

# ỨNG DỤNG MẠNG TRÍ TUỆ NHÂN TẠO TÌM CỐT LIỆU TƯƠNG ĐƯƠNG CHO BÀI TOÁN TÍNH HỆ SỐ DẪN HIỆU QUẢ CỦA VẬT LIỆU KHÔNG ĐỒNG NHẤT

Nguyễn Thị Hải Như<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup>*Khoa Công nghệ Thông tin, Trường Đại học Xây dựng,  
55 đường Giải Phóng, quận Hai Bà Trưng, Hà Nội, Việt Nam*

*Nhận ngày 21/01/2021, Sửa xong 10/03/2021, Chấp nhận đăng 11/03/2021*

---

## Tóm tắt

Tính chất của các vật liệu không đồng nhất có thể được tính nhanh sử dụng các công thức xấp xỉ. Các công thức này thường chỉ áp dụng cho các trường hợp có hình dáng cốt liệu đơn giản như hình tròn và hình cầu. Trong các vật liệu thực, cốt liệu có thường có hình dáng phức tạp hoặc rất phức tạp. Mô tả đầy đủ hình dáng vật liệu bằng phương pháp phần tử hữu hạn có thể đòi hỏi lưới chia rất mịn hoặc cần dùng đến các kỹ thuật hỗ trợ khác nếu dùng phương pháp phần tử mở rộng, việc này tiêu tốn thời gian và công sức tính toán. Bài báo này ứng dụng mạng trí tuệ nhân tạo để tìm cốt liệu tương đương có hình dạng đơn giản. Với cốt liệu tương đương, các công thức giải tích tính nhanh các hệ số dẫn có thể được áp dụng nhằm đơn giản hóa bài toán.

*Từ khoá:* hệ số dẫn; vật liệu không đồng nhất; cốt liệu tương đương; mạng trí tuệ nhân tạo.

APPLICATION OF ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS SPECIFYING THE EQUIVALENT INCLUSION FOR THE EFFECTIVE CONDUCTIVITY OF HETEROGENEOUS MATERIALS

## Abstract

The effective properties of inhomogeneous materials can be estimated quickly by approximation formulas. These formulas are limited to the cases of ideal-shaped inclusions, such as circles or spheres. The shape of inclusions of actual materials is usually complex or highly complex. Describing in detail using the Finite Element Method (FEM) may require a fine mesh or need an additional technique such as using the Extended-FEM, which costs time and effort. This work employs the artificial neural network to specify the equivalent simple inclusion. With the equivalent one, simple analytic formulas estimating the conductivity are applicable for the sake of simplicity.

*Keywords:* conductivity; inhomogeneous material; equivalent inclusion; artificial neural network.

[https://doi.org/10.31814/stce.nuce2021-15\(1V\)-10](https://doi.org/10.31814/stce.nuce2021-15(1V)-10) © 2021 Trường Đại học Xây dựng (NUCE)

---

## 1. Giới thiệu

Ở mức độ vi mô, hầu hết các vật liệu nhân tạo hoặc tự nhiên đều được cấu tạo bởi nhiều thành phần. Trong thực tế, các vật liệu thường được xem có đồng nhất đẳng hướng. Tính chất đại diện cho vật liệu ở tỉ lệ lớn được gọi là tính chất hiệu quả. Điều này hoàn toàn hợp lý khi các cốt liệu được sắp xếp ngẫu nhiên và một số trường hợp bố trí cốt liệu như cách bố trí các cốt liệu theo hình tam giác đều hoặc tại tâm của một mẫu hình vuông. Phương pháp thí nghiệm được xem như đáng tin cậy nhất để xác định các tham số này. Tuy nhiên, việc thực hiện thí nghiệm yêu cầu nhiều nguồn lực về thiết

---

\*Tác giả đại diện. Địa chỉ e-mail: [nhunth@nuce.edu.vn](mailto:nhunth@nuce.edu.vn) (Như, N. T. H.)

bị, kinh phí và thời gian. Các phương pháp đồng nhất hóa khắc phục các hạn chế này để tìm kết quả dựa vào vi cấu trúc của vật liệu, bao gồm mật độ, hình dạng, bố trí hình học của các cốt liệu. Trong các phương pháp đồng nhất hóa, các phương pháp số đồng nhất hoá vật liệu như phương pháp phần tử hữu hạn FEM, phương pháp phần tử hữu hạn mở rộng XFEM, hay khai triển nhanh chuỗi Fourier FFT... cho phép mô tả một cách chi tiết cấu trúc vi mô cho kết quả rất đáng tin cậy. Mặc dù rất phổ biến trong nghiên cứu và các phòng thí nghiệm nhưng vẫn chưa đủ đơn giản để áp dụng cho các tình huống cần có kết quả nhanh. Vì vậy, cho đến nay các phương pháp cổ điển cho kết quả nhanh như các ước tính biên [1–5] hoặc các công thức giải tích tính xấp xỉ [6–11] vẫn mang ý nghĩa thiết thực và được quan tâm, sử dụng.

Ứng dụng trí tuệ nhân tạo là xu hướng chung của tất cả các lĩnh vực đời sống, kinh tế, xã hội. Tính toán vật liệu ứng dụng mạng trí tuệ nhân tạo được bắt đầu từ những năm 1990 [11], trong đó mô hình vật liệu được xây dựng từ các kết quả của thí nghiệm. Những năm gần đây, mạng trí tuệ nhân tạo ngày càng được sử dụng phổ biến, ví dụ T. Kirchdoerfer, M. Ortiz [12] đã phát triển dùng mạng neuron để giải hệ phương trình trong tính toán cơ học. Một số công trình khoa học đã sử dụng mạng ANN để thay thế qua trình giải lập phi tuyến trong bài toán đồng nhất mô hình đa tỉ lệ [13, 14]. Nhiều công trình đã sử dụng mạng trí tuệ nhân tạo để dự đoán hệ số dẫn nhiệt của vật liệu. Papari et al. [15] sử dụng mạng nơ ron để dự đoán hệ số dẫn nhiệt của các chất lỏng nano. Hojjat et al. [16] đã sử dụng một mạng neuron để dự đoán hệ số dẫn nhiệt dựa vào tỉ lệ thể tích, nhiệt độ và hệ số dẫn nhiệt của các cốt liệu  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{CuO}$  trong môi trường carboxymethyl cellulose. Các nghiên cứu tương tự đã áp dụng thành công mạng ANN có thể kể đến [17–19].

Ứng dụng ANN cho bài toán tìm cốt liệu tương đương đã được đề xuất và ứng dụng cho bài toán đàn hồi trong [20]. Bài báo này trình bày kết quả ứng dụng đề xuất đó cho bài toán tìm hệ số dẫn cho các loại cốt liệu mới. Trong phần, mục 2 giới thiệu và thảo luận một số công thức giải tích và cách tính cốt liệu tương đương đã được công bố. Tiếp đó, mục 3 tóm tắt một số khái niệm về mạng trí tuệ nhân tạo và các bước ứng dụng trí tuệ nhân tạo để tìm cốt liệu tương đương. Quá trình huấn luyện cũng như kết quả ứng dụng cho các loại cốt liệu phức tạp được trình bày trong mục 4. Cuối cùng là kết luận của bài báo

## 2. Một số công thức xấp xỉ và cách tìm cốt liệu tương đương

Xét một vật thể trong không gian  $d$  chiều ( $d = 2, 3$ ) được cấu tạo bởi  $n$  thành phần vật liệu với tỉ lệ thể tích  $v_\alpha$  và hệ số dẫn  $k_\alpha$  ( $\alpha = 1, \dots, n$ ). Thành phần thứ nhất là thành phần pha nền  $k_1 = k_M$  và  $v_1 = v_M, n - 1$  thành phần còn lại là các cốt liệu riêng rẽ, được bao quanh bởi thành phần vật liệu pha nền.

Công thức xấp xỉ phân cực cho hệ số dẫn hiệu quả  $k^{\text{eff}}$  được viết [10]:

$$k^{\text{eff}} = P_{\text{vc}}^{(n)}((d-1)k_M) \quad (1)$$

trong đó  $P_{\text{vc}}^{(n)}$  là của xấp xỉ phân cực cho vật liệu có  $n$  thành phần cốt liệu chiếm thể tích  $v$  tính hệ số dẫn. Áp dụng cho một vật liệu có hệ số dẫn của pha nền là  $k_o$  bất kì,  $P_{\text{vc}}^{(n)}$  có dạng:

$$P_{\text{vc}}^{(n)}((d-1)k_o) = \left( \sum_{\alpha=1}^n \frac{v_\alpha}{k_\alpha + (d-1)k_o} \right)^{-1} - (d-1)k_o \quad (2)$$

Hệ số dẫn tính theo (1), (2) nằm trong khoảng dự đoán của Hashin-Strickman [1]:

$$P_{\text{vc}}^{(n)}((d-1)k_{\text{max}}) \geq k^{\text{eff}} \geq P_{\text{vc}}^{(n)}((d-1)k_{\text{min}}) \quad (3)$$

trong đó  $k_{\max} = \max \{k_1, \dots, k_n\}$ ;  $k_{\min} = \min \{k_1, \dots, k_n\}$ .

Ta cũng có thể dùng xấp xỉ sai phân để dự đoán hệ số dẫn hiệu quả bằng công thức sau:

$$\frac{dk}{dt} = \frac{k}{1 - v_{It}} \sum_{\alpha=2}^n v_{\alpha} \frac{d(k_{\alpha} - k)}{k_{\alpha} + (d - 1)k^{\text{eff}}} \quad (4)$$

trong đó hệ số dẫn tại thời điểm  $t = 0$ :  $k(0) = k_1 = k_M$ ,  $0 \leq t \leq 1$ ,  $v_I = \sum_{\alpha=2}^n v_{\alpha}$ .

Trường hợp cốt liệu chỉ có 2 thành phần, ta cũng có thể dùng công thức sau [7]:

$$k^{\text{eff}} = P_{vc}^{(2)}((d - 1)\bar{k}) \quad (5)$$

trong đó  $\bar{k}$  là nghiệm của công thức tự nhất quán:

$$\bar{k} = P_{\xi c}^{(2)}((d - 1)\bar{k}) \quad (6)$$

hay

$$\bar{k} = \left( \sum_{\alpha=1}^2 \frac{\xi_{\alpha}}{k_{\alpha} + (d - 1)\bar{k}} \right)^{-1} - (d - 1)\bar{k} \quad (7)$$

hay

$$\left( \sum_{\alpha=1}^2 \frac{\xi_{\alpha}}{k_{\alpha} + (d - 1)\bar{k}} \right)^{-1} - d\bar{k} = 0, \quad (8)$$

trong đó  $\xi_1, \xi_2 \geq 0$ ,  $\xi_1 + \xi_2 = 1$ .  $\xi_{\alpha}$  là các tham số tương quan đặc trưng cho vi cấu trúc của vật liệu. Các tham số này đã được tính toán cho một số loại cấu trúc trong [8].

Nhìn chung, các công thức (2)–(8) cũng như nhiều công thức giải tích khác, chỉ cho kết quả chính xác khi tỉ lệ thể tích của các pha cốt liệu tương đối bé và có hình cầu hoặc hình tròn lý tưởng. Khi tỉ lệ thành phần các cốt liệu lớn, các công thức này thường được dùng để tính sơ bộ. Muốn áp dụng được cho vật liệu thành phần cốt liệu phức tạp hơn, ví dụ hình ellip, các tác giả [16] đã đề xuất tính quy đổi cốt liệu từ hình ellip sang hình tròn bằng cách đồng dạng hóa công thức tính hệ số dẫn hiệu quả cho hình tròn và hình ellip.

Công thức tính hệ số dẫn của một vật liệu được cấu tạo bởi các pha cốt liệu có hình dạng bất kì được viết dưới dạng:

$$k^{\text{eff}} = k_M + v_{\alpha} (k_{\alpha} + k_M) D(k_{\alpha}, k_M) \quad (9)$$

trong đó  $D(k_{\alpha}, k_M)$  là hàm của thuộc tính chất pha cốt liệu và pha nền, có công thức thay đổi theo hình dạng cốt liệu.

Trong khi đó, công thức hệ số dẫn hiệu quả cho vật liệu có cốt liệu hình cầu hoặc hình tròn lý tưởng có hệ số dẫn  $\bar{k}_{\alpha}$  được viết như sau:

$$k^{\text{eff}} = k_M + v_{\alpha} (\bar{k}_{\alpha} - k_M) \frac{dk_M}{\bar{k}_{\alpha} + (d - 1)k_M} \quad (10)$$

Lưu ý rằng, các công thức (8)–(10) được áp dụng cho trường hợp  $v_{\alpha} \ll 1$ . Cân bằng (8) và (10), [16] đã đưa ra tính chất của cốt liệu hình cầu có cùng thể tích tương đương:

$$\bar{k}_{\alpha} = \frac{dk_M^2 + (d - 1)k_M D(k_{\alpha}, k_M)}{dk_M - (k_{\alpha} - k_M) D(k_{\alpha}, k_M)} \quad (11)$$

Trong trường hợp cốt liệu cần quy đổi có hình ellip, với tỉ số các bán kính  $r_\alpha = a_\alpha/b_\alpha$ , hàm  $D(k_\alpha, k_M)$  trong (9) và (11) được viết tường minh như sau:

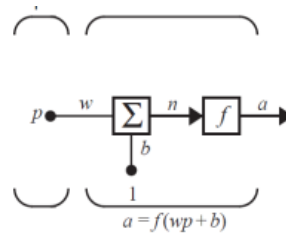
$$D(k_\alpha, k_M) = \frac{k_M(k_\alpha + k_M)(1 + r_\alpha)^2}{2(k_\alpha + r_\alpha k_M)(r_\alpha k_\alpha + k_M)} \quad (12)$$

Có thể thấy rằng, với trường hợp cốt liệu ellip, việc cân bằng hai công thức (8) và (9) cho một kết quả rõ ràng, tường minh. Thực tế có nhiều loại cốt liệu không có sẵn một công thức tính  $D(k_\alpha, k_M)$  như trường hợp này, vì thế không dễ dàng đưa ra được công thức tính cho hệ số dẫn của cốt liệu hình cầu hoặc hình tròn có cùng thể tích. Phần tiếp theo sẽ dùng phương pháp được đề nghị trong [20] để giải quyết bài toán.

### 3. Tính toán tính chất của cốt liệu tương đương sử dụng mạng trí tuệ nhân tạo ANN

#### 3.1. Mạng trí tuệ nhân tạo

Trong mục này, một số khái niệm cơ bản về mạng trí tuệ nhân tạo sẽ được trình bày. Hình 1 mô tả một neuron đơn vị, trong đó  $p$  là đầu vào,  $w$  là các trọng số,  $b$  là tham số điều chỉnh,  $f$  là hàm chuyển hay còn gọi là hàm kích hoạt và  $a$  là đầu ra của neuron.

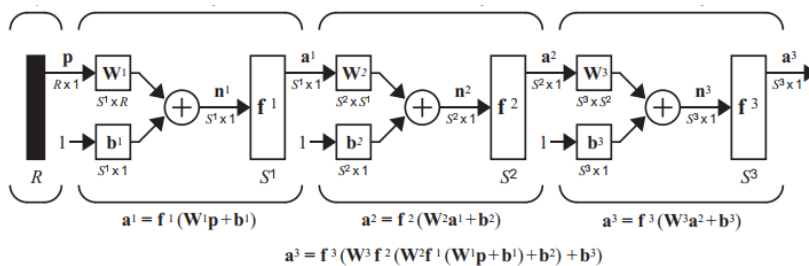


Hình 1. Một nơ-ron đơn vị [17]

Khi có nhiều trường dữ liệu đầu vào, ta có thể viết:

$$\mathbf{a}^k = \mathbf{f} \left( \sum_{i=1}^m \mathbf{w}_k \mathbf{p} + \mathbf{b}_k \right) \quad (13)$$

trong đó các kí hiệu in đậm biểu thị đại lượng là một véc tơ,  $m$  là số lớp của mạng,  $k$  biểu thị lớp thứ  $k$  trong mạng. Thông thường, một mạng ANN với một lớp ẩn có thể mô tả được một hàm số học bất kì. Hình 2 mô tả một mạng neuron nhiều lớp, trong đó các lớp ở giữa (không phải lớp đầu vào và đầu ra) được gọi là các lớp ẩn. Các lớp ẩn có thể có các hàm chuyển khác nhau.



Hình 2. Mạng nơ-ron nhiều lớp (MPL) [17]:  $f^1, f^2, f^3$  là các hàm chuyển của lớp 1,2,3 được chọn trước khi huấn luyện. Quá trình huấn luyện sẽ tìm ra các trọng số  $\mathbf{w}$  và  $\mathbf{b}$  sao cho hàm mất mát đạt cực tiểu

Trong tính toán vật liệu, ANN thường được ứng dụng làm mô hình thay thế. Để tìm mô hình này, ta chọn trước kiến trúc mạng và thực hiện huấn luyện. Mục đích của quá trình huấn luyện là tìm  $\mathbf{w}$ ,  $\mathbf{b}$  sao cho sai số giữa tập kết quả tính toán dùng mạng ANN và tập kết quả huấn luyện là nhỏ nhất, thể hiện qua hàm mất mát. Tùy thuộc loại bài toán, các hàm mất mát được định nghĩa khác nhau. Trong các bài toán thoái hóa, hàm sai số bình phương MSE (mean squared error) được dùng phổ biến và hiệu quả.

### 3.2. Hệ số dẫn tương đương sử dụng ANN

Để tìm hệ số dẫn tương đương, bài báo này sử dụng 2 mạng trí tuệ nhân tạo Net 1 và Net 2 theo phương pháp đã được đề xuất trong [20] cho bài toán tìm hệ số đàn hồi. Net 1 dùng để tính toán hệ số dẫn hiệu quả của cho phần tử đại diện có hình dáng cốt liệu phức tạp, Net 2 dùng để tìm hệ số dẫn của cốt liệu hình tròn có cùng diện tích. Ở đây, phương pháp được áp dụng cho hệ số dẫn với một số hình dáng cốt liệu mới. Hình dáng cốt liệu được mô tả dựa vào một hàm level-set:

$$\phi = \left( \frac{x - x_c}{r} \right)^{2q} + \left( \frac{y - y_c}{r} \right)^{2q} - 1 \quad (14)$$

trong đó  $x_c, y_c$  là tọa độ tâm của cốt liệu;  $r = r_0 + A \cos(B\theta)$  là bán kính cốt liệu, góc  $\theta$  dùng để quy đổi về hệ tọa độ cầu,  $x = x_c + r \cos(\theta)$ ,  $y = y_c + r \sin(\theta)$ . Hình dạng cốt liệu thay đổi khi  $A, B, q, r_0$  thay đổi. Tại biên của cốt liệu  $\phi$  bằng 0, giá trị của hàm  $\phi$  nhỏ hơn 0 tại điểm bên trong cốt liệu và lớn hơn 0 nếu ở bên ngoài cốt liệu.

Trong bài toán tìm nhân tương đương để tính toán hệ số dẫn nhiệt hiệu quả, các thông số đầu vào của Net 1 bao gồm hệ số dẫn của pha nền  $k_M$  và các pha cốt liệu  $k_\alpha$  với thể tích cốt liệu  $v_\alpha$  chọn trước, thông số đầu ra của Net 1 là hệ số dẫn hiệu quả  $k^{eff}$ . Thông số đầu vào của Net 2 gồm  $k_M$  và  $k^{eff}$ , dữ liệu đầu ra là hệ số dẫn của cốt liệu tròn tương đương  $\bar{k}_{equ}$ . Lưu ý rằng cốt liệu tương đương ở đây được chọn có cùng thể tích với cốt liệu ban đầu.

Trình tự xây dựng các mô hình thay thế và cách tính toán cốt liệu tương đương được mô tả như sau:

- Bước 1: Xác định tập dữ liệu đầu ứng với tính chất vật liệu của của pha nền và các cốt liệu cho Net 1. Trong bài toán hệ số dẫn nhiệt, với một thể tích cốt liệu chọn trước, khoảng dữ liệu có thể được viết gồm  $[k_M^{min}, k_\alpha^{min}] : [k_M^{max}, k_\alpha^{max}]$ . Các bộ dữ liệu được chọn ngẫu nhiên trong khoảng sử dụng một loại phân bố nào đó, ví dụ như phân bố chuẩn, phân bố halton set ... Chú ý rằng mô hình chỉ áp dụng được nếu dữ liệu nằm trong khoảng trên.

- Bước 2: Sử dụng mô hình số (FEM, XFEM) để tạo dữ liệu tương ứng  $k^{eff}$ . Đây chính là dữ liệu đầu ra của Net 1.

- Bước 3: Chọn kiến trúc mạng ANN gồm số lớp ẩn, số nút tương ứng, hàm kích hoạt, hàm mất mát, giải thuật huấn luyện và các thông số tương ứng như tỉ lệ học, mse kì vọng... và xác định mô hình thay thế.

- Bước 4: Xây dựng dữ liệu cho Net 2. Dữ liệu của Net 2 được xây dựng dựa trên dữ liệu của Net 1. Thông số vật liệu của các cốt liệu tròn chính là dữ liệu đầu ra của dữ liệu của Net 2. Ước lượng của thông số này cần đủ rộng để tạo ra được khoảng dữ giống với dữ liệu đầu ra (tính chất hiệu quả) của Net 1. Tính chất hiệu quả và tính chất pha nền là dữ liệu đầu vào của Net 2.

- Bước 5: Tương tự bước 3, ta đi tìm được mô hình (Net 2) tốt nhất có thể bằng cách thay đổi kiến trúc mạng và các thông số huấn luyện.

- Bước 6: Tính toán thông số vật liệu tương đương bằng cách sử dụng các mô hình Net 1 và Net 2 huấn luyện được. Dữ liệu ban đầu được đưa vào Net 1 để tìm tính chất hiệu quả, sau đó kết quả này cùng với tính chất của pha nền trở thành dữ liệu đầu vào của Net 2 để tìm ra tính chất của cốt liệu tương đương.

Trình tự thực hiện các bước sẽ được minh họa đầy đủ thông qua các ví dụ ở mục 4.

## 4. Ví dụ áp dụng

Trong mục này, các bước tính toán trong 3.2 sẽ được áp dụng cho một số loại cốt liệu. Trình tự các bước xây dựng dữ liệu và thông số huấn luyện, kết quả tính toán sẽ được trình bày cụ thể. Kết quả

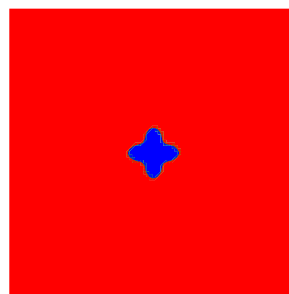
số khi sử dụng cốt liệu tương đương sẽ được so sánh với kết quả ban đầu.

#### 4.1. Cốt liệu II

Để tạo dữ liệu huấn luyện cho mẫu II (Hình 3), bài báo này lựa chọn  $r_0 = 0,05$  mm ứng với tỉ lệ thể tích cốt liệu  $v = 1,03\%$ . Hệ số dẫn của cốt liệu ở đây được giả thiết luôn lớn hơn hệ số dẫn của pha nền. Trong tính toán số tạo bộ dữ liệu, các mẫu sử dụng khoảng 45000 phần tử tam giác bậc 1, kích thước phần tử tương ứng ( $hsize \approx 0,0067$  mm).

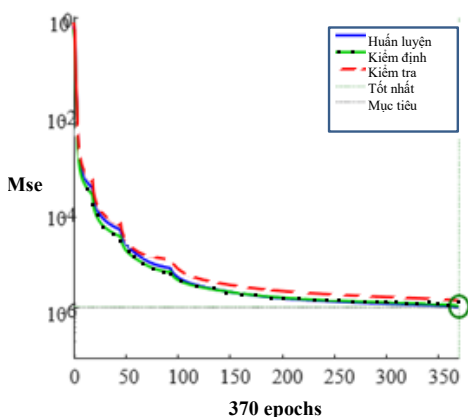
Tuy Net 1 chỉ dùng 2 trường dữ liệu đầu vào, nhưng không có sẵn công thức giải tích dành riêng cho vật liệu có hình dáng cốt liệu này. Sử dụng mô hình tương đương tìm hệ số hiệu quả sẽ không cần đến các phần mềm sử dụng phương pháp số. Đầu ra của Net 1 là hệ số dẫn hiệu quả cùng với hệ số dẫn của pha nền sẽ là dữ liệu đầu vào cho Net 2 để tính toán tính chất của cốt liệu tương đương. Dữ liệu đầu vào của Net 1 nằm trong khoảng  $[0,0039 \ 0,0544] : [2,9847 \ 101,7675]$ , trong khi của Net 2 nằm trong khoảng  $[0,0039 \ 0,0040] : [2,9847 \ 3,0434]$ .

Mạng được huấn luyện sử dụng Neural Network toolbox của Matlab, giải thuật Levenberg-Marquardt, hàm kích hoạt dùng tag-sigmoid, tỉ lệ học  $10^{-5}$ , hàm mục tiêu là sai số toàn phương trung bình (mean squared error- mse). Kích thước bộ dữ liệu là 500, trong đó kích thước tập huấn luyện chiếm 70%, tập kiểm tra chiếm 15%, tập kiểm định 15%. Quá trình huấn luyện đã sử dụng nhiều cấu trúc mạng khác nhau và kết quả huấn luyện cho thấy: trong khi Net 1 có thể nhanh chóng đạt được sai số rất bé như trên Hình 4(a) (mse của tập huấn luyện và tập kiểm định tương ứng là  $9,997 \text{ E-}7$ , của tập kiểm định là  $1,004 \text{ E-}6$ ), Net 2 cần thời gian huấn luyện lâu hơn và không dễ đạt được sai số nhỏ như Net 1. Trên



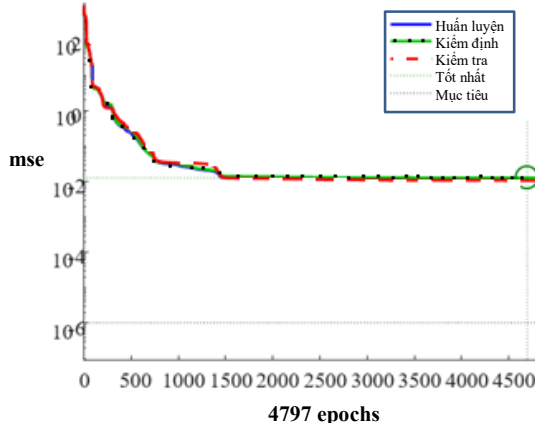
Hình 3. Mẫu vật liệu với cốt liệu có hình dáng phức tạp. Hình dáng cốt liệu được mô tả sử dụng hàm level set với  $q = 2, r_0 = 0,05, A = 0,4 \times r_0, B = 4$

mse của tập kiểm định đạt  $1.0339\text{e-}6$  tại epoch 370



(a) Net 1 (II)

mse của tập kiểm định đạt  $0.01242$  tại epoch 4697



(b) Net 2 (II)

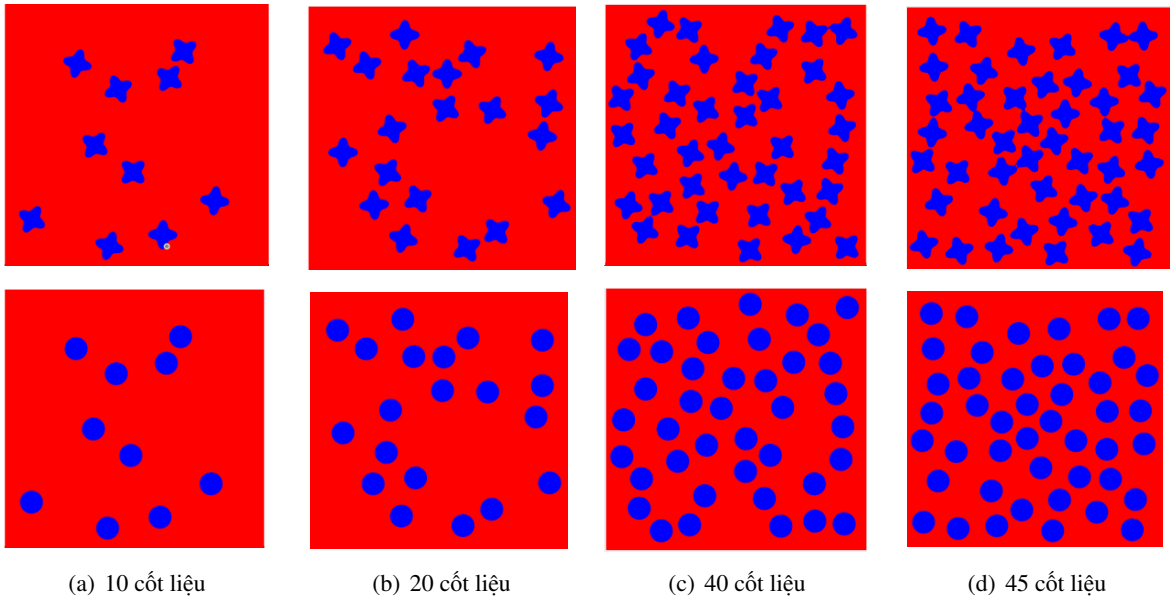
Hình 4. Biểu đồ hiệu năng (mse) của quá trình huấn luyện Net 1 (II) và Net 2 (II)

Hình 4(b), mse của tập huấn luyện là 0,0113, của tập kiểm định là 0,0124. Net 1 chỉ cần 1 lớp ẩn với 2 nút trong khi Net 2 cần đến 2 lớp ẩn với 3 nút để có thể đạt được sai số tương đối bé.

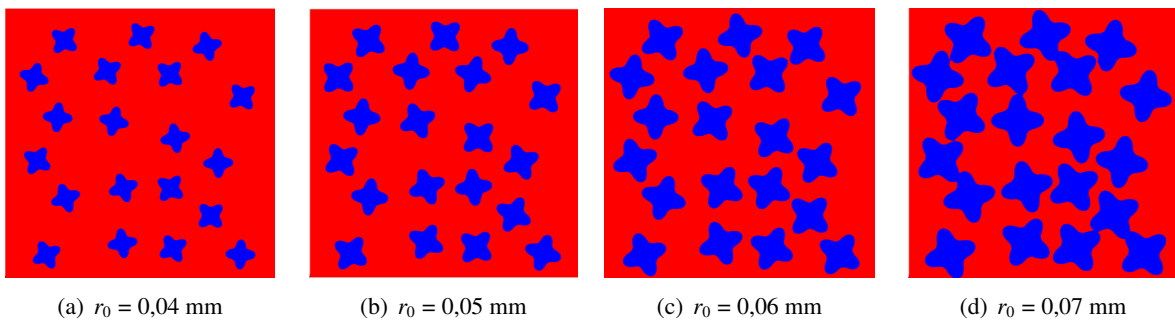
Sử dụng Net 1 và Net 2 nói trên với mẫu có cốt liệu II, có các hệ số của pha nền và cốt liệu tương ứng là  $k_M = 2 \text{ N/mm}^2$ ,  $k_I = 55 \text{ N/mm}^2$ , ta tính được hệ số dẫn của cốt liệu tương đương cùng diện tích  $k_{equ} = 500,74 \text{ N/mm}^2$ . Các thông số trên được sử dụng để tính sử dụng để tính hệ số dẫn hiệu quả của các mẫu chứa các cốt liệu II và cốt liệu hình tròn tương đương cùng vị trí như trong 2 trường hợp:

- TH1 – II: Tỷ lệ thể tích cốt liệu tăng bằng cách tăng số lượng như Hình 5. Số cốt liệu trong mẫu tăng dần từ 10 đến 45, vị trí và góc quay của các cốt liệu được lấy một cách ngẫu nhiên.

- TH2 – II: Tỷ lệ thể tích cốt liệu tăng bằng cách tăng bán kính, vị trí và số lượng của các cốt liệu được giữ nguyên. Các mẫu trên Hình 6 gồm 20 cốt liệu, bán kính tăng dần đều  $r_0 = 0,03 \text{ mm}$  đến  $r_0 = 0,07 \text{ mm}$ .

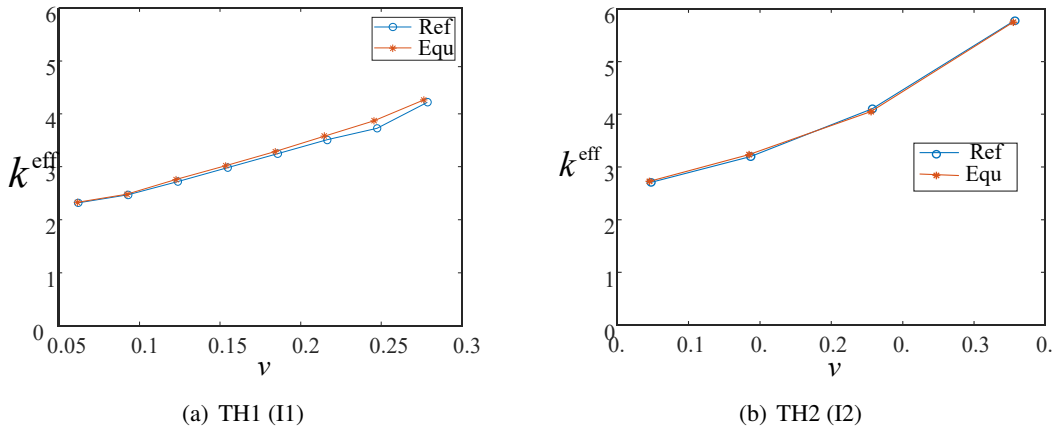


Hình 5. TH1: Các mẫu có kích thước  $1 \times 1 \text{ mm}^2$  với các cốt liệu bố trí tại các vị trí và góc xoay ngẫu nhiên (hàng trên: các mẫu các cốt liệu II; hàng dưới: các cốt liệu hình tròn cùng vị trí tương ứng)



Hình 6. TH2: Các mẫu có kích thước  $1 \times 1 \text{ mm}^2$  với 20 cốt liệu II bố trí tại các vị trí và góc xoay ngẫu nhiên, bán kính tăng dần từ  $r_0 = 0,04 \text{ mm}$  đến  $r_0 = 0,07 \text{ mm}$

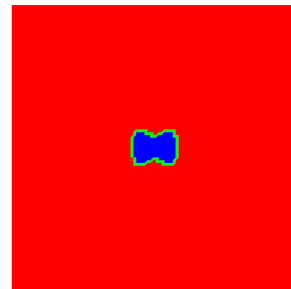
Hình 7(a)–7(b) so sánh hệ số dẫn hiệu quả tính bằng phương pháp số (XFEM) của các mẫu cốt liệu I1 (đường Ref) và cốt liệu hình tròn tương đương (đường Equ) tương ứng với TH1 và TH2. Ta thấy rằng, trên cả hai hình, đường Equ và đường bám sát nhau khi tỉ lệ thể tích cốt liệu ( $\nu$ ) nhỏ. Khi  $\nu$  tăng, khoảng cách giữa 2 đường tăng lên khi tỉ lệ thể tích tăng.



Hình 7. So sánh kết hệ số dẫn hiệu quả tính bằng XFEM của cốt liệu I1 (Ref) và cốt liệu tròn tương đương (Equ) khi tăng tỉ lệ thể tích của các hạt cốt liệu trong hai trường hợp TH1 và TH2

#### 4.2. Cốt liệu I2

Tiếp tục dùng một mẫu với bán kính  $r = 0,05$  để tạo dữ liệu huấn luyện cho mẫu I2 (Hình 8), ứng với tỉ lệ thể tích cốt liệu  $\nu = 0,96\%$ . Kích thước bộ dữ liệu là 500, trong đó kích thước tập huấn luyện chiếm 70%, tập kiểm tra chiếm 15%, tập kiểm định 15%. Dữ liệu đầu vào của Net 1 nằm trong khoảng  $[0,0039 \ 0,0544] : [2,9847 \ 101,7675]$ , trong khi của Net 2 nằm trong khoảng  $[0,0039 \ 0,0040] : [2,9847 \ 3,0434]$ . Kết quả huấn luyện trên Hình 9 cho thấy, trong khi Net 1 có thể nhanh chóng đạt được sai số rất bé như trên Hình 1(a) (mse của tập huấn luyện và tập kiểm định tương ứng là  $9,995 \text{ E-}7$ , của tập kiểm định là  $1,18 \text{ E-}6$ ), Net 2 cần thời gian huấn luyện lâu hơn và không dễ đạt được sai số nhỏ như Net 1. Trên Hình 1(b), mse của tập huấn luyện là  $0,0104$ , của tập kiểm định là  $0,0112$ ). Net 1 chỉ cần 1 lớp ẩn với 2 nút trong khi Net 2 cần đến 2 lớp ẩn  $\times$  3 nút mới có thể đạt được sai số tương đối bé.

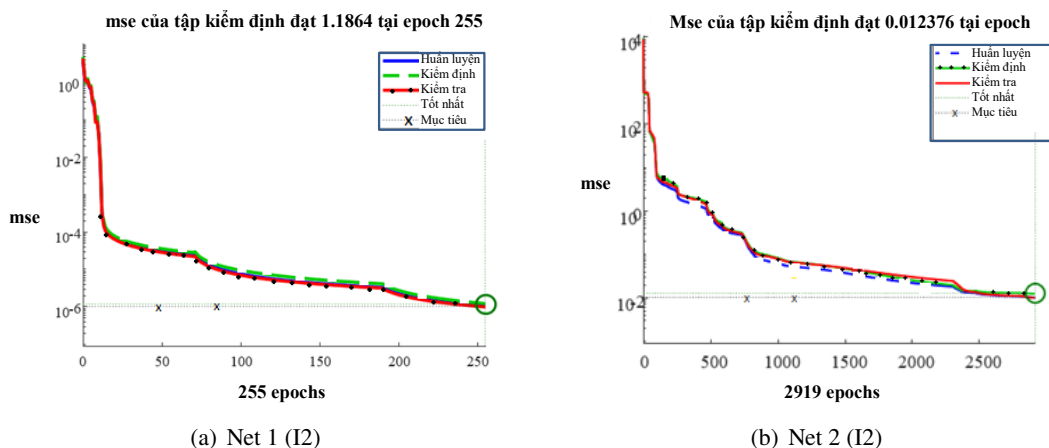


Hình 8. Mẫu vật liệu với cốt liệu có hình dáng phức tạp. Hình dáng cốt liệu được mô tả sử dụng hàm level set với  $q = 20, r_0 = 0,05, A = 0,3 * r_0, B = 2$

Sử dụng mô hình đề xuất Net 1 (I2) và Net 2 (I2) để tính hệ số dẫn tương đương ta có 2 bộ số liệu và áp dụng cho 2 trường hợp:

a) TH1- I2:  $k_M = 1,5 \text{ N/mm}^2, k_I = 15 \text{ N/mm}^2, k_{equ} = 25,71 \text{ N/mm}^2$ . Bộ số liệu được kiểm thử với các 8 mẫu có kích thước  $1 \times 1 \text{ mm}$ , chứa các cốt liệu có bán kính  $r_0 = 0.04 \text{ mm}$ . Số lượng cốt liệu tăng dần đều từ 15 đến 45. Vị trí và góc xoay của các cốt liệu được lấy ngẫu nhiên như trên Hình 11.

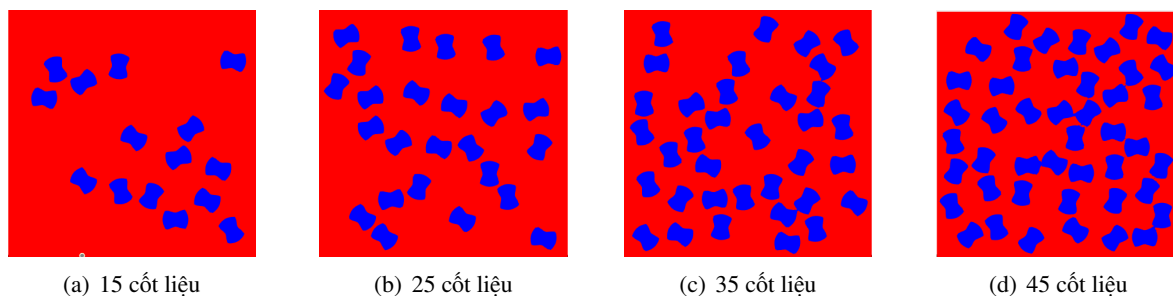




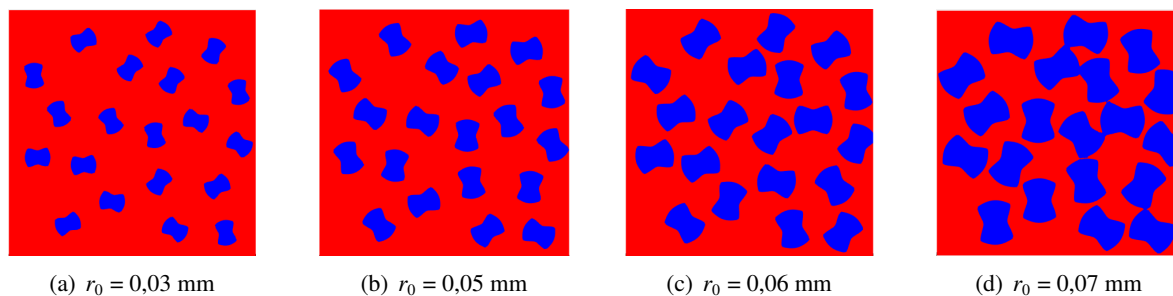
Hình 9. Biểu đồ hiệu năng (MSE) của quá trình huấn luyện Net 1 (I2) và Net 2 (I2)

b) TH2 - I2:  $k_M = 1 \text{ N/mm}^2$ ,  $k_I = 20 \text{ N/mm}^2$ ,  $k_{equ} = 136,70 \text{ N/mm}^2$ . Bộ số liệu được kiểm thử với mẫu có 20 cốt liệu cùng vị trí. Bán kính của cốt liệu thay đổi với  $r_{0-\min} = 0,03 \text{ mm}$ ,  $r_{0-\max} = 0,07 \text{ mm}$ .

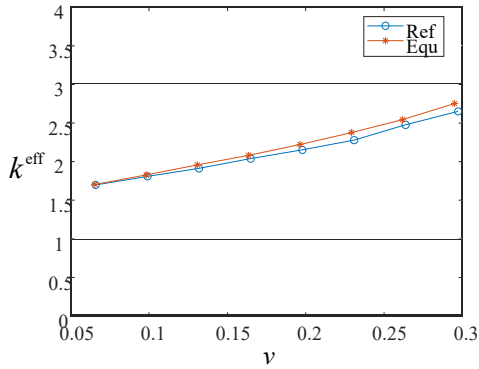
Tương tự như trường hợp cốt liệu I1, các kết quả số của mẫu sử dụng cốt liệu I2 và mẫu có cốt liệu tròn tương đương được so sánh trên Hình 12 và Hình 13 cho thấy sự tương đương giữa hệ số hiệu quả của hai loại cốt liệu khi thể tích cốt liệu bé. Sai số có xu hướng tăng dần khi thể tích cốt liệu tăng. Cụ thể trên Hình 13, khi thể tích cốt liệu chiếm đến 40%, sai số có thể lên đến 10%. Một nguyên nhân khác có thể làm tăng sai số cho trường hợp này là do mô hình thay thế không cho độ chính xác như nhau đối với các bộ dữ liệu khác nhau.



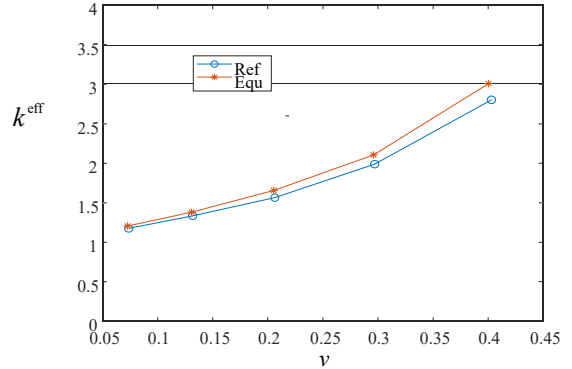
Hình 10. Các mẫu có kích thước  $1 \times 1 \text{ mm}^2$  với các cốt liệu hình I2 bố trí tại các vị trí và góc xoay ngẫu nhiên



Hình 11. Các mẫu có kích thước  $1 \times 1 \text{ mm}^2$  với 20 cốt liệu I1 bố trí tại các vị trí và góc xoay ngẫu nhiên với các mẫu  $r_0 = 0,04 \text{ mm}$  đến  $r_0 = 0,07 \text{ mm}$



Hình 12. So sánh kết hệ số dẫn hiệu quả tính bằng XFEM của cốt liệu I2 (Ref) và cốt liệu hình tròn tương đương (Equ). Tỷ lệ thể tích cốt liệu tăng dần bằng cách tăng số lượng cốt liệu (TH1-I2)



Hình 13. So sánh kết hệ số dẫn hiệu quả tính bằng XFEM của cốt liệu I2 (Ref) và cốt liệu hình tròn tương đương (Equ). Tỷ lệ thể tích cốt liệu tăng dần bằng cách tăng bán kính cốt liệu (TH2-I2)

## 5. Kết luận

Bài báo này đã trình bày ứng dụng mạng trí tuệ nhân tạo ANN để tính toán hệ số dẫn cho cốt liệu hình tròn tương đương, áp dụng cho một số loại cốt liệu phức tạp. Kết quả bài báo cho thấy, so với việc tính toán hệ số cốt liệu tương đương dựa vào công thức xấp xỉ giải tích chỉ áp dụng được khi các công thức giải tích là có sẵn, sử dụng mạng trí tuệ nhân tạo, đa dạng các loại cốt liệu có thể tìm thấy cốt liệu tương đương hình tròn. Sử dụng mô hình thay thế ứng dụng mạng trí tuệ nhân tạo để tính cốt liệu hình tròn tương đương cho kết quả khả quan nhất là khi tỷ lệ thể tích cốt liệu bé. Tuy nhiên, việc sử dụng mạng trí tuệ nhân tạo cũng có hạn chế nhất định về việc phạm vi ứng dụng bởi mô hình thay thế cho kết quả không chính xác nếu chúng ta sử dụng ANN để ngoại suy. Bên cạnh đó, hiệu năng huấn luyện của Net 2 trong bài không cao như Net 1. Điều này ảnh hưởng đến kết quả của bài toán. Đây là vấn đề cần được nghiên cứu thêm để nâng cao hiệu quả của phương pháp.

## Lời cảm ơn

Tác giả chân thành cảm ơn sự hỗ trợ tài chính của Trường Đại học Xây dựng cho đề tài: “Tính toán các thông số vật liệu tương đương của pha cốt liệu trong vật liệu không đồng nhất bằng cách tiếp cận hướng dữ liệu”, mã số: 36-2020/KHXD.

## Tài liệu tham khảo

- [1] Hashin, Z., Shtrikman, S. (1962). [A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials](#). *Journal of Applied Physics*, 33(10):3125–3131.
- [2] Miller, M. N. (1969). [Bounds for effective electrical, thermal, and magnetic properties of heterogeneous materials](#). *Journal of Mathematical Physics*, 10(11):1988–2004.
- [3] Phan-Thien, N., Milton, G. W. (1982). [New bounds on the effective thermal conductivity of N-phase materials](#). *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 380 (1779):333–348.
- [4] Le Chau, K., Chinh, P. D. (1991). [On bounding the effective conductivity of isotropic composite materials](#). *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, 42(4):614–622.

- [5] Chinh, P. D. (2011). [Bounds on the effective conductivity of statistically isotropic multicomponent materials and random cell polycrystals](#). *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59(3):497–510.
- [6] Tran, A. B., Vu, M. N., Nguyen, S. T., Dong, T. Q., Le-Nguyen, K. (2018). [Analytical and numerical solutions for heat transfer and effective thermal conductivity of cracked media](#). *Journal of Applied Geophysics*, 149:35–41.
- [7] Pham, D. C., Torquato, S. (2003). [Strong-contrast expansions and approximations for the effective conductivity of isotropic multiphase composites](#). *Journal of Applied Physics*, 94(10):6591–6602.
- [8] Torquato, S. *Random Heterogeneous Media*. Springer, New York.
- [9] Do, Q. H., Tran, A. B., Pham, D. C. (2016). [Equivalent inclusion approach and effective medium approximations for the effective conductivity of isotropic multicomponent materials](#). *Acta Mechanica*, 227(2): 387–398.
- [10] Tran, A. B., Vu, M. N., Nguyen, S. T., Dong, T. Q., Le-Nguyen, K. (2018). [Analytical and numerical solutions for heat transfer and effective thermal conductivity of cracked media](#). *Journal of Applied Geophysics*, 149:35–41.
- [11] Ghaboussi, J., Garrett Jr, J. H., Wu, X. (1991). [Knowledge-based modeling of material behavior with neural networks](#). *Journal of Engineering Mechanics*, 117(1):132–153.
- [12] Kirchdoerfer, T., Ortiz, M. (2016). [Data-driven computational mechanics](#). *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 304:81–101.
- [13] Le, B. A., Yvonnet, J., He, Q.-C. (2015). [Computational homogenization of nonlinear elastic materials using neural networks](#). *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 104(12):1061–1084.
- [14] Lu, X., Giovanis, D. G., Yvonnet, J., Papadopoulos, V., Detrez, F., Bai, J. (2019). [A data-driven computational homogenization method based on neural networks for the nonlinear anisotropic electrical response of graphene/polymer nanocomposites](#). *Computational Mechanics*, 64(2):307–321.
- [15] Papari, M. M., Yousefi, F., Moghadasi, J., Karimi, H., Campo, A. (2011). [Modeling thermal conductivity augmentation of nanofluids using diffusion neural networks](#). *International Journal of Thermal Sciences*, 50(1):44–52.
- [16] Hojjat, M., Etemad, S. G., Bagheri, R., Thibault, J. (2011). [Thermal conductivity of non-Newtonian nanofluids: experimental data and modeling using neural network](#). *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(5-6):1017–1023.
- [17] Longo, G. A., Zilio, C., Ceseraciu, E., Reggiani, M. (2012). [Application of artificial neural network \(ANN\) for the prediction of thermal conductivity of oxide–water nanofluids](#). *Nano Energy*, 1(2):290–296.
- [18] Esfe, M. H., Saedodin, S., Bahiraei, M., Toghraie, D., Mahian, O., Wongwises, S. (2014). [Thermal conductivity modeling of MgO/EG nanofluids using experimental data and artificial neural network](#). *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 118(1):287–294.
- [19] Esfe, M. H., Saedodin, S., Asadi, A., Karimipour, A. (2015). [Thermal conductivity and viscosity of Mg \(OH\) 2-ethylene glycol nanofluids](#). *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 120(2):1145–1149.
- [20] Nhu, N. T. H., Binh, T. A., Hung, H. M. (2020). [Equivalent-inclusion approach for estimating the effective elastic moduli of matrix composites with arbitrary inclusion shapes using artificial neural networks](#). *Journal of Science and Technology in Civil Engineering (STCE)-NUCE*, 14(1):15–27.