Мустафин Максат Бейбитовичтің 8D06102 – Компьютерлік инженерия білім беру бағдарламасы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алу үшін «Диффузия теңдеуін физикаға негізделген нейрондық желілерді қолданып шешу арқылы бейімделген құрылымдалған тор құру» тақырыбынағы диссертациясына

АҢДАТПА

Зерттеу тақырыбының өзектілігі. Сандық модельдеу мен есептік математика саласында соңғы жылдары бейімделген тор (adaptive mesh/grid) генерациялау әдістеріне деген қызығушылық едәуір артып отыр. Бұл үрдіс әсіресе көпөлшемді физикалық процестерді жоғары дәлдікпен және есептеу ресурстарын тиімді пайдалана отырып модельдеу қажеттілігімен тығыз байланысты. Күрделі геометрияларда, шекаралық қабаттарда, сондай-ақ локализацияланған құбылыстар байқалатын аймақтарда есептік тордың біртекті еместігі шешім сапасына тікелей әсер етеді. Дәстүрлі біртекті есептік торлар жоғары дәлдікке қол жеткізу үшін тор өлшемін бүкіл аймақ бойынша ұлғайтуды талап етеді. Бұл, әсіресе көпөлшемді есептерде, түйіндер санын күрт арттырып, есептеу уақытын көбейтеді және жады ресурстарын тиімсіз пайдалануға әкеледі. Мұндай тәсіл локализацияланған аймақтарда ғана нақтылық қажет болғанда артық есептеулер туғызады. Ал бейімделген торлар есептік ресурсты тиімді бөлуге және есептеу жүктемесін оңтайландыруға мүмкіндік береді. Мұндай жағдайларда бейімделген торлар – шешімнің ерекшеліктеріне сәйкес келетін түйін тығыздығын қамтамасыз ете алатын, жоғары тиімділікті есептеу құралдары ретінде қолданылады.

Тор генерациялау процесінің негізгі мақсаты – физикалық немесе геометриялық күрделілікке бейімделген түйіндердің таралуын автоматты түрде анықтау болып табылады. Дәстүрлі тәсілдер (айырымдық схемаларға негізделген итерациялық әдістер) дәл әрі сенімді болғанымен, олар шекаралық шарттарды енгізу, көпөлшемді геометрияларды сипаттау және бейімделу динамикасын бақылау тұрғысынан шектеулі болып келеді. Сонымен қатар, аналитикалық шешімі жоқ дифференциалдық теңдеулер үшін тор генерациялау міндетін тиімді шешу осы уақытқа дейін шешімі толық табылмаған ғылыми-тәжірибелік мәселе ретінде қалып отыр.

Бұл жұмыста физикаға негізделген нейрожелілік әдістер (Physics-Informed Neural Networks, PINN) жаңа ғылыми парадигма ретінде ұсынылуда. PINN әдісінің ерекшелігі – ол есептік аймақтың координаталарын нейрожелілер арқылы бейнелеп, есептің дифференциалдық сипаттамаларын шығын функциясына енгізу арқылы үйрену мүмкіндігін береді. Мұндай тәсіл дифференциалдық теңдеулер мен шекаралық шарттарды бір мезетте қанағаттандырып, бейімделу процесін дербес үйлестіруге мүмкіндік туғызады.

Алайда классикалық PINN әдісінің де кемшіліктері бар: шекаралық шарттардың дәл орындалмауы, локализацияланған бейімделу мүмкіндігінің шектеулігі және нейрожелілік архитектураның икемділігін толық пайдалана алмау мәселелері байқалады. Осыған байланысты бұл жұмыста модификацияланған PINN (MPINN) архитектурасы ұсынылады. Онда шекаралық шарттар нейрожелілік архитектура деңгейінде тікелей енгізіледі және бейімделу процесі арнайы маска-функциялар арқылы локализацияланады. Бұл тәсіл классикалық PINN әдісінің әлсіз тұстарын жоюға және бейімделу сапасын арттыруға бағытталған.

Осы диссертациялық жұмыстың өзектілігі – диффузиялық типтегі теңдеулерді шешу негізінде PINN және MPINN әдістерін қолданып, бейімделген тор генерациялаудың жаңа, тиімді тәсілін ұсыну. Бұл тәсіл әсіресе аналитикалық шешімі жоқ, күрделі геометриялы есептерде есептік дәлдікті арттыру және есептеу шығынын төмендету мақсатында аса маңызды. Сонымен қатар, ұсынылған әдіс әртүрлі өлшемдегі есептік аймақтарда кеңінен қолданылуға бейімделген, бұл оны әмбебап есептеу құралы ретінде ғылыми және инженерлік тәжірибеде пайдалануға мүмкіндік береді.

Диссертациялық жұмыстың мақсаты – бір және екі өлшемді есептік аймақтарда физикаға негізделген нейрондық желі (PINN) әдісі көмегімен бейімделген құрылымдалған торларды генерациялау және шекаралық шарттарды дәл сақтау тәсілдерін әзірлеу.

Зерттеу міндеттері:

1. Тор құру есептерінде PINN қолдануына шолу.
2. Бір өлшемді және екі өлшемді диффузия теңдеуі негізінде бейімделген тор құру моделінің сандық шешімін жүзеге асыру.
3. Бейімделген тор құру мақсатында PINN әдісін қолдану.
4. Шекаралық шарттарды сақтау үшін классикалық және модификацияланған PINN әдістерін іске асыру.
5. Нәтижелерді салыстыру және талдау.

Зерттеу нысаны – бейімделген тор генерациялауды қажет ететін бір өлшемді және екі өлшемді дифференциалдық теңдеулер негізіндегі есептер. Бұл есептерге тән ерекшелік – шешімнің белгілі бір аймақтарда күрт өзгеруі немесе локализациялануы, сондай-ақ шекаралық шарттардың орындалу нақтылығының шешім сапасына әсері.

Зерттеу пәні – диффузиялық типтегі теңдеулерді шешу арқылы бейімделген координаталар жүйесін құруда нейрондық желі модельдерді (PINN және MPINN) қолдану әдістемесі, сондай-ақ олардың архитектуралық құрылымы, оқыту алгоритмдері, шығын функциялары мен бейімделу сапасының сандық бағасы.

Жұмыстың ғылыми жаңалығы

- диффузия теңдеуіне негізделген бейімделген тор генерациясы PINN әдісімен алғаш рет жүзеге асырылды, тордың бейімделу процесі дифференциалдық теңдеулер арқылы басқарылды.

- тор түйіндері шекарасының есептеу облысымен дәл сәйкестігі модификацияланған MPINN әдісі арқылы қамтамасыз етілді – бұл торды бейімдеу кезінде шекаралық шарттарды қатаң түрде сақтау мәселесін шешуге мүмкіндік береді.

Қорғауға шығарылатын тұжырым

- Диффузия теңдеуіне негізделген бейімделген бір өлшемді есептік тор генерациясы үшін PINN әдісі ұсынылып, оның шешімі аналитикалық шешіммен жоғары дәлдікпен сәйкес келетіні көрсетілді. Зерттеу барысында PINN әдісінің нәтижелері аналитикалық шешімі бар тесттік есеппен салыстырылып, түйіндердің максималды айырмашылығы $5 \cdot 10^{-5}$- не дейін жетті. Бұл − PINN негізінде құрылған бейімделген тордың дәлдігі жоғары екенін көрсететін ғылыми дерек.

- Классикалық PINN әдісін модификациялау арқылы (MPINN) есептік тордың шекаралық түйіндерінің тұрақты қалуын (қозғалмауын) қамтамасыз ететін тәсіл ұсынылды. Жаңа архитектурада шекаралық шарттар арнайы маска-функция арқылы нейрожелінің өзінде тікелей бекітіледі, бұл шекара нүктелерінің есептеу барысында жылжымауын қамтамасыз ететін жаңа әдіс. Бұл әдіс классикалық PINN-мен салыстырғанда шекаралардағы түйіндердің орындарын дәл сақтап, бейімделу тұрақтылығын арттырады.

Зерттеудің теориялық және практикалық маңыздылығы

Жұмыстың теориялық маңыздылығы – бейімделген есептеу торын құруда диффузиялық теңдеулер мен PINN әдісінің біріктірілуімен және шекаралық шарттарды архитектура деңгейінде орындайтын MPINN моделінің ұсынылуымен сипатталады.

Практикалық маңыздылығы – MPINN әдісінің бейімделген тор генерациялауда қолдануға жарамдылығында. Әдіс есептік ресурстарды тиімді пайдалануға, күрделі есептерде дәлдік пен тұрақтылықты арттыруға мүмкіндік береді және сандық модельдеудің нақты қолданбалы есептерінде пайдалануға болады.

Ғылыми нәтижелердің дұрыстығы

Жұмыста алынған ғылыми нәтижелердің дұрыстығы ұсынылған әдістердің теориялық негізделуімен, сандық модельдеу арқылы алынған нәтижелердің аналитикалық және сандық шешімдермен салыстырылуымен дәлелденеді. MPINN архитектурасының тиімділігі RMSE, максималды ауытқу және шекаралық шарттардың орындалу деңгейі бойынша бағаланды. Алынған нәтижелердің тұрақтылығы әртүрлі бастапқы параметрлер, нейрожелілік конфигурациялар және шоғырлану жағдайлары үшін жүргізілген есептік эксперименттер арқылы тексерілді.

Жұмыстың құрылымы мен қысқаша мазмұны

Диссертациялық жұмыс кіріспеден, төрт негізгі бөлімнен, қорытындыдан және пайдаланылған әдебиеттер тізімінен тұрады. Жұмыстың жалпы көлемі – 73 бет, оның ішінде 41 сурет, 8 кесте, және 54 формула келтірілген.

Кіріспеде зерттеу тақырыбының өзектілігі негізделіп, мақсаттары, міндеттері, ғылыми жаңалығы мен құрылымы баяндалады.

Бірінші бөлімде бейімделген есептік торларды құру және олардың қолданылу саласына қатысты отандық және шетелдік ғылыми еңбектерге жан-жақты әдеби шолу жасалған. Бейімделген торлардың теориялық негіздері, типологиясы және генерация әдістері, сондай-ақ оларды дифференциалдық теңдеулерді шешуде қолдану ерекшеліктері қарастырылады. Сонымен қатар, физикаға негізделген нейрожелілер (PINN), тор тығыздығын басқаруға арналған control функциялар және ADF маска-функциясының бейімделген тор генерациясындағы рөлі сипатталған. Жүргізілген шолу негізінде зерттеу бағытының өзектілігі мен PINN әдісінің артықшылықтары негізделіп, диссертациялық жұмыстың теориялық-әдіснамалық негізі қалыптасқан.

Екінші бөлімде бейімделген тор генерациялаудың теориялық негіздері, диффузия теңдеуі және бір өлшемді есептердегі қолданылуы, шекаралық шарттар мен control функциялардың сипаттамасы берілген. Сондай-ақ екі өлшемді бейімделу теңдеулерінің қойылымы мен тор сапасын бағалау критерийлері сипатталады.

Үшінші бөлімде зерттеу әдістемесі ұсынылған. Мұнда айырымдық және PINN негізіндегі әдістер салыстырылады, PINN және MPINN архитектуралары, нейрондық желінің оқыту алгоритмдері, шекаралық шарттарды жұмсақ және қатаң түрде енгізу тәсілдері және маска-функция негізіндегі бейімделу әдісінің модельдік тұжырымдамасы құрылды.

Төртінші бөлімде алынған нәтижелер талданады. Бір өлшемді және екі өлшемді есептер бойынша аналитикалық және сандық шешімдермен салыстыру жүргізіледі, бейімделудің сапасы RMSE және максималды айырмашылықтармен бағаланып, PINN мен MPINN әдістерінің артықшылықтары мен шектеулері анықталады.

Қорытындыда жұмыстың негізгі нәтижелері жинақталып, олардың ғылыми және практикалық маңызы баяндалады. Сонымен қатар, болашақта жалғастыруға болатын бағыттар ұсынылады.

Зерттеу нәтижелері бойынша жарияланымдар

Диссертация тақырыбы бойынша 7 баспа жұмысы жарияланды, оның ішінде 4 жұмыс ҒЖБССҚК ҚР ұсынған басылымдарда, 2 жұмыс халықаралық дәйексөздер базасына кіретін рецензияланатын журналдарда «Web of Science» және/немесе «SCOPUS», 1 жұмыс халықаралық конференциялар жинақтарында жарияланды.

– 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.