

ОБЗОР МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Залогин Н.Е.¹.

Научный руководитель: Спицын В. Г.².

¹НИ ТПУ, ИШИТР, гр. А4-39, аспирант, nez4@tpu.ru

²НИ ТПУ, ИШИТР, д.т.н., профессор ОИТ

Аннотация

В статье представлен обзор современных методов машинного обучения, применяемых для моделирования физических процессов. Рассмотрены подходы суррогатного моделирования, физически информированные нейронные сети (PINNs), нейронные операторы и графовые нейронные сети. Проведен сравнительный анализ по критериям вычислительной эффективности, интерпретируемости и степени интеграции физических законов. Обозначены ограничения и направления дальнейших исследований.

Ключевые слова: машинное обучение, моделирование физических процессов, суррогатное моделирование, физически информированные нейронные сети, нейронные операторы, графовые нейронные сети.

Введение

Моделирование физических процессов представляет собой ключевую задачу в вычислительной науке, где традиционные численные методы сталкиваются с ограничениями при работе с высокоразмерными и нелинейными системами. Развитие методов машинного обучения (МО) предлагает альтернативные подходы, включая суррогатное моделирование, физически информированные нейронные сети (PINNs), нейронные операторы (FNO) и графовые нейронные сети (GNN). Эти методы направлены на снижение вычислительных затрат и интеграцию физических законов в структуру моделей.

Целью данной работы является анализ современных методов МО для моделирования физических процессов, в контексте их возможностей, ограничений и областей применения. Обзор рассматривает как классические подходы к суррогатному моделированию, так и современные архитектуры, такие как FNO и GNN.

Методология исследования основана на систематическом анализе современных научных трудов, включая работы по суррогатному моделированию [1, 2], а также исследования по PINNs [3] и FNO [4]. Акцент сделан на оценке вычислительной эффективности, интерпретируемости результатов и степени интеграции физических законов. Выявлены ограничения, такие как зависимость от объёма обучающих данных и сложности оптимизации.

Статья структурирована по направлениям: суррогатное моделирование, PINNs, FNO и GNN. Такой подход позволяет выделить общие закономерности и перспективы развития методов МО в контексте физического моделирования.

Основная часть

Суррогатное моделирование направлено на замену ресурсоёмких вычислительных процедур упрощёнными аппроксиматорами, минимизирующими среднеквадратичную ошибку между исходной моделью $f(x)$ и её приближением $\hat{f}(x; \theta)$:

$$\min_{\theta} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|f(x_i) - \hat{f}(x_i; \theta)\|^2, \quad (1)$$

где N – количество обучающих примеров, x_i – вектор входных параметров для i -го примера, $f(x_i)$ – истинное значение функции для i -го примера, $\hat{f}(x_i; \theta)$ – предсказанное моделью значение для i -го примера, θ – оптимизируемые параметры модели.

Работа [1] демонстрирует, как использование суррогатных моделей с методом конечных элементов для решения инженерных задач может ускорить расчёты. Авторы подробно

описывают механизмы приближения сложных систем и обсуждают процедуры выборки и валидации моделей, что позволяет обосновать их применение для задач прогнозирования, анализа чувствительности и оптимизации.

В исследованиях [2] нейронные сети и градиентный бустинг показали более высокую точность воспроизведения поведения агентно-ориентированных моделей по сравнению с гауссовскими процессами. Однако методы машинного обучения требуют тщательной настройки параметров и не всегда обеспечивают надёжные оценки неопределённости.

Метод, предложенный в работе [5], комбинирует анализ главных компонент (РСА) и активные подпространства для снижения размерности входных и выходных данных. Это сокращает вычислительные затраты при моделировании остаточных напряжений в аддитивном производстве, но точность модели зависит от качества структурированных данных и сложности аппроксимации нелинейных зависимостей.

Работы [6, 7] исследуют адаптивное обучение и альтернативные методы, такие как нелинейный метод опорных векторов (SVM), для улучшения суррогатных моделей. Ключевым вызовом остаётся оптимизация соотношения между объёмом обучающих данных и вычислительной эффективностью.

Основные преимущества суррогатного моделирования включают снижение вычислительной нагрузки. К ограничениям относятся зависимость точности от структуры данных, сложность балансировки между обобщающей способностью и архитектурой модели, а также необходимость разработки методов оценки неопределённости.

Физически информированные нейронные сети (PINNs) интегрируют дифференциальные уравнения, описывающие физические законы, в функцию потерь модели. Основная функция потерь объединяет два компонента: соответствие данным и соблюдение физических уравнений. Формально это выражается как:

$$L(\theta) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} (u(x_i; \theta) - u_{data}(x_i))^2 + \lambda \frac{1}{N_f} \sum_{j=1}^{N_f} \left(N(u(x_j; \theta)) \right)^2, \quad (2)$$

где N_d – число точек данных, N_f – число точек для оценки физического соответствия, N – оператор, задающий физическое уравнение, $u_{data}(x)$ – известное значение в точке, $u(x; \theta)$ – предсказание модели в точке, λ – коэффициент, балансирующий вклад двух составляющих.

В работе [3] метод PINNs применён для решения прямых и обратных задач, включая уравнения Навье-Стокса и теплопроводности. Последующие исследования, такие как [8], демонстрируют использование PINNs для идентификации повреждений в пластинах на основе уравнений теории Кирхгофа-Лява. Модели обучаются на ограниченных экспериментальных данных, генерируя «псевдо-идеальные» поля, что позволяет выделить аномалии, вызванные дефектами. В исследовании [9] PINNs применены для идентификации нелинейных повреждений в железобетонных опорах мостов через оценку примерно 50 динамических параметров. Интеграция физических уравнений позволила уменьшить ошибки оценок до 0.4-3.1 % при зашумлённых данных.

Одной из проблем PINNs является дисбаланс градиентов (gradient pathology) – явление, при котором компоненты функции потерь (физические уравнения и данные) генерируют градиенты разного масштаба, нарушая сходимость оптимизации, возникающий из-за конкуренции между членами функции потерь. В работе [10] предложен метод TSS-PINN, масштабирующий переменные в уравнениях и нейросети. Это позволяет снизить жёсткость градиентов на границах, что подтверждено экспериментами на задачах неразрушающего контроля корпусных конструкций. В то же время эксперименты в исследовании [11] выявили, что дисбаланс градиентов обусловлен численной жёсткостью градиентного потока, приводящей к неустойчивости обучения. Для её устранения предложены адаптивные стратегии масштабирования скорости обучения и модификации архитектур. Например, алгоритмы, основанные на статистике градиентов, повысили точность предсказаний на порядок.

Основные преимущества данного подхода заключаются в повышенной точности и возможности решения обратных задач. Ограничения включают зависимость от баланса коэффициента λ , вычислительную сложность для систем с большим числом параметров.

Нейронные операторы, такие как нейронный оператор Фурье (FNO), обучают отображения между функциональными пространствами, аппроксимируя решения семейств дифференциальных уравнений. Архитектура FNO включает прямое и обратное преобразования Фурье для параметризации интегральных ядер:

$$v_{t+1}(x) = \sigma \left(W v_t(x) + \mathcal{F}^{-1} (R \cdot \mathcal{F}(v_t)(k)) (x) \right), \quad (3)$$

где $v_t(x)$ – скрытое представление на шаге t в точке x ; W – обучаемая матрица весов; $\mathcal{F}$ и $\mathcal{F}^{-1}$ – прямое и обратное преобразования Фурье; R – обучаемый фильтр в пространстве Фурье; σ – функция активации.

В работе [4] FNO применён для решения параметрических уравнений в частных производных, демонстрируя увеличенную скорость вычислений на три порядка выше классических методов. Модификация Geo-FNO из работы [12] расширяет применимость метода на произвольные геометрии путём деформации физического пространства в латентное с равномерной сеткой, сохраняя вычислительную эффективность.

Интеграция линейного внимания в исследовании [13] снижает сложность вычислений с $O(n^2)$ до $O(n)$, улучшая точность моделирования трёхмерной турбулентности. В работе [14] предложен неявный нейронный оператор Фурье (IFNO), который обучается на экспериментальных данных для прогнозирования механических откликов материалов, превосходя классические конститутивные модели по устойчивости к шуму. Однако IFNO требует итеративных процедур, увеличивающих время обучения.

Основные преимущества выражаются в возможности моделирования целых семейств дифференциальных уравнений и снижении вычислительной сложности. Ограничения включают зависимость от объёма обучающих данных и сложность интерпретации многоуровневых преобразований.

Графовые нейронные сети (GNN) Графовые нейронные сети применяются для моделирования физических процессов, где данные представлены в виде графов, таких как микроструктуры материалов или динамические системы. Основу метода составляет схема передачи сообщений, формализуемая как:

$$h_i^{(l+1)} = \sigma \left(W^{(l)} h_i^{(l)} + \sum_{j \in N(i)} \phi \left(h_i^{(l)}, h_j^{(l)}, e_{ij} \right) \right) \quad (4)$$

где $h_i^{(l)}$ – представление узла i на слое l ; $W^{(l)}$ – матрица весов на слое l ; $N(i)$ – множество соседних узлов для узла i ; функция, ϕ – функция генерации сообщений на основе признаков узлов и рёбер e_{ij} , e_{ij} – признаки ребра между узлами i и j ; σ – функция активации.

В работе [15] GNN использованы для прогнозирования усталостных повреждений в ферритной стали. Микроструктура представлена графом, где узлы соответствуют зернам (grains), а рёбра – границам между ними. Метод обеспечил точность классификации повреждений на 72 %, превзойдя феноменологические модели и обычное машинное обучение на 68 % и 17 % соответственно. Модель, использованная в работе [16] вводит симметричное кодирование направлений для обеспечения макроскопической эквивариантности, что позволяет декомпозировать нормальные и тангенциальные взаимодействия в динамике твёрдых тел.

Исследование [17] демонстрирует применение GNN для прогнозирования полей перемещений и напряжений в конструкциях при динамических нагрузках. Итеративная схема предсказания сокращает время вычислений на порядок по сравнению с методами SPH, но обобщаемость на новые типы структур требует дополнительной валидации.

В работе [18] GNN использованы для моделирования полей деформаций в композитах и решётчатых метаматериалах. Модель преобразует конечно-элементные сетки в графы,

обучаясь на нескольких сотнях симуляционных данных, и воспроизводит нелинейные явления, такие как пластичность и потеря устойчивости. Время предсказания сокращено до долей секунды против часов для методов конечных элементов (МКЭ). Однако точность зависит от плотности обучающих данных, а обобщаемость на новые граничные условия ограничена.

GNN эффективно моделируют топологические зависимости и сокращают вычислительные затраты. К ограничениям относятся сложности масштабирования на большие графы, зависимость от качества данных.

Обсуждение

Анализ современных методов машинного обучения для моделирования физических процессов выявил ограничения и проблематику. Суррогатное моделирование, как показано в работах [1, 2, 5–7], сокращает вычислительные затраты за счёт аппроксимации ресурсоёмких моделей, но сталкивается с зависимостью от объёма обучающих данных и сложностями интерпретации. Физически информированные нейронные сети (PINNs), интегрирующие дифференциальные уравнения в функцию потерь [3, 8–10], демонстрируют потенциал для решения обратных задач, однако дисбаланс градиентов (gradient pathology) замедляет сходимость. Исследование [11] предлагает адаптивные стратегии масштабирования и модификации архитектур для смягчения этой проблемы.

Нейронные операторы, такие как FNO [4, 12–14], обеспечивают эффективное моделирование семейств уравнений, но требуют значительных объёмов данных и усложняют интерпретацию многоуровневых преобразований. Графовые нейронные сети (GNN), применяемые для анализа микроструктур [15] и динамики материалов [16–18], эффективно работают с дискретными данными, однако их масштабируемость ограничена вычислительными ресурсами и сложностью обработки крупных графов.

Методы суррогатного моделирования, PINNs, FNO и GNN демонстрируют такие преимущества, как снижение вычислительной нагрузки, интеграция физических законов, аппроксимация семейств уравнений и анализ топологических зависимостей. Однако сохраняются проблемы оптимизации обучения, интерпретируемости и устойчивости к изменениям параметров.

Перспективным направлением в данной области является разработка гибридных подходов, объединяющих сильные стороны различных методов. Например, работа [19] предлагает графовые суррогатные модели с трансферным обучением, что снижает потребность в данных и повышает обобщаемость. Дальнейшие исследования могут быть направлены на интеграцию физических ограничений в архитектуры FNO, применение адаптивного обучения для GNN и оптимизацию баланса между точностью и вычислительной эффективностью. Главной задачей остаётся создание универсальных моделей, способных адаптироваться к многомасштабным и мультифизическим задачам, сохраняя интерпретируемость и устойчивость.

Заключение

Проведенный анализ методов машинного обучения для моделирования физических процессов выявил их потенциал в снижении вычислительных затрат и повышении точности предсказаний. Каждая из рассмотренных методик – суррогатное моделирование, физически информированные нейронные сети (PINNs), нейронные операторы (FNO) и графовые нейронные сети (GNN) – демонстрирует специфические преимущества и ограничения.

Суррогатные модели и PINNs обеспечивают эффективное решение инженерных задач за счет сочетания физических законов с данными наблюдений, в то время как FNO и GNN расширяют возможности моделирования семейств дифференциальных уравнений и сложных структурных систем. Однако сохраняются проблемы, связанные с объемом обучающих данных, вычислительной эффективностью и интерпретируемостью результатов.

Перспективным направлением является разработка гибридных подходов, интегрирующих преимущества различных методов. Дальнейшие исследования должны быть сосредоточены на оптимизации архитектур моделей, совершенствовании алгоритмов обучения и повышении интерпретируемости. Что позволит расширить применение методов машинного обучения как в инженерной практике, так и в различных исследованиях.

Список использованных источников

1. Kudela J., Matousek R. Recent advances and applications of surrogate models for finite element method computations: a review // *Soft Computing*. – 2022. – Vol. 26. – № 24. – P. 13709-13733.
2. Angione C., Silverman E., Yaneske E. Using machine learning as a surrogate model for agent-based simulations // *Plos one*. – 2022. – Vol. 17. – № 2. – P. e0263150.
3. 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.
4. Li Z. et al. Fourier neural operator for parametric partial differential equations // *arXiv preprint arXiv:2010.08895*. – 2020.
5. Vohra M. et al. Fast surrogate modeling using dimensionality reduction in model inputs and field output: Application to additive manufacturing // *Reliability engineering & system safety*. – 2020. – Vol. 201. – P. 106986.
6. Guo Y. et al. Active learning for adaptive surrogate model improvement in high-dimensional problems // *Structural and Multidisciplinary Optimization*. – 2024. – Vol. 67. – № 7. – P. 122.
7. Kim J., Yi S., Wang Z. Dimensionality reduction can be used as a surrogate model for high-dimensional forward uncertainty quantification // *arXiv preprint arXiv:2402.04582*. – 2024.
8. Zhou W., Xu Y. F. Damage identification for plate structures using physics-informed neural networks // *Mechanical Systems and Signal Processing*. – 2024. – Vol. 209. – P. 111111.
9. Yamaguchi T., Mizutani T. A Physics - Informed Neural Network for the Nonlinear Damage Identification in a Reinforced Concrete Bridge Pier Using Seismic Responses // *Structural Control and Health Monitoring*. – 2024. – Vol. 2024. – № 1. – P. 5532909.
10. Chen X. et al. A two-step scaled physics-informed neural network for non-destructive testing of hull rib damage // *Ocean Engineering*. – 2025. – Vol. 319. – P. 120260.
11. Wang S., Teng Y., Perdikaris P. Understanding and mitigating gradient flow pathologies in physics-informed neural networks // *SIAM Journal on Scientific Computing*. – 2021. – Vol. 43. – № 5. – P. A3055-A3081.
12. Li Z. et al. Fourier neural operator with learned deformations for pdes on general geometries // *Journal of Machine Learning Research*. – 2023. – Vol. 24. – № 388. – P. 1-26.
13. Peng W. et al. Linear attention coupled Fourier neural operator for simulation of three-dimensional turbulence // *Physics of Fluids*. – 2023. – Vol. 35. – № 1.
14. You H. et al. Learning deep implicit Fourier neural operators (IFNOs) with applications to heterogeneous material modeling // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2022. – Vol. 398. – P. 115296.
15. Thomas A. et al. Materials fatigue prediction using graph neural networks on microstructure representations // *Scientific Reports*. – 2023. – Vol. 13. – № 1. – P. 12562.
16. Li B. et al. Learning solid dynamics with graph neural network // *Information Sciences*. – 2024. – Vol. 676. – P. 120791.
17. Li Q. et al. Machine learning prediction of structural dynamic responses using graph neural networks // *Computers & Structures*. – 2023. – Vol. 289. – P. 107188.
18. Maurizi M., Gao C., Berto F. Predicting stress, strain and deformation fields in materials and structures with graph neural networks // *Scientific reports*. – 2022. – Vol. 12. – № 1. – P. 21834.
19. Whalen E. J. Enhancing surrogate models of engineering structures with graph-based and physics-informed learning: Diss. – Massachusetts Institute of Technology, 2021.