



THE HOMOGENIZATION-BASED DATA-DRIVEN APPROACH TO PREDICT UNIAXIAL EFFECTIVE CONDUCTIVITY OF LOW THERMAL COMPOSITE MATERIALS

Le Canh Hung, Le Ba Anh, Bui Thi Loan, Tran Bao Viet*

University of Transport and Communications, No 3 Cau Giay Street, Hanoi, Vietnam

ARTICLE INFO

TYPE: Research Article

Received: 03/07/2023

Revised: 25/08/2023

Accepted: 30/08/2023

Published online: 15/10/2023

<https://doi.org/10.47869/tcsj.74.8.7>

* *Corresponding author*

Email: vietthb@utc.edu.vn; Tel: +84911451080

Abstract. Predicting the thermal conductivity coefficient of longitudinal fiber-reinforced materials is an important and significant problem due to its wide practical application in the structure of these materials. To achieve this factor, we redefine the classical homogenization formula based on a generalized self-consistent model with a free parameter. And then, we build a database of 1700 data points using the periodic homogenization finite element method, with varying contrast ratios of the inclusion phase to the matrix phase conductivity ranging from 1 to 0, and varying volume fractions of the inclusion phase from 0 to the maximum packing density. The combination of the dataset and the generalized self-consistent model allows us to determine the relationship between the free parameter and the material inputs. By combining the approximation function with the original analytical model, we obtain a simple, explicit, and easily applicable hybrid homogenization model that provides excellent predictive capabilities for computational results.

Keywords: homogenization, conductivity, machine learning, self-consistent, finite element.

@ 2023 University of Transport and Communications



PHƯƠNG PHÁP ĐỒNG NHẤT HÓA KẾT HỢP ĐỊNH HƯỚNG DỮ LIỆU DỰ BÁO HỆ SỐ DẪN HỮU HIỆU DỌC TRỤC CỦA VẬT LIỆU COMPOSITE DẪN NHIỆT THẤP

Lê Cảnh Hưng, Lê Bá Anh, Bùi Thị Loan, Trần Bảo Việt*

Trường Đại học Giao thông vận tải, Số 3 Cầu Giấy, Hà Nội, Việt Nam

THÔNG TIN BÀI BÁO

CHUYÊN MỤC: Công trình khoa học

Ngày nhận bài: 03/07/2023

Ngày nhận bài sửa: 25/08/2023

Ngày chấp nhận đăng: 30/08/2023

Ngày xuất bản Online: 15/10/2023

<https://doi.org/10.47869/tcsj.74.8.7>

* Tác giả liên hệ

Email: viettb@utc.edu.vn; Tel: +84911451080

Tóm tắt. Dự báo hệ số dẫn nhiệt của vật liệu cốt sợi dọc trục là bài toán quan trọng và có ý nghĩa do khả năng áp dụng rộng rãi trong thực tế của dạng kết cấu vật liệu này. Để thực hiện, chúng tôi thiết lập lại công thức đồng nhất hóa cổ điển dựa trên mô hình tự tương hợp tổng quát với một số thông số tự do. Tiếp theo, chúng tôi sẽ xây dựng cơ sở dữ liệu với 1700 dữ liệu dựa trên phương pháp phần tử hữu hạn đồng nhất hóa tuần hoàn với tỉ lệ tương phản của hệ số dẫn pha cốt trên pha nền biến đổi từ 1 tới 0, và tỉ lệ thể tích của pha cốt từ 0 tới độ chặt tối đa. Việc kết hợp giữa tập dữ liệu và mô hình tự tương hợp tổng quát cho phép xác định mối quan hệ số giữa thông số tự do với đầu vào của vật liệu, từ đó xây dựng được công thức giải tích xấp xỉ. Kết quả của nghiên cứu cho thấy, việc kết hợp hàm xấp xỉ với mô hình giải tích gốc, cho phép thu được một mô hình giải tích đồng nhất hóa kết hợp đơn giản, tường minh, dễ áp dụng, cho phép dự báo rất tốt các kết quả tính toán.

Từ khóa: đồng nhất hóa, hệ số dẫn, học máy, tự tương hợp, phần tử hữu hạn.

@ 2023 Trường Đại học Giao thông vận tải

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Bên cạnh công nghệ Internet Vạn vật (IoT), trí tuệ nhân tạo, thì công nghệ in 3D và công nghệ vật liệu mới được xem là một trong những thành phần tiêu biểu của nền công nghiệp 4.0, tạo ra nhiều đột phá trong nhiều lĩnh vực khác nhau. Với sự phát triển vượt bậc gần đây của công nghệ chế tạo bồi đắp (additive manufacturing) sử dụng kỹ thuật in 3D tiên tiến cho phép chế tạo được các dạng cấu trúc đặc biệt và các công nghệ chế tạo vật liệu mới có tính năng đặc biệt (vật liệu bóng khí, vật liệu bọt, vật liệu rỗng...), nhiều các dạng vật liệu mới có tính tương

phản cao về tính chất, thành phần của các pha vật liệu được lên ý tưởng, thiết kế, chế tạo, và đưa vào ứng dụng đại trà trong công nghiệp cũng như dân dụng [1]. Các vật liệu composite kháng nhiệt do pha cốt liệu có hệ số dẫn nhiệt thấp, hoặc đạt tới giá trị không được thiết kế chế tạo và ứng dụng trong thực tế. Dự báo các tính chất cơ học tổng thể của vật liệu dẫn nhiệt thấp dạng này luôn là chủ đề nghiên cứu được quan tâm bởi ý nghĩa quan trọng cả trong ứng dụng thực tế cũng như là phát triển lý thuyết.

Phương pháp đồng nhất hóa dựa trên các lý thuyết cơ học vi mô là một cách tiếp cận quan trọng vì được xây dựng dựa trên cơ sở cơ học và toán học căn bản, cho phép đạt được lời giải chính xác hoặc tiệm cận, giảm thiểu thời gian tính toán, và mang tính định hướng lý thuyết cao. Phương pháp này có lịch sử phát triển phong phú, kéo dài từ các nghiên cứu cơ bản cuối thế kỷ 19 tới những nghiên cứu gần đây với các chủ đề đa dạng như tiếp cận biến phân, mặt tiếp xúc không hoàn hảo, kết hợp với kỹ thuật nhận diện hình ảnh, phương pháp số, cốt liệu có hình dạng đặc biệt ... [2]. Cách tiếp cận cơ bản của phương pháp đồng nhất hóa cơ học vi mô trong việc xây dựng các hàm dự báo ứng xử gồm hai bước chính: (i) giải bài toán cục bộ chính xác, hoặc tiệm cận ở mức độ vi mô, và (ii) áp dụng một số sơ đồ xấp xỉ để tính toán các giá trị trung bình ở mức độ vĩ mô. Các mô hình đồng nhất hóa cổ điển được xây dựng dựa trên lời giải giải tích của Eshelby cho một pha cốt hình e-líp nằm trong miền đồng nhất vô hạn kết hợp với các sơ đồ đồng nhất khác nhau (phân tán, tự tương hợp (self-consistent), vi phân (differential), Mori-Tanaka). Các lời giải theo hướng này tương đối tường minh, công thức đơn giản, dễ áp dụng, nhưng cho các kết quả không tốt với vật liệu có tính tương phản cao và độ chặt của cốt liệu lớn.

Lý thuyết cơ học thống kê liên tục (Statistical continuum mechanics theory) cũng được áp dụng để giải quyết các bài toán xác định tính chất hữu hiệu của vật liệu. Theo cách tiếp cận này, Torquato [3] đã phát triển các hàm tương quan đa điểm (n-point correlation functions) để xây dựng các công thức dự báo tích chất hữu hiệu tùy thuộc vào các thông tin về cấu trúc vi mô của vật liệu. Phạm và Torquato [4] đã phát triển các hàm xấp xỉ tương quan (correlation approximation) với các hệ số tương quan tính toán phụ thuộc vào cấu trúc vật liệu cho phép tính toán khá tốt hệ số đàn hồi/dẫn hữu hiệu của vật liệu composite với các pha cốt liệu được xấp xỉ ngẫu nhiên hoặc có trật tự, với tỉ lệ thể tích của pha cốt liệu gần tới độ chặt tối đa của hỗn hợp. Một hướng nghiên cứu tương tự, phương pháp đồng nhất hóa tiệm cận (asymptotic homogenization) dựa trên khai triển bậc cao của trường chuyển vị (hoặc trường nhiệt độ với bài toán hệ số dẫn nhiệt) là hướng nghiên cứu phù hợp trong việc xây dựng các công thức tính các giá trị hữu hiệu của vật liệu hỗn độn nhiều thành phần có độ tương phản cao. Các nghiên cứu và các kết quả phù hợp nhất có thể được tìm thấy tại các công bố của Andrianov và cộng sự [5]. Tuy vậy các nghiên cứu theo hướng khai triển bậc cao này có công thức tương đối phức tạp, thiếu linh hoạt và vẫn chưa thực sự tốt tại điểm tới hạn về thể tích cốt liệu tối đa [6].

Do vậy, mục đích của bài báo là xây dựng mô hình đồng nhất hóa mới, đơn giản và hiệu quả trong việc xác định hệ số dẫn nhiệt trung bình của vật liệu kháng nhiệt với sự chênh lệch hệ số dẫn giữa các pha là cao và thể tích của cốt liệu lớn. Để thực hiện nhiệm vụ tương đối khó khăn này, trình tự công việc chúng tôi tiến hành trong bài báo như sau. Đầu tiên tại Mục 2, chúng tôi xây dựng lại một số tiếp cận đồng nhất hóa cổ điển. Phương pháp “Kiểu hình thái đại diện” (Morphological representative pattern-based approach, viết tắt MRP) [7] với một số thông số tự do được thiết lập. Tiếp theo, chúng tôi sẽ xây dựng cơ sở dữ liệu dựa trên phương pháp phần tử hữu hạn đồng nhất hóa tuần hoàn với tỉ lệ tương phản của hệ số dẫn pha nền trên pha cốt liệu biến đổi từ 1 tới vô cùng, và tỉ lệ thể tích của pha cốt liệu từ 0 tới độ chặt tối đa (Mục 3). Một số mô hình hồi quy/học máy được áp dụng nhằm kết hợp giữa các kết quả lý thuyết và

dữ liệu sẽ được thực hiện tại Mục 4, với mục tiêu xây dựng mô hình đồng nhất hóa hợp lý. Cuối cùng là phần kết luận và kiến nghị.

2. PHƯƠNG PHÁP ĐỒNG NHẤT HÓA

Trường hợp tổng quát, phương pháp đồng nhất hóa xây dựng phương pháp nhằm xác định giá trị trung bình của một môi trường vật chất hỗn độn nhiều thành phần. Với bài toán truyền dẫn được xem xét trong bài báo này, chúng tôi giả thiết một vật liệu hỗn độn nhiều thành phần ký hiệu trong miền không gian $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, với $d = 1, 2, 3$ là số chiều không gian và $\partial\Omega$ là biên của vật thể. Vật liệu gồm n pha cốt liệu khác nhau với hệ số dẫn C_i , chiếm tỉ lệ thể tích ϕ_i , nằm trong pha nền có hệ số dẫn C_m , tỉ lệ thể tích ϕ_m . Ở một cách tiếp cận đơn giản nhất khi xem xét tỉ lệ thể tích của các pha cốt liệu là nhỏ và bỏ qua ảnh hưởng tương tác, công thức xấp xỉ phân tán xác định hệ số dẫn trung bình C^e của môi trường có dạng như sau

$$C^e = C_m + \sum_{i=1}^n \phi_i (C_i - C_m) D_i(C_i, C_m). \quad (1)$$

Trong đó D_i là hàm dạng phụ thuộc vào hình dạng của cốt liệu và tính chất của vật liệu.

Trong trường hợp xem xét vai trò của các pha vật liệu là tương đương nhau, chúng ta có xấp xỉ nổi tiếng “tự tương hợp” cho phép tính đến ảnh hưởng của sự tương tác giữa các pha với $C^e = C$ là nghiệm của phương trình tự tương hợp (viết tắt là SC)

$$\sum_{i=1}^n \phi_i (C_i - C) D_i(C_i, C) = 0. \quad (2)$$

Xấp xỉ tự tương hợp luôn thỏa mãn các đánh giá Hashin-Shtrickman (viết tắt là HS), là đánh giá toán học tốt nhất chỉ dựa trên thông tin bậc 2 về tỉ lệ thể tích và tính chất của các pha vật liệu. Đánh giá Hashin-Shtrickman trên (HSU) và đánh giá Hashin-Shtrickman dưới (HSL) được định nghĩa như sau

$$HSL = P(C_{min}) \leq C^e \leq P(C_{max}) = HSU \quad (3)$$

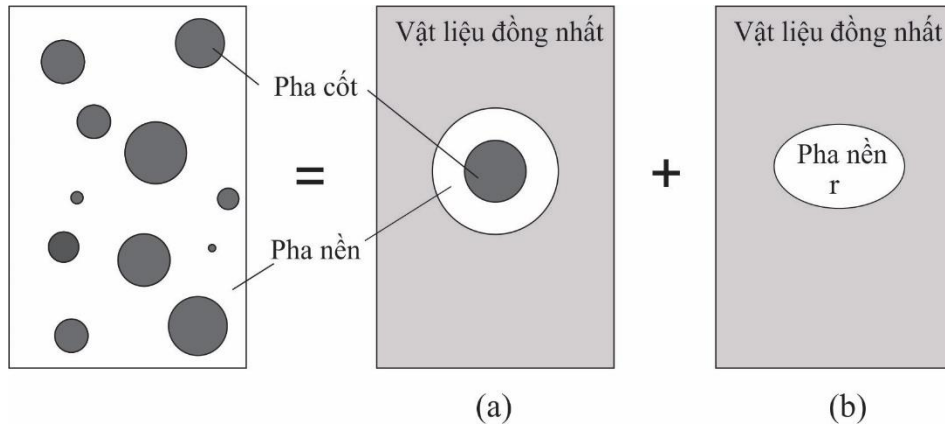
với

$$C_{min} = \min\{C_m, C_i\}, \quad C_{max} = \max\{C_m, C_i\} \quad (4)$$

và

$$P(C) = \left(\frac{\phi_m}{C_m + C_*} + \sum_{i=1}^n \frac{\phi_i}{C_i + C_*} \right)^{-1} - C_*, \quad C_* = (d - 1)C. \quad (5)$$

Thông thường, với vật liệu có hệ số dẫn nhiệt của các pha cốt liệu thấp, các kết quả thường nằm giữa đánh giá trên và xấp xỉ tự tương hợp. Với tỉ lệ thể tích của cốt liệu lớn thì sai số cũng lớn và các hàm dự báo cổ điển kể trên (gồm một số xấp xỉ khác như Mori-Tanaka hoặc sai phân) không đủ hiệu quả để áp dụng. Để khắc phục, nhiều hướng tiếp cận bổ sung thêm thông tin hoặc/và các tham số tự do để hiệu chỉnh đã được thực hiện. Trần năm 2019 [8] đã đề xuất một phương pháp “xấp xỉ tự tương hợp dạng tổng quát mở rộng” (gọi tắt là RGSCP) với 2 thông số bổ sung cho phép khắc phục những nhược điểm của các xấp xỉ cổ điển.



Hình 1. Phương pháp xấp xỉ tự tương hợp dạng tổng quát mở rộng (RGSCP).

Trong phương pháp RGSCP, nhóm nghiên cứu đề xuất phân tách pha nền thành hai phần, phần thứ nhất bao quanh cốt liệu và phần từ hai đóng vai trò như một cốt liệu ảo độc lập. Sơ đồ tính được thể hiện như Hình 1. Thông số tự do thứ nhất của mô hình là độ chặt tối đa của cốt liệu ϕ^M , là một thuộc tính của hỗn hợp vật liệu, có thể tính toán chính xác hoặc là một hàm xấp xỉ. Thông số thứ hai là hình dạng của cốt liệu ảo, đặc trưng bởi tỉ số r (nằm trong khoảng 0 tới 1) giữa hai trục của hình elip (trường hợp hai chiều) hoặc elip tròn xoay (trường hợp ba chiều). Trong khuôn khổ bài báo, chúng tôi quan tâm tới hệ số dẫn ngang của vật liệu, tương ứng với trường hợp $d = 2$, và cốt liệu có dạng hình tròn. Áp dụng xấp xỉ tự tương hợp cho cấu hình này, chúng ta có dạng phương trình tổng quát như sau

$$(1 - \phi^M) \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \frac{(C_m - C)}{A_i C_m + (1 - A_i) C} + \sum_i^n \phi_i^M \frac{d(C_{Eli} - C)}{C_{Eli} + (d - 1)C} = 0, \quad (6)$$

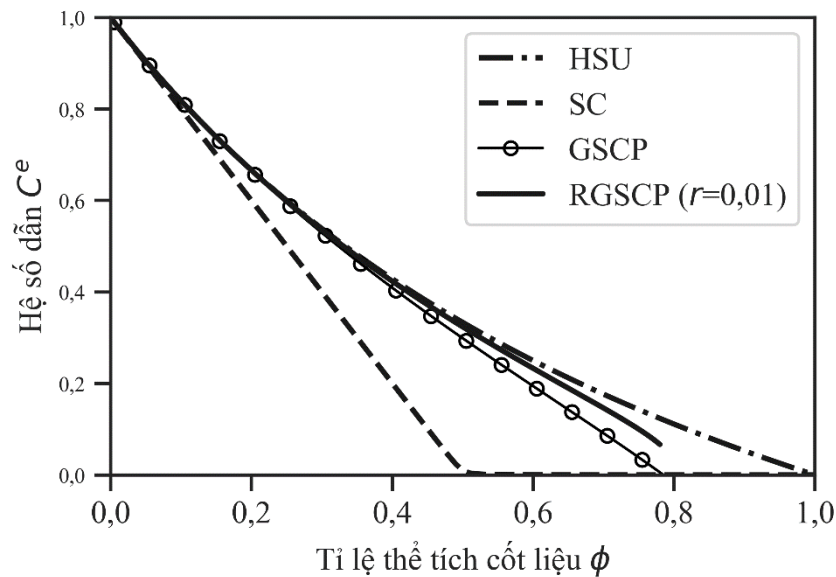
với

$$C_{Eli} = \left(\frac{f}{C_i + (d - 1)C_m} + \frac{1 - f}{C_m + (d - 1)C_m} \right)^{-1} - (d - 1)C_m, \quad (7)$$

và

$$\phi_i^M = \frac{\phi_i}{\phi} \phi^M, \quad f = \frac{\phi}{\phi^M}, \quad A_1 = \frac{r}{1 + r}, \quad A_2 = \frac{1}{1 + r}. \quad (8)$$

Với phương trình (6-8), chúng ta có xấp xỉ tương đối tốt, đơn giản để phản ánh tính chất hữu hiệu của hệ số dẫn của vật liệu nhiều thành phần. Hình 2 minh họa tính toán cho trường hợp vật liệu duy nhất 1 pha cốt liệu cách nhiệt tuyệt đối với $C_i = 0$, các hạt phân bố ngẫu nhiên và có cùng kích thước. Với trường hợp này $\phi^M = 0,82$. Dễ dàng nhận thấy với $r = 1$, $\phi^M = \phi$, RGSCP trùng với xấp xỉ SC; với $r = 1$, $\phi^M = 1$, RGSCP trùng với xấp xỉ đánh giá trên HSU cũng chính là xấp xỉ Mori-Tanaka và mô hình quả cầu lồng nhau CSA của Hashin. Ngoài ra trong Hình 2 chúng tôi cũng thể hiện cho trường hợp $r = 0,01$. Khi so sánh kết quả tại đây với kết quả tại Hình 3 của tài liệu tham khảo [8], dễ dàng nhận thấy rằng, cùng một giá trị thể tích cốt liệu, hệ số dẫn tăng lên khi r giảm. Điều này cũng đã được khẳng định tại [8], khi chúng tôi cũng chứng tỏ rằng mối quan hệ C^e, r là hàm đơn điệu tăng dần. Ngoài kết quả tại Hình 2, một số minh chứng thực nghiệm cũng chứng tỏ hiệu quả của phương pháp xấp xỉ này. Tuy vậy để thiết lập một xấp xỉ cho giá trị r là thách thức tương đối lớn và hiện tại các phương pháp giải tích chưa đủ hiệu quả. Tại bài báo này, một chiến lược xác định hàm r dựa trên định hướng dữ liệu sẽ được xem xét.



Hình 2. Kết quả dự báo cho vật liệu rỗng.

3. XÂY DỰNG TẬP DỮ LIỆU DỰA TRÊN PHƯƠNG PHÁP PHẦN TỬ HỮU HẠN

Tại mục này chúng tôi sẽ sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn (PTHH) cho vật liệu tuần hoàn để tính toán hệ số dẫn của vật liệu hai thành phần với mô tả như ở Mục 2. Pha cốt liệu có dạng hình tròn, một kích cỡ được sắp xếp theo hai dạng cơ bản là nhân tuần hoàn hình vuông và nhân tuần hoàn lục giác (Hình 3). Theo lý thuyết đồng nhất hóa vật liệu, các tính toán được tính trên phân tử thể tích đặc trưng (Ω). Giả sử đặt lên (Ω) một trường nhiệt độ vĩ mô có gradient ∇T , véc tơ dòng nhiệt vĩ mô \mathbf{Q} , khi đó hệ số dẫn hiệu dụng được xác định qua định luật Fourier trong điều kiện đẳng hướng:

$$(9) \quad \mathbf{Q} = -C^e \nabla T$$

Ở đây cần hiểu véc tơ dòng nhiệt vĩ mô \mathbf{Q} là trung bình trên toàn miền Ω của các véc tơ dòng nhiệt vi mô :

$$Q = \langle \mathbf{q}(\mathbf{z}) \rangle_{\Omega} \quad (10)$$

\mathbf{z} xác định vị trí của chất điểm trong Ω . Với nhân tử tuần hoàn hình chữ nhật (U) có cạnh là a_1, a_2 , vị trí các điểm trong nhân tuần hoàn ký hiệu là \mathbf{x} , có trường dòng nhiệt vi mô $\mathbf{q}(\mathbf{z})$

$$\forall n_1, n_2 \in N, \mathbf{q}(\mathbf{z}) = \mathbf{q}(\mathbf{z} + n_1 a_1 \mathbf{x}_1 + n_2 a_2 \mathbf{x}_2) \quad (11)$$

Điều kiện tuần hoàn là trung bình của dòng nhiệt vi mô trên miền (U) bằng với trung bình của dòng nhiệt vi mô trên miền (Ω)

$$\langle \mathbf{q}(\mathbf{z}) \rangle_U = \langle \mathbf{q}(\mathbf{z}) \rangle_{\Omega} = \mathbf{Q} \quad (12)$$

Mối quan hệ giữa \mathbf{Q} và ∇T có thể xác định trên miền U , dựa vào các quan hệ sau:

$$\text{div} \mathbf{q}(\mathbf{z}) = 0 \quad : (U) \quad (13)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{z}) = -C(\mathbf{z}) \nabla T(\mathbf{z}) \quad : (U) \quad (14)$$

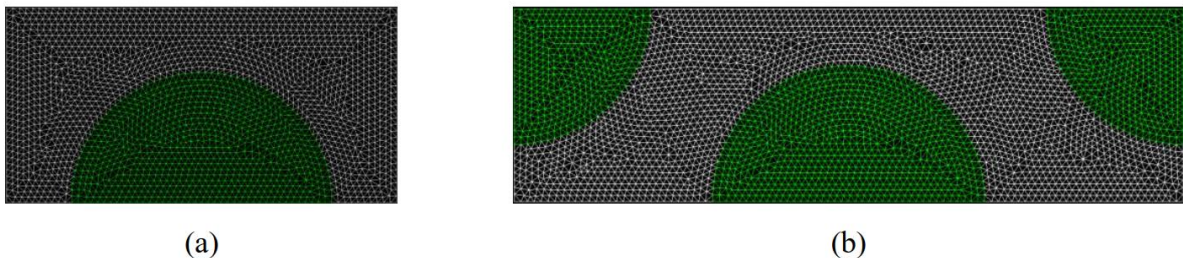
$$T(\mathbf{z}) = T_0 + \nabla T \cdot \mathbf{z} + T^*(\mathbf{z}) \quad : (U) \quad (15)$$

$$T^*(\mathbf{z}): \text{tuần hoàn} \quad : (\partial U) \quad (16)$$

$$(\mathbf{q}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}: \text{tuần hoàn} \quad : (\partial U) \quad (17)$$

Với $T(\mathbf{z}), T_0, T^*(\mathbf{z})$ lần lượt là trường nhiệt, nhiệt độ ban đầu của vật liệu và trường nhiệt hỗn loạn tuần hoàn gây ra bởi cốt được bọc, \mathbf{n} là véc tơ pháp tuyến ngoài trên biên ∂U . Hệ phương trình vi phân từng phần (13-17) có thể giải bằng phương pháp phần tử hữu hạn, qua đó có thể xác định được hệ số dẫn hữu hiệu của vật liệu tại phương trình (9). Để phù hợp với việc xử lý dữ liệu lớn và đẩy nhanh tốc độ tính toán, chương trình phần tử hữu hạn sử dụng nền tảng giải phương trình đạo hàm riêng FeniCSx trên ngôn ngữ Python dự kiến được sử dụng. Không mất tính tổng quát, chúng ta có thể đặt giá trị $C_m = 1, C_i$ thay đổi từ 0 tới 1, có thể bỏ qua vai trò của đơn vị hệ số dẫn nhiệt. Thực chất, các thiết lập ở bài báo này có thể áp dụng cho các bài toán dẫn nhiệt, từ, lan truyền ở trạng thái dừng. Tuy nhiên việc lấy ví dụ với bài toán nhiệt cho phép chúng tôi không cần đề cập đến một số cơ chế lý hóa khác khi xem xét bài toán lan truyền của các dạng vật chất khác. Kết quả tính toán cụ thể được thể hiện ở Bảng 1, với gần 1000 dữ liệu cho mỗi một dạng nhân tuần hoàn. Các mối tương quan giữa hệ số dẫn hữu hiệu với hệ số dẫn của pha thành phần và tỉ lệ cốt liệu được thể hiện tại Hình 4.

Tiếp theo chúng tôi sử dụng phương pháp Học máy XGB (Extreme Gradient Boosting) để xây dựng hàm dự báo cho tập dữ liệu mới xây dựng. Như đã được kết luận bởi nhiều công trình gần đây [9, 10], XGB là một trong những mô hình Học máy tốt nhất hiện nay trong việc dự báo dữ liệu dạng bảng. Để thực hiện thì chúng tôi chia ngẫu nhiên tập huấn luyện và tập kiểm tra với tỉ lệ 0,7-0,3 cho cả 2 dạng dữ liệu kiểu nhân tuần hoàn hình vuông và lục giác. Tham số mô hình XGB được lấy theo mặc định tại thư viện XGBoost. Kết quả dự báo được thể hiện tại Hình 5 và 6 với hệ số xác định R2 đạt 0,997 và 0,998 cho tập kiểm tra cho 2 dạng cấu trúc nhân tuần hoàn. Một cách chi tiết, tại Hình 5 và 6, giá trị hệ số dẫn hữu hiệu được thể hiện C^e cho mỗi cặp đầu vào $\phi, C_i/C_m$. Với mỗi điểm, trục ngang là giá trị C^e tính bằng phương pháp PTHH, trong khi trục dọc là giá trị dự báo sử dụng mô hình XGBoost. Một cách định tính, các điểm bám sát đường $y = x$, chứng tỏ giá trị tính và giá trị dự báo là trùng khớp. Kết quả này khá tốt và ổn định cho nhiều lần chia ngẫu nhiên các tập huấn luyện và tập kiểm tra do đó không cần thiết thực hiện tinh chỉnh cho các tham số của mô hình XGB.

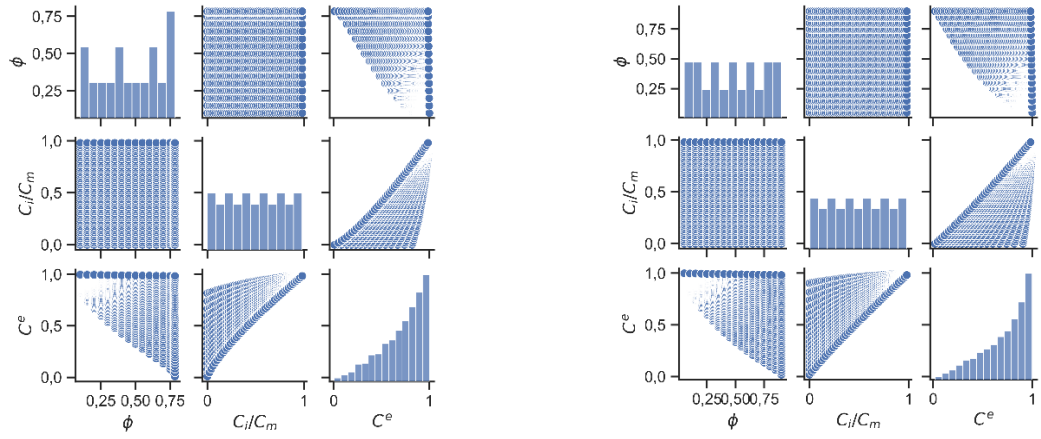


Hình 3. (a) - nhân tử tuần hoàn hình vuông, (b) – nhân tử tuần hoàn hình lục giác.

Bảng 1. Thông số thống kê của tập dữ liệu.

	Nhân tuần hoàn hình vuông			Nhân tuần hoàn lục giác		
	ϕ	C_i/C_m	C^e	ϕ	C_i/C_m	C^e
Số mẫu	816	816	816	918	918	918
Trung bình	0,469688	0,5	0,718767	0,475	0,5	0,723258

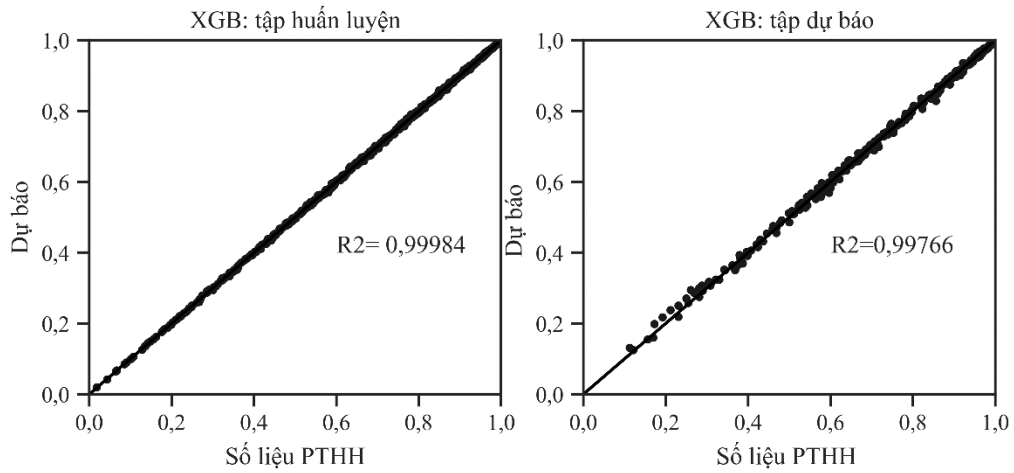
Lệch chuẩn	0,222682	0,294572	0,227898	0,259548	0,294552	0,232844
Nhỏ nhất	0,1	0,00001	0,008922	0,05	0,00001	0,018127
Lớn nhất	0,785	1	1	0,9	1	1



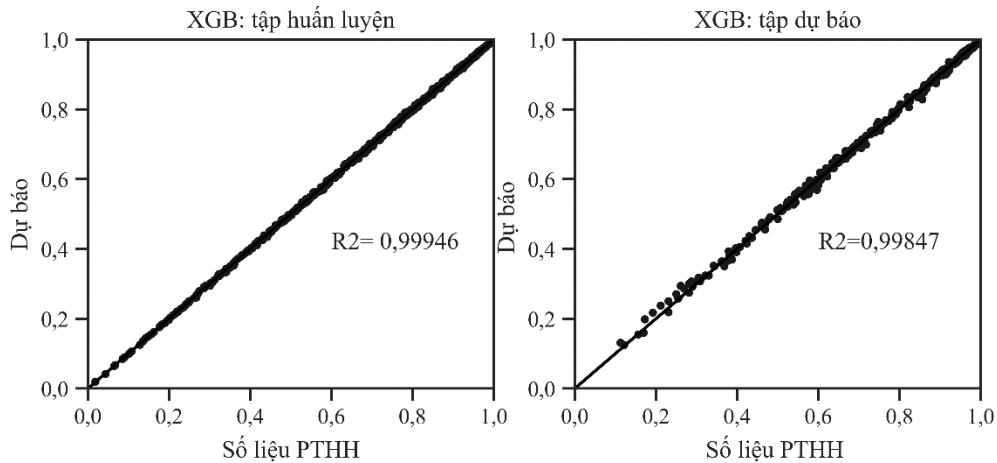
(a) - nhân tử tuần hoàn hình vuông

(b) – nhân tử tuần hoàn hình lục giác

Hình 4. Tương quan thống kê giữa các biến.



Hình 5. Dự báo dựa theo mô hình học máy XGB – nhân tuần hoàn hình vuông.



Hình 6. Dự báo dựa theo mô hình học máy XGB – nhân tuần hoàn lục giác.

4. XÂY DỰNG MÔ HÌNH ĐỒNG NHẤT HÓA KẾT HỢP

Mặc dù ý nghĩa của mô hình XGB được xây dựng tại Mục 3 là khá rõ khi cho phép chúng ta dự báo được hệ số dẫn nhiệt hữu hiệu của vật liệu mà không cần thực hiện lại các tính toán PTHH phức tạp. Tuy vậy, do là dạng không tường minh và không có ý nghĩa vật lý nên việc mở rộng cũng như dễ dàng áp dụng ở các mức độ khác nhau là nhược điểm lớn của mô hình Học máy kể trên. Như đã giới thiệu ở Mục 2, mô hình tự tương hợp dạng tổng quát mở rộng cho phép dự báo tốt so với các mô hình cổ điển khác, tuy nhiên việc đưa vào tham số tự do r là hạn chế lớn nhất làm giảm hiệu quả của mô hình. Một chiến lược xác định r được phát triển tại Mục này với các bước cụ thể như sau:

- Dựa trên Bảng dữ liệu thu được, với mỗi một điểm dữ liệu đầu vào $(\phi, C_i/C_m)$ và đầu ra C^e , chúng tôi sẽ tính ngược lại giá trị r cho mỗi điểm dữ liệu dựa theo hệ phương trình tự tương hợp (6- 8).
- Trường hợp không có nghiệm chúng tôi sẽ dùng kỹ thuật để lọc giá trị r với sai số nhỏ nhất.
- Sau khi tìm được giá trị r cho mỗi hàng dữ liệu, quan hệ giữa r với tỉ lệ C_i/C_m và tỉ lệ thể tích cốt liệu ϕ được thể hiện tại Hình 7 (các đường nét liền).

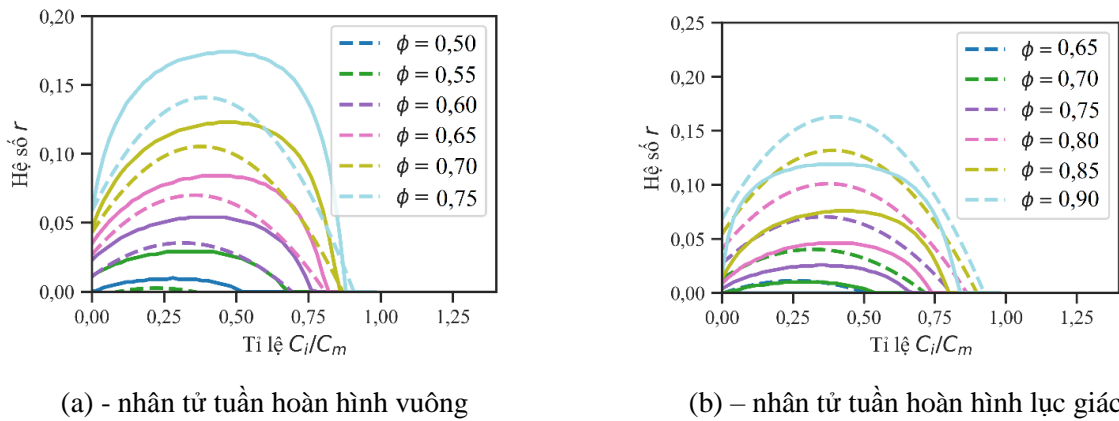
Một kết quả quan trọng nhận được sau khi tính toán r là với các hệ số tỉ lệ thể tích nhỏ hơn khoảng 0,55, r đều đạt giá trị 0. Với các trường hợp hệ số tỉ lệ thể tích lớn hơn và tiến sát tới độ chặt tối đa, mối quan hệ giữa r và tỉ số C_i/C_m có dạng parabol ngược như thể hiện tại Hình 7, cho cả hai kiểu nhân tuần hoàn. Qua Hình 7 ta thấy, hệ số r không mang nghĩa tự do như phương trình vật lý xây dựng đầu bài báo mà có thể có quy luật phụ thuộc vào các thông tin của vật liệu. Đây là kết quả rất thú vị và đáng ghi nhận.

Với định dạng là hàm parabol ngược phụ thuộc vào $\phi, C_i/C_m$, chúng ta có thể thu được kết quả hàm hồi quy tuyến tính dạng đơn giản như sau

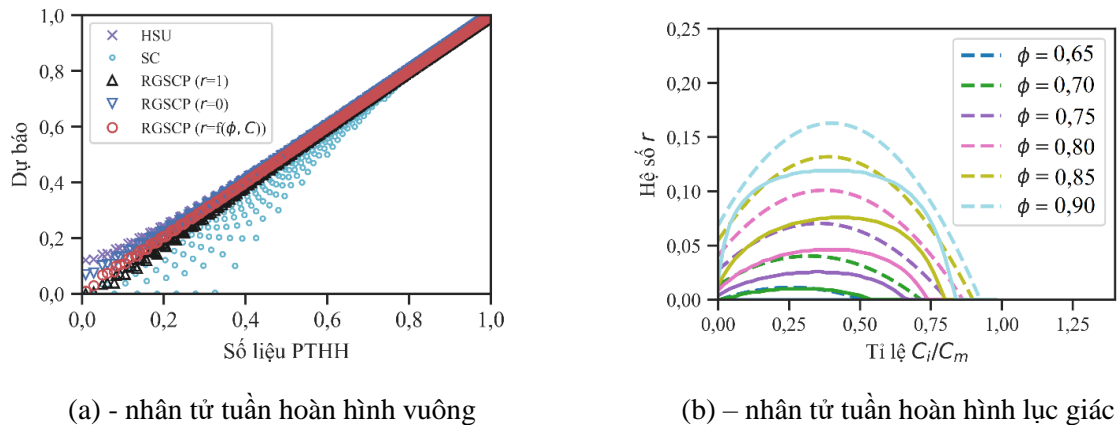
$$r = (-1,5 \frac{\phi}{\phi^M} + 0,9) \times (\frac{C_i}{C_m})^2 + (1,38 \frac{\phi}{\phi^M} - 0,9) (\frac{C_i}{C_m}) + (0,25 \frac{\phi}{\phi^M} - 0,18) \quad (18)$$

Kết quả của phương trình (18) là các đường cong đứt quãng trên Hình 7. Cần chú ý rằng độ chặt tối đa ϕ^M cho hai dạng nhân tử lần lượt là 0,785 và 0,905.

Kết hợp phương trình (18) với phương trình (6-8), chúng ta thu được mô hình giải tích đồng nhất hóa kết hợp cho phép dự báo hệ số dẫn hữu hiệu của vật liệu 2 thành phần. Mô hình được xây dựng từ hệ phương trình (6-8,18) gọi là mô hình tự tương hợp dạng tổng quát kết hợp, viết tắt là RGSCP với r thay đổi. Kết quả được thể hiện tại Hình 8 (trung tự Hình 5, 6 cho toàn bộ tập dữ liệu), trong đó mỗi điểm tương ứng với một giá trị vật liệu cụ thể, 2 trục đại diện giá trị của hệ số dẫn trung bình được tính bằng phương pháp PTHH (trục ngang) và mô hình dự báo (trục dọc). Tại Hình 8, mô hình kết hợp được xây dựng tại bài báo này thể hiện qua hình tròn đỏ, trong khi đánh giá HSU, mô hình tự tương hợp cổ điển SC, cũng như mô hình tự tương hợp tổng quát với r cố định được thể hiện tương ứng. Dễ dàng nhận thấy rằng mô hình thuần túy giải tích cho kết quả dự báo rất tốt, với hệ số xác định R^2 đạt tới 0,9999 cho cả 2 cách bố trí nhân tuần hoàn. Với một phương trình giải tích tương đối đơn giản, tường minh, được xây dựng từ các phát triển cơ học cơ bản, thỏa mãn các điều kiện vật lý nhưng vẫn đạt được kết quả dự báo thậm chí còn tốt hơn mô hình Học máy mạnh mẽ, đây là kết quả đáng ghi nhận.



Hình 7. Mối quan hệ giữa biến tỉ số r với các thông số vật liệu.



Hình 8. So sánh dự báo giữa các phương pháp.

Như vậy, thông qua dữ liệu thu được bằng tính toán PTHH, hệ số r được tính từ phương trình tự tương hợp tổng quát mở rộng (6-8), tương ứng với các thông tin vật liệu. Kết quả tốt nhất của bài báo này là hệ số r không phải là tham số tự do mà là tham số có quy luật phụ thuộc vào thông tin vật liệu và có thể mô tả bằng các phương trình giải tích xấp xỉ.

Cũng cần thiết để nhấn mạnh thêm về vai trò của phân bố không gian của cốt liệu tới kết quả thực tế cũng như là kết quả dự báo. Các kết quả thực nghiệm và mô phỏng trước đây đều chứng tỏ sự khác biệt về hệ số dẫn hữu hiệu giữa các dạng phân bố hình học khác nhau (ngẫu

nhiên hoặc có trật tự) của cùng một thông số vật liệu. Khác với các mô hình cổ điển, mô hình tự tương hợp tổng quát dạng mở rộng mà chúng tôi xây dựng gần đây (phương trình 6-8) có bổ sung thông số về độ chặt tối đa, là thông số nội tại của vật liệu, có thể tính toán lý thuyết. Đầu tiên, với sự xuất hiện của độ chặt tối đa cho phép mô hình đang thực hiện tại bài báo này phù hợp với các dạng khác nhau của phân bố không gian. Thứ hai, với tỉ lệ thể tích cốt liệu thấp hoặc trung bình cao (tới khoản 0,55), mô hình tự tương hợp tổng quát đã chứng tỏ ưu thế cho các dạng phân bố khác nhau, với giá trị r xấp xỉ không. Thứ ba, hệ số r đóng vai trò quan trọng trong những trường hợp tỉ lệ thể tích là rất cao (tiến sát đến độ chặt tối đa). Tại bài báo này, hệ số r được xây dựng dựa trên những kết quả của vật liệu phân bố có trật tự. Do đó mô hình này sẽ hiệu quả rất cao với các vật liệu có phân bố không gian của cốt liệu theo trật tự. Tuy nhiên, mô hình này vẫn tốt cho vật liệu phân bố ngẫu nhiên ít nhất là tới tỉ lệ thể tích đạt 0,55. Với tỉ lệ thể tích lớn hơn 0,55, việc mô phỏng cấu trúc ngẫu nhiên là thách thức lớn và gần như rất ít có các kết quả về mô phỏng số đã thực hiện. Do đó hiệu quả của mô hình hiện tại với vật liệu phân bố ngẫu nhiên tại tỉ lệ thể tích cốt liệu rất cao là chủ đề hấp dẫn cho nghiên cứu tiếp theo.

5. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, chúng tôi xây dựng một mô hình đồng nhất hóa kết hợp để dự báo hệ số dẫn hữu hiệu của vật liệu mô hình hai thành phần có cấu trúc vi mô đơn giản có hệ số dẫn nhiệt của pha cốt liệu nhỏ hơn hệ số dẫn nhiệt của pha nền. Một tập cơ sở dữ liệu với khoảng 1700 kết quả về hệ số dẫn trung bình của vật liệu cho các trường hợp khác nhau về tỉ lệ thể tích và tỉ lệ hệ số dẫn nhiệt của pha cốt và pha nền được xây dựng dựa trên phương pháp phần tử hữu hạn. Với tập dữ liệu này, mô hình Học máy XGB cho kết quả dự báo tốt với hệ số xác định cho tập kiểm tra đạt 0,999. Tiếp theo, việc kết hợp giữa tập dữ liệu và mô hình tự tương hợp tổng quát đã được thực hiện, cho phép xác định mối quan hệ số giữa thông số tự do với đầu vào của vật liệu. Hơn nữa, mối quan hệ này có thể xấp xỉ bằng hàm số bậc 2, phụ thuộc vào các biến tỉ lệ hệ số dẫn nhiệt, tỉ lệ thể tích, và độ chặt tối đa. Kết hợp hàm xấp xỉ với mô hình giải tích gốc, chúng ta thu được một mô hình giải tích đồng nhất hóa kết hợp cho phép dự báo rất tốt các kết quả tính toán với hệ số xác định R^2 đạt tới 0,9999. Kết quả thu được này là ấn tượng và cho phép mở rộng tính toán với các bài toán đồng nhất hóa phức tạp hơn như vật liệu có cấu trúc vi mô phức tạp, có nhiều kích thước cốt liệu khác nhau, mặt phân giới không hoàn hảo, bài toán đàn hồi, hư hại trong không gian 3 chiều.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Giao thông vận tải (ĐH GTVT) trong đề tài mã số T2023-XD-003.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. K. Tran-Quoc, L.B. Nguyen, V.H. Luong, H. Nguyen-Xuan, Machine learning for predicting mechanical behavior of concrete beams with 3D printed TPMS, Vietnam Journal of Mechanics, 44 (2022) 538–584. <https://doi.org/10.15625/0866-7136/17999>
- [2]. S. Torquato, Random Heterogeneous Materials, Interdisciplinary Applied Mathematics, Springer-Verlag, New York, 2002. <https://doi.org/10.1007/978-1-4757-6355-3>

- [3]. S. Torquato, Morphology and effective properties of disordered heterogeneous media, *International Journal of Solids and Structures*, 35 (1998) 2385-2406. [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(97\)00142-X](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(97)00142-X)
- [4]. D.C. Pham, S. Torquato, Strong-contrast expansions and approximations for the effective conductivity of isotropic multiphase composites, *Journal of Applied Physics*, 94 (2003) 6591–6602. <https://doi.org/10.1063/1.1619573>
- [5]. A. Kalamkarov, I. Andrianov, V. Danishevskyy, Asymptotic Homogenization of Composite Materials and Structures, *Applied Mechanics Reviews*, 62 (2009). <https://doi.org/10.1115/1.3090830>
- [6]. R. Ewing, O. Iliev, R. Lazarov, I. Rybak, J. Willems, A Simplified Method for Upscaling Composite Materials with High Contrast of the Conductivity, *SIAM J. Sci. Comput.*, 31 (2009) 2568–2586. <https://doi.org/10.1137/080731906>
- [7]. M. Bornert, C. Stolz, A. Zaoui, Morphologically representative pattern-based bounding in elasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44 (1996) 307–331. [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(95\)00083-6](https://doi.org/10.1016/0022-5096(95)00083-6)
- [8]. B.-V. Tran, A simple model to predict effective conductivity of multicomponent matrix-based composite materials with high volume concentration of particles, *Composites Part B: Engineering*, (2019) 106997. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.106997>
- [9]. A. Géron, *Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn and TensorFlow: Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems*, 2nd edition, O'Reilly Media, (2017).
- [10]. B.-A. Le, V.-H. Vu, S.-Y. Seo, B.-V. Tran, T. Nguyen-Sy, M.-C. Le, T.-S. Vu, Predicting the Compressive Strength and the Effective Porosity of Pervious Concrete Using Machine Learning Methods, *KSCE J Civ Eng.*, 26 (2022) 4664–4679. <https://doi.org/10.1007/s12205-022-1918-z>