

مدلسازی مدول یانگ، چقرمگی شکست و انرژی شکست کامپوزیت های تقویت شده با نانوذرات اکسید روی به روش های درخت تصمیم، شبکه عصبی مصنوعی و سطح پاسخ و بهینه سازی به کمک الگوریتم ژنتیک

عبدالرضا علوی قره باغ^{۱*}، علی دادرسی^۲، ساسان فولادپنجه^۳

۱- استادیار، گروه مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران
 ۲- استادیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد شاهرود، دانشگاه آزاد اسلامی، شاهرود، ایران
 ۳- آزمایشگاه مواد و پلیمر دانشگاه صنعتی امیر کبیر، تهران، ایران
 *Semenan, (۳۵۱۳۱-۱۹۱۱۱), (Abdorrezza.alavi@semnan.ac.ir)

چکیده

در این مقاله، یک مدلسازی عددی به روش پارامترهای چقرمگی شکست (K_{IC})، انرژی شکست (G_{IC}) و مدول یانگ (E) کامپوزیت‌های استایرن آکریلونیتریل با محتوای ۲۴ و ۳۴ درصد آکریلونیتریل که با نانوذرات اکسید روی تا سقف ۱ درصد حجمی تقویت شده، انجام شده است. پارامترهای مورد بررسی در مدلسازی، درصد حجمی نانوذرات و محتوای آکریلونیتریل بوده و روش‌های درخت تصمیم، شبکه عصبی مصنوعی و سطح پاسخ مد نظر قرار گرفته‌اند. مقایسه نتایج آزمایشگاهی و مدلسازی نشان می‌دهد که روش سطح پاسخ مرتبه دو بهترین پیش‌بینی را دارد. در نهایت بر اساس بهینه سازی صورت گرفته با الگوریتم ژنتیک بر روی مدل منتخب، مقدار بهینه چقرمگی شکست در ۳۴ درصد حجمی آکریلونیتریل و ۰/۱ درصد حجمی اکسید روی مشاهده شده است که برابر ۲/۲۸۳ MPa.m^{1/2} است. بهترین مقدار انرژی شکست نیز در ۳۴ درصد حجمی آکریلونیتریل و ۰/۳۳ درصد وزنی اکسید روی بدست آمد که معادل ۱۱۰۱ J/m² می‌باشد. همچنین مقدار بهینه مدول یانگ در ۳۱ درصد حجمی آکریلونیتریل و ۰/۵ درصد حجمی اکسید روی بدست آمده که برابر ۴/۲۸۱ GPa است.

کلید واژگان

چقرمگی شکست- انرژی شکست- روش سطح پاسخ- شبکه عصبی مصنوعی- بهینه سازی

Modelling of Young's Modulus, Fracture toughness & Fracture Energy of Composites Reinforced by ZnO Nanoparticles by Regression Tree, ANN & RSM and Optimization by Genetic Algorithm

Abdolreza Alavi Gharebagh^{1*}, Ali Dadrasi², Sasan Fooladpanjeh³

1- Department of Computer and Electrical Engineering, Semnan University, Semnan, Iran
 2- Department of Mechanical Engineering, Shahrood Branch, Islamic Azad University, Shahrood, Iran
 3- Laboratory of material & Polymer, AmirKabir University of Technology, Tehran, Iran.
 *Abdorrezza.alavi@semnan.ac.ir, Semnan, Pc 35131-19111

Abstract

A modelling of fracture toughness (K_{IC}), fracture energy (G_{IC}) and Young's modulus of styrene acrylonitrile composites by two volume content of 24% and 34% acrylonitrile has been conducted. ZnO nanoparticles were added to composites up to 1 wt%. Volume percent of nanoparticles and acrylonitrile's content has been used as input parameters for ANN, RSM and regression tree modelling. The results of modeling showed that the second order response surface method makes the best prediction. Additionally, the selected model optimized by binary GA. Based on this optimization, the best value for Fracture toughness is 2.283 MPa.m^{1/2} when the volume percent of styrene acrylonitrile is 34% and volume percent of ZnO is 0.1%. Also, the best value for fracture energy is equal to 1101 J/m², when the volume percent of styrene acrylonitrile is 34% and the volume percent of ZnO is 0.33%. And finally, this method shows that the best value for Young's modulus is 4.281 GPa when the volume percent of styrene acrylonitrile is 31% And volume percent of the particle is 0.5%.

Keywords

Fracture toughness- Fracture energy- Response surface method-Artificial neural network-Optimization

۱- مقدمه

غذایی، آرایش، دارویی و در ساخت پره‌های پنکه، قطعات داخلی یخچال، اسباب بازی، قطعات اتومبیل، ظروف غذا، نوار کاست و بطری نوشابه به کار می‌رود [۱، ۲]. امروزه با ظهور نانو فناوری، استفاده از نانوذرات در ساختار پلیمرها، یک راهکاری نوین برای بهبود خواص مواد پلیمری مد نظر است که می‌توان به تهیه نانوکامپوزیت‌های پلی یوونیل، کلرید با نانوذرات مونت موریلونیت، نانولوله کربن، تیتانیوم دی اکسید و اکسید روی اشاره کرد که در تغییر بسیاری از خواص پلیمرها نقش بسزایی دارند. خواص کششی، خمشی و پایداری گرمایی از جمله خواصی هستند که بر اثر وجود نانومواد در

استایرن آکریلونیتریل (SAN) از جمله رزین‌های ترموپلاستیک یا گرمنازم شفاف است که به دلیل دارا بودن خواص فیزیکی و مکانیکی مناسب، مقاومت خوب در برابر حلال‌های شیمیایی، ضریب انبساط حرارتی مناسب، استحکام کششی بالا و نیز قیمت ارزان نسبت به سایر کولپلیمرهای استایرن، در زمره پرمصرف‌ترین آنها قرار گرفته است [۱]. آکریلونیتریل کاربردهای بسیار متنوعی در مصارف اداری و صنعتی دارد؛ همچنین در بسته بندی مواد

مقدار آن معادل ۵۴ مگاپاسکال بود و افزایش آن نسبت به پلی استایرن خالص، ۶۱ درصد بود.

همچنین تحقیقات گسترده‌ای در زمینه‌ی مدلسازی خواص مکانیکی صورت گرفته است که برای دستیابی به یک روش ایده‌آل، از روش‌های مختلفی بهره گرفته شده است. لو و همکاران [۱۷] استحکام کششی کامپوزیت کلسیم فسفات، نانولوله‌های کربنی و سرم آلومین را مورد بررسی قرار دادند. نتایج آزمایشگاهی آنها نشان داد که بیشترین مقدار این خاصیت در ۰/۵ درصدوزنی نانولوله‌های کربن و ۱۵ درصدوزنی سرم آلومین بدست آمده است و مقدار آن برابر ۱۴ مگاپاسکال می‌باشد. همچنین آنها با کمک روش سطح پاسخ توانستند با خطای ۸ درصد، به مقدار ۱۳/۴۷ مگاپاسکال دست یابند. قاسمی و همکاران [۱۸] با استفاده از درصد وزنی‌های مختلف از طلق، گرافن و پلی پروپیلن و با بهره گرفتن از روش سطح پاسخ توانستند یک مدل منتخب ارائه کنند. نتایج آنها برای استحکام کششی نشان داد که بهترین مقدار بهینه برای این خاصیت در ۳۰ درصد وزنی طلق، ۰/۶۹ درصد وزنی گرافن و ۴ درصد وزنی پلی پروپیلن بدست آمده است که مقدار آن برابر ۴۲/۸ مگاپاسکال می‌باشد. همچنین نتایج آنها برای مقدار بهینه استحکام به ضربه این کامپوزیت در همان درصد وزنی‌های یاد شده گزارش شده است که مقدار آن برابر ۲۷/۹ J/m است. با توجه به رابطه‌ی ارائه شده برای مدل‌ها، گرافن بیشترین تأثیر را در نتایج داشته است. مورفی و همکاران [۱۹] خواص مکانیکی پلی‌استر به همراه اکسید آلومینیوم و کلسیم کربنات را مورد آزمایش قرار دادند. نتایج آزمایشگاهی آنها برای استحکام کششی و پیچشی نشان داد که بیشترین مقدار آنها در ۴ درصد حجمی از نانوذرات بدست آمده است و مقدار آنها به ترتیب ۳۰/۴۵ و ۸۹/۷۵ مگاپاسکال است. آنها همچنین با کمک روش‌های شبکه عصبی مصنوعی و سطح پاسخ، مقادیر بهینه‌ی خواص بالا را گزارش کردند. مقدار بهینه‌ی استحکام کششی در ۳ درصد حجمی نانوذرات بدست آمد که مقدار آن ۲۲/۶۸ مگاپاسکال می‌باشد؛ مقدار بهینه‌ی استحکام پیچشی در ۳/۱۷ درصد حجمی نانوذرات گزارش شد که مقدار آن برابر ۸۶ مگاپاسکال است.

در این مقاله، مدل‌هایی به کمک روش‌های درخت تصمیم، شبکه عصبی مصنوعی و سطح پاسخ، برای نتایج تجربی بدست آمده از بررسی برخی از خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های استایرن آکریلونیتریل/اکسید روی [۲۰] ارائه شده است. مقایسه بین نتایج مدل‌ها انجام گرفته و بهترین مدل استخراج شده است و در نهایت، مقدار درصد وزنی بهینه هر یک از پارامترها به کمک روش الگوریتم ژنتیک ۱ گزارش شده است.

۲- پایگاه داده

اطلاعات استفاده شده در این مدلسازی از یک آزمایش استاندارد [۲۰] که در آن از دو ترکیب استایرن/آکریلونیتریل استفاده شده، بدست آمده است. ترکیب نخست با نام تجاری لوران VLN، ۲۴ درصد حجمی و دیگری با نام تجاری لوران VLP، ۳۴ درصد حجمی آکریلونیتریل بوده است. نانوذره اکسید روی نیز از نوع نانوذره میله‌ای کوتاه با قطر ۱۳ نانومتر و دارای نسبت طول به قطر ۳ و تمامی مواد از شرکت BASF SE آلمان بوده است. عمل ترکیب اکسید روی و آکریلونیتریل توسط یک همزن با نام Werner در ۱۵۰ دور بر دقیقه صورت گرفته است. نمونه‌های آماده شده در قالب‌های فشاری با ضخامت ۴ و ۶ میلی متر به وسیله یک دستگاه پرس، تحت فشار ۵

کامپوزیت‌ها بهبود می‌یابند [۷-۴]. استفاده از گونه‌های مختلف نانوذرات بر روی پراکندگی آن تأثیرگذار است و نیز استفاده از شکل‌های مختلف نانوذرات همچون کروی و استوانه‌ای، نتایج مختلفی را در بر خواهد داشت [۸ و ۹]. در چند دهه‌ی اخیر، محققین از پرکننده‌های مختلفی جهت بهبود خواص مختلف مکانیکی استفاده کرده‌اند. دینگ و همکاران [۱۰] با استفاده از رزین اپوکسی و درصدهای وزنی مختلف از نانوذره اکسید روی، خواص مکانیکی آن را مورد بررسی قرار دادند. درصد وزنی‌های مورد استفاده، ۰ تا ۷ درصد وزنی بوده است و بیشترین مقدار بدست آمده برای استحکام کششی در ۵ درصد وزنی رخ داده است و مقدار آن معادل ۵۳/۱۴ مگاپاسکال می‌باشد و ۴۰/۴۸ درصد نسبت به اپوکسی خالص افزایش یافته است. در مورد مدول کششی نیز افزایش ۲۷ درصدی را گزارش کردند و مقدار آن در ۵ درصد وزنی اکسید روی معادل ۰/۴۲ گیگاپاسکال می‌باشد. همچنین مقدار بدست آمده برای مقاومت خمشی نیز در ۵ درصد وزنی بوده است و مقدار آن معادل ۹۹/۹۸ مگاپاسکال می‌باشد و افزایش آن نسبت به اپوکسی خالص، ۵۱ درصد می‌باشد. استفان و همکاران [۱۱] یک حالت ترکیبی از نانوذرات اکسید روی و سدیم هیدروکسید را به همراه پلی پروپیلن مورد بررسی قرار دادند. بهترین مقدار استحکام کششی معادل ۴۴/۳۷ N/mm² بود.

ژنگ و همکاران [۱۲] اثر افزودن ZnO را بر خواص مکانیکی پلی یورتان بررسی کردند. آنها با استفاده از چهار درصد وزنی مختلف از اکسید روی نشان دادند که مقدار مدول یانگ از ۳۸۳ مگاپاسکال برای پلی یورتان خالص به ۱۹۸ مگاپاسکال رسید که روند نزولی را ارائه کردند. لی و همکاران [۱۳] یک مطالعه تجربی بر روی اکسید روی و رزین هیدروکسیل آکرلیک انجام دادند. آنها نانوذره‌هایی با درصدوزنی های ۰، ۱، ۲، ۳ و ۴ را مورد استفاده قرار دادند و بیشترین مقدار مدول یانگ را در ۲ درصد وزنی گزارش کردند که معادل ۷۱۰/۴۸ مگاپاسکال بود. همچنین بیشترین مقدار استحکام کششی نیز در همین درصد وزنی ارائه گشت که معادل ۱۷/۸۳ مگاپاسکال بود.

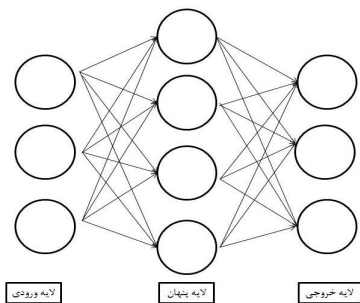
فرانسیس [۱۴] با استفاده از رزین اپوکسی و درصد وزنی‌های مختلف اکسید روی، نتایج زیر را گزارش کرد. مقدار چقرمگی شکست از ۳/۹۶ MN/m-3/2 برای اپوکسی خالص، به ۴/۲۵ MN/m-3/2 در ۲ درصد وزنی نانوذره رسید. اما برای مدول یانگ و استحکام خمشی، کاهش مقادیر را گزارش کردند؛ به گونه‌ای که مقدار مدول یانگ در اپوکسی خالص معادل ۳/۲ گیگاپاسکال بود که با افزایش مقدار اکسید روی، کاهش این خاصیت مشاهده شد. برای استحکام خمشی نیز، بیشترین مقدار در اپوکسی خالص بدست آمد و معادل ۱۱۲ مگاپاسکال بود. مطالعه‌ی انجام شده توسط یانگ ما و همکاران [۱۵] در پنج درصد وزنی مختلف ۰/۵، ۱، ۱/۵، ۲ و ۴ از اکسیدروی صورت گرفت. آنها نشان دادند که بیشترین مقدار استحکام کششی در ۰/۵ درصد وزنی می‌باشد که مقدار آن برابر ۱۲/۶ مگاپاسکال بوده است و در مقایسه با پلی یورتان خالص، ۳۴ درصد افزایش این مقدار را شاهد هستیم. آنها گزارش کردند که با افزودن مقدار نانوذره، این خاصیت کاهش می‌یابد.

در آزمایشی دیگر، علم و همکاران [۱۶] خواص مکانیکی اکسید روی و پلی استایرن را مورد بررسی قرار دادند. آنها سه درصد وزنی ۰/۱، ۰/۲ و ۰/۳ را مورد استفاده قرار دادند و بهترین استحکام کششی را در ۰/۲ درصد وزنی گزارش کردند که مقدار آن معادل ۳۱ مگاپاسکال بود که در مقابل پلی استایرن خالص، ۳۷ درصد افزایش را نشان می‌دهد. همچنین در رابطه با استحکام خمشی نیز بیشترین مقدار در همین درصد وزنی بدست آمد و

از حد مدل" خواهیم شد که به دلیل وجود موارد غیرعادی در داده‌های آموزشی، خطا تولید می‌کند [۲۲].

۴- شبکه عصبی مصنوعی (ANN)

شبکه‌های عصبی مصنوعی، الگوریتم‌های رایانه‌ای هستند که برگرفته از ساختار و رفتار نرون‌های واقعی هستند. ANN از مجموعه‌ای از واحدهای پردازش تشکیل یافته که نرون‌ها را شبیه سازی می‌کند و با مجموعه‌ای از پیوندها به یکدیگر متصل هستند که به سیگنال‌ها اجازه می‌دهد که هم بطور موازی و هم بطور سری حرکت کنند. هر پیوند، خروجی هر واحد را در یک عامل وزنی که به واقع قدرت اتصال در هر سیناپس است، ضرب می‌کند. پس از آن پیوند، مقدار خروجی وزن داده شده را به واحد دیگر منتقل می‌کند که مقادیر وارد شده را با مقادیر پیوندهای دیگر جمع می‌کند. اگر مقدار کل ورودی از مقدار آستانه تعیین شده فراتر رود، آن واحد از بین می‌رود. اصلاحات در الگوهای از بین رفتن، آموزش را تشکیل می‌دهد. ANN از لایه-هایی تشکیل شده است که به سه دسته تقسیم می‌شوند. شکل ۱ نشان دهنده‌ی این سه دسته است که بخش اول لایه‌ای از واحدهای ورودی است که اطلاعاتی که به شبکه خورنده می‌شود را نمایش می‌دهد. بخش دوم، یک یا چند لایه پنهان بین دو لایه‌ی ورودی و خروجی را نمایش می‌دهد و بخش سوم لایه‌ای از واحدهای خروجی را نشان می‌دهد که خروجی شبکه را نمایش می‌دهد.



شکل ۱ مدل شبکه عصبی مصنوعی پس از انتشار

برای آموزش ANN با یک هدف مشخص برای نمونه مدلسازی تصادفات، نخست باید نحوه چینش و پیوند واحدها به یکدیگر در قالب معماری شبکه تعیین شود. آموزش، ارائه شبکه عصبی با نمونه‌های مشخص است که مجموعه داده‌ها گفته می‌شود [۲۳]. یکی از موفق‌ترین روش‌های آموزش، الگوریتم پس از انتشار است که مفهوم اساسی آن، استفاده از مشتق یک تابع خطا برای یافتن جهتی است که خطای شبکه را حداقل می‌کند.

۴-۱- ارزیابی مدل

هنگام ارائه نمونه آموزش n با شبکه، خطای خروجی نرون ام لایه خروجی در تکرار nام مانند زیر است:

$$e_i(n) = d_i(n) - y_i(n) \quad (1)$$

مگاپاسکال و دمای ۲۰۰ درجه سانتی گراد قرار گرفته و سپس نمونه‌ها در دمای ۸۰ درجه سانتی گراد توسط یک آون به مدت ۳۶ ساعت خشک شده-اند. آزمایش کشش با استفاده از دستگاه اینسترون ۵۵۸۴ و بر اساس استاندارد ASTM D638 در دمای محیط انجام شده که نمونه‌های مورد استفاده برای این آزمایش، دمبلی شکل و با ابعاد ۴ میلی‌متر عرض و ۴ میلی‌متر ضخامت بوده است. آزمون چقرمگی شکست (KIC) نیز بر اساس استاندارد ASTM D5045 و با نمونه‌هایی با ضخامت ۶ میلی‌متر و عرض ۴۵ میلی‌متر و با استفاده از همان دستگاه اینسترون ۵۵۸۴ در دمای ۲۳ درجه سانتی گراد انجام شده است. اطلاعات نهایی آزمایش‌های پایگاه داده مورد استناد در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱ خواص مکانیکی کامپوزیت های استایرن آکریلونیتریل/ اکسید روی [۲۰]

نمونه	درصد حجمی (v%)	مدول یانگ (GPa)	چقرمگی (MPa.m ^{1/2})	انرژی شکست (J/m ²)
SAN-24	۰	۳/۸۷	۱/۱۲	۳۱۶
	۰/۰۵	۳/۹۵	۱/۴۱	۴۴۱
	۰/۱	۳/۹۸	۱/۴۰	۴۴۵
	۰/۳	۴/۰۳	۱/۳۴	۴۰۲
	۰/۵	۴/۰۶	۱/۲۶	۳۷۲
SAN-34	۰	۴/۱۴	۲/۱۱	۹۶۳
	۰/۱	۴/۲۱	۲/۳۰	۱۱۶۶
	۰/۵	۴/۲۴	۲/۱۸	۱۰۴۳
	۱	۴/۲۳	۱/۹۳	۸۱۴

۳- درخت تصمیم

درخت‌های تصمیم روشی برای نمایش یک سری از قوانین هستند که منتهی به یک رده یا مقدار می‌شوند. درخت تصمیم یک روش معروف برای دسته بندی است که نتایج آن در یک فلوچارت، که ساختار آن شبیه یک درخت است، نمایش داده می‌شود؛ به گونه‌ای که هر گره نشانگر یک آزمایش بر روی ارزش مشخصه و هر شاخه، خروجی هر آزمایش را بیان می‌کند. همچنین برگ‌های درخت نیز نمایانگر کلاس‌ها است. به طور عادی، پیچیدگی یک درخت تصمیم با افزایش تعداد مشخصه‌ها افزایش می‌یابد. اگرچه در بعضی از شرایط دیده شده است که تنها تعداد کمی از مشخصه‌ها می‌توانند کلاسی را که هر شیء به آن تعلق دارد، تعیین کنند و بقیه مشخصه‌ها کم یا بی‌تاثیر هستند [۲۱]. در ساخت درخت‌های تصمیم به طور معمول داده‌ها را به دو دسته تقسیم می‌کنند: داده‌های آموزشی^۱ که برای ساخت مدل مورد استفاده قرار می‌گیرند و داده‌های آزمایش^۲ که برای آزمایش و ارزیابی مدل ساخته شده کاربرد دارند. کیفیت داده‌های آموزشی اغلب نقش مهمی در تعیین کیفیت درخت تصمیم دارد. در صورتی که آموزش سیستم زیاد شود، یعنی داده‌هایی که برای آموزش و ساخت مدل به کار می‌رود، درصد زیادی از داده‌ها باشد، دچار حالتی به اسم "آموزش بیش

2. Regression Tree
3. Node
1. Train Data
2. Test Data

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^M (y_i - \bar{y}_i)^2}{M} \quad (6)$$

معیار روش های دیگری هم وجود دارد که از میان آنها می توان به خطای نسبی اشاره کرد. این روش برای تعیین شایستگی مدل زمانی مناسب و کارآمد است که در اطلاعات آزمایش عدد صفر وجود نداشته باشد.

$$RE = \left| \frac{y_i(x) - \bar{y}_i(x)}{y_i(x)} \right| \times 100 \quad (7)$$

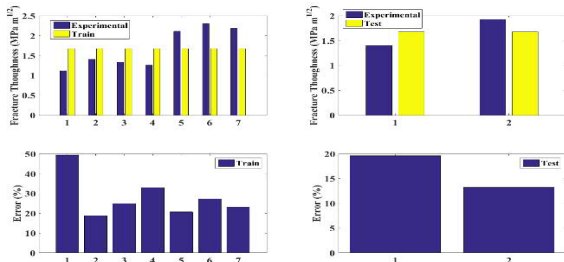
یکی دیگر از معیارهای متداول در بحث انطباق مدل ها، ضریب همبستگی پیرسون یا ضریب همبستگی حاصل ضرب گشتاور پیرسون است که میزان همبستگی خطی بین دو مقدار خروجی مدل و مقدار آزمایشگاهی را می سنجد. مقدار این ضریب بین -1 تا 1 تغییر می کند که «1» به معنای همبستگی مثبت کامل، «0» به معنی نبود همبستگی، و «-1» به معنی همبستگی منفی کامل است. این ضریب توسط کارل پیرسون براساس ایده اولیه فرانسیس گالتون تدوین شد. رابطه (8) فرم ریاضی این ضریب را نشان می دهد.

$$\rho(y, \bar{y}) = \frac{cov(y, \bar{y})}{\sigma_y \sigma_{\bar{y}}} = \frac{E((Y - \mu_Y)(\bar{Y} - \mu_{\bar{Y}}))}{\sigma_Y \sigma_{\bar{Y}}} \quad (8)$$

در انطباق دو مدل مقدار قدر مطلق این معیار مهم است که باید تا حد امکان به یک نزدیک باشد و هر چه از یک دورتر باشد به معنی ضعف و ناکارآمد بودن مدل محسوب می شود. گاهی این پارامتر را برحسب درصد نیز بیان می کنند که عددی بین صفر تا صد خواهد داشت.

6- مدلسازی نتایج تجربی

همان گونه که اشاره شد، در این مقاله از روش های درخت تصمیم، شبکه عصبی مصنوعی و سطح پاسخ برای مدل کردن پارامترهای چقرمگی شکست، انرژی شکست و مدول یانگ در فرآیند استفاده شده است. در همه شبیه سازی ها از 9 نمونه موجود، 70% آن معادل 7 نمونه به عنوان نمونه آموزش و 2 نمونه باقی مانده به عنوان نمونه آزمایش در نظر گرفته شده اند. نوع انتخاب نمونه های آموزش و آزمایش تصادفی بوده است. نتایج بدست آمده از روش درخت تصمیم برای چقرمگی شکست و انرژی شکست به همراه خطای آنها در هر حالت در شکل های 2 و 3 نشان داده شده است.



شکل 2 مقایسه نتایج مدل و آزمایشگاه برای چقرمگی شکست با نمونه های مختلف برای مدل درخت تصمیم

که در آن $d_i(n)$ پاسخ مطلوب و $y_i(n)$ خروجی واحد ام است. اگر انرژی خطا برای نرون ام برابر $\frac{1}{2}e_i^2(n)$ باشد، انرژی خطای کل برای تمام نرون های لایه خروجی برابر خواهد بود با:

$$E_{av} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^m e_i^2(n) \quad (2)$$

که در آن m شمار واحدهای لایه خروجی است. اگر N نمونه آموزشی به عنوان مجموعه داده ها به شبکه عصبی ارائه شود، میانگین مربعات انرژی خطا با جمع کردن $E(n)$ ها و N بار نرمال کردن آن مانند زیر خواهد بود:

$$E_{av} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N E(n) \quad (3)$$

هدف از فرآیند آموزش، کمینه کردن E_{av} است.

5- مدلسازی به روش سطح پاسخ RSM

روش سطح پاسخ، به مجموعه ای از تکنیک های الگوریتم های ریاضی گفته می شود که با استفاده از روش های برازش، سیستم های مختلف را به صورت ریاضی مدل می کنند. اولین قدم در روش سطح پاسخ پیدا کردن تقریب مناسب برای رابطه صحیح بین پاسخ و مجموعه متغیرهای مستقل می باشد. برای پیدا کردن بهترین درجه مدل معمولاً از چند جمله های مرتبه پایین استفاده می شود. اگر پاسخ بوسیله یک تابع خطی از متغیرهای مستقل مدل شود، آنگاه تابع تقریب روش سطح پاسخ، مدل درجه اول نامیده می شود. در این حالت روش سطح پاسخ معادل با رگرسیون خطی چند گانه² محسوب می شود.

$$\bar{Y}(X) = B_0 + \sum_{i=1}^N B_i X_i = B_0 + B_1 X_1 + B_2 X_2 + \dots + B_N X_N \quad (4)$$

اگر سیستم خطی کامل نباشد، بر اساس درجه رابطه ورودی با خروجی باید جملات با توان های بالاتر نیز در نظر گرفته شود، برای مثال رابطه درجه دو به فرم زیر خواهد بود.

$$\bar{Y}(X) = B_0 + \sum B_i X_i + \sum B_{ij} X_i X_j + \sum B_{ijk} X_i^2 X_j + \sum B_{ijl} X_i X_j X_l + L \quad (5)$$

$$X = X_{i,j,\dots} \quad i,j,\dots \in [1, \dots, N]$$

برای محاسبه ضرایب B از روش حداقل کردن میانگین مربعات خطا استفاده می شود. B_0 در این رابطه ضریب ثابت معادله است. اگر مقدار عددی متغیرها در یک بازه قرار داشته باشد، بزرگی و کوچکی ضرایب B ارزش یا اهمیت توان های مختلف متغیر را در خروجی نشان می دهد [24].

5-1- ارزیابی مدل

روش های متعددی برای ارزیابی تمامی مدل های عددی وجود دارد که می توان از میانگین مربعات خطا به عنوان یکی از متداول ترین این روش ها یاد کرد. میانگین مربعات خطا بر اساس رابطه زیر و طبق میانگین توان دو اختلاف مقدار مدل با مقدار آزمایش محاسبه می شود.

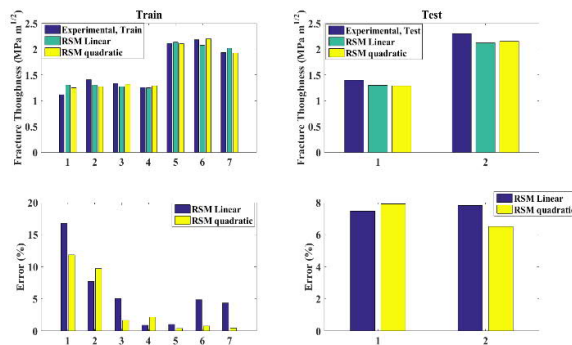
4. Response Surface Method
5. Multiple linear regression

همان گونه که از شکل های ۴ و ۵ مشخص است، کماکان یک خطای قابل قبول از روش شبکه‌ی عصبی برای چقرمگی و انرژی شکست بدست نیامده است. خطای ارائه شده برای چقرمگی شکست در حالت آموزش برابر ۲۰ درصد است و این مقدار برای آزمایش نزدیک به ۱۵ درصد است. همچنین خطاهای بدست آمده در حالت آموزش و آزمایش برای انرژی شکست نیز معادل ۱۴ و ۲۰ درصد است که نمی‌توان آنها را به عنوان یک خطای قابل قبول پذیرفت. به همین منظور و برای یافتن خطای توجیه پذیر از جانب سیستم، از روش سطح پاسخ مرتبه اول و دوم برای هر سه پارامتر چقرمگی شکست، انرژی شکست و مدول یانگ نیز استفاده شد. فرمول های بدست آمده از روش سطح پاسخ مرتبه یک و دو بر اساس اطلاعات برای چقرمگی شکست به صورت زیر است:

$$K_{IC}(X_1, X_2) = -0.9142 + 0.0939X_1 - 0.2683X_2 \quad (9)$$

$$K_{IC}(X_1, X_2) = 0.0149X_1 + 0.9811X_2 + 0.0015X_1^2 - 0.4912X_2^2 - 0.0249X_1X_2 \quad (10)$$

در رابطه های بالا، متغیر X_1 نماینده درصد حجمی های آکرپلونیتریل و متغیر X_2 نماینده درصد حجمی اکسید روی می‌باشد. در نهایت، مدل مرتبه دو بر اساس دقت بالاتر انتخاب شد که در شکل ۶ نتایج دو مدل و نتایج آزمایشگاهی به همراه خطای هر حالت آورده شده است.



شکل ۶ مقایسه نتایج دو مدل و آزمایشگاه برای چقرمگی شکست با نمونه های مختلف

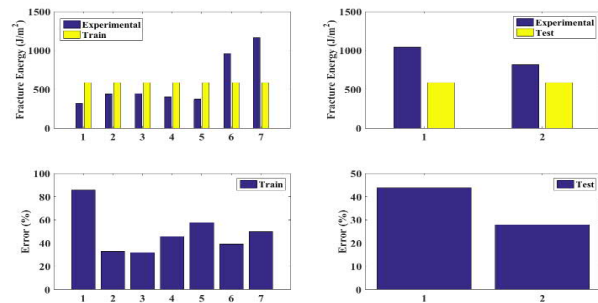
برای مدل RSM

همان طور که از نمودار شکل ۶ مشخص است، خطای بدست آمده در حالت آزمایش برای سطح مرتبه دوم کمتر از ۵ درصد است که بسیار مناسب تلقی می‌شود. فرمول های بدست آمده از روش سطح پاسخ مرتبه یک و دو برای انرژی شکست به صورت زیر است:

$$G_{IC}(X_1, X_2) = -1.1912 + 0.0667X_1 - 0.2008X_2 \quad (11)$$

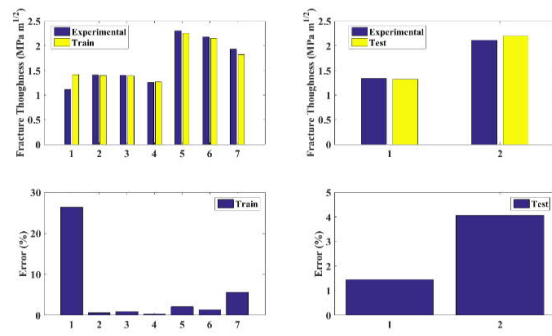
$$G_{IC}(X_1, X_2) = -21.0586X_1 + 171.5581X_2 + 1.5122X_1^2 - 651.5416X_2^2 + 7.4285X_1X_2 \quad (12)$$

در روابط فوق، متغیر X_1 نماینده درصد حجمی آکرپلونیتریل نگاشت شده و متغیر X_2 نماینده درصد حجمی نانوذره می‌باشد. همان گونه که از رابطه (۱۲) می‌توان دید مقدار آکرپلونیتریل دارای ضریب منفی



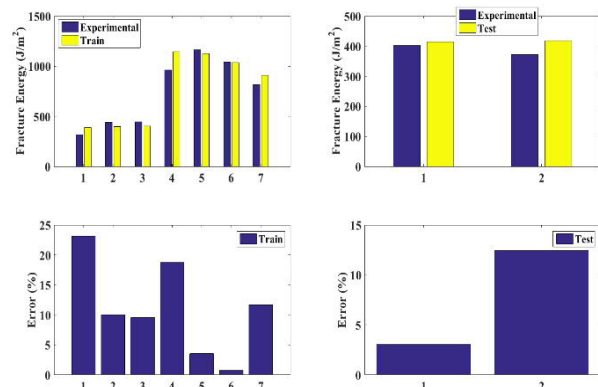
شکل ۳ مقایسه نتایج مدل و آزمایشگاه برای انرژی شکست با نمونه های مختلف برای مدل درخت تصمیم

با توجه به شکل های ۲ و ۳ مشخص است که مقدار خطا برای هر دو خاصیت غیرقابل قبول است؛ به گونه ای که خطا برای چقرمگی شکست در حالت آموزش تا ۵۰ درصد و در آزمایش نزدیک به ۲۰ درصد رسیده است. همچنین خطا برای انرژی شکست در حالت های آموزش و آزمایش به ترتیب ۸۵ درصد و ۴۳ درصد بدست آمد که قابل قبول نیست. به همین دلیل برای دستیابی به یک جواب مناسب، از روش شبکه عصبی مصنوعی استفاده شد که نتایج آن در شکل های ۴ و ۵ گزارش شده اند.



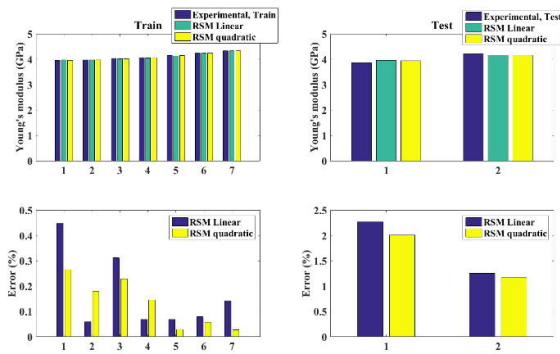
شکل ۴ مقایسه نتایج مدل و آزمایشگاه برای چقرمگی شکست با نمونه های مختلف

برای مدل شبکه عصبی مصنوعی



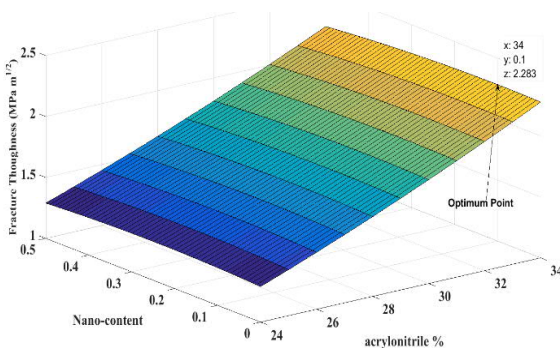
شکل ۵ مقایسه نتایج مدل و آزمایشگاه برای انرژی شکست با نمونه های مختلف برای

مدل شبکه عصبی مصنوعی



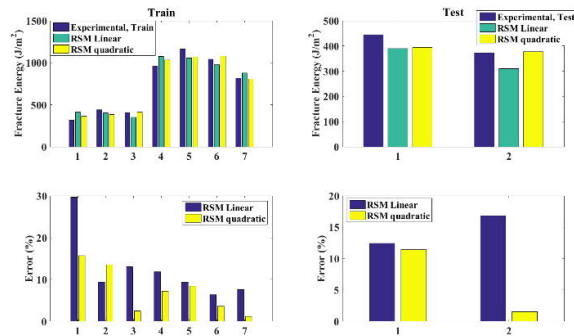
شکل ۸. مقایسه نتایج دو مدل و آزمایشگاه برای مدول یانگ با نمونه‌های مختلف برای مدل RSM

در مورد فرآیند بهینه‌سازی نیز از روش الگوریتم ژنتیک برای هر سه خاصیت مکانیکی بر روی مدل منتخب، یعنی پاسخ سطح مرتبه دو استفاده شده است. پارامترهای مورد استفاده برای الگوریتم ژنتیک که از نوع باینری بوده است به شرح زیر است. از نظر تعداد بیت برای هر یک از متغیرها ۱۰ بیت اختصاص داده شده است. با توجه به دو متغیر بودن ورودی، تعداد هر کروکوزوم ۲۰ بیت می‌باشد. همچنین نقطه‌های شروع اولیه به صورت تصادفی انتخاب شده‌اند. تعداد نقاط همپوشانی با توجه به طول کروموزوم ۲۰ بیت ۵ نقطه و احتمال جهش برابر ۰/۰۱ فرض شده است. در نهایت برای دو متغیر که متغیر اول X1 عدد صحیح صفر و یک و متغیر دوم درصد حجمی ماکزیمم تا یک درصد است و با فرض ماکزیمم کردن هر سه پارامتر جواب-های زیر حاصل شد. بیشترین مقدار چقرمگی شکست در ۳۴ درصد حجمی آکریلونیتریل و ۰/۱ درصد حجمی اکسید روی بدست آمد که برابر با $2/283 \text{ MPa.m}^{1/2}$ می‌باشد. همچنین مقدار بهینه انرژی شکست در ۳۴ درصد حجمی آکریلونیتریل و با ۰/۳۳ درصد حجمی از اکسید روی رخ داد که معادل 1101 J/m^2 است. برای مدول یانگ، بهترین مقدار در ۳۱ درصد حجمی از آکریلونیتریل و ۰/۵ درصد حجمی از اکسید روی بدست آمد که معادل $4/281 \text{ GPa}$ است. نتایج یاد شده در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ نمایش داده شده‌اند.



شکل ۹. گراف سه بعدی چقرمگی شکست بازاری درصد حجمی مختلف

است و توان دو آن ضریب مثبت دارد که در مجموع نشان از تأثیر مثبت آکریلونیتریل دارد و در مقابل با این که ضریب نانوذره مثبت است اما توان ۲ آن دارای ضریب منفی است و تأثیر بیشتری بر انرژی شکست خواهد گذاشت که این امر نشان دهنده‌ی این است که افزایش مقدار اکسید روی بر این خاصیت اثر منفی می‌گذارد. شکل ۷ نشان دهنده‌ی نتایج دو مدل پاسخ سطح خطی و مرتبه دوم و نتایج آزمایشگاهی انرژی شکست می‌باشد.



شکل ۷. مقایسه نتایج دو مدل و آزمایشگاه برای انرژی شکست با نمونه‌های مختلف برای مدل RSM

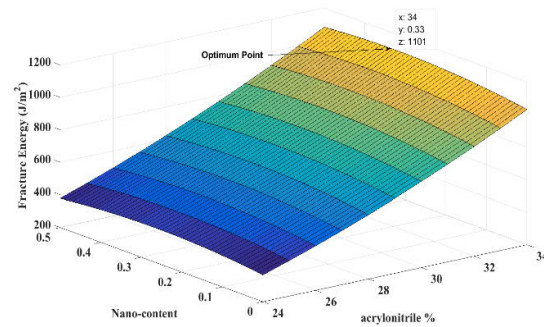
از شکل ۷ ملاحظه می‌شود که خطای بدست آمده برای انرژی شکست نیز قابل قبول بوده؛ به گونه‌ای که مقدار آن برای معادله مرتبه دوم به کمتر از ۲ درصد رسید که در مباحث مهندسی خطایی بسیار ناچیز به شمار می‌آید. در نهایت مدل مرتبه دو بر اساس دقت بالاتر انتخاب شد. فرمول‌های بدست آمده از روش سطح پاسخ مرتبه یک و دو برای مدول یانگ به ترتیب زیر است:

$$E(X_1, X_2) = 3.4860 + 0.0199X_1 + 0.1792X_2 \quad (13)$$

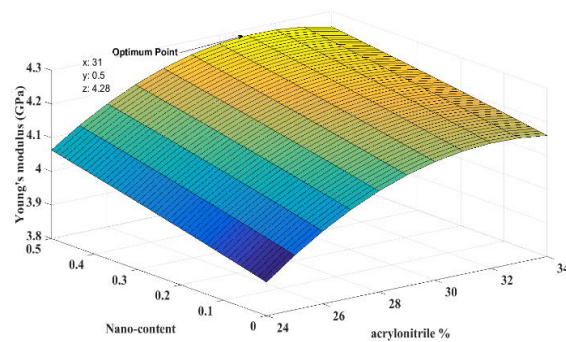
$$E(X_1, X_2) = 0.2640X_1 + 0.0649X_2 - 0.00042X_1^2 - 0.5199X_2^2 + 0.0189X_1X_2 \quad (14)$$

همانند چقرمگی شکست و انرژی شکست مدل پیشنهادی مرتبه دو نسبت به مرتبه یک از نظر درصد خطا قابل قبول تر است. شکل ۸ بیانگر نتایج دو مدل و نتایج آزمایشگاه می‌باشد که از روش سطح پاسخ خطی و مرتبه دوم برای مدول یانگ بدست آمده است. مقدار خطا برای مدول یانگ در حالت سطح پاسخ مرتبه دو به زیر ۲ درصد رسید که نشان می‌دهد این روش بهترین نتایج را ارائه کرده است. از آنجایی که روش سطح پاسخ مرتبه دو جواب بسیار مناسبی را به نمایش گذاشت، از دو روش درخت تصمیم و شبکه عصبی مصنوعی برای مدول یانگ استفاده نشد.

- [6] P. Sokhandani, et al., Nanocomposites of PVC/TiO₂ nanorods: Surface tension and mechanical properties before and after UV exposure. *Journal of Applied Polymer Science*, 129(6): pp. 3265-3272, 2013.
- [7] V. Kazukauskas, et al., Electrical conductivity of carbon nanotubes and polystyrene composites. *physica status solidi (c)*, 5(9): pp. 3172-3174, 2008.
- [8] R. K. Nayak, A. Dash, and B. C. Ray, Effect of Epoxy Modifiers (Al₂O₃/SiO₂/TiO₂) on Mechanical Performance of epoxy/glass Fiber Hybrid Composites. *Procedia Materials Science*, 6: pp. 1359-1364, 2014.
- [9] T. H. Hsieh, et al., The effect of carbon nanotubes on the fracture toughness and fatigue performance of a thermosetting epoxy polymer. *Journal of Materials Science*, 46(23): pp. 7525-7535, 2011.
- [10] K. Ding, G. Wang, and M. Zhang, Characterization of mechanical properties of epoxy resin reinforced with submicron-sized ZnO prepared via in situ synthesis method. *Materials & Design*, 32(7): pp. 3986-3991, 2011.
- [11] S. K. Esthappan, A. B. Nair, and R. Joseph, Effect of crystallite size of zinc oxide on the mechanical, thermal and flow properties of polypropylene/zinc oxide nanocomposites. *Composites Part B: Engineering*, 69: pp. 145-153, 2015.
- [12] J. Zheng, R. Ozisik, and R. W. Siegel, Disruption of self-assembly and altered mechanical behavior in polyurethane/zinc oxide nanocomposites. *Polymer*, 46(24): pp. 10873-10882, 2005.
- [13] J. H. Li, et al., Effects of ZnO nanoparticles on the mechanical and antibacterial properties of polyurethane coatings. *Progress in Organic Coatings*, 64(4): pp. 504-509, 2009.
- [14] B. Francis, Investigation of the Impact of ZnO Nanoparticles on the Properties of a Difunctional Epoxy Resin.
- [15] X. Y. Ma and W. D. Zhang, Effects of flower-like ZnO nanowhiskers on the mechanical, thermal and antibacterial properties of waterborne polyurethane. *Polymer Degradation and Stability*, 94(7): pp. 1103-1109, 2009.
- [16] M. A. Alam, S. Arif, and M. Shariq, Enhancement in Mechanical Properties of Polystyrene-ZnO Nanocomposites. 2014.
- [17] K. L. Low, S. H. Tan, S. H. Sharif Zein, D. S. McPhail, A. R. Boccaccini, Optimization of the mechanical properties of calcium phosphate/multi-walled carbon nanotubes/bovine serum albumin composites using response surface methodology. *Materials and Design*, 32: pp. 3312-3319, 2011.
- [18] F. A. Ghasemi, I. Ghasemi, S. Menbari, M. Ayaz, Optimization of mechanical properties of polypropylene/talc/graphene composites using response surface methodology. *Polymer Testing*, 53: pp. 283-292, 2016.
- [19] S. Sathiyamurthy, A. S. Thaheer, S. Jayabal, Prediction and optimization of mechanical properties of patricles filled coir-polyester composites using ANN and RSM algorithms. *Indian Journal of Fiber & Textile Research*, 38: pp. 81-86, 2013.
- [20] B. R. K. Blackman, H. Steininger, J. G. Williams, K. Zuo, The fatigue behaviour of ZnO nano-particle modified thermoplastics. *Composites Science and Technology*, 122: pp. 10-17, 2016.
- [21] K. C. Tan, Q. Yu, and J. H. Ang, A coevolutionary algorithm for rules discovery in data mining. *International Journal of Systems Science*, 37(12): pp. 835-864, 2006.
- [22] C. Chan and B. Lewis, A basic primer on data mining. *Information Systems Management*, 19: (4) pp. 56-60, 2002.
- [23] D. CireşAn, et al., Multi-column deep neural network for traffic sign classification. *Neural Networks*, 32: pp. 333-338, 2012.
- [24] M. Soltani and J. Soltani, Determination of optimal combination of applied water and nitrogen for potato yield using response surface methodology (RSM). *Bioscience Biotechnology Research Communications*, 9(1): pp. 46-54, 2016.



شکل ۱۰ گراف سه بعدی انرژی شکست بازای درصد حجمی مختلف



شکل ۱۱ گراف سه بعدی مدول یانگ بازای درصد حجمی مختلف

۷- بحث و نتیجه گیری

در این مقاله، یک مطالعه عددی به همراه بهینه سازی بر روی چقرمگی شکست (KIC)، انرژی شکست (GIC) و مدول یانگ (E) آکریلونیتریل تقویت شده با اکسید روی در دو حالت SAN-34 و SAN-24 با درصد حجمی های مختلف صورت گرفته است. درصد وزنی آکریلونیتریل و درصد حجمی اکسید روی به عنوان دو پارامتر ورودی جهت مدلسازی نتایج به روش شبکه عصبی مصنوعی، درخت تصمیم و روش سطح پاسخ در نظر گرفته شده است. در نهایت، نتایج مدلسازی به روش سطح پاسخ مرتبه دوم با ۷۰٪ نمونه‌ها برای آموزش و ۳۰٪ نمونه‌ها برای آزمایش از انطباق فوق العاده خوبی با نتایج آزمایشگاهی در هر سه خاصیت مکانیکی مورد بحث برخوردار بود. مدل منتخب با هدف بدست آوردن نقاط بهینه در هر سه خاصیت با الگوریتم ژنتیک بهینه سازی شد.

۸- مراجع

- [1] D. Liu, et al., Synthesis of polyacrylonitrile by single-electron transfer-irradiation radical polymerization using Fe(0) as catalyst and its adsorption properties after modification. *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, 49(13): pp. 4933-4947, 2011.
- [2] E. S. Straus and G. Geometta, Styrene Acrylonitrile (SAN) Resin Plastics. *Chemical Economics Handbook*, 1998.
- [3] P. Bajaj, T. Sreekumar, and K. Sen, Effect of reaction medium on radical copolymerization of acrylonitrile with vinyl acids. *Journal of Applied Polymer Science*, 79(9): pp. 1640-1652, 2001.
- [4] J. Pagacz and K. Pielichowski, Preparation and characterization of PVC/montmorillonite nanocomposites—a review. *Journal of Vinyl and Additive Technology*, 15(2): pp. 61-76, 2009.
- [5] P. Dwivedi, S. Narvi, and R. Tewari, A Novel Ag/CS-PVC Nanomaterial with High Antimicrobial Properties: A Potential Self-Sterilizing.