ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ · ЛЕКЦИЯ 8

Современные методы вычислительной физики

Суррогатные модели, PINN и машинно-обученные межатомные потенциалы

Лю Шисян

Кафедра теплофизики (Э6)
МГТУ им. Н.Э. Баумана
Москва / 2026

Место этой лекции в курсе

Связь с предыдущей лекцией

На лекции 7 мы разобрали, **как устроена и обучается нейронная сеть**. Теперь рассмотрим, **где именно машинное обучение может входить в физическую модель**.

От алгоритма нейросети — к задачам вычислительной физики.

План

TOC

1

Суррогатные модели

Когда нужен суррогат?

Традиционный расчёт

Для каждого нового набора параметров нужно заново запускать

FEM / MC / DFT / эксперимент.

Это может занимать минуты, часы или значительно больше.

Суррогатная модель

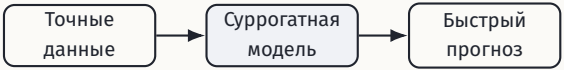
Сначала строим ограниченный набор точных данных, а затем обучаем модель приближать отображение

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{y}.$$

После обучения новый прогноз выполняется очень быстро.

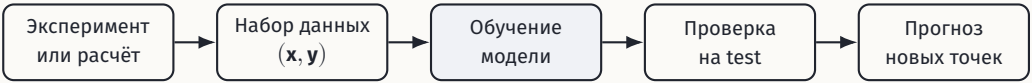
Например:

$$(T, L, \eta) \longrightarrow \text{MC} \longrightarrow \kappa.$$



Суррогат заменяет повторяющийся дорогой расчёт, но учится на его результатах.

Как строится суррогатная модель?



Входы

Геометрия, температура, состав, параметры режима:

$$\mathbf{x} = (T, L, W, \eta, ...).$$

Выход

Физическое свойство:

$$\mathbf{y} = (\kappa, C_v, ...).$$

Важно

Качество суррогата определяется не только архитектурой сети, но прежде всего качеством и покрытием обучающих данных.

Пример: прогноз теплопроводности

В учебном примере используются два входа:

$$T,\ L$$

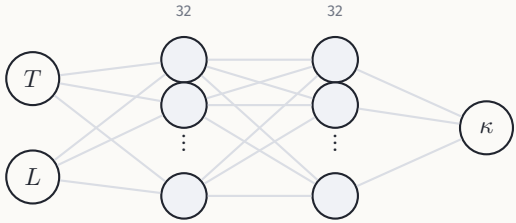
и один выход:

$$\kappa.$$

Архитектура

$$2 \to 32 \to 32 \to 1$$

Два скрытых слоя с ReLU, задача регрессии, loss — MSE.



Что даёт модель?

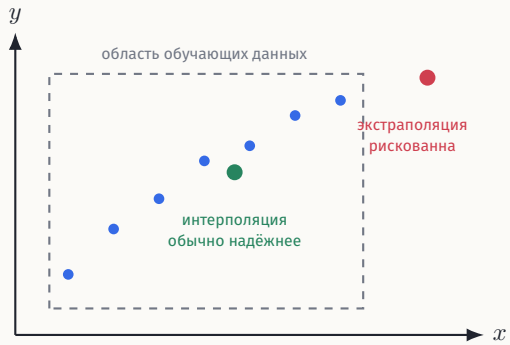
После обучения можно быстро оценивать

$$\kappa(T, L)$$

для новых точек внутри изученного диапазона.

Суррогатная модель аппроксимирует уже известное отображение «условия → свойство».

Интерполяция и экстраполяция



Интерполяция

Новая точка находится внутри области, покрытой обучающими примерами.

Экстраполяция

Модель используется за пределами известных данных.
Здесь ошибка может резко возрасти.

Перед использованием surrogate model нужно знать область применимости обучающего набора.

2

Физически-информированные нейронные сети

От обычной нейросети к PINN

Обычная нейросеть

Учится на парах данных:

$$\mathbf{x}_i \to \mathbf{y}_i.$$

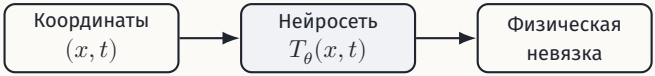
Физический закон явно не используется:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{data}}.$$

Physics-Informed NN

Кроме данных, известны уравнения и условия задачи.
Они добавляются в loss:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{data}} + \mathcal{L}_{\text{physics}}.$$



PINN обучается не только «похожести на данные», но и выполнению физического закона.

Пример: одномерная теплопроводность

Рассмотрим задачу

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \qquad x \in (0, L),\ t > 0.$$

Начальное условие

$$T(x, 0) = T_0(x).$$

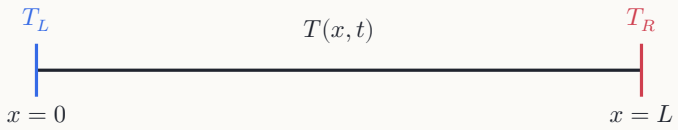
Оно задаёт начальное распределение температуры.

Граничные условия

Например,

$$T(0, t) = T_L, \qquad T(L, t) = T_R.$$

Они задают поведение на границах области.



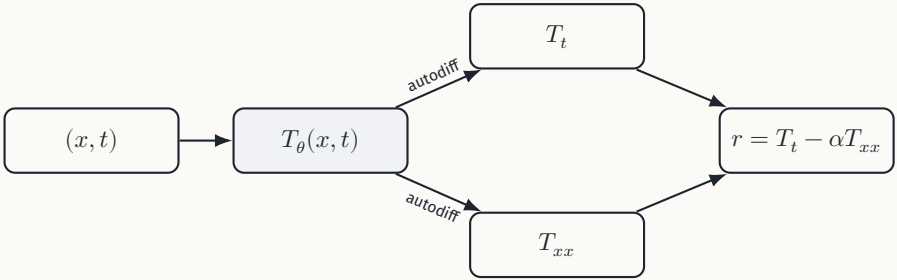
Почему PINN может вычислять производные?

Нейросеть задаёт непрерывную функцию

$$T_\theta = T_\theta(x, t).$$

Благодаря автоматическому дифференцированию можно получить

$$\frac{\partial T_\theta}{\partial t}, \qquad \frac{\partial T_\theta}{\partial x}, \qquad \frac{\partial^2 T_\theta}{\partial x^2}.$$



PINN превращает дифференциальное уравнение в функцию потерь.

Как строится функция потерь PINN?

Для теплопроводности определим residual

$$r(x,t) = T_t - \alpha T_{xx}.$$

Физика внутри области

$$\mathcal{L}_{\text{PDE}} = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |r(x_i, t_i)|^2.$$

Начальное условие

$$\mathcal{L}_{\text{IC}} = \frac{1}{N_i} \sum_{i} |T_\theta(x_i, 0) - T_0(x_i)|^2.$$

Граничные условия

$$\mathcal{L}_{\text{BC}} = \frac{1}{N_b} \sum_{i} |T_\theta(x_i^b, t_i) - T_b|^2.$$

Дополнительные данные

При наличии измерений можно добавить

$$\mathcal{L}_{\text{data}}.$$

$$\mathcal{L} = \lambda_f \mathcal{L}_{\text{PDE}} + \lambda_b \mathcal{L}_{\text{BC}} + \lambda_i \mathcal{L}_{\text{IC}} + \lambda_d \mathcal{L}_{\text{data}}$$

Преимущества и ограничения PINN

Преимущества

- физика входит прямо в процесс обучения;
- можно использовать редкие или шумные данные;
- легко включать неизвестные физические параметры;
- решение задаётся непрерывной функцией $T_\theta(x, t)$.

Ограничения

- обучение может быть трудным и медленным;
- разные компоненты loss имеют разные масштабы;
- сложны stiff, multiscale и высокочастотные задачи;
- сходимость оптимизатора не эквивалентна автоматически высокой физической точности.

PINN полезны там, где данные и физические ограничения нужно учитывать одновременно.

3

Машинно-обученные межатомные потенциалы

Почему молекулярной динамике нужен потенциал?

Движение атомов определяется уравнением Ньютона:

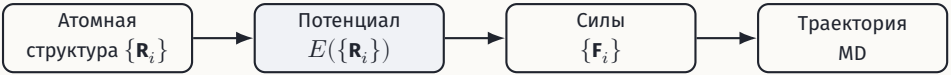
$$m_i \ddot{\mathbf{R}}_i = \mathbf{F}_i.$$

Но силы связаны с потенциальной энергией:

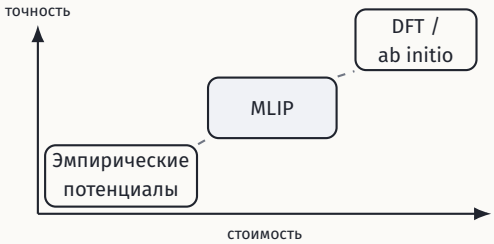
$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{R}_i}.$$

Следовательно, ключевой объект атомистического моделирования —

$$E(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N).$$



DFT, эмпирические потенциалы и MLIP



Эмпирические потенциалы

- очень быстрые;
- аналитическая форма задаётся заранее;
- ограниченная гибкость.

DFT

- высокая точность;
- используется для получения reference data;
- высокая вычислительная стоимость.

MLIP

- обучаются на reference data;
- существенно быстрее DFT;
- способны описывать сложные зависимости.

MLIP стремятся сочетать точность reference data с эффективностью классического атомистического моделирования.

Как строится MLIP?

Что должна содержать обучающая выборка?

Не одну равновесную структуру, а разнообразные конфигурации: температуры, деформации, дефекты, поверхности, неравновесные состояния и т.д.

Главное ограничение

MLIP надёжен только в той области конфигурационного пространства, которая достаточно представлена в обучающих данных.

Основные семейства MLIP

Локальные дескрипторы

Сначала локальное окружение атома переводится в набор признаков.

Примеры:
BPNN, GAP, MTP, ACE, NEP.

Message passing

Информация передаётся между соседними атомами по графу.

Пример:
SchNet и родственные модели.

Эквивариантные модели

Архитектура явно учитывает преобразования вращения и геометрию.

Примеры:
NequIP, MACE и др.

Архитектуры различаются, но цель одна: точно приблизить поверхность потенциальной энергии.

NEP: от локального окружения к атомной энергии

Для атома i строится набор локальных дескрипторов

$$\mathbf{q}_i = (q_1^{(i)}, q_2^{(i)}, \dots, q_{N_{\text{des}}}^{(i)}).$$

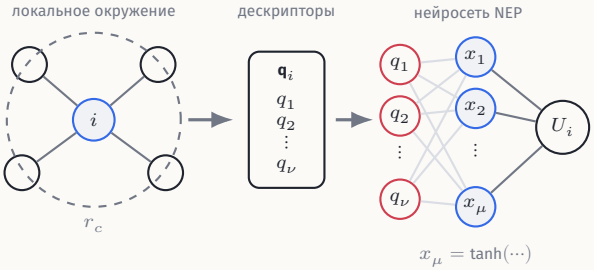
Они подаются в нейронную сеть NEP:

$$\mathbf{q}_i \longrightarrow \mathbf{x}_i \longrightarrow U_i.$$

Здесь $\mathbf{x}_i$ — выходы скрытого слоя после функции активации tanh.

Полная энергия системы:

$$E = \sum_i U_i.$$



Силы определяются как

$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{R}_i}.$$

Локальное окружение $\rightarrow$ дескрипторы $\rightarrow$ скрытые переменные x_μ $\rightarrow$ атомная энергия U_i.

NEP: что описывают локальные дескрипторы?

Радиальная информация

Расстояния до соседних атомов:

$$q_n^i = \sum_{j \neq i} g_n(r_{ij}).$$

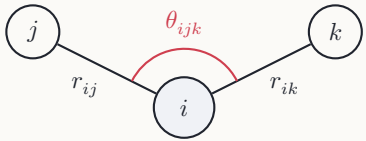
Описывает, **на каких расстояниях** находятся соседи.

Угловая информация

Геометрия троек атомов:

$$q_{nl}^i = \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i} g_n(r_{ij}) g_n(r_{ik}) P_l(\cos\theta_{ijk}).$$

Описывает, **как расположены** соседи вокруг атома.



Дескриптор — численное описание локального окружения атома.

NEP: обучение потенциала

Reference-данные обычно включают **энергию**, **силы** и **вириал / напряжения**.

Поэтому функция потерь записывается как

$$L = \lambda_E L_E + \lambda_F L_F + \lambda_V L_V + L_{\text{reg}}$$

Энергия

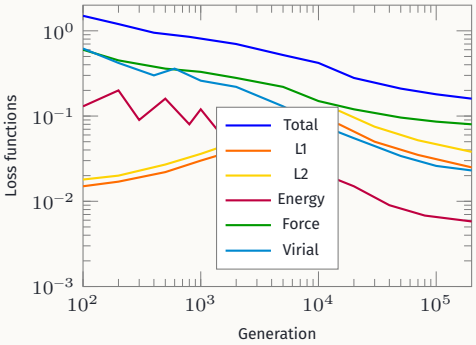
$$E^{\text{NEP}} \leftrightarrow E^{\text{DFT}}$$

Силы

$$\mathbf{F}^{\text{NEP}} \leftrightarrow \mathbf{F}^{\text{DFT}}$$

Вириал

$$\mathbf{V}^{\text{NEP}} \leftrightarrow \mathbf{V}^{\text{DFT}}$$



Обучение NEP — это согласование энергии, сил и вириала с reference-данными.

4

Практика и итоги

Практика 1: обучаем surrogate для $\kappa(T, L)$

Учебная задача

Сгенерировать данные

$$(T, L) \to \kappa,$$

разделить их на train/test и обучить небольшую сеть регрессии.

Модель

$$2 \to 32 \to 32 \to 1$$

ReLU + MSE + Adam.

```python
class KappaNet(nn.Module):
    def __init__(self):
        super().__init__()
        self.net = nn.Sequential(
            nn.Linear(2, 32),
            nn.ReLU(),
            nn.Linear(32, 32),
            nn.ReLU(),
            nn.Linear(32, 1)
        )
    def forward(self, x):
        return self.net(x)

criterion = nn.MSELoss()
optimizer = optim.Adam(
    model.parameters(), lr=1e-3
)
```

Практика 2: фононный спектр с NEP

В notebook используется готовый потенциал NEP для Si.

Последовательность

1. загрузить структуру и NEP;
2. релаксировать структуру;
3. вычислить силовые константы;
4. построить k-путь;
5. получить фононный спектр и DOS.

$$\text{POSCAR} \rightarrow \text{NEP} \rightarrow \Phi^{(2)} \rightarrow \omega(\mathbf{q})$$

```python
from ase.io import read
from calorine.calculators import CPUNEP
from calorine.tools import (
    get_force_constants,
    relax_structure
)

structure = read("POSCAR-Si")
calculator = CPUNEP("Si_NEP.txt")
structure.calc = calculator

relax_structure(structure, fmax=1e-4)
phonon = get_force_constants(
    structure, calculator, [4, 4, 4]
)
```

Итоги лекции

Что мы научились различать

- surrogate model — аппроксимация дорогого отображения;
- PINN — обучение с физическими ограничениями;
- MLIP — аппроксимация атомной потенциальной энергии и сил.

Общая математическая идея

Во всех случаях строится модель с параметрами θ и определяется цель:

$$\boxed{\theta^* = \arg\min_{\theta} \mathcal{L}(\theta)}.$$

Но содержание θ, данных и функции потерь зависит от физической задачи.

Машинное обучение расширяет инструментарий вычислительной физики, но не отменяет физическую постановку задачи.