</sup> validation set

<sup>۴</sup> Optuna

<sup>۵</sup> Pruning

<sup>۶</sup> Tree-structured Parzen Estimator

جستجو را پیمایش می‌کند، الگوریتم TPE به صورت تطبیقی و هوشمندانه نواحی امیدوارکننده فضای جستجو را شناسایی کرده و نمونه برداری می‌کند. الگوریتم TPE با مدل سازی توزیع احتمال پارامترهایی که در گذشته منجر به عملکرد مطلوب شده اند (توزیع  $l(x)$ ) و پارامترهایی با عملکرد نامطلوب (توزیع  $g(x)$ )، نقطه ای را در فضای پارامترها انتخاب می‌کند که بیشترین نسبت  $\frac{l(x)}{g(x)}$  را داراست. به بیان ساده، این الگوریتم به جای جستجوی تصادفی، از تجربیات قبلی برای انتخاب نمونه های جدید بهره می‌برد [۵۴].

ویژگی های مهم این روش عبارت اند از:

- استفاده مؤثر از تجربیات قبلی برای پیشنهاد بهتر پارامترها.
- سرعت بیشتر در همگرایی نسبت به روش های سنتی.
- پشتیبانی طبیعی از ابرپارامترهای شرطی (مانند انتخاب تابع فعال سازی بسته به ساختار شبکه).
- سازگاری با انواع مدل های پیچیده با فضای جستجوی بزرگ یا غیریوسته.

### ۳-۵- اعتبارسنجی متقابل تودرتو<sup>۱</sup>

یکی از چالش های اصلی در فرایند توسعه مدل های یادگیری ماشین، دستیابی به تخمینی دقیق و بی طرفانه از عملکرد مدل بر روی داده های دیده نشده است. این چالش به ویژه زمانی که مدل شامل فرایند تنظیم هایپرپارامترها باشد، دوچندان می شود. در چنین شرایطی، استفاده از روش های ارزیابی ساده مانند Cross-Validation، ممکن است به تخمینی خوش بینانه از عملکرد مدل منجر شود. برای رفع این مشکل، روش اعتبارسنجی متقابل تودرتو پیشنهاد شده است که هم زمان امکان تنظیم بهینه هایپرپارامترها و ارزیابی بی طرفانه عملکرد مدل را فراهم می کند [۵۵].

اعتبارسنجی متقابل تودرتو شامل دو حلقه ی تودرتو مطابق شکل ۳-۸ می باشد:

- حلقه بیرونی (Outer Loop)

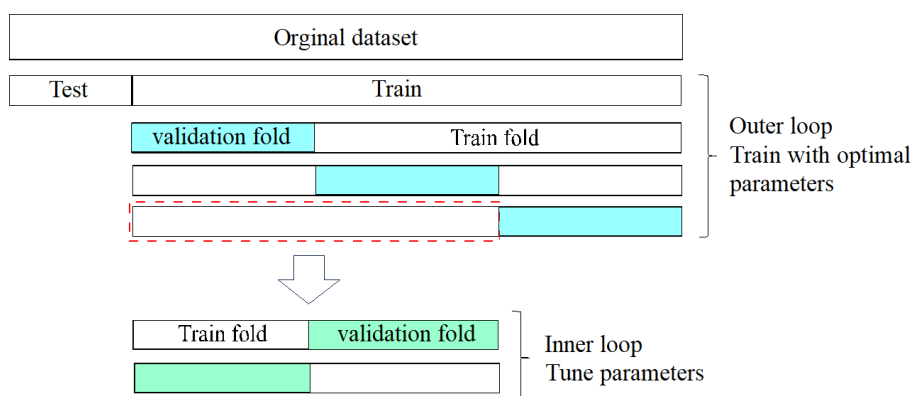
هدف از این حلقه، ارزیابی نهایی مدل روی داده های دیده نشده است. در این حلقه، داده ها به تعدادی بخش (fold) تقسیم می شوند و در هر تکرار، یکی از بخش ها به عنوان داده تست

<sup>۱</sup> Nested Cross-Validation

بیرونی در نظر گرفته می‌شود. مابقی داده‌ها برای آموزش مدل و تنظیم هایپرپارامترها استفاده می‌شوند [۵۶].

- حلقه درونی (Inner Loop)

در این حلقه، داده‌های آموزش حاصل از حلقه بیرونی به چند فولد دیگر تقسیم می‌شوند. سپس با استفاده از روش‌هایی مانند Optuna، ترکیب‌های مختلفی از هایپرپارامترها بررسی می‌شوند تا بهترین عملکرد روی اعتبارسنجی داخلی حاصل شود. پس از یافتن بهترین هایپرپارامترها، مدل نهایی با آن‌ها آموزش داده‌شده و روی داده تست حلقه بیرونی ارزیابی می‌شود [۵۶].



شکل ۳-۸- نمایش شماتیک تکنیک اعتبارسنجی متقابل تودرتو.

### ۳-۳-۶- یادگیری چندوظیفه‌ای<sup>۱</sup> (MTL)

یادگیری چندوظیفه‌ای یکی از رویکردهای نوین و مؤثر در حوزه یادگیری ماشین و به‌ویژه یادگیری عمیق است که با هدف بهبود عملکرد مدل‌ها از طریق آموزش هم‌زمان چندین وظیفه مرتبط توسعه یافته است. برخلاف یادگیری تک‌وظیفه‌ای که در آن هر مدل تنها برای یک خروجی خاص آموزش می‌بیند، در MTL تلاش می‌شود تا با بهره‌گیری از اشتراک‌گذاری ساختاری در لایه‌های شبکه، ویژگی‌های عمومی و اطلاعات مشترک بین وظایف مختلف استخراج شده و به تمام وظایف منتقل

<sup>۱</sup> Multi-Task Learning

شود. این رویکرد به‌ویژه در مسائلی که داده‌های مربوط به برخی وظایف محدود است یا وظایف دارای همبستگی مفهومی یا فیزیکی هستند، کاربرد فراوان دارد.

در معماری‌های مبتنی بر یادگیری چندوظیفه‌ای، ساختار مدل معمولاً از دو بخش اصلی تشکیل می‌شود: بخش اشتراکی<sup>۱</sup> و بخش وظیفه‌محور<sup>۲</sup>. لایه‌های ابتدایی شبکه به‌عنوان بخش اشتراکی، ویژگی‌های کلی و پایه‌ای داده‌ها را استخراج می‌کنند و به‌عنوان ورودی برای مسیرهای جداگانه مربوط به هر وظیفه عمل می‌نمایند، در شکل ۳-۹ معماری آن قابل مشاهده است. در ادامه، برای هر وظیفه شاخه‌ای مستقل از لایه‌های خاص طراحی می‌شود که ویژگی‌های یادگرفته‌شده را به خروجی مربوطه تبدیل می‌نماید. این ساختار امکان استفاده مؤثر از اطلاعات مشترک را فراهم کرده و از بروز بیش‌برازش در داده‌های محدود جلوگیری می‌کند.

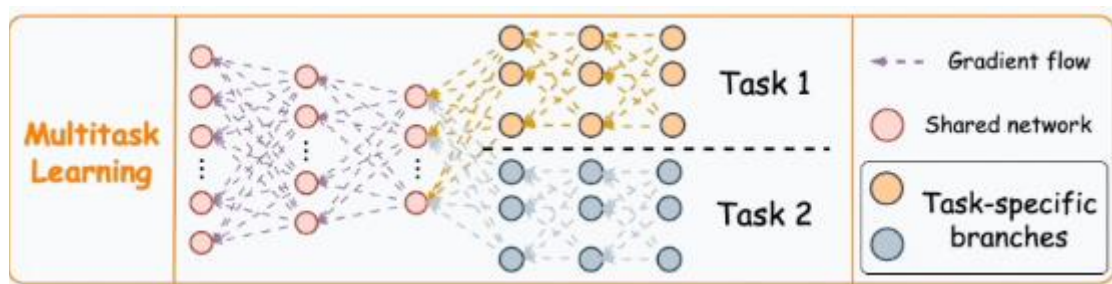
یکی از مهم‌ترین مزایای MTL، بهبود توان تعمیم مدل و کاهش نیاز به داده‌های آموزشی در وظایف با تعداد داده کم است. همچنین با بهره‌گیری از انتقال دانش میان وظایف، مدل قادر است الگوهای مفهومی و ساختاری را بهتر شناسایی کرده و دقت کلی خود را افزایش دهد. علاوه‌برآن، از آنجاکه در MTL تنها یک شبکه به‌صورت هم‌زمان چندین خروجی را پیش‌بینی می‌کند، هزینه محاسباتی کاهش یافته و کارایی سیستم ارتقا می‌یابد [۵۷].

در نهایت، یادگیری چندوظیفه‌ای به‌عنوان یک رویکرد مدرن، قابلیت بالایی در مدل‌سازی مسائل پیچیده و چندوجهی در حوزه‌های علمی و مهندسی دارد. به‌ویژه در زمینه‌هایی نظیر مدل‌سازی مواد، تحلیل رفتار چندمقیاسی و شبیه‌سازی‌های نانو که خروجی‌های متعددی نظیر خواص مکانیکی، ساختاری و دینامیکی به‌طور هم‌زمان باید پیش‌بینی شوند، استفاده از MTL نه تنها دقت مدل را افزایش می‌دهد، بلکه باعث کاهش زمان آموزش و افزایش کارایی مدل نیز خواهد شد.

---

<sup>۱</sup> Shared Layers

<sup>۲</sup> Task-Specific Layers



شکل ۳-۹- نمایش شماتیک شبکه MTL.



## فصل ۴: نتایج و بحث

---

### ۴-۱- مقدمه

در این فصل، نتایج حاصل از دو بخش اصلی پژوهش شامل مدل‌سازی عددی فرایند نانوایندنتیشن و مدل‌های یادگیری ماشین مبتنی بر داده‌های شبیه‌سازی شده ارائه و تحلیل می‌گردند. هدف از این فصل، بررسی دقیق رفتار مکانیکی ماده در مقیاس نانو با استفاده از شبیه‌سازی‌های مبتنی بر روش QC، و سپس بهره‌گیری از رویکردهای داده‌محور جهت پیش‌بینی خواص مکانیکی و تحلیل تأثیر پارامترهای مؤثر است. در بخش نخست، به بررسی پدیده نانوایندنتیشن در لایه‌ای نازک از مس پرداخته می‌شود که در آن اثرات زبری سطح، شکل و ابعاد نفوذگر و جهت‌گیری‌های بلوری مختلف تحلیل شده‌اند. پاسخ‌های بار-نفوذ، سازوکارهای گسیل نابجایی، و محاسبه سختی با استفاده از روش اولیور-فار، بخشی از تحلیل‌های انجام‌شده در این بخش هستند. این بررسی‌ها با هدف درک عمیق‌تر از رفتار پلاستیک موضعی و مکانیزم‌های تغییر شکل ماده در مقیاس نانو صورت گرفته‌اند.

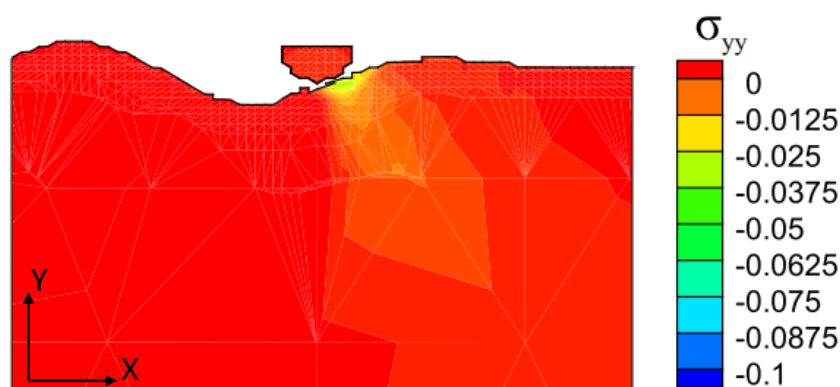
در ادامه، داده‌های استخراج‌شده از شبیه‌سازی عددی به‌عنوان ورودی برای مدل‌های یادگیری ماشین مورد استفاده قرار گرفته‌اند. با طراحی و آموزش شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)، مدل‌های چندخروجی و یادگیری چندوظیفه‌ای (MTL)، عملکرد این مدل‌ها در پیش‌بینی ویژگی‌هایی مانند سختی، بار بحرانی و پارامترهای جابه‌جایی مورد ارزیابی قرار گرفته است.

ترکیب مدل‌سازی فیزیکی و تکنیک‌های یادگیری ماشین در این فصل، تصویری جامع از پتانسیل روش‌های داده‌محور در تسریع و بهبود تحلیل‌های مکانیکی نانو ارائه می‌دهد و زمینه را برای توسعه ابزارهای پیش‌بینی دقیق در مسائل پیچیده مهندسی فراهم می‌سازد.

## ۴-۲- تعریف مسئله

در این تحقیق، یک لایه نازک از مس با ساختار مکعبی وجوه مرکز پر<sup>۱</sup> (FCC) با عرض ۲۰۰ نانومتر و ضخامت ۱۰۰ نانومتر مورد بررسی قرار گرفته است. با این حال، علی‌رغم نمایش دوبعدی مدل، در ارزیابی دقیق انرژی‌ها، ملاحظات سه‌بعدی نقش حیاتی دارند. دلیل این امر آن است که اتم‌های مجاور در فضای سه‌بعدی با یکدیگر برهم‌کنش دارند و این امکان را فراهم می‌کنند که جابه‌جایی‌ها در راستای Z مورد ارزیابی قرار گیرند. افزون بر این، در راستای خارج از صفحه، شرایط مرزی تناوبی اعمال شده‌اند.

طبق مطالعات پیشین انجام شده در آزمایشگاه محاسبات سریع، علی‌زاده و طلوعی مشاهده کردند که در صورت کوچک بودن نسبت عمق نفوذ به ضخامت سطح، زیر لایه تأثیری در نتایج نخواهد داشت. همچنین بررسی شده است که اگر نسبت عمق نفوذ به ضخامت کمتر از ۱۰ درصد باشد، زیرلایه در نتایج موثر نخواهد بود [۲۹]، بنابراین در مطالعه حاضر ابعاد مدل به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که نسبت عمق نفوذ به ضخامت حدود ۵ درصد باشد. همچنین باتوجه به استاتیکی بودن بارگذاری و صحت از تاثیر عدم تاثیر مرزها بر نتایج یک نمونه از تغییرات تنش مدل در شکل ۴-۱ مورد بررسی قرار گرفته است.

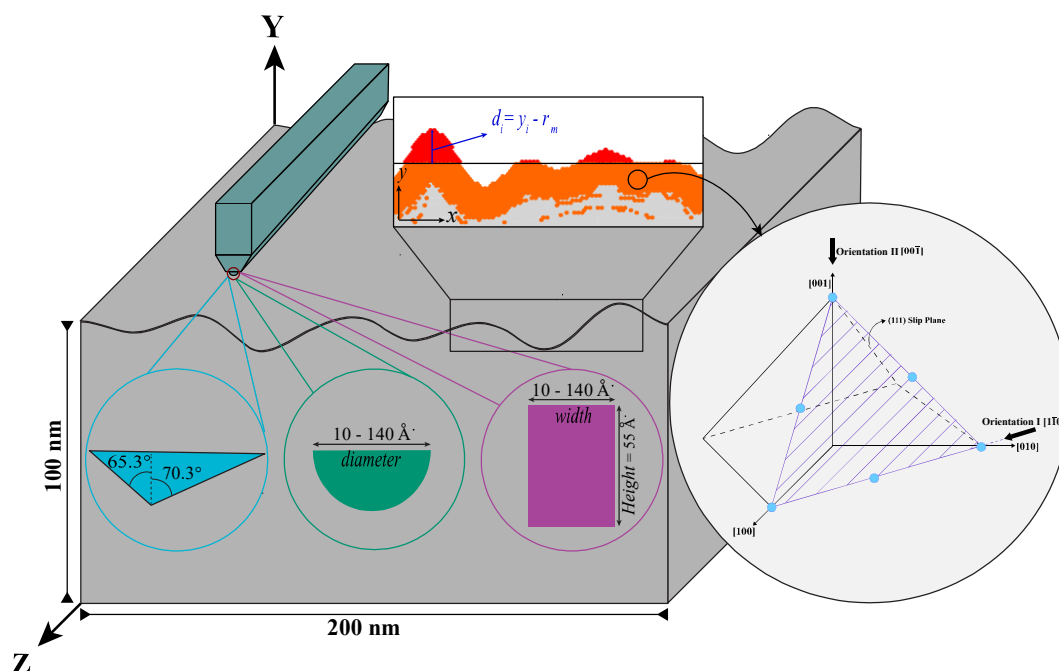


شکل ۴-۱- هیستوگرام تغییرات تنش در نمونه پس از نفوذ.

<sup>۱</sup> Face-Centered Cubic

نفوذگر به صورت یک جسم صلب مدل سازی شده که با نرخ ۰.۱ آنگستروم بر گام، وارد سطح مس می شود. در این پژوهش، یک نفوذگر استوانه ای با ۸ قطر مختلف بین ۱۰ تا ۱۴۰ آنگستروم، یک نفوذگر مستطیلی با ۸ عرض مختلف از ۱۰ تا ۱۴۰ آنگستروم، و یک نفوذگر برکویچ<sup>۱</sup> با زاویه های ۷۰.۳ و ۶۵.۳ درجه مورد بررسی قرار گرفته اند (شکل ۴-۲). ابعاد نفوذگر در آزمایش های نانوایندنتیشن مبتنی بر میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) معمولاً شعاعی کمتر از ۲۰ نانومتر دارند و این امکان را فراهم می سازند که ویژگی های مکانیکی سطح بادقت بالا مورد بررسی قرار گیرند. در این تحقیق، ابعاد نفوذگرها با در نظر گرفتن مقیاس نانو انتخاب شده اند تا با ویژگی های ماده سازگار بوده و نتایج دقیقی از سختی و مدول الاستیسیته به دست آید [۵۸]، [۵۹].

کد فورترن این مسئله توسط گروه آزمایشگاه محاسبات سریع بر مبنای کد شبه پیوسته تادمور توسعه یافته است و در این پایان نامه فرمول بندی کد تغییر نکرده است و صرفاً از کد برای مدل سازی مسئله این تحقیق استفاده شده است.



شکل ۴-۲- نمایش عمومی مسئله نانوایندنتیشن.

<sup>۱</sup> Berkovich

انرژی هر اتم بر اساس پتانسیل EAM محاسبه می‌شود. این پتانسیل به‌ویژه برای شبیه‌سازی رفتار اتم‌ها در سیستم‌هایی با تعداد زیاد اتم، مانند ساختارهای بلوری در مواد فلزی، مفید است [۶۰]. پارامترهای پتانسیل EAM برای ماده‌ی بستر در جدول ۴-۱ ارائه شده‌اند. در این جدول،  $a$ ،  $b$ ،  $C$ ،  $\mu$  و  $\nu$  به ترتیب نمایانگر ثابت شبکه، بردار برگرز<sup>۱</sup>، ضرایب کشسانی، مدول برشی، و نسبت پواسون هستند.

جدول ۴-۱- پارامترهای EAM برای مس [۶۰].

|    | $a$ (Å) | $b$ (Å) | $C_{11}$ (GPa) | $C_{12}$ (GPa) | $C_{44}$ (GPa) | $\mu$ (GPa) | $\nu$ |
|----|---------|---------|----------------|----------------|----------------|-------------|-------|
| Cu | 3.615   | 2.55    | 168            | 121            | 75             | 44.7        | 0.34  |

## ۴-۲-۱- زبری سطح

زبری سطح یکی از ویژگی‌های طبیعی سطح است که در تعیین خواص مختلف مواد، از جمله سختی، به‌ویژه در مسائل در مقیاس میکرو و نانو، نقش بسزایی دارد. در نظر گرفتن زبری سطح در تحلیل‌های نانوآیندنتیشن برای دستیابی به اندازه‌گیری‌های دقیق و معتبر خواص مکانیکی ضروری است؛ زیرا زبری مستقیماً بر تماس‌های سطحی و پاسخ کلی ماده اثر می‌گذارد.

زبری سطح را می‌توان با تحلیل فرکتالی یا سری‌های چندجمله‌ای در دو بعد توصیف کرد. یکی از شاخص‌های رایج برای سنجش زبری، میانگین حسابی زبری ( $R_a$ ) است که طبق استاندارد ISO 4287 تعریف می‌شود [۶۱]:

$$R_a = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |d_i| \quad (۱-۴)$$

$$d_i = y_i - R_m \quad (۲-۴)$$

$$R_m = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \quad (۳-۴)$$

که در آن،  $n$  تعداد نقاط تعریف‌کننده سطح و  $d_i$  تفاوت بین مختصات گره‌ای ( $y_i$ ) و میانگین مختصات  $Y$  تمام نقاط سطح یعنی  $R_m$  است، همان‌گونه که در شکل ۴-۱ نشان داده شده است. پروفیل سطح بر اساس رابطه زیر که توسط برک و ماسارت<sup>۲</sup> پیشنهاد شده، تعریف می‌شود [۶۲]:

<sup>۱</sup> Burgres vector

<sup>۲</sup> Berke and Massart

$$y_i(x) = \sum_{i=1}^N \frac{A_i}{2} \sin\left(\frac{2\pi}{\alpha_i} x + \theta_i\right) \quad (4-4)$$

در این رابطه،  $\alpha_i$  عامل مقیاس دهی فرکانس موج سینوسی (بزرگترین ضریب کشسانی)،  $\theta_i$  بیشینه شیفته افقی موج سینوسی و  $A_i$  دامنه‌ی ضرایب فوریه هستند که به صورت تصادفی تولید می‌شوند. در این تحقیق، ۱۳ پروفیل مختلف زبری با مقادیر  $R_a$  بین ۲ تا ۱۳ آنگستروم بررسی شده‌اند. برای سطح صاف، مقدار  $y_i = 0$  در نظر گرفته شده است.

#### ۴-۲-۲- جهت گیری بلور

جهت گیری بلور تأثیر قابل توجهی بر فرایند نانوایندنتیشن دارد. از این رو، لازم است جهت گیری‌های بلوری مختلف به صورت مستقل بررسی شوند.

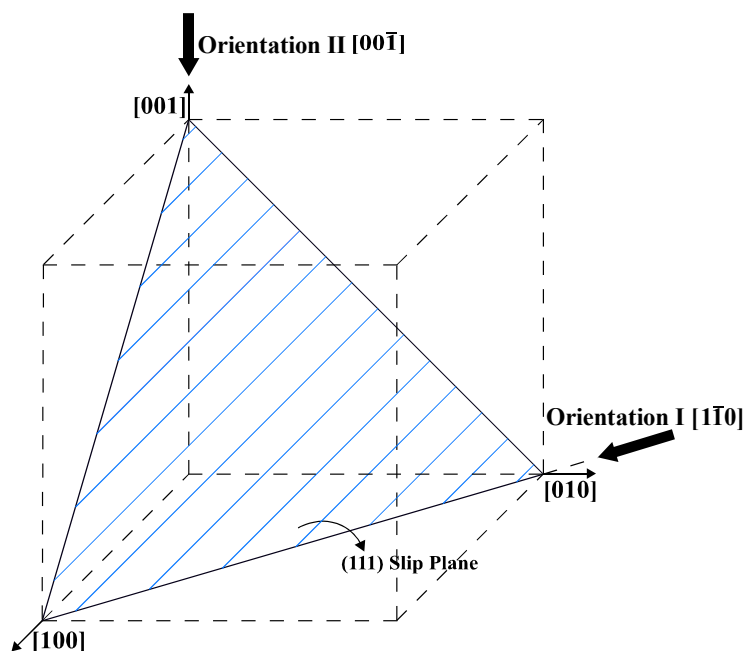
مکانیک تغییر شکل لغزشی در یک بلور طبق معیار اشمید<sup>۱</sup> در چارچوب نظریه دینامیک نابجایی‌ها توجیه می‌شود. با افزایش تنش خارجی، تنش برشی ایجاد شده در صفحات لغزش نیز افزایش می‌یابد. زمانی که این تنش برشی به آستانه‌ای بحرانی، موسوم به تنش تسلیم برشی، برسد، سازوکار لغزش فعال شده و منجر به تغییر شکل پلاستیک در بلور می‌شود [۶۳].

در این تحقیق، صفحه لغزش قطری (۱۱۱) برای تحلیل انتخاب شده است. به همین منظور، دو جهت گیری مختلف برای بررسی فرایند نانوایندنتیشن مورد استفاده قرار گرفته‌اند (شکل ۴-۳):

جهت گیری I: نفوذگر در راستای محور  $[1\bar{1}0]$  فشرده می‌شود. دستگاه مختصات به گونه‌ای تعریف شده که محور X در راستای  $[111]$  و محور Y در راستای  $[\bar{1}10]$  قرار گیرد.

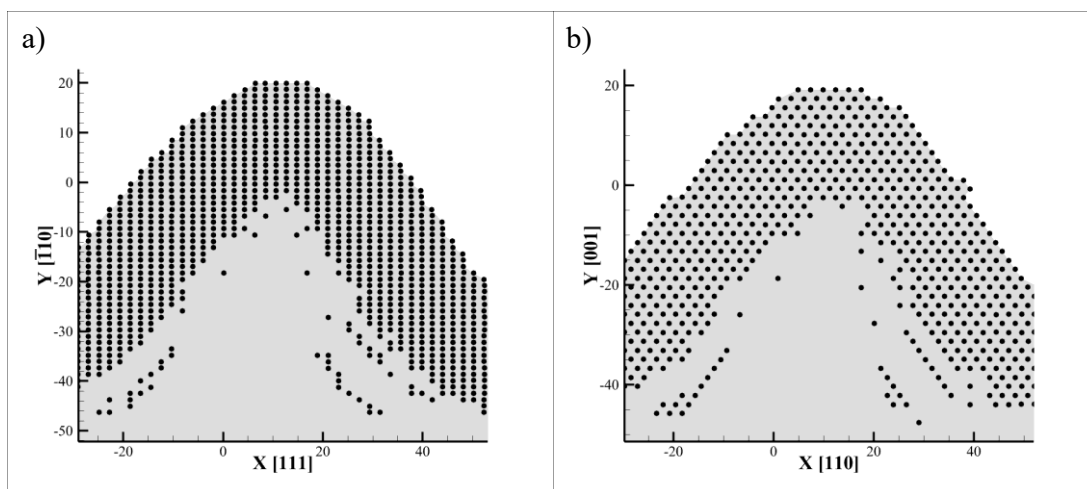
جهت گیری II: نفوذگر در راستای محور  $[00\bar{1}]$  فشرده می‌شود. دستگاه مختصات به گونه‌ای تعریف شده که محور X در راستای  $[110]$  و محور Y در راستای  $[001]$  قرار گیرد.

<sup>۱</sup> Schmid



شکل ۳-۴- صفحه لغزش (۱۱۱) در شبکه بلوری مس و دو جهت گیری انتخاب شده برای ایندنتیشن.

جهت گیری های I (شکل ۴-۴-a) و II (شکل ۴-۴-b) دو ساختار بلوری متمایز از چیدمان اتم ها را نمایش می دهند. این جهت گیری ها با تأثیر بر حرکت نابجایی ها و مسیرهای لغزش، رفتار ماده در حین ایندنتیشن را تعیین می کنند. زمانی که نفوذگر وارد سطح می شود، میدان تنشی ایجاد شده می تواند سازوکارهای خاصی را فعال کرده و موجب حرکت نابجایی ها شود؛ در نتیجه، بر سختی و تغییر شکل ماده تأثیر خواهد گذاشت.



شکل ۴-۴- چیدمان نمونه اتم‌ها برای (a) جهت‌گیری I و (b) جهت‌گیری II.

در مجموع، ۴۴۲ نمونه در این مطالعه تولید، تحلیل و به طور جامع بررسی شده‌اند. پس از هر گام بارگذاری در فرایند شبیه‌سازی، یک حلگر نیوتن-رافسون برای کمینه‌سازی انرژی پتانسیل کل سامانه به صورت تکراری به کار گرفته می‌شود تا پیکربندی تعادلی متناظر به دست آید.

## ۴-۳- نتایج مدل‌سازی عددی

نتایج حاصل از این شبیه‌سازی‌ها شامل نمودارهای پاسخ بار-نفوذ، کانتورهای جابه‌جایی، تحلیل نابجایی‌ها و محاسبه سختی ماده است. تحلیل این نتایج به منظور درک دقیق‌تر از سازوکارهای پلاستیسیته، ارزیابی پاسخ مکانیکی بستر و بررسی نقش فاکتورهای هندسی و ساختاری صورت گرفته است. در نهایت، از طریق مقایسه حالت‌های مختلف، سعی شده است روابط کمی و کیفی میان پارامترهای ساختاری ماده و ویژگی‌های مکانیکی آن استخراج شود.

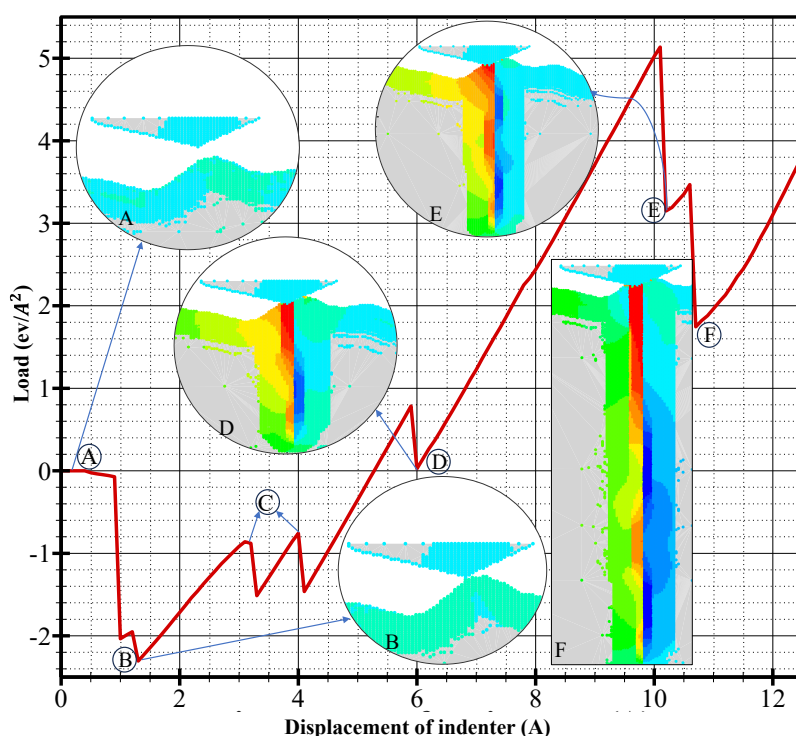
در این تحقیق نتایج مربوط به هندسه‌های نفوذگر و زبری زبر سطح با نتایج کار تحقیق مسلم زاده [۱۸] و نتایج مربوط به بخش جهت‌های کریستالوگرافی با تحقیق لی [۶۴] ارزیابی شده است. با توجه به اینکه نتایج آزمایشگاهی تاکنون در بررسی جهات کریستالوگرافی و زبری سطح موجود نیستند به نتایج عددی تحقیق‌های بالا استناد شده است.

## ۴-۳-۱- منحنی بار-نفوذ<sup>۱</sup>

منحنی بار-نفوذ در مسائل نانوایندنتیشن اطلاعات مهمی را ارائه می‌دهد. برای مثال، وقوع یک Pop-in در این پاسخ می‌تواند نشانه‌ای از آغاز تغییر شکل پلاستیک در عمق خاصی از نفوذ باشد. این فرایند که در آن انرژی جذب شده و ماده در یک ناحیه موضعی به حالت پلاستیک تبدیل می‌شود، با ایجاد نابجایی در مقیاس اتمی ساختار بلوری همراه است.

<sup>۱</sup> Load-Displacement Response

شکل ۴-۵ پاسخ بار-نفوذ برای یک لایه نازک از مس با زبری سطح ۶ آنگستروم و جهت گیری I را که تحت تأثیر نفوذگر برکوویچ قرار گرفته نشان می دهد. در این پیکربندی، در ابتدای شبیه سازی، نفوذگر به اندازه ای از سطح فاصله دارد که هیچ نیروی برهم کنشی میان آن و سطح وجود ندارد (نقطه A). با نزدیک شدن نفوذگر به سطح، نیروی جاذبه اتمی ظاهر شده و نیروی اعمالی منفی می شود (نقطه B)، که منجر به پدیده ای موسوم به "پرش به تماس" (jump to contact) می شود. نیروی واندروالسی در این جاذبه نقش دارد، تا زمانی که فاصله اتم ها خیلی کم شده و نیروی دافعه ظاهر می شود.



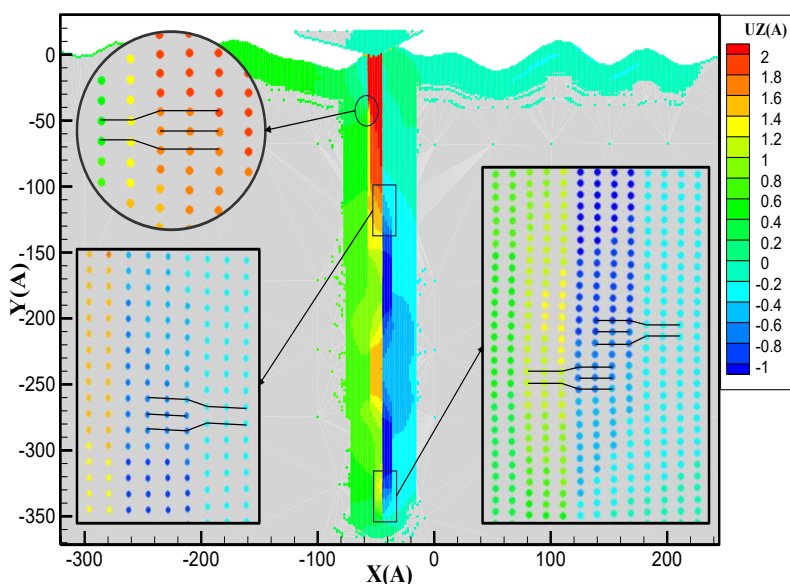
شکل ۴-۵ پاسخ بار-نفوذ لایه نازک مس (جهت گیری I) تحت اثر نفوذگر برکوویچ (زبری سطح ۶ آنگستروم).

شروع رفتار پلاستیک را می توان با افت هایی در منحنی بار-نفوذ شناسایی کرد که نشان دهنده تغییر در سازوکارهای مقیاس نانو مانند ایجاد نابجایی است. هرچند، برخی مطالعات نشان داده اند که افت های اولیه الزاماً ناشی از پلاستیسیته اولیه نیستند و افت هایی مانند گذار از نقطه A به B نباید به طور خودکار به تشکیل نابجایی نسبت داده شوند. این افت ها ممکن است ناشی از لغزش اتم ها زیر نفوذگر باشند.

<sup>1</sup> Jump to contact

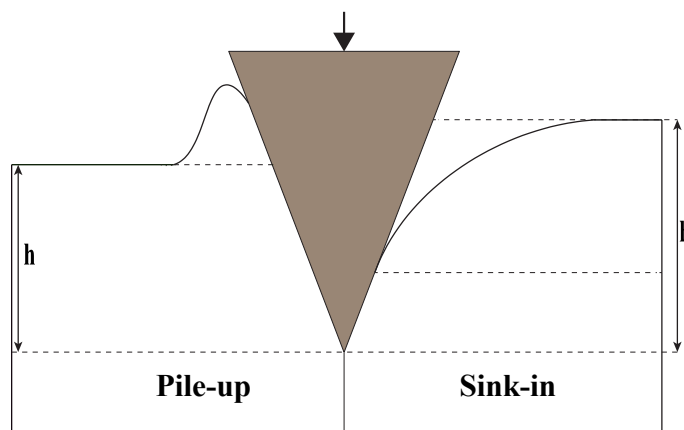
زمانی که سطح کاملاً صاف نباشد و دارای بی‌نظمی یا زبری باشد، توزیع تنش‌ها و نیروهای برهم‌کنشی بین اتم‌های سطح و نفوذگر، نامتقارن می‌شود. به همین دلیل، ممکن است اتم‌ها بدون ایجاد نابجایی‌های وسیع، جابه‌جایی‌های نامنظم انجام دهند که منجر به افت ناگهانی در نیرو و تغییر مقاومت ماده در برابر نفوذگر می‌شود (نقطه C).

با نفوذ بیشتر، گسیل نابجایی‌ها و جریان پلاستیک اتفاق می‌افتد که با افتی در منحنی پاسخ همراه است (نقطه D) که نشان‌دهنده تغییر در ساختار داخلی ماده است. از نقطه B تا D، رفتار الاستیک قابل بازیابی انتظار می‌رود. پس از افت اولیه که نشان‌دهنده آغاز پلاستیسیته است، یک افت دیگر با همان شیب خطی اولیه در منحنی بار-نفوذ دیده می‌شود که به نقطه E منتهی می‌شود. این روند با گسیل نابجایی دیگر در نقطه F ادامه می‌یابد. شکل ۴-۶ کانتور جابه‌جایی در راستای Z را برای نفوذگر برکوییچ، جهت‌گیری I و زبری سطح ۶ آنگستروم نشان می‌دهد. این تصویر مربوط به عمق نفوذ ۱۱.۵ آنگستروم است، جایی که نابجایی‌ها در مکان‌های مختلف شکل می‌گیرند. سه نابجایی در عمق‌های ۵۰، ۱۲۰ و ۳۳۰ آنگستروم به صورت دقیق نمایش داده شده‌اند.



شکل ۴-۶- کانتور جابه‌جایی در راستای Z برای نفوذگر برکوییچ (جهت‌گیری I و زبری ۶ آنگستروم).

پدیده‌های مهم دیگری مانند انباشته شدن<sup>۱</sup> و فرورفتگی<sup>۲</sup> نیز ممکن است در مسائل نانوایندنتیشن رخ دهند. انباشتگی زمانی اتفاق می‌افتد که ماده به سمت بیرون جابه‌جا شده و در اطراف نفوذگر جمع می‌شود که بیشتر در موادی با نرخ کار سختی پایین این پدیده ممکن است باعث برآورد بیش از حد سطح تماس و در نتیجه اندازه‌گیری اشتباه سختی شود. در مقابل، فرورفتگی زمانی رخ می‌دهد که ماده به سمت داخل جریان پیدا کند و یک فرورفتگی در اطراف ناحیه نفوذ ایجاد کند که معمولاً در موادی با نرخ کار سختی بالا دیده می‌شود و باعث برآورد کمتر از واقع سطح تماس خواهد شد. هر دو پدیده باید برای ارزیابی دقیق ناحیه ایندنتیشن و تفسیر درست نتایج نانوایندنتیشن در نظر گرفته شوند (شکل ۴-۷) [۴].



شکل ۴-۷- پدیده‌های انباشته شدن و فرورفتگی در ماده بستر در اطراف نفوذگر.

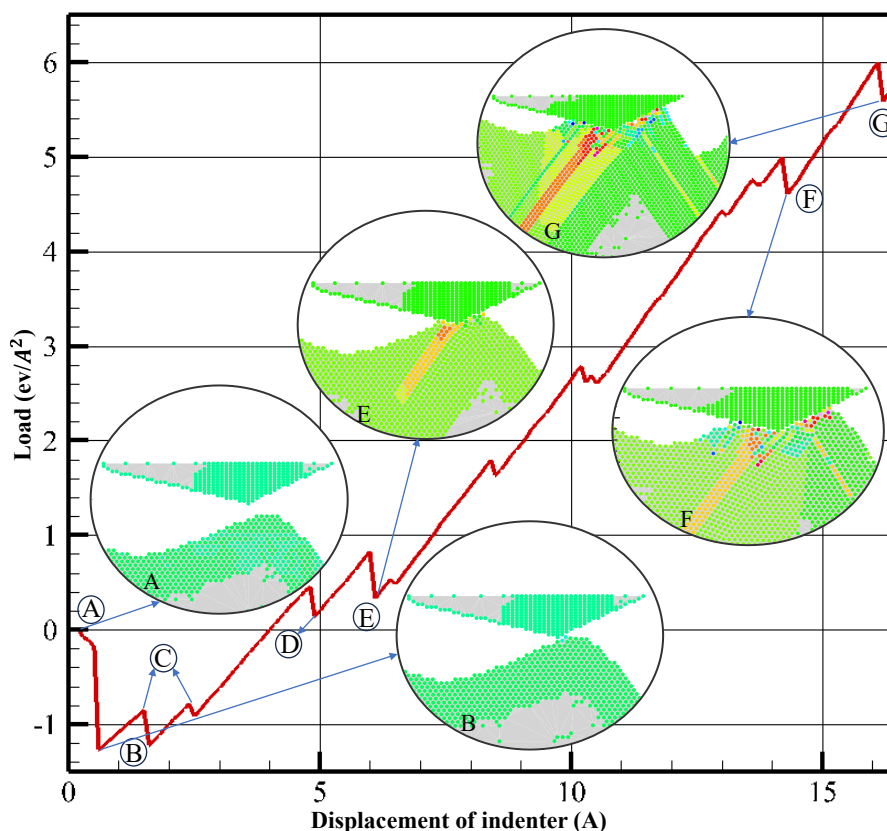
برای بررسی اثر کریستالوگرافی بر پاسخ بار-نفوذ، همان بستر با زبری سطح ۶ آنگستروم، تحت تأثیر نفوذگر برکویچ در جهت‌گیری II مورد مطالعه قرار می‌گیرد. مطابق با شکل ۴-۸ و مشابه حالت جهت‌گیری I، در ابتدا نفوذگر از بستر فاصله داشته و هیچ نیرویی بر آن وارد نمی‌کند (نقطه A). با نزدیک شدن نفوذگر، اتم‌های سطح دو جسم یکدیگر را جذب کرده و نیروی منفی ایجاد می‌شود (نقطه B). در نقطه C، افت ناگهانی در بار مشاهده می‌شود که ناشی از بازآرایی سریع ساختاری در ماده است (مانند شکست موضعی یا لغزش لایه اتمی)؛ بنابراین، در نقطه C ممکن است تغییرات موضعی در سطح ماده رخ داده باشد که منجر به تشکیل انباشتگی‌های کوچک مقیاس یا تغییرات موضعی دیگر شده

<sup>1</sup> Pile-up

<sup>2</sup> Sink-in

است. نقطه D نیز ممکن است نمایانگر نوعی وادادگی<sup>۱</sup> یا بازآرایی ساختاری کوچک مقیاس باشد. با این حال، انباشتگی‌های آشکار معمولاً در مراحل بعدی و تحت بارهای بالاتر تشکیل می‌شوند (مانند نقاط F و G).

با افزایش نفوذ نفوذگر، نخستین نابجایی در نقطه E شکل می‌گیرد که با بارگذاری بیشتر گسترش می‌یابد. افزایش بارگذاری ممکن است منجر به حرکت اتم‌ها، ایجاد عیوبی مانند نقص چیدمانی<sup>۲</sup>، نقص جای خالی<sup>۳</sup> یا سایر نقص‌ها در زیرلایه شود (نقطه F). با افزایش بیشتر عمق نفوذ، نابجایی جدیدی در نقطه G شکل می‌گیرد.



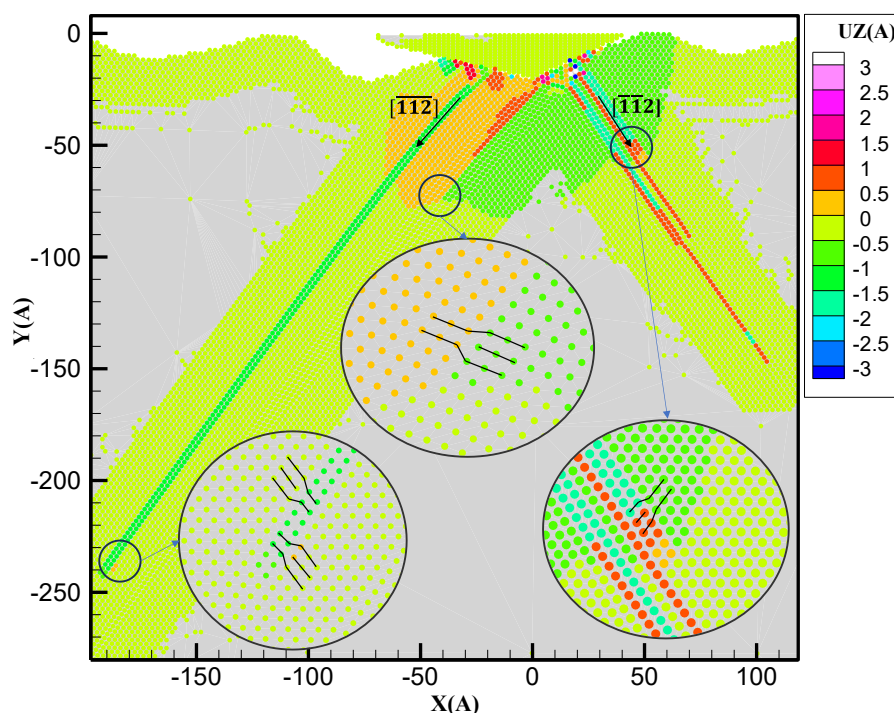
شکل ۴-۸- پاسخ بار-نفوذ برای لایه نازک مس (جهت‌گیری II) تحت اثر نفوذگر برکویچ (زبری سطح ۶ آنگستروم).

<sup>۱</sup> Relaxation

<sup>۲</sup> Stacking faults

<sup>۳</sup> Vacancies

برای بررسی تأثیر زبری‌های دیگر، پیکربندی دیگری با نفوذگر برکوییچ و زبری سطح ۶.۵ آنگستروم با جهت‌گیری II در شکل ۴-۹ نمایش داده شده است. شکل تغییر یافته این مدل در عمق نفوذ ۲۳.۸ آنگستروم نشان می‌دهد که ناهنجاری‌هایی در جهت لغزش‌های  $[11\bar{2}]$  و  $[\bar{1}12]$  ایجاد و گسترش یافته‌اند.

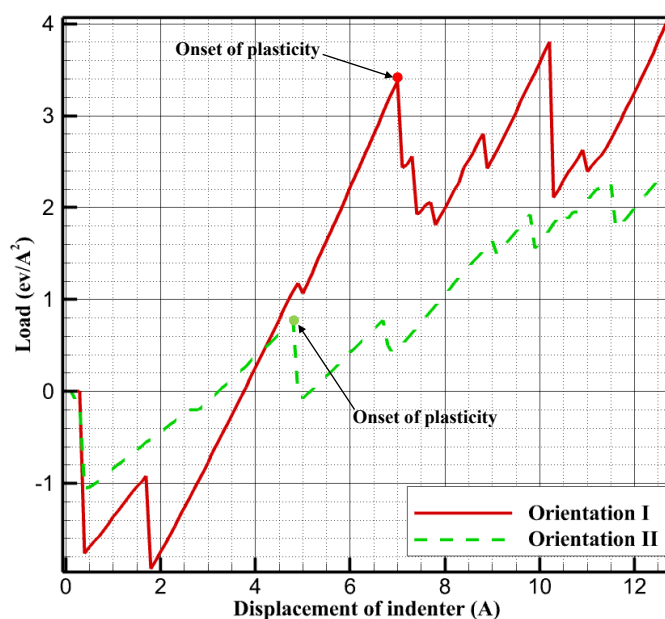


شکل ۴-۹- کانتور جابه‌جایی در راستای Z برای نفوذگر برکوییچ (جهت‌گیری II و زبری سطح ۶.۵ آنگستروم).

جهت‌گیری‌های مختلف بلوری دارای آرایش‌های متفاوت اتم‌ها و سطوح انرژی متفاوت برای گسیختگی پیوندهای اتمی هستند. این مفهوم را می‌توان به صورت غیرمستقیم با بررسی پاسخ بار-نفوذ نفوذگر برکوییچ برای زبری سطح ۱۰ آنگستروم در دو جهت‌گیری مختلف مشاهده کرد، همان‌طور که در شکل ۴-۱۰ ارائه شده است.

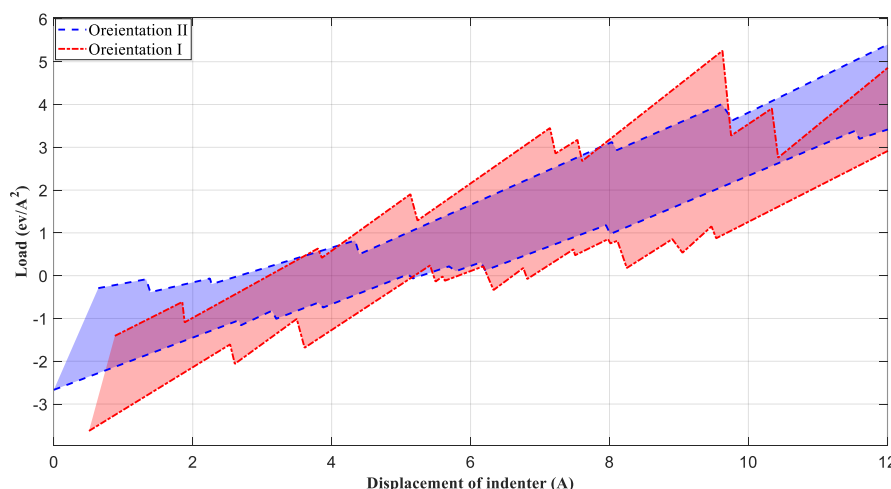
در اینجا دو ویژگی مهم قابل تحلیل‌اند: سختی و بار بحرانی. سختی به شیب ناحیه الاستیک در پاسخ بار-نفوذ بستگی دارد؛ شیب بیشتر نشان‌دهنده سختی بالاتر ماده است. شیب تندتر در بخش ابتدایی پاسخ نشان می‌دهد که ماده در جهت‌گیری I سخت‌تر از جهت‌گیری II است. به عبارتی، ماده در جهت‌گیری I به سطح بارگذاری بیشتری نیاز دارد تا وارد فاز پلاستیک شود که نشانه‌ای از بار بحرانی

بالتر برای تغییر شکل دائمی است. شایان توجه است که در ساختارهای مکعبی نظیر FCC، جهت [111] (جهت‌گیری I) معمولاً سخت‌ترین جهت محسوب می‌شود؛ زیرا پیوندهای بین‌اتمی در آن قوی‌تر هستند [۶۴].



شکل ۴-۱۰- پاسخ‌های بار-نفوذ نفوذگر برکوویچ برای زبری ۱۰ آنگستروم.

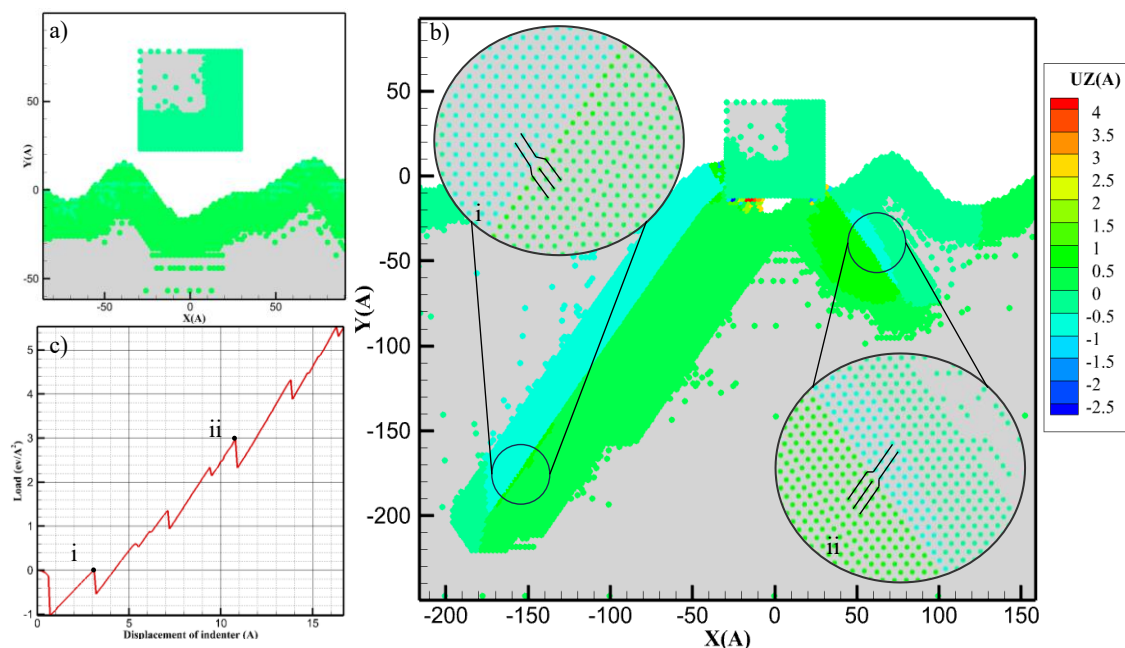
همچنین، ایجاد و رشد نقص‌ها یا نابجایی‌ها در جهت‌گیری I تنها در یک جهت رخ می‌دهد، درحالی‌که در جهت‌گیری II ممکن است در دو جهت اتفاق بیفتد؛ بنابراین، انتظار می‌رود دو مقدار متفاوت برای شیب منحنی و افت‌های مختلف در پاسخ بار-نفوذ برای این دو جهت‌گیری وجود داشته باشد. شکل ۴-۱۱ نوارهای پراکندگی پاسخ بار-نفوذ برای دو جهت‌گیری I و II را برای تمام مقادیر زبری در نفوذگر برکوویچ نمایش می‌دهد. نواحی سایه‌دار شامل تمام افت‌های بار در پاسخ بار-نفوذ هستند که ناشی از عیوب، نابجایی‌ها و ... می‌باشند. عرض این نوار که بازتاب‌دهنده تغییرات در آزادسازی انرژی بین حالات مختلف است، در جهت‌گیری II کمتر است. لذا، می‌توان نتیجه گرفت که افت انرژی ناشی از جوانه‌زنی و گسترش نابجایی‌ها در جهت‌گیری I بیشتر است.



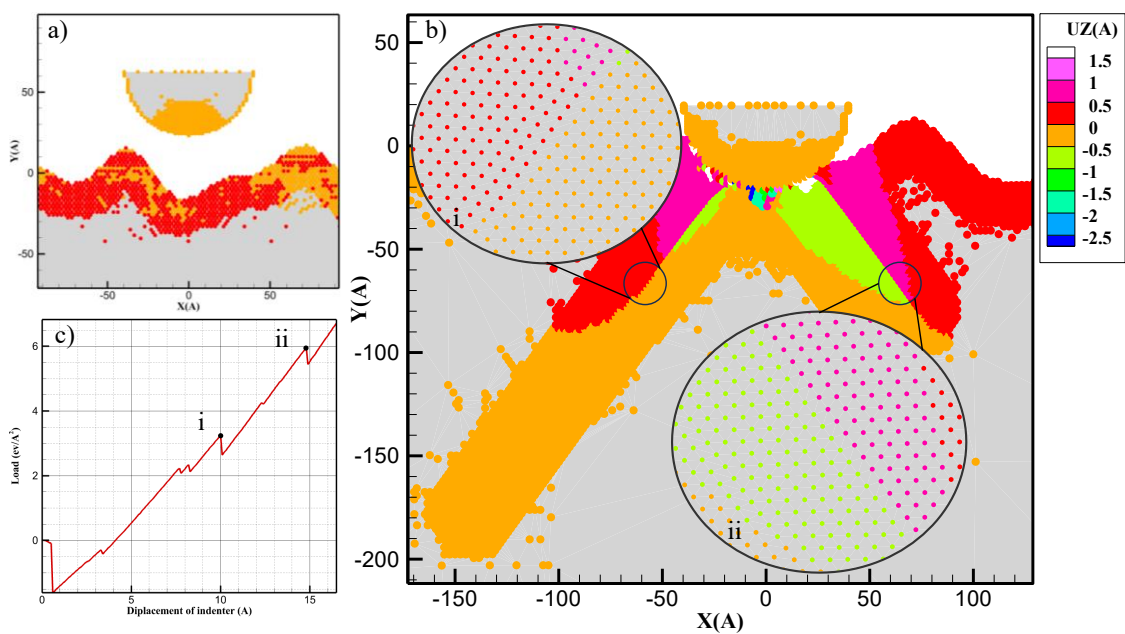
شکل ۴-۱۱- پراکندگی منحنی های بار-نفوذ برای زبری های مختلف در دو جهت گیری I و II (نفوذگر برکوویچ).

برای بررسی نتایج سایر انواع نفوذگرها، نفوذگرهای مستطیلی و استوانه ای نیز برای جهت گیری II مورد مطالعه قرار گرفته اند. تحلیل های جامع مربوط به نفوذگرهای مستطیلی و استوانه ای در جهت گیری I در پژوهش مسلم زاده و همکاران موجود است [۱۸].

شکل های ۴-۱۲ و ۴-۱۳ پیکربندی نفوذگر مستطیلی (با عرض ۶۰ آنگستروم) و نفوذگر استوانه ای (با قطر ۸۰ آنگستروم) را برای زبری سطح ۱۰ آنگستروم نشان می دهند. در شکل های ۴-۱۲-a و ۴-۱۳-a، وضعیت قبل از فرو رفتن نفوذگر نشان داده شده است. در شکل های ۴-۱۲-b و ۴-۱۳-b، کانتورهای جابه جایی پس از اعمال ایندنتیشن نمایش داده شده اند. دو ناحیه بزرگ نمایه شده با برچسب های I و II مکان هایی را نشان می دهند که نابجایی ها در طول فرایند ایندنتیشن در آن ها رخ داده اند. پاسخ های بار-نفوذ این دو نفوذگر در شکل های ۴-۱۲-c و ۴-۱۳-c نشان داده شده اند. رفتار پله ای مشاهده شده در این نمودارها که معمولاً با ایجاد نابجایی ها مرتبط است، نشان دهنده تغییرات ناگهانی در جابه جایی است.



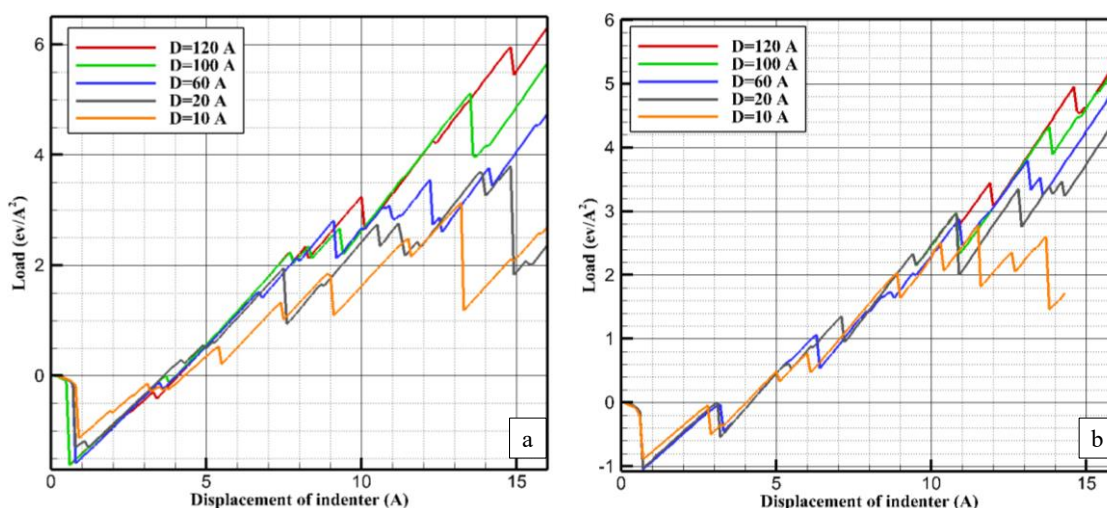
شکل ۴-۱۲- کانتور جابه‌جایی و پاسخ بار-نفوذ برای نفوذگر مستطیلی با عرض ۶۰ آنگستروم (جهت‌گیری II وزبری سطح ۱۰ آنگستروم).



شکل ۴-۱۳- کانتور جابه‌جایی و پاسخ بار-نفوذ برای نفوذگر استوانه‌ای با عرض ۸۰ آنگستروم (جهت‌گیری II وزبری سطح ۱۰ آنگستروم).

از آنجا که عرض و شکل هندسی نفوذگر مستقیماً بر سطح تماس با زیرلایه تأثیر می‌گذارند، بررسی پاسخ بار-نفوذ برای عرض‌ها و شکل‌های مختلف ضروری است.

شکل ۴-۱۴ پاسخ‌های بار-نفوذ را برای نفوذگرهای استوانه‌ای و مستطیلی با اندازه‌های مختلف نشان می‌دهد. شیب خطوط در تمام حالت‌ها تقریباً یکسان است زیرا جنس ماده و جهت‌گیری بلوری ثابت باقی مانده‌اند. این موضوع نشان می‌دهد که مقاومت ذاتی ماده در برابر نفوذ تغییر نکرده و تفاوت‌های مشاهده‌شده در رفتار مکانیکی می‌تواند ناشی از تفاوت در ابعاد نفوذگرها باشد. نفوذگرهای با قطر کوچک‌تر (مثل ۱۰ و ۲۰ آنگستروم) افت‌های بار عمیق‌تری نسبت به نفوذگرهای بزرگ‌تر دارند. این رفتار به این دلیل است که نفوذگرهای کوچک‌تر تنش‌های موضعی بالاتری ایجاد می‌کنند و در نتیجه منجر به ایجاد و گسترش بیشتر نابجایی‌ها و تغییرات ساختاری در ماده می‌شوند. برای نفوذگرهای کوچک، این افت‌ها زودتر رخ می‌دهند و منحنی پاسخ زودتر به حالت تقریباً افقی می‌رسد. این بدان معناست که ماده با نفوذ کمتر به نقطه‌ای می‌رسد که دیگر قادر به تحمل تغییر شکل پلاستیک چشمگیری نیست و مقاومت آن تغییر قابل توجهی نمی‌کند.

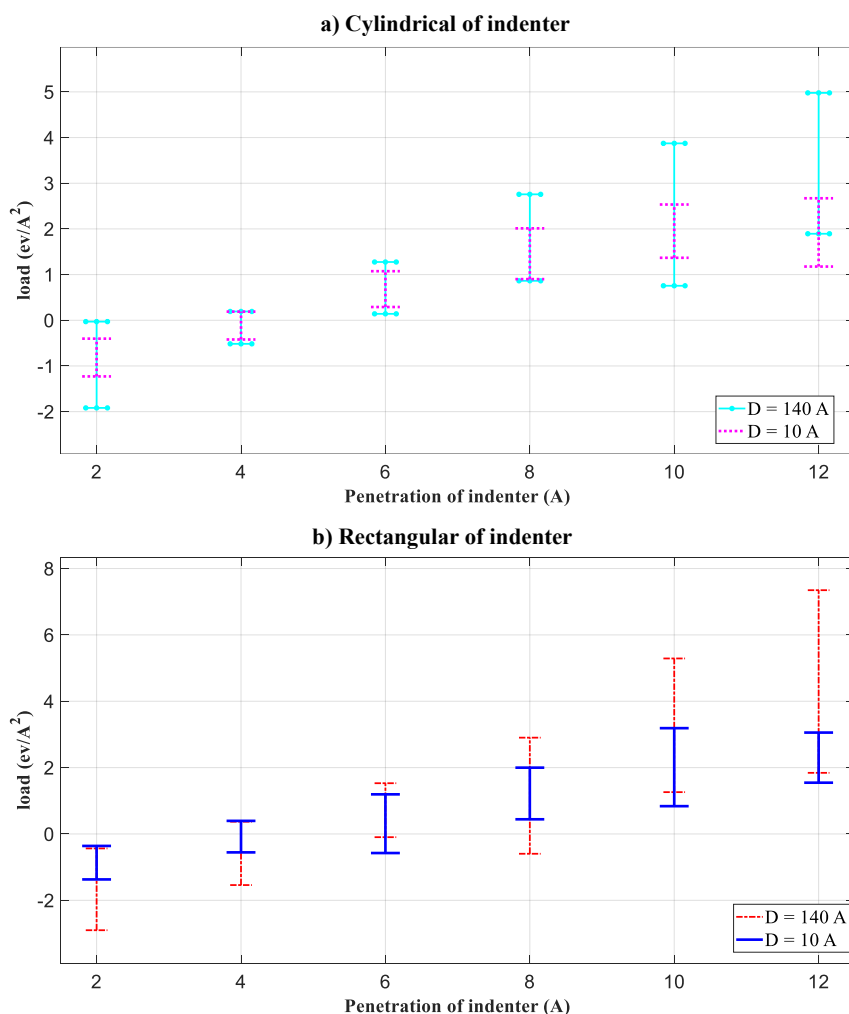


شکل ۴-۱۴ پاسخ بار-نفوذ برای لایه نازک مس (جهت‌گیری II و زبری سطح ۱۰ آنگستروم) تحت اثر نفوذگرهای (a) استوانه‌ای و (b) مستطیلی.

بار بحرانی که به نیرویی گفته می‌شود که در آن اولین نابجایی ایجاد می‌شود [۱۸]، مستقیماً با شکل و عرض یا قطر نفوذگر و همچنین زبری سطح مرتبط است. در پاسخ‌های بار - نفوذ برای نفوذگرهای

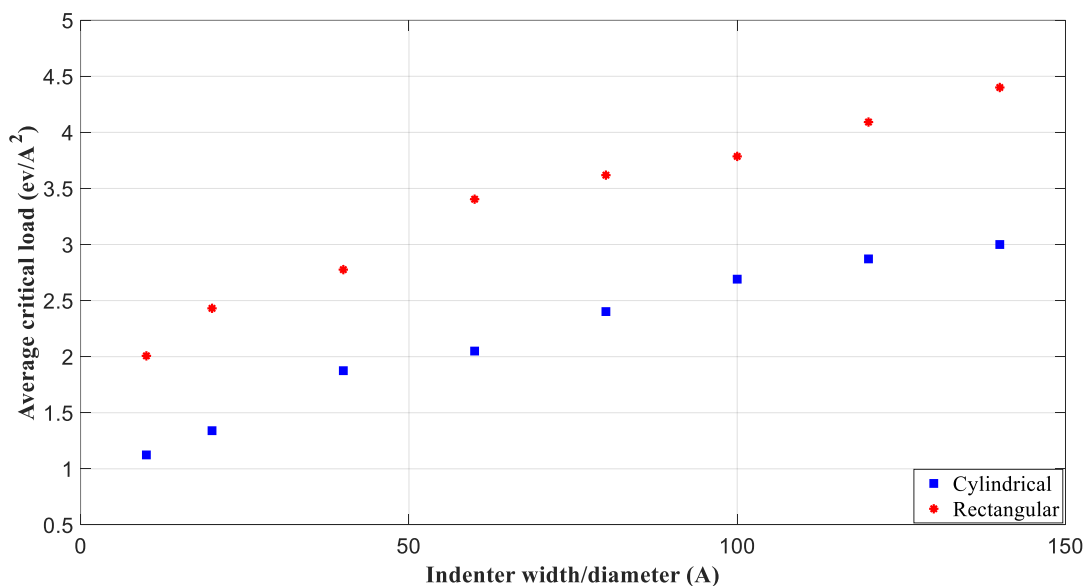
استوانه‌ای و مستطیلی با دو اندازه عرض/قطر و زبری‌های مختلف، بیشترین و کمترین مقادیر نیرو به پیکربندی‌های متفاوتی مربوط می‌شوند. این موضوع ضرورت بررسی پراکندگی نیرو را توجیه می‌کند، همان‌طور که در شکل ۴-۱۵ مشاهده می‌شود. پهنای پراکندگی برای اعماق نفوذ ۲، ۴، ۶، ۸، ۱۰ و ۱۲ آنگستروم محاسبه شده است.

وقتی عرض یا قطر نفوذگر کوچک‌تر باشد، سطح تماس بین نفوذگر و نمونه کاهش می‌یابد که منجر به پراکندگی کمتر می‌شود. همچنین نیروی کمتری برای تشکیل نابجایی موردنیاز است، در نتیجه نوار بار-نفوذ باریک‌تری مشاهده می‌شود.



شکل ۴-۱۵- پراکندگی بار بر اساس عمق نفوذ: (a) نفوذگر استوانه‌ای و (b) مستطیلی.

زمانی که عرض یا قطر نفوذگر کوچک است، پراکندگی پاسخ بار-نفوذ کاهش می‌یابد و تغییرات زبری سطح تأثیر قابل توجهی ندارد. نمودار شکل ۴-۱۶ تغییرات بار بحرانی میانگین برای ایجاد اولین نابجایی را برای تمامی مقادیر زبری، برحسب عرض/قطر نفوذگرهای استوانه‌ای و مستطیلی نشان می‌دهد. با افزایش عرض یا قطر نفوذگر، مقدار بار بحرانی مورد نیاز برای تشکیل اولین نابجایی نیز افزایش می‌یابد.



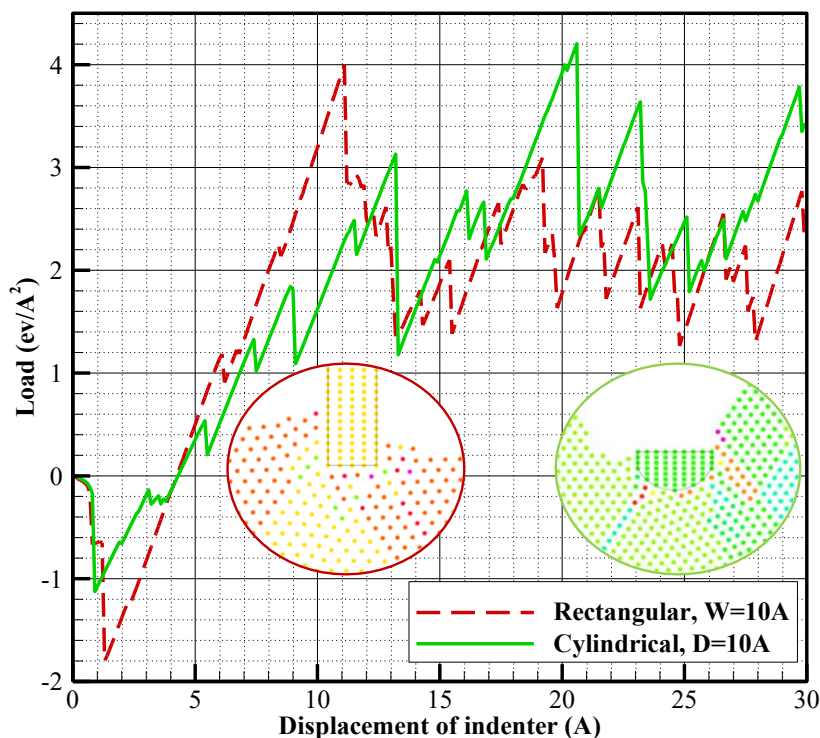
شکل ۴-۱۶- تغییرات در میانگین بار بحرانی نسبت به عرض/قطر نفوذگر.

شکل ۴-۱۷ پاسخ‌های بار-نفوذ برای حالاتی را نشان می‌دهد که سطح تماس ایندنتیشن به طور کامل با بستر در تماس قرار دارد (حالت تماس کامل). در این بررسی، دو نوع نفوذگر در نظر گرفته شده‌اند:

- یک نفوذگر مستطیلی با عرض ۲۰ آنگستروم (خط قرمز)
- یک نفوذگر استوانه‌ای با قطر ۲۰ آنگستروم (خط سبز)

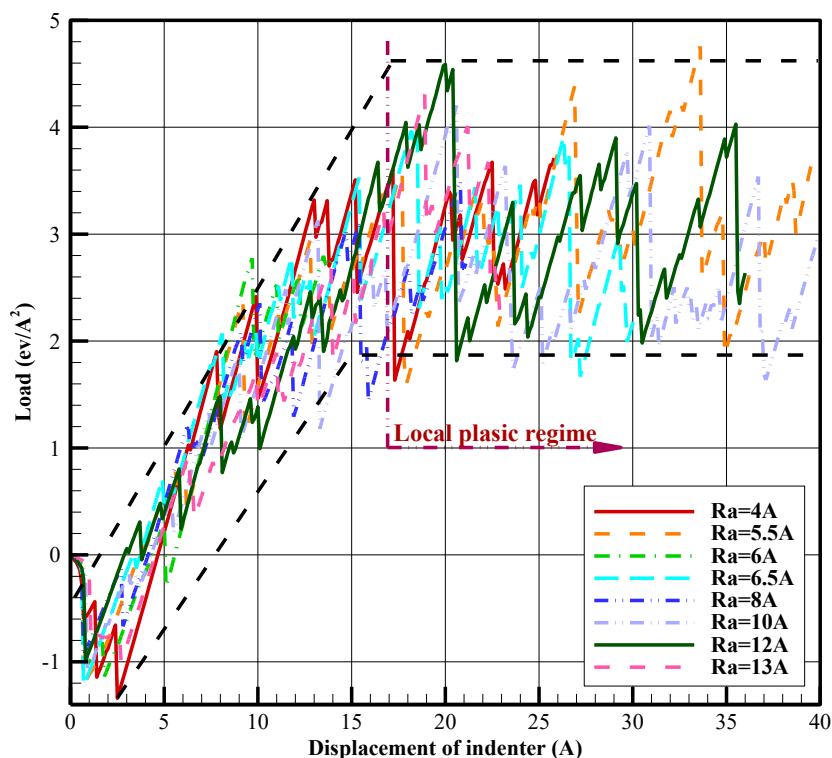
در ابتدای فرایند نفوذ نفوذگر در زیرلایه، روند افزایشی در نمودار بار-نفوذ برای هر دو نفوذگر مشاهده می‌شود. این روند بیانگر افزایش بار با افزایش عمق نفوذ است، اما نشان‌دهنده تغییر شکل الاستیک نیست، زیرا پیش از ایجاد تماس کامل، نابجایی‌ها تولید شده و تغییر شکل‌های غیرقابل بازگشت (پلاستیک) آغاز می‌شود. با افزایش نفوذ نفوذگر، مقدار باری که ماده در ناحیه موضعی زیر نفوذگر می‌تواند تحمل کند، به حداکثر مقدار خود می‌رسد. از این نقطه به بعد، ماده دیگر قادر به تحمل نیروی بیشتری نیست. این ناحیه موضعی پلاستیک برای نفوذگر استوانه‌ای در عمق تقریبی ۲۲ آنگستروم

و برای نفوذگر مستطیلی در عمق ۱۱ آنگستروم ظاهر می‌شود.



شکل ۴-۱۷- نمونه‌ای از سازوکارهای ایندنتیشن پس از تماس کامل نفوذگر با زیرلایه.

برای بررسی دقیق‌تر این پدیده، شکل ۴-۱۸ پاسخ‌های بار-نفوذ را برای نفوذگرهای استوانه‌ای با قطر ۱۰ آنگستروم و زبری‌های مختلف نشان می‌دهد. پس از رسیدن به نقطه تماس کامل، پوشش کلی منحنی‌ها روندی تقریباً افقی را دنبال می‌کند که نشان‌دهنده تغییر شکل دائمی (پلاستیک) بدون تحمل نیروی اضافه است. بررسی پیکربندی‌های شبیه‌سازی شده نشان می‌دهد که پس از نفوذ کامل نفوذگر به زیرلایه (طبق آنچه در شکل ۴-۱۷ مشاهده شد)، ناحیه‌ای موضعی از تغییر شکل پلاستیک در زیر نفوذگر ایجاد می‌شود.



شکل ۴-۱۸- پاسخ‌های بار-نفوذ برای نفوذگر استوانه‌ای (قطر ۲۰ آنگستروم، جهت‌گیری II) با زبری‌های مختلف.

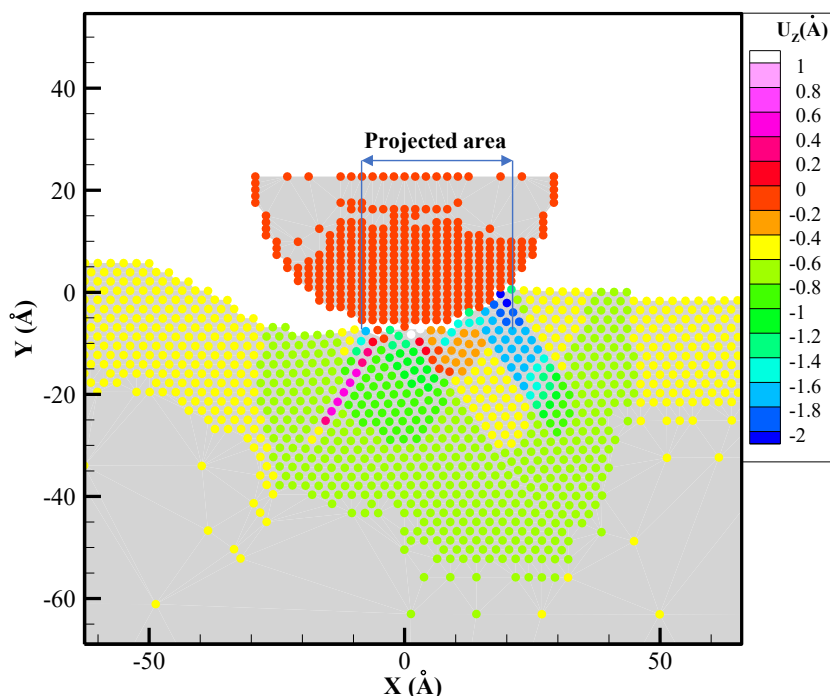
#### ۴-۳-۲- سختی

سختی به‌عنوان مقاومت یک ماده در برابر ایندنتیشن، خراش یا تغییر شکل پلاستیک تعریف می‌شود [۱۸]. به‌عبارت دیگر، سختی معیاری از توانایی یک ماده در مقابله با نیروهای خارجی مانند فشار یا خراش است. روش اولیور-فار<sup>۱</sup> یکی از تکنیک‌های کارآمد و رایج در نانوایندنتیشن برای تعیین خواص مکانیکی مواد، به‌ویژه سختی، است [۱۸]. سختی به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$H = \frac{P_{max}}{A} \quad (۴-۵)$$

که در آن،  $P_{max}$  بیشینه بار و  $A$  مساحت تصویرشده تماس بین نفوذگر و سطح زیرلایه در لحظه‌ی تشکیل اولین نابجایی است (شکل ۴-۱۹).

<sup>۱</sup> Oliver-Pharr

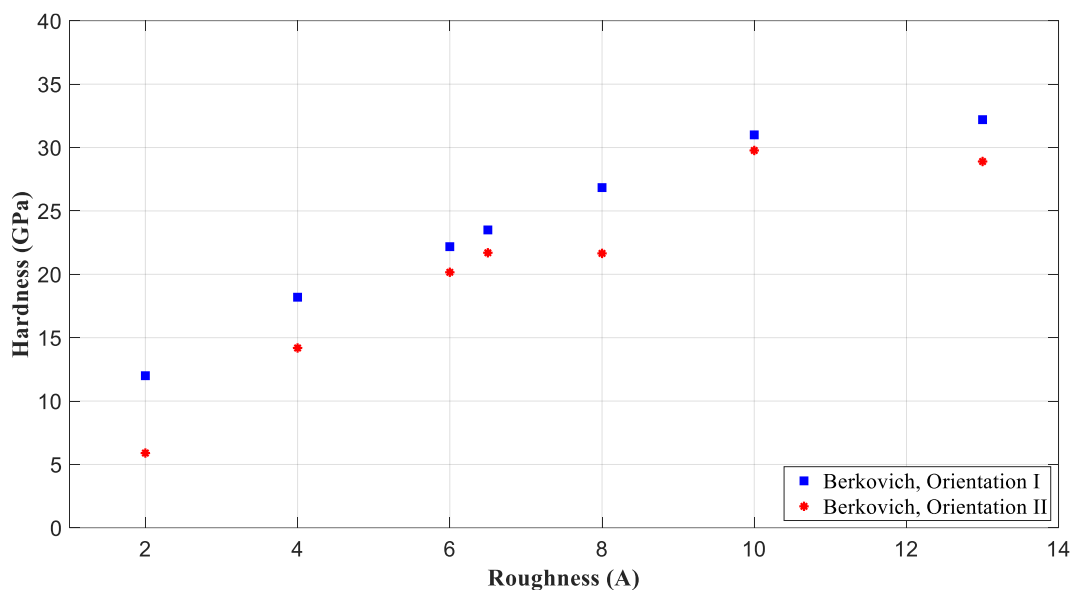


شکل ۴-۱۹- مساحت تصویرشده تماس در لحظه‌ی آغاز ایجاد نابجایی.

زبری سطح و جهت‌گیری بلوری نقش مهمی در خواص مکانیکی ماده ایفا می‌کنند؛ بنابراین، بررسی هم‌زمان تأثیر این دو عامل بر سختی ضروری است. در شکل ۴-۲۰ رابطه‌ی بین سختی و زبری سطح برای دو جهت‌گیری مختلف بلوری در حالت نفوذگر برکوویچ نشان‌داده‌شده است:

- جهت‌گیری I با نقاط آبی
- جهت‌گیری II با مربع‌های قرمز

در هر دو حالت، با افزایش زبری سطح، سختی افزایش می‌یابد؛ با این حال، سختی در جهت‌گیری I به‌طور کلی بیشتر از جهت‌گیری II است. این تفاوت ناشی از پیوندهای قوی‌تر بین اتم‌ها در جهت‌گیری I است که نیروی بیشتری برای گسیختگی آن‌ها نیاز دارد. زبری بیشتر سطح باعث افزایش زبری‌های موضعی و تماس‌های مکانیکی قوی‌تر بین نفوذگر و سطح ماده می‌شود. از سوی دیگر، سطوح زبرتر رفتارهای تغییر شکل پیچیده‌تری در حین ایندنتیشن از خود نشان می‌دهند. این اختلافات نشان‌دهنده تأثیر قابل توجه هم جهت‌گیری بلوری و هم زبری سطح بر سختی است.

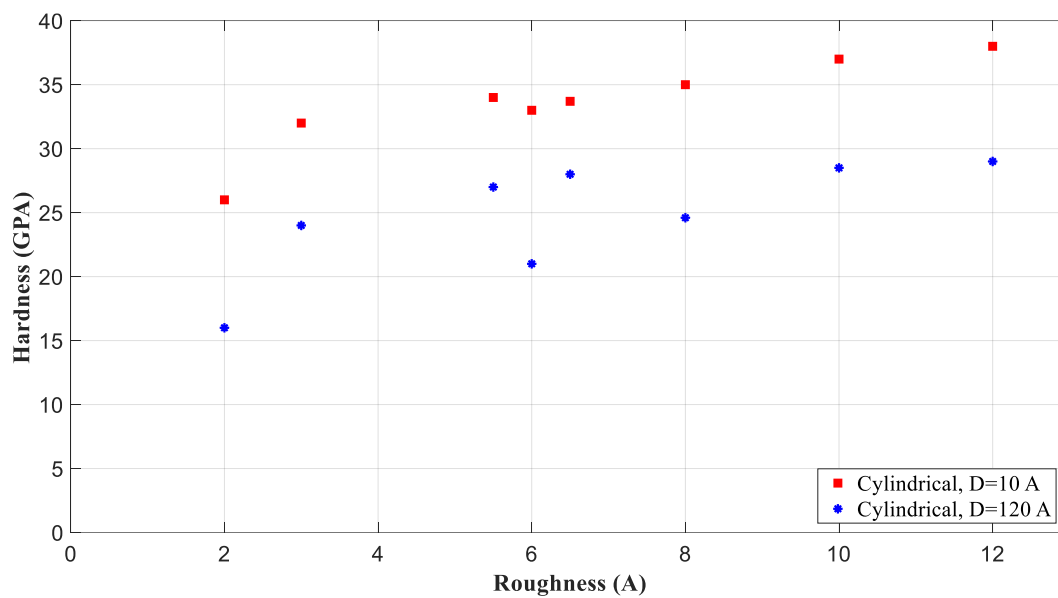


شکل ۴-۲۰- تغییرات سختی با زبری برای نفوذگر برکوویچ در دو جهت گیری مختلف.

تغییرات در عرض/قطر نفوذگر می تواند بر مکانیسم تماس و توزیع تنش تأثیر بگذارد، درحالی که زبری سطح بر نحوه مقاومت ماده در برابر تغییر شکل تحت بارگذاری تأثیر می گذارد. برای بررسی این اثرات، شکل ۴-۲۱ رابطه بین زبری سطح و سختی را برای دو مجموعه از نقاط داده از نفوذگرهای استوانه ای مرتبط با قطرهای ۱۰ آنگستروم (دایره های قرمز) و ۱۲۰ آنگستروم (مربع های آبی) نشان می دهد.

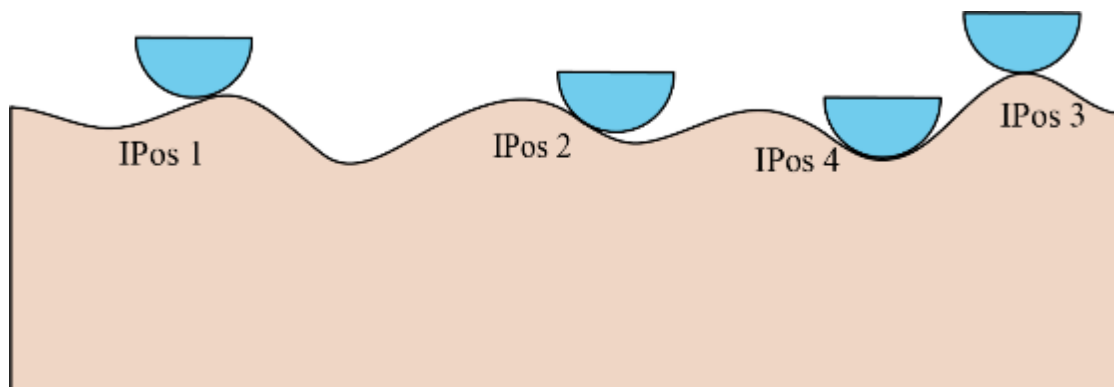
نفوذگر استوانه ای (۱۰ آنگستروم) به طور مداوم مقادیر سختی بالاتری نسبت به نفوذگر بزرگ تر (۱۲۰ آنگستروم) در تمام سطوح زبری دارد (شکل ۴-۲۰). این نشان می دهد که نفوذگرهای کوچک تر تمایل به پیش بینی سختی های بالاتر دارند، احتمالاً به این دلیل که آنها تعامل نزدیک تری با زبری سطح دارند و به طور مؤثر بیشتر به سطح زیرلایه نفوذ می کنند. از سوی دیگر، از آنجا که مساحت تصویر شده آنها، مخرج معادله ۴-۵، کوچک است، سختی افزایش می یابد. نکته قابل توجه این است که نواحی تماس کوچک تر نسبت به بی نظمی های سطحی مانند برآمدگی ها حساس تر هستند. در نتیجه، سختی اندازه گیری شده توسط نفوذگرهای کوچک تر، که بیشتر به ویژگی های ریز مقیاس سطح پاسخ می دهند، معمولاً بیشتر است. نفوذگر بزرگ تر عموماً منجر به مقادیر سختی پایین تر اما با پراکندگی بیشتر می شود. دلیل پراکندگی بیشتر در اندازه گیری ها با نفوذگر بزرگ تر این است که ناحیه تماس مربوطه گسترده تر است که بیشتر تحت تأثیر ویژگی های سطح، مانند زبری، نقص ها و غیره قرار می گیرد. این امر منجر به

پراکندگی بیشتر در اندازه‌گیری‌های سختی می‌شود زیرا مناطق مختلف سطح ممکن است زبری‌ها یا نقص‌های متفاوتی داشته باشند. در نتیجه، هر اندازه‌گیری ممکن است تحت تأثیر ویژگی‌های مختلف سطح قرار گیرد و باعث پراکندگی بیشتر در نتایج شود.



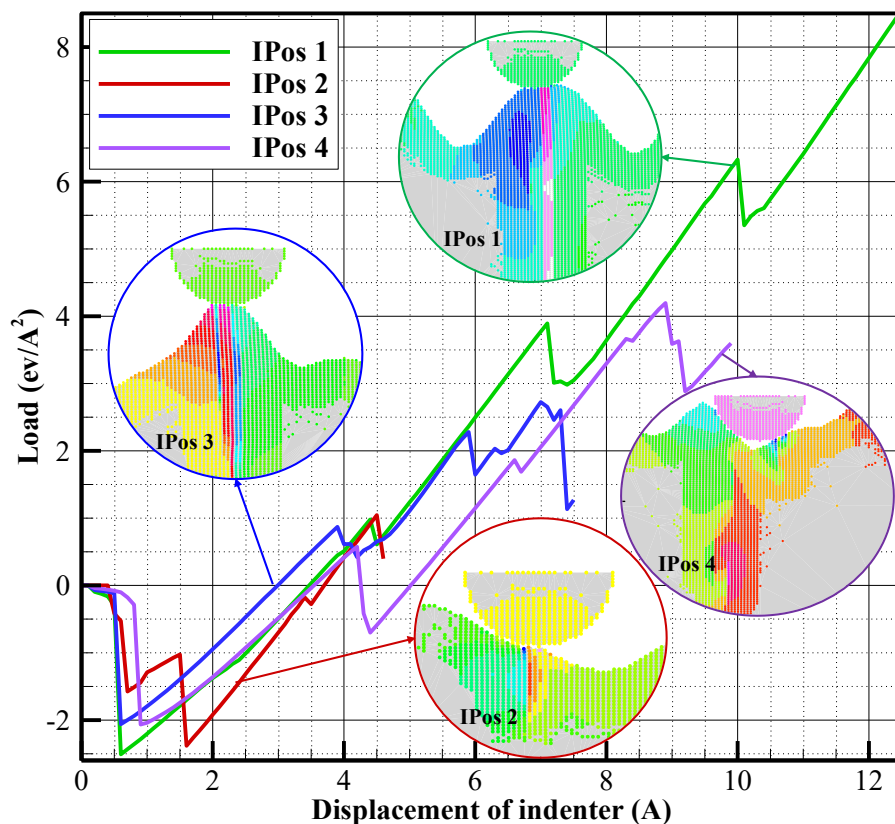
شکل ۴-۲۱- تغییرات سختی با زبری برای دو اندازه‌ی مختلف نفوذگر استوانه‌ای (جهت‌گیری II).

برای یک بستر زبر، محل رسیدن نفوذگر به سطح، بر نتایج پاسخ، به‌ویژه سختی، تأثیر می‌گذارد. برای بررسی بیشتر این موضوع، برای پروفیل سطح با زبری ۱۰ آنگستروم، یک نفوذگر استوانه‌ای با قطر ۶۰ آنگستروم در موقعیت‌های مختلف، همان‌طور که در شکل ۴-۲۲ نشان داده شده است، قرار داده شده است. برای موقعیت نفوذگر IPos 1، نفوذگر در نزدیکی یک قله روی سطح زیرلایه قرار می‌گیرد. در IPos 2، نفوذگر بین یک قله و یک دره کوچک قرار دارد به طوری که سطح تماس آن با زیرلایه بیشتر از IPos 1 است، درحالی‌که نفوذگر به ترتیب در IPos 3 و IPos 4 دقیقاً روی بلندترین قله و عمیق‌ترین دره پروفیل قرار می‌گیرد.



شکل ۴-۲۲- موقعیت‌های مختلف نفوذگر نسبت به سطح موج‌دار.

شکل ۴-۲۳ پاسخ‌های بار-نفوذ را برای یک نفوذگر استوانه‌ای با قطر ۶۰ آنگستروم در موقعیت‌های مختلف نفوذگر (IPos 1, IPos 2, IPos 3 و IPos 4) روی زیرلایه‌ای با زبری ثابت ۱۰ آنگستروم مقایسه می‌کند. هر موقعیت، رفتار بار-جابه‌جایی متفاوتی را نشان می‌دهد که نشان می‌دهد خواص محلی مواد یا ویژگی‌های سطح از موقعیتی به موقعیت دیگر متفاوت است. به عنوان مثال، خط سبز مرتبط با IPos 1 افزایش مداوم بار را با نفوذ نفوذگر به عمق بیشتر ماده نشان می‌دهد، که نشان می‌دهد این ناحیه ممکن است سخت‌تر یا در برابر تغییر شکل مقاوم‌تر باشد. از سوی دیگر، IPos 3 (خط آبی)، بار بسیار کمتری را در جابه‌جایی‌های قابل مقایسه نشان می‌دهد، که نشان می‌دهد ماده ممکن است در این موقعیت نرم‌تر یا نفوذ آسان‌تر باشد. از آنجایی که پاسخ مکانیکی ماده بسته به موقعیت نفوذگر متفاوت است، انتظار می‌رود سختی محاسبه شده برای موقعیت‌های مختلف نفوذگر متفاوت باشد.

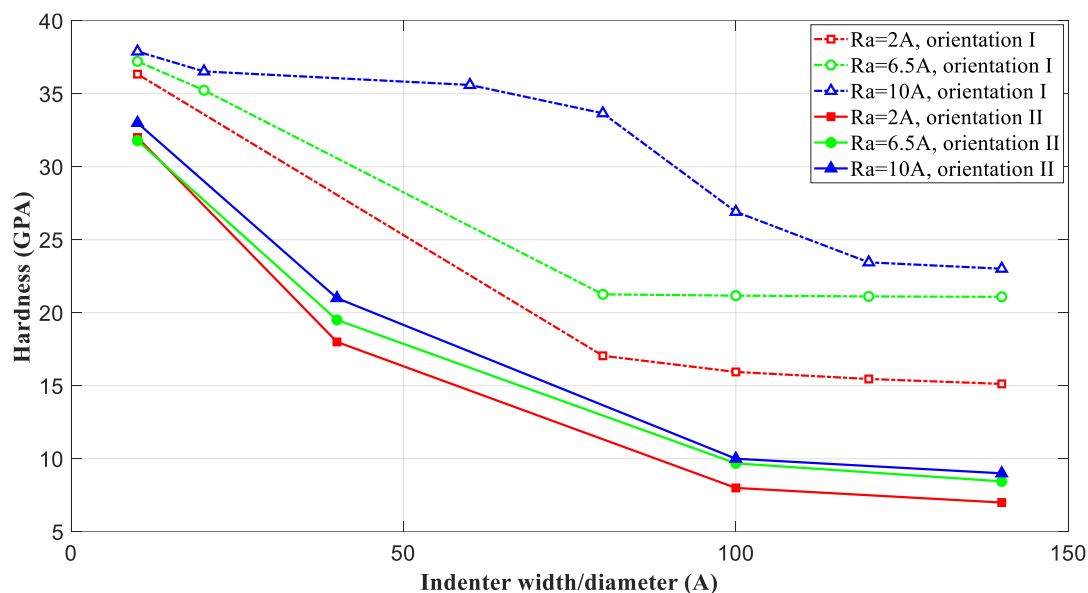


شکل ۴-۲۳- پاسخ‌های بار-نفوذ برای نفوذگر استوانه‌ای با قطر ۶۰ آنگستروم در موقعیت‌های مختلف.

مسئله مهم دیگر، نحوه تغییر سختی برای یک زبری ثابت اما برای قطرهای مختلف نفوذگر است. تغییرات سختی نسبت به قطر نفوذگر برای زبری‌های سطح مختلف و دو جهت‌گیری (I و II) در شکل ۴-۲۴ نشان داده شده است. برای همه نمونه‌ها، سختی با افزایش قطر نفوذگر کاهش می‌یابد. هنگامی که قطر نفوذگر افزایش می‌یابد، با مساحت سطح بزرگ‌تری از ماده تماس پیدا می‌کند و مساحت بزرگ‌تری از سطح ناهموار را لمس می‌کند که منجر به سختی محاسبه شده کمتر می‌شود.

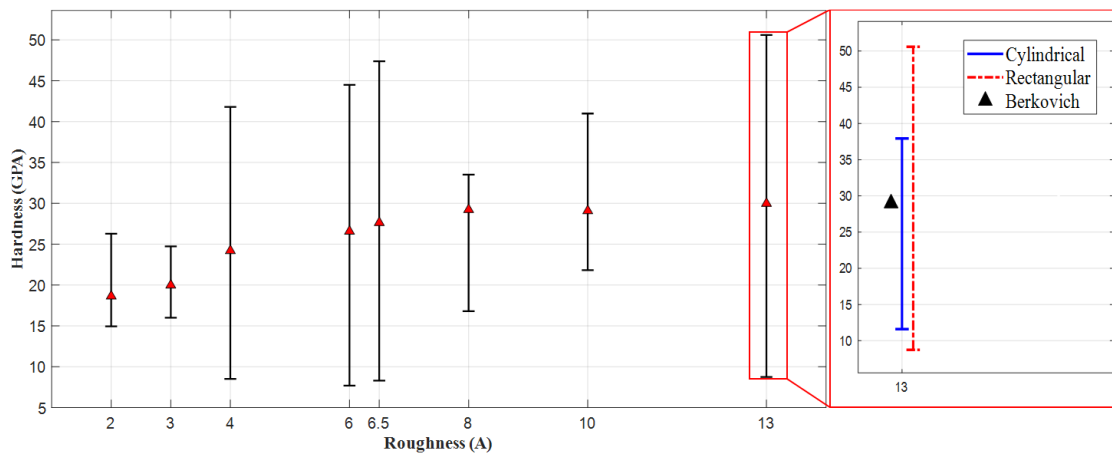
علاوه بر این، همه منحنی‌ها با افزایش قطر نفوذگر روند کاهشی را نشان می‌دهند، اما سرعت کاهش برای زبری کمتر (۲ آنگستروم) قابل‌توجه‌تر است. این نشان می‌دهد که زبری سطح با افزایش قطر نفوذگر تأثیر بیشتری بر سختی دارد، احتمالاً به این دلیل که سطح بزرگ‌تر نفوذگر با بی‌نظمی‌های سطحی بیشتری تعامل دارد. علاوه بر زبری سطح، جهت‌گیری کریستالوگرافی نقش مهمی در تخمین سختی ایفا می‌کند. جهت I معمولاً سختی بیشتری نسبت به جهت II با همان مقدار زبری دارد، و زبری

بیشتر (۶.۵ آنگستروم) منجر به سختی بیشتری نسبت به زبری کمتر (۲ آنگستروم) می شود، همان طور که در شکل ۴-۲۳ نشان داده شده است.



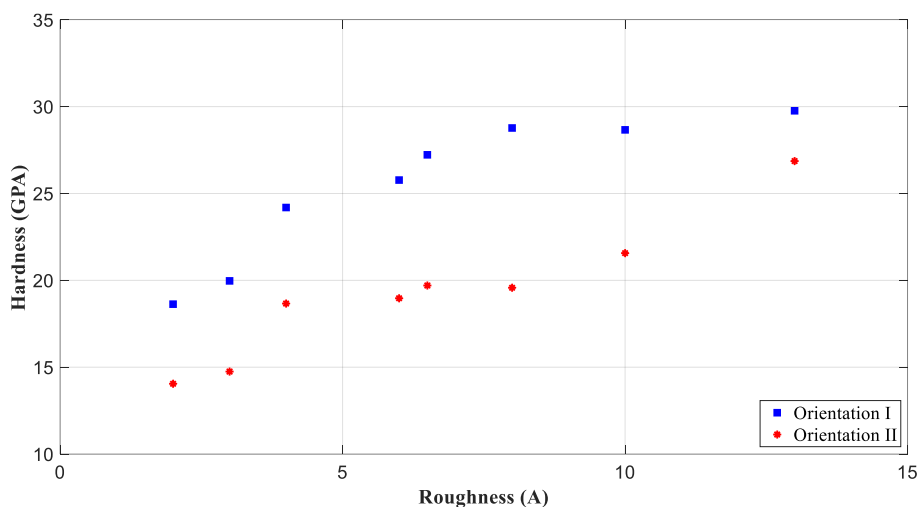
شکل ۴-۲۴- تغییرات سختی نسبت به قطر نفوذگر استوانه ای برای زبری ها و جهت گیری های مختلف.

نمودار پراکندگی در شکل ۴-۲۵، توزیع سختی را برای زبری های سطحی مختلف برای جهت گیری I، با در نظر گرفتن عرض ها و شکل های مختلف نفوذگر، نشان می دهد. خطوط عمودی نشان دهنده محدوده مقادیر سختی در هر زبری هستند که منعکس کننده تغییرات سختی ناشی از تفاوت در شکل و عرض نفوذگرها می باشند. مثلث های قرمز نشان دهنده میانگین سختی برای هر سطح زبری هستند که میانگین مقادیر سختی در تمام نفوذگرها (با شکل ها و عرض های مختلف) مورد استفاده برای آن زبری خاص است. پراکندگی مقادیر سختی نشان می دهد که قطر و شکل نفوذگرها تا چه حد بر سختی اندازه گیری شده، به ویژه در سطوح زبری مختلف، تأثیر می گذارد. در سمت راست شکل ۴-۲۴، توزیع سختی برای هر نفوذگر برای زبری نمونه ۱۳ آنگستروم به طور جداگانه نشان داده شده است. پراکندگی زیاد در نفوذگر مستطیلی به دلیل اثرات هم زمان زبری سطح و عرض و شکل نفوذگر است.



شکل ۴-۲۵- پراکندگی سختی برای جهت گیری I.

از آنجایی که شکل و قطر نفوذگر و سطح تماس بین نفوذگر و زیرلایه به طور قابل توجهی بر سختی اندازه گیری شده تأثیر می گذارد و منجر به تغییر در نتایج می شود، می توان سختی متوسط برای هر زبری را تعیین و نمایش داد تا تأثیر جهت گیری کریستالوگرافی بر سختی، بهتر تجزیه و تحلیل شود. در شکل ۴-۲۶، سختی متوسط برای جهت گیری های کریستالوگرافی I و II به عنوان تابعی از زبری زیرلایه رسم شده است. هر نقطه نشان دهنده سختی متوسط برای یک زبری خاص است که از آزمایش های مختلف با استفاده از نفوذگرهای استوانه ای، مستطیلی و برکوویچ به دست آمده است. صرف نظر از تأثیر خواص فیزیکی نفوذگر، سختی با افزایش زبری افزایش می یابد. علاوه بر این، در یک زبری سطح ثابت، سختی بالاتری در جهت گیری I مشاهده می شود.



شکل ۴-۲۶- پراکندگی میانگین سختی بر حسب زبری برای جهت‌گیری‌های I و II و همه نفوذگرها.

#### ۴-۴- نتایج مدل‌های یادگیری ماشین و ارزیابی عملکرد آنها

هدف از این بخش، توسعه یک چارچوب پیش‌بینی مبتنی بر شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN) برای استخراج و پیش‌بینی خواص مکانیکی لایه‌های نازک مس تحت شرایط مختلف آزمایش‌های نانوآیندنتیشن است. داده‌های مورد استفاده در این پژوهش از طریق روش چندمقیاسی QC تولید شده‌اند که امکان مدل‌سازی همزمان رفتار اتمی و پیوسته را فراهم می‌آورد. در این راستا، پارامترهای کلیدی و اثرگذار بر فرآیند نانوآیندنتیشن، شامل شکل و اندازه نفوذگر، زبری سطح و جهت‌گیری‌های کریستالوگرافی در نظر گرفته شده‌اند تا جامعیت تحلیل حفظ گردد.

پیش از توسعه مدل‌های عمیق، مجموعه‌ای از الگوریتم‌های یادگیری ماشین کلاسیک مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج حاصل نشان داد که مدل‌های خطی مانند Linear Regression، Ridge و Lasso و ElasticNet دقتی در محدوده ۰.۶۴ تا ۰.۶۵ به دست آوردند. این مقادیر بیانگر آن است که اگرچه بخشی از روابط میان ورودی‌ها و خروجی‌ها توسط مدل‌های خطی بازتاب داده می‌شود، اما این دسته از مدل‌ها توانایی کافی برای شناسایی روابط غیرخطی پیچیده موجود در داده‌ها را ندارند. مدل درخت

تصمیم (Decision Tree) نیز عملکردی پایین تر ( $R^2=0.63$ ) نسبت به مدل‌های خطی ارائه داد که نشان‌دهنده بیش‌پرازش یا کم‌پرازش در ساختار داده است.

با استفاده از مدل‌های ترکیبی مانند Random Forest، بهبود نسبی در نتایج حاصل شد ( $R^2=0.71$ ) که حاکی از توانایی بیشتر این الگوریتم در استخراج بخشی از روابط غیرخطی بود. با این حال، بهترین عملکرد متعلق به مدل XGBoost با مقدار  $R^2=0.89$  بود. این نتیجه نشان می‌دهد که داده‌های تولید شده دارای ساختارهای غیرخطی و تعاملات پیچیده هستند که تنها با مدل‌های تقویتی پیشرفته می‌توان به‌طور دقیق‌تر استخراج و پیش‌بینی کرد (به جدول ۴-۱ مراجعه کنید).

جدول ۴-۱- نتایج مدل‌های یادگیری ماشین

|   | Model                 | R2 Score |
|---|-----------------------|----------|
| 1 | LinearRegression      | 0.65     |
| 2 | Ridge                 | 0.65     |
| 3 | Lasso                 | 0.64     |
| 4 | ElasticNet            | 0.65     |
| 5 | DecisionTreeRegressor | 0.63     |
| 6 | RandomForestRegressor | 0.71     |
| 7 | KNeighborsRegressor   | 0.64     |
| 8 | XGBRegressor          | 0.89     |

به‌منظور دستیابی به بهترین عملکرد، برای هر یک از مدل‌های بررسی شده فرآیند تنظیم ابرپارامترها انجام شد. جدول فوق مقادیر بهینه ابرپارامترهای انتخاب‌شده برای هر مدل را نشان می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، مدل‌های خطی (Ridge, Lasso, ElasticNet) تنها به تنظیم پارامترهای ساده‌ای مانند  $\alpha$  و l1\_ratio نیاز داشتند، در حالی که مدل‌های مبتنی بر درخت (Decision Tree, Random Forest) به تنظیم عمق درخت و تعداد ویژگی‌ها حساس بودند. در نهایت، مدل XGBoost با تنظیم مناسب نرخ یادگیری، عمق درخت و تعداد تخمین‌زننده‌ها توانست بهترین عملکرد ( $R^2=0.89$ ) را ارائه دهد.

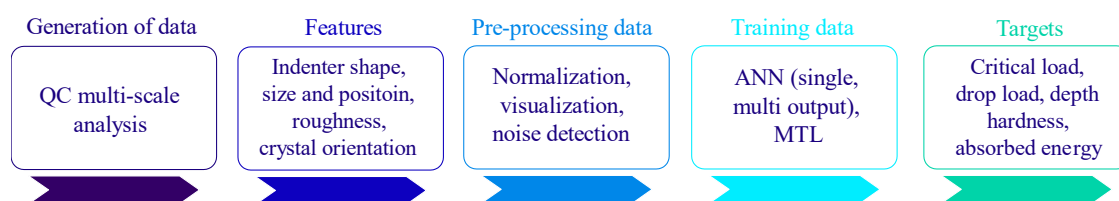
این نتایج بیانگر آن است که اگرچه انتخاب مدل نقش مهمی در دقت پیش‌بینی دارد، اما تنظیم دقیق ابرپارامترها نیز عامل کلیدی در بهبود عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین محسوب می‌شود. بر همین اساس، در بخش بعدی استفاده از مدل‌های یادگیری عمیق و چارچوب چندوظیفه‌ای (MTL) مورد توجه قرار گرفته است تا با بهره‌گیری از قابلیت یادگیری روابط غیرخطی پیچیده و وابستگی میان خروجی‌ها، نتایج دقیق‌تر و پایاتری حاصل گردد (به جدول ۴-۲ مراجعه کنید).

جدول ۴-۲- بهترین پارامترهای مدل‌های یادگیری ماشین

| Model |                       | Best Parameters                                                                                 |
|-------|-----------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1     | LinearRegression      | -----                                                                                           |
| 2     | Ridge                 | estimator__alpha': 1                                                                            |
| 3     | Lasso                 | estimator__alpha': 0.01                                                                         |
| 4     | ElasticNet            | estimator__alpha': 0.01, 'estimator__l1_ratio': 0.1                                             |
| 5     | DecisionTreeRegressor | estimator__max_depth': 12,<br>'estimator__max_features': 4,<br>'estimator__min_samples_leaf': 3 |
| 6     | RandomForestRegressor | estimator__max_depth': 11,<br>'estimator__max_features': 4,<br>'estimator__min_samples_leaf': 1 |
| 7     | KNeighborsRegressor   | estimator__n_neighbors': 5                                                                      |
| 8     | XGBRegressor          | estimator__learning_rate': 0.2,<br>'estimator__max_depth': 3,<br>'estimator__n_estimators': 600 |

با توجه به این نتایج، روشن است که مدل‌های کلاسیک به تنهایی قادر به دستیابی به دقت بالا در پیش‌بینی خواص مکانیکی لایه‌های نازک نیستند. از این رو، در ادامه پژوهش، تمرکز بر توسعه و ارزیابی مدل‌های شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN) قرار گرفت. شبکه‌های عصبی با قابلیت یادگیری روابط غیرخطی و پیچیده، ابزار مناسبی برای تحلیل این نوع داده‌ها محسوب می‌شوند. علاوه بر این، با توجه به چندخروجی بودن مسئله (شامل خواصی مانند سختی، بارهای بحرانی و تغییر مکان‌ها)، از رویکرد یادگیری چندوظیفه‌ای (Multi-Task Learning - MTL) نیز استفاده شد. این چارچوب امکان یادگیری همزمان چند ویژگی خروجی و بهره‌گیری از وابستگی‌های مشترک میان وظایف مختلف را فراهم کرده و موجب بهبود دقت پیش‌بینی در مقایسه با یادگیری تک‌وظیفه‌ای گردید.

شکل (۴-۲۷) مسیر کلی این مطالعه را نشان می‌دهد که شامل سه بخش اصلی است: تولید داده‌ها توسط روش QC، پیش‌پردازش و آماده‌سازی داده‌ها، و در نهایت توسعه و آموزش مدل‌های یادگیری عمیق. بدین ترتیب، این بخش از پایان‌نامه نه تنها عملکرد مدل‌های کلاسیک و پیشرفته را مورد مقایسه قرار می‌دهد، بلکه نشان می‌دهد چگونه استفاده از یادگیری عمیق و چارچوب چندوظیفه‌ای می‌تواند رویکردی نوین و کارآمد در پیش‌بینی خواص مکانیکی مواد در مقیاس نانو ارائه کند.



شکل ۴-۲۷- یک مسیر برای تحلیل نانوایندنتیشن مبتنی بر روش QC با استفاده از یادگیری ماشین.

لایه‌های ورودی که شامل شکل نفوذگر، اندازه نفوذگر، زبری، جهت کریستالوگرافی و موقعیت نفوذگر ( $X_5, X_4, X_3, X_2, X_1$ ) هستند، از طریق وزن‌ها (خطوط سبز) به نورون‌های لایه پنهان منتقل می‌شوند. در هر نورون، مجموع وزنی ورودی‌ها محاسبه می‌شود و یک بایاس (خطوط آبی) اضافه می‌شود. سپس این مجموع از طریق یک تابع فعال‌سازی منتقل می‌شود تا غیرخطی بودن به مدل وارد شود. لایه‌های خروجی عبارتند از بار بحرانی ( $P_{cr1}, P_{cr2}$ )، عمق نفوذ ( $D_1, D_2$ )، افت بار در نابجایی‌های اول و دوم ( $P_{dr1}, P_{dr2}$ )، سختی ( $H$ ) و انرژی جذب شده ( $U$ ) ( $y_8, \dots, y_3, y_2, y_1$ ).

داده‌ها به مجموعه‌های آموزشی و آزمایشی تقسیم می‌شوند که امکان آموزش مدل بر روی داده‌های آموزشی و ارزیابی مستقل عملکرد آن بر روی داده‌های آزمایشی را فراهم می‌کند. نود درصد داده‌ها برای آموزش جدا شده و ۱۰ درصد برای آزمایش رزرو شده است. معماری شبکه عصبی و پارامترهای آن از طریق کتابخانه Optuna بهینه می‌شوند.

تنظیم هایپرپارامتر فرایند بهینه‌سازی تنظیمات یک مدل یادگیری ماشین برای بهبود عملکرد آن است. هایپرپارامترها پیکربندی‌های خارجی هستند که باید به صورت دستی یا از طریق فرایندهای خودکار تنظیم شوند. نمونه‌هایی از آن شامل نرخ یادگیری، تعداد لایه‌ها، تعداد نورون‌ها، توابع فعال‌سازی، نرخ‌های ترک تحصیل، بهینه‌سازها و پارامترهای منظم‌سازی می‌شود. تنظیم هایپرپارامتر از طریق Optuna، یک چارچوب بهینه‌سازی قدرتمند، انجام می‌شود [۶۶]، [۶۵]، [۵۴]. تعداد لایه‌ها، تعداد

نورون‌ها در هر لایه، توابع فعال‌سازی و نرخ‌های ریزش از طریق کتابخانه Optuna بهینه‌سازی می‌شوند تا بهترین معماری شبکه از بین گزینه‌های زیر برای مطالعه حاضر پیدا شود:

- تعداد لایه‌ها بین ۳ تا ۷ است.
- تعداد نورون‌ها در هر لایه بین ۶ تا ۲۰۰ است.
- تابع فعال‌سازی هر لایه از ReLU، sigmoid، Tanh انتخاب می‌شود.
- بهینه‌ساز هر لایه از Adam، SGD و AdamW انتخاب می‌شود.
- نرخ یادگیری بهینه‌سازی بین  $1e-6$  و  $1e-2$  است.
- کاهش وزن<sup>۱</sup> از  $1e-5$  تا  $1e-2$  انتخاب می‌شود.
- میزان ریزش<sup>۲</sup> برای هر لایه بین ۰.۱ تا ۰.۳ انتخاب می‌شود.

عملکرد مدل با امتیاز  $R^2$  در مجموعه‌های اعتبارسنجی و آزمون ارزیابی می‌شود. امتیاز  $R^2$  یک معیار آماری است که نشان‌دهنده نسبت واریانس متغیر وابسته است که از متغیر(های) مستقل در یک مدل رگرسیون قابل‌پیش‌بینی است. به عبارت ساده‌تر، نشان می‌دهد که مدل چقدر با داده‌های مشاهده شده برازش دارد.

#### ۴-۱-۴-۴-۱-۴-۴ مدل چند خروجی<sup>۳</sup> با تمام اهداف

اولین مدل چند خروجی که معماری شبکه آن در شکل ۴-۲۸ قابل مشاهده است، در جدول ۴-۳ برای پیش‌بینی همه اهداف با هم آموزش داده شده است. این مدل از سه لایه پنهان با ۷۵، ۱۰۹ و ۸۱ نورون تشکیل شده است و از تابع فعال‌سازی Tanh استفاده می‌کند. از بهینه‌ساز Adam با نرخ یادگیری ۰.۰۰۲۳۰ و کاهش وزن ۰.۰۰۳۵ استفاده شده است. این مدل به دقت ۰.۹۳۶ دست می‌یابد.

---

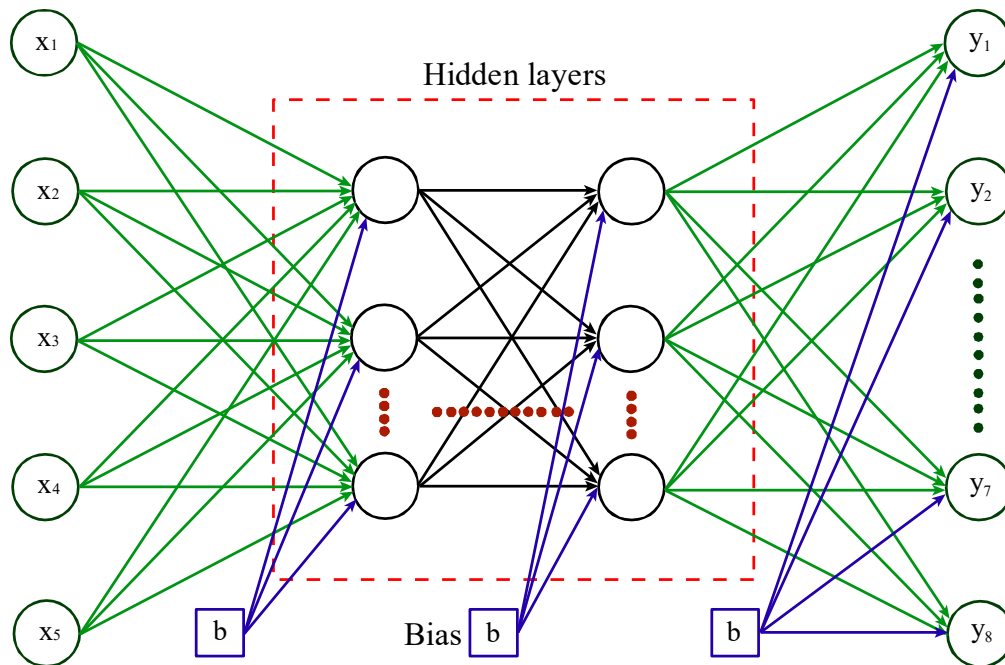
<sup>۱</sup> weight decay

<sup>۲</sup> Dropout

<sup>۳</sup> Multi-output model

Input layer

Output layer



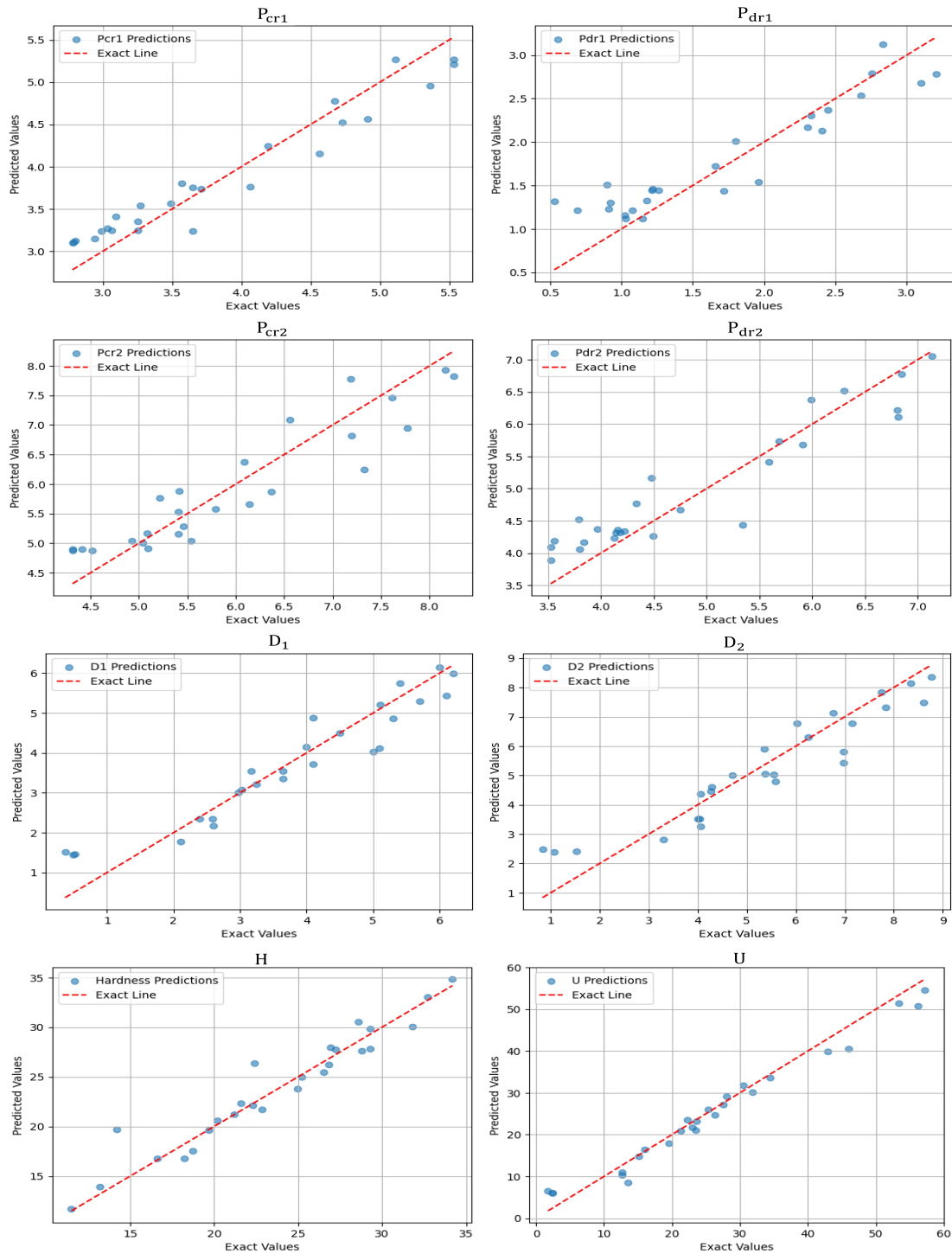
شکل ۴-۲۸- معماری مدل ANN.

جدول ۴-۳- مدل چند خروجی: یک شبکه واحد برای همه اهداف.

| Model        | Targets                                              | N-layer | N-neurons   | Activation | Drop-out         | Optimizer | Learning rate | Weight-decay | Accuracy ( $R^2$ ) |
|--------------|------------------------------------------------------|---------|-------------|------------|------------------|-----------|---------------|--------------|--------------------|
| Multi output | $P_{cr1}, P_{cr2}, P_{dr1}, P_{dr2}, D_1, D_2, U, H$ | 3       | 75, 109, 81 | Tanh       | 0.21, 0.11, 0.14 | Adam      | 0.00230       | 0.0035       | 0.936              |

شکل ۴-۲۹ پیش‌بینی‌هایی در مورد عملکرد مدل چند خروجی ارائه می‌دهد. نمودارهای پراکندگی در شکل ۴-۲۹ پیش‌بینی‌های مدل را با مقادیر واقعی برای متغیرهای خروجی مختلف مقایسه می‌کند. درحالی‌که برخی از متغیرها تطابق خوبی با مقادیر دقیق (مانند  $H$ ،  $U$ ) نشان می‌دهند، برخی دیگر پراکندگی بیشتری نشان می‌دهند ( $P_{cr1}$ ،  $P_{dr2}$ ).

## تحلیل چندمقیاسی نانوفروفتگی با ترکیب QC و یادگیری ماشین



شکل ۴-۲۹- عملکرد پیش‌بینی و همگرایی مدل چندخروجی با همه اهداف.

## ۴-۴-۲- مدل چند خروجی با دو گروه هدف مجزا

برای بهبود عملکرد، اکنون به جای یک مدل یکپارچه، دو مدل چند خروجی جداگانه آموزش داده می‌شوند. اهداف به دو گروه تقسیم می‌شوند: یک مدل روی  $P_{cr1}, P_{cr2}, P_{dr1}, P_{dr2}, U, H$  آموزش داده می‌شود و دیگری فقط روی  $D_2, D_1$  متمرکز است. این جداسازی با مشاهده این نکته ایجاد می‌شود که  $D_2, D_1$  همبستگی ضعیفی با  $P_{dr2}, P_{dr1}$  دارند اما همبستگی قوی با سایر اهداف دارند، که نشان می‌دهد گنجاندن آنها در یک مدل واحد با همه اهداف ممکن است بر یادگیری تأثیر منفی بگذارد.

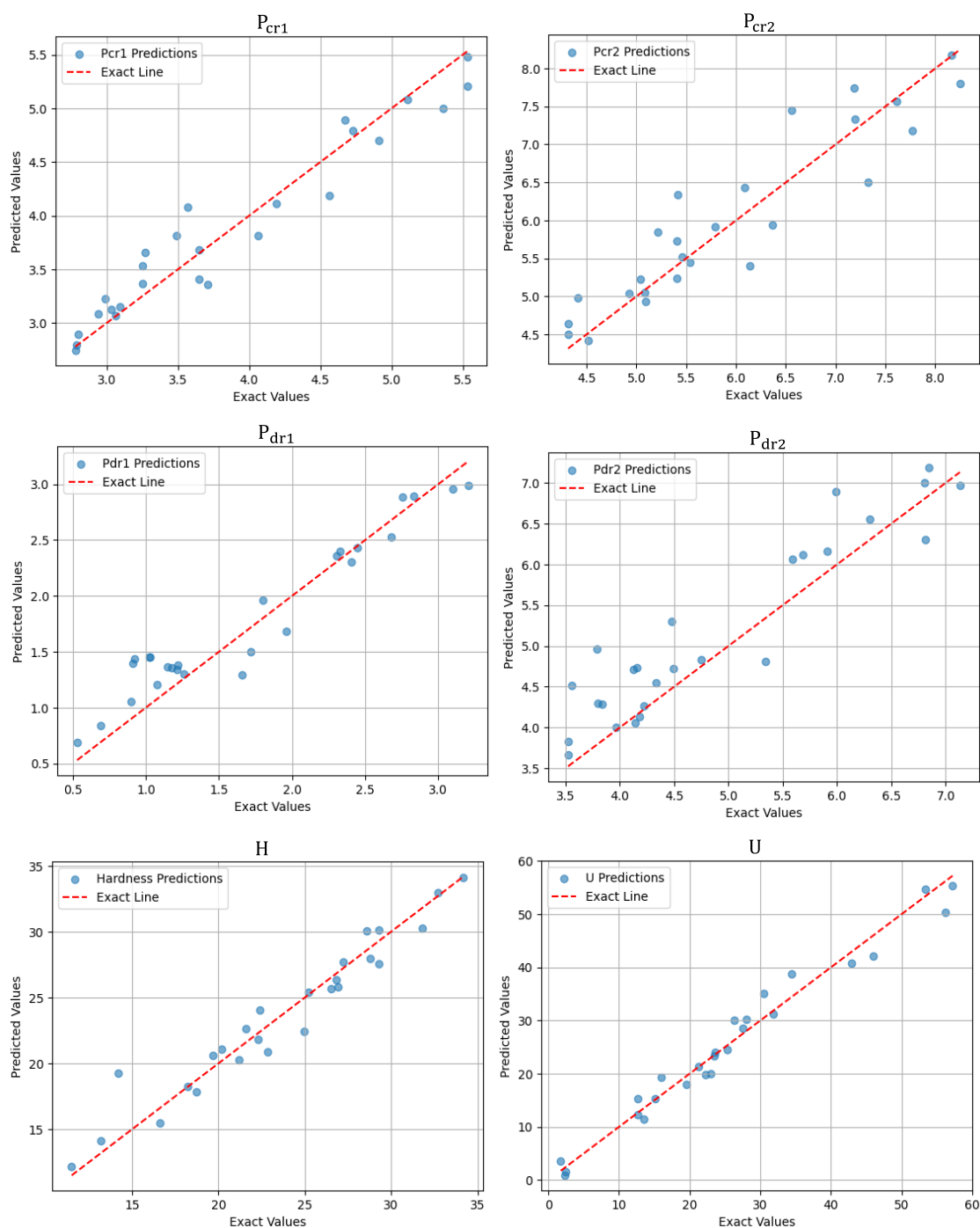
مدل  $D_2, D_1$  به دقت ۰.۹۶۱ دست می‌یابد که به طور قابل توجهی بیشتر از زمانی است که در مدل چند خروجی کامل (۰.۹۳۶) گنجانده می‌شوند. این یافته نشان می‌دهد که آموزش  $D_2, D_1$  به طور مستقل منجر به استخراج ویژگی و تعمیم بهتر برای این دو هدف می‌شود. از سوی دیگر، مدلی که  $P_{cr1}, H, P_{cr2}, P_{dr1}, P_{dr2}, U$  را پیش‌بینی می‌کند، دقتی برابر با ۰.۹۳۴ دارد که تقریباً با دقت مدل تک خروجی - چندگانه یکسان است. این نشان می‌دهد که حذف  $D_2, D_1$  تأثیر قابل توجهی بر یادگیری سایر اهداف نداشته است، و این ایده را تقویت می‌کند که  $D_2, D_1$  ممکن است در فرایند یادگیری در مدل کامل چند خروجی اختلال ایجاد کرده باشند (به جدول ۴-۴ مراجعه کنید).

جدول ۴-۴- مدل چند خروجی: شبکه‌های جداگانه برای گروه‌های هدف مختلف.

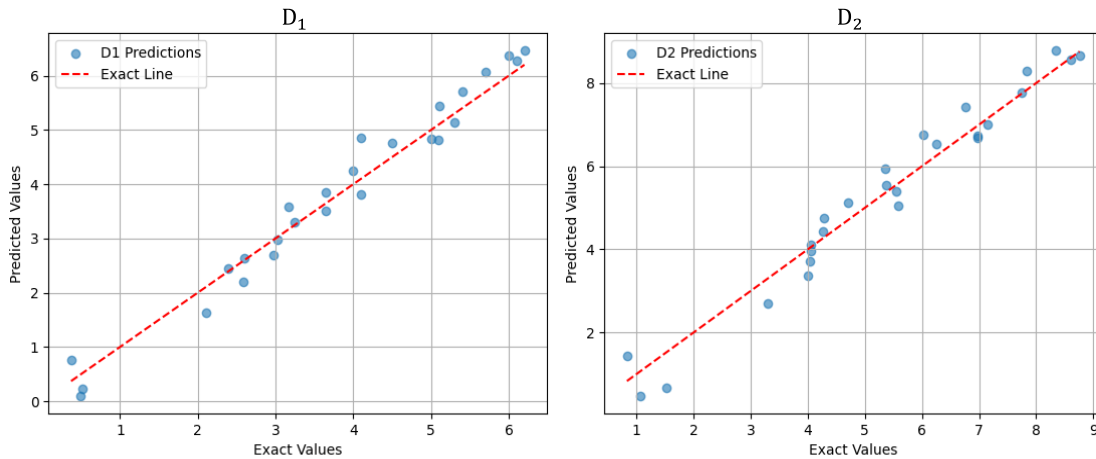
| Model        | Targets                                    | N-layer | N-neurons | Activation          | Drop-out         | Optimizer | Learning rate | Weight-decay | Accuracy ( $R^2$ ) |
|--------------|--------------------------------------------|---------|-----------|---------------------|------------------|-----------|---------------|--------------|--------------------|
| Multi output | $P_{cr1}, P_{cr2}, P_{dr1}, P_{dr2}, U, H$ | 3       | 65,70,82  | Tanh, Tanh, Sigmoid | 0.27, 0.17, 0.14 | Adam      | 0.00221       | 0.0030       | 0.934              |
| Multi output | $D_1, D_2$                                 | 3       | 43,16,89  | Tanh                | 0.21, 0.11, 0.15 | Adam      | 0.00240       | 0.0035       | 0.961              |

طبق شکل ۴-۳۰، که عملکرد پیش‌بینی  $P_{cr1}, P_{cr2}, P_{dr1}, P_{dr2}, U, H$  را نشان می‌دهد، مدل نسبت به مدل دوم دقت کمتری دارد. این احتمالاً به این دلیل است که متغیرهای کلیدی  $D_2, D_1$  از خروجی‌های هدف حذف شده‌اند. از آنجایی که  $D_2, D_1$  با برخی از متغیرهای هدف همبستگی دارند، عدم وجود آنها یادگیری و پیش‌بینی دقیق خروجی‌های باقی‌مانده را برای مدل دشوارتر می‌کند. نمودارهای پراکندگی نشان می‌دهند که درحالی که  $U$  و  $H$ ، به طور معقولی خوب پیش‌بینی شده‌اند، پیش‌بینی‌های  $P_{cr2}, P_{dr1}, P_{dr2}, P_{cr1}$  خطاهای قابل توجهی دارند که نشان می‌دهد مدل برای ثبت روابط اساسی آنها بدون  $D_2, D_1$  تلاش می‌کند. در مقابل، شکل ۴-۳۱، که فقط بر پیش‌بینی  $D_2, D_1$  تمرکز دارد، دقت

قابل توجهی را نشان می دهد. نمودارهای پراکندگی، هم ترازای قوی بین مقادیر پیش بینی شده و دقیق را نشان می دهند. این نشان می دهد که مدل سازی  $D_2, D_1$  آسان تر است و نقش های حیاتی در تعریف روابط بین تمام خروجی ها ایفا می کنند.



شکل ۴-۳۰- عملکرد پیش بینی و همگرایی مدل چند خروجی بدون  $D_2, D_1$ .



شکل ۴-۳۱- عملکرد پیش‌بینی و همگرایی مدل چند خروجی برای پیش‌بینی فقط  $D_1, D_2$ .

با وجود بهبود دقت برای  $D_1, D_2$ ، این رویکرد دو مدلی ناکارآمدی‌هایی را ایجاد می‌کند. آموزش مدل‌های جداگانه از یادگیری مشترک جلوگیری می‌کند و منجر به محاسبات زائد می‌شود که ایده‌آل نیست. به جای جداسازی کامل وظایف، می‌توان از یک رویکرد چند وظیفه‌ای برای حفظ مزایای جداسازی وظایف استفاده کرد و در عین حال امکان یادگیری ویژگی‌های مشترک را نیز فراهم کرد که منجر به یک مدل کارآمدتر و بالقوه دقیق‌تر می‌شود.

#### ۴-۳-۴- مدل چندوظیفه‌ای

یادگیری چندوظیفه‌ای یک رویکرد در یادگیری ماشین و یادگیری عمیق است که در آن یک مدل واحد برای حل چندین وظیفه‌ی مرتبط به‌طور همزمان آموزش داده می‌شود. برخلاف یادگیری تک‌وظیفه‌ای که در آن برای هر خروجی یک مدل مستقل ساخته می‌شود، در MTL بخش قابل‌توجهی از شبکه به صورت اشتراکی (Shared Layers) میان وظایف مختلف آموزش داده شده و تنها بخش انتهایی شبکه به صورت اختصاصی (Task-Specific Layers) برای هر وظیفه طراحی می‌گردد.

هدف اصلی از این روش، انتقال دانش بین وظایف مرتبط و استخراج بازنمایی‌های مشترک از داده‌هاست. این امر باعث می‌شود مدل علاوه بر داشتن دقت بالاتر، تعمیم‌پذیری بهتری نیز نسبت به مدل‌های تک‌وظیفه‌ای داشته باشد.

آموزش همزمان چند وظیفه، از بیش‌برازش جلوگیری کرده و سبب می‌شود مدل ویژگی‌های عمومی‌تری از داده‌ها بیاموزد. در بسیاری از مسائل علمی و مهندسی، حجم داده‌ها محدود است. با MTL، داده‌های مربوط به چند وظیفه به‌طور همزمان در فرآیند یادگیری دخالت داده می‌شوند و این امر موجب پایداری بیشتر مدل می‌گردد. وظایف مختلف معمولاً ویژگی‌های پنهان و مشترکی دارند. با یادگیری چندوظیفه‌ای، این ویژگی‌های مشترک استخراج شده و سپس برای هر خروجی به صورت اختصاصی پردازش می‌شوند. به‌جای آموزش چندین مدل جداگانه، یک مدل مشترک طراحی می‌شود که وظایف مختلف را همزمان انجام می‌دهد و این موضوع بهره‌وری محاسباتی را افزایش می‌دهد.

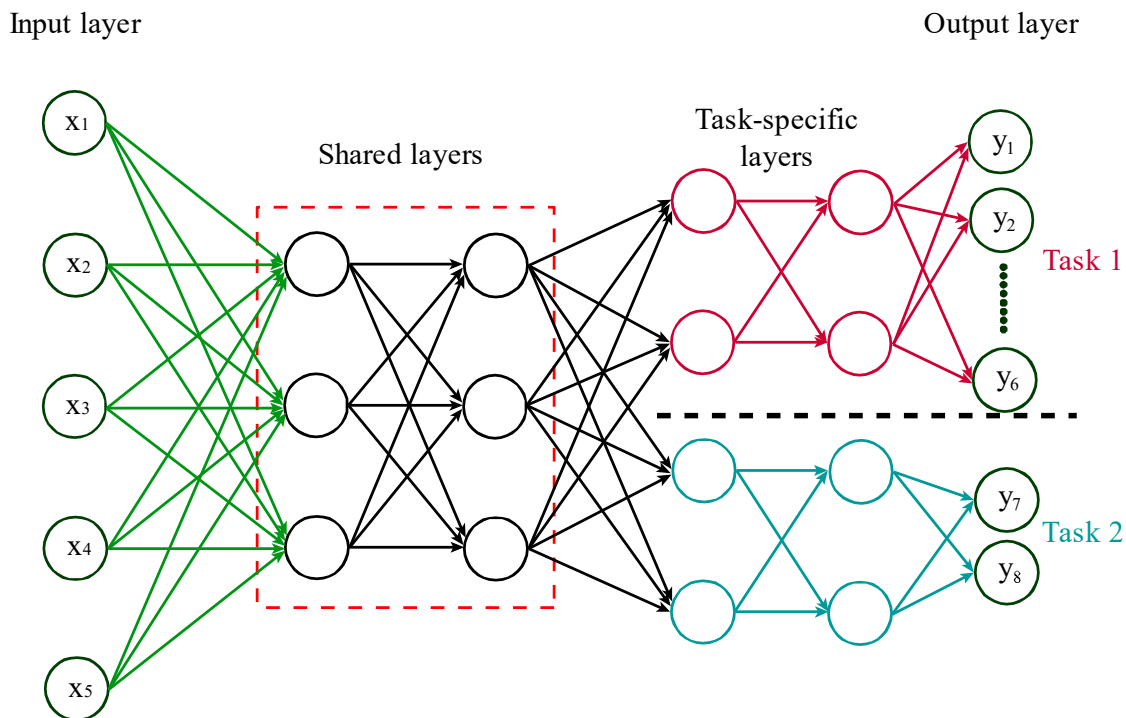
در این پایان‌نامه، مسئله پیش‌بینی خواص مکانیکی لایه نازک مس تحت شرایط مختلف نانوایندنتیشن مطرح است. خروجی‌های مورد نظر شامل مقادیری مانند سختی (Hardness)، بارهای بحرانی ( $P_{cr}$ )، بارهای افقی ( $P_{dr}$ ) و همچنین مقادیر جابجایی هستند. این خروجی‌ها اگرچه مستقل گزارش می‌شوند، اما در واقع دارای وابستگی‌های درونی و همبستگی‌های فیزیکی با یکدیگر هستند و همگی به شرایط مشترک آزمایش (شکل و اندازه نفوذگر، زبری سطح و جهت‌گیری کریستالوگرافی) وابسته‌اند.

بنابراین، به‌جای طراحی مدل‌های جداگانه برای هر خروجی، استفاده از چارچوب یادگیری چندوظیفه‌ای (MTL) امکان بهره‌برداری از این وابستگی‌ها را فراهم می‌کند. در این روش، بخش اشتراکی مدل ویژگی‌های عمومی و مشترک میان وظایف را یاد می‌گیرد و سپس هر وظیفه در بخش اختصاصی خود به‌طور دقیق‌تر آموزش داده می‌شود. این رویکرد نه تنها باعث افزایش دقت پیش‌بینی می‌شود، بلکه موجب کاهش نیاز به داده‌های بیشتر و پایداری بهتر مدل نیز خواهد شد.

برای رفع محدودیت‌های آموزش مدل‌های چند خروجی جداگانه، یک رویکرد یادگیری چندوظیفه‌ای پیاده‌سازی شده است. انتظار می‌رود که این رویکرد مزایای جداسازی وظایف را حفظ کند و درعین حال یادگیری مشترک را امکان‌پذیر سازد. در این مدل، یک شبکه مشترک برای استخراج ویژگی‌های مشترک تعریف شده است و به دنبال آن دو شاخه مختص به وظایف قرار دارد: وظیفه ۱ برای  $P_{cr1}$ ,  $P_{cr2}$ ,  $H$

$P_{dr1}$ ,  $P_{dr2}$ ,  $U$  و وظیفه ۲ برای  $D_1$ ,  $D_2$ . این طراحی به هر وظیفه اجازه می‌دهد تا بر ویژگی‌های مرتبط خود تمرکز کند و در عین حال از بازنمایی‌های مشترک آموخته شده در لایه‌های مشترک بهره‌مند شود. شکل ۳۲-۴ معماری یادگیری چندوظیفه‌ای را نشان می‌دهد. MTL تکنیکی در یادگیری ماشین است که در آن چندین وظیفه مرتبط به طور هم‌زمان از طریق یک مدل مشترک آموزش داده می‌شوند. ایده اصلی، استفاده از اطلاعات مشترک در بین وظایف برای بهبود تعمیم‌پذیری و عملکرد است. برخلاف یادگیری تک‌وظیفه‌ای، که در آن مدل‌ها به طور جداگانه برای هر وظیفه آموزش داده می‌شوند، MTL اشتراک‌گذاری نمایش‌ها را ارتقا می‌دهد و وظایف را قادر می‌سازد تا از یکدیگر بهره‌مند شوند [۵۷].

بخش میانی شکل ۳۰-۴، که در کادر قرمز قرار دارد، نشان‌دهنده لایه مشترک است. این لایه ویژگی‌های کلی مشترک در همه وظایف را استخراج می‌کند. اشتراک‌گذاری این نمایش به مدل اجازه می‌دهد تا اطلاعات را بین وظایف منتقل کند و عملکرد کلی را بهبود بخشد. در سمت راست، لایه‌های خاص وظیفه متناسب با نیازهای فردی هر وظیفه تنظیم شده‌اند. وظیفه ۱ دارای شش گره خروجی است و از یک مسیر پردازش منحصر به فرد از لایه‌های مشترک استفاده می‌کند. وظیفه ۲، با دو گره خروجی، یک مسیر پردازش متمایز از لایه‌های مشترک را دنبال می‌کند.



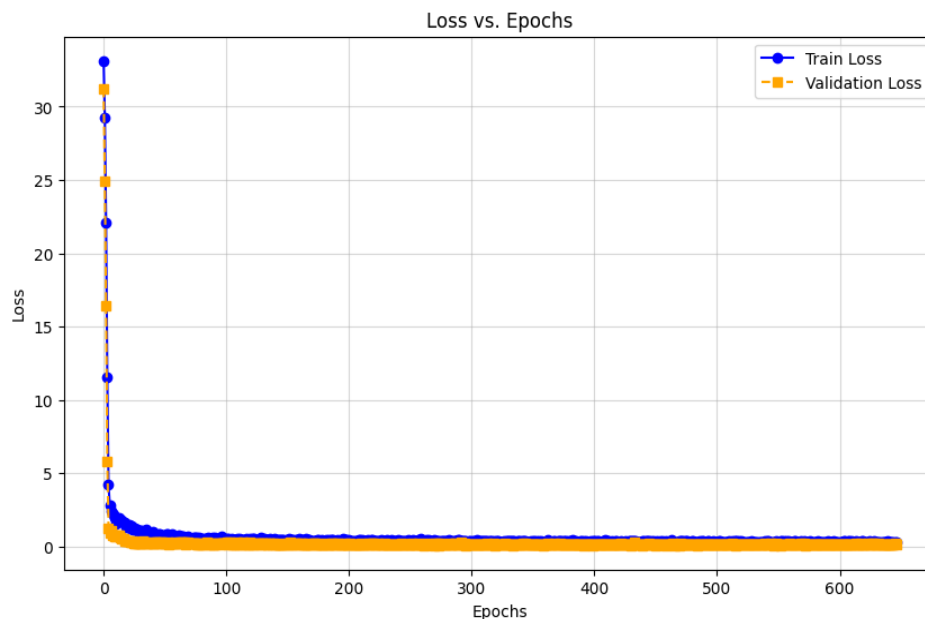
شکل ۴-۳۲- معماری مدل MTL.

طبق جدول ۴-۵، مدل MTL به دقت کلی ۰.۹۵۷۳ دست می‌یابد که بیشتر از مدل تک خروجی (۰.۹۳۶) و مدل‌های چند خروجی جداگانه (۰.۹۳۴) برای  $P_{cr1}$ ,  $P_{cr2}$ ,  $P_{dr1}$ ,  $P_{dr2}$ ,  $U$ ,  $H$  و ۰.۹۶۱ برای  $D_1$ ,  $D_2$  است. این نشان می‌دهد که MTL با موفقیت از یادگیری مشترک بهره می‌برد و در عین حال تداخلی را که در مدل تک خروجی چند خروجی رخ می‌دهد، کاهش می‌دهد. با تعریف صریح دو وظیفه، تضمین می‌شود که  $D_1$ ,  $D_2$  تحت تأثیر منفی اهداف با همبستگی ضعیف خود ( $P_{dr2}$ ,  $P_{dr1}$ ) قرار نگیرند و در عین حال از اطلاعات مشترک با سایر اهداف با همبستگی قوی بهره‌مند شوند.

جدول ۴-۵- مدل یادگیری چندوظیفه‌ای

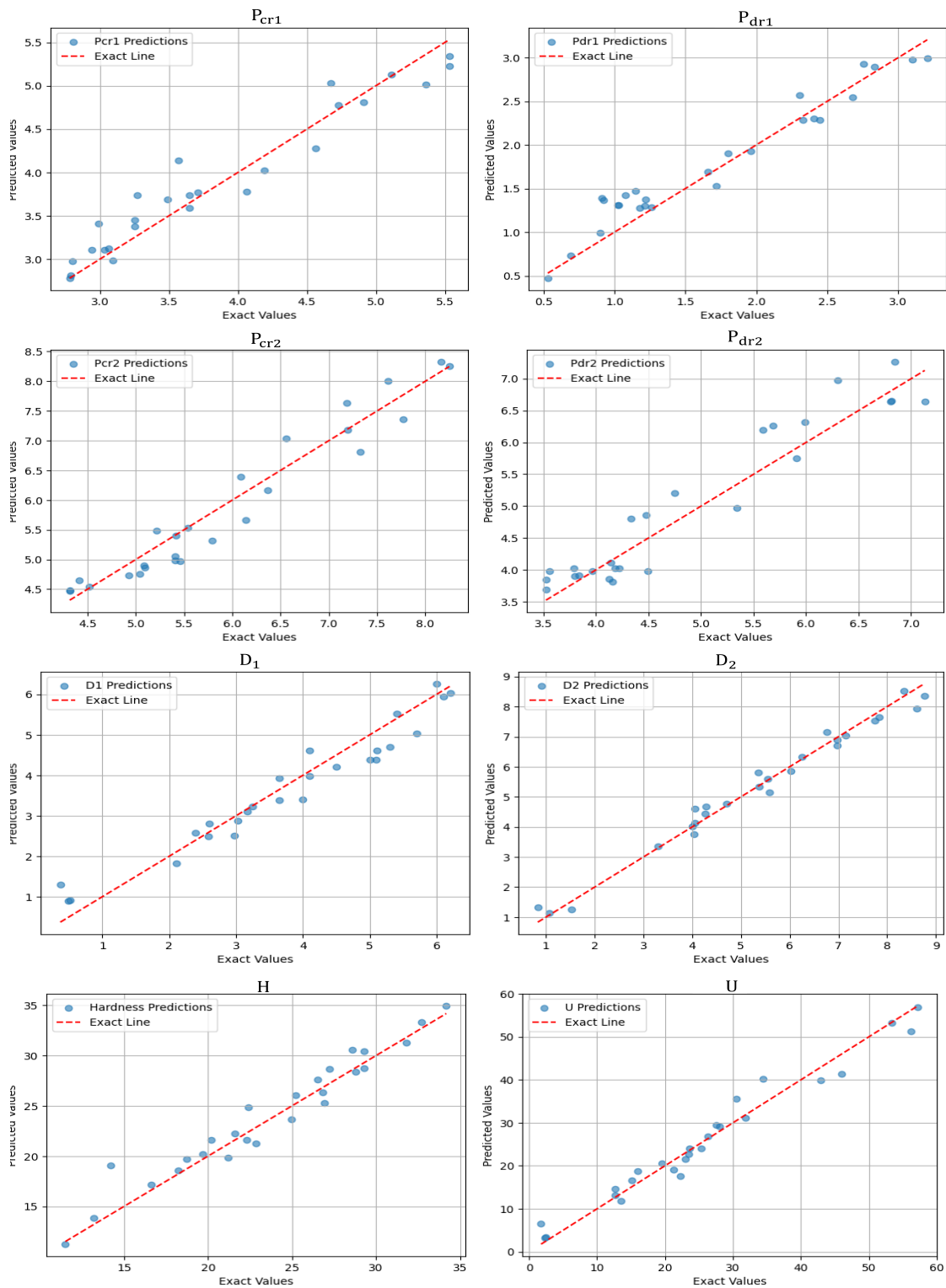
| Model | Targets                                                               | N-layer | N-neurons | Activation | Drop-out | Optimizer | Learning rate | Weight-decay | Accuracy ( $R^2$ ) |
|-------|-----------------------------------------------------------------------|---------|-----------|------------|----------|-----------|---------------|--------------|--------------------|
| MTL   | $P_{cr1}$ ,<br>$P_{cr2}$ ,<br>$P_{dr1}$ ,<br>$P_{dr2}$ ,<br>$U$ , $H$ | Shared  | 2         | 59,91      | Relu     | SGD       | 0.0043        | 0.0015       | 0.9573             |
|       |                                                                       | Task1   | 2         | 36,31      | Tanh     |           |               |              |                    |
|       | $D_1$ , $D_2$                                                         | Task2   | 2         | 19,18      | Tanh     |           |               |              |                    |

علاوه بر این، MTL از نظر محاسباتی کارآمدتر از آموزش دو مدل مستقل است، زیرا هر دو وظیفه را به طور هم‌زمان بهینه می‌کند تا اینکه ویژگی‌های مشترک را در دو مدل جداگانه به طور اضافی پردازش کند. استفاده از یک بهینه‌ساز SGD به جای Adam نیز ممکن است به تعمیم بهتر کمک کرده باشد، زیرا SGD اغلب با وارد کردن نویز بیشتر به فرایند بهینه‌سازی، به جلوگیری از بیش‌برازش کمک می‌کند. در مجموع، MTL از هر دو مدل تک و چندخروجی مجزا بهتر عمل می‌کند و اثربخشی آن را در مدیریت اهداف با همبستگی‌های متغیر ضمن حفظ کارایی محاسباتی تأیید می‌کند. این مدل به سرعت الگوهای اصلی داده را در ۲۰ دوره اول یاد می‌گیرد و افت شدیدی را در تلفات آموزش و اعتبارسنجی نشان می‌دهد. پس از آن، تلفات به طور یکنواخت کاهش می‌یابد و در حدود دوره ۱۰۰ تثبیت می‌شود. هم‌ترازی نزدیک دو منحنی بدون واگرایی، نشان‌دهنده آموزش موفقیت‌آمیز بدون بیش‌برازش است، همان‌طور که در شکل ۴-۳۳ نشان داده شده است.



شکل ۴-۳۳- همگرایی آموزش و اعتبارسنجی در طول دوره‌ها برای مدل MTL.

شکل ۴-۳۴ نتایج مدل MTL آموزش‌دیده برای پیش‌بینی هم‌زمان چندین خروجی را نشان می‌دهد. هشت زیرنمودار اول، نمودارهای پراکندگی را برای مقایسه مقادیر پیش‌بینی‌شده (محور  $y$ ) با مقادیر دقیق (محور  $x$ ) برای هر متغیر هدف را نشان می‌دهند. هر نمودار شامل یک خط چین قرمز است که نشان‌دهنده رابطه ایده‌آل ۱:۱ است، جایی که پیش‌بینی‌های کامل قرار می‌گیرند. نقاط عموماً در امتداد این خط به خوبی تراز شده‌اند، که نشان می‌دهد مدل الگوهای معناداری را آموخته است، اما برخی از پراکندگی‌ها نشان‌دهنده تغییرپذیری در دقت پیش‌بینی در اهداف مختلف هستند.



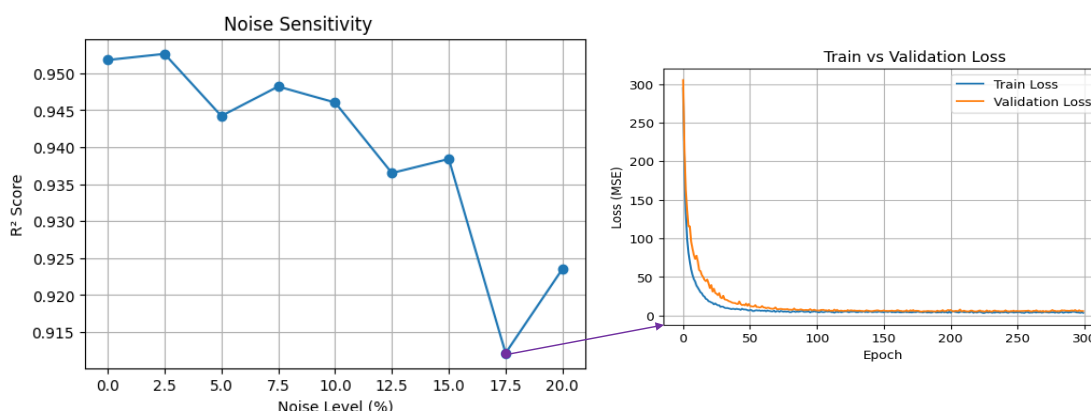
شکل ۴-۳۴- عملکرد پیش‌بینی مدل MTL.

در ادامه تحلیل حساسیت برای این مدل نیز انجام شده است. افزودن تحلیل حساسیت به نویز به مدل مالتی تسک لرنینگ با هدف ارزیابی پایداری و قابلیت اطمینان مدل در شرایط نزدیک به واقعیت انجام شد. در کاربردهای عملی، داده‌های ورودی معمولاً با نویز، عدم قطعیت یا خطاهای اندازه‌گیری همراه هستند، بنابراین مدلی که تنها بر داده‌های تمیز آموزش دیده باشد ممکن است در شرایط واقعی عملکرد مطلوبی نداشته باشد. از این رو، بررسی واکنش مدل نسبت به سطوح مختلف نویز به درک بهتری از مقاومت آن در برابر اغتشاش داده‌ها و میزان تعمیم‌پذیری آن کمک می‌کند. این تحلیل امکان می‌دهد تا مشخص شود آیا مدل MTL صرفاً داده‌ها را حفظ کرده یا واقعاً روابط فیزیکی و الگوهای مشترک میان تسک‌ها را یاد گرفته است. در نتیجه، افزودن نویز و بررسی تغییرات شاخص عملکرد به عنوان معیاری از توانایی<sup>۱</sup>، گامی ضروری در ارزیابی کیفیت کلی مدل و اطمینان از کارایی آن در محیط‌های واقعی محسوب می‌شود. در این بخش، به منظور بررسی قابلیت اطمینان مدل در برابر داده‌های نویزی، تحلیل حساسیت به نویز انجام شد. بدین منظور پس از آموزش مدل نهایی در هر مرحله از اعتبارسنجی متقاطع، به داده‌های ورودی تست سطوح مختلفی از نویز گاوسی افزوده شد. شدت نویز از صفر تا بیست درصد از انحراف معیار داده‌ها تغییر داده شد تا میزان تأثیر اغتشاش ورودی بر عملکرد مدل ارزیابی گردد. سپس مدل آموزش دیده بدون هیچ گونه بازآموزی بر روی داده‌های نویزی اعمال شد و مقدار ضریب تعیین برای هر سطح نویز محاسبه گردید.

نتایج حاصل از آموزش مدل مالتی تسک لرنینگ (MTL) نشان می‌دهد که مدل از نظر همگرایی، دقت و عملکرد بسیار مطلوبی دارد. همان‌طور که در نمودار تغییرات تابع هزینه مشاهده می‌شود، هر دو منحنی خطای آموزش و اعتبارسنجی با سرعت قابل توجهی کاهش یافته و پس از حدود صد دوره آموزشی به مقادیر ثابتی نزدیک صفر رسیده‌اند. نزدیکی مقادیر خطای آموزش و اعتبارسنجی در طول فرآیند آموزش در نقطه بنفش نشان دهنده نویز ۱۷.۵ درصد، در یکی از فولد های آموزش است، بیانگر آن است که مدل دچار بیش‌برازش (Overfitting) نشده و قابلیت تعمیم مناسبی بر داده‌های جدید دارد. از سوی دیگر، نتایج تحلیل حساسیت به نویز نشان می‌دهد که مدل در برابر اغتشاش داده‌ها از عملکرد قابل قبولی برخوردار است. در سطوح نویز تا حدود ۱۰ درصد، مقدار ضریب تعیین تقریباً ثابت

<sup>۱</sup> robustness

باقی مانده و تنها افت جزئی مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده‌ی مقاومت مدل در برابر نویزهای کم تا متوسط است. با افزایش نویز به بیش از ۱۵ درصد، کاهش محسوسی در مقدار  $R^2$  مشاهده می‌شود، با این حال عملکرد کلی مدل همچنان در سطح قابل قبول (بیش از ۰.۹) باقی می‌ماند. در مجموع، این نتایج نشان می‌دهند که مدل MTL توسعه‌یافته توانسته است تعادلی مناسب میان دقت پیش‌بینی، پایداری در برابر نویز و قابلیت تعمیم برقرار کند (شکل ۴-۳۵).



شکل ۴-۳۵- عملکرد پیش‌بینی مدل MTL.

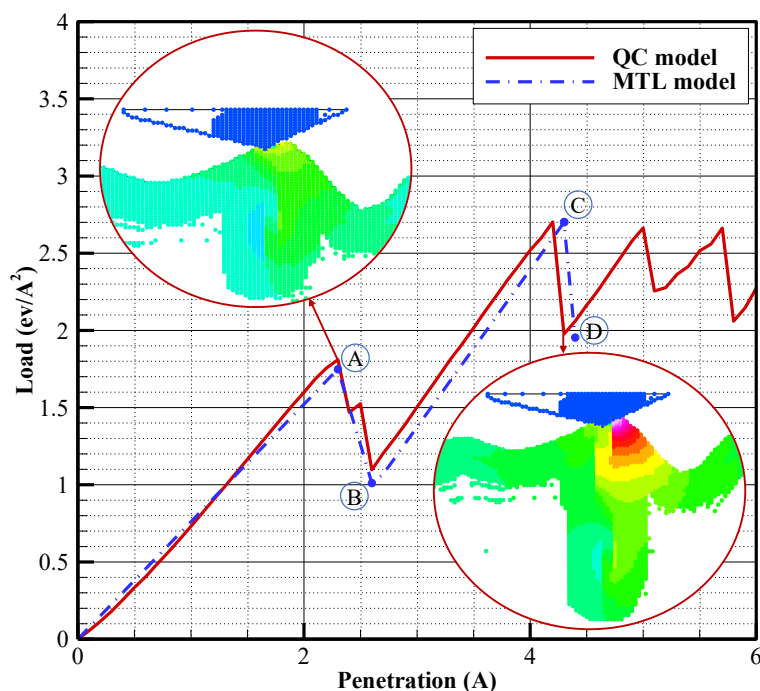
## ۴-۵- مطالعه موردی

### ۴-۵-۱- مثال اول

یک مسئله نانوایندنتیشن با نفوذگر برکروویچ، زبری سطح ۶.۵ آنگستروم و جهت کریستالوگرافی I حل شده است. برای ارزیابی دقت راه‌حل‌های مدل یادگیری عمیق، نتایج مدل MTL با نتایج مدل QC مقایسه شده‌اند، همان‌طور که در شکل ۴-۳۶ نشان داده شده است.

پاسخ بار-نفوذ پیش‌بینی شده از مدل MTL در کل محدوده عمق نفوذ، با مدل QC مطابقت نزدیکی دارد. بارهای بحرانی ( $P_{cr1}, P_{cr2}$ ) در نابجایی‌های اول و دوم تقریباً توسط مدل MTL (نقاط A و C) با خطای نسبی کمتر از ۱.۲٪ ثبت می‌شوند. مدل MTL مقدار سختی نزدیک به مدل QC ارائه می‌دهد که نشان‌دهنده دقت مدل یادگیری عمیق در ثبت اثرات زبری سطح و جهت کریستالوگرافی است. علاوه بر این، انرژی (U) جذب شده تا نابجایی دوم با خطای نسبی کم توسط مدل پیش‌بینی می‌شود.

این امر، قدرت مدل را در تخمین معیارهای مکانیکی مبتنی بر انرژی، که برای تحلیل تغییر شکل مواد حیاتی هستند، برجسته می‌کند. پس از شروع پلاستیسیته، مدل MTL به طور مؤثر افت بار ( $P_{dr1}$ ،  $P_{dr2}$ ) را که نشان‌دهنده حرکت نابجایی‌ها و شروع لغزش در ساختار کریستالی هستند (نقاط B و D) ثبت می‌کند.



شکل ۴-۳۶- مقایسه بین نتایج مدل‌های QC و MTL برای نفوذگر برکویچ و زبری ۶.۵ آنگستروم.

جدول ۴-۶ مقایسه‌ای بین مدل‌های QC و MTL در پیش‌بینی  $H$ ،  $U$  و زمان محاسباتی مورد نیاز ارائه می‌دهد. مدل MTL دقت بسیار خوبی را نشان می‌دهد و تنها حدود ۲.۲٪ خطا در پیش‌بینی سختی و انرژی در مقایسه با مدل QC دارد. مهم‌تر از آن، زمان محاسبات را به طور قابل توجهی کاهش می‌دهد، به طوری که از ۴۵ ساعت برای مدل QC به تنها ۴.۲ ساعت برای آموزش مدل MTL کاهش می‌یابد.

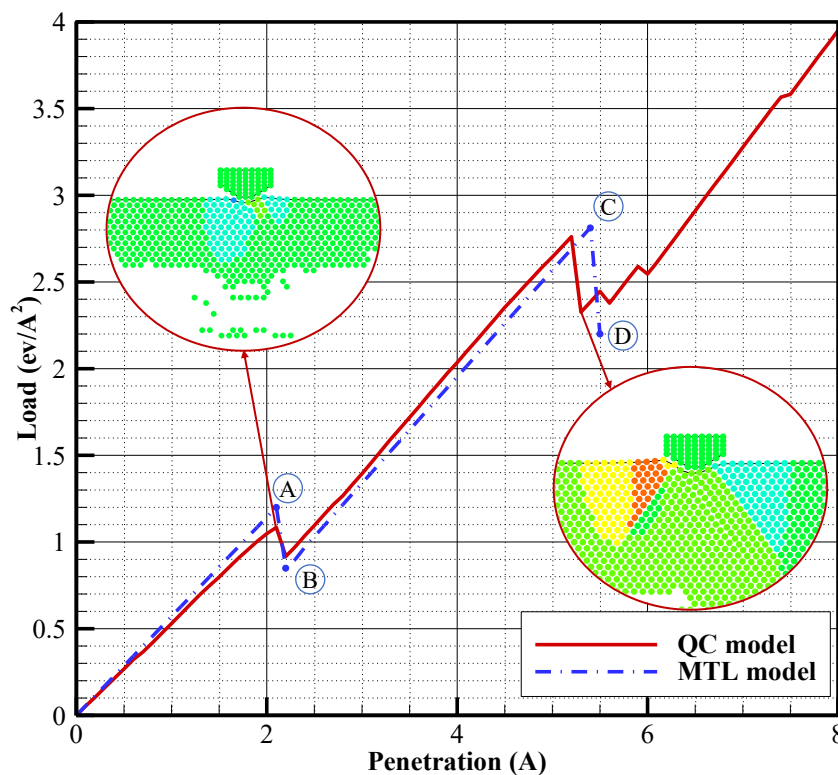
جدول ۴-۶- مقایسه مدل‌های QC و MTL برای نفوذگر برکویچ روی سطح ناهموار.

|           | $H$ (Gpa) | $U$ (ev) | Run time (h) |
|-----------|-----------|----------|--------------|
| QC model  | 21.70     | 6.25     | 45           |
| MTL model | 21.23     | 6.11     | —            |
| Error (%) | 2.16      | 2.24     | —            |

#### ۴-۵-۲- مثال دوم

یک آزمایش نانوایندنتیشن با یک نفوذگر استوانه‌ای، سطح صاف و جهت کریستالوگرافی II توسط هر دو روش QC و مدل MTL حل می‌شود.

این نمودار نفوذ بار در شکل ۴-۳۷ نتایج مدل‌های QC و MTL را مقایسه می‌کند. نقاط A و C نشان‌دهنده بارهای بحرانی اول و دوم ( $P_{cr1}, P_{cr2}$ ) هستند که در آن‌ها نابجایی‌ها رخ می‌دهند، درحالی‌که B و D مربوط به افت بار ( $P_{dr1}, P_{dr2}$ ) پس از این رویدادهای بحرانی هستند. ساختارهای اتمی بزرگنمایی شده، تغییر شکل در این نقاط را نشان می‌دهند و تشکیل نابجایی اولیه در  $P_{cr1}$  و نابجایی دوم در  $P_{cr2}$  را نشان می‌دهند. مساحت زیر منحنی تا D نشان‌دهنده U است، درحالی‌که سختی به صورت  $P_{cr1}$  تقسیم بر سطح تماس بین نفوذگر و زیرلایه محاسبه می‌شود. با مقایسه دو مدل، مدل MTL به طور نزدیکی از مدل QC پیروی می‌کند، تنها با انحرافات جزئی در نقاط بحرانی و خطای نسبی کمتر از ۱.۸٪، که نشان‌دهنده تغییرات جزئی در پیش‌بینی رویدادهای نابجایی و پاسخ ماده است.



شکل ۴-۳۷- مقایسه نتایج مدل‌های QC و MTL برای نفوذگر استوانه‌ای و سطح صاف.

باتوجه به اینکه زبری سطح صفر در نمونه‌های آموزشی لحاظ نشده است، ارزیابی عملکرد مدل تحت این شرایط از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. همان‌طور که در جدول ۴-۷ نشان داده شده است، مدل MTL علی‌رغم این محدودیت، قادر به پیش‌بینی  $H$  و  $U$  با دقت معقول است. خطاهای پیش‌بینی برای سختی ۲.۵٪ و برای انرژی ۴.۵٪ است. علاوه بر این، مدل MTL زمان محاسبات را به طور قابل توجهی کاهش می‌دهد و تنها به ۴.۲ ساعت در مقایسه با ۲۱ ساعت برای مدل QC نیاز دارد.

جدول ۴-۷- مقایسه مدل‌های QC و MTL برای نفوذگر استوانه ای روی سطح صاف.

|           | $H$ (Gpa) | $U$ (ev) | Run time (h) |
|-----------|-----------|----------|--------------|
| QC model  | 18.66     | 7.95     | 21           |
| MTL model | 19.13     | 8.31     | —            |
| Error (%) | 2.51      | 4.52     | —            |

لازم به ذکر است که اگرچه زمان آموزش شبکه مدل MTL تقریباً ۴ ساعت است، پیش‌بینی نمونه‌های جدید پس از آموزش بسیار سریع است و تنها چند ثانیه طول می‌کشد. این نتایج نشان می‌دهد که مدل MTL نه تنها دقت پیش‌بینی بالایی را حفظ می‌کند، بلکه جایگزینی بسیار کارآمد برای روش‌های چندمقیاسی پرهزینه محاسباتی مانند QC ارائه می‌دهد.

## فصل ۵: نتیجه‌گیری و پیشنهادها

---

### ۵-۱- مقدمه

در فصل‌های پیشین، یک رویکرد چندمقیاسی مبتنی بر روش شبه‌پیوسته (QC) برای تحلیل فرایند نانوایندنتیشن بر روی لایه‌های نازک مسی ارائه شد. تمرکز این پژوهش بر بررسی تأثیر هندسه نفوذگر، زبری سطح زیرلایه، و جهت‌گیری‌های مختلف بلوری بر ویژگی‌های مکانیکی ماده، از جمله سختی، بارهای بحرانی و پاسخ بار-جاب‌جایی بود. همچنین، با هدف تسریع و بهینه‌سازی تحلیل‌های عددی، از چارچوب‌های یادگیری عمیق شامل مدل‌های چندخروجی، دو شبکه‌ای و یادگیری چندوظیفه‌ای (MTL) برای پیش‌بینی رفتار مکانیکی نمونه‌ها استفاده شد.

در این فصل، نتایج اصلی حاصل از شبیه‌سازی‌ها و مدل‌سازی‌های یادگیری ماشین به‌صورت یکپارچه مرور و جمع‌بندی می‌گردند. ابتدا یافته‌های کلیدی در ارتباط با تأثیر پارامترهای فیزیکی بر پاسخ نانوایندنتیشن بیان می‌شوند. سپس عملکرد مدل‌های مختلف یادگیری ماشین مقایسه شده و نقاط قوت مدل چندوظیفه‌ای به‌عنوان چارچوب پیشنهادی برجسته می‌شود. در نهایت، مزایا، محدودیت‌ها و قابلیت تعمیم روش ارائه‌شده به سایر کاربردهای مرتبط موردبحث قرار می‌گیرد. این جمع‌بندی پایانی، به‌عنوان بستری برای پیشنهادها آتی و توسعه‌های بیشتر در زمینه مدل‌سازی هوشمند فرایندهای نانومقیاس عمل خواهد کرد.

## ۵-۲- نتیجه‌گیری

این مطالعه به صورت عددی تأثیر هندسه، موقعیت و زبری نفوذگر را بر اندازه‌گیری سختی از طریق پاسخ بار-جاب‌جایی به دست آمده از تحلیل چندمقیاسی شبه‌پیوسته بررسی کرد. یافته‌ها نشان داد که:

- نفوذگرهای با قطر کوچک‌تر، پراکندگی بار-جاب‌جایی کمتری ایجاد می‌کنند و این امر، مناسب بودن آنها را برای ثبت بر همکنش‌های نانومقیاس و تغییرات ساختاری در طول ایندنتیشن برجسته می‌کند.
- بار موردنیاز برای هسته‌زایی یک نابجایی و میزان افت بار در پاسخ بار-جاب‌جایی در لحظه هسته‌زایی نابجایی به جهت‌گیری کریستالوگرافی بستگی دارد.
- برای هسته‌زایی نابجایی در نفوذگرهایی با قطر/عرض بزرگ‌تر، بار بیشتری موردنیاز است.
- نفوذگرهایی که برای تماس کامل با زیرلایه به آن نفوذ می‌کردند، تغییر شکل‌های پلاستیکی موضعی در ناحیه زیر نفوذگر ایجاد می‌کردند.
- سختی اندازه‌گیری شده با افزایش قطر/عرض نفوذگر کاهش می‌یابد. این کاهش به این دلیل رخ داد که نفوذگرهای بزرگ‌تر با سطح زیرلایه بزرگ‌تری تعامل داشتند و در نتیجه مقادیر سختی کمتری ایجاد شد. درحالی‌که جهت‌گیری و زبری به طور قابل توجهی بر سختی تأثیر می‌گذارند، جهت‌گیری I به دلیل نیروهای پیوند بین‌اتمی قوی‌تر، عموماً سختی بالاتری را به همراه داشت.
- سطوح زبرتر سختی‌های بزرگ‌تری در تمام جهت‌گیری‌ها ثبت کردند که بر لزوم توجه دقیق به ویژگی‌های سطح و هندسه نفوذگر هنگام ارزیابی سختی تأکید می‌کند.
- این مطالعه نشان داد که موقعیت نفوذگر روی زیرلایه زبر، تأثیر قابل توجهی بر سختی، پاسخ بار-جاب‌جایی و مقاومت کلی دارد. این یافته‌ها تأیید می‌کنند که شکل، اندازه و موقعیت نفوذگر بر سختی و تغییر شکل موضعی سطح در آزمایش‌های نانوایندنتیشن تأثیر می‌گذارد.
- این مطالعه یک چارچوب یادگیری عمیق برای پیش‌بینی پاسخ مکانیکی نانوایندنتیشن با استفاده از داده‌های تولید شده توسط روش شبه‌پیوسته ارائه می‌دهد. با استفاده از شبکه‌های عصبی، روابط غیرخطی پیچیده بین پارامترهای کلیدی نانوایندنتیشن، از جمله بارهای بحرانی، افت بار، عمق ایندنتیشن، سختی و اتلاف انرژی با موفقیت مدل‌سازی می‌شوند.

- یکی از دستاوردهای این تحقیق، ارزیابی سه مدل مختلف یادگیری ماشین است. مدل چندخروجی که تمام پارامترهای ایندنتیشن را به طور همزمان پیش‌بینی می‌کند، یک مبنای مفید ارائه می‌دهد؛ اما با ویژگی‌های با همبستگی ضعیف مشکل دارد. رویکرد دو مدل جداگانه که در آن عمق ایندنتیشن از سایر خواص مکانیکی جدا می‌شوند، با کاهش تداخل بین خروجی‌های نامرتب، دقت پیش‌بینی را بهبود می‌بخشد. با این حال، مدل یادگیری چندوظیفه‌ای (MTL) از هر دو جایگزین بهتر عمل می‌کند و با بهره‌گیری از یادگیری مشترک بین متغیرهای مرتبط، به بالاترین دقت و کمترین هزینه محاسباتی دست می‌یابد.
- برتری رویکرد MTL به دلیل توانایی آن در ثبت وابستگی‌های متقابل بین خواص مکانیکی و درعین حال جلوگیری از تداخل متغیرهای با همبستگی ضعیف است. برخلاف مدل چندخروجی ساده که در آن هر متغیر هدف به طور مستقل موردبررسی قرار می‌گیرد، MTL به‌صراحت فرایند یادگیری را به دو وظیفه مرتبط سازماندهی می‌کند: یکی متمرکز بر نفوذ و دیگری بر بارهای بحرانی، افت بار، سختی و اتلاف انرژی. این فرایند یادگیری ساختاریافته به مدل اجازه می‌دهد تا از نمایش ویژگی‌های مشترک بهره‌مند شود، جایی که اطلاعات مرتبط از یک وظیفه می‌تواند پیش‌بینی‌های مربوط به وظیفه دیگر را بهبود بخشد. MTL با جلوگیری از تداخل خروجی‌های نامرتب با یکدیگر، به طور مؤثر خطاهای پیش‌بینی را کاهش داده و استحکام مدل را افزایش می‌دهد. علاوه بر این، MTL با اعمال منظم‌سازی از طریق اشتراک‌گذاری وظیفه، خطر بیش‌برازش را کاهش می‌دهد و منجر به بهبود تعمیم‌پذیری به داده‌های دیده نشده می‌شود.
- برای اعتبارسنجی عملکرد مدل‌ها، دو مطالعه موردی انجام شد: (۱) یک نفوذگر برکویچ روی یک سطح مسی زبر با جهت کریستالوگرافی I و (۲) یک نفوذگر استوانه‌ای روی یک سطح صاف با جهت II. در هر دو سناریو، پیش‌بینی‌های یادگیری عمیق با شبیه‌سازی‌های QC مطابقت نزدیکی داشتند و حداقل خطا در پیش‌بینی‌های بار بحرانی و سختی وجود داشت. این امر تأیید کرد که چارچوب پیشنهادی می‌تواند رفتار مواد را در شرایط مختلف نانوایندنتیشن به طور قابل اعتمادی مدل‌سازی کند.
- یکی از جنبه‌های مهم این مطالعه، بیش‌برازش بود؛ یک چالش رایج در مدل‌های یادگیری ماشین که بر روی داده‌های فیزیکی با ابعاد بالا آموزش دیده‌اند. از اعتبارسنجی متقابل تودرتو

برای اطمینان از تنظیم قوی ابرپارامتر با جداسازی فرایند انتخاب مدل از ارزیابی عملکرد نهایی، جلوگیری از نشت اطلاعات بین مجموعه‌های آموزش و اعتبارسنجی و مینی‌بچ استفاده شد.

- تکنیک‌های منظم‌سازی مانند کاهش وزن و حذف برای کنترل پیچیدگی مدل اعمال شد که وزن‌های بزرگ را برای پایداری جریمه می‌کرد، درحالی‌که حذف به طور تصادفی نورون‌ها را غیرفعال می‌کرد تا یادگیری ویژگی قوی را تشویق کند. در نهایت، توقف زودهنگام برای توقف آموزش پس از ثابت شدن عملکرد اعتبارسنجی به کار گرفته شد و از بیش‌برازش غیرضروری جلوگیری شد. این استراتژی‌های ترکیبی تضمین می‌کردند که شبکه‌های عصبی آموزش دیده دقت و قابلیت اطمینان بالایی را در داده‌های دیده نشده حفظ کنند.
- یکی دیگر از مزایای چارچوب یادگیری عمیق پیشنهادی، کارایی محاسباتی آن است. درحالی‌که شبیه‌سازی‌های کنترل کیفیت سنتی از نظر محاسباتی دشوار هستند و برای هر سناریوی ایندنتیشن به زمان پردازش قابل توجهی نیاز دارند، شبکه‌های عصبی آموزش دیده پیش‌بینی‌های تقریباً آنی ارائه می‌دهند. این کارایی، مدل را برای مطالعات با کارایی بالا که در آن شرایط ایندنتیشن چندگانه باید به سرعت تجزیه و تحلیل شوند، مناسب می‌کند. توانایی پیش‌بینی رفتار مواد با حداقل هزینه محاسباتی، امکانات جدیدی را برای غربالگری و بهینه‌سازی مواد در مقیاس بزرگ فراهم می‌کند.

### ۵-۳- پیشنهاد تحقیقات آتی

باتوجه به نتایج به دست آمده از این پژوهش و محدودیت‌های موجود، مسیرهای متعددی برای گسترش مطالعات آینده پیشنهاد می‌شوند:

- بررسی تأثیر دما بر پاسخ نانوایندنتیشن و گنجاندن آن به عنوان یکی از ویژگی‌های ورودی در شبکه عصبی، می‌تواند به شبیه‌سازی دقیق‌تر فرایندهای واقعی منجر شود.
- افزودن نرخ بارگذاری (strain rate) به عنوان یک پارامتر متغیر، امکان تحلیل رفتار وابسته به سرعت در مواد مختلف را فراهم می‌کند.

- استفاده از معماری‌های دیگر مانند شبکه‌های گرافی (GNN)، ترنسفورمرها، یا مدل‌های مبتنی بر توجه (Attention-based) برای ثبت بهتر ارتباطات بین ویژگی‌ها و متغیرهای خروجی.
- توسعه چارچوب‌هایی برای پیش‌بینی پارامترهای ورودی (مانند هندسه یا زبری سطح) از پاسخ بار-نفوذ به دست‌آمده، به منظور تسهیل در طراحی معکوس و مهندسی مواد.
- به‌کارگیری شبکه‌های PINN که معادلات فیزیکی حاکم (مانند معادلات تعادل، روابط الاستیسیته یا معادلات جریان پلاستیک) را در فرایند آموزش دخیل می‌سازند، می‌تواند منجر به مدل‌هایی شود که علاوه بر دقت بالا، تفسیرپذیر نیز باشند. این رویکرد به‌ویژه در مدل‌سازی پدیده‌های نانومقیاس که دارای رفتارهای پیچیده و وابسته به مکان هستند، پتانسیل بالایی دارد.

## فصل ٦: مراجع

---

- [1] ISO (International Organization for Standardization), *ISO 14577-1:2015: Metallic materials – Instrumented indentation test for hardness and materials parameters – Part 1: Test method*. International Organization for Standardization, 2015.
- [2] B. Poon, D. Rittel, and G. Ravichandran, “An analysis of nanoindentation in linearly elastic solids,” *International Journal of Solids and Structures*, vol. 45, no. 24, pp. 6018–6033, Dec. 2008, doi: 10.1016/j.ijsolstr.2008.07.021.
- [3] W. C. Oliver and G. M. Pharr, “An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments,” *Journal of Materials Research*, vol. 7, no. 6, pp. 1564–1583, Jun. 1992, doi: 10.1557/JMR.1992.1564.
- [4] A. Bolshakov and G. M. Pharr, “Influences of pileup on the measurement of mechanical properties by load and depth sensing indentation techniques,” *Journal of Materials Research*, vol. 13, no. 4, pp. 1049–1058, Apr. 1998, doi: 10.1557/JMR.1998.0146.
- [5] M. M. McCann and S. G. Corcoran, “Nanoindentation Behavior of Gold Single Crystals,” *MRS Proceedings*, vol. 795, p. U8.30, Feb. 2003, doi: 10.1557/PROC-795-U8.30.
- [6] K. Sangwal, P. Gorostiza, J. Servat, and F. Sanz, “Atomic force microscopy study of nanoindentation deformation and indentation size effect in MgO crystals,” *Journal of Materials Research*, vol. 14, no. 10, pp. 3973–3982, Oct. 1999, doi: 10.1557/JMR.1999.0537.
- [7] K. Tai, H. J. Qi, and C. Ortiz, “Effect of mineral content on the nanoindentation properties and nanoscale deformation mechanisms of bovine tibial cortical bone,” *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, vol. 16, no. 10, pp. 947–959,

- Oct. 2005, doi: 10.1007/s10856-005-4429-9.
- [8] G. M. Pharr, W. C. Oliver, and F. R. Brotzen, “On the generality of the relationship among contact stiffness, contact area, and elastic modulus during indentation,” *Journal of Materials Research*, vol. 7, no. 3, pp. 613–617, Mar. 1992, doi: 10.1557/JMR.1992.0613.
  - [9] B. A. Galanov and S. N. Dub, “Critical comments to the Oliver–Pharr measurement technique of hardness and elastic modulus by instrumented indentations and refinement of its basic relations,” *Journal of Superhard Materials*, vol. 39, no. 6, pp. 373–389, Nov. 2017, doi: 10.3103/S1063457617060016.
  - [10] Q. Ma and D. R. Clarke, “Size dependent hardness of silver single crystals,” *Journal of Materials Research*, vol. 10, no. 4, pp. 853–863, Apr. 1995, doi: 10.1557/JMR.1995.0853.
  - [11] X. Feng, Y. Huang, and K. Hwang, “Size Effects in Nanoindentation,” in *Micro and Nano Mechanical Testing of Materials and Devices*, New York, NY: Springer US, 2008, pp. 49–69. doi: 10.1007/978-0-387-78701-5\_2.
  - [12] W.-G. Jiang, J.-J. Su, and X.-Q. Feng, “Effect of surface roughness on nanoindentation test of thin films,” *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 75, no. 17, pp. 4965–4972, Nov. 2008, doi: 10.1016/j.engfracmech.2008.06.016.
  - [13] L. Chen, A. Ahadi, J. Zhou, and J.-E. Ståhl, “Quantitative study of roughness effect in nanoindentation on AISI316L based on simulation and experiment,” *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, vol. 231, no. 21, pp. 4067–4075, Nov. 2017, doi: 10.1177/0954406216657575.
  - [14] A. M. Minor *et al.*, “A new view of the onset of plasticity during the nanoindentation of aluminium,” *Nature Materials*, vol. 5, no. 9, pp. 697–702, Sep. 2006, doi: 10.1038/nmat1714.
  - [15] F. Zeng, Y. Sun, Y. Liu, and Y. Zhou, “Multiscale simulations of wedged nanoindentation on nickel,” *Computational Materials Science*, vol. 62, pp. 47–54, Sep. 2012, doi: 10.1016/j.commatsci.2012.05.011.
  - [16] H. Lu, J. Li, and Y. Ni, “Position effect of cylindrical indenter on nanoindentation into Cu thin film by multiscale analysis,” *Computational Materials Science*, vol. 50, no. 10, pp. 2987–2992, Aug. 2011, doi: 10.1016/j.commatsci.2011.05.017.

- [17] P. Zhu, Y. Hu, H. Wang, and T. Ma, "Study of effect of indenter shape in nanometric scratching process using molecular dynamics," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 528, no. 13–14, pp. 4522–4527, May 2011, doi: 10.1016/j.msea.2011.02.035.
- [18] H. Moslemzadeh, O. Alizadeh, and S. Mohammadi, "Quasicontinuum multiscale modeling of the effect of rough surface on nanoindentation behavior," *Meccanica*, vol. 54, no. 3, pp. 411–427, Feb. 2019, doi: 10.1007/s11012-019-00956-x.
- [19] Z. Zhang, C. Wang, X. Hu, and Y. Ni, "Shape Effect of Surface Defects on Nanohardness by Quasicontinuum Method," *Micromachines*, vol. 11, no. 10, p. 909, Sep. 2020, doi: 10.3390/mi11100909.
- [20] A. Olokun, T. Dillard, A. Dhiman, and V. Tomar, "Experimental study of anisotropic constitutive behavior of  $\beta$ -HMX crystals via nanoindentation and small-scale dynamic impact," *SN Applied Sciences*, vol. 3, no. 12, p. 875, Dec. 2021, doi: 10.1007/s42452-021-04862-4.
- [21] O. Alizadeh and S. Mohammadi, "A review of concurrent multiscale methods for the analysis of fine scale discontinuity problems," *Journal of Computational Methods In Engineering*, vol. 42, no. 2, Mar. 2024, doi: 10.47176/jcme.42.2.1013.
- [22] S. P. Xiao and T. Belytschko, "A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 193, no. 17–20, pp. 1645–1669, May 2004, doi: 10.1016/j.cma.2003.12.053.
- [23] W. K. Liu, D. Qian, S. Gonella, S. Li, W. Chen, and S. Chirputkar, "Multiscale methods for mechanical science of complex materials: Bridging from quantum to stochastic multiresolution continuum," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 83, no. 8–9, pp. 1039–1080, Aug. 2010, doi: 10.1002/nme.2915.
- [24] H. Moslemzadeh and S. Mohammadi, "An atomistic entropy based finite element multiscale method for modeling amorphous materials," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 256, p. 111983, Dec. 2022, doi: 10.1016/j.ijsolstr.2022.111983.
- [25] O. Alizadeh and S. Mohammadi, "The variable node multiscale approach: Coupling the atomistic and continuum scales," *Computational Materials Science*,

- vol. 160, pp. 256–274, Apr. 2019, doi: 10.1016/j.commatsci.2019.01.003.
- [26] E. B. Tadmor, M. Ortiz, and R. Phillips, “Quasicontinuum analysis of defects in solids,” *Philosophical Magazine A*, vol. 73, no. 6, pp. 1529–1563, Jun. 1996, doi: 10.1080/01418619608243000.
  - [27] G. S. Smith, E. B. Tadmor, and E. Kaxiras, “Multiscale Simulation of Loading and Electrical Resistance in Silicon Nanoindentation,” *Physical Review Letters*, vol. 84, no. 6, pp. 1260–1263, Feb. 2000, doi: 10.1103/PhysRevLett.84.1260.
  - [28] R. E. Miller and E. B. Tadmor, “The Quasicontinuum Method: Overview, applications and current directions,” *Journal of Computer-Aided Materials Design*, vol. 9, no. 3, pp. 203–239, 2002, doi: 10.1023/A:1026098010127.
  - [29] O. Alizadeh, G. Tolooei Eshlaghi, and S. Mohammadi, “Nanoindentation simulation of coated aluminum thin film using quasicontinuum method,” *Computational Materials Science*, vol. 111, pp. 12–22, Jan. 2016, doi: 10.1016/j.commatsci.2015.08.044.
  - [30] J. Weng, R. Lindvall, K. Zhuang, J.-E. Ståhl, H. Ding, and J. Zhou, “A machine learning based approach for determining the stress-strain relation of grey cast iron from nanoindentation,” *Mechanics of Materials*, vol. 148, p. 103522, Sep. 2020, doi: 10.1016/j.mechmat.2020.103522.
  - [31] R. Iglesias and E. P. M. Leiva, “Two-grain nanoindentation using the quasicontinuum method: Two-dimensional model approach,” *Acta Materialia*, vol. 54, no. 10, pp. 2655–2664, Jun. 2006, doi: 10.1016/j.actamat.2006.02.004.
  - [32] S. Xiao, R. Hu, Z. Li, S. Attarian, K.-M. Björk, and A. Lendasse, “A machine-learning-enhanced hierarchical multiscale method for bridging from molecular dynamics to continua,” *Neural Computing and Applications*, vol. 32, no. 18, pp. 14359–14373, Sep. 2020, doi: 10.1007/s00521-019-04480-7.
  - [33] S. Park, J. H. Fonseca, K. P. Marimuthu, C. Jeong, S. Lee, and H. Lee, “Determination of material properties of bulk metallic glass using nanoindentation and artificial neural network,” *Intermetallics*, vol. 144, p. 107492, May 2022, doi: 10.1016/j.intermet.2022.107492.
  - [34] S. Park, K. P. Marimuthu, G. Han, and H. Lee, “Deep learning based nanoindentation method for evaluating mechanical properties of polymers,” *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 246, p. 108162, May 2023, doi:

- 10.1016/j.ijmecsci.2023.108162.
- [35] G. Han, K. P. Marimuthu, and H. Lee, “Evaluation of thin film material properties using a deep nanoindentation and ANN,” *Materials & Design*, vol. 221, p. 111000, Sep. 2022, doi: 10.1016/j.matdes.2022.111000.
  - [36] W. Jin, J. Pei, P. Xie, J. Chen, and H. Zhao, “Machine Learning-Based Prediction of Mechanical Properties and Performance of Nickel–Graphene Nanocomposites Using Molecular Dynamics Simulation Data,” *ACS Applied Nano Materials*, vol. 6, no. 13, pp. 12190–12199, Jul. 2023, doi: 10.1021/acsanm.3c01919.
  - [37] X. Liu, Z. Long, and L. Peng, “Prediction of Vickers hardness of amorphous alloys based on interpretable machine learning,” *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 602, p. 122095, Feb. 2023, doi: 10.1016/j.jnoncrysol.2022.122095.
  - [38] A. R. Khoei, M. R. Seddighian, and A. R. Sameti, “Machine learning-based multiscale framework for mechanical behavior of nano-crystalline structures,” *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 265, p. 108897, Mar. 2024, doi: 10.1016/j.ijmecsci.2023.108897.
  - [39] K. P. Marimuthu and H. Lee, “Physics-informed neural networks for spherical indentation problems,” *Materials and Design*, vol. 236, no. August, p. 112494, 2023, doi: 10.1016/j.matdes.2023.112494.
  - [40] K. P. Marimuthu, J. Lee, G. Han, and H. Lee, “Machine learning based dual flat-spherical indentation approach for rough metallic surfaces,” *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, vol. 125, no. July, p. 106724, 2023, doi: 10.1016/j.engappai.2023.106724.
  - [41] S. Mohammadi, *Multiscale Biomechanics*. Wiley, 2023. doi: 10.1002/9781119033714.
  - [42] M. . Bamber, K. . Cooke, A. . Mann, and B. Derby, “Accurate determination of Young’s modulus and Poisson’s ratio of thin films by a combination of acoustic microscopy and nanoindentation,” *Thin Solid Films*, vol. 398–399, pp. 299–305, Nov. 2001, doi: 10.1016/S0040-6090(01)01341-4.
  - [43] M. S. Daw and M. I. Baskes, “Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals,” *Physical Review Letters*, vol. 50, no. 17, pp. 1285–1288, Apr. 1983, doi: 10.1103/PhysRevLett.50.1285.
  - [44] I. Fortran, W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling, and B. Flannery, “Numerical

- Recipes,” *Cambridge, UK, Cambridge University Press*, 1992.
- [45] J. Heaton, “Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville: Deep learning,” *Genetic Programming and Evolvable Machines*, vol. 19, no. 1–2, pp. 305–307, Jun. 2018, doi: 10.1007/s10710-017-9314-z.
  - [46] S. S. Haykin, *Neural networks and learning machines*. Prentice Hall/Pearson, 2009.
  - [47] C. M. Bishop, “Pattern Recognition and Machine Learning,” *Journal of Electronic Imaging*, vol. 16, no. 4, p. 049901, Jan. 2007, doi: 10.1117/1.2819119.
  - [48] M. M. Hammad, “Artificial Neural Network and Deep Learning: Fundamentals and Theory,” 2024. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2408.16002>
  - [49] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams, “Learning Representations by Back-Propagating Errors,” in *Cognitive Modeling*, The MIT Press, 2002, pp. 213–222. doi: 10.7551/mitpress/1888.003.0013.
  - [50] L. Bottou, “Stochastic Gradient Descent Tricks,” 2012, pp. 421–436. doi: 10.1007/978-3-642-35289-8\_25.
  - [51] M. Smelyanskiy, N. Shirish Keskar, D. Mudigere, J. Nocedal, P. Tak, and P. Tang, “On Large-Batch Training for Deep Learning: Generalization Gap and Sharp Minima,” 2016, doi: 10.48550/arXiv.1609.04836.
  - [52] D. P. Kingma and J. Ba, “Adam: A Method for Stochastic Optimization,” Dec. 2014, [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1412.6980>
  - [53] K. P. Murphy, *Machine learning : a probabilistic perspective*. MIT Press, 2012.
  - [54] T. Akiba, S. Sano, T. Yanase, T. Ohta, and M. Koyama, “Optuna,” in *Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*, New York, NY, USA: ACM, Jul. 2019, pp. 2623–2631. doi: 10.1145/3292500.3330701.
  - [55] H. Babaei, M. Zamani, and S. Mohammadi, “The impact of data splitting methods on machine learning models: A case study for predicting concrete workability,” *Machine Learning for Computational Science and Engineering*.
  - [56] S. Varma and R. Simon, “Bias in error estimation when using cross-validation for model selection,” *BMC Bioinformatics*, vol. 7, no. 1, p. 91, Dec. 2006, doi: 10.1186/1471-2105-7-91.
  - [57] R. Caruana, L. Pratt, and S. Thrun, “Multitask Learning \*,” Kluwer Academic

Publishers, 1997.

- [58] T. Csanádi, M. Bľanda, A. Duszová, P. Hvizdoš, and J. Dusza, “Nanoindentation and AFM Studies on Tungsten Carbide Crystals in WC-Co Hardmetal,” *Key Engineering Materials*, vol. 606, pp. 107–110, Mar. 2014, doi: 10.4028/www.scientific.net/KEM.606.107.
- [59] D. Huo, Y. Liang, and K. Cheng, “An investigation of nanoindentation tests on the single crystal copper thin film via an atomic force microscope and molecular dynamics simulation,” *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, vol. 221, no. 2, pp. 259–266, Feb. 2007, doi: 10.1243/0954406JMES448.
- [60] S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw, “Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys,” *Physical Review B*, vol. 33, no. 12, pp. 7983–7991, Jun. 1986, doi: 10.1103/PhysRevB.33.7983.
- [61] “ISO 21920-2:2021(en), ‘Geometrical product specifications (GPS) — Surface texture: Profile — Part 2: Terms, definitions and surface texture parameters.’ International Organization for Standardization,”.
- [62] P. Berke and T. J. Massart, “Coupled Friction and Roughness Surface Effects in Shallow Spherical Nanoindentation,” 2011, pp. 269–289. doi: 10.1007/978-3-642-22167-5\_15.
- [63] J. P. H. and J. L. Peter M. Anderson, *Theory of dislocations*. Cambridge University Press, 2017.
- [64] J. Li, Y. Ni, H. Wang, and J. Mei, “Effects of Crystalline Anisotropy and Indenter Size on Nanoindentation by Multiscale Simulation,” *Nanoscale Research Letters*, vol. 5, no. 2, pp. 420–432, Feb. 2010, doi: 10.1007/s11671-009-9500-x.
- [65] J. Snoek, H. Larochelle, and R. P. Adams, “Practical Bayesian Optimization of Machine Learning Algorithms.”
- [66] J. Bergstra, J. B. Ca, and Y. B. Ca, “Random Search for Hyper-Parameter Optimization Yoshua Bengio,” 2012. [Online]. Available: <http://scikit-learn.sourceforge.net>.



## Abstract

Nanoindentation is a powerful technique for probing the mechanical behavior of materials at the nanoscale, though its accuracy and modeling remain sensitive to surface features, indenter geometry, and underlying crystal structure. In this study, the quasicontinuum (QC) multiscale method is employed to simulate the nanoindentation of copper thin films, systematically investigating the effects of surface roughness (2–13 Å), various indenter shapes (cylindrical, rectangular, Berkovich) and sizes (10–140 Å), and two crystallographic orientations. The simulations reveal that smaller indenters are more influenced by local surface asperities but yield more consistent hardness values, while larger indenters reduce sensitivity to roughness yet show greater variability due to positional effects.

To efficiently predict the complex mechanical responses observed in these simulations, a deep learning framework is developed and trained on the QC-generated dataset. Three architectures are evaluated: a multioutput model, a two-network approach, and a multitask learning (MTL) model. The MTL model achieves the highest accuracy and generalization, effectively capturing nonlinear relationships among hardness, critical loads, penetration depths, and energy absorption. Validation through case studies confirms strong agreement between deep learning predictions and QC simulations. This integrated approach, combining QC simulation and data-driven modeling, offers a robust and efficient pathway for advancing nanoscale mechanical characterization and predictive analysis.

**Keywords:** Multiscale, Nanoindentation, Quasicontinuum method, Multi-Task learning, Nested cross-validation, Deep learning.



University of Tehran  
College of Engineering  
School of Civil  
Engineering



# **Development of quasi-continuum multiscale method with artificial intelligent techniques for the study of nanoscale material behavior**

A thesis submitted to the Graduate Studies Office  
in partial fulfillment of the requirements for  
the degree of Master of Science in  
Civil Engineering

**By:**

**Hasan Ghahremani**

**Supervisor:**

**Prof. Soheil Mohammadi**

**Advisor:**

**Dr. Omid Alizadeh**

**September .2025**