

## شبیه‌سازی عددی رفتار مکانیکی مواد نانو و میکرو همراه با پیش‌بینی استحکام تسلیم با استفاده از مدل‌های یادگیری ماشین در محیط پایتون

لیلا میرزایی<sup>۱\*</sup>، آرش باقریه<sup>۲</sup>

۱- کارشناس واحد تحقیق و توسعه شرکت غلتک سازان سپاهان، leylamrz98@gmail.com

۲- مدیر واحد تحقیق و توسعه شرکت غلتک سازان سپاهان، arashbagheriyeh@gmail.com

### خلاصه

در این پژوهش، تأثیر اندازه ذرات در دو مقیاس نانویی و میکرونی بر رفتار مکانیکی مواد با استفاده از شبیه‌سازی عددی در محیط پایتون مورد بررسی قرار گرفته است. در مدل توسعه‌یافته، شعاع متوسط ذرات، تخلخل و نسبت سطح به حجم به‌عنوان پارامترهای اصلی در نظر گرفته شدند و بر اساس روابط شناخته‌شده در علم مواد، مقادیر مدول یانگ و استحکام تسلیم برای ساختارهای مختلف محاسبه گردید. نتایج نشان می‌دهد که کاهش اندازه ذرات تا محدوده نانومتری موجب افزایش قابل توجه استحکام تسلیم می‌شود که این امر عمدتاً به افزایش نسبت سطح به حجم و تقویت مکانیزم‌های وابسته به ریزساختار مرتبط است. همچنین مشاهده شد که مدول یانگ بیش از هر چیز تحت تأثیر میزان تخلخل قرار دارد و تغییرات اندازه ذرات تأثیر ثانویه بر آن دارد. برای بررسی توان پیش‌بینی این الگو، یک مدل ساده یادگیری ماشین آموزش داده شد که توانست رابطه بین ویژگی‌های ساختاری و استحکام تسلیم را با دقت مناسبی بازسازی کند. یافته‌های این پژوهش نشان می‌دهد که ترکیب شبیه‌سازی عددی با روش‌های تحلیل داده می‌تواند رویکردی کارآمد برای ارزیابی رفتار مکانیکی مواد در مقیاس‌های مختلف ارائه دهد و امکان تحلیل سریع تأثیر پارامترهای ابعادی را فراهم سازد.

**کلمات کلیدی:** نانومواد، رفتار مکانیکی، انرژی سطحی، یادگیری ماشین، شبیه‌سازی عددی، پایتون.

### ۱. مقدمه

صنعت مواد در دهه‌های اخیر با گسترش و توسعه فناوری نانو دستخوش تحولات چشمگیری شده است. کاهش ابعاد ساختارها تا مقیاس نانومتری موجب تغییرات بنیادین در خواص فیزیکی و مکانیکی مواد می‌شود و رفتارهایی را ایجاد می‌کند که در مقیاس بالک مشاهده نمی‌گردد. به‌ویژه خواصی مانند استحکام، مدول الاستیسیته، انرژی سطحی و پایداری ساختاری به‌شدت تابع اندازه ذرات هستند و این موضوع ضرورت مطالعه دقیق اثرات ابعادی را دوچندان کرده است. بررسی‌های انجام‌شده نشان می‌دهد که افزایش نسبت سطح به حجم در نانو ساختارها و تغییرات مربوط به مرزخانه‌ها نقش مهمی در تقویت رفتار مکانیکی ایفا می‌کنند [۱،۲]. بر اساس پژوهش‌های گسترده، کوچک‌شدن اندازه ذرات یا دانه‌ها می‌تواند استحکام تسلیم، سختی و انرژی سطحی را به میزان قابل توجهی افزایش دهد و این موضوع یکی از مباحث کلیدی در مهندسی مواد نانو ساختار است [۲].

از سوی دیگر، بررسی تجربی خواص مواد در مقیاس‌های بسیار کوچک غالباً پرهزینه، پیچیده و زمان‌بر است؛ به همین