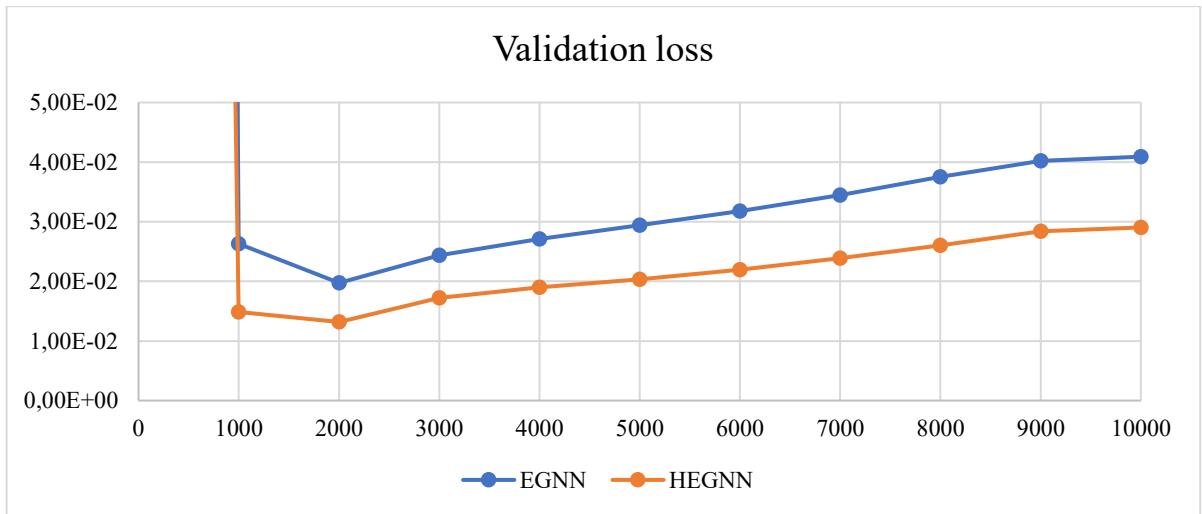


Сравнение классической и свежей архитектур графовой нейронной сети на задаче симуляции простейшего физического процесса

Обучение

Сравним классическую модель графовой нейросети EGNN (2022) и современную HEGNN (2025) на задаче трех тел. Требуется предсказать состояние системы через 500 шагов, зная начальному положение и скорость каждого объекта. Создадим выборку из 8000 траекторий для тренировки и 2000 для валидации. В качестве loss функции будем использовать MSE. Будем обучать модели в течение 10000 эпох.



Можно видеть, что HEGNN обучается лучше , но обе модели переобучаются уже после 2000 итераций.

Заметим, что при одинаковых параметрах, EGNN обучалась 173,5 минут, а HEGNN 337,9 минут, то есть в 1,9 раз дольше. Процесс можно ускорить, увеличив размер батча, но это ухудшает результаты. Обучение проводилось на RTX 3070.

Тестирование

Возьмем веса, полученные после 2000 эпох, и вычислим среднюю погрешность на тестовой выборке из 1000 траекторий. Получим среднее отклонение $1,947\text{e-}2$ у EGNN и $1,316\text{e-}2$ у HEGNN. Таким образом, ошибка более свежей модели на 33% меньше, чем у классической.

Измерим также время инференса двух моделей. Для батча из 1000 систем по 3 тела в каждой EGNN дает предсказание в среднем за 3,8 миллисекунд, а HEGNN – за 185,9 миллисекунд. То есть новая модель в 48,9 раз медленнее.

Наконец, количество параметров. У EGNN их 133764 (522KB), а у HEGNN – 161500 (631KB).

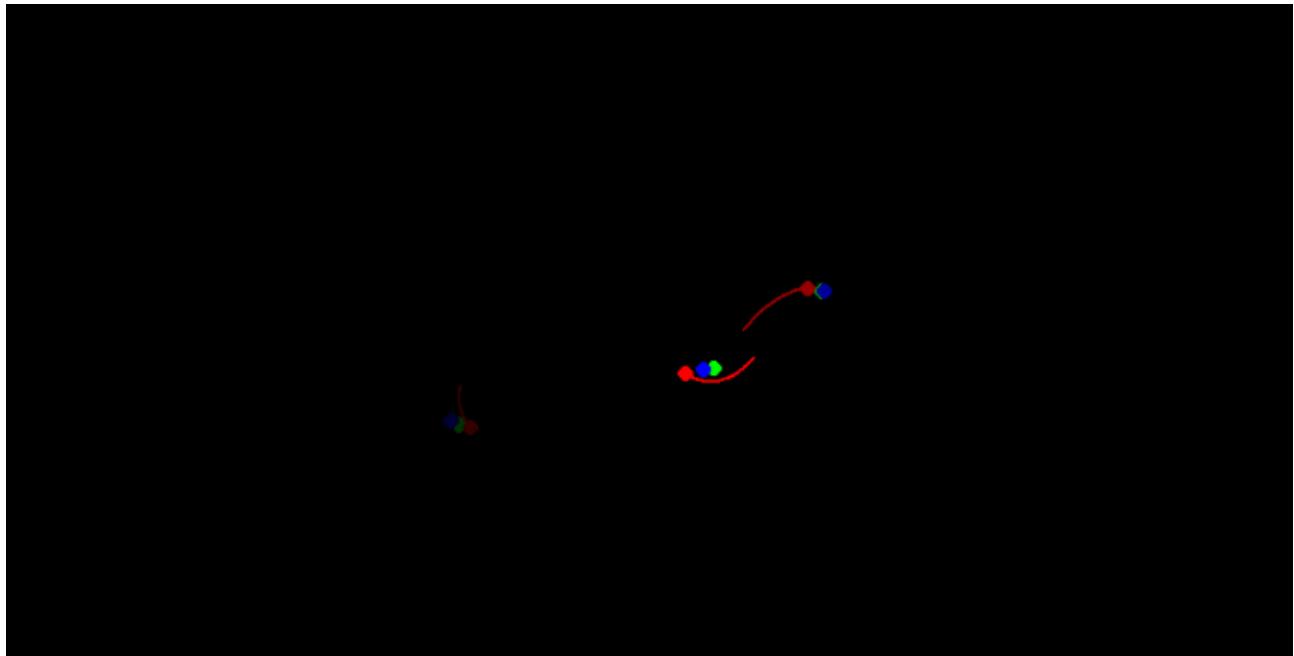
Сравнительная таблица

Приведем сравнительную таблицу для изученных моделей.

Характеристика	EGNN (2022)	HEGNN (2025)	Коэффициент
Время обучения, минут	173,5	337,9	1,9
Минимальный MSE	1,947e-2	1,316e-2	0,67
Время инференса, миллисекунд	3,8	185,9	48,9
Примерная частота кадров	263,2	5,4	0,02
Количество параметров	133764	161500	1,2
Вес параметров, килобайт	522	631	1,2

Пример работы моделей

На приведенном изображении красные точки это истинное состояние модели через 500 шагов, зеленое – прысканное EGNN, а синее – предсказанное HEGNN.



Вывод

К сожалению, при многократном увеличении вычислительной сложности современная модель графовой нейросети дает на данной задаче погрешность всего на 33% меньшую, чем более простая модель. Замечу, что мой результат совпадает с результатом авторов HEGNN.