

TRƯỜNG ĐẠI HỌC PHENIKAA



BÁO CÁO TỔNG KẾT
KẾT QUẢ THỰC HIỆN ĐỀ TÀI KHCN
CẤP CƠ SỞ

Tên đề tài: Phát triển mô hình số dự đoán ứng xử cơ học vật liệu composite nền polyme gia cường nano

Mã số đề tài: 2-05.2020.04

Chủ nhiệm đề tài: TS. Lê Tiến Thịnh

Hà Nội, 2022

PHẦN I. THÔNG TIN CHUNG

1.1. Tên đề tài: Phát triển mô hình số dự đoán ứng xử cơ học vật liệu composite nền polyme gia cường nano

1.2. Mã số: 2-05.2020.04

1.3. Danh sách thành viên tham gia thực hiện đề tài:

| TT | Chức danh, học vị, họ và tên | Đơn vị công tác | Vai trò thực hiện đề tài |
|----|------------------------------|--|--------------------------|
| 1 | TS. Lê Tiến Thịnh | Khoa Cơ khí – Cơ điện tử, Trường ĐH Phenikaa | Chủ nhiệm đề tài |
| 2 | TS. Trần Ngọc An | Khoa Cơ khí – Cơ điện tử, Trường ĐH Phenikaa | Thành viên |

1.4. Đơn vị chủ trì: Khoa Cơ khí – Cơ điện tử

1.5. Thời gian thực hiện:

1.5.1. Theo hợp đồng: từ tháng 01 năm 2021 đến tháng 12 năm 2021

1.5.2. Gia hạn (nếu có): đến tháng..... năm.....

1.5.3. Thực hiện thực tế: từ tháng 01 năm 2021 đến tháng 12 năm 2021

1.6. Những thay đổi so với thuyết minh ban đầu (nếu có):

(Về mục tiêu, nội dung, phương pháp, kết quả nghiên cứu và tổ chức thực hiện; Nguyên nhân; Ý kiến của Cơ quan quản lý)

1.7. Tổng kinh phí được phê duyệt của đề tài: 40 triệu đồng.

PHẦN II. ĐÁNH GIÁ TỔNG QUAN KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU

2.1. Tổng quan về nghiên cứu

Để phát triển vật liệu mới nhanh hơn, một số dự án quan trọng đã được công bố và nhận được sự quan tâm đáng kể từ các nhà nghiên cứu và kỹ sư trên toàn thế giới. Tại Hoa Kỳ, vào năm 2011, Tổng thống Obama đã giới thiệu sáng kiến Materials Genome Initiative (MGI), hỗ trợ các cơ quan nghiên cứu Hoa Kỳ trong việc khám phá, thiết kế, sản xuất và triển khai các vật liệu tiên tiến với tốc độ gấp đôi và với một phần chi phí (tức là giảm từ khoảng 10-20 năm xuống còn khoảng 5-10 năm) [1–3]. MGI là một ứng cử viên rất tiềm năng trong việc thu hẹp

khoảng cách giữa thí nghiệm vật liệu và lý thuyết. Một dự án như vậy cũng có thể thúc đẩy các phương pháp tiếp cận nghiên cứu có hệ thống và chuyên sâu về dữ liệu. Có ba khía cạnh quan trọng để phục vụ mục đích của MGI: công cụ tính toán, nguồn lực thí nghiệm và dữ liệu kỹ thuật số [4]. Thật vậy, sự kết hợp như vậy rất quan trọng trong việc thúc đẩy sự phát triển của các vật liệu mới. Các nỗ lực tính toán có thể cho phép các nhà nghiên cứu khám phá thành phần và tính chất của vật liệu một cách hiệu quả, trong khi dữ liệu thực nghiệm là điều cần thiết để xác nhận các mô hình số. Trên thực tế, việc này tiết kiệm được rất lớn về thời gian và chi phí thiết kế vật liệu bằng cách kết hợp thông tin từ các mô phỏng và các thí nghiệm thích hợp [5].

Các công cụ tính toán luôn đóng một vai trò quan trọng trong cuộc cách mạng của khoa học vật liệu [1,6,7]. Thật vậy, từ mô phỏng Lý thuyết hàm mật độ (Density Functional Theory) đến Động lực học phân tử (Molecular Dynamics) hay Phương pháp phần tử hữu hạn (Finite Element Method), càng nhiều mã được phát triển thì càng có nhiều tiến bộ về khoa học vật liệu. Rõ ràng rằng, để phân tích chặt chẽ vấn đề và thực hiện tính toán song song hiệu suất cao với dữ liệu lớn, việc phát triển mã bằng ngôn ngữ lập trình là rất cần thiết. Tuy nhiên, việc phát triển các mã này, Lý thuyết hàm mật độ (Density Functional Theory), Động lực học phân tử (Molecular Dynamics) hay Phương pháp phần tử hữu hạn (Finite Element Method), vẫn còn rất nhiều thách thức đối với các nhà nghiên cứu, đặc biệt là về việc triển khai các thuật toán phi tuyến. Do đó, rõ ràng là cần phải có một phương pháp hiệu quả hơn để hiểu rõ và dự đoán ứng xử cơ học của vật liệu nhiều thành phần.

Hơn nữa, những mô phỏng quy mô lớn thường cung cấp một lượng dữ liệu khổng lồ [8], như Dự án Vật liệu Materials Genome Initiative đã đề cập ở trên, thu thập hơn 120.600 hợp chất vô cơ, 35.000 phân tử cũng như 530.000 vật liệu nano. Trong một nghiên cứu khác, Gómez-Bombarelli et al. [9] đã kết hợp lý thuyết, hóa học lượng tử và nhiều phương pháp để khám phá hành vi của vật liệu từ cơ sở dữ liệu gồm $1,6 \times 10^6$ phân tử điốt phát quang hữu cơ. Để xử lý nhanh chóng và hiệu quả với các bộ dữ liệu lớn như vậy, một cuộc cách mạng trong khoa học vật liệu tính toán liên quan đến các phương pháp Học máy (Machine Learning) đã được đề ra. Nhiều ứng dụng thành công của phương pháp Học máy trong khoa học vật liệu đã được công bố. Nouria và cộng sự. [10] đã sử dụng mạng Generative Adversarial để khám phá các cấu trúc tinh thể học mới. Các ứng dụng như vậy trên kiến trúc tinh thể cũng đã được nghiên cứu bởi Ryan et al. [11] sử dụng Học sâu (Deep learning) và Oliynyk et al. [12] sử

dụng Máy vector hỗ trợ (Support vector machine). Về vật liệu nền polyme, Mannodi-Kanakkithodi et al. [13] đã sử dụng hồi quy Kernel Ridge để thiết kế các chất điện môi polyme. Về hiệu suất cơ học, Yousef et al. [14] đã sử dụng mạng nơ ron nhân tạo để dự đoán các tính chất cơ học của propylene nguyên chất và hỗn hợp của chúng. Khi kết hợp polyme với pha gia cường, Lingaraju et al. [15] đã dự đoán một số đặc tính kỹ thuật của vật liệu nano polyme-đất sét-silica bằng cách sử dụng mạng nơ ron nhân tạo. Khan và cộng sự. [16] đã kết hợp thuật toán tối ưu hóa tổng quát và mạng nơ ron nhân tạo để dự đoán độ dẫn nhiệt của sợi tổng hợp nano polyvinyl-pyrrolidone. Kopal và cộng sự. [17] đã dự đoán độ bền kéo của cao su gia cường muội than bằng cách sử dụng mô hình mạng nơ ron nhân tạo. Một số công trình tổng hợp về ứng dụng của các phương pháp Học máy trong khoa học vật liệu được đề xuất như [18–22], và đặc biệt đối với các vật liệu nền polyme [23–25].

Trong lĩnh vực cơ học vật liệu ở Việt Nam hiện nay, rất ít các công trình sử dụng mô hình số học máy để nghiên cứu, dự đoán ứng xử của vật liệu, đặc biệt là vật liệu nhiều thành phần. Một trong những nguyên nhân chủ yếu là do sự thiếu hụt, phân tán các nguồn dữ liệu cơ sở, mà giúp thiết lập và huấn luyện mô hình học máy. Có thể nói thêm rằng một trong những rào cản là do các cơ sở nghiên cứu ở Việt Nam hiện chưa có các truy cập vào các thư viện nghiên cứu lớn trên thế giới. Thêm vào đó, các tổ chức khoa học trong lĩnh vực này chưa sở hữu nhiều các máy tính hiệu năng cao trợ giúp tính toán song song, điều mà rất cần thiết cho việc phát triển mô hình học máy.

Có thể thấy rằng, những khó khăn khi nghiên cứu tính chất cơ học của vật liệu composite chẳng hạn như chi phí thí nghiệm, thời gian và tài nguyên. Hơn nữa, từ tổng quan cơ sở nghiên cứu có thể thấy rằng đặc tính cơ học tổng thể của vật liệu composite bị ảnh hưởng bởi một số thông số như ứng xử cơ học của từng thành phần, dạng hình học của pha gia cường, phương pháp xử lý bề mặt, vv..., và sự ảnh hưởng của các yếu tố này chưa được giải quyết một cách định lượng. Từ các cơ sở trên, nhóm tác giả đã đề xuất phát triển mô hình số nhằm dự đoán mô đun đàn hồi của vật liệu composite nền polyme gia cường ống nano cacbon, dựa trên phương pháp học máy, tính tới nhiều yếu tố đầu vào như tính chất của pha nền, tính chất của pha gia cường, và tương tác giữa hai pha. Mô hình đã được huấn luyện và tối ưu các thông số thông qua một cơ sở dữ liệu thu thập từ các tài liệu đã công bố. Ngoài ra, các chỉ số tin cậy cũng được sử dụng nhằm đánh giá định lượng hiệu năng của mô hình. Từ mô hình tối ưu, các yếu tố ảnh hưởng cũng như ưu nhược điểm của mô hình đã được chỉ ra và phân tích.

2.2. Phương pháp nghiên cứu

Trong nghiên cứu này, các cách tiếp cận sau sẽ được triển khai:

- Phương pháp lý thuyết: thu thập các dữ liệu thí nghiệm từ các tài liệu đã công bố;
- Phương pháp mô phỏng số: phát triển mã lập trình huấn luyện mô hình học máy, tối ưu hóa các tham số của mô hình.

Các phương pháp trên được trình bày cụ thể như sau:

2.2.1. Phương pháp lý thuyết : thu thập dữ liệu từ các tài liệu đã công bố

Dữ liệu được sử dụng trong nghiên cứu này đã được thu thập từ các nghiên cứu thí nghiệm đã công bố. Bảng 1, 2 và 3 dưới đây lần lượt tóm tắt thông tin tổng hợp cơ sở dữ liệu, thống kê giá trị các tham số và hệ số tương quan tuyến tính giữa các tham số. Các biến trong cơ sở dữ liệu đã được chọn và phân loại dựa trên các tiêu chí sau:

- Loại ma trận polyme và khối lượng riêng của nó;
- Tính chất cơ học của pha nền polyme: mô đun đàn hồi, giới hạn bền kéo;
- Tính chất vật lý của pha gia cường: khối lượng riêng, chiều dài trung bình, đường kính trung bình;
- Tính chất cơ học của pha gia cường: mô đun đàn hồi;
- Các thông số kết hợp: tỉ trọng gia cường, phương pháp hòa trộn, phương pháp biến tính bề mặt.

Trong cơ sở dữ liệu này, 23 pha nền polyme khác nhau đã được sử dụng, kết hợp với 22 phương pháp hòa trộn và 20 biến tính bề mặt CNT. Các tham số này được mã hóa trong mô phỏng. Bảng 2 trình bày phân tích thống kê giá trị của các biến trong cơ sở dữ liệu, bao gồm giá trị nhỏ nhất, trung bình, tối đa, độ lệch chuẩn và hệ số biến thiên. Ngoài ra, Bảng 3 chỉ ra hệ số tương quan tuyến tính giữa từng cặp biến trong cơ sở dữ liệu.

Bảng 1. Thông tin tổng hợp về cơ sở dữ liệu

| Tài liệu tham khảo | Số thí nghiệm | % tỉ lệ | Pha nền polyme (tên tiếng Anh) | Ký hiệu pha nền | wt _{min} (%) | wt _{max} (%) |
|--------------------|---------------|---------|--------------------------------|-----------------|-----------------------|-----------------------|
| | | | | | | |

| | | | | | | |
|-----------------------|----|-----|---|------------|-------|------|
| Wu et al. [26] | 4 | 2.0 | Acrylic acid grafted polylactide | PLA-g-AA | 0.5 | 3 |
| Yang et al. [27] | 5 | 2.5 | Poly(ethylene oxide) | PEO | 0.1 | 2 |
| Kuan et al. [28] | 8 | 4.0 | Polyurethane | PU | 0.5 | 4 |
| Shi et al. [29] | 4 | 2.0 | Poly(vinyl chloride) | PVC | 0.1 | 0.5 |
| Tseng et al. [30] | 10 | 5.1 | Epoxy | Epoxy | 0.1 | 1 |
| Blond et al. [31] | 6 | 3.0 | Poly(methyl methacrylate) (PMMA)-functionalized | PMMA | 0.019 | 0.6 |
| Safadi et al. [32] | 3 | 1.5 | Polystyrene | PS | 1 | 5 |
| Xia et al. [33] | 2 | 1.0 | Polypropylene | PP | 1 | 3 |
| Qian et al. [34] | 2 | 1.0 | Polystyrene | PS | 1 | 1 |
| Kanagarai et al. [35] | 4 | 2.0 | High density polyethylene | HDPE | 0.11 | 0.44 |
| Xiao et al. [36] | 4 | 2.0 | Low density polyethylene | LDPE | 1 | 10 |
| Yang et al. [37] | 8 | 4.0 | Low density polyethylene | LDPE | 0.5 | 2 |
| Jose et al. [38] | 2 | 1.0 | Polypropylene | PP | 0.5 | 1 |
| Masuda et al. [39] | 6 | 3.0 | Polypropylene | PP | 0.92 | 1.1 |
| Liu et al. [40] | 1 | 0.5 | Poly(methyl methacrylate) | PMMA | 5 | 5 |
| Liu et al. [41] | 2 | 1.0 | Poly(methyl methacrylate) | PMMA | 2.1 | 5 |
| Kim et al. [42] | 3 | 1.5 | Poly(methyl methacrylate) | PMMA | 0.01 | 0.1 |
| Coleman et al. [43] | 7 | 3.5 | Polyvinyl alcohol | PVA | 0.11 | 1 |
| McCullen et al. [44] | 2 | 1.0 | Poly(ethylene oxide) | PEO | 1 | 3 |
| Hou et al. [45] | 5 | 2.5 | Polyacrylonitrile nanofibers | PAN | 2 | 20 |
| Li et al. [46] | 1 | 0.5 | Poly(styrene-b-butadiene-co-butylene-b-styrene) | SBBS | 3 | 3 |
| Bokobza et al. [47] | 7 | 3.5 | Styrene-butadiene rubber | SBR | 1 | 10 |
| Zhao et al. [48] | 2 | 1.0 | Polyamide-6 | Nylon 6 | 0.5 | 0.5 |
| Shao et al. [49] | 2 | 1.0 | Polyamide-6 | Nylon 6 | 0.5 | 1 |
| Kang et al. [50] | 1 | 0.5 | Poly(hexamethylene sebacamide) | Nylon 610 | 1.5 | 1.5 |
| Ogasawara et al. [51] | 3 | 1.5 | Polyimide Triple A | PI | 3.3 | 14.3 |
| Zhu et al. [52] | 3 | 1.5 | Poly(amic acid) | PI | 2 | 9 |
| Liu et al. [53] | 2 | 1.0 | Polyetherimide | PEI | 0.5 | 1 |
| Yuen et al. [54] | 4 | 2.0 | Polyimide | PI | 1 | 7 |
| Kwon et al. [55] | 14 | 7.1 | Waterborne polyurethane | WBPU | 0.01 | 1.5 |
| Xia et al. [56] | 3 | 1.5 | Polyurethane | PU | 0.5 | 2 |
| Xu et al. [57] | 5 | 2.5 | Polyurethane | PU | 0.1 | 0.5 |
| Jin et al. [58] | 9 | 4.5 | Poly(ethylene terephthalate) | PET | 0.5 | 2 |
| Bai et al. [59] | 2 | 1.0 | Hard epoxy | Hard epoxy | 0.5 | 1 |
| Bai et al. [60] | 9 | 4.5 | Epoxy | Epoxy | 0.5 | 4 |
| Guo et al. [61] | 4 | 2.0 | Epoxy | Epoxy | 2 | 8 |
| Kim et al. [62] | 9 | 4.5 | Polycarbonate | PC | 0.1 | 1 |
| Hou et al. [63] | 1 | 0.5 | Polyvinyl alcohol | PVA | 0.2 | 0.2 |
| Isayev et al. [64] | 4 | 2.0 | Polyetherimide | PEI | 1 | 10 |

| | | | | | | |
|------------------------|-----|-----|---|------|------|-----|
| Li et al. [65] | 5 | 2.5 | Poly(styrene-b-butadiene-co-butylene-b-styrene) | SBBS | 1.25 | 15 |
| Yan et al. [66] | 3 | 1.5 | Polyamide 6 | PCL | 0.5 | 1.5 |
| Zhang et al. [67] | 5 | 2.5 | Polyimide | PI | 1 | 10 |
| Srivastava et al. [68] | 12 | 6.1 | Polyimide | PI | 0.5 | 3 |
| Tổng | 198 | 100 | | | | |

Bảng 2. Thống kê cơ sở dữ liệu.

| Tham số | Ký hiệu | Đơn vị | Giá trị nhỏ nhất | Q ₂₅ | Giá trị trung bình | Q ₇₅ | Giá trị lớn nhất | Phương sai | Hệ số biến thiên (%) |
|---|----------------|-------------------|------------------|-----------------|--------------------|-----------------|------------------|------------|----------------------|
| Pha nền | M | - | 2.00 | 8.00 | 13.28 | 19.00 | 24.00 | 6.78 | 51.07 |
| Khối lượng riêng pha nền | ρ_p | g/cm ³ | 0.91 | 1.10 | 1.20 | 1.30 | 3.12 | 0.21 | 17.78 |
| Mô đun đàn hồi của pha nền | E _p | MPa | 0.24 | 75.30 | 986.47 | 1477.00 | 3060.00 | 911.49 | 92.40 |
| Giới hạn bền kéo của pha nền | N _p | MPa | 0.49 | 9.96 | 42.10 | 58.70 | 132.00 | 38.10 | 90.50 |
| Tỉ trọng khối lượng pha gia cường | wt | % | 0.01 | 0.50 | 2.05 | 2.00 | 20.00 | 2.89 | 140.64 |
| Khối lượng riêng pha gia cường | ρ_t | g/cm ³ | 1.30 | 1.90 | 1.94 | 2.00 | 2.16 | 0.15 | 7.94 |
| Đường kính trung bình pha gia cường | ϕ_t | nm | 5.50 | 15.00 | 32.01 | 47.50 | 127.50 | 27.91 | 87.19 |
| Chiều dài trung bình pha gia cường | l _t | nm | 850.00 | 10000.00 | 26609.85 | 30000.00 | 252500.00 | 37920.33 | 142.50 |
| Mô đun đàn hồi pha gia cường | E _t | GPa | 450.00 | 850.00 | 848.59 | 850.00 | 1100.00 | 87.49 | 10.31 |
| Phương pháp biến tính bề mặt pha gia cường | M | - | 1.00 | 10.00 | 12.94 | 16.00 | 21.00 | 4.92 | 38.03 |
| Phương pháp hòa trộn pha nền và pha gia cường | P | - | 1.00 | 6.00 | 13.05 | 19.00 | 22.00 | 6.40 | 49.07 |
| Giới hạn bền kéo của nanocomposite | N _c | MPa | 0.55 | 14.50 | 51.67 | 79.50 | 190.00 | 43.72 | 84.61 |

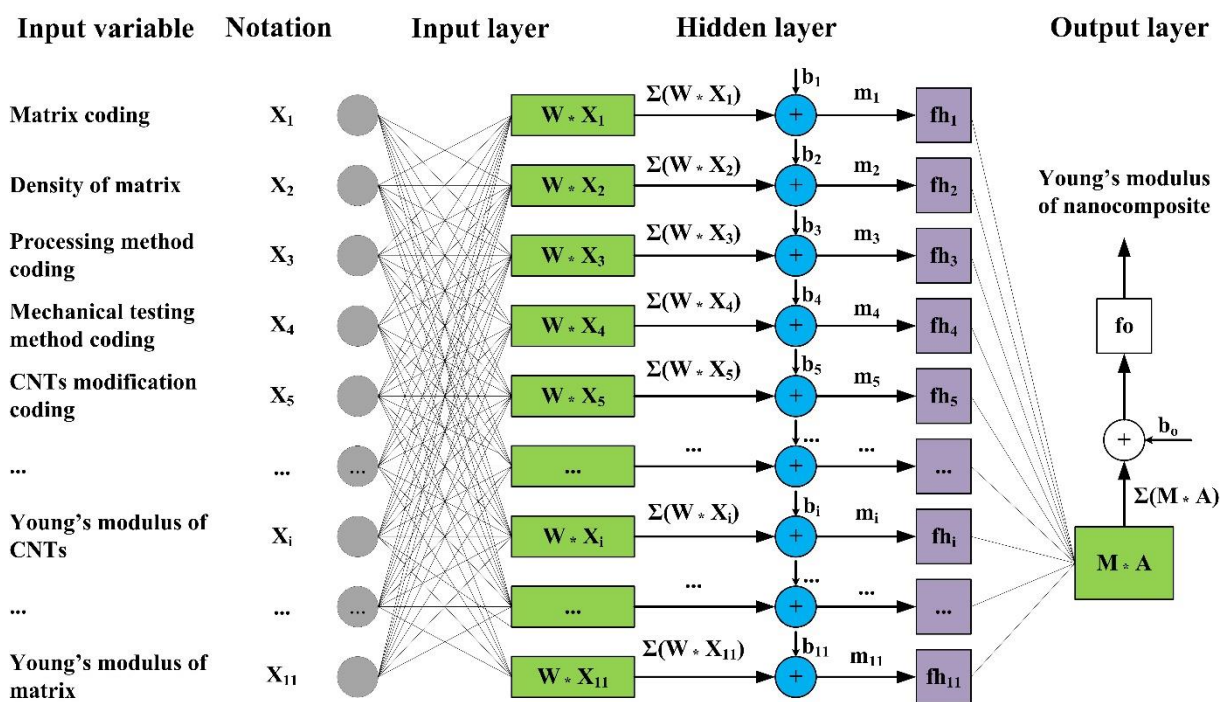
Bảng 3. Phân tích hệ số tương quan tuyến tính của cơ sở dữ liệu.

| Hệ số tương quan | M | ρ_p | E_p | N_p | wt | ρ_t | ϕ_t | l_t | E_t | M | P | N_c |
|------------------|---|----------|--------|----------|--------|----------|----------|--------|--------|--------|--------|--------|
| M | 1 | -0.002 | -0.239 | -0.252 | -0.005 | -0.079 | -0.499 | -0.274 | -0.07 | -0.028 | -0.092 | -0.193 |
| ρ_p | | 1 | 0.202 | 0.273 | 0.083 | -0.039 | -0.003 | 0.1 | 0.074 | -0.199 | -0.111 | 0.283 |
| E_p | | | 1 | 0.571 | 0.152 | -0.14 | 0.15 | 0.227 | -0.041 | 0.101 | -0.098 | 0.6 |
| N_p | | | | 1 | 0.131 | -0.129 | 0.037 | 0.111 | 0.069 | -0.268 | 0.197 | 0.89 |
| wt | | | | | 1 | -0.014 | -0.038 | 0.125 | -0.051 | -0.054 | -0.147 | 0.094 |
| ρ_t | | | | | | 1 | -0.061 | -0.106 | -0.277 | 0.115 | -0.021 | -0.04 |
| ϕ_t | | | | | | | 1 | 0.05 | -0.003 | 0.13 | 0.155 | 0.006 |
| l_t | | | | Đối xứng | | | | 1 | -0.059 | -0.051 | -0.271 | 0.129 |
| E_t | | | | | | | | | 1 | -0.137 | -0.022 | 0.091 |
| M | | | | | | | | | | 1 | -0.069 | -0.204 |
| P | | | | | | | | | | | 1 | 0.116 |
| N_c | | | | | | | | | | | | 1 |

2.2.2. Phương pháp mô phỏng số

Trong nghiên cứu này, phương pháp học máy Mạng nơ ron nhân tạo (ANN) được phát triển và tối ưu hóa nhằm dự đoán cơ tính của vật liệu tổng hợp nanocomposite. ANN là một phương pháp học máy được sử dụng phổ biến trong khoa học dữ liệu, được đề xuất ban đầu bởi McCulloch và Pitts [69]. Nền tảng chính của mô hình ANN dựa trên chức năng của bộ não sinh học, được cấu tạo bởi các nút có thể thực hiện một số nhiệm vụ nhất định. Mỗi nơ ron nhân tạo (được gọi là nút tính toán) trong mạng bao gồm dữ liệu đầu vào, trọng số và phản hồi đầu ra.

Ưu điểm của mô hình ANN là khả năng giải quyết các vấn đề phức tạp có chứa mối quan hệ phi tuyến giữa các biến đầu vào và đầu ra. Một ưu điểm khác của phương pháp ANN là không yêu cầu các giả thuyết và ràng buộc trước trong quá trình mô phỏng. Phương pháp này có khả năng phân tích các mối quan hệ phi tuyến tính phức tạp cũng như xử lý dữ liệu đầu vào kích thước lớn. Về mặt hiệu suất, ANN có thể giải quyết các vấn đề phức tạp về kích thước cao nhờ cấu trúc tính toán song song.



Hình 1. Minh họa cấu trúc của mô hình ANN gồm có một lớp đầu vào, một lớp ẩn và một lớp đầu ra.

Có ba lớp chính trong cấu trúc của mô hình ANN, đó là những lớp sau (Hình 1):

- Lớp đầu vào;
- Các lớp ẩn của các nút chức năng;
- Lớp đầu ra

Các lớp trên được kết nối với nhau bằng các nút tính toán nhân tạo có chức năng xác định các trọng số của mô hình. Đối với một vấn đề đầu ra duy nhất, mô hình ANN được xây dựng dựa trên quan hệ phi tuyến sau:

$$f : X \in \mathbb{R}^N \mapsto Y \in \mathbb{R}^1, \quad (1)$$

trong đó X biểu thị vectơ đầu vào và Y biểu thị biến đầu ra. Hàm f có thể được viết lại như sau:

$$X \mapsto f(X) = fo(M * (fh(b + W * X)) + b_o), \quad (2)$$

trong đó W là ma trận trọng số, fh biểu thị hàm kích hoạt và b biểu thị vectơ thiên vị của lớp ẩn. Mặt khác, M , fo và b_o là các biến giống nhau cho lớp đầu ra:

$$m = W * X + b \quad (3)$$

$$A = fh(W * X + b) \quad (4)$$

$$\lambda = fo(M * A + b_o) \quad (5)$$

2.3. Kết quả nghiên cứu

2.3.1. Tối ưu hóa cấu trúc của mô hình ANN bằng nghiên cứu tham số

Trong mô hình ANN, các lớp ẩn, được định nghĩa là các lớp giữa các lớp đầu vào và đầu ra, có thể được thiết lập theo nhiều cách khác nhau. Việc phân tích cấu trúc của các lớp ẩn là rất quan trọng vì hiệu suất dự đoán bị ảnh hưởng trực tiếp bởi số lượng các lớp ẩn và số nơ ron trong mỗi lớp ẩn. Trong nghiên cứu này, một nghiên cứu tham số đã được thực hiện để khảo sát ảnh hưởng của số lượng lớp ẩn và nơ ron trong mỗi lớp ẩn đối với hiệu suất dự đoán. Trong nghiên cứu tham số này, số lượng lớp ẩn N_{layer} được thay đổi biến thiên từ 1 đến 4, trong khi số lượng nơ ron trong mỗi lớp ẩn, N_{neuron} , biến thiên từ 1 đến 30. Phạm vi giá trị như vậy cho N_{layer} và N_{neuron} được chọn chủ yếu là do thời gian tính toán. Vì số lượng nơ ron trong mỗi lớp ẩn có thể được hoán vị với sự lặp lại, số lượng lớp ẩn càng lớn thì số lượng cấu trúc tiềm năng ANN càng lớn. Cần lưu ý rằng 50 lần chạy ngẫu nhiên đã được áp dụng cho mỗi cấu trúc, để có thể xem xét ảnh hưởng của các lần lấy mẫu ngẫu nhiên. Vì vậy, thời gian tính toán là rất quan trọng. Bảng 4 chỉ ra số lượng cấu trúc có thể có trong nghiên cứu tham số.

Bảng 4. Số lượng cấu trúc có thể có trong nghiên cứu tham số

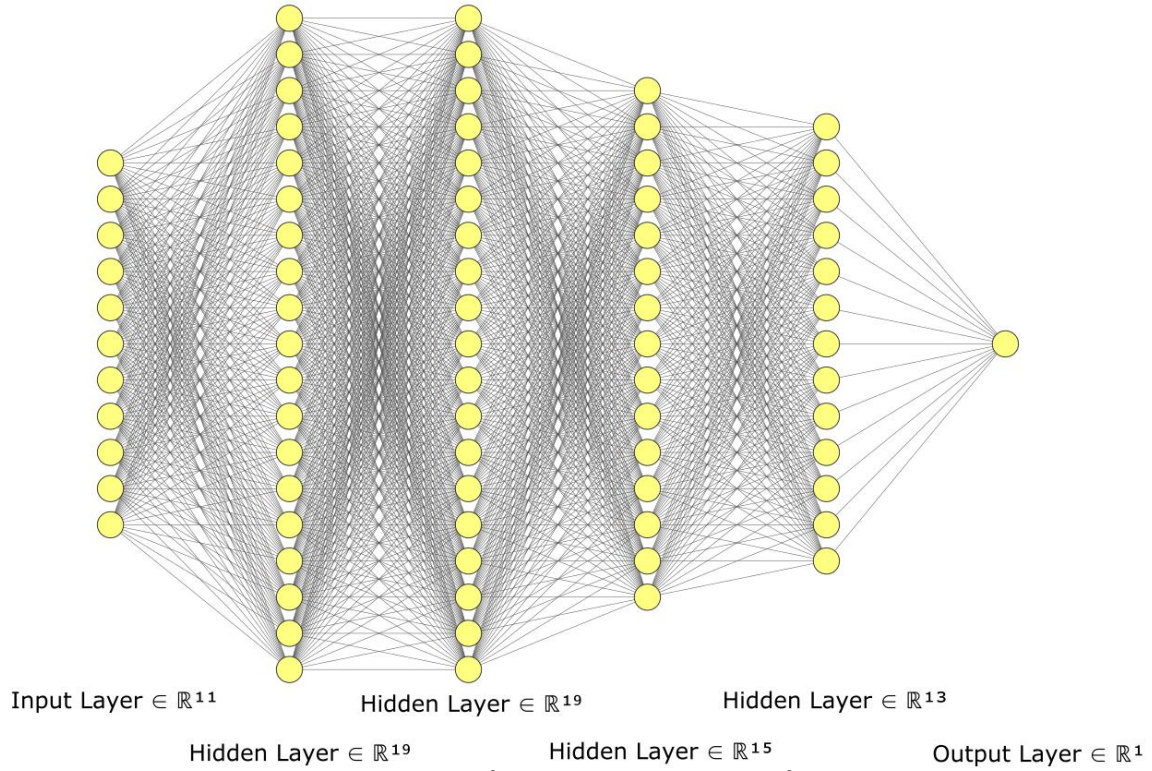
| Trường hợp | Số lớp ẩn | Số nơ ron tối đa trong mỗi lớp ẩn | Số nơ ron tối thiểu trong mỗi lớp ẩn | Số lần chạy ngẫu nhiên cho mỗi cấu trúc | Số cấu trúc có thể có |
|------------|-----------|-----------------------------------|--------------------------------------|---|-----------------------|
| 1 | 1 | 30 | 1 | 50 | 1,500 |
| 2 | 2 | 30 | 1 | 50 | 46,500 |
| 3 | 3 | 30 | 1 | 50 | 1,396,500 |
| 4 | 4 | 30 | 1 | 50 | 41,896,500 |

Tính toán trong nghiên cứu này được thực hiện bằng máy tính DELL Vostro i5-9400 2.90GHz 16Gb RAM tại Trường Đại học Phenikaa. Theo khuyến nghị của Abambres et al. [70], kỹ thuật Levenberg-Marquardt được sử dụng để huấn luyện mô

hình ANN nhằm tối ưu hóa các trọng số của nó. Về các hàm kích hoạt, cần lưu ý rằng có thể sử dụng nhiều hàm khác nhau, chẳng hạn như: hàm sigmoid tiếp tuyến hyperbol, hàm log-sigmoid, hàm tuyến tính, hàm tuyến tính tích cực, hàm tuyến tính bão hòa, hàm tuyến tính bão hòa đối xứng, v.v. Tuy nhiên, như được chỉ ra trong phần cơ sở dữ liệu, tất cả các điểm dữ liệu được đưa về tỉ lệ $[0; 1]$, do đó sigmoid là ứng cử viên thích hợp nhất làm hàm kích hoạt vì hàm này tồn tại trong khoảng từ 0 đến 1. Do đó, hàm sigmoid được chọn cho các lớp ẩn và hàm tuyến tính được chọn cho các lớp đầu ra. Cuối cùng, một hàm sai số bình phương trung bình đã được sử dụng làm hàm mục tiêu. Đối với mỗi cấu hình, các giá trị trung bình trên 50 lần chạy tiêu chí thống kê như R, RMSE và MAE đã được tính toán và tổng hợp. Kết quả cho thấy, cấu trúc ANN tốt nhất bao gồm 4 lớp ẩn, lần lượt có 19, 19, 15 và 13 nơ ron. Cấu hình như vậy cung cấp giá trị cao nhất của R, giá trị thấp nhất của RMSE và MAE tương ứng cho phần kiểm chứng. Hơn nữa, độ lệch chuẩn của R, RMSE và MAE trên 50 lần chạy đã được điều tra, cho thấy rằng cấu trúc 19-19-15-13 cho giá trị thấp nhất của độ lệch chuẩn. Cấu trúc ANN tối ưu này được trình bày trong Hình 2, cho thấy số lượng nơ ron trong mỗi lớp ẩn. Trong phần tiếp theo, khả năng dự đoán của mô hình ANN tối ưu này sẽ được trình bày. Tóm tắt mô hình được trình bày trong Bảng 5.

Bảng 5. Đặc tính của mô hình ANN.

| Loại | Tham số | Giá trị |
|--------------------|--|--|
| Cố định | Số nơ ron lớp đầu vào | 11 |
| | Số nơ ron lớp đầu ra | 1 |
| | Hàm kích hoạt cho lớp ẩn | Sigmoid |
| | Hàm kích hoạt cho lớp đầu ra | Tuyến tính |
| | Thuật toán huấn luyện | Levenberg-Marquardt |
| | Hàm mục tiêu | MSE |
| Nghiên cứu tham số | Số lớp ẩn | N_{layer} , biến thiên từ 1 tới 4 |
| | Số nơ ron trong lớp ẩn | N_{neuron} , biến thiên từ 1 tới 30 |
| Ma trận trọng số | Kích thước ma trận trọng số lớp ẩn | $N_{\text{neuron}} \times N_{\text{layer}}$ |
| | Kích thước ma trận bias lớp ẩn | $1 \times N_{\text{neuron}}$ |
| | Kích thước ma trận trọng số lớp đầu ra | $1 \times N_{\text{neuron}}$ |
| | Kích thước ma trận bias lớp đầu ra | 1×1 |

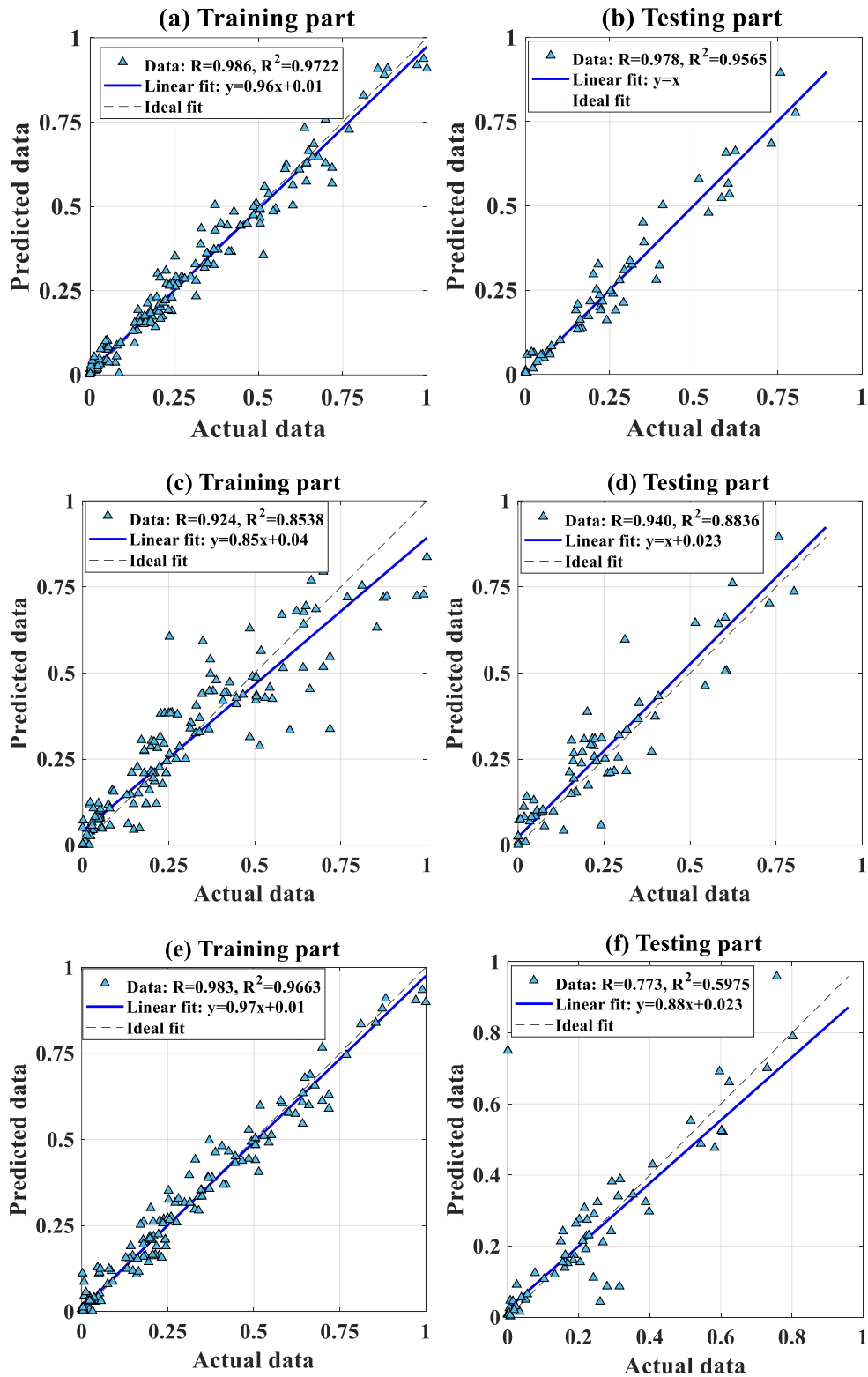


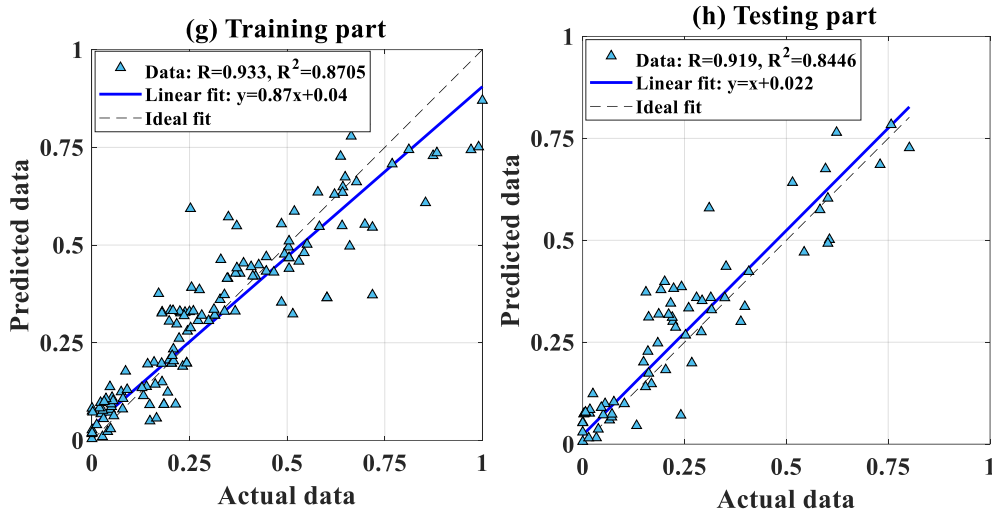
Hình 2. Cấu trúc mô hình ANN tối ưu.

2.3.2. Hiệu suất của mô hình

Trong phần này, kết quả dự đoán cấu trúc tối ưu được trình bày và so sánh với các mô hình khác như tuyến tính, tuyến tính có tương tác và mô hình hồi quy đa thức bậc hai. Đồ thị hồi quy cho phần huấn luyện sử dụng ANN, hồi quy tuyến tính, hồi quy tuyến tính có tương tác và hồi quy bậc hai được hiển thị lần lượt trong Hình 3a, 3c, 3e và 3g. Mặt khác, đồ thị hồi quy cho phần kiểm chứng sử dụng ANN, hồi quy tuyến tính, hồi quy tuyến tính có tương tác và hồi quy bậc hai được trình bày lần lượt trong Hình 3b, 3d, 3f và 3h. Trong các hình này, giá trị của hệ số tương quan R cũng được chỉ ra, cùng với hệ số xác định R^2 và phương trình hồi quy tuyến tính (độ dốc). Tất cả các giá trị của số liệu cũng được chỉ ra trong Bảng 6, bao gồm chỉ số hiệu suất % Advantage giữa ANN và các mô hình khác như được định nghĩa trong phương trình dưới đây:

$$\% \text{ Advantage} = \begin{cases} ((\phi^{ANN} - 1) - (\phi^{others} - 1)) \times 100 & \text{for R, IOA, Slope} \\ ((\phi^{others} - \phi^{ANN}) / \phi^{others}) \times 100 & \text{for ErrorStD, RMSE, MAE, SSE, SI, ADR} \end{cases} \quad (6)$$





Hình 3. Đồ thị hồi quy cho phần huấn luyện sử dụng (a) ANN, (c) hồi quy tuyến tính, (e) hồi quy tuyến tính có tương tác và (g) hồi quy bậc hai; cho phần kiểm chứng sử dụng (b) ANN, (d) hồi quy tuyến tính, (f) hồi quy tuyến tính có tương tác và (h) hồi quy bậc hai.

Có thể thấy rằng mô hình ANN thể hiện hiệu suất rất tốt cho cả tập dữ liệu huấn luyện và thử nghiệm. Hệ số tương quan trong cả hai trường hợp đều thỏa mãn ($R = 0.986$ cho phần huấn luyện và $R = 0.978$ cho phần kiểm chứng). Về các đánh giá chất lượng khác, có thể thấy trong Bảng 6 rằng mô hình ANN được đề xuất thể hiện rất tốt so với các mô hình khác. Về mặt SSE, mô hình ANN được đề xuất tạo ra giá trị thấp nhất trong cả pha huấn luyện và kiểm chứng ($SSE = 0.0018$ cho huấn luyện và $SSE = 0.0021$ cho kiểm chứng). Về AIC, mô hình ANN cũng thể hiện hiệu năng tốt với giá trị $AIC = -181.14$.

Về giá trị cho $\%Advantage$, mô hình ANN được đề xuất thể hiện một lợi thế lớn so với các mô hình khác. Dựa trên RMSE, MAE, ErrorStD, R, Slope, IOA, SSE và ADR, giá trị của $\%Advantage$ luôn dương cho cả điểm dữ liệu huấn luyện và kiểm chứng, xác nhận hiệu suất cao hơn của mô hình ANN được đề xuất. Cần lưu ý rằng đây là một bài toán đa chiều liên quan đến 11 biến đầu vào. Vì lý do đó, các kỹ thuật hồi quy tuyến tính, tuyến tính với tương tác và bậc hai không thể thỏa mãn hiệu suất yêu cầu. Có thể nói rằng nhìn chung, mô hình ANN vượt trội hơn các mô hình khác.

Bảng 6. Bảng thống kê hiệu suất của các mô hình và %_{Advantage} giữa ANN và các mô hình khác.

| Dữ liệu | Mô hình | RMSE | MAE | ErrorMean | ErrorStd | R | Slope | IOA | SSE | SI | AIC | ADR |
|------------|-------------------------|---------------|---------------|------------------|-----------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|------------------|---------------|
| Huấn luyện | ANN | 0.0420 | 0.0300 | -0.0001 | 0.0422 | 0.9860 | 0.9638 | 0.9928 | 0.0018 | 1.8519 | -181.1362 | 1.2477 |
| | Tuyến tính | 0.0968 | 0.0678 | 0.0000 | 0.0971 | 0.9236 | 0.8530 | 0.9589 | 0.0094 | 1.7618 | 92.3451 | -8.3864 |
| | Tuyến tính có tương tác | 0.0464 | 0.0342 | 0.0000 | 0.0466 | 0.9829 | 0.9661 | 0.9913 | 0.0022 | 1.8439 | -148.4300 | -12.4518 |
| | Bậc hai | 0.0909 | 0.0661 | 0.0000 | 0.0912 | 0.9329 | 0.8703 | 0.9643 | 0.0083 | 1.7746 | 71.8995 | -0.6237 |
| Kiểm chứng | ANN | 0.0457 | 0.0329 | -0.0002 | 0.0460 | 0.9778 | 1.0041 | 0.9886 | 0.0021 | 2.0899 | -113.4448 | 0.9813 |
| | Tuyến tính | 0.0805 | 0.0621 | -0.0243 | 0.0772 | 0.9397 | 1.0064 | 0.9648 | 0.0065 | 1.8602 | -30.9773 | -8.1966 |
| | Tuyến tính có tương tác | 0.1540 | 0.0751 | 0.0002 | 0.1550 | 0.7728 | 0.8849 | 0.8785 | 0.0237 | 2.0628 | 71.6027 | 42.7215 |
| | Bậc hai | 0.0931 | 0.0698 | -0.0230 | 0.0908 | 0.9189 | 1.0038 | 0.9534 | 0.0087 | 1.8798 | -7.9530 | -13.6294 |
| | %Advantage | RMSE | MAE | ErrorMean | ErrorStd | R | Slope | IOA | SSE | SI | AIC | ADR |
| Huấn luyện | Tuyến tính | +56.6 | +55.8 | - | +56.6 | +6.2 | +11.1 | +3.4 | +81.1 | -5.1 | - | +114.9 |
| | Tuyến tính có tương tác | +9.5 | +12.2 | - | +9.5 | +0.3 | -0.2 | +0.2 | +18.1 | -0.4 | - | +110.0 |
| | Bậc hai | +53.8 | +54.6 | - | +53.8 | +5.3 | +9.4 | +2.9 | +78.6 | -4.4 | - | +300.0 |
| Kiểm chứng | Tuyến tính | +43.2 | +47.0 | - | +40.3 | +3.8 | -0.2 | +2.4 | +67.7 | -12.3 | - | +112.0 |
| | Tuyến tính có tương tác | +70.3 | +56.1 | - | +70.3 | +20.5 | +11.9 | +11.0 | +91.2 | -1.3 | - | +97.7 |
| | Bậc hai | +50.9 | +52.9 | - | +49.3 | +5.9 | +0.0 | +3.5 | +75.9 | -11.2 | - | +107.2 |

PHẦN III. SẢN PHẨM, CÔNG BỐ VÀ KẾT QUẢ ĐÀO TẠO CỦA ĐỀ TÀI

3.1. Kết quả nghiên cứu

| TT | Danh mục sản phẩm | Yêu cầu khoa học | |
|----|-------------------|------------------|----------|
| | | Đăng ký | Đạt được |
| 1 | Bài báo ISI | 01 | 01 |
| 2 | Bài báo Scopus | 01 | 01 |
| | | | |

3.2. Hình thức, cấp độ công bố kết quả

| TT | Sản phẩm | Tình trạng (<i>Đã in/ chấp nhận in/ đã nộp đơn/ đã được chấp nhận đơn hợp lệ/ đã được cấp giấy xác nhận SHTT/ xác nhận sử dụng sản phẩm</i>) | Ghi địa chỉ và cảm ơn sự tài trợ của Trường ĐH Phenikaa đúng quy định | Đánh giá chung (<i>Đạt, không đạt</i>) |
|-----|--|---|---|---|
| 1 | Công trình công bố trên tạp chí ISI | | | |
| 1.1 | N. X. Ho, T. T. Le* , M. V. Le, Development of artificial intelligence based model for the prediction of Young's modulus of polymer/carbon-nanotubes composites, <i>Mechanics of Advanced Materials and Structures</i> , 2021, ISI Q1, IF 4.03, https://doi.org/10.1080/15376494.2021.1969709 | Chấp nhận in (“Article in press, published online: 07 Sep 2021”) | Đúng quy định | Đạt |
| 2 | Bài báo thuộc hệ thống Scopus | | | |
| 2.1 | T. T. Le* , M. V. Le, Prediction Model for Tensile Modulus of Carbon Nanotube–Polymer Composites. In: Nguyen D.C., Vu N.P., Long B.T., Puta H., Sattler KU. (eds) <i>Advances in Engineering Research and Application. ICERA 2021. Lecture Notes in Networks and Systems, vol 366. Springer, Cham</i> , https://doi.org/10.1007/978-3-030-92574-1_80 | Đã in (“published online: 01 Jan 2022”) | Đúng quy định | Đạt |
| 3 | Bài báo quốc tế khác | | | |
| 3.1 | | | | |
| 3.1 | | | | |
| 4 | Bài báo trong nước | | | |
| 4.1 | | | | |

| | | | | |
|-----|------------------------|--|--|--|
| 4.2 | | | | |
| 5 | Bài báo hội nghị | | | |
| 5.1 | | | | |
| 5.2 | | | | |
| 6 | Đăng ký sở hữu trí tuệ | | | |
| 6.1 | | | | |
| 6.2 | | | | |
| | Sản phẩm khác | | | |
| | | | | |
| | | | | |

Ghi chú:

- *Cột sản phẩm khoa học công nghệ: Liệt kê các thông tin các sản phẩm KHCN theo thứ tự <tên tác giả, tên công trình, tên tạp chí/nhà xuất bản, số phát hành, năm phát hành, trang đăng công trình, mã công trình đăng tạp chí/sách chuyên khảo (DOI), loại tạp chí ISI/Scopus>*
- *Các ấn phẩm khoa học (bài báo, báo cáo KH, sách chuyên khảo...) chỉ được chấp nhận nếu có ghi nhận địa chỉ và cảm ơn tài trợ của Trường Đại học Phenikaa theo đúng quy định.*
- *Bản phô tô toàn văn các ấn phẩm này phải đưa vào phụ lục các minh chứng của báo cáo. Riêng sách chuyên khảo cần có bản phô tô bìa, trang đầu và trang cuối có ghi thông tin mã số xuất bản.*

3.3. Kết quả đào tạo (nếu có)

| TT | Họ và tên | Thời gian và kinh phí tham gia đề tài (số tháng/số tiền) | Công trình công bố liên quan (Sản phẩm KHCN, luận án, luận văn) | Đã bảo vệ |
|-------------------------------|-----------|--|---|-----------|
| Nghiên cứu sinh | | | | |
| 1 | | | | |
| Học viên cao học | | | | |
| 1 | | | | |
| Sinh viên nghiên cứu khoa học | | | | |
| 1 | | | | |

PHẦN IV. TÌNH HÌNH SỬ DỤNG KINH PHÍ

| TT | Nội dung chi | Kinh phí được duyệt (triệu đồng) | Kinh phí thực hiện (triệu đồng) | Ghi chú |
|----|---------------------------------|----------------------------------|---------------------------------|---------|
| 1 | Nguyên, nhiên vật liệu, ... | | | |
| 2 | Thiết bị, dụng cụ | | | |
| 3 | Công tác phí : tham dự hội thảo | 15,000,000 | 10,552,168 | |
| 4 | Dịch vụ thuê ngoài | 10,000,000 | 9,499,751 | |
| 5 | Tổ chức hội nghị, hội thảo | 15,000,000 | 11,241,570 | |
| | Tổng số | 40,000,000 | 31,293,489 | |

PHẦN V. KIẾN NGHỊ (về phát triển các kết quả nghiên cứu của đề tài; về quản lý, tổ chức thực hiện ở các cấp)

Các kiến nghị sau đây được đề xuất để phát triển các kết quả nghiên cứu của đề tài:

- Xây dựng cơ sở dữ liệu đầy đủ và có nhiều dữ liệu hơn, hướng tới các tính chất lý hóa khác nhau của vật liệu nanocomposite;

- Kết hợp cơ sở dữ liệu thu được với các cơ sở dữ liệu hiện có;
- Phát triển cơ sở dữ liệu tính tới các thông số quan trọng như nhiệt độ;
- Phát triển các mô hình học máy khác nhằm kiểm chứng hiệu năng của mô hình ANN;
- Cung cấp mô hình tối ưu tới các nhà khoa học/nghiên cứu sinh/sinh viên bằng các giao diện đồ họa người dùng, phát triển trên nền Excel nhằm đơn giản hóa việc sử dụng;
- Xây dựng các mô hình lý thuyết (cơ học vi mô) và các mô phỏng số phân tử hữu hạn để so sánh với mô hình phát triển trong nghiên cứu này;
- Thực hiện các thí nghiệm kiểm chứng trong khả năng cho phép.

PHẦN VI. PHỤ LỤC (*minh chứng các sản phẩm nêu ở Phần III*)

- *Đối với bài báo khoa học, Bằng sáng chế, Giải pháp công nghệ, ... in các minh chứng kèm theo.*

Development of artificial intelligence based model for the prediction of Young's modulus of polymer/carbon-nanotubes composites

Nang Xuan Ho^{a,b}, Tien-Thinh Le^{b,c} , and Minh Vuong Le^d 

^aFaculty of Vehicle and Energy Engineering, PHENIKAA University, Hanoi, Viet Nam; ^bPHENIKAA Research and Technology Institute (PRATI), A&A Green Phoenix Group JSC, Hanoi, Viet Nam; ^cFaculty of Mechanical Engineering and Mechatronics, PHENIKAA University, Hanoi, Viet Nam; ^dLaboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, Université Paris-Est, MSME UMR 8208 CNRS, Marne-la-Vallée, France

ABSTRACT

In this paper, an Artificial Intelligence (AI) model is constructed for the behavior prediction, i.e. Young's modulus, of polymer/carbon-nanotube (CNTs) composites. The AI is proposed to overcome the difficulties when studying the properties of novel composite materials, for example the time-consuming of experimental studies of resource-consuming of other numerical methods. Artificial Neural Network (ANN) model was chosen and optimized in architecture based on a parametric study. The main objective of this study is to firstly confirm that the proposed AI method performs well for nanocomposites and it can then be optimized in terms of computational time and resources in further studies. The obtained results have shown that the proposed model exhibits great performance in both training and testing phases, where the correlation coefficient is 0.986 for training part and 0.978 for the testing part.

ARTICLE HISTORY

Received 22 June 2021
Accepted 15 August 2021

KEYWORDS

AI; ML; nanocomposites;
neural network; polymer;
composite properties





1. Introduction

With the recent challenges in economic and environment of engineering structures, technological innovations are required, which leads to the needs of new materials. However, finding and characterizing novel materials are conventionally done by experiments [1], which are costly in terms of time and resources. For example, the studies of novel materials can take up to 10-20 years using laboratory experiments [2]. Therefore, only a limited number of problems can be studied using conventional methods.

As a solution to this problem, many projects have been proposed in the past to reduce the cost when studying behavior of novel materials. With very interesting goals, these projects have attracted huge attention from researchers all around the world. One stand out project that can be listed is the Material Genome Initiative (MGI) introduced by president Obama in 2011, with the purpose of improving the design and production of advanced materials with the time and cost reduction of 50% [3]. To this aim, the US's government has largely engaged in the infrastructure of current R&D institutions for accelerating and accompanying the manufacturing in industrial zones. In 2014, the US National Science and Technology Council has published "Materials Genome Initiative Strategic Plan", guiding and coordinating all the US Federal activities on the MGI's vision [4]. In a same context, European Materials Modeling Council has also announced several major projects, which aim to bring together different materials activities in Europe and to rise competitiveness in the industrial sectors [5].

The MGI project composes of three main contributions, which are computational, experimental resources and numerical data [1]. Such combination, with the inclusion of computational resources, plays a crucial role in the study of novel materials. On the other hand, the experimental data are essential for the validation of numerical models. A typical example of MGI significant progress could be listed such as the Materials Project [6], which offers to all researchers and engineers an online database from Density Functional Theory (DFT) simulations over 66,000 compounds. A vast advanced materials have been developed through this database including new battery [7] and thermoelectric [8] materials.

Computational tools always play an important role in the revolution of materials science [9, 10]. Indeed, from DFT to Molecular Dynamics simulations, the more efficient codes are developed, the more materials science progresses are made. Moreover, these large-scale simulations provide an enormous amount of data [11], as the typical example Materials Project mentioned above, gathering more than 120,600 inorganic compounds, 35,000 molecules as well as 530,000 nanoporous materials. In another investigation, Gómez-Bombarelli et al. [12] have combined theory and numerical methods to study the behavior of materials from a database of 1.6×10^6 organic light-emitting diode molecules. Another type of computational approach to study the behavior of composite materials is homogenization-based approaches. However, this type of methods also requires a lot of time and resources. For example, in [13], to solve a multi-scale problem involving 1.3 billion unknowns, the

CONTACT Nang Xuan Ho  nang.hoxuan@phenikaa-uni.edu.vn  Faculty of Vehicle and Energy Engineering, PHENIKAA University, Yen Nghia, Ha Dong, Hanoi 12116, Viet Nam; Tien-Thinh Le  thinh.tetien@phenikaa-uni.edu.vn  Faculty of Mechanical Engineering and Mechatronics, PHENIKAA University, Yen Nghia, Ha Dong, Hanoi 12116, Viet Nam

© 2021 Taylor & Francis Group, LLC



Prediction Model for Tensile Modulus of Carbon Nanotube–Polymer Composites

Tien-Thinh Le^{1,2(✉)} and Minh Vuong Le³

¹ Faculty of Mechanical Engineering and Mechatronics,
PHENIKAA University, Yen Nghia, Ha Dong, Hanoi 12116, Viet Nam
thinh.letien@phenikaa-uni.edu.vn

² A&A Green Phoenix Group JSC, PHENIKAA Research and Technology
Institute (PRATI), No. 167 Hoang Ngan, Trung Hoa,
Hanoi 11313, Cau Giay, Viet Nam

³ Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, Université Paris-Est,
MSME UMR 8208 CNRS, 5 bd Descartes, 77454 Marne-la-Vallée, France

Abstract. This work develops a Neural Network (NN) model for the prediction of the tensile modulus of carbon nanotube (CN)/polymer nanocomposites, based on experimental database. A data set composed of 282 configurations is collected from available resources. Considered input variables of the dataset are such as mechanical properties of separated phases, density of polymer matrix, processing method, geometry of CN, modification method at the CN surface, etc. while the problem output is the tensile modulus of nanocomposite. Parametric studies have been performed in finding optimum architecture of the proposed NN model.

Keywords: Neural Network · Carbon nanotubes · Nanocomposites · Polymer · Tensile modulus

1 Introduction

With the constant development of technologies and economic, and from an environmental point of view, more and more materials need to be developed. However, finding and characterizing novel materials are conventionally done by experiments [1]. Historically, the average timeframe to fully comprehend the behavior of materials using laboratory experiments is 10 to 20 years. These types of experiments, especially for composite materials are costly in terms of resources and equipment. In addition, they can only study a limited number and/or mixture proportion when considering a novel material.

In order to deal quickly and efficiently with such large datasets, a computational revolution in computational materials science has come involving Machine Learning (ML) methods. Application of machine learning algorithms in material science has been proven successful with several published papers in the literature. Nouira et al. [2] have employed Generative Adversarial Networks for discovering new crystallographic structures. Such applications on crystal architecture have also been investigated by Ryan et al. [3] using Deep Learning and by Oliynyk et al. [4] using Support Vector

Hà Nội, ngày 25 tháng 03 năm 2022

Đơn vị chủ trì đề tài
(Thủ trưởng đơn vị ký tên, đóng dấu)

Chủ nhiệm đề tài
(Họ tên, chữ ký)

Tài liệu tham khảo

- [1] Green ML, Choi CL, Hattrick-Simpers JR, Joshi AM, Takeuchi I, Barron SC, et al. Fulfilling the promise of the materials genome initiative with high-throughput experimental methodologies. *Applied Physics Reviews* 2017;4:011105. <https://doi.org/10.1063/1.4977487>.
- [2] Schmidt J, Marques MRG, Botti S, Marques MAL. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science. *Npj Comput Mater* 2019;5:1–36. <https://doi.org/10.1038/s41524-019-0221-0>.
- [3] de Pablo JJ, Jones B, Kovacs CL, Ozolins V, Ramirez AP. The Materials Genome Initiative, the interplay of experiment, theory and computation. *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 2014;18:99–117. <https://doi.org/10.1016/j.cossms.2014.02.003>.
- [4] Pablo JJ de, Jackson NE, Webb MA, Chen L-Q, Moore JE, Morgan D, et al. New frontiers for the materials genome initiative. *Npj Comput Mater* 2019;5:1–23. <https://doi.org/10.1038/s41524-019-0173-4>.
- [5] Jain A, Ong SP, Hautier G, Chen W, Richards WD, Dacek S, et al. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Materials* 2013;1:011002. <https://doi.org/10.1063/1.4812323>.
- [6] Koinuma H, Takeuchi I. Combinatorial solid-state chemistry of inorganic materials. *Nature Mater* 2004;3:429–38. <https://doi.org/10.1038/nmat1157>.
- [7] Dao DV, Adeli H, Ly H-B, Le LM, Le VM, Le T-T, et al. A Sensitivity and Robustness Analysis of GPR and ANN for High-Performance Concrete Compressive Strength Prediction Using a Monte Carlo Simulation. *Sustainability* 2020;12:830. <https://doi.org/10.3390/su12030830>.
- [8] Suram SK, Haber JA, Jin J, Gregoire JM. Generating Information-Rich High-Throughput Experimental Materials Genomes using Functional Clustering via Multitree Genetic Programming and Information Theory. *ACS Comb Sci* 2015;17:224–33. <https://doi.org/10.1021/co5001579>.
- [9] Gómez-Bombarelli R, Aguilera-Iparraguirre J, Hirzel TD, Duvenaud D, Maclaurin D, Blood-Forsythe MA, et al. Design of efficient molecular organic light-emitting diodes by a high-throughput virtual screening and experimental approach. *Nature Mater* 2016;15:1120–7. <https://doi.org/10.1038/nmat4717>.
- [10] Noura A, Sokolovska N, Crivello J-C. CrystalGAN: Learning to Discover Crystallographic Structures with Generative Adversarial Networks. *ArXiv:181011203 [Cs, Stat]* 2019.
- [11] Ryan K, Lengyel J, Shatruk M. Crystal Structure Prediction via Deep Learning. *J Am Chem Soc* 2018;140:10158–68. <https://doi.org/10.1021/jacs.8b03913>.
- [12] Oliynyk AO, Adutwum LA, Harynuk JJ, Mar A. Classifying Crystal Structures of Binary Compounds AB through Cluster Resolution Feature Selection and Support Vector Machine Analysis. *Chem Mater* 2016;28:6672–81. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.6b02905>.
- [13] Mannodi-Kanakthodi A, Pilania G, Huan TD, Lookman T, Ramprasad R. Machine Learning Strategy for Accelerated Design of Polymer Dielectrics. *Sci Rep* 2016;6:1–10. <https://doi.org/10.1038/srep20952>.
- [14] Yousef BF, Mourad A-HI, Hilal-Alnaqbi A. Prediction of the Mechanical Properties of PE/PP Blends Using Artificial Neural Networks. *Procedia Engineering* 2011;10:2713–8. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2011.04.452>.
- [15] Lingaraju D, Ramji K, Rao NBRM, lakshmi UR. Characterization and prediction of some engineering properties of polymer - Clay/Silica hybrid nanocomposites through ANN and regression models. *Procedia Engineering* 2011;10:9–18. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2011.04.004>.

- [16] Khan WS, Hamadneh NN, Khan WA. Prediction of thermal conductivity of polyvinylpyrrolidone (PVP) electrospun nanocomposite fibers using artificial neural network and prey-predator algorithm. *PLOS ONE* 2017;12:e0183920. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0183920>.
- [17] Kopal I, Labaj I, Harnicarova M, Valicek J, Hruby D. Prediction of the Tensile Response of Carbon Black Filled Rubber Blends by Artificial Neural Network. *Polymers* 2018;10. <https://doi.org/Artn 644 10.3390/Polym10060644>.
- [18] Ward L, Aykol M, Blaiszik B, Foster I, Meredig B, Saal J, et al. Strategies for accelerating the adoption of materials informatics. *MRS Bulletin* 2018;43:683–9. <https://doi.org/10.1557/mrs.2018.204>.
- [19] Correa-Baena J-P, Hippalgaonkar K, van Duren J, Jaffer S, Chandrasekhar VR, Stevanovic V, et al. Accelerating Materials Development via Automation, Machine Learning, and High-Performance Computing. *Joule* 2018;2:1410–20. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2018.05.009>.
- [20] Rajan K. Materials Informatics: The Materials “Gene” and Big Data. *Annu Rev Mater Res* 2015;45:153–69. <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-070214-021132>.
- [21] Rajan K. Materials informatics. *Materials Today* 2005;8:38–45. [https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(05\)71123-8](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(05)71123-8).
- [22] Bock FE, Aydin RC, Cyron CJ, Huber N, Kalidindi SR, Klusemann B. A Review of the Application of Machine Learning and Data Mining Approaches in Continuum Materials Mechanics. *Front Mater* 2019;6. <https://doi.org/10.3389/fmats.2019.00110>.
- [23] Kumar JN, Li Q, Jun Y. Challenges and opportunities of polymer design with machine learning and high throughput experimentation. *MRS Communications* 2019;9:537–44. <https://doi.org/10.1557/mrc.2019.54>.
- [24] Elton DC, Boukouvalas Z, Fuge MD, Chung PW. Deep learning for molecular design—a review of the state of the art. *Mol Syst Des Eng* 2019;4:828–49. <https://doi.org/10.1039/C9ME00039A>.
- [25] Zhou T, Song Z, Sundmacher K. Big Data Creates New Opportunities for Materials Research: A Review on Methods and Applications of Machine Learning for Materials Design. *Engineering* 2019. <https://doi.org/10.1016/j.eng.2019.02.011>.
- [26] Wu D, Zhang Y, Zhang M, Yu W. Selective localization of multiwalled carbon nanotubes in poly(ϵ -caprolactone)/polylactide blend. *Biomacromolecules* 2009;10:417–24. <https://doi.org/10.1021/bm801183f>.
- [27] Yang B-X, Shi J-H, Pramoda KP, Goh SH. Enhancement of stiffness, strength, ductility and toughness of poly(ethylene oxide) using phenoxy-grafted multiwalled carbon nanotubes. *Nanotechnology* 2007;18. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/18/12/125606>.
- [28] Kuan H-C, Ma C-CM, Chang W-P, Yuen S-M, Wu H-H, Lee T-M. Synthesis, thermal, mechanical and rheological properties of multiwall carbon nanotube/waterborne polyurethane nanocomposite. *Composites Science and Technology* 2005;65:1703–10. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2005.02.017>.
- [29] Shi J-H, Yang B-X, Pramoda KP, Goh SH. Enhancement of the mechanical performance of poly(vinyl chloride) using poly(n-butyl methacrylate)-grafted multi-walled carbon nanotubes. *Nanotechnology* 2007;18. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/18/37/375704>.
- [30] Tseng C-H, Wang C-C, Chen C-Y. Functionalizing carbon nanotubes by plasma modification for the preparation of covalent-integrated epoxy composites. *Chemistry of Materials* 2007;19:308–15. <https://doi.org/10.1021/cm062277p>.
- [31] Blond D, Barron V, Ruether M, Ryan KP, Nicolosi V, Blau WJ, et al. Enhancement of modulus, strength, and toughness in poly(methyl methacrylate)-based composites by the incorporation of poly(methyl methacrylate)-functionalized nanotubes. *Advanced Functional Materials* 2006;16:1608–14. <https://doi.org/10.1002/adfm.200500855>.

- [32] Safadi B, Andrews R, Grulke EA. Multiwalled carbon nanotube polymer composites: Synthesis and characterization of thin films. *Journal of Applied Polymer Science* 2002;84:2660–9. <https://doi.org/10.1002/app.10436>.
- [33] Xia H, Wang Q, Li K, Hu G-H. Preparation of polypropylene/carbon nanotube composite powder with a solid-state mechanochemical pulverization process. *Journal of Applied Polymer Science* 2004;93:378–86. <https://doi.org/10.1002/app.20435>.
- [34] Qian D, Dickey EC, Andrews R, Rantell T. Load transfer and deformation mechanisms in carbon nanotube-polystyrene composites. *Applied Physics Letters* 2000;76:2868–70. <https://doi.org/10.1063/1.126500>.
- [35] Kanagaraj S, Varanda FR, Zhil'tsova TV, Oliveira MSA, Simões JAO. Mechanical properties of high density polyethylene/carbon nanotube composites. *Composites Science and Technology* 2007;67:3071–7. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2007.04.024>.
- [36] Xiao KQ, Zhang LC, Zarudi I. Mechanical and rheological properties of carbon nanotube-reinforced polyethylene composites. *Composites Science and Technology* 2007;67:177–82. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2006.07.027>.
- [37] Yang B-X, Pramoda KP, Xu GQ, Goh SH. Mechanical reinforcement of polyethylene using polyethylene-grafted multiwalled carbon nanotubes. *Advanced Functional Materials* 2007;17:2062–9. <https://doi.org/10.1002/adfm.200600599>.
- [38] Jose MV, Dean D, Tyner J, Price G, Nyairo E. Polypropylene/carbon nanotube nanocomposite fibers: Process-morphology- property relationships. *Journal of Applied Polymer Science* 2007;103:3844–50. <https://doi.org/10.1002/app.25475>.
- [39] Masuda J, Torkelson JM. Dispersion and major property enhancements in polymer/multiwall carbon nanotube nanocomposites via solid-state shear pulverization followed by melt mixing. *Macromolecules* 2008;41:5974–7. <https://doi.org/10.1021/ma801321j>.
- [40] Liu L-Q, Tasis D, Prato M, Wagner HD. Tensile mechanics of electrospun multiwalled nanotube/poly(methyl methacrylate) nanofibers. *Advanced Materials* 2007;19:1228–33. <https://doi.org/10.1002/adma.200602226>.
- [41] Liu L-Q, Eder M, Burgert I, Tasis D, Prato M, Wagner HD. One-step electrospun nanofiber-based composite ropes. *Applied Physics Letters* 2007;90. <https://doi.org/10.1063/1.2644379>.
- [42] Kim KH, Jo WH. Improvement of tensile properties of poly(methyl methacrylate) by dispersing multi-walled carbon nanotubes functionalized with poly(3-hexylthiophene)-graft-poly(methyl methacrylate). *Composites Science and Technology* 2008;68:2120–4. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2008.03.008>.
- [43] Coleman JN, Cadek M, Blake R, Nicolosi V, Ryan KP, Belton C, et al. High-performance nanotube-reinforced plastics: Understanding the mechanism of strength increase. *Advanced Functional Materials* 2004;14:791–8. <https://doi.org/10.1002/adfm.200305200>.
- [44] McCullen SD, Stevens DR, Roberts WA, Ojha SS, Clarke LI, Gorga RE. Morphological, electrical, and mechanical characterization of electrospun nanofiber mats containing multiwalled carbon nanotubes. *Macromolecules* 2007;40:997–1003. <https://doi.org/10.1021/ma061735c>.
- [45] Hou H, Ge JJ, Zeng J, Li Q, Reneker DH, Greiner A, et al. Electrospun polyacrylonitrile nanofibers containing a high concentration of well-aligned multiwall carbon nanotubes. *Chemistry of Materials* 2005;17:967–73. <https://doi.org/10.1021/cm0484955>.
- [46] Li Y, Shimizu H. High-shear processing induced homogenous dispersion of pristine multiwalled carbon nanotubes in a thermoplastic elastomer. *Polymer* 2007;48:2203–7. <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2007.02.066>.
- [47] Bokobza L, Bilin C. Effect of strain on the properties of a styrene-butadiene rubber filled with multiwall carbon nanotubes. *Journal of Applied Polymer Science* 2007;105:2054–61. <https://doi.org/10.1002/app.26153>.

- [48] Zhao C, Hu G, Justice R, Schaefer DW, Zhang S, Yang M, et al. Synthesis and characterization of multi-walled carbon nanotubes reinforced polyamide 6 via in situ polymerization. *Polymer* 2005;46:5125–32. <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2005.04.065>.
- [49] Shao W, Wang Q, Wang F, Chen Y. The cutting of multi-walled carbon nanotubes and their strong interfacial interaction with polyamide 6 in the solid state. *Carbon* 2006;44:2708–14. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2006.04.006>.
- [50] Kang M, Myung SJ, Jin H-J. Nylon 610 and carbon nanotube composite by in situ interfacial polymerization. *Polymer* 2006;47:3961–6. <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2006.03.073>.
- [51] Ogasawara T, Ishida Y, Ishikawa T, Yokota R. Characterization of multi-walled carbon nanotube/phenylethynyl terminated polyimide composites. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 2004;35:67–74. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2003.09.003>.
- [52] Zhu B-K, Xie S-H, Xu Z-K, Xu Y-Y. Preparation and properties of the polyimide/multi-walled carbon nanotubes (MWNTs) nanocomposites. *Composites Science and Technology* 2006;66:548–54. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2005.05.038>.
- [53] Liu T, Tong Y, Zhang W-D. Preparation and characterization of carbon nanotube/polyetherimide nanocomposite films. *Composites Science and Technology* 2007;67:406–12. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2006.09.007>.
- [54] Yuen S-M, Ma C-CM, Lin Y-Y, Kuan H-C. Preparation, morphology and properties of acid and amine modified multiwalled carbon nanotube/polyimide composite. *Composites Science and Technology* 2007;67:2564–73. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2006.12.006>.
- [55] Kwon J, Kim H. Comparison of the properties of waterborne polyurethane/multiwalled carbon nanotube and acid-treated multiwalled carbon nanotube composites prepared by in situ polymerization. *Journal of Polymer Science, Part A: Polymer Chemistry* 2005;43:3973–85. <https://doi.org/10.1002/pola.20897>.
- [56] Xia H, Song M. Preparation and characterization of polyurethane-carbon nanotube composites. *Soft Matter* 2005;1:386–94. <https://doi.org/10.1039/b509038e>.
- [57] Xu M, Zhang T, Gu H, Wu J, Chen Q. Synthesis and properties of novel polyurethane - Urea/multiwalled carbon nanotube composites. *Macromolecules* 2006;39:3540–5. <https://doi.org/10.1021/ma052265+>.
- [58] Jin SH, Park Y-B, Yoon KH. Rheological and mechanical properties of surface modified multi-walled carbon nanotube-filled PET composite. *Composites Science and Technology* 2007;67:3434–41. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2007.03.013>.
- [59] Bai J. Evidence of the reinforcement role of chemical vapour deposition multi-walled carbon nanotubes in a polymer matrix. *Carbon* 2003;41:1325–8. [https://doi.org/10.1016/S0008-6223\(03\)00034-4](https://doi.org/10.1016/S0008-6223(03)00034-4).
- [60] Bai JB, Allaoui A. Effect of the length and the aggregate size of MWNTs on the improvement efficiency of the mechanical and electrical properties of nanocomposites—experimental investigation. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 2003;34:689–94. [https://doi.org/10.1016/S1359-835X\(03\)00140-4](https://doi.org/10.1016/S1359-835X(03)00140-4).
- [61] Guo P, Chen X, Gao X, Song H, Shen H. Fabrication and mechanical properties of well-dispersed multiwalled carbon nanotubes/epoxy composites. *Composites Science and Technology* 2007;67:3331–7. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2007.03.026>.
- [62] Kim KH, Jo WH. A strategy for enhancement of mechanical and electrical properties of polycarbonate/multi-walled carbon nanotube composites. *Carbon* 2009;47:1126–34. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2008.12.043>.
- [63] Hou Y, Tang J, Zhang H, Qian C, Feng Y, Liu J. Functionalized few-walled carbon nanotubes for mechanical reinforcement of polymeric composites. *ACS Nano* 2009;3:1057–62. <https://doi.org/10.1021/nn9000512>.

- [64] Isayev AI, Kumar R, Lewis TM. Ultrasound assisted twin screw extrusion of polymer-nanocomposites containing carbon nanotubes. *Polymer* 2009;50:250–60. <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2008.10.052>.
- [65] Li Y, Shimizu H. Toward a stretchable, elastic, and electrically conductive nanocomposite: Morphology and properties of poly[styrene-b-(ethylene-co-butylene)-b-styrene]/ multiwalled carbon nanotube composites fabricated by high-shear. *Macromolecules* 2009;42:2587–93. <https://doi.org/10.1021/ma802662c>.
- [66] Yan D, Yang G. Synthesis and properties of homogeneously dispersed polyamide 6/MWNTs nanocomposites via simultaneous in situ anionic ring-opening polymerization and compatibilization. *Journal of Applied Polymer Science* 2009;112:3620–6. <https://doi.org/10.1002/app.29783>.
- [67] Zhang Q, Li J, Zhao X, Chen D. Preparation and characterization of alkylated carbon nanotube/polyimide nanocomposites. *Polymer International* 2009;58:557–63. <https://doi.org/10.1002/pi.2568>.
- [68] Srivastava R, Banerjee S, Jehnichen D, Voit B, Böhme F. In situ preparation of polyimide composites based on functionalized carbon nanotubes. *Macromolecular Materials and Engineering* 2009;294:96–102. <https://doi.org/10.1002/mame.200800241>.
- [69] McCulloch WS, Pitts W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Mathematical Biophysics* 1943;5:115–33. <https://doi.org/10.1007/BF02478259>.
- [70] Abambres M, Rajana K, Tsavdaridis KD, Ribeiro TP. Neural Network-Based Formula for the Buckling Load Prediction of I-Section Cellular Steel Beams. *Computers* 2019;8:2. <https://doi.org/10.3390/computers8010002>.