

Dự báo cường độ chịu nén của bê tông xi măng cốt sợi kết hợp nano-silica bằng mô hình tăng cường độ dốc cấp cao có tinh chỉnh các siêu tham số bằng phương pháp tìm kiếm ngẫu nhiên

■ TS. MAI THỊ HẢI VÂN

Trường Đại học Công nghệ Giao thông vận tải
Email: vanmth@utt.edu.vn

TÓM TẮT: Bê tông xi măng cốt sợi sử dụng phụ gia nano-silica (BTCNS) có nhiều ưu điểm nổi bật như tăng cường độ nén, tăng cường độ uốn, hạn chế nứt... nên được sử dụng nhiều trong xây dựng, giao thông, đặc biệt là các kết cấu chịu lực lớn, tuổi thọ cao. Cường độ chịu nén (CĐ) là một chỉ tiêu cơ học quan trọng của BTCNS cần xác định. Mục tiêu của nghiên cứu là xây dựng và đề xuất được một mô hình máy học để dự báo cường độ chịu nén của BTCNS hiệu quả, nhanh chóng và chính xác. Trong nghiên cứu này, mô hình tăng cường độ dốc cấp cao (XGB) được lựa chọn để nghiên cứu. Bộ dữ liệu sử dụng gồm 175 dữ liệu thí nghiệm có sẵn, thu thập được từ các bài báo quốc tế uy tín. Bằng cách tinh chỉnh các siêu tham số của mô hình XGB bằng phương pháp tìm kiếm ngẫu nhiên đã đề xuất được một mô hình XGB tối ưu có hiệu dự báo cường độ chịu nén của BTCNS cao, kết quả đáng tin cậy. Ngoài ra, nghiên cứu cũng đưa ra một hướng dẫn sử dụng mô hình XGB đề xuất. Hướng dẫn này giúp người sử dụng có thể dễ dàng, nhanh chóng dự báo chính xác được cường độ chịu nén của BTCNS khi giá trị các thông số đầu vào thay đổi, mà không cần thực hiện thí nghiệm.

TỪ KHÓA: Cường độ chịu nén, bê tông xi măng cốt sợi, Nano-silica, mô hình tăng cường độ dốc cấp cao, tìm kiếm ngẫu nhiên.

ABSTRACT: Fiber-reinforced concrete incorporating nano-silica (FRCNS) has many outstanding advantages, such as increased compressive strength, increased flexural strength, and limited cracking... so it is widely used in construction, transportation, especially structures that bear heavy loads and have long lifespans. Compressive strength is an important mechanical criterion of FRCNS that needs

to be determined. In this study, the Extreme gradient boosting model (XGB) is selected for research. The dataset used includes 175 available experimental samples, collected from reputable international articles. Using the random search method for hyperparameter tuning of the XGB model, an optimal XGB model that accurately predicts the compressive strength of FRCNS with dependable outcomes has been proposed. The study also provides a guide for using the proposed XGB model. This guide helps users easily and quickly predict the compressive strength of FRCNS when the values of input parameters change without doing experiments.

KEYWORDS: Compressive strength, fibre-reinforced concrete, Nano-silica, extreme gradient boosting, random research.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Bê tông cốt sợi có nhiều ưu điểm nổi bật hơn so với bê tông thường như cường độ chịu kéo, độ mài mòn, khả năng chống va đập cao, kiểm soát sự lan truyền vết nứt, chịu được biến dạng lớn... tùy thuộc vào loại sợi gia cường (sợi thép, sợi polypropylen, thủy tinh...). Khi sử dụng kết hợp một hàm lượng thích hợp nano silica cho bê tông cốt sợi, các hạt nano silica sẽ lấp đầy các lỗ rỗng trong hồ xi măng, từ đó cải thiện các tính chất cơ học của bê tông như tăng cường độ nén, cường độ uốn [1, 2]. Hơn nữa, vùng chuyển tiếp bề mặt được coi là điểm yếu của vật liệu bê tông. Khi sử dụng nano silica, vùng điểm yếu này được tăng cường do các hạt nano silica sẽ lấp đầy các khoảng trống và lỗ rỗng, giảm tính thấm của vật liệu bê tông [3]. Nhờ những tính năng nổi bật trên nên bê tông cốt sợi kết hợp nano silica (BTCNS) thường được sử dụng trong xây dựng các kết cấu bền vững, chịu tải trọng lớn như công trình cầu đường, công trình thoát nước hay cầu cảng.

Cường độ chịu nén (CĐ) là một trong những chỉ tiêu cơ lý quan trọng của hỗn hợp bê tông. Dựa vào CĐ có thể trực tiếp hoặc gián tiếp đánh giá một số đặc tính cơ học và độ bền của bê tông [4, 5]. Phương pháp thông thường để xác định CĐ hiện nay là phương pháp thí nghiệm. Việc đúc mẫu và quá trình tiến hành thí nghiệm có thể gây lãng phí thời gian và chi phí, đặc biệt là khi kết quả thí nghiệm không đạt yêu cầu cần phải tiến hành lại, thiết kế lại hỗn hợp bê tông. Để khắc phục các hạn chế này, một số mô hình dự báo độ bền của vật liệu đang được áp dụng như mô hình hồi quy, mô hình máy học. Trong đó, mô hình máy học gần đây đang phát triển mạnh mẽ do có nhiều ưu điểm như: Có thể dự báo nhanh chóng, tiết kiệm chi phí thí nghiệm, tận dụng được các kết quả thí nghiệm đã có sẵn. Ngoài ra, phương pháp máy học có thể giải quyết các bài toán có nhiều tham số đầu vào và mối quan hệ giữa các tham số đầu vào và đầu ra không được mô tả bằng các phương trình toán học. Vì vậy, mô hình máy học rất có tiềm năng trong bài toán dự báo cường độ chịu nén của vật liệu BTCNS.

Trong nghiên cứu này, một mô hình máy học tăng cường độ dốc cấp cao được xây dựng để dự báo CĐ của BTCNS. Để tinh chỉnh các siêu tham số của mô hình, phương pháp tìm kiếm ngẫu nhiên được sử dụng. Kết quả tìm kiếm đã chọn ra được một mô hình XGB có năng lực dự báo CĐ của BTCNS rất đáng tin cậy, thể hiện qua các chỉ số đánh giá R^2 cao và các sai số (MAE, RMSE, MAPE thấp) cho cả giai đoạn đào tạo và kiểm tra. Ngoài ra, một hướng dẫn sử dụng mô hình XGB thông qua biểu đồ GUI được trình bày. Hướng dẫn này giúp cho người thiết kế có thể dễ dàng, nhanh chóng dự báo được CĐ khi thay đổi giá trị các thành phần hỗn hợp BTCNS.

2. CƠ SỞ DỮ LIỆU

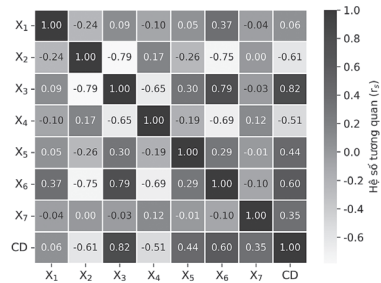
Cơ sở dữ liệu đóng vai trò quan trọng trong việc đào tạo và kiểm tra các mô hình AIML. Trong nghiên cứu này, để xây dựng mô hình ML, một bộ gồm 175 dữ liệu được thu thập từ các bài báo quốc tế uy tín [6]. Cơ sở dữ liệu bao gồm 7 tham số đầu vào (X_1, X_7) là các yếu tố liên quan đến cường độ chịu nén của BTCNS và một tham số đầu ra chính là cường độ chịu nén của BTCNS (ký hiệu là CĐ). Các phân tích thống kê của bộ dữ liệu được tiến hành và kết quả chi tiết được trình bày ở Bảng 2.1.

Bảng 2.1. Phân tích cơ sở dữ liệu

Tên tham số	Hàm lượng sợi	Tỷ lệ cốt liệu lớn / Cốt liệu nhỏ	Hàm lượng bột đá vôi	Tỷ lệ nước / Chất kết dính	Hàm lượng Nano silica	Tỷ lệ phụ gia siêu dẻo/ Chất kết dính	Tuổi của mẫu	Cường độ chịu nén
Ký hiệu	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	CĐ
Đơn vị	%	-	kg/m ³	-	kg/m ³	-	ngày	MPa
Số lượng dữ liệu	175	175	175	175	175	175	175	175
Trung bình	0,20	0,91	198,10	0,41	21,21	0,02	42,49	66,48
Độ lệch chuẩn	0,18	0,06	134,50	0,04	17,30	0,01	37,70	17,83
Nhỏ nhất	0	0,874	0	0,31	0	0,005	7	19,1
25%	0,1	0,874	0	0,39	0	0,017	7	55,55
50%	0,2	0,874	288,9	0,39	16,5	0,02	28	70
75%	0,2	0,905	288,9	0,43	33	0,02	90	81,6
Lớn nhất	0,9	1,135	288,9	0,48	49,6	0,025	120	91,2

Tiếp theo, mối quan hệ giữa các tham số đầu vào với nhau và giữa các tham số đầu vào với tham số đầu ra được

đánh giá thông qua hệ số tương quan Pearson- r_s (Hình 2.1). Kết quả cho thấy hầu hết mối tương quan giữa các tham số với nhau tương đối thấp, ngoại trừ có một vài tương quan mạnh, chẳng hạn $r_s = 0,79$ cho tương quan giữa X_3 (hàm lượng bột đá vôi) với X_6 (tỷ lệ phụ gia siêu dẻo/chất kết dính). Có nghĩa là, có thể coi 7 tham số đầu vào của bộ dữ liệu này là các biến độc lập và tất cả các biến sẽ được giữ lại xây dựng mô hình dự báo.



Hình 2.1: Tương quan giữa các tham số

3. CƠ SỞ LÝ THUYẾT

3.1. Mô hình tăng cường độ dốc cực đại (Extreme Gradient Boosting - XGB)

Mô hình tăng cường độ dốc cực đại (XGB) là một thuật toán có giám sát được phát triển bởi Chen và các cộng sự dựa trên thuật toán tăng cường độ dốc (Gradient Boosting) của Friedman. XGB có sự tăng cường độ dốc về mặt tốc độ và quy mô so với thuật toán GB. Nó có thể giải quyết cả bài toán hồi quy và phân loại. Nguyên lý của thuật toán này tối ưu hóa các hàm mục tiêu. Ở giai đoạn đào tạo sẽ sử dụng nhiều cây tăng cường song song để quá trình học có thể diễn ra đồng thời cho người học. Vì vậy, ưu điểm của XGB là có thể xử lý được bộ dữ liệu lớn một cách nhanh chóng và chính xác.

3.2. Phương pháp tìm kiếm ngẫu nhiên (Random search)

Tinh chỉnh siêu tham số (Hyperparameter tuning) là quá trình tìm kiếm và chọn lựa giá trị tối ưu cho các siêu tham số trong mô hình máy học. Có nhiều phương pháp tinh chỉnh các siêu tham số, nghiên cứu này sử dụng phương pháp tìm kiếm ngẫu nhiên. Nguyên tắc của phương pháp này chọn ngẫu nhiên các giá trị siêu tham số từ một phạm vi xác định. Như vậy, không phải tất cả trường hợp kết hợp tham số đều được khảo sát, mà chỉ một số lượng nhất định các trường hợp được lựa chọn để khảo sát, quá trình lựa chọn được thực hiện trên toàn bộ các mẫu. Các giá trị được lựa chọn ngẫu nhiên và mô hình được huấn luyện và đánh giá với từng giá trị để tìm ra giá trị tối ưu. Số lượng các kết hợp được khảo sát được thực hiện bởi việc chọn tham số n_iter (tổng số lần tìm kiếm). Tổng số lần tìm kiếm càng nhiều thì kết quả tìm kiếm càng tốt nhưng thời gian tìm kiếm lâu và ngược lại. Phương pháp này thường áp dụng khi số lượng mẫu lớn, các trường hợp kết hợp nhiều tham số, việc tìm kiếm đầy đủ sẽ tốn nhiều thời gian.

3.3. Đánh giá hiệu suất dự báo của mô hình

Hiệu suất dự báo của mô hình được đánh giá dựa trên giá trị của 4 chỉ số thống kê là hệ số xác định (R^2), sai số tuyệt đối trung bình (MAE), sai số bình phương trung bình (RMSE)

và sai số phần trăm tuyệt đối trung bình (MAPE). Trong đó, R^2 có giá trị trong khoảng $[0,1]$. Khi giá trị của R^2 càng lớn, đồng thời giá trị của các sai số MAE, RMSE, MAPE càng nhỏ thì hiệu suất dự báo của mô hình càng cao (càng chính xác) và ngược lại. Các chỉ số này được xác định như sau:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - x'_i)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (1)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - x'_i)^2} \quad (2)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |(x_i - x'_i)| \quad (3)$$

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|(x_i - x'_i)|}{x_i} \quad (4)$$

Trong đó: x_i - CĐ xác định từ thí nghiệm; x'_i - CĐ dự báo bởi mô hình học máy của mẫu thứ i ; n - Số lượng dữ liệu (số lượng mẫu) mà mô hình sử dụng; \bar{x} - CĐ thí nghiệm trung bình.

4. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

4.1. Tinh chỉnh siêu tham số của mô hình XGB bằng phương pháp tìm kiếm ngẫu nhiên

Nội dung phần này trình bày quá trình tinh chỉnh các siêu tham số của mô hình XGB bằng phương pháp tìm kiếm ngẫu nhiên. Các siêu tham số được lựa chọn để tinh chỉnh là:
 max_depth: Độ sâu tối đa của cây
 n_estimators: Số lượng các giai đoạn thúc đẩy
 Learning_rate: Tốc độ học tập
 min_child_weight: Số lượng mẫu tối thiểu cần thiết để tách một nút trong
 subsample: Tỷ lệ mẫu được sử dụng phù hợp với từng người học cơ sở

Các tham số còn lại của mô hình XGB được gán các giá trị mặc định như trong thư viện scikit-learn. Các siêu tham số được tinh chỉnh trong phạm vi khảo sát như **Bảng 4.1**.

Bảng 4.1. Các siêu tham số quan trọng và khoảng giá trị khảo sát

Các siêu tham số	Giá trị mất lưới khảo sát
subsample	(0,1; 0,5; 1)
n_estimators	(100, 200, 400, 600, 800, 1000, 1400, 1600)
min_child_weight	(1, 3, 5)
max_depth	(3, 4, 5, 6, 7)
learning_rate	(0,1; 0,3; 0,4)

Để thực hiện quá trình này, bộ dữ liệu được chia ngẫu nhiên thành 2 phần: Phần dữ liệu đào tạo (chiếm 70% toàn bộ dữ liệu) và phần dữ liệu kiểm tra (chiếm 30%). Trong đó, phần dữ liệu đào tạo được sử dụng để huấn luyện và xác thực chéo mô hình. Trong suốt giai đoạn đào tạo, mô hình không hề biết đến phần dữ liệu kiểm tra, phần dữ liệu này được để riêng cho mục đích kiểm tra mô hình sau khi đã được đào tạo. Ở phần tinh chỉnh các siêu tham số của mô hình XGB, để xếp hạng hiệu suất dự báo của mô hình sẽ dựa vào giá trị R^2 của phần dữ liệu xác thực. Giá trị R^2 được xác định bằng cách lấy trung bình của 5 lần xác thực chéo. R^2 càng gần đến 1, khả năng dự báo của mô hình càng tin

cậy. Kết quả tinh chỉnh các siêu tham số được trình bày trên **Bảng 4.2**.

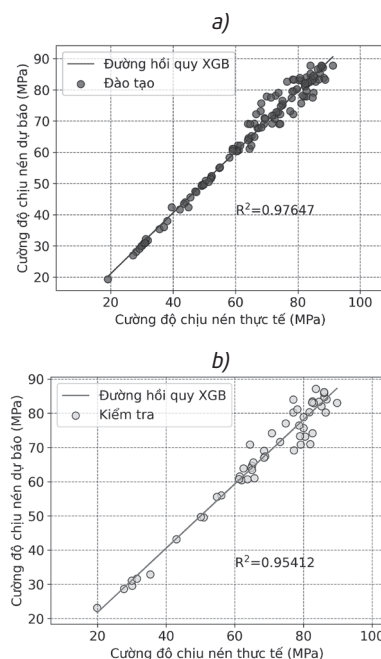
Bảng 4.2. Kết quả tối ưu hóa các siêu tham số của mô hình XGB bằng phương pháp tìm kiếm ngẫu nhiên

STT lần chạy	Các tham số khảo sát					Kết quả giai đoạn xác nhận		Xếp hạng
	subsample	n_estimators	min_child_weight	max_depth	learning_rate	R^2	Std	
0	0,5	400	3	5	0,1	0,87777	0,04787	6
1	0,1	600	3	5	0,3	0,90675	0,04691	2
2	0,5	1600	5	4	0,3	0,86382	0,07195	10
3	0,5	1400	5	5	0,1	0,86622	0,06573	9
4	0,5	400	5	5	0,4	0,89386	0,04347	3
5	0,5	400	3	5	0,3	0,87777	0,04787	6
6	0,1	600	5	7	0,1	0,88998	0,03474	4
7	0,1	400	1	3	0,3	0,88397	0,04243	5
8	1	100	5	5	0,3	0,90744	0,03684	1
9	0,5	600	1	3	0,4	0,86689	0,06253	8

Kết quả ở **Bảng 4.2** cho thấy xếp hạng 1 là mô hình XGB ở lần chạy thứ 8 (có R^2 xác thực trung bình = 0,90744 và Std = 0,03684) với các siêu tham số là: subsample = 1, n_estimators = 100, min_child_weight = 5, max_depth = 5, learning_rate = 0,3. Mô hình XGB tối ưu này sẽ được đề xuất để dự báo CĐ của BTCNS.

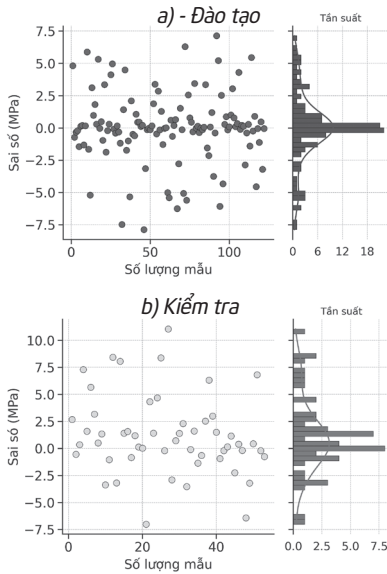
4.2. Kết quả dự báo cường độ chịu nén của BTCNS bằng mô hình XGB tối ưu

Hiệu suất dự báo CĐ của BTCNS bằng mô hình XGB tối ưu (là mô hình với các siêu tham số đã được tinh chỉnh) được thể hiện trên biểu đồ hồi quy (**Hình 4.1**). Đường hồi quy là đường lý tưởng thể hiện giá trị CĐ dự báo trùng với giá trị thí nghiệm hay các điểm dữ liệu càng gần đường hồi quy thể hiện mô hình dự báo càng chính xác và ngược lại. **Hình 4.1a** (giai đoạn đào tạo) và **Hình 4.1b** (giai đoạn kiểm tra) cho thấy hầu hết các dữ liệu đều phân bố rất gần với đường hồi quy, chứng tỏ mô hình XGB có hiệu suất dự báo rất cao ở cả hai giai đoạn này (R^2 đào tạo = 0,97647, R^2 kiểm tra = 0,95412).



Hình 4.1: Biểu đồ hồi quy ở: a) - Giai đoạn đào tạo; b) - Giai đoạn kiểm tra

Hơn nữa, kết quả dự báo của mô hình XGB còn thể hiện thông qua biểu đồ sai số giữa các giá trị CĐ dự đoán và CĐ thực tế (Hình 4.2). Quan sát cho thấy, ở giai đoạn đào tạo (Hình 4.2a), kết quả dự báo của mô hình rất đáng tin cậy thể hiện ở sai số nhỏ, khoảng [-2, 2] MPa. Tương tự, ở giai đoạn kiểm tra (Hình 4.2b) sai số khoảng [-2,5 , 2,5] cho thấy hiệu năng dự báo CĐ của mô hình XGB đề xuất rất tốt.



Hình 4.2: Biểu đồ phân phối sai số kết quả dự báo của mô hình XGB tối ưu cho a) - Giai đoạn đào tạo; b) Giai đoạn kiểm tra

Chi tiết kết dự báo CĐ bằng mô hình XGB tối ưu được thể hiện trong Bảng 4.3.

Bảng 4.3. Kết quả dự báo CĐ bằng mô hình XGB

Giai đoạn	RMSE (MPa)	MAE (MPa)	R ²	MAPE
Đào tạo	2,73053	1,80644	0,97648	0,02524
Kiểm tra	3,77115	2,64982	0,95413	0,03873

Ngoài ra, thao tác dự báo CĐ của BTCNS bằng mô hình XGB tối ưu được cụ thể một cách đơn giản hóa thông qua biểu đồ GUI (Graphical User Interface) như Hình 4.3. Với mô hình này, người dùng dễ dàng chọn các giá trị mong muốn của 7 tham số đầu bằng cách dùng chuột kéo các nút tròn trên từng thanh tham số. Sau đó, ấn nút "Submit", giá trị độ ổn định CĐ dự báo sẽ hiển thị ở ô "Cường độ chịu nén".

Hình 4.3: Giao diện mô hình XGB để xuất để dự báo CĐ

5. KẾT LUẬN

Bằng cách sử dụng phương pháp tìm kiếm ngẫu nhiên để tinh chỉnh các siêu tham số, nghiên cứu đã đề xuất được mô hình XGB tối ưu có hiệu suất dự báo CĐ của BTCNS cao, đáng tin cậy thể hiện ở giá trị R² tương đối cao và các sai số tương đối nhỏ (R² = 0,95413; MAE = 2,64982 MPa, RMSE = 3,77115 (MPa), MAPE = 0,03873 cho giai đoạn kiểm tra). Ngoài ra, nghiên cứu cũng đã cụ thể hóa cách sử dụng mô hình XGB thông qua biểu đồ GUI một cách đơn giản, dễ dàng. Điều này giúp người sử dụng có thể nhanh chóng dự báo chính xác được CĐ của BTCNS khi thay đổi giá trị của các tham số đầu vào, giúp giảm đáng kể lãng phí vật liệu, thời gian do giảm số lượng mẫu thử thí nghiệm.

Tài liệu tham khảo

- [1]. Khánh Đ. D. và Tuấn L. A., Ảnh hưởng của hạt nano-silica và sợi polyme trong kết cấu bê tông.
- [2]. F. U. A. Shaikh, S. W. M. Supit and P. K. Sarker (Aug., 2014), A study on the effect of nano silica on compressive strength of high volume fly ash mortars and concretes, Materials & Design, vol.60, pp.433-442, doi: 10.1016/j.matdes.2014.04.025.
- [3]. A. M. Sharkawi, M. A. Abd-Elaty and O. H. Khalifa (Mar., 2018), Synergistic influence of micro-nano silica mixture on durability performance of cementitious materials, Construction and Building Materials, vol.164, pp.579-588, doi: 10.1016/j.conbuildmat.2018.01.013.
- [4]. M. Ahmed, K. M. E. Hadi, M. A. Hasan, J. Mallick and A. Ahmed (Jan., 2014), Evaluating the co-relationship between concrete flexural tensile strength and compressive strength, International Journal of Structural Engineering, vol.5, no.2, pp.115-131, doi: 10.1504/IJSTRUCTE.2014.060902.
- [5]. M. A. Rashid, M. A. Mansur and P. Paramasivam (Jun., 2002), Correlations between Mechanical Properties of High-Strength Concrete, Journal of Materials in Civil Engineering, vol.14, no.3, pp.230-238, doi: 10.1061/(ASCE)0899-1561(2002)14:3(230).
- [6]. A. Ashrafian, M. J. Taheri Amiri, M. Rezaie-Balf, T. Ozbakkaloglu and O. Lotfi-Omran (Nov., 2018), Prediction of compressive strength and ultrasonic pulse velocity of fiber reinforced concrete incorporating nano silica using heuristic regression methods, Construction and Building Materials, vol.190, pp.479-494, doi: 10.1016/j.conbuildmat.2018.09.047.
- [7]. P. Jitvutikrai, T. Kaewkhluab and S. Tangtermsirikul (Jan., 2004), A compressive strength model for roller-compacted concrete with fly ash, Magazine of Concrete Research - MAG CONCR RES, vol.56, pp.35-44, doi: 10.1680/macr.2004.56.1.35.

Ngày nhận bài: 26/01/2024
Ngày nhận bài sửa: 21/02/2024
Ngày chấp nhận đăng: 15/3/2024