АННОТАЦИЯ

к диссертации Мустафина Максата Бейбитовича на соискание степени доктора философии (PhD) по образовательной программе 8D06102 – Компьютерная инженерия на тему: «Построение адаптивной структурированной сетки путем решения уравнения диффузии с использованием физически информированных нейронных сетей»

Актуальность темы исследования. В последние годы в области численного моделирования и вычислительной математики наблюдается значительный рост интереса к методам генерации адаптивных сеток (adaptive mesh/grid). Эта тенденция тесно связана с необходимостью моделирования многомерных физических процессов с высокой точностью и эффективным использованием вычислительных ресурсов. Непостоянство вычислительной сетки в сложных геометриях, в граничных слоях, а также в областях, где наблюдаются локализованные явления, напрямую влияет на качество решения. Традиционные равномерные сетки требуют увеличения размера сетки по всей области для достижения высокой точности, что, особенно в многомерных задачах, приводит к резкому росту числа узлов, увеличению времени расчета и неэффективному использованию памяти. Такой подход вызывает избыточные вычисления, когда высокая точность требуется лишь в ограниченных областях. Адаптивные сетки, напротив, позволяют эффективно распределять вычислительные ресурсы и оптимизировать нагрузку. В таких случаях адаптивные сетки выступают как высокоэффективный инструмент, обеспечивающий плотность узлов, соответствующую особенностям решения.

Основная цель процесса генерации сетки – автоматическое определение распределения узлов, адаптированного к физической или геометрической сложности. Традиционные подходы (итерационные методы на основе разностных схем) хотя и точны и надежны, имеют ограничения в отношении задания граничных условий, описания многомерных геометрий и контроля динамики адаптации. Кроме того, для дифференциальных уравнений, не имеющих аналитического решения, задача эффективной генерации сетки до сих пор остается нерешённой научно-практической проблемой.

В этой работе методы нейронных сетей, основанные на физике (Physics-Informed Neural Networks, PINN), предлагаются как новая научная парадигма. Особенность метода PINN заключается в том, что он отображает координаты расчетной области через нейронные сети и включает дифференциальные характеристики задачи в функцию потерь, что позволяет одновременно удовлетворять дифференциальным уравнениям и граничным условиям, обеспечивая самостоятельную адаптацию процесса обучения.

Однако классический метод PINN также имеет недостатки: неточная реализация граничных условий, ограниченная локализованная адаптация и неполное использование гибкости архитектуры нейросети. В связи с этим в данной работе предлагается модифицированная архитектура PINN (MPINN), в которой граничные условия внедряются непосредственно на уровне архитектуры сети, а процесс адаптации локализуется с помощью специальных маска-функций. Такой подход направлен на устранение слабых сторон классического PINN и повышение качества адаптации.

Актуальность данной диссертационной работы заключается в предложении нового эффективного метода генерации адаптивных сеток с использованием PINN и MPINN при решении уравнений диффузионного типа. Этот метод особенно важен для задач с отсутствием аналитического решения и сложной геометрией, где требуется повышение точности расчётов и снижение вычислительных затрат. Кроме того, предложенный метод адаптирован для применения в расчетных областях различной размерности, что делает его универсальным инструментом для научных и инженерных задач.

Цель диссертационной работы – разработка методов генерации адаптивных структурированных сеток с помощью нейронных сетей, основанных на физике (PINN), в одно- и двумерных расчетных областях с точным соблюдением граничных условий.

Задачи исследования

1. Провести обзор применения PINN в задачах построения сеток.
2. Реализовать численное решение модели построения адаптивной сетки на основе одномерного и двумерного уравнения диффузии.
3. Применить метод PINN для генерации адаптивной сетки.
4. Реализовать классический и модифицированный методы PINN для обеспечения соблюдения граничных условий.
5. Сравнить и проанализировать результаты.

Объект исследования – задачи на основе одномерных и двумерных дифференциальных уравнений, требующие генерации адаптивной сетки. Характерной особенностью этих задач является резкое изменение или локализация решения в определённых областях, а также влияние точности выполнения граничных условий на качество решения.

Предмет исследования – методология применения нейронных сетей (PINN и MPINN) для построения адаптированных координатных систем при решении уравнений диффузионного типа, а также их архитектурная структура, алгоритмы обучения, функции потерь и численная оценка качества адаптации.

Научная новизна

- Впервые реализована генерация адаптивной сетки на основе уравнения диффузии с использованием метода PINN, при этом процесс адаптации сетки управляется дифференциальными уравнениями.

- Совпадение границ сеточных узлов с расчетной областью обеспечено модифицированным методом MPINN, что позволяет строго соблюдать граничные условия при адаптации сетки.

Основные положения, выносимые на защиту

Для генерации одномерной адаптивной расчетной сетки, основанной на уравнении диффузии, предложен метод PINN, решение которого с высокой точностью совпадает с аналитическим решением. В ходе исследования результаты PINN сравнивались с тестовой задачей, имеющей аналитическое решение, и максимальное отклонение узлов составило $5 \cdot 10^{-5}$, что свидетельствует о высокой точности построенной адаптивной сетки.

Путем модификации классического метода PINN (MPINN) предложен способ обеспечения неподвижности граничных узлов расчетной сетки. В новой архитектуре граничные условия закрепляются непосредственно в нейросети с помощью маска-функции, что предотвращает смещение граничных точек в процессе вычислений и повышает устойчивость адаптации.

Теоретическая и практическая значимость исследования

Теоретическая значимость работы заключается в объединении уравнений диффузии и метода PINN при построении адаптивных вычислительных сеток, а также в предложении MPINN-модели, выполняющей граничные условия на уровне архитектуры. Практическая значимость – в применимости метода MPINN для генерации адаптивных сеток. Метод позволяет эффективно использовать вычислительные ресурсы, повышает точность и устойчивость в сложных задачах и может применяться в практических задачах численного моделирования.

Достоверность научных результатов

Достоверность полученных результатов подтверждается теоретическим обоснованием предложенных методов, сопоставлением численных результатов с аналитическими решениями, а также сравнительным анализом моделей. Эффективность архитектуры MPINN оценивалась по RMSE, максимальному отклонению и уровню соблюдения граничных условий. Стабильность результатов проверялась серией вычислительных экспериментов при различных начальных параметрах, конфигурациях нейросетей и условиях сходимости.

Структура и краткое содержание работы

Диссертационная работа состоит из введения, четырех основных разделов, заключения и списка использованных источников. Общий объем работы – 73 страниц, включая 41 рисунок, 8 таблиц и 54 формулы.

Во введении обоснована актуальность темы, изложены цели, задачи, научная новизна и структура работы.

В первом разделе приведён подробный обзор отечественных и зарубежных исследований, посвящённых построению адаптивных вычислительных сеток и областям их применения.

Рассмотрены теоретические основы, типология и методы генерации адаптивных сеток, а также особенности их применения для решения дифференциальных уравнений.

Описаны физически-информированные нейронные сети (PINN), функции управления плотностью сетки и роль маска-функции ADF в генерации адаптивных сеток.

На основе проведенного обзора обоснована актуальность направления и преимущества метода PINN, сформирована теоретико-методологическая основа диссертационной работы.

Во втором разделе изложены теоретические основы генерации адаптивных сеток, уравнение диффузии и его применение в одномерных задачах, даны характеристики граничных условий и функций управления (control functions).

Также описана постановка двумерных уравнений адаптации и критерии оценки качества сетки.

В третьем разделе представлена методология исследования: сравнение разностных и PINN-методов, описание архитектур PINN и MPINN, алгоритмы обучения нейросетей, способы мягкого и жёсткого введения граничных условий и модельная концепция адаптации на основе маска-функций.

В четвёртом разделе проведен анализ полученных результатов. Приведено сравнение аналитических и численных решений для одно- и двумерных задач, оценено качество адаптации по RMSE и максимальным отклонениям, определены преимущества и ограничения методов PINN и MPINN.

В заключении обобщены основные результаты работы, описано их научное и практическое значение, а также предложены направления для дальнейших исследований.

Публикации по результатам исследования

По теме диссертации опубликовано 7 печатных работ, включая: 4 статьи в изданиях, рекомендованных ККСОН МОН РК, 2 статьи в рецензируемых журналах, входящих в международные базы цитирования *Web of Science* и/или *SCOPUS*, 1 работа в материалах международных конференций.

– Turar, O., Mustafin, M., & Akhmed-Zaki, D. (2025). Adaptive Grid Generation by Solving One-Dimensional Diffusion Equation Using Physics-Informed Neural Networks. Algorithms, 18(6), 334. https://doi.org/10.3390/a18060334

– Matkerim, B.; Mukhanbet, A.; Kassymbek, N.; Daribayev, B.; Mustafin, M.; Imankulov, T. Machine Learning Analysis Using the Black Oil Model and Parallel Algorithms in Oil Recovery Forecasting. *Algorithms* 2024, *17*, 354. https://doi.org/10.3390/a17080354

– Visualization for Geo-Models on Mobile Devices and Desktop Systems with Ray Tracing GPUs // 17th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, ECMOR. – 2020. P. 1-11.

– М. Б.Мустафин, О. Н. Тұрар, Д. Ж. Ахмед-Заки Тестирование визуализации vulkan для геомоделей на системах с графическими процессорами для трассировки лучей \ ВЕСТНИК Национальной инженерной академии Республики Казахстан № 3 (77). – 2020. С. 50-60.

– Мустафин М. Б., Махмут Е. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬОВАНИЯ ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ В МАШИННОМ ОБУЧЕНИИ. Вестник Национальной инженерной академии Республики Казахстан. 2024. № 4 (94) с. 136-146.

– Mustafin.M.B., Akhmed-Zaki D.Zh., Turar O.N. Application of Vulkan technology for 3D Visualization of large computing data which change over the time. Вестник КазНУ. № 2(102), 2019. -С. 46-55.

– N.M. Kassymbek, M.B. Mustafin, D.Zh. Akhmed-Zaki. Optimization of the program for solving oil displacement problem. Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University. – 2019. №2 (127). - P. 40 -48.