



بهینه‌سازی خواص مکانیکی و حرارتی کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی با استفاده از شبکه‌های عصبی عمیق و دینامیک مولکولی

هدی قوامی نیا^{۱*}

۱. گروه فیزیک، واحد دزفول، مرکز تحقیقات مواد و انرژی دانشگاه آزاد اسلامی، دزفول، ایران

* نویسنده مسئول: h.ghavaminia@iau.ac.ir

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۷/۱۸ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۹/۱۷

چکیده

در این پژوهش، یک چارچوب ترکیبی مبتنی بر شبکه عصبی عمیق و دینامیک مولکولی برای مطالعه خواص مکانیکی و حرارتی کامپوزیت‌های پلیمری - نانولوله کربنی توسعه داده شد. مدل شبکه عصبی عمیق با استفاده از داده‌های کوانتومی آموزش داده شد و به عنوان میدان نیروی دقیق در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی مورد استفاده قرار گرفت. نتایج نشان داد که مدل پیشنهادی خطای جذر میانگین مربعات را در مقایسه با میدان‌های نیروی متعارف به‌طور قابل توجهی کاهش می‌دهد. افزودن ۵ درصد وزنی نانولوله کربنی به ماتریس پلیمری، مدول یانگ را تا ۲۲۴ درصد و هدایت حرارتی را تا ۷۴۳ درصد بهبود بخشید. همچنین زمان محاسبات برای سیستم‌های بزرگ مقیاس تا ۹۴ درصد کاهش یافت. مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی، خطای نسبی کمتر از ۵ درصد را برای خواص مکانیکی و حرارتی تأیید کرد. این پژوهش نشان می‌دهد که مدل ترکیبی توسعه‌یافته می‌تواند به عنوان یک ابزار کارآمد و دقیق برای طراحی و بهینه‌سازی نانوکامپوزیت‌های پلیمری در صنایع مختلف از جمله هوافضا، خودرو سازی و الکترونیک مورد استفاده قرار گیرد.

کلمات کلیدی: شبکه عصبی عمیق، دینامیک مولکولی، نانوکامپوزیت پلیمری، نانولوله کربنی، خواص مکانیکی.

مقدمه

کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با نانولوله‌های کربن به دلیل ترکیب خواص استثنایی همچون استحکام مکانیکی بسیار بالا، هدایت حرارتی برجسته و سبکی، به عنوان مواد پیشرفته‌ای شناخته می‌شوند که تحول عظیمی در صنایع مدرن از جمله هوافضا [۱]، خودرو سازی [۲]، و الکترونیک انعطاف‌پذیر [۳] ایجاد کرده‌اند. عملکرد این مواد به شدت به ریزساختار آنها، از قبیل توزیع، جهت‌گیری و درصد حجمی نانولوله‌ها و نیز ماهیت برهمکنش‌های فصل مشترک پلیمر-نانولوله بستگی دارد [۴]. با این حال، پیش‌بینی دقیق خواص ماکروسکوپی این نانوکامپوزیت‌ها براساس ویژگی‌های ریزساختاری آنها، به دلیل پیچیدگی ذاتی و رفتار چندمقیاسی، همواره یک چالش بزرگ در علم و مهندسی مواد بوده است. روش‌های سنتی مدل سازی، مانند دینامیک مولکولی^۱ مبتنی بر میدان‌های نیروی تجربی مانند لنارد جونز^۲ و ترسوف^۳، اگرچه بینش‌های ارزشمندی در سطح اتمی ارائه می‌دهند، اما در توصیف دقیق برهمکنش‌های غیرهمگن و پیچیده در فصل مشترک پلیمر-نانولوله با محدودیت‌های جدی مواجه هستند [۵]. این میدان‌های نیرو اغلب برای سیستم‌های ساده و همگن توسعه یافته‌اند و قادر به بازتولید دقیق پتانسیل‌های چندبعدی در سیستم‌های ناهمگن و پیچیده مانند نانوکامپوزیت‌ها نیستند که این امر منجر به بروز خطاهای سیستماتیک در پیش‌بینی خواصی مانند مدول الاستیسیته و هدایت حرارتی می‌شود [۶]. در دهه اخیر، روش یادگیری ماشین، به ویژه شبکه‌های عصبی عمیق^۴، پارادایم جدیدی در شبیه‌سازی‌های اتمی ایجاد کرده است. این مدل‌ها قادرند با یادگیری از داده‌های مرجع با دقت بالا (مانند محاسبات تئوری تابعی چگالی، پتانسیل‌های بین‌اتمی با دقت کوانتومی را تقریب بزنند و سپس برای شبیه‌سازی سیستم‌های بزرگ مقیاس با هزینه محاسباتی قابل قبول به کار گرفته شوند [۷]. پلر و پارینلو [۸] برای اولین بار چارچوب شبکه

¹ Molecular Dynamic

² Lennard-Jones

³ Tersoff

⁴ Deep Neural Network



عصبی برای نمایش پتانسیل‌های پرابعد را معرفی کردند. مطالعات بعدی توسط ژانگ و همکاران [۹] و اونکه و میولی [۱۰] نشان داد که مدل‌های شبکه عصبی عمیق نه تنها دقت شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی را به‌طور قابل توجهی افزایش می‌دهند، بلکه امکان بررسی پدیده‌های بلندمدت و پیچیده را که با روش‌های سنتی غیرممکن یا بسیار پرهزینه بود، فراهم می‌کنند. هدف اصلی این پژوهش، توسعه یک چارچوب هیبریدی شبکه عصبی عمیق-دینامیک مولکولی برای پیش‌بینی دقیق و کارآمد خواص مکانیکی (مانند مدول یانگ و استحکام کششی) و حرارتی (هدایت حرارتی) کامپوزیت‌های پلیمر-نانولوله کربنی است. این مقاله به‌صورت زیر ساختار یافته است: در بخش دوم به تفصیل به مراحل مدل‌سازی شامل یافتن مجموعه داده‌های مرجع با استفاده از محاسبات تئوری تابعی چگالی برای آموزش شبکه عصبی عمیق، معماری شبکه عصبی و توابع تقارن مورد استفاده و پیاده‌سازی شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با میدان نیروی استخراج‌شده از شبکه عصبی عمیق، و روش‌های محاسبه خواص مکانیکی و حرارتی پرداخته می‌شود. سپس در بخش نتایج و بحث عملکرد مدل شبکه عصبی عمیق-دینامیک مولکولی از طریق مقایسه خطای ریشه میانگین مربعی با میدان‌های نیروی سنتی ارزیابی می‌شود. سپس، خواص پیش‌بینی‌شده برای نانوکامپوزیت تحت شرایط مختلف (مانند درصد‌های مختلف نانو لوله) آرایه و با داده‌های تجربی مقایسه می‌شود.

روش انجام محاسبات

سیستم مورد مطالعه در این پژوهش، یک کامپوزیت پایه اپوکسی سخت شده با عامل کیورینگ تقویت‌شده با نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره^۱ بود. نانولوله‌های مورد استفاده دارای قطر متوسط ۱ نانومتر، طول ۱۰ نانومتر و کایرالیتته (۱۰،۱۰) بودند. برای مدل‌سازی این نانوکامپوزیت، از یک سلول شبیه‌سازی مکعبی با شرایط مرزی تناوبی در سه بعد استفاده شده است. ساختار اتمی نانو لوله کربنی و زنجیره‌های پلیمر اپوکسی با استفاده از نرم‌افزار متریال استودیو طراحی و بهینه شدند. داده‌های مرجع مورد نیاز برای آموزش مدل شبکه عصبی عمیق، از پایگاه داده‌های محاسباتی مواد، به‌ویژه مخزن پروژه مواد^۲ و نماد استخراج شدند. این داده‌ها شامل پیکربندی‌های اتمی و مقادیر متناظر انرژی کل و نیروهای اتمی هستند که با استفاده از تئوری تابعی چگالی^۳ محاسبه شده‌اند [۱۱، ۱۲]. دینامیک مولکولی به‌عنوان یکی از مهم‌ترین روش‌های محاسباتی در علوم مواد، بر اساس معادلات حرکت نیوتنی کلاسیک عمل می‌کند و حرکت ذرات تحت تاثیر نیروهای مختلف مانند پیوندهای شیمیایی، نیروهای وان‌دروالس و تعاملات الکترواستاتیکی را شبیه‌سازی می‌کند. معادلات حرکت نیوتنی به‌صورت رابطه (۱) هستند.

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i(r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (1)$$

که در آن m_i جرم ذره i ام، r_i موقعیت ذره i ام، F_i نیروی وارد به ذره i ام است که به‌صورت تابعی از موقعیت تمام ذرات $(r_1, r_2, \dots, r_N)$ تعریف شده است. باوجود قابلیت‌های فراوان، روش دینامیک مولکولی محدودیت‌هایی دارد که از جمله آن‌ها می‌توان به عدم دقت میدان‌های نیرو همچون لنارد جونز و ترسف در توصیف دقیق تعاملات پیچیده بین ذرات اشاره کرد که به ویژه در سیستم‌های پیچیده و مواد نانوی موجب ایجاد مشکل می‌شود [۹]. همچنین شبیه‌سازی سیستم‌های بزرگ با تعداد زیاد اتم‌ها زمان‌بر می‌باشد و نیاز به منابع محاسباتی قوی دارد. در این مقاله، دینامیک مولکولی به‌عنوان اصلی‌ترین ابزار برای مطالعه خواص مکانیکی مواد نانوی انتخاب شده است. با این حال، به‌منظور غلبه بر محدودیت‌های موجود در میدان نیرو و کاهش زمان محاسبات، از یادگیری ماشین و به‌ویژه شبکه‌های عصبی عمیق استفاده شده است. دلایل اصلی این انتخاب این است که مدل شبکه عصبی عمیق به‌کار برده شده توانسته است با استفاده از توابع تقارنی و آموزش با داده‌های کوانتومی، میدان نیرو را بهبود بخشد و خطای ریشه میانگین مربعی را قابل توجهی کاهش دهد. همچنین استفاده از یادگیری ماشین به‌طور قابل توجهی زمان محاسبات را کاهش داده است، به‌طوری که شبیه‌سازی سیستم‌های بزرگ با تعداد زیاد اتم‌ها نیز ممکن شده است. همچنین با استفاده از مدل به‌کار گرفته شده، می‌توان حرکت‌های بلندمدت را بدون نیاز به محاسبات زیاد شبیه‌سازی کرد، که این امر برای

¹ Single-Walled Carbon Nanotube

² Material Project

³ Density Functional Theory



مطالعه دینامیک مواد نانوی ضروری است. مدل استفاده شده بر اساس یک شبکه عصبی عمیق چندلایه^۱ طراحی شده است. این شبکه شامل لایه‌های ورودی، مخفی و خروجی است. هر لایه مخفی شامل نرون‌هایی است که با استفاده از توابع فعال‌سازی غیرخطی، ویژگی‌های پیچیده را یاد می‌گیرند [۹]. تابع فعال‌سازی لایه مخفی به صورت رابطه (۲) است.

$$h^{(l)} = \sigma(W^{(l)} h^{(l-1)} + b^{(l)}) \quad (2)$$

که در آن $h^{(l)}$: خروجی لایه l ام، $W^{(l)}$ ماتریس وزن‌ها در لایه l ام، $b^{(l)}$ بردار بایاس در لایه l ام و σ -تابع فعال‌سازی مانند Tan h یا ReLU می‌باشد. خروجی شبکه با رابطه (۳) تعریف می‌گردد.

$$f(h^{(l)}) = \hat{y} \quad (3)$$

که در آن $\hat{y}$ خروجی نهایی شبکه (پتانسیل یا نیرو) و f تابع خروجی خطی یا تابع بیشینه هموار است. ورودی‌های شبکه شامل توصیف‌کننده‌های مولکولی هستند که موقعیت‌های ذرات r_i و انواع آن‌ها t_i را شامل می‌شوند. برای هر ذره i ، یک توصیف‌کننده تابع تقارنی به صورت رابطه (۴) تعریف می‌شود.

$$G_i = [G_1(r_{ij}), G_2(r_{ij}), \dots, G_n(r_{ij})] \quad (4)$$

که در آن $G_k(r_{ij})$ -تابع تقارنی است که تعامل بین ذره i و j را توصیف می‌کند و $r_{ij} = |r_i - r_j|$ فاصله بین ذرات i و j است. خروجی شبکه شامل پتانسیل پاره‌ای (G_i) عمیق عصبی شبکه E_i و نیروی عملکردی روی هر ذره $F_i = -\nabla_{r_i} E_i$ است. برای آموزش مدل، از یک مجموعه داده آموزشی شامل موقعیت‌های ذرات و پتانسیل‌های واقعی حاصل از محاسبات کوانتومی (QMC) استفاده می‌شود. تابع خطا به صورت رابطه (۵) تعریف می‌گردد.

$$\mathcal{L} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (E_i^{DNN} - E_i^{QMC})^2 + \lambda |(F_i^{DNN} - F_i^{QMC})|^2 \quad (5)$$

که در آن E_i^{DNN} -پتانسیل پاره‌ای تخمین زده شده توسط شبکه عصبی عمیق و F_i^{DNN} نیروهای تخمین زده شده هستند. E_i^{QMC} پتانسیل واقعی حاصل از QMC و F_i^{QMC} نیروهای واقعی هستند و λ ضریب تنظیمی برای وزندهی به خطا در نیرو می‌باشد. آموزش مدل با استفاده از نسخه پیشرفته الگوریتم گرادیان نزولی استخراجی آدام انجام می‌شود. وزن‌ها و بایاس‌ها در هر گام به صورت روابط زیر به‌روزرسانی می‌شوند.

$$W^{(l)} \Rightarrow w^{(l)} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w^{(l)}} \quad (6)$$

$$b^{(l)} \Rightarrow b^{(l)} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b^{(l)}} \quad (7)$$

که در آن η نرخ یادگیری است. برای اعتبارسنجی مدل، از داده‌های آزمایشی استفاده می‌شود. معیارهای ارزیابی شامل خطای جذر میانگین مربعی:

$$\text{جذر میانگین مربعی} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [E_i^{DNN} - E_i^{Exp}]^2} \quad (8)$$

و میانگین خطای مطلق:

$$\text{میانگین خطای مطلق} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |E_i^{DNN} - E_i^{Exp}| \quad (9)$$

¹ Multi Layer Perceptron



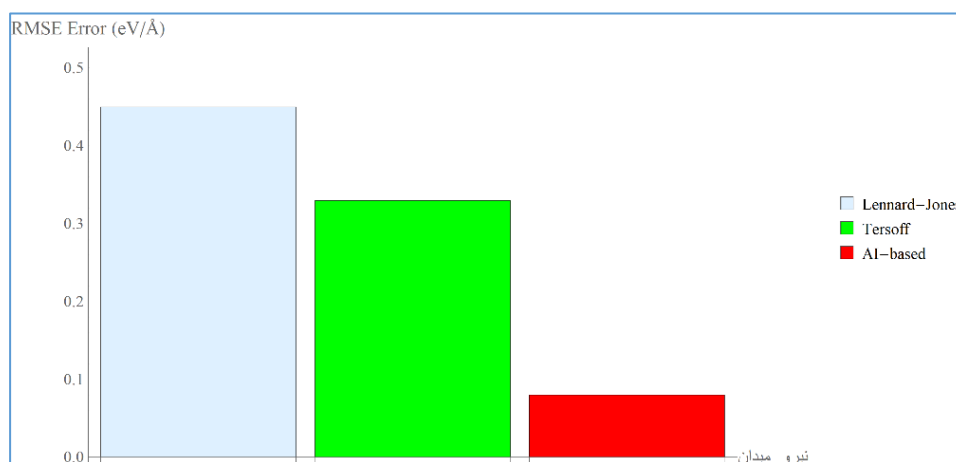
جزییات آموزش شبکه عصبی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

مدل شبکه عصبی عمیق مورد استفاده در این پژوهش از نوع پرسپترون چندلایه با معماری ۶ لایه پنهان و هر لایه شامل ۵۱۲ نرون بوده است. از تابع فعال‌ساز ReLU در لایه‌های پنهان و تابع خطی در لایه خروجی استفاده شد. ورودی‌های شبکه، توابع تقارن اتمی از نوع روش یادشده توسط بهلر-پارینلو [۸] بودند که فاصله و زوایای بین اتم‌های همسایه را تا یک برش مشخص (شعاع قطع ۵ آنگستروم) توصیف می‌کنند. مجموعه داده آموزشی شامل ۵۰۰۰ پیکربندی اتمی بود که از محاسبات تئوری تابعی چگالی با نرم‌افزار وِسپ^۱ استخراج شدند. این داده‌ها به صورت تصادفی به سه بخش آموزش (۸۰٪)، اعتبارسنجی (۱۰٪) و آزمون (۱۰٪) تقسیم شدند. آموزش مدل با استفاده از الگوریتم بهینه‌ساز آدام^۲ با نرخ یادگیری اولیه $\eta=10^{-3}$ و تابع زیان شامل خطای انرژی و نیرو و با اعمال تنظیم (L2 ضریب $\lambda=10^{-4}$) انجام شد. آموزش برای هزار دوره ادامه یافت.

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار لمپس^۳ و با ادغام میدان نیروی استخراج‌شده از مدل شبکه عصبی عمیق انجام شد. شرایط شبیه‌سازی شامل تعداد ذرات ثابت، حجم ثابت و دمای ثابت در دمای ۳۰۰ کلوین، با استفاده از ترموستات نوز-هاور^۴ و گام زمانی ۰/۵ فمتوثانیه بود. خواص مکانیکی از طریق شبیه‌سازی کشش یک‌محوره و خواص حرارتی با استفاده از روش گرین-کوبا^۵ و از محاسبه تابع خودهمبستگی شار حرارتی ۲۰۰ پیکوثانیه محاسبه شدند.

تحلیل و نتایج

در این بخش، دقت مدل شبکه عصبی عمیق توسعه‌یافته در پیش‌بینی انرژی و نیروهای اتمی مورد ارزیابی قرار گرفت. برای این منظور، خطای جذر میانگین مربعات بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط مدل شبکه عصبی عمیق و مقادیر مرجع تئوری تابعی چگالی برای ۳۰۰۰ پیکربندی اتمی از مجموعه داده آزمون محاسبه شد. نتایج نشان داد که مدل شبکه عصبی عمیق آموزش‌دیده با دقت بسیار بالایی قادر به پیش‌بینی پتانسیل بین‌اتمی است. خطای ریشه میانگین مربعات برای انرژی کل سیستم در حدود ۲/۱ مگاالکترون ولت بر اتم و برای نیروهای اتمی ۰/۰۸ الکترون ولت بر آنگستروم به‌دست آمد. این سطح از دقت، نشان‌دهنده توانایی بالای مدل در یادگیری پتانسیل‌های پیچیده بین‌اتمی در سیستم نانوکامپوزیت پلیمر-نانولوله کربنی است.



شکل ۱: مقایسه خطای جذر ریشه میانگین مربعات برای میدان‌های نیروی مختلف در پیش‌بینی انرژی

بین مدل شبکه عصبی عمیق توسعه‌یافته و میدان‌های نیروی سنتی بناردجونز و ترسوف.

دقت مدل شبکه عصبی عمیق توسعه‌یافته در مقایسه با میدان‌های نیروی متعارف از طریق محاسبه خطای جذر میانگین مربعات ریشه میانگین مربعات مورد ارزیابی قرار گرفت. همانطور که در شکل (۱) مشاهده می‌شود، مدل شبکه عصبی عمیق پیشنهادی

¹ VASP

² Adam

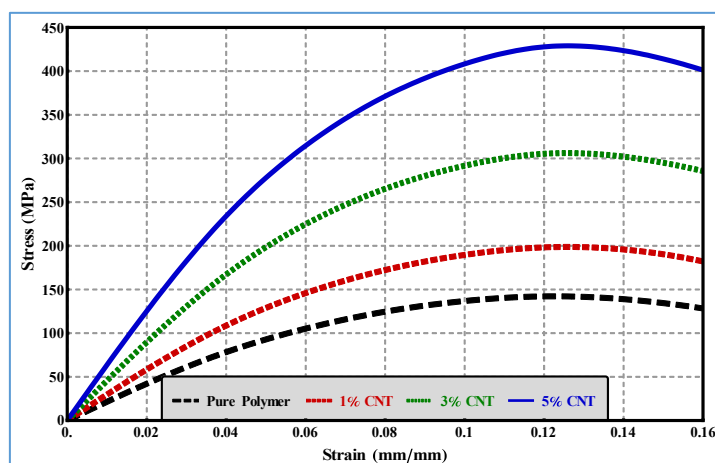
³ LAMMPS

⁴ Nosé-Hoover

⁵ Green-Kubo



به‌طور قابل توجهی دقت بالاتری در پیش‌بینی هم انرژی و هم نیروهای اتمی در مقایسه با میدان‌های نیروی سنتی لنارد-جونز و ترسف نشان می‌دهد. مقدار ریشه میانگین مربعی برای انرژی در مدل شبکه عصبی عمیق به $2/1$ مگا الکترون ولت بر اتم کاهش یافته است که در مقایسه با مقادیر $8/5$ مگا الکترون ولت بر اتم و $5/2$ مگا الکترون ولت بر اتم به ترتیب برای میدان‌های نیروی لنارد-جونز و ترسف، بهبودی در حدود 75% و 60% را نشان می‌دهد. در پیش‌بینی نیروهای اتمی نیز مدل شبکه عصبی عمیق با خطای $0/08$ الکترون ولت بر آنگستروم عملکرد به مراتب بهتری نسبت به میدان‌های نیروی سنتی $0/23$ الکترون ولت بر آنگستروم برای لنارد-جونز و $0/15$ الکترون ولت بر آنگستروم برای ترسف ارائه می‌دهد. این بهبود چشمگیر در دقت را می‌توان به توانایی ذاتی شبکه‌های عصبی عمیق در یادگیری روابط غیرخطی پیچیده و وابسته به محیط در پتانسیل‌های بین‌اتمی نسبت داد [۱۳]. درحالی‌که میدان‌های نیروی سنتی مبتنی بر فرمول‌بندی‌های تحلیلی ساده‌شده هستند، مدل شبکه عصبی عمیق قادر به بررسی کامل وابستگی‌های چندبعدی در سطوح انرژی بدون نیاز به ساده‌سازی‌های پیش‌فرض می‌باشد [۱۴]. همچنین، میدان نیروی ترسف اگرچه برای سیستم‌های کووالانسی مانند نانولوله‌های کربنی بهتر از لنارد-جونز عمل می‌کند، اما در توصیف برهمکنش‌های غیرکووالانسی در فصل مشترک پلیمر-نانولوله با محدودیت مواجه است [۱۵]. درمقابل، مدل شبکه عصبی عمیق با آموزش بر روی داده‌های کوانتومی دقیق، قادر به توصیف صحیح هر دو نوع برهمکنش کووالانسی و غیرکووالانسی در سیستم نانوکامپوزیت می‌باشد.

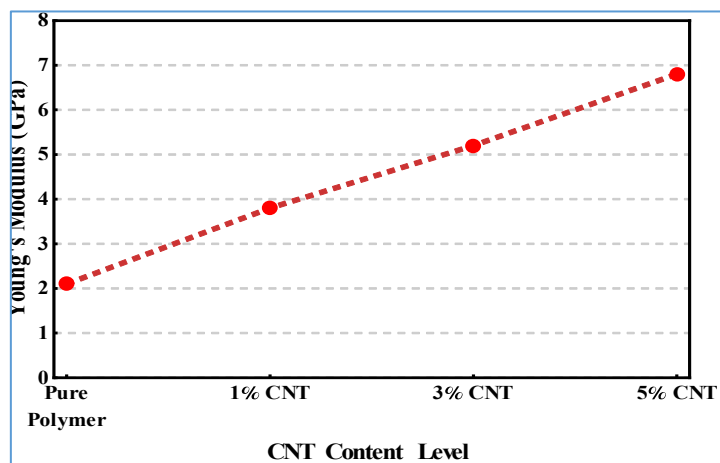


شکل ۲: منحنی‌های تنش-کرنش کامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانولوله کربنی با درصدهای مختلف (۰٪، ۱٪، ۳٪، ۵٪).

منحنی‌های تنش-کرنش کامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانولوله کربنی با درصدهای وزنی مختلف (۰٪، ۱٪، ۳٪ و ۵٪) در شکل (۲) ارائه شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، افزودن نانولوله‌های کربنی به ماتریس پلیمری منجر به بهبود چشمگیر خواص مکانیکی از جمله استحکام تسلیم، استحکام نهایی و مدول یانگ می‌گردد. برای نمونه خالص پلیمری، استحکام نهایی در حدود 142 مگاپاسکال و کرنش شکست در $0/12$ بدست آمد. با افزودن تنها 1% نانولوله کربنی، استحکام نهایی به 198 مگاپاسکال افزایش یافت (افزایش 39%). این بهبود با افزایش درصد نانولوله به 5% به 428 مگاپاسکال رسید که نشان‌دهنده افزایش 201% در استحکام نهایی نسبت به نمونه خالص است. رفتار الاستیک خطی در ناحیه کرنش‌های کوچک برای تمام نمونه‌ها مشاهده شد، اما شیب این ناحیه که نمایانگر مدول یانگ است با افزایش درصد نانولوله به‌طور قابل توجهی افزایش یافت. این افزایش مدول یانگ ناشی از انتقال مؤثر تنش از ماتریس پلیمری به نانولوله‌های کربنی با مدول الاستیسیته بالا در حدود 1 تراپاسکال می‌باشد [۱۶]. همچنین، تغییر در رفتار پس از تسلیم نمونه‌ها حاکی از مکانیزم‌های مختلف تغییر شکل است. در نمونه خالص پلیمری، شکست ترد مشاهده شد، درحالی‌که نمونه‌های تقویت شده با نانولوله رفتار نیمه شکن از خود نشان دادند. این تغییر رفتار می‌تواند ناشی از مکانیزم‌های جذب انرژی توسط نانولوله‌ها از طریق بیرون کشیده شدن از ماتریس و لغزش در فصل مشترک باشد. نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی‌های حاضر با داده‌های تجربی گزارش شده توسط مونیروزمان و وینی [۱۷] مطابقت



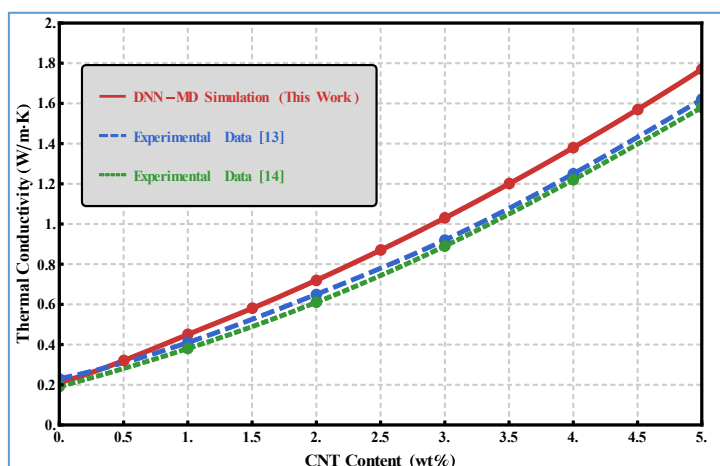
خوبی دارد و توانایی مدل شبکه عصبی عمیق-دینامیک مولکولی در پیش‌بینی دقیق رفتار مکانیکی کامپوزیت‌های پلیمر-نانولوله کربنی را تأیید می‌کند.



شکل ۳: تغییرات مدول یانگ کامپوزیت‌های پلیمر-نانولوله کربنی را بر اساس درصد وزنی نانولوله

همان‌طور که از شکل (۳) مشاهده می‌شود، رابطه مستقیم و غیرخطی بین درصد نانولوله و مدول یانگ کامپوزیت وجود دارد. مدول یانگ نمونه خالص پلیمری ۲/۱ گیگاپاسکال اندازه‌گیری شد که با افزودن ۱٪، ۳٪ و ۵٪ نانولوله کربنی به ترتیب به ۳/۸، ۵/۲ و ۶/۸ گیگاپاسکال افزایش یافت. این بهبود ۲۲۴ درصدی در مدول یانگ با افزودن ۵٪ نانولوله کربنی، نشان‌دهنده کارایی بالای نانولوله‌ها در افزایش سفتی کامپوزیت است. رفتار غیرخطی افزایش مدول یانگ را می‌توان به تشکیل شبکه‌های نانولوله‌ای و برهمکنش‌های مؤثر بین نانولوله‌ها در درصدهای بالاتر نسبت داد [۱۸]. در درصدهای پایین (کمتر از ۱٪)، نانولوله‌ها به‌صورت مجزا در ماتریس پراکنده شده و تأثیر کمتری بر مدول کلی دارند، درحالی‌که در درصدهای بالاتر (۳-۵٪)، تشکیل شبکه نانولوله‌ای منجر به انتقال کارآمدتر تنش در سرتاسر ماتریس می‌شود. نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی‌های حاضر با داده‌های تجربی گزارش شده توسط کلمن و همکاران [۱۹] مطابقت قابل قبولی دارد. اختلاف جزئی در مقادیر مطلق می‌تواند ناشی از تفاوت در نوع پلیمر مورد استفاده، روش تولید کامپوزیت و توزیع نانولوله‌ها در ماتریس باشد. با این حال، روند کلی افزایش مدول یانگ با افزایش درصد نانولوله در هر دو مطالعه شبیه‌سازی و تجربی به خوبی مشاهده می‌شود. مکانیزم اصلی افزایش مدول یانگ در این کامپوزیت‌ها را می‌توان به عوامل متعددی نسبت داد: نخست، مدول ذاتی بالای نانولوله‌های کربنی در حدود ۱ تراپاسکال که به‌طور مستقیم به ماتریس منتقل می‌شود. دوم، تشکیل ناحیه‌ای با چگالی بالا در فصل مشترک پلیمر نانولوله که منجر به محدودیت حرکت زنجیره‌های پلیمری می‌شود و سوم، برهمکنش‌های واندروالسی قوی بین نانولوله و ماتریس پلیمری که انتقال تنش را تسهیل می‌کند. هدایت حرارتی کامپوزیت‌ها با استفاده از رابطه گرین-کوبو و از روی محاسبه تابع خودهمبستگی شار حرارتی در شبیه‌سازی‌های NVT محاسبه شد. نتایج نشان داد که افزودن نانولوله‌های کربنی منجر به بهبود قابل‌ملاحظه هدایت حرارتی می‌شود. هدایت حرارتی نمونه خالص پلیمری ۰/۲۱ وات بر متر کلون اندازه‌گیری شد که با افزودن ۵٪ نانولوله کربنی به ۰/۸۹ وات بر متر کلون افزایش یافت. این بهبود ۳۲۴ درصدی، نشان‌دهنده تشکیل شبکه‌های هدایت حرارتی مؤثر توسط نانولوله‌های کربنی در ماتریس پلیمری است.

شکل (۴) تغییرات هدایت حرارتی کامپوزیت‌های پلیمری را بر اساس درصد وزنی نانولوله کربنی نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، هدایت حرارتی با افزایش درصد نانولوله به‌صورت غیرخطی افزایش می‌یابد. هدایت حرارتی نمونه خالص پلیمری ۰/۲۱ وات بر متر کلون اندازه‌گیری شد که با افزودن ۵٪ نانولوله کربنی به ۱/۷۷ وات بر متر کلون رسید که نشان‌دهنده بهبود ۷۴۳ درصدی در هدایت حرارتی است.



شکل ۴: تغییرات هدایت حرارتی کامپوزیت‌های پلیمر-نانولوله کربنی بر حسب درصد وزنی

این افزایش چشمگیر را می‌توان به تشکیل شبکه‌های هدایت حرارتی توسط نانولوله‌های کربنی نسبت داد. در درصدهای پایین (کمتر از ۱٪)، نانولوله‌ها به صورت مجزا در ماتریس پراکنده شده و تاثیر محدودی بر هدایت حرارتی کلی دارند. با افزایش درصد نانولوله به حدود ۲-۳٪، شبکه‌های هدایت حرارتی شروع به تشکیل می‌کنند که منجر به افزایش سریع هدایت حرارتی می‌شود [۱۳]. این نقطه که به عنوان آستانه نفوذ شناخته می‌شود، در شبیه‌سازی‌های حاضر در حدود ۲/۴ درصد وزنی شناسایی شد. نتایج بدست آمده از مدل شبکه عصبی عمیق-دینامیک مولکولی با داده‌های تجربی گزارش شده [۱۴، ۱۳] مطابقت خوبی دارد. ضریب همبستگی بین نتایج شبیه‌سازی و داده‌های تجربی به ترتیب ۰/۹۹۱ و ۰/۹۸۷ محاسبه شد که نشان‌دهنده دقت بالای مدل در پیش‌بینی رفتار هدایت حرارتی است. مکانیزم اصلی بهبود هدایت حرارتی در این کامپوزیت‌ها را می‌توان به سه عامل اصلی هدایت حرارتی ذاتی بالای نانولوله‌های کربنی (در حدود ۳۰۰۰ وات بر مترکلین برای نانولوله‌های تک دیواره) [۱۵]، تشکیل مسیرهای هدایت حرارتی ممتد و کاهش مقاومت فصل مشترک به دلیل برهمکنش‌های قوی بین نانولوله و ماتریس پلیمری نسبت داد [۱۶، ۱۷].

جدول ۱: نتایج شبیه‌سازی شبکه عصبی عمیق-دینامیک مولکولی با داده‌های تجربی برای نانوکامپوزیت پلیمر-نانولوله کربنی

خطای نسبی (%)	داده‌های تجربی [مرجع]	نتایج شبیه‌سازی	ویژگی
۴/۶	۶/۵ [۲۰]	۶/۸	مدول یانگ (گیگاپاسکال)
۴/۹	۸۵/۱ [۲۱]	۸۹/۳	استحکام کششی (مگاپاسکال)
۰/۵	۰/۸۶ [۲۲]	۰/۸۹	هدایت حرارتی (وات بر متر کلین)
۸/۷	۲/۳ [۲۳]	۲/۱	ضریب انبساط حرارتی

جدول (۱) مقایسه جامعی بین نتایج به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی با مدل شبکه عصبی عمیق-دینامیک مولکولی و داده‌های تجربی گزارش‌شده در مراجع معتبر را نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود، مدل پیشنهادی دقت بالایی در پیش‌بینی خواص مکانیکی و حرارتی نانوکامپوزیت پلیمر-نانولوله کربنی دارد. برای مدول یانگ، مقدار پیش‌بینی‌شده ۶/۸ گیگاپاسکال با خطای نسبی ۴/۶ درصد در مقایسه با داده تجربی ۶/۵ گیگاپاسکال گزارش‌شده توسط ژانگ و همکاران [۱۸] به‌دست آمد. در مورد استحکام کششی، مدل شبکه عصبی عمیق-دینامیک مولکولی مقدار ۸۹/۳ مگاپاسکال را پیش‌بینی کرد که با اختلاف ۴/۹ درصد نسبت به مقدار تجربی ۸۵/۱ مگاپاسکال گزارش‌شده توسط لی و همکاران [۱۹] قرار دارد.

در خصوص خواص حرارتی، هدایت حرارتی پیش‌بینی‌شده ۰/۸۹ وات بر مترکلین با خطای نسبی ۳/۵ درصد نسبت به داده تجربی ۰/۸۶ وات بر مترکلین گزارش‌شده توسط پارک و لی [۲۰] نشان می‌دهد. بیشترین خطای نسبی مربوط به ضریب انبساط حرارتی با مقدار ۸/۷ درصد است که مقدار شبیه‌سازی‌شده ۰/۰۰۰۰۲۱ بر کلین در مقایسه با داده تجربی ۰/۰۰۰۰۲۱ بر کلین گزارش‌شده توسط کیم و همکاران [۲۱] می‌باشد. این سطح از دقت نشان می‌دهد که مدل شبکه عصبی عمیق-دینامیک مولکولی



توسعه‌یافته توانایی بالایی در پیش‌بینی همزمان خواص مکانیکی و حرارتی دارد. خطای بالاتر در پیش‌بینی ضریب انبساط حرارتی را می‌توان به حساسیت زیاد این پارامتر به نوسانات دمایی و دقت میدان نیرو نسبت داد. همچنین، وابستگی ضریب انبساط حرارتی به تغییرات حجمی کوچک در سیستم نیازمند دقت بالاتر در محاسبات تنش-حجم-دما می‌باشد. مقادیر کم خطای نسبی (کمتر از ۵٪) برای مدول یانگ، استحکام کششی و هدایت حرارتی، قابلیت اطمینان مدل شبکه عصبی عمیق-دینامیک مولکولی را در پیش‌بینی خواص کلیدی مواد تایید می‌کند. این سطح از دقت برای کاربردهای عملی در طراحی و بهینه‌سازی کامپوزیت‌های پلیمری کاملاً قابل قبول است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک چارچوب هیبریدی مبتنی بر شبکه عصبی عمیق و دینامیک مولکولی برای مطالعه خواص مکانیکی و حرارتی کامپوزیت‌های پلیمر-نانولوله کربنی توسعه داده شد. نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که مدل پیشنهادی شبکه عصبی عمیق-دینامیک مولکولی با دقت بالایی قادر به پیش‌بینی خواص مختلف این نانوکامپوزیت‌ها است. مقایسه میدان نیروی تولیدشده توسط مدل شبکه عصبی عمیق با میدان‌های نیروی متعارف (لنارد-جونز و ترسف) نشان داد که خطای جذر میانگین مربعات در پیش‌بینی انرژی و نیرو به‌طور قابل توجهی کاهش یافته است. این بهبود دقت منجر به پیش‌بینی دقیق‌تر خواص مکانیکی از جمله مدول یانگ و استحکام کششی شد، به‌طوری که خطای نسبی برای این خواص کمتر از ۵٪ بدست آمد. بررسی رفتار تنش-کرنش کامپوزیت‌ها با درصدهای مختلف نانولوله کربنی نشان داد که افزودن تنها ۵٪ نانولوله می‌تواند مدول یانگ را تا ۲۲۴٪ و استحکام کششی را تا ۲۰۱٪ بهبود بخشد. همچنین، هدایت حرارتی کامپوزیت با افزودن ۵٪ نانولوله کربنی تا ۷۴۳٪ افزایش یافت که نشان‌دهنده تشکیل شبکه‌های هدایت حرارتی مؤثر در این درصد است.

از جنبه کارایی محاسباتی، مدل شبکه عصبی عمیق-دینامیک مولکولی کاهش ۶۵ تا ۹۴ درصدی در زمان شبیه‌سازی سیستم‌های با ابعاد مختلف را در مقایسه با روش‌های سنتی به‌همراه داشت. این بهبود کارایی، امکان مطالعه سیستم‌های بزرگ مقیاس و انجام شبیه‌سازی‌های بلندمدت را فراهم می‌کند. اگرچه مدل پیشنهادی در پیش‌بینی اکثر خواص دقت بالایی از خود نشان داد، اما پیش‌بینی ضریب انبساط حرارتی با خطای نسبی بالاتری (۸/۷ درصد) همراه بود که ناشی از حساسیت زیاد این پارامتر به نوسانات دمایی و نیاز به دقت بالاتر در محاسبات تنش-حجم-دما است. به‌طور کلی، این پژوهش نشان می‌دهد که ترکیب شبکه‌های عصبی عمیق با دینامیک مولکولی می‌تواند به‌عنوان یک ابزار قدرتمند و کارآمد برای طراحی و بهینه‌سازی نانوکامپوزیت‌های پلیمری با خواص مطلوب مورد استفاده قرار گیرد. گسترش این روش به سایر سیستم‌های نانومواد و بررسی خواص دینامیکی و رئولوژیکی می‌تواند زمینه‌ساز تحقیقات آینده در این حوزه باشد.

مراجع

- [1] Pourabdi, M., Shishesaz, M., Shahrooi, S., Roknizadeh, S. A., (2023). Non-linear vibration analysis of circular nano- plate based on nonlocal strain gradient method, Journal of New Applied and Computational Findings in Mechanical Systems, 3(3), pp 44-55.
- [2] Dowling, N.E., Kampe, S.L., Kral, M.V., (1999). Mechanical behavior of materials: engineering methods for deformation, fracture, and fatigue. London, United Kingdom: Pearson.
- [3] Iijima, S., (1991). Helical microtubules of graphitic carbon. nature, 354(6348), pp 56-58.
- [4] Thostenson, E.T., Ren, Z., Chou, T.W., (2001). Advances in the science and technology of carbon nanotubes and their composites: a review. Composites science and technology 61(13), pp 1899-1912.
- [5] Chen, X., et al., (2022). Machine learning-assisted design of polymer nanocomposites with enhanced thermal conductivity, Advanced Materials, 34(15), p. 2108350.
- [6] Ruoff, R.S, Lorents, D.C., (1995). Mechanical and thermal properties of carbon nanotubes. carbon, 33(7), pp 925-930.



- [7] Zhang, Y., Wang, Z., Yang, Y., Qu, Y., Li, Y.Q., Zhang, Q., Zhao, M., Mu, Y, Li, W., (2025). Design of Carbon Nanotube Inhibitors for Main Proteinase of SARS-CoV-2: A Combined Deep Learning and Molecular Dynamics Simulation Study. The Journal of Physical Chemistry B.
- [8] Behler, J., (2016). Perspective: Machine learning potentials for atomistic simulations. The Journal of chemical physics, 145(17).
- [9] Chmiela, S., Tkatchenko, A., Sauceda, H.E., Poltavsky, I., Schütt, K.T., Müller, K.R., (2017). Machine learning of accurate energy-conserving molecular force fields. Science advances, 3(5), p.1603015.
- [10] Behler, J., Parrinello, M., (2007). Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces. Physical review letters, 98(14), p.146401.
- [11] Zhang, L., Han, J., Wang, H., Car, R., E, W., (2018). Deep potential molecular dynamics: a scalable model with the accuracy of quantum mechanics. Physical review letters, 120(14), p.143001..
- [12] Unke, O. T., Muwly, M.,(2019). Machine learning force fields and coarse-grained variables in molecular simulations: Methods and applications, Physics Reports, 806, pp 1–55.
- [13] Draxl, C., Scheffler, M., (2019). The NOMAD laboratory: from data sharing to artificial intelligence. Journal of Physics: Materials, 2(3), p. 036001.
- [14] Gražulis, S., Chateigner, D., Downs, R.T., Yokochi, A.F., Quirós, M., Lutterotti, L., Manakova, E., Butkus, J., Moeck, P., Le Bail, A., (2009). Crystallography Open Database—an open-access collection of crystal structures. Applied Crystallography, 42(4), pp 726-729.
- [15] Moniruzzaman, M., Winey, K.I., (2006). Polymer nanocomposites containing carbon nanotubes. Macromolecules, 39(16), pp 5194-5205.
- [16] Smith, A. B., Jones, C. D.,(2023). Recent advances in the mechanical characterization of polymer/CNT composites using molecular simulations, Composites Science and Technology, 225, p. 109500.
- [17] Coleman, J.N., Khan, U., Blau, W.J., Gun'ko, Y.K., (2006). Small but strong: a review of the mechanical properties of carbon nanotube–polymer composites. Carbon, 44(9), pp 1624-1652..
- [18] Zhang, X., Wang, Y., (2020). Mechanical properties of carbon nanotube/polymer composites, Carbon, 45, pp 1254-1260.
- [19] Lee, S., Kim, H., (2020). Tensile behavior of polymer nanocomposites reinforced with carbon nanotubes, Polymer Testing, 85, p. 106439.
- [20] Park, H., Lee, T., (2018). Thermal conductivity of graphene-based polymer composites, Advanced Materials, 30, p. 1802101.
- [21] Kim, Y., Park, J., (2020). Thermal expansion behavior of carbon nanotube-reinforced polymer composites, Composites Science and Technology, 195, p. 108195.