

I. Д. Капран¹

¹Національний лісотехнічний університет України, м. Львів, Україна, ORCID: 0000-0001-9666-9531

Моделювання процесу сушіння деревини на основі машинного навчання

Анотація: Сушіння – це складний процес одночасного перенесення тепла, маси та імпульсу з безперервними фазовими переходами. Чисельне моделювання є одним з найефективніших інструментів для представлення різних фізичних явищ процесів сушіння, що дозволяє точно прогнозувати кінетику та розуміти морфологічні зміни під час сушіння. Однак математичне моделювання процесів сушіння є складним процесом і потребує великих обчислювальних ресурсів через мультифізичний характер переносу тепла та маси під час сушіння. Моделювання на основі машинного навчання, яке враховує фізику процесів (PIML), має потенціал подолати ці недоліки та може стати перспективним доповненням у дослідженні сушіння. Воно дозволяє описати процеси сушіння, інтегруючи основні закони переносу та обмеження в моделі машинного навчання. В роботі представлено моделювання на основі даних для розроблення моделей PIML, які можуть бути використанні під час сушіння деревини. Розглядається поточний стан моделей на основі PIML, а також їхні обмеження. Представлено приклад структури PIML для моделювання у процесі сушіння. Висвітлюються виклики, пов'язані з одночасним врахуванням переносу тепла, маси та імпульсу в моделюванні PIML для оптимізації процесу сушіння.

Ключові слова: теплообмін; масообмін; алгоритм; нейронні мережі; PIML.

I. D. Kapran¹

¹National Forestry University of Ukraine, Lviv, Ukraine, ORCID: 0000-0001-9666-9531

Modeling of wood drying process based on machine learning

Abstract: Drying is a complex process of simultaneous heat, mass, and momentum transport phenomena with continuous phase changes. Numerical modelling is one of the most effective tools to mechanistically express the different physics of drying processes for accurately predicting the drying kinetics and understanding the morphological changes during drying. However, the mathematical modelling of drying processes is complex and computationally very expensive due to multiphysics and the multiscale nature of heat and mass transfer during drying. Physics-informed machine learning (PIML)-based modelling has the potential to overcome these drawbacks and could be an exciting new addition to drying research for describing drying processes by embedding fundamental transport laws and constraints in machine learning models. Based on a comprehensive literature review, this paper presents two types of information: fundamental physics-based information about drying processes and data-driven modelling strategies to develop PIML-based models for drying applications. The current status of physics-based models and PIML-based models and their limitations are discussed. A sample PIML-based modelling framework for drying application is presented. Finally, the challenges of addressing simultaneous heat, mass, and momentum transport phenomena in PIML modelling for optimizing the drying process are presented at the end of this paper.

Keywords: heat transfer; mass transfer; algorithm; neural networks; PIML.

Вступ

Процес сушіння є провідним промисловим процесом, який широко використовується для обробки або збереження вологих матеріалів з метою запобігання поширення бактерій, мікроорганізмів та плісняви шляхом видалення вологи. Сушіння широко використовується в різних галузях промисловості, зокрема в сільському господарстві, деревообробці, обробці морепродуктів, фармацевтиці, виробництві паперу, кераміки та переробці біомаси. Нинішній ринок сушіння оцінюється у 108,15 мільярда доларів США і, як очікується, до 2027 року сягне 166,92 мільярда доларів США [1]. Попри такий значний потенціал, сучасні галузі сушіння стикаються з труднощами, пов'язаними з існуючими традиційними системами сушіння, які є енергоємними та повільними. Залежно від умов сушіння, цей процес може споживати до 15% всієї промислової енергії. Крім того, погіршення якості висушеної продукції є однією з основних проблем сучасних систем сушіння. Ці проблеми не можуть бути вирішені, якщо системи сушіння не будуть спроектовані на основі глибокого розуміння реальних процесів сушіння та характеристик продукції на різних рівнях. Процес сушіння включає складні одночасні процеси перенесення тепла, маси та імпульсу [2]. Чисельне моделювання є унікальним інструментом для точного опису цих складних процесів сушіння [3], саме тому значні дослідження були проведені для розробки чисельного моделювання процесів сушіння.

Щоб зменшити обчислювальну складність, можна застосувати моделювання на основі машинного навчання (ML) для процесу сушіння деревини. Підходи на основі машинного навчання ефективно моделюють нелінійні складні процеси тепломасообміну під час сушіння та здатні прогнозувати кінетику сушіння без значних обчислювальних зусиль, порівняно з традиційними методами моделювання. Однак, моделі на основі ML мають труднощі з точним прогнозуванням у випадках, коли набір даних є недостатньо точним, містить шум або недостатній за обсягом [17-18]. У таких випадках вбудовування фізичних законів у дані, отримані в результаті спостережень, через фізично обґрунтоване машинне навчання (PIML) дає значні переваги для більшості наукових та інженерних задач [18-20]. Хоча було проведено багато досліджень для розробки як фізичних моделей, так і моделей на основі машинного навчання, жодної моделі сушіння на основі PIML, яка б об'єднувала обидва підходи, ще не розроблено. Для вирішення цієї суттєвої наукової проблеми потрібні значні дослідження.

Метою даної статті є представити основи потенційної стратегії моделювання на основі PIML.

Моделювання на основі даних — це процес розробки моделей на основі даних та статистичного навчання. Воно може бути розділене на дві категорії: моделювання на основі даних, відоме як моделювання на основі машинного навчання, і моделювання, яке враховує фізичні принципи, засноване на машинному навчанні (PIML).

PIML — це нова концепція, яка кодує фізичні моделі, визначені диференціальними рівняннями, з інформацією, отриманою з даних. Інтеграція здійснюється через функцію втрат. Решта втрат фізичних умов (граничні умови і/або початкові умови) та основних рівнянь поєднуються з типовою функцією втрат для контрольованої нейронної мережі (рис. 1).

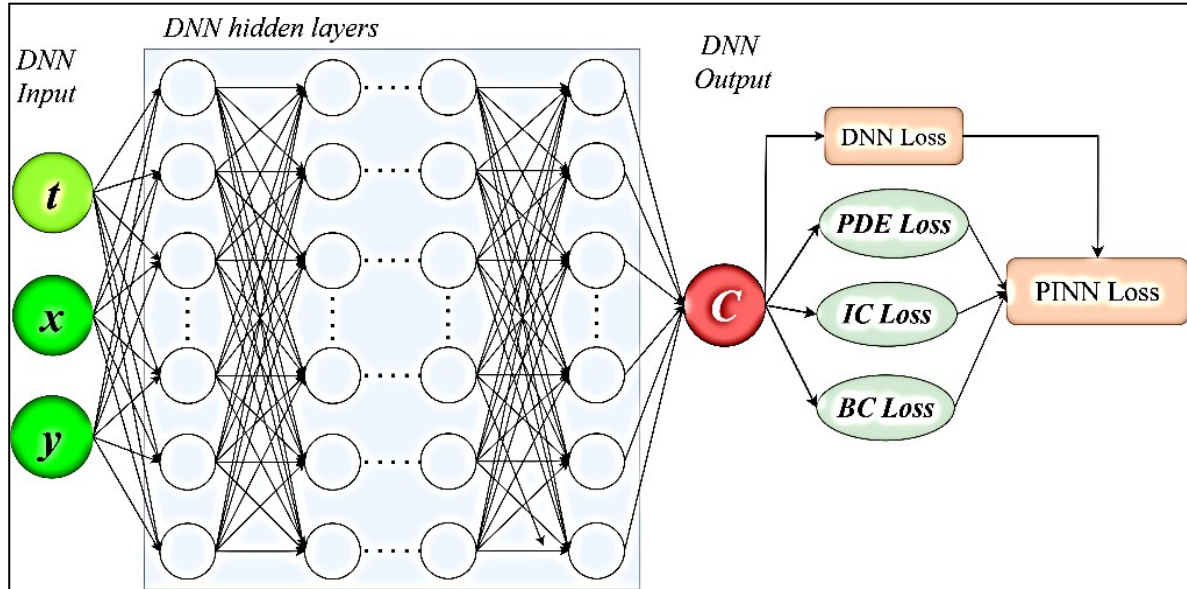


Рисунок 1. Схематичне зображення структури PIML (тут t — час сушіння, x і y — двовимірні осі, а C — концентрація рідини (моль/м³)).

Ваги і зсуви нейронної мережі оптимізуються за допомогою ітераційних процесів, поки залишки загальної функції втрат не досягнуть критеріїв збіжності. Мінімальні залишки цих умов та рівнянь свідчать про те, що прогнози близькі до заданих фізичних взаємозв'язків, враховуючи наявні дані. Похідні фізичних моделей, інтегрованих з PIML, обчислюються без використання сіток або взаємодій частинок. Таким чином, в PIML не виникають помилки дискретизації області чи інші обмеження, пов'язані з традиційними методами. Для рухомих меж або областей PIML не вимагає складних обчислювальних ресурсів, на відміну від традиційних обчислювальних підходів [18].

Цей PIML-фреймворк може бути використаний для дослідження варіацій у випадках, коли провести прямі вимірювання не можливо. Отже, існує величезний потенціал у застосуванні PIML для дослідження теплових і масоперенесень у мікро- та макроскопічних процесах сушки продуктів для виявлення невідомих параметрів і їх варіацій під час безперервних фазових змін.

Більшість моделей PIML ґрунтуються на 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 з 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 та застосування):

$$MSE_{DNN} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [c_{gt} - \hat{c}_p]^2 \quad (1)$$

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

У рамках PIML додаткові члени втрат 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:

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

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 — дифузія, t — час сушіння, h_m — коефіцієнт масопередачі, а c_{air} та c_0 — концентрація вологи в повітрі та початковий стан відповідно.

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

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

$$MSE_{Total} = \frac{1}{n} \left[\sum_{i=1}^n [c_{gt} - \hat{c}_p]^2 + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla D \nabla c \right) + \sum_{i=1}^n (D \nabla c|_n - h_m (c - c_{air})) + \sum_{i=1}^n (c - c_0) \right] \quad (6)$$

Схематичне зображення PIML з фізичними аспектами, пов'язаними з масопередачею під час сушіння, зображено на рисунку 2. Параметри нейронної мережі ($\theta := (W, b)$) тренуються ітеративно для мінімізації загальної функції втрат (MSE_{Total}). Таким чином, прогнози з добре навченої моделі відповідають як набору даних, так і вбудованим фізичним рівнянням та умовам.

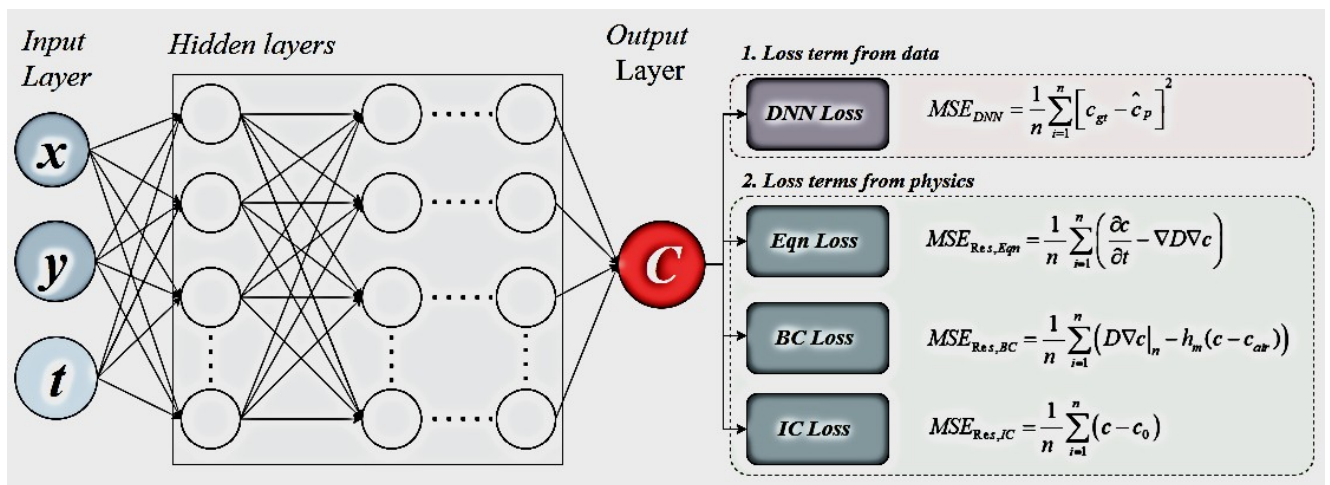


Рисунок 2. Схематичне зображення PIML для моделювання масопередачі під час сушіння.

Для розробки моделі сушіння потрібен обширний аналіз CFD. У цьому випадку можуть бути використані різні моделі турбулентності, такі як модель $k-\omega$, модель $k-\varepsilon$, алгебраїчна модель Y-plus (SPF), модель L-VEL, модель $k-\varepsilon$ низького числа Рейнольдса (AKN) і модель SST, щоб інтегрувати CFD з моделлю сушіння. Ці моделі можуть бути розв'язані за допомогою рівнянь Нав'є-Стокса з середніми по Рейнольдсу (RANS). Серед цих моделей турбулентності модель $k-\omega$ широко використовується завдяки своїй простоті та здатності до точного прогнозування.

Модель турбулентності $k-\omega$ була інтегрована з моделлю сушіння (синхронний тепловий і масовий переніс) та моделлю об'ємного нагріву (електромагнітної), як показано на рисунку 3. Використовувалися відомі фізичні закони, такі як другий закон Фіка для масопередачі, закон Фур'є для теплопередачі, закон Ламберта для об'ємного (мікрохвильового) нагріву та рівняння Нав'є-Стокса для аналізу CFD, щоб описати процеси синхронного теплового, масового і імпульсного переносу з об'ємним нагрівом.

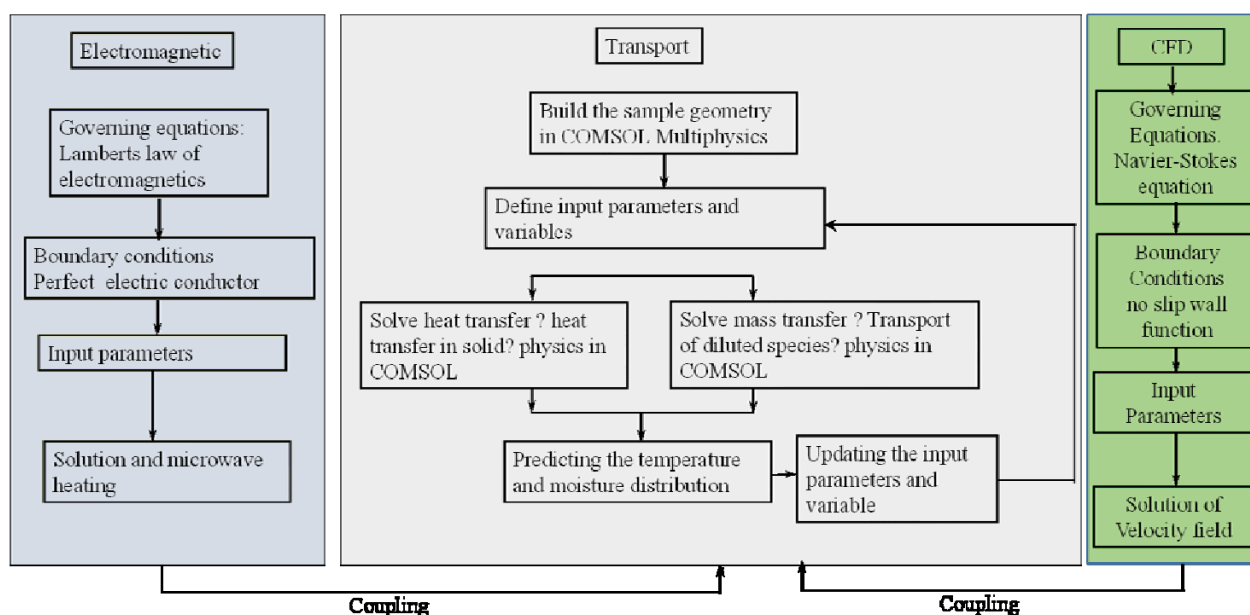


Рисунок 3. Схематична діаграма різних фізичних принципів, які були використані для розробки CFD-інтегрованої 3D-IMCD моделі.

Було виявлено, що просторовий розподіл тепла і маси суттєво впливає на кінетику сушіння. Модель сушіння, яка не має інтегрованої CFD, може переоцінювати кінетику сушіння.

Хоча моделі на основі PIML можуть ефективно поєднувати фізичні моделі з даними для покращення прогнозів, PIML також має свої недоліки. По-перше, при застосуванні PIML до реалістичних задач виникають великі обчислювальні процеси в порівнянні з традиційними підходами. Для скорочення часу навчання з оригінальними мережами з прямою подачею досліджуються різні методи, такі як розподіл області та паралельна реалізація PIML. Крім того, комбінування мульти-GPU та CPU обчислень забезпечує багатообіцяючий рівень ефективності для обчислювальної продуктивності.

По-друге, повністю зв'язані мережі з прямою подачею часто не можуть зійтися за термінами втрат для змістовних або коректних рішень. Коли залучено більше ніж одне фізичне рівняння або умова, досягти балансу втрат може бути важко через невідповідність між спостережуваними даними та фізичними умовами.

Висновки

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

Окрім PIML, існують інші виклики, такі як недоступність мікромасштабних властивостей, що становить серйозну перешкоду для розвитку тонкошарових (мікро- або мультишарових) моделей.

Використані джерела

1. Air-Dried Food Market Size, Global Industry Report, 2020–2027. 2020. Report No: GVR-4-68038-513-7. Available online: <https://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/air-dried-food-market>.
2. Khan, M.I.H.; Joardder, M.U.H.; Kumar, C.; Karim, M.A. Multiphase porous media modelling: A novel approach to predicting food processing performance. *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* 2018, 58, 528–546.
3. Rzig, R.; Khedher, N.B.; Nasrallah, S.B. A 3-D numerical heat and mass transfer model for simulating the vibration effects on drying process. *Heat Transf.—Asian Res.* 2017, 46, 1204–1221.
4. Jomaa, W.; Puiggali, J.R. Drying of shrinking materials: Modellings with shrinkage velocity. *Dry. Technol.* 1991, 9, 1271–1293.
5. Kiranoudis, C.T.; Tsami, E.; Maroulis, Z.B.; Marinos-Kouris, D. Drying kinetics of some fruits. *Dry. Technol.* 1997, 15, 1399–1418.
6. Putranto, A.; Chen, X.D.; Webley, P.A. Modeling of drying of food materials with thickness of several centimeters by the reaction engineering approach (REA). *Dry. Technol.* 2011, 29, 961–973.
7. Ben Mabrouk, S.; Benali, E.; Oueslati, H. Experimental study and numerical modelling of drying characteristics of apple slices. *Food Bioprod. Process.* 2012, 90, 719–728.
8. Kaya, A.; Aydın, O.; Dincer, I. Experimental and numerical investigation of heat and mass transfer during drying of Hayward kiwi fruits (*Actinidia Deliciosa* Planch). *J. Food Eng.* 2008, 88, 323–330.
9. Khan, M.I.H.; Pham, D.N.; Karim, A. Theoretical and experimental investigation of temperature and moisture distributions and changes in nutritional quality during intermittent microwave convective drying. In *Proceedings of the 21st International Drying Symposium*, Editorial Universitat Politècnica de Valencia, Valencia, Spain, 11–14 September 2018; 2018; pp. 553–560.
10. Golestani, R.; Raisi, A.; Aroujalian, A. Mathematical Modeling on Air Drying of Apples Considering Shrinkage and Variable Diffusion Coefficient. *Dry. Technol.* 2013, 31, 40–51. [CrossRef] *Energies* 2022, 15, 9347 23 of 27
11. Kumar, C.; Millar, G.J.; Karim, M.A. Effective Diffusivity and Evaporative Cooling in Convective Drying of Food Material. *Dry. Technol.* 2014, 33, 227–237.
12. Fowler, A.J.; Bejan, A. The effect of shrinkage on the cooking of meat. *Int. J. Heat Fluid Flow* 1991, 12, 375–383.
13. Khan, M.; Kumar, C.; Joardder, M.U.H.; Karim, M.A. Determination of appropriate effective diffusivity for different food materials *Dry. Technol.* 2017, 35, 335–346.
14. Datta, A.K. Porous media approaches to studying simultaneous heat and mass transfer in food processes. I: Problem formulations. *J. Food Eng.* 2007, 80, 80–95.
15. Gulati, T.; Datta, A.K. Mechanistic understanding of case-hardening and texture development during drying of food materials. *J. Food Eng.* 2015, 166, 119–138.
16. Mercier, S.; Marcos, B.; Moresoli, C.; Mondor, M.; Villeneuve, S. Modeling of internal moisture transport during durum wheat pasta drying. *J. Food Eng.* 2014, 124, 19–27.

17. 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.
18. Karniadakis, G.E.; Kevrekidis, I.G.; Lu, L.; Perdikaris, P.; Wang, S.; Yang, L. Physics-informed machine learning. *Nat. Rev. Phys.* 2021, 3, 422–440.
19. Raissi, M.; Yazdani, A.; Karniadakis, G.E. Hidden fluid mechanics: Learning velocity and pressure fields from flow visualizations. *Science* 2020, 367, 1026–1030.
20. Raissi, M.; Perdikaris, P.; Karniadakis, G.E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *J. Comput. Phys.* 2019, 378, 686–707.