КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АЛЬ-ФАРАБИ · КАФЕДРА КОМПЬЮТЕРНЫХ НАУК

Научное машинное обучение

Лекция 8. Графовые нейронные сети для научного моделирования

Передача сообщений на графах: частицы, сетки и молекулы

Кенжебек Ержан Ғалымжанұлы

PhD, старший преподаватель кафедры компьютерных наук

Цель и план лекции

Цель

Изучить графовые нейронные сети (GNN) с передачей сообщений и их использование для моделирования физических систем на сетках и системах частиц.

План

1. Графы как модель физических систем
2. Передача сообщений
3. Основные архитектуры GNN
4. Связь с диффузией и численными схемами
5. Моделирование на сетках и частицах
6. Ограничения GNN

Почему графы

Неструктурированные сетки

Узлы — вершины сетки, рёбра — связи ячеек.

Системы частиц

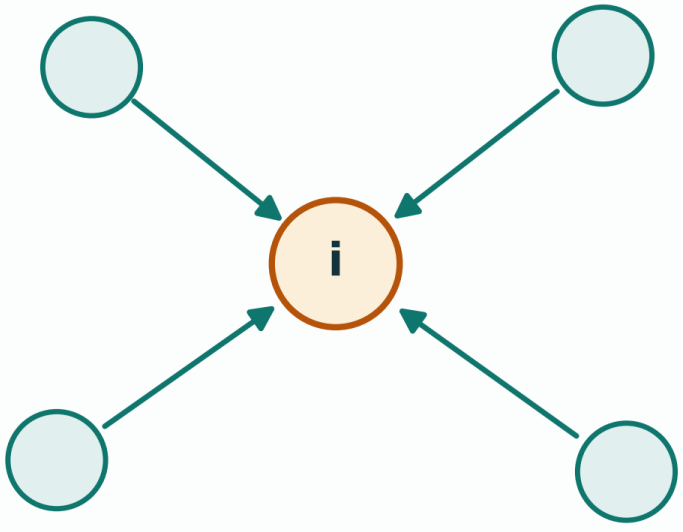
Узлы — частицы, рёбра — взаимодействия в радиусе обрезания.

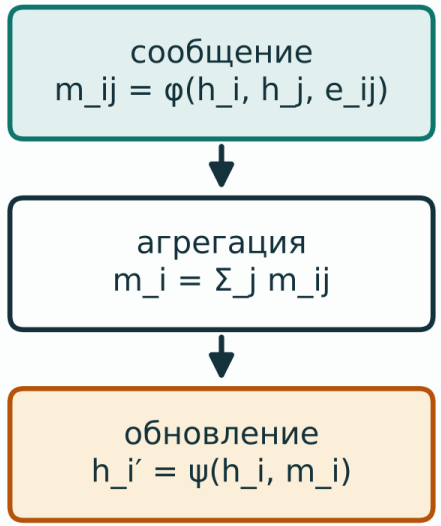
Молекулы и материалы

Узлы — атомы, рёбра — связи и близость.

Граф $G = (V, E)$: множество узлов с признаками h_i и рёбер с признаками e_{ij}.

Передача сообщений





Один слой GNN повторяется K раз: информация доходит до K-го соседа

Каждый узел получает сообщения от соседей, агрегирует их и обновляет своё состояние. Формулы соответствуют схеме MPNN (Gilmer и др., 2017).

Симметрии и агрегаторы

Результат не должен зависеть от нумерации узлов: агрегатор обязан быть перестановочно-инвариантным.

Сумма

Сохраняет число соседей; естественна для потоков и сил.

Среднее

Нормирует по степени узла.

Максимум

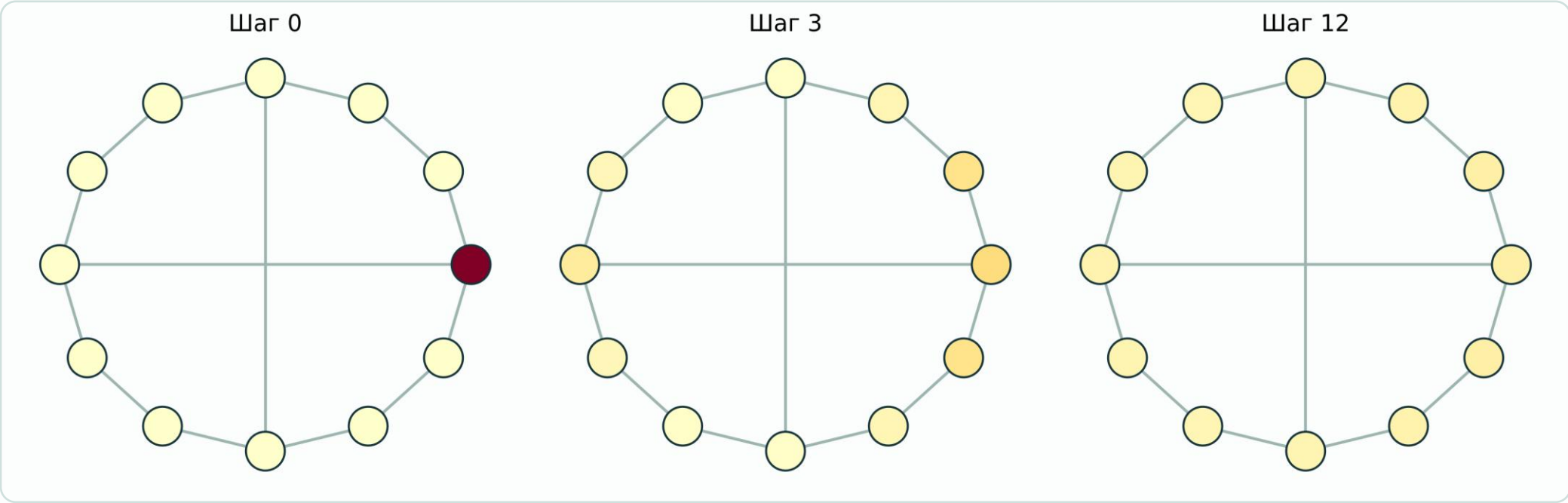
Выделяет самые сильные сигналы.

Для физики важна и эквивариантность к поворотам и сдвигам (Satorras и др., 2021).

Основные архитектуры

Модель	Идея	Источник
GCN	Свёртка со сглаживанием по нормированной смежности	Kipf, Welling, 2017
GraphSAGE	Выборка и агрегация соседей	Hamilton и др., 2017
GAT	Внимание: вес соседа зависит от пары узлов	Veličković и др., 2018
GIN	Сумма и MLP; максимальная различающая способность	Xu и др., 2019

Связь с диффузией на графе



Шаг $x \leftarrow x - \alpha \cdot L \cdot x$ с лапласианом графа L — простейшая передача сообщений и аналог явной схемы для уравнения теплопроводности. Начальный импульс в одном узле растекается по графу.

Лаплациан графа

$$L = D - A,\ (Lx)_i = \Sigma_{j \in N(i)} (x_i - x_j)$$

Здесь A — матрица смежности, D — диагональная матрица степеней. Лаплациан — дискретный аналог оператора Δ с обратным знаком.

Обучаемые GNN обобщают такие операторы: вместо фиксированных весов ребра сеть обучает функции φ и ψ.

MeshGraphNets

Схема «кодировщик – процессор – декодировщик» на сетке расчётной области (Pfaff и др., 2021).

- Кодировщик превращает физические признаки узлов и рёбер в векторы.
- Процессор — несколько слоёв передачи сообщений.
- Декодировщик возвращает скорости изменения состояния; шаг по времени — интегрирование.
- Применяется к течениям, деформациям, тканям; сетка может перестраиваться.

Моделирование частиц

Сеть Graph Network-based Simulator (Sanchez-Gonzalez и др., 2020) предсказывает ускорения частиц по графу соседей и обновляет их положение явным шагом.

- Рёбра строятся по радиусу взаимодействия.
- Для устойчивости на длинных траекториях добавляют шум в обучающие данные.
- Один и тот же обученный закон работает при другом числе частиц.

Прогноз погоды на графе

GraphCast (Lam и др., Science, 2023) — GNN на многоуровневой сетке поверхности Земли; делает 10-дневный прогноз с разрешением 0,25° менее чем за минуту на одном ускорителе TPU.

Обучена на реанализе ERA5; по ряду показателей превосходит оперативную систему HRES Европейского центра среднесрочных прогнозов.

Ограничения GNN

Сглаживание

При многих слоях признаки узлов становятся неразличимыми.

Дальние связи

Информация плохо проходит большие расстояния по графу.

Накопление ошибки

При долгих прогнозах малые ошибки шагов растут.

Лекарства: остаточные связи, многоуровневые сетки, шум при обучении, физические симметрии.

Инструменты

- PyTorch Geometric и DGL — библиотеки для GNN.
- Типовой слой: MessagePassing с функциями message, aggregate, update.
- Данные: списки рёбер, признаки узлов и рёбер, временные ряды состояний.
- Задание 8: передача сообщений для динамики частиц или диффузии на графе.

Выводы

- Графы естественно описывают сетки, частицы и молекулы.
- Слой GNN: сообщение – агрегация – обновление; агрегатор обязан быть инвариантен к перестановке.
- Лапласиан графа — дискретный аналог оператора Лапласа; простая диффузия — передача сообщений.
- MeshGraphNets, GNS и GraphCast показывают масштабируемость GNN на сетках, частицах и глобальных прогнозах.
- Проблемы: сглаживание, дальние связи, накопление ошибки.

Контрольные вопросы

1. Как физическая система описывается графом?
2. Из каких шагов состоит слой передачи сообщений?
3. Почему агрегатор должен быть инвариантен к перестановке?
4. Как диффузия на графе связана с уравнением теплопроводности?
5. Опишите схему MeshGraphNets.
6. Какие ограничения у GNN?

Литература

1. Gilmer J. et al. Neural message passing for quantum chemistry // ICML. 2017.
2. Kipf T.N., Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks // ICLR. 2017.
3. Pfaff T. et al. Learning mesh-based simulation with graph networks // ICLR. 2021.
4. Sanchez-Gonzalez A. et al. Learning to simulate complex physics with graph networks // ICML. 2020.
5. Battaglia P. et al. Relational inductive biases, deep learning, and graph networks. arXiv:1806.01261, 2018.
6. Lam R. et al. Learning skillful medium-range global weather forecasting // Science. 2023. Vol. 382. P. 1416–1421.
7. Bronstein M. et al. Geometric deep learning: grids, groups, graphs, geodesics, and gauges. arXiv:2104.13478, 2021.