



**IITMO**

# Генеративный дизайн физических объектов и где он обитает

**Аспирант**

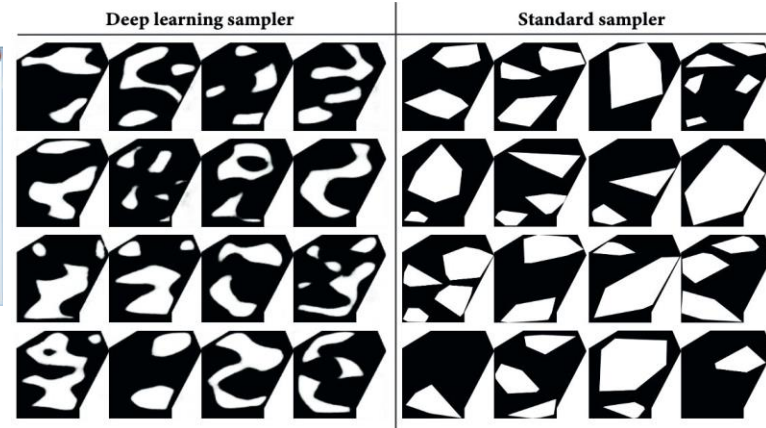
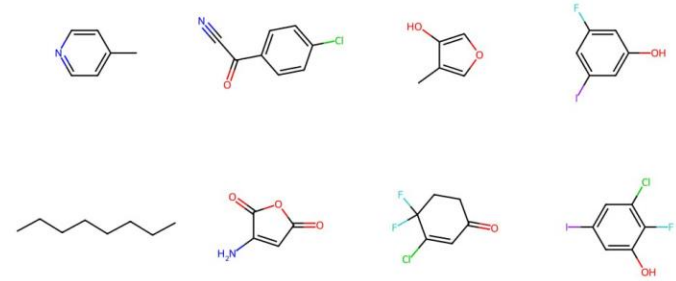
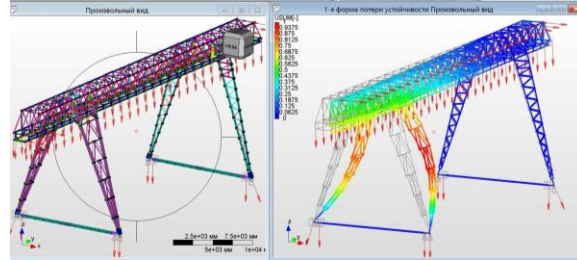
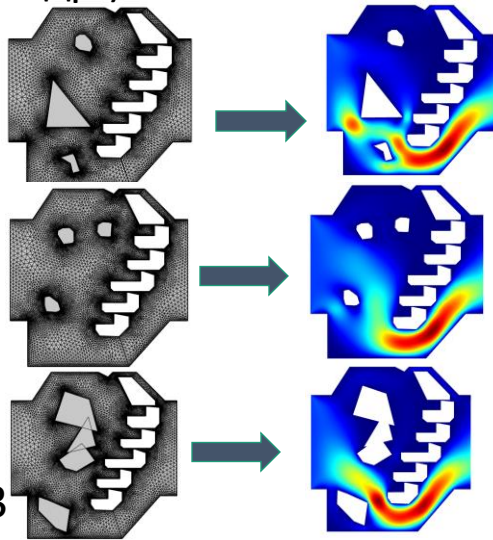
Соловьев Глеб Витальевич

Санкт-Петербург - 2024

# **Генеративный дизайн и подходы к нему.**

# В чем заключается генеративный дизайн физических объектов?

- Создание структур, которые предполагается использовать в той или иной области.
- Оценка способности созданных объектов выполнять требуемые условия (Прочность, теплопроводность, химические свойства и др.)



# Какие существуют подходы для различных задач?

## Генерация объектов (сэмплирование):

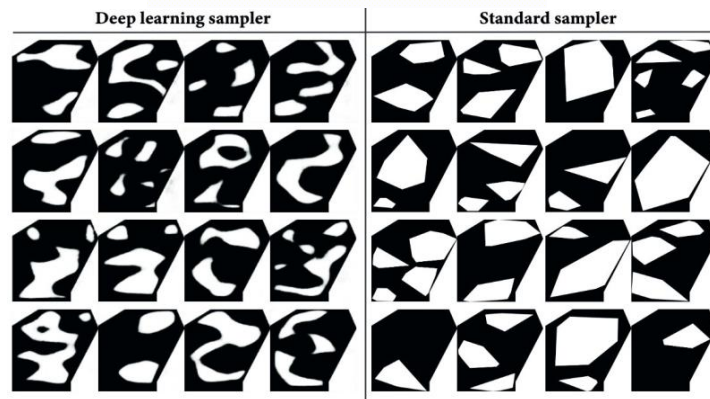
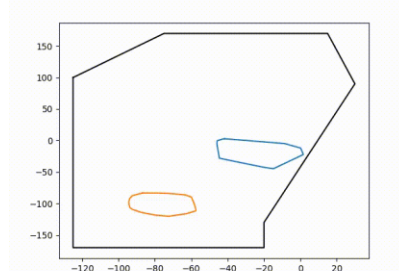
VAE/GAN на основе сверточных нейронных сетей.

### Плюсы:

- Генерация изначально более эффективных примеров.
- Архитектура GAN/VAE проще, чем комплекс валидации и исправления некорректных структур.

### Минусы:

- Требуются данные для обучения под каждый пример.



Случайная генерация точек. GEFEST-like.

### Плюсы:

- Не требуется обучение.
- Возможность настройки размера, числа точек и локализации объектов.

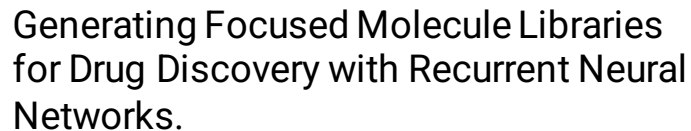
### Минусы:

- Случайная генерация, независимая от качества объектов.
- Сложный алгоритм валидации генерируемых объектов.

**WITMO**

# GNOME or Google DeepMind

- <https://www.nature.com/articles/s41586-023-06735-9?ref=maginitive.com>

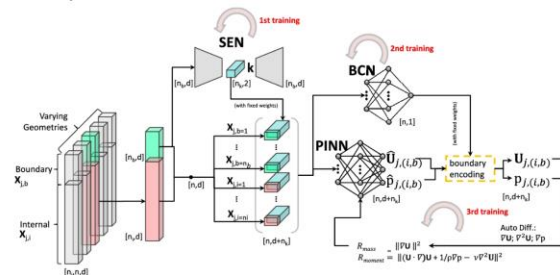
[illegible]

<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c01289>

# Какие существуют подходы для различных задач?

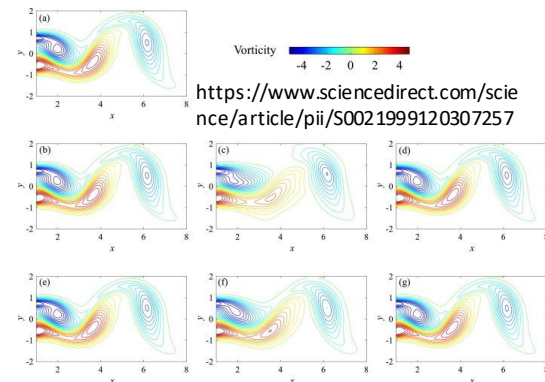
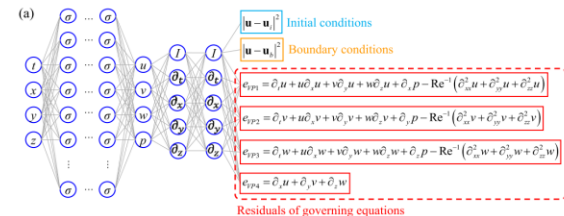
## Суррогатное моделирование физ процессов:

- Физически обоснованные модели PINNs.
- VAE и GAN на основе сверточных нейронных сетей.
- Их комбинации.



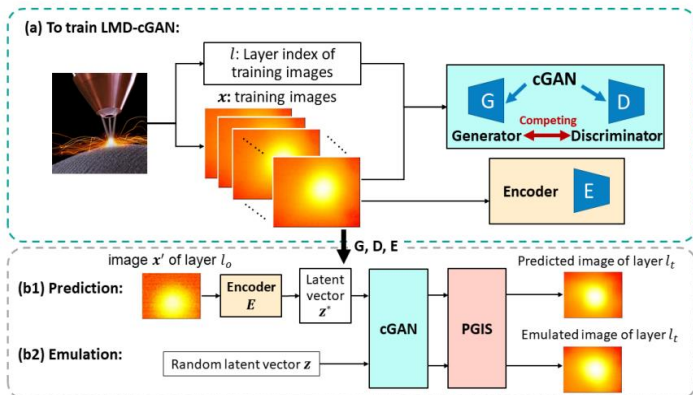
Schematic description of the architecture of the proposed DNN Method (GA/PINN) to generate surrogates of PDEs with irregular non-parameterized geometries using PINNs. The network consists of three subnetworks which are trained separately. The SEN is a Variational-Auto-Encoder type reducing the geometry dimensions to a latent vector  $k$ . PINN takes  $k$  and spatial positions to solve the PDE and building the surrogate and BCN, by also taking spatial information and  $k$ , helps constraining boundary conditions in the PINN. Dimensions at each operation are noted in brackets.

<https://link.springer.com/article/10.1186/s40323-022-00221-z>



## GAN without timeseries info

(Laser metal deposition.  
Prediction of next thermal  
map layer)



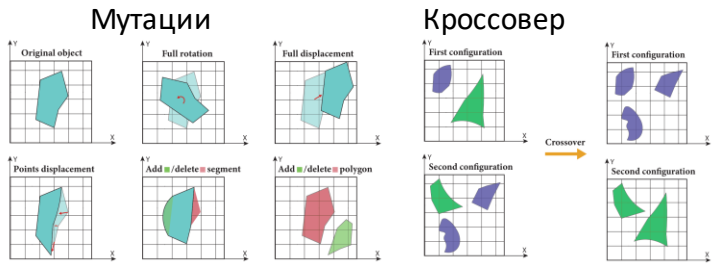


# Применяемые нами методы сегодня:

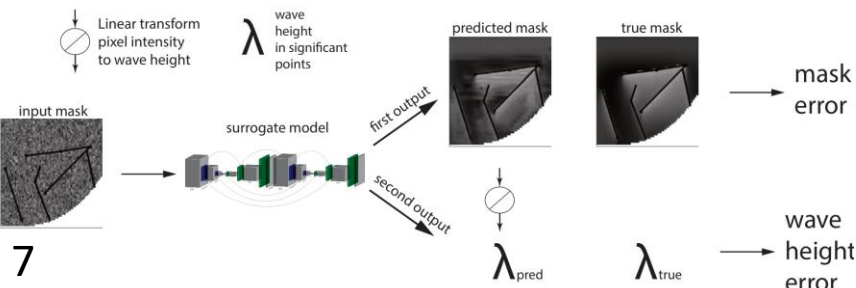


Основа генерации и оптимизации структур - полигоны с переводом в графы и их эволюция.

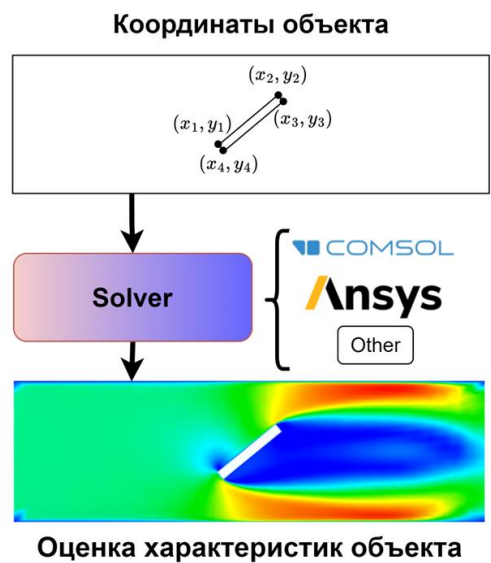
Основной метод валидации физических свойств - применение ПО для инженерного анализа и численного моделирования



В одной из задач также применялись и суррогатные модели.



## Этап шага оптимизации



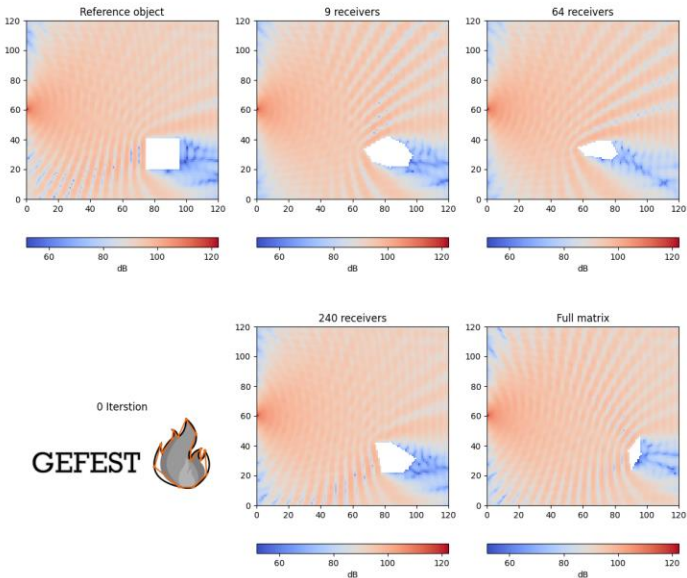
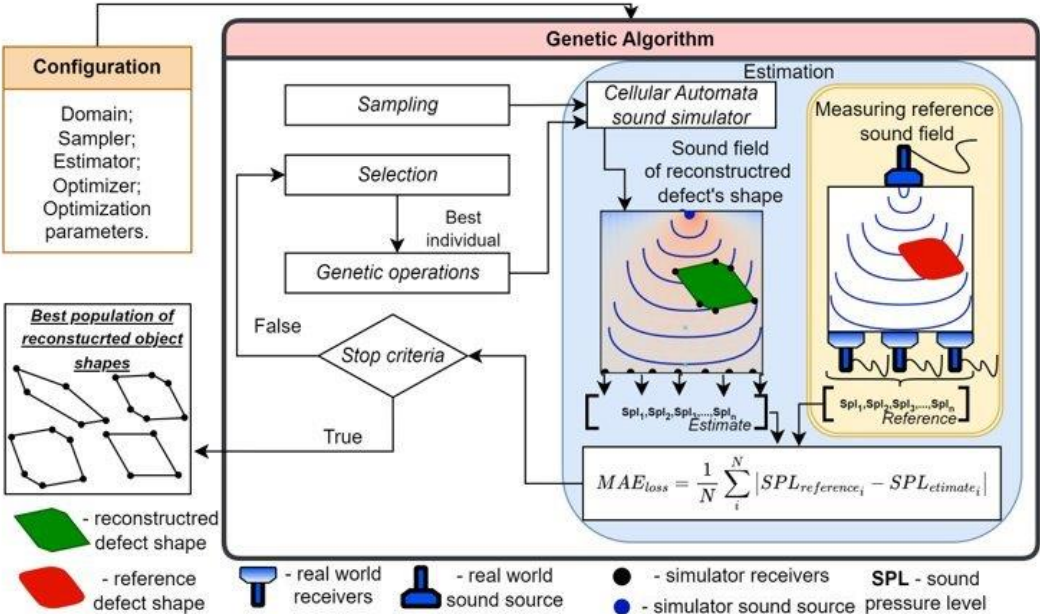
# **Примеры решенных задач.**



# GEFEST. Восстановление формы объектов, окруженных сплошной средой.

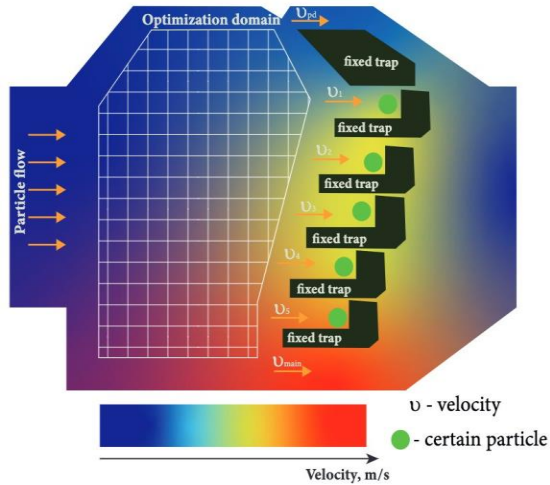


Задача поиска формы объекта, влияющего на окружение.



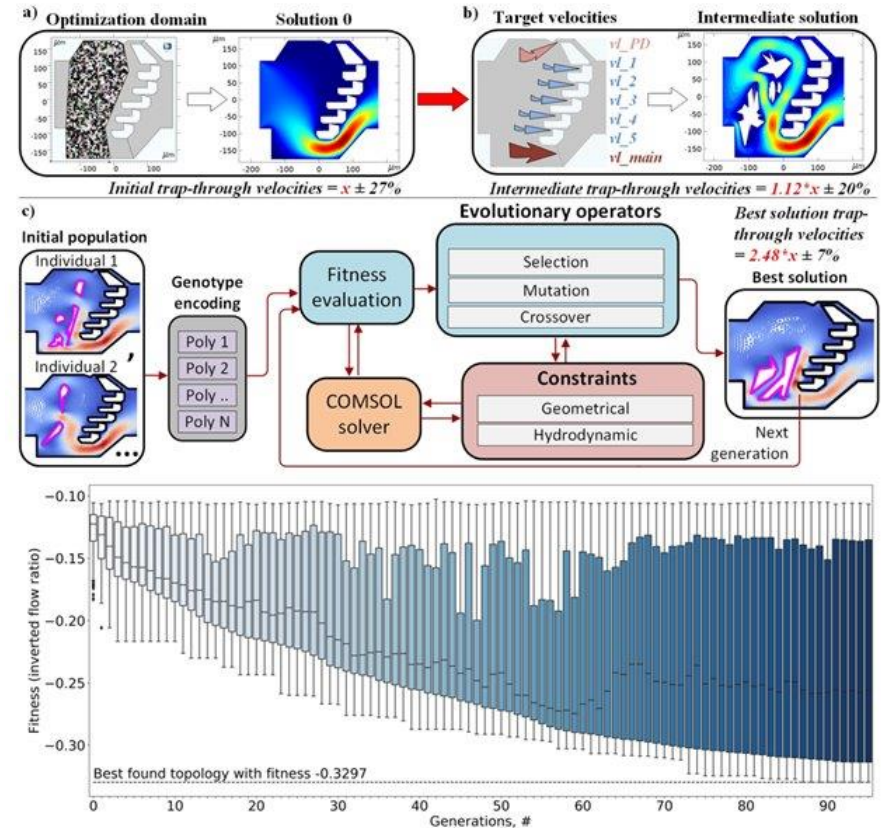
# Проектирование микрофлюидных устройств.

## Основная постановка задачи, решаемая с помощью эволюционных подходов.



$$Y = \frac{\sum_{i=1}^5 v_i}{v_{\text{main}} + v_{\text{pd}}} \longrightarrow \max$$

Задача поиска  
геометрической  
структуры лабиринта.

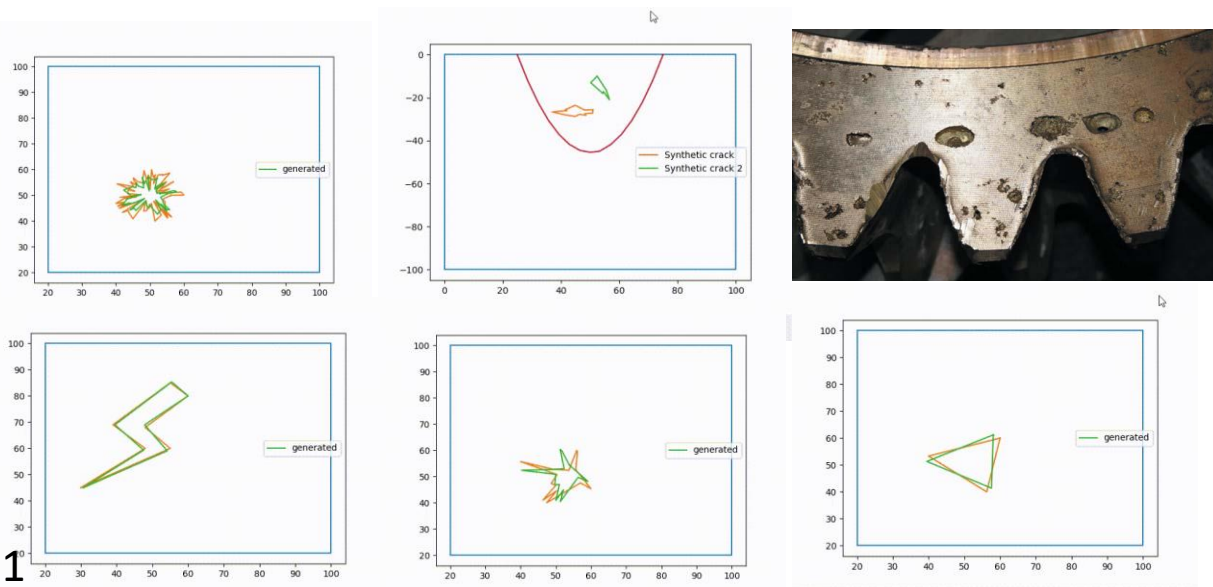


# Применение одноэтапной эволюции для генерации семейства синтетических объектов.

# ИТМО

Генерация труднодоступных данных на основе нескольких имеющихся альбомных примерах, с учетом их принадлежности к конкретным классам.

Задача генерации синтетических данных, на основе существующих структур.



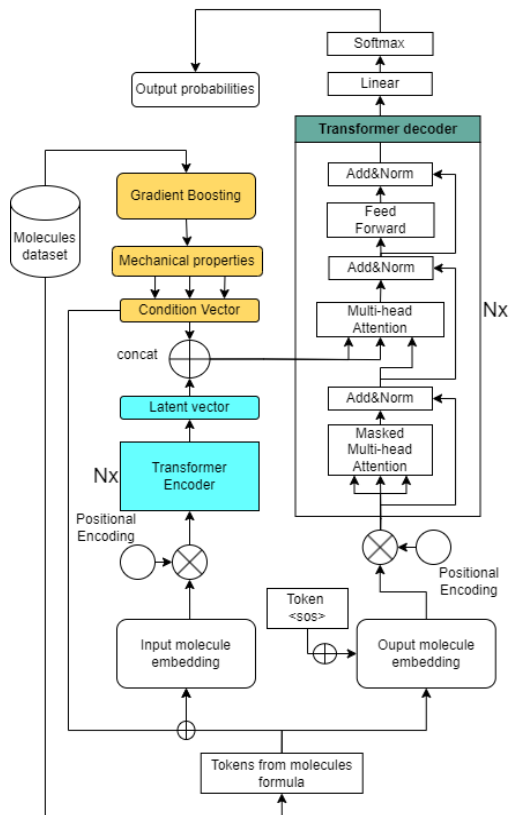
НАИМЕНОВАНИЕ	ПРИЧИНА	НАИМЕНОВАНИЕ	ПРИЧИНА
КРАТЕРЫ	<ul style="list-style-type: none"><li>Обрыв дуги</li><li>Неправильное выполнение конечного участка шва</li></ul>	ПОДРЕЗЫ	<ul style="list-style-type: none"><li>Большой сварочный ток</li><li>Длинная дуга</li><li>При сварке угловых швов - смещение электрода в сторону вертикальной стенки</li></ul>
ПОРЫ	<ul style="list-style-type: none"><li>Быстрое охлаждение шва</li><li>Загрязнение кромок маслом, ржавчиной и т.п.</li><li>Неподвижный электрод</li><li>Высокая скорость сварки</li></ul>	НЕПРОВАР	<ul style="list-style-type: none"><li>Малый угол скоса вертикальных кромок</li><li>Малый зазор между ними</li><li>Загрязнение кромок</li><li>Недостаточный сварочный ток</li><li>Зависание скорость сварки</li></ul>
ВКЛЮЧЕНИЯ ШЛАКА	<ul style="list-style-type: none"><li>Грязь на кромок</li><li>Малый сварочный ток</li><li>Большая скорость сварки</li></ul>	ПРОЖОГ	<ul style="list-style-type: none"><li>Большой ток при малой скорости сварки</li><li>Большой зазор между кромками</li><li>Под свариваемый шов плохой подката флюсовой подушки или нечистота подкладке</li></ul>
НЕСПЛАВЛЕНИЯ	<ul style="list-style-type: none"><li>Плохая зачистка кромок</li><li>Большая длина дуги</li><li>Неподвижный сварочный ток</li><li>Большая скорость сварки</li></ul>	НЕРАВНОМЕРНАЯ ФОРМА ШВА	<ul style="list-style-type: none"><li>Неустойчивый режим сварки</li><li>Неточное направление электрода</li></ul>
НАПЛЫВ	<ul style="list-style-type: none"><li>Большой сварочный ток</li><li>Неправильный наклон электрода</li><li>Удлинение дуги</li></ul>	ТРЕЩИНЫ	<ul style="list-style-type: none"><li>Резкое охлаждение конструкции</li><li>Высокие напряжения в жестко закрепленных конструкции</li><li>Повышенное содержание серы или фосфора</li></ul>
СВИЩИ	<ul style="list-style-type: none"><li>Низкая пластичность металла шва</li><li>Образование заключенных структур</li><li>Напряжения от неравномерного нагрева</li></ul>	ПЕРЕГРЕВ (ПЕРЕЖОГ) МЕТАЛЛА	<ul style="list-style-type: none"><li>Чрезмерный нагрев окружающей зоны</li><li>Неправильный выбор тепловой мощности</li><li>Завышенное значение мощности пламени или сварочного тока</li></ul>

# Генерация последовательностей молекул. Применение трансформера на основе схемы CVAE

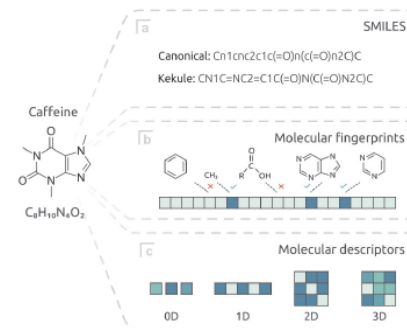
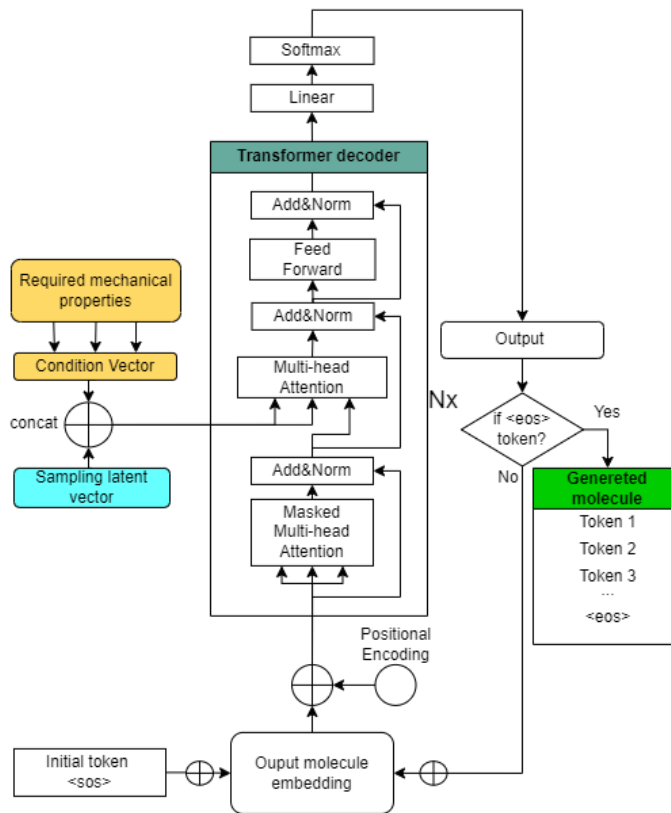


Задача генерации  
структур формул  
химических веществ.

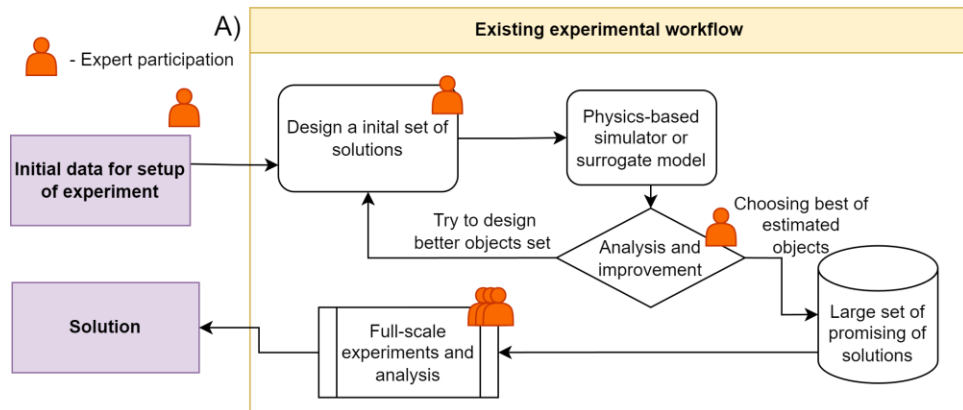
## Train scheme



## Inference scheme

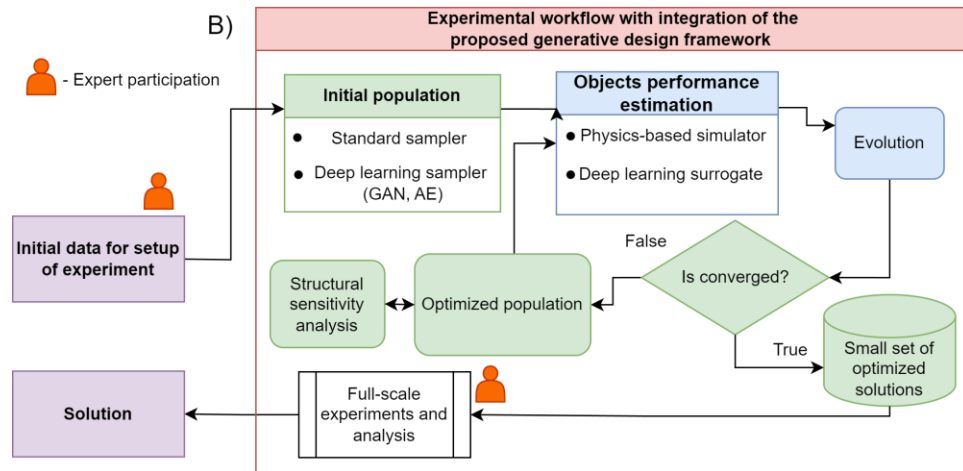


# Применение генеративного дизайна в области дизайна экспериментов.



A) - Классический подход проведения эксперимента.

В) - Подход с применением ГД.

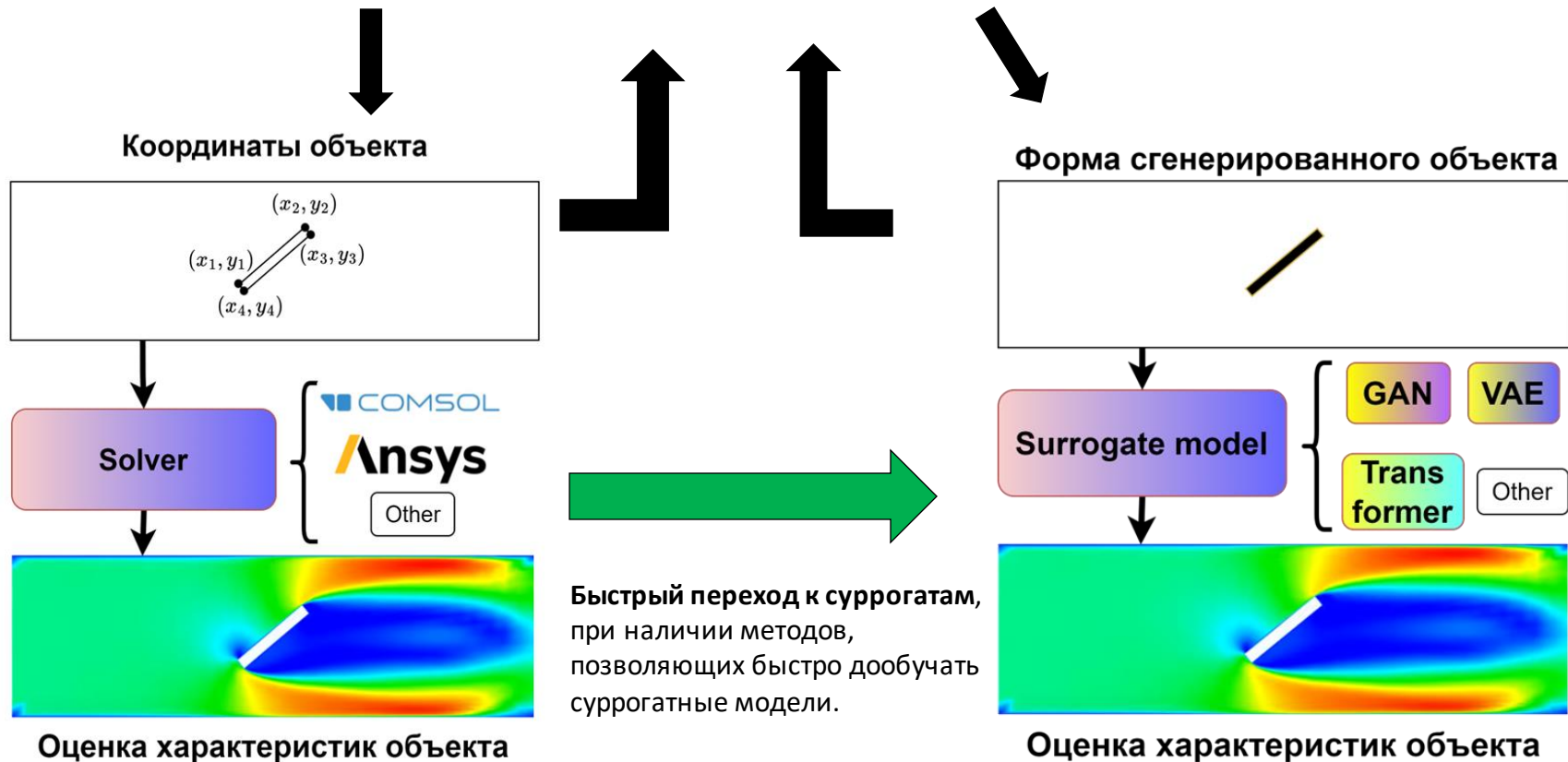


**Цели дальнейших  
исследований.**



# Применение существующих методов в более эффективной постановке.

## Эволюционная оптимизация





# Существующие проблемы.



Применение ЭО позволяет разрешать любые, в особенности многокритериальные задачи.

## **Проблемы:**

- Долгое время сходимости.
- Требуется Солвер или Суррогат.

Наличие солвера позволяет точно валидировать сгенерированные объекты.

## **Проблемы:**

- Нет гарантии наличия солвера под задачу.
- Длительное время вычисления одной итерации симулятором.

Нет солвера -  
нет данных. Нет данных -

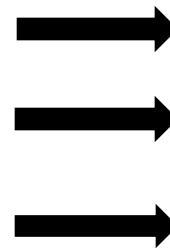
# Разработка суррогатных моделей.

**Возможность применения различных архитектур и их комбинаций для:**

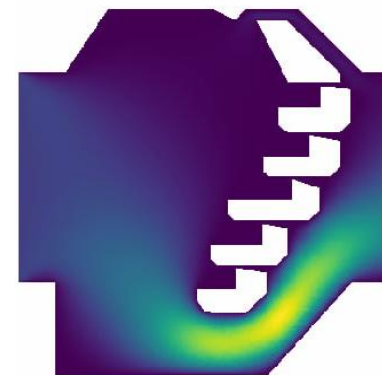
- Суррогатного сэмплера для генерации начальной популяции структур (Diffusion models, Transformers) и для замены симулятора.



Solving

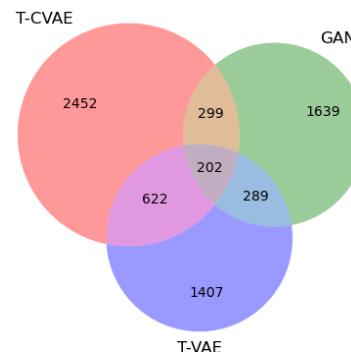


**ИТМО**  
Result



- Применение SOTA генеративных моделей и их кросс-ансамблей для генерации различных объектов.

Total valid, novel and condition required molecules from 100k generated

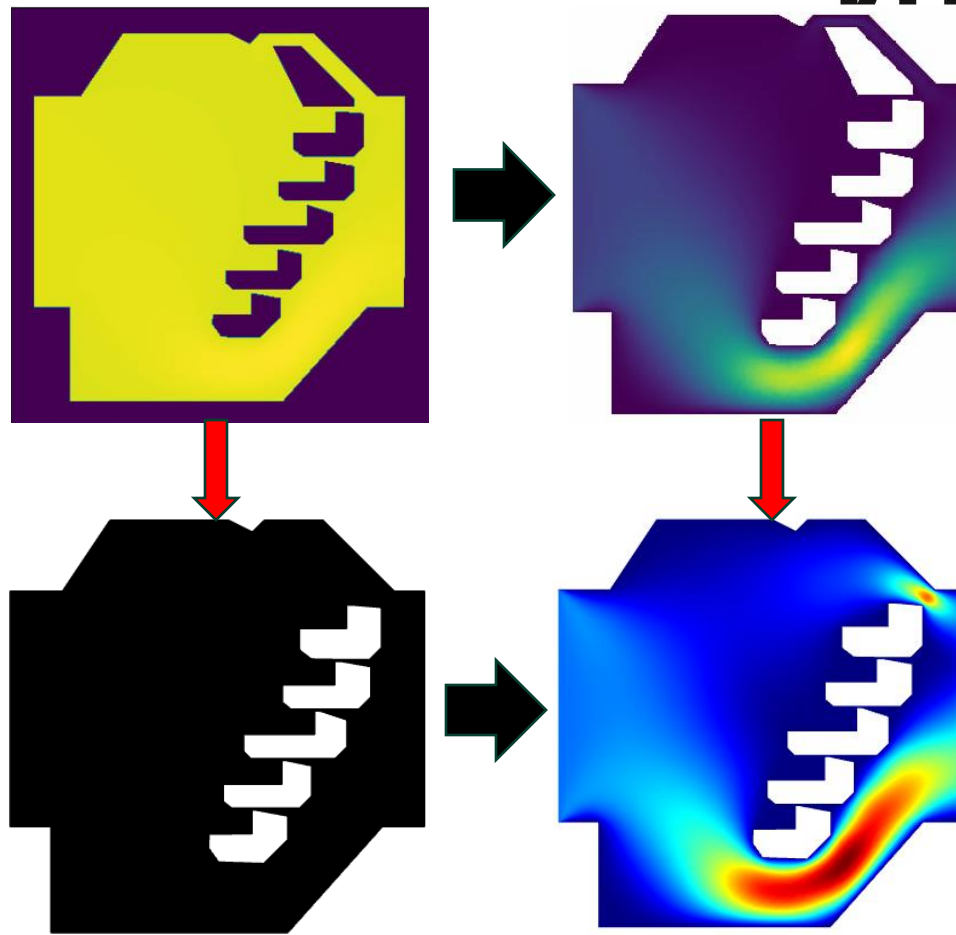


- Применение ансамблирования.

## Разработка суррогатных моделей, дообучаемых под схожие задачи.

### Основные этапы.

- Генерация данных для обучения.
  - Обучение нейронной сети для решения поставленной задачи.
- 
- Постановка новой задачи в рассматриваемой области.
  - Генерация меньшего числа примеров для дообучения существующей сети.



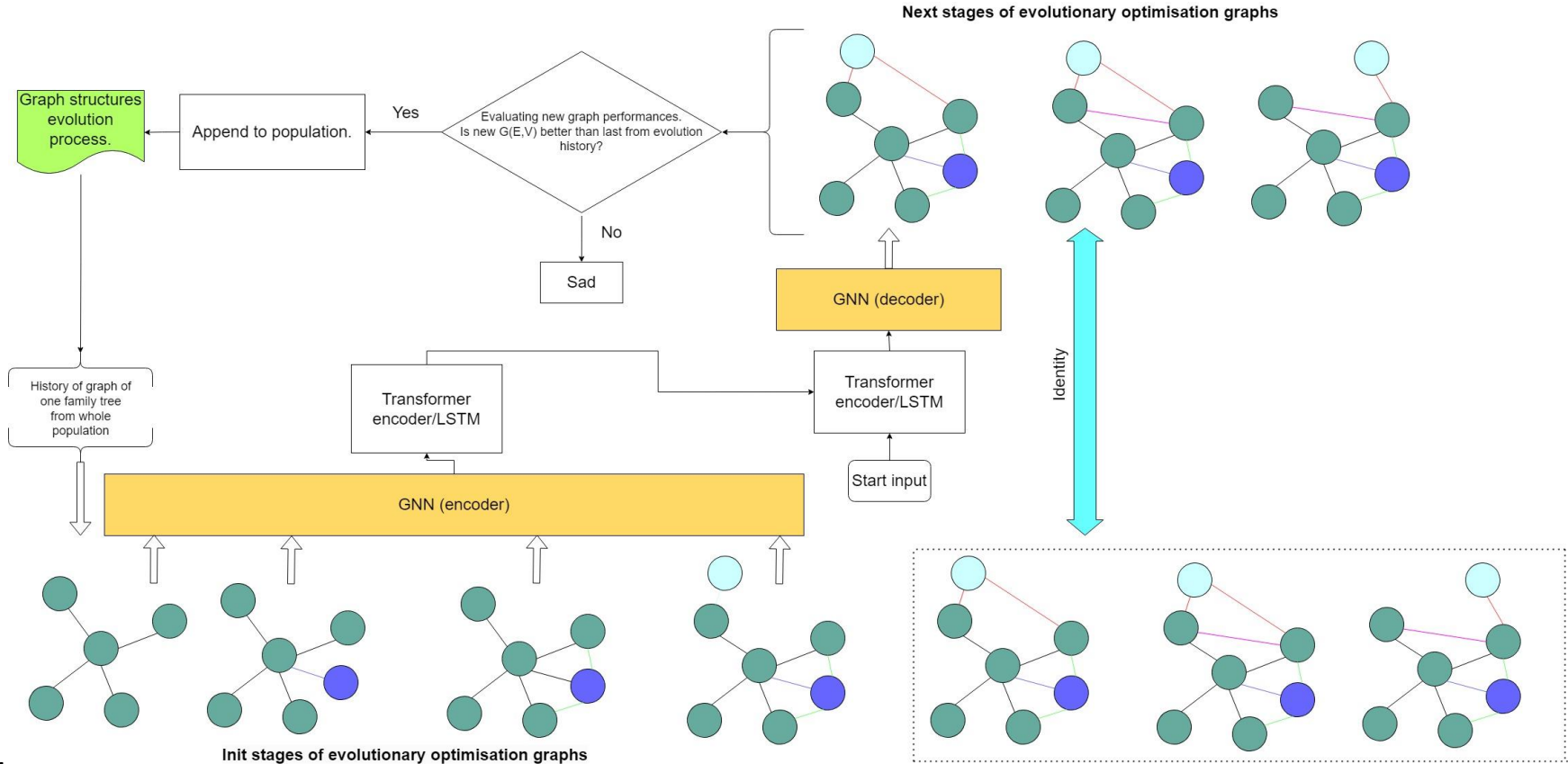
**ЭО эффективный метод поиска решения. Но медленный.**

Существующие методы ее ускорения - алгоритмы направленной оптимизации не внедрены в GEFEST (вероятно, и в GOLEM).

## **Предложение:**

- Применить современные методы предсказания временных рядов/структур со временной зависимостью.
- Использование графовых нейронных сетей для кодирования графовых структур.

# Предсказание последующих этапов эволюции графовых структур.



# Итог

- Уже имеющиеся подходы построения суррогатных симуляторов и генераторов необходимо улучшить, применяя SOTA решения, и (кросс) ансамблирование.
- Оптимизация эволюции подходами направленной эволюции и предсказаний.
- Применение Transfer-learning и метаоптимизации для оптимального использования имеющихся данных и применимости решения к множеству задач.
- Альтернативно, существует возможность применять PINNs. Однако, применение их осложнено составлением диффузов, требуемых для каждой задачи.

Мета обучение \

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045794921002418>

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135423000285>

Спасибо  
за внимание!

it's **MO**re than a  
**UNIVERSITY**