

Ярослав Соколовський¹, Тетяна Самотій²

¹ Кафедра систем автоматизованого проектування, Національний університет Львівська політехніка, вул.С.Бандери 12, Львів, Україна, E-mail: yaroslav.i.sokolovskyi@lpnu.ua, ORCID 0000-0003-4866-2575

² Кафедра інженерії програмного забезпечення, Національний лісотехнічний університет України, вул. Г.Чупринки 103, Львів, Україна, E-mail: t.samotiy@nltu.edu.ua, ORCID 0000-0002-1317-8786

НЕЙРОМЕРЕЖЕВЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ВОЛОГОПЕРЕНОСЕННЯ НА ПІДСТАВІ ПОХІДНИХ ДРОБОВОГО ПОРЯДКУ

Отримано: серпень 12, 2023 / Переглянуто: вересень 28, 2023 / Прийнято: жовтень 01, 2023

© Соколовський Я., Самотій Т., 2023

<https://doi.org/>

Анотація. У даній роботі представлено та досліджено математичну модель вологоперенесення у капілярно-пористих середовищах у одно- та двовимірному просторі, для опису якої використовувався апарат дробового інтегродиференціювання. Такий підхід дозволив врахувати такі властивості системи із фрактальною структурою як пам'ять, самоорганізація, часові та просторові кореляції. Складність даної математичної моделі ускладнює її застосування і вимагає значних обчислювальних потужностей. Для обчислення чисельного розв'язку диференціального рівняння та прискорення розрахунків застосовано фрактальний нейромережний метод, який заснований на fPINN-архітектурі. Даний метод використовує функцію втрат, яка враховує фізичну інформацію про досліджуваний процес. Застосовано формули з дробового диференціального обчислення для вираження дробових похідних та розроблено різницеву схему для функції втрат. Розроблено програмне забезпечення для реалізації нейронного мережевого методу та обґрунтовано застосований підхід через порівняння отриманих чисельних результатів з результатами експериментів інших науковців та результатами, отриманими за допомогою чисельних методів скінчених різниць. Проведена перевірка достовірності досліджуваних показників вказує на адекватність математичної моделі та перспективність подальшого застосування числового фрактального нейромережевого методу.

Ключові слова: математична модель; процес вологопереносу; дробові похідні; метод скінчених різниць; нейронні мережі, інформовані фізикою

Вступ

На сучасному етапі важливою науковою задачею є розробка математичних моделей для нерівноважних фізичних процесів, особливо в системах з фрактальною структурою, які б відображали сутність явищ точно й достовірно. Оскільки фрактальні системи мають складну просторово-часову структуру та характеризуються явищами пам'яті, самоорганізації та просторової нелокальності, для їх опису необхідно використовувати геометрію дробової розмірності. Такий підхід до формування математичних моделей інженерно-технологічних задач застосовується у різних наукових галузях, включаючи механіку, електротехніку, гідрологію, фізику, медицину, економіку, соціологію тощо. Пошук розв'язку для цих задач вимагає застосування нетрадиційних підходів, зокрема математичних методів, що базуються на інтегродиференціальних рівняннях дробового порядку. Дробовий апарат інтегродиференціювання використовується для моделювання фізичних систем із пам'яттю через їхню здатність зберігати інформацію про попередні стани та

взаємодії. Показник дробовості за часом дозволяє враховувати долю попередніх станів системи, яка залишається актуальною у динаміці системи. Таким чином дробовий показник, показує чи система повністю зберігає всю інформацію про свої попередні стани і взаємодії, і нічого не "забуває", чи з іншого боку, вказує, що частина інформації зникає з часом, і система має "коротшу пам'ять". Дробові похідні за просторовими координатами віддзеркалюють самоподібну неоднорідність у внутрішній структурі середовища, в якому протікає процес. У такому середовищі розбиття на елементи полягає у простому процесі розмноження вихідного середовища на подібні до себе частини. Це означає, що частина фракталу має аналогічні структурні властивості до всього фракталу в цілому та що масштаби цих неоднорідностей можуть бути порівняні з масштабами мікроскопічних структур [1]. Ця особливість природи системи призводить до потреби аналізу її властивостей за концепцією просторової нелокальності, що вказує на те, що властивості одного регіону системи можуть впливати на інші регіони, навіть якщо вони розташовані на великій відстані один від одного. Таким чином застосування дробових похідних та інтегралів дозволяє отримати більш глибоке розуміння явищ та знаходити нові рішення, які недосяжні для класичних методів інтегродиференціювання.

Об'єктом дослідження даної роботи є процеси вологоперенесення у капілярно-пористих матеріалах з врахуванням ефектів пам'яті та просторових кореляцій.

Предметом дослідження є модель фрактальної нейронної мережі для моделювання процесів вологообміну в неоднорідних середовищах.

Основною метою даної роботи є дослідження математичної моделі процесу вологоперенесення з урахуванням її фрактальної структури. А також розроблення й дослідження моделі фрактальної нейронної мережі з використанням розроблених алгоритмів та програмних засобів для розрахунку зміни вологообміну у капілярно-пористих матеріалах під дією джерела теплової енергії та визначення точності та достовірності отриманих результатів.

Наукова новизна – розроблено нову модель фрактальної нейронної мережі для визначення еволюції полів вологості у середовищах з неоднорідною структурою.

Практичне значення – розроблено алгоритм використання моделі нейронної мережі. У цій моделі оптимізаційні параметри мережі обмежуються на основі введення функцій втрат, які засновані на математичній моделі процесу вологообміну для неоднорідних середовищ та її граничних та початкових умовах. Використання такого алгоритму на стадії передбачення нейронної моделі значно прискорює швидкість моделювання системи в порівнянні з іншими методами, такими як метод скінченних різниць.

Методи дослідження. Використано математичний апарат інтегродиференціювання дробового порядку для врахування фрактальної структури капілярно-пористого матеріалу та побудови різницевої схем для функцій втрат. Для формування наборів точок навчання застосовано метод скінченних різниць до знаходження наближеного розв'язку задачі. Також у роботі використано методи комп'ютерного моделювання, автоматичного диференціювання та нейромережевий метод, заснований на фізиці процесів з врахуванням фрактальної структури матеріалу.

Огляд літературних джерел за темою публікації

У сучасних наукових дослідженнях для розв'язання диференціальних рівнянь дробового порядку застосовують як аналітичні, так і чисельні методи. Існують аналітичні розв'язки задач з граничними умовами першого роду для диференціальних рівнянь дробового порядку в одновимірних [2]-[4] та двовимірних випадках [5]. Досліджується також динаміка та автохвильові розв'язки бістабільних систем реакції-дифузії з дробовими похідними за часом [6]. Фундаментальні розв'язки першої та другої задач Коші, що виражаються через функції Міттаг-Леффлера та функції Майнард отримано у [7]. Для моделювання поширення акустичної хвилі авторами [8] описано хвильове рівняння з дробовими лапласіанами, що обчислюються в просторовій частотній області з використанням псевдоспектральної реалізації Фур'є. У деяких випадках застосовано спектральний

метод [9] та метод скінченних різниць для чисельного розв'язання рівнянь дробового порядку [10], [11]. Проте чисельні методи для розв'язання диференціальних рівнянь дробового порядку ще потребують подальшого вдосконалення, особливо для задач з граничними умовами третього роду, яким присвячена не велика кількість робіт [12]. Обчислювальний процес за допомогою апроксимації може бути досить продуктивним, але він вимагає значних обсягів пам'яті та часу, тому вчені розглядають альтернативний підхід, який полягає в застосуванні штучних нейронних мереж.

Прості моделі нейронних мереж, такі як мультишаровий персептрон з кількома прихованими шарами, використовувалися в ранніх роботах для вирішення диференціальних рівнянь [13]. Вчені розробили гібридну архітектуру нейронної мережі для чисельного розв'язання високопорядкових диференціальних рівнянь [14]. Сучасні підходи, що базуються на алгоритмах глибокого навчання нейронних мереж, використовують переваги оптимізаційних структур та автоматичного диференціювання. Наприклад, дослідники [15] розробили техніку об'єднаної глибокої нейронної мережі для оцінювання рішень у рівняннях з частковими похідними. Моделі глибоких нейронних мереж мають велику гнучкість і можуть містити десятки тисяч параметрів. Проте завдяки останнім досягненням у автоматичному диференціюванні [16], [17], паралельному апаратному забезпеченні, і стохастичній оптимізації [18], їх можна ефективно навчати та оцінювати.

Досі вчені випробували кілька підходів до вирішення часткових диференціальних рівнянь (ЧДР), шляхом безпосереднього моделювання їх розв'язків. Усі ці спроби мають спільну складову: нейронна мережа використовується для наближення розв'язку як функції вхідних даних. Після цього ця мережа навчається шляхом мінімізації спеціальної функції втрат, яка тісно пов'язана з диференціальними рівняннями. Однак існують фундаментальні відмінності у підходах до цього завдання. Розв'язок ЧДР повинен задовольняти граничним та початковим умовам, а також самим ЧДР. З цієї точки зору ці обмеження обов'язково повинні бути враховані в нейронній мережі.

Один із способів гарантування виконання цих обмежень полягає в розгляді більшості з них як жорстких обмежень і впровадженні функції втрат так, щоб всі ці обмеження були задоволені. У деяких випадках можна легко перетворити граничні умови на жорсткі обмеження [19], [20]. Це дозволяє зосередитися лише на вирішенні самого ЧДР, оскільки граничні умови автоматично виконуються для будь-якої нейронної мережі. Проте цей спосіб не є універсальним, та його складно застосувати для широкого класу задач. Недавні досягнення авторів [21], [22], представлені в роботі [23], використовують інший підхід, а саме розглядають початкові та граничні умови як м'які обмеження, вбудовуючи їх у функцію втрат і одночасно мінімізуючи цю функцію втрат. Змінюючи ці функції втрат, можна враховувати різні типи граничних і початкових умов, не змінюючи фундаментально метод навчання фізично заснованих нейронних мереж (PINN). У наступних розробках нейронні мережі засновані на фізичних законах були адаптовані для вирішення дробових й інтегродиференціальних рівнянь [24].

Опис математичних моделей

Математична модель вологообмінних процесів в одновимірному просторі описується диференціальним рівнянням у частинних похідних, яке має дробовий порядок за часом τ та просторовою координатою x .

$$\frac{\partial^\alpha U(x, \tau)}{\partial \tau^\alpha} = A_1 \frac{\partial^\beta U(x, \tau)}{\partial x^\beta} + f(x, \tau), \quad (1)$$

Диференціальне рівняння (1) має задовільняти початкову (2)

$$U(x, \tau) \Big|_{\tau=0} = \varphi(x), \quad (2)$$

та граничні умови (3)-(4)

$$A_1 \frac{\partial^\nu U}{\partial x^\nu} \Big|_{x=0} = B_1 (U_p - U_0), \quad (3)$$

$$A_1 \frac{\partial^\nu U}{\partial x^\nu} \Big|_{x=0} = B_1^* (U_p - U_a), \quad (4)$$

де $(x, \tau) \in D$; $D = [0, T] \times [0, a]$ τ - часова координата; x — просторова координата; $U(\tau, x)$ — шукана функція вологості; $f(\tau, x)$, $\varphi(\tau, x)$ - задані функції A_1 — коефіцієнт вологопровідності; U_p — вологовміст на поверхні; U_o, U_a — початковий та рівноважний вологовміст, що є функцією від температури t_c та відносної вологості зовнішнього середовища; $B_1, B_1^*(t_c, \nu)$ — коефіцієнти вологообміну; α — дробовий порядок похідної за часом ($0 < \alpha \leq 1$); β, ν — дробові показники похідної за просторовими координатами ($1 < \beta \leq 2$), ($0 < \nu \leq 1$).

Математична модель вологообмінних процесів в двовимірному просторі описується диференціальним рівнянням у частинних похідних, який має дробовий порядок за часом τ та просторовими координатами x та y .

$$\frac{\partial^\alpha U(x, y, \tau)}{\partial \tau^\alpha} = A_1 \frac{\partial^\beta U(x, y, \tau)}{\partial x^\beta} + A_2 \frac{\partial^\beta U(x, y, \tau)}{\partial y^\beta} + g(x, y, \tau), \quad (5)$$

Диференціальне рівняння (1) має задовільняти початкову (2)

$$U(x, y, \tau)|_{\tau=0} = \psi(x, y), \quad (6)$$

та граничні умови (3)-(4)

$$A_1 \frac{\partial^\nu U(x, y, \tau)}{\partial x^\nu} \Big|_{x=0} = B_1 (U_p - U_0), \quad (7)$$

$$A_2 \frac{\partial^\nu U(x, y, \tau)}{\partial y^\nu} \Big|_{x=0} = B_2 (U_p - U_0), \quad (8)$$

$$A_1 \frac{\partial^\nu U(x, y, \tau)}{\partial x^\nu} \Big|_{x=a} = B_1^* (U_p - U_a), \quad (9)$$

$$A_2 \frac{\partial^\nu U(x, y, \tau)}{\partial y^\nu} \Big|_{x=b} = B_2^* (U_p - U_b), \quad (10)$$

де $(x, y, \tau) \in G$, $G = [0, T] \times [0, a] \times [0, b]$; τ — часова координата; x, y — просторові координати; $U(x, y, \tau)$ — шукана функція вологості; $g(x, y, \tau)$, $\psi(x, y, \tau)$ — задані функції A_1, A_2 — коефіцієнти вологопровідності; U_p — вологовміст на поверхні; U_0, U_a, U_b — початковий та рівноважний вологовміст, що є функцією від температури t_c та відносної вологості зовнішнього середовища; $B_1, B_1^*, B_2, B_2^*(t_c, \nu)$ — коефіцієнти вологообміну; α — дробовий порядок похідної за часом ($0 < \alpha \leq 1$); β, ν — дробові показники похідної за просторовими координатами ($1 < \beta \leq 2$), ($0 < \nu \leq 1$).

Визначимо вирази в лівих частинах рівнянь (1) та (5), які мають похідні порядку α за часом, як такі, що обчислюються з використанням лівосторонньої похідної Капуто [25].

$$\frac{\partial^\alpha U(x, \tau)}{\partial \tau^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^\tau (\tau - t)^{-\alpha} U'(t) \partial t, \quad 0 < \alpha \leq 1, \quad (11)$$

де $\Gamma(1-\alpha)$ — гамма-функція

Визначимо члени рівнянь (1) – (10) з показниками дробового порядку β (де $1 < \beta \leq 2$), та з показниками дробового порядку ν ($0 < \nu \leq 1$), які є похідними за просторовими координатами у сенсі Грюнвальда-Летнікова [1].

$$\begin{aligned} \partial_{x_i}^\beta U(x, \tau) &= \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{x_i - a}{N} \right)^{-\beta} \frac{1}{\Gamma(-\beta)} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{\Gamma(k - \beta)}{\Gamma(k + 1)} U \left(x_i - k \frac{x_i - a}{N} \right). \end{aligned} \quad (12)$$

Нейромержевий метод розв'язання одновимірної та двовимірної задач

З математичної точки зору глибока нейронна мережа представляє собою складну композиційну функцію. Визначимо структуру нейронної мережі, як мережу прямого зв'язку, також відому як багатошаровий перцептрон. У цій мережі інформація переходить від вхідного шару $N^0(\chi)$ до вихідного шару $N^L(\chi)$ (L — кількість шарів мережі, $l-1$ — кількість прихованих шарів мережі) через послідовне застосування лінійних та нелінійних операцій. На кожному шарі мережі відбувається обчислення, де кожен вузол або "нейрон" (n^l — кількість нейронів у шарі) взаємодіє з вузлами попереднього та наступного шарів, здійснюючи операції зваженого додавання та активації.

Лінійні операції включають в себе множення вхідних сигналів на ваги W^l та їх сумування з вектором зміщень b^l , що створює вихід сигналу. Нелінійні операції, відомі як активаційні функції δ , додають нелінійність до системи, дозволяючи мережі вчитися складнішим залежностям у вхідних даних. Цей процес послідовно повторюється через всі шари мережі, дозволяючи їй вчитися та апроксимувати складні функції, що містяться в навчальних даних:

$$\text{вхідний шар: } N^0(\chi) = \chi, \quad (13)$$

$$\text{приховані шари } N^l(\chi) = \delta(W^l N^{l-1}(\chi) + b^l); \quad (14)$$

$$\text{вихідний шар } N^L(\chi) = \delta(W^L N^{L-1}(\chi) + b^L); \quad (15)$$

де $l = 1, 2, \dots, L-1$; δ – функція гіперболічного тангенса, $\chi = (x, \tau) \in D$, для одновимірного випадку та $\chi = (x, y, \tau) \in G$, для двовимірного випадку.

У фрактальній фізично-інформованій нейронній мережі потрібно обчислити похідні виходів мережі відносно входів мережі. Це можливо зробити, якщо показник похідної набуває цілого значення. Тоді застосовуємо метод автоматичного диференціювання, який враховує, що нейронна мережа представляє собою складну композиційну функцію. Автодиференціювання використовує правило ланцюга для обчислення похідних цієї функції. Процес автоматичного диференціювання складається з двох кроків: перший - прямий прохід, під час якого обчислюються значення всіх змінних у функції, і другий - зворотний прохід, який використовується для обчислення похідних. У прямому проході автодиференціювання визначає всі проміжні значення, які потім використовуються на зворотньому проході для обчислення похідних. З цих похідних можна отримати градієнти по відношенню до вхідних змінних функції, що є важливими для задачі оптимізації та навчання.

Застосування звичайного правила автоматичного диференціювання для дробових обчислень непрактичне через складність дробових версій цих правил, які можуть виглядати як нескінчений ряд, що створює незручності для обчислень. У цьому контексті архітектура фрактальної нейронної мережі на основі фізичних законів дозволяє апроксимувати дробові похідні за допомогою чисельних методів дискретизації [24].

Отже, вихід нейронної мережі (15) є наближеним розв'язком рівняння (1) або (5) (в залежності від обраної розмірності моделі), який приймає вхідні дані χ і виводить вектор такої ж розмірності, що й U . Позначимо через $\theta = \{W^l, b^l\}$, $l = 1, 2, \dots, L$ множину всіх вагових матриць та векторів зміщення в нейронній мережі. Далі, необхідно встановити обмеження для нейронної мережі $N^L(\chi, \theta)$, щоб вона відповідала фізичним законам, враховуючи диференціальні рівняння дробового порядку, початкові та граничні умови. Для вимірювання різниці між нейронною мережею $N^L(\chi, \theta)$ та вимогами обмежень ми використовуємо функцію втрат. Ця функція визначається як зважена сума квадратів залишку для рівняння L_f , початкових й граничних умов L_{bc} та відомих даних навчання L_d :

$$L_N = \omega_d L_d + \omega_f L_f + \omega_{bc} L_{bc}, \quad (16)$$

Нейромережеве моделювання процесу вологоперенесення на підставі...

де $\omega_d, \omega_f, \omega_{bc}$ - вагові коефіцієнти. У формулі (16) кожен компонент розраховується на наборах навчальних точок P_d, P_f, P_{bc} . Ці множини визначені в межах області D або G (в залежності від обраної розмірності моделі).

Втрати, пов'язані з навчальними даними, можна представити так:

$$L_d = \frac{1}{P_d} \sum_{i=1}^{P_d} \|N^L(\chi, \theta) - U_i^*\|^2 \quad (17)$$

Втрати, пов'язані з залишками рівняння (1) та відповідними граничними та початковими умовами (2)-(4) для одновимірної математичної моделі набувають вигляду (18) та (19):

$$L_f = \frac{1}{P_f} \sum_{i=1}^{P_f} \left(\frac{\partial^\alpha U}{\partial \tau^\alpha} \Big|_{\tau_i, x_i} - A_1 \frac{\partial^\beta U}{\partial x_i^\beta} \Big|_{\tau_i, x_i} - f(\tau_i, x_i) \right)^2, \quad (18)$$

$$L_{bc} = \frac{1}{P_{bc}} \left(\sum_{i=1}^{P_{bc}} \left(A_1 \frac{\partial^\nu U}{\partial x_i^\nu} \Big|_{x_i=0} - B_1 (U_p - U|_{x_i=0}) \right)^2 + \sum_{i=1}^{P_{bc}} \left(+A_1 \frac{\partial^\nu U}{\partial x_i^\nu} \Big|_{x_i=a} - B_1^* (U_p - U|_{x_i=a}) \right)^2 + \sum_{i=1}^{P_{bc}} (+U|_{\tau=0} - \varphi(x_i))^2 \right), \quad (19)$$

А втрати, пов'язані з залишками рівняння (5) та відповідними граничними та початковими умовами (6)-(10) для двовимірної математичної моделі набувають вигляду (20) та (21):

$$L_f = \frac{1}{P_f} \sum_{i=1}^{P_f} \left(\frac{\partial^\alpha U}{\partial \tau^\alpha} \Big|_{\tau_i, x_i, y_i} - A_1 \frac{\partial^\beta U}{\partial x_i^\beta} \Big|_{\tau_i, x_i, y_i} - A_2 \frac{\partial^\beta U}{\partial y_i^\beta} \Big|_{\tau_i, x_i, y_i} - g(\tau_i, x_i, y_i) \right)^2, \quad (20)$$

$$L_{bc} = \frac{1}{P_{bc}} \left(\sum_{i=1}^{P_{bc}} \left(A_1 \frac{\partial^\nu U}{\partial x_i^\nu} \Big|_{x_i=0} - B_1 (U_p - U|_{x_i=0}) \right)^2 + \sum_{i=1}^{P_{bc}} \left(+A_1 \frac{\partial^\nu U}{\partial x_i^\nu} \Big|_{x_i=a} - B_1^* (U_p - U|_{x_i=a}) \right)^2 + \sum_{i=0}^{P_{bc}} (+U|_{\tau=0} - \psi(x_i, y_i))^2 + \sum_{i=1}^{P_{bc}} \left(A_2 \frac{\partial^\nu U}{\partial y_i^\nu} \Big|_{y_i=0} - B_2 (U_p - U|_{y_i=0}) \right)^2 + \sum_{i=1}^{P_{bc}} \left(+A_2 \frac{\partial^\nu U}{\partial y_i^\nu} \Big|_{y_i=a} - B_2^* (U_p - U|_{y_i=a}) \right)^2 \right), \quad (21)$$

У формулах (18) – (21) проведемо заміну дробових диференціальних операторів їх дискретними версіями та включимо їх до функції втрат.

Співвідношення для похідної Капуто за часом (6) можна наблизити за допомогою схеми, яка описана у джерелі [25].

$$\partial_\tau^\alpha U(x, \tau_k) = \frac{\gamma^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} \left[c_0 U(x, t_k) - c_{k-1} U(x, \tau_0) + \sum_{i=1}^{k-1} (c_i - c_{i-1}) U(x, \tau_{k-i}) \right], \quad (22)$$

де $c_i = (i+1)^{1-\alpha} - i^{1-\alpha}$, $i = 0, 1, \dots, K-1$; $\gamma = \frac{T}{N}$, $\tau_k = k\gamma$, $k = 0, \dots, K$.

А співвідношення для апроксимації похідної Грюнвальда-Летнікова має вигляд:

$$\partial_{x_i}^\beta U(x_n, \tau) \approx \frac{1}{h^\beta} \sum_{i=0}^n \lambda_i^\beta U(x_{n+1-i}, \tau), \quad (23)$$

де $\lambda_i = \frac{\Gamma(i-\beta)}{\Gamma(-\beta)\Gamma(i+1)}$, $h = \frac{x_n}{i}$, $n = 0, \dots, N$.

Врахувавши наближення (22)-(23) для дробових операторів Капуто та Грюнвальда-Летнікова відповідно та поклавши $U((x)_n, \tau_k) = U_n^k$, для одновимірної задачі та $U((x)_n, (y)_m, \tau_k) = U_{n,m}^k$, для

двовимірної задачі, ми можемо отримати наступну чисельну апроксимацію функцій втрат для нейронної мережі при дробових значеннях α , β і ν .

Для одновимірної моделі:

$$L_f = \frac{1}{P'_f} \times \sum_{k=1}^K \sum_{n=1}^{N-1} \left[\frac{\gamma^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} [c_0 U_n^k - c_{k-1} U_n^0 + \sum_{i=1}^{k-1} (c_i - c_{i-1}) U_n^{k-i}] - \frac{A_1}{h_1^\beta} \sum_{i=0}^n \lambda_i^\beta U_{n+1-i}^k - f_n^k \right]^2 \quad (24)$$

$$L_{bc} = \frac{1}{P'_{ic}} \sum_{n=0}^N (U_n^0 - \varphi(x_n))^2 + \frac{1}{P'_{bc}} \left(\sum_{k=1}^K \left(\frac{A_1}{h_1^\nu} \lambda_0^\nu U_{1,m}^k - B_1(U_p - U_{0,m}^k) \right)^2 + \sum_{k=1}^K \left(\frac{A_1}{h_1^\nu} \sum_{i=0}^N \lambda_i^\beta U_{n+1-i}^k - B_1^*(U_p - U_N^k) \right)^2 \right), \quad (25)$$

Та для двовимірної моделі:

$$L_f = \frac{1}{P'_f} \times \sum_{k=1}^K \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=1}^{M-1} \left[\frac{\gamma^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} [c_0 U_{n,m}^k - c_{k-1} U_{n,m}^0 + \sum_{i=1}^{k-1} (c_i - c_{i-1}) U_{n,m}^{k-i}] - \frac{A_1}{h_1^\beta} \sum_{i=0}^n \lambda_i^\beta U_{n+1-i,m}^k - \frac{A_2}{h_2^\beta} \sum_{i=0}^m \lambda_i^\beta U_{n,m+1-i}^k - g_{n,m}^k \right]^2, \quad (26)$$

$$L_{bc} = \frac{1}{P'_{ic}} \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M (U_n^0 - \psi_{n,m}^0)^2 + \frac{1}{P'_{bc}} \left(\sum_{k=1}^K \sum_{m=0}^M \left(\frac{A_1}{h_1^\nu} \lambda_0^\nu U_{1,m}^k - B_1(U_p - U_{0,m}^k) \right)^2 + \sum_{k=1}^K \sum_{m=0}^M \left(\frac{A_1}{h_1^\nu} \sum_{i=1}^N \lambda_i^\nu U_{N+1-i,m}^k - B_1^*(U_p - U_{N,m}^k) \right)^2 + \sum_{k=1}^K \sum_{n=0}^N \left(\frac{A_2}{h_2^\nu} \lambda_i^\beta U_{n,1}^k - B_2(U_p - U_{n,0}^k) \right)^2 + \sum_{k=1}^K \sum_{n=0}^N \left(\frac{A_2}{h_2^\nu} \sum_{i=0}^M \lambda_i^\beta U_{n+1-i,M}^k - B_2^*(U_p - U_{n,M}^k) \right)^2 \right), \quad (27)$$

де $P'_f = K \times (N - 1) \times (M - 1)$ — кількість навчальних точок, визначених у середині області D (або G); P'_{ic}, P'_{bc} - набори точок навчання, визначених на межі області D (G).

У процесі навчання нейронної мережі застосовується метод мінімізації функцій втрат, що дозволяє знаходити оптимальні параметри θ^* :

$$\theta^* = \arg \min_{\theta} (\omega_d L_d + \omega_f L_f + \omega_{bc} L_{bc}). \quad (28)$$

Схема розробленої нейронної мережі для моделювання одновимірної (1)-(4) та двовимірної фрактальної моделі (5)-(10) представлена на Рис. 1.

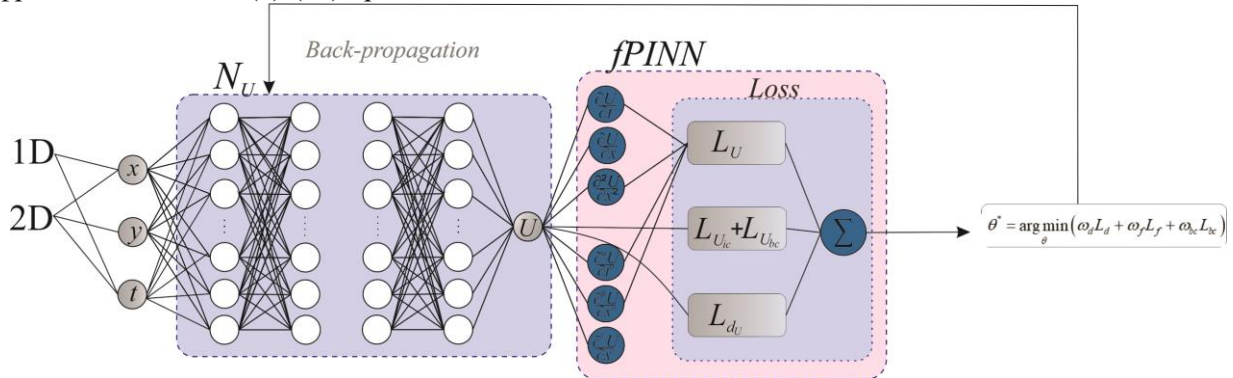


Рис 1. Архітектура нейронної мережі.

Результати та обговорення

Для оцінки ефективності запропонованого підходу було проведено моделювання процесу вологопереносу в капілярно-пористих матеріалах із фрактальною структурою. Для цього було розроблено програмне забезпечення мовою програмування Python з використанням бібліотек TensorFlow, Keras, Matplotlib тощо.

Програмна розробка включає три взаємопов'язаних програмних модуля (Рис.1): модуль реалізації математичної моделі; модуль реалізації нейронної мережі; модуль візуалізації даних.

Модуль реалізації математичної моделі призначений для задання параметрів моделі, чисельного моделювання вихідної задачі методом скінченних різниць та формування наборів даних, які в подальшому будуть застосовані у навчальній мережі.

Модуль реалізації нейронної мережі призначений для чисельного моделювання одновимірної математичної моделі (1)-(4). Він містить реалізацію фрактальної повнозв'язної нейронної мережі, яка має 8 прихованих шарів та 40 вузлів на кожному шарі, загалом 11641 параметрів. У моделі було застосовано функцію активації гіперболічний тангенс для всіх прихованих шарів, це рішення обрано через її гладку природу та відсутність нульової похідної.

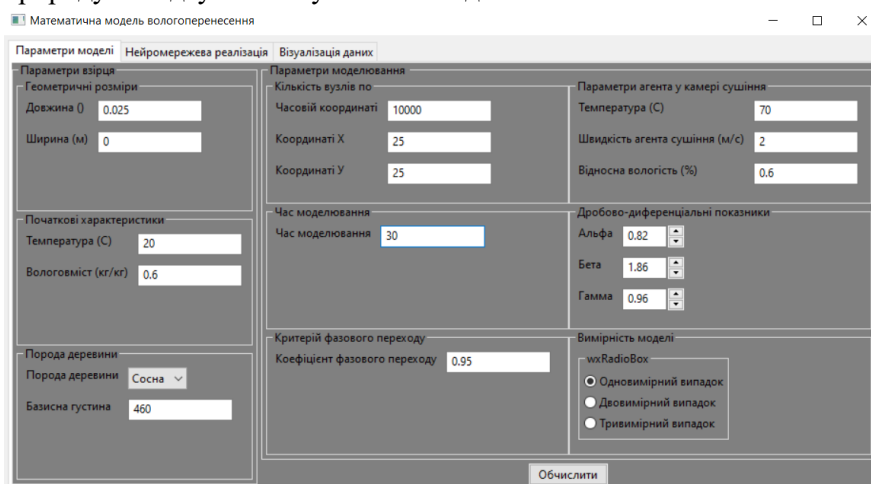


Рис 2. Діалогове вікно програми для задання параметрів моделі.

Нейромережа використовується для апроксимації вологісних полів. Для оптимізації функції втрат використовується алгоритм оцінки адаптивного моменту (Adam), який був адаптований для зміни швидкості навчання в залежності від ітерацій градієнтного спуску.

Модуль візуалізації даних призначений для побудови графічних залежностей.

Всі дослідження були проведені на персональному комп'ютері з процесором Intel Core i7-8750H та 16 ГБ оперативної пам'яті.

Використовуючи розроблений програмний застосунок проведено набір тестових експериментів з використанням деревини породи сосна. Основні вхідні параметри були фіксовані на таких рівнях: початкова температура $T_0 = 20^\circ\text{C}$, кінцева температура $t_c = 70^\circ\text{C}$, початкова вологість $U_0 = 0,4 \text{ кг/кг}$, відносна вологість повітря $\varphi = 60\%$ та швидкість агента сушіння $v = 2 \text{ м/с}$.

Дані для навчання нейронної мережі були розділені на три набори: перший містив 10 000 точок, розташованих у формі рівномірної сітки всередині області D ; два інші набори склалися з 100 точок, які були рівномірно розподілені на межі області D для врахування початкових та граничних умов. Для ефективного оцінки моделі ці дані для навчання також були розподілені на три основні множини: навчальний набір (train set), валідаційний набір (validation set) та тестовий набір (test set). Навчальний набір використано для навчання фрактальної нейронної мережі, валідаційний та тестовий набори - для налаштування параметрів моделі під час навчання, а саме вибору оптимальної кількості епох (≈ 4500) для уникнення перенавчання (Рис.3).

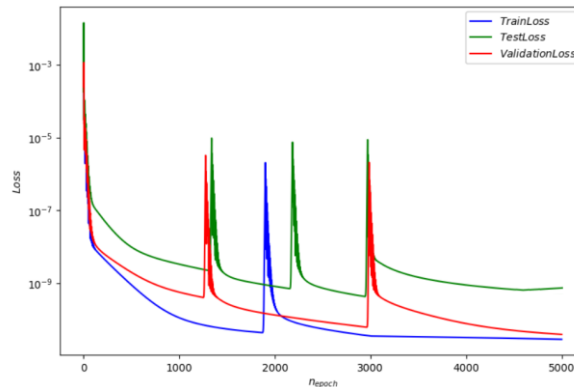


Рис 3. Еволюція функцій втрат для навчального, валідаційного та тестового наборів даних.

Після навчання нейронної мережі, існує можливість оцінити U і для будь-яких заданих значень x, y, t в межах розглянутого діапазону. Це займає приблизно 10^{-5} секунд на оцінку; і для сітки, що включає 10000 точок, це становить загальну суму часу приблизно 0,5 секунди. Для порівняння, вирішення тієї ж задачі за допомогою методу скінченних різниць займає близько 7 секунд.

Для перевірки точності реалізованої моделі було проведено порівняння отриманих результатів з використанням мережі з результатами, отриманими методом скінчених різниць. Чисельний експеримент проведений для одновимірної фрактальної задачі вологопереносу. Результати моделювання наведені на Рис. 4.

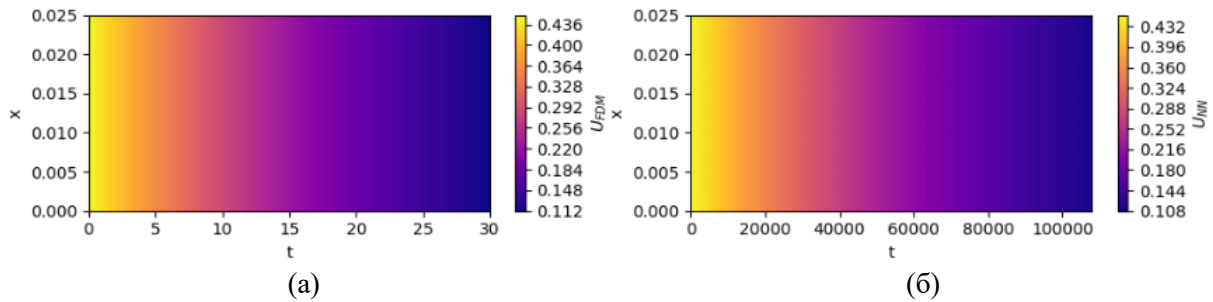


Рис. 4. Чисельне моделювання зміни вологості методами (а) —скінченних різниць, (б)—нейромережевим методом.

Отримані результати свідчать, що абсолютна похибка у прогнозуванні вологості за допомогою фрактального нейромережевого методу залишається в прийнятних межах порівняно з результатами, отриманими методом скінченних різниць для розглянутого випадку. Також ці результати експериментів добре узгоджуються з результатами, отриманими іншими дослідниками [26], [27].

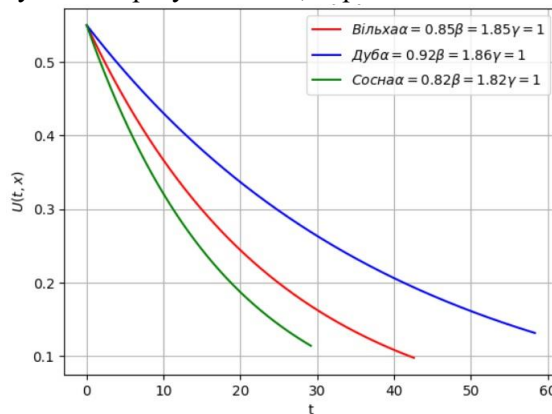


Рис. 5. Вологовміст для різних порід деревини з урахуванням фрактальної структури матеріалу

На Рис. 5 показано зміни у вологості матеріалів при чисельних експериментах з одновимірною математичною моделлю капілярно-пористих матеріалів з фрактальною структурою. Досліджувалася

динаміка вмісту вологи в деревині різних порід при різних значеннях параметрів α , β та ν . Початкове значення вологості було встановлено на рівні 0,55 кг/кг. Аналізуючи Рис. 5, можна визначити, що вологість вивільнюється швидше для деревини сосни, а найповільніше – для дуба. Це пояснюється різницею у капілярно-пористій структурі між м'якими та твердими листяними породами. Отже, процес вивільнення вологи під час сушіння відбувається повільніше для деревини з більшою базисною густиною, а саме для твердих листяних порід. Це пов'язано з неоднорідністю матеріалу та властивостями самоорганізації твердих порід, через що деревина цих порід відновлює свій початковий стан швидше.

Проаналізуємо вплив дробових показників на зміну вологості капілярно-пористих матеріалів з часом. Для цього розглянемо Рис.6 та Рис.7.

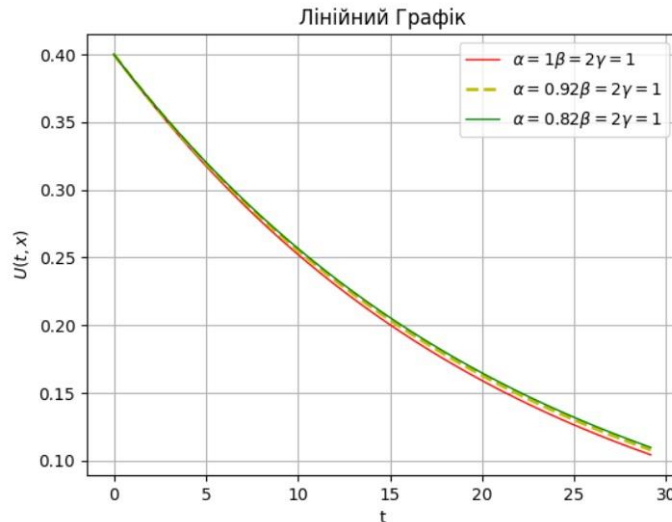


Рис. 6. Вплив дробового параметра α на вологовміст

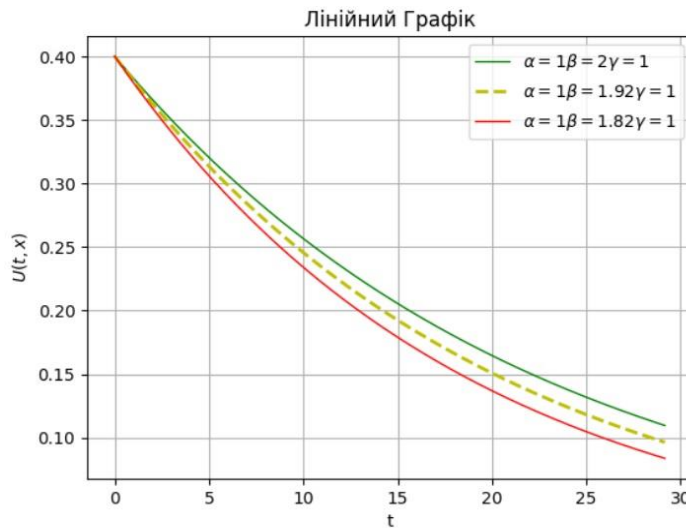


Рис. 7. Вплив дробового параметра β на вологовміст

Отримані результати показують, що зниження дробово-диференціальних показників у моделі вологоперенесення при неоднорідних та фрактальних структурах сприяє швидшому вивільненню вологи з деревини будь-якої породи всередині матеріалу. Це явище характерне для субдифузії.

Результати фрактальної моделі вологоперенесення показали, що вплив параметра β , який відображає дробовий показник моделі за просторовими координатами, є суттєвішим, ніж вплив параметра α .

Отже, використання параметрів, які враховують як часові, так і просторові аспекти у дробово-диференціальних дослідженнях, дозволяє докладніше вивчити процеси, що відбуваються у даних середовищах. Це дозволяє враховувати спадковість та внутрішню самоорганізацію матеріалу з більшою точністю.

Висновки

У даній роботі досліджена математична модель вологоперенесення в капілярно-пористих середовищах у одно- та двовимірному просторі з урахуванням фрактальної структури матеріалу. Цей підхід дозволив враховувати такі властивості системи, як пам'ять, самоорганізація та кореляції у часі та просторі. Математична модель досить складна, тому для її чисельного моделювання використовувався фрактальний нейромережевий метод на основі fPINN-архітектури. Цей метод використовує спеціальну функцію втрат, яка враховує фізичні властивості дослідженого процесу. Для обчислення дробових операторів використовувались формули з дробового диференціального обчислення, і була розроблена різницева схема для функції втрат. Також розроблено програмне забезпечення для реалізації нейромережевого методу, і його ефективність перевірена порівнянням отриманих чисельних результатів з результатами, отриманими за допомогою чисельних методів скінченних різниць. Проведені перевірки показали адекватність математичної моделі та показали перспективність застосування числового фрактального нейромережевого методу.

Перелік використаних джерел

1. V. V. Uchaikin, "Method drobovykh pokhidnykh." ["Method of Fractional Derivatives"]. Ul'yanovsk: Artishok Publ., 2008, 512 p.
2. L. A. Fil'shtyn's'kyi, T. V. Mukomel, T. A. Kirichok. "Odnovymirna pochatkovo –kraiiova zadacha dlia drobovo – diferentsial'noho rivniannia teplonosinnia." [One-Dimensional Initial and Boundary Problem for Fractional Differential Equation of Heat Conduction]. Visnyk Zaporiz'koho natsional'noho universytetu, 2010, No. 1, pp. 113-118.
3. V. V. Nikolenko, V. A. Yachmenyev, "Tochne virishennya pochatkovo-kraiiovoji zadachi dlya rivnannya anormal'noji dyfuziyi." ["Exact Solution of the Initial-Boundary Problem for the Equation of Anomalous Diffusion"]. Visnyk Kharkivs'koho natsional'noho universytetu imeni V.M. Karazina, 2015, S. 131-136.
4. F. Huang, F.Liu, "The Space-Time Fractional Diffusion Equation with Caputo Derivatives". Journal of Applied Mathematics and Computing, 19 (2005), 1-2, pp. 179-190.
5. Y. Z Povstenko, «Signalling problem for time-fractional diffusion-wave equation in a half-plane». Fractional calculus and applied analysis, 2008, 11, № 3, pp. 329-352.
6. B.Y. Datsko, V.V. Gafiychuk, "Different types of instabilities and complex dynamics in reaction-diffusion systems with fractional derivatives". Computational and Nonlinear Dynamics, 2012.
7. Y.Povstenko, "Fundamental solutions to timefractional heat conduction equations in two joint half-lines", Cent. Eur. J. Phys, 11(10), 2013, pp. 1284-1294
8. Zhu Tiejuan, Jerry M Harris, "Modeling acoustic wave propagation in heterogeneous attenuating media using decoupled fractional laplacians", Geophysics, 79(3), 2014, T105–T116.
9. Chinenye Assumpta Nnakenyi, J. A. C. Weideman, "Spectral Methods for Fractional Differential Equations". African Institute for Mathematical Sciences (AIMS), 2015.
10. Ya. Sokolovskyy, V. Shymanskyi, M. Levkovych, "Mathematical modeling of nonisothermal moisture transfer and visco-elastic deformation in the materials with fractal structure", Computer Science and Information Technologies. CSIT 2016: proc. of the 11th Intern. Sci. and Techn. Conf., Lviv, 2016. P. 91-95.
11. Y. Sokolovskyy, M. Levkovych, V. Yarkun, Y. Protsyk and A. Nechepurenko, "Parallel Realization of the Problem of Heat and Moisture Transfer in Fractal-structure Materials," 2020 IEEE 15th International Conference on Computer Sciences and Information Technologies (CSIT), Zbarazh, Ukraine, 2020, pp. 86-90, doi: 10.1109/CSIT49958.2020.9322021.
12. A. K. Bazzaev, "Lokalno-odnomirna skhema dlya rivnannya teplorozvidnosti iz krayovymi umovami tret'oho rodu." ["Local One-Dimensional Scheme for the Heat Conduction Equation with Third-Kind Boundary Conditions"]. Vladikavkazkyi matematychnyi zhurnal, 2011, Vol. 13, No. 1, pp. 3-12.
13. I.E. Lagaris; A. Likas; D.I. Fotiadis, "Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations". IEEE transactions on neural networks 1998, 9, 987–1000.

14. Malek, A.; Beidokhti, R.S. Numerical solution for high order differential equations using a hybrid neural network-optimization method. *Applied Mathematics and Computation*, 2006, 183, 260–271.
15. J. Berg, K. Nystrom, “A unique deep artificial neural network approach to partial differential equations in complex geometries”. *Neurocomputing*, 317:28, <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2018.06.056>
16. A. G. Baydin, B. A. Pearlmutter, A. A. Radul, J. M. Siskind. “Automatic differentiation in machine learning: a survey”. *The Journal of Machine Learning Research*, 18(1), 2017.
17. James Bergstra, Olivier Breuleux, Frédéric Bastien, Pascal Lamblin, Razvan Pascanu, Guillaume Desjardins, Joseph Turian, David Warde-Farley, Yoshua Bengio. “Theano: a cpu and gpu math expression compiler”. In *Proceedings of the Python for scientific computing conference (SciPy)*, pages 1- 7, 2010.
18. Yu M Ermoliev and RJ-B Wets, “Numerical techniques for stochastic optimization”. Springer-Verlag, 1988.
19. I. E. Lagaris, A. Likas, D. I. Fotiadis. “Artificial Neural Networks for Solving Ordinary and Partial Differential Equations”. *arXiv e-prints*, page physics/9705023, 1997.
20. P. Márquez-Neila, M. Salzmann, P. Fua, “Imposing Hard Constraints on Deep Networks: Promises and Limitations”. *arXiv e-prints*, page arXiv:1706.02025, 2017.
21. R. Kondor, S. Trivedi, “On the Generalization of Equivariance and Convolution in Neural Networks to the Action of Compact Groups”. *Proceedings of the 35th International Conference on Machine Learning, Proceedings of Machine Learning Research*, vol 80. PMLR, pp 2747-2755.
22. S. Mallat, “Understanding deep convolutional networks”. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2015, pp.203. <https://doi.org/10.1098/rsta.2015.0203>.
23. M. Raissi, P. Perdikaris, GE. Karniadakis, “Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations”. *Journal of Computational Physics*, 378: 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>.
24. G. Pang, L. Lu, G. E. Karniadakis, “fPINNs: Fractional physics-informed neural networks”. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 41, 2019, pp. A2603–A2626.
25. J. Bangti, L. Raytcho, Zhou Zhi. “An analysis of the 11 scheme for the subdiffusion equation with nonsmooth data”. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 36(1), 2015, pp.197–221.
26. Y. Sokolovskyy, V. Shymanskyi, M. Levkovich, V. Yarkun, “Mathematical modeling of heat and moisture transfer and reological behavior in materials with fractal structure using the parallelization of predictor-corrector numerical method.” *Proceedings of the 2016 IEEE 1st International Conference on Data Stream Mining and Processing, DSMP 2016*, pp. 108-111, doi: 10.1109/DSMP.2016.7583518
27. Y. Sokolovskyy, M. Levkovich, O. Mokrytska, Y. Kaspryshyn, “Mathematical Modeling of Nonequilibrium Physical Processes, Taking into Account the Memory Effects and Spatial Correlation,” *9th International Conference on Advanced Computer Information Technologies, ACIT 2019 – Proceedings*, 2019, pp. 56-59, doi: 10.1109/ACITT.2019.8780011

Yaroslav Sokolovskyy¹, Tetiana Samotii²

¹ Computer Aided Design Department, Lviv Polytechnic National University, 12 S.Bandery Street, Lviv, Ukraine, E-mail: yaroslav.i.sokolovskyy@lpnu.ua, ORCID 0000-0003-4866-2575

²Software Engineering Department, Ukrainian National Forestry University, Ukraine, Lviv, 103 H.Chuprinky Str., E-mail: t.samotiy@ntu.edu.ua, ORCID 0000-0002-1317-8786

NEURAL NETWORK MODELING OF THE PROCESS MOISTURE TRANSFER ON THE BASIS OF DERIVATIVES FRACTIONAL ORDER

Received: August 12, 2023 / Revised: September 28, 2023 / Accepted: October 01, 2023

© Sokolovskyy Ya., Samotii T., 2023

Abstract. In this paper, a mathematical model of moisture transfer in capillary-porous media in one- and two-dimensional space is presented and investigated, for its description the apparatus of fractional integrodifferentiation was used. This approach made it possible to take into account such properties of a system with a fractal structure as memory, self-organization, temporal and spatial

correlations. The complexity of this mathematical model complicates its application and requires significant computing power. To calculate the numerical solution of the differential equation and speed up the calculations, the fractal neural network method, which is based on the fPINN architecture, is used. This method uses a loss function that takes into account physical information about the process under study. Formulas from fractional differential calculus were applied to express fractional derivatives and a difference scheme for the loss function was developed. The software for the implementation of the neural network method was developed and the applied approach was justified by comparing the obtained numerical results with the results of experiments by other scientists and the results obtained using finite difference numerical methods. The reliability check of the investigated indicators indicates the adequacy of the mathematical model and the prospects for further application of the numerical fractal neural network method.

Keywords: mathematical model; moisture transfer process; fractional derivatives; method of finite differences; physics-informed neural networks