

KẾT HỢP PHƯƠNG PHÁP RỜI RẠC VÀ PHƯƠNG PHÁP MÁY HỌC TRONG DỰ BÁO ĐỘ TOI XÓP

Bùi Văn Hiệu

Trường Đại học Thủy lợi, email: hieubv@tlu.edu.vn

1. GIỚI THIỆU

Độ toi xóp, phần thể tích của không gian trống của vật liệu, là thông số quan trọng đối với nhiều lĩnh vực. Trong lĩnh vực máy xây dựng, độ rỗng ảnh hưởng đến khả năng chất tải của các phương tiện, ảnh hưởng đến lực tác dụng lên bộ công tác của các thiết bị máy làm đất, máy gia cố nền móng [4]. Trong lĩnh vực thủy lực, dòng chảy qua lỗ rỗng, độ toi xóp ảnh hưởng tới lưu lượng dòng chảy qua các hạt và ma sát của dòng chảy với lớp hạt [2]. Trong lĩnh vực dầu khí, độ toi xóp trong các lớp đất đá là nơi chứa dầu, quyết định trữ lượng dầu của các mỏ [1]. Mặc dù quan trọng nhưng việc dự báo, xác định và mô phỏng độ toi xóp gặp nhiều khó khăn do hạn chế về chi phí thí nghiệm và chi phí tính toán [1,2].

Bài báo này thể hiện nỗ lực của tác giả trong việc xây dựng một phương pháp mới, kết hợp của phương pháp rời rạc (DEM) và phương pháp máy học có tên là mạng nơ-ron nhân tạo (ANN), dùng để phân tích và dự đoán độ toi xóp của hạt. Trong đó, DEM dùng để mô phỏng phân bố kích thước hạt, độ rỗng. Kết quả mô phỏng được so sánh với kết quả thí nghiệm [3]. Dữ liệu phân bố hạt dựa trên mô phỏng DEM sẽ được sử dụng như là đầu vào của ANN để dự báo độ toi xóp.

2. PHƯƠNG PHÁP

2.1. Phương pháp rời rạc (DEM)

Phương pháp phần tử rời rạc (DEM) ban đầu được đề xuất bởi Cundall và Strack để mô hình hóa hành vi cơ học của dòng hạt và để mô phỏng các lực tác động lên từng hạt cùng

chuyển động của nó [1]. Thông thường trong DEM, chuyển động của một hạt có thể được phân loại thành hai loại: Chuyển động thẳng và chuyển động quay. Động lượng và năng lượng của các hạt được trao đổi trong các va chạm với các hạt lân cận, va chạm với tường biên và các va chạm, tương tác với môi trường (chất lỏng, chất khí...). Thông qua việc áp dụng định luật chuyển động thứ hai của Newton, ta có thể xác định quỹ đạo của từng hạt i (bao gồm cả gia tốc, vận tốc và vị trí của hạt) từ các phương trình sau:

$$m_i \frac{d\vec{u}_i}{dt} = m_i \vec{g} + \sum_k \vec{f}_{i,k} + \vec{f}_{i,f} \quad (1)$$

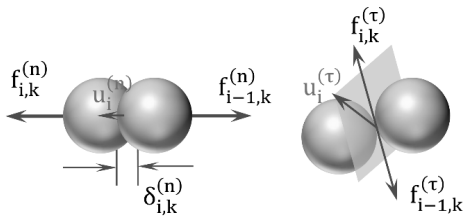
$$I \frac{d\vec{\omega}_i}{dt} = \frac{d_i}{2} \sum_k (\vec{n}_{i,k} \times \vec{f}_{i,k}) \quad (2)$$

Trong đó m_i = khối lượng của một hạt i ; \vec{u}_i = vận tốc của một hạt i ; \vec{g} = gia tốc trọng trường; $\vec{f}_{i,k}$ = lực tương tác giữa hạt i và hạt k (lực tiếp xúc); $\vec{f}_{i,f}$ = lực tương tác giữa hạt i và môi trường; I = mô men quán tính; $\vec{\omega}_i$ = vận tốc góc; d_i = đường kính của hạt i ; $\vec{n}_{i,k}$ = hướng va chạm = véc tơ hướng tâm giữa các hạt i và k . Mô hình lực tiếp xúc được sử dụng phổ biến trong DEM dựa trên nguyên đàn hồi giảm chấn cũng như các đề xuất của Hertz - Mindlin. Lực tiếp xúc được xác định từ phương pháp phân tích lực; các yếu tố độ cứng và giảm chấn được phân tích theo hai hướng: vuông góc và tiếp tuyến của bề mặt tiếp xúc giữa hai hạt (hình 1).

$$\vec{f}_{i,k}^{(n)} = k_i^{(n)} \delta_{i,k}^{(n)} + \alpha_i^{(n)} \Delta u_i^{(n)} \quad (3)$$

$$\vec{f}_{i,k}^{(\tau)} = k_i^{(\tau)} \delta_{i,k}^{(\tau)} + \alpha_i^{(\tau)} \Delta u_i^{(\tau)} \quad (4)$$

(n) và (τ) được gọi là hai thành phần của lực tiếp xúc theo hướng vuông góc và tiếp tuyến; k_i = độ cứng của hạt i ; $\delta_{i,k}^{(n)}$ = Đặc tính của tiếp xúc và chuyển vị; α_i = hệ số giảm chấn; và Δu_i = vận tốc tương đối của hạt tại thời điểm va chạm.

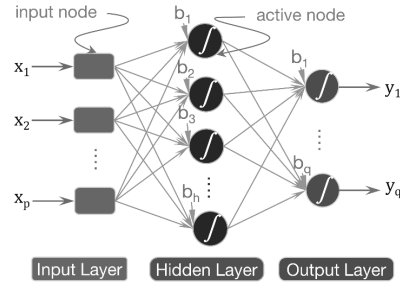


Hình 1. Mô hình lực tiếp xúc các hạt

2.2. Phương pháp máy học dùng mạng nơ-ron nhân tạo

Mạng nơ-ron nhân tạo (ANN) là một thuật ngữ chung bao gồm nhiều kiểu mạng, trong đó gồm các nơ-ron được kết nối theo những cách khác nhau: Theo cách truyền thẳng (FNN), hoặc truyền hồi quy (RNN). Cấu tạo cơ bản của mạng ANN gồm ba phần chính: một lớp nơ-ron đầu vào, một lớp nơ-ron đầu ra và một số nơ-ron ẩn (hình 2). Một nơ-ron riêng lẻ có trọng số (weight) và một đơn vị sai lệch (bias) được kết nối với các nơ-ron của các lớp trước và sau. Trong quá trình huấn luyện mạng, ứng với mỗi gói dữ liệu đầu vào, ANN sẽ dự báo ra kết quả đầu ra dựa vào các trọng số và sai lệch từ nơ-ron của các lớp. Hàm lỗi, đạt được bằng quá trình so sánh kết quả dự báo của mô hình và bộ dữ liệu chuẩn, sẽ được truyền ngược lại các lớp nơ-ron để điều chỉnh lại trọng số và sai lệch. Quá trình huấn luyện được lặp lại với các chuỗi dữ liệu khác nhau. Khi mạng đã được huấn luyện phù hợp để mô phỏng và có phản hồi tốt nhất với dữ liệu đầu vào, cấu hình mạng được lưu lại và quá trình kiểm tra sẽ được dùng để đánh giá hiệu quả của mạng ANN như một công cụ dự đoán [1].

Trong nghiên cứu này, mạng ANN được phát triển dựa trên thư viện mã nguồn mở về máy học của Google (TensorFlow và Keras).



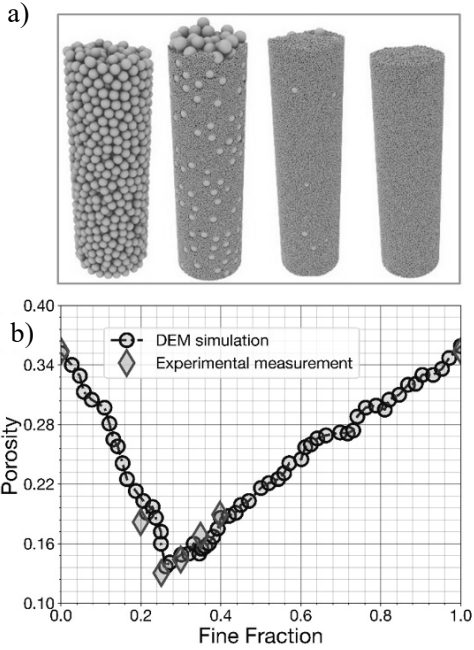
Hình 2. Mô hình mạng nơ-ron ba lớp

3. KẾT QUẢ

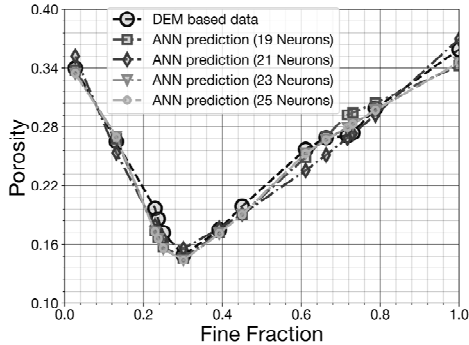
(hình 3) thể hiện kết quả mô phỏng của các mẫu với tỉ lệ đường kính hạt mịn và hạt thô (d/D) là 0.14 và tỉ lệ về khối lượng của hạt mịn và hạt thô từ 0 đến 1. Lực rung theo phương ngang với biên độ 0,0012 m và thời gian 0,08 giây được sử dụng trong mô hình để điều chỉnh độ toát xốp. Hình 3a cho thấy kết quả mô phỏng 3D của 4 trên tổng số 60 trường hợp ứng với tỉ lệ hạt mịn 0, 20, 80 và 100%. Hình 3b cho thấy sự so sánh giữa các kết quả mô phỏng bằng DEM của 60 mẫu này và 7 kết quả thực đo. Từ biểu đồ có thể nhận ra rằng có một sự khác biệt giữa kết quả mô phỏng và đo lường: giá trị nhỏ nhất của kết quả mô phỏng không nhỏ như kết quả đo đặc độ toát xốp từ thí nghiệm. Điều này có thể được giải thích như sau: hạt mịn trong mô phỏng đã không hoàn toàn lấp đầy khoảng trống giữa các hạt thô, do hệ số ma sát cao của hạt và do thời gian tác động lực ngắn và biên độ dao động nhỏ. Tuy nhiên, xét trên tổng thể, kết quả mô phỏng bằng DEM đã đạt được sự phù hợp tốt với kết quả thí nghiệm.

Hình 4 so sánh giữa độ toát xốp dựa trên ANN với số lượng nơ-ron khác nhau và bộ số liệu thu được từ DEM. Các chỉ số thống kê (R, RMSE, MAE) [1] của hiệu suất mô hình ANN cho bốn dự đoán độ xốp với những trường hợp được trình bày trong bảng 1. Từ biểu đồ hình 4 và bảng 1 ta thấy kết quả dự đoán của mô hình ANN rất sát với bộ số liệu của DEM và kết quả dự đoán khi mạng ANN dùng 23 nơ-ron tốt hơn đáng kể so với khi dùng 19 và 21 nơ-ron. Tuy nhiên khi tăng lên 25 nơ-ron, kết quả dự đoán của mô hình không có nhiều

khác biệt do trọng số của nơ ron mới ít đóng góp vào việc mô tả tính chất của dữ liệu. Điều này gợi ý rằng với bộ dữ liệu trình bày trong bài báo này, mạng ANN với 23 nơ - ron là phù hợp nhất để dự đoán độ tơi xốp.



Hình 3. Mô phỏng độ tơi xốp. (a) 04/60 Mẫu mô phỏng bởi DEM. b) Độ tơi xốp mô phỏng bởi DEM so sánh với số liệu đo đạc bởi McGeary [3]



Hình 4. ANN dự đoán độ tơi xốp

Bảng 1. Đánh giá mô hình ANN cho bộ dữ liệu kiểm tra với số lượng nơ-ron khác nhau

Nơ-ron	19	21	23	25
R	0.9837	0.9892	0.9907	0.9909
RMSE	0.0132	0.0114	0.0113	0.0112
MAE	0.0106	0.0097	0.0092	0.0090

4. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, tôi đã phát triển thành công phương pháp kết hợp DEM và ANN để dự đoán độ tơi xốp với kết quả tốt. DEM đã mô phỏng chân thật các mẫu. Dựa trên kết quả mô phỏng đó, ANN đã dự báo thành công độ tơi xốp của hạt. Phương pháp này hiệu quả với mô hình cần nhiều thời gian tính toán nhưng có nhược điểm là phát sinh thêm sai số do dự báo. Trong bước tiếp theo của nghiên cứu, để tăng chất lượng của dữ liệu huấn luyện ANN, ảnh hưởng của thủy lực đối với độ tơi xốp của hạt sẽ được xem xét bằng cách kết hợp LIGGGHT-DEM với OpenFOAM® để nghiên cứu các tương tác giữa các hạt và chất lỏng cũng như làm các thí nghiệm trên mô hình vật lý để hiệu chỉnh, nâng cao khả năng dự đoán của mô hình.

5. TÀI LIỆU THAM KHẢO:

- [1] Bùi Văn Hiệu; Bùi Minh Đức; Peter Rutschmann. 2020. The Prediction of Fine Sediment Distribution in Gravel-Bed Rivers Using a Combination of DEM and FNN. *Water*, 12(6), 10.3390/w12061515.
- [2] Bùi Văn Hiệu; Bùi Minh Đức; Peter Rutschmann. 2019. Advanced Numerical Modeling of Sediment Transport in Gravel-Bed Rivers. *Water*, 11(3), 10.3390/w11030550.
- [3] McGeary, R.K. 1961. Mechanical packing of spherical particles. *J. Am. Ceram. Soc.* 1961, 44, 513-522.
- [4] Vũ Minh Khương; Nguyễn Đăng Cường. 2004. Máy xây dựng. Nhà xuất bản xây dựng.