

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «ЛЬВІВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА»

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

САМОТІЙ ТЕТЯНА СЕРГІЇВНА

УДК 004.[42+942]:519.[63+688]:536.24

ДИСЕРТАЦІЯ

**МЕТОДИ ТА ЗАСОБИ НЕЙРОМЕРЕЖЕВОГО МОДЕЛЮВАННЯ
ТЕПЛОМАСОПЕРЕНЕСЕННЯ В АНІЗОТРОПНИХ СЕРЕДОВИЩАХ З
ФРАКТАЛЬНОЮ СТРУКТУРОЮ**

12 – Інформаційні технології

122 – Комп'ютерні науки

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

 Т. С. Самотій

Наукові керівники:

Соколовський Ярослав Іванович, доктор технічних наук, професор

Мадейський Павел, доктор наук (габілітований), інженер, професор Гірничо-металургійної академії м.Краків

Львів – 2025

АНОТАЦІЯ

Самотій Т. С. Методи та засоби нейромережевого моделювання тепломасоперенесення в анізотропних середовищах з фрактальною структурою. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 122 «Комп'ютерні науки», галузь знань 12 «Інформаційні технології» – Національний університет “Львівська політехніка”, Львів, 2025.

Дисертацію присвячено вирішенню актуального науково-прикладного завдання побудови фрактальної фізично-інформованої нейронної моделі для опису процесів теплового та вологого перенесення в анізотропних капілярно-пористих середовищах із фрактальною організацією, а також розробці методів її практичної реалізації на основі апарату дробового інтегродиференціювання та глибинного навчання. Розроблені методи спрямовані на оптимізацію моделювання просторово-часового розподілу температури та вологовмісту в технологічних процесах, а також ідентифікацію параметрів дробових операторів моделі тепломасоперенесення.

У **першому розділі** дисертації здійснено системний аналіз сучасних підходів до моделювання теплового та вологого перенесення у фрактальних капілярно-пористих середовищах. Охарактеризовано математичні властивості фрактальних структур і різні представлення дробових операторів, включно з формами Капуто, Грюнвальда–Летнікова та Рімана–Ліувілля. Розглянуто існуючі математичні моделі процесів перенесення та виявлено їхні обмеження у випадку структурно складних матеріалів. Проведено огляд фізично-інформованих нейронних мереж (PINN), їх потенціалу для моделювання фізичних процесів і напрямків розширення під задачі фрактальних середовищ. Подано порівняльну характеристику програмних засобів, які використовують для реалізації відповідних моделей.

У **другому розділі** розроблено архітектуру фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі (fPINN), адаптовану до задач теплового та вологого

перенесення з урахуванням фрактальної структури середовища. Інтегровано дробові похідні у фізичні рівняння, що дало змогу врахувати ефекти пам'яті та просторової нелокальності. Розглянуто методи апроксимації фрактальних операторів і сформульовано функціонали втрат, які включають залишки рівнянь, граничні та початкові умови, а також компонент, що забезпечує узгодження моделі з навчальними даними. Обґрунтовано методи навчання мережі, включаючи методи поетапного навчання та адаптивного масштабування функціоналів втрат для покращення збіжності. Проведено оцінку точності моделі та аналіз її збіжності.

У **третьому розділі** представлено реалізацію запропонованої моделі в програмному середовищі. Описано структуру програмного застосунку, реалізованого у вигляді модульної системи для побудови, тренування, валідації та візуалізації результатів роботи fPINN. Обґрунтовано підхід до формування навчальних наборів даних та використання квазівипадкових точок для колокаційних умов. Визначено критерії вибору бібліотек, інструментів оптимізації та параметрів тренування. Запропоновано алгоритм реалізації fPINN у контексті задачі моделювання теплового та вологого перенесення. Проведено чисельні експерименти на синтетичних даних, які продемонстрували перевагу запропонованої моделі порівняно з класичними чисельними методами.

У **четвертому розділі** здійснено всебічний аналіз результатів дослідження. Наведено графіки розподілу температури та вологовмісту, отримані за допомогою fPINN-моделі, а також результати нейромережевої ідентифікації фрактальних параметрів середовища. Досліджено вплив регуляризаційних стратегій (L1 і L2) на точність прогнозування. Проведено порівняльну оцінку різних типів похибок і чутливість моделі до змін архітектури мережі. Проаналізовано вплив фрактальних характеристик середовища на тепловолгі властивості. Сформульовано практичні висновки та рекомендації щодо використання моделі в задачах, що потребують урахування фрактальної структури матеріалу.

Дисертаційна робота є внеском у розвиток інтелектуальних методів моделювання складних фізичних процесів. Запропонована нейромережева модель, що враховує фрактальні властивості середовища та використовує дробові оператори, у поєднанні з розробленими методами поетапного навчання з адаптивним балансуванням функціоналів втрат, забезпечує високу точність і гнучкість під час відтворення тепловологих процесів в анізотропних капілярно-пористих структурах. Крім того, розроблена методика дає можливість здійснювати ідентифікацію дробових параметрів перенесення, які відображають властивості пам'яті та просторової нелокальності середовища.

Розроблене програмне забезпечення для прогнозування розподілу температури та вологовмісту призначене для застосування в інженерних задачах – зокрема, у процесах сушіння матеріалів, теплообробки композитів і біоматеріалів, де критичним є врахування ефектів пам'яті та мікроструктурної неоднорідності. Інтеграція запропонованої моделі в інженерні системи сприятиме оптимізації технологічних режимів та підвищенню якості кінцевого продукту.

Ключові слова: тепло- та вологе перенесення; фрактальні середовища; капілярно-пористі матеріали; анізотропія; дробові диференціальні рівняння; нейронні мережі; фізично-інформовані нейронні мережі (fPINN); глибинне навчання; машинне навчання; архітектура нейромереж; адаптивна оптимізація; ідентифікація параметрів; комп'ютерне моделювання; інтелектуальні технології.

ПЕРЕЛІК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Перелік наукових публікацій, у яких відображено основні результати дисертаційного дослідження:

1.1. У міжнародних наукових журналах, що індексуються в базах Scopus та Web of Science:

1. Sokolovsky Y., Drozd K., Samotii T., Boretska I. Fractional-Order Modeling of Heat and Moisture Transfer in Anisotropic Materials Using a Physics-Informed Neural

Network // Materials. – 2024. – Vol. 17, No. 19. – Article number: 4753. – DOI: <https://doi.org/10.3390/ma17194753>.

1.2. У публікаціях, включених до переліку фахових наукових видань

України:

2. Sokolovsky Y., Samotii T. Application of an adaptive neural network for the identification of fractional parameters of heat and moisture transfer processes in fractal // Вісник Національного університету «Львівська політехніка». Серія: «Комп'ютерні системи проектування. Теорія і практика». – Львів: Вид-во Львів. політехніки, 2025. – № 1(7). – С. 11–24. – DOI: <https://doi.org/10.23939/cds2025.01.011>.
3. Sokolovsky Y., Samotii T. Adaptive Fractional Neural Algorithm for Modeling Heat-and-Mass Transfer // Вісник Національного університету «Львівська політехніка». Серія: «Комп'ютерні системи проектування. Теорія і практика». – Львів: Вид-во Львів. політехніки, 2024. – № 3(6). – С. 139–153. – DOI: <https://doi.org/10.23939/cds2024.03.139>.
4. Соколовський Я., Самотій Т. Нейромережеве моделювання процесу вологоперенесення на основі похідних дробового порядку // Вісник Національного університету «Львівська політехніка». Серія: «Комп'ютерні системи проектування. Теорія і практика». – Львів: Вид-во Львів. політехніки, 2023. – № 1(5). – С. 108–120. – DOI: <https://doi.org/10.23939/cds2023.01.108>.

2. Публікації, що підтверджують апробацію результатів дисертаційного дослідження:

5. Sokolovsky Y., Samotii T., Levkovych M., Kroshnyy I., Mokrytska O. Neural network for modeling the process of moisture transfer in materials with fractal structure // 2024 IEEE 19th International Conference on Computer Science and Information Technologies (CSIT), 16–19 October 2024, Lviv, Ukraine. – IEEE, 2024. – DOI: <https://doi.org/10.1109/CSIT65290.2024.10982656>.

6. Sokolovsky Y., Samotii T., Mokrytska O. Adaptive neural network identification of fractional heat and moisture transfer parameters in fractal media // CAD in Machinery Design. Implementation and Educational Issues: Proceedings of the XXXII International Conference (Lviv, 28–30 November 2024). – Lviv, 2024. – P. 10. – URL: https://cadmd.lpnu.ua/doc/CADMD_2024_book.pdf.
7. Samotiy T. S., Sokolovskyi Y. I. Нейромережевий метод дослідження теплообміну у середовищах з фрактальною структурою // Forestry Education and Science: Current Challenges and Development Prospects: Proceedings of the International Science-Practical Conference (Lviv, 23–25 October 2024). – 2024. – DOI: <https://doi.org/10.36930/conf150.5.11>.
8. Самотій Т., Соколовський Я.І. Нейромережевий метод чисельного моделювання вологоперенесення у фрактальних середовищах // Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології: матеріали V наук.-практ. конф. студентів, аспірантів та молодих учених (Львів, 2023). – Львів: НЛТУ України, 2023. – С. 49–51. – URL: <https://conf.nltu.edu.ua/index.php/conf1/article/view/17>.
9. Sokolovsky Y., Samotii T., Mokrytska O. Using fractal physics-informed neural network in solving problems of heat and moisture conductivity // XXXI International Conference CAD in Machinery Design Implementation and Educational Issues (CADMD), 26–28 October 2023, Supraśl, Poland. – 2023. – URL: <https://cadmd.lpnu.ua/2023.html>.
10. Самотій Т., Соколовський Я.І. Сурогатне моделювання процесів тепломасопереносу на основі глибокого навчання з фізичними обмеженнями // Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології: матеріали IV наук.-практ. конф. студентів, аспірантів та молодих учених (Львів, 2022). – Львів: НЛТУ України, 2022. – С. 62–67.
11. Sokolovsky Y., Samotii T., Kroshnyy I. Physics-informed neural network for modeling the process of heat-and-mass transfer based on the apparatus of fractional

derivatives // 2023 IEEE 17th International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems (CADSM), 22–25 February 2023, Lviv, Ukraine. – IEEE, 2023. – P. 30–35. – DOI: <https://doi.org/10.1109/CADSM58174.2023.10076540>.

12. Самотій Т.С. Нейромережевий підхід до розв’язання диференціальних рівнянь параболічного типу // Комп’ютерне моделювання та інформаційні технології: матеріали III наук.-практ. конф. студентів, аспірантів та молодих учених (Львів, 2021). – Львів: НЛТУ України, 2021. – С. 11–15.

3. Інші публікації, що додатково висвітлюють результати дисертаційного дослідження:

13. Sokolovsky Y., Nechepurenko A., Samotii T., Yatsyshyn S., Mokrytska O., Yarkun V. Software and algorithmic support for finite element analysis of spatial heat-and-moisture transfer in anisotropic capillary-porous materials // Proceedings of the Second International Conference on Data Stream Mining and Processing (DSMP), 21–25 August 2020, Lviv, Ukraine. – IEEE, 2020. – P. 316–320. – DOI: <https://doi.org/10.1109/DSMP47368.2020.9204175>.
14. Sokolovsky Y., Nechepurenko A., Herasymchuk O., Mokrytska O., Samotii T. Software and algorithmic aspects of automating finite-element discretization // Proceedings of the 2021 IEEE 16th International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems (CADSM), 22–26 February 2021, Lviv, Ukraine. – IEEE, 2021. – P. 28–33. – DOI: <https://doi.org/10.1109/CADSM52681.2021.9385238>.
15. Sokolovsky Y., Sinkevych O., Shymanskyi V., Boretska I., Samotii T. Construction of asynchronous cell-automatic model for research the thermal mass transfer process // Proceedings of the XVIIth International Conference on Perspective Technologies and Methods in MEMS Design (MEMSTECH), 12–16 May 2021, Polyana, Ukraine. – IEEE, 2021. – P. 29–33. – DOI: <https://doi.org/10.1109/MEMSTECH53091.2021.9467930>.

ABSTRACT

Samotii T.S. Methods and tools of neural network modeling of heat and mass transfer in anisotropic media with fractal structure. – A qualification scientific work in the form of a manuscript.

Dissertation for the degree of Doctor of Philosophy in specialty 122 "Computer Science", field of knowledge 12 "Information Technology" – Lviv Polytechnic National University, Lviv, 2025.

The dissertation is devoted to solving a relevant scientific and applied problem of constructing a fractal physics-informed neural network (fPINN) model for describing heat and moisture transfer processes in anisotropic capillary-porous media with fractal organization. It also focuses on developing methods for its practical implementation based on the apparatus of fractional integro-differentiation and deep learning. The developed methods aim to optimize the modeling of spatio-temporal temperature and moisture content distributions in technological processes, as well as to identify the parameters of fractional operators of the heat and moisture transfer model.

In the first chapter, a systematic analysis of modern approaches to modeling heat and moisture transfer in fractal capillary-porous media is presented. The mathematical properties of fractal structures and different representations of fractional operators, including Caputo, Grünwald–Letnikov, and Riemann–Liouville forms, are described. The limitations of existing mathematical models for structurally complex materials are identified. An overview of physics-informed neural networks (PINNs), their potential for modeling physical processes, and possibilities for extending them to fractal environments is provided. Comparative characteristics of software tools for implementing such models are presented.

In the second chapter, the architecture of the fPINN adapted to heat and moisture transfer tasks is developed, taking into account the fractal structure of the medium.

Fractional derivatives are integrated into the physical equations, enabling the model to capture memory effects and spatial nonlocality. Methods for approximating fractal operators are presented, and loss functionals are formulated to include PDE residuals, boundary and initial conditions, and data consistency terms. Training strategies, including staged training and adaptive loss weighting, are justified to improve convergence. The accuracy and convergence behavior of the model are evaluated.

The third chapter presents the implementation of the proposed model in a software environment. The structure of the application is described, implemented as a modular system for constructing, training, validating, and visualizing the performance of the fPINN. The approach to forming training datasets and using quasi-random sampling for collocation points is explained. The choice of libraries, optimization tools, and training parameters is substantiated. The algorithm for implementing fPINN in the context of heat and moisture transfer modeling is detailed. Numerical experiments on synthetic data demonstrate the advantages of the proposed model over classical numerical methods.

In the fourth chapter, the results of the study are comprehensively analyzed. Graphs of temperature and moisture content distribution obtained via fPINN are provided, along with the results of neural network-based identification of fractal parameters. The influence of regularization strategies (L1 and L2) on prediction accuracy is investigated. A comparative evaluation of different error types and the sensitivity of the model to network architecture changes is conducted. The effect of fractal characteristics on the thermal and moisture properties of the medium is analyzed. Practical conclusions and recommendations for using the model in problems requiring the consideration of fractal structure are formulated.

This dissertation contributes to the advancement of intelligent methods for modeling complex physical processes. The proposed neural network model, which incorporates fractal properties and uses fractional operators, combined with developed staged training methods and adaptive loss balancing, ensures high accuracy and flexibility

in modeling heat and moisture processes in anisotropic capillary-porous structures. Furthermore, the developed methodology enables identification of fractional transfer parameters that reflect memory and spatial nonlocality of the medium.

The developed software tool for predicting temperature and moisture distribution is intended for engineering applications—particularly in material drying processes, heat treatment of composites, and biomaterials—where consideration of memory effects and microstructural heterogeneity is critical. Integration of the proposed model into engineering systems will facilitate optimization of process regimes and improvement of final product quality.

Keywords: heat and moisture transfer; fractal media; capillary-porous materials; anisotropy; fractional differential equations; physics-informed neural networks (fPINN); deep learning; machine learning; neural network architecture; adaptive optimization; parameter identification; computer modeling; intelligent technologies.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	13
РОЗДІЛ I АНАЛІЗ МЕТОДІВ МАШИННОГО НАВЧАННЯ ТА МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТЕПЛОВОГО ТА ВОЛОГОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ У ФРАКТАЛЬНИХ СЕРЕДОВИЩАХ.....	21
1.1. Фрактальні середовища: математичний опис та їхні властивості.....	22
1.2. Аналіз теоретичних аспектів фрактальних операторів та їх різних форм представлення.....	29
1.3. Аналіз математичних моделей процесів теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах та обмеження традиційних підходів.....	36
1.4. Огляд класичних фізично-інформованих нейромереж (PINN).....	46
1.5. Розширення PINN для роботи з фрактальними середовищами.....	52
1.6. Огляд засобів програмної реалізації.....	56
Висновки до I розділу.....	64
РОЗДІЛ II РОЗРОБЛЕННЯ ФРАКТАЛЬНОЇ ФІЗИЧНО-ІНФОРМОВАНОЇ НЕЙРОМЕРЕЖІ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТЕПЛОВОГО ТА ВОЛОГОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ У ФРАКТАЛЬНИХ СЕРЕДОВИЩАХ.....	66
2.1. Обґрунтування архітектури fPINN.....	66
2.2. Інтеграція моделі теплового та вологого перенесення у fPINN: використання дробових похідних у рівняннях моделі.....	71
2.3. Апроксимація фрактальних операторів.....	79
2.4. Визначення функцій втрат.....	84
2.5. Методи навчання та оптимізації fPINN для ефективного моделювання процесів перенесення.....	89
2.5.1. Поетапний підхід до навчання fPINN.....	91
2.5.2. Метод адаптивного масштабування функцій втрат для покращення збіжності.....	93
2.6. Оцінка точності моделей та аналіз збіжності мережі fPINN.....	97
Висновки до II розділу.....	104
РОЗДІЛ III ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ.....	106
3.1. Структура програмного застосунку.....	106
3.2. Обґрунтування підбору навчальних даних та їх розподілу.....	115

3.3. Обґрунтування вибору бібліотек для оптимізації	122
3.4. Методи навчання та аналізу помилок	126
3.5. Алгоритм реалізації fPINN для моделювання теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах	130
3.6. Чисельне моделювання на синтетичних даних: оцінка точності fPINN в порівнянні з класичними методами	134
Висновки до III розділу	138
РОЗДІЛ IV АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ ДОСЛІДЖЕННЯ	140
4.1. Нейромережева реалізація теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах.....	140
4.2. Нейромережева реалізація алгоритмів ідентифікації фрактальних параметрів	151
4.3. Дослідження впливу L1 та L2 регуляризації на фрактальну нейронну модель	164
4.4. Дослідження адекватності моделі на основі оцінки різних типів похибок .	172
4.5. Дослідження впливу архітектури мережі на точність фрактальної нейронної моделі.....	174
4.6. Аналіз впливу фрактальних характеристик середовища на величини температури та вологості.....	177
Висновки до IV розділу	185
ВИСНОВКИ.....	187
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ.....	189
ДОДАТОК А Акти впровадження результатів дисертаційної роботи	216
ДОДАТОК Б Теплофізичні параметри матеріалу.....	217

ВСТУП

Обґрунтування вибору теми дослідження. У природних і техногенних системах широко розповсюджені матеріали з капілярно-пористою структурою, яка за своєю природою є фрактальною. До таких матеріалів належать ґрунти, геологічні породи, біологічні тканини, композити та деревина. У таких середовищах відбуваються складні процеси перенесення речовини та енергії, зокрема тепла й вологи, що зумовлює складність їх математичного опису.

Класичні лінійні та квазілінійні моделі, попри простоту та зручність аналітичного опрацювання, часто не забезпечують адекватного відображення тепломасообмінних процесів у середовищах із фрактальною структурою. Нелінійні моделі розширюють діапазон можливостей опису, однак переважно не враховують характерні властивості таких середовищ – зокрема ефекти довготривалої пам'яті, багатомасштабності та просторової самоорганізації.

Це обумовлює необхідність використання гнучкіших та універсальних підходів, здатних поєднувати геометричну складність фрактального середовища з його внутрішньою динамікою. Потреба в розробленні точніших математичних моделей для капілярно-пористих матеріалів також пов'язана з прикладними завданнями, адже чимало важливих технологічних процесів – таких як сушіння, термічна обробка, зволоження, зберігання та транспортування – супроводжуються складними явищами перенесення тепла і вологи, нелінійною дифузією та формуванням залишкових напружень.

Полімерні матеріали є одним із найхарактерніших прикладів капілярно-пористих матеріалів, де вологоперенесення за неізотермічних умов суттєво впливає на якість і тривалість технологічних операцій, насамперед сушіння. Тому моделювання таких процесів вимагає підходів, здатних відтворювати фрактальну неоднорідність, ефекти пам'яті та анізотропію матеріалу.

Сучасні тенденції розвитку математичного моделювання та автоматизації інженерних розрахунків засвідчують ефективність застосування методів штучного інтелекту, зокрема штучних нейронних мереж. Особливий інтерес становлять Physics-Informed Neural Networks (PINN) – фізично-інформовані нейронні мережі, які поєднують у собі переваги враховування емпіричних даних, числового розв’язання диференціальних рівнянь і гнучкість машинного навчання. Інтеграція апарату дробового числення та нейромережевої апроксимації дає змогу суттєво підвищити ефективність моделювання, забезпечивши при цьому врахування фрактальних властивостей і властивостей із пам’яттю середовища.

Отже, вибір теми дослідження обґрунтовано необхідністю удосконалення математичних та нейромережевих підходів до моделювання процесів тепловологоперенесення у фрактальних капілярно-пористих матеріалах з метою підвищення точності розрахунків і ефективності керування технологічними циклами.

Актуальність дослідження зумовлена сучасними викликами у сфері моделювання процесів тепловологообміну в капілярно-пористих середовищах, що пов’язані з необхідністю врахування складної внутрішньої структури матеріалу з фрактальними властивостями. Точне чисельне моделювання цих процесів має значення для технологій, пов’язаних зі сушінням, термообробкою та зберіганням вологих матеріалів. Помилки в таких розрахунках можуть призвести до втрати якості продукції, підвищених енерговитрат та неконтрольованих змін у матеріалі.

Наявні числові методи серед яких, наприклад, методи скінченних різниць і скінченних елементів, хоча й широко застосовуються, не здатні точно відтворити складні ефекти, притаманні фрактальним середовищам, особливо у випадках багатомасштабної структури та динамічної зміни властивостей у часі. У цьому контексті особливо перспективним є використання математичного апарату

дробового числення, що дає змогу моделювати ефекти пам'яті, аномальної дифузії, просторової нелокальності у поєднанні з методами штучного інтелекту.

Зокрема, фізично-інформовані фейронні мережі (PINN) та їх фрактальні модифікації (fPINN) відкривають нові можливості для створення гібридних моделей, у яких фізичні рівняння інтегруються в навчальний процес нейронної мережі. Такий підхід забезпечує точність, стійкість до шуму в даних, а також здатність адаптуватися до експериментальних або синтетичних даних.

Отже, розробка та дослідження методів моделювання, що поєднують дробове диференціювання з нейромережевими підходами, є актуальним і необхідним як для поглиблення теоретичних основ моделювання у фрактальних середовищах, так і для вдосконалення практичних інструментів керування тепловологообмінними процесами у високочутливих технологічних системах.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Матеріали дисертаційної роботи одержано в межах виконання науково-дослідних тем, затверджених у Національному лісотехнічному університеті України. Зокрема, дослідження проводилися в рамках наукових тем «Технології та засоби математичного моделювання, оптимізації та системного аналізу нерівноважних фізичних процесів» (реєстраційний номер 0121U110154, термін виконання: березень 2021р. – грудень 2023 р.) та «Інтелектуальні моделі та програмні засоби аналізу та прогнозування процесів у самоорганізованих системах» (реєстраційний номер 0124U002470, період реалізації: березень 2024 р.– березень 2027 р.).

У межах вказаних тем здобувачкою розроблено фрактальну нейромережеву модель для опису процесів тепло- та вологоперенесення в анізотропних капілярно-пористих середовищах із фрактальною структурою та методи поетапного навчання нейромережі з адаптивним узгодженням ваг складових функціоналів втрат й ідентифікації дробових параметрів. Запропоновану модель використано для

комп'ютерного моделювання процесів тепломасообміну під час термічної обробки матеріалів із фрактально організованою структурою.

Мета дисертаційної роботи полягає у побудові та дослідженні фрактальних фізично-інформованих нейромережових моделей процесів тепломасоперенесення в анізотропних капілярно-пористих середовищах із фрактальною структурою, у розробленні методів їх навчання та засобів реалізації з використанням апарату дробового інтегро-диференціювання та інструментів глибинного навчання.

Для її реалізації необхідно розв'язати такі завдання:

- синтезувати нейронну модель зв'язаного тепломасоперенесення, яка враховує ефекти пам'яті, просторової нелокальності та внутрішньої самоорганізації матеріалу;
- розробити метод навчання фізико-інформованої нейронної мережі, що враховує взаємодію процесів тепломасоперенесення в анізотропних капілярно-пористих матеріалах;
- розробити алгоритми та програмне забезпечення для реалізації нейромережової моделі тепломасоперенесення у середовищах з фрактальною структурою;
- розробити нейромережовий метод ідентифікації параметрів дробових операторів;
- здійснити числовий аналіз результатів дослідження та встановити закономірності процесу тепломасоперенесення у фрактальних середовищах.

Об'єкт дослідження – процеси тепломасоперенесення в анізотропних середовищах із фрактальною структурою.

Предмет дослідження – математичні та нейромережові моделі (fPINN) процесів тепломасоперенесення у матеріалах із фрактальною структурою, методи їх навчання, ідентифікації параметрів.

У дисертаційній роботі використано такі методи дослідження:

- методи математичної фізики та дробового числення для формулювання математичних моделей тепломасоперенесення у фрактальних структурах.
- методи теорії штучних нейронних мереж, зокрема підходи Physics-Informed Neural Networks (PINN) та їх фрактальні модифікації (fPINN) для синтезу нейромережових моделей.
- скінченно-різницеві схеми дробового порядку для побудови функції втрат.
- алгоритми машинного навчання, зокрема, оптимізаційні методи (Adam, RMSProp та інші) для навчання нейромереж і налаштування їх параметрів.
- методи статистичного аналізу для перевірки адекватності моделей.
- методи об'єктно-орієнтованого аналізу та проектування програмного забезпечення.

Наукова новизна одержаних результатів дисертаційної роботи полягає у такому:

- вперше розроблено метод синтезу фрактальної фізично-інформованої нейронної моделі (fPINN) для моделювання взаємопов'язаних процесів тепломасоперенесення в анізотропних середовищах з урахуванням ефектів довготривалої пам'яті та просторової нелокальності;
- отримано нові скінченно-різницеві схеми апроксимації функцій втрат у фрактальній фізико-інформованій нейронній мережі, які інтегровані безпосередньо у процес навчання мережі та дають можливість врахувати ефекти пам'яті та просторової нелокальності в процесах тепломасоперенесення;
- вперше розроблено метод поетапного навчання фрактальної фізико-інформованої нейронної мережі, що забезпечує досягнення допустимого рівня функцій втрат відповідно до заданих критеріїв точності моделі з урахуванням розбалансування градієнтів тепломасоперенесення у фрактальних середовищах;
- розроблено нейромережовий метод ідентифікації параметрів дробових операторів моделі процесу тепломасоперенесення у фрактальних середовищах,

який дає змогу визначати параметри ефекту пам'яті та просторової нелокальності на основі наявності обмежених синтетичних або експериментальних даних;

- встановлено закономірності процесу тепломасоперенесення у фрактальних середовищах, що проявляються, зокрема, у взаємозв'язку між дробовими показниками та ступенем анізотропії матеріалу. Показано, що варіювання цих параметрів суттєво впливає на просторово-часову структуру перенесення тепла і вологи.

Практичне значення отриманих результатів:

- розроблено алгоритм числової реалізації фрактальної нейромережевої моделі неізотермічного тепломасоперенесення у двовимірній області, який враховує дробові похідні за просторовими та часовими координатами. Запропонований алгоритм дає змогу моделювати зміну параметрів процесу з урахуванням ефектів пам'яті й самоорганізації, що є суттєвим для контролю технологічних параметрів теплової обробки матеріалів;
- реалізовано процедуру ідентифікації параметрів дробово-диференціальних операторів fPINN на основі синтетичних та експериментальних даних тепломасоперенесення в фрактальних середовищах. Це дає змогу підвищити точність математичних моделей процесів у капілярно-пористих середовищах, що сприятиме вдосконаленню технологічних процесів з урахуванням конкретних умов та даних вимірювань;
- створено програмне забезпечення для реалізації fPINN, що дає змогу аналізувати поведінку процесу тепломасоперенесення у середовищах з урахуванням ефектів пам'яті та просторової нелокальності.

Запропоновані в дисертаційній роботі методи, що поєднують апарат фрактального інтегродиференціювання з нейромережевими архітектурами (fPINN) знайшли застосування в навчальному процесі підготовки магістрів та бакалаврів спеціальності 122 «Комп'ютерні науки» на кафедрі систем автоматизованого

проектування Національного університету «Львівська політехніка». Зокрема, окремі положення дослідження інтегровано в зміст навчальних дисциплін «Системи штучного інтелекту», «Застосування систем штучного інтелекту у технологічних рішеннях», а також «Системи із самоорганізацією та самонавчанням» для здобувачів освітнього ступеня «бакалавр» і дисципліни «Штучні нейронні мережі». (акт впровадження від 03.06.2025 року).

Особистий внесок здобувачки. Дисертаційне дослідження є результатом самостійної наукової роботи здобувачки. Сформульовані у дисертації наукові положення, висновки та практичні рекомендації отримано нею особисто.

У наукових працях, опублікованих у співавторстві, до дисертації включено лише ті положення, які є результатом індивідуального наукового внеску здобувачки.

Апробація результатів дисертації. Основні положення та результати дисертаційного дослідження представлені та обговорені на низці міжнародних і вітчизняних наукових конференцій, серед яких: IEEE International Conference on Computer Science and Information Technologies (CSIT) – 2024 р., Львів, Україна; International Conference «CAD in Machinery Design. Implementation and Educational Issues (CADMD) – 2023 р., Супрасль, Польща; 2024 р., Львів, Україна; IEEE International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems (CADSM) – 2021, 2023 рр., Львів, Україна; Науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології» – 2021, 2022, 2023 рр., Львів, Україна; International Science-Practical Conference «Forestry Education and Science: Current Challenges and Development Prospects» – 2024 р., Львів, Україна; International Conference «Data Stream Mining & Processing (DSMP) – 2020 р., Львів, Україна; International Conference on Perspective Technologies and Methods in MEMS Design (MEMSTECH) – 2021 р., Поляна, Україна.

Публікації. Результати дисертаційного дослідження викладено у 15 наукових публікаціях. Серед них – одна стаття, опублікована у журналі, що індексується у міжнародній наукометричній базі Scopus (Materials, кuartиль Q1 за JCR), три статті – у фахових наукових виданнях України за спеціальністю 122 «Комп’ютерні науки», включених до переліку наукових фахових видань МОН України (категорія Б), а також десять публікацій у матеріалах міжнародних та всеукраїнських конференцій, п’ять із яких індексуються у базі даних Scopus.

Ці публікації відображають результати досліджень, пов’язаних зі створенням нейромережевої моделі тепло- та вологоперенесення у фрактальних середовищах, розробкою методів її навчання та адаптації, а також з розробленням програмного забезпечення для чисельного моделювання відповідних процесів.

Структура та обсяг роботи. Дисертація включає анотацію, вступ, чотири розділи основного змісту, висновки, список використаних джерел і додатки. Загальний обсяг роботи становить 218 сторінок, з яких 175 займає основний текст. У дисертації наведено 1 таблицю, 31 ілюстрацію та 7 лістингів коду. Перелік використаних джерел складається з 208 найменувань і охоплює 27 сторінок.

РОЗДІЛ І АНАЛІЗ МЕТОДІВ МАШИННОГО НАВЧАННЯ ТА МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТЕПЛОВОГО ТА ВОЛОГОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ У ФРАКТАЛЬНИХ СЕРЕДОВИЩАХ.

Розвиток сучасної інженерії та науково-технічної думки дедалі частіше вимагає залучення комплексних підходів до моделювання природних і техногенних процесів. Зокрема, у сфері тепловологообміну велике значення мають методи, що дають змогу одночасно враховувати складну структуру матеріалів, а також мультифізичну природу явищ перенесення. У цьому контексті привертає увагу ідея фрактальності середовищ, адже багато реальних об'єктів – від геологічних порід та деревини до високотехнологічних композитів – мають ієрархічну неоднорідну будову, яку складно адекватно описати класичними підходами.

Аналіз літературних джерел свідчить, що за останні десятиліття наука виробила низку методів для моделювання тепломасоперенесення: від традиційних рівнянь теплопровідності й дифузії до сучасних варіантів із залученням дробового інтегродиференціювання. Водночас активний розвиток машинного та глибинного навчання відкриває нові можливості для аналізу складних процесів. Фізично-інформовані нейронні мережі (PINN) надають засоби побудови моделей, які “розуміють” внутрішню фізику процесу завдяки вбудованим у функцію втрат рівнянням. Поєднання такого підходу з фрактальними операторами та адаптація PINN до задач фрактальної геометрії дають можливість підвищити точність і ефективність чисельних розрахунків.

Разом із цим дослідження фрактальних систем ускладнене нелінійним характером процесів, підвищеними вимогами до обчислювальних ресурсів, а також відсутністю єдиних “класичних” методик для опису широкого спектра явищ. Тому актуальність застосування методів штучного інтелекту та розширених математичних моделей у цьому напрямі є безсумнівною.

У **першому розділі** цієї роботи розглянуто ключові аспекти й досягнення в царині машинного навчання та математичного моделювання процесів теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах. Зокрема, у підрозділах проаналізовано фрактальну геометрію та особливості структури фрактальних середовищ, способи представлення дробових операторів у математичних моделях, а також оглянуто класичні PINN-методики та можливості їх модифікацій під фрактальні завдання. Окрему увагу приділено різним програмним засобам, що дають змогу реалізувати ці підходи на практиці.

Отже, у цьому розділі сформовано концептуальну основу для подальшого глибшого вивчення та впровадження математичних і нейромережевих методів моделювання в задачах тепловологообміну у фрактальних середовищах. Окреслені підходи й аналітичні інструменти забезпечують широке бачення досліджуваної проблематики й створюють підґрунтя для розробки нових рішень, здатних підвищити ефективність керування складними фізичними процесами.

Основні результати, представлені в цьому розділі, висвітлені у наукових публікаціях, наведених у переліку джерел [135, 134, 131, 138, 126, 137, 202, 141].

1.1. Фрактальні середовища: математичний опис та їхні властивості

Термін “фрактал” (від лат. *fractus* – “дробовий” або “роздроблений”) уведений у науковий обіг Бенуа Мандельбротом у 1970-х роках у зв’язку з дослідженням об’єктів, форма яких є нерегулярною і залишається складною при різних масштабах збільшення [14, 91]. Класичним прикладом фрактального об’єкта може бути знаменита множина Кантора, крива Коха або сніжинка Коха [159, 160], але у природі нерегулярна та ієрархічна структура спостерігається набагато ширше: у будові берегових ліній [92], у тканинах живих організмів [163, 26, 98], у структурі пористих матеріалів [120, 21, 2, 3, 13, 178] тощо.

Головна ідея фрактальної геометрії полягає в тому, що фрактальні об'єкти мають властивість самоподібності (англ. *self-similarity*): кожний фрагмент їхньої структури відтворює будову цілого, тільки в меншому масштабі [14, 38]. Ступінь цієї самоподібності може варіюватися, але загальний принцип залишається незмінним. Це відрізняє фрактали від “гладких” об'єктів евклідової геометрії та зумовлює нетривіальні методи їх математичного опису.

Під фрактальним середовищем розуміється тип просторово неоднорідного матеріального середовища, морфологічна структура якого підпорядковується законам фрактальної геометрії. Його ключовими ознаками є самоподібність та масштабна інваріантність, що відображається у фрактальній розмірності [47, 77, 23, 108, 38, 14, 159, 160, 91] – числовому показнику, який кількісно описує ступінь структурної складності.

Фрактальна розмірність (зокрема, розмірність Гаусдорфа) дає змогу математично формалізувати ступінь «заповнення простору» тим чи іншим об'єктом і, на відміну від класичних геометричних розмірностей (1 – лінія, 2 – площа, 3 – об'єм), може набувати дробових значень. Наприклад, фрактальна розмірність кривої Коха становить приблизно 1,2619 [159, 160], кривої Пеано – 2 [108], кривої Леві – 1.9340 [77], а кривої Мінковського 1,5 [23]. Практичне обчислення розмірності Гаусдорфа є складним завданням і зазвичай вимагає застосування чисельних методів або спрощених аналогів, таких як метод покрокового підрахунку (англ. *box-counting*).

У концепції цього методу, щоб оцінити міру множини в просторі, використовують покривні набори – фігури (наприклад, кулі, куби чи квадрати) з характерним масштабом δ , якими покривають усю множину. Визначають кількість $N(\delta)$ таких елементів, необхідних для повного покриття. За зменшення масштабу δ , поведінка функції $N(\delta)$ дає змогу встановити фрактальну розмірність.

Для множини, що заповнює простір у певному фрактальному сенсі, виконується така асимптотична залежність:

$$N(\delta) \sim \delta^{-D} \quad (1.1)$$

де D – шуканий показник розмірності.

Розмірність Гаусдорфа визначається на основі міри Гаусдорфа M_d . Цю міру вводять як функцію від параметра розмірності d :

$$M_d = \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_i \gamma(d) \delta^d = \lim_{\delta \rightarrow 0} \gamma(d) N(\delta) \delta^d \quad (1.2)$$

де $\gamma(d)$ – геометричний коефіцієнт, пов'язаний із формою покривних елементів.

Отже, розмірність Гаусдорфа визначається як критичне значення $D = d$, для якого:

$$M_d = \begin{cases} 0, & \text{якщо } d < D, \\ \infty, & \text{якщо } d > D. \end{cases} \quad (1.3)$$

На практиці для знаходження D використовують логарифмічне перетворення (1.1):

$$\log N(\delta) \approx -D \log \delta, \quad (1.4)$$

тобто

$$D \approx \frac{\log N(\delta)}{-\log \delta}. \quad (1.5)$$

Залежність $\log N(\delta)$ від $\log \delta$ апроксимується прямою лінією, а її нахил визначає значення розмірності [38].

Розмірність D відповідає кількісному оцінюванню заповнення простору множиною без урахування розподілу маси або ймовірностей у її підобластях. Проте у випадку структур із нерівномірним, багатошаровим або статистично неоднорідним розподілом (тобто мультифракталів) така оцінка є недостатньою.

Для повнішої характеристики фрактальних структур введемо узагальнений спектр фрактальних розмірностей D_q , де параметр $q \in \mathbb{R}$ дає можливість зосередитись на різних аспектах поведінки розподілу:

$$D_q = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{q-1} \frac{\log \sum_{i=1}^{N(\delta)} p_i^q}{\log \delta}, \quad (1.6)$$

де p_i – маса або ймовірність у i -тому покривному наборі розміру δ , $N(\delta)$ – кількість елементів, що повністю покривають фрактал.

Отже, для $q = 0$ отримаємо – розмірність за методом покрокового покриття, для $q = 1$ отримаємо інформаційну розмірність, для $q = 2$ кореляційну розмірність, що враховує взаємне скупчення точок. Значення D_q для цілих $q > 2$, пов’язані з вищими порядками статистичних залежностей і можуть бути інтерпретовані як характеристики, що відображають багатоточкову кореляцію в структурі об’єкта [47].

До фрактальних середовищ зазвичай відносять природні та штучні матеріали, структура яких характеризується багаторівневою ієрархічністю, самоподібністю та статистичною неоднорідністю, серед яких:

- Гірські породи та ґрунти: мають складну пористу структуру, де макропори та мікропори формують ієрархічний простір для переміщення рідин та тепла [9, 174].
- Деревина: річні кільця, судини й волокна утворюють неоднорідну багаторівневу структуру, що впливає на механічні, тепло- та вологопровідні властивості [45, 67, 2].
- Керамічні та композитні матеріали: іноді мають “кластеризований” розподіл домішок, що створює фрактальну мережу пустот та мікротріщин [59].
- Пінисті матеріали та аерогелі: характеризуються відкритою пористістю з багаторівневою структурою осередків, які мають самоподібні геометричні властивості на різних масштабах [168].
- Біотканини та судинні системи живих організмів: розгалуження капілярів, альвеол або нейронних зв’язків часто демонструють фрактальні ознаки,

забезпечуючи ефективне транспортування речовин у компактному об'ємі [83].

- Вугільні та карбонатні матеріали: мають складну мікроструктуру з порожнинами, щілинами та міжзерновими зв'язками, які створюють фрактальну морфологію, що впливає на проникність та сорбційні властивості [20].
- Об'єкти цифрового або модульного середовища: у синтетичних моделях такі структури штучно формуються на основі фрактальних алгоритмів для імітації природних процесів [158].

У межах цього дослідження деревину обрано як представницьке фрактальне середовище, що у своїй природній будові поєднує складність, упорядкованість і варіативність. Її анатомічна архітектоніка – від мікроскопічних пористих каналів до макроструктурних волокон – не лише відповідає ідеї фракталу, а й формує багаторівневу систему перенесення, чутливу до напрямку, масштабу та локальної геометрії. Така матеріальна основа є цінною для тестування нейромережових підходів у моделюванні анізотропних процесів, де класичні моделі часто виявляються надто жорсткими або обмеженими.

Такий природно сформований, але структурно складний матеріал створює сприятливе середовище для перевірки того, наскільки ефективно нейромережові моделі здатні вловлювати тонку динаміку перенесення тепла та вологи, особливо в умовах геометричної неоднорідності й обмеженого набору емпіричних даних.

З огляду на це, у контексті цього дослідження деревина постає не лише як матеріальний об'єкт експерименту, а й як смисловий міст між абстрактною геометрією фракталів і широким колом прикладних задач. Вона дає можливість поєднати математичне моделювання з реальними фізичними процесами – зокрема сушінням та гідротермічною обробкою біоматеріалів – і закладає підґрунтя для подальших досліджень, пов'язаних із прогнозуванням деградації структур,

проектуванням адаптивних матеріалів із заданими функціональними характеристиками та інтеграцією в системи контролю технологічних процесів.

Отже, деревина є типовим прикладом капілярно-пористого середовища з фрактальною організацією. Її структура формується взаємозв'язаними анатомічними елементами – капілярами, судинами, трахеїдами, волокнами та паренхімними тканинами (рис. 1.1).

Багаторівнева, просторово неоднорідна будова обумовлює істотний капілярний ефект і ієрархічну пористість на макро-, мезо- та мікрорівнях, що забезпечує анізотропний тепло- та вологоперенос. Самоподібні властивості цієї структури доведені за допомогою фрактального аналізу різними методами (наприклад, порозиметрія ртуті або газова адсорбція) [31, 30, 71, 21]. Результати досліджень також показали, що поверхнева та об'ємна фрактальність структур суттєво відрізняються залежно від масштабу, що вказує на мультифрактальний характер деревини.

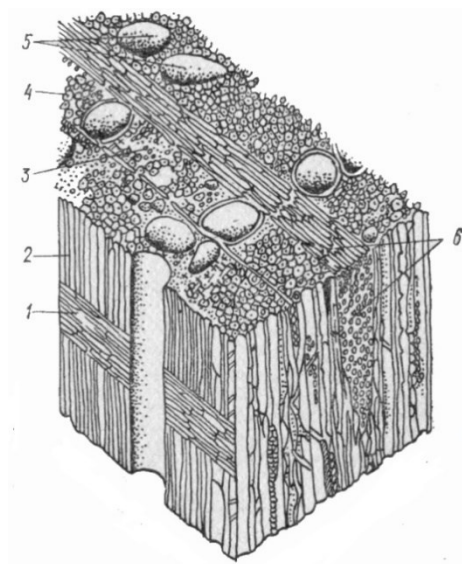


Рисунок 1.1 – Мікроструктура деревини дуба: 1,6 – серцевинні промені; 2 – лібриформні волокна; 3 – паренхімні клітини; 4 – дрібні судини пізньої деревини; 5 – великі судини ранньої деревини

Згідно з результатами досліджень, проведених методом газової адсорбції, фрактальна розмірність порового простору в різних породах деревини становить у середньому 2,92–2,97 [71]. Комплементарно до цього, метод ртутної порозиметрії дав змогу визначити широкий діапазон розмірів пор – від 3 до 35 000 нм, за якого загальна пористість деревини змінюється в межах 58–76%. На основі отриманих даних виділено три основні класи пор: макропори (з радіусом 5000–35 000 нм), мезопори (100–5000 нм) і мікропори (3–100 нм). Для кожного класу встановлено характерні значення фрактальної розмірності: для макропор – 2,98–2,998, для мезопор 2,60–2,92, а для мікропор – 2,53–2,72. Отримані результати свідчать про те, що із зростанням розміру пор підвищується складність їхньої геометричної організації [31, 30].

Авторами [21] запропоновано фракційні моделі проникності та теплопровідності для фрактального пористого середовища з урахуванням мікроструктурних властивостей і не ньютонівської поведінки. Моделі продемонстрували вищу точність порівняно з класичним капілярним підходом. Дослідниками встановлено, що збільшення фракційного параметра α і радіусного співвідношення β підвищує проникність і теплопровідність, тоді як зростання фрактальної розмірності та геометричних параметрів мікроструктури (довжинне співвідношення, кут розгалуження, рівень розгалуження) зменшує ці характеристики.

Знання фрактальної розмірності дає змогу кількісно враховувати ступінь нерівномірності структури, що важливо для моделювання процесів перенесення тепла й вологи [185, 29]. Це пояснюється тим, що вищі або проміжні (нецілі) розмірності можуть свідчити про збільшену площу контакту між пористою матрицею та перерізами, а це безпосередньо впливає на коефіцієнти вологопровідності, теплопровідності та капілярного підйому.

Загалом у галузі тепломасоперенесення [171, 161, 182, 14, 79, 36, 53, 205, 21, 185, 29, 34] та пружних властивостей пористих матеріалів [145, 146, 10, 130, 114, 4] фрактальні підходи дають можливість пояснити низку явищ, які не піддаються повному аналізу засобами класичних рівнянь: неоднорідність розподілу тепла на різних масштабах, нестандартні ефекти вологопоглинання тощо.

Отже у матеріалах із фрактальною пористістю температура та тепловий потік можуть різко змінюватися локально – із нерівнозначним розподілом ізотерм через неоднорідні мікроструктури [185, 29, 34]. Також фрактальні моделі дозволяють описувати нестандартні транспортоформи, які виникають внаслідок багаторівневої пористості – наприклад, швидке або сповільнене проникнення вологи, неадитивні ефекти капілярного підйому й дифузії [185, 177].

Ці результати підтверджують, що врахування фрактальності структури є важливим для точного моделювання теплового та вологопереносу в пористих середовищах, оскільки забезпечує можливість опису анізотропії та множинних нелокальних ефектів.

1.2. Аналіз теоретичних аспектів фрактальних операторів та їх різних форм представлення

Фрактальні оператори – це узагальнений інструмент для дослідження процесів, що відбуваються в неоднорідних чи складно організованих середовищах, котрі неможливо адекватно описати стандартними лінійними операторами. Одним із найпоширеніших підходів є використання дробового інтегродиференціювання, де звичайні похідні замінюються на дробові аналоги. На підставі цього модель отримує додаткові ступені свободи для відображення різноманітних ефектів, пов'язаних з «пам'яттю» системи, фрактальною розмірністю або складною взаємодією між шарами матеріалу.

Існують різні способи визначення дробових похідних за часом: Рімана–Ліувілля, Капуто, Грюнвальда–Летнікова та інші. Вибір конкретної форми залежить від необхідних граничних умов, фізичної інтерпретації та зручності обчислень. Кожен із наведених підходів має власні переваги й недоліки, що позначається на точності, швидкості збіжності алгоритмів та можливостях адаптації до конкретних фізичних моделей, які описують неінтегральну часову динаміку.

Окрім дробових похідних за часом, застосовують також оператори дробового впливу для опису просторових процесів. У низці випадків фрактальні оператори можуть моделювати нерівномірний розподіл фізичних параметрів і нерівномірний розподіл полів, пов'язаних із тепло- і вологоперенесенням.

Для більш точного моделювання тепловологоперенесення у фрактальних середовищах дедалі частіше використовують методи дробового числення [171, 161, 182, 14, 79, 36, 53, 205, 145, 146, 30, 71, 21, 185, 29, 34, 177, 206, 192, 196, 156, 153, 16, 37]. Такі підходи забезпечують можливість відображення складних фізичних явищ, зокрема ефектів довготривалої пам'яті, а також аномального характеру перенесення, коли швидкість дифузії, теплопровідність або вологопоглинання не підпорядковуються класичним лінійним закономірностям [21, 185, 29, 34, 177]. У науковій літературі виділяють кілька основних класів дробових операторів – кожен із них має власні переваги й обмеження щодо точності, збіжності чисельних методів та можливостей адаптації до конкретних умов моделювання складних середовищ.

Початковим етапом формалізації дробового числення стали оператори Рімана–Ліувілля (Riemann–Liouville), які широко застосовують у різноманітних фізичних задачах [147, 111, 66, 104, 90, 5, 125]. Визначення дробової похідної Рімана–Ліувілля порядку $\alpha > 0$ для функції $f(t)$, визначеної на інтервалі $t \in [a, b]$, ґрунтується на узагальненні інтеграла згорткового типу з ядром степеневого вигляду $(t - \tau)^{-\alpha}$, що дає змогу враховувати вплив попередніх станів системи (ефект пам'яті) на її подальшу еволюцію:

$$D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \int_a^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha-n+1}} d\tau, \quad (1.7)$$

де $\Gamma(\cdot)$ – гамма-функція Ейлера, а $n = \lceil \alpha \rceil$ – найменше ціле число, яке не менше за α .

Однак практичне використання цього оператора не завжди зручне через жорсткі вимоги до граничних умов і первісних функцій [66, 104, 125].

Альтернативою є оператор Капуто, який також базується на інтегралі Рімана–Ліувілля, але відрізняється специфічним формулюванням початкових умов. Її означення для порядку $\alpha > 0$, коли $n = \lceil \alpha \rceil$, має вигляд:

$${}^c D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^t (t-\tau)^{-\alpha+n-1} f^{(n)}(\tau) d\tau, \quad 0 < \alpha \leq 1, \quad (1.8)$$

На відміну від похідної Рімана–Ліувілля, тут початкові умови формулюються в термінах звичайних (цілочисельних) похідних, що часто є ближчим до реальних фізичних процесів. Завдяки цьому похідна Капуто стала надзвичайно популярною в інженерній практиці, зокрема в задачах механіки та перенесення, адже дає змогу безпосередньо підставляти виміряні або задані початкові умови [111, 66, 90, 173, 125].

Окрім класичних формулювань дробових похідних, активно досліджуються так звані нестандартні дробові оператори, які передбачають змінені інтегральні ядра або більш гнучкі способи врахування пам'яті системи. Вони виникли як відповідь на обмеження традиційних моделей при описі складних фізичних явищ у фрактальних середовищах.

Одним із таких підходів є оператор Атангана–Балеану [6, 76, 74, 64, 86, 105], який базується на згортковому представленні з ядром у формі функції Міттага–Лефлера:

$${}^{ABC} D_t^\alpha f(t) = \frac{B(\alpha)}{(1-\alpha)} \int_a^t f'(\tau) E_\alpha \left(-\alpha \frac{(t-\tau)}{1-\alpha} \right) d\tau, \quad (1.9)$$

Де $E_\alpha(\cdot)$ – функція Міттага–Лефлера; $B(\alpha)$ – нормувальний коефіцієнт, зазвичай $B(\alpha)=1$.

Така структура дає змогу точніше моделювати процеси з повільним згасанням пам'яті та краще враховувати ефекти аномальної релаксації, що важливо для матеріалів із складною мікроструктурою. Також її гладке ядро у поєднанні з властивостями дробового числення підвищує стабільність чисельних алгоритмів, що є перевагою в прикладному моделюванні.

Іншим прикладом є похідна Капуто–Фабріціо [7, 44, 179, 115, 61], яка представляє собою модифікацію класичної дробової похідної Капуто та використовує експоненціальне згорткове ядро без сингулярностей при $t \rightarrow a$:

$${}^{CF}D_t^\alpha f(t) = \frac{M(\alpha)}{1-\alpha} \int_a^t f'(\tau) e^{\left(-\alpha \frac{(t-\tau)}{1-\alpha}\right)} d\tau, \quad (1.10)$$

де $M(\alpha)$ – нормувальний коефіцієнт (часто $M(\alpha)=1$).

Завдяки цьому вона є придатною для моделювання систем з обмеженою пам'яттю. Такий підхід має переваги в описі процесів із спадковими ефектами, що поступово згасають, не спричиняючи розривів на початку часової осі. Похідна Капуто–Фабріціо знайшла широке застосування у різних галузях, особливо там, де важливо враховувати часову динаміку систем зі скінченною пам'яттю. Зокрема, вона є ефективною під час моделювання теплопровідності [61] у матеріалах з подібними властивостями, таких як наноматеріали чи композити.

Оператор Хільфера (Hilfer) [49, 48] репрезентує узагальнення класичних дробових операторів і дає змогу плавно змінювати модель між типами Рімана–Ліувілля та Капуто. Така гнучкість є цінною під час моделювання процесів із різною інтенсивністю "пам'яті", особливо у випадках складної взаємодії фаз або середовищ із перемінною структурою.

$${}^H D_t^{\alpha,\beta} f(t) = {}_\alpha I_t^{\beta(1-\alpha)} \left(\frac{d}{dt} \left[{}_\alpha I_t^{(1-\beta)(1-\alpha)} f(t) \right] \right), \quad (1.11)$$

де ${}_t I_t^\gamma$ – дробовий інтеграл Рімана–Ліувілля порядку γ ; $0 < \alpha < 1$ – порядок похідної; $0 \leq \beta \leq 1$ – параметр інтерполяції між похідними Капуто та Рімана–Ліувілля.

Дробова похідна Прабхакара [128, 35, 55, 151, 127] є однією з сучасних модифікацій дробових операторів, яка базується на узагальненій функції Міттага–Лефлера – так званому ядрі Прабхакара:

$$\begin{aligned} \left({}^C D_{\alpha, \beta, \lambda, t_0}^\gamma\right)(t) &= \left(I_{\alpha, m-\beta, \lambda, t_0}^{-\gamma} D^m f\right)(t) = \\ &= \int_{t_0}^t (t-z)^{m-\beta-1} E_{\alpha, m-\beta}^{-\gamma} \left[\lambda (t-z)^\alpha \right] f^{(m)}(z) dz \end{aligned} \quad (1.12)$$

Де $E_{\alpha, m-\beta}^{-\gamma}$ – узагальнена функція Міттага–Лефлера; α – порядок ядра функції Міттага–Лефлера; β – параметр, який впливає на ступінь згортки; γ – експонент узагальнення; λ – параметр масштабування ядра; m – порядок класичної похідної.

Її використання дає змогу моделювати процеси з нелінійною спадковістю та багатофазовою релаксацією, що особливо важливо для вивченні систем з нерівномірними часовими затримками, резонансними явищами або складною динамікою згасання.

Завдяки високій гнучкості, похідна Прабхакара застосовується для опису аномальної теплопровідності, зокрема в композитних і наноматеріалах, а також у багатокомпонентних пористих середовищах, де звичайні моделі не відображають усі особливості тепло- та масопереносу [128, 35, 121, 33]. Її використання забезпечує підвищену гладкість математичних моделей та робить їх більш стабільними.

Такі оператори продовжують активно досліджуватися й адаптуватися для конкретних застосувань у галузі тепломасоперенесення. Вони сприяють кращому відображенню мультифізичних феноменів у пористих матеріалах із фрактальною структурою, де класичні методи часто дають суттєві похибки.

Для просторового фрактального аналізу використовують також дробові оператори Ріша [81, 125], які виступають двобічними або багатовимірними аналогами дробового оператора Лапласа:

$$\begin{aligned} {}^R D_t^\alpha f(x, t) &= \frac{1}{2} \left({}_{\alpha^+} D_t^\alpha f(x, t) + (-1)^n {}_t D_{b^-}^\alpha f(x, t) \right) = \\ &= \frac{1}{2\Gamma(n-\alpha)} \frac{\partial^n}{\partial t^n} \int_a^b |t-\tau|^{n-\alpha-1} f(x, \tau) d\tau \end{aligned} \quad (1.13)$$

де ${}_{\alpha^+} D_t^\alpha$ та ${}_t D_{b^-}^\alpha$ – ліво- та правобічні дробові похідні Рімана–Ліувілля.

Така узагальнена форма особливо доречна під час моделювання багатонаправлених потоків у пористих середовищах, де транспорт залежить від анізотропних характеристик простору.

Важливою перевагою підходів, що використовують оператор Ріша, є здатність точніше відтворювати явища “довгохвильового” чи “корельованого” розповсюдження тепла та вологи в середовищах зі складною геометрією. Разом із тим, запровадження двобічних дробових похідних у чисельні схеми потребує ретельної адаптації сіток та підвищеного обчислювального навантаження [125].

Серед просторових дробових методів зручним для дискретизації є підхід Грюнвальда–Летнікова, який фактично реалізує скінченні різниці дробового порядку:

$${}^{GL} D_x^\beta f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\beta} \sum_{k=0}^{\left[\frac{x-a}{h} \right]} (-1)^k \binom{\beta}{k} (x - kh), \quad (1.14)$$

де h довжина часткового інтервала, визначена по просторовій координаті; $[\cdot]$ – позначає цілу частину.

Він зручний для впровадження в алгоритми з регулярною чи адаптивною сіткою і дає змогу будувати ітераційні схеми, еквівалентні інтегродиференціальним рівнянням [1,15]. Завдяки простоті обчислювального формулювання цей оператор

набув популярності у прикладних задачах, коли потрібно врахувати фрактальну структуру за координатами.

Враховуючи складність механізмів теплового перенесення в середовищах з фрактальною структурою, у цій роботі запропоновано використовувати дробову похідну Капуто за часом та оператор Грюнвальда–Летнікова за просторовими координатами. Такий вибір опирається на низку наступних аргументів.

По-перше, використання формулювання Капуто дає змогу інтегрувати в модель експериментальні або класичні граничні умови, які мають чітке фізичне трактування та легко вимірюються на практиці.

По-друге, оператор Грюнвальда–Летнікова добре адаптується до чисельних методів, зокрема схем кінцевих різниць, скінченних елементів чи об'ємів, що забезпечує технічну гнучкість під час переходу до фрактального опису просторової структури середовища.

І нарешті, обидва оператори характеризуються помірною обчислювальною складністю, що особливо важливо при реалізації моделі в умовах великої розмірності або потреби в паралельному обчисленні.

Отже, використання дробових операторів Рімана–Ліувілля, Капуто, Атангана–Балеану, Капуто–Фабріціо, Хільфера, Прабхакара, Ріша та Грюнвальда–Летнікова продовжує розвиватися й залишається одним із ключових напрямів у математичному моделюванні складних динамічних процесів. Для задач тепломасоперенесення у фрактальних середовищах найперспективнішими є саме ті підходи, які поєднують зручність постановки початково-крайових умов, здатність охоплювати багатовимірні системи та прийнятне обчислювальне навантаження, що і мотивує вибір операторів Капуто й Грюнвальда–Летнікова в рамках цього дослідження.

1.3. Аналіз математичних моделей процесів теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах та обмеження традиційних підходів

Класичні моделі теплоперенесення в матеріалах базуються на законі Фур'є (1822), відповідно до якого тепловий потік прямопропорційний градієнту температури. Це веде до класичного диференційного рівняння теплопровідності, яке для однорідних середовищ описує нормальну дифузію через гауссовий розподіл температур [192, 194].

У випадку пористих матеріалів із нерівномірною мікроструктурою теплопровідність залежить не лише від пористості, але й від глобальних геометричних характеристик – як розподіл пор, їхня форма, тортуюзність та фрактальна розмірність [174, 59]. Класичні підходи, включно з серійно-паралельними моделями для композитних матеріалів або моделями Максвелла–Бруггемана [29, 181], часто ігнорують мікроструктурні аспекти або враховують їх наближено, що може призводити до значних помилок при моделюванні теплоперенесення в таких середовищах.

У науковій літературі запропоновані фрактальні моделі теплопровідності, що враховують геометричні параметри пористих структур: фрактальні розмірності, тортуюзність, відносну шорсткість та розмірний розподіл пор. Наприклад, модель для визначення ефективної теплопровідності у ґрунтах, побудована на основі серійно-паралельної схеми з урахуванням звивистості та звивистої фрактальної розмірності, пористості та розподілу діаметрів пор показує значне покращення точності прогнозування порівняно з класичними моделями [181, 180].

Аналогічно, для масоперенесення (також і вологоперенесення) класичним є закон Фіка (1855), який стверджує, що густина дифузійного потоку пропорційна градієнту концентрації (вологості). Це веде до стандартного рівняння дифузії, розв'язки якого показують поступове вирівнювання концентрації в часі. У випадку

рідин у пористих середовищах часто використовується також закон Дарсі (1856) для фільтрації: об'ємна витрата крізь пористе середовище пропорційна градієнту тиску рідини [54]. Закон Дарсі успішно описує повільну ламінарну фільтрацію в капілярно-пористих матеріалах і покладений в основу гідрогеології. Проте вже класичні роботи відзначали, що рух рідини в пористому тілі суттєво відрізняється від течії в гладких трубках: флюїд змушений просочуватися звивистими каналами, де постійно прискорюється і сповільнюється. Через це ефективна проникність середовища залежить від структури пор, а схожість закону Дарсі з рівнянням Пуазейля для прямої трубки є лише формальною [54].

Для опису одночасного перенесення тепла і вологи у капілярно-пористих матеріалах (наприклад, деревина) розроблені розширені моделі. Класичним став підхід Ликова А.В., який запропонував систему рівнянь тепло- та вологоперенесення в капілярно-пористих тілах з урахуванням теплового ефекту випаровування та сорбції [193, 195]. Рівняння Ликова А. В. поєднують закон Фур'є для теплового потоку і узагальнений закон дифузії для вологості, при цьому вводяться коефіцієнти, що залежать від температури, вологовмісту, властивостей матеріалу й умов сушіння. Система рівнянь, розроблена А. В. Ликовим, успішно застосовувалася для моделювання процесів сушіння деревини та інших капілярно-пористих матеріалів, забезпечуючи можливість прогнозування динаміки розподілу температури й вологості у часі. Однак коефіцієнти, що входять до моделі (теплопровідність, дифузія, термоградієнтне перенесення тощо), зазвичай визначались емпірично. Це означає, що вони не враховують безпосередньо геометричної складності пористої структури матеріалу, зокрема її анізотропії чи фрактальних властивостей. Як наслідок, така модель має обмежену здатність до екстраполяції за межі досліджених умов і вимагає повторного експериментального калібрування при зміні типу матеріалу або режиму обробки.

Поряд з підходом Ликова А. В. у науковій літературі запропоновано низку альтернативних підходів до моделювання процесів тепломасоперенесення в пористих середовищах, серед яких: дифузійна теорія, модель рухомої границі фазового переходу, модель Філіпа та де Фріза, теорія Крішера, а також модель Вітакера, яку часто покладають в основу побудови чисельних алгоритмів: методу скінченних елементів, об'ємів, а також спектральних методик. Ці підходи враховують різні фізичні механізми переносу та ступені деталізації, однак, потребують адаптації або розширення для врахування структурної складності матеріалів природного походження, таких як фрактальність.

Однією з найперших моделей у світі було запропоновано дифузійну модель, започатковану роботами Льюїса В. К і Шервуда Т. К. Вони адаптували рівняння теплопровідності Фур'є для опису переносу вологи, замінивши температуру на вологість, а теплопровідність – на ефективний коефіцієнт дифузії. Цей підхід отримав подальший розвиток у роботах Шервуда Т. К. [13], Цегльске Н. Г. і Хогена О. А. [14], які зазначили, що перенесення вологи не можна пояснити виключно дифузією, оскільки значну роль відіграють капілярні сили, гравітація, конвекція та випаровування.

Подальші дослідження, проведені Сузукі М. і Маеда С. [16], запропонували емпіричні залежності коефіцієнта дифузії від вологості. Застосування таких моделей підтверджено в численних експериментах для глини, деревини, харчових продуктів та будівельних матеріалів [17, 25].

Іншим запропонованим підходом була модель рухомої границі фазового переходу, яка описує переміщення границі зволоженої зони вглиб матеріалу під час тепломасоперенесення. Згідно з цією моделлю, видалення вологи відбувається у два етапи: спочатку – випаровування вільної вологи з поверхні, згодом – міграція залишкової (зв'язаної) вологи з внутрішніх областей. Такий підхід описаний у роботах Чена Ц. і Шмідта В. [38] і деталізований Цокас Е. [11]. Попри інтуїтивність

моделі, вона має недоліки: складність визначення положення рухомої границі, відсутність точного опису капілярного тиску, а також складність у формалізації граничних умов.

Філіп ДЖ. Р. і де Фріз Д. А. [39, 41, 112] розширили класичну дифузійну теорію, включивши капілярний потік рідини та перенесення пари, а також врахування температурного градієнта. Вони сформулювали рівняння переносу вологи та тепла на основі комбінації дифузійних механізмів, де всі коефіцієнти залежали від температури й вологості. Модель враховувала вплив гравітації, термодифузії та взаємозв'язок між фазами. Незважаючи на певні обмеження: нехтування зміною тиску газової фази, – цей підхід був успішно застосований до ґрунтів, деревини та харчових матеріалів.

Ще один важливий внесок зробив Крішер О. [69], який у 1950-х роках запропонував опис процесу тепломасоперенесення з урахуванням капілярного потоку рідини та дифузії пари. Модель доповнена подальшими роботами Бергера Р.ДЖ. і Пей Д.С. [12], де враховано сорбційні ізоТЕРМИ як зв'язуючий механізм між фазами. Модель застосовується до пластин, циліндрів і сферичних зразків, однак вимагає низки припущень, зокрема миттєвого досягнення рівноваги на поверхні сушіння, що обмежує її точність.

Найповнішою з погляду фізичної достовірності вважається модель Вітакера С. [167], яка об'єднує закони збереження маси, енергії та імпульсу для багатофазного середовища. За допомогою методу об'ємного осереднення С. Вітакер сформулював макроскопічні рівняння переносу, які враховують: капілярний потік, дифузію й конвекцію в рідинній та газовій фазах, випаровування та теплопровідність. Попри складність моделі (необхідність визначення ефективної дифузії, проникності тощо), вона була успішно застосована до моделювання сушіння піску [53], цегли [61], деревини [63–66] тощо.

Особливо значущими є роботи Перре П. та Тернера І. В. [109, 110, 155, 156, 156], які реалізували тривимірні чисельні моделі сушіння з урахуванням анізотропії деревини, зв'язаної вологи, внутрішнього тиску пари та складних граничних умов. Їхні дослідження підтвердили необхідність тривимірного підходу для адекватного опису складних процесів тепломасоперенесення під час сушіння. У подальших роботах Перре П. разом з Карром Е. Дж. та Тернером І. В. запропоновано двомасштабний підхід до моделювання: макрорівень дошки або пакету дошок зв'язувався з мікрорівнем пористої структури деревини, що дало можливість обходитися без ефективних середніх параметрів, а прямо враховувати розподіл вологи в мезоструктурі [18]. Окрім того, П. Перре запропонував зручний критерій для оцінки умов сушіння – число інтенсивності сушіння (NDI). Це безрозмірне число допомагає визначити, наскільки сильно пов'язані процеси тепло- і вологоперенесення в даних умовах, і, відповідно, яку складність моделі слід обрати (одна змінна чи кілька, чи потрібно враховувати градієнт тиску тощо) [109, 110].

Фінляндський вчений Сален Ж. Г. зробив помітний внесок як у розвиток моделей, так і в їх практичну інтерпретацію стосовно якості деревини після сушіння. Також Сален Ж. Г. зосередився на фундаментальних питаннях руху вологи: ним досліджено сушіння рідкої води в деревині (вище точки насичення волокон) та вплив на цей процес структури капілярної мережі волокна. Ним показано, що капілярна будова (анатомія судин і пор) значною мірою визначає швидкість видалення вільної (капілярної) води на початкових стадіях сушіння. Salin зазначає, що класичні дифузійні моделі мають бути доповнені врахуванням капілярного перетікання, аби коректно описати поведінку деревини при високому вологовмісті [124].

Бурак Я. Й. – автор фундаментальних робіт з теорії тепло- та масоперенесення в багатофазних системах. У його монографії (спільно з Чаплею Є. Я. та

Чернухою О. Ю., 2006) сформульовано континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів [189], які можна застосовувати і до деревини як до пружного пористого тіла зі складними теплофізичними процесами.

У 2010-х роках подальший розвиток отримали моделі з урахуванням рухомої границі фазового переходу. Зокрема, Гайвась Б. І. запропонувала математичну модель сушіння пористих тіл, яка враховує кінетику фазових переходів та деформації матеріалу [190]. Цей підхід дає можливість точніше описати стадію видалення вільної води, коли формуються градієнти тиску і волога переміщується не лише дифузійно, але й капілярним переносом.

П'янило Я. Д. відомий своїми працями з математичного моделювання процесів перенесення у континуальних середовищах, зокрема із застосуванням дробових похідних. Хоча частина його досліджень виконана для газотранспортних мереж (нестационарний рух газу в трубопроводах) [196, 198], отримані результати мають методологічне значення і для задач тепломасоперенесення у пористих тілах. П'янило Я. Д. показав ефективність використання апарату дробового числення для опису процесів з довготривалою пам'яттю та нелокальністю у часі, що саме характерно для сушіння матеріалів з фрактальною структурою.

Соколовський Я. І. та його учні зробили суттєвий внесок у впровадження сучасних математичних підходів до моделювання сушіння. Соколовський Я. І. одним з перших в Україні почав досліджувати вплив фрактальної структури пористих середовищ на процеси тепломасоперенесення. Науковець виходив з того, що деревина має ієрархічну будову (клітини, судини, пори різних масштабів), яку можна описати моделями з дробовими похідними. У дисертаційних роботах під його керівництвом (Шиманського В. М., Левкович М. В.) побудовано неізотермічні моделі вологоперенесення у середовищах з фрактальною структурою [206, 192]. Це означає, що диференціальні рівняння у математичних моделях містять похідні ненатурального порядку, які враховують “пам'ять” матеріалу та неоднорідність

середовища. Наприклад, Шиманський В. М. розробив модель, де показники порядку похідних пов'язані з фрактальною розмірністю пористого простору деревини [206, 130, 146, 205]. Такі моделі належать до класу аномальної дифузії і здатні описувати уповільнене проникнення вологи у складних структурах, що неможливо точно відтворити класичними рівняннями Фіка. У спільних працях Соколовського Я. І. з Крошним І. М. та Прусаком Ю. В. вивчено поведінку деревини як в'язко-пружно-пластичного тіла при видаленні вологи. Це дало змогу побудувати реологічну модель усушки, яка описує накопичення залишкових деформацій та релаксацію напружень в міру висихання матеріалу [204]. Окрім теоретичних напрацювань, група Соколовського Я. І. приділяла увагу чисельним методам: реалізовано алгоритми скінченно-елементного та скінченно-різницевого розв'язків задачі сушіння та розроблено програмні комплекси для прогнозування процесу, що є важливим кроком до практичного застосування теорії для досягнення необхідної якості деревини без дефектів [206, 192, 204, 146, 145, 205, 187, 191, 203]. Отже, дослідження школи Соколовського Я. І. дали потужний імпульс розвитку інженерних методик для проектування процесів сушіння, теплової обробки матеріалів та оцінки їхніх експлуатаційних властивостей.

Під час застосування більшості згаданих класичних моделей до середовищ з фрактальною структурою виникають принципові ускладнення. Фрактальні середовища характеризуються самоподібною, вельми нерівномірною будовою пор [29]. Геометрія таких пористих тіл описується дробовим (нецілим) значенням фрактальної розмірності, що відбиває ступінь заповнення простору структурою. На відміну від випадкових моделей пор, фрактальний підхід дає змогу врахувати цю масштабну самоподібність. Зокрема, фрактальна розмірність використовується як параметр, що кількісно характеризує неоднорідність та “звивистість” порового простору: більші значення фрактальної розмірності відповідають більш нерівномірному, розгалуженому розподілу пор [29].

Використання фрактальної геометрії для опису пористої структури ґрунтів та будівельних матеріалів дало змогу пояснити залежність ефективної теплопровідності від морфології пористості. Також було показано, що навіть при тій самій пористості збільшення фрактальної розмірності (більш хаотична структура) послаблює здатність матеріалу проводити тепло [29].

Іншим підходом є узагальнення класичних законів перенесення через використання апарату дробового числення. Класичні рівняння перенесення, побудовані на основі звичайних похідних у евклідовому просторі, не враховують факту неоднорідності та фрактальності будови пористих середовищ. Як наслідок, спостережені явища перенесення можуть відхилятися від “нормальної” поведінки. Встановлено, що дифузія в сильно неоднорідних, фрактально-подібних пористих мережах часто є аномальною (не підпорядковується закону Фіка) [156, 37]. Експериментальні дослідження вологоперенесення в деревині та інших матеріалах показують наявність нелінійної кінетики поглинання і висихання, яку класичні моделі не описують адекватно. Отже, традиційні моделі мають обмежену застосовність для фрактальних капілярно-пористих матеріалів: вони не відображають сповільнене проникнення (субдифузію) або, навпаки, наддифузійні ефекти, обумовлені складною будовою порового простору [37].

Натомість фізично дробові похідні часто впливають із перебування частинок в пастках або руху по дуже звивистих траєкторіях у фрактальних мережах пор. Отже, фрактальне рівняння дифузії здатне врахувати пам'ять процесу та широкий розподіл часів перешкод [156]. Тому Перре П. та Тернер І. В. (2011) побудували зв'язану модель тепломасоперенесення у деревині, де в рівняння для вологості входить дробовий оператор Лапласа з показником меншим за 2 [156]. Така модель успішно відтворила уповільнене поглинання вологи, яке не могли пояснити цілочисельні моделі. Взагалі, фрактальні похідні все ширше застосовуються для узагальнення закону Дарсі та рівнянь дифузії у випадках, коли емпірично

спостерігається відхилення від лінійної залежності потоку від градієнту [1]. Наприклад, узагальнений “фрактальний” закон Дарсі був запропонований для опису течії рідини в пористих середовищах з аномальними ефектами; він переходить у класичний закон при певних значеннях дробового параметра, але в загальному випадку передбачає нелінійну залежність швидкості фільтрації від градієнта тиску [1]. Отже, рівняння з фрактальними похідними дають можливість теоретично врахувати фрактальну структуру через модифікацію диференціальних операторів, що приводить до більш гнучких моделей перенесення.

Фрактальні капілярно-пористі матеріали, такі як деревина, мають ієрархічну будову: від нанопор в стінках клітин до макроскопічних річних кілець і судин. Тому важливо поєднувати різні масштабні рівні під час моделювання. Сучасні багатомасштабні підходи використовують результати мікроскопічного моделювання (або експериментального аналізу) для покращення макроскопічних рівнянь. Один із підходів – гомогенізація, де параметри рівнянь перенесення на макрорівні обчислюються на основі мікроструктури. Так, в нещодавній роботі [153] запропоновано фрактальну дифузійну модель для клітинної стінки деревини на основі її пористого «пучка капілярів», а потім виконано перехід до масштабів цілого зразка через електричну аналогію (модель електричного опору).

Врахування реальної пористої геометрії підвищує прогностну здатність моделей. Так, розрахунок термодинамічних характеристик сорбції деревини на основі фрактальної геометрії внутрішніх поверхонь показав, що фрактальний підхід узгоджується з прямими калориметричними вимірюваннями теплових ефектів сорбції, тоді як класичний ізостеричний метод давав суттєві похибки [16].

Отже, багато науковців пропонують модифіковані рівняння теплового й вологого перенесення, що включають дробові похідні, коефіцієнти дифузії зі змінною структурою та інші додаткові складові. Але серед головних труднощів залишається визначення адекватних фракційних параметрів, коректне

формулювання граничних умов для фрактальних систем, а також висока обчислювальна складність таких моделей.

Під час моделювання процесів теплоперенесення та вологоперенесення в капілярно-пористому матеріалі широко застосовують класичні методи розв'язування відповідних рівнянь – як аналітичні, так і чисельні. Фрактальні моделі, які враховують дробові похідні в часі чи просторі, потребують спеціалізованих підходів до їх розв'язання. Аналітичні підходи до розв'язання фрактальних диференціальних рівнянь часто базуються на використанні перетворень Лапласа і Фур'є. У випадку простих областей (одновимірне середовище) комбінація перетворень Лапласа (за часом) і Фур'є (за просторовою змінною) дає змогу отримати аналітичний розв'язок дробових рівнянь теплопровідності чи вологообміну [25]. Перевага аналітичних методів полягає в тому, що вони дають точний розв'язок (у замкненій формі або вигляді збіжних рядів), що дає можливість глибоко проаналізувати вплив параметрів моделі. Обмеження ж дуже суттєві: аналітичні розв'язки можливі лише для відносно простих випадків – як правило, для лінійних рівнянь із постійними коефіцієнтами, простою геометрією та ідеалізованими граничними умовами. До того ж, отримані аналітичні вирази можуть бути настільки складними (містити спеціальні функції), що їх практична цінність обмежена і все одно потребує чисельної побудови графіків. Зокрема, навіть існуючі аналітичні розв'язки фрактальних моделей тепломасоперенесення не поширюються на реальні випадки анізотропної структури деревини чи нелінійної сорбції, тому в інженерній практиці аналітичні методи застосовують обмежено [25, 78].

Для розв'язання практично важливих задач тепломасоперенесення в деревині з урахуванням фрактальної природи процесів найчастіше залучають чисельні методи. До них належать традиційні підходи дискретизації диференціальних рівнянь – метод скінченних різниць, метод скінченних елементів, різноманітні

спектральні методи – адаптовані під випадок операторів дробового порядку [197, 144, 143, 129, 142, 203, 187, 204, 206, 192].

У контексті капілярно-пористих матеріалів, зокрема, деревини, де процеси перенесення мають анізотропний та багатофакторний характер, найбільш поширені підходи – це різницеві та елементні методи [144, 143, 129, 142, 203, 187, 204, 206, 192]. Спектральні та аналітичні рішення слугують для верифікації та теоретичного аналізу. Загалом застосування кожного методу потребує компромісу між точністю та витратами: вибір методу визначається як вимогами до точності, так і доступними обчислювальними ресурсами.

Оскільки і аналітичні, і традиційні чисельні методи стикаються з труднощами при розв’язанні фрактальних моделей, в останні роки з’явився альтернативний напрям, що передбачає використання методів штучного інтелекту, зокрема штучних нейронних мереж,

1.4.Огляд класичних фізично-інформованих нейромереж (PINN)

Фізично-інформовані нейронні мережі (Physics-Informed Neural Networks, PINN) – це підхід, що поєднує глибоке навчання із фізичними моделями для розв’язання диференціальних рівнянь. Ідея полягає в тому, що нейронна мережа навчається не тільки на емпіричних даних, але й з урахуванням фізичних законів задачі. Для цього до функції втрат включають члени, які характеризують залишки рівнянь фізичної моделі та граничні й початкові умови. Отже, під час навчання мережа мінімізує одночасно помилку наявних даних і залишки диференціальних рівнянь, фактично виконуючи мультимодельне навчання, що змушує нейронну мережу задовольняти фізичні закони [15]. Важливо, що для оцінювання диференціальних операторів PINN використовують автоматичне диференціювання [107, 43], що усуває похибки дискретизації, притаманні традиційним чисельним методам [15]. Це означає, що PINN не потребує явної побудови сітки для

обчислення похідних – похідні обчислюються аналітично по мережі, заданій на неперервній області.

На ранніх етапах розвитку методу для чисельного розв’язання звичайних диференціальних рівнянь та рівнянь у частинних похідних з регулярними граничними умовами дослідники використовували багатошарові персептрони та функції втрат як засіб оптимізації [51], [72]. Згодом підхід був адаптований для задач із нерегулярними межами [73]. Упродовж наступних років спостерігалось зростання кількості досліджень [117, 118], у яких моделі мали більшу глибину (кількість шарів та параметрів), а також активно впроваджувалися радіально-базисні нейронні мережі.

Проте сучасна концепція PINN оформилася в другій половині 2010-х років, з появою робіт Раїссі М., Пердікаріс П., Карніадакіс Г. Е. [116, 117, 118], які запропонували вбудовувати рівняння в функцію втрат нейронної мережі для розв’язання як прямих, так і обернених задач з частковими диференціальними рівняннями [154]. Відтоді PINN стрімко набули популярності у наукових колах, започаткувавши цілий напрям наукового машинного навчання. За останні роки було зроблено значний прогрес у розвитку PINN: з’явилися покращені архітектури мереж, наприклад, вузьконаправлені мережі під конкретні типи задач, адаптивні методи вибору точок колокації та вагових коефіцієнтів у функції втрат, методи декомпозиції області, а також нові активаційні функції та оптимізатори, що прискорюють збіжність [154, 58, 164, 22, 56, 52, 169]. Одним з новітніх напрямів є створення спеціальних архітектур, що аналітично задовольняють деякі фізичні інваріанти або теоретичні представлення рішення – прикладом є мережі PIKAN (Kolmogorov–Arnold Networks), запропоновані в 2023 році як альтернатива класичним PINN [154]. Отже, розвиток PINN можна умовно поділити на етап зародження концепції (близько 2017–2019 рр.) та етап бурхливого вдосконалення

(2020-ті роки), коли дослідники зосередилися на подоланні обмежень базового підходу за рахунок поліпшення алгоритмів навчання і архітектур мереж.

Методи PINN набули помітного поширення в задачах тепло- та масопереносу, де часто доводиться розв'язувати складні системи рівнянь тепломасообміну. Для класичних задач теплопровідності (дифузійного перенесення тепла) PINN дають змогу розв'язувати рівняння теплопередачі у неперервній постановці. Наприклад, PINN можна застосувати до задачі нестационарної теплопровідності в твердому тілі, формулюючи функцію втрат із нев'язкою рівняння теплопровідності і граничними умовами. У випадку наявності фазового переходу типу Стефана, метод стикається з рухомою межею поділу фаз. Дослідження Мадіра Б.-Е., Людденса Ф., Лотода К., Данайла І. показали, що PINN в змозі вирішувати такі задачі, проте зона фазового переходу створює труднощі для навчання нейронної мережі [88].

Конвекція – ще одна важлива сфера застосування PINN. У задачах конвективного теплообміну доводиться розв'язувати сполучені рівняння – рівняння руху рідини (напр. Нав'є–Стокса) та рівняння енергії (теплопередачі). PINN дозволяють одночасно навчити нейронну мережу відтворювати як динаміку потоку, так і розподіл температур, включивши у функцію втрат нев'язки відповідних PDE та умови. Перевага PINN проявляється особливо у випадках, коли частина граничних умов або параметрів невідома. Автори [15] показали застосування PINN до задач вимушеної і змішаної конвекції у порожнині з невідомими тепловими граничними умовами на нагрітих стінках. У результаті PINN змогла відновити як поле температур, так і поле швидкостей у всій області (включно з значеннями на межах, де не було датчиків). Такий підхід фактично вирішує обернену задачу визначення граничних умов, що традиційними методами є складною погано обумовленою проблемою.

PINN застосовувалися і до інших задач з явним фазовим розділенням та переносом теплоти, наприклад, фізично-обґрунтовані мережі використовувались

для моделювання кипіння та конденсації, двофазних потоків з теплообміном, де важливо відстежувати рухомі міжфазні границі [60]. Результати показали, що PINN успішно захоплює поведінку міжфазної межі та поля температур у потоці. Максимальна похибка в визначенні положення межі фаз становила близько 5%, а в оцінці температурного поля – кілька відсотків. Автори [60] також відзначили факт, що після навчання мережа дає розв’язок набагато швидше, ніж традиційний розрахунок, що може означати значну економію обчислювальних витрат при багаторазовому використанні моделі.

PINN ефективно працюють у багатофізичних задачах, де одночасно взаємодіють кілька фізичних процесів. Однією з демонстрацій є задача сполученого теплообміну між твердим тілом і рідиною, де потрібно одночасно розв’язати рівняння теплопровідності в твердій стінці та рівняння конвективного теплообміну в прилеглому шарі рідини, при тому на межі “стіна-рідина” повинні виконуватися умови теплового балансу. Для таких задач запропонована стратегія багатодоменого PINN (англ. *multi-domain PINN*), коли кожному фізичному домену (стіна, рідина) відповідає окрема нейронна мережа, а на спільній межі їх рішення зв’язуються умовами спряження [166].

Приклад промислового застосування PINN до задач тепловідведення в електронних системах за реалістичних умов експлуатації наведений у [15]. У таких складних сценаріях традиційні методи часто стикаються з громіздкими сітками та чисельними труднощами, тоді як PINN змогли напяму працювати з експериментальними даними і рівняннями теплообміну, отримавши рішення, які узгоджуються з практичними спостереженнями.

Класичні методи розв’язання покладаються на сітку: скінченні елементи, різницеві схеми тощо, – і дискретизацію області, що вимагає складної підготовки, такої як: генерації сітки, згущення в потрібних зонах, – та породжує похибки дискретизації. Натомість PINN є по суті безсітковим підходом: нейронна мережа

наближує неперервне розв'язання на всій області, а похідні обчислюються аналітично. Це значно спрощує реалізацію та усуває помилки апроксимації похідних на сітці [15, 63], а також дає можливість масштабуватися до високих розмірностей простору, тим самим потенційно даючи змогу вирішувати задачі високої розмірності, недосяжні для сіткових методів [63, 119].

Класичні чисельні методи створені для знаходження розв'язку прямої задачі: знайти поле величини при заданих параметрах і умовах. Розв'язування обернених задач, таких як: ідентифікація параметрів, знаходження невідомих граничних умов, – вимагає окремих алгоритмів. На відміну від класичних методів PINN мають можливість інтегрувати розв'язування обернених задач безпосередньо в процес навчання нейромережі [100, 85, 24].

Ще одною ключовою перевагою PINN є здатність природно враховувати експериментальні дані (навіть неповні чи зашумлені) у процесі розв'язання задачі. У PINN будь-які наявні дані вимірювань безпосередньо входять у функцію втрат, що дає змогу «прив'язати» модель до експерименту [63, 89, 148, 8, 184, 162, 39]. Практичний наслідок – PINN можуть розв'язувати погано обумовлені задачі, з якими не впораються традиційні методи [15]. Отже, PINN розширює клас розв'язуваних задач за межі класично добре обумовлених постановок, що є суттєвою перевагою для теплофізичних задач, де часто дані неповні або дорогі в отриманні.

Гофманн-Велленгоф М. та співавтори [50] зазначили, що в ідеалі PINN може надавати рішення в довільній точці простору за вартістю одного прямого проходу через нейронну мережу – тобто майже миттєво після навчання. Це надзвичайно вигідно у сценаріях, коли потрібно отримувати результати в режимі онлайн або проводити багатократні запуски моделі. Навіть якщо процес навчання PINN може бути тривалим, використання навченої моделі є швидким, тоді як традиційні

чисельні методи вимагають повторного розрахунку для кожної нової конфігурації [60, 50].

Попри значний потенціал, на практиці PINN стикаються з низкою значних обмежень і труднощів, особливо помітних у складних інженерних задачах тепломасообміну. Навчання PINN – це вирішення задачі оптимізації високої, – і ця задача часто виявляється важко розв’язуваною. Дослідження показують, що мінімізувати функцію втрат PINN суттєво складніше, ніж здається, через проблеми поганої обумовленості внеску диференціальних операторів [119, 70, 27]. Диференціальні оператори можуть мати різні масштаби (наприклад, друга похідна може бути значно більша за першу), що призводить до того, що нев’язка PDE домінує або, навпаки, стає занадто малою порівняно з частиною втрат на дані. Це робить ландшафт функції втрат “скелястим” і ускладнює пошук глобального мінімуму стандартними градієнтними методами [119, 100].

У роботі [119] показано, що звичайний PINN може зовсім не збігатися або збігатися надзвичайно повільно на задачах з жорсткими системами рівнянь чи великою різницею масштабів, якщо не застосувати попередню підготовку, наприклад, не нормалізувати рівняння.

Крім того, функція втрат у PINN є негладкою і неглобально-випуклою, а це значить, що алгоритми типу Adam або L-BFGS не гарантовано знайдуть правильне рішення [75]. У літературі запропоновано чимало удосконалень: від комбінації різних оптимізаторів до продуманого початкового масштабування рівнянь, динамічного переважування різних компонент функції втрат та адаптивного вибору точок колокації [119, 100, 103, 172, 176, 102, 57, 82, 65].

PINN мають багато гіперпараметрів: архітектура мережі (кількість шарів, нейронів), вибір функцій активації, вагові коефіцієнти при різних частинах функції втрат (для балансування між виконанням рівнянь та відповідністю даним), параметри оптимізатора (темп навчання, розклад) тощо. Неправильний вибір цих

параметрів може призвести до розходження навчання або некоректного рішення. Практики відзначають, що PINN-вирішення потребує часто більше “мистецтва”, ніж автоматизації – тобто дослідник мусить експериментувати з гіперпараметрами для кожної нової задачі [50]. Підбір правильного балансу між фізичними залишками та відповідністю даним – окрема проблема: якщо надати занадто великий пріоритет рівнянням, мережа може ігнорувати дані; якщо ж переважити дані – рішення перестане строго задовольняти фізику [75].

Отже, PINN чутливі до налаштувань, і знайдення оптимальної конфігурації – нетривіальне завдання, що потребує часу і експериментів, чого не потребують традиційні методи, де параметри, як правило, зумовлені математичною стійкістю і точністю. Проте, наукова спільнота усвідомлює виклики і активно працює над їх подоланням – з’являються праці, присвячені аналізу ландшафту функції втрат і методам його покращення [119], пропонуються нові архітектури [154], адаптивні алгоритми навчання тощо.

1.5. Розширення PINN для роботи з фрактальними середовищами

Як зазначалось вище, фрактальні пористі середовища демонструють аномальні режими дифузії й теплообміну, в яких класичні рівняння не виконуються [37]. Для адекватного опису таких процесів застосовуються апарати дробового числення та фрактальної геометрії. Для адаптації PINN до задач теплопереносу й дифузії у фрактальних середовищах пропонуються певні теоретичні модифікації архітектури мережі та функції втрат. Оскільки геометрія середовища може мати фрактальну розмірність або самоподібність, важливо належним чином задати ці характеристики в моделі.

Один із підходів – використання спеціальних архітектур нейронної мережі. Наприклад, запропоновано фізично-інформовану мережу на основі радіально-базисних функцій, в якій стандартну евклідову відстань замінено на метрику

Гаусдорфа (фрактальну відстань) [113]. Така модифікація фактично “вбудовує” фрактальну геометрію простору в ядро мережі, даючи змогу природно врахувати фрактальну метричну структуру при обчисленні похибки у процесі навчання.

Інший напрям – вибір і адаптація функцій активації. Дослідження показали, що для рівнянь з фрактальними операторами вибір активацій може впливати на збіжність. Зокрема, було проведено порівняння різних активацій і знайдено оптимальний варіант для задач з гаусдорфовими похідними [170]. Модифікації торкаються і функції втрат PINN. У стандартному PINN функція втрат складається із сум середньоквадратичних залишків диференційного рівняння та граничних і початкових умов [116, 106]. Для врахування фрактальної геометрії або дробових похідних до цієї функції втрат вводять відповідні доданки. Зокрема, при моделюванні процесів на фрактальних множинах може застосовуватися гаусдорфова похідна – оператор диференціювання, визначений на фрактальному метричному просторі. У роботах з фрактальними PINN такий оператор включають до функції втрат через спеціальні чисельні обчислення. Наприклад, показано, що рівняння з похідною Гаусдорфа можна ефективно розв’язувати PINN, переформулювавши задачу як оптимізаційну: мережа мінімізує залишки рівняння з гаусдорфовою похідною на довільній області без необхідності явної сітки [170].

Фрактальні параметри (наприклад, фрактальна розмірність середовища) можуть явно входити в рівняння – через показники степеня при просторових похідних чи коефіцієнтах дифузії. Так, у роботі [183] використали поняття конформної дробової похідної, яка є еквівалентною певному визначенню дробової похідної для опису дифузії на фрактальних об’єктах. Мережею PINN було успішно розв’язано декілька моделей дифузії у фрактальному просторі з використанням такої похідної, що продемонструвало високу універсальність підходу.

У роботі [123] запропоновано метод, заснований на розкладі в ряд, який дає змогу з високою точністю отримувати розв'язки лінійних рівнянь із частковими похідними високого порядку.

Отже, модифікуючи архітектуру (наприклад, через RBF-мережі чи спеціальні активації) і функцію втрат (додаючи фрактально-дробові оператори), PINN можна пристосувати до розв'язання рівнянь тепломасоперенесення у середовищах зі складною фрактальною геометрією.

Фрактальні середовища часто описуються рівняннями з дробовими похідними (по часу або/та простору), що відображають пам'ять системи та неоднорідність структури. Інтеграція дробових похідних в PINN – нетривіальне завдання, адже класичне автоматичне диференціювання [107, 43] не застосовується безпосередньо до фрактальних операторів, тому що ланцюгове правило в традиційному вигляді не діє для дробових похідних. Зокрема, автори [106] розробили фрактальну PINN (fPINN), де в залишку рівняння дробові похідні обчислюються за допомогою різницевих схем для дробових похідних, тоді як цілі частини рівняння – через аналітичні похідні нейромережі. Такий підхід дає можливість обійти труднощі з реалізацією дробових операторів і успішно розв'язувати просторово-часові дробові рівняння. У одновимірних тестових задачах метод fPINN показав збіжність результатів різних порядків (першого, другого, третього порядку точності для різних схем дискретизації) до точного розв'язку [106].

У роботі [165] представлено вдосконалену модифікацію fPINN, яка поєднує можливості фізично-інформованих нейронних мереж зі спектральним методом колокації, що дає можливість зменшити кількість дискретизаційних точок, необхідних для апроксимації дробових операторів, тим самим підвищуючи як точність розв'язку, так і обчислювальну ефективність.

У роботі [40] автори представили підхід Monte Carlo fPINNs – метод глибокого навчання для розв’язання прямих та обернених задач, які описуються високорозмірними дробовими диференціальними рівняннями. Запропонована модель поєднує архітектуру fPINN з методом Монте-Карло, що дає можливість ефективно обробляти складні задачі в багатовимірних просторах. Основна увага зосереджена на зменшенні обчислювальної складності та покращенні узагальнюючої здатності нейронної мережі при роботі з дробовими операторами.

У дослідженні [96] запропоновано новий підхід до моделювання турбулентного плину Куетта із використанням фізично-інформованої нейромережі. Основною метою роботи стало виявлення універсальної моделі зі змінним порядком дробової похідної, яка точно описує поведінку плину на основі експериментальних даних. Особливістю даного підходу є те, що нейронна мережа не лише апроксимує розв’язок рівняння, але також визначає сам порядок дробової похідної, який може змінюватися залежно від координати. Завдяки цьому вдалося побудувати модель, яка краще враховує складні властивості турбулентних течій, зокрема ефекти пам’яті та просторової неоднорідності.

У статті [87], що опублікована на початку 2025 року Ма С., Цю Л., Чжан Б. описали метод дробових адаптивних фізично-інформованих нейромереж для моделювання аномального процесу перенесення тепла. Як і в цьому дослідженні автори [87] поєднали дробове числення з глибинним навчанням для вирішення прямих та обернених задач. Ма С., Цю Л., Чжан Б. запропонували алгоритм динамічного балансування втрат, який підвищує стійкість моделі до шуму та складних умов. Метод пройшов перевірку на задачах з просторово неоднорідними властивостями, зокрема у функціонально-градієнтних матеріалах, де він показав кращі результати порівняно з класичними підходами.

Загалом застосування нейронних мереж для розв’язання задач з дробовою розмірністю, зокрема обернених задач та задач параметричної ідентифікації, наразі

перебуває на ранньому етапі розвитку. На сьогодні ця тематика представлена обмеженою кількістю наукових публікацій.

1.6.Огляд засобів програмної реалізації

У сучасних дослідженнях PINN та їх узагальнень, зокрема фрактальних PINN (fPINN), використовують різноманітні програмні інструменти. Вибір платформи визначає гнучкість реалізації архітектури мережі, задання функцій втрат, а також зручність інтеграції фізичних рівнянь. Більшість реалізацій PINN базується на мовах програмування високого рівня (передусім Python) із залученням сучасних бібліотек машинного навчання [154]. Водночас існують спеціалізовані програмні середовища для чисельного розв'язання рівнянь в частинних похідних та пакети для дробового числення, які можна поєднувати з PINN. У цьому підрозділі наведено огляд ключових бібліотек та середовищ для реалізації PINN і fPINN, зокрема TensorFlow, PyTorch, FEniCS, COMSOL Multiphysics, OpenFOAM, MATLAB, C#.ML, а також інших спеціалізованих пакетів та бібліотек.

TensorFlow – це відкрита бібліотека глибокого навчання, розроблена компанією Google. Вона надає високорівневі API (TensorFlow API, Keras) і засоби автоматичного диференціювання, що є ключовими для реалізації PINN [154]. TensorFlow широко використовується в наукових дослідженнях фізично-обґрунтованих нейронних мереж, зокрема став основою для кількох спеціалізованих PINN-бібліотек: DeepXDE, SciANN [154]. TensorFlow розповсюджується з відкритим вихідним кодом, зокрема, згідно ліцензії Apache 2.0, і підтримує багатоплатформні обчислення на CPU та GPU. TensorFlow дає змогу повністю налаштовувати структуру нейронної мережі та функцію втрат. Дослідник може явно включити диференціальні рівняння цілого порядку в функцію втрат через автоматичне диференціювання (GradientTape) [107, 43]. Отже, реалізація фізично-обґрунтованих мереж у TensorFlow зводиться до задання відповідної

архітектури мережі та додавання до функції втрат членів, що відповідають фізичним законам. Використання Keras API полегшує створення таких кастомних моделей завдяки гнучкості у визначенні функцій втрат та підтримці автоматичного обчислення градієнтів.

Прямої підтримки дробового числення TensorFlow не містить, однак є можливість реалізувати дробові оператори чисельно і включити їх у архітектуру мережі. Зокрема, у підході fPINN дробові похідні обчислюються не через автодиференціювання [107, 43], а з використанням чисельних схем [106]. В TensorFlow такі обчислення можуть бути реалізовані шляхом написання власних операторів або з використання окремих Python-пакетів для дробового числення.

На відміну від спеціалізованих наукових пакетів, TensorFlow не має вбудованого апарату для знаходження розв'язків диференціальних рівнянь, проте існують обгортки як SciANN – високо-рівнева надбудова над TensorFlow/Keras для задач механіки та матеріалознавства [154], що полегшує задання диференціальних операторів у структурі нейромережі.

TensorFlow спроектовано з урахуванням ефективного виконання на апаратурі високої продуктивності. Він підтримує обчислення на графічних процесорах GPU (Graphics Processing Unit) та TPU (Tensor Processing Unit), автоматично розподіляючи операції. Для великих моделей PINN TensorFlow дає змогу розподілене тренування на кількох GPU і навіть вузла [154]. Відкритий код TensorFlow та широка підтримка апаратури роблять його одним з найкращих інструментів для дослідників, що потребують швидкого навчання нейронних моделей на GPU-кластерах.

Аналогом бібліотеки TensorFlow є провідна платформа з відкритим вихідним кодом для глибокого навчання PyTorch, яка є розробленою корпорацією Meta. Вона відома завдяки наявності апарату динамічного обчислювального графа, гнучкістю у побудові моделей та зручністю налагодження. PyTorch, так само як TensorFlow,

активно використовується для реалізації фізично-обґрунтованих нейронних мереж, і навколо нього теж сформувалася екосистема спеціалізованих інструментів [154]. Зокрема, новітні промислові та академічні розробки віддають перевагу PyTorch завдяки його продуктивності на GPU та простоті інтеграції з C++ кодом. Також PyTorch надає повну свободу у визначенні функції втрат і архітектури нейромережі. За допомогою механізму autograd (автоматичного диференціювання) [107, 43] можна обчислювати похідні від виходу мережі за її вхідними змінними, тому включення диференціальних рівнянь у функцію втрат відбувається природно. Багато дослідницьких реалізацій PINN написані на PyTorch вручну або з використанням допоміжних бібліотек, наприклад, бібліотек NeuroDiffEq та TorchPhysics [154]. PyTorch, як і TensorFlow, не має вбудованих функцій для дробового диференціювання, однак допускає їх реалізацію. У випадку реалізації fPINN на PyTorch застосовуються аналогічні підходи гібридного обчислення: дробові похідні дискретизуються методом Монте-Карло чи скінченними різницями і включаються у функцію втрат як зовнішні розрахунки [106, 122]. Як і TensorFlow, PyTorch не розв'язує диференціальні рівняння сам по собі. Окрім того, існують спеціалізовані фреймворки на PyTorch, такі як NVIDIA Modulus (раніше відомий як SimNet), що орієнтовані на задачі фізично-інформованого навчання та розраховані на поєднання з традиційними САПР-даними. NVIDIA Modulus побудований на PyTorch і оптимізований для роботи на GPU, а також містить готові компоненти для постановки фізичних умов і розв'язування багаторазових задач [154].

FEniCS – відкрите середовище для розв'язування диференціальних рівнянь методом скінченних елементів. Це проєкт з відкритим кодом (ліцензія LGPL) та з активною спільнотою розробників, який надає високорівневі інтерфейси на Python і C++ для формулювання й розв'язання варіаційних задач. FEniCS дає змогу швидко транслювати математичну постановку диференційних рівнянь у ефективний код, автоматично генеруючи низькорівневі реалізації методів скінченних елементів.

Хоча FEniCS не створювався спеціально для нейронних мереж, він може відігравати важливу роль у контексті PINN як інструмент для отримання еталонних рішень диференціальних рівнянь та перевірки результатів, а також потенційно для гібридних підходів. FEniCS надає багаті можливості для класичних рівнянь у частинних похідних, включаючи різні типи скінченних елементів і розв’язування задач від лінійних до нелінійних. Проте для дробових диференціальних рівнянь прямих засобів у стандартному FEniCS немає.

COMSOL Multiphysics – це комерційний програмний комплекс для багатофізичних моделювань, що використовує метод скінченних елементів та інші чисельні підходи для розв’язання диференціальних рівнянь. COMSOL надає графічний інтерфейс і широку бібліотеку готових фізичних модулів (теплопровідність, механіка, електромагнетизм, реакції тощо), а також можливість введення користувацьких рівнянь. Хоча COMSOL не призначений спеціально для нейронних мереж, останніми роками з’являються спроби використовувати його разом із PINN. Статус COMSOL – комерційне програмне забезпечення, тобто на відміну від відкритих бібліотек, його використання потребує придбання ліцензії. В COMSOL відсутні засоби розробки нейронних мереж – він сфокусований на детермінованому розв’язанні рівнянь. Однак існують інструменти оптимізації та параметричного дослідження, які можуть бути пристосовані для навчання простої нейромережі [199]. У літературі описано випадки, коли PINN реалізовували безпосередньо в COMSOL через модуль оптимізації: одна нейронна мережа (задана як аналітична функція з параметрами) тренувалася на відповідність розв’язку диференціального рівняння разом із COMSOL, а інша мережа тренувалася зовнішнім

OpenFOAM – популярний відкритий пакет для обчислювальної гідродинаміки (CFD) і суміжних задач, який базується на методі кінцевих об’ємів (Finite Volume Method). OpenFOAM є open-source (ліцензія GPL) і широко

використовується в наукових та інженерних колах для моделювання течій, переносу тепла, хімічних реакцій та інших фізичних процесів. Його архітектура модульна, що дає змогу досвідченим користувачам додавати власні рівняння, граничні умови чи моделі турбулентності. У контексті PINN OpenFOAM цікавий як джерело високоякісних даних для навчання та перевірки. OpenFOAM не надає інструментів для побудови нейронних мереж; натомість, він дає змогу програмувати власні модулі C++ для вирішення рівнянь. Це означає, що теоретично можна інтегрувати обчислення нейромережі в OpenFOAM, використовуючи, наприклад, бібліотеку `libtorch`. З практичної точки зору, це досить складне завдання. Проте вже продемонстровано подібну ідею [94].

Важливу нішу займають спеціалізовані бібліотеки, розроблені саме для фізично-обґрунтованого навчання. Такі бібліотеки надають вищий рівень абстракції: дають змогу визначати диференціальні рівняння, області, граничні умови і автоматично формувати нейронну мережу та функцію втрат для PINN. Більшість із них є open-source проектами, що виникли в академічному середовищі: DeepXDE (Deep Learning for Differential Equations), NVIDIA Modulus, NeuroDiffEq.

DeepXDE – відкрита бібліотека, спочатку розроблена на базі TensorFlow, а нині сумісна з декількома бекендами (TensorFlow, PyTorch, JAX, PaddlePaddle) [154, 84]. DeepXDE підтримує різні типи задач: прямі та обернені PDE, інтегро-диференціальні рівняння, стохастичні диференціальні рівняння та ін. Зокрема, вона підтримує фрактальні PINN (fPINN): у бібліотеці реалізовано підхід для розв’язування дробових диференціальних рівнянь. Користувач у DeepXDE може в декларативний спосіб задати дробовий оператор, а бібліотека включить його у частину функції втрат. Отже, DeepXDE спрощує реалізацію PINN і fPINN, абстрагуючи низькорівневі деталі [154, 84], проте це ускладнює його використання в умовах розробки кастомізованого програмного забезпечення з нетиповими вимогами.

NVIDIA Modulus (PhysicsNeMo) – потужний індустріальний фреймворк від NVIDIA для створення фізично-обґрунтованих нейронних мереж та загалом моделей фізичного машинного навчання. Modulus є відкритим програмним забезпеченням і орієнтованим на максимальну продуктивність на GPU. Він побудований на PyTorch і включає оптимізовані реалізації розрахунку залишкових втрат, підтримує розподілене навчання, а також пропонує бібліотеки готових компонент таких, як: шари для обчислення градієнтів, геометричні примітиви, бібліотеку «рівнянь фізики». Modulus особливо ефективний для масштабних 3D задач та параметричних досліджень, оскільки використовує технології NVIDIA для прискорення. Хоча основна увага приділяється цілочисельним диференціальним рівнянням, Modulus можна адаптувати і для дробових рівнянь за рахунок ручного включення відповідних операторів у функцію втрат [154, 99].

NeuroDiffEq – відкрита бібліотека на базі PyTorch, створена для розв’язування диференціальних рівнянь з допомогою нейронних мереж. Вона автоматично будує PINN для заданого диференційного рівняння, дає змогу специфікувати граничні умови та має опції для прискорення навчання за рахунок перенесення навчання. NeuroDiffEq, хоч і не оновлюється так активно, демонструє концепцію максимальної автоматизації: користувач задає рівняння у символьному вигляді, а бібліотека сама формує функцію втрат і проводить навчання. Це зручно для стандартних задач, але для складніших або нестандартних (таких як дробові) задач може вимагати розширення коду [19].

TorchPhysics та PyDEns – інші дослідницькі проекти на PyTorch, які фокусуються на певних аспектах. TorchPhysics спрощує задавання геометрії області та умов, підтримує складні області (напр. задані імпортованою сіткою) [154, 150, 68]. PyDEns (Physics-Differential Equations Network Solvers) – пакет для розв’язування параметричних сімейств диференціальних рівнянь, наприклад, множини задач теплопровідності чи хвильового рівняння [154, 68]. Ці інструменти

показують гнучкість підходу PINN і дають змогу вирішувати цілі класи задач однією нейромережею, що є важко досяжним для традиційних методів.

SciANN – високорівневий API на основі TensorFlow/Keras для задач механіки та матеріалознавства, що використовує ідею PINN [154, 42]. SciANN дає можливість оголосити поля, наприклад, переміщення чи напруження, як нейромережі та додати рівняння рівноваги, сумісності чи матеріальні закони як компоненти функції втрат, по суті реалізуючи PINN для задач механіки суцільних середовищ. Ця бібліотека є прикладом галузевого застосування PINN у середовищі дослідників, знайомих з Keras [42].

Існують також бібліотеки іншими мовами програмування, наприклад, NeuralPDE.jl мовою Julia [154, 186] – компонент екосистеми SciML для автоматизованого розв’язання диференціальних рівнянь засобами PINN, та ADCME (Adaptive Differentiation-enabled Computational Mechanics) – написаний мовою Julia/TF та орієнтований на обернені задачі механіки [154, 175].

Наведені спеціалізовані бібліотеки загалом є відкритими і безоплатними для академічного використання. Вони стоять «над» фреймворками глибокого навчання, приховуючи рутинні аспекти реалізації PINN такі, як: обчислення градієнтів, формування втрат, генерування точок навчання, – і надають користувачу більш декларативний спосіб постановки задачі.

MATLAB є комерційним середовищем для чисельних обчислень, що використовує високорівневу мову програмування та вбудовані функції для математичних обчислень, обробки даних та візуалізації. Оскільки MATLAB активно використовується в інженерії та науці, його бібліотеки з математичного моделювання й чисельного аналізу роблять його потужним інструментом для реалізації PINN, хоча з певними обмеженнями щодо вбудованої підтримки нейронних мереж [199].

MATLAB пропонує інструменти для розробки нейронних мереж через Deep Learning Toolbox, що підтримує різноманітні архітектури нейронних мереж і включає алгоритми для навчання на великих даних. Однак MATLAB не є настільки гнучким, як Python-фреймворки, такі як TensorFlow чи PyTorch, у плані створення кастомних функцій втрат і моделювання специфічних фізичних рівнянь. Створення PINN в MATLAB потребує значних зусиль для визначення диференціальних рівнянь, а також для включення фізичних обмежень у модель нейронної мережі, оскільки MATLAB не має прямої підтримки для автоматичного диференціювання рівнянь, як це реалізовано в TensorFlow або PyTorch [199].

Мова C# з бібліотекою ML.NET надає можливості для машинного навчання в екосистемі .NET, однак її використання для задач, подібних до PINN, є обмеженим у порівнянні з більш спеціалізованими бібліотеками, такими як TensorFlow або PyTorch. ML.NET дає змогу будувати нейронні мережі через API для глибокого навчання, хоча його можливості є обмеженими для складних кастомних задач, таких як PINN. C# не підтримує автоматичне диференціювання, як це робиться в TensorFlow або PyTorch, тому реалізація фізично-інформованих мереж буде вимагати значних зусиль для обчислень залишку рівняння та інтеграції його в модель [17, 101].

Для реалізації PINN та fPINN важливо мати можливість задавати довільні функції втрат – це добре підтримується фреймворками глибокого навчання (TF, PyTorch) та відповідними науковими надбудовами (DeepXDE, Modulus тощо). Моделювання дробових операторів вимагає залучення додаткових чисельних методів або пакетів, оскільки жодна з розглянутих універсальних ML-платформ прямо не надає такої функціональності. Підтримка паралельних обчислень і GPU є критичною для навчання PINN та fPINN на практично складних задачах – тут найкращі результати демонструє спеціалізований фреймворк Modulus у поєднанні з потужністю сучасних графічних процесорів [124].

Висновки до I розділу

У цьому розділі здійснено комплексний аналіз наукових підходів до моделювання процесів тепловологоперенесення у пористих фрактальних середовищах. Зокрема:

- встановлено, що фрактальна структура середовищ у капілярно-пористих матеріалах, зокрема деревині, зумовлює складну геометричну неоднорідність, анізотропію та мультифрактальні властивості, що безпосередньо впливають на ефективність переносу тепла і вологи. Показано, що класичні моделі тепловологоперенесення не завжди враховують ці фактори, що обмежує їхню здатність до узагальнення і точного прогнозування.

- показано, що дробове диференціювання виявилось адекватним інструментом опису процесів, які характеризуються пам'яттю та нелокальними ефектами. Розглянуто дробового порядку похідні, які дають можливість точніше відображати поведінку фрактальних капілярно-пористих систем.

- проаналізовано традиційні методи розв'язання моделей тепломасоперенесення: аналітичні, чисельні. Встановлено, що незважаючи на поширеність чисельних методів, їх реалізація у задачах із дробовими похідними супроводжується значними витратами обчислювальних ресурсів та складністю масштабування.

- розглянуто сучасні підходи на основі фізично-інформованих нейронних мереж, які демонструють перспективність у моделюванні складних систем, що описуються диференціальними рівняннями, зокрема дробового порядку. Виявлено, що нейромережеві моделі здатні враховувати фізичні обмеження, працювати на обмежених даних і ефективно вирішувати як прямі, так і обернені задачі.

- встановлено, що використання PINN/fPINN у задачах тепловологоперенесення у фрактальних середовищах перебуває на етапі становлення. Наукові публікації з цієї тематики наразі обмежені, але демонструють суттєвий потенціал до подальшого розвитку.

Аналіз підтверджує доцільність подальших досліджень у напрямі створення об'єднаної методики, яка інтегрує дробові оператори, фрактальну геометрію та нейромережеві підходи, забезпечуючи підвищену точність і універсальність під час моделювання перенесення тепла й вологи у складних середовищах..

РОЗДІЛ II РОЗРОБЛЕННЯ ФРАКТАЛЬНОЇ ФІЗИЧНО-ІНФОРМОВАНОЇ НЕЙРОМЕРЕЖІ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТЕПЛОВОГО ТА ВОЛОГОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ У ФРАКТАЛЬНИХ СЕРЕДОВИЩАХ

У цьому розділі синтезовано фрактальну фізично-інформовану нейронну модель теплоперенесення та вологоперенесення у капілярно-пористих середовищах із фрактальною організацією. Враховуючи складну фізико-математичну природу цих процесів, у розділі обґрунтовано вибір архітектури нейронної моделі, з урахуванням дробових похідних Капуто та Грюнвальда–Летнікова, представлено методи апроксимації фрактальних операторів та побудови функціоналів втрат, а також приділено окрему увагу розробці методів навчання, зокрема методів поетапного та адаптивного навчання, що забезпечують підвищену збіжність моделі при одночасному збереженні фізичної інтерпретованості результатів.

Основні положення викладено у наукових працях [135, 134, 131, 136, 138, 200, 140, 201, 137, 202, 133, 132, 141].

2.1. Обґрунтування архітектури fPINN

Розроблення ефективних методів моделювання процесів теплового та вологого перенесення у фрактальних капілярно-пористих середовищах потребує врахування як складної просторової структури, так і ефектів пам'яті, зумовлених неоднорідним розподілом пористості та самоорганізацією середовища. Використання класичних математичних моделей, зокрема таких, що ґрунтуються на похідних цілого порядку, у багатьох випадках не забезпечує належної точності опису фізичних процесів. Це обумовлює необхідність застосування некласичних математичних формулювань, зокрема моделей на основі диференціальних рівнянь із дробовими похідними. Водночас класичне чисельне розв'язання дробово-диференціальних рівнянь ускладнюють значні обчислювальні витрати, високі вимоги до обсягу пам'яті, а також до щільності й форми просторово-часового

дискретизування області розрахунку, що актуалізує використання альтернативних обчислювальних стратегій.

Перспективним є використання концепції фізично-інформованих нейронних мереж (PINN), які дають змогу об'єднати емпіричні (у тому числі синтетичні) дані, рівняння математичної фізики та нейромережеву апроксимацію в межах єдиного оптимізаційного процесу. На відміну від класичних методів, підхід PINN не потребує явного просторово-часового дискретизування та може працювати з нерегулярними сітками, розрідженими або синтетичними даними.

Водночас варто зазначити, що хоча стандартні PINN ефективно інтегрують диференціальні рівняння з похідними цілого порядку у функцію втрат, вони виявляються непридатними для прямого врахування дробових похідних, які є ключовими для моделювання процесів із “довгою пам'яттю” та просторовою самоорганізацією. Причиною цього є обмеження стандартного механізму автодиференціювання, який не підтримує фракційні оператори. Це зумовлює необхідність використання розширеної фрактальної архітектури нейронної мережі (fPINN), що розширює базову концепцію PINN з урахуванням специфіки дробового числення та забезпечує адекватне відображення фізичних властивостей середовищ з фрактальною структурою.

У випадку двовимірної задачі з просторовими координатами $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ та часом t , архітектура fPINN зберігає загальну структуру, характерну для класичних фізично-інформованих нейронних мереж, і включає три основні компоненти: нейронну мережу прямого розповсюдження, фізично-обґрунтований модуль та механізм зворотного зв'язку [131, 106].

На вхід нейронної мережі N подаються значення змінних $\mathbf{z} = (\mathbf{x}, t)$, а за необхідності – додаткові параметри, що відображають характеристики середовища чи початкові умови. Основу першого компонента моделі складає набір прихованих шарів N^l реалізованих переважно у вигляді повнозв'язних (fully-connected) шарів

із нелінійними функціями активації φ . На кожному шарі виконується така процедура: усі вихідні сигнали з попереднього шару множаться на відповідні вагові коефіцієнти W^l , до результату додається вектор зміщень b^l , після чого застосовується нелінійна функція активації φ . Завдяки цій нелінійній складовій модель здатна відтворювати складні багатовимірні залежності, характерні для фізичних процесів. Зазначені кроки повторюються на кожному наступному шарі, формуючи багаторівневу (глибинну) структуру з високою апроксимаційною здатністю. Вихідний шар мережі N^L проєктується так, щоб відтворювати цільові фізичні величини. Якщо потрібно наблизити лише одну характеристику (наприклад, вологовміст U), зазвичай використовується один вихідний нейрон, що формує відповідне апроксимаційне значення:

$$\text{вихідний шар мережі: } N^0(\mathbf{z}, \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{z}, \quad (2.1)$$

$$\text{приховані шари мережі } N^l(\mathbf{z}, \boldsymbol{\mu}) = \varphi\left(W^l N^{l-1}(\mathbf{z}) + b^l\right); \quad (2.2)$$

$$\text{вихідний шар мережі } N^L(\mathbf{z}, \boldsymbol{\mu}) = \varphi\left(W^L N^{L-1}(\mathbf{z}) + b^L\right) \approx Y := \left(U(\mathbf{z})\right); \quad (2.3)$$

де L – кількість шарів мережі N , l – кількість прихованих шарів, $l = 1, 2, \dots, L-1$; φ – активаційна функція; $\mathbf{z}$ – набір просторово-часових координат, $\mathbf{z} := (\mathbf{x}, t) \in D$, $\boldsymbol{\mu} = \{W^l, b^l\}_{1 \leq l \leq L}$ – множина параметрів мережі, що формується на основі матриці вагових коефіцієнтів W та векторів зміщень b .

У випадку одночасного моделювання кількох величин (наприклад, вологості U та температури T) кількість вихідних нейронів збільшується залежно від кількості фізичних полів, які необхідно наблизити:

$$N^L(\mathbf{z}, \boldsymbol{\mu}) \approx Y := \left(U(\mathbf{z}), T(\mathbf{z})\right); \quad (2.4)$$

Попри збереження типової архітектури PINN, фрактальні фізично-інформовані нейронні мережі (fPINN) потребують додаткових механізмів для коректного врахування дробових похідних. На відміну від класичних PINN, у яких

усі похідні обчислюються автоматично за допомогою механізмів автодиференціювання, у fPINN дробові похідні реалізуються окремим обчислювальним модулем, розташованим поза межами основної архітектури мережі. У цьому модулі здійснюється чисельна апроксимація дробових похідних на основі вихідних значень мережі, зокрема, за допомогою різницевих схем, після чого результати включаються до функціоналу втрат L_N . Функціонал втрат формується у вигляді зваженої суми складових, кожна з яких відповідає окремому аспекту математичної постановки задачі: похибкам виконання диференціальних рівнянь L_f , дотриманню початкових умов L_{ic} та граничних умов L_{bc} , а також, за наявності, узгодженню з експериментальними або синтетичними даними L_d . Кожна складова функціоналу масштабована відповідним ваговим коефіцієнтом $(\eta_d, \eta_f, \eta_{ic}, \eta_{bc})$, що дає змогу досягти збалансованого врахування усіх фізичних аспектів моделі під час оптимізації:

$$L_N(\mu) = \eta_d L_d + \eta_f L_f + \eta_{ic} L_{ic} + \eta_{bc} L_{bc}. \quad (2.5)$$

Для обчислення похибок застосовується метод середньоквадратичної помилки (Mean Squared Error, MSE), який дає змогу кількісно оцінити відхилення між розрахованими та очікуваними значеннями кожного з фізичних станів системи. Такий підхід сприяє подоланню обмеження стандартного диференціювання в глибокому навчанні та забезпечує точне врахування фракційних операторів, що є необхідним для опису процесів із властивостями пам'яті та багатомасштабною структурою, характерних для фрактальних середовищ.

Третім важливим компонентом архітектури fPINN є механізм зворотного зв'язку, який забезпечує адаптацію мережі під час навчання. Його реалізація передбачає ітеративне оновлення параметрів мережі μ на основі мінімізації функціоналу втрат L_N , що формально задається виразом:

$$\mu^* = \arg \min_{\mu} L_N(\mu, Y(z)). \quad (2.6)$$

Процедура оптимізації виконується з використанням градієнтних методів, які забезпечують поступове зменшення функціоналу втрат, визначеного у формулі (2.5), шляхом коригування параметрів нейронної мережі у напрямку найшвидшого зменшення похибки. На кожній ітерації модель обчислює вихідні значення, оцінює дробові похідні, формує функціонал втрат, визначає його градієнт і, на цій основі, оновлює вагові коефіцієнти відповідно до обраного алгоритму оптимізації. Зазначені ітерації групуються в епохи, кожна з яких охоплює повний прохід через весь набір тренувальних даних. Такий підхід дає змогу послідовно наближатися до глобального або локального мінімуму функціоналу втрат. Процес оптимізації триває доти, поки не буде досягнуто бажаного рівня похибки або поки зміни у функціоналі втрат не стануть незначними.

У контексті використання фрактальних фізично-інформованих нейронних мереж, які враховують дробові похідні та складну просторово-часову структуру середовища, досягнення необхідного рівня точності під час апроксимації моделі, як правило, може сягати кількох тисяч епох навчання або більше – залежно від складності постановки задачі.

Водночас залежно від характеру задачі, навчальний процес може відбуватися в контрольованому, неконтрольованому або напівконтрольованому режимі. Тоді фрактальні фізично-інформовані нейронні мережі виступають як метод неконтрольованого навчання, коли навчання здійснюється виключно на основі фізичних рівнянь і граничних умов. Натомість за наявності експериментальних даних така мережа розглядається як інструмент контрольованого навчання. У випадку нестачі даних або часткового шумового забруднення можна організувати напівконтрольоване навчання, за якого модель одночасно використовує і фізичну формалізацію, і обмежену кількість спостережень. Напівконтрольований підхід дає змогу мережі гнучко пристосовуватися до реальних умов, підвищуючи точність та

надійність апроксимації навіть за умови неповної інформації, адже більша частина інформації вбудовується в модель на підставі фізичних законів.

Отже, запропонована архітектура фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі (fPINN) успадковує основні переваги класичних PINN – універсальну апроксимаційну здатність, можливість урахування експериментальних даних та просту інтеграцію початково-граничних умов. Водночас вона розширює функціонал мережі завдяки додатковому модулю для обчислення дробових операторів, що дає змогу описувати нелокальні ефекти та явища з “довгою пам’яттю” у фрактальних середовищах. Така архітектура забезпечує гнучкість під час розв’язання різноманітних підзадач: збільшення кількості вихідних змінних (наприклад, для опису механічних деформацій), застосування до багатовимірних задач (2D, 3D), а також підтримку різних типів дробових похідних чи комбінованих дифузій (у випадках, коли в моделі одночасно описуються кілька різних механізмів перенесення, наприклад тепла, вологи чи хімічних речовин).

2.2. Інтеграція моделі теплового та вологого перенесення у fPINN: використання дробових похідних у рівняннях моделі

Застосування дробових (фракційних) похідних у рівняннях теплового та вологоперенесення зумовлене тим, що класичні підходи (лінійні закони Фіка та Фур’є) [37] не завжди адекватно описують динаміку процесу, коли в матеріалі виникають довготривалі еридитарні ефекти та спостерігаються аномальні (субдифузійні чи наддифузійні) режими перенесення. У таких випадках традиційні моделі, що базуються на цілих порядках похідних недооцінюють сповільнене проникнення рідини або тепла і не дають змоги врахувати складну внутрішню будову матеріалу.

Натомість дробові похідні (Рімана–Ліувілля, Капуто, Грюнвальда–Летнікова тощо) здатні відображати широкий спектр складних ефектів, недосяжних для звичайних (цілочисельних) рівнянь. Насамперед маються на увазі процеси з ефектами пам'яті, в яких субдифузійна поведінка обумовлена тим, що поточний стан системи залежить не лише від теперішніх умов, а й від усієї попередньої історії її розвитку. Таку спадкову динаміку (ефект «довгої пам'яті») не можна коректно описати класичними диференціальними рівняннями, які передбачають миттєвий відгук без урахування часової пам'яті. Крім того, у фрактальних середовищах відстань у просторі не завжди прямо пропорційна швидкості поширення тепла чи вологи, тож дробовий порядок похідних за просторовими координатами уможливорює моделювання над- або субдифузії залежно від ступеня структурної неоднорідності. Нарешті, реальна структура капілярно-пористих матеріалів містить пори, пов'язані нетиповими шляхами, через що маса й енергія поширюються інакше, ніж це передбачають традиційні лінійні закони, зумовлюючи складні механізми переносу, які враховують як змінні кореляції у просторі, так і глибинні історичні процеси.

Завдяки цьому використання дробових похідних за просторовими і часовою координатами дає змогу врахувати нелокальні та спадкові ефекти на рівні відповідних диференціальних операторів. Це допомагає отримати більш адекватну математичну модель для опису технологічних процесів, зокрема сушіння деревини, в яких експериментально фіксуються суттєві відхилення від класичних співвідношень швидкості дифузії чи теплопровідності. У цьому дослідженні для опису процесів тепловологоперенесення у фрактальних середовищах використано дробову похідну Капуто щодо часу та оператор Грюнвальда–Летнікова для просторових координат. Такий вибір зумовлений декількома чинниками, серед яких: фізичний сенс початкових умов за часом, простота просторової дискретизації оператора Грюнвальда–Летнікова та збалансоване обчислювальне навантаження

для обох операторів. Формулювання Капуто зручно вбудовується до рівнянь, де початкові умови задано у формі класичних чи емпіричних даних, бо дробова похідна Капуто допускає використання класичних граничних/початкових умов у вигляді значень функції та її цілих похідних у момент $t = 0$. Це суттєво спрощує застосування класичних фізичних умов початку процесу, коли відомий початковий розподіл температури чи/та вологовмісту. Оператор Грюнвальда–Летнікова легко інтегрується з методами кінцевих різниць або елементів, бо фракційна похідна Грюнвальда–Летнікова має різницеве формулювання. Обидва оператори – Капуто (у часі) та Грюнвальда–Летнікова (у просторі) – є відносно “дружніми” для імплементації на паралельних архітектурах. Їхні різницеві аналоги легко розподіляються у вузлах обчислень, що дає змогу досягти більшої масштабованості під час розв’язання задачі тепловологоперенесення у фрактальних матеріалах.

З урахуванням зазначеного вище, математична постановка двовимірної задачі перенесення тепла і вологи в анізотропному капілярно-пористому матеріалі з фрактальною структурою описується системою диференціальних рівнянь із дробовими похідними (2.7)-(2.8):

$$c\rho^C D_t^\alpha T = \sum_{i=1}^2 \lambda_i^{GL} D_{x_i}^\beta T + \varepsilon \rho_0 r^C D_t^\alpha U, \quad (2.7)$$

$$^C D_t^\alpha U = \sum_{i=1}^2 \left(a_i^{GL} D_{x_i}^\beta U + a_i \delta^{GL} D_{x_i}^\beta T \right), \quad (2.8)$$

що доповнюється відповідними початковими умовами (2.9):

$$T|_{t=0} = T_0(\mathbf{x}), U|_{t=0} = U_0(\mathbf{x}), \quad (2.9)$$

та граничними умовами третього роду (2.10)-(2.11):

$$\lambda_i^{GL} D_{x_i}^\nu T|_{x_i=0,l_i} + \sigma \beta_i \left(U|_{x_i=0,l_i} - U_p \right) = \alpha_i \left(T|_{x_i=0,l_i} - t_e \right), \quad (2.10)$$

$$a_i^{GL} D_{x_i}^\nu U|_{x_i=0,l_i} + a_i \delta^{GL} D_{x_i}^\nu T|_{x_i=0,l_i} = \beta_i \left(U_p - U|_{x_i=0,l_i} \right), \quad (2.11)$$

де $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ – вектор координат; x_i – просторові координати, $x_i \in [0, l_i], i = 1, 2$; t – координата за часом, $t \in [0, t_{\max}]$; $T(t, \mathbf{x})$ – температура; $U(t, \mathbf{x})$ – вміст вологості; $c(T, U)$ – теплоємність; $\rho(U)$ – щільність; $\lambda_i(T, U)$ та $a_i(T, U)$ ($i = 1, 2$) – коефіцієнти теплопровідності та вологопровідності відповідно; $\sigma = \rho_0(1 - \varepsilon)$, де ρ_0 – базова щільність та ε – коефіцієнт фазового переходу; r – питома теплота пароутворення; $\delta(T, U)$ – термоградієнтний коефіцієнт; температура навколишнього середовища; $U_p(t_e, \varphi)$ – рівноважний вологовміст; t_e – температура навколишнього середовища; φ – відносна вологість навколишнього середовища; $\alpha_i(t_e, \nu)$ та $\beta_i(t_e, \nu)$ – коефіцієнти теплопередачі та вологообміну відповідно; ν – швидкість руху агента навколишнього середовища; ${}^C D_t^\alpha$ – оператор похідної Капуто дробового порядку, ${}^{GL} D_{x_i}^\beta$ та ${}^{GL} D_{x_i}^\nu$ – диференціальний оператор Грюнвальда-Летнікова нецілого порядку, α ($0 < \alpha \leq 1$) – дробовий порядок похідної за часом; β ($1 < \beta \leq 2$) та ν ($0 < \nu \leq 1$) – дробові показники похідних за просторовими координатами. Початкові умови (2.9) для нерегулярного режиму сушіння задають початкові значення температури та вологості, що визначають вихідний стан системи. Граничні умови третього роду описують процес взаємодії досліджуваного матеріалу з навколишнім середовищем. Зокрема, умови (2.10) і (2.11) визначають швидкість передачі тепла через поверхню зразка, а також швидкість видалення вологи крізь цю ж поверхню.

Для визначення динаміки температури $T(t, \mathbf{x})$ та вологості $U(t, \mathbf{x})$ потрібно розв'язати задачу тепловологоперенесення, математично представлену системою рівнянь (2.7)–(2.11).

Інтеграція моделі теплового та вологого перенесення (2.7)–(2.11), яка описує середовище з фрактальною структурою, ефектами пам'яті, самоорганізації та

просторової нелокальності, до архітектури fPINN є нетривіальним і складним завданням. Це зумовлено тим, що система включає два фізично взаємопов'язані процеси, кожен із яких має відмінну динаміку та характер еволюції.

Основна ідея полягає в тому, що для наближення розв'язків рівнянь теплового та вологого перенесення, які містять похідні дробового порядку, нейронна мережа формується аналогічно до звичайної fPINN (2.1), (2.2), (2.4). Тобто, на вхід подаються просторові координати та час $\mathbf{z} = (\mathbf{x}, t)$ (2.1), а мережа, проходячи низку прихованих шарів з нелінійною активацією (2.2), повертає апроксимаційні значення шуканих фізичних полів, зокрема вологості $U(t, \mathbf{x})$ і температури $T(t, \mathbf{x})$ (2.4).

З метою формування функціоналу втрат (2.5), який може включати як класичні (цілочисельні), так і дробові компоненти моделі, доцільно ввести позначення: сукупність диференціальних операторів, що визначені у рівняннях (2.7) - (2.11), позначимо як $D = \{ {}^C D_t^\alpha, {}^{GL} D_{x_i}^\beta, {}^{GL} D_{x_i}^\nu \}$. Водночас виникає необхідність класифікації елементів множини D , які діють на температурне та вологісне поля, на дві незалежні групи. Такий поділ ґрунтується на значеннях параметрів α, β та ν : оператори, що відповідають цілочисельним значенням, утворюють першу групу, для якої застосовується стандартна процедура автодиференціювання на основі ланцюгового правила [11]. Водночас оператори, що відповідають дробовим показникам порядків похідних, формують другу групу. Ці оператори не піддаються класичному диференціюванню і потребують окремих чисельних алгоритмів для їх обчислення.

Натомість у функції втрат передбачено механізм для оцінки дробових операторів. Зокрема, вихід мережі в колокаційних точках $\mathbf{z}_i = (\mathbf{x}_i, t_i)$ підставляється у спеціальну числову різницеву схему, що наближає дробову похідну. Далі отримані значення використовуються у відповідній складовій функціоналу втрат L_f , L_{ic} або L_{bc} , яка відповідає залишку відповідного керівного рівняння (2.7) чи

(2.8), або початкових (2.9) чи граничних (2.10), (2.11) умов. Отже, дробові оператори враховуються у загальній функції втрат (2.5), причому складові L_f визначаються як:

$$L_f = L_T + L_U, \quad (2.12)$$

де L_T та L_U , відповідно визначаються як залишкові функції для рівнянь (2.7) та (2.8).

Втрати, що відображають невідповідність початкових та граничних умов, заданих рівняннями (2.9)–(2.11), визначаються наступним чином:

$$L_{ic} = L_{T_{ic}} + L_{U_{ic}} \quad (2.13)$$

$$L_{bc} = L_{T_{bc}} + L_{U_{bc}} \quad (2.14)$$

Отже, під час оптимізації параметрів мережі згідно (2.6) здійснюється мінімізація похибок не лише за класичними компонентами (обчисленими через автодиференціювання для цілочисельних порядків похідних), але й за дробовими операторами, що враховують ефекти пам'яті та фрактальну специфіку середовища.

Особливістю застосування такого підходу є підвищені вимоги до просторово-часової дискретизації, зумовлені специфікою реалізації дробових операторів. Зокрема, для оператора Капуто необхідне збереження інформації про попередні часові зрізи, тоді як реалізація оператора Грюнвальда–Летнікова потребує врахування значень функції в околі кожної просторової точки. Це зумовлює зростання обчислювальної складності, проте дає змогу значно підвищити точність моделювання та адекватність опису фізичних процесів у фрактальних середовищах. Такий підхід дає змогу відтворювати складні динамічні ефекти, зокрема субдифузійне (уповільнене) поширення тепла чи вологи, а також наддифузійну поведінку – пришвидшену релаксацію у певних зонах середовища.

Враховуючи взаємозалежність компонентів у функції втрат (2.5), процес навчання однієї нейронної мережі з двома виходами (2.4) за допомогою градієнтних оптимізаторів стає обчислювально складним і нестабільним. Щоб зменшити вплив

цієї складності, у роботі запропоновано альтернативну архітектуру, що передбачає використання двох окремих, незалежних нейронних мереж прямого поширення (Рис. 2.1).

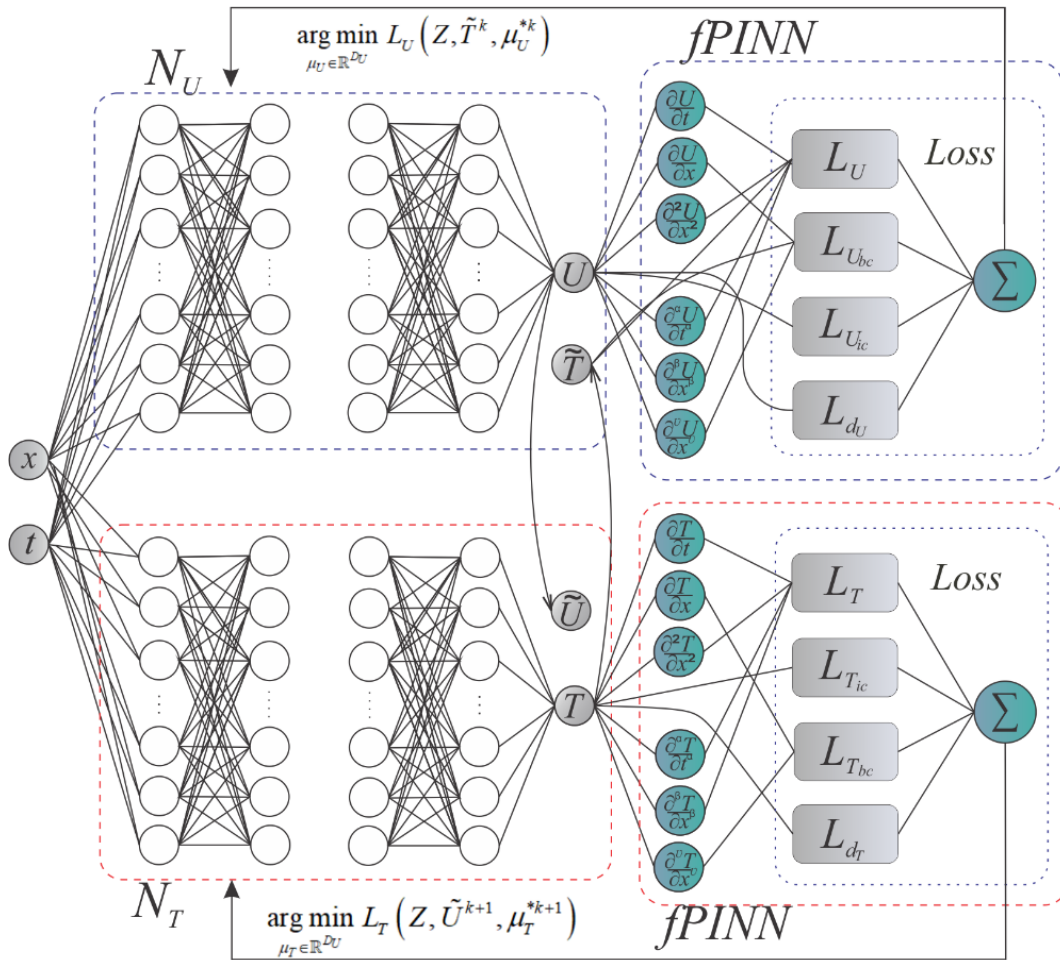


Рисунок 2.1 – Модель нейронної мережі

Кожна з цих мереж має один вихід і моделює окрему фізичну величину – температуру або вологовміст – за умови, що взаємні впливи між потоками (між градієнтом температури та вологості) є незначними. Така модульна структура не лише зменшує кількість взаємозалежних параметрів у межах однієї мережі, але й дає змогу краще контролювати процеси навчання кожного з виходів. Це сприяє зниженню ризику накопичення помилок, підвищенню стабільності моделі та пришвидшенню її збіжності. У результаті вихідні сигнали цих окремих мереж

можна інтерпретувати як апроксимаційні розв'язки рівнянь (2.7)–(2.8), що описують процеси теплового та вологого перенесення:

$$\tilde{U}(\mathbf{x}, t) \approx N_U(Z, \mu_U), \quad (2.15)$$

$$\tilde{T}(\mathbf{x}, t) \approx N_T(Z, \mu_T), \quad (2.16)$$

де N_U – нейронна мережа, яка апроксимує вологовміст, а N_T – мережа, призначена для наближення температурного поля; μ_U, μ_T – вектори параметрів оптимізації для двох незалежних мереж N_U та N_T відповідно. Навчання моделей здійснюється на множині точок Z , яка охоплює часово-просторову область $G = [0, t_{\max}] \times [0, l_i]$, $i = 1, 2$.

У рамках цієї архітектури функції втрат для нейронних мереж N_U та N_T мають вигляд, поданий у формулах (2.17) та (2.18):

$$L_{N_U} = \eta_{U_d} L_{U_d} + \eta_U L_U + \eta_{U_{ic}} L_{U_{ic}} + \eta_{U_{bc}} L_{U_{bc}}, \quad (2.17)$$

$$L_{N_T} = \eta_{T_d} L_{T_d} + \eta_T L_T + \eta_{T_{ic}} L_{T_{ic}} + \eta_{T_{bc}} L_{T_{bc}}, \quad (2.18)$$

де $L_U, L_T, L_{U_0}, L_{T_0}, L_{U_{bc}}, L_{T_{bc}}$ – вирази, що відповідають залишкам рівнянь системи (2.7)–(2.11). У функціях втрат враховано вагові коефіцієнти $\eta_{U_d}, \eta_U, \eta_{U_{ic}}, \eta_{U_{bc}}, \eta_{T_d}, \eta_T, \eta_{T_{ic}}, \eta_{T_{bc}}$ які використовуються для балансування впливу різних складових і покращення ефективності роботи алгоритмів оптимізації. Ці параметри дають змогу адаптивно налаштовувати процес навчання, посилюючи або послаблюючи вплив окремих фізичних умов у загальному функціоналі.

У межах запропонованої архітектури функції втрат для моделей N_U та N_T мають окрему форму, адаптовану до особливостей кожної змінної. Вони розраховуються з урахуванням відповідних похідних та умов задачі, що дає змогу кожній мережі самостійно мінімізувати похибку у відтворенні заданого фізичного поля.

Отже, включення дробових похідних до структури fPINN дає змогу зберегти базову архітектуру нейронної мережі, яка складається з вхідного шару, системи прихованих шарів і вихідного шару, що генерує апроксимацію шуканого фізичного поля (температури або вологості). Основною модифікацією є використання окремої мережі прямого поширення для кожної змінної, а також побудова індивідуального функціоналу втрат, який відображає специфіку відповідного процесу та спрямований на мінімізацію похибки саме для цієї фізичної величини. Кожен функціонал втрат доповнюється модулем чисельного обчислення дробових операторів, що забезпечує точне врахування ефектів пам'яті та просторової нелокальності.

Запропонований підхід дає змогу суттєво зменшити обчислювальні витрати завдяки відмові від використання щільної просторово-часової сітки, а також підвищити стійкість до шумових спостережень. У випадку залучення експериментальних або синтетичних даних мережа здатна ефективніше інтерполювати значення в недостатньо представлених ділянках простору. Додатковою перевагою є гнучкість моделі: за потреби фізичні компоненти – наприклад, дробові похідні за просторовими або часовими змінними – можна легко активувати або деактивувати шляхом зміни значень порядків диференціювання α, β, ν .

Отже, така архітектура fPINN забезпечує фізично обґрунтовану взаємодію моделі з процесами, що мають спадкову природу, та відкриває можливості для ефективного розв'язання широкого спектра задач субдифузійного й наддифузійного типу в рамках тепловологообміну у фрактальних середовищах.

2.3. Апроксимація фрактальних операторів

Одним із основних аспектів побудови ефективних фізично-інформованих нейромереж, призначених для моделювання процесів теплового та вологого

перенесення в капілярно-пористих фрактальних середовищах, є апроксимація дробових (фрактальних) диференціальних операторів. Останні суттєво відрізняються від класичних похідних цілого порядку своєю нелокальністю та здатністю враховувати ефекти пам'яті й аномальної дифузії, що значно впливає на адекватність опису реальних фізичних процесів.

Для чисельної реалізації фрактальних моделей найпоширенішими є похідні Капуто для часової компоненти та оператор Грюнвальда–Летнікова для просторових координат. Нижче представлено теоретичні обґрунтування та схеми дискретизації, які використали у роботі для побудови чисельної реалізації фрактальної фізично-інформованої нейромережі (fPINN).

Похідна Капуто є зручною для застосування у фізичних задачах, оскільки дає можливість напряду використовувати класичні початкові та граничні умови, типові для багатьох фізичних процесів, включно з тепловим перенесенням. Згідно з визначенням дробової похідної у сенсі Капуто [147], обчислення здійснюється шляхом початкового диференціювання функції $U(t)$ порядку n (де $n = \lceil \alpha \rceil$), після чого результат підлягає інтегруванню дробового порядку α . У загальному вигляді це виражається співвідношенням:

$${}^c D_t^\alpha U(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_\alpha^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} U^{(n)}(\tau) d\tau \quad (2.19)$$

де $\Gamma(n-\alpha)$ гамма-функція, а n – найменше ціле число, що перевищує α , $\alpha \in \mathbb{R}, n-1 < \alpha \leq n$. У границі для $\alpha \rightarrow 1$ дробова похідна переходить у класичну похідну першого порядку за часом.

У разі, якщо початкова точка інтегрування $n=1$, то параметр α , що задовольняє умову $0 < \alpha \leq 1$, інтерпретується як індикатор спадкових властивостей (еридитарності) процесу, зокрема субдифузії – режиму перенесення, під час якого частинки поширюються повільніше порівняно зі звичайною дифузією (дифузією Фіка).

Дробова похідна Капуто порядку α , $0 < \alpha < 1$, визначається наступним оператором:

$${}_0^C D_t^\alpha U(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-\tau)^{-\alpha} U'(\tau) d\tau \quad (2.20)$$

Для чисельної апроксимації похідної у сенсі Капуто застосували модифіковану схему апроксимації підвищеної точності [149, 80, 62]. Вибір цієї схеми мотивується балансом між обчислювальною складністю і точністю апроксимації. Така апроксимаційна схема має вигляд:

$${}_0^C D_t^\alpha U(t_n) = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha} \times \left[U(t_n) - U(t_{n-1}) + \sum_{j=1}^{n-1} \left((j+1)^{1-\alpha} - j^{1-\alpha} \right) (U(t_{n-j}) - U(t_{n-1-j})) \right] \quad (2.21)$$

де τ – крок дискретизації за часом, а коефіцієнти в сумі враховують історичну залежність процесу, тобто ефект «довгої пам'яті». Дана схема має порядок точності $O(\tau^{2-\alpha})$ при достатній регулярності розв'язку ($U(t) \in C^2[0, t_{\max}]$).

У цій роботі використали схему [62, 80], аналогічну до рівняння (2.20), проте подану в еквівалентній формі:

$${}_0^C D_t^\alpha U(t_n) = \frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \left[b_0 U(t_n) - b_{n-1} U(t_0) \right] + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j - b_{j-1}) U(t_{n-j}) \quad (2.22)$$

де $b_j = (j+1)^{1-\alpha} - j^{1-\alpha}$, $j = 0, 1, \dots, K-1$; $t_n = \tau n$, $n = 0, \dots, N$; $\tau = \frac{t_{\max}}{N}$.

У фрактальних середовищах перенесення тепла та вологи відбувається за аномальними траєкторіями, що вимагає застосування дробового числення для точного опису просторових характеристик процесу. Серед відомих підходів особливої популярності набув оператор дробової похідної в сенсі Грюнвальда–Летнікова [147, 111]:

$${}^{GL} D_x^\beta U(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^\beta} \sum_{n=0}^{\left[\frac{x-a}{h} \right]} (-1)^n \binom{\beta}{n} (x-nh), \quad (2.23)$$

де β – порядок похідної, $\beta > 0$; $h = \frac{x-a}{N}$ – довжина елементарного просторового інтервалу дискретизації; $x \in [a, b]$, $x_n = nh$, $h = 0, \dots, N$, $[\cdot]$ – позначає цілу частину числа.

Найпоширенішим підходом для апроксимації дробового оператора Грюнвальда–Летнікова є схема [147]:

$${}^{GL}D_x^\beta U(x_k) \approx \frac{1}{h^\beta} \sum_{i=0}^k \gamma_i^\beta U(x_{k+1-i}), \quad (2.24)$$

де β – порядок дробової похідної (найчастіше $1 < \beta \leq 2$), h – просторовий крок, а коефіцієнти визначаються за виразом: $\gamma_i = \frac{\Gamma(i-\beta)}{\Gamma(-\beta)\Gamma(i+1)}$.

Вибір конкретної чисельної схеми апроксимації дробових похідних значною мірою визначається вимогами до точності та обчислювальної ефективності алгоритму. Але щодо часової дискретизації, варто зазначити, що для значень порядку диференціювання $\alpha \approx 1$ вплив спадкових ефектів є відносно слабким, тому допустиме використання порівняно великих кроків дискретизації за часом без істотної втрати точності. Натомість для $\alpha \ll 1$ спадкові властивості суттєво проявляються, що зумовлює необхідність зменшення кроку інтегрування з метою належного відтворення ефектів довготривалої пам'яті.

Для просторової апроксимації, коли порядок дробової похідної наближається до $\beta \approx 2$, чисельна схема практично збігається з класичним наближенням оператора Лапласа і, як правило, не потребує суттєвих модифікацій. Натомість за $\beta \ll 2$, особливо за умов вираженої просторової нелокальності, необхідним є розширення області апроксимації, що може вимагати додаткових сіткових вузлів або проведення аналізу стійкості з урахуванням впливу далекодіючих компонентів у дискретному представленні дробових операторів.

У цьому дослідженні для апроксимації просторових дробових похідних застосували зміщену різницеву схему Грюнвальда–Летнікова (2.24), яка вирізняється покращеними стабілізаційними характеристиками порівняно з класичним варіантом. Застосування цієї модифікації дає змогу не лише підвищити чисельну стійкість методу, а й зменшити похибки апроксимації, що є особливо важливим при моделюванні процесів у середовищах із фрактальною структурною неоднорідністю.

Отже, вибір часових і просторових кроків та врахування порядку дробових похідних є важливим для стабільної та точної чисельної реалізації фрактальної фізично-інформованої моделі тепловологоперенесення. Врахування наведених особливостей дає змогу забезпечити чисельну стабільність і адекватність отриманих результатів стосовно фізичних процесів у капілярно-пористих фрактальних середовищах.

У фрактальній фізично-інформованій нейронній мережі наведені чисельні схеми апроксимації дробових операторів Капуто та Грюнвальда–Летнікова вводяться безпосередньо у функціях втрат (2.17), (2.18). Вони дають можливість враховувати нелокальні та часові ефекти, притаманні фрактальним середовищам, що сприяє більшій фізичній адекватності результатів нейромережевого моделювання [106].

Отже, вибір просторових і часових кроків, а також урахування порядків дробових похідних є дуже важливими для забезпечення стабільності та точності чисельної реалізації фрактальної фізично-інформованої моделі тепловологоперенесення. Дотримання наведених умов дає змогу досягти чисельної стійкості та фізичної достовірності результатів моделювання процесів у капілярно-пористих середовищах з фрактальними властивостями.

У межах фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі реалізація чисельних схем апроксимації дробових операторів – зокрема, у формулюваннях

Капуто та Грюнвальда–Летнікова – здійснюється безпосередньо через функції втрат (2.17), (2.18). Це дає змогу інтегрувати в модель характерні для фрактальних середовищ нелокальні та спадкові ефекти, тим самим підвищуючи фізичну адекватність нейромережевого наближення [5].

Отже, представлена чисельна апроксимація дробових операторів (2.22) та (2.24) є важливим кроком для впровадження фізичної інформації в нейромережевій моделі. Завдяки спеціалізованим схемам дискретизації вдається досягнути точнішого опису динамічних процесів у середовищах зі складною структурою, де класичні методи не забезпечують належної адекватності опису процесів теплового перенесення.

2.4. Визначення функцій втрат

У фізично-інформованих нейронних мережах (PINN), а також у їх фрактальному розширенні (fPINN), фундаментальну роль відіграє конструкція функції втрат (loss function), яка поєднує фізичні закони з даними та забезпечує узгодженість моделі з реальними процесами. На відміну від традиційних підходів, що орієнтуються лише на відхилення від емпіричних точок, fPINN оптимізує параметри нейронної мережі на основі залишків рівнянь у частинних похідних, які можуть включати дробові оператори, та додаткових умов задачі (початкових, граничних, симетрій тощо).

Для задачі моделювання неізотермічного вологоперенесення у фрактальному середовищі із використанням двох незалежних мереж N_U та N_T , функціонал втрат реалізується окремо для кожної мережі, як це зазначено у формулах (2.17) та (2.18).

У виразах (2.17) та (2.18) кожна складова обчислюється на множині навчальних точок, що належать області $Z \subset G = [0, t_{\max}] \times [0, l_i], i = 1, 2$. Для кожного з елементів функціоналів втрат застосовується метод найменших квадратів, що дає змогу оцінити відхилення між апроксимованими та очікуваними значеннями

відповідних фізичних станів системи. Відповідно, складові функціоналів втрат, пов'язані з навчальними даними для мереж N_U та N_T , можна формалізувати у такому вигляді:

$$L_{U_d} = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \|N_U(\mathbf{z}^i) - Y_i^*(U)\|^2 \quad (2.25)$$

$$L_{T_d} = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \|N_T(\mathbf{z}^i) - Y_i^*(T)\|^2 \quad (2.26)$$

Складові функціоналів втрат, що відповідають залишкам основних рівнянь моделі (2.7) та (2.8), матимуть вигляд:

$$L_U = \frac{1}{N_f} \sum_{j=1}^{N_f} \left({}^c D_\tau^\alpha U|_{\tau_j, x_{ij}} - \sum_{i=1}^2 \left(a_i {}^{GL} D_{x_i}^\beta U|_{\tau_j, x_{ij}} + a_i \delta {}^{GL} D_{x_i}^\beta T|_{\tau_j, x_{ij}} \right) \right)^2 \quad (2.27)$$

$$L_T = \frac{1}{N_f} \sum_{j=1}^{N_f} \left(c \rho {}^c D_\tau^\alpha T|_{\tau_j, x_{ij}} - \sum_{i=1}^2 \lambda_i {}^{GL} D_{x_i}^\beta T|_{\tau_j, x_{ij}} - \varepsilon \rho_0 r {}^c D_\tau^\alpha U|_{\tau_j, x_{ij}} \right)^2 \quad (2.28)$$

де N_f - кількість внутрішніх точок області G ; $i = 1, 2$.

Компоненти функціоналів втрат, які забезпечують узгодженість моделі з початковими умовами (2.9), мають вигляд:

$$L_{U_{ic}} = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} \left(U|_{t=0} - U_0(\mathbf{x}_j) \right)^2, \quad (2.29)$$

$$L_{T_{ic}} = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} \left(T|_{t=0} - T_0(\mathbf{x}_j) \right)^2, \quad (2.30)$$

де N_i - кількість точок просторово-часової області G , що відповідають початковому моменту часу $t = 0$.

Втрати, що відповідають виконанню граничних умов, визначених рівняннями (2.10)–(2.11), обчислюються за таким принципом:

$$L_{U_{bc}} = \frac{1}{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} \left(a_i {}^{GL} D_{x_i}^\nu U|_{x_i=0, l_i} + a_i \delta {}^{GL} D_{x_i}^\nu T|_{x_i=0, l_i} - \beta_i \left(U_p - U|_{x_i=0, l_i} \right) \right)^2, \quad (2.31)$$

$$L_{T_{bc}} = \frac{1}{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} \left(\lambda_i {}^{GL} D_{x_i}^\nu T|_{x_i=0, l_i} - \sigma \beta_i \left(U|_{x_i=0, l_i} - U_p \right) - \alpha_i \left(T|_{x_i=0, l_i} - t_c \right) \right)^2, \quad (2.32)$$

де N_b – точки, що належать границі просторово-часової області G ; $i = 1, 2$.

З метою уникнення застосування автодиференціювання для операторів другої групи, для яких показники α, β, ν мають нецілі значення, доцільно скористатися їх дискретними апроксимаціями, поданими формулами (2.22) та (2.24). Позначивши дискретні значення функцій у вигляді $U((x_1)_n, (x_2)_m, t_k) = U_{n,m}^k$ та $T((x_1)_n, (x_2)_m, t_k) = T_{n,m}^k$ отримаємо апроксимаційні співвідношення для компонентів функціоналів втрат:

$$L_U = \frac{1}{N'_r} \times \sum_{k=1}^K \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=1}^{M-1} \left[\frac{1}{\lambda^\alpha \Gamma(2-\alpha)} [d_0 U_{n,m}^k - d_{k-1} U_{n,m}^0 + \sum_{j=1}^{k-1} (d_j - d_{j-1}) U_{n,m}^{k-j}] - \right. \\ \left. - \frac{a_1}{h_1^\beta} \sum_{j=0}^n \gamma_j^\beta U_{n+1-j,m}^k - \frac{a_1}{h_2^\beta} \sum_{j=0}^m \gamma_j^\beta U_{n,m+1-j}^k - \right. \\ \left. - \frac{a_2 \delta}{h_1^\beta} \sum_{j=0}^n \gamma_j^\beta T_{n+1-j,m}^k - \frac{a_2 \delta}{h_2^\beta} \sum_{j=0}^m \gamma_j^\beta T_{n,m+1-j}^k, \right]^2, \quad (2.33)$$

$$L_T = \frac{1}{N'_r} \times \sum_{k=1}^K \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=1}^{M-1} \left[\frac{c\rho}{\lambda^\alpha \Gamma(2-\alpha)} [d_0 T_{n,m}^k - d_{k-1} T_{n,m}^0 + \sum_{j=1}^{k-1} (d_j - d_{j-1}) T_{n,m}^{k-j}] - \right. \\ \left. - \frac{\lambda_1}{h_1^\beta} \sum_{j=0}^n \gamma_j^\beta T_{n+1-j,m}^k - \frac{\lambda_2}{h_2^\beta} \sum_{j=0}^m \gamma_j^\beta T_{n,m+1-j}^k - \right. \\ \left. - \frac{\varepsilon \rho_0 r}{\lambda^\alpha \Gamma(2-\alpha)} [d_0 U_{n,m}^k - d_{k-1} U_{n,m}^0 + \sum_{j=1}^{k-1} (d_j - d_{j-1}) U_{n,m}^{k-j}] \right]^2, \quad (2.34)$$

$$L_{T_{ic}} = \frac{1}{N'_0} \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M \left(T_{n,m}^0 - T_0((x_1)_n, (x_2)_m) \right)^2, \quad (2.35)$$

$$L_{U_{ic}} = \frac{1}{N'_0} \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M \left(U_{n,m}^0 - U_0((x_1)_n, (x_2)_m) \right)^2, \quad (2.36)$$

$$L_{U_{bc}} = \frac{1}{N'_b} \times [L_{U_{bc1}} + L_{U_{bc2}} + L_{U_{bc3}} + L_{U_{bc4}}], \quad (2.37)$$

$$L_{T_{bc}} = \frac{1}{N'_b} \times [L_{T_{bc1}} + L_{T_{bc2}} + L_{T_{bc3}} + L_{T_{bc4}}], \quad (2.38)$$

Обчислення компонент сум у виразах (2.37) – (2.38) ґрунтується на математичних залежностях, наведених у формулах (2.39) – (2.46):

$$L_{U_{bc1}} = \sum_{k=1}^K \sum_{m=0}^M \left(\frac{a_1}{h_1^\nu} \gamma_0^\nu U_{1,m}^k + \frac{a_1 \delta}{h_1^\nu} \gamma_0^\nu T_{1,m}^k - \beta_1 (U_p - U_{0,m}^k) \right)^2, \quad (2.39)$$

$$L_{U_{bc2}} = \sum_{k=1}^K \sum_{n=0}^N \left(\frac{a_2}{h_2^\nu} \gamma_0^\nu U_{n,1}^k + \frac{a_2 \delta}{h_2^\nu} \gamma_0^\nu T_{n,1}^k - \beta_2 (U_p - U_{n,0}^k) \right)^2, \quad (2.40)$$

$$L_{U_{bc3}} = \sum_{k=1}^K \sum_{m=0}^M \left(\frac{a_1}{h_1^\nu} \sum_{j=0}^N \gamma_j^\nu U_{N+1-j,m}^k - \frac{a_1 \delta}{h_1^\nu} \sum_{j=0}^N \gamma_j^\nu T_{N+1-j,m}^k - \beta_1 (U_p - U_{N,m}^k) \right)^2, \quad (2.41)$$

$$L_{U_{bc4}} = \sum_{k=1}^K \sum_{n=0}^N \left(\frac{a_2}{h_2^\nu} \sum_{j=0}^M \gamma_j^\nu U_{n,M+1-j}^k - \frac{a_2 \delta}{h_2^\nu} \sum_{j=0}^M \gamma_j^\nu T_{n,M+1-j}^k - \beta_2 (U_p - U_{n,M}^k) \right)^2, \quad (2.42)$$

$$L_{T_{bc1}} = \sum_{k=1}^K \sum_{m=0}^M \left(\frac{\lambda_1}{h_1^\nu} \gamma_0^\nu T_{1,m}^k - \sigma \beta_1 (U_{0,m}^k - U_p) - \alpha_1 (T_{0,m}^k - t_c) \right)^2, \quad (2.43)$$

$$L_{T_{bc1}} = \sum_{k=1}^K \sum_{n=0}^N \left(\frac{\lambda_2}{h_2^\nu} \gamma_0^\nu T_{n,1}^k - \sigma \beta_2 (U_{n,0}^k - U_p) - \alpha_2 (T_{n,0}^k - t_c) \right)^2, \quad (2.44)$$

$$L_{T_{bc3}} = \sum_{k=1}^K \sum_{m=0}^M \left(\frac{\lambda_1}{h_1^\nu} \sum_{j=0}^N \gamma_j^\nu T_{N+1-j,m}^k - \sigma \beta_1 (U_{N,m}^k - U_p) - \alpha_1 (T_{N,m}^k - t_c) \right)^2, \quad (2.45)$$

$$L_{T_{bc4}} = \sum_{k=1}^K \sum_{n=0}^N \left(\frac{\lambda_2}{h_2^\nu} \sum_{j=0}^M \gamma_j^\nu T_{n,M+1-j}^k - \sigma \beta_2 (U_{n,M}^k - U_p) - \alpha_1 (T_{n,M}^k - t_c) \right)^2, \quad (2.46)$$

У функціоналах втрат передбачено застосування вагових коефіцієнтів $\eta_{U_d}, \eta_U, \eta_{U_{ic}}, \eta_{U_{bc}}, \eta_{T_d}, \eta_T, \eta_{T_{ic}}, \eta_{T_{bc}}$, які виконують роль регуляторів відносного внеску окремих складових у загальну функцію втрат. Вони дають змогу збалансувати вплив різних джерел інформації – зокрема залишків фізичних рівнянь, початкових і граничних умов, а також експериментальних чи синтетичних даних – у процесі навчання нейронної мережі, що сприяє підвищенню ефективності оптимізації.

Залежно від достовірності та складності фізичної моделі, ці коефіцієнти можна налаштувати відповідним чином. Наприклад, у випадках, коли фізична модель містить спрощення або має обмежену точність, доцільно зменшити вагу

відповідних складових функціоналу, аби зменшити їхній вплив на загальну оптимізаційну процедуру й уникнути домінування менш надійних джерел інформації.

У випадку занулення вагових коефіцієнтів $\eta_U, \eta_{U_{ic}}, \eta_{U_{bc}}, \eta_T, \eta_{T_{ic}}, \eta_{T_{bc}}$, що відповідають залишкам фізичних рівнянь, граничним і початковим умовам, останні виключаються з функціоналів втрат. Тоді нейронна мережа навчається виключно на основі наданих даних, без урахування фізичних законів, що фактично зводить модель до традиційного «data-driven» підходу. Водночас, якщо забезпечено повну інформацію про початкові та граничні умови, розв’язання відповідної задачі може здійснюватися винятково на основі фізичних співвідношень, реалізованих у структурі мережі. Такий підхід фактично імітує класичні чисельні методи розв’язання диференціальних рівнянь [95].

У подальших розділах продемонстровано, що для підвищення стабільності навчального процесу застосовується адаптивне масштабування складових функціоналу втрат. Зокрема, вагові коефіцієнти для окремих компонентів можуть динамічно змінюватися впродовж оптимізації відповідно до стратегій адаптивного градієнтного спуску, що дає змогу покращити збіжність та уникнути домінування однієї з частин функціоналу.

Хоча з точки зору підвищення точності моделювання доцільно враховувати фізичні рівняння в усій розрахунковій області, збільшення кількості колокаційних точок, що використовуються для обчислення залишків рівнянь (2.7), (2.8), неминуче призводить до зростання обчислювальних витрат, пов’язаних з оцінкою та мінімізацією функціоналів втрат [46]. Крім того, важливе значення має не лише кількісна характеристика колокаційних точок, а й їх просторове розміщення, оскільки геометрична конфігурація цих точок значно впливає на структуру функціоналу втрат та загальну якість наближення розв’язку [93].

Отже, функція втрат у фрактальній фізично-інформованій нейронній мережі (fPINN) виконує не лише роль критерію відповідності модельного розв'язку до наявних даних, але й виступає засобом інтеграції фізичних закономірностей у процес навчання. З урахуванням цієї особливості сконструйовано окремі функціонали втрат для температурного та вологісного полів, оскільки, хоча процеси теплоперенесення та вологоперенесення є фізично взаємопов'язаними, вони мають різну чутливість до вхідних параметрів і можуть по-різному впливати на узагальнений функціонал втрат. У разі спільного навчання єдиної нейронної мережі з декількома виходами це призводить до небажаного розбалансування оптимізації.

Застосування розгалуженої архітектури дає змогу уникнути зазначених обмежень, даючи можливість кожній підмережі незалежно адаптуватися до специфіки свого фізичного поля. Такий підхід забезпечує узгоджене моделювання складних процесів у середовищах із фрактальною структурою, зокрема з урахуванням ефектів пам'яті та аномальної поведінки перенесення.

2.5. Методи навчання та оптимізації fPINN для ефективного моделювання процесів перенесення

Процес навчання нейронної мережі є ітеративною процедурою оптимізації її параметрів μ (ваг і зміщень), метою якої є мінімізація функціоналу втрат (2.6), що характеризує відхилення між прогнозованими вихідними значеннями та еталонними (істинними) результатами.

У випадку фрактальних фізично-інформованих нейронних мереж (fPINN) процедура навчання додатково передбачає включення фізичних закономірностей, що задаються у вигляді дробових диференціальних рівнянь та початково-граничних умов, безпосередньо у функціонал втрат. Отже, мета навчання полягає не лише в апроксимації емпіричних даних, а й у забезпеченні узгодженості з фундаментальними фізичними принципами, які описують поведінку моделі.

Оскільки функція втрат у більшості випадків є сильно нелінійною та неопуклою відносно параметрів моделі, оптимізація здійснюється з використанням градієнтних методів, зокрема алгоритмів Адама (Adam), Адама з моментом Нестерева (NAdam), середньоквадратичного розповсюдження (RMSProp) та стохастичного градієнтного спуску (SGD) [30]. Ці методи забезпечують послідовну адаптацію параметрів у напрямку зменшення загальної похибки моделі.

Кількість ітерацій, необхідна для досягнення збіжності, суттєво залежить від специфіки задачі, зокрема від ступеня гладкості цільового розв'язку. Для контролю за процесом навчання застосовуються спеціальні механізми, такі як зворотні виклики, які дають змогу відстежувати значення функції втрат або залишкові величини відповідних диференціальних рівнянь. На відміну від класичних чисельних методів розв'язання крайових задач, методологія fPINN не гарантує єдиність розв'язку, оскільки навчання зводиться до розв'язання складної неопуклої задачі оптимізації, яка допускає множину локальних мінімумів.

Наприклад, для нейронної мережі середньої складності, що містить п'ять шарів (один вхідний та чотири приховані шари) із 20 нейронами в кожному прихованому шарі, загальна кількість параметрів перевищує 1000. У такому високowymірному параметричному просторі функція втрат має складну геометрію з великою кількістю локальних екстремумів, що ускладнює пошук глобального мінімуму за допомогою стандартних градієнтних методів. З позиції обчислювальної складності, дана задача належить до класу NP-складних [106].

Досягнення бажаного рівня точності вимагає ретельного налаштування гіперпараметрів моделі, зокрема архітектури мережі (глибини, ширини), швидкості навчання, а також кількості та просторового розташування колокаційних точок. Зауважимо, що результати, отримані за допомогою fPINN, можуть суттєво залежати від початкової ініціалізації параметрів, що обумовлено неопуклістю задачі оптимізації та наявністю множини допустимих локальних мінімумів [46,106, 152].

У задачах моделювання процесів тепловологоперенесення за допомогою фрактальних фізично-інформованих нейронних мереж (fPINN), процес оптимізації додатково ускладнюється через наявність дробових похідних, нелокальних операторів та взаємопов'язаних фізичних полів, таких як температура та вологовміст. У цих умовах традиційні градієнтні методи стикаються з проблемами, пов'язаними з дисбалансом складових функції втрат та «застряганням» у локальних мінімумах, що негативно впливає на швидкість і точність збіжності. З метою подолання цих труднощів застосовуються спеціалізовані підходи до оптимізації та навчання, які сприяють підвищенню ефективності побудови моделі.

2.5.1. Поетапний підхід до навчання fPINN

У класичних фізично-інформованих нейронних мережах (PINN) зазвичай реалізується уніфікована стратегія навчання, що передбачає одночасну мінімізацію функції втрат для всіх змінних та відповідних диференціальних рівнянь. Однак, під час моделювання процесів тепловологоперенесення, які охоплюють кілька фізичних полів (температуру та вологовміст), кожне з яких має відмінну чутливість до параметрів мережі та описується дробовими операторами, така синхронна оптимізація може призводити до чисельної нестійкості або перенавчання окремих компонентів моделі.

Для усунення зазначених недоліків пропонується альтернативний підхід – поетапне навчання. Ця стратегія ґрунтується на ідеї роздільної оптимізації параметрів для кожної з підмереж у різні фази навчального процесу. Зокрема, за фіксації параметрів однієї з мереж здійснюється оптимізація функції втрат, пов'язаної з відповідним фізичним полем, для іншої мережі. Після завершення певної кількості ітерацій (або епох) градієнтного спуску ролі мереж змінюються, і процедура повторюється до досягнення заданого критерію збіжності або вичерпання дозволеної кількості епох. Такий поетапний алгоритм рекомендовано

для задач із двома або більше фізичними полями, де поля мають різні часові чи просторові масштаби або різну чутливість до параметрів нейронної мережі.

Запропонований метод застосовується до задачі моделювання теплового перенесення і передбачає поетапну мінімізацію функцій втрат, що відповідають нейронним мережам N_U та N_T , з метою визначення оптимальних значень параметрів μ_U та μ_T . Навчальний алгоритм реалізується у формі послідовної двоетапної процедури, яка забезпечує поетапну оптимізацію кожної з мереж за умов фіксованих параметрів іншої, що сприяє покращенню стабільності та збіжності моделі:

$$\mu_U^{*k+1} = \arg \min_{\mu_U \in \mathbb{R}^{D_U}} L_{N_U}(Z, \tilde{T}^k, \mu_U^{*k}), \quad (2.47)$$

$$\mu_T^{*k+1} = \arg \min_{\mu_T \in \mathbb{R}^{D_T}} L_{N_T}(Z, \tilde{U}^{k+1}, \mu_T^{*k+1}). \quad (2.48)$$

де μ_U^{*k} та μ_T^{*k} – початкові параметри відповідних мереж для k -ї ітерації, $\tilde{T} \approx N_T(Z, \mu_T^{*k})$ та $\tilde{U} \approx N_U(Z, \mu_U^{*k+1})$ – наближення вихідних змінних на навчальних точках Z .

На першому етапі здійснюється оптимізація параметрів мережі N_U за фіксованих параметрів мережі N_T . Далі, на наступному кроці, відбувається оновлення параметрів мережі N_T , водночас параметри N_U залишаються незмінними. Така чергова схема оптимізації повторюється ітеративно до моменту досягнення бажаної точності на навчальному або валідаційному наборі даних, або ж до виконання наперед визначеної кількості ітерацій.

Отже, задача оптимізації на $(k+1)$ -ій ітерації навчального процесу формулюється як послідовне оновлення параметрів кожної з мереж за фіксації параметрів іншої, що дає змогу забезпечити стабільність та поступову збіжність у багатовимірному просторі параметрів моделі.

Застосування поетапного навчання дає змогу зменшити взаємні перешкоди між фізичними полями, що виникають через нерівномірний розподіл градієнтів під час спільного навчання. Крім того, воно покращує чисельну стабільність моделі, оскільки зменшує ризик надмірного коливання вагових коефіцієнтів на кожному кроці оптимізації. Додатковими перевагами цього підходу є підвищена стійкість до збоїв під час оптимізації, коли покращення одного фізичного поля негативно впливає на інше, а також можливість незалежного налаштування гіперпараметрів (наприклад, швидкості навчання) для кожного етапу, що дає змогу гнучко адаптувати процес під особливості задачі.

2.5.2. Метод адаптивного масштабування функцій втрат для покращення збіжності

Другим важливим аспектом під час навчання фрактальних фізично-інформованих нейронних мереж (fPINN) є адаптивне масштабування складових функціоналу втрат. Зазвичай функція втрат формується як сума кількох компонентів, що відповідають різним аспектам задачі. У нашому випадку вона визначається виразами (2.17) та (2.18), де члени L_U, L_T відображають залишки рівнянь із дробовими операторами, $L_{U_{ic}}, L_{U_{bc}}, L_{T_{ic}}, L_{T_{bc}}$ – відповідно втрати на початкових і граничних умовах, а L_{U_d}, L_{T_d} – втрати, що пов’язані з розбіжністю між прогнозами мережі та наявними навчальними даними.

На практиці важливо забезпечити збалансований внесок усіх компонентів у загальну функцію втрат. Якщо одна зі складових, наприклад, залишкові рівняння, значно переважає інші, це може спричинити нестабільність оптимізації або призвести до ігнорування певних фізичних умов, таких як початкові чи граничні. Для уникнення такого дисбалансу застосуємо метод компенсації так званих «неврівноважених градієнтів». Суть підходу полягає у динамічному оновленні

вагових коефіцієнтів складових функції втрат на основі оцінювання середніх значень їх градієнтів, що дає змогу підтримувати їх на одному порядку величини.

Впровадження адаптивного масштабування функції втрат у контексті fPINN забезпечує низку важливих переваг. По-перше, воно сприяє покращенню збіжності, оскільки рівномірний розподіл ваг між складовими функціоналу втрат дає змогу моделі гармонійно враховувати всі умови задачі, запобігаючи домінуванню однієї з них, наприклад, залишків рівнянь у частинних похідних. По-друге, адаптивне регулювання ваг знижує ризик перенавчання моделі на окрему складову, що забезпечує більш узгоджене відтворення всіх фізичних аспектів процесу. Нарешті, така стратегія дає змогу уникнути ручного налаштування вагових коефіцієнтів $\eta_U, \eta_{U_{ic}}, \eta_{U_{bc}}, \eta_{U_d}, \eta_T, \eta_{T_{ic}}, \eta_{T_{bc}}, \eta_{T_d}$, що є суттєвою перевагою в умовах наявності дробових похідних та взаємодіючих фізичних полів.

Ці ідеї є особливо актуальними для задач, у яких складові функціоналу втрат мають різні масштаби похибки – як, наприклад, у фрактальних диференціальних рівняннях, де похибки, пов'язані з дробовими похідними, часто мають інші характеристики порівняно з класичними.

Параметри нейронних мереж μ_U та μ_T , оновлюються на кожному кроці оптимізації відповідно до методу градієнтного спуску за наступними співвідношеннями:

$$\begin{aligned} \mu_U^{k+1} &= \mu_U^k - \eta_{L_U} \nabla_{\mu_U} L_{N_U}(\mu_U^k) = \\ &= \mu_U^k - \eta_{L_U} \left(\nabla_{\mu_U} L_{U_d}(\mu_U^k) + \nabla_{\mu_U} L_U(\mu_U^k) + \nabla_{\mu_U} L_{U_{ic}}(\mu_U^k) + \nabla_{\mu_U} L_{U_{bc}}(\mu_U^k) \right) \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} \mu_T^{k+1} &= \mu_T^k - \eta_T \nabla_{\mu_T} L_{N_T}(\mu_T^k) = \\ &= \mu_T^k - \eta_T \left(\nabla_{\mu_T} L_{T_d}(\mu_T^k) + \nabla_{\mu_T} L_T(\mu_T^k) + \nabla_{\mu_T} L_{T_{ic}}(\mu_T^k) + \nabla_{\mu_T} L_{T_{bc}}(\mu_T^k) \right) \end{aligned} \quad (2.50)$$

де η_{L_U}, η_{L_T} – коефіцієнти швидкості навчання, $\nabla_{\mu_U} L_{N_U}, \nabla_{\mu_T} L_{N_T}$ – градієнти функцій втрат L_{N_U} та L_{N_T} за параметрами мереж μ_U та μ_T відповідно.

Функції втрат L_{N_U} та L_{N_T} , як зазначалося раніше, є сумами або зваженими комбінаціями кількох складових. Отже, кожний крок оптимізації полягає у корекції параметрів мереж у напрямку, протилежному до градієнтів відповідної функції втрат.

У традиційних PINN або fPINN вагові коефіцієнти складових функції втрат здебільшого задаються вручну (зазвичай встановлюються рівними одиниці або наперед заданим фіксованим значенням) й залишаються фіксованими протягом навчання. Проте така стратегія може спричиняти суттєвий дисбаланс між величинами градієнтів окремих компонентів втрат (2.49) та (2.50), зокрема тих, що відповідають керівним рівнянням $\nabla_{\mu_U} L_{U_r}, \nabla_{\mu_T} L_{T_r}$, початковим $\nabla_{\mu_U} L_{U_{ic}}, \nabla_{\mu_T} L_{T_{ic}}$ або граничним $\nabla_{\mu_U} L_{U_{bc}}, \nabla_{\mu_T} L_{T_{bc}}$ умовам, а також наявним навчальним даним $\nabla_{\mu_U} L_{U_d}, \nabla_{\mu_T} L_{T_d}$. Це, у свою чергу, може зумовлювати нерівномірну увагу моделі до окремих фізичних аспектів задачі, що підвищує ймовірність «застрягання» в локальних мінімумах та знижує загальну ефективність навчання.

Для подолання зазначеної проблеми пропонується впровадити адаптивні вагові коефіцієнти $\eta_U, \eta_{U_{ic}}, \eta_{U_{bc}}, \eta_{U_d}, \eta_T, \eta_{T_{ic}}, \eta_{T_{bc}}, \eta_{T_d}$, які дають змогу автоматично балансувати внесок кожного члена у функцію втрат. Таке вагове регулювання спрямоване на гармонізацію градієнтів та забезпечення збалансованого оновлення параметрів нейронної мережі в процесі оптимізації.

Адаптивні вагові коефіцієнти визначаються згідно з наступними правилами:

$$\forall \varepsilon_1 > 0, \left| \frac{\left(\eta_U \nabla_{\mu_U} L_U(\mu_U) - \eta_{U_{ic}} \nabla_{\mu_U} L_{U_{ic}}(\mu_U) - \eta_{U_{bc}} \nabla_{\mu_U} L_{U_{bc}}(\mu_U) \right)}{-\eta_{U_d} \nabla_{\mu_U} L_{U_d}(\mu_U)} \right| < \varepsilon_1 \quad (2.51)$$

$$\forall \varepsilon_2 > 0, \left| \frac{\left(\eta_T \nabla_{\mu_T} L_T(\mu_T) - \eta_{T_{ic}} \nabla_{\mu_T} L_{T_{ic}}(\mu_T) - \eta_{T_{bc}} \nabla_{\mu_T} L_{T_{bc}}(\mu_T) \right)}{-\eta_{T_d} \nabla_{\mu_T} L_{T_d}(\mu_T)} \right| < \varepsilon_2 \quad (2.52)$$

$$\eta_{U_d} = \frac{|\nabla_{\mu_U} L_U(\mu_U)|}{|\nabla_{\mu_U} L_{U_d}(\mu_U)|}, \eta_U = \frac{|\nabla_{\mu_U} L_U(\mu_U)|}{|\nabla_{\mu_U} L_U(\mu_U)|} = 1, \quad (2.53)$$

$$\eta_{U_{ic}} = \frac{|\nabla_{\mu_U} L_U(\mu_U)|}{|\nabla_{\mu_U} L_{U_{ic}}(\mu_U)|}, \eta_{U_{bc}} = \frac{|\nabla_{\mu_U} L_U(\mu_U)|}{|\nabla_{\mu_U} L_{U_{bc}}(\mu_U)|}, \quad (2.54)$$

$$\eta_{T_d} = \frac{|\nabla_{\mu_T} L_T(\mu_T)|}{|\nabla_{\mu_T} L_{T_d}(\mu_T)|}, \eta_T = \frac{|\nabla_{\mu_T} L_T(\mu_T)|}{|\nabla_{\mu_T} L_T(\mu_T)|} = 1, \quad (2.55)$$

$$\eta_{T_{ic}} = \frac{|\nabla_{\mu_T} L_T(\mu_T)|}{|\nabla_{\mu_T} L_{T_{ic}}(\mu_T)|}, \eta_{T_{bc}} = \frac{|\nabla_{\mu_T} L_T(\mu_T)|}{|\nabla_{\mu_T} L_{T_{bc}}(\mu_T)|} \quad (2.56)$$

де $|\cdot|$ – середнє значення градієнта, обчислене для відповідних складових функціоналів втрат (2.17) та (2.18).

Отже, запровадження динамічного масштабування дає можливість підтримувати збалансований внесок кожної складової функції втрат, що забезпечує стабільнішу та ефективнішу оптимізацію. Крім того, мережа отримує можливість самостійно адаптувати темп оновлення параметрів відповідно до чутливості кожного члена, що сприяє загальному підвищенню точності та швидкості збіжності моделі порівняно з підходами, які використовують фіксовані значення гіперпараметрів.

Застосування поетапного підходу до навчання (коли мережі або компоненти почергово оптимізуються) та адаптивного масштабування функціоналів втрат дає змогу суттєво підвищити ефективність і стабільність навчання фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі. Якщо перше запобігає взаємному «заважанню» різних фізичних величин (температури й вологовмісту), то друге – нівелює розбалансування впливів різних типів похибок (для залишків керівних рівнянь системи, початкових і граничних умов), забезпечуючи більш рівномірний і стійкий процес оптимізації навіть за умов складної, багатокomпонентної постановки задачі.

2.6. Оцінка точності моделей та аналіз збіжності мережі fPINN.

Важливою умовою успішного застосування фізично-інформованих нейронних мереж (fPINN) для моделювання процесів теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах є забезпечення високої точності апроксимації розв'язку та стійкої збіжності навчального процесу. У цьому підрозділі подано результати оцінки точності моделей, побудованих у межах запропонованого підходу, а також проаналізовано особливості їх збіжності залежно від вибору архітектури та вагових коефіцієнтів.

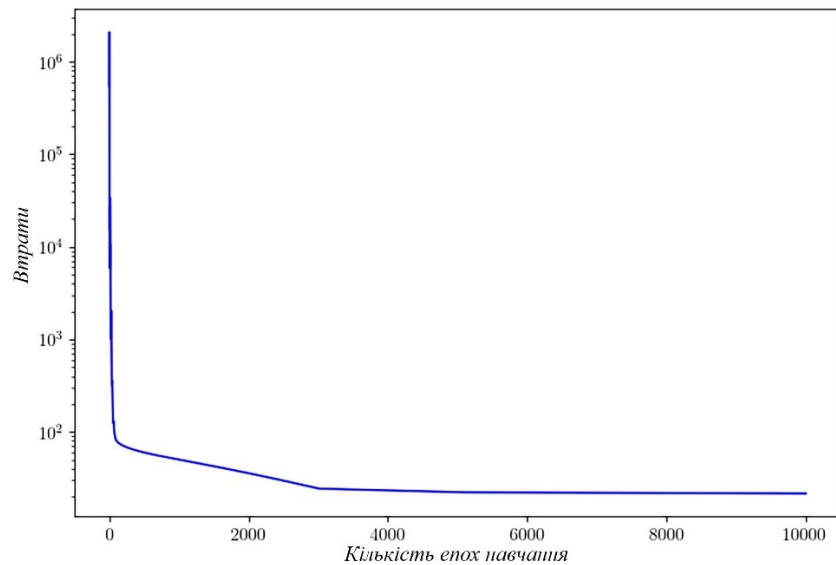
Для аналізу збіжності розробленої нейромережевої моделі виконали серію чисельних експериментів, що відтворювали динаміку просторово-часового тепло- та масоперенесення у капілярно-пористих середовищах під час термічного осушення. Як об'єкт моделювання розглядали деревину з густиною 460 кг/м^3 . Початкові умови для задачі визначені так: температура зразка $T_0 = 20^\circ \text{C}$, температура навколишнього середовища $T_c = 70^\circ \text{C}$, початковий вміст води $U_0 = 0,4 \text{ кг/кг}$, відносна вологість середовища $\varphi = 60\%$, швидкість агента сушіння $v = 2 \text{ м/с}$.

У моделі використовувалися такі значення дробових параметрів: $\alpha = 0,82$ – порядок похідної Капуто за часом, $\beta = 1,92$ – порядок похідної Грюнвальда–Летнікова за просторовою координатою, $\nu = 0.9$ – фрактаний показник похідної Грюнвальда–Летнікова за просторовою координатою, що визначений на межі.

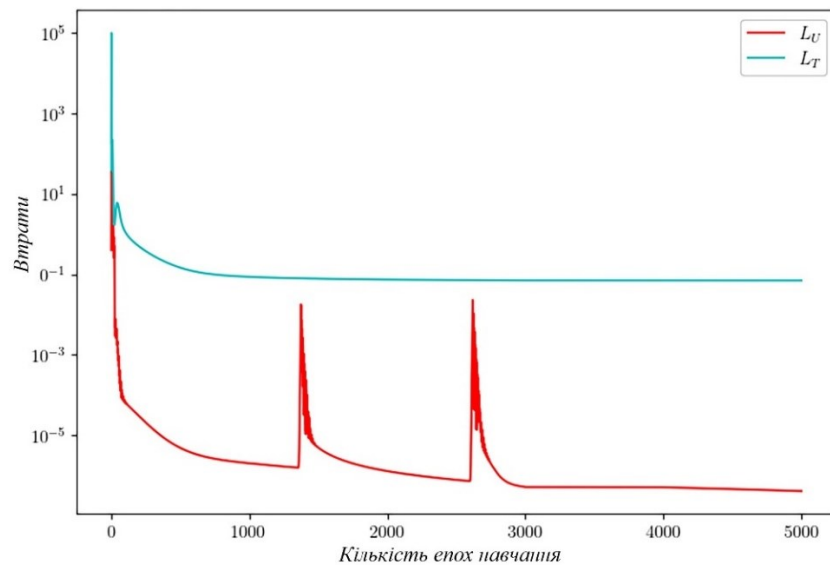
Обчислювальні експерименти проводились з метою перевірки стійкості та збіжності мережі на тлі вказаних фізичних умов.

На рис. 2.2 подано порівняння ефективності навчання двох різних архітектур нейронної моделі, що використовуються для апроксимації процесів теплового та вологоперенесення у фрактальних середовищах.

На рис. 2.2, а зображено еволюцію функції втрат для моделі, яка реалізована у вигляді однієї нейронної мережі з двома виходами – температурою $T(t, \mathbf{x})$ та вологовмістом $U(t, \mathbf{x})$. Обидві фізичні величини моделюються спільно, а загальна функція втрат агрегує похибки обох каналів. Як видно з графіка, початкові епохи характеризуються різким спадом значення функції втрат, що свідчить про швидке навчання моделі на початковому етапі. Проте подальша динаміка демонструє



а



б

Рисунок 2.2 – Графіки збіжності функцій втрат під час навчання

поступове уповільнення темпу зменшення похибки й раннє досягнення плато, що вказує на обмеження моделі одночасно узгоджено наближати два фізичні поля в умовах їх взаємного впливу. Така поведінка моделі ймовірно пов'язана з наявністю конфліктних градієнтів, які уповільнюють збіжність, ускладнюють навчання та приводять до досягнення локального мінімуму функції втрат, яка зупиняється приблизно на рівні 10^0 (тобто після 4000 епох зменшення майже припиняється). На нашу думку, це свідчить про обмежену здатність однієї спільної мережі одночасно апроксимувати дві фізичні величини $T(t, \mathbf{x})$ та $U(t, \mathbf{x})$.

Графік на рис. 2.2, б відображає поетапний процес навчання двох окремих мереж – однієї для температури $T(t, \mathbf{x})$ та іншої для вологовмісту $U(t, \mathbf{x})$, із розділеними функціоналами втрат. Ця архітектура дає змогу кожній мережі фокусуватись лише на одному фізичному процесі, що знижує конфліктність між градієнтами і покращує збіжність. Сплески на графіку L_{N_U} , які спостерігаються у проміжках між фазами навчання, ймовірно свідчать про реакцію моделі на зміну активного компонента втрат, або є реакцією на поетапну зміну кроку навчання оптимізаційного алгоритму, але, варто наголосити, що загальна тенденція до зменшення похибки є стабільною. Водночас функція втрат L_{N_T} демонструє плавнішу динаміку. Функція втрат L_{N_U} продовжує зменшуватися до рівня менше ніж 10^{-6} , попри наявність тимчасових осциляцій, проте, функція втрат L_{N_T} стабілізується на рівні приблизно 10^{-1} , що є задовільним показником, але ймовірно вказує на те, що глобального мінімуму не досягнуто.

Отримані нами результати підтверджують переваги модульного підходу з поетапним навчанням для складної багатofізичної задачі, особливо у випадку фрактального середовища, де взаємозв'язки між температурою та вологістю є складними та нелінійними. Використання двох незалежних мереж з розділеними

функціоналами втрат дає можливість досягти кращої адаптації до окремих особливостей кожного з процесів та підвищити загальну точність моделі.

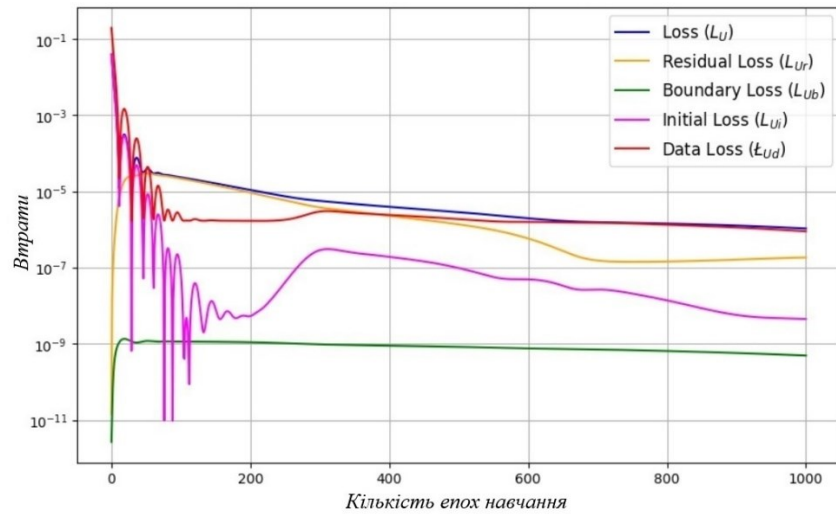
На рис. 2.3 подано динаміку функцій втрат під час навчання двох окремих нейронних мереж у складі fPINN-моделі, що апроксимують відповідно температуру $T(x, t)$ та вологовміст $U(x, t)$. Ці графіки дають змогу проаналізувати збіжність мережі для кожної фізичної величини окремо та оцінити внесок різних компонент функцій втрат у загальний процес навчання.

На рис. 2.3, а представлено еволюцію компонент втрат для температурного поля $T(x, t)$. Найбільший внесок у загальну функцію втрат протягом усього навчання забезпечує залишкова похибка рівняння (L_{T_r}), що є індикатором дотримання фізичних законів моделі. Вона поступово зменшується з рівня 10^2 до величин порядку 10^{-1} , демонструючи стабільну збіжність. Початкова умова (L_{T_i}) та похибка на емпіричних даних (L_{T_d}) зменшуються до рівня 10^{-4} , тоді як гранична умова (L_{T_b}) стабілізується ще раніше. Загальна функція втрат (L_{N_T}) має чітко виражену спадну динаміку протягом перших 600 епох, після чого досягає асимптотичного плато, що свідчить про досягнення стійкої фази навчання.

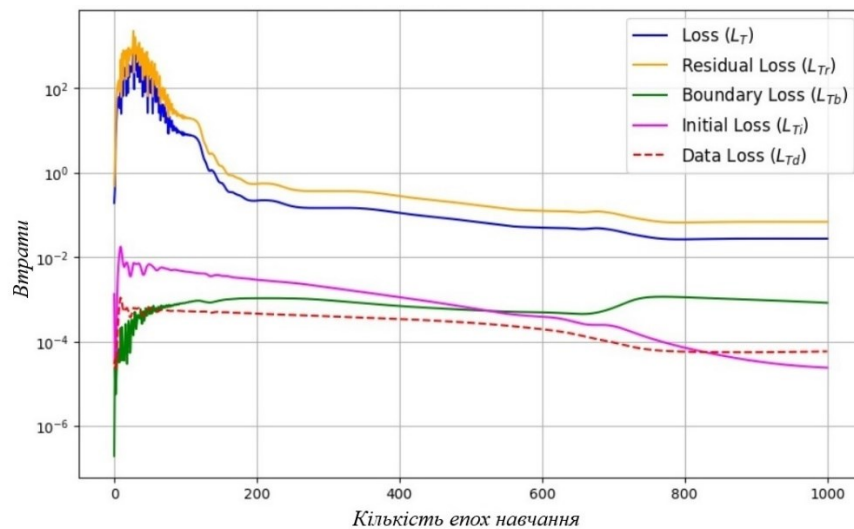
На рис. 2.3, б подано аналогічні показники для мережі, що апроксимує вологовміст $U(x, t)$. У цьому випадку модель має ще вищу точність: усі компоненти втрат знижуються до рівнів нижчих за 10^{-5} , а похибка початкової умови (L_{U_i}) – до 10^{-7} . Коливання в області початкових епох (до ~ 200) зумовлені характером ініціалізації ваг та чутливістю до градієнтів на етапі навчання, однак вони швидко затухають. Залишкова похибка (L_{U_r}) зменшується більш плавно, що свідчить про поступову адаптацію моделі до дробової природи рівнянь перенесення.

Обидві моделі досягають стабільної збіжності в межах 800–1000 епох. Це підтверджує ефективність вибраної архітектури та функціоналу втрат, а також коректність імплементації дробових операторів у рамках fPINN.

Отже, аналіз збіжності на основі компонент функцій втрат показує високу апроксимаційну здатність моделі під час моделювання складних процесів у середовищах із фрактальною структурою. Отримані результати підтверджують потенціал fPINN як ефективного інструмента для чисельного розв’язання задач, що



а



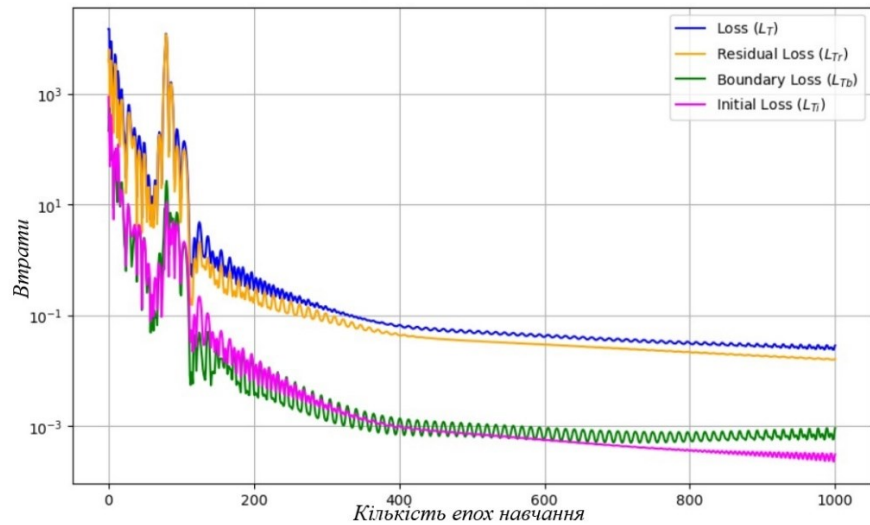
б

Рисунок 2.3 – Збіжність функцій втрат у моделі fPINN з фіксованими вагами:
а) втрати, визначені для вологовмісту; б) втрати, визначені для температури

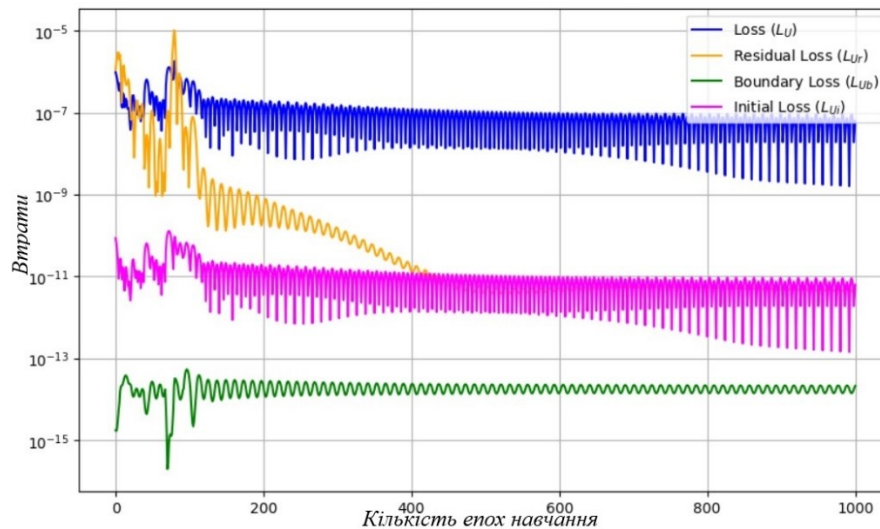
описують аномальні процеси перенесення з ефектами пам'яті та просторовою нелокальністю.

Для подолання проблеми домінування окремих складових у загальній функції втрат впроваджено механізм адаптивного масштабування вагових коефіцієнтів для різних її компонентів.

На рис. 2.4 представлено динаміку функцій втрат під час навчання двох незалежних мереж з використанням адаптивних ваг. У моделі, що апроксимує



а



б

Рисунок 2.4 – Вплив адаптивних вагових коефіцієнтів на збіжність функції втрат у fPINN-моделі: а) втрати, визначені для температури; б) втрати, визначені для вологовмісту

температуру $T(x, t)$, вже на перших стадіях навчання спостерігається вирівнювання внеску різних похибок (залишкової, початкової, граничної), що сприяє уникненню конфлікту градієнтів. Попри наявність коливань у початковій фазі (0–200 епох), модель демонструє стабільну збіжність після 300–400 епох, досягаючи значень функції втрат на рівні 10^{-2} . Така поведінка свідчить про ефективне вирівнювання ваг та рівномірне зменшення усіх компонент функціоналу втрат без переважного навчання на одному з критеріїв.

Модель, яка моделює вологовміст $U(x, t)$, демонструє ще вищий рівень стабільності. Як видно з рис. 2.4, б, всі компоненти функції втрат зменшуються до наднизьких значень: залишкова похибка – до 10^{-9} , початкова – до 10^{-11} , а гранична – нижче 10^{-13} . Після 400 епох навчання спостерігається чітка стабілізація без зростання похибок, що свідчить про відсутність перенавчання та добру узагальнювальну здатність моделі. Порівняно з підходом фіксованого масштабування (без адаптації ваг), де збіжність досягалася значно повільніше (понад 600–800 епох) і супроводжувалась сильнішими осциляціями, адаптивний підхід демонструє очевидні переваги.

Отже, результати чисельного експерименту підтвердили, що адаптивне масштабування вагових коефіцієнтів у функції втрат є ефективною стратегією стабілізації процесу навчання. Вона дає змогу зменшити похибки апроксимації на один–два порядки, забезпечити швидшу збіжність та досягти кращого балансу між фізичними компонентами моделі. Такий підхід є особливо доцільним для моделювання багатofізичних процесів у середовищах з фрактальною структурою, де наявні ефекти пам'яті, просторової нелокальності та складна взаємодія між температурними і вологісними полями.

Висновки до II розділу

У розділі 2 запропоновано фрактальну фізично-інформовану нейромережу (fPINN), яку вперше застосували для моделювання процесів теплового та вологого перенесення у капілярно-пористих середовищах із фрактальною структурою, що супроводжуються субдифузійною або супердифузійною динамікою та просторовою нелокальністю.

Фізичну природу процесів теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах інтегровано безпосередньо в структуру моделі шляхом включення дробових операторів Капуто (за часом) та Грюнвальда–Летнікова (за простором) до функцій втрат. Уперше запропоновано явну математичну форму цих функцій, адаптовану для нейромережевого навчання, а також подано їх відповідні різниці апроксимації, що відтворюють ефекти пам'яті та просторової нелокальності в межах нейромережевої архітектури.

Запропоновано нову архітектуру з двома незалежними нейромережами для апроксимації температурного та вологісного полів, яка дала можливість уникнути перехресного впливу градієнтів та досягти кращої збіжності. Також уперше запропоновано розділення функціоналів втрат для кожної фізичної величини.

Метод fPINN адаптовано до задачі моделювання у фрактальних середовищах шляхом запропонованого методу поетапного навчання. Такий підхід забезпечив поступову оптимізацію параметрів кожної з мереж, що дало можливість уникнути конфлікту локальних мінімумів, які зазвичай виникають у складному багатофізичному середовищі.

Для підвищення ефективності навчання запропоновано механізм адаптивного масштабування компонент функцій втрат, який забезпечив баланс між фізичними умовами задачі (початковими, граничними, залишковими та даними), зменшив осциляції та прискорив збіжність.

Проведений аналіз збіжності моделі засвідчив стабільне та поступове зниження функцій втрат протягом навчання, що свідчить про ефективність реалізованого алгоритму навчання. Модель досягає малих значень відносної похибки, забезпечуючи надійне наближення до розв'язків дробових диференціальних рівнянь.

Отже, у цьому розділі вперше обґрунтовано та реалізовано повноцінну нейромережеву платформу для моделювання процесів тепломасоперенесення у фрактальних середовищах. Запропоновані інноваційні елементи – роздільні функції втрат, поетапне навчання, адаптивне масштабування – суттєво підвищують точність і ефективність моделі. У наступному розділі розглядатиметься програмна реалізація запропонованого методу, а також його перевірка на реальних та синтетичних даних.

РОЗДІЛ III ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ

У розділі розроблено архітектуру та реалізовано програмний застосунок для моделювання процесів теплового та вологого перенесення у фрактальних капілярно-пористих анізотропних середовищах на базі фрактальної фізично-інформованої нейромережі. Представлено структурну організацію програмних модулів, що охоплюють введення параметрів, генерацію навчальних даних, формування функцій втрат, навчання нейромережі та візуалізацію результатів. Окремо виділено модулі, які забезпечують порівняльне моделювання із застосуванням класичних чисельних методів та аналізують похибки й збіжність моделі.

Засіб має модульну побудову та підтримує адаптацію до нових фізичних сценаріїв, що робить його придатним для подальшого наукового розвитку й практичного використання. Створено систему збереження параметрів, ваг моделі та результатів симуляції для забезпечення відтворюваності експериментів.

Основні результати, представлені в цьому розділі, опубліковано в наукових працях автора [131, 136, 138, 200, 140, 137, 132, 133].

3.1. Структура програмного застосунку

Розроблене програмне забезпечення для моделювання тепловологоперенесення у фрактальних капілярно-пористих середовищах базується на архітектурі fPINN та реалізоване у вигляді модульного Python-застосунку. Його структура розроблена з урахуванням потреб у багатофункціональності, масштабованості та інтерактивній роботі з користувачем.

Програма забезпечує повний цикл моделювання – від введення фізичних, геометричних і мережевих параметрів через графічний інтерфейс до тренування та візуалізації результатів. Такий підхід дає змогу дослідникам і інженерам легко

адаптувати модель до різних типів матеріалів, умов технологічного процесу чи параметрів навколишнього середовища.

У цьому підпункті наведено детальний опис організації коду, функціональних модулів та взаємозв'язку між компонентами застосунку, а також функціональних та апаратних вимог до програмного забезпечення.

Розроблений програмний застосунок має забезпечити повноцінну підтримку процесів моделювання, тренування та аналізу фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі для задач теплового та вологого перенесення у фрактальних анізотропних середовищах. Основні функціональні вимоги включають:

- можливість введення фізичних параметрів процесу та налаштувань моделі користувачем через графічний інтерфейс;
- побудова колокаційних точок у просторі та часі з підтримкою різних стратегій дискретизації (методом сітки та методом вибірки латинським гіперкубом);
- ініціалізація архітектури нейронної мережі з гнучким вибором кількості шарів, нейронів, швидкості навчання та типів активації;
- реалізація функцій втрат з урахуванням граничних, початкових умов і залишкових дробових рівнянь та синтетичних чи експериментальних даних;
- підтримка навчання моделі з поетапною стратегією та адаптивним масштабуванням складників функціоналів втрат;
- реалізація процедур порівняння результатів із класичними чисельними методами;
- візуалізація температурних і вологісних профілів, помилок, графіків збіжності функціоналів втрат тощо;
- експорт результатів у форматах .png, .prz та збереження конфігурацій моделі;
- зручність повторного використання моделей та підтримка відновлення навчання з попередніх вагових конфігурацій.

Вимоги до апаратного забезпечення

Для коректної роботи програмного застосунку необхідно забезпечити мінімальні технічні характеристики, що відповідають обчислювальним потребам тренування нейронних мереж, виконання чисельних операцій з дробовими похідними та візуалізації результатів.

Мінімальні апаратні вимоги для функціонування програмного забезпечення передбачають наявність процесора рівня Intel Core i5 або AMD Ryzen 5 з чотирма ядрами та тактовою частотою не менше 2,5 ГГц, оперативної пам'яті обсягом щонайменше 8 ГБ, інтегрованого або дискретного графічного адаптера (опціонально – з підтримкою GPU-прискорення для навчання моделей), вільного місця на диску не менше 2 ГБ для зберігання моделей, результатів і необхідних бібліотек, а також екрана з роздільною здатністю не нижче 1366x768 для коректного відображення графічного інтерфейсу. У якості рекомендованих апаратних параметрів розглядаються процесор Intel Core i7 або AMD Ryzen 7 чи потужніші аналоги, обсяг оперативної пам'яті 16–32 ГБ, відеокарта з підтримкою CUDA (наприклад, NVIDIA GTX 1050 Ti, RTX 2060 або новіші моделі), твердотільний накопичувач (SSD) для пришвидшеного обміну з великими обсягами даних, а також сучасна операційна система, така як Windows 10/11 або Linux (рекомендовано Ubuntu 20.04 або новіша версія). Такі характеристики забезпечують оптимальну продуктивність при роботі з великою кількістю точок, складними дробовими рівняннями та підвищеними вимогами до графіки та обчислень.

Програмна реалізація фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі для задач тепловологоперенесення у фрактальних капілярно-пористих середовищах побудована на модульній архітектурі з використанням мови Python та бібліотеки TensorFlow 2.x. Графічний інтерфейс реалізовано на основі бібліотеки wxPython, що забезпечує інтерактивність, гнучкість налаштування параметрів і можливість візуального контролю за результатами моделювання.

Розроблене програмне забезпечення для реалізації моделі fPINN представлено у вигляді багаторівневої модульної архітектури, що забезпечує розділення логіки на незалежні компоненти відповідно до принципів структурованого програмування (рис. 3.1).

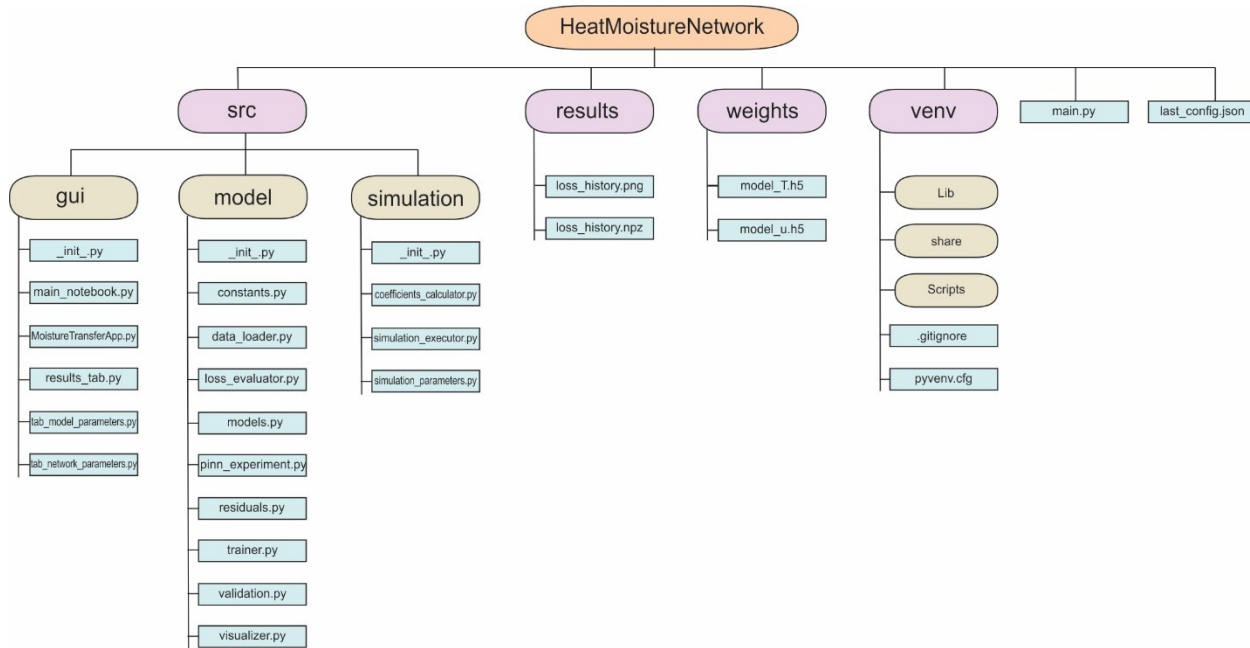


Рисунок 3.1 – Схема структури директорій і файлів застосунку

Основним робочим каталогом є `src`, який містить три підкаталоги: `gui`, `model` та `simulation`.

Підкаталог `gui` реалізує графічний інтерфейс користувача на основі бібліотеки `wxPython`. Файл `main_notebook.py` відповідає за організацію багатовкладкового інтерфейсу, де користувач має змогу вводити параметри моделі (`tab_model_parameters.py`), налаштовувати параметри нейронної мережі (`tab_network_parameters.py`) і переглядати результати обчислень та моделювання (`results_tab.py`). Модуль `results_tab.py` забезпечує інтерактивність і зручність налаштування симуляцій без необхідності роботи з кодом вручну.

Папка `model` містить ядро реалізації fPINN-моделі. Вона включає:

- `constants.py` – зберігання фізичних констант та параметрів моделювання;

- `data_loader.py` – генерація колокаційних, граничних, початкових та синтетичних точок;
- `loss_evaluator.py` – обчислення функцій втрат з урахуванням дробових похідних;
- `models.py` – побудова архітектури нейронної мережі;
- `pinn_experiment.py` – інтеграція всіх компонент у повноцінний експеримент;
- `residuals.py` – формалізація диференціальних залишків для рівнянь теплового перенесення;
- `trainer.py` – функціонал для навчання моделі з поетапним підходом;
- `validation.py` – модулі перевірки точності моделей на тестових та валідаційних множинах;
- `visualizer.py` – графічна побудова розподілів температури, вологості, графіків збіжності та помилок.

Блок `simulation` відповідає за класичні методи обчислення. Він включає файли `coefficients_calculator.py` і `simulation_executor.py`, де реалізовано моделі для синтетичного генератора даних за допомогою чисельного підходу методу скінчених різниць, зокрема його модифікації – предиктор-коректор [192, 206, 144]. Файл `simulation_parameters.py` відповідає за задання параметрів експерименту.

Окремо зберігаються результати та ваги моделі (`results/`, `weights/`), а також глобальний сценарій запуску (`main.py`) із параметрами останнього запуску (`last_config.json`). Віртуальне середовище `venv` забезпечує відтворюваність програмного середовища.

Представлена структура має чітке розділення відповідальностей між інтерфейсною частиною, логікою машинного навчання, блоками класичного моделювання та візуалізацією. Це дає змогу масштабувати програму, адаптувати її до інших задач і забезпечувати зручність у тестуванні, навчанні та впровадженні.

Загальна структура програмного комплексу включає низку логічно розділених компонентів, кожен з яких виконує окрему функціональну роль у циклі підготовки, навчання та валідації fPINN-моделі. Основні модулі наведено нижче.

Модуль параметризації (tab_network_parameters.py): відповідає за формування конфігурації експерименту, зокрема гіперпараметрів нейромережі (кількість шарів, кількість нейронів, швидкість навчання, кількість епох), фізичних характеристик середовища (початкові розподіли температури та вологи, базова щільність, швидкість теплового агента), дробових параметрів (α , β , γ), способу генерації навчальних точок (сітка, латинський гіперкуб, дані), а також ваг функцій втрат.

Фізичний модуль (constants.py): реалізує клас PhysicalConstants, який автоматично обчислює похідні фізичні параметри процесу на основі введених базових величин. Зокрема, розраховуються теплофізичні коефіцієнти (теплопровідності та вологопровідності), гідротермічні властивості матеріалу (рівноважний вологовміст, термоградієнтний коефіцієнт), коефіцієнти конвективного теплообміну та інші.

Генератор даних (data_loader.py): реалізує класи TrainingDataGenerator та DataNormalizer. Перший із них відповідає за генерацію колокаційних точок згідно з вибраною методикою (сітка, вибірка латинським гіперкубом або з завантажених навчальних даних), включаючи точки залишкових рівнянь, початкових і граничних умов. Другий клас забезпечує нормалізацію даних до діапазону $[-1, 1]$, що є стандартною практикою для підвищення стабільності навчання нейромереж.

Архітектура моделей (models.py): містить функцію build_pinn_model, яка будує модель fPINN із заданою кількістю шарів та нейронів. У моделі використовується функція активації tanh, а на вхід подаються нормалізовані просторово-часові координати. Модель реалізовано у вигляді послідовної моделі keras.Sequential.

Оцінювач втрат (loss_evaluator.py): відповідає за обчислення функцій втрат для температури й вологовмісту. Враховуються компоненти залишкових рівнянь, граничних умов, початкових умов і точок із даними. Похідні цілих порядків обчислюються через автоматичне диференціювання за допомогою `tf.GradientTape`, а похідні дробових порядків апроксимується через реалізовані різницеві схеми. Вагові коефіцієнти визначають вплив кожної складової на загальну втрату.

Формалізація залишків (residuals.py): містить математичні формули залишкових членів для рівнянь вологоперенесення та теплоперенесення, а також відповідних граничних умов.

Навчальний модуль (trainer.py): реалізує клас `fPINNTrainer`, що забезпечує ітеративне навчання двох моделей (для температури і вологи) на основі отриманих градієнтів функціоналів втрат. Передбачено окремі оптимізатори для кожної моделі. Модуль також зберігає історію втрат для подальшого аналізу.

Оркестратор експерименту (pinn_experiment.py): інкапсулює всі етапи реалізації fPINN-експерименту: ініціалізацію фізичних параметрів, генерацію даних, побудову моделі, визначення втрат, навчання, валідацію та візуалізацію. При потребі завантажує зовнішні експериментальні дані у вигляді файлів з розширенням `.prz` для перевірки точності.

Валідаційний модуль (validation.py): виконує оцінку точності моделі на основі середньої абсолютної похибки (MAE) та середньої відносної похибки між передбаченими й синтетичними (або експериментальними) значеннями температури і вологовмісту.

Візуалізатор (visualizer.py): реалізує 3D-візуалізацію поверхонь температури та вологості, графіки збіжності функцій втрат та помилок. Результати можуть зберігатись у графічних форматах для подальшого аналізу.

Роботу програми організовано у вигляді GUI-застосунку. У межах розробленого інтерфейсу користувач отримує змогу взаємодіяти із застосунком

через використання трьох вкладок, а саме: вводити фізичні параметри (рисунок 3.2), налаштовувати архітектуру моделі, вибирати тип генерації точок, керувати вагами функцій втрат та імпортувати/експортувати конфігурацію (рисунок 3.3). Після запуску fPINN-моделі здійснюється навчання, хід якого фіксується у журналі, а результати візуалізуються у вигляді графіків (рисунок 3.4) та 3D-поверхонь.

Практична перевірка показала, що розроблена програма є адаптованою до завдань моделювання теплового та вологого перенесення в складних фрактальних середовищах, а також поєднує сучасні методи машинного навчання з апроксимацією дробових похідних та зручним інтерфейсом для взаємодії з користувачем.

Моделювання тепловологоперенесення

Параметри моделі Нейромережа Результати

Геометричні розміри
 Довжина (м): 0.025
 Ширина (м): 0.025

Початкові характеристики
 Температура (C): 20
 Вологовміст (кг/кг): 0.4

Порода деревини
 Порода деревини: Сосна
 Базисна густина (кг/м3): 460

Параметри моделювання
 Кроків за часом: 100000
 Кількість вузлів по X: 250
 Кількість вузлів по Y: 25
 Час моделювання: 60

Параметри агента
 Температура агента (C): 70
 Швидкість агента (м/с): 2
 Відн. вологість: 0.6

Дробово-диференціальні показники
 Альфа: 0.95
 Бета: 1.95
 Гамма: 0.95

Вимірність моделі
☒ 1D
☐ 2D

Коефіцієнт фазового переходу
 0.95

Обчислити

Рисунок 3.2 – Інтерфейс програми для введення параметрів моделі

Моделювання теплового перенесення

Параметри моделі Нейромережа Результати

Гіперпараметри мережі

Режим 'Швидкість навчання':
☒ Одна ШН ☐ Поетапна ШН

Швидкість навчання: 0.001

Кількість шарів: 8

Нейронів на шар: 40

Кількість епох: 4001

Кількість точок навчання: 1000

Кількість точок навчання при t=0: 10

Кількість точок навчання на межі: 100

☒ Завантажити попередні ваги
 Файл ваг для U-моделі: C:\Users\TD\PycharmProjects\HeatM Browse
 Файл ваг для T-моделі: C:\Users\TD\PycharmProjects\HeatM Browse

☐ Використовувати зовнішні дані

Фізичні параметри

Температура (C): 20

Вологовміст (кг/кг): 0.4

Температура агента (C): 70

Відн. вологість (%): 0.6

Швидкість агента (м/с): 2

Базисна густина (кг/м3): 460

Коефіцієнт фазового переходу: 0.95

Ширина (м): 0.15

Довжина (м): 0.15

Час моделювання: 9600

Нейромережеві налаштування

Активізаційна функція: tanh

Оптимізатор: Adam

Параметри дробових похідних

α : 0.85

β : 1.95

γ : 0.95

Метод генерації точок

☒ Сітка ☐ Лат.гіперкуб ☐ З даних

Режим призначення ваг

Оберіть спосіб визначення ваг:
☒ Фіксовані ваги
☐ Адаптивні (гармонізація градієнтів)
☐ Адаптивні (вплив компонентів втрат)

Ваги функцій втрат (лише для фіксованих)

w_ud: 0 w_td: 0

w_ub: 1 w_tb: 1

w_ui: 1 w_ti: 1

w_u: 1 w_t: 1

Рисунок 3.3 – Інтерфейс програми для налаштування архітектуру нейромережових параметрів моделі

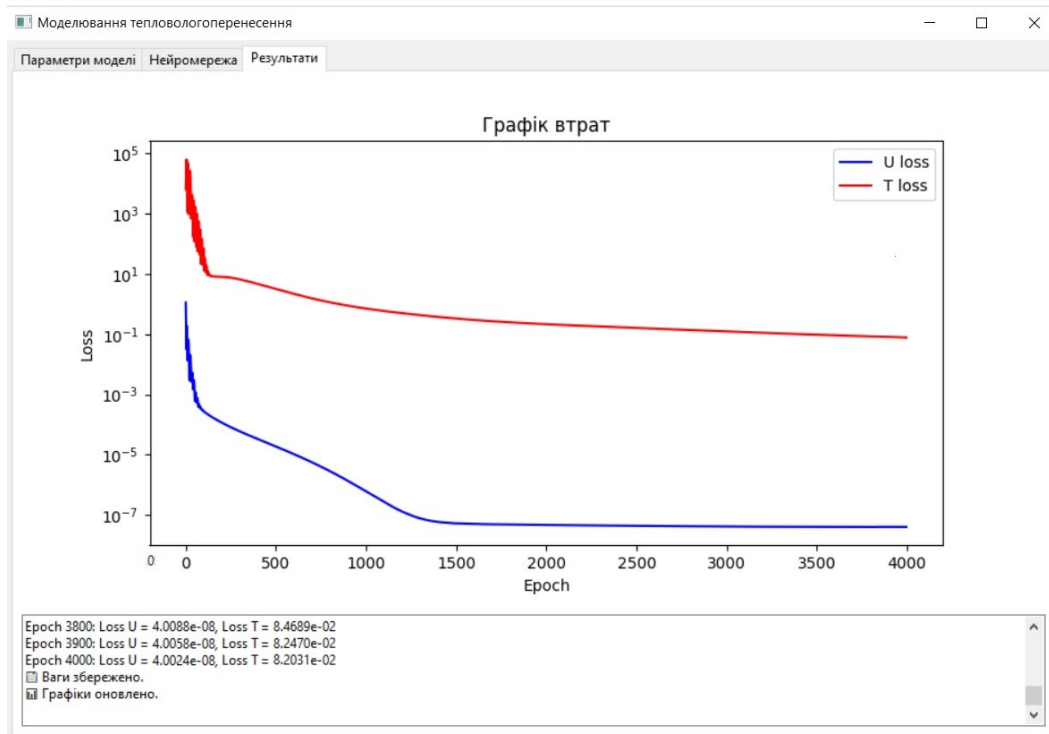


Рисунок 3.4 – Візуалізація результатів моделювання

3.2. Обґрунтування підбору навчальних даних та їх розподілу

Коректний підбір та розподіл навчальних даних є критично важливим етапом при реалізації фрактальної PINN для моделювання процесів теплового та вологого перенесення у капілярно-пористих середовищах із фрактальною структурою. Навчальні дані повинні адекватно відображати фізичну сутність задачі, забезпечувати стійкість навчання, а також сприяти досягненню високої точності результатів.

Важливим моментом формування навчальної вибірки є правильне створення системи колокаційних точок для мінімізації залишкової похибки рівнянь у частинних похідних. Саме колокаційні точки визначають ті області простору-часу, де мережа повинна суворо дотримуватися фізичних законів без безпосереднього використання експериментальних вимірювань, що особливо важливо при моделюванні складних процесів перенесення у фрактальних середовищах.

Колокаційні точки у цій роботі формувалися двома основними методами залежно від характеру задачі: шляхом регулярної сітки та методом вибірки латинським гіперкубом (Latin Hypercube Sampling, LHS). Під час проведення порівняння результатів моделювання мережі з методом скінченних різниць застосовувався рівномірний розподіл у вигляді регулярної просторово-часової сітки, що забезпечувало однорідне покриття всієї області розв'язання. В інших випадках використовувався метод вибірки латинським гіперкубом, який забезпечує статистично рівномірне заповнення двовимірного простору з використанням меншої кількості точок. Водночас точки розміщуються так, щоб рівномірно покривати кожен координатну вісь, однак їх положення всередині інтервалів визначається випадковим чином.

Кількість колокаційних точок для внутрішньої області обрано на рівні близько 1000. Такий обсяг є оптимальним компромісом між необхідною точністю апроксимації дробових операторів і обчислювальними ресурсами. Дробові похідні

Капуто і Грюнвальда–Летнікова, які характеризуються сильним впливом історичних і просторових змін, вимагають більшої щільності точок для адекватної передачі особливостей процесів пам'яті та нелокальності.

Просторово-часова розстановка точок здійснювалась таким чином, щоб покривати всю область моделювання $G=[0,L]\times[0,t_{\max}]$. За просторовою та часовою координатами точки розподілялися рівномірно або квазірівномірно для забезпечення збалансованої апроксимації просторових дробових операторів.

Такий підхід до вибору і розташування колокаційних точок безпосередньо пов'язаний із потребою у стабільному навчанні нейромережі на складних рішеннях дробових рівнянь. Забезпечення репрезентативного покриття області моделювання дає змогу уникнути локальних розбалансувань похибок, покращує збіжність оптимізації функції втрат і сприяє досягненню фізично коректних результатів навіть для систем із сильною нелокальністю та ефектами пам'яті.

Включення фізичної інформації у вигляді початкових і граничних умов є важливою складовою побудови фізично-інформованої нейромережі. У цій роботі точки для апроксимації початкових і граничних умов формувалися за спеціальними правилами, що забезпечували точну відповідність фізичній сутності задачі теплового та вологого перенесення у фрактальних капілярно-пористих середовищах.

Точки для початкових умов розташовані на часовому зрізі $t=0$. Вибір цих точок здійснювався або рівномірно по всій просторовій області $[0,L]$ для обидвох змінних або методом вибірки латинського гіперкуба. Такий розподіл гарантував, що нейронна мережа на етапі навчання точно відтворюватиме початкові стани системи.

Точки для граничних умов були обрані на межах просторової області, а саме при $x=0$ та $x=L$. Розподіл точок на межах здійснювався аналогічно до точок початкових умов. Подібний вибір точок дає можливість моделі адекватно врахувати

вплив зовнішнього середовища на тепло- та вологоперенесення у матеріалі, враховуючи, що граничні умови мають змішаний характер (умови третього роду) та включають дробові оператори за просторовими змінними.

Від загальної кількості навчальних точок точки для початкових і граничних умов становили близько 15%-20% . Таке співвідношення було обрано свідомо, адже надто мала кількість таких точок могла призвести до некоректного врахування початкових або граничних умов, тоді як надлишок міг переобтяжити функцію втрат і знизити увагу мережі до залишкової похибки диференціального рівняння.

Контроль балансу між внутрішніми точками та точками на межах є важливою умовою правильного навчання моделі. Недостатня кількість точок на межах може спричинити фізичні викривлення розв'язку, такі як порушення енергетичного балансу або некоректне відображення граничних потоків. Натомість правильний розподіл гарантує, що нейронна мережа задовольняє не тільки рівняння у внутрішній області, але й фізично обґрунтовані обмеження на межах, що суттєво підвищує точність і стабільність моделювання.

У цьому дослідженні важливим етапом підготовки навчальної інформації стало формування синтетичних та емпіричних даних, що забезпечило об'єктивність тестування та підвищило достовірність оцінки точності нейромережевої моделі.

Основою для створення синтетичних рішень стало чисельне розв'язання системи дробових диференціальних рівнянь за допомогою методу предиктор-коректор [142, 143, 192, 206], адаптованого для задач із дробовими похідними Капуто за часом та Грюнвальда–Летнікова за простором. Цей метод дав змогу отримувати високоточні розв'язки із контролем похибки, що є важливим при моделюванні фізичних процесів із сильними ефектами пам'яті та нелокальності. Результати чисельних експериментів на основі цього підходу формували орієнтири для навчання та валідації нейромережі.

Паралельно використовували дані, отримані з експериментальних досліджень, опублікованих у працях [206, 192, 207, 143, 188, 28]. Зокрема, параметри початкового вологовмісту, температури та густини деревини були обрані відповідно до даних про фізико-механічні властивості капілярно-пористих матеріалів, що широко використовуються у технологіях сушіння [207]. Також під час побудови моделі враховано відомі теплофізичні характеристики деревини, зокрема залежності теплопровідності, вологопровідності, теплоємності тощо від вологості та температури. У фрактальній моделі ці характеристики реалізуються як змінні коефіцієнти, функціонально залежні від поточного стану середовища. Такий підхід дає змогу точніше враховувати реальні умови процесу тепловологоперенесення. Основні емпіричні залежності, використані під час моделювання, наведені у додатку 3.

Для перевірки відповідності синтетичних даних очікуваній фізичній поведінці застосовувався комплексний підхід. По-перше, результати чисельних рішень аналізувалися на предмет відповідності базовим фізичним закономірностям: зменшення вологовмісту з часом, поступове вирівнювання температурного профілю та узгодження швидкостей теплоперенесення і дегідратації із теоретичними оцінками. По-друге, порівнювалися тренди синтетичних даних із відомими експериментальними кривими сушіння для деревини та аналогічних капілярно-пористих матеріалів [206, 192, 207, 143, 188, 28]. Це дало можливість переконатися, що згенеровані дані відображають реальні фізичні процеси.

Використання даних з різних джерел – як чисельних, так і експериментальних – суттєво підвищило надійність тестування моделі. Це забезпечило комплексне охоплення можливих сценаріїв поведінки матеріалу, сприяло кращому узагальненню нейромережі та підвищило її стійкість до варіацій вихідних параметрів.

Окремий клас `DataHandler` реалізує завантаження синтетичних або експериментальних даних з файлів формату `*.npz`. Отримані масиви значень T і U використовуються для побудови відповідних компонентів функціоналів втрат та дають можливість моделі навчатися з урахуванням наявної емпіричної інформації.

Отже, гнучка система генерації та підготовки даних забезпечує можливість побудови збалансованих навчальних множин, що є критично важливим для задач із дробовими похідними.

Ефективність навчання та здатність моделі до узагальнення значною мірою залежать від правильного розподілу навчальних даних на окремі піднабори. У цьому дослідженні для побудови і тренування фрактальної фізично-інформованої нейромережі обрали класичне співвідношення розподілу даних: 70% для навчального набору (англ. *train set*), 15% для валідаційного набору (англ. *validation set*) та 15% для тестового набору (англ. *test set*).

Вибір саме такого співвідношення обумовлений прагненням забезпечити оптимальний баланс між обсягом даних, які активно використовуються для оновлення параметрів нейромережі, і кількістю даних, необхідних для незалежної оцінки її роботи, причому 70% навчального набору дають можливість моделі отримати достатньо інформації для вивчення фізичних закономірностей процесу теплового та вологого перенесення з урахуванням дробових ефектів і фрактальної структури середовища, а 15% валідаційних даних використовуються для регулярного моніторингу процесу навчання, підбору гіперпараметрів і контролю перенавчання, що критично важливо в задачах високої складності. Решта 15% даних формує тестовий набір, який застосовується виключно після завершення етапу навчання для оцінки реальної узагальнювальної здатності моделі.

Для забезпечення репрезентативності у кожному піднаборі дані розподілялися випадковим чином, із збереженням рівномірності розподілу за ключовими фізичними параметрами: просторовими координатами, часовими

інтервалами, початковими та граничними умовами. Таке рішення дозволило уникнути перекосу в навчанні та оцінюванні, пов'язаного з нерівномірним охопленням різних ділянок області моделювання або фаз процесу.

Особлива увага приділялася тому, щоб тестовий набір був повністю незалежним і не використовувався жодним чином під час тренування чи валідації моделі. Це дало змогу об'єктивно оцінити здатність нейронної мережі узагальнювати закономірності на нові дані, що є ключовим критерієм придатності запропонованої моделі для практичного застосування у задачах складного тепловологоперенесення у фрактальних середовищах.

На рис. 3.5 відображено динаміку зміни функцій втрат протягом процесу навчання: окремо для температурного (L_T) та вологісного (L_U) компонентів, на всіх трьох підмножинах: навчальному, валідаційному та тестовому.

Поведінка моделі на тренувальному наборі демонструє покрокове зниження похибки із характерними “сплесками”, особливо вираженими для L_U . Ці осциляції відповідають етапам активації нових фаз навчання у поетапній архітектурі.

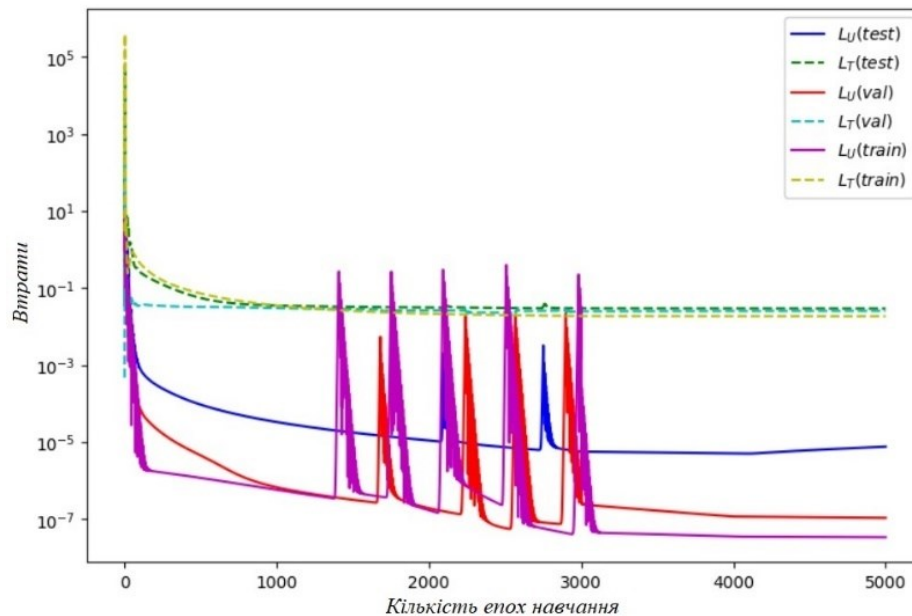


Рисунок 3.5 – Еволюція функцій втрат для навчальної, валідаційної та тестової вибірок

Незважаючи на них, загальна тенденція є стабільно спадною. На валідаційному наборі спостерігається згладжене та стійке зниження втрат до значень нижче 10^{-5} , що свідчить про відсутність перенавчання навіть у складних режимах дробової динаміки. На тестовому наборі модель демонструє стабільну поведінку: відсутні стрибки похибки, а рівень втрат залишається низьким і практично не змінюється після 4000 епох, що свідчить про високу здатність до узагальнення.

З огляду на наведене, аналіз рис. 3.5 дає змогу зробити висновок, що оптимальна кількість епох для цієї архітектури мережі становить приблизно 4000. На цьому етапі розроблена модель досягає компромісу, а саме: збалансоване співвідношення між рівнем навчання та стабільністю прогнозів на нових даних. Зокрема, фіксується стабілізація значень функцій втрат: для вологості вони знижуються до рівня 10^{-7} , а для температури – 10^{-1} . Така поведінка свідчить про досягнення прийнятного рівня точності при мінімальній генералізаційній похибці.

У задачах моделювання теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах із застосуванням дробових диференціальних рівнянь особливу роль відіграє правильний підбір густоти навчальних точок залежно від порядку дробових похідних. Значення порядків дробових операторів (α для часу та β для простору) безпосередньо впливають на характер процесів та визначають необхідну щільність дискретизації для адекватної апроксимації фізичних явищ.

Під час моделювання процесів з дробовим порядком $\alpha < 1$, що відповідає субдифузійній поведінці, виникає необхідність у збільшеній густоті часових колокаційних точок. Це пов'язано з тим, що у випадках субдифузії пам'яттєві ефекти системи проявляються сильніше, і поточний стан залежить від усієї попередньої історії процесу. Для точного відтворення такої залежності в моделі необхідна щільніша сітка часових точок, особливо на ранніх етапах розвитку процесу, де зміни відбуваються найбільш активно.

Аналогічно, порядок просторової дробової похідної β впливає на необхідну густоту просторової дискретизації. Для $\beta < 2$ посилюються ефекти просторової нелокальності, що обумовлює необхідність збільшення кількості точок у просторі для коректного врахування аномальної дифузії на великих відстанях. У практичній реалізації моделі забезпечувалось підвищення щільності точок як у часі, так і в просторі для сценаріїв із низькими значеннями α та β .

Підбір та розподіл навчальних даних у даному дослідженні здійснювався із врахуванням специфіки фізичних процесів теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах і особливостей моделювання дробових диференціальних рівнянь. Сформовано репрезентативні набори колокаційних точок для мінімізації залишкової похибки, підготовлено спеціалізовані точки для початкових і граничних умов, а також створено синтетичні дані на основі чисельних методів для забезпечення контролю якості навчання. Ретельно продуманий розподіл даних на навчальні, валідаційні та тестові підмножини дозволив гарантувати стабільність і достовірність процесу оптимізації. Особливу увагу приділено адаптації щільності розміщення точок залежно від порядку дробових похідних, що забезпечило точну апроксимацію субдифузійних та супердифузійних явищ. Такий комплексний підхід до підготовки даних став основою для досягнення високої точності та фізичної осмисленості побудованої fPINN-моделі.

3.3. Обґрунтування вибору бібліотек для оптимізації

Для реалізації задачі ефективного навчання фрактальної фізично-інформованої нейромережі, що моделює складні процеси тепло- та вологоперенесення у середовищах з фрактальною структурою, важливим є обґрунтований вибір інструментів і бібліотек для створення програмного продукту. Обчислювальна складність задачі, наявність дробових операторів, високі вимоги до

точності та збіжності зумовлюють потребу у використанні сучасних засобів глибинного навчання та наукових обчислень.

З огляду на це, застосовувалась бібліотека TensorFlow (версія 2.13) як основна платформа для побудови нейромережевої моделі, оскільки вона забезпечує гнучку архітектуру, підтримку як CPU, так і GPU-обчислень, автоматичного диференціювання та оптимізацію на GPU. Бібліотеки NumPy та SciPy дають змогу ефективно працювати з великими об'ємами даних, зокрема NumPy завдяки високій швидкодії та підтримці широкого спектру лінійної алгебри застосовувалась для ефективної роботи з багатовимірними масивами даних та векторизованими операціями. Вона забезпечила обчислення колокаційних точок, параметрів моделі та операцій над тензорами на етапах підготовки даних. SciPy, як надбудова над NumPy, дала змогу реалізувати спеціальні математичні функції, зокрема, гамма-функцію.

У реалізованому програмному забезпеченні використано високорівневу бібліотеку Keras, яка є частиною екосистеми TensorFlow та орієнтована на швидку розробку моделей глибинного навчання. Keras забезпечує модульну структуру побудови нейронних мереж та дає можливість гнучко налаштовувати архітектуру, вибирати типи шарів, функції активації, оптимізатори та методи регуляризації.

Завдяки Keras реалізовано два окремих блоки нейронних мереж для моделювання температурного та вологісного полів відповідно. Бібліотека надала інструменти для ефективного створення повнозв'язних шарів, ініціалізації ваг, реалізації кастомних функціоналів втрат із включенням залишків дробових диференціальних рівнянь.

Поєднання бібліотек, таких як: NumPy, SciPy, TensorFlow, Matplotlib, Keras та wxPython, забезпечило можливість створення інтегрованого середовища для повного циклу обчислювального експерименту – від генерації даних і навчання моделі до візуалізації результатів та аналізу точності.

У реалізованому програмному застосунку для навчання фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі було використано низку сучасних оптимізаторів, що входять до складу бібліотеки TensorFlow. Зокрема, досліджено ефективність таких алгоритмів, як Adam, Nadam, SGD та RMSprop, кожен з яких має свої переваги в контексті моделювання складних динамічних процесів.

Для забезпечення гнучкого налаштування процесу оптимізації в межах тренування нейромережі реалізовано метод динамічного вибору оптимізатора, тобто користувач може обрати один із зазначених алгоритмів (рис. 3.3).

Лістинг 3.1 Ініціалізація оптимізаторів для моделей N_U та N_T

```
def _get_optimizers(self, lr_schedule:tf.keras.optimizers.schedules.LearningRateSchedule):
    optimizer_map = {
        "Adam": tf.keras.optimizers.Adam,
        "SGD": tf.keras.optimizers.SGD,
        "RMSprop": tf.keras.optimizers.RMSprop,
        "NAdam": tf.keras.optimizers.Nadam
    }
    if self.optimizer_name not in optimizer_map:
        tf.print(
            f"Попередження: оптимізатор '{self.optimizer_name}' не підтримується. Використано Adam за замовчуванням.")
    optimizer_class = optimizer_map.get(self.optimizer_name, tf.keras.optimizers.Adam)
    optim_u = optimizer_class(learning_rate=lr_schedule)
    optim_T = optimizer_class(learning_rate=lr_schedule)
    return optim_u, optim_T
```

Метод `_get_optimizers`, представлений у лістингу 3.1 формує два незалежні екземпляри оптимізаторів для відповідних моделей, використовуючи спільний граф розкладу швидкості навчання. Такий підхід сприяє уніфікації та масштабованості програмного модуля, забезпечуючи одночасно контроль над поведінкою алгоритму градієнтного спуску на різних етапах тренування.

Вибір Adam зумовлений його здатністю автоматично адаптувати швидкість навчання для кожного параметра, що особливо корисно при роботі з високорозмірними просторами параметрів та фрактальними залежностями. Алгоритм Nadam поєднує адаптивні властивості Adam з технікою Nesterov momentum, що покращує швидкість збіжності на складних ландшафтах функції втрат. У свою чергу, SGD із фіксованим або змінним коефіцієнтом навчання є

базовим методом, що забезпечує стабільність та контрольованість процесу оптимізації. RMSprop ефективно працює з нестационарними цілями та осциляційними градієнтами, що властиві задачам з дробовими похідними та фрактальними структурами.

У підрозділі 4.1 представлено теоретичне обґрунтування вибору оптимізаторів і порівняльну візуалізацію ефективності їх застосування.

Крім вибору оптимізаторів, використання `tf.function` для прискорення обчислень у режимі графу дало змогу досягти відчутного приросту продуктивності у порівнянні з імперативним виконанням.

Бібліотеки Matplotlib і wxPython використано для візуалізації процесу навчання, графіків втрат, 3D-поверхонь температури та вологовмісту, а також реалізації графічного інтерфейсу користувача. Перевагою Matplotlib є можливість побудови як дво-, так і тривимірних графіків, що дало змогу наочно інтерпретувати результати роботи нейромоделі та порівняти їх із класичними чисельними рішеннями, зокрема методом скінченних різниць. Результати даного співставлення, представлені у підрозділі 3.6.

Для реалізації графічного інтерфейсу користувача було обрано wxPython – бібліотеку, що надає гнучкі інструменти для створення нативних GUI-додатків у середовищі Python. Її використання забезпечило реалізацію багатовкладкового інтерфейсу, інтерактивного введення параметрів, запуску симуляцій, а також перегляду результатів без необхідності взаємодії з кодом. Застосування wxPython зробило розроблений програмний продукт зручним для користувачів, які не мають досвіду програмування.

Отже, вибір даних бібліотек був зумовлений їх надійністю, продуктивністю, підтримкою наукової спільноти та сумісністю з фреймворками машинного навчання. Обрані інструменти забезпечили навчання нейромережі з урахуванням

особливостей дробової моделі, складної геометрії простору розв’язання та необхідності масштабованості до задач підвищеної розмірності.

3.4. Методи навчання та аналізу помилок

Процес навчання розробленої фрактальної нейронної мережі для моделювання теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах реалізовано з урахуванням специфіки задачі, що включає наявність двох взаємопов’язаних фізичних полів (температура та вологовміст), а також дробових похідних у рівняннях моделі. Для підвищення стабільності та точності навчання застосовано поділ моделі на дві окремі підмережі, кожна з яких апроксимує один з розв’язків: температурне поле – мережа N_T та поле вологості – мережа N_U (лістинг 3.2).

Лістинг 3.2 – Виклик функції побудови фрактальних фізично-інформованих нейронних мереж

```
self.model_u = build_fpin_model(self.lb, self.ub, self.layers, self.neurons,
                                activation_fn=self.activation)
self.model_T = build_fpin_model(self.lb, self.ub, self.layers, self.neurons,
                                activation_fn=self.activation)
```

У лістингу 3.2 показано фрагмент Python-коду, в якому ініціалізуються дві нейронні моделі типу fPINN. Також для кожної з підмереж визначено власну функцію втрат, яка включає компоненти залишкових рівнянь, граничних умов, початкових умов та, за потреби, точок із синтетичними або емпіричними даними (лістинг 3.3 та 3.4).

Лістинг 3.3 – Реалізація функцій втрат та визначення вагової моделі у fPINN

```
def compute_loss(self, model_u, model_T, X_r, X_b, X_0, u_0, T_0, X_d, U_d, T_d):
    if not self._prepared:
        self.prepare_coordinates(model_u, model_T, X_r, X_b, X_0)
    total_loss_u = self.compute_loss_u(model_u, model_T, X_r, X_b, X_0, u_0, X_d, U_d)
    total_loss_T = self.compute_loss_T(model_u, model_T, X_r, X_b, X_0, T_0, X_d, T_d)
    return total_loss_u, total_loss_T

def compute_loss_u(self, model_u, model_T, X_r, X_b, X_0, u_0, X_d, U_d):
    mode = self.weight_mode
```

```

if mode == 0:
    return self.compute_loss_u_fixed_weights(model_u, model_T, X_r, X_b, X_0,
                                              u_0, X_d, U_d)
elif mode == 1:
    return self.compute_loss_u_harmonized(model_u, model_T, X_r, X_b, X_0, u_0,
                                          X_d, U_d)
elif mode == 2:
    return self.compute_loss_u_loss_aware(model_u, model_T, X_r, X_b, X_0, u_0,
                                          X_d, U_d)
else:
    raise ValueError(f"Unsupported weight mode: {mode}")

```

Лістинг 3.4 – Обчислення функції втрат для вологовмісту з використанням фіксованих ваг та похідних за просторово-часовими координатами

```

def compute_loss_u_fixed_weights(self, model_u, model_T, X_r, X_b, X_0, u_0, X_d, U_d):
    u_pred = model_u(tf.concat([self.t, self.x], axis=1))
    u_pred = tf.reshape(u_pred, U_d.shape)
    loss_u_data = self.w['w_ud'] * tf.reduce_mean(tf.square(u_pred - U_d))
    if self.alpha == 1.0 or self.beta == 2.0 or self.gamma == 1.0:
        with tf.GradientTape(persistent=True) as tape:
            tape.watch(self.t)
            tape.watch(self.x)
            u = model_u(tf.concat([self.t, self.x], axis=1))
            u_t = tape.gradient(u, self.t)
            u_x = tape.gradient(u, self.x)
            u_xx = tape.gradient(u_x, self.x)
        del tape
    else:
        u = model_u(tf.concat([self.t, self.x], axis=1))
        u_t = None
        u_x = None
        u_xx = None
    T = self.prev_T
    T_t = self.prev_T_t
    T_x = self.prev_T_x
    T_xx = self.prev_T_xx
    r_u = self.rf.fun_residual_u(
        self.t[:self.N_r], self.x[:self.N_r], u[:self.N_r], T[:self.N_r],
        u_t[:self.N_r] if u_t is not None else None, u_x[:self.N_r] if u_x is not None else None,
        u_xx[:self.N_r] if u_xx is not None else None, T_t[:self.N_r] if T_t is not None else None,
        T_x[:self.N_r] if T_x is not None else None, T_xx[:self.N_r] if T_xx is not None else None
    )
    loss_r_u = self.w['w_u'] * tf.reduce_mean(tf.square(r_u))
    u_i = u[:self.N_i]
    u_b = tf.concat([u[:self.N_i + self.half_N_b], u[self.N_i + self.half_N_b + self.N_r:]], axis=0)
    u_t_b = tf.concat([u_t[:self.N_i + self.half_N_b], u_t[self.N_i + self.half_N_b + self.N_r:]],
                     axis=0) if u_t is not None else None
    u_x_b = tf.concat([u_x[:self.N_i + self.half_N_b], u_x[self.N_i + self.half_N_b + self.N_r:]],
                     axis=0) if u_x is not None else None
    u_xx_b = tf.concat([u_xx[:self.N_i + self.half_N_b], u_xx[self.N_i + self.half_N_b +
self.N_r:]],
                     axis=0) if u_xx is not None else None
    r_ub = self.rf.fun_residual_Ub(
        self.tb, self.xb, u_b, T[:tf.shape(u_b)[0]],
        u_t_b, u_x_b, u_xx_b,
        T_t[:tf.shape(u_b)[0]] if T_t is not None else None, T_x[:tf.shape(u_b)[0]] if T_x is not
None else None,
        T_xx[:tf.shape(u_b)[0]] if T_xx is not None else None
    )

```

```

loss_u_b = self.w['w_ub'] * tf.reduce_mean(tf.square(r_ub))
loss_u_ic = self.w['w_ui'] * tf.reduce_mean(tf.square(u_0 - u_i))
self.prev_u = u
self.prev_u_t = u_t
self.prev_u_x = u_x
self.prev_u_xx = u_xx
return loss_u_data + loss_r_u + loss_u_ic + loss_u_b

```

Запропонована декомпозиція дає змогу уникнути проблеми взаємного впливу градієнтів від різних компонент функції втрат, де вплив різних масштабів, а саме теплопровідності та вологовмісту, призводить до втрати збіжності (рисунки 2.2). Обчислення похідних цілого порядку реалізовано з використанням автоматичного диференціювання засобами TensorFlow, а саме через `tf.GradientTape`, а дробові похідні апроксимовано за допомогою відповідних різницьових схем (лістинг 3.7).

У реалізованій функції `compute_loss` передбачено поетапне навчання фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі шляхом розділення процесу оптимізації на окремі етапи для вологості та температури. Після обчислення значень функції U у `compute_loss_u`, а також її похідних за просторовою та часовою координатами, ці значення зберігаються у відповідних полях класу (`self.prev_u`, `self.prev_u_t`, `self.prev_u_x`, `self.prev_u_xx`). На наступному етапі ці дані використовуються у функції втрат для температури (`compute_loss_T`), що дає змогу уникнути повторного обчислення похідних та забезпечує скорочення обчислювального навантаження.

За потреби можлива реалізація механізму фіксації обчислених значень однієї функції та її похідних не лише на одну епоху навчання, а на певний фіксований інтервал. Такий підхід дасть змогу зменшити кількість повторних обчислень, що сприятиме зниженню обчислювального навантаження та пришвидшенню процесу навчання моделі.

Відповідно до коду, зображеного у лістингу 3.3 методи адаптивного навчання фрактальної фізично-інформованої нейромережі реалізовані у вигляді окремих функцій: `compute_loss_u_harmonized` та `compute_loss_u_loss_aware`. Перша з них

відповідає за гармонізовану вагову стратегію, яка забезпечує збалансований внесок кожного компонента втрат. Друга – реалізує інший підхід, при якому ваги окремих компонентів функціоналів адаптивно коригуються відповідно до їх впливу на загальну помилку. Це дає можливість автоматично зменшувати вагу тих компонентів, які вже добре апроксимовані, і зосереджувати навчання на складніших ділянках. Обраний режим визначається через змінну *weight_mode*.

Оптимізація параметрів обох мереж здійснюється з застосуванням обраного користувачем оптимізатора. Кожна з мереж навчається окремо, але функціонально узгоджено через спільні колокаційні точки, що забезпечує фізичну взаємозалежність полів.

Оцінювання моделі виконується автоматично у випадку вибору режиму завантаження даних. Для аналізу точності використовуються ключові метричні показники: середня абсолютна похибка (MAE), середня відносна похибка (MRE), а також відносна похибка, обчислена за L2-нормою (RelL2):

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\hat{y}_i - y_i| \quad (3.1)$$

$$MRE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|\hat{y}_i - y_i|}{|y_i|} \quad (3.2)$$

$$RelL2 = \frac{\|\hat{y} - y\|_2}{\|y\|_2} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n y_i^2}} \quad (3.3)$$

З огляду на результати попередніх досліджень, встановлено, що оптимальна якість моделі досягається приблизно на 4000-й епосі. Тому, з метою підвищення ефективності, навчання завершується достроково після досягнення цього порогу.

Під час тренування зберігаються значення втрат для кожного етапу, що дає змогу побудувати графіки збіжності та оцінити ефективність навчального процесу. Результати валідації відображаються через графічний інтерфейс у вигляді часових профілів температури та вологості, а також карти просторових розподілів помилок.

Завдяки такій структурі навчання fPINN-модель демонструє стабільну збіжність, низькі похибки та високу узгодженість із фізичними принципами процесу тепловологоперенесення у фрактальних середовищах. Це підтверджує обґрунтованість вибору архітектури, розділення втрат і стратегії тренування.

3.5. Алгоритм реалізації fPINN для моделювання теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах

Розглянемо основні алгоритмічні етапи реалізації фрактальної фізично-інформованої нейронної моделі, орієнтованої на поетапне навчання в задачах тепловологоперенесення (2.7) – (2.11). Наведений нижче опис доповнюється прикладами програмного коду, що ілюструють основні стадії: ініціалізація моделі, розрахунок залишкових похибок з урахуванням фрактальних характеристик середовища, формування функціоналів втрат, організація процесу навчання й візуалізації отриманих результатів.

Крок 1. На першому етапі задаються вихідні фізичні параметри моделі: геометричні розміри зразка матеріалу, початкові умови для температури та вологовмісту, властивості середовища, такі як: щільність, коефіцієнт фазового переходу, температура агента сушіння тощо, – та дробові показники порядків похідних.

Крок 2. Задається кількість епох навчання або критерій зупинки, наприклад, досягнення певного порогу похибки, що визначає завершення навчального циклу

Крок 3. Налаштовуються гіперпараметри навчального процесу: вибір оптимізатора, початкове значення швидкості навчання, методи задання вагових коефіцієнтів функцій втрат згідно з рівняннями (2.17), (2.18).

Крок 4. На основі заданих величин автоматично обчислюються стартові вторинні параметри, наприклад, коефіцієнти теплопровідності та

вологопровідності. Це гарантує внутрішню узгодженість усіх характеристик середовища.

Крок 5. Визначаються множини навчальних точок, що відповідають залишкам рівнянь (2.27) – (2.28) – N_f , початкових умов (2.29) – (2.30) – N_i , граничних умов (2.31) – (2.32) – N_b , а також тренувальні точки з даними – N_d . У якості прикладу продемонструємо генерацію колокаційних навчальних точок методом вибірки латинського гіперкуба (лістинг 3.5):

Лістинг 3.5 – Генерація навчальних точок методом латинського гіперкуба для внутрішньої області, початкових та граничних умов

```
def _generate_lhs(self):
    if self.N_d <= self.N_i + 2 * self.N_b:
        raise ValueError("Недостатньо точок: N_d має бути > N_i + 2 * N_b")

    bounds = [(0, self.t_max), (0, self.x_max)]
    dim = len(bounds)
    try:
        sampler_r = qmc.LatinHypercube(d=dim)
        sample_r = sampler_r.random(n=self.N_d - self.N_i - 2 * self.N_b)
        scaled_r = qmc.scale(sample_r, [b[0] for b in bounds], [b[1] for b in bounds])
        X_r = tf.convert_to_tensor(scaled_r, dtype=tf.float32)
    except Exception as e:
        raise RuntimeError(f"Помилка генерації X_r: {e}")

    try:
        sampler_i = qmc.LatinHypercube(d=1)
        x_i = qmc.scale(sampler_i.random(n=self.N_i), bounds[1][0], bounds[1][1])
        t_i = np.zeros_like(x_i)
        X_0 = tf.convert_to_tensor(np.hstack([t_i, x_i]), dtype=tf.float32)
    except Exception as e:
        raise RuntimeError(f"Помилка генерації X_0: {e}")

    try:
        sampler_b = qmc.LatinHypercube(d=1)
        t_b_half = qmc.scale(sampler_b.random(n=self.N_b), bounds[0][0], bounds[0][1])
        t_b = np.vstack([t_b_half, t_b_half])
        x_b = np.vstack([
            np.full((self.N_b, 1), bounds[1][0]),
            np.full((self.N_b, 1), bounds[1][1])
        ])
        X_b = tf.convert_to_tensor(np.hstack([t_b, x_b]), dtype=tf.float32)
    except Exception as e:
        raise RuntimeError(f"Помилка генерації X_b: {e}")

    return X_0, X_b, X_r
```

Крок 6. Усі координати та значення функцій масштабуються до діапазону $[-1, 1]$ для забезпечення стабільної роботи нейромережі під час тренування.

Крок 7. Згідно зі структурною схемою (рисунок 2.1 або рисунок 4.4) реалізується функція побудови та ініціалізації мережі прямого поширення. Вона передбачає задання кількості прихованих шарів, числа нейронів у кожному з них, типу активаційної функції та методу ініціалізації ваг.

Лістинг 3.6 – Побудова fPINN-моделі з масштабуванням входів

```
def build_fpin_model(lb, ub, num_hidden_layers=8, num_neurons_per_layer=40, activation_fn='tanh'):
    """
    Створює fPINN-модель з лінійним масштабуванням вхідних даних до [-1, 1].
    """
    model = tf.keras.Sequential()
    model.add(tf.keras.Input(shape=(2,))) # 2 входи: час t і координата x
    # Масштабування вхідних даних до [-1, 1]
    model.add(tf.keras.layers.Lambda(lambda x: 2.0 * (x - lb) / (ub - lb) - 1.0))
    # Приховані шари з активацією tanh
    for _ in range(num_hidden_layers):
        model.add(tf.keras.layers.Dense(num_neurons_per_layer,
                                         activation=activation_fn,
                                         kernel_initializer='glorot_normal'))

    # Вихідний шар
    model.add(tf.keras.layers.Dense(1))
    return model
```

Крок 8. На основі функції ініціалізації створюються два окремі екземпляри нейронних моделей: N_U – для прогнозування температурного поля, та N_T – для вологісного поля (лістинг 3.2).

Крок 9. Формується функція, що реалізує залишкові похибки дробових диференціальних рівнянь (2.33) – (2.34), дискретизованих через різницеві схеми із застосуванням інструментів TensorFlow (лістинг 3.7).

Лістинг 3.7 – Побудова fPINN-моделі з масштабуванням входів

```
def fun_residual_u(t, x, u, T, u_t, u_x, u_xx, T_t, T_x, T_xx):
    if alfa == 1 and betta == 2:
        return fun_r_u_integer(u_t, u_xx, T_xx)
    elif alfa == 1 and betta < 2:
        return fun_r_u_int_alfa_float_betta(u, T, u_t)
    elif alfa < 1 and betta == 2:
        return fun_r_u_float_alfa_int_betta(u, u_xx, T_xx)
    else:
        return fun_r_u_float(u, T)

def fun_r_u_float(u, T):
    self.N_t = self.N_r // self.N_r_x
    reshaped_u = tf.reshape(u, [self.N_t, self.N_r_x])
    reshaped_T = tf.reshape(T, [self.N_t, self.N_r_x])
    d_all = tf.stack([fun_d(k) for k in range(1, N_t)])
    sum_u_t = []
    sum_u_x = []
```

```

sum_t_x = []
for k in range(1, N_t):
    d = d_all[k - 1]
    s_ut = fun_sum_c(reshaped_u, d, k, self.N_r_x)
    s_ux = fun_sum_gl(reshaped_u, k, 0, self.N_r_x)
    s_tx = fun_sum_gl(reshaped_T, k, 0, self.N_r_x)
    sum_u_t.append(s_ut)
    sum_u_x.append(s_ux)
    sum_t_x.append(s_tx)
sum_u_t = tf.stack(sum_u_t)
sum_u_x = tf.stack(sum_u_x)
sum_t_x = tf.stack(sum_t_x)
d_all = tf.stack(d_all)
d0 = d_all[:, 0:1]
dK = d_all[:, -1:]
term1 = (1 / (lambda_ ** alfa * gamma_val)) * (
    d0 * reshaped_u[1:, :] - dK * reshaped_u[0, :] + sum_u_t
)
term2 = a1 / h1 ** betta * sum_u_x
term3 = a1 * delta / h1 ** betta * sum_t_x
res_u = term1 - term2 - term3
tf.print("Max term1:", tf.reduce_max(term1))
tf.print("Max term2:", tf.reduce_max(term2))
tf.print("Max term3:", tf.reduce_max(term3))
tf.print("res_u:", tf.reduce_max(res_u))
return tf.reshape(res_u, [-1, 1])

```

Крок 10. Аналогічно до попереднього пункту реалізується обчислення залишків початкових (2.35) – (2.36) і граничних (2.37) – (2.38) умов із використанням інструментів глибинного навчання TensorFlow.

Крок 11. Визначаються функції втрат згідно з рівняннями (2.17), (2.18), які формулюються як зважені середньоквадратичні помилки відповідних залишків рівнянь (2.33) – (2.28) та відхилень від еталонних або тестових даних (2.25) – (2.26).

Крок 12. Реалізується процедура навчання, наведена у (2.47) – (2.48), для моделей N_U та N_T , визначених на кроці 3, з урахуванням відповідних функцій втрат, визначених на кроці 6.

Крок 13. Виконується поетапне навчання моделей N_U та N_T з випадковою ініціалізацією параметрів. На кожній епосі реєструються значення функцій втрат і часові характеристики процесу. Застосовуються механізми зворотного виклику для моніторингу процесу оптимізації.

Крок 14. Для оцінювання точності моделі використовується прямий прохід по мережі, який дає змогу відтворити значення стану на контрольному наборі точок і оцінити точність розв'язання системи дробових рівнянь.

Крок 15. Проводиться візуальний аналіз результатів моделювання, зокрема побудова графіків, із використанням бібліотеки Matplotlib (більшість графіків представлено у розділі 4), що дає змогу оцінити точність апроксимації температурного та вологісного полів.

Реалізований алгоритм поєднує фізичну достовірність математичної постановки, гнучкість глибинного навчання та наочність аналізу результатів. Весь процес реалізовано у вигляді взаємопов'язаних модулів, що дає змогу легко адаптувати програму для нових геометрій, зміни параметрів процесу або альтернативних типів матеріалів.

3.6. Чисельне моделювання на синтетичних даних: оцінка точності fPINN в порівнянні з класичними методами

Для оцінки точності розробленої фрактальної фізично-інформованої нейромережі було здійснено порівняння її результатів із класичними чисельними методами розв'язання дробових диференціальних рівнянь. Зокрема, використовувався метод скінчених різниць для побудови еталонних розв'язків.

Для забезпечення коректного порівняння результатів моделі fPINN із розв'язками, отриманими методом скінчених різниць, було дотримано принцип узгодження розмірів сіток. Зокрема, колокаційні точки, що використовувались у нейромережевій моделі для обчислення залишкової похибки PDE, розташовувались у відповідності до вузлів дискретизації методу кінцевих різниць. Це дало змогу здійснювати безпосереднє порівняння значень температури та вологовмісту у відповідних просторово-часових точках.

Побудова рівномірної сітки та узгодження її характеристик із колокаційними точками нейромережі забезпечили наукову обґрунтованість порівняння. Це дало змогу об'єктивно оцінити переваги запропонованої fPINN-моделі щодо точності, збіжності та здатності до апроксимації складних фізичних процесів у фрактальних капілярно-пористих середовищах.

Для оцінки точності та ефективності розробленої fPINN-моделі було проведено чисельне моделювання нейромережевої моделі на основі синтетичних даних. Синтетичні дані формувалися шляхом розв'язання задачі теплового перенесення за допомогою методу скінченних різниць, адаптованого до дробових похідних, а саме його модифікації – предиктор-коректор, описаному у науковій літературі, зокрема в [192]).

Сформовані дані охоплювали профілі температури та вологовмісту в межах фізично допустимих значень ($T \in [20, 70]^\circ\text{C}$; $U \in [0,1; 0,4]$ кг/кг) і відповідали умовам типової термічної обробки деревини при відносній вологості повітря $\Phi = 60\%$, швидкості сушильного агента $v = 2$ м/с, густини матеріалу $\rho = 500$ кг/м³. Значення дробових параметрів моделі було встановлено наступним чином: $\alpha = 0,82$, $\beta = 1,92$, $\nu = 0,9$.

На кожній ітерації обчислювались абсолютна та відносна похибки між розв'язками.

Результати показали, що фрактальна нейронна модель демонструє високу точність апроксимації, навіть для задач із ефектами пам'яті та просторовою нелокальністю. При порівнянні з FD-моделлю похибки не перевищували 1% у критичних точках області (рис. 3.8).

Проведений аналіз просторово-часового розподілу похибок показав, що найбільші відхилення спостерігаються поблизу граничних точок, особливо в області часу $t \rightarrow 0$ температурного поля. Це типова картина для моделей з дробовими похідними Капуто, де початкові умови мають підвищену чутливість до розв'язку

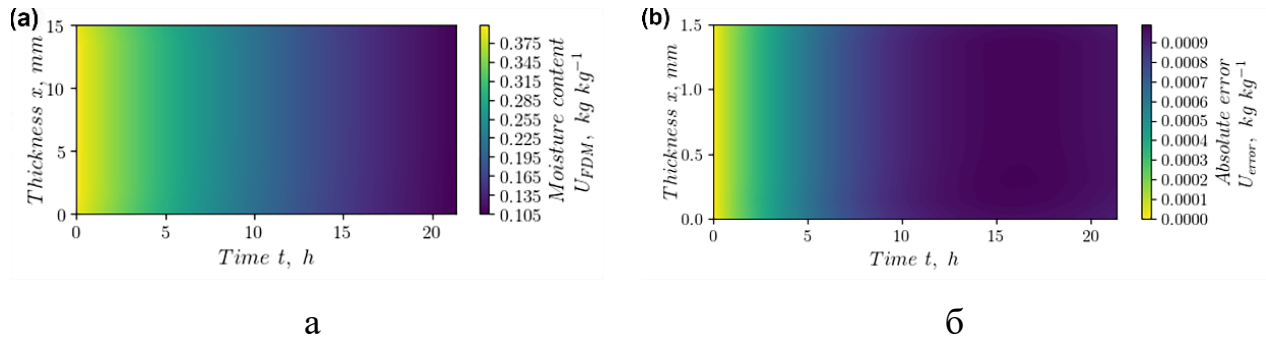


Рисунок 3.6 – Порівняння результатів моделювання вологовмісту: а) розподіл вологовмісту, отриманий методом скінчених різниць (FDM); б) абсолютна похибка між результатами fPINN та FDM.

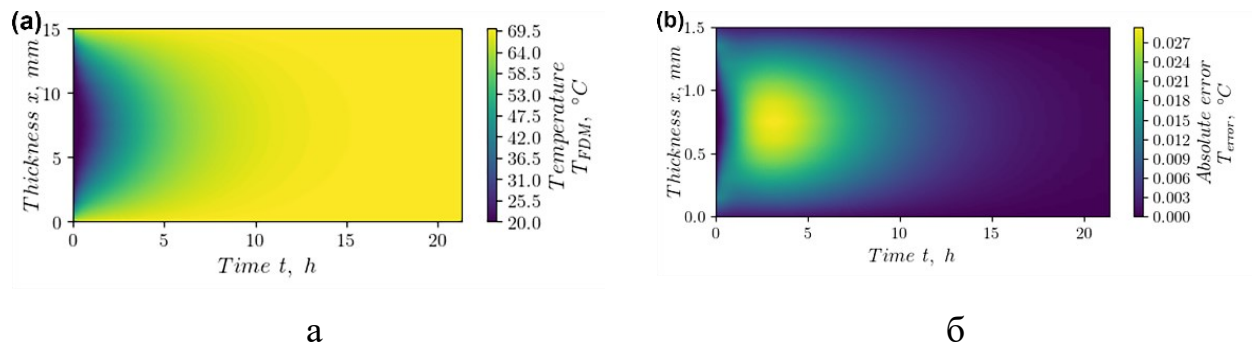


Рисунок 3.7 – Порівняння результатів моделювання температури: а) розподіл температури, отриманий методом скінчених різниць (FDM); б) абсолютна похибка між результатами fPINN та FDM.

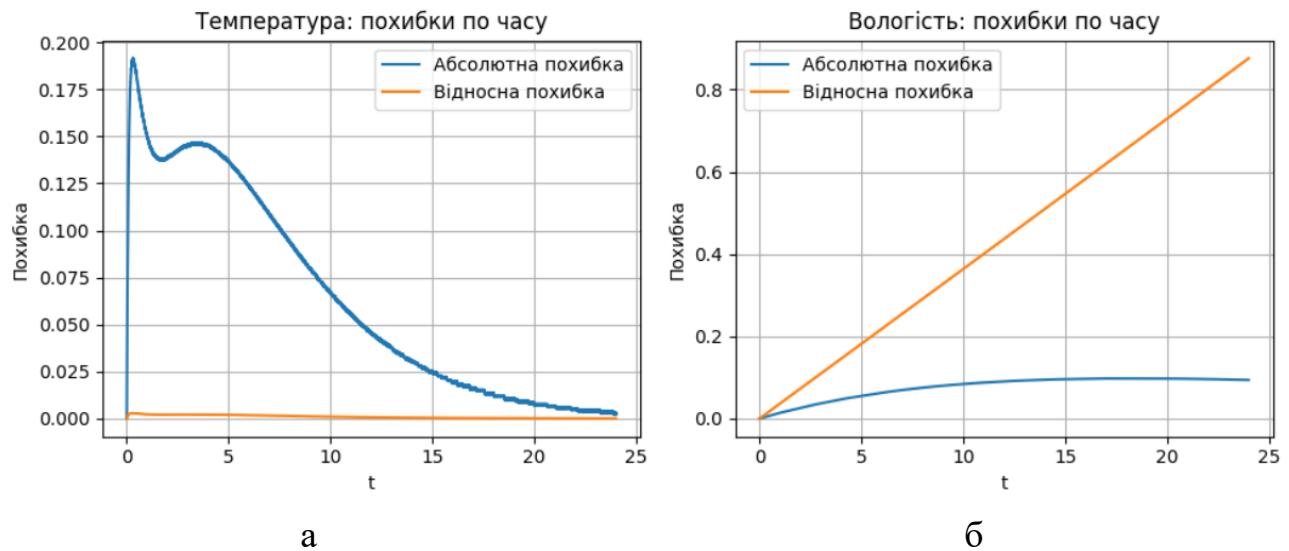


Рисунок 3.8 – Динаміка абсолютної та відносної похибки моделі fPINN у часі: а) для температури; б) для вологовмісту

в усьому попередньому часовому інтервалі. Дана картина не спостерігається стосовно вологісного поля, адже дана функція більш гладка на даній ділянці.

У центральній частині області моделювання (в середині G) відхилення були значно меншими, що свідчить про добру здатність моделі передавати основні фізичні закономірності в умовах фрактальної неоднорідності середовища. Важливо, що нейромережа ефективно адаптується до поступових змін у структурі розв'язку, не створюючи осциляцій чи “зламів” у поведінці температурного чи вологісного фронту.

Таблиця 3.1 Значення середніх похибок для температури та вологовмісту

№	Метрика	Позначення	Значення (%)
1	Середня абсолютна похибка (T)	MAE_T	0.7019
2	Середня відносна похибка (T)	MRE_T	0.0129
3	Середня абсолютна похибка (U)	MAE_U	0.0762
4	Середня відносна похибка (U)	MRE_U	0.4374

Під час моделювання на синтетичних даних, де референсне рішення відоме, спостерігалася висока точність апроксимації, особливо у випадках, коли порядок дробової похідної в часі α перебував у межах $[0,85; 1,0]$, а просторовий порядок $\beta \approx 2$. У цьому діапазоні відносна похибка у нормі L_2 для температурного поля $T(t, \mathbf{x})$ не перевищувала 2,5%, а для вологовмісту $U(t, \mathbf{x})$ – 2,1%.

Зменшення α до 0,7 або нижче, що відповідає посиленню ефектам пам'яті, призводило до помірного зростання похибки: значення відносної похибки у нормі L_2 сягало 3–5% залежно від кількості колокаційних точок і застосованої схеми апроксимації. Аналогічна тенденція спостерігалась і при переході до $\beta < 1,8$, що пов'язане з поглибленою нелокальністю просторового перенесення у фрактальних середовищах.

Оцінка збіжності моделі fPINN проводилася за допомогою аналізу графіків втрат (рис. 2.3), а також порівнянням поверхонь температури та вологості, побудованих на основі обох підходів (рис. 4.1).

Отже, чисельне моделювання підтвердило, що розроблений нейромережевий підхід є конкурентоздатним в порівнянні із класичними чисельними методами, забезпечуючи високу точність, стабільність та гнучкість в умовах складних фізичних задач із дробовими похідними.

Висновки до III розділу

У цьому розділі представлено структуру, методи реалізації та алгоритмічне забезпечення програмного комплексу, орієнтованого на нейромережеве моделювання тепловологоперенесення у капілярно-пористих середовищах з фрактальною структурою. Розроблений застосунок поєднує сучасні інструменти глибинного навчання, апроксимації дробових операторів та графічного інтерфейсу користувача, забезпечуючи повний цикл – від введення фізичних параметрів до візуалізації результатів.

Особливу увагу приділено структурі програмного коду, що реалізує архітектуру fPINN з подвійною моделлю для температури та вологовмісту, адаптивним механізмом оптимізації та поетапним навчанням. Обґрунтовано вибір бібліотек, функцій втрат, стратегій навчання та аналізу похибок.

Запропоновані методи поетапного навчання та адаптивного узгодження ваг функціоналів втрат сприяють підвищенню стійкості та збіжності нейромережевої моделі, що забезпечує більш точне відтворення процесів тепловологоперенесення в умовах складної геометрії та неоднорідності середовища.

Порівняльне чисельне моделювання показало, що запропонована fPINN-модель має точність $< 1\%$ та кращу фізичну інтерпретованість розв'язку порівняно з класичними методами. Це підтверджує практичну придатність розробленого програмного забезпечення до складних інженерних задач моделювання в умовах обмежених емпіричних даних та сильних ефектів пам'яті і нелокальності, що властиві фрактальним середовищам.

Передбачено використання експериментальних даних як початкових умов для адаптивного навчання нейромережі з подальшим прогнозуванням температури та вологовмісту в будь-якій точці досліджуваного зразка. Завдяки збереженим параметрам моделі та попередньо натренованим вагам забезпечується можливість високоточної та миттєвої імітації процесів без необхідності повторного повного навчання. Запропонований підхід забезпечує вищу обчислювальну ефективність у задачах підвищеної складності, де традиційні чисельні методи вимагають значного згущення сітки та високих обчислювальних витрат.

Отже, результати чисельного моделювання на синтетичних даних підтверджують ефективність та конкурентоспроможність fPINN-моделі у порівнянні з класичними чисельними методами, зокрема в умовах складної фізики процесу, а також фрактальної структури середовища.

РОЗДІЛ IV АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ ДОСЛІДЖЕННЯ

Розділ 4 присвячено дослідженню ефективності та точності розробленої фрактальної фізично-інформованої нейронної моделі (fPINN) для опису процесів теплового та вологого перенесення у фрактальних капілярно-пористих середовищах. На основі чисельних експериментів оцінено здатність моделі до апроксимації температурних і вологісних полів, виявлено закономірності впливу архітектурних параметрів, досліджено ефективність методів навчання та регуляризації, а також здійснено порівняння з класичними підходами. Особливу увагу зосереджено на ідентифікації фрактальних параметрів моделі, перевірці збіжності та аналізі похибок у контексті експериментальних даних.

Основні результати викладено у наукових працях [126, 134, 135 137, 136, 138, 139, 140, 201, 202].

4.1. Нейромережева реалізація теплового та вологого перенесення у фрактальних середовищах

Важливим результатом проведеного дослідження є розроблення та реалізація фрактальної фізично-інформованої нейромережі (fPINN) для моделювання процесів теплового та вологого перенесення в капілярно-пористих середовищах з фрактальною структурою. Запропонований підхід поєднує гнучкість архітектури глибинних нейронних мереж з фізичним інформуванням із строгістю математичного формалізму дробового інтегро-диференціювання, що дає можливість ефективно описувати процеси з спадковими та нелокальними ефектами, характерними для фрактальних середовищ.

У попередніх підрозділах детально розглянуто специфіку реалізації обчислювальної схеми, закладеної в основу fPINN, обґрунтовано вибір архітектури нейромережі, стратегій навчання, а також проведено аналіз збіжності моделі. У цьому підрозділі представлено результати чисельного моделювання, які

демонструють здатність запропонованої нейромережевої архітектури точно відтворювати фізично обґрунтовану динаміку температурного та вологісного полів у середовищах із вираженою фрактальною структурою та анізотропними властивостями. Крім того, у цьому підрозділі здійснено аналіз впливу різних активаційних функцій та типів оптимізаторів на стабільність і ефективність навчального процесу, що дало змогу визначити найбільш придатні конфігурації для моделювання складних тепломасообмінних процесів.

Активаційна функція є одним з ключових компонентів архітектури нейронної мережі, оскільки визначає здатність моделі описувати нелінійні взаємозв'язки між досліджуваними полями температури й вологості. Зважаючи на особливості задач тепловологоперенесення у фрактальних середовищах, вибір оптимальної активації набуває особливого значення, адже саме вона впливає на спроможність нейромережі точно моделювати процеси з яскраво вираженими ефектами спадковості, нелокальності та анізотропії, що властиві таким середовищам.

У цьому дослідженні реалізовано та експериментально перевірено такі активаційні функції: гіперболічний тангенс ($\tanh$), випрямлена лінійна функція (ReLU), сигмоїдна функція (sigmoid) та функція Swish. Усі ці функції мають різну форму, градієнтну поведінку та властивості, що впливають на здатність мережі до узагальнення, стабільність градієнтів та швидкість збіжності.

Аналітичні вирази та особливості застосованих активаційних функцій описано нижче. Гіперболічний тангенс, визначено наступним чином:

$$\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}, \quad (4.1)$$

Гіперболічний тангенс є симетричною щодо початку координат гладкою функцією, яка ефективно працює зі стандартизованими вхідними даними. Вона забезпечує обмеження вихідних значень у межах інтервалу $[-1, 1]$, що дає

можливість запобігти "вибуху" градієнтів і підвищує стабільність навчання в задачах, де важлива симетрична реакція мережі на вхідні сигнали.

Функція *ReLU* (Rectified Linear Unit), визначена виразом:

$$ReLU(x) = \max(0, x), \quad (4.2)$$

є простою та широко вживаною активацією, що характеризується високою обчислювальною ефективністю. Однак, її особливістю є занулення градієнтів для негативних аргументів, що може спричинити "вимирання нейронів", особливо у разі перенормованих або розріджених вхідних сигналів.

Логістична сигмоїдна функція (sigmoid), визначена як

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}, \quad (4.3)$$

є гладкою, монотонною функцією, яка стискає вхідні значення до інтервалу (0, 1). Попри свою поширеність у задачах бінарної класифікації, sigmoid має значний недолік – «затухання градієнтів» для великих за абсолютною величиною аргументів, що може значно уповільнювати процес навчання у глибоких нейромережах.

Функція Swish, яка визначається формулою

$$Swish(x) = x \cdot \sigma(x) = \frac{x}{1 + e^{-x}}, \quad (4.4)$$

є відносно новою активацією, що комбінує властивості лінійності та гладкості. На відміну від інших функцій, вона не є монотонною, що дає змогу їй ефективніше передавати інформацію в глибокі шари мережі. У проведених експериментах *Swish* продемонструвала кращі характеристики збіжності та стабільності навчання у порівнянні з іншими активаційними функціями.

Для кожної з розглянутих активаційних функцій здійснено повноцінне навчання нейромережі із розділеною архітектурою, яка окремо апроксимує поля

температури та вологості. На рис. 4.1 подано динаміку функцій втрат упродовж навчання для кожного варіанта активації.

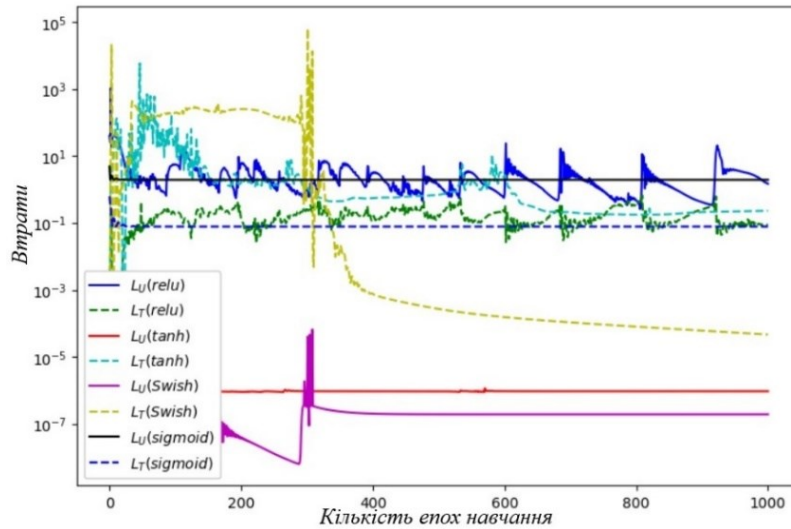


Рисунок 4.1 – Динаміка функцій втрат L_{N_u} та L_{N_T} для різних функцій активації протягом навчання fPINN

Це дало змогу порівняти не лише швидкість зменшення значень втрат, але й загальну стабільність процесу оптимізації. Такий підхід допоміг виявити специфіку поведінки кожної активаційної функції щодо виникнення коливань, затримок збіжності або нестабільності в різних фазах навчання.

Зокрема, застосування активації *ReLU* супроводжується значними коливаннями втрат як для температури (L_{N_T}), так і для вологості (L_{N_U}). Такі коливання вказують на нестабільність процесу навчання, що може бути пов'язано з властивістю *ReLU* зануляти градієнти в зоні негативних аргументів, спричиняючи тим самим втрату інформації та періодичні «стрибки» оптимізатора.

Під час використання функції *sigmoid* спостерігається стабільніша, але значно повільніша збіжність. Початковий етап характеризується коливаннями, однак у подальшому процес стабілізується, хоча значення втрат залишаються високими у порівнянні з іншими функціями. Така поведінка обумовлена тенденцією *sigmoid* до затухання градієнтів, що істотно сповільнює оновлення вагових коефіцієнтів.

Функція $\tanh$ має помітно кращу стабільність і швидшу збіжність. Вже після 300 ітерацій значення втрат стають майже незмінними та підтримуються на досить низькому рівні. Це пояснюється симетричністю $\tanh$ щодо нуля і більш ефективною передачею інформації в глибокі шари нейромережі, що позитивно впливає на стабільність навчання у складних фізичних моделях.

Найкращі результати показує активаційна функція *Swish*, яка забезпечує швидку, гладку та стабільну збіжність функцій втрат L_{N_U} та L_{N_T} вже на ранніх стадіях навчання. Відсутність значних осциляцій і швидке досягнення мінімальних значень свідчать про те, що *Swish* поєднує переваги гладкості *sigmoid* та ефективності *ReLU*, що забезпечує оптимальний компроміс між стабільністю та швидкістю збіжності.

Отже, проведений аналіз підтверджує, що для задач моделювання тепломасоперенесення у фрактальних середовищах доцільно застосовувати активаційні функції $\tanh$ та особливо *Swish*, які гарантують стабільну й ефективну роботу нейромережових моделей.

Для оптимізації функції втрат під час навчання фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі використано декілька популярних оптимізаторів, серед яких: Adam, Nesterov-accelerated Adam (Nadam), RMSprop та стохастичний градієнтний спуск (SGD). Кожен із них має свої особливості, які впливають на динаміку збіжності, стабільність навчання та здатність уникати локальних мінімумів.

SGD (Stochastic Gradient Descent) – базовий метод оптимізації, що виконує оновлення ваг після кожного окремого прикладу з навчального набору:

$$\mu_{t+1} = \mu_t - \eta_t \nabla L(\mu_t), \quad (4.5)$$

де μ_t - вектор параметрів нейронної моделі на ітерації t ; η_t - швидкість навчання (learning rate), може бути сталою або змінною на кожній ітерації; $\nabla L(\mu_t)$ – градієнт функції втрат за параметрами нейронної моделі на ітерації t .

Хоча цей підхід є обчислювально простим і часто вимагає більше епох для досягнення збіжності, у поєднанні з правильним підбором параметрів (наприклад, зменшенням кроку навчання або додаванням моменту) може демонструвати достатню ефективність і добре узагальнення.

RMSprop (Root Mean Square Propagation) – адаптивний алгоритм, який масштабує швидкість навчання на основі середнього квадрату попередніх градієнтів, пригнічуючи коливання й даючи змогу зосередити оновлення в «проблемних» регіонах:

$$\begin{aligned}\vartheta_0 &= 1, m_0 = 0, \\ \vartheta_{t+1} &= \chi \vartheta_t + (1 - \chi) \nabla L(\mu_t)^2, \\ m_{t+1} &= km_t + \frac{\eta_t}{\sqrt{\vartheta_{t+1} + \varepsilon}} \nabla L(\mu_t), \\ \mu_{t+1} &= \mu_t - m_{t+1},\end{aligned}\tag{4.6}$$

де ϑ_t - рухоме середнє квадратів градієнтів; χ - коефіцієнт згладжування, що визначає швидкість згасання рухомого середнього; ε - мала константа (часто $\varepsilon \approx 10^{-8}$), додається для уникнення ділення на нуль; m_t - адаптоване значення градієнта (масштабоване градієнтом і рухомих середнім).

Цей підхід особливо ефективний у задачах, де функція втрат змінюється дуже нерівномірно в різних напрямках, що часто спостерігається при моделюванні нелінійних процесів.

Adam (Adaptive Moment Estimation) – поєднує переваги методів адаптивної швидкості навчання (як RMSprop) і моменту (як Momentum), автоматично підлаштовуючи темп оновлення ваг для кожного параметра на основі першого та другого моментів градієнтів:

$$\begin{aligned}\vartheta_0 &= 0, m_0 = 0, \\ m_{t+1} &= \chi_1 m_t + (1 - \chi_1) \nabla L(\mu_t),\end{aligned}\tag{4.7}$$

$$\vartheta_{t+1} = \chi_2 \vartheta_t + (1 - \chi_2) \nabla L(\mu_t)^2,$$

$$b_{t+1} = \frac{\sqrt{1 - \chi_2^{t+1}}}{1 - \chi_1^{t+1}}$$

$$\mu_{t+1} = \mu_t - \nu_t \frac{m_{t+1}}{\sqrt{\vartheta_{t+1} + \varepsilon}} b_{t+1},$$

де m_t – рухоме середнє градієнтів (перший момент); ϑ_t – рухоме середнє квадратів градієнтів (другий момент); χ_1, χ_2 – коефіцієнти, які контролюють швидкість згасання рухомих середніх; ε – мала константа (також зазвичай $\varepsilon \approx 10^{-8}$) для числової стабільності; b_{t+1} – коригувальний множник, що компенсує зміщення рухомих середніх на ранніх ітераціях; ν_t – швидкість навчання.

Завдяки цьому Adam забезпечує швидку збіжність і добре працює в задачах з нерівномірним ландшафтом функції втрат.

Nadam (Nesterov-accelerated Adaptive Moment Estimation) – модифікований варіант Adam, який використовує передбачення градієнта на наступному кроці (Nesterov momentum), що дає можливість зробити оптимізацію ще чутливішою до змін у градієнтах і зменшити ризик «перестрибування» через мінімальні області:

$$\vartheta_0 = 0, m_0 = 0,$$

$$m_{t+1} = \chi_1 m_t + (1 - \chi_1) \nabla L(\mu_t),$$

$$\vartheta_{t+1} = \chi_2 \vartheta_t + (1 - \chi_2) \nabla L(\mu_t)^2,$$

$$b_{t+1} = \frac{\sqrt{1 - \chi_2^{t+1}}}{1 - \chi_1^{t+1}}$$

(4.7)

$$\mu_{t+1} = \mu_t - \nu_t \frac{\chi_1 m_{t+1} + (1 - \chi_1) \nabla L(\mu_t)}{\sqrt{\vartheta_{t+1} + \varepsilon}} b_{t+1},$$

m_t – експоненційно згладжене середнє градієнтів (перший момент), що описує напрям оновлення параметрів; ϑ_t – експоненційно згладжене середнє квадратів

градієнтів (другий момент), яке враховує дисперсію градієнтів. χ_1, χ_2 – параметри, що регулюють швидкість згасання відповідно першого та другого моментів; ε – додаткова константа ($\varepsilon \approx 10^{-8}$), яка вводиться для уникнення ділення на нуль, що підвищує числову стабільність алгоритму; b_{t+1} – коригувальний множник, що використовується для компенсації зміщення на початкових ітераціях; v_t – швидкість навчання, яка задає величину кроку при оновленні параметрів мережі.

У задачах, що передбачають наявність дробових характеристик, оптимізатор Nadam мав би демонструвати кращу здатність до узгодження з фізично обґрунтованими властивостями даних. Оскільки він одночасно враховує як поточну мінливість градієнтів, так і накопичену динаміку попередніх ітерацій, що узгоджується з ефектами пам'яті нелокальності, характерними для фрактальних моделей.

Під час досліджень проведено порівняння ефективності кожного з наведених оптимізаторів, що дало змогу обґрунтувати вибір найбільш придатного для задачі моделювання тепломасообміну у фрактальних середовищах (рис. 4.2).

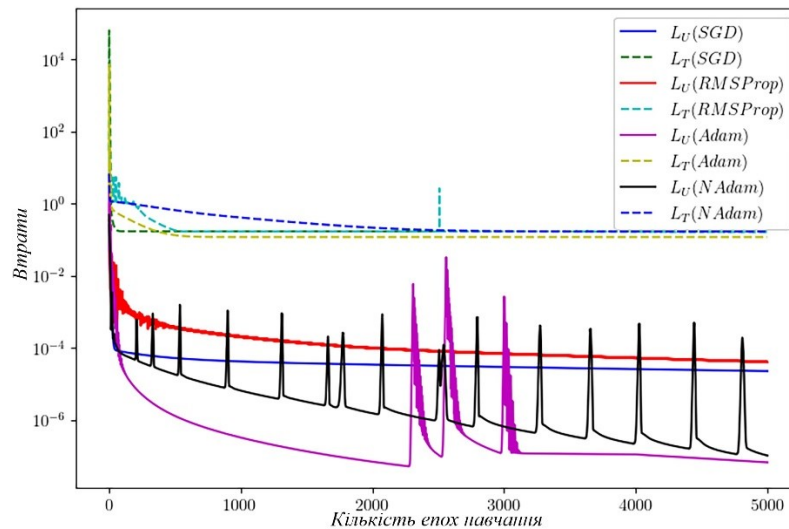


Рисунок 4.2 – Зміна функції втрат при використанні оптимізаторів SGD, RMSProp, Adam та Nadam

На рис. 4.2 представлено порівняльну еволюцію функцій втрат L_{N_U} та L_{N_T} що характеризують точність відтворення просторово-часових розподілів вологості та температури відповідно, за умов використання чотирьох оптимізаційних алгоритмів: SGD, RMSprop, Adam і Nadam. Кожен з розглянутих методів демонструє різну динаміку збіжності, що, в свою чергу, відображає їхню ефективність у задачах моделювання складних процесів тепломасообміну у фрактально структурованих середовищах.

Оптимізатор Adam виявив високу стійкість у процесі навчання, особливо в частині функції втрат L_{N_U} , яка демонструвала стабільне монотонне зменшення до порядку 10^{-9} без значних флуктуацій. Така поведінка зумовлена властивістю Adam динамічно адаптувати швидкість оновлення ваг, поєднуючи це з моментним згладжуванням градієнтів. Це особливо корисно в задачах з великою кількістю параметрів. У той же час, для температурної компоненти L_{N_T} після приблизно 1000 ітерацій починають простежуватись регулярні коливання значень функції втрат. Ймовірно, вони спричинені складнощами чисельного наближення дробових похідних або неоднорідним масштабуванням градієнтів у різних частинах архітектури.

Алгоритм Nadam, який модифікує стандартний Adam за рахунок включення корекції імпульсу в стилі Нестерова, не виявив помітного приросту ефективності щодо темпів зменшення функції втрат порівняно з базовим варіантом. Проте, варто відзначити, що у випадку температурної компоненти L_{N_T} він сприяв значному приглушенню коливань і стабілізації процесу оптимізації. Така властивість є суттєвою для задач, де локальні флуктуації градієнта можуть істотно впливати на динаміку навчання й точність моделі.

RMSprop, хоча й забезпечив певне зниження функціоналу L_{N_U} , показав загалом гіршу збіжність у порівнянні з Adam та Nadam, а також більшу схильність

до коливань і нестабільності для L_{N_T} . Ймовірною причиною є специфіка адаптивного механізму RMSprop, який не завжди забезпечує достатню стійкість у задачах, що потребують точного дотримання фізичних обмежень та поступового згладженого зменшення функції втрат.

Оптимізатор SGD виявився найменш результативним серед розглянутих методів, демонструючи найвищі значення функції втрат протягом усього періоду навчання. Через відсутність механізмів адаптивного налаштування швидкості оновлення параметрів, алгоритм характеризується повільною збіжністю та підвищеною вразливістю до локальних мінімумів. Хоча для температурної компоненти L_{N_T} спостерігається відносна стабільність значень функціоналу, рівень досягнутої точності істотно поступається показникам, отриманим за допомогою інших оптимізаторів.

Отже, результати аналізу вказують на те, що у контексті моделювання процесів тепломасообміну в середовищах із фрактальною структурою найкращі результати забезпечує оптимізатор Adam, особливо для вологісного поля. Для моделювання температури доцільно враховувати можливість використання Nadam з огляду на його стабілізуючий вплив.

У рамках експериментів із дослідження впливу різних активаційних функцій та оптимізаторів використовувалися наступні параметри моделювання, а саме: матеріал зразка - деревина з густиною $\rho = 500 \text{ кг/м}^3$; початкова температура зразка $T_0 = 20 \text{ }^\circ\text{C}$, температура навколишнього середовища $T_c = 70 \text{ }^\circ\text{C}$, початковий вологовміст $U_0 = 0,4 \text{ кг/кг}$, відносна вологість повітря $\phi = 60\%$, швидкість сушильного агента $v = 2 \text{ м/с}$. У моделі використовувалися дробові параметри $\alpha = 0.82$, $\beta = 1.92$, $\nu = 0.9$. Інші параметри, а також відповідні емпіричні залежності, були визначені на підставі результатів експериментальних досліджень, наведених у джерелах [30, 32, 60, 61, 63, 64].

Збереження ідентичних параметрів у межах кожного експериментального запуску дозволило досягти методологічної цілісності й забезпечити коректність порівняння результатів, отриманих на основі різних архітектур нейромереж. Такий підхід унеможливлює вплив зовнішніх чинників і зосереджує увагу виключно на внутрішніх характеристиках моделей. Візуалізовані розподіли температури та вологості, сформовані в умовах капілярно-пористого середовища з фрактальними властивостями, наведено нижче (рис. 4.3), і вони відображають вплив обраної топології мережі на якість апроксимації фізичних процесів.

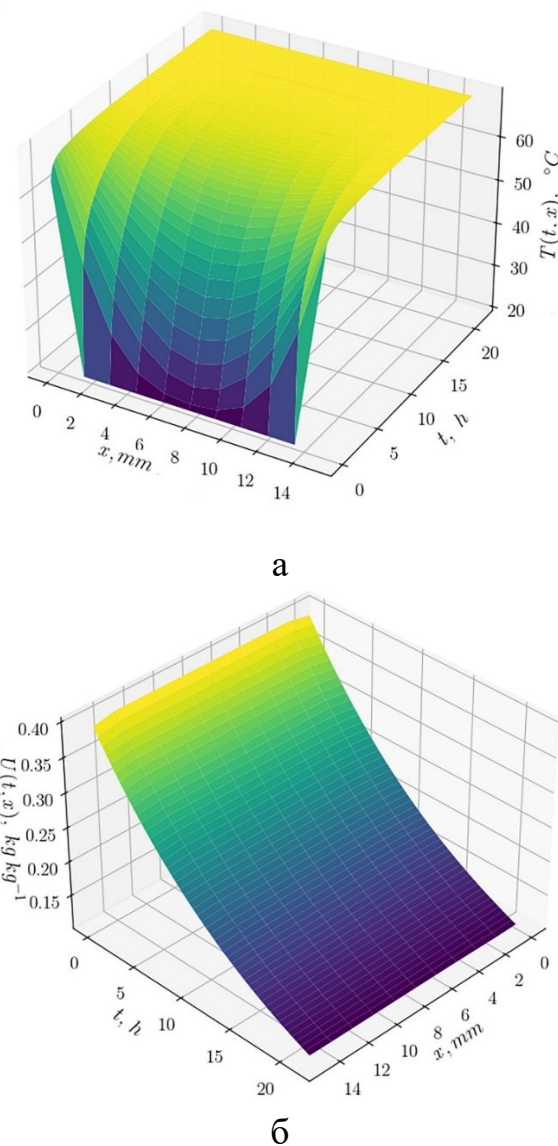


Рисунок 4.3 – Результати, отримані за допомогою фрактальної нейромережевої моделі: а) зміна температурних полів; б) зміна полів вологовмісту

Разом ці графіки ілюструють узгоджену поведінку температури та вологості під час теплової обробки матеріалу й демонструють здатність fPINN-моделі ефективно відтворювати просторово-часову динаміку складних процесів у фрактальних середовищах.

Загалом, отримані результати підтверджують доцільність і перспективність запропонованого підходу для подальшого використання в прикладних задачах, зокрема в моделюванні процесів сушіння деревини, гідротермічної обробки біоматеріалів, а також для оцінювання динаміки вологовбирання в пористих середовищах.

4.2. Нейромережева реалізація алгоритмів ідентифікації фрактальних параметрів

У задачах теплового та вологого перенесення в капілярно-пористих середовищах із фрактальною структурою часто виникає потреба не лише у розв'язанні прямої задачі для обчислення просторово-часових розподілів температури та вологовмісту, а й у визначенні невідомих дробових (фрактальних) параметрів, таких як порядок похідної α у часі, β або ν у просторі, а також інших коефіцієнтів, що відображають аномальну або ерідитарну поведінку матеріалу. Такі задачі формулюються як задачі ідентифікації, метою яких є визначення значень фрактальних параметрів, що забезпечують найкращу відповідність між результатами моделювання та доступними даними – як експериментальними, так і синтетичними.

У цьому дослідженні розроблено підхід до ідентифікації дробових параметрів на основі фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі (fPINN). Сформульована система рівнянь (2.7)–(2.11) становить приклад прямої задачі, в межах якої математична модель із наперед заданими параметрами, зокрема порядками дробових похідних α, β, ν , використовується для прогнозування

динаміки температурного та вологісного полів. При цьому обчислення здійснюється на основі керівних рівнянь (2.7), (2.8), початкових умов (2.9) та граничних умов третього роду (2.10)–(2.11).

Обернена задача, на противагу прямій, полягає у відновленні невідомих параметрів моделі на основі доступних вимірюваних або синтетичних даних, що характеризують поведінку температурного та вологісного полів у просторі та часі. Ця задача належить до класу некоректно поставлених задач у сенсі Адамара [11], що вимагає застосування методів регуляризації та ефективних оптимізаційних стратегій для забезпечення чисельної стійкості та достовірності отриманого розв'язку.

Реалізований підхід передбачає поетапне навчання нейронної мережі: спершу розв'язується пряма задача з фіксованими дробовими параметрами з метою побудови температурного й вологісного полів. На наступному етапі, із використанням методів зворотного аналізу, здійснюється ідентифікація параметрів α, β, ν . Отже, щоб результати моделювання узгоджувалися з емпіричними або синтетичними вимірюваннями.

Під час розв'язання прямої задачі фізичні закономірності, подані у вигляді рівнянь (2.7)–(2.11), включено у функціонали втрат (2.17)–(2.18) у вигляді додаткових обмежень. Це дало можливість моделі враховувати не лише дані, а також фізичні принципи, які лежать в основі описуваного процесу.

Конструкція функцій втрат поєднує дві ключові компоненти: перша відповідає за відповідність до емпіричних даних, тоді як друга забезпечує виконання фізичних рівнянь моделі шляхом мінімізації залишків відповідних рівнянь у частинних похідних.

У межах запропонованої методології здійснено чисельну апроксимацію дробових операторів у часовій та просторовій областях. Отримані дискретизовані вирази інтегрувалися у функціонали втрат (2.17), (2.18) фрактальної нейромережі

(рис. 4.4), що дало змогу ефективно інтегрувати дробові похідні у процес оптимізації та відобразити фізичні особливості моделі.

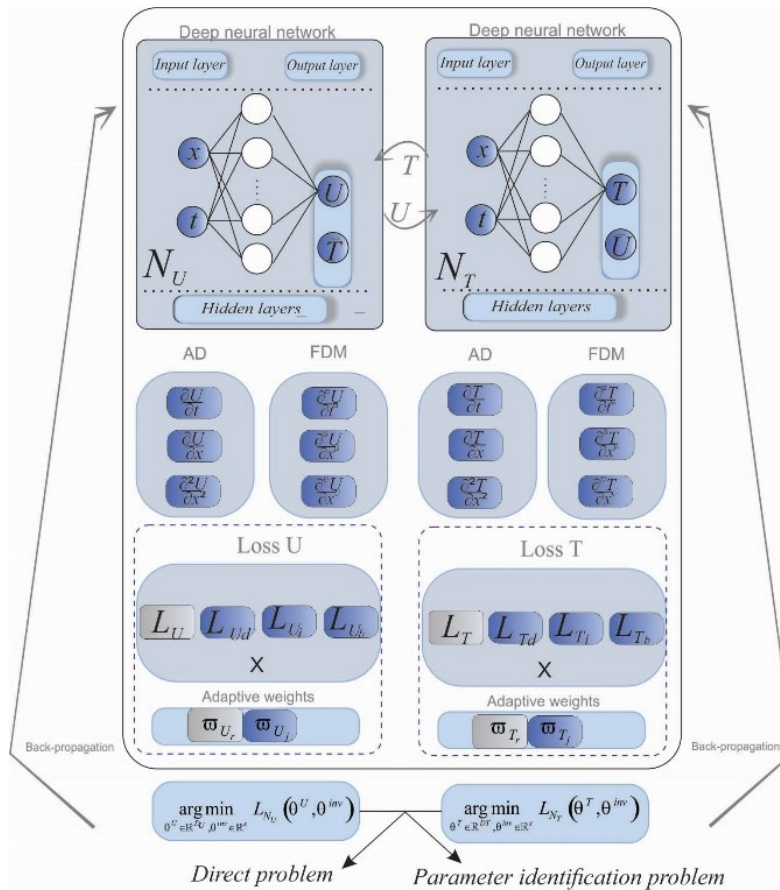


Рисунок 4.4 – Архітектура дробової нейронної мережі з адаптивним навчанням

На відміну від класичної постановки задачі у fPINN, де нейронна мережа виконує лише апроксимацію фізичних полів $T(t, x)$ та $U(t, x)$, у задачі ідентифікації фрактальних параметрів в рамках оберненої постановки змінною оптимізації додатково виступає вектор $\mu_{inv} := \{\alpha, \beta, \nu\}$, який містить шукані дробові порядки похідних α, β, ν . У такому випадку процедура навчання формалізується як:

$$\{\mu_U^{*k+1}, \mu_{Inv}^{*k+1}\} = \arg \min_{\mu_U \in \mathbb{R}^{D_U}, \mu_{Inv} \in \mathbb{R}^{D_{Inv}}} L_U(Z, \tilde{T}^k, \mu_U^{*k}, \mu_{Inv}^{*k}), \quad (4.1)$$

$$\{\mu_T^{*k+1}, \mu_{inv}^{*k+1}\} = \arg \min_{\mu_T \in \mathbb{R}^{D_T}, \mu_{inv} \in \mathbb{R}^{D_{inv}}} L_T(Z, \tilde{U}^{k+1}, \mu_T^{*k+1}, \mu_{inv}^{*k+1}). \quad (4.2)$$

де μ_U^{*k} та μ_T^{*k} - параметри відповідних мереж N_U та N_T , отримані після k -ї ітерації оптимізації; $\tilde{T} \approx N_T(Z, \mu_T^{*k})$ та $\tilde{U} \approx N_U(Z, \mu_U^{*k+1})$ - відповідних фізичних полів у множині навчальних точок Z , $\mu_{inv} := \{\alpha, \beta, \upsilon\}$ - вектор фізичних параметрів моделі, зокрема дробових порядків похідних α, β, υ , що підлягають ідентифікації.

Задача ідентифікації параметрів у дробових диференціальних моделях часто набуває некоректного характеру через обмежену кількість експериментальних даних, що характеризують фізичну систему. Такий дефіцит інформації може зумовлювати нестійкість розв'язку та високу чутливість до похибок у вихідних спостереженнях.

Для подолання зазначених труднощів доцільно застосовувати спеціалізовані методи навчання та регуляризації, які сприяють забезпеченню стабільності обчислень і підвищенню точності відновлення параметрів. Одним із таких використаних нами рішень є введення до функціоналу втрат додаткового штрафного члена, який знижує вплив шумових складових у даних і покращує узгодженість розв'язку з фізичними законами, що описують досліджувану систему:

$$L_{N_U}^{inv}(\mu_U, \mu_{inv}) = L_{N_U}(\mu_U) + \eta_{inv} \times \sum_{i=1}^s (\mu_{inv}^i - \mu_{inv}^{i*})^2 \quad (4.3)$$

$$L_{N_T}^{inv}(\mu_T, \mu_{inv}) = L_{N_T}(\mu_T) + \eta_{inv} \times \sum_{i=1}^s (\mu_{inv}^i - \mu_{inv}^{i*})^2, \quad (4.4)$$

де $L_{N_U}^{inv}$, $L_{N_T}^{inv}$ - регуляризовані функціонали втрат для нейронних мереж N_U та N_T відповідно; L_{N_U} , L_{N_T} - основні функціонали втрат, визначені відповідно до (2.17) та (2.18); η_{inv} - регуляризаційний коефіцієнт, який контролює вплив штрафного члена на загальні функції втрат; μ_{inv}^{i*} - деяке референтне або початкове значення параметрів.

Отже, вирази (4.1) та (4.2) відображають те, що в процесі оптимізації мережі, окрім мінімізації основних функціоналів втрат (2.17) та (2.18), додатково враховуються відхилення поточних параметрів від заданих (референтних) значень, що дає змогу обмежити надмірні коливання параметрів і сприяє підвищенню стабільності навчання.

Для усунення необхідності явного накладання обмежень під час оптимізації, запропоновано здійснювати пошук оптимальних значень у перетвореному просторі параметрів із використанням спеціальних функціональних перетворень (4.5)-(4.7):

$$\alpha = 0.5 \tanh(\alpha_i) + 0.5 \quad (4.5)$$

$$\beta = 0.5 \tanh(\beta_i) + 1.5 \quad (4.6)$$

$$\nu = 0.5 \tanh(\nu_i) + 0.5 \quad (4.7)$$

де α_i, β_i, ν_i – початкове значення змінних на кожній ітерації оптимізаційного процесу; $\alpha, \nu \in (0; 1)$, $\beta \in (1; 2)$ – допустимі інтервали для дробових похідних за часом та простором. Застосування перепараметризування (4.5)–(4.7) дає змогу здійснювати процес оптимізації у просторі дійсних чисел $\mathbb{R}$ без порушення обмежень на допустимі значення параметрів. Завдяки цьому початкові змінні α_i, β_i, ν_i можуть вільно змінюватися в $\mathbb{R}$, тоді як відповідні перетворені значення α, β, ν автоматично залишаються в фізично та/або математично обґрунтованих межах.

Крім того, одним із потенційно ефективних підходів є адаптивний метод балансування градієнтів, застосований нами у процесі навчання мережі під час вирішення прямої задачі (2.45)-(2.50), який спрямований на зниження взаємного впливу між компонентами функції втрат і мінімізацію конфліктів між ними. Водночас, результати, отримані в ході дослідження, засвідчують, що більш вищої точності вдається досягти шляхом реалізації модифікованої адаптивної стратегії,

спеціально узгодженої з особливостями оберненого підходу в фрактальній фізично-інформованій архітектурі.

Тому для проведення процедури ідентифікації в рамках оберненої задачі адаптовано та модифіковано підхід [11], забезпечивши його узгодження з особливостями структури функціоналу втрат та з урахуванням специфіки фрактальної фізично-інформованої архітектури (рис. 4.4). На відміну від стандартного застосування методів динамічного масштабування, запропоноване розширення враховує взаємозалежність між параметрами і складовими втрат, що дає змогу підвищити точність і стабільність навчання в умовах високої чутливості до початкових та граничних умов та обмеженості даних. Вагові коефіцієнти тут виконують роль гнучких регуляторів впливу відповідних фізичних компонентів, мінімізуючи ризик переважання окремих членів у процесі оптимізації:

$$L_{N_U}^{inv}(\mu_U, \mu_{inv}) = \sum_{j=1}^Z (\varpi_{U_j}^e \times (R_{U_j}^{i \times b \times d})^2 + \varpi_{U_r}^e \times (R_{U_j}^r)^2), \quad (4.5)$$

$$L_{N_T}^{inv}(\mu_T, \mu_{inv}) = \sum_{j=1}^Z (\varpi_{T_j}^e \times (R_{T_j}^{i \times b \times d})^2 + \varpi_{T_r}^e \times (R_{T_j}^r)^2), \quad (4.6)$$

де Z — множина навчальних точок, $R_{U_j}^{i \times b \times d}, R_{T_j}^{i \times b \times d}$ — компоненти втрат, що відображають відхилення виходу мережі від початкових, граничних та експериментальних (або синтетичних) даних; $R_{U_j}^r, R_{T_j}^r$ — залишки диференціальних рівнянь, пов'язаних з функціями температури та вологовмісту; $\varpi_{U_j}^e, \varpi_{U_r}^e, \varpi_{T_j}^e, \varpi_{T_r}^e$ — вагові коефіцієнти, які оновлюються на кожній ітерації оптимізації з метою динамічного балансування внеску різних складових у функціонали втрат. Для коректного налаштування цих ваг у процесі навчання застосовуються такі співвідношення:

$$\varpi_{Uj}^e = \frac{\hat{\varpi}_{Uj}^e}{\sum_{i=1}^Z \hat{\varpi}_{Ui}^e + \hat{\varpi}_{Ur}^e}, \varpi_{Ur}^e = \frac{\hat{\varpi}_{Ur}^e}{\sum_{i=1}^Z \hat{\varpi}_{Ui}^e + \hat{\varpi}_{Ur}^e}, \quad (4.7)$$

$$\varpi_{Tj}^e = \frac{\hat{\varpi}_{Tj}^e}{\sum_{i=1}^Z \hat{\varpi}_{Ti}^e + \hat{\varpi}_{Tr}^e}, \varpi_{Tr}^e = \frac{\hat{\varpi}_{Tr}^e}{\sum_{i=1}^Z \hat{\varpi}_{Ti}^e + \hat{\varpi}_{Tr}^e}, j=1, \dots, Z, \quad (4.8)$$

де також введено допоміжні величини $\hat{\varpi}_{Uj}^e, \hat{\varpi}_{Ur}^e, \hat{\varpi}_{Tj}^e, \hat{\varpi}_{Tr}^e$, необхідні для реалізації адаптивного механізму оновлення ваг. Зокрема:

$$\hat{\varpi}_{Uj}^e = \begin{cases} \eta_{U_b}, \text{ якщо } x_j \in \partial G \\ \eta_{U_i}, \text{ якщо } \tau_j = 0 \\ \varphi(e) \times \eta_{U_d}, \text{ якщо } (x_j, \tau_j) \in N_d \\ 0, \text{ в інших випадках} \end{cases}, \quad j=1, \dots, P \quad (4.9)$$

$$\hat{\varpi}_{Tj}^e = \begin{cases} \eta_{T_b}, \text{ якщо } x_j \in \partial G \\ \eta_{T_i}, \text{ якщо } \tau_j = 0 \\ \varphi(e) \times \eta_{T_d}, \text{ якщо } (x_j, \tau_j) \in N_d \\ 0, \text{ в інших випадках} \end{cases}, \quad j=1, \dots, Z \quad (4.10)$$

$$\hat{\varpi}_{Ur}^e = \begin{cases} 1, \text{ якщо } (x_j, \tau_j) \in G \\ 0, \text{ в інших випадках} \end{cases}, \quad (4.11)$$

$$\hat{\varpi}_{Tr}^e = \begin{cases} 1, \text{ якщо } (x_j, \tau_j) \in G \\ 0, \text{ в інших випадках} \end{cases}, \quad (4.12)$$

де $\eta_{T_d}, \eta_{U_d}, \eta_{U_b}, \eta_{U_i}, \eta_{T_b}, \eta_{T_i}$ – сталі коефіцієнти, які визначають відносну значущість граничних, початкових умов та даних у функціоналах втрат; $\varphi(e)$ – монотонно зростаюча функція від нуля до одиниці, що залежить від номера епохи e та має вигляд:

$$\varphi(e) = \frac{\tanh\left(10\left(\frac{e - E/2 - \tilde{E}}{E}\right)\right)}{2}, e = 1, \dots, E, \quad (4.13)$$

де E – загальну кількість епох; $\tilde{E}$ – номер епохи, після якого вагові коефіцієнти починають зазнавати суттєвого коригування.

Така стратегія дає змогу на початкових етапах навчання зосередитися на точному виконанні операторних рівнянь, а з часом – поступово підвищувати вплив даних для досягнення узгодженості з фізичними спостереженнями.

Обчислення градієнтів $\nabla_{\theta^U} L_{N_U}$ та $\nabla_{\theta^{inv}} L_{N_U}$, $\nabla_{\theta^T} L_{N_T}$ та $\nabla_{\theta^{inv}} L_{N_T}$ функції втрат за параметрами нейронної мережі, а також за фізичними величинами виконується з використанням алгоритму автоматичного диференціювання. Для забезпечення належної стабільності навчання та запобігання передчасному оновленню фізичних параметрів застосовується їх попереднє масштабування за допомогою спеціального множника. Це дає змогу “активувати” оновлення фізичних параметрів лише тоді, коли відповідна інформація починає істотно впливати на функціонал втрат.

Оптимізація параметрів здійснюється за допомогою алгоритму Adam із із початковою швидкістю навчання v_i , яка змінюється залежно від номера епохи відповідно до експоненціального затухання:

$$v_e = v_i \mathcal{G}^{\left\lfloor \frac{e}{100} \right\rfloor} \quad (4.14)$$

де v_e – значення коефіцієнта навчання на епосі e ; v_i – початкове значення коефіцієнта навчання; $\mathcal{G}$ – коефіцієнт затухання, що визначає швидкість зменшення темпу навчання, причому $0.9 < \mathcal{G} < 0.99$; $\left\lfloor \cdot \right\rfloor$ – цілочисельне ділення (округлення донизу).

Процедура навчання реалізується у формі ітеративного процесу, що починається з нульової епохи. На кожному кроці виконується послідовне оновлення параметрів нейронної мережі з урахуванням адаптивного

масштабування градієнтів і вагових коефіцієнтів. Навчання триває до досягнення критерію збіжності або допустимої кількості епох.

Отже, описаний підхід забезпечує гнучке керування вагами та параметрами моделі, сприяючи підвищенню стабільності оптимізації й точності у процесі ідентифікації дробових характеристик середовища.

Чисельні експерименти були проведені з метою оцінки ефективності запропонованої адаптивної фрактальної фізично-інформованої нейронної архітектури [135] при розв'язанні прямої задачі тепловологоперенесення, а також задачі ідентифікації дробових показників моделі, що формалізується системою рівнянь (2.7)–(2.11).

Моделювання виконувалося для процесів теплового та вологісного обміну в капілярно-пористому середовищі з фрактальними характеристиками. Як приклад матеріалу обрали деревину зі щільністю $\rho = 460 \text{ кг/м}^3$. Початково-граничні умови формувалися за такими параметрами: температура внутрішньої області зразка становила $T_0 = 20^\circ\text{C}$, температура зовнішнього середовища – $T_c = 70^\circ\text{C}$, початковий вміст води – $U_0 = 0,5 \text{ кг/кг}$, відносна вологість повітря – $\phi = 65\%$, швидкість сушильного агента – $v = 2 \text{ м/с}$. Для симуляції поведінки середовища із ефектами пам'яті та нелокальними властивостями використовувалися такі значення дробових показників: $\alpha = 0,9$, $\beta = 1,9$ $\nu = 0,95$.

На рис. 4.5 показано динаміку функціоналів втрат під час навчання нейромережі для трьох випадків: використання фіксованих вагових коефіцієнтів (а, б) та адаптивного зважування (в). Порівняння графіків цих функцій дає змогу краще зрозуміти, як вагові коефіцієнти впливають на процес навчання.

У першому варіанті функція втрат розраховується зі сталими вагами і тому відображає базовий рівень узгодженості моделі. У випадках (а) та (б) видно, що окремі складові мають різну амплітуду змін і можуть домінувати на окремих етапах оптимізації, що призводить до нерівномірного зменшення відповідних похибок.

складовими функціоналу втрат спостерігається стаке згасання всіх компонентів, що свідчить про досягнення узгодженого балансу між ними. Такий підхід дає змогу на початкових етапах зосередитися на мінімізації залишків основних диференціальних рівнянь поступово зміщуючи акцент на відтворення початкових й граничних умов та узгодження з наявними синтетичними або експериментальними даними. У такий спосіб модель у першу чергу навчається дотримуватись фізичних законів, що описують процес, і лише потім адаптується до наявних спостережень. Це забезпечує динамічну рівновагу між різними джерелами похибок, сприяючи більш рівномірному зменшенню залишкових значень усіх складових функціоналу втрат. У підсумку така стратегія підвищує стабільність збіжності й точність моделі як щодо початково-граничних умов, так і щодо емпіричних чи синтетичних даних.

У межах проведеного дослідження послідовно було реалізовано кілька стратегій для покращення точності та збіжності під час ідентифікації дробових показників. На рис. 4.6 подано процедуру ідентифікації з фіксованими вагами у функціоналах втрат. Криві показують еволюцію оцінених значень параметрів у

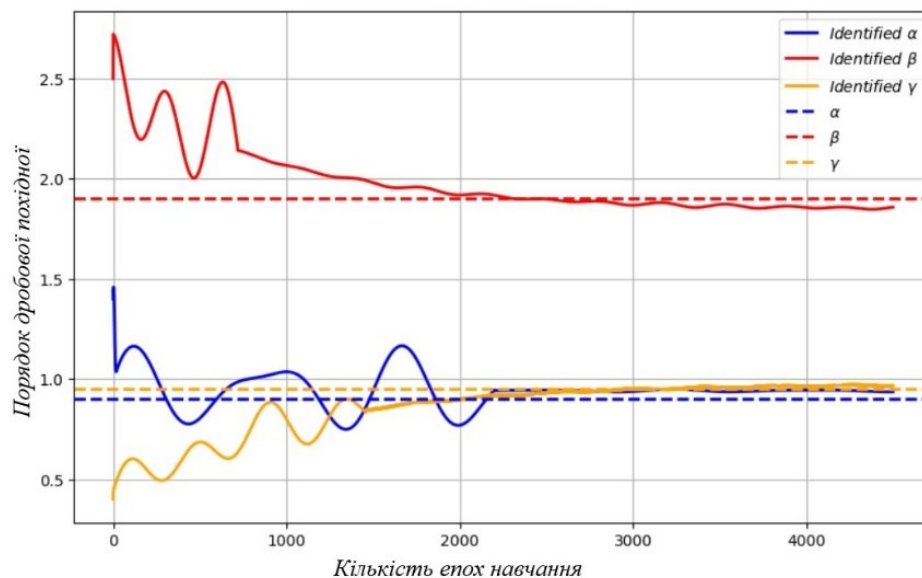


Рисунок 4.6 – Ідентифікація дробових параметрів із включенням штрафного доданка у функцію втрат

процесі навчання моделі протягом приблизно 4000 епох та характеризуються високим рівнем осциляцій у перші етапи навчання. Всі параметри з часом поступово збігаються до своїх референтних значень (пунктирні лінії), однак швидкість і стабільність цього процесу є обмеженими через відсутність динамічного регулювання ваг та відносна похибка даного наближення становить для $\alpha \approx 5\%$, для $\beta \approx 2,7\%$ і для $\gamma \approx 1,5\%$

Результати, представлені на рис. 4.7 показують застосування функціональних перетворень (4.3)-(4.4), які сприяють зменшенню впливу локальних мінімумів за рахунок згладжування топології функціоналу втрат. Застосовуваний перехід до трансформованого простору параметрів сприяє більш стабільному перебігу оптимізації та знижує чутливість до вибору початкових умов. Отже, даний підхід суттєво покращує ідентифікацію: зменшує коливання, забезпечує точніше наближення до реальних значень і знижує ризик «застрягання» у локальних мінімумах.

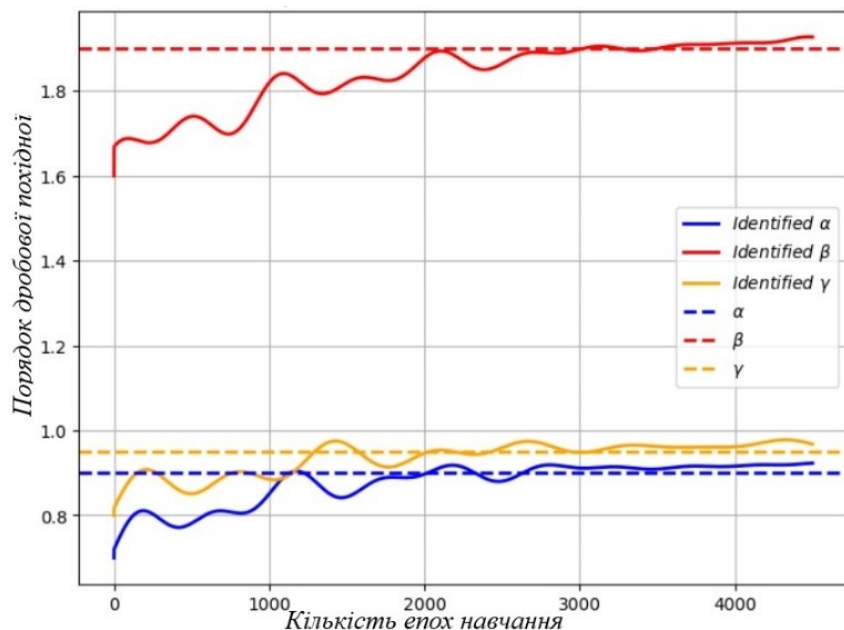


Рисунок 4.7 – Вплив функціональних перетворень на ідентифікацію дробових параметрів

Проте найкращі результати отримано за комбінованого використання функціональних перетворень із адаптивною вагою складових функціоналу втрат відповідно до співвідношень (4.7)–(4.8), що показано на рис. 4.8. Завдяки цьому підходу забезпечується гнучке балансування між вимогами фізичної моделі та доступними даними. На початкових етапах навчання домінує внесок залишків диференціальних рівнянь (2.7)–(2.8), унаслідок чого траєкторії параметрів характеризуються осциляціями навколо цільових значень. Із наближенням до розв’язку зростає вплив емпіричних даних, початкових і граничних умов, що сприяє підвищенню узгодженості результатів, зменшенню градієнтних конфліктів та дає змогу досягти стабілізації приблизно після 1500 епох навчання. Покращується і точність ідентифікації: відносна похибка становить для $\alpha \approx 1,1\%$, для $\beta \approx 1,3\%$ і для $\gamma \approx 0,5\%$.

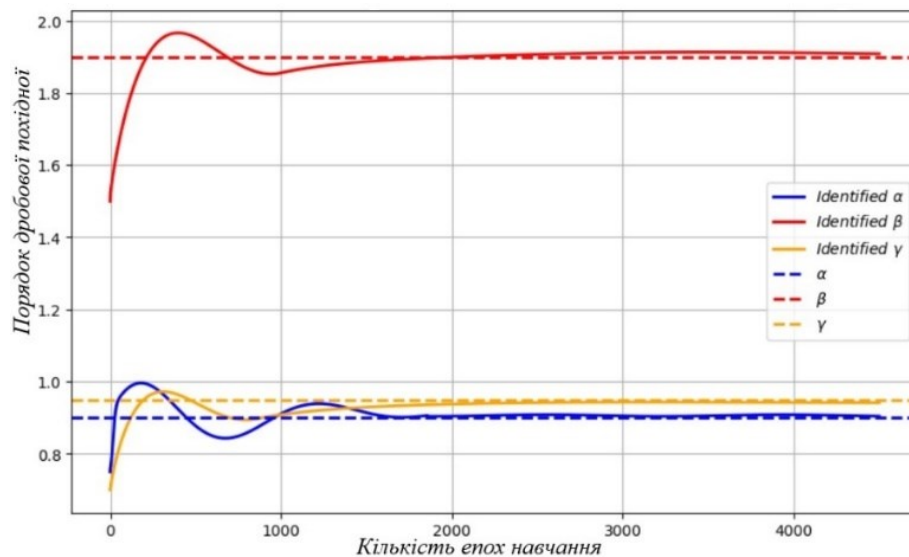


Рисунок 4.8 – Покращення ідентифікації дробових параметрів шляхом використання адаптивних вагових коефіцієнтів у функції втрат

Отже, порівняння графіків на рис. 4.6–4.8 демонструє поступове зниження похибок та покращення стабільності збіжності. Рис. 4.6 відображає базовий варіант без додаткової регуляризації, де спостерігається вплив локальних мінімумів.

Рис. 4.7 демонструє переваги перепараметризації, тоді як рис. 4.8 підтверджує ефективність поєднання двох підходів, що дає змогу досягнути найкращих результатів у рамках задачі ідентифікації дробових параметрів для моделі тепло- та вологоперенесення у фрактальних середовищах.

Загалом, точність визначення дробових параметрів на штучно згенерованих даних, для яких відомі істинні значення, коливається в межах 1,3-5% залежно від використаної стратегії навчання. На якість ідентифікації також суттєво будуть впливати обрана схема апроксимації дробових операторів, кількість колокаційних точок та конкретні значення дробових показників.

Зокрема, при $\alpha \approx 1$ та $\beta \approx 2$ модель збігається швидше і демонструє нижчі похибки, оскільки поведінка системи наближається до класичної дифузії. Натомість при $\alpha < 0,7$ або $\beta < 1,8$ буде посилюватись вплив ефектів пам'яті та нелокальних ефектів, що зумовить потребу у використанні більш тонкої просторово-часової дискретизації та розширеному навчальному наборі даних для забезпечення стабільної та точної ідентифікації параметрів.

4.3. Дослідження впливу L1 та L2 регуляризації на фрактальну нейронну модель

У межах запропонованої фрактальної фізично-інформованої нейронної архітектури (fPINN), яка використовується для моделювання процесів теплового та вологого перенесення з урахуванням дробових операторів, регуляризація відіграє ключову роль у забезпеченні стійкого та збалансованого навчального процесу. Зокрема, застосування L1- та L2-регуляризацій дає можливість ефективно зменшити ризик перенавчання, стабілізувати оптимізацію в умовах складної «жорсткої» постановки задачі, що включає як локальні, так і нелокальні складові, а також покращити узгодження між різними компонентами функції втрат. У межах нашого дослідження було проаналізовано вплив цих двох підходів на точність і

динаміку збіжності моделі. Показано, що такі методи регуляризації, які належать до класу явних, суттєво впливають на градієнтну динаміку, оскільки додають до функціоналу втрат спеціалізовані штрафні компоненти, прямо змінюючи напрямок оновлення параметрів у процесі оптимізації. Це, зі свого боку, сприяє кращому узгодженню моделі як із заданими фізичними законами, так і з емпіричними даними, особливо у випадках наявності фрактальних властивостей середовища.

Один із значимих викликів під час моделювання з використанням фрактальної нейронної мережі полягає в обробці дробових операторів, зокрема похідних Капуто та Грюнвальда–Летнікова. Унаслідок застосування дискретизації функціонал втрат набуває складної багатовимірної структури, чутливої до навіть незначних змін параметрів, що може спричиняти істотні коливання в обчислюваному розв’язку. У цьому контексті регуляризація відіграє важливу стабілізуючу роль: вона згладжує простір оптимізації, знижує чутливість до локальних флуктуацій вагових коефіцієнтів і тим самим підвищує загальну стійкість навчання нейронної мережі.

Додаткову складність створює використання глибоких нейронних мереж із великою кількістю шарів та нейронів у кожному з них. За таких умов існує ризик перенавчання, коли окремі елементи архітектури починають "запам'ятовувати" початкові, граничні або операторні умови, замість виявлення узагальнених закономірностей, що властиві ерідитарним процесам у фрактальних середовищах. Застосування регуляризаційних методів, таких як L1- або L2-регуляризація, дає змогу суттєво знизити ймовірність перенавчання та покращити здатність мережі до узагальнення.

У поєднанні з адаптивними стратегіями масштабування складових функцій втрат, які динамічно змінюють ваги компонентів відповідно до важливості фізичних умов, регуляризація відіграє ще одну важливу роль – вона запобігає ситуації, коли один з модулів мережі (наприклад, пов’язаний із залишками рівняння

або даними) починає домінувати в процесі навчання, зміщуючи оптимізацію в бік локального мінімуму, що не узгоджується з усією постановкою задачі.

Отже, використання регуляризації у архітектурі fPINN є не лише засобом боротьби з перенавчанням, а й важливим елементом балансу, що забезпечує стабільність і точність у складних фізичних сценаріях.

Класична L2-регуляризація додає до функціоналів втрат суму квадратів вагових коефіцієнтів. З урахуванням специфіки двокомпонентної структури нейромережі, що складається з двох незалежних підмереж N_U та N_T , відповідна модифікація функціоналів втрат набуває такого вигляду:

$$L_{N_U}^{L2reg} = L_{N_U} + \eta_U^{L2reg} \sum_l \sum_{i,j} (w_{i,j}^l)^2, \quad (4.14)$$

$$L_{N_T}^{L2reg} = L_{N_T} + \eta_T^{L2reg} \sum_l \sum_{i,j} (w_{i,j}^l)^2, \quad (4.15)$$

де L_{N_U} , L_{N_T} – “базові” функції втрат, що включає операторні, початкові та граничні умови, дані; $w_{i,j}^l$ – ваги на l -му шарі, а η_U^{L2reg} , η_T^{L2reg} – коефіцієнти регуляризації. Застосування L2-регуляризації означає, що модель штрафується за занадто великі значення ваг, що заохочує до гладких (менш коливальних) рішень, тобто регуляризація L2 сприяє більш рівномірному розподілу ваг, не дозволяючи різким стрибкам або сильній концентрації інформації лише в окремих вузлах. Це особливо важливо, оскільки процеси мають континуальний характер (безперервні в часі та просторі), й відповідно небажано, щоб нейромережа генерувала розірвані наближення.

L1-регуляризація вносить до функціоналів втрат суму абсолютних значень вагових коефіцієнтів, що у нашому випадку реалізується окремо для кожної з підмереж N_U та N_T , забезпечуючи індивідуальне штрафування надлишкових параметрів кожної компоненти мережі:

$$L_{N_U}^{L1reg} = L_{N_U} + \eta_U^{L1reg} \sum_l \sum_{i,j} |w_{i,j}^l|, \quad (4.16)$$

$$L_{N_T}^{L1reg} = L_{N_T} + \eta_T^{L1reg} \sum_l \sum_{i,j} |w_{i,j}^l|, \quad (4.17)$$

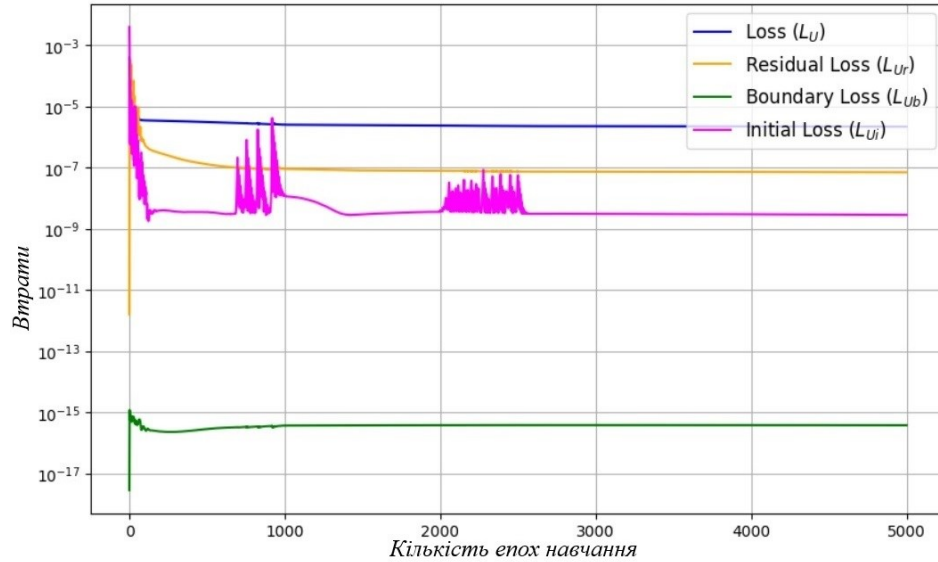
На практиці L1-регуляризація набагато інтенсивніше змушує частину ваг обертатися в нуль, унаслідок чого поліпшується розрідження параметрів мережі. У задачі з дробовими операторами, де інколи існують математично надлишкові шари чи невикористовувані підмережеві зв'язки, L1 може сприяти тому, що мережа акуратно виокремлює найважливіші ознаки, відкидаючи другорядні. Це особливо корисно, коли параметри $U(t, \mathbf{x})$ та $T(t, \mathbf{x})$ підлягають одночасному пошуку і мережа може захоплюватися специфічними комбінаціями ваг.

У роботі проведено дослідження впливу методів регуляризації на навчання моделі фрактальної нейронної мережі, яка застосовувалася для моделювання тепловологоперенесення у капілярно-пористому матеріалі (деревина, густина $\rho = 450 \text{ кг/м}^3$). Початкові умови моделі такі: температура зразка $T_0 = 20^\circ \text{C}$, температура середовища $T_c = 80^\circ \text{C}$, початковий вміст води $U_0 = 0,5 \text{ кг/кг}$, відносна вологість повітря $\varphi = 65\%$, швидкість руху сушильного агента $v = 2 \text{ м/с}$. Для дробових параметрів моделі використовувались значення $\alpha = 0,9$, $\beta = 1,9$, $\nu = 0,95$.

У ході дослідження послідовно реалізовано L1 та L2 регуляризацію, вплив яких на процес навчання мережі з фіксованими ваговими коефіцієнтами проілюстровано графіками функцій втрат і їх складових (рис. 4.9 та рис. 4.10).

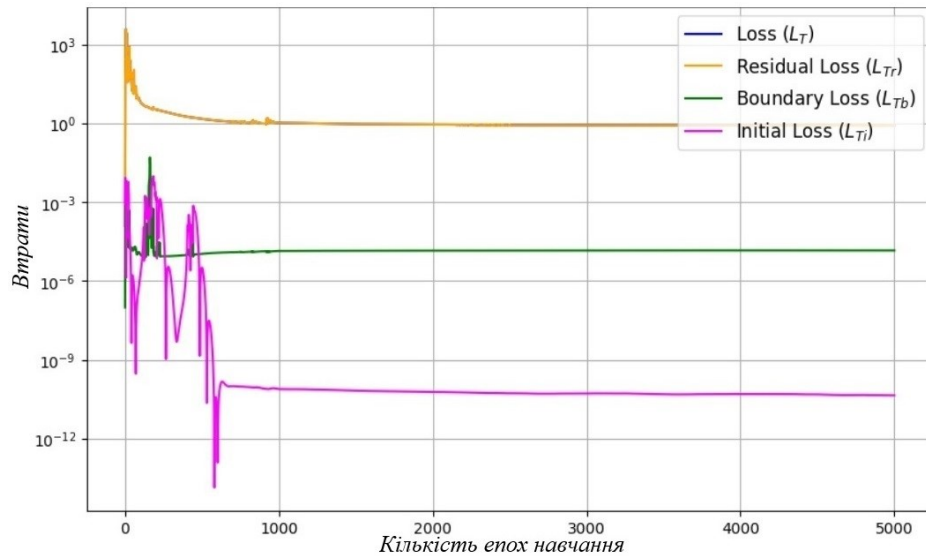
Застосування L1-регуляризації призводить до збільшення варіативності вагових коефіцієнтів мережі, оскільки штраф накладається на абсолютні значення ваг (4.16)-(4.17), що сприяє створенню більш розрідженої структури моделі. Встановлено, що водночас спостерігаються виразніші коливання складових функцій втрат на початкових етапах навчання. Особливо помітно це для втрат, пов'язаних з початковими умовами, де спостерігаються виражені коливання з

високою амплітудою. Після перших кількох сотень епох відбувається стабілізація, хоча остаточні значення похибок залишаються порівняно високими, особливо для залишкових втрат для температури.



а

Рисунок 4.9 – Використання L1-регуляризації: а) вплив L1-регуляризації на функцію втрат L_{N_U} та її складові в моделі fPINNs з фіксованими вагами

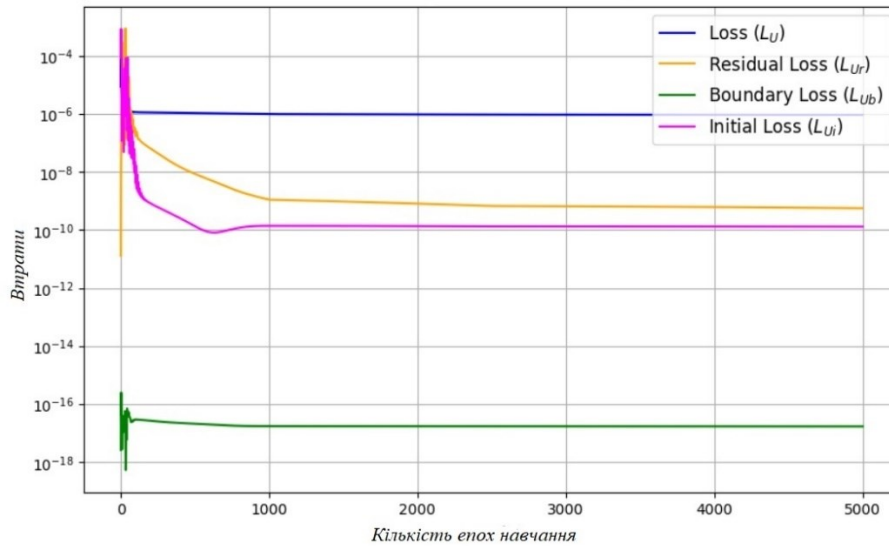


б

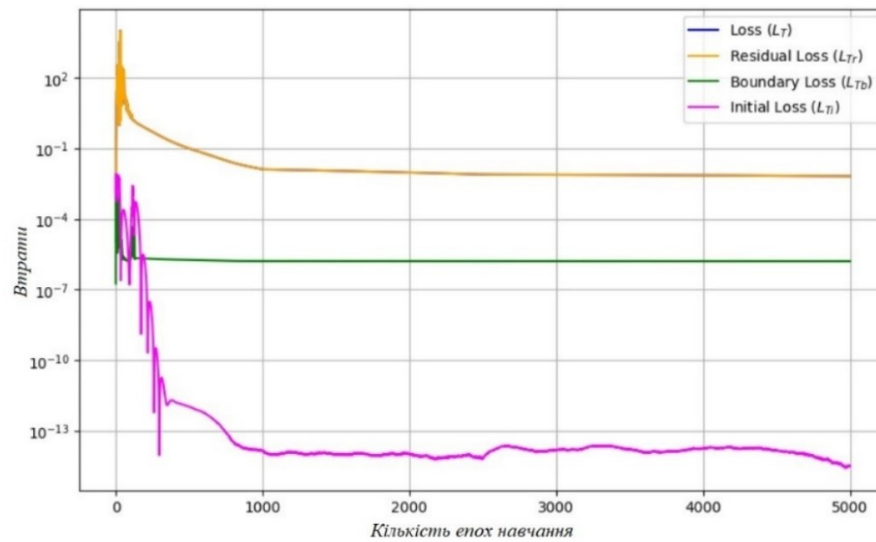
Рисунок 4.9 – Використання L1-регуляризації: б) вплив L1-регуляризації на функцію втрат L_{N_T} та її складові в моделі fPINNs із фіксованими вагами

З іншого боку, L2-регуляризація стабілізує навчальний процес шляхом додавання штрафу за квадратичні значення вагових коефіцієнтів (4.14)-(4.15), що

сприяє загальному зменшенню їхньої величини та запобігає перенавчанню. Завдяки цьому модель стає стійкішою до шумів у даних і покращує її здатність до узагальнення. Оцінка графіків рисунка 4.6 показує, що застосування L2-регуляризації супроводжується стабільнішим та більш рівномірним зниженням похибок, особливо для залишкових складових функції втрат.



а



б

Рисунок 4.10 – Вплив методу L2-регуляризації на модель: а) вплив L2-регуляризації на функцію втрат L_{N_U} та її складові в моделі fPINNs з фіксованими вагами; б) вплив L2-регуляризації на функцію втрат L_{N_T} та її складові в моделі fPINNs із фіксованими вагами.

Отже, за результатами експериментів, L2-регуляризація забезпечує більш стабільну і гладку траєкторію збіжності в процесі навчання нейронної мережі, тоді як L1-регуляризація, незважаючи на свою здатність до генерації розріджених моделей, характеризується більшою варіативністю та стрибкоподібною поведінкою на початкових етапах оптимізації.

Для оцінки ефективності розробленого підходу було використано показник відносної похибки за нормою L2, що дає змогу кількісно порівнювати точність апроксимації вихідних змінних. Відповідні графіки, що ілюструють динаміку зміни відносної середньоквадратичної похибки для змінних $U(t, \mathbf{x})$ та $T(t, \mathbf{x})$, подано на рис. 4.11. Графіки, представлені на рис. 4.11, показують вплив різних типів регуляризації – L1 та L2 – на поведінку моделі, зокрема з погляду рівня відносної середньоквадратичної похибки та збіжності.

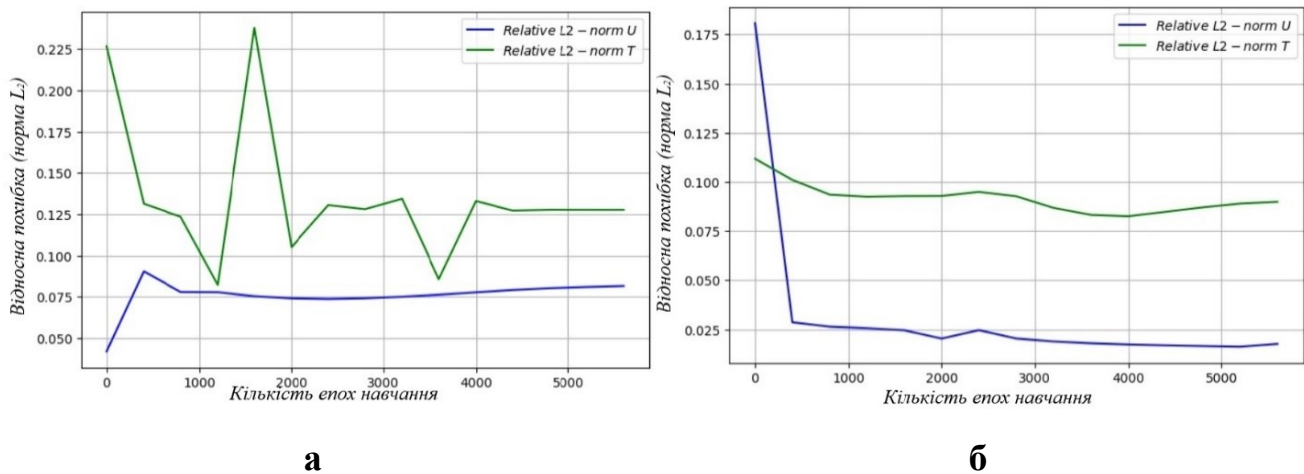


Рисунок 4.11 – Порівняння відносної похибки за нормою L2 для L1- та L2-регуляризацій

У випадку L1-регуляризації (графік а) спостерігається двоїста картина. Для змінної $U(t, \mathbf{x})$ значення похибки залишається в межах 0,05–0,075 протягом більшості епох, що свідчить про достатню стабільність моделі для цієї змінної. Проте для температурного поля $T(t, \mathbf{x})$ характерна нестабільна поведінка: похибка демонструє стрибкоподібні коливання і на окремих етапах досягає рівня 0,225.

Лише на пізніх етапах навчання простежується певне згасання, однак точність залишається помітно нижчою, ніж у випадку з $U(t, \mathbf{x})$. Такі особливості можуть бути зумовлені тим, що L1-регуляризація схильна до формування спарсних структур ваг, що потенційно сприяє різкій перебудові внутрішніх представлень мережі та провокує нестабільність.

L2-регуляризація (графік b), навпаки, демонструє більш керовану та плавну поведінку. Похибка для вологовмісту $U(t, \mathbf{x})$ знижується до низьких значень вже впродовж перших 1000 ітерацій і залишається стабільною до завершення процесу навчання. Температурна змінна $T(t, \mathbf{x})$ також характеризується монотонним зменшенням похибки без коливань – значення поступово наближаються до рівня 0,075–0,1. Такий характер збіжності вказує на те, що L2-регуляризація не лише покращує загальну стабільність навчання, а й сприяє рівномірному розподілу ваг, що позитивно впливає на точність моделі в умовах присутності складної фізичної залежності.

Порівняння ефективності L1- та L2-регуляризації свідчить про те, що кожен із підходів має свої переваги залежно від контексту задачі та особливостей структури нейронної мережі. L1-регуляризацію доцільно застосовувати на початкових етапах навчання, оскільки вона допомагає швидко усунути випадкові залежності, що могли виникнути внаслідок шуму або надмірної складності структури. L2-регуляризація виявилась більш результативною у нашому випадку. Вона забезпечила стабільнішу збіжність і допомогла уникнути застрягання оптимізації в локальних мінімумах; через пригнічення різких змін в градієнтах, сприяла згладженню траєкторії оптимізації. Крім того, підхід з L2-регуляризацією також є більш доцільним, оскільки досліджувана модель характеризується великою глибиною. L2-регуляризація дає змогу уникнути занулення ваг у окремих шарах,

що зберігає апроксимаційний потенціал мережі через уникнення ефекту затухання градієнтів.

Отже, дослідження впливу L1 та L2 регуляризації на нейронні моделі фрактального тепловологоперенесення підтверджують їхню важливу роль у підвищенні стабільності та точності збіжності алгоритмів. L1 дає змогу агресивніше усувати “зайві” ваги, що за певних умов зменшує перенавчання, а L2, за рахунок плавнішого обмеження ваг, сприяє більш рівномірному розподілу параметрів і меншій флуктуації функції втрат, особливо у випадках з підсиленими ерідитарними ефектами.

4.4. Дослідження адекватності моделі на основі оцінки різних типів похибок

Оцінка адекватності фрактальної фізично-інформованої нейромережевої моделі є важливим етапом для перевірки її придатності до практичного застосування. Під адекватністю у даному контексті розуміється не лише чисельна точність апроксимації, а й узгодженість поведінки моделі з фізичними закономірностями, притаманними реальним процесам теплового та вологого перенесення у капілярно-пористих середовищах із фрактальною структурою.

У роботі проведено дослідження похибок, яке охоплює аналіз абсолютної та відносної похибки за метриками (3.1)-(3.2), а також графічну верифікацію моделі шляхом зіставлення її результатів із експериментальними даними. Для цього використовували експериментальні спостереження вологовмісту деревини під час термічної обробки, які описано в [207, 188, 28, 192, 206, 146, 145].

Модельна задача формувалась як одновимірна постановка для вологовмісту $U(t, x)$, що була виведена як частковий випадок із загальної двовимірної моделі тепломасоперенесення. Для симуляції використовували такі початкові та граничні умови: $T_0 = 20^\circ C$, температура середовища $T_c = 120^\circ C$, початковий вміст води

$U_0 = 1,1$ кг/кг, відносна вологість середовища $\phi = 60\%$, швидкість агента сушіння $v = 2$ м/с, густина матеріалу $\rho = 670$ кг/м³. Фрактальні параметри, що характеризують часову пам'ять та просторову нелокальність, були підібрані як $\alpha = 0,928, \beta = 1,936, \gamma = 0,95$ – такі значення відображають мультифрактальну поведінку пористої структури та уповільнені ефекти еволюції вологовмісту.

На рис. 4.12 представлено порівняння результатів моделювання нейромережею з експериментальними даними [207].

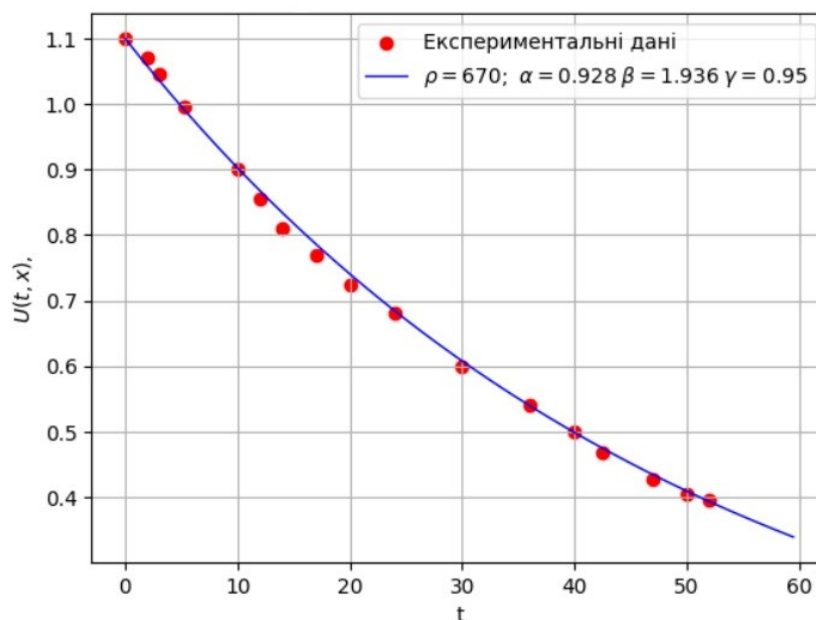


Рисунок 4.12 – Зміна вологовмісту у зрізці з врахуванням фрактальної структури матеріалу та експериментальних даних

Спостерігається характерна крива релаксації вологовмісту, що апроксимує експериментальні дані у всьому часовому проміжку, включно з початковим етапом, коли відбуваються найшвидші зміни.

Відносна похибка між прогнозом моделі та вимірними величинами не перевищує 0,37%, що свідчить про ефективну генералізаційну здатність мережі. А відносна похибка в L2- нормі складає 0,99%.

Крім кількісних показників, якісні аспекти моделі також свідчать про її адекватність: динаміка розподілу вологи, уповільнення дегідратації, відповідність

характеру кривих – усе це узгоджується із теоретичними уявленнями про аномальну дифузію у фрактальних середовищах.

Отже, врахування дробових похідних забезпечує достовірну реконструкцію реальних фізичних процесів. Це дає можливість розглядати описану модель як ефективний інструмент для аналізу тепломасообмінних явищ у природних композитних матеріалах.

4.5. Дослідження впливу архітектури мережі на точність фрактальної нейронної моделі

Для ефективного застосування фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі (fPINN) у моделюванні процесів теплового та вологого перенесення у середовищах з фрактальною організацією важливим є вибір оптимальної архітектури мережі. Архітектурні параметри, зокрема кількість шарів, кількість нейронів у кожному шарі, типи активаційних функцій, наявність незалежних мереж для окремих фізичних величин безпосередньо впливають на точність наближення, збіжність навчання, обчислювальні витрати й здатність моделі узагальнювати складну фізичну динаміку.

У цьому підрозділі здійснено аналіз впливу архітектурних характеристик фрактальних фізично-інформованих нейронних мереж на точність моделювання взаємопов'язаних полів температури $T(t, \mathbf{x})$ і вологовмісту $U(t, \mathbf{x})$ для задач тепловологоперенесення в капілярно-пористих фрактальних середовищах. Особлива увага приділяється ролі кількості прихованих шарів і нейронів на кожному з них як одних з ключових чинників, що впливають на збіжність і точність апроксимації. Інші параметри моделі, зокрема типи активаційних функцій, кількість нейромереж, структура їх взаємозв'язків і формування функціоналів втрат, розглядалися в попередніх підрозділах (активаційні функції – у

підрозділі 4.1, структура мереж та функції втрат – у розділі 2), що забезпечує системний підхід до оцінювання ефективності обраної архітектури.

Метою аналізу було виявлення оптимальних конфігурацій мережі шляхом зміни її глибини (кількості прихованих шарів) та ширини (кількості нейронів на кожному шарі), а також дослідження впливу зазначених архітектурних параметрів на результати чисельного моделювання. Зокрема, реалізовано серію чисельних експериментів для архітектур, які включали від 4 до 12 прихованих шарів, водночас кількість нейронів у кожному шарі варіювалася в межах від 10 до 160.

Оцінювання якості одержаних результатів проводилося шляхом розрахунку відносної середньоквадратичної похибки, яка характеризує відхилення отриманих розв'язків від еталонних значень. Узагальнені результати досліджень наведено на рис. 4.13, що відображає залежність точності моделі від архітектурних параметрів. Отримані результати дали змогу виявити закономірності, які свідчать про важливість збалансованого вибору глибини і ширини мережі з метою забезпечення максимальної точності розв'язання задач тепловологоперенесення.

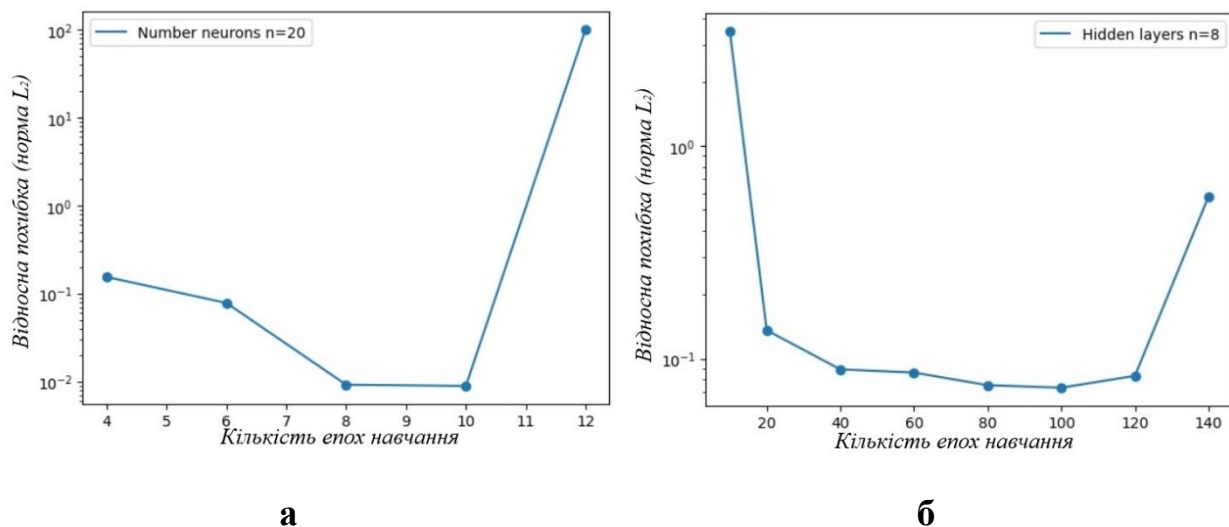


Рисунок 4.13 – Вплив ширини та глибини нейромережі на точність моделі:
а) Вплив глибини мережі; б) Вплив ширини мережі.

Згідно з представленими на графіку рис. 4.13, а даними, можна відзначити, що збільшення кількості прихованих шарів позитивно впливає на точність

результатів лише до певної межі. З початкових 4-х прихованих шарів до 8-ми спостерігається стабільне зменшення величини похибки, що свідчить про покращення здатності мережі до апроксимації складних залежностей між змінними, що характеризують тепловологоперенесення у фрактальних матеріалах. За досягнення межі 8-10 шарів відносна похибка мінімізується, однак за подальшого збільшення глибини мережі (11-12 шарів) помилка стрімко зростає, перевищуючи початкові значення. Це можна пояснити виникненням проблеми «затухання» або «вибуху» градієнтів, коли мережа стає надмірно складною для стабільного навчання. Отже, оптимальною глибиною мережі для розглядуваних задач є 8 шарів.

Графік на рис. 4.13, б відображає залежність точності від кількості нейронів на кожному шарі при фіксованій кількості прихованих шарів. Результати показують, що зі збільшенням кількості нейронів відносна похибка поступово зменшується, досягаючи мінімуму при значенні близько 100 нейронів. Це пояснюється тим, що достатня кількість нейронів забезпечує необхідну апроксимаційну здатність, даючи змогу нейромережі повніше описувати складні взаємозв'язки між параметрами задачі. Однак після досягнення цього значення спостерігається різке зростання похибки при подальшому збільшенні кількості нейронів до 120–160. Подібне явище вказує на перенавчання мережі через надмірну кількість параметрів, що призводить до втрати узагальнювальної здатності.

З практичної точки зору варто враховувати також обчислювальну складність та час навчання нейронних мереж. Як засвідчили результати досліджень, нейронна мережа із 100 нейронами на шар характеризується найбільшою точністю, проте вимагає більших обчислювальних витрат порівняно з архітектурою, що має 40 нейронів на шар. Порівняння цих двох архітектур виявило, що зменшення кількості нейронів від 100 до 40 дає можливість скоротити час навчання моделі, водночас погіршення точності є незначним і є в межах прийнятних величин для досліджуваної задачі. Враховуючи це, оптимальною архітектурою для практичного

застосування визначено нейромережу з 8 прихованими шарами по 40 нейронів у кожному шарі.

Отже, проведені дослідження підтвердило важливість вибору архітектури нейромережі для досягнення оптимального співвідношення між точністю розв'язку та обчислювальною складністю. Визначені оптимальні параметри моделі забезпечують високу точність моделювання тепловологоперенесення у фрактальних нейромережах, що відповідає вимогам практичного застосування.

4.6. Аналіз впливу фрактальних характеристик середовища на величини температури та вологості

Під час дослідження впливу фрактальних характеристик капілярно-пористих матеріалів на динаміку температурного та вологісного полів встановлено низку важливих закономірностей, що мають значення для глибшого розуміння поведінки матеріалів у технологічних процесах, зокрема під час гідротермічної обробки. Врахування фрактальної природи структури є принципово важливим, оскільки реальні матеріали – зокрема деревина – мають складну морфологію з властивою їй просторовою неоднорідністю, анізотропією, реологічними властивостями, гідрофобністю, нелокальністю взаємодій, а також вираженими ефектами спадковості.

У рамках проведеного дослідження здійснено всебічний аналіз впливу фрактальних властивостей капілярно-пористих анізотропних матеріалів на динаміку теплових і вологісних процесів. Чисельні експерименти реалізовано на основі розробленої фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі, структура та принципи побудови якої детально викладені в розділі 2. На цьому етапі моделювання вивчали поведінку «базової» конфігурації моделі – без урахування впливу адаптивного коригування вагових коефіцієнтів у функціоналах втрат.

Для моделювання процесів тепло- та вологоперенесення задали наступні параметри: початкова температура зразка $T_0=20$, кінцева температура $T_c=70^\circ\text{C}$ початковий вміст води в матеріалі $U_0=0,4$ кг/кг, відносна вологість повітря $\varphi=60\%$ та швидкість сушильного агента $v=2$ м/с. Значення інших параметрів, необхідних для математичної постановки задачі, а також відповідні емпіричні залежності, визначали на основі результатів експериментальних досліджень, наведених у [207, 188, 28, 206, 192].

Якщо не зазначено окремо, у чисельному моделюванні використовувалися такі значення дробових показників: $\alpha=0,82$, $\beta=1,92$, $\nu=0,9$ та густина матеріалу зразка $\rho=500$ кг/м³. Навчальний набір для нейромережі складався з 1000 колокаційних точок, рівномірно розподілених у внутрішній розрахунковій області, а також додаткових точок на її межах. Такий підхід дав можливість забезпечити достатнє покриття області моделювання та коректне врахування початково-граничних умов [131].

Температурна динаміка та зміна вологовмісту в капілярно-пористих фрактальних матеріалах під час гідротермічної обробки значно залежать від густини матеріалу, яка визначає рівень пористості. З метою аналізу впливу цього параметра проведено чисельне моделювання для матеріалів із різною густиною: 500, 520, 650, 670 та 700 кг/м³. Результати обчислень щодо зміни вологості наведено на рис. 4.14.

Аналіз графіка показує чітку залежність швидкості вологовиділення від густини матеріалу. Отримані дані демонструють, що матеріали з меншою густиною характеризуються швидшим зменшенням вологовмісту. Це пояснюється тим, що їхня структура, яка має фрактальну природу, забезпечує вищу проникність та сприяє прискореному переносу води. Водночас матеріали з меншою густиною демонструють повільніше відновлення стану, що зумовлено властивостями самоорганізації та неоднорідністю структури. Отриманий результат узгоджується

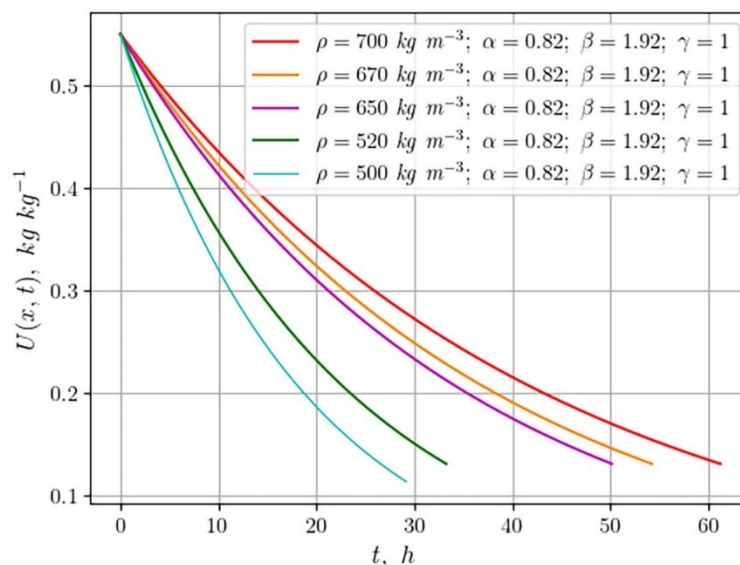


Рисунок 4.14 – Зміна вологовмісту у взірці залежно від густини матеріалу

з фізичними властивостями пористих матеріалів: матеріали з меншою густиною зазвичай мають більшу пористість, що сприяє полегшеному транспорту вологи через капіляри. Вища густина означає меншу кількість і розмір пор, що сповільнює процес вологоперенесення.

У рамках подальшого аналізу досліджено вплив параметрів навколишнього середовища на зміну температурного та вологісного режимів у зразку фрактального капілярно-пористого матеріалу. На рис. 4.15 представлено залежність температурного розподілу в зразку з густиною 460 кг/м^3 за різних температур сушильного агента (70°C , 80°C та 90°C).

Виявлено, що підвищення температури агента зумовлює інтенсивніше прогрівання внутрішніх шарів зразка. Особливої уваги заслуговує вплив фрактальних властивостей матеріалу, які змодельовані шляхом введення дробових показників α та β . Зі збільшенням температурного режиму їх роль у формуванні температурного профілю стає більш вираженою.

Результати чисельного експерименту також свідчать про те, що застосування дробового порядку похідної β сприяє швидшому прогріванню центральної частини

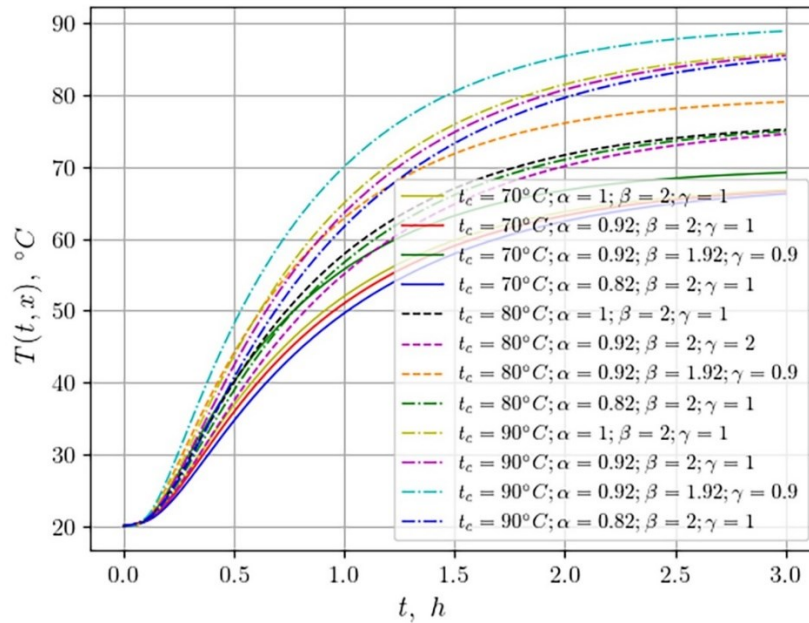


Рисунок 4.15 – Зміна температури у взірці залежно від

температури навколишнього середовища та фрактальних показників матеріалу

зразка в порівнянні з випадком, коли використовується цілий порядок похідної. Так, температура в центрі швидше досягає значення близько 90°C у моделі з фрактальною структурою, що, відповідно, прискорює процес дегідратації. Різниця температур між моделями з фрактальним та класичним підходами становила близько 4°C , що свідчить про значний вплив структурної нелокальності на теплову поведінку матеріалу. Варто також зазначити, що зменшення дробового показника β суттєво прискорює досягнення температури сушильного агента, тоді як зниження значення α , навпаки, дещо уповільнює нагрів, затримуючи видалення вологи. Така динаміка є наслідком ефектів пам'яті та дифузійної повільності, притаманних дробовим моделям.

З фізичної точки зору, параметр β в моделі відповідає за ступінь просторової нелокальності – тобто, наскільки тепловий потік у точці залежить не лише від локального градієнта температури, а й від розподілу температури на деякій відстані. Зменшення β означає зростання цієї нелокальності, що еквівалентно розширенню області впливу, з якої теплова енергія може поширюватись. Унаслідок цього тепло

швидше досягає внутрішніх зон зразка – процес стає “більш глобальним” і менш залежним від локального перепаду температур.

Параметр α , натомість, описує ефекти пам’яті – як поточна швидкість зміни температури залежить від усієї історії зміни температури в точці. Менші значення α означають сильнішу пам’ять і пригнічують миттєву реакцію системи, що уповільнює нагрівання, особливо в початковій фазі процесу.

На рис. 4.16 подано результати чисельного моделювання, що ілюструють зміну вологовмісту капілярно-пористого матеріалу з густиною 500 кг/м^3 під час гідротермічної обробки за різних температур сушильного агента (60°C , 80°C та 100°C) з урахуванням фрактальної природи структури середовища. Проведений аналіз показує, що під час включення дробово-диференціальних параметрів у математичну модель спостерігається пришвидшення процесу вологовиділення. Це свідчить про те, що за умов фрактальної структурованості матеріалу, вологість у пористому середовищі зменшується інтенсивніше, а криві вологовмісту асимптотично прямують до рівноважного значення, що відповідає стаціонарному стану.

Отже, загальна тенденція представлена на рис. 4.16 говорить про те, що чим вища температура сушильного агента, тим швидше відбувається видалення вологи. Це є фізично закономірним, оскільки за підвищеної температури зростає тиск насиченої пари і швидкість дифузії, що інтенсифікує процес сушіння. Криві з фрактальними параметрами демонструють прискорене зниження вологості у порівнянні з класичною моделлю при кожному температурному режимі. Це свідчить про суттєвий вплив фрактальної структури матеріалу на масоперенос. Зокрема, зменшення параметра β підсилює просторову нелокальність, тобто рух вологи в точці залежить не лише від локального градієнта, а й від умов у сусідніх ділянках матеріалу. Це сприяє швидшій передачі вологи з глибини матеріалу до її

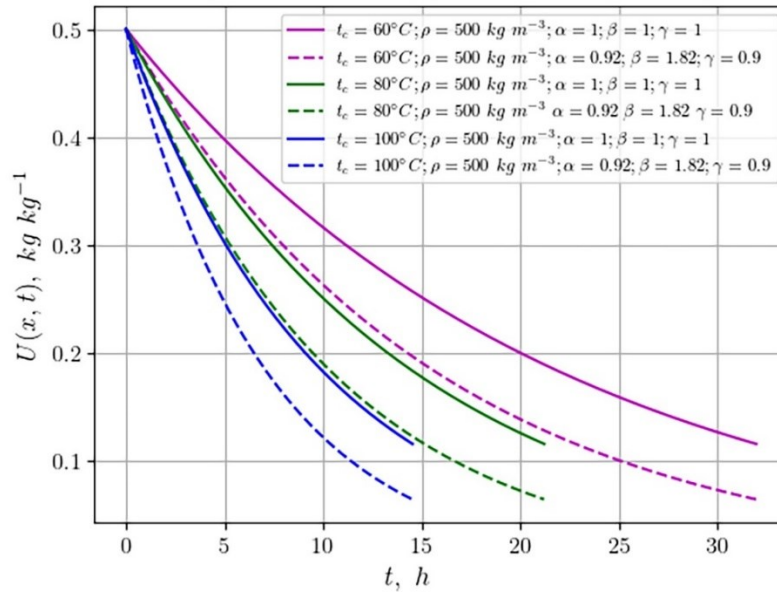


Рисунок 4.16 – Зміна вологості у взірці залежно від температури навколишнього середовища та фрактальних показників матеріалу

поверхні та її подальшому видаленню. Отже, фрактальна модель, на відміну від класичної, краще відображає реальні механізми масообміну в анізотропних середовищах.

Додатково в межах цього дослідження розглянуто вплив відносної вологості сушильного агента на зміну вологості матеріалу. Математичне моделювання здійснювалось для взірця з густиною 500 кг/м³, за постійної температури середовища 70 °C і швидкості сушильного агента $v = 2$ м/с. Значення відносної вологості варіювались на рівнях 50%, 60% та 70%, а результати візуалізовано на рис. 4.17.

Отримані дані чітко демонструють, що зі зменшенням відносної вологості повітря відбувається прискорення вологовиділення. Це пояснюється тим, що при нижчій вологості навколишнього середовища зростає градієнт парціального тиску водяної пари між порами матеріалу та повітрям, що інтенсифікує дифузію вологи назовні. Водночас вплив фрактальних властивостей матеріалу на зміну вологовмісту стає менш значущим, що вказує на домінування умов зовнішнього середовища у визначенні динаміки процесу. Водночас, фрактальна модель показує

швидше зменшення вологості в порівнянні з класичною моделлю, незалежно від рівня відносної вологості.

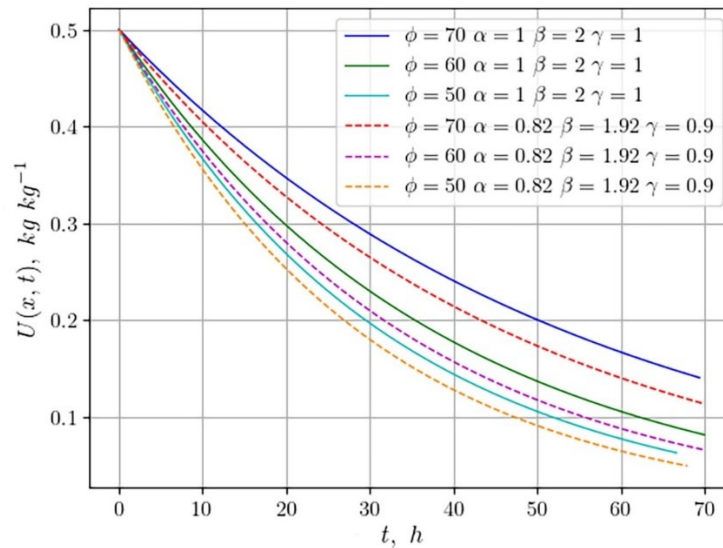


Рисунок 4.17 – Зміна вологості у взірці залежно від відносної вологості навколишнього середовища та фрактальних показників матеріалу

Для подальшого поглиблення аналізу досліджено залежність зміни вологовмісту від анізотропії теплофізичних характеристик матеріалу. Зокрема, у математичній моделі (1)–(5) враховувалися коефіцієнти теплопровідності, вологопровідності, теплообміну, вологообміну, рівноважної вологості, густини та термоградієнтного коефіцієнта. Усі ці параметри вважалися функціями температури та вологості, а їх числові значення отримано на основі залежностей, поданих у джерелі [31].

Результати моделювання, наведені на рис. 4.18, засвідчили, що збільшення значень анізотропних коефіцієнтів теплопровідності та вологопровідності сприяє інтенсивнішому вологовиділенню, що призводить до зменшення залишкового вологовмісту в матеріалі. Варто підкреслити, що вплив фрактальної структури на динаміку вологості виявляється більш помітним при менших значеннях вищезазначених коефіцієнтів, тоді як за умов високої анізотропії цей вплив помітно знижується.

Поєднання високої теплопровідності λ та вологопровідності α формує умови для більш активного й рівномірного прогрівання зразка, що сприяє швидшому переносу вологи до поверхні. Водночас наявність фрактальних параметрів у моделі суттєво впливає на динаміку. Отже, моделі з дробовими значеннями показують помітно швидше зменшення вологовмісту, особливо на ранніх етапах процесу, що вказує на домінування нелокальних ефектів у перенесенні тепла і вологи. Саме завдяки цьому моделі з дробовими параметрами демонструють кращу адаптацію до складної структури матеріалу.

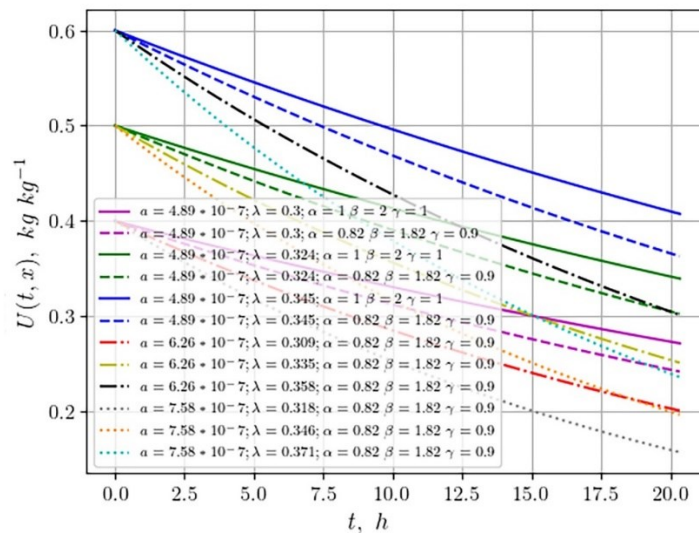


Рисунок 4.18 – Зміна вологості у зрізці залежно від анізотропних коефіцієнтів вологопровідності й теплопровідності та фрактальних показників матеріалу

Результати чисельних експериментів показали істотну залежність процесів тепловологоперенесення від фрактальних параметрів моделі – дробового порядку похідної за часом α та за просторовими координатами β та γ . Зменшення дробового порядку α , що відповідає похідній Капуто, супроводжувалося підсиленням ерідитарних ефектів, які призводять до уповільнення процесу перенесення тепла та вологи. Це пояснюється тим, що дробові похідні Капуто враховують історію станів системи, що призводить до ефекту затримки реакції матеріалу на зовнішні температурні та вологісні впливи. Натомість зменшення

просторового дробового параметра β зумовлює нелокальний характер перенесення, завдяки чому волога ефективніше дифундує у просторі матеріалу.

Отже, аналіз впливу фрактальних параметрів на процеси тепловологоперенесення підтвердив важливість урахування дробових похідних у моделях капілярно-пористих матеріалів. Отримані результати свідчать про те, що вибір значень дробових параметрів α та β має значний вплив на точність опису фізичних явищ, зокрема процесу термічної обробки деревини. Це дає змогу враховувати складні ефекти, пов'язані з нелокальністю та пам'яттю матеріалів, і, як наслідок, створювати точніші та фізично адекватні моделі, що можуть бути застосовані у технологічних процесах.

Висновки до IV розділу

У результаті проведеного моделювання підтверджено, що запропонована фрактальна фізично-інформована нейронна мережа (fPINN) є ефективним інструментом для розв'язання прямих задач теплового та вологого перенесення у капілярно-пористих середовищах із фрактальною структурою. На відміну від класичних підходів, модель fPINN дає змогу не лише апроксимувати розв'язки рівнянь з дробовими похідними, але й ідентифікувати дробові параметри (показники α , β , ν), що визначають ступінь пам'яті та просторової нелокальності матеріалу.

Виконано дослідження впливу архітектурних параметрів моделі (кількості шарів, кількості нейронів, типів активаційних функцій) на точність моделювання та збіжність навчання. У результаті встановлено оптимальні конфігурації, які забезпечують баланс між обчислювальною складністю та якістю апроксимації, що підвищує ефективність моделі для практичного застосування.

Здійснено порівняльний аналіз ефективності регуляризаційних стратегій. Було встановлено, що використання L2-регуляризації стабілізує процес навчання та

зменшує перенавчання у більшості тестованих сценаріїв, а також на відміну від L1-регуляризації, проявляє певні переваги у випадках обмежених за обсягом даних.

Показано ефективність застосування адаптивного масштабування ваг у функції втрат, що дає змогу стабілізувати навчання моделі та зменшити ризик перенавчання при обмеженій кількості спостережень, що особливо важливо в умовах неповної або часткової інформації про процес.

Уперше продемонстровано ефективність підходу fPINN для вирішення обернених задач – зокрема, ідентифікації дробових показників лише на основі часткових експериментальних або синтетичних даних. Це розширює функціональні можливості моделі від апроксимаційного до діагностичного інструменту.

Отримані результати демонструють потенціал запропонованої моделі у контексті її розширення на багатовимірні задачі (2D, 3D), включення додаткових фізичних ефектів (теплопружності, фазових переходів), а також інтеграції з експериментальними установками для оновлення параметрів у режимі реального часу.

Отже, розроблений підхід на основі fPINN формує потужний інструментарій для дослідження складних фізичних процесів у середовищах із фрактальною геометрією, забезпечує високу точність, гнучкість та інтерпретованість результатів, і створює перспективну основу для подальших досліджень у галузі обчислювальної фізики, машинного навчання та інженерного моделювання.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішено актуальне наукове завдання моделювання процесів тепломасоперенесення в анізотропних середовищах з фрактальною структурою із застосуванням фрактальних фізико-інформованих нейронних мереж для підвищення ефективності технологічних процесів теплового оброблення матеріалів.

Розроблено метод синтезу фрактальної фізично-інформованої нейромережевої моделі (fPINN) процесів тепломасоперенесення у капілярно-пористих середовищах з фрактальною структурою, що поєднує апарат дробового числення з глибинним навчанням для відображення фізики тепломасообміну у пористих матеріалах з фрактальною структурою. Використання дробових похідних Капуто (за часом) і Грюнвальда–Летнікова (за просторовими координатами) дало змогу коректно врахувати ефекти пам'яті та просторової нелокальності у динаміці перенесення.

Розроблено нову архітектуру нейромережевої моделі з роздільним представленням температури та вологості, що реалізується через дві окремі підмережі з відповідними функціями втрат. Така архітектура дає змогу врахувати взаємозалежність фізичних полів та підвищити ефективність моделювання пов'язаних процесів теплового і вологого перенесення у фрактальних середовищах.

Отримано різницеві схеми для апроксимації функцій втрат у fPINN-моделі, що дає змогу враховувати дробові похідні за часовою та просторовими координатами й інтегрувати фізичні залежності процесів тепломасоперенесення у фрактальних середовищах безпосередньо в процес оптимізації.

Розроблено метод поетапного навчання фрактальної нейронної мережі, що передбачає покрокову оптимізацію кожної з підмереж із незалежними функціями втрат – для вологості та температури. Запропонований підхід забезпечує збіжність навчання за умов розбалансованих градієнтів, даючи змогу досягати значень

функціоналів втрат порядку 10^{-6} для вологості та 10^{-1} для температури для моделі з фіксованими вагами.

Адаптовано метод автоматичного масштабування вагових коефіцієнтів у багатокомпонентних функціях втрат, що забезпечує динамічне балансування впливу кожної фізичної складової під час навчання нейромережі. Запропонований підхід сприяє зменшенню залишкової похибки, підвищенню точності моделі та запобіганню перенавчанню.

Проведено числове моделювання на синтетичних даних і валідацію моделі на основі результатів, отриманих класичним методом скінченних різниць. Порівняння показало високу точність моделі fPINN, особливо в задачах із сильним впливом ефектів пам'яті. Відносна похибка у більшості експериментів не перевищувала 1–3%.

Розроблено нейромережевий метод ідентифікації дробових показників моделі тепломасоперенесення, що забезпечує точність на рівні 1,3–5% залежно від обраної стратегії навчання. Запропонований підхід дає змогу використовуючи обмежені синтетичні або експериментальні дані визначити параметри еридитарності та просторової нелокальності, що дає можливість досліджувати властивості матеріалів і середовищ без необхідності повного апаратного чи експериментального забезпечення.

Розроблене програмне забезпечення є інструментом для дослідження тепломасоперенесення у середовищах з фрактальною структурою, має модульну структуру, візуальний інтерфейс на базі wxPython, і дає можливість здійснювати моделювання процесів перенесення тепла і вологи з урахуванням анізотропії, ефектів довготривалої пам'яті та просторової нелокальності. Відсутність сітки дискретизації та використання навченої нейромережевої моделі, дають змогу миттєво отримувати значення температури та вологовмісту в довільній точці області та в будь-який момент часу.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Adame, L. D., Gutiérrez-Torres, C. d. C., Figueroa-Espinoza, B., Barbosa-Saldaña, J. G., Jiménez-Bernal, J. A. A mechanical picture of fractal Darcy's law / L. D. Adame, C. d. C. Gutiérrez-Torres, B. Figueroa-Espinoza, J. G. Barbosa-Saldaña, J. A. Jiménez-Bernal // *Fractal and Fractional*. – 2023. – Vol. 7, No. 9. – Article No. 639.
2. Adler, P. M. Fractal porous media / P. M. Adler // in: Bear, J., Corapcioglu, M. Y. (eds.) *Transport Processes in Porous Media*. – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1990. – P. 723–743.
3. Adler, P. M. *Porous Media: Geometry and Transports* / P. M. Adler. – Stoneham, MA: Butterworth-Heinemann, 1992. – 221 p.
4. Ai, Z. Y., Gui, J. C., Mu, J. J. 3-D time-dependent analysis of multilayered cross-anisotropic saturated soils based on the fractional viscoelastic model / Z. Y. Ai, J. C. Gui, J. J. Mu // *Applied Mathematical Modelling*. – 2019. – Vol. 76. – P. 172– 92.
5. Albidah, A. B. Application of Riemann–Liouville derivatives on second-order fractional differential equations: The exact solution / A. B. Albidah // *Fractal and Fractional*. – 2023. – Vol. 7, No. 12. – Article No. 843.
6. Alesemi, M. Numerical analysis of fractional-order parabolic equation involving Atangana–Baleanu derivative / M. Alesemi // *Symmetry*. – 2023. – Vol. 15, No. 1. – Article No. 237.
7. Al-Salti, N., Karimov, E., Sadarangani, K. On a differential equation with Caputo–Fabrizio fractional derivative of order $1 < \beta \leq 2$ and application to mass–spring–damper system / N. Al-Salti, E. Karimov, K. Sadarangani // *Progress in Fractional Differentiation and Applications*. – 2016. – Vol. 2, No. 4. – P. 257–263.
8. Amini, D., Haghighat, E., Juanes, R. Physics-informed neural network solution of thermo–hydro–mechanical processes in porous media / D. Amini, E. Haghighat, R. Juanes // *Journal of Engineering Mechanics*. – 2022. – Vol. 148, No. 11. – Article No. 04022070.

9. Bai, Y., Qin, Y., Lu, X., et al. Fractal dimension of particle-size distribution and their relationships with alkalinity properties of soils in the western Songnen Plain, China / Y. Bai, Y. Qin, X. Lu et al. // *Scientific Reports*. – 2020. – Vol. 10. – Article No. 20603.
10. Balankin, A. S. Stresses and strains in a deformable fractal medium and in its fractal continuum model / A. S. Balankin // *Physics Letters A*. – 2013. – Vol. 377, Issue 38 (15 November). – P. 2535–2541.
11. Berardi M., Difonzo F. V., Icardi M. Inverse Physics-Informed Neural Networks for transport models in porous materials // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2025. – Vol. 435. – Article ID: 117628.
12. Berger J., Dutykh D., Mendes N. On the optimal experimental design for heat and moisture parameter estimation [Электронный ресурс] / Julien Berger, Denys Dutykh, Nathan Mendes. – 2016. – Режим доступа: <https://hal.science/hal-01334414v1>
13. Brenner, H. Dispersion resulting from flow through spatially periodic porous media / H. Brenner // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. – 1980. – Vol. 297. – P. 81–133.
14. Cai, J., Huai, X. L. Study on fluid–solid coupling heat transfer in fractal porous medium by lattice Boltzmann method / J. Cai, X. L. Huai // *Applied Thermal Engineering*. – 2010. – Vol. 30. – P. 715–723.
15. Cai, S., Wang, Z., Wang, S., Perdikaris, P., Karniadakis, G. E. Physics-informed neural networks for heat transfer problems / S. Cai, Z. Wang, S. Wang, P. Perdikaris, G. E. Karniadakis // *Journal of Heat Transfer*. – 2021. – Vol. 143, No. 6. – Article No. 060801.
16. Cao, J., Kamdem, D. P. Moisture adsorption thermodynamics of wood from fractal-geometry approach / J. Cao, D. P. Kamdem // *Holzforschung*. – 2004. – Vol. 58, No. 3. – P. 274–279. – DOI: <https://doi.org/10.1515/HF.2004.042>.

17. Capellman, J. *Hands-On Machine Learning with ML.NET: Getting started with Microsoft ML.NET to implement popular machine learning algorithms in C#* / Jarred Capellman. – Birmingham: Packt Publishing, 2020. – ISBN 978-1789801781.
18. Carr, E. J., Turner, I. W., Perré, P. A dual-scale modelling approach for drying hygroscopic porous media / E. J. Carr, I. W. Turner, P. Perré // *SIAM Multiscale Modeling and Simulation*. – 2013. – Vol. 11. – P. 362–384.
19. Chen, F., Sondak, D., Protopapas, P., Mattheakis, M., Liu, S., Agarwal, D., Di Giovanni, M. NeuroDiffEq: a Python package for solving differential equations with neural networks / F. Chen, D. Sondak, P. Protopapas, M. Mattheakis, S. Liu, D. Agarwal, M. Di Giovanni // *Journal of Open Source Software*. – 2020. – Vol. 5, No. 46. – Article No. 1931.
20. Chen, X., Ma, R., Wu, J., Sun, J. Fractal analysis of coal pore structure based on computed tomography and fluid intrusions / X. Chen, R. Ma, J. Wu, J. Sun // *Fractal and Fractional*. – 2023. – Vol. 7, No. 6. – Article No. 439.
21. Chen, Y., Jiang, W., Zhang, X., Geng, Y., Bai, G. Spatial fractional permeability and fractional thermal conductivity models of fractal porous medium / Y. Chen, W. Jiang, X. Zhang, Y. Geng, G. Bai // *Physics of Fluids*. – 2022. – Vol. 34, Article No. 073106.
22. Cho, J., Nam, S., Yang, H., Yun, S.-B., Hong, Y., Park, E. Separable physics-informed neural networks / J. Cho, S. Nam, H. Yang, S.-B. Yun, Y. Hong, E. Park // *Advances in Neural Information Processing Systems*. – 2024. – Vol. 36.
23. Cohen, N. L. Fractal antennas: Part 1 / N. L. Cohen // *Communications Quarterly*. – 1995. – Summer. – P. 5–23.
24. Cuomo, S., Di Cola, V. S., Giampaolo, F., Rozza, G., Raissi, M., Piccialli, F. Scientific machine learning through physics-informed neural networks: where we are and what's next / S. Cuomo, V. S. Di Cola, F. Giampaolo, G. Rozza, M. Raissi, F. Piccialli // *Journal of Scientific Computing*. – 2022. – Vol. 92, No. 3.

25. Datsko, B., Podlubny, I., Povstenko, Y. Time-fractional diffusion-wave equation with mass absorption in a sphere under harmonic impact / B. Datsko, I. Podlubny, Y. Povstenko // *Mathematics*. – 2019. – Vol. 7, No. 5. – Article No. 433
26. Datsko, J., et al. Hierarchy of wool fibers and fractal dimensions / J. Fan et al. // *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*. – 2008. – Vol. 9, No. 3. – P. 293–296.
27. De Ryck, T., Bonnet, F., Mishra, S., de Bezenac, É. An operator preconditioning perspective on training in physics-informed machine learning [Electronic resource] / T. De Ryck, F. Bonnet, S. Mishra, É. de Bezenac. – arXiv preprint, 2023. – arXiv:2310.05801.
28. Dedic, A.D., Mujumdar, A.S., Voronjic, D.K. Three-dimensional model for heat and mass transfer in convective wood drying // *Drying Technology*. – 2004. – Vol. 21. – P. 1–15.
29. Deng, Z., Liu, X., Huang, Y., Zhang, C., Chen, Y. Heat conduction in porous media characterized by fractal geometry / Z. Deng, X. Liu, Y. Huang, C. Zhang, Y. Chen // *Energies*. – 2017. – Vol. 10, No. 8. – Article No. 1230.
30. Dessie, T. *Fractal modeling of moisture diffusion in wood* : PhD Dissertation / T. Dessie. – Vancouver: University of British Columbia, 2021.
31. Dessie, T., Avramidis, S. Fractal dimension of wood pores from pore size distribution / T. Dessie, S. Avramidis // *Holzforschung*. – 2022. – Vol. 76, No. 11–12 (November). – DOI: <https://doi.org/10.1515/hf-2021-0190>.
32. De Vries D.A. Simultaneous transfer of heat and moisture in porous media // *Transactions of the American Geophysical Union*. – 1958. – Vol. 39, No. 5. – P. 909–916.
33. dos Santos, M. A. F. Fractional Prabhakar derivative in diffusion equation with non-static stochastic resetting / M. A. F. dos Santos // *Physics*. – 2019. – Vol. 1, No. 1. – P. 40–58.

34. Du, Z. Y., Yang, M. L., Liu, Q. G., Yu, M. Numerical investigation on thermal conduction in fractal-like porous media / Z. Y. Du, M. L. Yang, Q. G. Liu, M. Yu // *Archives of Environmental Science and Environmental Toxicology*. – 2019. – Article AESET-109, No. 100009.
35. Dubey, V. P., Singh, J., Dubey, S., Kumar, D. Analysis of Cauchy problems and diffusion equations associated with the Hilfer–Prabhakar fractional derivative via Kharrat–Toma transform / V. P. Dubey et al. // *Fractal and Fractional*. – 2023. – Vol. 7. – Article No. 413.
36. Fan, J. T., Cheng, X. Y. Heat and moisture transfer with sorption and phase change through clothing assemblies. Part I: Experimental investigation / J. T. Fan, X. Y. Cheng // *Textile Research Journal*. – 2005. – Vol. 75. – P. 99–105.
37. Fan, J., Wang, L.-L., Liu, F.-J., Liu, Z.-G., Liu, Y., Zhang, S. Model of moisture diffusion in fractal media / J. Fan, L.-L. Wang, F.-J. Liu, Z.-G. Liu, Y. Liu, S. Zhang // *Thermal Science*. – 2015. – Vol. 19, No. 5. – P. 161–168.
38. Feder, J. *Fractals* / J. Feder. – New York: Plenum Press, 1988. – 283 p.
39. Gao, H., Zahr, M. J., Wang, J.-X. Physics-informed graph neural Galerkin networks: a unified framework for solving PDE-governed forward and inverse problems / H. Gao, M. J. Zahr, J.-X. Wang // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2022. – Vol. 390. – Article No. 114502.
40. Guo, L., Wu, H., Yu, X., Zhou, T. Monte Carlo fPINNs: deep learning method for forward and inverse problems involving high-dimensional fractional partial differential equations / L. Guo, H. Wu, X. Yu, T. Zhou // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2022. – Vol. 400. – Article No. 115523
41. Hadamard J. Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique // *Princeton University Bulletin*. – 1902. – Vol. 13. – P. 49–52.
42. Haghighat, E., Juanes, R. SciANN: a Keras/TensorFlow wrapper for scientific computations and physics-informed deep learning using artificial neural networks / E.

- Haghighat, R. Juanes // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2021. – Vol. 373. – Article No. 113552.
43. Harrison, D. A brief introduction to automatic differentiation for machine learning / D. Harrison. – University of California, Santa Cruz, 2019. – arXiv:2110.06209v2.
44. Hattaf, K. A new mixed fractional derivative with applications in computational biology / K. Hattaf // *Computation*. – 2024. – Vol. 12, No. 1. – Article No. 7.
45. Hatzikiriakos, S. G., Avramidis, S. Fractal dimension of wood surfaces from sorption isotherms / S. G. Hatzikiriakos, S. Avramidis // *Wood Science and Technology*. – 1994. – Vol. 28. – P. 275–284.
46. He Q., Barajas-Solano D., Tartakovsky G. та ін. (2020). Physics-informed neural networks for multiphysics data assimilation with application to subsurface transport. *Advances in Water Resources*, 141, 103610.
47. Hentschel, H. G. E., Procaccia, I. The infinite number of generalized dimensions of fractals and strange attractors / H. G. E. Hentschel, I. Procaccia // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 1983. – Vol. 8, Issue 3 (September). – P. 435–444.
48. Hilfer, R. Applications of fractional calculus in physics / R. Hilfer // *Applications of Fractional Calculus in Physics*. – Singapore: World Scientific Publishing, 2000. – P. 87–130.
49. Hilfer, R. Fractional time evolution / R. Hilfer // *Fractional Calculus and Applied Analysis*. – 1995. – Vol. 2, No. 4. – P. 299–324.
50. Hofmann-Wellenhof, M., Fuchs, A., Pernkopf, F. On training physics-informed neural networks for oscillating problems / M. Hofmann-Wellenhof, A. Fuchs, F. Pernkopf // *Proceedings of the Workshop on AI for Differential Equations in Science (AI4DiffEqtnsInSci @ ICLR 2024)*, 3 March 2024, Poster presentation. – 2024.
51. Hornik, K., Stinchcombe, M., White, H. Multilayer feedforward networks are universal approximators / K. Hornik, M. Stinchcombe, H. White // *Neural Networks*. – 1989. – Vol. 2, No. 5. – P. 359–366.

52. Howard, A. A., Murphy, S. H., Ahmed, S. E., Stinis, P. Stacked networks improve physics-informed training: applications to neural networks and deep operator networks [Electronic resource] / A. A. Howard, S. H. Murphy, S. E. Ahmed, P. Stinis. – arXiv preprint, 2023. – arXiv:2311.06483.
53. Huang, F., Liu, F. The space-time fractional diffusion equation with Caputo derivatives / F. Huang, F. Liu // *Journal of Applied Mathematics and Computing*. – 2005. – Vol. 19, No. 1–2. – P. 179–190.
54. Hubbert, M. K. Darcy's law and the field equations of the flow of underground fluids / M. K. Hubbert // *Transactions of the American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers (AIME)*. – 1956. – Vol. 207. – P. 222–239.
55. Indushree, M., Venkataraman, M. An application of the Prabhakar fractional operator to a subclass of analytic univalent function / M. Indushree, M. Venkataraman // *Fractal and Fractional*. – 2023. – Vol. 7. – Article No. 266.
56. Jagtap, A. D., Karniadakis, G. E. Extended physics-informed neural networks (XPINNs): a generalized space-time domain decomposition based deep learning framework for nonlinear partial differential equations / A. D. Jagtap, G. E. Karniadakis // *Communications in Computational Physics*. – 2020. – Vol. 28, No. 5.
57. Jagtap, A. D., Kawaguchi, K., Karniadakis, G. E. Adaptive activation functions accelerate convergence in deep and physics-informed neural networks / A. D. Jagtap, K. Kawaguchi, G. E. Karniadakis // *Journal of Computational Physics*. – 2020. – Vol. 404. – Article No. 109136.
58. Jagtap, A. D., Mitsotakis, D., Karniadakis, G. E. Deep learning of inverse water waves problems using multi-fidelity data: application to Serre–Green–Naghdi equations / A. D. Jagtap, D. Mitsotakis, G. E. Karniadakis // *Ocean Engineering*. – 2022. – Vol. 248. – Article No. 110775.
59. Jalaluddin, M. L., Azlan, U. A., Abd Rashid, M. W., Tamin, N., Masri, M. N. A review of pore-forming agents on the structures, porosities, and mechanical properties of

- porous ceramics / M. L. Jalaluddin, U. A. Azlan, M. W. Abd Rashid, N. Tamin, M. N. Masri // *AIMS Materials Science*. – 2024. – Vol. 11, No. 4. – P. 634–665.
60. Jalili, D., Jang, S., Jadidi, M., Giustini, G., Keshmiri, A., Larimi, Y. M. Physics-informed neural networks for heat transfer prediction in two-phase flows / D. Jalili, S. Jang, M. Jadidi, G. Giustini, A. Keshmiri, Y. M. Larimi // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2024. – Vol. 221. – Article No. 125089
61. Javed, F., Riaz, M. B., Iftikhar, N., Awrejcewicz, J., Akgül, A. Heat and mass transfer impact on differential type nanofluid with carbon nanotubes: A study of fractional order system / F. Javed, M. B. Riaz, N. Iftikhar, J. Awrejcewicz, A. Akgül // *Fractal and Fractional*. – 2021. – Vol. 5, No. 4. – Article No. 231.
62. Jin B., Lazarov R., Zhou Z. An analysis of the L1 scheme for the subdiffusion equation with nonsmooth data // *IMA Journal of Numerical Analysis*. – 2015. – Vol. 36. – P. 197–221.
63. Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., [et al.]. Physics-informed machine learning / G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu [et al.] // *Nature Reviews Physics*. – 2021. – Vol. 3. – P. 422–440.
64. Khan, F. S., Khalid, M., Al-moneef, A. A., Hasan Ali, A., Bazighifan, O. Freelance model with Atangana–Baleanu Caputo fractional derivative / F. S. Khan, M. Khalid, A. A. Al-moneef, A. Hasan Ali, O. Bazighifan // *Symmetry*. – 2022. – Vol. 14, No. 11. – Article No. 2424.
65. Khodayi-Mehr, R., Zavlanos, M. VarNet: variational neural networks for the solution of partial differential equations / R. Khodayi-Mehr, M. Zavlanos // *Proceedings of the 2nd Conference on Learning for Dynamics and Control (L4DC 2020)*. – 2020. – P. 298–307.
66. Kilbas, A. A., Srivastava, H. M., Trujillo, J. J. *Theory and Applications of Fractional Differential Equations*. – 1st ed. – Vol. 204. – Amsterdam : Elsevier Science,

2006. – 521 p. – (North-Holland Mathematics Studies). – ISBN 978-0-444-51832-3 (Print). – ISBN 978-0-08-046207-3 (eBook).
67. Koñas, P., Buchar, J., Severa, L. Study of correlation between the fractal dimension of wood anatomy structure and impact energy / P. Koñas, J. Buchar, L. Severa // *European Journal of Mechanics – A/Solids*. – 2009. – Vol. 28, Issue 3. – P. 545–550. – ISSN 0997-7538.
68. Koryagin, A., Khudorozkov, R., Tsimfer, S. PyDEns: a Python framework for solving differential equations with neural networks/ A. Koryagin, R. Khudorozkov, S. Tsimfer. – arXiv preprint, 2019. – arXiv:1909.11544.
69. Krischer O. Die wissenschaftlichen Grundlagen der Trocknungstechnik. – Berlin: Springer, 1963. – 702 s.
70. Krishnapriyan, A., Gholami, A., Zhe, S., Kirby, R., Mahoney, M. W. Characterizing possible failure modes in physics-informed neural networks / A. Krishnapriyan, A. Gholami, S. Zhe, R. Kirby, M. W. Mahoney // *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*. – 2021.
71. Kucharczyk, A., Pawlik, K. Modelling and experimental study of moisture transport in wood, taking into account diffusion and the accompanying adsorption of water vapour by cell walls / A. Kucharczyk, K. Pawlik // *Materials*. – 2021. – Vol. 14, No. 1. – Article No. 17.
72. Lagaris, I., Likas, A., Fotiadis, D. Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations / I. Lagaris, A. Likas, D. Fotiadis // *IEEE Transactions on Neural Networks*. – 1998. – Vol. 9, No. 5. – P. 987–1000.
73. Lagaris, I., Likas, A., Papageorgiou, D. Neural-network methods for boundary value problems with irregular boundaries / I. Lagaris, A. Likas, D. Papageorgiou // *IEEE Transactions on Neural Networks*. – 2000. – Vol. 11, No. 5. – P. 1041–1049.
74. Lakhdar Riabi, M., Hamdi Cherif, M., Cattani, C. An efficient approach to solving the fractional SIR epidemic model with the Atangana–Baleanu–Caputo fractional

- operator / M. Lakhdar Riabi, M. Hamdi Cherif, C. Cattani // *Fractal and Fractional*. – 2023. – Vol. 7, No. 8. – Article No. 618.
75. Lee, J., Shin, S., Kim, T., [et al.]. Physics-informed neural networks for fluid flow analysis with repetitive parameter initialization / J. Lee, S. Shin, T. Kim [et al.] // *Scientific Reports*. – 2025. – Vol. 15. – Article No. 16740.
76. Lee, S., Kim, H., Jang, B. A novel numerical method for solving nonlinear fractional-order differential equations and its applications / S. Lee, H. Kim, B. Jang // *Fractal and Fractional*. – 2024. – Vol. 8, No. 1. – Article No. 65.
77. Lévy, P. Plane or space curves and surfaces consisting of parts similar to the whole / P. Lévy // in: Edgar, G. A. (ed.) *Classics on Fractals*. – Reading, MA: Addison-Wesley Publishing, 1993. – P. 384. – ISBN 0-201-58701-7.
78. Li, K., Peng, J. Laplace transform and fractional differential equations / K. Li, J. Peng // *Applied Mathematics Letters*. – 2011. – Vol. 24, No. 12.
79. Li, Y., Luo, Z. X. An improved mathematical simulation of the coupled diffusion of moisture and heat in wool fabric / Y. Li, Z. X. Luo // *Textile Research Journal*. – 1999. – Vol. 69, No. 10. – P. 760–768.
80. Lin Yumin, Xu Chuanju. Finite difference/spectral approximations for the time-fractional diffusion equation // *Journal of Computational Physics*. – 2007. – Vol. 225, No. 2. – P. 1533–1552. – DOI: 10.1016/j.jcp.2007.02.001.
81. Liu, J.-G., Geng, L., Pan, Y.-M. Formulation of the differential equations of Riesz fractional derivative / J.-G. Liu, L. Geng, Y.-M. Pan [et al.] // *Modern Physics Letters B*. – 2021. – Vol. 34, No. 36. – Article No. 2050289.
82. Liu, S., Su, C., Yao, J., Hao, Z., Su, H., Wu, Y., Zhu, J. Preconditioning for physics-informed neural networks / S. Liu, C. Su, J. Yao, Z. Hao, H. Su, Y. Wu, J. Zhu. – 2024.
83. Lorthois, S., Cassot, F. Fractal analysis of vascular networks: Insights from morphogenesis / S. Lorthois, F. Cassot // *Journal of Theoretical Biology*. – 2010. – Vol. 262, Issue 4. – P. 614–633. – ISSN 0022-5193.

84. Lu, L., Meng, X., Mao, Z., Karniadakis, G. E. DeepXDE: a deep learning library for solving differential equations / L. Lu, X. Meng, Z. Mao, G. E. Karniadakis // *SIAM Review*. – 2021. – Vol. 63, No. 1. – P. 208–228.
85. Lu, L., Pestourie, R., Yao, W., Wang, Z., Verdugo, F., Johnson, S. G. Physics-informed neural networks with hard constraints for inverse design / L. Lu, R. Pestourie, W. Yao, Z. Wang, F. Verdugo, S. G. Johnson // *SIAM Journal on Scientific Computing*. – 2021. – Vol. 43, No. 6. – P. B1105–B1132.
86. Lupaş, A. A., Cătaş, A. Applications of the Atangana–Baleanu fractional integral operator / A. A. Lupaş, A. Cătaş // *Symmetry*. – 2022. – Vol. 14, No. 3. – Article No. 630.
87. Ma X., Qiu L., Zhang B., Wu G., Wang F. Adaptive fractional physics-informed neural networks for solving forward and inverse problems of anomalous heat conduction in functionally graded materials // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2025. – Vol. 236, Part 2. – Article 126393.
88. Madir, B.-E., Luddens, F., Lothode, C., Danaila, I. Physics-informed neural networks for heat conduction with phase change [Electronic resource] / B.-E. Madir, F. Luddens, C. Lothode, I. Danaila. – October 2024. – SSRN preprint.
89. Mahmoudabadbozchelou, M., Karniadakis, G. E., Jamali, S. nn-PINNs: non-Newtonian physics-informed neural networks for complex fluid modeling / M. Mahmoudabadbozchelou, G. E. Karniadakis, S. Jamali // *Soft Matter*. – 2022. – Vol. 18, No. 1. – P. 172–185.
90. Mainardi, F. *Fractional Calculus and Waves in Linear Viscoelasticity: An Introduction to Mathematical Models*. – London : Imperial College Press, 2010. – XX + 347 p. – ISBN 978-1-84816-329-4 1-84816-329-0.
91. Mandelbrot, B. B. *The Fractal Geometry of Nature* / B. B. Mandelbrot. – San Francisco: W. H. Freeman, 1982. – 468 p.
92. Mandelbrot, B. *Fractals: Form, Chance and Dimension* / B. Mandelbrot. – San Francisco: W. H. Freeman and Co, 1977. – 365 p. – ISBN 0-7167-0473-0.

93. Mao Z., Jagtap A.D., Karniadakis G.E. (2020). Physics-informed neural networks for high-speed flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 360, 112789.
94. Maric, T., Weiner, A. Towards physics-based deep learning in OpenFOAM: combining OpenFOAM with the PyTorch C++ API / T. Maric, A. Weiner // *Proceedings of the 17th OpenFOAM Workshop*, 11 July 2022, Cambridge University, United Kingdom.
95. Mathews, A., Francisquez, M., Hughes, J.W. та ін. (2021). Uncovering turbulent plasma dynamics via deep learning from partial observations. *Physical Review E*, 104(2).
96. Mehta, P. P., Pang, G., Song, F., Karniadakis, G. E. Discovering a universal variable-order fractional model for turbulent Couette flow using a physics-informed neural network / P. P. Mehta, G. Pang, F. Song, G. E. Karniadakis // *Fractional Calculus and Applied Analysis*. – 2019. – Vol. 22, No. 6. – P. 1675–1688.
97. Metzler, R., Klafter, J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach / R. Metzler, J. Klafter // *Physics Reports*. – 2000. – Vol. 339. – P. 1–77.
98. Mirsalimov, V. M. Simulation of partial closure of a variable width slot with interfacial bonds in end zones in an isotropic medium / V. M. Mirsalimov // *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. – Vol. 25, No. 2.
99. Modulus Contributors. *NVIDIA Modulus: an open-source framework for physics-based deep learning in science and engineering* [Electronic resource] / Modulus Contributors. – 2023.
100. Moseley, B., Markham, A., Nissen-Meyer, T. Finite basis physics-informed neural networks (FBPINNs): a scalable domain decomposition approach for solving differential equations / B. Moseley, A. Markham, T. Nissen-Meyer. – arXiv preprint, 2021. – arXiv:2107.07871v1.

101. Mukherjee, S. *ML.NET Revealed: Simple Tools for Applying Machine Learning to Your Applications* / Sudipta Mukherjee. – New York: Apress, 2020. – ISBN 978-1484265420.
102. Muller, J., Zeinhofer, M. Achieving high accuracy with PINNs via energy natural gradient descent / J. Muller, M. Zeinhofer // *Proceedings of the 40th International Conference on Machine Learning (ICML 2023)*, Honolulu, Hawaii, USA, 2023.
103. Nabian, M. A., Gladstone, R. J., Meidani, H. Efficient training of physics-informed neural networks via importance sampling / M. A. Nabian, R. J. Gladstone, H. Meidani // *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*. – 2021. – Vol. 36, No. 8. – P. 962–977.
104. Oldham, K. B., Spanier, J. *The Fractional Calculus: Theory and Applications of Differentiation and Integration to Arbitrary Order*. – 1st ed. – Vol. 111. – New York : Elsevier Science, 1974. – 525 p. – (Mathematics in Science and Engineering). – ISBN відсутній (друкована версія). – ISBN 978-0-08-095620-6 (eBook).
105. Omaba, M. E., Enyi, C. D. Atangana–Baleanu time-fractional stochastic integro-differential equation / M. E. Omaba, C. D. Enyi // *Partial Differential Equations in Applied Mathematics*. – 2021. – Vol. 4. – Article No. 100100.
106. Pang, G., Lu, L., Karniadakis, G. E. fPINNs: fractional physics-informed neural networks / G. Pang, L. Lu, G. E. Karniadakis // *SIAM Journal on Scientific Computing*. – 2019. – Vol. 41, No. 4. – P. A2603–A2626.
107. Paszke, A., Gross, S., Chintala, S., [et al.]. Automatic differentiation in PyTorch [Technical report] / A. Paszke, S. Gross, S. Chintala [et al.]. – 2017.
108. Peano, G. Sur une courbe, qui remplit toute une aire plane / G. Peano // *Mathematische Annalen*. – 1890. – Vol. 36. – P. 157–160.
109. Perré, P. Multiscale aspects of heat and mass transfer during drying / P. Perré // *Transport in Porous Media*. – 2007. – Vol. 33. – P. 2463–2478.

110. Perré, P. The proper use of mass diffusion equations in drying modeling: Introducing the drying intensity number / P. Perré // *Drying Technology*. – 2015. – Vol. 33. – P. 1949–1962.
111. Podlubny I. *Fractional Differential Equations: An Introduction to Fractional Derivatives, Fractional Differential Equations, to Methods of Their Solution and Some of Their Applications*. – Amsterdam: Elsevier Science, 1998. – 340 p.
112. Philip J.R., De Vries D.A. Moisture movement in porous materials under temperature gradients // *Transactions of the American Geophysical Union*. – 1957. – Vol. 38, No. 2. – P. 222–232.
113. Qiu, L., Wang, F., Liang, Y., Qin, Q.-H. Physics-informed radial basis function network based on Hausdorff fractal distance for solving Hausdorff derivative elliptic problems / L. Qiu, F. Wang, Y. Liang, Q.-H. Qin // *Computers & Mathematics with Applications*. – 2025. – Vol. 183. – P. 271–286.
114. Rabotnov, Yu. N. Equilibrium of an elastic medium with after-effect / Yu. N. Rabotnov // *Fractional Calculus and Applied Analysis*. – 2014. – Vol. 17, No. 3. – P. 684–696.
115. Rahman, M. U., Althobaiti, A., Riaz, M. B., Al-Duais, F. S. A theoretical and numerical study on fractional order biological models with Caputo–Fabrizio derivative / M. U. Rahman, A. Althobaiti, M. B. Riaz, F. S. Al-Duais // *Fractal and Fractional*. – 2022. – Vol. 6, No. 8. – Article No. 446.
116. 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 // *Journal of Computational Physics*. – 2019. – Vol. 378. – P. 686–707.
117. Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G. E. Physics-informed deep learning (Part I): data-driven solutions of nonlinear partial differential equations / M. Raissi, P. Perdikaris, G. E. Karniadakis. – arXiv preprint, 2017. – arXiv:1711.10561.

118. Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G. E. Physics-informed deep learning (Part II): data-driven discovery of nonlinear partial differential equations / M. Raissi, P. Perdikaris, G. E. Karniadakis. – arXiv preprint, 2017. – arXiv:1711.10566.
119. Rathore, P., Lei, W., Frangella, Z., Lu, L., Udell, M. Challenges in training PINNs: a loss landscape perspective [Electronic resource] / P. Rathore, W. Lei, Z. Frangella, L. Lu, M. Udell. – arXiv preprint, 2024. – arXiv:2402.01868v2.
120. Rayneau-Kirkhope, D., et al. Ultralight fractal structures from hollow tubes / D. Rayneau-Kirkhope et al. // *Physical Review Letters*. – 2012. – Vol. 109, No. 20. – P. 204301–204304.
121. Rehman, A. U., Jarad, F., Riaz, M. B., Shah, Z. H. Generalized Mittag-Leffler kernel form solutions of free convection heat and mass transfer flow of Maxwell fluid with Newtonian heating: Prabhakar fractional derivative approach / A. U. Rehman et al. // *Fractal and Fractional*. – 2022. – Vol. 6, No. 2. – Article No. 98.
122. Ren, H., Meng, X., Liu, R., Hou, J., Yu, Y. A class of improved fractional physics informed neural networks / H. Ren, X. Meng, R. Liu, J. Hou, Y. Yu // *Neurocomputing*. – 2023. – Vol. 562. – Article No. 126890.
123. Rostami, F., Jafarian, A. A new artificial neural network structure for solving high-order linear fractional differential equations / F. Rostami, A. Jafarian // *International Journal of Computational Mathematics*. – 2018. – Vol. 95. – P. 528– 539.
124. Salin, J. G. Drying of liquid water in wood as influenced by the capillary fiber network / J. G. Salin // *Drying Technology*. – 2008. – Vol. 26, No. 5. – P. 560–567.
125. Samko, S. G., Kilbas, A. A., Marichev, O. I. *Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications*. – Amsterdam : Gordon and Breach Science Publishers, 1993. – 976 p. – ISBN 2-88124-864-0.
126. Samotiy T. S., Sokolovskyi Y. I. Нейромережевий метод дослідження теплообміну у середовищах з фрактальною структурою // *Forestry Education and*

Science: Current Challenges and Development Prospects: International Science-Practical Conference (Lviv, October 23–25, 2024). – Lviv, 2024.

127. Sandev, T. Generalized Langevin equation and the Prabhakar derivative / T. Sandev // *Mathematics*. – 2017. – Vol. 5. – Article No. 66.
128. Sarwar, N., Asjad, M. I., Sitthiwiratham, T., Patanarapeelert, N., Muhammad, T. A. Prabhakar fractional approach for the convection flow of Casson fluid across an oscillating surface based on the generalized Fourier law / N. Sarwar et al. // *Symmetry*. – 2021. – Vol. 13. – Article No. 2039.
129. Shymanskyi, V., Sokolovskyy, Y. Finite element calculation of the linear elasticity problem for biomaterials with fractal structure / V. Shymanskyi, Y. Sokolovskyy // *Open Bioinformatics Journal*. – 2021. – Vol. 14. – P. 114–122.
130. Shymanskyi, V., Sokolovskyy, Y. Variational formulation of viscoelastic problem in biomaterials with fractal structure / V. Shymanskyi, Y. Sokolovskyy // *Proceedings of the 3rd International Conference on Informatics & Data-Driven Medicine (IDDM-2020)*, Växjö, Sweden, November 19–21, 2020. – P. 360–369.
131. Sokolovskyy Y., Drozd K., Samotii T., Boretska I. Fractional-order modeling of heat and moisture transfer in anisotropic materials using a physics-informed neural network // *Materials*. – 2024. – Vol. 17, No. 19. – Article No. 4753.
132. Sokolovskyy Y., Nechepurenko A., Herasymchuk O., Mokrytska O., Samotii T. Software and algorithmic aspects of automating finite-element discretization // *Proc. IEEE 16th Int. Conf. Experience of Designing and Application of CAD Systems (CADSM)*. – Lviv, 22–26 Feb. 2021. – P. 28–33.
133. Sokolovskyy Y., Nechepurenko A., Samotii T., Yatsyshyn S., Mokrytska O., Yarkun V. Software and algorithmic support for finite element analysis of spatial heat-and-moisture transfer in anisotropic capillary-porous materials // *Proc. 2nd Int. Conf. Data Stream Mining & Processing (DSMP)*. – Lviv, 2020. – P. 316–320.

134. Sokolovskyy Y., Samotii T. Adaptive fractional neural algorithm for modeling heat-and-mass transfer // *Bulletin of the National University "Lviv Polytechnic". Series: "Computer Systems of Design. Theory and Practice"*. – 2024. – Vol. 6, No. 3. – P. 139–153.
135. Sokolovskyy Y., Samotii T. Application of an adaptive neural network for the identification of fractional parameters of heat and moisture transfer processes in fractal // *Bulletin of the National University "Lviv Polytechnic". Series: "Computer Systems of Design. Theory and Practice"*. – 2025. – Vol. 7, No. 1. – P. 11–24.
136. Sokolovskyy Y., Samotii T. Neural network modeling of the process moisture transfer on the basis of derivatives fractional order // *Bulletin of the National University "Lviv Polytechnic". Series: "Computer Systems of Design. Theory and Practice"*. – 2023. – Vol. 5, No. 1. – P. 108–120.
137. Sokolovskyy Y., Samotii T., Kroshnyy I. Physics-informed neural network for modeling the process of heat-and-mass transfer based on the apparatus of fractional derivatives // *Proc. IEEE 17th Int. Conf. Experience of Designing and Application of CAD Systems (CADSM)*. – Lviv, 22–25 Feb. 2023. – P. 30–35.
138. Sokolovskyy Y., Samotii T., Levkovych M., Kroshnyy I., Mokrytska O. Neural network for modeling the process of moisture transfer in materials with fractal structure // *Proc. IEEE 19th Int. Conf. on Computer Science and Information Technologies (CSIT)*. – Lviv, 16–19 Oct. 2024.
139. Sokolovskyy Y., Samotii T., Mokrytska O. Adaptive neural network identification of fractional heat and moisture transfer parameters in fractal media // *CAD in Machinery Design. Implementation and Educational Issues: Proc. XXXII Int. Conf.* – Lviv, 28–30 Nov. 2024. – P. 10.
140. Sokolovskyy Y., Samotii T., Mokrytska O. Using fractal physics-informed neural network in solving problems of heat and moisture conductivity // *Proc. XXXI Int. Conf.*

CAD in Machinery Design Implementation and Educational Issues (CADMD). – Supraśl (Poland), 26–28 Oct. 2023.

141. Sokolovskyy Y., Sinkevych O., Shymanskyi V., Boretska I., Samotii T. Construction of asynchronous cell-automatic model for research of the thermal mass transfer process // *Proc. XVII Int. Conf. Perspective Technologies and Methods in MEMS Design (MEMSTECH)*. – Polyana, 12–16 May 2021. – P. 29–33.

142. Sokolovskyy, Y., Levkovich, M., Mokrytska, O., Kaspryshyn, Y. Mathematical modeling of nonequilibrium physical processes, taking into account the memory effects and spatial correlation / Y. Sokolovskyy, M. Levkovich, O. Mokrytska, Y. Kaspryshyn // *Proc. of the 9th Int. Conf. on Advanced Computer Information Technologies (ACIT 2019)*, České Budějovice, Czech Republic, 5–7 June 2019.

143. Sokolovskyy, Y., Levkovich, M., Sokolovskyy, I. The study of heat transfer and stress-strain state of a material, taking into account its fractal structure / Y. Sokolovskyy, M. Levkovich, I. Sokolovskyy // *Mathematical Modeling and Computing*. – 2020. – Vol. 7. – P. 400–409.

144. Sokolovskyy, Y., Shymanskyi, V., Levkovich, M. Mathematical modeling of non-isothermal moisture transfer and visco-elastic deformation in the materials with fractal structure / Y. Sokolovskyy, V. Shymanskyi, M. Levkovich // *Proc. of the 11th Int. Sci. and Techn. Conf. Computer Science and Information Technologies (CSIT 2016)*, Lviv, Ukraine, 6–10 September 2016.

145. Sokolovskyy, Y., Shymanskyi, V., Levkovich, M., Yarkun, V. Mathematical modeling of heat and moisture transfer and rheological behavior in materials with fractal structure using the parallelization of predictor-corrector numerical method / Y. Sokolovskyy, V. Shymanskyi, M. Levkovich, V. Yarkun // *Proceedings of the 2016 IEEE 1st International Conference on Data Stream Mining and Processing (DSMP 2016)*. – 2016. – P. 108–111.

146. Sokolovskyy, Ya., Shymanskyi, V., Levkovych, M. Mathematical modeling of nonisothermal moisture transfer and visco-elastic deformation in materials with fractal structure / Ya. Sokolovskyy, V. Shymanskyi, M. Levkovych // *Computer Science and Information Technologies (CSIT 2016): Proceedings of the 11th International Scientific and Technical Conference*. – Lviv, 2016. – P. 91–95.
147. Sousa E. How to approximate the fractional derivative of order $1 < \alpha \leq 2$ // *International Journal of Bifurcation and Chaos*. – 2012. – Vol. 22, No. 6. – Article ID: 1250075.
148. Sukumar, N., Srivastava, A. Exact imposition of boundary conditions with distance functions in physics-informed deep neural networks / N. Sukumar, A. Srivastava // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2022. – Vol. 389. – Article No. 114333.
149. Sun Zhi-zhong, Wu Xiaonan. A fully discrete difference scheme for a diffusion-wave system // *Applied Numerical Mathematics*. – 2006. – Vol. 56, No. 2. – P. 193–209. – ISSN 0168-9274.
150. Tanyu, D. N., Ning, J., Freudenberg, T., Heilenkötter, N., Rademacher, A., Iben, U., Maass, P. Deep learning methods for partial differential equations and related parameter identification problems / D. N. Tanyu, J. Ning, T. Freudenberg, N. Heilenkötter, A. Rademacher, U. Iben, P. Maass // *Inverse Problems*. – 2023. – Vol. 39, No. 10. – Article No. 103001.
151. Tarasov, V. E. Fractional dynamics with depreciation and obsolescence: Equations with Prabhakar fractional derivatives / V. E. Tarasov // *Mathematics*. – 2022. – Vol. 10. – Article No. 1540.
152. Tartakovsky A.M., Marrero C.O., Perdikaris P., Tartakovsky G.D., Barajas-Solano D. Learning parameters and constitutive relationships with physics-informed deep neural networks // arXiv preprint. – 2018. – arXiv:1808.03398.

153. Tibebu, D. *Fractal modeling of moisture diffusion in wood*: PhD Thesis / D. Tibebu. – Vancouver: University of British Columbia, 2021.
154. Toscano, J. D., Oommen, V., Varghese, A. J., Zou, Z., Daryakenari, N. A., Wu, C., Karniadakis, G. E. From PINNs to PIKANs: recent advances in physics-informed machine learning [Electronic resource] / J. D. Toscano, V. Oommen, A. J. Varghese, Z. Zou, N. A. Daryakenari, C. Wu, G. E. Karniadakis. – arXiv preprint, 2024. – arXiv:2410.13228.
155. Turner I.W., Ilic M. Convective drying of a consolidated slab of wet porous material // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 1989. – Vol. 32, No. 8. – P. 1437–1450
156. Turner, I. I., Ilic, M. M., Perré, P. Modelling non-Fickian behavior in the cell walls of wood using a fractional-in-space diffusion equation / I. I. Turner, M. M. Ilic, P. Perré // *Drying Technology*. – 2011. – Vol. 29, No. 16. – P. 1932–1940.
157. Vambolt, E., Pöpel, N., Lowe, L., Fromme, L., Wilczok, E., Lohbreier, J. 3D study of TEG-based energy harvesters with physics-informed neural networks / E. Vambolt, N. Pöpel, L. Lowe, L. Fromme, E. Wilczok, J. Lohbreier // *Proceedings of the COMSOL Conference 2024*, Florence, Italy. – Technische Hochschule Nürnberg Georg Simon Ohm, 2024.
158. van Almkerk, M., Huisman, G. Virtual nature environments based on fractal geometry for optimizing restorative effects / M. van Almkerk, G. Huisman // *Proceedings of the 32nd British Human Computer Interaction Conference (HCI 2018)*. – 2018.
159. von Koch, H. Sur une courbe continue sans tangente, obtenue par une construction géométrique élémentaire / H. von Koch // *Arkiv för matematik, astronomi och fysik*. – 1904. – Vol. 1. – P. 681–704. – (In French). – JFM 35.0387.02.
160. von Koch, H. Une méthode géométrique élémentaire pour l'étude de certaines questions de la théorie des courbes planes / H. von Koch // *Acta Mathematica*. – 1906. – Vol. 30. – P. 145–174. – (In French). – DOI: 10.1007/BF02418570. – ISSN 0001-5962.

161. Wang, B. X., Zhou, L. P., Peng, X. F. A fractal model for predicting the effective thermal conductivity of liquid with suspension of nanoparticles / B. X. Wang, L. P. Zhou, X. F. Peng // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2003. – Vol. 46. – P. 2665–2672.
162. Wang, J., Peng, X., Chen, Z., Zhou, B., Zhou, Y., Zhou, N. Surrogate modeling for neutron diffusion problems based on conservative physics-informed neural networks with boundary conditions enforcement / J. Wang, X. Peng, Z. Chen, B. Zhou, Y. Zhou, N. Zhou // *Annals of Nuclear Energy*. – 2022. – Vol. 176. – Article No. 109234.
163. Wang, Q.-L., et al. Fractional model for heat conduction in polar hairs / Q.-L. Wang et al. // *Thermal Science*. – 2012. – Vol. 16, No. 2. – P. 339–342.
164. Wang, S., Teng, Y., Perdikaris, P. Understanding and mitigating gradient flow pathologies in physics-informed neural networks / S. Wang, Y. Teng, P. Perdikaris // *SIAM Journal on Scientific Computing*. – 2021. – Vol. 43, No. 5. – P. A3055–A3081.
165. Wang, S., Zhang, H., Jiang, X. Fractional physics-informed neural networks for time-fractional phase field models / S. Wang, H. Zhang, X. Jiang // *Nonlinear Dynamics*. – 2022. – Vol. 110, No. 4. – P. 2715–2739.
166. Wang, T., Wang, Z., Huang, Z., [et al.]. Multi-domain physics-informed neural network for solving heat conduction and conjugate natural convection with discontinuity of temperature gradient on interface / T. Wang, Z. Wang, Z. Huang [et al.] // *Science China Technological Sciences*. – 2022. – Vol. 65.– P. 2442–2461.
167. Whitaker S. Simultaneous heat, mass, and momentum transfer in porous media: a theory of drying // *Advances in Heat Transfer*. – 1977. – Vol. 13. – P. 119–203.
168. Woignier, T., Primera, J., Alaoui, A., Dieudonne, P., Duffours, L., Beurroies, I., Calas-Etienne, S., Despestis, F., Faivre, A., Etienne, P. Fractal structure in silica and composites aerogels / T. Woignier, J. Primera, A. Alaoui, P. Dieudonne, L. Duffours, I. Beurroies, S. Calas-Etienne, F. Despestis, A. Faivre, P. Etienne // *Gels*. – 2021. – Vol. 7, No. 1. – Article No. 1.

169. Wu, C., Zhu, M., Tan, Q., Kartha, Y., Lu, L. A comprehensive study of non-adaptive and residual-based adaptive sampling for physics-informed neural networks / C. Wu, M. Zhu, Q. Tan, Y. Kartha, L. Lu // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2023. – Vol. 403. – Article No. 115671.
170. Wu, G., Wang, F., Qiu, L. Physics-informed neural network for solving Hausdorff derivative Poisson equations / G. Wu, F. Wang, L. Qiu // *Fractals*. – 2023. – Vol. 31, No. 6. – Article No. 23401035.
171. Wu, J. S., Yu, B. M. A fractal resistance model for flow through porous media / J. S. Wu, B. M. Yu // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2007. – Vol. 50. – P. 3925–3932.
172. Wu, W., Daneker, M., Jolley, M. A., Turner, K. T., Lu, L. Effective data sampling strategies and boundary condition constraints of physics-informed neural networks for identifying material properties in solid mechanics / W. Wu, M. Daneker, M. A. Jolley, K. T. Turner, L. Lu // *Applied Mathematics and Mechanics*. – 2023. – Vol. 44, No. 7. – P. 1039–1068.
173. Wu, Z., Zhang, X., Wang, J., Zeng, X. Applications of fractional differentiation matrices in solving Caputo fractional differential equations / Z. Wu, X. Zhang, J. Wang, X. Zeng // *Fractal and Fractional*. – 2023. – Vol. 7, No. 5. – Article No. 374.
174. Xia, Y., Wei, W., Liu, Y., Cai, Z., Zhang, Q., Cai, J. A fractal-based approach to evaluate the effect of microstructure on the permeability of two-dimensional porous media / Y. Xia, W. Wei, Y. Liu, Z. Cai, Q. Zhang, J. Cai // *Applied Geochemistry*. – 2021. – Vol. 131. – Article No. 105013. – ISSN 0883-2927.
175. Xu, K., Darve, E. ADCME: learning spatially-varying physical fields using deep neural networks / K. Xu, E. Darve. – arXiv preprint, 2020. – arXiv:2011.11955.
176. Yao, J., Su, C., Hao, Z., Liu, S., Su, H., Zhu, J. MultiAdam: parameter-wise scale-invariant optimizer for multiscale training of physics-informed neural networks / J. Yao,

- C. Su, Z. Hao, S. Liu, H. Su, J. Zhu // *Proceedings of the 40th International Conference on Machine Learning (ICML 2023)*, Honolulu, Hawaii, USA, 2023.
177. Yu, B. An overview: Analysis of heat and mass transfer in fractal media by fractal geometry and technique / B. Yu // *Proceedings of the 14th International Heat Transfer Conference (IHTC-14)*, January 2010.
178. Yu, B. M. Analysis of flow in fractal porous media / B. M. Yu // *Applied Mechanics Reviews*. – 2008. – Vol. 61. – Article No. 050801.
179. Yu, D., Liao, X., Wang, Y. Modeling and analysis of Caputo–Fabrizio definition-based fractional-order boost converter with inductive loads / D. Yu, X. Liao, Y. Wang // *Fractal and Fractional*. – 2024. – Vol. 8, No. 2. – Article No. 81.
180. Zeng, Y., Ji, B., Zhang, Y., Feng, J., Luo, J., Wang, M. A fractal model for effective thermal conductivity in complex geothermal media / Y. Zeng, B. Ji, Y. Zhang, J. Feng, J. Luo, M. Wang // *Frontiers in Earth Science*. – 2022. – Vol. 10. – Article No. 786290.
181. Zhan, C., Cui, W., Li, L. A fractal model of effective thermal conductivity of porous materials considering tortuosity / C. Zhan, W. Cui, L. Li // *Energies*. – 2023. – Vol. 16, No. 1. – Article No. 271.
182. Zhang, L. Z. A fractal model for gas permeation through porous membranes / L. Z. Zhang // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2008. – Vol. 51. – P. 5288–5295.
183. Zhao, D., Yu, G., Li, W. Diffusion on fractal objects modeling and its physics-informed neural network solution / D. Zhao, G. Yu, W. Li // *Fractals*. – 2020. – Vol. 29, No. 3. – Article No. 21500717.
184. Zhou, Z., Wang, L., Yan, Z. Deep neural networks learning forward and inverse problems of two-dimensional nonlinear wave equations with rational solitons / Z. Zhou, L. Wang, Z. Yan // *Computers and Mathematics with Applications*. – 2023. – Vol. 151. – P. 164–171.

185. Zhu, Q. Y., Xie, M. H., Yang, J., Li, Y. A fractal model for the coupled heat and mass transfer in porous fibrous media / Q. Y. Zhu, M. H. Xie, J. Yang, Y. Li // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2011. – Vol. 54, Issues 7–8. – P. 1400–1409. – ISSN 0017-9310.
186. Zubov, K., McCarthy, Z., Ma, Y., Calisto, F., Pagliarino, V., Azeglio, S., Bottero, L., Luján, E., Sulzer, V., Bharambe, A., [et al.]. NeuralPDE: automating physics-informed neural networks (PINNs) with error approximations / K. Zubov, Z. McCarthy, Y. Ma, F. Calisto, V. Pagliarino, S. Azeglio, L. Bottero, E. Luján, V. Sulzer, A. Bharambe [et al.]. – arXiv preprint, 2021. – arXiv:2107.09443.
187. Бакалець, А. В. Програмна реалізація методу скінченних елементів для моделювання неізотермічного вологоперенесення і в'язкопружного стану у деревині в процесі сушіння / А. В. Бакалець // *Науковий вісник НЛТУ України*. – 2009. – Вип. 19.10. – С. [уточнити сторінки].
188. Білей П. В. Теоретичні основи теплової обробки і сушіння деревини : монографія. – Коломия : Вік, 2005. – 360 с.
189. Бурак, Я. Й., Чапля, Є. Я., Чернуха, О. Ю. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів / Я. Й. Бурак, Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха. – Київ: Наукова думка, 2006. – 272 с.
190. Гайвась, Б. І. Математичне моделювання процесу сушіння пористих тіл з врахуванням кінетики фазових переходів та деформацій : автореф. дис. д-ра техн. наук / Б. І. Гайвась. – Львів, 2012. – 40 с.
191. Дендюк, М. В., Поберейко, В. П., Соколовський, Я. І. Застосування методу кінцевих елементів для розрахунку нестационарних полів вологоперенесення у висушуваній деревині / М. В. Дендюк, В. П. Поберейко, Я. І. Соколовський // *Лісове господарство, лісова, паперова і деревообробна промисловість : міжвідомчий наук.-техн. зб.* – Львів : УкрДЛТУ, 2003. – Вип. 28. – С. 100–106.

192. Левкович, М. В. Математичне моделювання деформаційних і тепломасообмінних процесів у середовищах з фрактальною структурою: дис. ... канд. техн. наук: 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи / М. В. Левкович; наук. керівник Я. І. Соколовський; Нац. лісотехн. ун-т України, Нац. ун-т «Львівська політехніка». – Львів, 2019.
193. Мазяк З.Ю. Математична модель процесу механічного видалення вологи з твердого пористого тіла / Мазяк З.Ю., Ханик Я.М., Ільків І.М. // Наук. вісн. УкрДЛТУ : зб. наук.-техн. праць. – Львів, 2002. – С. 67-72.
194. Матвійчук Я.М. Математичне макромодельовання динамічних систем : Теорія і практика / Я.М. Матвійчук. – Львів: Вид. ценр ЛНУ, 2000 р. – 214 с.
195. Матвійчук Я.М. Розробка методів макромодельовання електричних та електронних кіл та систем: Автореф. дис. ... д-ра техн. наук. – Львів: Львів. політехн. ун-т. – 1998. – 33 с.
196. П'янило, Я. Використання дробових похідних для аналізу нестационарного руху газу в трубопроводах за наявності компресорних станцій та відводів / Я. П'янило // *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології*. – 2012. – Вип. 16. – С. 122–132.
197. П'янило, Я., Васюник, М., Васюник, І. Використання многочленів Лагерра до спектрального методу розв'язування рівнянь у дробових похідних за часом / Я. П'янило, М. Васюник, І. Васюник // *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології*. – 2013. – Вип. 17. – С. 163–167.
198. П'янило, Я., П'янило, Г. Дослідження впливу теплофізичних параметрів на процес руху газу в трубопроводах / Я. П'янило, Г. П'янило // *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології*. – 2009. – Вип. 10. – С. 58–69.
199. Перцевий, В., Жовтонога, М., Попова, А. Використання програмних продуктів *COMSOL Multiphysics®*, *MATLAB®*, *Simulink®* та *Simscape™* при розв'язанні задач гідрогазодинаміки та тепломасообміну / В. Перцевий, М. Жовтонога, А. Попова. – Д.: ЛІРА, 2016. – ISBN 978-966-383-684-3.

200. Самотій Т., Соколовський Я.І. Нейромережевий метод чисельного моделювання вологоперенесення у фрактальних середовищах // *Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології: матер. 5-ї наук.-практ. конф. студентів, аспірантів та молодих вчених.* – Львів: НЛТУ України, 2023. – С. 49–51.
201. Самотій Т., Соколовський Я.І. Сурогатне моделювання процесів тепломасопереносу на основі глибокого навчання з фізичними обмеженнями // *Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології: матер. 4-ї наук.-практ. конф. студентів, аспірантів та молодих вчених.* – Львів: НЛТУ України, 2022. – С. 62–67.
202. Самотій Т.С. Нейромережевий підхід до розв'язання диференціальних рівнянь параболічного типу // *Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології: матер. 3-ї наук.-практ. конф. студентів, аспірантів та молодих вчених.* – Львів: НЛТУ України, 2021. – С. 11–15.
203. Соколовський, Я. І., Бакалець, А. В. Моделювання та оптимізація технологічних режимів сушіння деревини / Я. І. Соколовський, А. В. Бакалець // *Вісник Національного університету «Львівська політехніка». Комп'ютерна інженерія та інформаційні технології.* – Львів : Вид-во НУ «Львівська політехніка», 2008. – Вип. 629. – С. 105–111.
204. Соколовський, Я. І., Прусак, Ю. В., Крошній, І. М. Дослідження пружно-в'язкопластичного стану деревини у процесі сушіння / Я. І. Соколовський, Ю. В. Прусак, І. М. Крошній // *Науковий вісник НЛТУ України.* – 2014. – Вип. 24.3. – С. 118–128.
205. Соколовський, Я. І., Шиманський, В. М. Фрактальна модель тепло- і масоперенесення у капілярно-пористих матеріалах / Я. І. Соколовський, В. М. Шиманський // *Вісник Національного університету «Львівська політехніка». Комп'ютерні науки та інформаційні технології.* – Львів: НУ «ЛП», 2011. – № 694. – С. 424–428.

206. Шиманський, В. М. Математичне моделювання неізотермічного вологоперенесення та в'язко-пружного деформування у середовищах з фрактальною структурою: дис. ... канд. техн. наук: 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи / В. М. Шиманський ; наук. керівник Я. І. Соколовський; Нац. лісотехн. ун-т України. – Львів, 2015.
207. Штофель, О. О. Застосування методу фрактального аналізу до вивчення зміни властивостей металу / О. О. Штофель, М. Д. Рабкіна // *Вісник КПІ. Серія Приладобудування*. – 2019. – Вип. 58, № 2. – С. 28–33. – ISSN 2663-3450 (Online), ISSN 0321-2211 (Print).
208. Яковенко В.О. Моделювання процесів переносу в областях з рухомими межами під дією енергії надвисоких частот: Монографія / В.О. Яковенко // Дніпропетровськ: Академія митної служби України, 2009. – 196 с.

ДОДАТОК А

Акт впровадження результатів дисертаційної роботи

"ЗАТВЕРДЖУЮ"

Проректор з наукової роботи

Національного університету

«Львівська політехніка»

д.т.н., проф. Іван ДЕМИДОВ



2025 р.

АКТ

про впровадження у навчальний процес
результатів дисертаційної роботи
аспіранки Самотій Тетяни Сергіївни

Цей акт складено про те, що результати дисертаційної роботи «Методи та засоби нейромережевого моделювання тепломасоперенесення в анізотропних середовищах з фрактальною структурою» Самотій Тетяни Сергіївни впроваджено у навчальний процес кафедри систем автоматизованого проектування.

Впровадження результатів дисертаційної роботи полягає в їхньому використанні при викладанні навчальних дисциплін як окремих тем лекційних курсів, так і в циклах лабораторних робіт

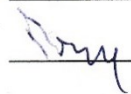
Зокрема, для викладання дисциплін «Системи штучного інтелекту», «Застосування систем штучного інтелекту у технологічних рішеннях» та «Системи із самоорганізацією та самонавчанням» для студентів освітньо-кваліфікаційного рівня "бакалавр" та дисципліни «Штучні нейронні мережі» для студентів освітньо-кваліфікаційного рівня "магістр", які навчаються за напрямом 122 "Комп'ютерні науки", використано такі результати:

- метод синтезу фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі;
- методи поетапного навчання та адаптивного балансування функціоналів втрат;
- метод ідентифікації дробових параметрів засобами фрактальної фізично-інформованої нейронної мережі.

В.о. Директор ІКНІ,

 Віктор ХАВЯНСЬКИЙ

Завідувач кафедри САП
д. т. н., професор

 Михайло ЛОБУР

ДОДАТОК Б

Теплофізичні параметри матеріалу

1. Питома теплоємність, C , Дж/(кг·град) – це фізична величина, що визначає кількість теплової енергії, необхідної для підвищення температури одного кілограма речовини на один градус. Питома теплоємність встановлюється на основі наступного співвідношення:

$$\begin{cases} C = 3.5T + 3200 - 2.18 \cdot 10^2 (130 - 100\nu)^{2.28}, 0^\circ C \leq T \leq 100^\circ C \\ C = 20T + 243U + 2200, -60^\circ C \leq T < 0^\circ C \end{cases}$$

2. Коефіцієнт теплопровідності, λ , Вт/(м·град) (при $\rho = 500 \text{ кг/м}^3$) – чисельно відображає здатність матеріалу передавати теплову енергію через свою товщу.

$$\lambda = 0.00222UT + 10^{0.295 \lg 100U - 1.022}, 0.05 \leq U \leq 1.0$$

$$\lambda = (0.00131\nu + 0.0009)T + 10^{0.295 \lg 100\nu - 1.022}, 1.0 < U \leq 1.3$$

3. Термоградієнтний коефіцієнт, δ , град⁻¹ – характеризує залежність теплового стану об'єкта від величини температурного градієнта. Обчислення цього коефіцієнта здійснюється за наступною залежністю:

$$\delta = \left((5.55 - 0.013T) - 2.42 \cdot 10^{-3} (100\nu - (72 - 0.35T)) \right)^2 \cdot 10^{-2}$$

4. Коефіцієнт теплообміну, α , Вт/(м²·град) – визначає ефективність процесу теплообміну між поверхнею матеріалу та зовнішнім середовищем. Його значення встановлюється шляхом розрахунку за відповідним рівнянням:

$$\alpha = 8.35 (0.00625t_c + 2.1) \left(\frac{\nu}{0.0083t_c + 1.37} \right)^{0.8} \cdot l^{0.2}$$

5. Рівноважна вологість, U_p , % – відображає стан, за якого вміст води в матеріалі відповідає умовам довкілля і більше не змінюється з часом. Визначається за емпірично або за розрахунковою формулою:

$$U_p = 10.6^p (0.0327 - 0.00015T) \cdot 100$$

6. Коефіцієнт температуропровідності, a , м²/с (при $\rho = 500 \text{ кг/м}^3$) – визначає швидкість перенесення тепла в об'ємі матеріалу:

$$a = \left((0.523 \cdot 10^{-2}U - 0.0005)T + (1.76 - 0.6U) \right) \cdot 10^{-7}$$

7. Поправка на густину під час визначення λ , $K_{\rho\lambda}$ – дає змогу врахувати зміну теплопровідності при відхиленні густини матеріалу від стандартної. Формула має вигляд:

$$K_{\rho\lambda} = \frac{1}{1.864 - 0.00115\rho_0}$$

8. Поправка на густину під час визначення a , $K_{\rho a}$ – використовується для адаптації коефіцієнта температуропровідності до фактичної густини матеріалу. Залежність подається у вигляді:

$$\begin{aligned} \text{При } \rho_0 < 500 \text{ кг / м}^3 \quad K_{\rho a} &= 1,9 - 0,00205\rho_0 \\ \text{При } \rho_0 > 500 \text{ кг / м}^3 \quad K_{\rho a} &= 0,98 \end{aligned}$$

9. Щільність, ρ , кг / м^3 – є фундаментальною фізичною характеристикою, яка визначає масу одиниці об'єму речовини.

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_0(1+U), U > 0.3 \\ \rho &= \rho_0 \left(\frac{(1+U) \cdot (100 - K_p \cdot 30)}{100 + K_p \cdot 100U} \right), U \leq 0.3 \end{aligned}$$

10. Коефіцієнт вологопровідності, a_i – характеризує здатність матеріалу переносити вологу внаслідок різниці вологості у різних зонах об'єму.

$$\begin{aligned} a_i &= 10^{9.36\lg(t+273)-22.6} \cdot 10^{-10}, (\text{сосна}) \\ a_i &= 10^{9.36\lg(t+273)-22.79} \cdot 10^{-10}, (\text{береза}) \\ a_i &= 10^{9.36\lg(t+273)-22.97} \cdot 10^{-10}, (\text{бук}) \\ a_i &= 10^{9.36\lg(t+273)-23.13} \cdot 10^{-10}, (\text{дуб}) \end{aligned}$$

11. Коефіцієнт вологообміну, β – характеризує швидкість перенесення вологи між поверхнею матеріалу та навколишнім середовищем в умовах градієнта вологості.

$$\begin{aligned} \beta &= [0.527(t_c + 10)^{2.06} \cdot 10^{-4} + 0.04][(5\nu + 3.5) - \\ &- (0.0017\nu + 0.0116)(\varphi - 45)^2] \cdot 10^{-7}, 5^\circ \text{C} < t_c \leq 70^\circ \text{C} \end{aligned}$$