Tạp chí Khoa học Giao thông vận tải, Tập 76, Số 05 (06/2025), 739-751

Transport and Communications Science Journal

CRITICAL LOAD AND DISPLACEMENT PREDICTION OF BRITTLE MATERIALS USING PHASE-FIELD MODELING COMBINED WITH MACHINE LEARNING METHOD

Vu Ba Thanh, Hoang Viet Hai*, Nguyen Xuan Lam, Nguyen Duy Tien

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

ARTICLE INFO

TYPE: Research Article
Received: 10/03/2025
Revised: 17/04/2025
Accepted: 10/06/2025
Published online: 15/06/2025
8*https://doi.org/10.47869/tcsj.76.5.8*

* *Corresponding author*
Email: hoangviethai@utc.edu.vn

Abstract. The phase-field method has proven to be highly effective in simulating and determining the critical load and displacement at which crack initiation occurs in brittle materials. This paper combines the phase-field method to identify input datas with machine learning models to predict critical load and displacement. Simulations are performed on a square sample with an initial crack in tension, using a homogeneous, isotropic brittle material with varying specimen sizes, initial crack lengths, and material properties. Traditional simulation methods for generating 100 datasets are time-consuming, therefore, this study leverages machine learning algorithms to predict the damage of intermediate samples. The analysis results show that the machine learning approach facilitates rapid convergence, thereby laying the groundwork for solving more complex structural problems. The dataset of 100 samples is used to train machine learning models, including Linear Regression (LR), SVR, Random Forest (RF), KNN, Adaboost, XGBoost, and CatBoost. With an accuracy of $R^2 = 0,964$ when predicting the critical load value and $R^2 = 0,9751$ when predicting the critical displacement, the CatBoost model exhibits the highest accuracy and demonstrates optimal capability in forecasting the critical load and displacement. This study contributes to demonstrating the potential of machine learning in optimizing the determination of material behaviors.

Keywords: Machine learning, Fracture, Phase-field modeling, Brittle material, Critical load, Material behavior.

@ 2025 University of Transport and Communications

Transport and Communications Science Journal, Vol 76, Issue 05 (06/2025), 739-751

Tạp chí Khoa học Giao thông vận tải

DỰ BÁO TẢI TRỌNG VÀ CHUYỂN VỊ TỚI HẠN CỦA VẬT LIỆU GIÒN BẰNG MÔ HÌNH TRƯỜNG PHA KẾT HỢP VỚI PHƯƠNG PHÁP HỌC MÁY

Vũ Bá Thành, Hoàng Việt Hải*, Nguyễn Xuân Lam, Nguyễn Duy Tiến

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: 10/03/2025
Ngày nhận bài sửa: 17/04/2025
Ngày chấp nhận đăng: 10/06/2025
Ngày xuất bản Online: 15/06/2025
https://doi.org/10.47869/tcsj.76.5.8

* *Tác giả liên hệ*
Email: hoangviethai@utc.edu.vn

Tóm tắt. Phương pháp trường pha đã chứng minh được tính ưu việt trong việc mô phỏng, xác định tải trọng và chuyển vị tới hạn tại thời điểm bắt đầu phát triển vết nứt của vật liệu giòn**.** Bài báo này kết hợp phương pháp trường pha để xác định dữ liệu đầu vào và sử dụng học máy để dự báo tải trọng và chuyển vị tới hạn. Mô phỏng được thực hiện trên mẫu vuông chứa vết nứt mồi chịu kéo trực tiếp, với vật liệu giòn, đồng nhất, đẳng hướng, có sự thay đổi về kích thước, chiều dài vết nứt mồi và đặc trưng vật liệu. Việc tạo 100 bộ dữ liệu bằng mô phỏng truyền thống mất nhiều thời gian, do đó, bài báo khai thác các thuật toán học máy để dự báo hư hỏng của mẫu vật liệu trung gian. Kết quả phân tích cho thấy phương pháp học máy giúp sự hội tụ kết quả nhanh chóng, từ đó tạo tiền đề giải quyết các bài toán mẫu vật liệu phức tạp hơn. Cơ sở dữ liệu của 100 mẫu trên được sử dụng để huấn luyện các thuật toán học máy, bao gồm mô hình LR, SVR, RF, KNN, Adaboost, XGboost, và Catboost. Với độ chính xác R^2=0,964 khi dự báo giá trị tải trọng tới hạn và có chỉ số R^2=0,9751 khi dự báo chuyển vị tới hạn, ta thấy rằng mô hình Catboost có độ chính xác lớn nhất, đồng thời thể hiện khả năng tối ưu trong việc dự báo tải trọng và chuyển vị tới hạn. Nghiên cứu góp phần chứng minh khả năng ứng dụng phương pháp học máy nhằm tối ưu thời gian xác định đặc trưng ứng xử của vật liệu.

Từ khóa: Học máy, Hư hỏng, Mô hình trường pha, Vật liệu giòn, Tải trọng tới hạn, Ứng xử vật liệu.

@ 2025 Trường Đại học Giao thông vận tải

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Trong những năm gần đây, phương pháp trường pha được sử dụng phổ biến để mô phỏng hư hỏng mẫu vật liệu. Phương pháp này mô tả tổng năng lượng tồn tại trong mẫu vật liệu bao gồm phần năng lượng đàn hồi và phần năng lượng để tạo ra hai bề mặt vết nứt trong quá trình hư hỏng mẫu. Hơn nữa, ưu điểm của phương pháp là sử dụng véc-tơ chuyển vị và biến trường pha để mô tả tình trạng của mẫu từ trạng thái nguyên vẹn tới trạng thái hư hỏng hoàn toàn. Trong đó, thành phần năng lượng đàn hồi chứa một hàm suy biến của biến trường pha để dự báo sự xuống cấp của mẫu vật liệu khi giá trị của biến trường pha tăng lên, do đó các vết nứt trong mẫu có thể phân nhánh hoặc hợp nhất mà không cần tạo trước vết nứt mồi.

Trong các phương pháp mô phỏng nói chung và phương pháp trường pha nói riêng, việc mô tả chính xác sự hình thành và lan truyền về nứt, cũng như đường cong ứng xử tương ứng là một thách thức yêu cầu ngày một hoàn thiện hơn. Các nghiên cứu gần đây [1, 2] đã sử dụng mô hình trường pha với họ hàm suy biến cải tiến để dự báo được chính xác giá trị tải trọng tới hạn tương ứng với vết nứt được hình thành trong vật liệu thạch cao. Việc sử dụng họ hàm suy biến này giúp cho việc chia lưới phần tử thô hơn, làm giảm số lượng phần tử trong mẫu vật liệu dẫn đến thời gian mô phỏng giảm đi đáng kể mà không ảnh hưởng tới kết quả. Hơn nữa, trong các nghiên cứu [2, 3] cũng phân tích chi tiết các yếu tố ảnh hưởng tới kết quả mô phỏng như kích thước lưới phần tử, tham số chiều dài và giá trị bước tải trọng, từ đó lựa chọn ra được các giá trị tối ưu của các yếu tố trên và được chứng minh là hiệu quả khi so sánh với kết quả thực nghiệm.

Từ trước tới nay, đã có nhiều nghiên cứu sử dụng phương pháp trường pha để giải quyết các loại vật liệu khác nhau như vật liệu đồng nhất đẳng hướng [1-4], vật liệu dị hướng mạnh [5-7], vật liệu đa pha có xét tới ảnh hưởng mặt phân giới [7-9], kết hợp giữa phương pháp trường pha và thuật toán tối ưu để giảm khối lượng pha cốt trong vật liệu đa pha giúp giảm chi phí bởi pha cốt với đặc tính tốt hơn sẽ có giá thành cao hơn [10, 11], hư hỏng mẫu vật liệu do tải trọng động [12] và vật liệu dẻo [13]. Trong đó các nghiên cứu [3, 7, 9] đã sử dụng điều kiện trực giao của [14] giúp cải thiện sự chính xác trong dự báo tình trạng mẫu vật liệu nhất là sau khi mẫu vật liệu xuất hiện vết nứt.

Một trong những nhược điểm của các phương pháp mô phỏng truyền thống đó là thời gian mô phỏng phụ thuộc nhiều vào số lượng phần tử và sự phức tạp của các thuật toán tồn tại trong các phương pháp này. Hơn nữa, với cùng một kiểu mẫu vật liệu mà chỉ khác nhau về kích thước việc xác định tình trạng hư hỏng và đường cong ứng xử, cần phải mô phỏng từ đầu tới khi mẫu vật liệu hư hỏng, dẫn tới tốn rất nhiều thời gian tính toán. Ngày nay, với sự phát triển về công cụ lưu trữ và chia sẻ dữ liệu, giúp cho việc tiếp cận các dữ liệu liên quan tới cùng một kiểu bài toán rất dễ dàng. Việc quan trọng, cần phải có một công cụ hoặc một phương pháp sử dụng và phân tích các dữ liệu này để dự báo kết quả cho các mẫu vật liệu trung gian mà không cần phải sử dụng phương pháp mô phỏng truyền thống mô tả lại.

Gần đây, việc sử dụng phương pháp học máy (ML) trong lĩnh vực cơ học, lĩnh vực xây dựng đã có được những bước phát triển đáng kể [15]. Đặc biệt, việc phát triển các mô hình thông minh để dự báo các thuộc tính cơ học và khả năng làm việc của vật liệu giòn. Những mô hình ML có khả năng cung cấp dự báo chính xác cao hơn các thuộc tính mong muốn tốt hơn so với các phương pháp phân tích truyền thống [16,17]. Gần đây, nghiên cứu [18] đã chứng minh mô hình học máy giúp cho việc xác định các tham số khó xác định khi sử dụng phương pháp trường pha. Tiếp đó, nghiên cứu [19] đã sử dụng mạng nơ ron nhân tạo (ANN) mới giúp mô phỏng trường pha dự báo được sự lan truyền vết nứt trong vật liệu giòn. Với sự ra đời của các

mô hình học máy như các mô hình: Hồi quy tuyến tính (LR), Thuật toán Hồi quy Vector hỗ trợ (SVR), Thuật toán rừng ngẫu nhiên (RF), Thuật toán người láng giềng gần nhất (KNN), các thuật toán tăng cường Adaboost, XGboost, Catboost, … Tuy nhiên, ứng dụng các mô hình học máy, đối chiếu so sánh các mô hình trong việc dự báo các tham số trong mô phỏng trường pha vẫn chưa được nhiều nghiên cứu đề cập.

Do đó, bài báo này sử dụng các tập dữ liệu được xác định bằng phương pháp trường pha, sau đó sử dụng các thuật toán của phương pháp học máy để dự báo kết quả của các mẫu vật liệu trung gian. Quy trình thực hiện của bài báo gồm phần đầu tiên sẽ sử dụng phương pháp trường pha nhằm xác định giá trị tải trọng và chuyển vị tới hạn xuất hiện trong mẫu vật liệu có chiều dài *L*, chiều cao *H* và có vết nứt mồi để tạo ra 100 bộ dữ liệu. Sau đó, căn cứ vào 100 bộ dữ liệu thu được, các thuật toán tối ưu của mô hình học máy sẽ được sử dụng. Qua việc so sánh độ chính xác của các thuật toán, nghiên cứu đề xuất thuật toán phù hợp để dự báo giá trị tải trọng và chuyển vị tới hạn bằng phương pháp học máy mà không cần tốn nhiều thời gian để mô phỏng bài toán bằng phương pháp trường pha.

2. MÔ HÌNH TRƯỜNG PHA KẾT HỢP PHƯƠNG PHÁP HỌC MÁY

2.1. Mô tả phương pháp trường pha

Phần này sử dụng phương pháp trường pha cho miền nứt V chứa vật liệu giòn như trong các nghiên cứu [2-4]. Năng lượng tự do bao gồm tải trọng tác dụng trong miền nứt V như sau:

$$\begin{aligned}\prod &= E(\boldsymbol{u},p) - E^{\text{ext}} \\ &= \int_V \bar{\Psi}_u(\boldsymbol{\varepsilon},p)dV + \int_V G_c\,\gamma(p,\nabla p)dV - \int_V \boldsymbol{f}_k\,\boldsymbol{u}dV \\ &\quad - \int_{\partial V_F} F^{ext}\,\boldsymbol{u}d\Gamma\end{aligned} \tag{1}$$

trong đó $p(\boldsymbol{x}), l$ và G_c là biến trường pha, tham số chiều dài và năng lượng kháng nứt tương ứng; $E(\boldsymbol{u},p)$, và E^{ext} là tổng năng lượng và công của ngoại lực F^{ext}; $\boldsymbol{f}_k$ là lực khối; $\gamma(p,\nabla p) = \frac{p^2}{2l} + \frac{l}{2}\nabla p \cdot \nabla p$ là hàm mật độ vết nứt; ∇p là gradient của biến p.

Các nghiên cứu [2, 4] sử dụng hàm mật độ năng lượng đàn hồi $\bar{\Psi}_u = \bar{\Psi}^+(\boldsymbol{\varepsilon})\{g(p)+\kappa\} + \bar{\Psi}^-(\boldsymbol{\varepsilon})$. Trong đó, hàm suy biến bậc hai $g(p) = (1-p)^2$ với κ là số thực vô cùng nhỏ được sử dụng rộng rãi. Trong vật liệu giòn, ten-xơ biến dạng $\boldsymbol{\varepsilon}$ được chia thành phần biến dạng dương $\boldsymbol{\varepsilon}^+$ và phần biến dạng âm $\boldsymbol{\varepsilon}^-$. Từ đó, ta xác định được hai thành phần năng lượng đàn hồi $\bar{\Psi}^{\pm}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\lambda}{2}(\langle Tr(\boldsymbol{\varepsilon})\rangle_{\pm})^2 + \mu Tr\{(\boldsymbol{\varepsilon}^{\pm})\}^2$ liên quan tới $\boldsymbol{\varepsilon}^{\pm}$, với λ và μ là hệ số Lamé.

Theo [2, 4], ta có hệ phương trình bao gồm các điều kiện biên tương ứng để giải biến trường pha p:

$$\begin{cases}\int_V -2(1-p)\mathcal{H}\delta p\,dV + \int_V \frac{G_c}{l}(p - l^2\Delta p)\delta p dV = 0 & trong\ V \\ p(\boldsymbol{x}) = 1 & tại\ \ \Gamma \\ \nabla p(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{n} = 0 & tại\ \ \partial V\end{cases} \tag{2}$$

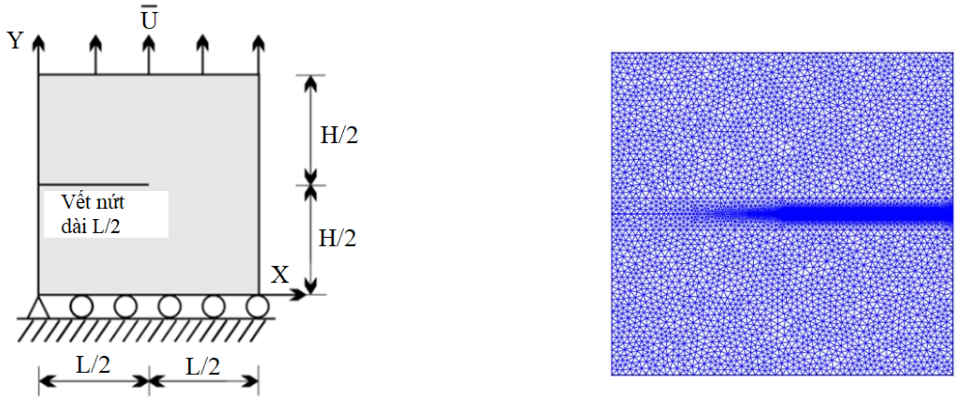
Tương tự, để xác định véc-tơ chuyển vị $\boldsymbol{u}$, ta giải hệ phương trình dưới đây:

$$\begin{cases} \int_V \boldsymbol{\sigma}: \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \boldsymbol{u})\, dV - \int_V f_k\, \delta \boldsymbol{u} dV - \int_{\partial V_F} F^{ext}\, \delta \boldsymbol{u} d\Gamma = 0 & trong\ V \\ \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \bar{\boldsymbol{u}} & tại\ \ \partial V_u \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = F^{ext} & tại\ \ \partial V_F \end{cases} \quad (3)$$

Trong đó, $\boldsymbol{n}$ là vec-tơ pháp tuyến tại biên $\partial V = \partial V_u + \partial V_F$; ∂V_u và ∂V_F là biên chuyển vị và biên lực; Δp là toán tử Laplace của $p(\boldsymbol{x})$; Ứng suất Cô-sy được xác định theo $\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \bar{\Psi}_u}{\partial \varepsilon}$; và hàm lịch sử biến dạng $\mathcal{H} = \max_{\tau \in [0,t]} \{\bar{\Psi}^+(\boldsymbol{x}, \tau)\}$ (xem [2, 4]).

2.2. Thu thập 100 tập dữ liệu

Trong tất cả các ví dụ của bài báo này, ta sử dụng các tham số vật liệu được coi là giòn, đồng nhất với hai tham số độc lập như sau: mô đun đàn hồi E được thay đổi từ 50 ; 70; 90 ; 110; 130 ; 150; 170; 190; 210 và 230 GPa, hệ số Poisson không đổi υ = 0,3, từ đó có thể xác định hai hệ số Lamé theo công thức $\lambda = \frac{E\upsilon}{(1+\upsilon)(1-2\upsilon)}$ và $\mu = \frac{E}{2(1+\upsilon)}$; năng lượng kháng nứt G_c = 2,7.10^{-3} kN/mm (xem trong [4]). Các ví dụ được thực hiện trong bài toán hai chiều (2D) với điều kiện biến dạng phẳng.



(a) (b)

Hình 1. Tấm chịu kéo: (a) Kích thước tấm; (b) chia lưới phần tử cho tấm.

Mỗi giá trị mô đun đàn hồi E ở trên, ta dùng phương pháp trường pha để khảo sát sự lan truyền vết nứt, giá trị lực tới hạn P_{max} và giá trị chuyển vị u tương ứng với ở trạng thái các mẫu vật liệu bắt đầu xuất hiện vết nứt (như Hình 1a) với kích thước là L=H= 0,25 ; 0,5 ; 0,7 ; 0,8 ; 1 ; 1,2 ; 1,5 ; 1,6 ; 1,8 ; 2mm. Chiều dài vết nứt mồi là $L_{nut} = L/2$. Sau đó thu thập dữ liệu tương ứng với mục đích sử dụng phương pháp học máy để dự báo nhanh kết quả mục tiêu nhằm rút ngắn thời gian tính toán vì thời gian tính toán là nhược điểm của phương pháp trường pha bởi phương pháp này sử dụng nhiều phần tử rời rạc và mỗi bài toán phải thực hiện toàn bộ theo các bước chuyển vị. Mẫu vật liệu được chia lưới tam giác với kích thước lưới $h_{min} = 0{,}001mm$ và $h_{max} = 0{,}02mm$ (xem Hình 1b). Trong suốt quá trình mô phỏng, mẫu vật liệu được gia tải với bước chuyển vị không đổi $\Delta u = 5 \times 10^{-5} mm$. Các giá trị tải trọng tới hạn P_{max} và chuyển vị u tương ứng với P_{max} đạt được bằng phương pháp trường pha với các kích thước và tham số vật liệu thay đổi của mẫu vật liệu được thống kê trong Bảng 1 và Bảng 2. Sự hình thành, lan truyền vết nứt và đường cong tải trọng-chuyển vị được minh họa tương ứng với Hình 2a, Hình

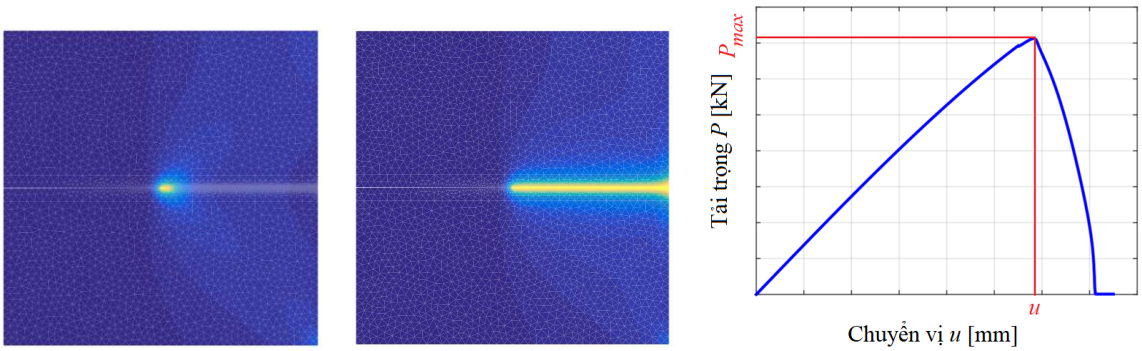
2b và Hình 2c. Trong tất cả các mẫu được xét, tham số chiều dài được sử dụng $l = 0{,}015mm$ để đảm bảo điều kiện $l > 2h_{min}$ (xem [4]). Để chứng minh mức độ chính xác của phương pháp trường pha được sử dụng để tạo bộ dữ liệu, ta so sánh về giá trị tải trọng tới hạn P_{max} và chuyển vị u giữa kết quả hiện tại và kết quả tham chiếu [4] trong trường hợp E=210 GPa, υ = 0,3 và L=H=1 mm. Các giá trị tương ứng trong nghiên cứu hiện tại được thể hiện trong Bảng 1 và Bảng 2 cho thấy P_{max}= 0,712kN, và u=0,0058 mm rất giống với giá trị tham chiếu [4]. Do đó, phương pháp hiện tại là đáng tin cậy và có thể được sử dụng cho các trường hợp mẫu vật liệu có kích thước khác.

Bảng 1. Bảng giá trị P_{max} của 100 mẫu xác định được bằng phương pháp trường pha.

LxH (mm)	**Mô đun đàn hồi *E* (GPa)**									
	50	70	90	110	130	150	170	190	210	230
	Giá trị tải trọng tới hạn P_{max} (kN)									
0,25x0,25	0,139	0,166	0,184	0,209	0,224	0,246	0,255	0,275	0,28	0,296
0,5x0,5	0,23	0,268	0,304	0,348	0,366	0,394	0,42	0,444	0,463	0,49
0,7x0,7	0,288	0,347	0,396	0,443	0,459	0,505	0,526	0,557	0,593	0,638
0,8x0,8	0,313	0,376	0,416	0,483	0,499	0,553	0,572	0,608	0,637	0,671
1x1	0,356	0,416	0,477	0,551	0,574	0,645	0,656	0,717	0,712	0,762
1,2x1,2	0,398	0,478	0,537	0,617	0,656	0,728	0,73	0,792	0,811	0,852
1,5x1,5	0,452	0,547	0,604	0,702	0,766	0,832	0,835	0,915	0,908	0,964
1,6x1,6	0,47	0,575	0,621	0,725	0,784	0,865	0,784	0,928	0,957	1,002
1,8x1,8	0,501	0,614	0,501	0,749	0,807	0,908	0,807	1,032	1,106	1,174
2x2	0,527	0,65	0,746	0,833	0,914	0,989	0,914	1,055	1,148	1,225

Bảng 2. Bảng giá trị u của 100 mẫu xác định được bằng phương pháp trường pha.

LxH (mm)	**Mô đun đàn hồi *E* (GPa)**									
	50	70	90	110	130	150	170	190	210	230
	Giá trị chuyển vị u (mm)									
0,25x0,25	0,0058	0,005	0,0044	0,0039	0,0037	0,0034	0,0032	0,0029	0,0029	0,0027
0,5x0,5	0,0084	0,0073	0,0064	0,0059	0,0054	0,0049	0,0047	0,0044	0,0042	0,004
0,7x0,7	0,01	0,009	0,008	0,0075	0,0064	0,006	0,0056	0,0053	0,005	0,0047
0,8x0,8	0,0106	0,0095	0,0082	0,008	0,0069	0,0064	0,0061	0,0057	0,0054	0,0051
1x1	0,0118	0,0102	0,009	0,0087	0,0077	0,0073	0,0068	0,0064	0,0058	0,0055
1,2x1,2	0,0129	0,0115	0,0099	0,0095	0,0085	0,0081	0,0073	0,007	0,0066	0,0063
1,5x1,5	0,0144	0,0129	0,0111	0,0108	0,0099	0,0095	0,008	0,0077	0,0072	0,0069
1,6x1,6	0,0149	0,0137	0,0115	0,0111	0,0102	0,0099	0,0102	0,0083	0,0076	0,0072
1,8x1,8	0,0157	0,0148	0,0125	0,0118	0,0106	0,0102	0,0106	0,009	0,0089	0,0086
2x2	0,0164	0,0159	0,0148	0,0136	0,0123	0,0118	0,0123	0,0098	0,0092	0,009



(a) (b) (c)

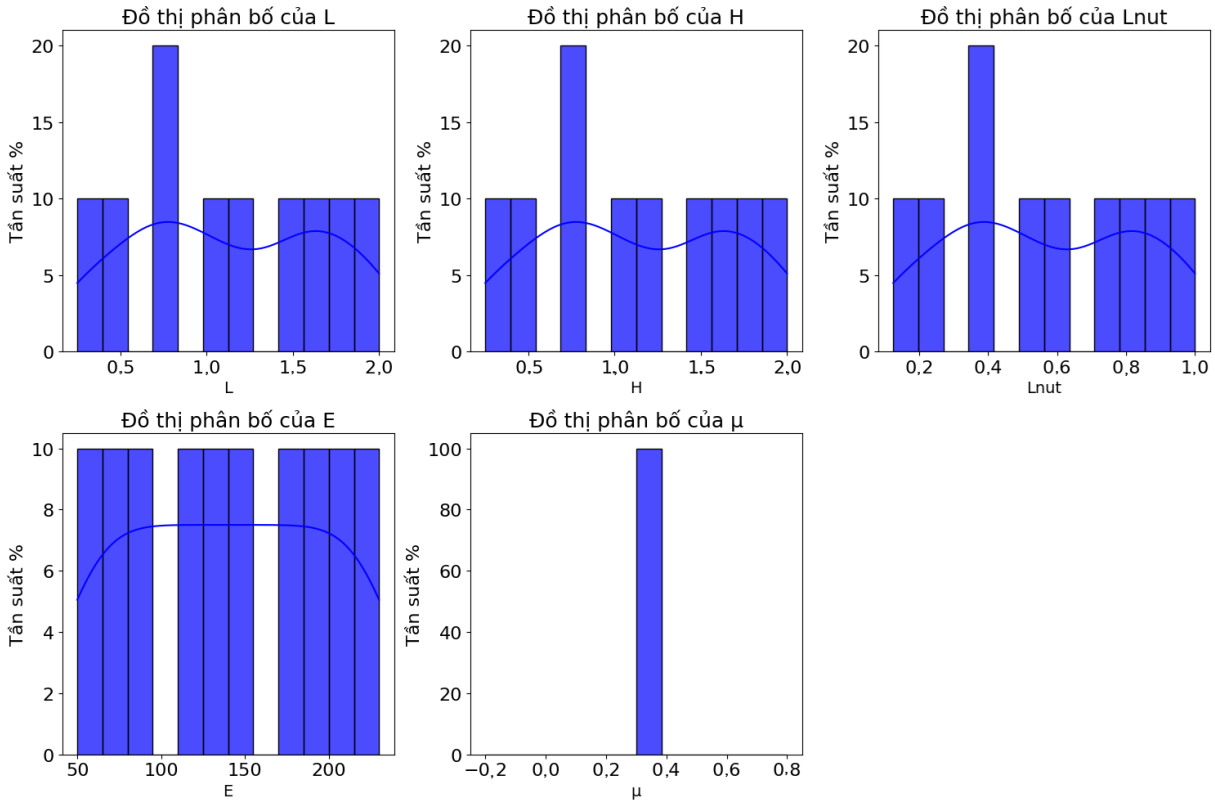
Hình 2. (a) Sự hình thành vết nứt ; (b) Sự lan truyền vết nứt (đường màu vàng); (c) Đường cong tải trọng- chuyển vị .

Bài báo này nhằm nghiên cứu các mô hình để dự báo tải trọng tới hạn P_{max} bắt đầu xuất hiện lan truyền vết nứt, và dự báo chuyển vị u tương ứng với P_{max} bằng các thuật toán học máy với việc sử dụng 100 bộ dữ liệu thu được bằng phương pháp trường pha để làm tham số đầu vào. Các mẫu vật liệu có đặc điểm khác nhau về kích thước, chiều dài vết nứt mồi, mô đun đàn hồi và hệ số Poisson (Hình 3). Biểu đồ tổng quan về mẫu và các thuộc tính tương ứng của chúng được thể hiện trong Hình 4. Hơn nữa, các chỉ số thống kê của các bộ dữ liệu thu thập được tóm tắt trong Bảng 3.

Bảng 3. Các chỉ số thống kê của tập dữ liệu.

	Kí hiệu	**Số lượng mẫu**	**Trung bình**	**Độ lệch chuẩn**	**min**	**max**
L	X1	100	1,135	0,555	0,25	2
H	X2	100	1,135	0,555	0,25	2
L_{nut}	X3	100	0,567	0,278	0,125	1
E	X4	100	140	57,735	50	230
υ	X5	100	0,3	0	0,3	0,3
P_{max}	Y1	100	0,608	0,251	0,139	1,225
u	Y2	100	0,0084	0,003256	0,0027	0,0164

Qua phân tích đánh giá, tổng cộng năm thông số đầu vào khác nhau được xác định để ước lượng tải trọng tới hạn P_{max} và chuyển vị u. Các thông số bao gồm chiều dài (L), chiều cao (H), chiều dài vết nứt mồi (L_{nut}), mô đun đàn hồi (E) và hệ số Poisson (υ). Đầu ra là tải trọng tới hạn (P_{max}), chuyển vị u tương ứng với P_{max} trong đường cong biểu diễn mối quan hệ giữa tải trọng và chuyển vị (Hình 2c). Thông tin thống kê và phân phối tần suất của đầu ra và đặc tính đầu vào cho cơ sở dữ liệu thu thập được được cung cấp trong Hình 3, tương ứng.



Hình 3. Biểu đồ phân phối của các thuộc tính dựa trên số liệu mô phỏng.

Biểu đồ cột trong Hình 3 biểu diễn phân phối và đặc điểm của dữ liệu bằng cách hiển thị tần suất của các giá trị khác nhau của dữ liệu trong Bảng 1. Như có thể thấy từ Hình 3, giá trị *L* nằm trong khoảng từ 0,25 đến 2 mm, giá trị *H* chủ yếu nằm trong khoảng 0,25 đến 2 mm, tập trung chủ yếu là 1,5mm. Chiều dài vết nứt mồi thay đổi từ 0,125 mm đến 1 mm. Các giá trị mô đun đàn hồi thay đổi từ 50-230 MPa, hệ số Poisson được giữ không đổi bằng 0,3.

2.3. Các mô hình dự báo

Trong những năm gần đây, bên cạnh cách mô hình truyền thống: Mô hình rừng cây ngẫu nhiên RF (Random forest), mô hình tăng cường thích ứng (Adaboost), mô hình máy véc-tơ hỗ trợ (SVM), mô hình tăng cường trong máy học (XGBoost), mô hình tăng cường độ dốc (Gradient Boosting), mô hình Catboost,…Mỗi một thuật toán có ưu và nhược điểm riêng căn cứ vào bộ dữ liệu sử dụng để huấn luyện đặc tính, đặc điểm các tham số trong thuật toán. Trong nghiên cứu này, việc dự báo là trị P_{max} đạt được giữa các thuật toán được so sánh với nhau lựa chọn và đề xuất ra các thuật toán tối ưu. Trong phần tiếp theo, cơ sở lý thuyết của 02 thuật toán (XGboost, Catboost) có khả năng tìm kiếm dữ liệu với độ chính xác cao sẽ được giới thiệu chi tiết.

2.3.1. Thuật toán XGBoost

Thuật toán XGboost là một thuật toán học máy dựa trên phương pháp tăng cường độ dốc **(**Gradient Boosting), được tối ưu hóa để cải thiện tốc độ và hiệu suất. XGBoost xây dựng nhiều cây quyết định liên tiếp, trong đó mỗi cây mới được tạo ra nhằm sửa lỗi của các cây trước đó. Nhờ vào kỹ thuật chính quy hóa **(**regularization), thuật toán này giúp giảm việc quá khớp trong mô hình (overfitting) và tăng độ chính xác. XGBoost còn hỗ trợ xử lý dữ liệu thiếu, tính toán song song và tối ưu bộ nhớ, giúp nó trở thành một trong những thuật toán phổ biến nhất trong

các bài toán hồi quy và phân loại.

2.3.2. Thuật toán Catboost (CAT)

Catboost là một thuật toán học máy dựa trên cây quyết định được phát triển với nhóm Yandex [20]. Nó có khả năng xử lý dữ liệu có tính chất rời rạc, dữ liệu thưa và dữ liệu có giá trị bị thiếu, giúp tăng độ chính xác cho mô hình phân loại và dự báo, Catboost sử dụng các kỹ thuật tăng tốc gradient và đánh giá mức độ ưu tiên của các thuộc tính để tạo ra mô hình phân loại hoặc dự báo chính xác [20].

Trong mỗi lần tính toán, các hàm số được tạo ra một cách ngẫu nhiên, sau đó, hàm số có độ chính xác cao nhất được lưu và đánh giá với tập dữ liệu kiểm chứng. Để đánh giá độ chính xác của mô hình, bốn hệ số đánh giá độ chính xác là R2, RMSE, MAE và MAE được sử dụng như sau:

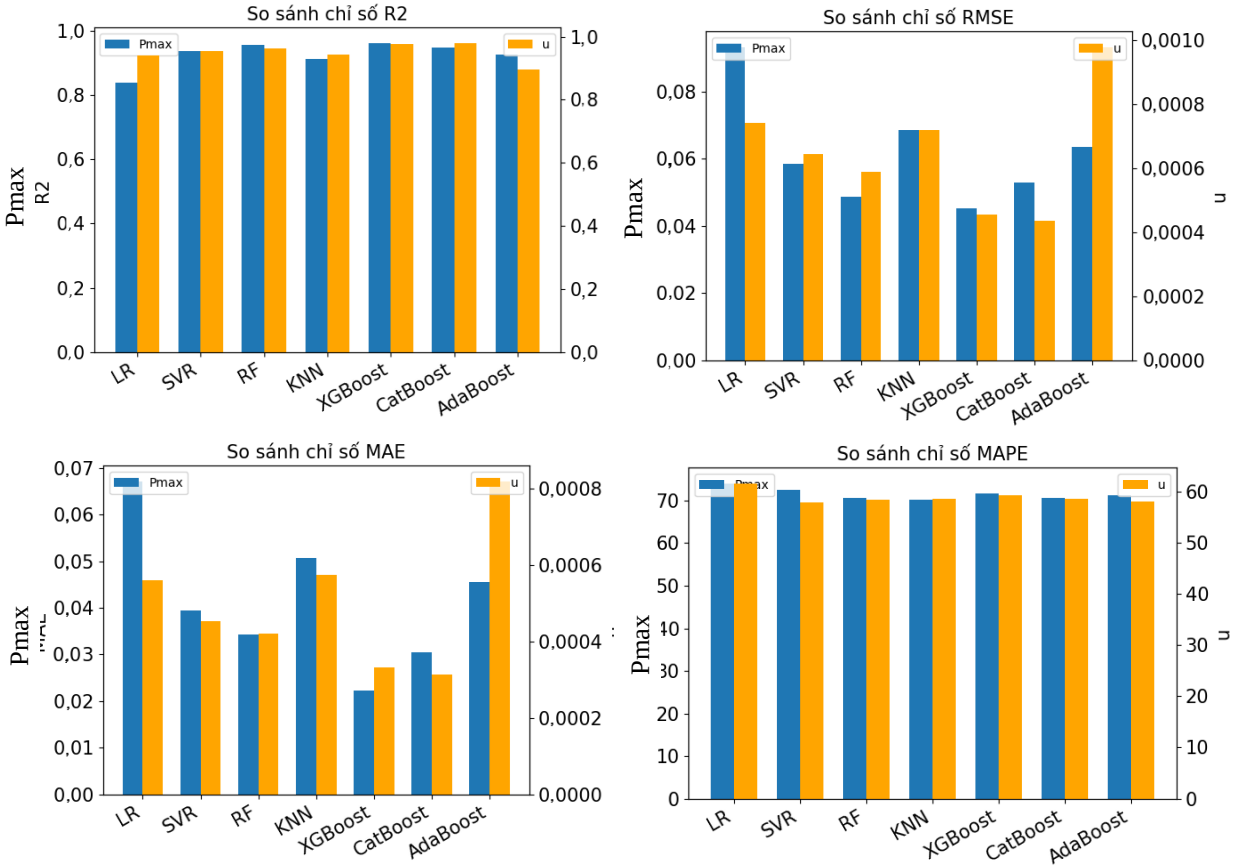
$$R_2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y}_l)^2} \quad (4)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (5)$$

$$MAPE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{|y_i - \hat{y}_i|}{y_i} \quad (6)$$

$$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|y_i - \hat{y}_i| \quad (7)$$

3. KẾT QUẢ DỰ BÁO VÀ THẢO LUẬN

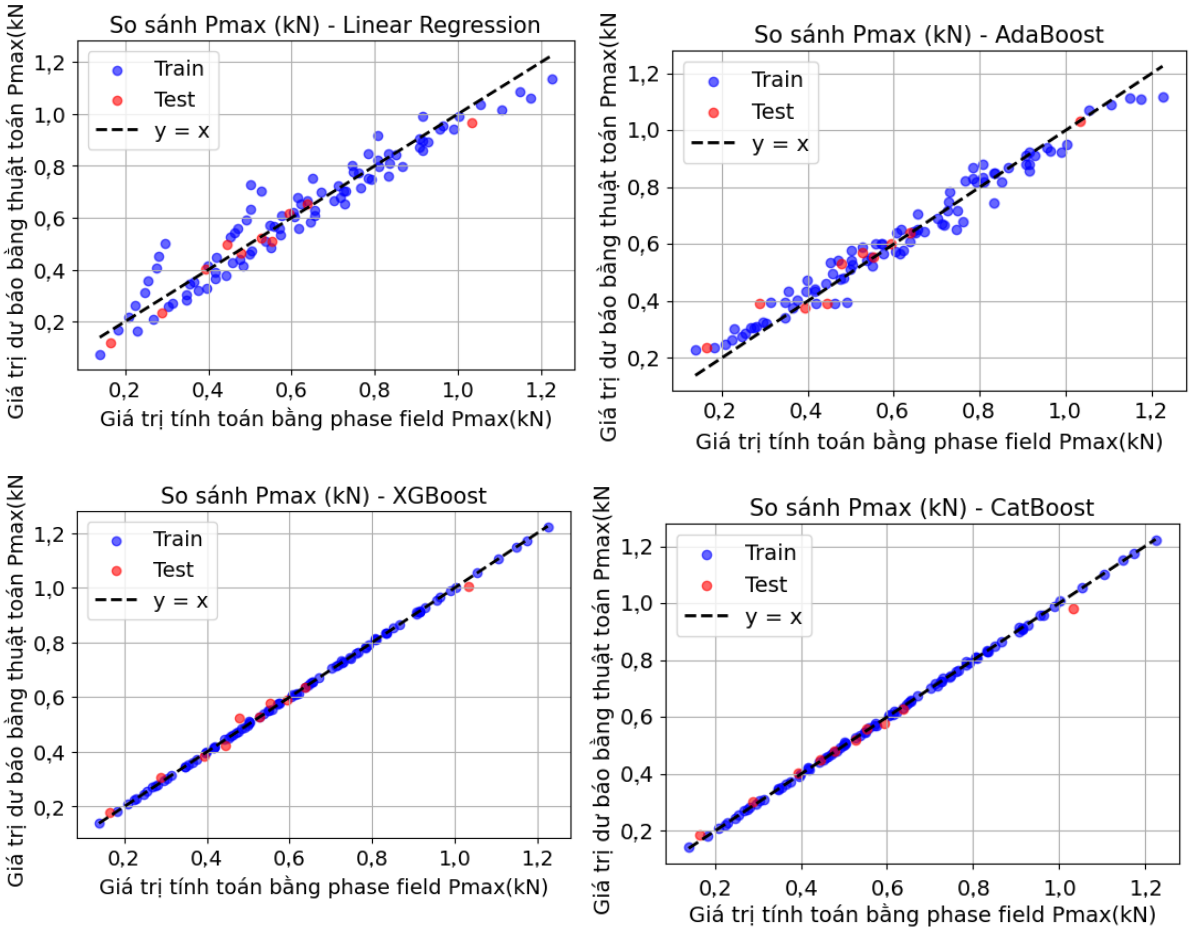


Hình 4. Biểu đồ so sánh R2, RMSE, MAE và MAE của các mô hình trong việc dự báo giá trị P_{max} và *u*.

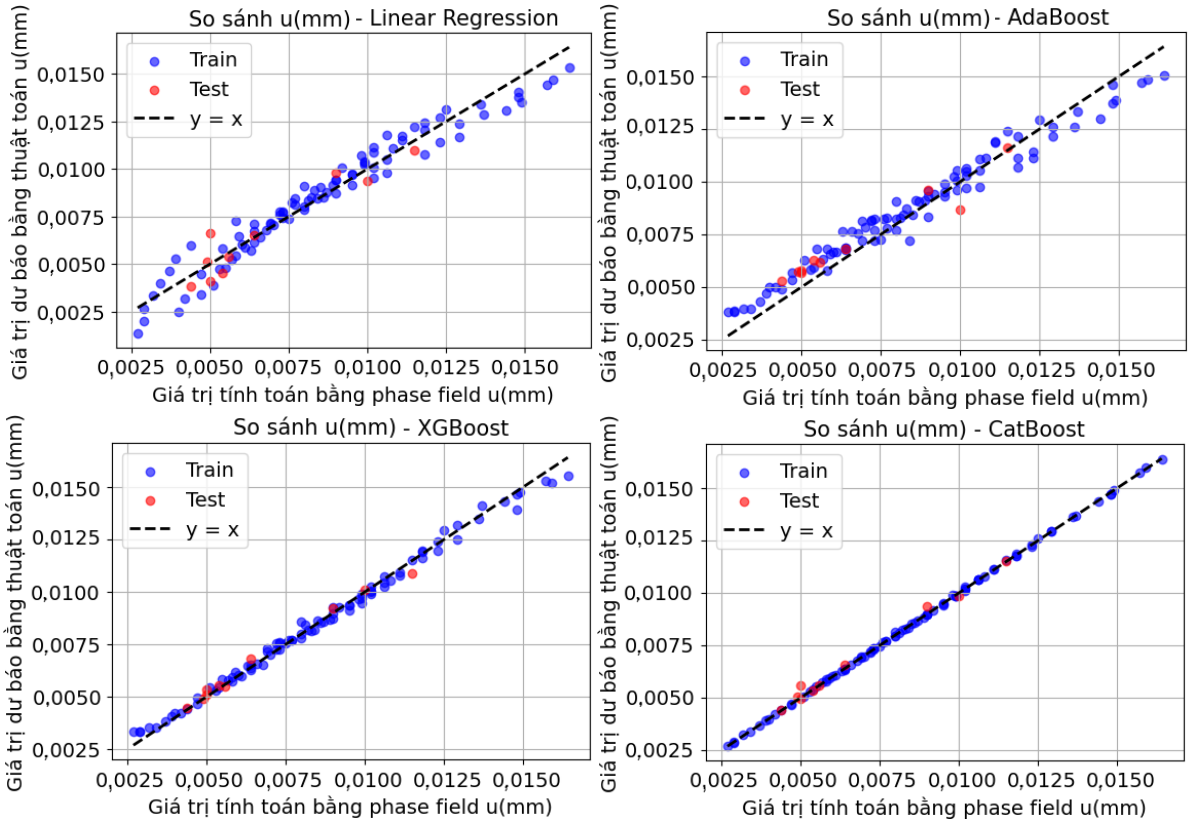
Độ chính xác của mô hình được đánh giá thông qua bốn hệ số R2, RMSE, MAE và MAE. Có thể thấy rằng thuật toán Catboost có độ chính xác cao nhất với R2=0,964, RMSE = 0,046; MAE = 0,027; MAPE=4,632 khi dự báo giá trị P_{max} và có chỉ số R2=0,9751, RMSE = 0,0005; MAE = 0,0003; MAPE=0,031 khi dự báo chuyển vị tới hạn (xem Bảng 4, Hình 4).

Bảng 4. So sánh thông số của các thuật toán dự báo.

Mô hình	Tham số dự báo	R2	RMSE	MAE	MAPE
LR	P_{max}	0,904	0,076	0,055	0,1101
	u	0,957	0,0006	0,0005	0,0695
SVR	P_{max}	0,941	0,0601	0,037	0,0675
	u	0,9735	0,0005	0,0003	0,039
RF	P_{max}	0,9276	0,0066	0,0477	0,082
	u	0,9374	0,0007	0,0004	0,0597
XGBoost	P_{max}	0,960	0,049	0,035	0,0625
	u	0,9698	0,0005	0,0004	0.0397
KNN	P_{max}	0,947	0,0566	0,0378	0,0719
	u	0,9374	0,0007	0,0005	0,0597
AdaBoost	P_{max}	0,89	0,0786	0,0606	0,1183
	u	0,9399	0,0007	0,0006	0,0789
Catboost	P_{max}	0,964	0,0472	0,0285	0,488
	u	0,9751	0,0005	0,0003	0,031



Hình 5. So sánh giá trị dự báo bằng học máy và giá trị tính toán P_{max} bằng phương pháp trường pha.



Hình 6. So sánh giá trị dự báo bằng học máy và giá trị tính toán *u (mm)* bằng phương pháp trường pha.

Hình 5, Hình 6 thể hiện so sánh giữa kết quả dự báo và kết quả tính toán từ bằng mô phỏng trường pha cho tải trọng tới hạn P_{max} và chuyển vị tới hạn tương ứng u. Trong đó, các mô hình đều sử dụng 70% tập dữ liệu để huấn luyện (dữ liệu màu xanh); 30% dữ liệu còn lại sử dụng để xác định độ chính xác của mô hình (dữ liệu màu đỏ). Đường chéo là đường y = x đánh giá độ chụm của dữ liệu. Kết quả trên Hình 5 và Hình 6 cho thấy hai thuật toán Catboost và XGboost là hai thuật toán có khả năng dự báo tốt nhất.

5. KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ

Nghiên cứu này nhằm mục đích đánh giá khả năng sử dụng các thuật toán học máy trong việc dự báo tải trọng tới hạn và chuyển vị tương ứng trong một mẫu chứa vật liệu giòn, đồng nhất, đẳng hướng có sự xuất hiện của vết nứt mồi. Kết quả xây dựng mô hình học máy được thực hiện dựa trên 100 dữ liệu thu được thông qua việc mô phỏng trường pha. Sau đó, các thuật toán học máy được sử dụng nhằm so sánh đối chiếu kết quả dự báo với kết quả thu được bằng mô phỏng trường pha. Kết quả cho thấy, trong các mô hình học máy thì mô hình Catboost có khả năng dự báo tốt nhất trên tập dữ liệu với việc thu được với hệ số R^2=0,964 cho việc dự báo P_{max} và R^2=0,9751 cho việc dự báo u; sau đó là mô hình XGBoost có khả năng dự báo với hệ số R^2=0,96 cho việc dự báo P_{max} và R^2=0,9698 cho việc dự báo u; các mô hình còn lại đều có khả năng dự báo dữ liệu với hệ số R^2 kém hơn.

Với kết quả khả quan này có thể tạo tiền đề cho các nghiên cứu tiếp theo với việc bổ sung bộ dữ liệu với các mẫu vật liệu chứa các vật liệu và hình thức gia tải phức tạp hơn, sau đó so sánh thêm với các thuật toán học sâu (deep learning) hoặc các thuật toán lai để tìm ra thuật toán

tối ưu để dự báo tải trọng và chuyển vị tới hạn đối với các mẫu vật liệu này.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Bộ Giáo dục và Đào tạo trong đề tài mã số B2024-GHA-03

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1].J.M. Sargado, E. Keilegavlen, I. Berre, J.M. Nordbottenn, High-accuracy phasefield models for brittle fracture based on a new family of degradation functions, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 111 (2018) 458–489. https://doi.org/10.1016/j.jmps.2017.10.015

[2].B.T. Vu, H. Le-Quang, Q.C. He, A phase-field method of crack nucleation investigation for experimental validation by using the improved degradation functions and strain orthogonal decompositions, Applications in Engineering Science, 17 (2024) 100173. https://doi.org/10.1016/j.apples.2023.100173

[3].T.T. Nguyen, J. Yvonnet, M. Bornert, C. Chateau, K. Sab, R. Romani, R. Le Roy, On the choice of parameters in the phase field method for simulating crack initiation with experimental validation, International Journal of Fracture, 197 (2016) 213–226. https://doi.org/10.1007/s10704-016-0082-1

[4].C. Miehe, M. Hofacker, F. Welschinger, A phase field model for rate-independent crack propagation: Robust algorithmic implementation based on operator splits, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 199 (2010) 2765–2778. https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.04.011

[5].J. Bleyer, R. Alessi, Phase-field modeling of anisotropic brittle fracture including several damage mechanisms, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 336 (2018) 213–236. https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.03.012

[6].T.T. Nguyen, J. Réthoré, M. C. Bainetto, Phase field modelling of anisotropic crack propagation, European Journal of Mechanics-A/Solids, 65 (2017) 279–288. https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2017.05.002

[7].B.T. Vu, H. Le-Quang, Q.C. He, Fracture modeling in composite structures containing orthotropic materials by incorporating strain orthogonal decompositions into phase-field method of interfacial damage, Engineering Computations, 41 (2024) 2225-2250. https://doi.org/10.1108/EC-12-2023-0951

[8].T.T. Nguyen, J. Yvonnet, Q.Z. Zhu, M. Bornert, C. Chateau, A phase-field method for computational modeling of interfacial damage interacting with crack propagation in realistic microstructures obtained by microtomography, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 312 (2015) 567–595. https://doi.org/10.1016/j.cma.2015.10.007

[9].B.T. Vu, T.T. Bui, N.L. Nguyen, T.T. Tran, X.L. Nguyen, V.H. Hoang, Phase-field modelings of fracture investigate the influence of interfacial effects on damage and optimal material distribution in brittle inclusion-matrix structures, Forces in Mechanics, 16 (2024) 100282. https://doi.org/10.1016/j.finmec.2024.100282

[10]. L. Xia, D. Da, J. Yvonnet, Topology optimization for maximizing the fracture resistance of quasi-brittle composites, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 332 (2018) 234-254. https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.12.021

[11]. D. Da, J. Yvonnet, L. Xia, G. Li, Topology optimization of particle-matrix composites for optimal fracture resistance taking into account interfacial damage, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 115 (2018) 604-626. https://doi.org/10.1002/nme.5818

[12]. M. Hofacker, C. Miehe, Continuum phase field modeling of dynamic fracture: Variational principles and staggered FE implementation, International Journal of Fracture, 178 (2012) 113-129. https://doi.org/10.1007/s10704-012-9753-8
[13]. R. Alessi, J.J. Marigo, S. Vidoli, Gradient damage models coupled with plasticity: Variational formulation and main properties, Mechanics of Materials, 80 (2015) 351-367. https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2013.12.005
[14]. Q. C. He, Q. Shao, Closed-form coordinate-free decompositions of the two-dimensional strain and stress for modeling tension–compression dissymmetry, Journal of Applied Mechanics, 86 (2019) 031007. https://doi.org/10.1115/1.4042217
[15]. M. Mohtasham Moein, A. Saradar, K. Rahmati, S.H. Ghasemzadeh Mousavinejad, J. Bristow, V. Aramali, M. Karakouzian, Predictive models for concrete properties using machine learning and deep learning approaches: A review, Journal of Building Engineering, 63 (2023) 105444. https://doi.org/10.1016/j.jobe.2022.105444
[16]. H.T. Thai, Machine learning for structural engineering: A state-of-the-art review, Structures, 38 (2022) 448-491. https://doi.org/10.1016/j.istruc.2022.02.003
[17]. A.T.G. Tapeh, M.Z. Naser, Artificial Intelligence, Machine Learning, and Deep Learning in Structural Engineering: A Scientometrics Review of Trends and Best Practices, Archives of Computational Methods in Engineering, 30 (2023) 115-159. https://doi.org/10.1007/s11831-022-09793-w
[18]. Y.Feng, Q. Wang, D. Wu, Z. Luo, X. Chen, T. Zhang, W. Gao, Machine learning aided phase field method for fracture mechanics, International Journal of Engineering Science 169 (2021) 103587. https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2021.103587
[19]. H.Q. Nguyen, B.A Le, B.V. Tran, T.S. Vu, T.L. Bui, Deep artificial neural network-powered phase field model for predicting damage characteristic in brittle composite under varying configurations, Machine Learning: Science and Technology, 5 (2024) 025062. https://doi.org/10.1088/2632-2153/ad52e8
[20]. J.T. Hancock, T.M. Khoshgoftaar, CatBoost for big data: an interdisciplinary review. Journal of Big Data 7 (94) (2020) 1-45. https://doi.org/10.1186/s40537-020-00369-8