Ігор Капран

НЛТУ України, Львів, Україна. ORCID: 0000-0001-9666-9531,
kapran@nltu.edu.ua

Моделювання процесу сушіння з використанням фізично-обґрунтованих нейронних мереж

Анотація. *У роботі представлено підхід фізично-інформованого машинного навчання (PIML) для моделювання масоперенесення під час сушіння. Запропонована модель поєднує глибокі нейронні мережі з фізичними рівняннями, зокрема другим законом дифузії Фіка та граничними умовами, що дозволяє підвищити точність прогнозування навіть за обмеженої кількості даних.*

Ключові слова *– машинне навчання, граничні умови, початкові умови, чисельне моделювання.*

Вступ. Для кращого розуміння розроблення PIML в роботі описані етапи інтеграції фізичних принципів, пов'язаних із масоперенесенням, у глибокі нейронні мережі (DNN) [1]. Щоб зрозуміти стратегії PIML, спочатку варто розглянути чисту модель DNN, а потім перейти до фізично закодованої PIML.

Математична модель. Більшість моделей PIML ґрунтуються на прямолінійних нейронних мережах із зворотним зв'язком. Вона складається з кількох шарів, включаючи вхідний шар (набір вхідних змінних, які називаються незалежними змінними), вихідні шари (залежні змінні) та приховані шари між вхідними та вихідними шарами. У алгоритмі навчання з учителем із відомими даними DNN навчається ітеративно, щоб мінімізувати функцію втрат. Втрата – це різниця між істинним значенням (відомим значенням) і прогнозованим значенням. Цю різницю можна математично визначити різними способами (наприклад, середньоквадратична похибка (MSE), середня абсолютна похибка (MAE), корінь середньоквадратичної похибки (RMSE) на основі продуктивності) [2]:

$$MSE_{DNN} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left[c_{gt} - c_p\right]^2, \quad (1)$$

де c_{gt} – відомі значення вологості, c_p – прогнозовані значення вологості, а n-розмір просторово-часового домену.

* науковий керівник

Метою чистої моделі DNN на основі даних є навчити параметри нейронної мережі ($\theta := (W, b)$) для мінімізації функції втрат (*MSEDNN*), тому навчання DNN повністю залежить від набору даних, що використовуються для навчання. Краща точність може бути очікувана, якщо доступні достатні набори даних.

У рамках PIML додаткові члени втрат від фізики поєднуються з функцією втрат, визначеною в рівнянні (2). Для ілюстрації, MSE залишків закону дифузії Фіка, граничної умови та початкових умов для моделі масопередачі під час сушіння можуть бути закодовані в DNN за допомогою таких виразів.

Залишкова величина основного рівняння (друге правило дифузії Фіка) має вигляд:

$$MSE_{Res,Eqn} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla D \nabla c\right). \quad (2)$$

Залишкова величина граничної умови (конвективна масопередача на межі) записується так:

$$MSE_{Res,BC} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(D\nabla c|_n - h_m(c - c_{air})\right). \quad (3)$$

Залишкова величина початкової умови (вологість у початковому стані) виражається наступним чином:

$$MSE_{Res,IC} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(c - c_0), \quad (4)$$

де c – концентрація вологи, D – дифузійність, t – час сушіння, h_m – коефіцієнт масопередачі, а c_{air} та c_0 – концентрація вологи в повітрі та початковий стан відповідно.

Щоб розвинути PIML для масопередачі під час сушіння, необхідно поєднати члени втрат від фізичних умов, обговорених вище, з функцією втрат чистої моделі DNN.

$$MSE_{Total} = MSE_{DNN} + MSE_{Res,Eqn} + MSE_{Res,BC} + MSE_{Res,IC} \quad (5)$$

$$MSE_{Total} = \frac{1}{n}\left[\sum_{i=1}^{n}\left[c_{gt} - c_p\right]^2 + \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla D \nabla c\right) + \sum_{i=1}^{n}\left(D\nabla c|_n - h_m(c - c_{air})\right) + \sum_{i=1}^{n}(c - c_0)\right]$$

Програмна реалізація. Схематичне зображення PIML з фізичними аспектами, пов'язаними з масопередачею під час сушіння, ілюструється на рисунку 1. Тепер параметри нейронної мережі ($\theta := (W, b)$) тренуються ітеративно для мінімізації загальної функції втрат (*MSETotal*). Таким чином, прогнози з добре

* науковий керівник

навченої моделі відповідають як набору даних, так і вбудованим фізичним рівнянням та умовам.

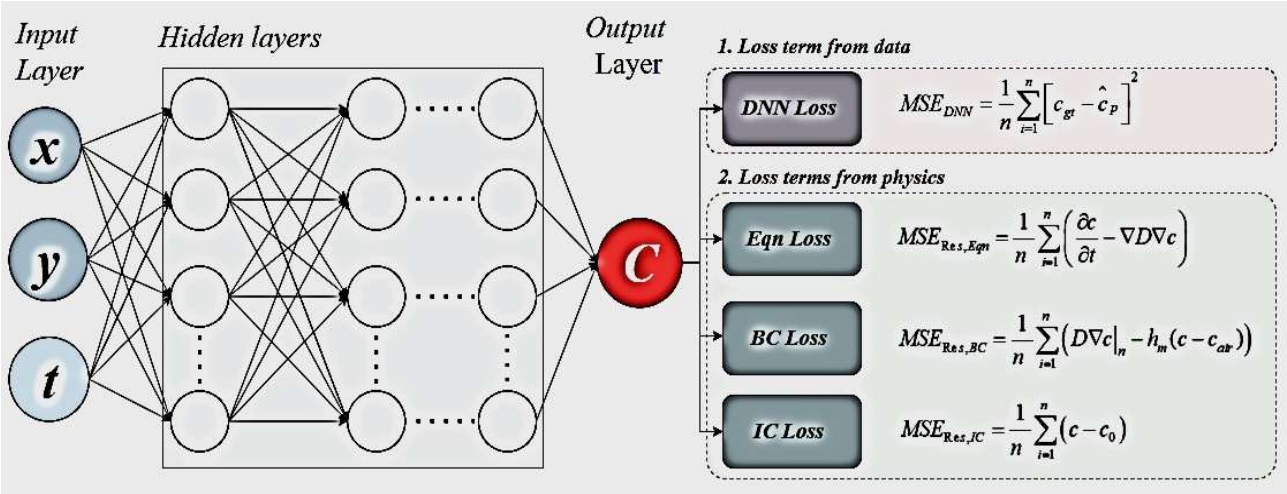

Рисунок 1. Схематичне зображення PIML для моделювання масопередачі під час сушіння

Хоча обидві мови програмування Python і MATLAB можуть успішно використовуватися для розроблення моделей PIML, Python здобув значну популярність завдяки наявності відкритого коду та бібліотек. Хагіґат і Хуанес опублікували кроки розробки моделі PIML за допомогою спеціального програмного інтерфейсу (API) під назвою SciANN [3]. Нассіменто та ін. представили всебічну демонстрацію впровадження моделей PIML для розв’язання типових часткових диференціальних рівнянь (PDEs) [4]. Крім того, Бай та ін. описали кроки розробки вихідного коду для задач механіки твердих тіл [5]. Обидва автори використовували Python і надали вихідний код у відкритій спільноті GitHub.

Висновок. Для розроблення моделі прогнозування властивостей на основі PIML спочатку необхідно чітко визначити проблему в рамках архітектури нейронної мережі. Потім її можна інтегрувати з відповідною фізикою через комбіновану функцію втрат. На завершальному етапі слід провести чисельну реалізацію для навчання, тестування та валідації моделі. Одним із основних викликів моделювання PIML є правильне поєднання рівнянь метафізики з нейронною мережею прямої подачі. Якщо необхідно вирішити більше ніж одне фізичне рівняння або умову, досягнення балансу втрат може бути складним через невідповідність між спостережуваними даними та фізичними умовами. Хоча

* науковий керівник

самоадаптивні гіперпараметри для функції активації та ваги втрат показали кращі результати для моделей PIML, вони виявляються чутливими до конкретних випадків. Цю проблему можна вирішити, змінивши базову модель нейронної мережі з прямої подачі на графову нейронну мережу (GNN), яка має кращі можливості для вирішення складних систем із неструктурованими даними.

Список використаних літературних джерел

[1] Batuwatta-Gamage, C.P.; Rathnayaka, C.M.; Karunasena, H.C.P.; Wijerathne, W.D.C.C.; Jeong, H.; Welsh, Z.G.; Karim, M.A.; Gu, Y.T. A physics-informed neural network-based surrogate framework to predict moisture concentration and shrinkage of a plant cell during drying. J. Food Eng. 2022, 332, 111137.

[2] Kowalczyk, D.; Baraniak, B. Effect of candelilla wax on functional properties of biopolymer emulsion films– A comparative study. Food Hydrocoll. 2014, 41, 195–209.

[3] Haghighat, E.; Juanes, R. SciANN: A Keras/TensorFlow wrapper for scientific computations and physics-informed deep learning using artificial neural networks. Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 2021, 373, 113552.

[4] Nascimento, R.G.; Fricke, K.; Viana, F.A.C. A tutorial on solving ordinary differential equations using Python and hybrid physics-informed neural network. Eng. Appl. Artif. Intell. 2020, 96, 103996.

[5] Bai, J.; Jeong, H.; Batuwatta-Gamage, C.P.; Xiao, S.; Wang, Q.; Rathnayaka, C.M.; Alzubaidi, L.; Liu, G.R.; Gu, Y. An introduction to programming Physics-Informed Neural Network-based computational solid mechanics. arXiv 2022, arXiv:2210.09060.

Modeling of the drying process using physics-informed neural networks

Ihor Kapran

This study presents a physics-informed machine learning (PIML) approach for modeling mass transfer during drying. The proposed model integrates deep neural networks with physical laws, including Fick's second law of diffusion and boundary conditions, enabling improved prediction accuracy even with limited data.

* науковий керівник