

Графові нейронні мережі для оцінювання проникності в моделях пористих середовищ

Олег Афанасьєв, асп.
Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, Харків, Україна
Email: oleg.afanasiev@karazin.ua
Науковий керівник: С.О. Пославський, канд. фіз.-мат. наук, доц.

Анотація. У роботі розвиваємо наш попередній підхід на основі згорткових нейронних мереж (CNN) для двовимірних перколяційних конфігурацій і переходимо до графового подання задачі прогнозування проникності в пористих матеріалах. Замість піксельного подання ґраткової конфігурації представляємо середовище як граф порового простору і навчаємо графову нейронну мережу з агрегацією ознак за сусідніми вузлами графа прогнозувати ефективну проникність k_{eff} . Графове представлення явно враховує зв'язність порового простору, що є критичною поблизу перколяційного порога, а також дозволяє вводити ознаки вузлів і ребер, які відображають локальну геометрію. Порівнюємо GNN із нашими попередніми результатами для CNN на узгоджених режимах даних, оцінюючи точність і здатність до узагальнення.

Постановка задачі та методи. Генеруємо вибірки 2D перколяційних конфігурацій на ґратці та перетворюємо кожен конфігурацію на граф порового простору, вузли якого відповідають порам (зв'язним компонентам відкритих комірок), ребра — з'єднують пори.

«Еталонну» проникність k_{eff} обчислюємо, розв'язуючи дискретизоване рівняння Лапласа-Дарсі на ґратці за фіксованого перепаду тиску та інтегруємо потік;

Моделі: GCN/GraphSAGE/GAT з 2–4 шарами з агрегацією ознак за сусідніми вузлами графа глобальним readout (mean/sum) і MLP-головою для скалярної регресії k_{eff} .

Навчання виконуємо на конфігураціях із пористістю $p \in [0.4, 0.8]$; тестування включає екстраполяцію до $p < 0.4$ і $p > 0.8$. Метрики: MAE/MSE/RMSE та R^2 .

Попередні результати. На синтетичних наборах даних розміром до 10^4 графів ($|V| \approx 50 - 500$) базові GCN/GraphSAGE демонструють малу похибку в діапазоні навчання, тоді як увага (GAT) підвищує стабільність за екстраполяції, зокрема поблизу перколяційного порога. Порівняно з CNN, навченими на зображеннях тих самих структур, GNN демонструють конкурентну точність у межах діапазону та кращу стійкість до екстраполяції поза ним, що узгоджується з явним урахуванням зв'язності.

Висновки. Графові нейронні мережі є перспективним інструментом для моделювання переносу в пористих середовищах, оскільки явно враховують

зв'язність і графові характеристики зв'язності. Подальша робота буде спрямована на масштабування до 3D мікроструктур та виявлення додаткових характеристик пористих середовищ.

Ключові слова: перколяція, проникність, пористі середовища, графові нейронні мережі.