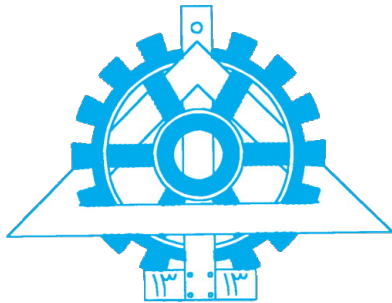




دانشگاه تهران
پردیس دانشکده‌های فنی
دانشکده علوم مهندسی
گروه الگوریتم‌ها و محاسبات



به کارگیری معماری ترنسفورمر در تحلیل چندمقیاسی مسئله نانوایندنتیشن

پایان‌نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته مهندسی کامپیوتر
گرایش الگوریتم‌ها و محاسبات

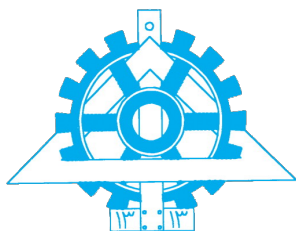
سید محمد مهدی سید محمدی شال

اساتید راهنما

دکتر نگین باقرپور
دکتر سهیل محمدی

مهر ۱۴۰۴





دانشگاه تهران
پردیس دانشکده‌های فنی
دانشکده علوم مهندسی



گواهی دفاع از پایان‌نامه کارشناسی ارشد

هیأت داوران پایان‌نامه کارشناسی ارشد آقای / خانم سید محمد مهدی سید محمدی شال به شماره دانشجویی ۸۱۰۸۰۲۰۳۰ در رشته مهندسی کامپیوتر - گرایش الگوریتم‌ها و محاسبات را در تاریخ با عنوان

«به کارگیری معماری ترنسفورمر در تحلیل چند مقیاسی مسئله ناویندنتیشن»

به حروف

به عدد

--	--

با نمره نهایی

ارزیابی کرد.

و درجه

--

ردیف	مشخصات هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه دانشگاهی	دانشگاه یا مؤسسه	امضا
۱	استاد راهنما	دکتر نگین باقرپور	استادیار	دانشگاه تهران	
۲	استاد راهنما	دکتر سهیل محمدی	استاد	دانشگاه تهران	
۳	استاد داور داخلی	دکتر علی معینی	استاد	دانشگاه تهران	
۴	استاد مدعو	دکتر امیرحسین عسجدی	استادیار	دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی	
۵	نماینده تحصیلات تکمیلی دانشکده	دکتر علی معینی	استاد	دانشگاه تهران	

نام و نام خانوادگی معاون آموزشی و تحصیلات

تکمیلی پردیس دانشکده‌های فنی:

تاریخ و امضا:

نام و نام خانوادگی معاون تحصیلات تکمیلی و

پژوهشی دانشکده / گروه:

تاریخ و امضا:

تعهدنامه اصالت اثر

باسمه تعالی

اینجانب سید محمد مهدی سید محمدی شال تأیید می‌کنم که مطالب مندرج در این پایان‌نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است و به دستاوردهای پژوهشی دیگران که در این نوشته از آن‌ها استفاده شده است مطابق مقررات ارجاع گردیده است. این پایان‌نامه قبلاً برای احراز هیچ مدرک هم‌سطح یا بالاتری ارائه نشده است.

نام و نام خانوادگی دانشجو: سید محمد مهدی سید محمدی شال

تاریخ و امضای دانشجو:

کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر
متعلق به دانشگاه تهران است.

تقديم به:

خانواده عزيزم

قدردانی

سپاس خداوندگار حکیم را که با لطف بی کران خود، آدمی را به زیور عقل آراست.

در آغاز وظیفه خود می دانم از زحمات بی دریغ سرکار خانم دکتر باقرپور، صمیمانه تشکر و قدردانی کنم که در طول انجام این پایان نامه با نهایت صبوری همواره راهنما و مشوق من بودند و قطعاً بدون راهنمایی های ارزنده ایشان، این مجموعه به انجام نمی رسید.

از جناب آقای دکتر محمدی که افتخار شاگردی ایشان نصیبم شد و با راهنمایی های گرانبهای خود در به سرانجام رسیدن این مجموعه یاری نمودند، کمال امتنان را دارم.

با سپاس بی دریغ خدمت دوستان مهربانم، اساتید گروه الگوریتم و محاسبات، مجموعه کارکنان زحمتکش دانشکده و همه عزیزانی که با همفکری مرا صمیمانه و مشفقانه یاری داده اند.

سید محمد مهدی سید محمدی شال

مهر ۱۴۰۴

چکیده

داده‌های نانوایندنتیشن به سبب ماهیت ناهمگن، رفتارهای غیرخطی و وابستگی‌های زمانی-مکانی پیچیده، چالشی اساسی برای روش‌های یادگیری عمیق ایجاد می‌کنند. بسیاری از معماری‌های مرسوم، حتی با افزایش حجم داده یا تنظیم‌های گسترده ابرپارامترها، در بازیابی ساختارهای پنهان و نوسان‌های موضعی شکست می‌خورند. در این کار، با تکیه بر ظرفیت «توجه درون‌ذاتی» ترنسفورمرها برای مدل‌سازی وابستگی‌های بلندمدت در دنباله‌ها، چارچوبی ارائه می‌دهیم که علاوه بر استفاده از ترنسفورمر به عنوان هسته پیش‌بینی، یک روش خوراندن داده هدفمند با نام SPICE را نیز معرفی می‌کند. درواقع به جای افزودن انبوه نقاط میان‌یابی شده که هزینه محاسباتی را افزایش می‌دهد و الزاماً کیفیت تعمیم را بهتر نمی‌کند، SPICE با انتخاب تعداد اندکی نقاط مرجع ماده و ثابت نگه داشتن مختصات فضایی آن‌ها در طول همه گام‌های زمانی، به عنوان ورودی در اختیار ترنسفورمر قرار می‌دهد. این راهبرد خوراندن، ساختار زمانی را برای سازوکار توجه برجسته می‌کند، و در نتیجه استخراج الگوهای نوسانی و تغییرات ریزمقیاس UZ پایدارتر و دقیق‌تر انجام می‌گیرد.

نتایج تجربی نشان می‌دهد که ترکیب ترنسفورمر با SPICE نسبت به روش‌های مرسوم دو دستاورد اصلی دارد: نخست، بهبود قابل توجه در دقت پیش‌بینی (به ویژه در گام‌های زمانی دیده نشده و بازه‌های نوسانی حساس) و دوم، ارتقای کارایی محاسباتی از طریق استفاده نکردن از اطلاعات بیشتری که حاصل از درونیابی نقاط بوده و تمرکز بر نمونه‌های مفید. علاوه بر این، مشاهده کردیم که رویکرد SPICE حتی برای شبکه‌های عصبی غیر ترنسفورمری نیز سودمند است، که مؤید آن است که «شیوه خوراندن داده» یک اهرم مستقل و اثرگذار در یادگیری پدیده‌های مکانیکی پیچیده است. این یافته‌ها از منظر مهندسی محاسباتی مهم‌اند: نخست، نشان می‌دهند که می‌توان بدون تکیه صرف بر افزایش حجم پایگاه داده یا معماری‌های بسیار بزرگ، از طریق مهندسی ورودی هوشمندانه به بهبود معنادار رسید. دوم، مسیرهایی تازه برای تعمیم روش به حوزه‌های مجاور می‌گشایند-از جمله شبیه‌سازی‌های چندمقیاسی در مکانیک جامدات، مسائل معکوس مبتنی بر میدان‌های تنش-کرنش، و پیش‌بینی‌های بلندمدت در سری‌های زمانی مهندسی و همچنین تحلیل داده‌های بازارهای مالی. در مجموع، SPICE و ترنسفورمر همراه آن چشم‌اندازی عملی برای استخراج الگوهای پیچیده از داده‌های نانوایندنتیشن فراهم می‌کنند.

واژگان کلیدی تحلیل چندمقیاسی، معماری ترنسفورمر، نانوایندنتیشن، یادگیری عمیق

فهرست مطالب

پ	فهرست تصاویر
ث	فهرست جداول
ث	فهرست الگوریتم‌ها
۱	فصل ۱: مقدمه
۱	۱.۱ پیشینه و چالش‌های نانوایندنتیشن
۶	۲.۱ مبانی نظری و جزئیات مسئله نانوایندنتیشن
۶	۱.۲.۱ تعریف، هدف و دامنه کاربرد
۶	۲.۲.۱ هندسه فرورونده‌ها و کمیت‌های کلیدی
۷	۳.۲.۱ پدیده sink-in و pile-up
۷	۴.۲.۱ اثر اندازه نفوذ
۷	۵.۲.۱ جمع‌بندی
۸	۳.۱ ترنسفورمرها و کاربرد آن‌ها در تحلیل سری‌های زمانی
۱۰	۴.۱ کاربرد ترنسفورمرها در تحلیل داده‌های مسائل نانوایندنتیشن چندمقیاسی
۱۱	۵.۱ هدف و نوآوری پژوهش حاضر
۱۲	فصل ۲: ساختار داده و پیچیدگی‌های آن
۱۲	۱.۲ داده‌های ورودی مدل
۲۴	فصل ۳: کارهای انجام شده

۱.۳	مرور کار قهرمانی و همکاران و داده‌های تولیدی آن‌ها	۲۴
۲.۳	منحنی نیرو-نفوذ و ترنسفورمر فازی	۲۹
۳.۳	نتایج اصلی	۳۲
۴.۳	نتایج ترنسفورمر فازی	۳۳
فصل ۴: الگوریتم پیشنهادی برای UZ		
۱.۴	شبکه ترنسفورمر	۳۶
۲.۴	تراکم‌سازی داده و روش SPICE	۳۸
فصل ۵: بحث و نتیجه‌گیری		
۱.۵	نتایج مدل	۴۸
۲.۵	نتیجه‌گیری	۶۳
۳.۵	پیشنهادهای آینده	۶۳
کتاب‌نامه		۶۵

فهرست تصاویر

۱.۱	شماتیک تماس نوک هرمی با سطح نمونه	۶
۲.۱	دو الگوی مرزی اطراف نوک: pile-up (چپ) و sink-in (راست)	۷
۲.۲	نفوذ فرورونده در ماده در گام زمانی ۲۰۲ (برگرفته از خروجی شبیه‌سازی QC).	۱۷
۱.۲	پیکربندی آغازین فرورونده و ماده در گام زمانی ۰ (برگرفته از خروجی شبیه‌سازی QC).	۱۷
۳.۲	نمودار نیرو بر حسب SolutionTime که ناپیوستگی‌ها را در برخی گام‌ها نشان می‌دهد.	۱۸
۴.۲	نفوذ فرورونده در ماده در گام‌های ۱۶۲ و ۱۶۳ SolutionTime	۱۹
۵.۲	نمودارهای SolutionTime-UZ برای چهار نقطه انتخابی.	۲۰
۱.۳	معماری ANN	۲۷
۲.۳	معماری MTL	۲۷
۳.۳	طرح کلی شبکه ترنسفورمر فازی	۳۰
۵.۳	ایندنتور و ماده - گام زمانی ۱۵۵	۳۳
۴.۳	ایندنتور و ماده - گام زمانی صفر	۳۳
۶.۳	استفاده از عدد فازی گاوسی	۳۴
۷.۳	استفاده از عدد فازی ذوزنقه‌ای	۳۴
۸.۳	استفاده از عدد فازی مثلثی	۳۴
۱.۴	معماری شبکه ترنسفورمر	۳۷
۲.۴	تولید تعداد دلخواهی از نقاط تصادفی درون هر المان	۳۹
۳.۴	داده‌های استخراج‌شده برای یک نقطه انتخابی (با همان قالب جدول ۱.۴).	۴۰

- ۱.۵ مختصات نمونه‌های نماینده با دایره‌های سفید مشخص شده‌اند. ۴۹
- ۲.۵ مقایسه MSE برای طول‌های دنباله مختلف - مقادیر گزارش شده برای Sample3 و Sample4. ۵۱
- ۳.۵ مقایسه MSE برای طول‌های دنباله مختلف - مقادیر گزارش شده برای Sample10 و Sample13. ۵۲
- ۴.۵ نمودار UZ برای Sample3. نقاط قرمز پیش‌بینی‌های مدل ترنسفورمر روی داده آزمون را نشان می‌دهند، نقاط آبی مقادیر واقعی UZ را نمایش می‌دهند، و نقاط سبز پیش‌بینی‌های مدل روی داده آموزش را مشخص می‌کنند. ۵۳
- ۵.۵ مقادیر MSE برای ۱۵ نمونه انتخاب شده روی داده آزمون برحسب مختصات نقاط (آنگستروم).
نقاط قرمز مربوط به مختصاتی هستند که در داده آموزش گنجانده شده‌اند، در حالی که نقاط آبی مختصاتی را نمایش می‌دهند که بخشی از داده آموزش نبوده‌اند. ۵۴
- ۶.۵ مقادیر MSE برای نمونه‌های ۱، ۲، ۴ و ۵ روی داده آزمون برحسب مختصات نقاط (آنگستروم). ۵۵
- ۷.۵ مقادیر MSE برای نمونه‌های ۳، ۶، ۷، ... و ۱۵ روی داده آزمون برحسب مختصات نقاط (آنگستروم). ۵۵
- ۸.۵ مقادیر MSE برحسب تعداد اِپک‌های طی شده ۵۷
- ۹.۵ پیش‌بینی ۱۲ گام آینده برای Sample1 ۵۹
- ۱۰.۵ پیش‌بینی ۱۲ گام آینده برای Sample3 ۵۹
- ۱۱.۵ پیش‌بینی ۱۲ گام آینده برای Sample4 ۶۰
- ۱۲.۵ کانتور UZ در $SolutionTime = ۲۲۱$ - نتیجه QC ۶۱
- ۱۳.۵ کانتور UZ در $SolutionTime = ۲۲۲$ - خروجی مدل ترنسفورمر ۶۲

فهرست جداول

۱.۲	نمایی از محتویات فایل dat - بلوک ابتدایی و انتهایی فایل	۲۱
۲.۲	داده‌های خام آغازین ذخیره‌شده در فایل ..dat	۲۲
۳.۲	داده‌ها پس از نخستین مرحله پیش پردازش-ذخیره‌شده در یک فایل ..csv	۲۳
۱.۳	زمان اجرا براساس تعداد لایه‌های مختلف و اعداد فازی مختلف (بر حسب ثانیه)	۳۵
۲.۳	خطای داده‌های آموزش و آزمون - معیار PICP	۳۵
۳.۳	مشخصات رایانه برای اجرای کد	۳۵
۱.۴	داده‌های استخراج‌شده در نقطه سفید برجسته‌شده در شکل ۳.۴	۴۰
۲.۴	تمامی نقاط استخراج‌شده مشابه جدول ۱.۴ در یک مجموعه داده ادغام شدند.	۴۱
۳.۴	مجموعه داده نهایی مورد استفاده به عنوان ورودی ترنسفورمر.	۴۳
۱.۵	مختصات نمونه‌های نماینده از نقاط مختلف درون ماده	۴۹
۲.۵	مقادیر MSE برای داده‌های آموزش و آزمون در طول‌های دنباله مختلف - آبی نشان‌دهنده بهترین مقدار برای داده آموزش در میان ۷ طول دنباله و سبز نشان‌دهنده بهترین مقدار برای	
۵۰	داده آموزش در میان ۷ طول دنباله است.	

فهرست الگوریتم‌ها

	Convert Tecplot .dat to a “NoElements” variant by stripping element	۱.۴
۴۴	connectivity	
	End-to-end pipeline: sample interior points from Tecplot .dat and	۲.۴
۴۵	save to CSV.	
	Merge multiple CSV files with schema alignment, de-duplication, and	۳.۴
۴۶	safe saving	
	Insert a new time-step zone into a Tecplot NoElements .dat file from	۴.۴
۴۷	time-series points	

فصل ۱

مقدمه

۱.۱ پیشینه و چالش‌های نانوایندنتیشن

نانوایندنتیشن^۱ به عنوان یکی از دقیق‌ترین ابزارهای سنجش موضعی خواص مکانیکی، جایگاهی محوری در پژوهش و صنعت یافته است؛ زیرا می‌تواند پاسخ ماده را در مقیاس‌های میکرو و نانو، بدون نیاز به نمونه‌های بزرگ و بدون تخریب چشمگیر، آشکار کند. در این آزمون، یک فرورونده استاندارد (معمولاً برکویچ/ویکرز هر می یا نوک کرومی) به سطح نمونه اعمال می‌شود و منحنی بار-فرو رفتگی^۲ ثبت می‌گردد که از آن سختی، مدول الاستیک و سایر سنج‌های مکانیکی با دقت بالا استخراج می‌شوند. این قابلیت، نانوایندنتیشن را به ابزاری ایده‌آل برای «نگاشت مکانیکی»^۳ ریزساختارها-از لایه‌های نازک و پوشش‌ها تا دانه‌های منفرد در مواد چندفازی-تبدیل کرده است؛ جایی که آزمون‌های ماکروسکوپی قادر به تفکیک فضایی کافی نیستند [۱-۳].

از دیدگاه عملی، منحنی بار-فرو رفتگی اطلاعات غنی‌ای در هر دو ناحیه بارگذاری و برداشت در بردارد: شیب ابتدای برداشت، سختی تماس^۴ را می‌دهد و با داشتن تابع سطح تماس مؤثر، می‌توان مدول الاستیک کاهش یافته و سپس مدول ماده را به دست آورد. هم‌چنین سختی نفوذی-به عنوان نسبت بار به سطح تماس-به طور رویتین

^۱ Nanoindentation: این آزمون که گاهی با عنوان instrumented indentation testing یا depth-sensing indentation نیز شناخته می‌شود، روشی استاندارد برای اندازه‌گیری خواص مکانیکی در مقیاس‌های میکرو و نانو است. در این روش بار و عمق نفوذ به صورت پیوسته ثبت می‌شود و امکان استخراج خواص الاستیک و پلاستیک فراهم می‌گردد. این تکنیک در استاندارد بین‌المللی ISO 14577 توصیف شده است و کتاب‌های مرجع مانند Fischer-Cripps (Nanoindentation, Springer, 2011) به طور مفصل اصول و کاربردهای آن را شرح داده‌اند.

^۲ منحنی بار-فرو رفتگی: نمایش هم‌زمان نیرو (یا بار) و عمق نفوذ نوک در طول چرخه بارگذاری/برداشت.

^۳ Mechanical mapping: تهیه نگاشت‌های فضایی سختی/مدول از روی آرایه‌ای از نفوذها در مختصات مختلف.

^۴ contact stiffness

گزارش می‌شود و تفسیر آن با سنت کلاسیک سختی‌سنجی تیپور^۵ پیوند دارد. در عمل، دقت این استخراج‌ها منوط به کالیبراسیون دقیق نوک (زاویه/شعاع نوک، گردشگی راس)، تصحیح تبعیت دستگاه و لحاظ رفتارهای سطحی است. به علاوه، پدیده‌های موضعی مانند sink-in/pile-up^۶ و زبری سطح می‌توانند بر برآورد سطح تماس و در نتیجه بر مدول/سختی اثر بگذارند. همین حساسیت‌هاست که طراحی آزمایش (انتخاب هندسه نوک، نرخ بارگذاری، مد کنترل نیرو/عمق) را در مقیاس نانو حیاتی می‌کند [۱، ۳].

در حوزه پوشش‌ها و لایه‌های نازک، نانوایندنتیشن برای جداسازی سهم پوشش و زیرلایه، ارزیابی چسبندگی مکانیکی و سنجش اثر تنش‌های پسماند به کار می‌رود. مدلسازی این حالت‌ها غالباً به تحلیل‌های FEM نیاز دارد تا تماس غیرخطی، هندسه واقعی نوک و ناهمگنی لایه/زیرلایه به صورت منسجم لحاظ شوند و بتوان از روی منحنی‌های بار-فرورفتگی، خواص مؤثر را پایدار و بدون سوگیری استخراج کرد. این پیوند آزمایش-محاسبه به‌ویژه هنگامی اهمیت دارد که مقیاس ضخامت پوشش با مقیاس نفوذ هم‌مرتبه شود و اثرات مرزی و گرادیان‌های ریزساختاری پررنگ شوند. در چنین سناریوهایی، دقت تفکیک مکانی نانوایندنتیشن امکان نقشه‌برداری هدفمند مناطقی بحرانی (لبه‌ها، مرزخانه‌ها، فازهای ثانویه) را فراهم می‌کند [۱، ۲].

از منظر نظری و تاریخی، مفهوم سختی و نسبت آن با تش تسلیم، از کار کلاسیک تیپور ریشه می‌گیرد که چارچوبی کمی برای پیوند فشار تماس زیر نوک و مقاومت جاری‌شدن ماده ارائه کرد. این چارچوب هنوز مبنای شهودی تفسیر بسیاری از منحنی‌های نفوذ است و درک می‌دهد که چرا اندازه، شکل و شعاع مؤثر نوک بر مقدار سنج‌های استخراجی اثرگذارند. در مقیاس‌های بسیار کوچک، این پیوند با «اثر اندازه فرورفتگی» و فعال‌شدن سازوکارهای پلاستیک موضعی (نظیر آغاز جوانه‌زنی نابجایی‌ها) پیچیده‌تر می‌شود؛ پدیده‌ای که در آزمون‌های دقیق نانوایندنتیشن بارها مشاهده شده و بخشی از رفتارهای امضامانند منحنی (مانند «پاپ-این») را توضیح می‌دهد. هرچند توضیح اتمی کامل این رخدادها فراتر از دامنه این بخش است، اما باید یادآور شد که نگاه اتم‌محور به حرکت ذرات - که ریشه‌های روش‌شناختی آن تا مطالعات کلاسیک دینامیک مولکولی آلدروین‌رایت بازمی‌گردد - بستر مفهومی ارزشمندی برای فهم خاستگاه این پدیده‌ها در مقیاس نانو فراهم کرده است [۳، ۴].

مزیت کلیدی نانوایندنتیشن در قیاس با آزمون‌های ماکروسکوپی این است که حجم مؤثر آزموده‌شده بسیار کوچک است؛ بنابراین می‌توان ناهمگنی‌های ریزساختاری را «حل» کرد و سهم هر ناحیه/فاز را مستقل سنجید. این ویژگی، همراه با امکان اجرای آرایه‌های نفوذی و روش‌های رهگیری پویای سختی^۷، به نقشه‌برداری عملکردی مواد مهندسی، پوشش‌های ضدسایش/ضد خوردگی و سامانه‌های MEMS/NEMS سرعت و دقت می‌بخشد. همچنین، برای فرایندهای نوین ساخت (مانند تولید افزایشی) که در آن‌ها ریزساختار و خواص در طول ضخامت

^۵David Tabor

^۶Sink-in/Pile-up: بالازدگی/فرونشست ماده در پیرامون نوک که باعث اختلاف بین عمق واقعی و عمق هندسی و نیز تغییر سطح

تماس می‌شود.

^۷Continuous Stiffness Measurement (CSM) یا مدهای پویای مشابه برای استخراج سختی/مدول به صورت تابعی از عمق.

تغییر می‌کند، نانوایندنتیشن امکان پایش و کنترل کیفیت موضعی را مهیا می‌کند. جمع‌بندی آن‌که، این روش با فراهم کردن داده موضعی پرکیفیت و تکیه بر سنت نظری سختی سنجی فلزات و دستورکارهای استاندارد استخراج خواص، به ابزاری غیرقابل جایگزین برای طراحی، مهندسی و تضمین کیفیت مواد-به‌ویژه در لایه‌های نازک و پوشش‌ها-تبدیل شده است [۳-۱].

اهمیت عملی نانوایندنتیشن از چند جهت برجسته است: نخست آن‌که می‌توان خواص موضعی پوشش‌های عملکردی (ابزاری/ضدسایش/ضد خوردگی) را روی زیرلایه‌های متفاوت سنجید و اثر چسبندگی، زبری و تنش‌های پسماند را ارزیابی کرد؛ دوم، در فناوری‌های MEMS/NEMS، که اجزا در ابعاد میکرون/نانومتر کار می‌کنند، کالیبراسیون دقیق خواص ماده در همان مقیاس عملکردی حیاتی است؛ سوم، در مهندسی زیست‌مواد و بافت‌های نرم، امکان ارزیابی رفتار وابسته به زمان (خزش/آرامش تنش)^۸ در عمق‌های بسیار کم فراهم می‌شود؛ و چهارم، در تولید افزایشی و قطعات گرادیانی، نقشه‌برداری سختی/مدول در مسیر ساخت به کنترل کیفیت و تنظیم پارامترهای فرایند کمک می‌کند. با این حال، تفسیر داده‌ها همیشه ساده نیست؛ در این مقیاس‌ها پدیده‌هایی مانند پلاستیسیته موضعی، ناهمسانی بلوری، و «اثر اندازه فرورفتگی» باعث رفتارهای غیرخطی و پیچیده در منحنی نیرو-عمق می‌شوند. وقوع رویدادهایی چون «پاپ-این»^۹ و «جهش به تماس»^{۱۰} در بسیاری از مواد گزارش شده و شدت آن‌ها به ریزساختار و شرایط سطح وابسته است. همین حساسیت به ریزساختار سبب می‌شود نانوایندنتیشن برای مهندسی ماده (طراحی آلیاژها، پوشش‌ها و فرایندهای سطحی) ابزاری راهبردی باشد [۷-۵].

برای فهم سازوکارهای زیربنایی این پاسخ‌های پیچیده، جامعه مکانیک محاسباتی از سه خانواده شبیه‌سازی بهره می‌گیرد: روش المان محدود^{۱۱}، دینامیک مولکولی^{۱۲} و روش شبه‌پیوسته^{۱۳}. هر یک تاریخچه، قلمرو کاربرد و هزینه محاسباتی خاص خود را دارد و در کنار یکدیگر طیفی از مقیاس‌ها را پوشش می‌دهند.

(۱) FEM - خاستگاه و قلمرو کاربرد. ریشه‌های FEM به دهه ۱۹۵۰ و تحلیل سازه‌های هوافضا بازمی‌گردد و سپس به سرعت در تمام شاخه‌های مهندسی گسترش یافت. در زمینه فروروندگی، FEM ابزار استاندارد برای مدل‌سازی الاستوپلاستی و تماس غیرخطی بوده است: از هندسه‌های محوری ساده برای نوک‌های کروی^{۱۴}/برینل^{۱۵} تا مدل‌های سه‌بعدی کامل نوک‌های برکوویچ^{۱۶}/ویکرز^{۱۷}؛ از بررسی پدیده pile-up/sink-in تا استخراج مدول و سختی پوشش/زیرلایه و ارزیابی اثر تنش‌های پسماند. قوت FEM در انعطاف‌پذیری هندسی و تعمیم آسان

^۸creep/stress relaxation

^۹Pop-in: جهش ناگهانی در عمق یا افت آنی در نیرو، غالباً هم‌زمان با آغاز تسلیم ناحیه زیر نوک و جوانه‌زنی نابجایی.

^{۱۰}Jump-to-contact: جابجایی ناگهانی نوک در لحظه تماس اولیه به سبب نیروهای جذب سطحی/وان‌دروالس.

^{۱۱}Finite Element Method (FEM).

^{۱۲}Molecular Dynamics (MD).

^{۱۳}Quasi-Continuum (QC).

^{۱۴}Spherical

^{۱۵}Brinell

^{۱۶}Berkovich

^{۱۷}Vickers

قوانین ماده است، اما دقت بالا مستلزم مش بندی ریز، فرمول بندی تماس پایدار و (گاهی) حل گرهای غیرخطی گران است. در مدل های سه بعدی با میلیون ها درجه آزادی و تماس اصطکاکی، زمان حل به طور قابل ملاحظه ای افزایش می یابد و اجرای مطالعات پارامتری گسترده دشوار می شود [۸، ۹].

۲) MD - نگاه اتم به اتم و محدودیت زمانی / ابعادی. MD از اواخر دهه ۱۹۵۰ برای رهگیری رفتار جمعی ذرات شکل گرفت (کار کلاسیک آلدرو و وین رایت) و بعدها با توسعه پتانسیل های برهم کنش و رایانش موازی، به ابزار اصلی فیزیک و علم مواد در مقیاس اتمی بدل شد. در فروروندگی نانومقیاس، MD امکان مشاهده مستقیم آغاز تسلیم، جوانه زنی و حرکت نابجایی ها، دوقلویی، و حتی دگرگونی های فازی موضعی (مثلاً در سیلیکون) را فراهم می کند. با این حال، پایداری عددی معمولاً گام های زمانی فمتوثانیه ای را تحمیل می کند و ابعاد قابل شبیه سازی به چند ده نانومتر و زمان های چند نانوثانیه محدود می ماند؛ به علاوه، تعداد اتم ها باید در حد صدها هزار تا میلیون ها باشد تا تماس نوک/ماده به واقع بینانه مدل شود که همگی هزینه محاسباتی سنگینی دارد [۱۰].

۳) QC - پل میان اتمی و پیوسته. روش QC در میانه دهه ۹۰ معرفی شد تا تنها در نواحی بحرانی و حساس (مثلاً زیر نوک یا مسیر نابجایی) دقت اتمی را نگه دارد و سایر نواحی را با تقریب های پیوسته پوشش دهد؛ بدین ترتیب، جزئیات اتمی مهم حفظ می شود اما هزینه به مراتب کمتر از MD تمام اتمی است. QC برای پدیده های چندمقیاسی مواد بلوری (تعامل نابجایی ها با مرزدانه، پیشروی ترک در حضور شبکه لغزش، و فروروندگی روی سطوح زبر/بافت دار) به طور گسترده به کار رفته است. با وجود بهره وری بالاتر، اجرای سناریوهای زیاد یا وارون سازی مسئله (استخراج خواص از داده آزمایش) همچنان پرهزینه است و به زیرساخت محاسباتی قدرتمند نیاز دارد [۱۱، ۱۲].

موضوع مهم دیگر این هست که توجه کنیم کجا و در چه مسائلی از هر سه روش فوق بصورت تکی استفاده شده است. FEM در تحلیل پوشش های صنعتی (ابزارهای برشی/ضدسایش)، ریزاجزاء MEMS، بسته بندی الکترونیکی و زیرلایه های چندلایه، به خاطر انعطاف هندسی/مرزی، بسیار رایج است. MD در علوم مواد و فیزیک حالت جامد برای روشن کردن سازوکارهای آغاز تسلیم، حرکت نابجایی ها و نقش دما/نرخ بارگذاری در تماس نوک/بلور به کار می رود. QC نیز در مسائل مهندسی مواد پیشرفته - که در آن ها لازم است پدیده اتمی موضعی با پاسخ پیوسته سراسر نمونه پیوند بخورد - جایگاه ممتازی دارد؛ نمونه آن کار مسلم زاده و همکاران بر تک بلور مس زبر است که در آن اثر اندازه فرورونده و زبری سطح بر منحنی نیرو-نفوذ، «جهش به تماس» و «پاپ-این» نخستین نابجایی بررسی شد.

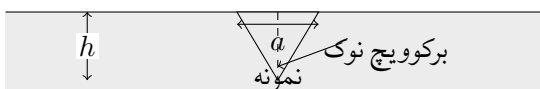
همچنین نیاز است که از لحاظ بار محاسباتی و پیامدهای زمانی آن نیز یک بررسی کوتاه باشیم. افزایش دقت در FEM (مش ریز، تماس سه بعدی، قوانین ماده پیشرفته) زمان حل را به شدت بالا می برد و اجرای بهینه سازی را پرهزینه می کند. در MD، محدودیت گام زمانی و ابعاد مدل - حتی روی ابررایانه ها - میدان دید پدیده ها را کوتاه/کوچک می کند. QC اگرچه مقیاس پذیرتر از MD است، اما برای پوشش دامنه های بزرگ با

مناطق بحرانی متعدد و نیز برای مطالعات پارامتری وسیع، به زمان و حافظه زیاد نیاز دارد. نتیجه آن که «شبیه سازی مستقیم» برای همه ترکیب های نوک/سطح/شرایط بارگذاری یا برای وارون سازی منظم خواص، به سختی پاسخ گو است. از همین رو، ادبیات اخیر به سمت راهبردهای داده محور و مدل های جانشین حرکت کرده است تا از داده های محدود پرهزینه شبیه سازی/آزمایش بیشترین بهره اطلاعاتی اخذ شود-بی آن که بار محاسباتی تکرار حل های مستقیم تحمیل گردد.

به موازات این پیشرفت ها، ظهور روش های یادگیری ماشین^{۱۸} و به ویژه یادگیری عمیق^{۱۹} افق های جدیدی را برای تحلیل داده های پیچیده ی نانوایندنتیشن گشوده است. این الگوریتم ها که بر روی داده های آزمایشگاهی یا شبیه سازی شده آموزش می بینند، می توانند روابط پنهان میان ویژگی های ماده، شرایط بارگذاری و پاسخ های مکانیکی را فراگیرند و حتی در برخی موارد جایگزین مدل های فیزیکی مرسوم شوند. به عنوان مثال، از روش های یادگیری عمیق مبتنی بر بینایی کامپیوتر برای تعیین خواص مکانیکی فولادهای خودرویی از تصاویر میکروسکوپی سطح استفاده شده که تطابق بسیار خوبی با نتایج آزمون کشش مستقل نشان داده است. همچنین با به کارگیری داده های حاصل از شبیه سازی QC برای نانوایندنتیشن لایه های نازک، یک مدل یادگیری عمیق چندوظیفه ای توانسته است با بهره گیری از ویژگی های مشترک بین اهداف مرتبط، عملکرد بهتری نسبت به مدل های پایه ی چندخروجی و شبکه های دودویی داشته باشد [۱۳-۱۵].

بررسی منابع اخیر نشان می دهد که ترکیب داده های آزمایشگاهی، شبیه سازی های شبه پیوسته و الگوریتم های هوش مصنوعی^{۲۰} چارچوب مؤثری برای استخراج دقیق تر ویژگی های مکانیکی در ریزساختارهای ناهمگن فراهم می کند [۵]. از این رو انتظار می رود که در آینده تجزیه و تحلیل داده های نانوایندنتیشن بیش از پیش متکی بر یکپارچه سازی روش های عددی و یادگیری ماشین باشد. پژوهش حاضر نیز همین مسیر را دنبال می کند و با به کارگیری معماری های مدرن یادگیری عمیق یعنی ترنسفورمرها^{۲۱} درصدد غلبه بر پیچیدگی های ذاتی داده های نانوایندنتیشن است.

¹⁸Machine Learning (ML)¹⁹Deep Learning (DL)²⁰Artificial Intelligence (AI)²¹Transformer



شکل ۱.۱: شماتیک تماس نوک هرمی (به صورت مخروط معادل) با سطح نمونه. کمیت‌های اصلی شامل عمق نفوذ h و شعاع تماس a هستند.

۲.۱ مبانی نظری و جزئیات مسئله نانوایندنتیشن

۱.۲.۱ تعریف، هدف و دامنه کاربرد

نانوایندنتیشن یا «آزمون نفوذ در مقیاس نانو» روشی برای برآورد پارامترهای مکانیکی موضعی (مانند سختی، مدول الاستیسیته و گاه پارامترهای ویسکوالاستیک) با اعمال یک بار کنترل‌شده به کمک فرورونده‌ای^{۲۲} بسیار سخت و اندازه‌گیری جابه‌جایی عمودی سطح نمونه است. به دلیل توان تفکیک مکانی بالا و نیاز به آماده‌سازی حداقلی، این روش در فلزات نانو ساختار، پوشش‌ها و لایه‌های نازک، مواد ترد (سرامیک‌ها)، پلیمرها و زیست‌مواد کاربرد گسترده دارد. ایده اصلی ساده است: اعمال نیرو-برداشت نیرو و ثبت همزمان منحنی بار-فرورفتگی و سپس استنتاج کمیت‌های مکانیکی از روی هندسه تماس و شیب منحنی در ناحیه باربرداری.

۲.۲.۱ هندسه فرورونده‌ها و کمیت‌های کلیدی

رایج‌ترین فرورونده‌ها شامل برکویچ، ویکرز، کنوپ^{۲۳} (هر سه هرمی/هرمی-سه‌وجهی) و فرورونده کروی^{۲۴} هستند. پارامترهای عملیاتی اصلی عبارت‌اند از:

- بار لحظه‌ای $P(t)$ و نفوذ لحظه‌ای $h(t)$,
- بار بیشینه $P_{\max}$ و نفوذ متناظر $h_{\max}$,
- شیب بخش باربرداری $S = \left. \frac{dP}{dh} \right|_{\text{unload}}$ که به «سختی تماس» معروف است،
- عمق تماس h_c ، سطح تماس مؤثر A_c و «تابع سطح»^{۲۵} که برای هر نوک باید کالیبره شود [۱].

^{۲۲}Indenter

^{۲۳}Knoop

^{۲۴}Spherical indenter

^{۲۵}Area function



شکل ۲.۱: دو الگوی مرزی اطراف نوک: pile-up (چپ) و sink-in (راست). در حالت اول A_c واقعی بزرگ‌تر و در حالت دوم کوچک‌تر از مدل ایده‌آل است [۱].

۳.۲.۱ پدیده pile-up و sink-in

برای مواد با کارسختی کم/رفتار نرم‌شونده، ماده پیرامون نوک برآمده (pile-up) و در مواد با کارسختی زیاد/کرنش‌سختی قوی، فرورفت (sink-in) رخ می‌دهد. این پدیده باعث می‌شود سطح تماس واقعی از $A(h_c)$ ایده‌آل متفاوت شود.

۴.۲.۱ اثر اندازه نفوذ

در بسیاری از فلزات نانوساختار، سختی افزایش‌یافته با کاهش عمق مشاهده می‌شود (اثر اندازه نفوذ). تبیین این پدیده به چگالی نابجایی‌ها و کارسختی مقیاس‌وابسته مربوط است. برای تحلیل نتایج کم‌عمق، این اثر باید در نظر گرفته شود.

۵.۲.۱ جمع‌بندی

نانوایندنتیشن چارچوبی دقیق اما ظریف است: اعتبارسنجی هر نتیجه به چند حلقه به هم پیوسته وابسته است - کنترل هندسه تماس (زاویه/شعاع واقعی نوک و area function)^{۲۶}، کالیبراسیون نوک و سختی دستگاه^{۲۷}، جبران خطاهای ابزاری^{۲۸}، و سرانجام مدل‌سازی سازگار با فیزیک ماده و تماس. حتی زمانی که منحنی نیرو-نفوذ به ظاهر تمیز است، پدیده‌هایی مانند «پاپ-این» (شروع ناگهانی لغزش‌های نابجایی) و «پرش به تماس» می‌توانند خوانش مدول و سختی را دچار سوگیری کنند؛ به‌ویژه اگر نرخ بارگذاری بالا، دما متغیر یا سطح زیر باشد. در پوشش‌ها و لایه‌های نازک، اثر زیرلایه و زبری سطح باعث می‌شود تفسیر مستقیم داده بر پایه فرمول‌های

^{۲۶} تابع سطح تماس یا area function معمولاً به صورت چند جمله‌ای کالیبره می‌شود تا گردشگی نوک و خطاهای ساخت را جبران کند.

^{۲۷} سختی مؤثر سامانه یا frame compliance، سهم تغییر شکل سازه دستگاه در جابه‌جایی ثبت شده است.

^{۲۸} برای نمونه خزش سامانه و رانش حرارتی؛ instrument/thermal drift.

بسته، خطای قابل ملاحظه داشته باشد و ناگزیر باید از شبیه سازی های کمکی -مانند المان محدود یا شبه پیوسته - برای جداسازی سهم لایه ها و شرایط مرزی کمک گرفت.

از منظر مدل سازی نیز، انتخاب چارچوب مناسب برای تماس و پلاستیسیته اهمیت دارد: در مواد ترد، تماس الاستیک هر تری تقریب خوبی برای فاز اولیه نفوذ می دهد، اما با فعال شدن سازوکارهای لغزش یا گسترش ترک، منحنی از الگوهای کلاسیک منحرف می شود؛ در مواد ویسکو-پلاستیک، نرخ بارگذاری و مکث های زمانی تابع پاسخ اند و باید در تابع هدف هم ارزی داده/مدل وارد شوند. در پوشش های چندلایه، مدل های لایه-زیرلایه با پارامترهای اندک، گرچه شهودی اند، اما در حضور زبری معنی دار یا هندسه نوک گرد، ناکافی می شوند و آنگاه هم جوسازی با شبیه سازی های QC/FEM ابزار اصلی برای جداسازی اثرها است [۲، ۷].

در جمع، نانوایندنتیشن تنها یک منحنی نیرو-نفوذ نیست؛ زنجیره ای از تصمیم های آزمایشگاهی و انتخاب های مدل سازی است که هر کدام می تواند بر برآورد خواص اثر بگذارد. بنابراین، راهبرد معقول آن است که داده ابزارمند تمیز (با کالیبراسیون و جبران خطا) را با شبیه سازی عددی راهنما ترکیب کنیم تا از چندمعنایی بکاهیم و بر ناهمگنی ریزساختار غلبه کنیم. این بستر-همان گونه که در بخش بعد خواهیم دید- برای بهره گیری از روش های نوین داده محور نیز بسیار مناسب است: مدل های یادگیری عمیق (به ویژه در قالب ترنسفورمرهای دنباله و میدانی) می توانند از داده های ابزارمند و شبیه سازی شده به طور هم افزا بیاموزند، رخداد های گذرا را پیش کنند و در تنظیم آزمایش و وارون سازی پارامترها نقش مکمل پررنگی داشته باشند [۵، ۱۳].

۳.۱ ترنسفورمرها و کاربرد آنها در تحلیل سری های زمانی

معماری های ترنسفورمر از زمان معرفی توسط Vaswani و همکاران در سال ۲۰۱۷ فصل جدیدی را در یادگیری عمیق گشودند، زیرا مکانیزم توجه^{۲۹} را به عنوان رویکردی نوین برای تحلیل داده های ترتیبی مطرح کردند که درخور توجه بود [۱۶]. تفاوت کلیدی ترنسفورمرها با شبکه های بازگشتی نظیر LSTM^{۳۰} در به کارگیری سازوکار خودتوجهی برای شناسایی و حفظ وابستگی های بلندمدت در داده ها است [۱۷، ۱۸]. این ویژگی زمینه ساز موفقیت ترنسفورمرها در حوزه هایی چون پردازش زبان طبیعی^{۳۱} و ترجمه ماشینی شد و راه را برای به کارگیری آنها در پیش بینی سری های زمانی هموار کرد [۱۹].

پیش بینی سری های زمانی که عبارت است از تخمین روند آینده یک کمیت بر پایه ی مشاهدات گذشته، نقش کلیدی و قابل توجه در طیف وسیعی از کاربردهای مهندسی از جمله حوزه های انرژی، حمل و نقل، پیش

²⁹ Attention mechanism

³⁰ Long Short-Term Memory (LSTM)

³¹ Natural Language Processing (NLP)

ماشین‌آلات و سامانه‌های سازه‌ای ایفا می‌کند [۲۰-۲۲]. مدل‌های کلاسیک آماری مانند آریما^{۳۲} مبتنی بر فرضیات محدودکننده‌ای نظیر خطی بودن و ایستایی هستند و در مواجهه با داده‌های پیچیده عملکرد ضعیفی نشان می‌دهند [۲۳]. در مقابل، پیشرفت شبکه‌های عصبی عمیق امکان مدل‌سازی روابط غیرخطی را فراهم ساخته و دقت پیش‌بینی را بهبود بخشیده است [۲۴]. در این میان، ترنسفورمرها به عنوان گزینه‌ای برتر برای پیش‌بینی سری‌های زمانی ظاهر شده‌اند، به‌ویژه در افق‌های بلندمدت، چرا که به‌طور ذاتی قادر به درک وابستگی‌های بلندمدت در داده‌ها هستند [۲۵، ۲۶].

با این حال، محدودیت‌های محاسباتی ترنسفورمر اولیه در پردازش توالی‌های بسیار بلند، پژوهشگران را بر آن داشته است تا معماری‌های کارآمدتری توسعه دهند [۲۷]. گونه‌هایی نظیر ترنسفورمر لاگ-اسپارس^{۳۳} پیچیدگی زمانی محاسبات را کاهش می‌دهند و مدل‌هایی مانند Autoformer، Informer و FEDformer با نوآوری‌های ویژه‌ای دقت و سرعت پیش‌بینی سری‌های زمانی را بهبود می‌بخشند [۱۸، ۲۵، ۲۷، ۲۸]. به‌طور مشابه، در سال‌های اخیر معماری‌هایی از جمله Reformer، Pyraformer، Triformer و Conformer نیز برای ارتقای مقیاس‌پذیری و کارایی معرفی شده‌اند [۲۹-۳۲].

در عمل، ترنسفورمرها در رشته‌های گوناگونی نظیر مهندسی برق، سامانه‌های انرژی و اقتصاد برای پیش‌بینی سری‌های زمانی به کار گرفته شده‌اند و اغلب عملکردی در حد یا بهتر از الگوهای آماری کلاسیک مانند آریما، مدل‌های هموارسازی نمایی روند-فصلی^{۳۴} و خودرگرسیون برداری^{۳۵} و همچنین شبکه‌های بازگشتی از خود نشان داده‌اند [۲۰، ۲۱]. با این حال، مطالعات اخیر حاکی از آن است که در برخی موارد حتی مدل‌های خطی ساده نیز می‌توانند عملکردی قابل رقابت ارائه دهند، بدین معنا که انتخاب مدل به‌طور کامل به ماهیت داده‌ها وابسته است [۳۳]. علاوه بر این، مدل‌های نوظهوری همچون PatchTST و TranAD نیز برای رفع کاستی‌های مدل‌های ترنسفورمر پایه معرفی شده‌اند [۳۴، ۳۵].

به‌طور کلی، توسعه‌ی معماری‌های ترنسفورمر از سال ۲۰۱۷ تاکنون افق‌های تازه‌ای را برای مواجهه با مسائل مهندسی پیچیده‌تر گشوده است؛ از جمله تحلیل پدیده‌ها در مقیاس‌های کوچک در حوزه‌ی مکانیک جامدات. این پیشرفت به‌طور طبیعی انگیزه‌بخش کاربرد روش‌های مبتنی بر ترنسفورمر برای شبیه‌سازی عددی مسائل نانوایندنتیشن بوده است؛ موضوعی که در بخش بعدی به آن پرداخته می‌شود.

³² Autoregressive Integrated Moving Average (ARIMA)

³³ LogSparse Transformer

³⁴ Exponential Smoothing in the Error-Trend-Seasonal family (ETS)

³⁵ Vector Autoregression (VAR)

۴.۱ کاربرد ترنسفورمرها در تحلیل داده‌های مسائل نانوایندنتیشن چندمقیاسی

با گسترش فزاینده‌ی به کارگیری معماری‌های ترنسفورمر در شاخه‌های مختلف علوم، جامعه‌ی مکانیک محاسباتی نیز به تدریج به پتانسیل این چارچوب برای کاهش هزینه‌ی محاسباتی شبیه‌سازی‌های عددی پی برده است. یکی از برجسته‌ترین حوزه‌های کاربرد ترنسفورمر، توسعه‌ی مدل‌های جانشین برای فرایندهای شبیه‌سازی پرهزینه بوده است. در این رویکرد، به جای حل مستقیم معادلات حاکم بر سیستم، یک شبکه‌ی عمیق با استفاده از مجموعه داده‌ی محدودی که از نتایج شبیه‌سازی شبه‌پیوسته (QC) حاصل شده است آموزش داده می‌شود و سپس می‌تواند پاسخ‌های تقریبی را با سرعت قابل ملاحظه‌ای تولید کند. هرچند شبکه‌های عصبی پیش‌تر به عنوان مدل‌های جانشین مبتنی بر روش المان محدود به کار گرفته شده بودند، اما دقت و انعطاف‌پذیری ترنسفورمرها علاقه‌ی دوباره‌ای به این معماری برانگیخته است [۳۶، ۳۷].

برای مثال، Kim و Shin (۲۰۲۵) یک مدل جانشین چندمقیاسی برای مواد الاستوپلاستیک پیشنهاد کردند که در آن کاهش بُعد مبتنی بر تجزیه‌ی موزون متعامد^{۳۶} با یک کُدگذار ترنسفورمر ترکیب شده بود [۳۶]. آن‌ها ابتدا داده‌های میدان تنش حاصل از حل المان محدود را به چند مؤلفه‌ی اصلی کاهش داده و سپس یک ترنسفورمر را آموزش دادند تا ضرایب این مؤلفه‌ها را در گام‌های زمانی بعدی پیش‌بینی کند. این چارچوب یکپارچه توانست وابستگی‌های فضایی-زمانی داده‌های ریزساختاری را با دقت بالا مدل‌سازی کرده و استنتاج مدل جانشین را در چارچوب چندمقیاسی المان محدود به طور چشمگیری تسریع کند. به طور مشخص، مکانیزم خودتوجهی ترنسفورمر در حکم یک حل‌کننده‌ی دینامیکی تقریبی عمل کرده و پاسخ میکروسکوپی ماده را تحت بارگذاری‌های متغیر پیش‌بینی نمود [۳۶، ۳۷].

نمونه‌ی دیگری از نقش ترنسفورمر در مکانیک سازه‌ها را می‌توان در پژوهش گراندیو و همکاران (۲۰۲۵) مشاهده کرد که در آن از یک «ترنسفورمر نقطه‌ای»^{۳۷} برای پیش‌بینی تغییر مکان‌های یک پل تاریخی استفاده شد. در این مطالعه، شبکه با استفاده از ابرنقاط حاصل از اسکن لیزری پل و نیز تعداد محدودی تحلیل المان محدود آموزش داده شد و توانست توزیع تغییر مکان گره‌ها را به صورت بلادرنگ پیش‌بینی کند. نقطه‌ی قوت این مدل در آن بود که ساختار سه بعدی نقاط به طور صریح در معماری ترنسفورمر لحاظ گردید. نتایج نشان داد که ترنسفورمر نقطه‌ای به ضریب تعیین $R^2 > 0.99$ دست یافت که به مراتب بهتر از یک پرسپترون چندلایه‌ی متعارف با $R^2 \approx 0.4$ بود [۳۸]. این امر بر اهمیت لحاظ وابستگی‌های فضایی پیچیده از طریق مکانیزم خودتوجهی تأکید می‌کند.

همچنین لیو و همکاران (۲۰۲۳) مدل «ترنسفورمر عملگر عصبی ترتیبی»^{۳۸} را معرفی کردند و نشان دادند که

^{۳۶}Proper Orthogonal Decomposition (POD)

^{۳۷}Point Transformer

^{۳۸}Sequential Neural Operator Transformer (SNOT)

ترکیب یک واحد بازگشتی دروازه دار^{۳۹} با ترنسفورمرها می تواند به عنوان یک عملگر قابل آموزش برای مدل سازی پدیده های غیرخطی وابسته به زمان در مکانیک عمل کند. این چارچوب در پیش بینی میدان تنش- کرنش یک تیر تحت بارگذاری دینامیکی عملکرد بهتری نسبت به مدل مرجع یادگیری عملگر DeepONet از خود نشان داد [۳۹]. این نتیجه بار دیگر توانمندی ترنسفورمرها در تلفیق با رویکردهای متنوع، از کاهش بُعد گرفته تا شبکه های عصبی گرافی، را مورد تأکید قرار می دهد.

با وجود پیشرفت هایی که در به کارگیری ترنسفورمر برای کاربردهای مهندسی حاصل شده است، تاکنون کار ویژه ای در خصوص استفاده از ترنسفورمر برای تحلیل داده های شبیه سازی نانوایندنتیشن گزارش نشده است. بیشتر پژوهش های مرتبط در حوزه یادگیری ماشین، یا معطوف به داده های آزمایشگاهی نانوایندنتیشن بوده اند (برای مثال، تخمین سختی و مدول از روی منحنی نیرو-عمرق نفوذ یا تصاویر اثر فرورونده [۱۴، ۴۰])، و یا بر فرمول بندی های معکوس ساده شده با استفاده از شبکه های عصبی معمول تکیه داشته اند [۵]. در ادامه، مسیرهای فنی مشخصی را که ترنسفورمرها برای نانوایندنتیشن چندمقیاسی فراهم می کنند، مرور و ساختار بندی می کنیم.

۵.۱ هدف و نوآوری پژوهش حاضر

در این پژوهش، یک راهبرد نوآورانه برای تغذیه داده به مدل ترنسفورمر - موسوم به SPICE - معرفی شده است. در این روش، تعداد اندکی نقاط انتخاب شده به صورت تصادفی به داده های اصلی افزوده می شوند و مدل ترنسفورمر از طریق این رویکرد ساختاریافته قادر می گردد الگوهای پیچیده زمانی را با پایداری و دقت بیشتری استخراج کند. نتایج حاصل از شبیه سازی های عددی حاکی از بهبود چشمگیر هم در دقت پیش بینی و هم در کارایی محاسباتی در تحلیل مجموعه داده وسیع شبیه سازی QC فرایند نانوایندنتیشن است. این یافته ها پتانسیل رویکرد SPICE را در رفع چالش های ذاتی تحلیل داده های نانوایندنتیشن نشان می دهند و افق های جدیدی را برای کاربرد معماری ترنسفورمر در مسائل مهندسی پیشرفته ترسیم می کنند.

³⁹Gated Recurrent Unit (GRU)

فصل ۲

ساختار داده و پیچیدگی‌های آن

۱.۲ داده‌های ورودی مدل

داده ورودی اصلی این مدل از شبیه‌سازی‌های شبه‌پیوسته‌ی QC در آزمایش نانوایندنتیشن بر روی فیلم نازک مس به‌دست آمده است [۴۱]. ساختار بلوری مس از نوع مکعبی با وجوه مرکزدار (FCC)^۱ است؛ در این آرایش، اتم‌ها در هشت گوشه‌ی مکعب و در مرکز هر وجه جای می‌گیرند و هر اتم عدد همسایگی ۱۲ دارد. چنین تراکمی، همراه با وجود صفحات لغزش پُرتراکم {۱۱۱} و جهات لغزش {۱۱۰} در شبکه‌ی FCC، زمینه‌ساز شکل‌پذیری و رفتار لغزشی برجسته‌ی مس در مقیاس نانو است و در پاسخ نانوایندنتیشن نقشی تعیین‌کننده دارد.

معنای {۱۱۱} و {۱۱۰} و چرایی اهمیت آن‌ها. صورت‌بندی {۱۱۱} و {۱۱۰} از نمایه‌گذاری میلر^۲ پیروی می‌کند؛ آکولاد { } «خانواده‌ی صفحات معادل بلوری» و زاویه‌براکت < > «خانواده‌ی جهات معادل» را نشان می‌دهد.^۳ در شبکه‌ی FCC، صفحات {۱۱۱} پُرتراکم‌ترین صفحات اند (بیشترین چگالی اتمی)، و جهات درون همین صفحات که پُرتراکم‌اند، همان جهات {۱۱۰} هستند. به همین دلیل، سامانه‌های لغزش غالب FCC به‌صورت {۱۱۰}<۱۱۱> نوشته می‌شوند که در مجموع ۱۲ سیستم لغزش (۴ صفحه × ۳ جهت در هر صفحه) پدید می‌آورد.

از دیدگاه فیزیکی نابجایی، بردار برگرز نابجایی‌های پیچشی/ترکیبی در FCC برابر $\frac{a}{\sqrt{3}}\langle 110 \rangle$ است (با a به‌عنوان پارامتر شبکه)، و همین همراستایی b با جهات پُرتراکم، انرژی نابجایی و تنش بحرانی لغزش را کاهش می‌دهد؛ پس آغاز پلاستیسیته در FCC معمولاً با لغزش روی {۱۱۱} در راستای <۱۱۰> رخ می‌دهد.

^۱Face-Centered Cubic.

^۲Miller indices: دستگاه نمایش صفحات و جهات بلوری با سه عدد صحیح بدون بعد.

^۳به‌طور مثال، {۱۱۱} شامل (۱۱۱)، (۱۱۱)، (۱۱۱) و (۱۱۱) است؛ و {۱۱۰} شامل [۱۱۰]، [۱۱۰]، [۱۰۱]، [۱۰۱]، [۰۱۱]، [۰۱۱] و ...

نانوایندنتیشن، بیشینه برش حل شده در ناحیه‌ای در زیر نوک متمرکز می‌شود و وقتی مؤلفه برش حل شده روی یکی از سامانه‌های $\{110\}$ به مقدار بحرانی برسد، هسته‌زایی نابجایی و جهش اولیه پلاستیک (پدیده pop-in) بروز می‌کند؛ چیزی که در منحنی نیرو-نفوذ به صورت شکست ریز یا افت ناگهانی شیب دیده می‌شود.

جهت‌گیری نمونه نسبت به محور نفوذ تعیین می‌کند کدام سامانه‌های $\{110\}$ بیشترین Schmid factor ($m = \cos \phi \cos \lambda$) را دارند و زودتر فعال می‌شوند؛ برای نمونه، در نفوذ روی سطح (001) معمولاً چهار صفحه $\{111\}$ با عامل شمد نزدیک به هم فعال می‌شوند و ردّ لغزش متقارنی پدید می‌آورند، در حالی که روی سطح (111) تعداد سامانه‌های مؤثر کمتر و سختی اندازه‌گیری شده معمولاً بالاتر است (به سبب هم‌راستایی کمتر تنش‌های برشی با راستاهای لغزش). در فیلم‌های نازک مسی، تماس نوک با سطح و نیز قید زیرلایه (ساب استریت) باعث می‌شود فقط آن سامانه‌های $\{110\}$ که کمترین زاویه را با سطح/مرز مشترک دارند به طور کارآمد فعال شوند؛ از این رو، ردّ لغزش‌ها غالباً به صورت نوارهای مورب هم‌جهت با $\{110\}$ روی اثر نفوذ دیده می‌شود.

پیامد عملی این هندسه لغزش آن است که: (۱) بی‌جهتی همسانی FCC در مقیاس ماکرو به رغم آن، در مقیاس نانو پاسخ نفوذ به شدت وابسته به جهت‌گیری می‌شود؛ (۲) شبیه‌سازی‌ها (چه QC و چه FEM/MD بلورشناختی) باید ماتریس چرخش بلور را طوری تنظیم کنند که خانواده $\{110\}$ در مختصات نمونه به درستی فرافکنده شود؛ (۳) تفسیر رخدادهایی مانند pop-in، توده شدن (pile-up) یا نشست (sink-in) پیرامون شیار نفوذ مستقیماً به توزیع تنش‌های برشی حل شده روی همین سامانه‌ها گره خورده است. به عبارت دیگر، نمادهای $\{111\}$ و $\{110\}$ فقط علائم بلوری نیستند، بلکه نقشه راه مسیرهای محتمل لغزش زیر نوک را ارائه می‌کنند و کلید خوانش آن‌چه در منحنی نیرو-نفوذ و میدان جابه‌جایی رخ می‌دهد، به شمار می‌آیند.

طرح کلی تولید داده. مراحل اصلی تولید داده‌ها به طور خلاصه به شرح زیر است:

- **مدل ماده:** یک فیلم نازک مسی به عنوان دامنه در نظر گرفته شد. مس با ساختار مکعبی با وجوه مرکزدار دارای صفحات پرتراکم $\{111\}$ و جهات لغزش $\{110\}$ است که زمینه شکل‌پذیری بالا را فراهم می‌کنند و به محض شروع تماس و تمرکز برش زیر نوک، سامانه‌های $\{110\}$ آسان‌تر فعال می‌شوند [۱]. حالت تنش صفحه‌ای (plane stress) در مقیاس پیوسته فرض گردید؛ یعنی مؤلفه تنش عمود بر صفحه مدل در اغلب نواحی کوچک است ($\sigma_{\perp} \approx 0$) و پاسخ عمدتاً توسط تنش‌های درون صفحه کنترل می‌شود. این فرض، وقتی نسبت ضخامت فیلم به بعد درون صفحه‌ای کوچک باشد و فیلم نسبتاً آزاد از قید بیرون صفحه‌ای عمل کند، تقریب معتبری است؛ تنها در نواحی بسیار نزدیک به تماس یا در همسایگی لایه مقید ممکن است از این رفتار عدول شود [۲]. در عین حال، برهم‌کنش‌های سه‌بعدی اتمی در نواحی حیاتی لحاظ شد تا مکانیزم‌هایی نظیر هسته‌زایی نابجایی، لغزش اتمی روی $\{111\}$ و رویدادهای ناپیوسته (مانند pop-in)

با دقت نزدیک به اتمی بازتاب یابند [۷، ۴۱]. این تلفیق «پیوسته صفحه ای» با «اتمی موضعی» همان منطق اصلی در روش شبه پیوسته (QC) است: در اطراف نوک و هر جا گرادیان کرنش زیاد است، دقت اتمی حفظ می شود و در نواحی دورتر، تقریب پیوسته (بر مبنای قاعده Cauchy-Born) با درجه آزادی کاهش یافته به کار می رود تا هزینه محاسباتی کنترل شود [۷، ۴۱]. برای کاهش هزینه محاسباتی و حذف اثرات مرزی غیرفیزیکی، لایه زیرین (نزدیک زیرلایه) مقید در نظر گرفته شد تا نقش تکیه گاه سخت را ایفا کند و از جابه جایی های صلب ناخواسته جلوگیری شود [۲]. افزون بر آن، در راستای ضخامت از شرایط مرزی تناوبی (PBC) استفاده شد تا اثر میدان های دور دست و برهم کنش با تکرارهای مجازی دامن به شکل همساز مدل شود و اندازه دامن محاسباتی بدون افزایش شدید تعداد اتم ها/المان ها مؤثرتر گردد.^۴ ترکیب «زیرلایه مقید» و «تناوب در راستای ضخامت» به مدل اجازه می دهد تا هم سختی تکیه گاهی فیلم را لحاظ کند و هم از بزرگ کردن بی رویه دامن برای تقلید محیط گسترده پرهیز شود [۲، ۷]. در ناحیه تماس، تماس ایندنتور صلب با فیلم با قیود نفوذناپذیری و (در صورت نیاز) اصطکاک مدل می شود؛ نیرو/جابجایی اعمالی به نوک مستقیماً به میدان های تنش/کرنش در زیر نوک کوپل شده و پاسخی تولید می کند که در منحنی نیرو-نفوذ ثبت می شود [۱، ۲]. از نظر گسسته سازی در QC، مجموعه ای از «اتم های نماینده» (repatoms) و «نقاط انتگرال گیری نمونه» انتخاب و شبکه محاسباتی به صورت سازگار با گرادیان کرنش ریز/درشت می شود؛ بدین ترتیب، چگالی گره ها در اطراف نوک و ریزساختارهای بحرانی بالا نگه داشته می شود و در دور دست کاهش می یابد. معیارهای تطبیقی (مثلاً آستانه انرژی کرنشی یا گرادیان جابه جایی) برای افزایش موضعی دقت در طول نفوذ به کار می روند تا مسیرهای لغزش فعال و شروع پلاستیسیته دقیق تر ردیابی شوند [۷، ۴۱]. این انتخاب های مدل سازی — plane stress — در ناحیه پیوسته، دقت اتمی در ناحیه بحرانی، زیرلایه مقید، و PBC — بین دقت فیزیکی (ثبات مکانیسم های اتمی زیر نوک) و پایداری/کارایی محاسباتی (کنترل تعداد درجات آزادی) توازن برقرار می کند و با اهداف نانوایندنتیشن فیلم های نازک (استخراج سختی، مدول و مطالعه رویدادهای ناپیوسته) هم راستاست [۱، ۲، ۷، ۴۱].

• **روش شبیه سازی:** چارچوب شبه پیوسته ی QC به کار گرفته شد؛ در این روش، در نواحی زیر نوک فرورونده دقت اتمی حفظ و سایر بخش ها با تقریب پیوسته مدل می شوند؛ بنابراین دقت موضعی با کارایی محاسباتی تلفیق می گردد.

• **فرورونده (ایندنتور):** ایندنتور به صورت جسم صلب مدل شد؛ فرض صلب بودن با توجه به نسبت مدول الاستیسیته بسیار بزرگ الماس نسبت به مس (چند برابر) توجیه پذیر است، بنابراین تغییر شکل نوک ناچیز

^۴ در عمل، PBC باعث می شود پاسخ موضعی در برش مدل سازی شده نماینده لایه های معادل در جهت تناوب باشد و نوسانات لبه ای کاهش یابد.

فرض می‌شود و تمام تغییر شکل در نمونه رخ می‌دهد. سه هندسه زیر در کار آقای قهرمانی بررسی گردیده است که البته ما یک نمونه، آن هم نمونه استوانه‌ای را بررسی نموده‌ایم در کار خودمان:

- استوانه‌ای، مستطیلی و Berkovich. نوک Berkovich یک هرم سه‌وجهی متقارن است که زاویه نیم‌رأس آن طوری انتخاب می‌شود که «سطح تماس تصویر شده» با نوک Vickers متناظر باشد.^۵ نوک استوانه‌ای تماس نزدیک به «خطی/سطحی» می‌سازد (در مقایسه با تماس نوک تیز هر می)، و نوک مستطیلی برای ایجاد میدان تنش با کشیدگی جهت‌دار به کار می‌رود.

- ابعاد: اندازه‌ها در بازه $10 \text{ \AA}$ تا $140 \text{ \AA}$ انتخاب شد تا «اثر اندازه نوک» بر میدان تنش/کرنش و روی داده‌هایی مانند pile-up یا sink-in ارزیابی شود؛ نسبت اندازه نوک به طول مقیاس زبری نیز در همین بازه‌ها پوشش داده شده است.

- نرخ نفوذ و شیوه بارگذاری: بارگذاری به صورت کنترل جابه‌جایی انجام شد و در هر گام، نوک به اندازه $10 \text{ \AA}$ در راستای نفوذ پیش‌رانده شد. «نرخ نفوذ» در اینجا به معنای میزان تغییر عمق نفوذ در واحد گام/زمان است؛ یعنی اگر $\Delta h = 10 \text{ \AA}$ و Δt مدت هر گام باشد، نرخ برابر $\dot{h} = \Delta h / \Delta t$ خواهد بود. در ادبیات نفوذ، گاهی «نرخ کرنش نفوذ» نیز به کار می‌رود که به صورت $\dot{\epsilon} = \dot{h} / h$ تعریف می‌شود.^۶ انتخاب گام کوچک ($10 \text{ \AA}$) برای رصد دقیق ناپیوستگی‌های ریز (مثلاً pop-in های کوتاه دامنه) ضروری است.

- هم خطی و شروع تماس: محور نوک با مرکز دامنه هم خط فرض شد و فاصله اولیه کوچکی تا سطح لحاظ گردید تا «برخورد ناگهانی» رخ ندهد. تشخیص تماس با تقاطع سطح نوک و توپولوژی شبکه انجام و قیود نفوذ ناپذیری اعمال شد.

- قانون تماس و اصطکاک: در حالت پایه، تماس بی‌اصطکاک مدل شد تا پاسخ الاستیک-پلاستیک ماده بدون پیچیدگی برشی مرزی بررسی شود؛ در صورت نیاز، ضریب اصطکاک کولمبی نیز قابل اعمال است. قیود تماس به صورت سفت و جز می با پارامتر پناستی تنظیم شده اعمال گردید تا «هم پوشانی مصنوعی» رخ ندهد و در عین حال همگرایی سریع باقی بماند.

- نکته مقیاسی: نوک‌های کوچک‌تر (مثلاً $10 \text{ \AA}$ تا $40 \text{ \AA}$) میدان برش را در حجم کوچک‌تری متمرکز می‌کنند و برای مشاهده هسته‌زایی اولیه نابجایی مناسب‌اند؛ نوک‌های بزرگ‌تر (تا $140 \text{ \AA}$) تماس

^۵ در تحلیل تماس شبه‌استاتیک، برای Berkovich غالباً از تابع سطح تماس استاندارد استفاده می‌شود؛ به طور ایده‌آل $A(h_c) \propto h_c^2$ (با h_c عمق تماس). در عمل، کالیبراسیون $A(h_c)$ به هندسه واقعی نوک وابسته است.
^۶ در شبیه‌سازی‌های QC که ماهیت شبه‌استاتیک دارند، گام‌ها نماینده «زمان کاذب» هستند؛ در نتیجه ثابت نگه داشتن Δh موجب نرخ نفوذ اسمی ثابت می‌شود و در هر گام تعادل مکانیکی برقرار می‌گردد.

گسترده تر و میانگین گیری فضایی قوی تری ایجاد می کنند و برای مطالعه اثر زبری «مقیاس کوچک در مقیاس درشت» مفیدند.

- **پیامدهای هندسه:** نوک هر می Berkovich به دلیل نوک تیزی، گرادیان کرنش شدیدتری نسبت به نوک استوانه ای تولید می کند و معمولاً در عمق های کم، سختی مؤثر بالاتری گزارش می شود؛ در مقابل، تماس استوانه ای/مسطحی برای بررسی پاسخ جهت دار (ناهمسان گردی مؤثر میدان) مناسب است.

• **زبر بودن سطح:** زبری سطح در بازه $2 \text{ \AA}$ تا $13 \text{ \AA}$ در نظر گرفته شد. پروفیل زبری با یک تابع سینوسی تصادفی مبتنی بر سری فوریه و تغییر دامنه، فاز و ضریب مقیاس ساخته شد.

• **نحوه اعمال به مدل:** پروفیل $z(x, y)$ به صورت جابه جایی هندسی به گره های سطحی اعمال شد. (بالارفتگی/افروفتگی سطحی) به طوری که ضخامت موضعی مثبت باقی بماند و با PBC هم خوان باشد. در نمونه های با زبری کوچک تر ($2-4 \text{ \AA}$)، تماس غالباً «چندآسپریتی کم دامنه» است و شروع تماس دیرتر رخ می دهد؛ در زبری های بزرگ تر ($10-13 \text{ \AA}$)، تماس زودتر و روی قله ها آغاز می شود، میدان تنش موضعاً متمرکزتر است و احتمال pile-up پیرامون اثر نوک افزایش می یابد. این تفاوت ها، حتی با یک دامنه نفوذ یکسان، می تواند شکل منحنی نیرو-نفوذ و توزیع جابه جایی (مانند الگوی sink-in در دره ها) را به صورت سیستماتیک دگرگون کند. برای مقایسه «زبری های متفاوت با آمار هم خانواده»، مجموعه پارامترها (R_q, ℓ_c, H) در چند سطح گسسته انتخاب شد؛ در هر سطح، فقط R_q تغییر کرد تا اثر «دامنه» از اثر «طیف فضایی» جداگانه تحلیل شود. این رویه امکان می دهد سهم هر مؤلفه-دامنه، طول مقیاس و ناهمسان گردی-در پاسخ تماس به طور مستقل سنجیده شود، بدون آن که به هندسه نوک یا سایر بخش های مدل وابسته باشد.

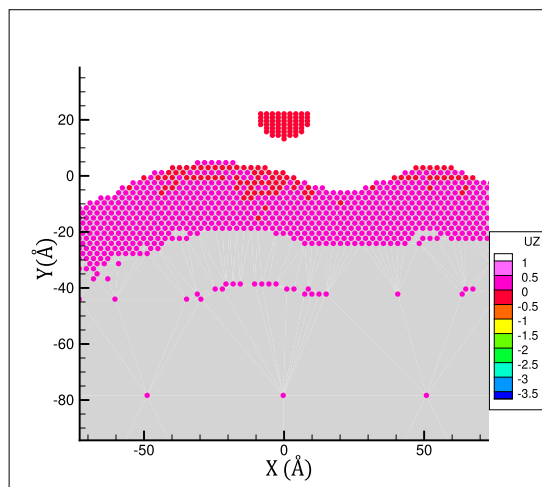
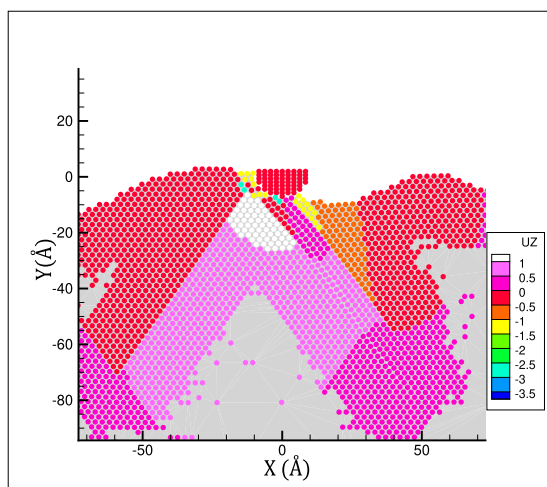
• **جهت گیری بلوری:** دو راستای بلوری Orientation I و Orientation II بررسی شد (تفاوت در هم راستایی شبکه بلوری نسبت به ایندنتور).

• **تعداد نمونه ها:** با ترکیب همه حالت های هندسه و اندازه ایندنتور، دامنه زبری و جهت گیری بلوری، در مجموع ۴۴۲ حالت مستقل شبیه سازی و داده استخراج شد.

برای «نمونه مبنا»، ماده مورد مطالعه «مس» با زبری سطحی $2 \text{ \AA}$ و فرورونده صلب معادل نوک الماسی متداول در آزمایش ها در نظر گرفته شد. هندسه فرورونده استوانه ای بوده و قطر آن $20 \text{ \AA}$ است.

شکل های ۱.۲ و ۲.۲ فرایند فروروندگی را-رندر شده در Tecplot^v- در گام های زمانی ۰ و ۲۰۲ نشان

^vTecplot: نرم افزار مصورسازی و ترسیم جابجایی ها و نتایج عددی.



شکل ۲.۲: نفوذ فرورونده در ماده در گام زمانی ۲۰۲ (برگرفته از خروجی شبیه‌سازی QC).

شکل ۱.۲: پیکربندی آغازین فرورونده و ماده در گام زمانی ۰ (برگرفته از خروجی شبیه‌سازی QC).

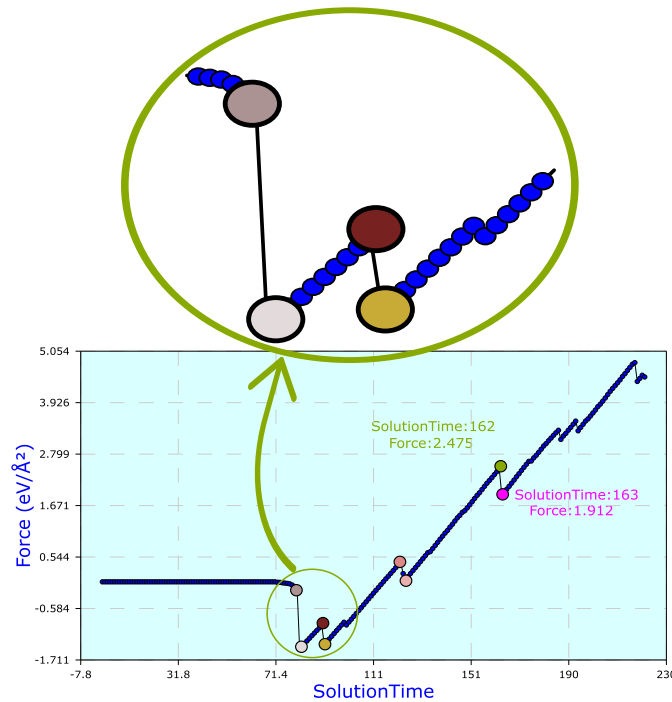
می‌دهند. در هر گام زمانی، فرورونده در راستای y به اندازه $1 \text{ \AA}$ به سمت لایه مسی جابه‌جا می‌شود و در مجموع شبیه‌سازی تا گام ۲۲۱ ادامه دارد. شکل ۳.۲ نیروی واکنشی وارد از سوی ماده به فرورونده را در گام‌های گسسته $\text{SolutionTime}^{\wedge}$ نشان می‌دهد. در $\text{SolutionTime}=162$ یک جهش رخ می‌دهد و نیروی واکنشی به‌طور ناگهانی افت می‌کند (نگاه کنید به شکل ۴.۲). نیمرخ نفوذ فرورونده در ماده نیز برای این دو گام نمایش داده شده است. همچنین اگر برای نقطه‌های لایت‌شده در شکل، مؤلفه U_z^9 را برحسب SolutionTime ترسیم کنیم، در همان گام ناپیوستگی متناظری در U_z دیده می‌شود.

اگر یک ترنسفورمر بتواند U_z را بیاموزد و چنین ناپیوستگی‌هایی را در نقاط مکانی انتخابی ثبت کند (شکل ۵.۲)، فهم پاسخ ماده و در نتیجه نیروی واکنشی وارد بر فرورونده در طول گام‌های زمانی به‌شکل معناداری بهبود می‌یابد. هرچند آموزش مدلی که این رفتار را به‌طور باثبات پیش‌بینی کند، چالش‌برانگیز است. کار مرتبط Ghahremani و Mohammadi [۱۵] از یک مدل یادگیری عمیق چندوظیفه‌ای برای یادگیری دو ناپیوستگی نخست در منحنی نیرو- SolutionTime بهره گرفته است (نگاه کنید به شکل ۳.۲). هدف ما، با این حال، کندوکاو سازوکار زیربنایی، با تمرکز بر «فعالیت نابعایی‌ها» است که از علل اصلی شکستگی‌های سیگنال نیرو به‌شمار می‌رود. این موضوع مسئله را به‌مراتب دشوارتر می‌کند: ماده شامل هزاران نقطه مکانی است که هرکدام پاسخ سری زمانی مستقل خود را دارند. بنابراین هدف آن است که «تمام این سری‌ها» آموخته شوند تا برای هر مختصات دلخواه (x, y) ، ترنسفورمر بتواند پاسخ موضعی U_z را-با تمام نوسان‌ها و ناپیوستگی‌ها-مدل کند و نیز روند کلی را تا ۱۲ گام آینده پیش‌بینی نماید. بنا بر آگاهی ما تا لحظه نگارش این رساله، کاری که به‌طور هم‌زمان (i) کل خانواده

$\text{SolutionTime}^{\wedge}$: شاخص گام زمانی که در این پایان‌نامه استفاده کرده‌ایم.

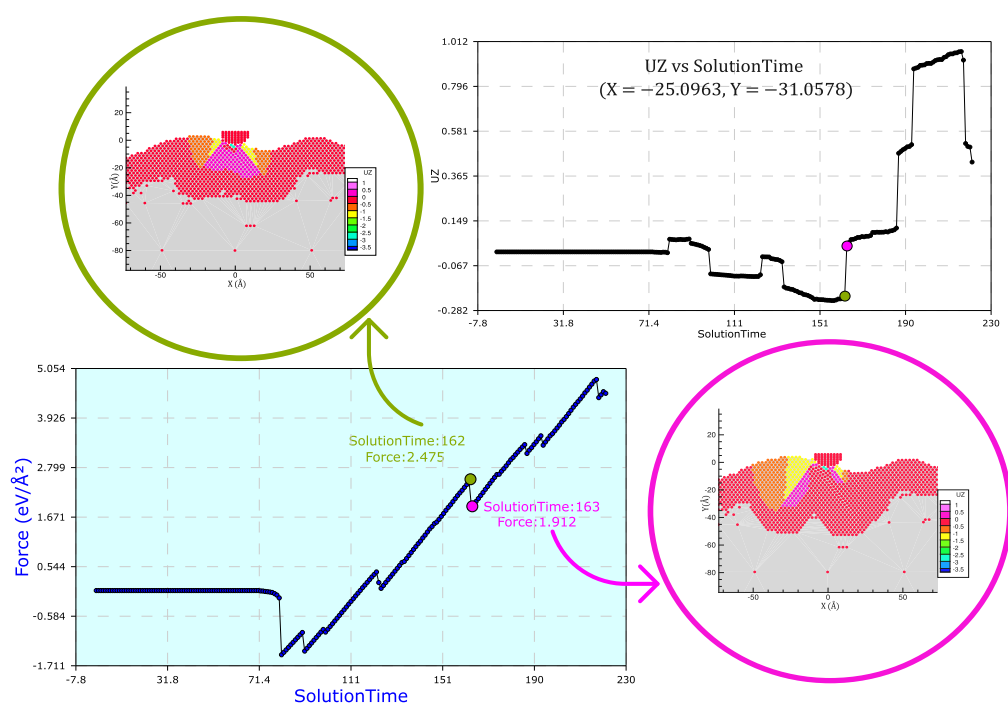
U_z^9 : مؤلفه جابه‌جایی در راستای z .

سری‌های زمانی موضعی UZ را در مختصات دلخواه (x, y) از داده‌های QC نانوایندنتیشن بیاموزد و (ii) روند آن‌ها را ۱۲ گام جلوتر پیش‌بینی کند، گزارش نشده است؛ از این‌رو مبنای مقایسه مستقیم در این صورت‌بندی خاص در دسترس نیست.

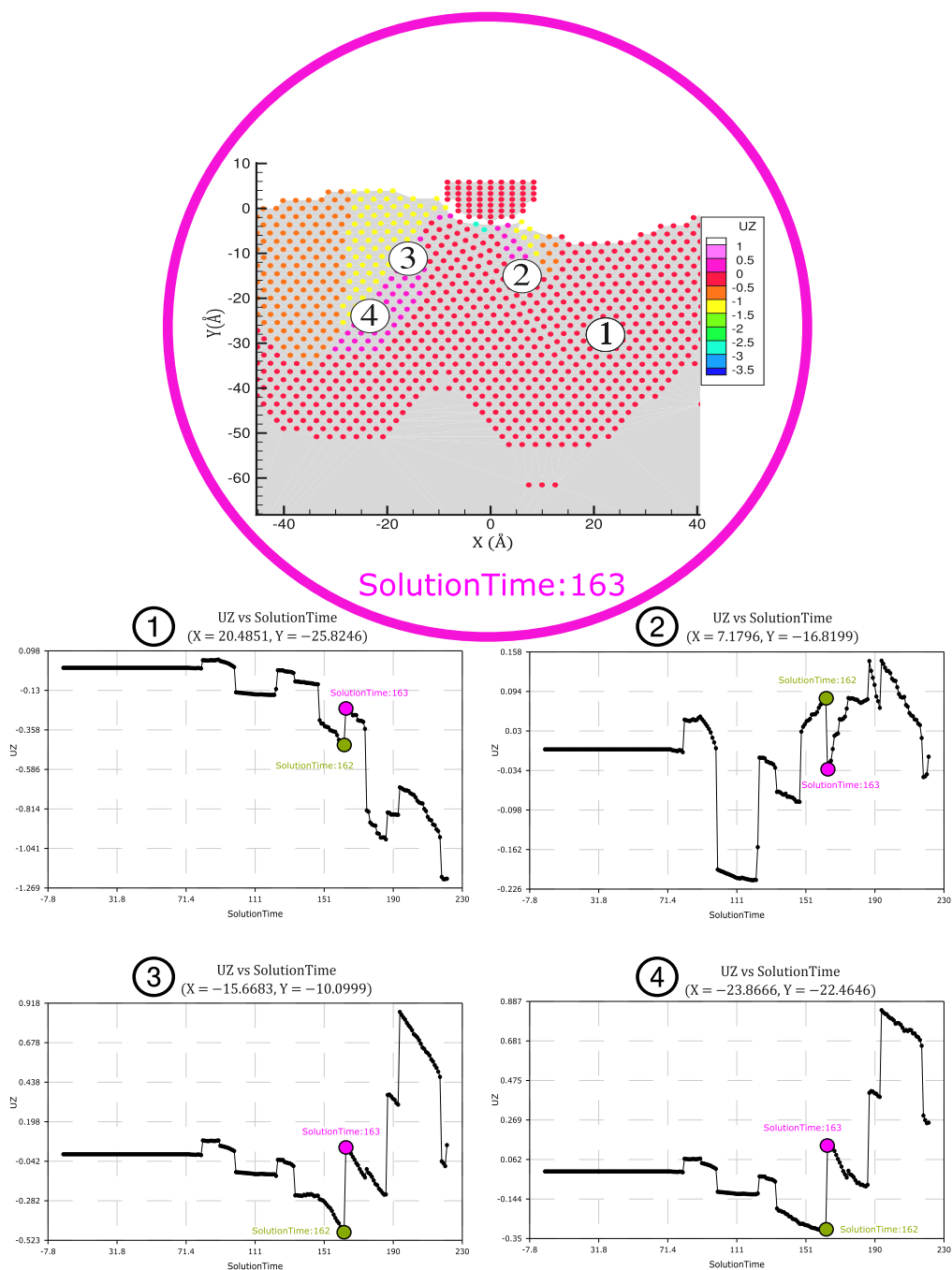


شکل ۳.۲: نمودار نیرو برحسب SolutionTime که ناپیوستگی‌ها را در برخی گام‌ها نشان می‌دهد.

در آغاز فرایند آموزش ترنسفورمر، داده‌های مدل در یک فایل `.dat` ذخیره می‌شوند. این فایل شامل اطلاعات گام‌های زمانی از ۰ تا ۲۲۱ است و داده‌های گره‌ها در شش ستون X, Y, Z, UX, UY, UZ چیده شده‌اند. تعداد گره‌ها در هر گام زمانی متغیر است و با پیشروی شبیه‌سازی به سبب افزایش تفکیک محاسباتی در نواحی بحرانی - بر تعداد گره‌ها افزوده می‌شود. ساختار فایل `.dat` در جدول ۲.۲ آمده است و داده کامل با دقت اعشاری بالاتر که با آن پژوهش را انجام داده‌ایم، در جدول ۱.۲ مشاهده می‌کنیم. اگر فایل `.dat` را باز کنیم، ساختار داده‌ها همان‌طور که در جدول ۱.۲ دیده می‌شود، شامل ستون‌های مختصات و جابه‌جایی‌ها است. جدول ۱.۲ ابتدای فایل را نشان می‌دهد که شامل سرآیند (مقادیر اولیه `SolutionTime` و فهرست گره‌ها) و چند ردیف نخست داده‌ها است؛ همچنین انتهای فایل را نیز نمایش می‌دهد که آخرین گام‌های زمانی و مقادیر متناظر ستون‌ها را نشان می‌دهد. این جدول به خوبی نشان می‌دهند که داده‌ها برای هر گام زمانی به صورت بلوک‌های مجزا ذخیره شده‌اند و تعداد خطوط داده در انتهای بلوک پایانی به حدود ۸۲۱ هزار می‌رسد.



شکل ۴.۲: نفوذ فرورونده در ماده در گام‌های ۱۶۲ و ۱۶۳ SolutionTime (برگرفته از خروجی شبیه‌سازی QC). در نمودار نیرو-SolutionTime میان این دو گام ناپیوستگی رخ می‌دهد. نمودار UZ-SolutionTime برای مختصات هایلایت شده نیز همین ناپیوستگی را نشان می‌دهد.



شکل ۵.۲: نمودارهای UZ-SolutionTime برای چهار نقطه انتخابی.

جدول ۱.۲: نمایی از محتویات فایل dat - بلوک ابتدایی و انتهایی فایل

```
TITLE = "disp time = 0.1000 prop = 0.1000"
VARIABLES =
"X"
"Y"
"Z"
"UX"
"UY"
"UZ"
ZONE T="ZONE ONE"
STRANDID=1, SOLUTIONTIME=0
Nodes=3349, Elements=5820, ZONETYPE=FEQuadrilateral
DATAPACKING=POINT
DT=(SINGLE SINGLE SINGLE SINGLE SINGLE SINGLE )
-8.348480225E+00 2.214450073E+01 3.689539909E+00 0.000000000E+00 -1.000000015E-01
0.000000000E+00
-8.348480225E+00 2.086639977E+01 1.475819945E+00 0.000000000E+00 -1.000000015E-01
0.000000000E+00
:
:
ZONE T="ZONE ONE"
STRANDID=1, SOLUTIONTIME=221
Nodes=5411, Elements=9944, ZONETYPE=FEQuadrilateral
DATAPACKING=POINT
DT=(SINGLE SINGLE SINGLE SINGLE SINGLE SINGLE )
9.978330078E+02 -5.449640155E-01 1.278679967E+00 -5.074619874E-02 4.253619909E-02
5.867920117E-04
9.952769775E+02 -5.462629795E-01 1.278679967E+00 -5.067029968E-02 4.123720154E-02
5.888530286E-04
:
:
```

جدول ۲.۲: داده های خام آغازین ذخیره شده در فایل dat ..

SolutionTime = 0 Nodes = 3349						
	X	Y	Z	UX	UY	UZ
1	-8.348480E+00	2.214450E+01	3.689539E+00	0.000000E+00	-1.000000E-01	0.000000E+00
2	-8.348480E+00	2.086639E+01	1.475819E+00	0.000000E+00	-1.000000E-01	0.000000E+00
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
3349	9.978779E+02	-5.786520E-01	1.278100E+00	-5.568129E-03	8.848009E-03	1.001400E-16

SolutionTime = 1 Nodes = 3349						
	X	Y	Z	UX	UY	UZ
1	-9.984949E+02	-5.783810E-01	1.278100E+00	5.680240E-03	9.118829E-03	-2.246299E-18
2	-9.959390E+02	-5.785269E-01	1.278100E+00	5.680240E-03	8.972769E-03	5.398009E-18
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
3349	8.348480E+00	2.204450E+01	7.379090E-01	0.000000E+00	-2.000000E-01	0.000000E+00

SolutionTime = 221 Nodes = 5411						
	X	Y	Z	UX	UY	UZ
1	9.978330E+02	-5.449640E-01	1.278679E+00	-5.074619E-02	4.253619E-02	5.867920E-04
2	9.952769E+02	-5.462629E-01	1.278679E+00	-5.067029E-02	4.123720E-02	5.888530E-04
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
5411	-5.691640E+01	-2.630089E+01	-5.722830E-01	-3.716079E-01	-2.215919E+00	-5.722830E-01

مهم ترین ستون، UZ است. از آن جا که شبکه ترنسفورمر در PyTorch^{۱۰} پیاده سازی شده، کاهش ابعاد تنسورها مستقیماً نیاز RAM را کم می کند. بنابراین، به جای تعریف یک بُعد جداگانه برای زمان حل، یک ستون واحد در ابتدای فایل dat. افزوده می شود تا گام زمانی متناظر را نمایش دهد. علاوه بر این، ستون های Z، UX و UY- که برای تحلیل حاضر لازم نیستند- حذف شده اند. قالب فایل نیز به csv. تبدیل می شود و ساختار نهایی داده ها در جدول ۳.۲ آمده است.

^{۱۰}PyTorch: چارچوب یادگیری عمیق برای پیاده سازی شبکه های عصبی.

جدول ۳.۲: داده‌ها پس از نخستین مرحله پیش‌پردازش - ذخیره‌شده در یک فایل CSV ..

SolutionTime = 0 Lines = 3349			
SolutionTime	X	Y	UZ
0	-8.348480225E+00	2.214450073E+01	0.000000000E+00
⋮	⋮	⋮	⋮
0	9.978779907E+02	-5.786520243E-01	1.001400004E-16

SolutionTime = 1 Lines = 3349			
SolutionTime	X	Y	UZ
1	-9.984949951E+02	-5.783810019E-01	-2.246299943E-18
⋮	⋮	⋮	⋮
1	8.348480225E+00	2.204450035E+01	0.000000000E+00

⋮

SolutionTime = 221 Lines = 5411			
SolutionTime	X	Y	UZ
221	9.978330078E+02	-5.449640155E-01	5.867920117E-04
⋮	⋮	⋮	⋮
221	-5.691640091E+01	-2.630089951E+01	-5.722830296E-01

این داده‌ها به‌عنوان ورودی شبکه ترنسفورمر استفاده می‌شوند؛ بدین معنا که SolutionTime، X و Y نقش ورودی و UZ نقش خروجی هدف را بر عهده دارد.

فصل ۳

کارهای انجام شده

۱.۳ مرور کار قهرمانی و همکاران و داده‌های تولیدی آنها

هدف کار قهرمانی و همکاران [۴۱] تولید یک پایگاه داده تمیز و نظام مند از پاسخ‌های نانوایندنتیشن فیلم نازک مسی با استفاده از چارچوب چندمقیاسی QC بود تا بتوان اثرات هندسه نوک، زبری سطح و جهت‌گیری بلوری را به صورت تفکیک پذیر بررسی کرد و منحنی‌های نیرو-نفوذ و میدان‌های جابه‌جایی/تنش متناظر را استخراج نمود. آنها به طور خاص بر رخدادهای ناپیوسته زیر نوک (نظیر pop-in) و حساسیت پاسخ به پیکربندی‌های مختلف تمرکز داشتند.

پیکربندی ماده و دامنه

نمونه، فیلمی از مس بلوری با ساختار FCC بود. در ناحیه نزدیک تماس (زیر نوک)، مدل با دقت اتمی (ناحیه اتمی QC) و در نواحی دورتر با تقریب پیوسته حل شد تا هزینه محاسباتی کنترل شود. لایه زیرین نقش تکیه‌گاه سخت را ایفا می‌کرد (مقیدسازی زیرلایه) و برای حذف اثرات لبه، از شرایط مرزی تناوبی (PBC) در راستای ضخامت/صفحه استفاده شد. این چالش امکان می‌داد پاسخ موضعی زیر نوک با کمترین آرتیفکت مرزی استخراج شود، در حالی که ابعاد مدل در حد قابل قبول باقی بماند.

نفوذکننده و سناریوهای تماس

ایندنتور به صورت جسم صلب مدل شد (با توجه به سختی بسیار بالاتر الماس نسبت به مس). سه هندسه مجزا به کار رفت:

- نوک‌های استوانه‌ای، مستطیلی و Berkovich؛
 - اندازه مشخصه در بازه $10 \text{ \AA}$ تا $140 \text{ \AA}$ برای پوشش اثر اندازه نوک؛
 - بارگذاری جابه‌جایی محور با «نرخ نفوذ» گامی $1/10 \text{ \AA}$ (در هر گام، عمق نفوذ به میزان $1/10 \text{ \AA}$ افزایش می‌یابد) تا امکان رصد دقیق رویدادهای ناپیوسته فراهم شود.
- هندسه هر نوک میدان‌های تنش/کرنش متفاوتی ایجاد می‌کند؛ مثلاً نوک هر می Berkovich گرادین‌های تندتری نزدیک نوک می‌سازد و برای آشکارسازی pop-in‌های اولیه حساس‌تر است، در حالی که نوک‌های استوانه‌ای/مستطیلی برای مطالعه پاسخ‌های جهت‌دار و تماس‌های «پخت‌تر» مناسب‌اند.

مدل‌سازی زبری سطح

برای سطح فیلم، پروفیل‌های زبری با دامنه‌های واقع‌گرایانه در بازه $2 \text{ \AA}$ تا $13 \text{ \AA}$ اعمال شد. پروفیل‌ها به صورت سری فوریه تصادفی ساخته شدند (گزینش بسامدها/فازها/ضرایب مقیاس به گونه‌ای که هم دامنه و هم طول مقیاس‌های غالب به صورت کنترل‌شده تغییر کند) تا خانواده‌ای از سطوح با آمار هم‌خانواده ولی دامنه‌های متفاوت حاصل شود. این کار اجازه داد اثر «دامنه زبری» از اثر «طیف فضایی» تفکیک و سهم هر کدام در تماس چندآسپریتی روشن شود. تماس در زبری‌های کوچک‌تر اغلب دیرتر و روی چند آسپریت کوچک آغاز می‌شود و در زبری‌های بزرگ‌تر زودتر و روی قله‌ها شروع شده و به تمرکز تنش و pile-up بیشتر پیرامون اثر نوک می‌انجامد.

بلورشناسی و راستاها

دو جهت‌گیری بلوری متمایز (Orientation I و Orientation II) نسبت به راستای نفوذ بررسی شد تا حساسیت پاسخ به فراکنی سامانه‌های لغزش $\{110\}$ و $\{111\}$ روی راستای بارگذاری سنجیده شود. این انتخاب، تفاوت در Schmid factorها و ترتیب فعال‌شدن سامانه‌های لغزش را به طور مستقیم در منحنی‌های نیرو-نفوذ بازتاب می‌دهد.

بروندادهای محاسباتی و قالب داده

- برای هر سناریو، شبیه سازی در گام های نفوذ متوالی اجرا شد و در هر گام، کمیت های زیر ثبت گردید:
 - منحنی نیرو-نفوذ (بار واکنشی نوک در برابر عمق/زمان حل) با دقت کافی برای آشکارسازی شکست های ریز و pop-in؛
 - میدان های جابه جایی (به ویژه مؤلفه عمودی UZ) و مختصات (X,Y) نقاط نمونه؛
 - فرااطلاعات گام حل (SolutionTime) برای ایندکس گذاری یکنواخت سری ها در همه حالت ها.
- داده ها در ابتدا در قالب dat ذخیره شد و سپس برای استفاده پایین دستی (در این پایان نامه) با افزودن ستون SolutionTime و حذف ستون های غیر ضروری به csv تبدیل گردید تا بار حافظه و پیچیدگی خوانش کاهش یابد.

پوشش پارامتری و شمار نمونه ها

با ترکیب سه هندسه نوک، بازه اندازه 10 Å تا 140 Å ، دامنه های زبری 2 Å تا 13 Å و دو جهت گیری بلوری، در مجموع ۴۴۲ سناریوی مستقل شبیه سازی و داده برداری شد. این پوشش، طیفی از حالات تماس از «چندآسپریتی کم دامنه» تا «پُرآسپریتی پُر دامنه» و از «نوک تیز» تا «نوک پخ» را شامل می شود.

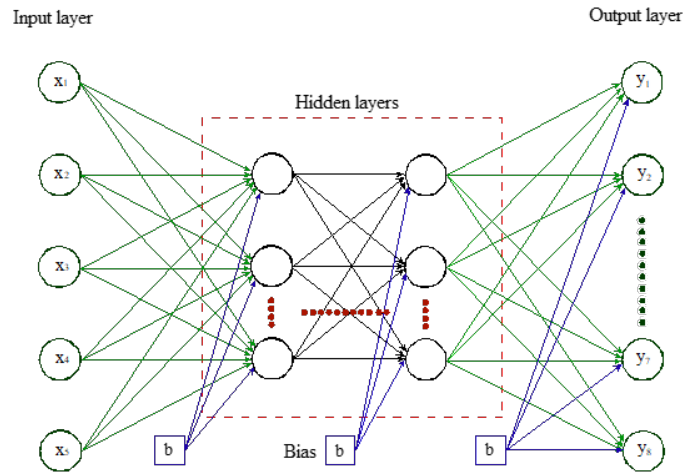
جایگاه این داده ها در کار حاضر

داده های [۴۱] به عنوان منبع اصلی «سری های زمانی موضعی UZ» و «منحنی های نیرو-نفوذ» در این پایان نامه به کار گرفته می شود. قالب دهی یکنواخت (افزودن SolutionTime و تبدیل به csv) و تنوع پارامتری سناریوها، بستری مناسب برای آموزش/اعتبارسنجی مدل های یادگیر-به ویژه در تحلیل رخداد های ناپیوسته-فراهم می کند، بی آن که نیاز به تکرار محاسبات سنگین شبیه سازی باشد.

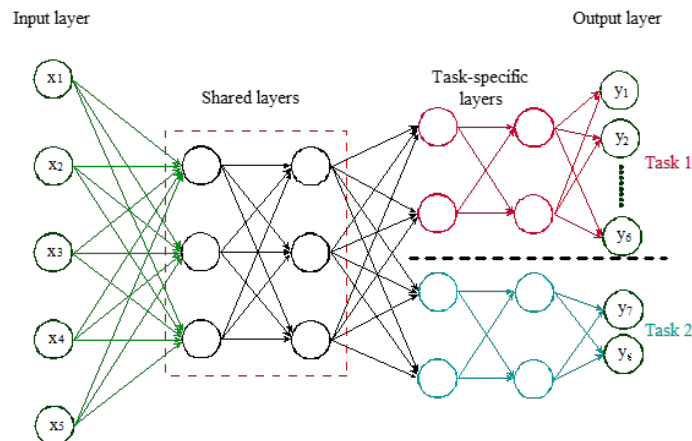
چارچوب یادگیری در کار قهرمانی و همکاران: ورودی ها، خروجی ها و هدف

هدف کلی. کار Ghahremani یک چارچوب یادگیری عمیق ارائه می کند که با تکیه بر داده های شبیه سازی QC، وقوع و کمیت های «رویدادهای ناپیوسته» را همراه با سنجه های کلیدی مکانیکی پیش بینی کند؛ به طوری که

به جای اجرای جابجایی محاسباتی پرهزینه، برای ترکیب‌های جدید هندسه/زبری/جهت‌گیری بتوان نتایج را به سرعت برآورد کرد. ساختارهای مدل در شکل‌های ۱.۳ و ۲.۳ نشان داده شده‌اند: معماری ANN پایه و مدل چندوظیفه‌ای MTL.



شکل ۱.۳: معماری ANN



شکل ۲.۳: معماری MTL

ورودی‌ها (ویژگی‌ها). بردار ورودی از پارامترهای آزمایش نانوایندنتیشن ساخته شده است (نگاه کنید به «فهرست ورودی‌ها» در [۴۱] و تشریح معماری در شکل‌های ۴ و ۵):

- هندسه نوک (indenter shape): یکی از Berkovich، استوانه‌ای یا مستطیلی (شکل‌های ۴ و ۵ [۴۱])
نمای کلی شبکه‌ها را نشان می‌دهد.

- اندازه‌نوک (size/diameter): در بازه‌آنگسترومی (همان دامنه ۱۰ تا ۱۴۰ Å که در داده QC آمده است).
- زبری سطح (surface roughness، معمولاً R_q): در بازه ۲ تا ۱۳ Å.
- جهت‌گیری بلوری (crystallographic orientation): دوراستای گزارش شده در [۴۱] (در تحلیل‌های روند، اثر جهت‌گیری در شکل‌های ۱۴ و ۱۵ [۴۱] مقایسه شده است).
- موقعیت نوک نسبت به پروفیل زبری (indenter position): تماس روی قله/شیب/دره (برای اثر آغاز تماس روی رخداد ناپیوسته‌ها؛ فهرست ویژگی‌ها در متن [۴۱]).

خلاصه کار Ghahremani (مرجع [۱۵] [۴۱])

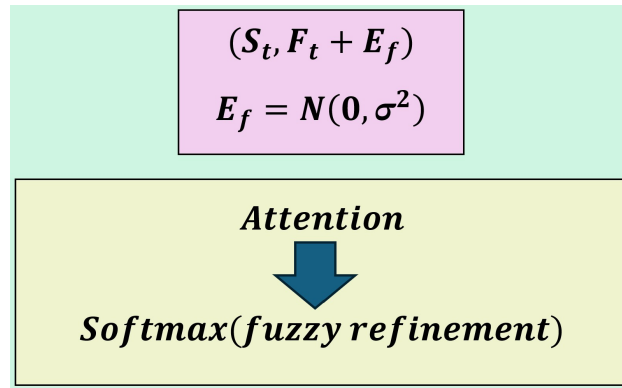
در این کار، به‌جای بازسازی کامل منحنی نیرو-نفوذ، تمرکز صرفاً بر اولین ناپیوستگی یا است؛ به‌عبارت دیگر، هدف اصلی پیش‌بینی بار بحرانی نخست و ویژگی‌های همراه آن از روی سناریوهای شبیه‌سازی QC است [۴۱]. بردار ویژگی‌های ورودی شامل نوع نوک فرورونده (indenter type: استوانه‌ای/مسطحی/Berkovich)، اندازه نوک (size)، شاخص‌های زبری سطح (surface roughness) و جهت‌گیری بلوری (crystal orientation) است؛ و خروجی‌های کلیدی عبارت‌اند از:

- وقوع/مکان first pop-in روی منحنی نیرو-نفوذ (تشخیص ناپیوستگی اول)،
- مقدار بار بحرانی نخست (first critical load) در لحظه آغاز نابجایی،
- اندازه افت بار بلافاصله پس از رویداد (load drop magnitude).

دو معماری یادگیری پیاده‌سازی و مقایسه شد: شبکه پایه ANN برای نگاشت مستقیم ویژگی‌ها به کمیت‌های فوق، و چارچوب چندوظیفه‌ای MTL که پیش‌بینی اهداف مرتبط (وقوع رویداد، بار بحرانی، افت بار) را به‌طور هم‌زمان انجام می‌دهد. نتیجه نشان می‌دهد که MTL به‌سبب هم‌افزایی نمایه‌های مشترک میان وظایف نزدیک، پایداری و دقت تخمین first pop-in را نسبت به ANN پایه بهبود می‌دهد. بدین ترتیب، بدون اجرای دوباره شبیه‌سازی‌های پرهزینه QC، می‌توان برای ترکیب‌های جدید هندسه/زبری/جهت‌گیری، first pop-in و first critical load را سریع و کم‌هزینه برآورد کرد [۱۵].

۲.۳ منحنی نیرو-نفوذ و ترنسفورمر فازی

معماری ترنسفورمر یکی از پیشرفته‌ترین ساختارهای یادگیری عمیق است که ابتدا در حوزه‌ی پردازش زبان طبیعی معرفی شد. ایده‌ی محوری ترنسفورمر، بهره‌گیری از سازوکار توجه برای یافتن وابستگی‌های درازمدت و چندسویه در یک توالی داده است؛ بدون اینکه نیاز باشد، مانند شبکه‌های بازگشتی، ورودی به صورت ترتیبی پردازش شود یا مانند شبکه‌های پیچشی، از عملیات پیچشی و فیلترهای موضعی استفاده گردد. این ویژگی، ترنسفورمر را به ابزاری قدرتمند برای انواع داده‌های ترتیبی و سری‌های زمانی پیچیده تبدیل کرده است. در شبیه‌سازی یا تحلیل نانوایندنتیشن، داده‌ها می‌توانند به صورت سری‌های زمانی نیروی واردشده و یا عمق فرورفتگی در طول زمان ثبت شوند. ما سری‌های زمانی را به صورت نیروی وارد شده در گام‌های زمانی مختلف در نظر گرفته‌ایم. همچنین، در مقیاس‌های اتمی، مثلاً در بخش اتم‌های پیرامون نوک ایندنتور، تا مقیاس‌های میکروسکوپی داده‌ی مکانی وجود دارد. اخیراً چارچوب‌هایی برای خودکارسازی نانوایندنتیشن پیشنهاد شده‌اند که با استفاده از یادگیری ماشین و تطبیق تصاویر، مدیریت داده‌ها و تحلیل آن‌ها را دقیق‌تر و سریع‌تر می‌کنند [۴۲]. یک مدل ترنسفورمر می‌تواند داده‌ها را به بخش‌های مجزا تقسیم کرده و سپس از طریق مکانیسم توجه، روابط میان این بخش‌ها را یاد بگیرد. در واقع ساختار داده‌های ثبت شده و آماده برای یادگیری به صورت (S_t, F_t) است که در آن S_t زمان، F_t نیز نیروی وارده بر ایندنتور در زمان t است. نکته قابل توجه در تحلیل و پیش‌بینی سری زمانی فوق، احتمال وجود خطا در داده‌های ورودی به واسطه کوچک نبودن مقیاس المان‌ها به اندازه کافی، خطاهای محاسباتی در مقیاس‌های خیلی کوچک و خطاهای اندازه‌گیری است. برای کاهش برخی از این خطاها، استفاده از مکانیزم توجه فازی پیشنهاد شده است [۴۳]. با توجه به عدم در اختیار داشتن اطلاعات دقیق در ارتباط با نوع خطاها، آن‌ها را به صورت اعداد فازی گاوسی که برای خطاهای عمومی رایج هستند در نظر خواهیم گرفت. یک مدل مناسب برای مدلسازی این جمله خطا، استفاده از اعداد فازی گاوسی با میانگین صفر و واریانس کوچک است. به علاوه در مکانیزم توجه، محاسبه امتیاز تابع احتمال سافت‌مکس را می‌توان روی یک ورودی فازی انجام داد و به این ترتیب می‌توان عدم قطعیت‌ها را به طور مستقیم در توزیع توجه مدل کرد [۴۳، ۴۴]. در واقع، می‌توان فرض کرد که تمام محاسبات اعم از مرحله حل در ابعاد کوچک و مراحل یادگیری و پیش‌بینی دارای عدم قطعیت است. مسأله‌ای که ما برای تحلیل انتخاب کرده‌ایم، ماده‌ای از جنس مس می‌باشد. با این حال برای مدل ترنسفورمر ما تفاوتی نمی‌کند که ماده از چه جنسی بوده است و برای تحلیل تنها به عنوان یک داده ورودی به آن نگاه خواهیم کرد. در بخش اول، انگیزه از ایجاد ساختار فازی، در نظر گرفتن خطا در نتایج محاسبات قبلی است. برای مثال، چارچوب FANTF با بهره‌گیری از توابع عضویت گاوسی قادر است عدم قطعیت و نویز در سری‌های زمانی را مدیریت کند [۴۳]. در بخش دوم، برای محاسبه عملگر احتمال مکانیزم توجه، سه نوع عدد فازی در نظر می‌گیریم و نتایج را گزارش و مقایسه می‌کنیم؛ مشابه به آنچه در رویکردهای ترکیبی یادگیری عمیق با لایه توجه فازی در



شکل ۳.۳: طرح کلی شبکه ترنسفورمر فازی

داده‌های عصبی مشاهده شده است [۴۵، ۴۶]. علاوه بر این، مدل‌های هیبرید مانند ترکیب گراف توجه فازی با ترنسفورمر برای جبران نویز و داده‌های ناقص، نشان داده‌اند که می‌توان در ورودی‌های حساس، دقت و پایداری را افزایش داد [۴۷]. آنچه ما در نهایت به دنبال آن هستیم، نیرویی است که به ایندنتور وارد می‌شود. بنابراین طرح کلی شبکه در این حالت مطابق شکل ۳.۳ خواهد بود و ورودی داده‌ها مطابق $(S_t, F_t + E_f)$ است. در ادامه سه نوع عدد فازی معروف را معرفی می‌کنیم که در بخش دوم محاسبات استفاده کرده‌ایم.

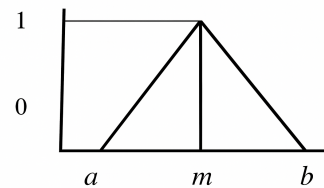
عدد فازی مثلثی

یکی از ساده‌ترین و پرکاربردترین انواع اعداد فازی است. این عدد با سه مقدار تعریف می‌شود:

- a : حد پایین (کوچک‌ترین مقدار ممکن)
- m : مقدار اوج (جایی که درجه عضویت برابر با ۱ است)
- b : حد بالا (بزرگ‌ترین مقدار ممکن)

به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mu(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x \leq a \\ \frac{x-a}{m-a} & \text{if } a < x \leq m \\ \frac{b-x}{b-m} & \text{if } m < x < b \\ 0 & \text{if } x \geq b \end{cases}$$



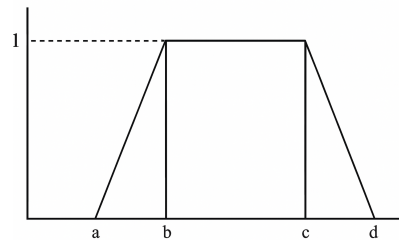
عدد فازی ذوزنقه‌ای

این عدد با چهار مقدار تعریف می‌شود:

- a : نقطه شروع (جایی است که درجه عضویت از صفر آغاز می‌شود)
- b : ابتدای بخش ضلع بالا
- c : انتهای بخش ضلع بالا
- d : نقطه‌ی پایان (جایی است که درجه عضویت دوباره به صفر می‌رسد)

به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mu(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a} & \text{if } a < x \leq b \\ 1 & \text{if } b < x < c \\ \frac{d-x}{d-c} & \text{if } c < x < d \\ 0 & \text{if } x \geq d \end{cases}$$

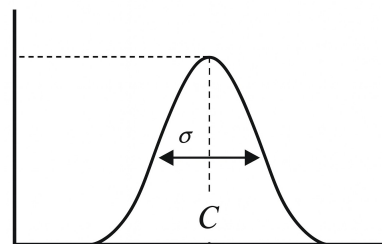


عدد فازی گاوسی

تابع عضویت در این عدد بر اساس تابع توزیع نرمال (یا گاوسی) تعریف می‌شود:

- c : مرکز عدد فازی است؛ یعنی مقداری که درجه‌ی عضویت در آن بیشینه (برابر با ۱) است.
- σ : انحراف معیار است؛ هرچه مقدار آن بزرگ‌تر باشد، منحنی تابع عضویت پهن‌تر می‌شود.

$$\mu(x) = \exp\left(-\frac{(x-c)^2}{2\sigma^2}\right)$$



۳.۳ نتایج اصلی

نمودار نیرو-جابجایی که جهت تحلیل، یادگیری و پیش‌بینی انتخاب کرده‌ایم، از روش‌های QC بدست آمده‌اند. ماده‌ای که بررسی می‌گردد از جنس مس می‌باشد که **زبری^۱ آن برابر ۲** است. در ادبیات نانوایندنتیشن مشخص شده که زبری سطح رابطه مستقیم با عدم قطعیت در تشخیص نقطه تماس اولیه دارد؛ به طوری که انحراف نیرو-جابجایی با افزایش زبری بیشتر می‌شود و خطاها در سختی و مدول وارد شده تا ۵%-۱۰% افزایش می‌یابد [۴۹، ۴۸]. همچنین مشخصات نفوذکننده نیز از جنس مس بوده ولی از آنجا که آن را صلب در نظر گرفته‌ایم، تفاوتی نمی‌کند با نفوذکننده از جنس الماس که در کارهای آزمایشگاهی از آن استفاده می‌شود. نفوذکننده نیز استوانه‌ای شکل می‌باشد که قطر نفوذکننده آن 10 Å است.

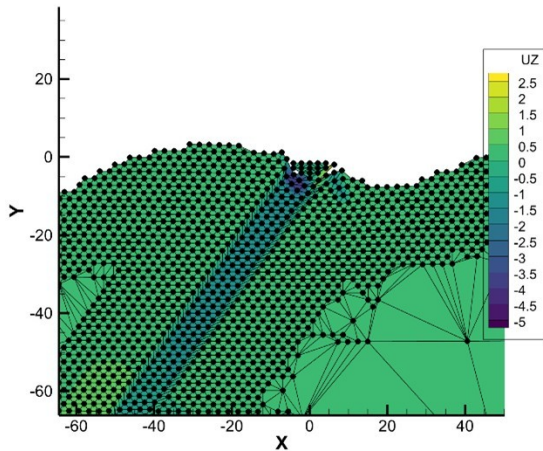
در شکل ۴.۳ و ۵.۳، نفوذ ایندنتور در ماده که در برنامه تکپلات به نمایش درآمده را به عنوان نمونه در گام‌های زمانی صفر و ۱۵۵ مشاهده می‌کنیم. در هر گام زمانی، ایندنتور به میزان ۱ آنگستروم در جهت y به سمت ماده حرکت می‌کند. در کل نیز اطلاعات را تا گام زمانی ۳۰۳ در اختیار داریم. در شبکه ترنسفورمر، با توجه به پیچیدگی داده‌ها ۹۲ درصد از داده‌ها را برای آموزش و ۸ درصد را برای آزمون از همدیگر جداسازی کرده‌ایم. توجه می‌دهیم که در مقالات مشابه اساساً پیش‌بینی انجام نشده و یا بعد از یادگیری حجم بسیار بیشتری داده ورودی فاز پیش‌بینی مدنظر قرار گرفته است. به منظور محاسبه تابع زیان از رابطه

$$L = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N loss_i \quad (1.3)$$

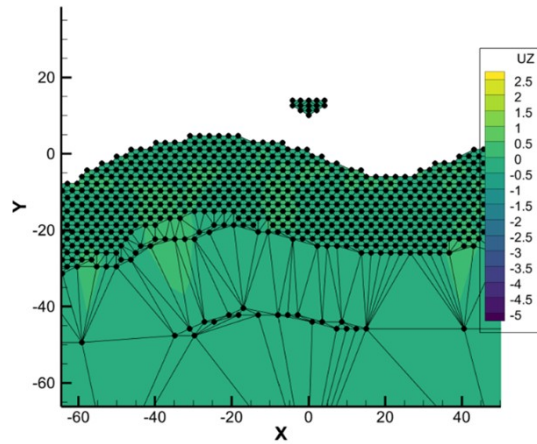
استفاده شده است که در آن مقدار زیان برای هر نمونه به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\begin{aligned} loss_i = & \underbrace{\beta(c_i - y_i)^2}_{\text{error squared center}} \\ & + \underbrace{\max(0, l_i - y_i) + \max(0, y_i - u_i)}_{[l, u] \text{ outside value true for penalty}} \\ & + \underbrace{\alpha(u_i - l_i)^2}_{\text{penalty interval-width}} \end{aligned} \quad (2.3)$$

¹Ra: Roughness Parameter



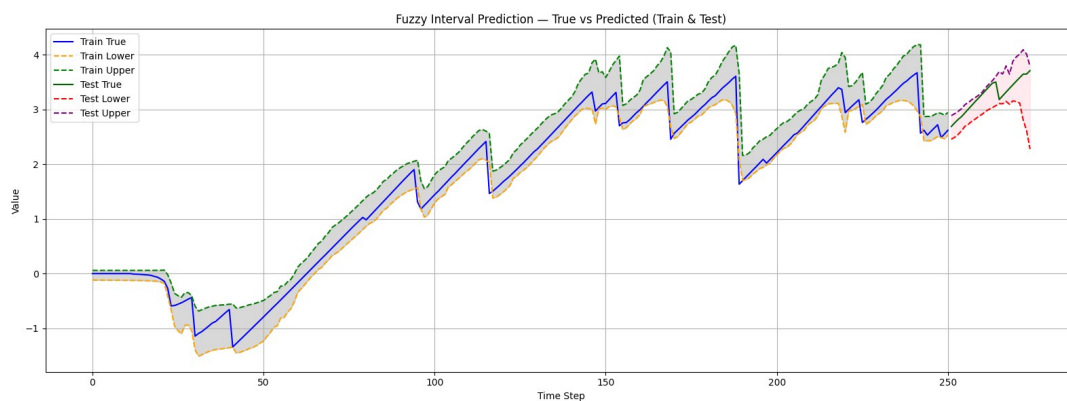
شکل ۵.۳: ایندنتور و ماده - گام زمانی ۱۵۵



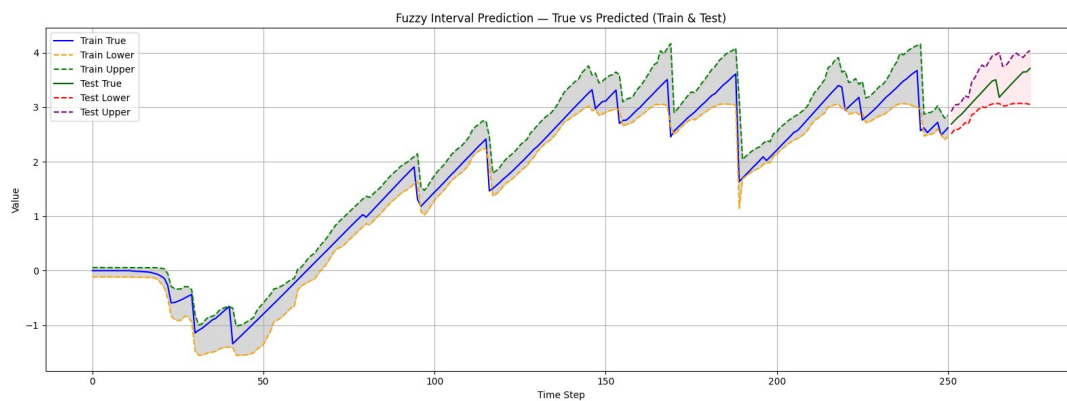
شکل ۴.۳: ایندنتور و ماده - گام زمانی صفر

۴.۳ نتایج ترنسفورمر فازی

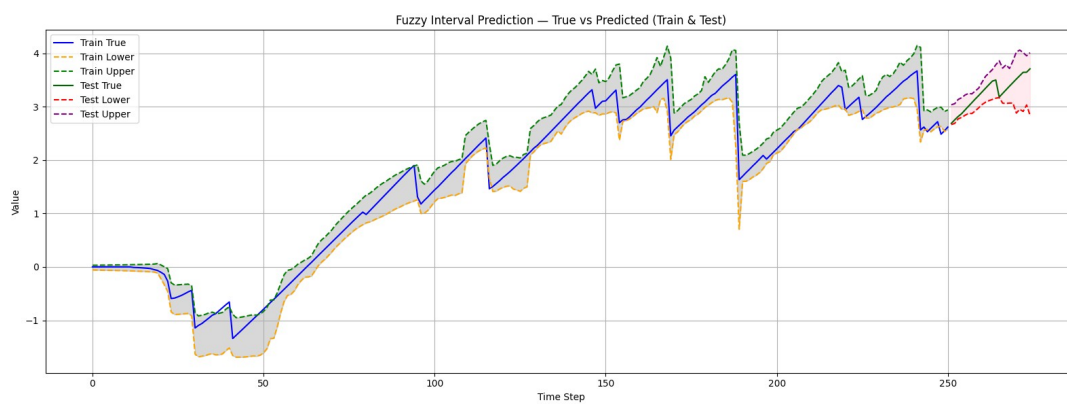
با توجه به ماهیت داده‌های ورودی و نتایج یادگیری در مراحل مختلف، استفاده از ساختار فازی برای پوشش دادن عدم قطعیت در محاسبات پیشنهاد شده است. بر اساس نتایج عددی، استفاده از ساختار فازی مقدار خطای پیش‌بینی و همچنین بازه‌ی پیش‌بینی را، مطابق شکل‌های ۶.۳، ۷.۳ و ۸.۳ و جدول ۲.۳ و ۱.۳، بهبود می‌دهد. در شکل‌های ۶.۳، ۷.۳ و ۸.۳ نمودار پیش‌بینی برای داده‌های آموزش و آزمون نیز در کنار مقادیر واقعی بدست آمده از تحلیل عددی رسم شده است. نمودار سه شکل برای حالتی که سه لایه در شبکه داشته‌ایم رسم شده است. در بررسی تاثیر تعداد لایه‌ها، برای انجام مقایسه قابل اعتماد، تمامی شرایط مقایسه یکسان در نظر گرفته شده است. این نتایج با رایانه شخصی بدست آمده است که مشخصات آن در جدول ۳.۳ آمده است. همچنین، در نظر گرفتن مدل دارای عدم قطعیت منجر به نتایج هموار و قابل اعتماد می‌شود. پیشنهاد می‌شود که در تمام تحلیل‌های چندمقیاسی برای بهبود کیفیت یادگیری و پیش‌بینی از اعداد فازی کمک گرفته شود. همچنین، برای یافتن ساختار فازی بهینه پیشنهاد می‌گردد که در تحقیقات بعدی ساختارهای متنوع آزمون شده و نتایج به صورت کامل گزارش شود. همچنین، به نظر می‌رسد که ساختار کلی معماری از جمله تعداد لایه‌های شبکه ترنسفورمر برای رسیدن به یک دقت مشخص می‌تواند تحت تاثیر ساختار فازی استفاده شده قرار بگیرد. بنابراین، پیشنهاد می‌شود که امکان ساده سازی ساختار شبکه در صورت استفاده از داده‌های فازی را به طور دقیق بررسی کرد. چنانچه این فرضیه درست باشد، با اضافه کردن اندکی محاسبات مربوط به اعداد فازی عملاً خواهیم توانست شبکه با ساختار کوچک‌تر و ساده‌تری را برای پیش‌بینی استفاده نماییم.



شکل ۳.۶: استفاده از عدد فازی گاوسی



شکل ۳.۷: استفاده از عدد فازی دوزنقه‌ای



شکل ۳.۸: استفاده از عدد فازی مثلثی

جدول ۱.۳: زمان اجرا براساس تعداد لایه‌های مختلف و اعداد فازی مختلف (بر حسب ثانیه)

گوسی	دوزنقه‌ای	مثلی	عدد فازی / تعداد لایه
۷۲۰	۱۰۸۰	۱۲۰۰	$n = 2$
۱۰۲۰	۹۰۰	۹۶۰	$n = 3$
۲۷۰۰	۲۵۸۰	۲۱۰۰	$n = 4$
۴۲۰۰	۳۶۰۰	۴۲۰۰	$n = 5$

جدول ۲.۳: خطای داده‌های آموزش و آزمون - معیار PICP

گوسی	دوزنقه‌ای	مثلی	عدد فازی / تعداد لایه
Train: ۰.۰۱۴ Test: ۰.۰۶۸ PICP: ۹۰.۶۰	Train: ۰.۰۳۳ Test: ۰.۰۱۷ PICP: ۹۰.۸۴	Train: ۰.۰۲۷ Test: ۰.۱۵۴ PICP: ۹۰.۴۴	$n = 2$
Train: ۰.۰۲۷ Test: ۰.۰۴۴ PICP: ۹۶.۴۱	Train: ۰.۰۲۴ Test: ۰.۰۱۷ PICP: ۹۶.۴۱	Train: ۰.۰۲۹ Test: ۰.۰۳۷ PICP: ۹۴.۰۲	$n = 3$
Train: ۲.۵۹۵ Test: ۱.۴۷۴ PICP: ۷۰.۹۲	Train: ۲.۴۲۷ Test: ۱.۴۶۷ PICP: ۹۸.۰۱	Train: ۴.۴۵۸ Test: ۵.۱۵۰ PICP: ۸۶.۰۶	$n = 4$
Train: ۲.۹۵۱ Test: ۳.۱۷۸ PICP: ۹۹	Train: ۲.۹۳۴ Test: ۳.۰۰۳ PICP: ۹۹	Train: ۳.۰۰۴ Test: ۳.۱۲۰ PICP: ۹۹	$n = 5$

جدول ۳.۳: مشخصات رایانه برای اجرای کد

Experiments were run on a Microsoft Surface Pro 7+ tablet with the following specifications:
- CPU: 11th Gen Intel® Core™ i7-1165G7 @ 2.80GHz (8 logical cores)
- RAM: 16 GB
- Operating System: Windows 11 Pro 64-bit (Build 26100)
- GPU: Intel Iris Xe Graphics (integrated)
- DirectX Version: DirectX 12

فصل ۴

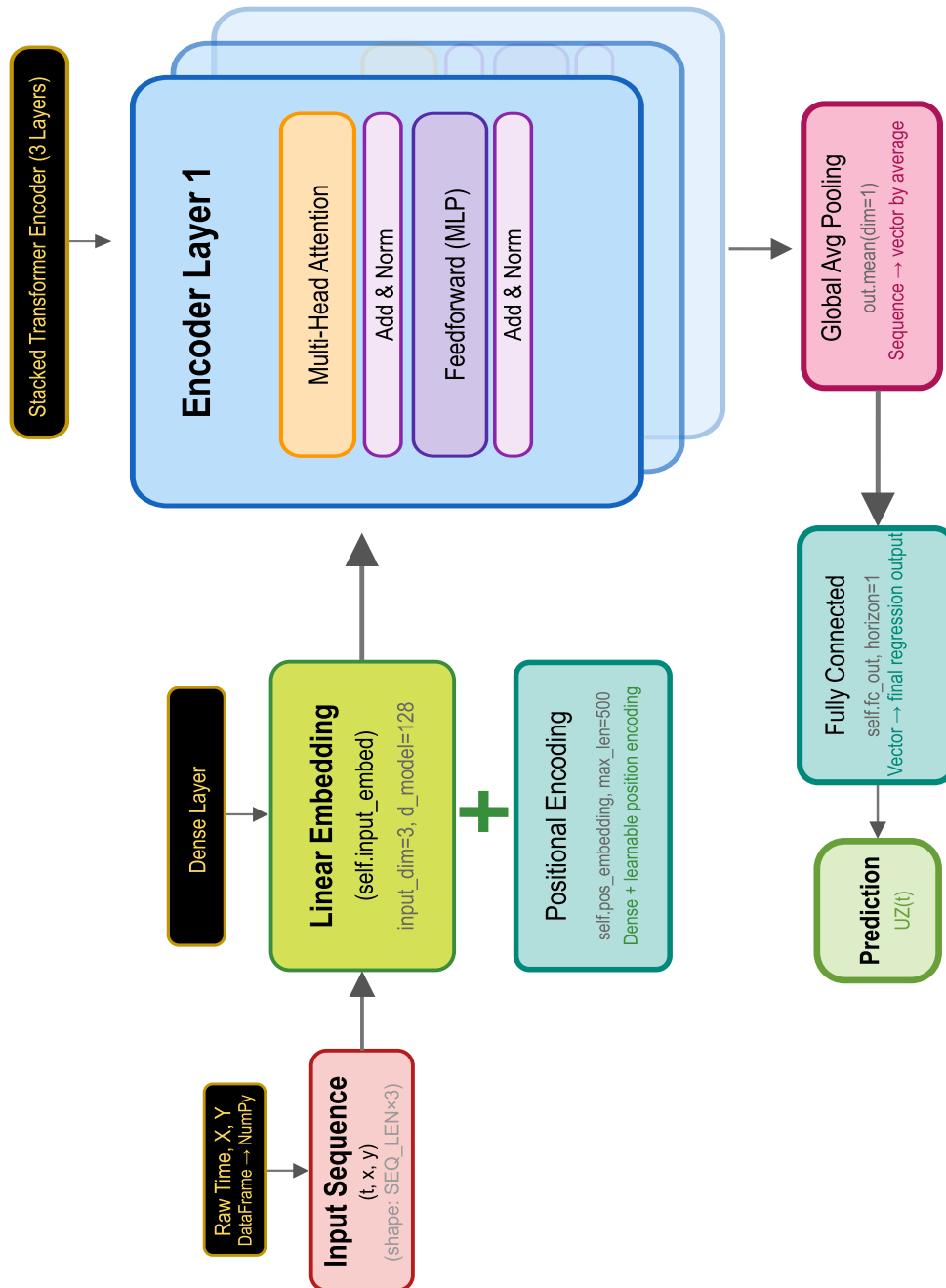
الگوریتم پیشنهادی برای UZ

۱.۴ شبکه ترنسفورمر

در این مطالعه از معماری ترنسفورمر استفاده شده است. هر دنباله ورودی طول L دارد (یعنی SEQ_LEN) و هر توکن یک سه‌تایی (t, x, y) است. یک نگاشت خطی مشترک $\mathbb{R}^3$ را به فضای نهفته‌ای با بُعد $d_{\text{model}} = ۱۲۸$ (بردار نهفتگی) تصویر می‌کند و یک کدگذاری مکانی قابل آموزش برای حفظ ترتیب به آن افزوده می‌شود. بنابراین رمزگذار دنباله‌هایی با شکل (L, d_{model}) را پردازش می‌کند.

هسته مدل شامل سه لایه رمزگذار پشته شده است. هر لایه شامل توجه خودی هشت‌سری، بلوک Add&Norm و یک شبکه پیش‌خور نقطه‌به‌نقطه با اندازه نهان ۵۱۲ است. خروجی دنباله با میانگین‌گیری سراسری روی بُعد دنباله تجمیع می‌شود تا $h \in \mathbb{R}^{d_{\text{model}}}$ به دست آید و در نهایت یک سرگرسیون خطی h را به یک پیش‌بینی اسکالر $\hat{u}_z$ (هدف UZ) نگاشت می‌کند.

این معماری امکان مدل‌سازی روابط غیرخطی و وابستگی‌های زمانی بلندبرد در داده‌های ورودی را فراهم می‌کند. طرح کلی شبکه در شکل ۱.۴ نشان داده شده است.



شکل ۱.۴: معماری شبکه ترنسفورمر

۲.۴ تراکم‌سازی داده و روش SPICE

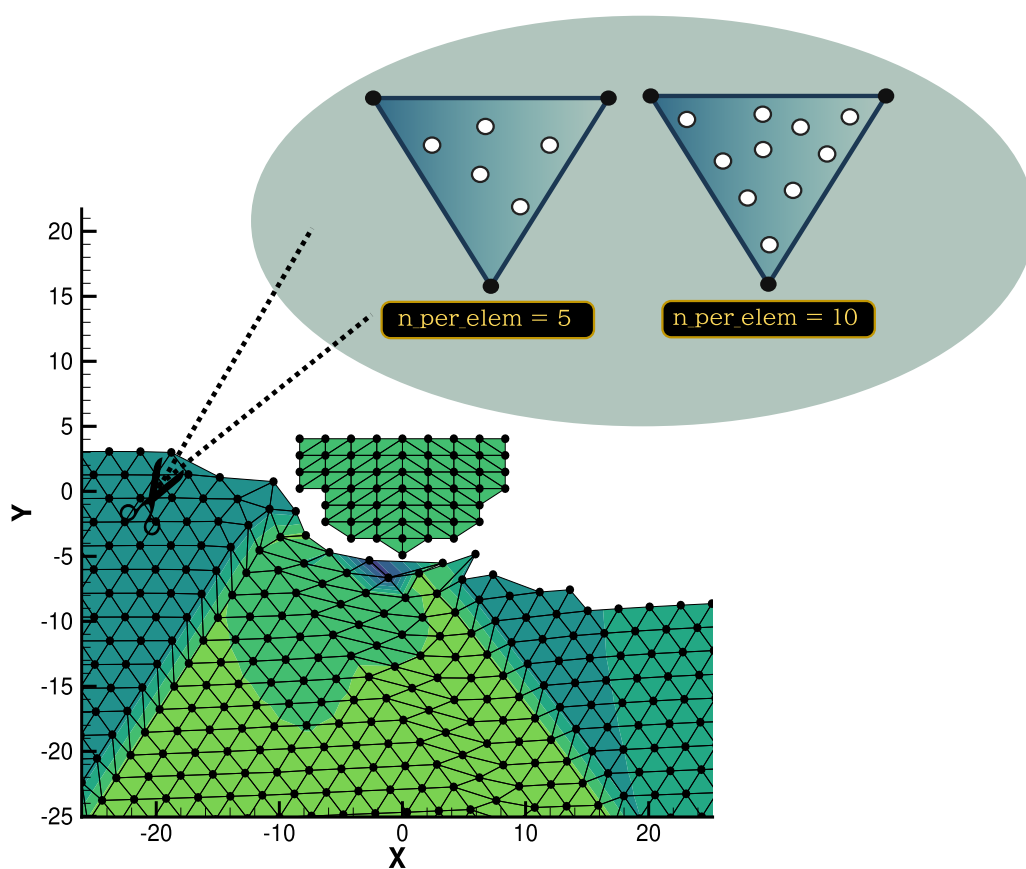
وقتی داده‌ها در قالب جدول ۳.۲ به شبکه داده شدند، مدل نتوانست نوسان‌های موجود در منحنی UZ را در نقاط مختلف مدل به‌طور دقیق ثبت کند. در نانوایندنتیشن، شناسایی و یادگیری درست چنین نوسان‌های پله‌ای که در گام‌های زمانی مشخص رخ می‌دهند اهمیت حیاتی دارد. مطالعات متعددی گزارش کرده‌اند که افزایش حجم داده کارایی یادگیری ترنسفورمر را بهبود می‌دهد [۱۶، ۵۰-۵۲]. بنابراین تصمیم گرفته شد مجموعه داده با افزودن نقاط اضافی از طریق درون‌یابی غنی‌تر شود.

برای این منظور، درون هر المان نقاط متعددی با روش درون‌یابی استخراج شدند. برای این کار یک اسکریپت پایتون نوشته شد که در آن می‌توان تعداد نقاط درون‌یابی شده در هر المان را مشخص کرد و یک فایل جدید `dat` تولید نمود. به‌عنوان نمونه، اگر تعداد نقاط درون‌یابی ۱۰ تعیین می‌شد، اسکریپت به‌طور تصادفی ۱۰ نقطه در داخل هر المان تولید می‌کرد (نگاه کنید به شکل ۲.۴). سپس این نقاط با فایل اصلی `dat` ادغام شدند. جالب آن‌که حتی با افزودن تا ۸۰ نقطه در هر المان، بهبودی معنادار در یادگیری مدل مشاهده نشد. باید توجه داشت که در هر گام زمانی مختصات این نقاط به‌سبب تغییر شکل ماده، باز شبکه‌بندی تطبیقی و تغییر موقعیت المان‌ها با گام قبل متفاوت است. این موضوع نه تنها باعث بهبود یادگیری نشد، بلکه محدودیت حافظه GPU را نیز به دنبال داشت و به کاهش اندازه بچ مجبور کرد. در نتیجه، زمان اجرای هر اپک به‌طور قابل توجهی افزایش یافت (دسترسی فقط به یک کارت RTX 4090 با حافظه ۲۴ گیگابایت وجود داشت).

بر این اساس، نحوه تغذیه داده به ترنسفورمر دوباره مورد بازنگری قرار گرفت. با الهام از حوزه معاملات الگوریتمی، جایی که ترنسفورمرها به توانمندی در مدل‌سازی داده‌های سری زمانی معروف‌اند، انتظار می‌رفت برای داده‌های پیچیده و وابسته به زمان نانوایندنتیشن نیز مناسب باشند. ایده این است: به جای درون‌یابی نقاط بیشتر در داخل المان‌ها، نوع داده ورودی اصلاح شود. رویه اصلاح شامل انتخاب تصادفی تعداد اندکی از نقاط ماده، ثابت نگه داشتن مختصات X و Y آن‌ها، و ثبت جابه‌جایی UZ در طول تمام گام‌های زمانی است. شگفت‌آور آن‌که حتی تعداد بسیار اندکی از این نقاط (مثلاً ۱۰ نقطه از نواحی مختلف مدل) تأثیر چشمگیری بر بهبود یادگیری مدل داشتند.

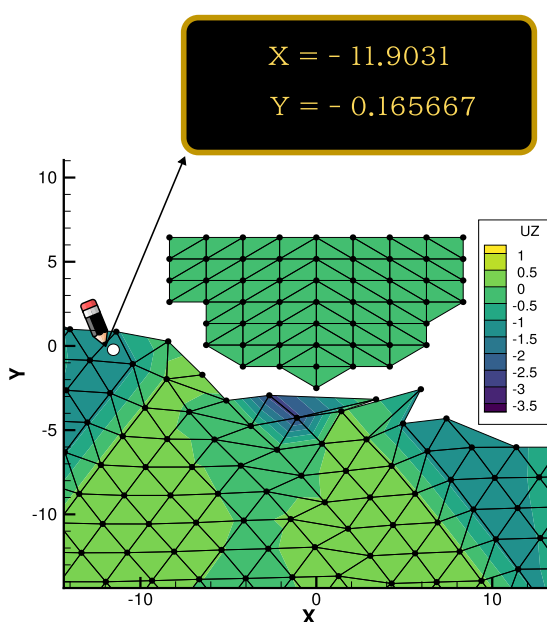
این موضوع اهمیت شیوه تغذیه داده به مدل‌های یادگیری عمیق را برجسته می‌کند. به‌ویژه این راهبرد نه تنها ترنسفورمر بلکه شبکه‌های عصبی متعارف را نیز بهبود می‌بخشد. این روش SPICE نامیده شد؛ الهام گرفته از رمان *Dune* اثر فرانک هربرت که در آن *SPICE* ارزشمندترین ماده جهان است و آگاهی را گسترش می‌دهد و امکان دیدن آینده را فراهم می‌کند [۵۳]. از آن‌جا که مجموعه داده اصلی همچنان در قالب جدول ۳.۲ باقی می‌ماند، این نقاط اضافی تنها در تعداد اندک افزوده می‌شوند-مانند افزودن ادویه برای بهبود طعم غذا.

در شکل ۲.۴ نقاطی به‌صورت تصادفی در Tecplot انتخاب شدند. برای این نقاط، مختصات X, Y در تمام



شکل ۲.۴: تولید تعداد دلخواهی از نقاط تصادفی درون هر المان

۲۲۲ گام زمانی ثابت نگه داشته شد، در حالی که مقادیر متناظر UZ ثبت گردید. Tecplot این قابلیت را برای انجام چنین عملیاتی فراهم می کند. به عنوان نمونه، یک نقطه دلخواه در Tecplot انتخاب شد (که به صورت مرکز دایره سفید در شکل ۳.۴ نشان داده شده است) و داده های آن در قالب جدول ۱.۴ استخراج گردید.



شکل ۳.۴: داده های استخراج شده برای یک نقطه انتخابی (با همان قالب جدول ۱.۴).

جدول ۱.۴: داده های استخراج شده در نقطه سفید برجسته شده در شکل ۳.۴.

Time Series Plot Zone						
Solution	X	Y	Z	UX	UY	UZ
Time						
0	-1.1903E+01	-1.6567E-01	9.3609E-01	-6.512E-03	-6.184E-02	2.5E-15
1	-1.1903E+01	-1.6567E-01	9.3609E-01	-6.512E-03	-6.184E-02	2.5E-15
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
221	-1.1903E+01	-1.6567E-01	-2.3484E+00	-1.5306E+00	-1.5487E+00	-2.4637E+00

سپس با استفاده از یک اسکریپت دیگر، تمام نقاط استخراج شده با هم ادغام و در قالب نشان داده شده در جدول ۲.۴ سازمان دهی شدند.

جدول ۲.۴: تمامی نقاط استخراج شده مشابه جدول ۱.۴ در یک مجموعه داده ادغام شدند.

SolutionTime	X	Y	Z	UX	UY	UZ
0	-1.5308E+01	-3.3535E+00	6.2829E-01	1.0626E-02	-6.9948E-02	6.7E-16
0	1.0716E+00	-1.6665E+01	1.4899E-01	1.5438E-02	-2.0723E-02	4.8E-16
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
0	-4.2814E+01	-4.8127E+01	1.1242E+00	7.0892E-03	-2.3182E-02	7.0E-16

SolutionTime	X	Y	Z	UX	UY	UZ
1	-1.5308E+01	-3.3535E+00	6.2829E-01	1.0626E-02	-6.9948E-02	6.7E-16
1	1.0716E+00	-1.6665E+01	1.4899E-01	1.5438E-02	-2.0723E-02	4.8E-16
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
1	-4.2814E+01	-4.8127E+01	1.1242E+00	7.0892E-03	-2.3182E-02	7.0E-16

⋮

SolutionTime	X	Y	Z	UX	UY	UZ
221	-1.5308E+01	-3.3535E+00	-2.6417E+00	-1.1235E+00	-1.8877E+00	-3.2988E+00
221	1.0716E+00	-1.6665E+01	5.1878E-01	8.6214E-02	-7.8440E+00	-4.9705E-02
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
221	-4.2814E+01	-4.8127E+01	4.5825E-01	-8.0855E-01	-3.0082E+00	-5.9190E-03

از آن جا که مدل سازی UZ اهمیتِ نخست را دارد، ستون های Z، UX و UY حذف می شوند. ستون Z کنار گذاشته می شود زیرا ویژگی ای می افزاید که فقط پیچیدگی داده های ورودی را افزایش می دهد. بنابراین، مجموعه داده نهایی که به ترنسفورمر داده می شود، به شکل نشان داده شده در جدول ۳.۴ در می آید. این جدول شامل ۱۱۱۲۶۹ سطر است و 100% کل مجموعه داده را پوشش می دهد. همان گونه که پیش تر اشاره شد، حتی اگر اندازه مجموعه داده از طریق درونیابی و استخراج نقاط اضافی در هر المان افزایش یابد و به ۱۴۰ میلیون سطر برسد، تأثیر آن بر یادگیری مدل ناچیز می ماند. بهبودهای چشمگیر تنها زمانی رخ می دهد که داده های از نوع SPICE در مجموعه داده گنجانده شوند.

در این پژوهش چهار الگوریتم اصلی طراحی و پیاده سازی شده است که هر یک بخشی از زنجیره پردازش داده را بر عهده دارند. الگوریتم ۱.۴ وظیفه حذف اطلاعات المان ها از فایل های dat. و تولید نسخه «بدون المان» را بر عهده دارد. در ادامه، الگوریتم ۲.۴ به استخراج و نمونه برداری نقاط درونی از داده های هندسی می پردازد تا مجموعه داده ای غنی تر فراهم شود. پس از آن، الگوریتم ۳.۴ مسئول ادغام فایل های متعدد CSV است که به صورت سری زمانی (بر اساس روش SPICE) تولید شده اند. نهایتاً، الگوریتم ۴.۴ داده های سری زمانی SPICE را در فایل های dat. ادغام کرده و بدین ترتیب داده های تکمیلی به ساختار اصلی اضافه می شود.

جدول ۳.۴: مجموعه داده نهایی مورد استفاده به عنوان ورودی ترنسفورمر.

	SolutionTime	X	Y	UZ
Line 1	0	-15.3083	-3.35348	6.74E-16
Line 2	0	1.07157	-16.665	4.78E-16
	⋮	⋮	⋮	⋮
	0	-42.8141	-48.1268	6.96E-16
	1	-15.3083	-3.35348	6.74E-16
	1	1.07157	-16.665	4.78E-16
	⋮	⋮	⋮	⋮
	1	-42.8141	-48.1268	6.96E-16
		⋮		
	221	-15.3083	-3.35348	-3.29876
	221	1.07157	-16.665	-0.0497045
	⋮	⋮	⋮	⋮
Line 1111269	221	-42.8141	-48.1268	-0.00591882

Algorithm 4.1

 Convert Tecplot .dat to a "NoElements" variant by stripping element connectivity

Require: input_file (e.g., "S2.dat"), output_file (e.g., "S2_NoElements.dat")**Ensure:** A Tecplot-like .dat file where node data are preserved and element connectivity lines are removed

```

1: Open input_file for reading as infile; open output_file for writing as
  outfile.
2: while true do
3:   line ← infile.readline()
4:   if line is EOF then
5:     break
6:   end if
7:   if "Nodes=" in line and "Elements=" in line then
8:     Parse nodes and elements counts from line (split by commas, then split each
      key=value and cast to integers).
9:     Write the zone header line to outfile (preserve metadata as-is).
10:    for i ← 1 to nodes do
11:      data_line ← infile.readline(); if EOF then break
12:      outfile.write(data_line) {copy node records verbatim}
13:    end for
14:    for i ← 1 to elements do
15:      elem_line ← infile.readline(); if EOF then break
16:      {read-and-skip: do not write element connectivity lines}
17:    end for
18:    {continue; next loop iteration will handle subsequent zones/headers}
19:  else
20:    outfile.write(line) {copy all other lines (title, variables, etc.) as-is}
21:  end if
22: end while
23: Close infile and outfile; return output_file.

```

Algorithm 4.2

End-to-end pipeline: sample interior points from Tecplot .dat and save to CSV.

Require: `dat_path` (input Tecplot .dat), samples per element $n_{\text{per_elem}}$, optional random seed s , `csv_path` (output).

Ensure: CSV file with columns SOLUTIONTIME, X, Y, Z, UX, UY, UZ.

- 1: **Import/Runner:** import `sample_all` from `interpolate_dat_points`.
- 2: **Parse header:** open `dat_path`; read TITLE, VARIABLES/VARS, and ZONE lines.
- 3: Extract node/element counts (N/E), optional ZONETYPE, and current SOLUTIONTIME.
- 4: **Read nodes:** store for each node id its (X, Y, Z) and (U_X, U_Y, U_Z) .
- 5: **Read elements:** store for each element its connectivity indices $\{i_1, i_2, i_3, i_4\}$ (triangles may have 3 indices).
- 6: **for** each element e **do**
- 7: **if** e is quadrilateral **then**
- 8: Sample (u, v) pairs in $(0, 1)$ (optionally avoid edges by a small offset).
- 9: Map (u, v) to physical coordinates via bilinear interpolation of the 4 corner nodes.
- 10: Interpolate (U_X, U_Y, U_Z) bilinearly at that point.
- 11: **else**
- 12: Sample barycentric (α, β, γ) with $\alpha, \beta, \gamma > 0$ and $\alpha + \beta + \gamma = 1$ (uniform interior).
- 13: Map to physical coordinates by affine combination of the 3 vertices.
- 14: Interpolate (U_X, U_Y, U_Z) barycentrically at that point.
- 15: **end if**
- 16: Append one record [SOLUTIONTIME, X, Y, Z, UX, UY, UZ] per sampled interior point of e .
- 17: **end for**
- 18: Concatenate all records into a single DataFrame `df`.
- 19: Optionally preview (`df.head()`), then save: `df.to_csv(csv_path, index=False)`.
- 20: **return** `csv_path`.

Algorithm 4.3

Merge multiple CSV files with schema alignment, de-duplication, and safe saving

Require: inputs (list of CSV paths or a glob pattern), optional columns (schema to keep), optional key (dedupe key columns), out_path (output CSV), optional sort_by.

Ensure: A single CSV containing all rows from inputs with unified schema, optional de-duplication and sorting.

- 1: Resolve inputs: if a glob pattern is given, expand it to a list of file paths.
 - 2: Initialize empty list frames.
 - 3: **for** each path in inputs **do**
 - 4: Read CSV from path into df (use UTF-8; handle NA values).
 - 5: **if** columns is provided **then**
 - 6: If any required column is missing in df, create it filled with NA to match the schema.
 - 7: Subset df to columns in that order.
 - 8: **end if**
 - 9: Optionally add a source column with the file name (for traceability).
 - 10: Append df to frames.
 - 11: **end for**
 - 12: Concatenate all frames into big (row-wise concat).
 - 13: **if** key is provided **then**
 - 14: Drop duplicate rows in big based on key (keep first).
 - 15: **end if**
 - 16: **if** sort_by is provided **then**
 - 17: Sort big by sort_by (ascending).
 - 18: **end if**
 - 19: Reset index of big.
 - 20: Save big to out_path as CSV with index=False.
 - 21: **return** out_path.
-

Algorithm 4.4

Insert a new time-step zone into a Tecplot NoElements .dat file from time-series points

Require: noelem_path (input .dat with nodes and no elements), points_csv with columns [X,Y,Z,UX,UY,UZ] and a single SOLUTIONTIME value; optional node_id; out_path.

Ensure: New .dat with a new ZONE (Elements=0) at the given SOLUTIONTIME containing the provided node records.

- 1: Load points_csv into DataFrame df.
 - 2: Validate required columns exist; if node_id exists, sort df by node_id ascending.
 - 3: Extract unique time t_new from df ["SOLUTIONTIME"]; error if multiple distinct values.
 - 4: Set N $\leftarrow$ number of rows of df; set E $\leftarrow$ 0.
 - 5: Open noelem_path for reading as infile; open out_path for writing as outfile.
 - 6: Copy the preamble/content of infile to outfile (append mode), or stop at the desired insertion point if ordering by time is required.
 - 7: Ensure a proper VARIABLES/VARS line exists and matches the column order [X,Y,Z,UX,UY,UZ].
 - 8: Write a new zone header to outfile: ZONE T="t={t_new}"
 SOLUTIONTIME={t_new} Nodes={N} Elements=0.
 - 9: **for** each row r in df **do**
 - 10: Format one line: r[X] r[Y] r[Z] r[UX] r[UY] r[UZ] with numeric precision consistent with existing zones.
 - 11: Write the line to outfile.
 - 12: **end for**
 - 13: If insertion (not append) was chosen, write the remaining tail of infile to outfile.
 - 14: Close both files; **return** out_path.
-

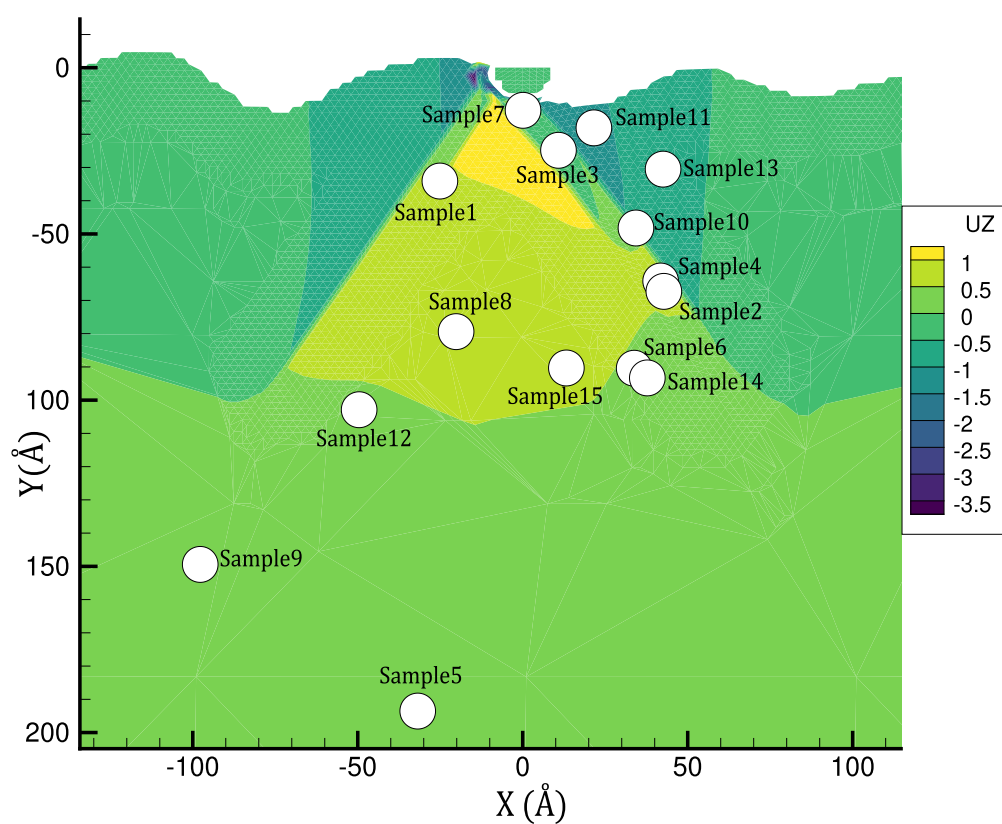
فصل ۵

بحث و نتیجه‌گیری

۱.۵ نتایج مدل

کارایی مدل شرح داده شده تحت طول‌های دنباله مختلف (پارامتر SEQ_LEN) بررسی شد. پنج درصد پایانی داده‌ها به عنوان مجموعه آزمون کنار گذاشته شدند؛ به این معنا که گام زمانی از ۲۱۰ تا ۲۲۱ هرگز در طول آموزش در اختیار مدل قرار نگرفت. نتایج بسیار امیدوارکننده بودند. در میان طول‌های دنباله مختلف، مشخص شد که وقتی $SEQ_LEN = 10$ باشد (در حالی که سایر پارامترها ثابت نگه داشته شدند)، مدل بهترین عملکرد یادگیری را به دست می‌آورد.

برای این منظور، ۱۵ نمونه از مختصات ماده مورد بررسی، در نقاط مختلف انتخاب شدند (نگاه کنید به شکل ۱.۵) که مشخصات آن‌ها در جدول ۱.۵ آمده است. جدول ۲.۵ مقادیر MSE را برای این ۱۵ نقطه در طول‌های دنباله مختلف ارائه می‌دهد. همان‌طور که دیده می‌شود، مقادیر MSE در حالتی که طول دنباله برابر ۱۰ باشد، در میان کمترین مقادیر قرار دارند.



شکل ۱.۵: مختصات نمونه‌های نماینده با دایره‌های سفید مشخص شده‌اند.

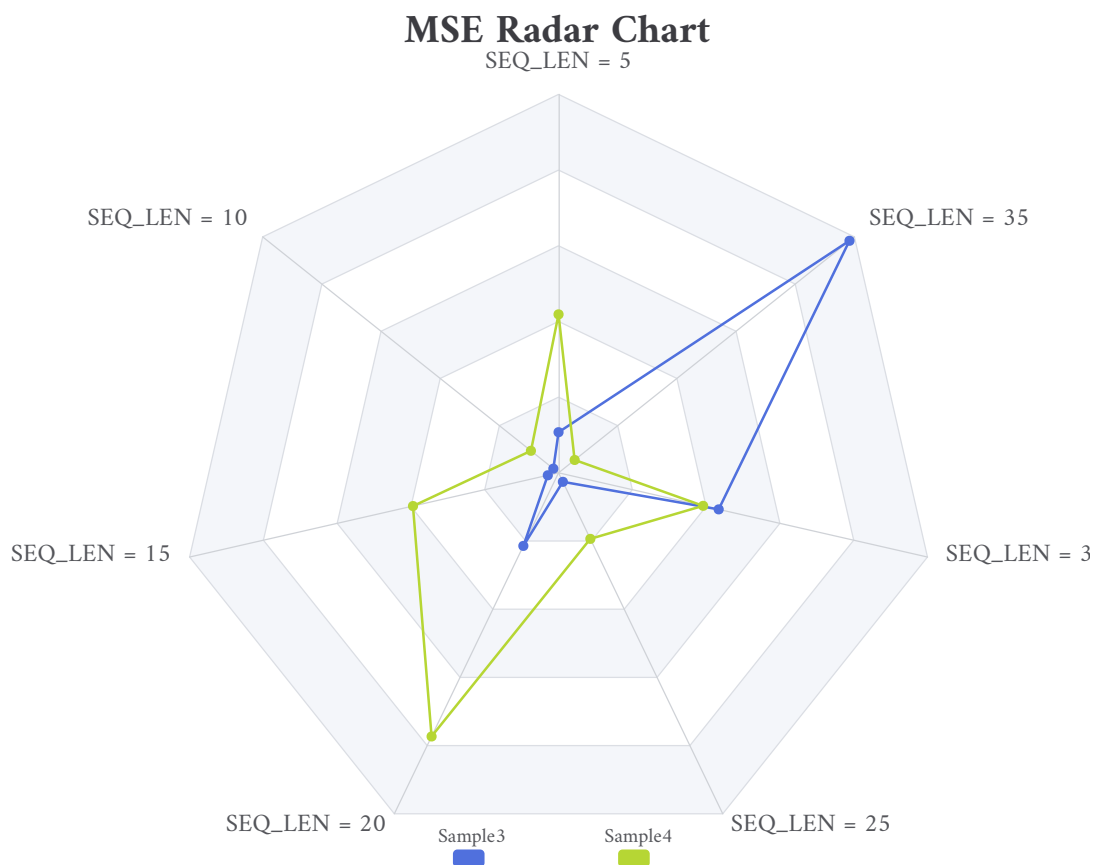
جدول ۱.۵: مختصات نمونه‌های نماینده از نقاط مختلف درون ماده

	Sample1	Sample2	Sample3	Sample4	Sample5
X	-2.511350E+01	4.276540E+01	1.084100E+01	4.179950E+01	-3.181740E+01
Y	-3.409010E+01	-6.728100E+01	-2.483490E+01	-6.416390E+01	-1.935370E+02
	Sample6	Sample7	Sample8	Sample9	Sample10
X	3.378580E+01	1.009700E-01	-2.019160E+01	-9.774830E+01	3.431670E+01
Y	-9.040520E+01	-1.281290E+01	-7.939800E+01	-1.494220E+02	-4.821360E+01
	Sample11	Sample12	Sample13	Sample14	Sample15
X	2.157050E+01	-4.957750E+01	4.253920E+01	3.775390E+01	1.322940E+01
Y	-1.808650E+01	-1.028830E+02	-3.050520E+01	-9.331210E+01	-9.032130E+01

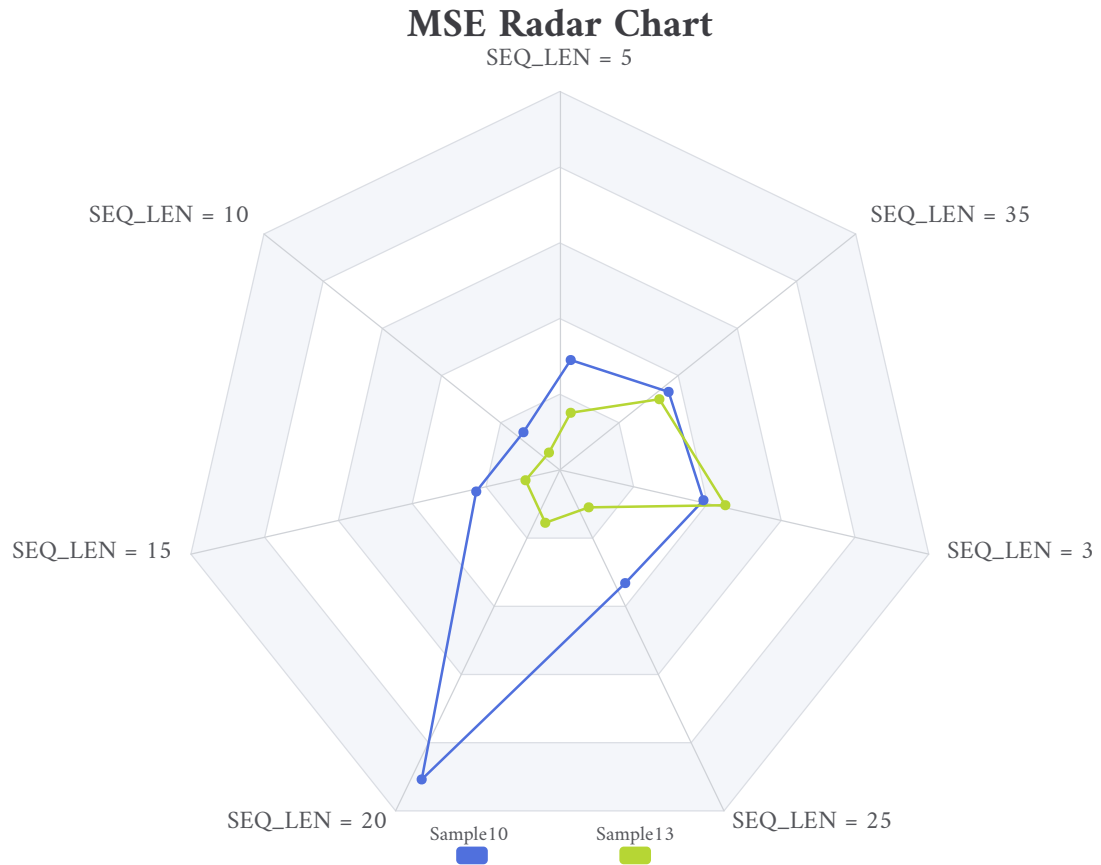
جدول ۲.۵: مقادیر MSE برای داده های آموزش و آزمون در طول های دنباله مختلف - آبی نشان دهنده بهترین مقدار برای داده آزمون در میان ۷ طول دنباله و سبز نشان دهنده بهترین مقدار برای داده آموزش در میان ۷ طول دنباله است.

		SEQ_LEN						
	Data	5	10	15	20	25	30	35
Sample1	Train	3.29E-03	2.46E-03	6.25E-03	3.87E-03	9.75E-03	1.01E-02	1.38E-02
	Test	3.96E-02	2.66E-02	2.21E-01	9.73E-03	2.90E-02	6.37E-02	3.17E-02
Sample2	Train	9.24E-04	5.94E-04	2.41E-03	1.53E-03	1.98E-03	2.52E-03	3.85E-03
	Test	3.21E-02	8.59E-03	3.70E-02	7.13E-02	1.64E-02	3.75E-02	6.36E-03
Sample3	Train	4.56E-04	2.66E-03	6.12E-03	4.92E-03	6.97E-03	6.85E-03	1.01E-02
	Test	1.40E-02	2.29E-03	3.78E-03	2.79E-02	3.43E-03	5.64E-02	1.28E-01
Sample4	Train	9.37E-04	6.60E-04	2.55E-03	1.62E-03	2.48E-03	2.80E-03	4.77E-03
	Test	5.44E-02	1.21E-02	5.13E-02	1.01E-01	2.52E-02	5.10E-02	7.09E-03
Sample5	Train	1.17E-03	3.40E-04	2.42E-03	2.07E-03	2.08E-03	2.81E-03	7.53E-04
	Test	3.10E-03	4.16E-03	1.96E-03	2.62E-03	1.29E-03	1.18E-03	1.36E-03
Sample6	Train	1.54E-03	4.94E-04	2.02E-03	1.33E-03	2.88E-03	2.02E-03	2.94E-03
	Test	7.93E-04	2.47E-03	1.37E-03	8.51E-03	8.79E-04	2.30E-03	1.75E-02
Sample7	Train	6.14E-04	2.25E-03	5.41E-03	4.40E-03	4.32E-03	5.45E-03	6.83E-03
	Test	2.66E-04	2.93E-02	2.59E-02	4.14E-03	1.91E-02	6.23E-02	3.40E-02
Sample8	Train	2.34E-03	6.80E-04	3.81E-03	1.96E-03	7.45E-03	4.76E-03	4.61E-03
	Test	4.51E-03	2.17E-02	8.09E-03	1.93E-03	2.61E-03	1.51E-02	1.40E-02
Sample9	Train	1.21E-03	3.57E-04	1.41E-03	9.08E-04	7.24E-04	2.74E-03	1.38E-03
	Test	5.28E-03	5.33E-03	4.75E-03	5.69E-03	3.48E-03	3.31E-03	2.60E-03
Sample10	Train	9.21E-04	1.56E-03	3.84E-03	2.42E-03	2.89E-03	4.70E-03	6.43E-03
	Test	5.81E-02	3.19E-02	5.12E-02	1.82E-01	6.64E-02	7.20E-02	6.62E-02
Sample11	Train	1.37E-02	1.34E-02	1.72E-02	1.34E-02	1.03E-02	1.60E-02	1.36E-02
	Test	6.15E-03	2.62E-02	1.53E-02	2.85E-02	6.67E-02	5.93E-01	2.76E-01
Sample12	Train	1.72E-03	3.71E-04	2.25E-03	1.01E-03	2.04E-03	1.54E-03	9.98E-04
	Test	3.02E-03	2.40E-02	1.41E-03	1.67E-03	6.50E-03	2.28E-02	6.77E-03
Sample13	Train	1.33E-03	1.88E-03	4.28E-03	2.84E-03	3.35E-03	3.00E-03	7.16E-03
	Test	3.02E-02	1.47E-02	2.45E-02	3.10E-02	2.19E-02	8.38E-02	5.99E-02
Sample14	Train	1.38E-03	4.86E-04	1.98E-03	1.34E-03	2.38E-03	1.86E-03	2.17E-03
	Test	5.47E-03	3.67E-03	1.55E-03	9.17E-03	7.41E-04	1.37E-03	1.04E-02
Sample15	Train	1.83E-03	5.41E-04	2.83E-03	1.54E-03	5.38E-03	3.25E-03	3.78E-03
	Test	6.67E-04	9.42E-04	1.20E-03	2.21E-03	6.69E-04	4.56E-03	4.13E-03

برای مقایسه روشن‌تر، مقادیر MSE برای داده‌های آزمون جفت نمونه‌های ۳ و ۴ و ۱۰ و ۱۳ در شکل‌های ۲.۵ و ۳.۵ نشان داده شده‌اند. تعداد اپک‌های موردنیاز برای رسیدن به این مقادیر MSE حدوداً ۵۰۰ است. در ادامه بحث خواهد شد که کاهش MSE فراتر از ۵۰۰ اپک بهبود قابل‌توجهی ایجاد نمی‌کند. در واقع، آموزش برای ۵۰۰ اپک کمتر از ۳۰ دقیقه روی مدل ما زمان می‌برد و هرچند اپک‌های بیشتر می‌توانند MSE را اندکی کاهش دهند، این بهبود ناچیز بوده و زمان اضافی آموزش را توجیه نمی‌کند.

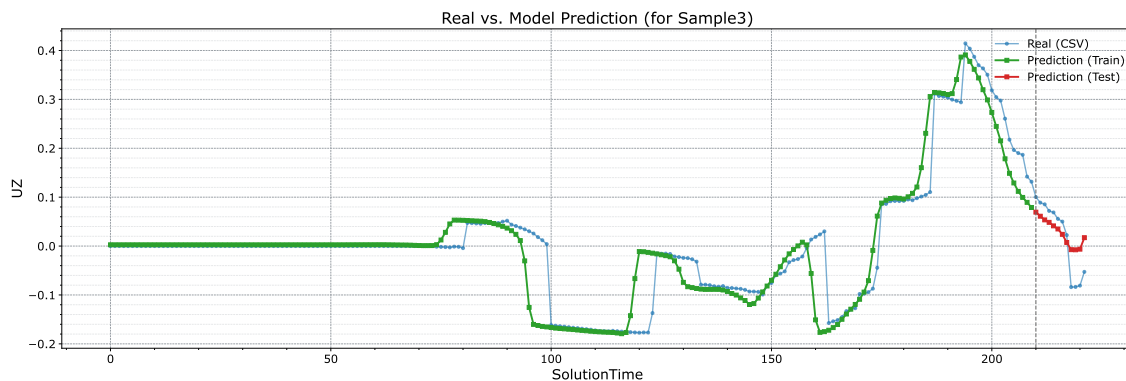


شکل ۲.۵: مقایسه MSE برای طول‌های دنباله مختلف - مقادیر گزارش شده برای Sample3 و Sample4.



شکل ۳.۵: مقایسه MSE برای طول‌های دنباله مختلف - مقادیر گزارش شده برای Sample10 و Sample13.

در شکل ۴.۵ مقادیر پیش‌بینی شده UZ برای Sample3 نشان داده شده‌اند. یکی از دلایل انتخاب این نقطه در میان ۱۵ نمونه، رفتار متمایز آن در طول ۱۲ گام زمانی پایانی است (یک الگوی دوزنقه‌ای کوتاه در چهار گام پایانی بخش آزمون). همان‌طور که در شکل ۴.۵ دیده می‌شود، مدل نوسان‌های UZ را به‌خوبی دنبال می‌کند، حتی با وجود آنکه این ۱۲ گام پایانی در طول آموزش در اختیار مدل قرار نگرفته‌اند.



شکل ۴.۵: نمودار UZ برای Sample3. نقاط قرمز پیش‌بینی‌های مدل ترنسفورمر روی داده‌آزمون را نشان می‌دهند، نقاط آبی مقادیر واقعی UZ را نمایش می‌دهند، و نقاط سبز پیش‌بینی‌های مدل روی داده‌آموزش را مشخص می‌کنند.

شایان ذکر است که این وظیفه توسط یک شبکه عصبی متعارف قابل انجام نیست. افزون بر این، در شکل‌های ۵.۵، ۶.۵ و ۷.۵ نمودارهای حبابی ارائه شده‌اند که مقادیر MSE را نسبت به مختصات X و Y نشان می‌دهند. این مقادیر متناظر با داده‌های آزمون هستند. هرچه اندازه حباب بزرگ‌تر باشد، مقدار MSE در آن نقطه بیشتر است. در مکان‌هایی که داده‌های SPICE افزوده شده‌اند، مقدار MSE به‌طور کلی کمتر است؛ با این حال، در مکان‌هایی که فاقد افزودن SPICE هستند، مقدار MSE همچنان در مرتبه 10^{-2} باقی می‌ماند (نگاه کنید به جدول ۲.۵).



شکل ۵.۵: مقادیر MSE برای ۱۵ نمونه انتخاب شده روی داده آزمون برحسب مختصات نقاط (آنگستروم). نقاط قرمز مربوط به مختصاتی هستند که در داده آموزش گنجانده شده اند، در حالی که نقاط آبی مختصاتی را نمایش می دهند که بخشی از داده آموزش نبوده اند.



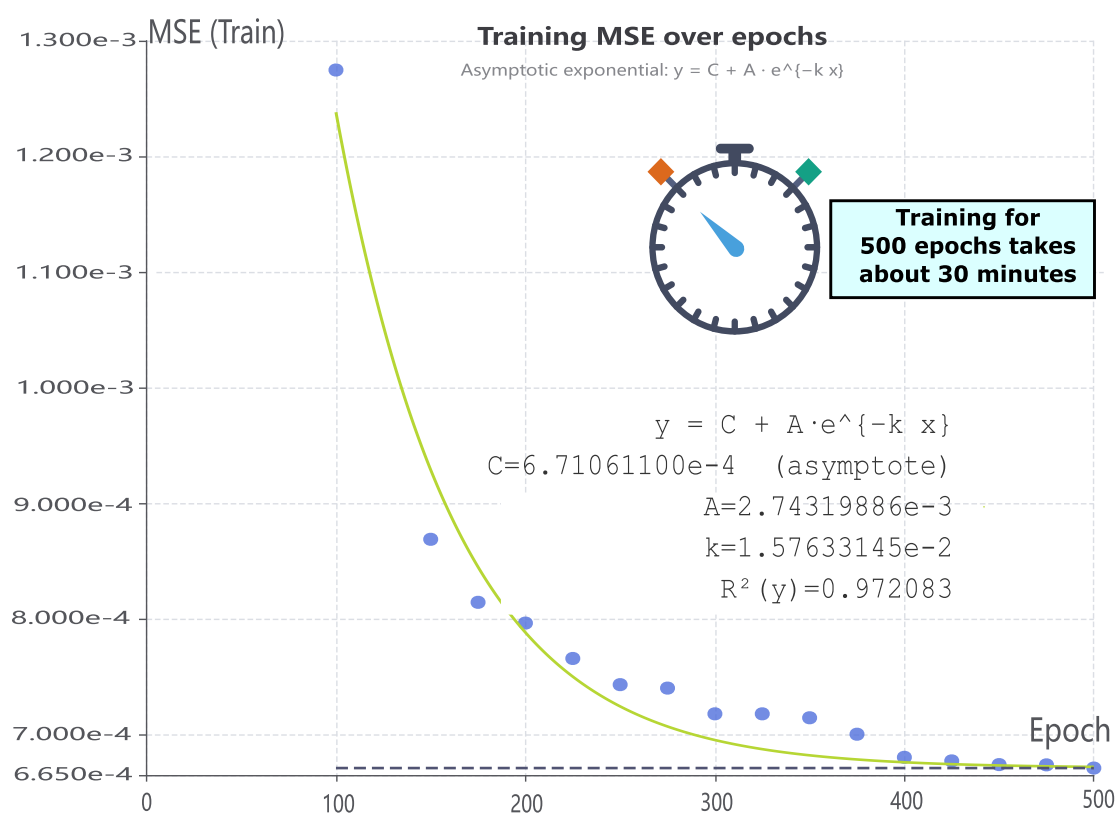
شکل ۵.۶: مقادیر MSE برای نمونه‌های ۱، ۲، ۴ و ۵ روی داده‌آزمون برحسب مختصات نقاط (آنگستروم).



شکل ۵.۷: مقادیر MSE برای نمونه‌های ۳، ۶، ۷، ... و ۱۵ روی داده‌آزمون برحسب مختصات نقاط (آنگستروم).

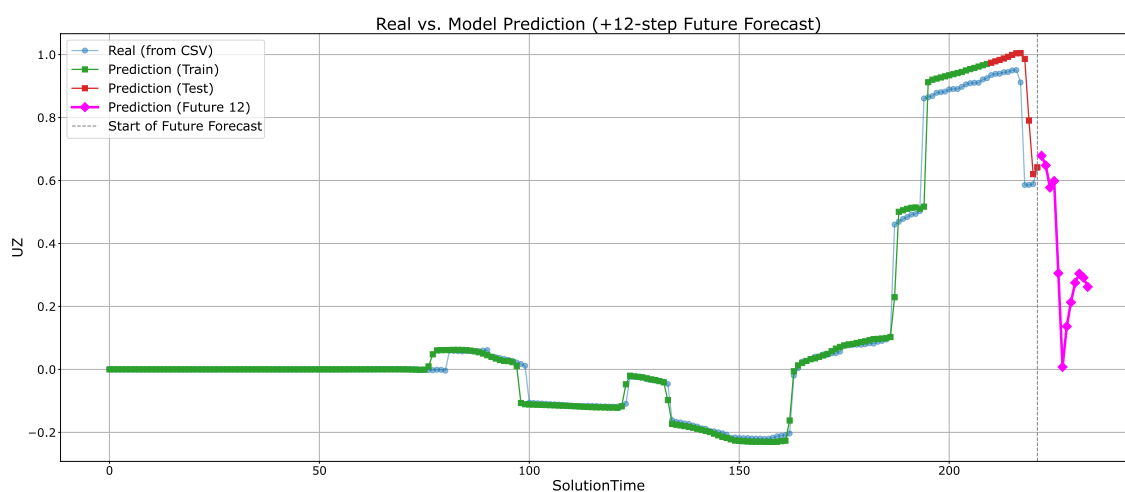
در شکل ۸.۵ روند کاهش MSE با افزایش تعدادِ اینک‌ها نشان داده شده است. از این نمودار می‌توان نتیجه گرفت که:

- افزایش تعدادِ اینک‌ها فراتر از ۵۰۰ از حیث کاهشِ بیشترِ MSE مقرون به صرفه/ارزشمند نیست،
- با افزایش‌های پیاپی تعدادِ اینک‌ها به بیش از ۵۰۰، مقدارِ MSE پیرامون 10^{-4} باقی می‌ماند که از نظر ریاضی، همگراییِ مدل به نتایج دقیق را تأیید می‌کند.

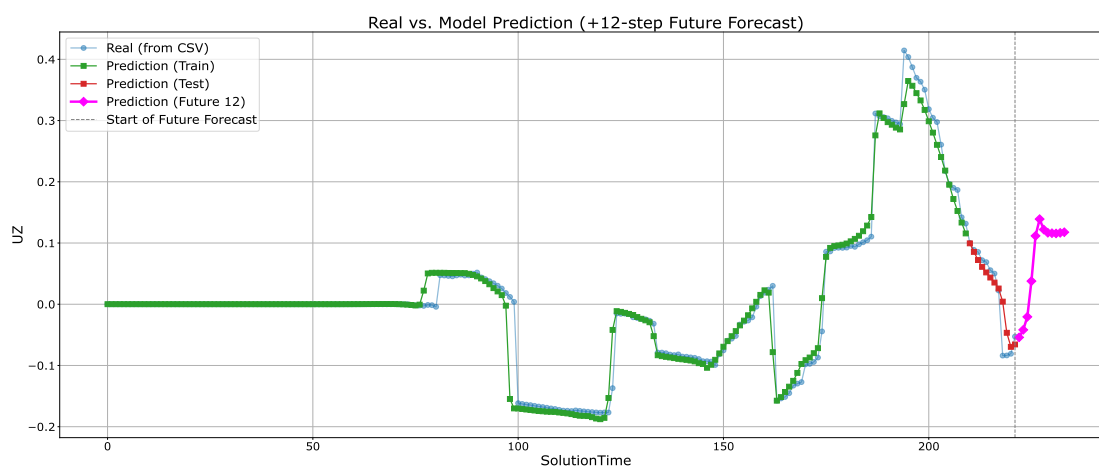


شکل ۸.۵: مقادیر MSE بر حسب تعداد اِپک‌های طی شده

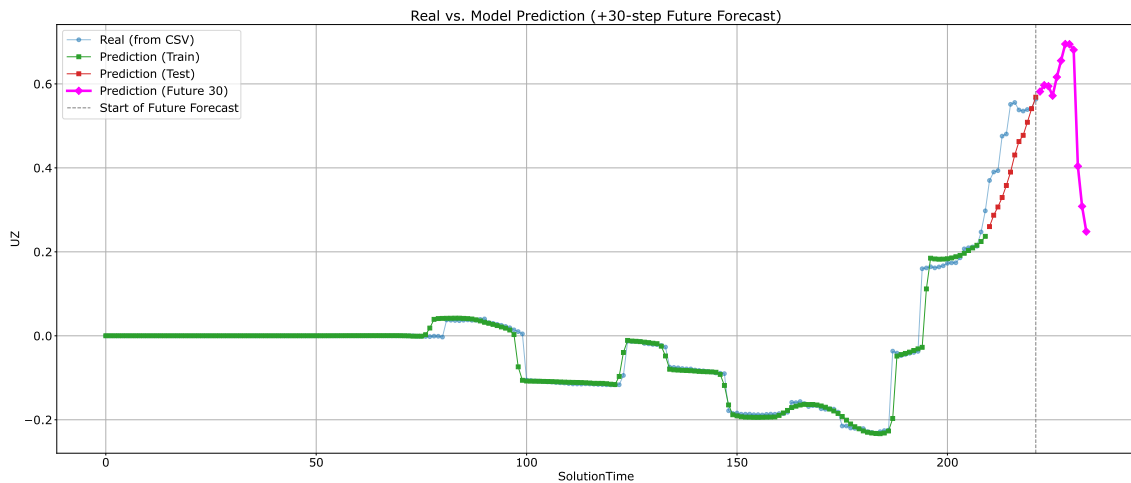
برای پیش‌بینی مقادیر آینده، 100% داده‌ها در اختیار مدل قرار داده شدند. مشابه با 12 گامی که برای داده‌های آزمون کنار گذاشته شده بود، این بار مدل 12 گام اضافی پس از داده‌های آزمون را پیش‌بینی و نمایش داد. به‌عنوان نمونه، نمودارهای UZ برحسب SolutionTime برای سه نقطه فهرست‌شده در جدول ۱۰.۵ در شکل‌های ۹.۵، ۱۰.۵ و ۱۱.۵ نشان داده شده‌اند.



شکل ۹.۵: پیش‌بینی ۱۲ گام آینده برای Sample1

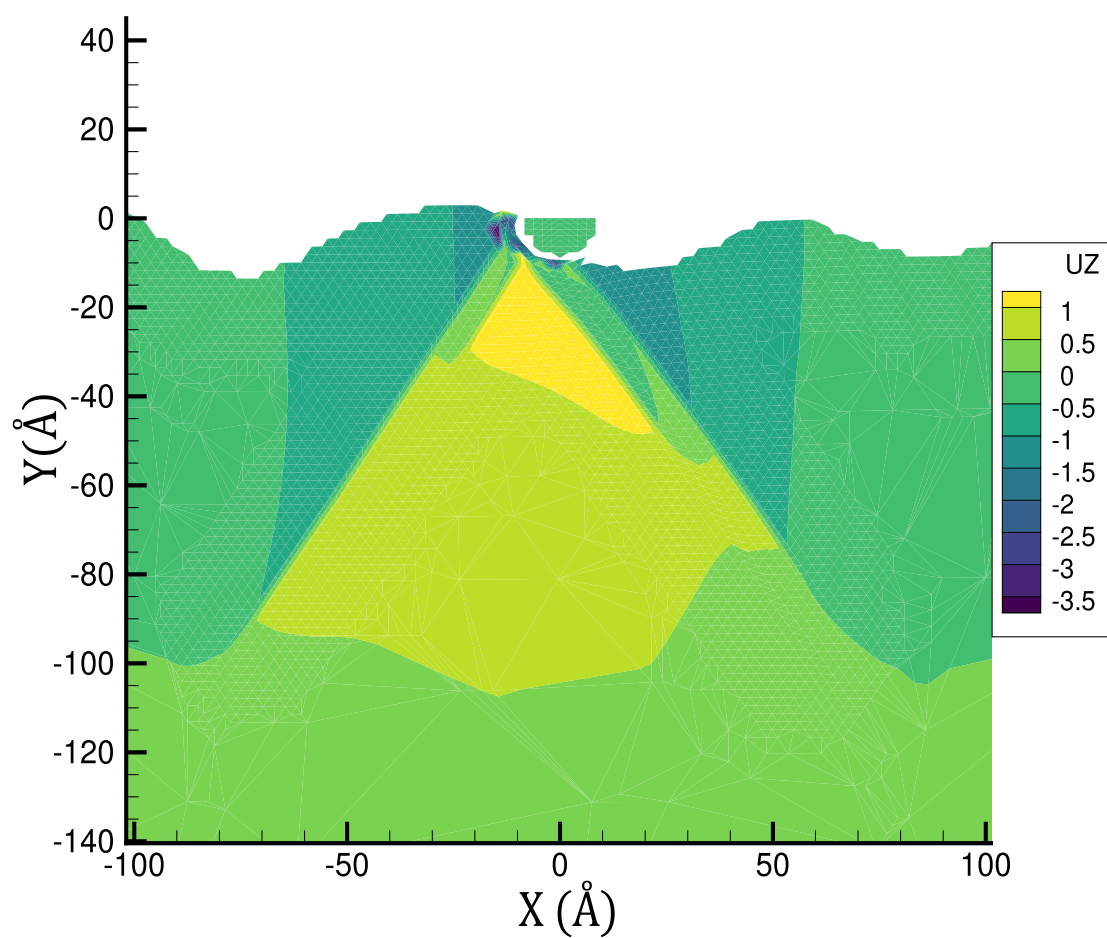


شکل ۱۰.۵: پیش‌بینی ۱۲ گام آینده برای Sample3

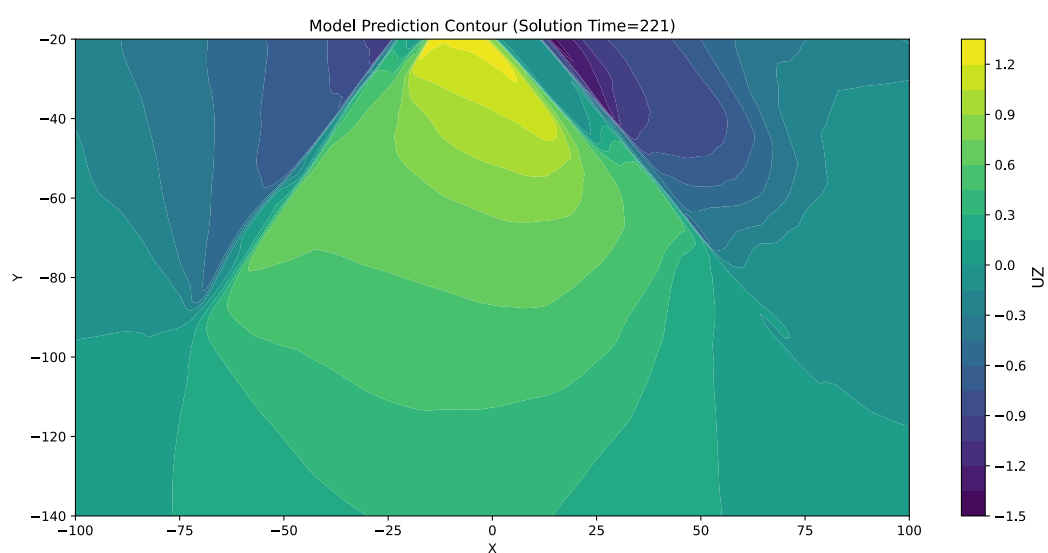


شکل ۱۱.۵: پیش بینی ۱۲ گام آینده برای Sample4

در نهایت، آنچه به طور گسترده موفقیت یادگیری مدل پیشنهادی را نشان می دهد، کانتور جابه جایی در گام های پایانی است. از این رو، کانتور به دست آمده از حل چندمقیاسی با کانتور پیش بینی شده توسط مدل حاضر مقایسه شد. این مقایسه که در شکل های ۱۲.۵ و ۱۳.۵ نشان داده شده است، تأیید می کند که انطباق قابل قبولی میان مقادیر واقعی UZ و پیش بینی های مدل وجود دارد. شایان ذکر است که مقدار خطای میانگین مربعات (MSE) محاسبه شده بر کل مجموعه داده در تمام گام های $SolutionTime$ (از ۰ تا ۲۲۱) برابر با $4/428325 \times 10^{-3}$ و ضریب تعیین $R^2 = 0/9175$ است. افزون بر این، زمانی که ارزیابی تنها به $SolutionTime = 221$ محدود می شود، مقدار MSE برابر با $1/894723 \times 10^{-1}$ و ضریب تعیین $R^2 = 0/7112$ خواهد بود. این خطای بالاتر نسبت به معیار کل مجموعه داده قابل انتظار است، زیرا مدل بر کل گام های $SolutionTime$ بهینه سازی شده است نه بر یک گام منفرد. مقیاس محورها در شکل های ۱۲.۵ و ۱۳.۵ متفاوت است. به ویژه در شکل ۱۳.۵ محور عمودی (محور y) از مقدار ۲۰- آغاز می شود؛ بنابراین مقایسه دیداری باید با در نظر گرفتن این جابه جایی انجام گیرد.



شکل ۱۲.۵: کانتور UZ در $\text{SolutionTime} = ۲۲۱$ - نتیجه QC



شکل ۱۳.۵: کانتور UZ در $\text{SolutionTime} = 222$ - خروجی مدل ترنسفورمر

۲.۵ نتیجه‌گیری

داده‌های به‌دست‌آمده از نانوایندنتیشن دیدگاه‌های ارزشمندی درباره‌ی خواص مکانیکی مواد فراهم می‌کنند. با این حال، پیچیدگی و تنوع داده‌های نانوایندنتیشن استخراج الگوها و پیش‌بینی مقادیر را با استفاده از الگوریتم‌های متداول یادگیری عمیق بسیار دشوار می‌سازد. در این مطالعه، روشی نوآورانه به نام SPICE معرفی شد که در آن ترنسفورمرها بر چنین داده‌هایی به‌کار گرفته شدند و یک تحلیل دقیق از نتایج عددی ارائه گردید. این رویکرد مسیری نو برای تغذیه داده‌ها به مدل ترنسفورمر پیشنهاد می‌دهد. به‌طور مشخص، با سازمان‌دهی هدفمند ورودی‌ها و افزودن نقاط مناسب به مجموعه داده، مدل قادر شد الگوهای پیچیده جابه‌جایی را در طول زمان ثبت کند.

بر اساس نتایج عددی، کیفیت کشف و یادگیری الگوهای فضازمانی موجود در داده‌های پیچیده شبیه‌سازی شبه‌پیوسته (Quasi-Continuum) هم از نظر دقت و هم از نظر زمان اجرا به‌طور معناداری بهبود یافت. نکته مهم در این مدل‌سازی موفق آن است که پیچیدگی‌های داده‌های نانوایندنتیشن، که در ابتدا موانعی برای به‌کارگیری معماری‌های ساده‌تر همچون شبکه‌های عصبی به نظر می‌رسیدند، در واقع به ارتقای عملکرد و توسعه مؤثر مدل کمک کردند.

این مطالعه چشم‌اندازهای جدیدی برای کاربرد معماری‌های ترنسفورمر در حل مسائل پیشرفته مهندسی ترسیم می‌کند. همچنین پیشنهاد می‌شود که معماری پیشنهادی برای تحلیل انواع مختلف داده‌های پیچیده سری‌های زمانی مورد استفاده قرار گیرد. افزون بر این، می‌توان الگوریتم کارآمدی برای انتخاب نقاط نمونه طراحی کرد و تأثیر انتخاب نقاط بر نتایج را به‌طور نظام‌مند بررسی نمود.

۳.۵ پیشنهادهای آینده

- توسعه و پیاده‌سازی مدل ترنسفورمر برای تحلیل همزمان نفوذکننده‌هایی با اشکال هندسی و ابعاد گوناگون و همچنین زبری‌های متفاوت، به منظور ارزیابی توانایی مدل در تعمیم‌پذیری به شرایط متنوع آزمایشگاهی و شبیه‌سازی.
- به‌کارگیری رویکرد SPICE در حوزه‌ی یادگیری سری‌های زمانی مالی، با هدف آموزش همزمان مدل بر روی مجموعه‌ای از شاخص‌ها، عوامل اقتصادی و سهام مختلف، به منظور ارتقای دقت پیش‌بینی و کارآمدی در تحلیل بازارهای مالی.

قدردانی

نگارندگان مقالات استخراج شده از این پایان‌نامه مراتب قدردانی خود را از آزمایشگاه الگوریتم‌ها و محاسبات (LAC)، دانشکده علوم مهندسی، دانشگاه تهران برای فراهم‌سازی دسترسی به منابع GPU مورد استفاده در این مطالعه ابراز می‌دارند. همچنین از پشتیبانی فنی آزمایشگاه محاسبات کارایی بالا (HPC-Lab)، دانشکده مهندسی عمران، برای داده‌های چندمقیاسی QC سپاسگزاری می‌شود.

کتاب نامه

- [1] Fischer-Cripps, A. C. (2011). *Nanoindentation* (3rd ed.). Springer, New York.
- [2] Alaboodi, S. A., & Hussain, G. (2019). Finite element modelling of nano-indentation technique to characterize thin film coatings. *Journal of King Saud University – Engineering Sciences*, 31(1), 61–69.
- [3] Tabor, D. (2000). *The Hardness of Metals* (reprint ed.). Oxford University Press.
- [4] Alder, B. J., & Wainwright, T. E. (1959). Studies in molecular dynamics. I. General method. *Journal of Chemical Physics*, 31(2), 459–466.
- [5] Zhang, Y., Zhao, Y., Zhang, X., Zhang, H., & Li, X. (2023). Machine learning aided nanoindentation: A review of the current state and future perspectives. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 27(4), 101091.
- [6] Nix, W. D., & Gao, H. (1998). Indentation size effects in crystalline materials: A law for strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(3), 411–425.
- [7] Moslemzadeh, H.; Alizadeh, O.; Mohammadi, S. (2019). Quasicontinuum multi-scale modeling of the effect of rough surface on nanoindentation behavior. *Meccanica*.

-
- [8] Zienkiewicz, O. C., & Taylor, R. L. (2000). *The Finite Element Method* (Vols. 1–3). Butterworth–Heinemann.
- [9] Belytschko, T., Liu, W. K., & Moran, B. (2013). *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures* (2nd ed.). Wiley.
- [10] Allen, M. P., & Tildesley, D. J. (2017). *Computer Simulation of Liquids* (2nd ed.). Oxford University Press.
- [11] Tadmor, E. B., Ortiz, M., & Phillips, R. (1996). Quasicontinuum analysis of defects in solids. *Philosophical Magazine A*, 73(6), 1529–1563.
- [12] Miller, R. E., & Tadmor, E. B. (2009). A unified framework and review of the quasicontinuum method. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(5), 053001.
- [13] Zhang, H., Zhao, Y., & Li, X. (2022). Advances of machine learning in nanoindentation data analysis. *Journal of Materials Science & Technology*, 99, 30–46.
- [14] Javaheri, E.; Kumala, V.; Javaheri, A.; Rawassizadeh, R.; Lubritz, J.; Graf, B.; Rethmeier, M. (2020). Quantifying Mechanical Properties of Automotive Steels with Deep Learning Based Computer Vision Algorithms. *Metals*, 10(2), 163.
- [15] Ghahremani, H.; Mohammadi, S. (2025). A Multitask Deep Learning Framework Based on QC Multiscale Modeling of Nanoindentation in Thin Films. submitted.
- [16] Vaswani, A., Shazeer, N., Parmar, N., Uszkoreit, J., Jones, L., Gomez, A. N., Kaiser, Ł., & Polosukhin, I. (2017). Attention is all you need. *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, 30.

-
- [17] Li, S., Jin, X., Xuan, Y., Zhou, X., Chen, W., Wang, Y., & Yan, X. (2019). Enhancing the locality and breaking the memory bottleneck of Transformer on time series forecasting. *NeurIPS*, 32.
- [18] Wu, H., Xu, J., Wang, J., & Long, M. (2021). Autoformer: Decomposition Transformers with Auto-Correlation for Long-Term Series Forecasting. *NeurIPS*, 34.
- [19] Lin, Z., Zhou, J., & Xu, Y. (2023). A review of Transformer architectures in natural language processing. *Artificial Intelligence Review*, 57(1), 1–40.
- [20] Lim, B., & Zohren, S. (2021). Time-series forecasting with deep learning: a survey. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 379(2194), 20200209.
- [21] Wang, Y., et al. (2022). Transformer-based models for time-series forecasting: A review. *Information Fusion*, 87, 147–170.
- [22] Li, H., Ma, X., Guo, Z., & Jin, L. (2022). Deep learning for time series forecasting: A survey. *Big Data Mining and Analytics*, 5(1), 1–23.
- [23] Box, G. E. P., Jenkins, G. M., Reinsel, G. C., & Ljung, G. M. (2015). *Time Series Analysis: Forecasting and Control* (5th ed.). Wiley.
- [24] Lai, G., Chang, W., Yang, Y., & Liu, H. (2018). Modeling Long- and Short-Term Temporal Patterns with Deep Neural Networks. In *Proceedings of SIGIR* (pp. 95–104).
- [25] Zhou, H., Zhang, S., Peng, J., Zhang, S., Li, J., Xiong, H., & Zhang, W. (2021). Informer: Beyond Efficient Transformer for Long Sequence Time-Series Forecasting. *AAAI*, 35(12), 11106–11115.
- [26] Wen, Q., Zhou, T., Zhang, C., Chen, W., Ma, Z., Yan, J., Sun, L., & Wang, F. (2022). Transformers in Time Series: A Survey. arXiv:2202.07125.

-
- [27] Child, R., Gray, S., Radford, A., & Sutskever, I. (2019). Generating long sequences with sparse transformers. arXiv:1904.10509.
- [28] Zhou, T., et al. (2022). FEDformer: Frequency Enhanced Decomposition Transformer for Long-term Series Forecasting. *ICLR 2022*.
- [29] Kitaev, N., Kaiser, L., & Levskaya, A. (2020). Reformer: The Efficient Transformer. *ICLR 2020*.
- [30] Liu, Z., Yu, H., Liao, C., Li, J., Liu, A. X., Lin, W., & Dustdar, S. (2022). Pyraformer: Low-Complexity Pyramidal Attention for Long-Range Time Series Modeling and Forecasting. *ICLR 2022*.
- [31] Cirstea, R.-G., Guo, C., Yang, B., Kieu, T., Dong, X., & Pan, S. (2022). Triformer: Triangular, Variable-Specific Attentions for Long Sequence Multivariate Time Series Forecasting. In *Proceedings of IJCAI-22* (pp. 1994–2001).
- [32] Gulati, A., Qin, J., Chiu, C.-C., Parmar, N., Zhang, Y., Yu, J., Han, W., Wang, S., Zhang, Z., Wu, Y., & Pang, R. (2020). Conformer: Convolution-Augmented Transformer for Speech Recognition. In *INTERSPEECH 2020* (pp. 5036–5040).
- [33] Zeng, A., et al. (2023). Are Transformers Effective for Time Series Forecasting? *ICLR 2023*.
- [34] Nie, Y., Nguyen, N. H., Sinthong, P., & Kalagnanam, J. (2022). PatchTST: Revisiting Patch Attention for Time Series Forecasting. arXiv:2211.14730.
- [35] Tuli, S., Casale, G., & Jennings, N. R. (2022). TranAD: Deep Transformer Networks for Anomaly Detection in Multivariate Time Series Data. *Proceedings of the VLDB Endowment*, 15(6), 1201–1214.

-
- [36] Kim, S., & Shin, H. (2025). Accelerating the data-driven multiscale finite element analysis for elastoplastic materials by using proper orthogonal decomposition and transformer architecture. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 437, 117827.
- [37] Kim, S., & Shin, H. (2024). Data-driven multiscale finite-element method using deep neural network combined with proper orthogonal decomposition. *Engineering with Computers*, 40, 661–675.
- [38] Grandío, J., Barros, B., Cabaleiro, M., & Riveiro, B. (2025). Point Transformer Network-Based Surrogate Model for Spatial Prediction in Bridges. *Infrastructures*, 10(4), 70.
- [39] Liu, Q., Li, S., Wang, Y., & Karniadakis, G. E. (2025). S-NOT: Sequential Neural Operator Transformer for High-Fidelity Dynamic Multivariate Sequence Prediction in Mechanics. arXiv:2507.03272.
- [40] Niu, J., Sun, X., Yan, B., Sun, Z., Wang, X., & Li, Z. (2024). Leveraging Deep Neural Networks for Estimating Vickers Hardness from Nanoindentation Hardness. *Materials*, 17(1), 148.
- [41] H. Ghahremani, O. Alizadeh, H. Moslemzadeh, and S. Mohammadi. (2025). Multi-scale Simulation of Nanoindentation: The Impact of Surface Roughness and Indenter Geometry on Thin Films. submitted.
- [42] Chawla, V., Penumadu, D., & Kalinin, S. (2025). Automating Nanoindentation: Optimizing Workflows for Precision and Accuracy. *arXiv preprint arXiv:2504.18525*.
- [43] Chakraborty, S., & Heintz, F. (2025). Enhancing Time Series Forecasting with Fuzzy Attention Integrated Transformers (FANTF). *arXiv preprint arXiv:2504.00070v1*.

-
- [44] Koohpayegani, A., et al. (2025). SimA: Simple Softmax-Free Attention for Vision Transformers. *WACV 2024*.
- [45] Jiang, X., Ou, L., Chen, Y., et al. (2024). A Fuzzy-based Attention Layer for fNIRS Neural Data.
- [46] Zhang, Y., et al. (2024). Stacked hybrid model for load forecasting: Combining Transformer-based Time-Series with Fuzzy Logic to Enhance Robustness against Noisy Data. *Scientific Reports, Nature Publishing Group*.
- [47] Xing, J., Xue, C., Luo, D., & Xing, R. (2024). FGATT: Fuzzy Graph Attention + Transformer for Wireless Data Imputation.
- [48] Laurent Brocq, M., Béjanin, E., & Champion, Y. (2015). Influence of roughness and tilt on nanoindentation measurements: a quantitative model. *Scanning*, 37(5), 350–360.
- [49] Chen, L., Ahadi, A., Zhou, J., & Ståhl, J. (2014). Numerical and experimental study of the roughness effects on mechanical properties of AISI 316L by nanoindentation. *Modelling and Numerical Simulation of Material Science*, 4, 153–162.
- [50] Devlin, J., Chang, M.-W., Lee, K., & Toutanova, K. (2019). BERT: Pre-training of Deep Bidirectional Transformers for Language Understanding. In *Proceedings of NAACL-HLT 2019* (pp. 4171–4186).
- [51] Brown, T. B., Mann, B., Ryder, N., Subbiah, M., Kaplan, J., Dhariwal, P., ... Amodei, D. (2020). Language models are few-shot learners. *NeurIPS*, 33, 1877–1901.
- [52] Dosovitskiy, A., Beyer, L., Kolesnikov, A., Weissenborn, D., Zhai, X., Unterthiner, T., Dehghani, M., Minderer, M., Heigold, G., Gelly, S., Uszkoreit, J., & Houlsby,

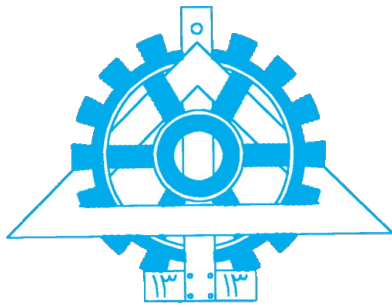
N. (2021). An image is worth 16×16 words: Transformers for image recognition at scale. *ICLR 2021*.

[53] Herbert, F. (1965). *Dune*. Chilton Books.

Abstract

Complexity and diversity of multiscale nanoindentation data create a challenging domain for deep learning models, where conventional architectures often fail to capture hidden patterns and nonlinear structures. In this study, transformers are implemented along with the introduction of an innovative method for data feeding called SPICE. This method focuses on how data are given to the transformer. A few randomly selected points are added to the data and, through this structured strategy, enables more accurate and stable extraction of complex temporal displacement patterns. Numerical results demonstrate significant improvements in both predictive accuracy and computational efficiency when analyzing large-scale data of Quasi-Continuum simulation of nanoindentation. The findings highlight the potential of SPICE to address the intrinsic challenges of nanoindentation data and point to new directions for applying transformer architectures to advanced engineering problems.

Keywords Nanoindentation, Transformer, Multiscale Modeling, Deep Learning



University of Tehran
College of Engineering
Faculty of Engineering Science
Algorithms and Computation



Application of Transformer Architecture to Multiscale Nanoindentation Analysis

A Thesis submitted to the Graduate Studies Office
In partial fulfillment of the requirements for
The degree of Master of Science
in Computer Engineering - Algorithms and Computation

By:

SeyedMohamadMahdi SeyedMohamadiShaal

Supervisors:

**Negin Bagherpour
Soheil Mohammadi**

October 2025