

Автономная некоммерческая
образовательная организация высшего образования
«НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «СИРИУС»

Научный центр информационных технологий и искусственного интеллекта
направление «Математическое моделирование в биомедицине и геофизике»

К ЗАЩИТЕ ДОПУСТИТЬ
Руководитель направления
«Математическое моделирование в
биомедицине и геофизике»
к.э.н., д.э.н., доцент

_____ М.В. Ширяев
« ____ » _____ 2025 г.

**СУРРОГАТНАЯ МОДЕЛЬ НА ОСНОВЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ
ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДВУХФАЗНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ**

Магистерская диссертация
по направлению подготовки 01.04.02 Прикладная математика и информатика
направленность (профиль) «Математическое моделирование процессов и
материалов»

Студент гр. М01ММ-23
_____ М.С. Пугачев
« ____ » _____ 2025 г.

Руководитель
доцент направления
«Математическое моделирование в
биомедицине и геофизике»
к.ф.-м.н.
_____ К.М. Терехов
« ____ » _____ 2025 г.

Автономная некоммерческая
образовательная организация высшего образования
«НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «СИРИУС»

Научный центр информационных технологий и искусственного интеллекта
направление «Математическое моделирование в биомедицине и геофизике»

УТВЕРДИТЬ

Руководитель направления
«Математическое моделирование в
биомедицине и геофизике»
к.э.н., д.э.н., доцент

_____ М.В. Ширяев
« ____ » _____ 2025 г.

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ

на выполнение магистерской диссертации
по направлению подготовки 01.04.02 Прикладная математика и информатика
направленность (профиль) «Математическое моделирование процессов и
материалов»

Пугачев Максим Сергеевич

1. Тема: «Суррогатная модель на основе машинного обучения для решения задачи двухфазной фильтрации».
2. Цель: создать графовую нейронную сеть, предназначенную для аппроксимации решений задачи двухфазной фильтрации.
3. Задачи:
 - реализовать численный симулятор двухфазной фильтрации на неструктурированных сетках для генерации обучающего и тестового наборов данных;
 - разработать архитектуру графовой нейронной сети для краткосрочного прогноза приращения давления и насыщенности воды в пористой среде на основе входных данных в графовом формате;

- выполнить обучение и валидацию суррогатной модели на синтетических данных, полученных с помощью численного симулятора, и провести количественное и визуальное сравнение с результатами эталонных численных расчетов;

- провести анализ ограничений и возможностей обобщения предложенной модели, в том числе исследовать воспроизводимость результатов на различных сетках, при разных начальных и граничных условиях.

4. Рабочий график (план) выполнения магистерской диссертации:

№	Перечень заданий	Сроки выполнения
1.	Написание литературного обзора	
2.	Изложение материалов и методов	
3.	Представление полученных результатов	

Дата выдачи: «__» _____ 2025 г.

Руководитель:

_____ К.М. Терехов

Задание принял к исполнению:

Студент группы М01ММ-23

_____ М.С. Пугачев

«__» _____ 2025 г.

Реферат

Выпускная квалификационная работа, 90 страниц, 25 рисунков, 6 таблиц, 33 источника.

ГРАФОВЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ, ДВУХФАЗНАЯ ФИЛЬТРАЦИЯ, СУРРОГАТНАЯ МОДЕЛЬ, НЕСТРУКТУРИРОВАННАЯ СЕТКА, МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, ГРАФОВАЯ СТРУКТУРА ДАННЫХ

Объектом исследования являются физические процессы двухфазной фильтрации в пористых средах, описываемые гидродинамическими уравнениями, а также их численное моделирование с использованием графовых нейронных сетей.

Цель работы: разработать суррогатные модели на основе графовых нейронных сетей для прогнозирования полей давления и насыщенности воды при двухфазной фильтрации в пористых средах в условиях заданной геометрии, начальных и граничных условий.

В данной работе удалось разработать двухфазную суррогатную модель на основе графовых нейронных сетей, способную с сопоставимой точностью по отношению к численному симулятору воспроизводить поля давления и водонасыщенности. Отметим, что полученные результаты достигнуты в условиях контролируемой постановки задачи – при фиксированной геометрии расчетной сетки, определённых начальных и граничных условиях, а также заданных физических параметрах среды.

Abstract

Final qualifying work, 90 pages, 25 figures, 6 tables, 33 sources.

GRAPH NEURAL NETWORKS, TWO-PHASE FLOW, SURROGATE
MODEL, UNSTRUCTURED MESH, MACHINE LEARNING,
GRAPH-STRUCTURED DATA

The object of the study is the physical processes of two-phase filtration in porous media, described by hydrodynamic equations, as well as their numerical simulation using graph neural networks.

Goal of the work: to develop surrogate models based on graph neural networks for predicting pressure and water saturation fields during two-phase filtration in porous media under given geometry, initial and boundary conditions.

In this work, a two-phase surrogate model based on graph neural networks was successfully developed. It is capable of reproducing pressure and water saturation fields with accuracy comparable to that of a conventional numerical simulator. It should be noted that the obtained results were achieved under a controlled problem setting – with fixed computational grid geometry, specified initial and boundary conditions, and predefined physical parameters of the medium.

Сокращения, обозначения, термины и определения

В настоящей работе применяют следующие сокращения и обозначения:

- **AD-GPRS** – The Automatic Differentiation General Purpose Research Simulator – платформа для мультифизического моделирования;
- **Adam** – оптимизатор обучения;
- **CFL-условие** – условие Куранта–Фридрихса–Леви, условие устойчивости;
- **CO₂** – углекислый газ;
- **CSR** – Compressed Sparse Row – сжатое построчное представление матрицы;
- **DeepField** – библиотека для подготовки данных и обучения глубоких моделей, в том числе графовых нейросетей, для задач моделирования полей в пористых средах;
- **DigitalRocksPortal** – онлайн-платформа для хранения, поиска, обмена, организации и анализа изображений пористых микроструктур;
- **EdgeConv** – сверточный слой по рёбрам графа;
- **Eclipse** – семейство программных продуктов, разработанных компанией Schlumberger для численного моделирования разработки нефтяных и газовых месторождений;
- **ELU** – гладкая аппроксимация ReLU;
- **GMSH** – генератор сеток;
- **GNN** – Graph Neural Network – графовая нейронная сеть;
- **GraphSAGE** – Graph Sample and Aggregate – архитектура для обработки больших графов;
- **IMPES** – Implicit Pressure Explicit Saturation – численный метод решения задач двухфазной фильтрации, в котором уравнение давления дискрети-

зуется неявным способом, а уравнение насыщенности – явно;

- **INMOST** – Integrated Numerical Modeling and Object-oriented Supercomputing Technologies – платформа для распределенного математического моделирования;

- **inj** – injection – нагнетание;

- **LIL** – List of Lists – формат хранения разреженных матриц;

- **MAE** – Mean Absolute Error – средняя абсолютная ошибка;

- **mean, sum, max** – функции агрегации, использовавшиеся в архитектуре графовой нейронной сети (среднее, сумма, максимум);

- **MLP** – Multi-Layer Perceptron – класс искусственных нейронных сетей прямого распространения;

- **MSE** – Mean Squared Error – среднеквадратичная ошибка;

- **OpenPorousMedia** – бесплатный гидродинамический симулятор, предназначенный для моделирования течения жидкостей и газов в пористой среде;

- **Pore-GNN** – графовая нейронная сеть для моделирования на уровне пор;

- **prod** – production – добыча;

- **ReLU** – нелинейная функция активации;

- **RMSE** – Root Mean Squared Error – корень из среднеквадратичной ошибки;

- **R-U-Net** – ResNet-UNet – модификация U-Net с остаточными связями;

- **R²** – коэффициент детерминации;

- **SPE-10** – эталонная геологическая модель, которая служит стандартным набором данных для верификации методов гидродинамического моделирования;

- **U-Net** – архитектура нейросети с симметричным кодировщиком и декодировщиком;

- **микро-СТ** – микрокомпьютерная томография.

Оглавление

Введение	10
1 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ	12
1.1 Обзор численных методов	12
1.2 Применение графовых нейронных сетей в нефтегазовом моделировании	14
1.3 Сравнение графовых нейронных сетей и традиционных методов моделирования	17
1.4 Сравнительный анализ различных архитектур графовых нейронных сетей	18
1.5 Графовые нейронные сети в геомеханике	22
1.6 Ограничения использования графовых нейронных сетей	24
2 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ	27
2.1 Входные данные и подготовка геологической основы	29
2.2 Графовое представление данных	32
2.3 Цель работы	37
2.4 Новизна работы	38
2.5 Практическая значимость	39
3 ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ	40
3.1 Численный симулятор двухфазной фильтрации на неструктурированных сетках	40
3.1.1 Введение	40
3.1.2 Математическая постановка задачи	41
3.1.3 Упрощённая математическая постановка задачи	43
3.1.4 Дискретизация на треугольной сетке	44
3.1.5 Трансмиссивности на общей грани	45
3.1.6 Аппроксимация против потока для фазовых подвижностей ..	47

3.1.7	Учёт скважинных узлов	47
3.1.8	Алгоритм решения	47
3.1.9	Ограничения модели и область применимости	50
3.1.10	Генерация обучающего набора на основе численного симулятора	52
3.2	Графовые суррогатные модели динамики двухфазной фильтрации	54
3.2.1	Постановка задачи прогнозирования	54
3.2.2	Структура входных и выходных векторов	56
3.2.3	Формирование тренировочной выборки	57
3.2.4	Архитектура графовой нейронной сети для прогнозирования приращения давления	58
3.2.5	Блок кодирования–обработки–декодирования	59
3.2.6	Кодировщик вершин	60
3.2.7	Кодировщик рёбер	60
3.2.8	Декодер и явное обновление состояния	62
3.2.9	Выбор гиперпараметров	62
3.2.10	Прикладной вывод	63
3.2.11	Критерий оптимизации и функция потерь	64
3.2.12	Стратегия обучения модели	68
3.2.13	Прогнозирование и оценка качества модели	70
3.2.14	Результаты для модели прогнозирования приращений давления	73
3.2.15	Результаты для модели прогнозирования приращений водонасыщенности	79
	Заключение	84
	Список использованных источников	86

Введение

Эффективная разработка нефтегазовых месторождений требует решения сложных задач, связанных с прогнозированием распределения давления и насыщенности флюидов в неоднородных пористых средах. В современной практике решения этих задач доминируют численные методы, такие как метод конечных элементов, конечных объёмов, конечных разностей, а также методика IMPES (Implicit Pressure Explicit Saturation) [1]. Несмотря на надёжность этих подходов и фундаментальную обоснованность с точки зрения физических принципов, они требуют значительных вычислительных ресурсов, особенно для крупных трёхмерных геомоделей и многократных расчётов, что затрудняет перебор множества вариантов размещения скважин для поиска оптимального варианта.

В связи с этим в последние годы активно развивается направление использования суррогатных моделей на основе машинного обучения, позволяющих значительно ускорить вычисления за счёт предварительного обучения на ограниченном числе точных расчётов [2]. Среди таких моделей особое внимание уделяется графовым нейронным сетям, показавшим способность эффективно моделировать пространственно сложные задачи благодаря своей естественной адаптации к неструктурированным расчётным сеткам и сложной топологии задач течения в пористой среде [3].

Особый интерес к применению графовых нейронных сетей обусловлен тем, что они позволяют корректно учитывать неоднородности среды, сложные конфигурации скважин, трещины, сопряжённые геомеханические процессы, не привязываясь жёстко к регулярной геометрии и упрощённым предположениям традиционных методов. Однако, несмотря на стремительное развитие области, пока не ясны пределы их точности и общие границы применимости по сравнению с классическими численными подходами [4].

Цель данной работы заключается в разработке, обучении и тестировании графовой нейронной сети, которая способна выступать в роли суррогатной модели для численного симулятора двухфазной фильтрации. Модель получает на вход граф трансмиссивности, поровые объёмы и признаки узлов, и должна предсказывать приращение физических величин (давления и насыщенности) на следующий временной шаг. В качестве эталона используются данные, полученные с помощью численного симулятора, верифицированного на тестовых конфигурациях. Работа направлена на исследование способности модели к воспроизведению динамики, её устойчивости к накоплению ошибок и потенциальной обобщающей способности.

Архитектура разработанной в данной работе суррогатной модели предусматривает разделение вычислений на три стадии: первичное извлечение признаков, агрегацию информации по графу и генерацию предсказания. На этапе первичного извлечения реализован модуль кодировки с отдельной обработкой признаков узлов и рёбер. Такой подход продемонстрировал улучшение устойчивости прогноза и может быть полезен в будущих исследованиях. Разработанная модель позволяет воспроизводить как распределение давления, так и насыщенности. Численный симулятор, разработанный в ходе работы, принимает на вход произвольный граф, что обеспечивает возможность использования любых неструктурированных сеток при условии корректного преобразования входных данных в графовое представление.

1 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

1.1 Обзор численных методов

Для математического моделирования многофазного течения флюидов в пористых средах, характерного для нефтегазовой отрасли, традиционно применяются классические численные подходы, основанные на дискретизации дифференциальных уравнений механики сплошной среды. Среди наиболее распространённых методов выделяются метод конечных элементов, метод конечных объёмов, метод конечных разностей, а также широко используемая методика разделения неявного расчета давления и явного расчета насыщенной (IMPES) [1].

Метод конечных элементов исторически получил широкое распространение благодаря своей гибкости в описании сложной геометрии и эффективному моделированию сопряженных физико-механических задач, таких как пороупругость и гидроразрыв пласта [5]. Этот метод предоставляет мощный аппарат для аппроксимации решений дифференциальных уравнений на неструктурированных сетках, хорошо подходящих для сложной геометрии пористых сред. Однако его применение сопряжено с высокой вычислительной сложностью, особенно в случае нелинейных задач [1].

Метод конечных объёмов получил широкое распространение именно в задачах моделирования течения в пористых средах благодаря своей строгой консервативности и естественному соблюдению законов сохранения массы и энергии [6]. Этот метод особенно популярен в нефтегазовом моделировании, так как обеспечивает явное соблюдение баланса масс и простоту реализации граничных условий. Тем не менее, основным ограничением метода является сложность его эффективного применения на сильно неструктурированных и адаптивных сетках, что особенно критично в моделировании трещиноватых

пластов и сложных геологических структур [1].

Метод конечных разностей является наиболее простым с точки зрения реализации и широко используется благодаря простоте и эффективности расчётов на структурированных регулярных сетках. Его главный недостаток – необходимость регулярной сетки и трудности с точным представлением сложной геометрии, что делает его малоприменимым для геологически реалистичных задач, включающих трещины и сложные конфигурации скважин [1].

Метод разделения неявного расчёта давления и явного расчёта насыщенности IMPES широко применяется в нефтегазовом моделировании благодаря своей вычислительной эффективности и простоте реализации. Его основное достоинство – экономичность расчёта на больших временных шагах и устойчивость при решении эллиптического уравнения для давления [1]. Однако метод IMPES страдает ограничениями при моделировании быстроменяющихся фронтов насыщенности и может требовать мелкого временного шага для устойчивости, что существенно замедляет расчёты при долгосрочном моделировании и оптимизации разработки месторождения [4]. В дополнение к перечисленным ограничениям, все традиционные методы характеризуются высокой вычислительной сложностью при решении задач геомеханики, так как требуют итеративного совместного решения связанных систем нелинейных уравнений, что зачастую приводит к значительным затратам вычислительных ресурсов [7; 8].

Именно в связи с перечисленными выше недостатками и ограничениями в последние годы наблюдается активное развитие суррогатных моделей на основе графовых нейронных сетей, которые могут частично или полностью нивелировать указанные проблемы, сохраняя при этом приемлемую точность результатов [9].

1.2 Применение графовых нейронных сетей в нефтегазовом моделировании

В последние годы графовые нейронные сети находят всё более широкое применение в качестве приближённых моделей при численном моделировании движения жидкостей в нефтегазовых пластах. Их важное преимущество – способность эффективно работать с неупорядоченными и неравномерными расчётными сетками – делает их особенно полезными при решении задач в геологически сложных и неоднородных структурах [9]. Всё больше интереса вызывает применение комбинированных решений, объединяющих графовые сети с более привычными слоями глубокой нейросети, в том числе со свёрточными структурами. Так, в ряде исследований продемонстрировано, что такие модели, где графовая часть описывает изменение насыщенности, а блок на основе трёхмерной свёрточной архитектуры рассчитывает распределение давления, позволяют достигать высокой точности при моделировании двухфазного движения нефти и воды, одновременно значительно снижая затраты вычислительных ресурсов по сравнению с классическими численными методами [9].

Эффективность графовых нейросетей значительно повышается при объединении с рекуррентными слоями, способными учитывать временные зависимости в процессе фильтрации, что позволяет моделировать динамику течения во времени. Подобные гибридные графовые сети способны прогнозировать эволюцию дебитов скважин с относительной погрешностью не более 5%, при этом обеспечивая ускорение расчётов в тысячи раз по сравнению с численными симуляторами [10].

Графовые нейронные сети также активно применяются для решения задач течения в трещиноватых средах. Сети, построенные на основе вложенной дискретной модели трещин, демонстрируют высокую точность и стабиль-

ность при долгосрочном прогнозировании давления и насыщенности даже в условиях наличия множества трещин. Подобные модели демонстрируют способность к обобщению на новые случаи – например, на сетки и структуры трещин, которые не встречались в обучающем наборе [11].

Графовые нейронные сети, построенные по принципу передачи сообщений между узлами и рёбрами, также показывают хорошие результаты в задачах двухфазного течения в средах с неструктурированной сеткой. Такие архитектуры позволяют добиться средней ошибки при прогнозе давления и насыщенности на уровне 1–2%, что вполне сопоставимо с точностью классических численных подходов, в частности метода конечных объёмов. Благодаря этому они особенно привлекательны для задач оптимизации – например, при выборе положения и режимов работы скважин, где требуется многократное и быстрое решение прямой задачи [2].

Перспективным является применение архитектур графовых нейросетей, основанных на механизмах внимания, которые позволяют учитывать далекодействующие эффекты и корреляции между удалёнными участками пласта [12]. Такие сети показывают высокую эффективность в смежных областях и будут рассмотрены далее в сравнении архитектур графовых нейронных сетей.

Также ведутся активные исследования по интеграции графовых нейросетей в сопряжённые геомеханические модели. Современные подходы предлагают объединение графовых нейронных сетей с физически обоснованными нейронными сетями, что позволяет учитывать физические ограничения и законы сохранения без необходимости использования больших наборов данных для обучения [7]. Несмотря на то, что число подобных исследований пока невелико, уже имеются примеры успешного применения таких гибридных моделей для прогнозирования совместных гидродинамических и геомеханических процессов, таких как деформации пласта и смеще-

ния земной поверхности. [8]

Отдельное внимание заслуживают открытые реализации и наборы данных, которые существенно ускоряют развитие и распространение суррогатных моделей на основе графовых нейросетей в научном и инженерном сообществе. Так, активно используется библиотека DeepField, разработанная в Сколковском институте науки и технологий, предоставляющая инструменты для удобной подготовки данных из численных симуляторов и оптимизации процесса обучения глубоких моделей, в том числе графовых сетей [13]. Также доступен проект графового симулятора, предоставляющий открытую реализацию графовых симуляторов, легко адаптируемых к задачам фильтрации и механики пористых сред [9]. Из общедоступных эталонных задач для тестирования новых моделей наиболее распространена модель SPE-10, содержащая реальные характеристики проницаемости пласта и широко используемая для валидации численных и суррогатных методов. Дополнительными источниками открытых данных выступают платформа Open Porous Media, содержащая наборы синтетических задач, и Digital Rocks Portal, предлагающая микро-СТ изображения пористых сред для исследований на микроструктурном уровне.

Графовые нейронные сети успешно применяются в качестве суррогатных моделей для задач многофазного течения в пластах, демонстрируя сопоставимую с традиционными численными методами точность, но при этом обеспечивая многократное сокращение вычислительных затрат. Несмотря на то, что графовые нейросети всё ещё требуют высококачественных обучающих выборок и не всегда гарантируют физическую достоверность прогнозов при значительном выходе за рамки условий обучения, их потенциал и востребованность в нефтегазовом моделировании постоянно растут.

1.3 Сравнение графовых нейронных сетей и традиционных методов моделирования

Во всех рассмотренных работах графовые нейросетевые модели используются как заменяющие численные расчёты – они обучаются на результатах, полученных с помощью высокоточного симулятора, и по сути приближают его поведение. Поэтому качество таких моделей оценивается путём сопоставления с результатами классических численных методов. Например, одна из моделей показала медианную относительную ошибку в расчёте давления около 1%, а насыщенности – около 2%, что сопоставимо с точностью метода конечных объёмов [2]. В другом случае нейросетевая модель, учитывающая изменение параметров во времени, обеспечила среднюю ошибку прогноза дебитов скважин менее 5%, что делает её пригодной для инженерных расчётов [10].

Основным преимуществом суррогатных моделей на основе графовых нейросетей является колоссальный выигрыш в скорости по сравнению с традиционными численными методами. Например, расчёты при помощи графового симулятора, используемого в [2] ускорились в 36 раз, другая модель продемонстрировала ускорение в 18 раз на резервуаре SPE-10 с более чем миллионом ячеек [9], а графовая нейронная сеть для двухфазных задач достигла 200-кратного ускорения [4]. Наибольшее ускорение (более чем в 1000 раз) показала модель, объединяющая графовую нейросеть с механизмом учёта временной последовательности состояний, при решении трёхфазных задач [10].

Также важным достоинством графовых нейросетей является их способность обобщаться на неструктурированные и адаптивные сетки. Например, одна из моделей успешно справлялась с произвольными геометриями и новыми конфигурациями сеток, которые не встречались при обучении, де-

монстрируя среднюю ошибку около 1–2% [4]. Аналогичные результаты были получены в исследовании, подтвердившем способность графовых нейронных сетей обобщаться на сетки с трещинами (дискретизация с явным учётом трещин) и прогнозировать давление с высокой точностью даже при экстраполяции на новые сети трещин [11]. Однако резкое изменение типа задачи (например, другие законы фазовой проницаемости, присутствие новых фаз или реакций и т.п.) потребует включения этих эффектов в обучающую выборку либо дополнительной физической корректировки модели.

Однако графовые нейронные сети пока уступают традиционным методам в устойчивости и надёжности прогноза при выходе за пределы обучающих данных. Для повышения устойчивости используются специальные методы обучения, такие как многошаговая схема [4] и регуляризация дополнительных физических метрик [2], но строгих математических гарантий устойчивости у таких моделей пока нет. Поэтому в критически важных сценариях, таких как управление пластовым давлением и геомеханические прогнозы, графовые нейросети используются лишь для предварительных расчётов, тогда как окончательная проверка проводится классическими численными методами [4].

1.4 Сравнительный анализ различных архитектур графовых нейронных сетей

Модель передачи сообщений по рёбрам графа. Многие подходы строятся по принципу передачи информации между ячейками, связанными на графе. В таких моделях состояния (например, давление, насыщенность и др.) передаются от узла к узлу через рёбра, с последующей свёрткой поступивших значений. Например, в модели, рассмотренной в [2] используется схема с тремя этапами: начальное кодирование информации, последовательная обработка и итоговое восстановление поля. Похожим образом работает

модель, рассмотренная в [9], в которой отдельные функции обновления отвечают за передачу по рёбрам (с учётом, например, коэффициентов проводимости) и за пересчёт состояния каждой ячейки. Такие графовые схемы по сути являются обобщением классических итерационных численных методов: например, при расчёте давления учитываются дальние взаимосвязи между ячейками, и нейросеть обучается передавать такие влияния через несколько уровней пересчёта.

К этому типу относятся и такие методы, как GraphSAGE и классическая графовая свёртка. Основное различие между ними – в способе объединения информации от соседей: в GraphSAGE обычно берётся среднее или максимум, тогда как в классической свёртке используется взвешенная сумма. В задачах фильтрации это влияет на точность моделирования границ между фазами: например, простое усреднение может «размазывать» резкие переходы насыщенности. Для борьбы с этим добавляется операция, которая использует относительное положение соседей и помогает сохранять чёткие градиенты фронта [4].

Механизм внимания на графах. Подход, основанный на выделении наиболее значимых связей между ячейками, применяется для усиления влияния тех участков, которые оказывают наибольшее воздействие на общую динамику. В задачах фильтрации это может позволить, например, лучше учитывать ключевые каналы потока или взаимосвязь между скважинами. В ряде работ реализован модуль на основе внимания для графа скважин: по данным о расположении добывающих и нагнетательных скважин он позволяет прогнозировать распределение потоков и объёмы добычи [12]. Показано, что механизм внимания способен усиливать влияние дальних участков, если между ними существует значимая гидродинамическая связь.

Тем не менее, такие архитектуры используются реже по сравнению с классической схемой передачи сообщений. Это может быть связано с тем,

что в задачах фильтрации структура связи между ячейками в значительной степени уже определяется физикой задачи – например, уравнением Дарси – и потому дополнительный механизм выделения значимых соседей не всегда даёт ощутимый прирост.

Тем не менее, использование подобных архитектур активно исследуется в смежных областях. Например, недавно была представлена модель для прогноза погодных условий, где состояние атмосферы описывается как граф: каждая ячейка сетки – это узел, а соседства между ними задаются рёбрами. Такой подход, совмещённый с вниманием и последовательным прогнозом по времени, позволил добиться более высокой точности, чем у традиционных моделей [14]. Это подтверждает, что и в задачах моделирования потоков в пластах такие методы могут оказаться полезными – особенно когда требуется учитывать дальние влияния, связанные, например, с упругими свойствами среды или глобальными перепадами давления.

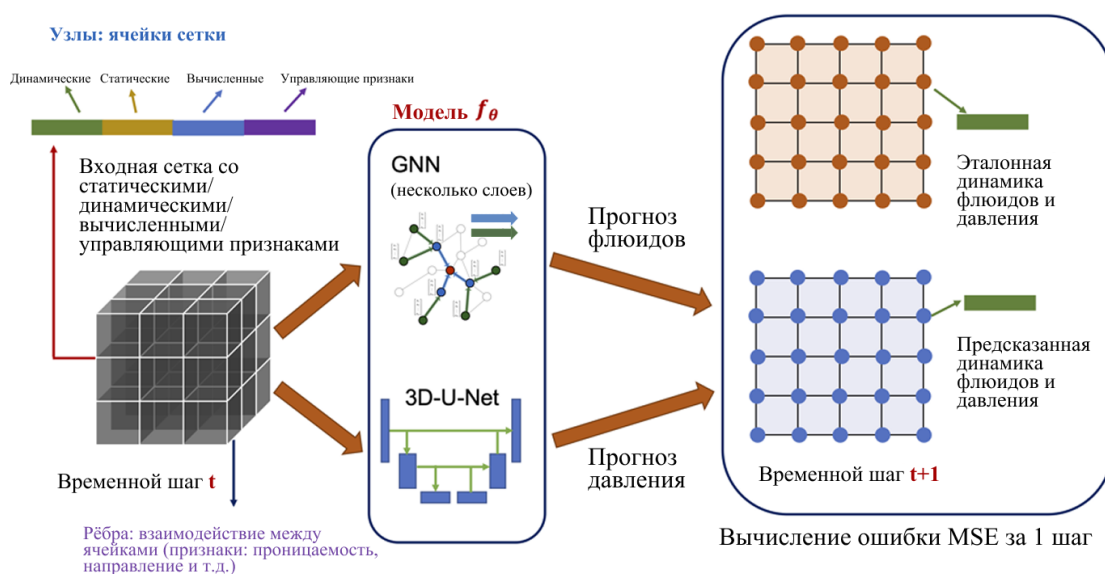


Рисунок 1.1 – Обзор архитектуры гибридной графовой нейронной системы и вычисления ошибки за 1 шаг [9]

Гибридные архитектуры (совмещение со свёрточными сетями, сетями типа U-Net). Подход заключается в комбинировании графовой нейронной сети со свёрточной, что позволяет учитывать как локальные, так и гло-

Таблица 1.1 – Сравнение различных архитектур графовых нейронных сетей

Архитектура графовых нейросетей	Точность, %	Ускорение	Поддержка неструктурированных сеток	Обобщаемость
Сети передачи сообщений	98–99	36×	Да	Высокая
Графовые свёрточные сети	97–98	200×	Да	Средняя
Сети с графовым вниманием	95–97	50×	Да	Высокая
Рекуррентные графовые сети	95–96	1000×	Да	Очень высокая
Свёрточные + графовые сети	98–99	18×	Частично	Средняя

бальные пространственные зависимости в моделируемом процессе [9]. Давление в пластах удовлетворяет эллиптическому уравнению, решение которого глобально сглажено и зависит от всего пласта сразу. В то же время насыщенности подчиняются более локальным транспортным уравнениям. Поэтому гибридная графовая нейронная система разделяет задачи: трёхмерная сеть типа U-Net моделирует распределение давления, а графовая сеть – перенос флюидов [9]. Свёрточная сеть эффективно захватывает глобальные корреляции давления на сетке, но работает только потому, что используется регулярная сетка. Графовая нейронная сеть же берёт на себя нелинейную динамику насыщенности, где важны локальные взаимодействия ячеек. Модель обучается совместно, в результате каждая подсеть фокусируется «на своём» процессе, что даёт суммарно лучшее качество (показано, что исключение любой

из подсетей ведёт к росту ошибки) [9]. (рисунок 1.1) иллюстрирует такую архитектуру: исходная модель пласта представляется в виде набора признаков узлов и рёбер графа, которые подаются одновременно в блок графовой нейронной сети (для расчёта приращения насыщенностей) и в трёхмерную сеть типа U-Net (для расчёта приращения давлений). На выходе получается прогноз новых полей давления и насыщенности, сравниваемый с решением симулятора для вычисления функции потерь. Подобные гибридные схемы объединяют плюсы обеих технологий и показывают себя очень перспективно для масштабируемых трёхмерных систем.

1.5 Графовые нейронные сети в геомеханике

Модели закачки и хранения CO_2 . Одним из перспективных направлений является использование гибридных методов машинного обучения для моделирования процессов хранения углекислого газа в пластовых системах. В частности, рассмотрена глубокая нейросетевая рекуррентная модель R-U-Net для прогнозирования 3D-распределений давления и насыщенности CO_2 , а также 2D-карт деформаций земной поверхности [7]. В работе рассмотрена сверточная нейронная сеть, а не графовая модель. Тем не менее, она продемонстрировала возможность эффективного приближения гидродинамических и геомеханических процессов с учетом взаимного влияния изменения давления и механической деформации породы. В перспективе аналогичный принцип может быть применен и к графовым нейросетям, например, путем построения двух независимых графов: один для ячеек пласта (фильтрация), другой для узлов геомеханической сетки (напряжения), и обмениваться между ними через особые ребра (отражающие связь изменения давления с деформацией породы) [8].

Моделирование пороупругости с использованием графовых нейронных сетей. При решении задачи Био узлы графа могут содержать как

состояния флюида (давление, насыщенность), так и механические степени свободы (поры, напряжения). В этом контексте графовые нейронные сети потенциально могут использоваться для предсказания совместного распределения давления, насыщенности и механических полей. В обзоре по графовым нейросетям в механике отмечается рост работ, где графовые сети решают задачи механики сплошных сред [15]. Например, графовые модели применяли для моделирования деформаций балок, контактного взаимодействия, и показывали близость к методам конечных элементов. Можно ожидать, что графовый подход [2] пригоден и для пороупругости: граф может включать ребра, передающие как гидравлические взаимодействия (потoki между порами), так и упругие связи (между узлами сетки). Отдельный интерес представляет модель, которая называется Pore-GNN [16], комбинирующая графовые и сверточные сети для предсказания упругих свойств пористых сред на основе данных микроскопической структуры пород [7]. Разработана графовая нейросеть, способная предсказывать поля напряжений и деформаций в различных материалах, включая композиты и решетчатые структуры, достигнув точности в диапазоне 96–98% относительно эталонных расчетов методом конечных элементов. Модель эффективно воспроизводит как упругие, так и пластические эффекты, обеспечивая значительное ускорение вычислений по сравнению с традиционными численными методами. [17]. Эти примеры демонстрируют перспективность использования графовых нейросетей в задачах механики пористых сред, однако полноценная модель, объединяющая гидродинамику и геомеханику, пока остается предметом будущих исследований.

Моделирование гидроразрыва и изменения проницаемости. Одним из ключевых аспектов геомеханического моделирования является прогнозирование формирования и развития трещин и их влияния на фильтрационные характеристики пласта. В данной области применение графовых ней-

росетей осложняется дискретным характером процесса образования новых связей в графе. Потенциально, такие модели могут отслеживать состояние каждой связи (вводя признак «открыто/закрыто») и обучиться правилам развития трещин по данным геомеханических симуляций (например, когда напряжение превышает прочность, добавить ребро трещины).

В настоящее время исследования в данной области находятся на ранних этапах – обычно рассматриваются стационарные трещины с заданной геометрией. Например, предложен метод ускоренного прогнозирования утечки флюидов через разломы на основе физически-обоснованных нейросетей [18]. Хотя в данной работе использовался подход с физически-обоснованными нейросетями, сам факт успешного применения методов машинного обучения в задачах геомеханического моделирования свидетельствует о перспективности данной области. Для дальнейшего развития графовых нейросетей в этом направлении могут потребоваться усовершенствованные архитектуры, способные моделировать процессы развития трещин в динамике, например, с использованием многоуровневых графовых структур или сочетания графовых нейросетей с дифференцируемыми конечными элементами.

1.6 Ограничения использования графовых нейронных сетей

Графовые нейросети обучаются на данных, полученных из численных симуляций, и их точность зависит от качества и полноты обучающей выборки. Если в данных отсутствуют определенные сценарии (например, новые режимы работы скважин или резкие изменения проницаемости), то модели могут плохо обобщать такие ситуации [2]. В частности, для задач оптимизации размещения скважин использование графовой нейросети вместо традиционного симулятора приводит к 36-кратному ускорению расчетов, но ошибки модели могут превышать 2% в случае сложных неоднородностей [2].

Многие архитектуры графовых нейросетей, например, графовая свертка усредняют информацию между соседними узлами, что приводит к сглаживанию резких градиентов насыщенности. Это особенно критично в задачах моделирования фронтов вытеснения нефти водой, где резкие изменения насыщенности играют важную роль [4]. Для борьбы с этим добавляют модули типа EdgeConv, но даже в этом случае передача информации между узлами ограничена глубиной сообщения [4]. При многократном шаге по времени ошибка суррогатных моделей на основе графовых нейронных сетей может накапливаться, что приводит к отклонениям от физически корректных решений. Например, на задачах двухфазной фильтрации в трещиноватых средах рекуррентные графовые сети оказались более устойчивыми на больших временах, чем обычные авторегрессионные графовые нейросети, так как модель с памятью лучше учитывает долгосрочные зависимости [11]. Тем не менее, традиционные численные методы сохраняют устойчивость даже при длительных расчетах.

В отличие от традиционных симуляторов, где можно явно включить новые физические процессы (например, фазовые переходы, капиллярные силы), графовые модели требуют переобучения на новых данных. В работах, посвященных трехфазным моделям (нефть-газ-вода), такие модели пока не достигли высокой точности, так как учет фазовых переходов (выделение газа, растворимость) требует либо дополнительных физических ограничений, либо увеличения обучающего набора [10].

Хотя суррогатные модели на основе графовых нейронных сетей показывают высокую точность (ошибки насыщенности 2%), они все же уступают традиционным численным схемам, особенно в областях с высокими гетерогенностями. Например, в модели, рассмотренной в [9], ошибка предсказаний на долгих временных интервалах снижена на 21% по сравнению с предыдущими моделями машинного обучения, но все равно остается выше, чем у

классических схем [9].

Несмотря на то, что суррогатные модели на основе графовых нейросетей работают на порядки быстрее после обучения, процесс их тренировки требует значительных вычислительных ресурсов. Например, обучение рекуррентной графовой сети для предсказания дебитов нефти/воды заняло несколько дней на мощных графических ускорителях, хотя затем обеспечило ускорение расчетов в 1000 раз [10]. Это делает графовые нейросети эффективными только в сценариях, где требуется многократное моделирование, а не разовые высокоточные расчеты.

В отличие от традиционных методов, где результаты можно проверить с помощью физических законов и балансных соотношений, прогнозы графовых нейросетей сложно интерпретировать. Например, модель, рассмотренная в [9], может давать реалистичные предсказания даже в новых условиях, но физические механизмы, лежащие в основе таких решений, не всегда понятны. Это ограничивает применение графовых нейросетей в критически важных задачах, где требуется строгая верификация решений.

2 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В настоящей работе рассматривается задача моделирования двухфазной фильтрации в проницаемой пористой среде. Особенностью постановки задачи является использование двумерной неструктурированной сетки, приближённой к реальным геологическим условиям.

Область моделирования представляет собой квадратный домен, в котором построена треугольная неструктурированная сетка. Эта сетка была сгенерирована с разрешением 60 на 60 в логических координатах, что соответствует приблизительно 338 ячейкам. Явным образом координаты и количество ячеек зависят от способа триангуляции, так как сетка построена с уплотнением к центру области.

Таким образом, геометрия не является регулярной: размер и форма треугольников варьируются, причём наибольшее сгущение сформировано в центральной части области. Такая конфигурация была выбрана произвольно на этапе генерации сетки и используется в качестве тестовой геометрии с варьирующейся плотностью дискретизации.

Распределение ячеек по области и характер триангуляции представлены на рисунке 1. Сетка была построена с использованием генератора GMSH, что обеспечило возможность гибкой настройки плотности дискретизации и формы элементов.

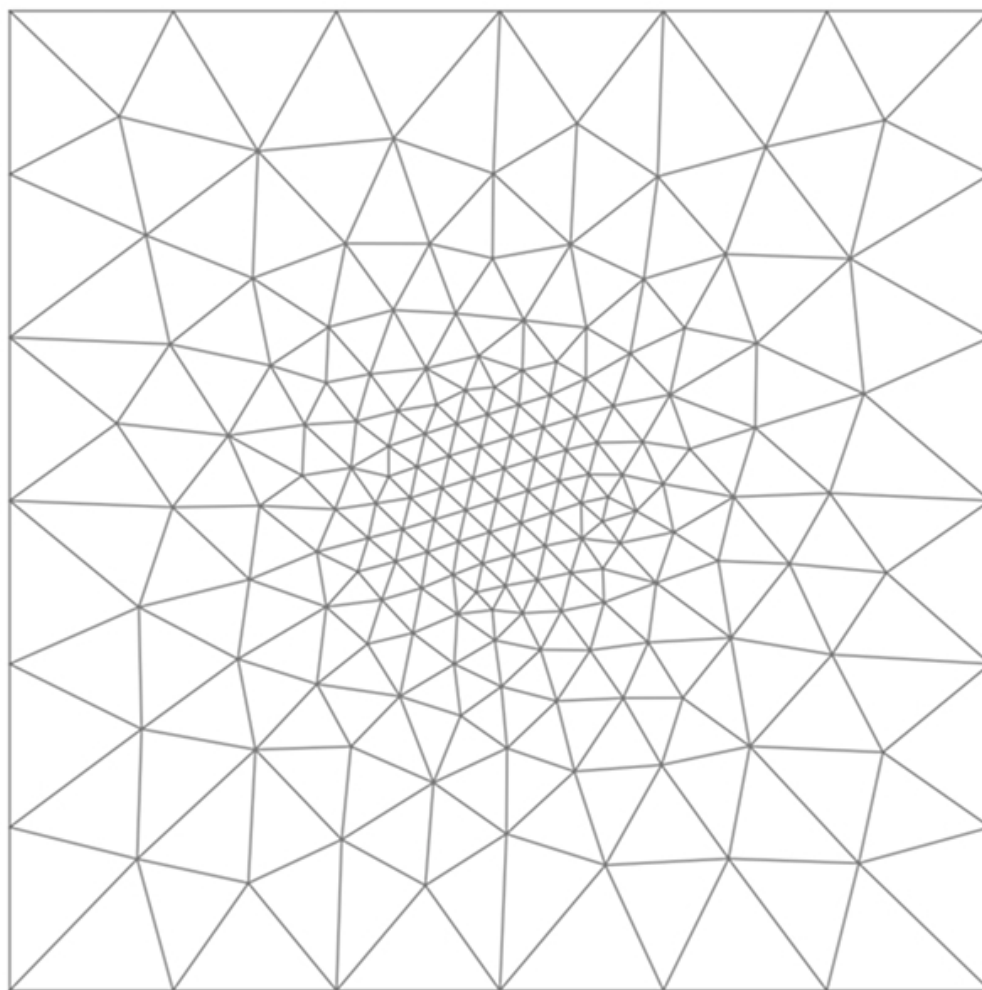


Рисунок 2.1 – Исходная сетка

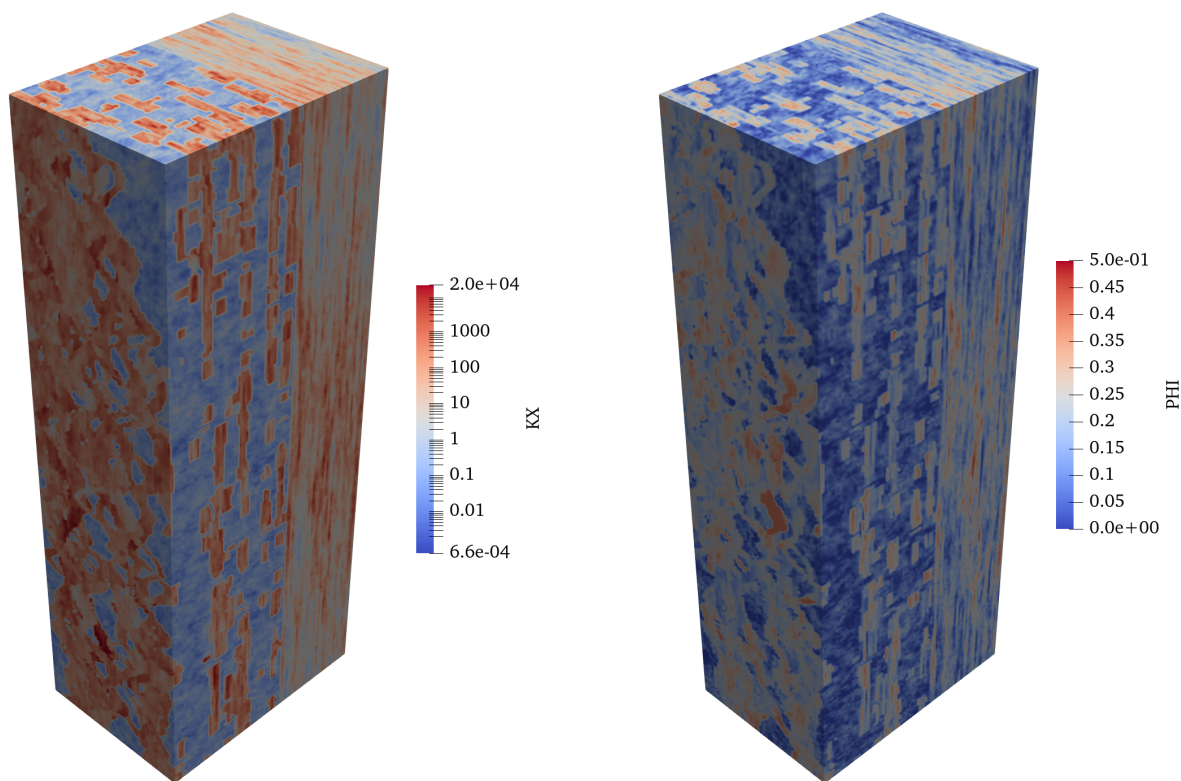
Такая постановка предоставляет возможность моделировать сложные сценарии фильтрации с учётом пространственной неоднородности параметров, и в дальнейшем служит основой как для численного симулятора, так и для разработки ускоренной суррогатной модели.

Во всех рассматриваемых конфигурациях задачи присутствуют две скважины: одна нагнетательная и одна добывающая. Эти скважины не являются частью расчётной сетки, а задаются независимо – в виде точек с заданными координатами внутри моделируемой области.

2.1 Входные данные и подготовка геологической основы

Для моделирования использовались как искусственно задаваемые параметры, так и реальные геологические данные. Начальные условия по давлению, а также значения забойных давлений на нагнетательной и добывающей скважинах задавались вручную для различных конфигураций. В отличие от этого, распределения пористости и проницаемости были получены из открытого промышленного набора данных SPE10.

Набор данных SPE10 (рисунок 2.2) представляет собой трёхмерную модель геологического пласта, заданную в виде прямоугольного блока размером $60 \times 220 \times 85$, где каждая ячейка характеризуется значениями абсолютной проницаемости и пористости. Проницаемость представлена в трёх направлениях: K_x , K_y и K_z . В данной работе извлекается горизонтальный слой с постоянной координатой $z = const$, из которого берётся компонент K_x , как наиболее релевантный для двумерной фильтрации. Этот набор данных широко используется для тестирования фильтрационных моделей благодаря высокой детальности, наличию гетерогенностей и вариативности параметров.

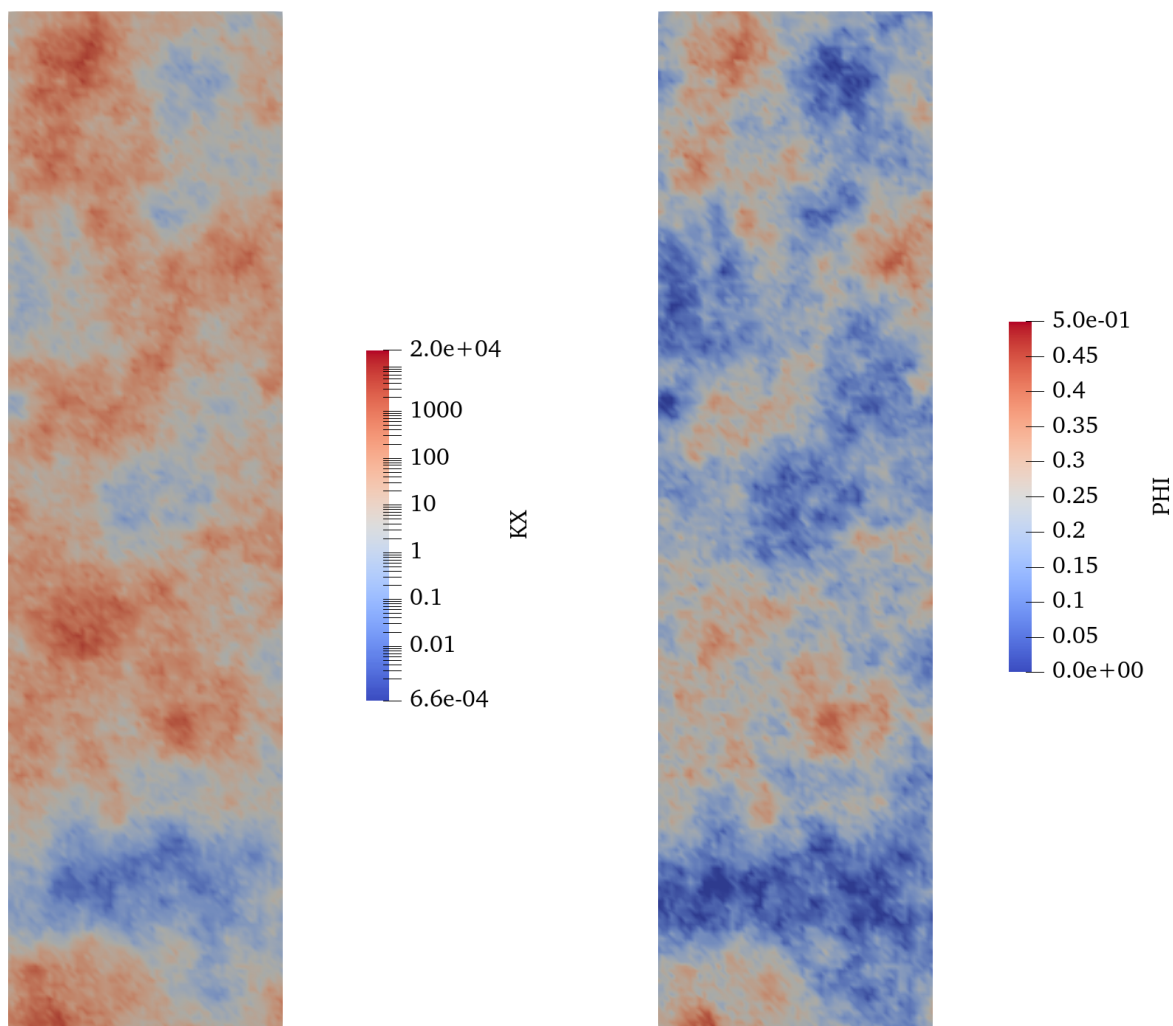


(a) Распределение проницаемости по направлению K_x в логарифмической шкале

(b) Пористость, отображённая в линейной шкале

Рисунок 2.2 – Пример исходных геологических данных: проницаемость и пористость

Для привязки этих трёхмерных данных к нашей двумерной задаче был разработан программный скрипт на Python. Он последовательно обрабатывает каждый горизонтальный срез трёхмерного пласта, извлекая 2D-матрицу значений параметров. Каждый такой срез интерпретируется как отдельный двумерный случай для моделирования (рисунок 2.3). Далее каждая такая матрица разбивается на квадратные фрагменты размером 60×60 , что позволяет использовать их в сочетании с построенной в GMSH неструктурированной сеткой (рисунок 2.1).

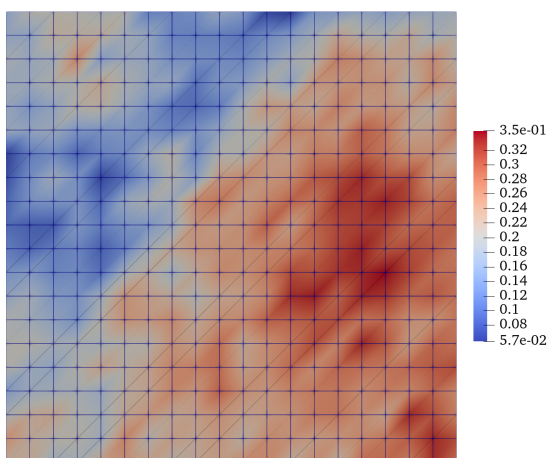


(a) Слой проницаемости по направлению K_x в логарифмической шкале

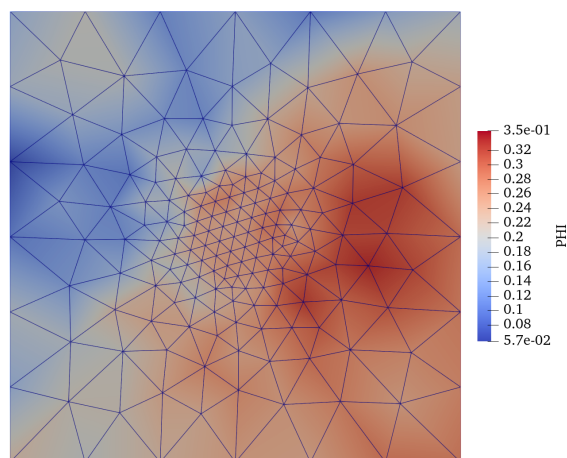
(b) Слой пористости, отображённый в линейной шкале

Рисунок 2.3 – Пример двумерных слоев геологических данных: проницаемость и пористость

Для получения физических полей на построенной сетке выполнялась интерполяция соответствующего блока с регулярной 60×60 -сеткой на координаты узлов неструктурированной триангуляции. Результат этой привязки и примеры полученных двумерных срезов представлены на рисунках [2.4](#) и [2.5](#).

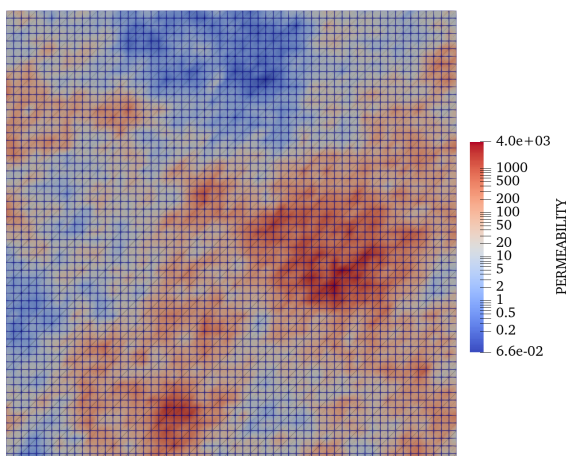


(a) Поле пористости на регулярной сетке 60×60

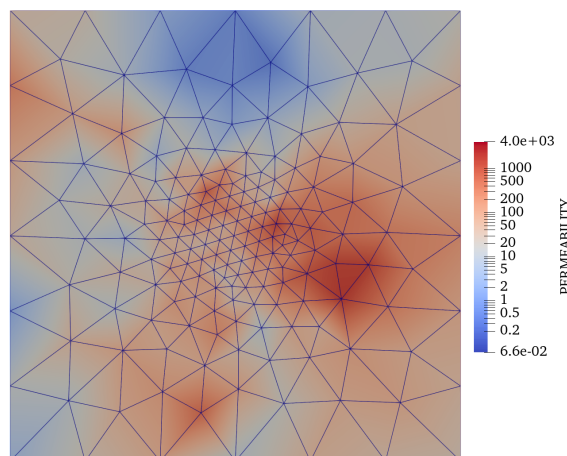


(b) Интерполяция поля пористости на неструктурированную треугольную сетку

Рисунок 2.4 – Сопоставление регулярной и расчётной сетки для поля пористости



(a) Поле проницаемости на регулярной сетке 60×60



(b) Интерполяция поля проницаемости на неструктурированную треугольную сетку

Рисунок 2.5 – Сопоставление регулярной и расчётной сетки для поля проницаемости

2.2 Графовое представление данных

Представление численной схемы в виде графа соответствует идее локального взаимодействия и обеспечивает совместимость с методами машинного обучения на графах, в частности с графовыми нейронными сетями, работающими на неструктурированных данных.

Для перехода от геометрического описания задачи двухфазной фильтрации к формату, удобному для последующего машинного моделирования, все входные данные преобразуются во взвешенный неориентированный граф. Граф позволяет выразить физику задачи через локальные взаимодействия между ячейками расчётной области.

Рассматриваемый граф обозначается как $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ предполагается конечным, простым и неориентированным, без петель и кратных рёбер:

- $\mathcal{V} = \{v_i\}_{i=1}^N$ – множество узлов, каждый из которых соответствует одной ячейке в неструктурированной двумерной сетке;
- $\mathcal{E} \subset \mathcal{V} \times \mathcal{V}$ – множество рёбер, соединяющих пары соседних ячеек.

Каждому узлу $v_i \in \mathcal{V}$ сопоставляется вектор признаков $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^6$ следующего вида:

$$\mathbf{x}_i = \begin{bmatrix} V_i \\ p_i \\ S_i \\ \mathbf{e}_i \end{bmatrix}, \quad (2.1)$$

где:

- $V_i = \phi_i ||\Omega_i||$ – поровый объём ячейки, где ϕ_i - пористость, а Ω_i - площадь ячейки;
- $p_i \in \mathbb{R}$ – давление;
- $S_i \in [0, 1]$ – насыщенность воды;
- $\mathbf{e}_i \in \{0, 1\}^3$ – кодировка типа ячейки:
 - $[1, 0, 0]$ – обычная ячейка;

- $[0, 1, 0]$ – нагнетательная скважина;
- $[0, 0, 1]$ – добывающая скважина.

Каждому ребру $(v_i, v_j) \in \mathcal{E}$ приписывается вещественный вес $T_{ij} \in \mathbb{R}_+$, характеризующий трансмиссивность между ячейками i и j . Эта величина выражает способность флюида протекать между ячейками и рассчитывается по следующей формуле:

$$\lambda_i = \mathbf{n}_{ij}^\top K_i \mathbf{n}_{ij}, \quad (2.2)$$

$$\lambda_j = \mathbf{n}_{ij}^\top K_j \mathbf{n}_{ij}, \quad (2.3)$$

$$T_{ij} = \frac{\lambda_i \lambda_j}{\lambda_i d_j + \lambda_j d_i} L_{ij}, \quad (2.4)$$

где:

- $K_i, K_j \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ – тензоры абсолютной проницаемости;
- $\mathbf{n}_{ij}$ – единичный вектор, направленный от центра ячейки i к ячейке j ;
- $d_i, d_j \in \mathbb{R}_+$ – расстояния от центров ячеек до центров их общей грани;
- $L_{ij} \in \mathbb{R}_+$ – длина (в 2D) или площадь (в 3D) общей грани между ячейками.

Если один из узлов соответствует скважине, то соответствующее ребро модели описывает фильтрационную связь между скважиной и ближайшей к ней ячейкой сетки. Скважина соединяется с ближайшей ячейкой по евклидовому расстоянию до центра тяжести. Предполагается, что ближайшая ячейка единственна (что обеспечивается достаточной разреженностью сетки). Значение веса T_{iw} в этом случае определяется на основе аналитической формулы продуктивности, выведенной в 7.71 в работе [1]. В оригинале она была выведена для прямоугольной декартовой сетки, однако в настоящей постановке –

несмотря на использование треугольной сетки – в целях упрощения расчётов эффективный радиус дренажа r_b аппроксимируется по параметрам обрамляющего прямоугольника. Несмотря на то, что сетка треугольная, оценка r_b по обрамляющему прямоугольнику остаётся обоснованной, так как площадь такого прямоугольника аппроксимирует площадь ячейки с достаточно высокой точностью при регулярности геометрии [19].

$$T_{iw} = WI = \frac{2\pi\Delta z}{\ln\left(\frac{r_b}{r_w}\right)}, \quad (2.5)$$

где:

- r_w – радиус скважины;
- r_b – эффективный радиус области дренажа, аппроксимируемый по обрамляющему прямоугольнику треугольной ячейки как:

$$r_b = \sqrt{(\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i-1/2})(\Delta y_{j+1/2} + \Delta y_{j-1/2})/\pi} \quad (2.6)$$

Здесь $\Delta x_{i\pm 1/2}$ и $\Delta y_{j\pm 1/2}$ – половины размеров обрамляющего прямоугольника вдоль соответствующих координатных направлений.

- Δz – толщина области (в данной двумерной постановке принимается $z = 1$).

Для хранения структуры графа используется множество троек:

$$\mathcal{T} := \{ (T_{ij}, i, j) \mid (i, j) \in \mathcal{E} \}, \quad (2.7)$$

что обеспечивает удобство хранения и использования при численном моделировании.

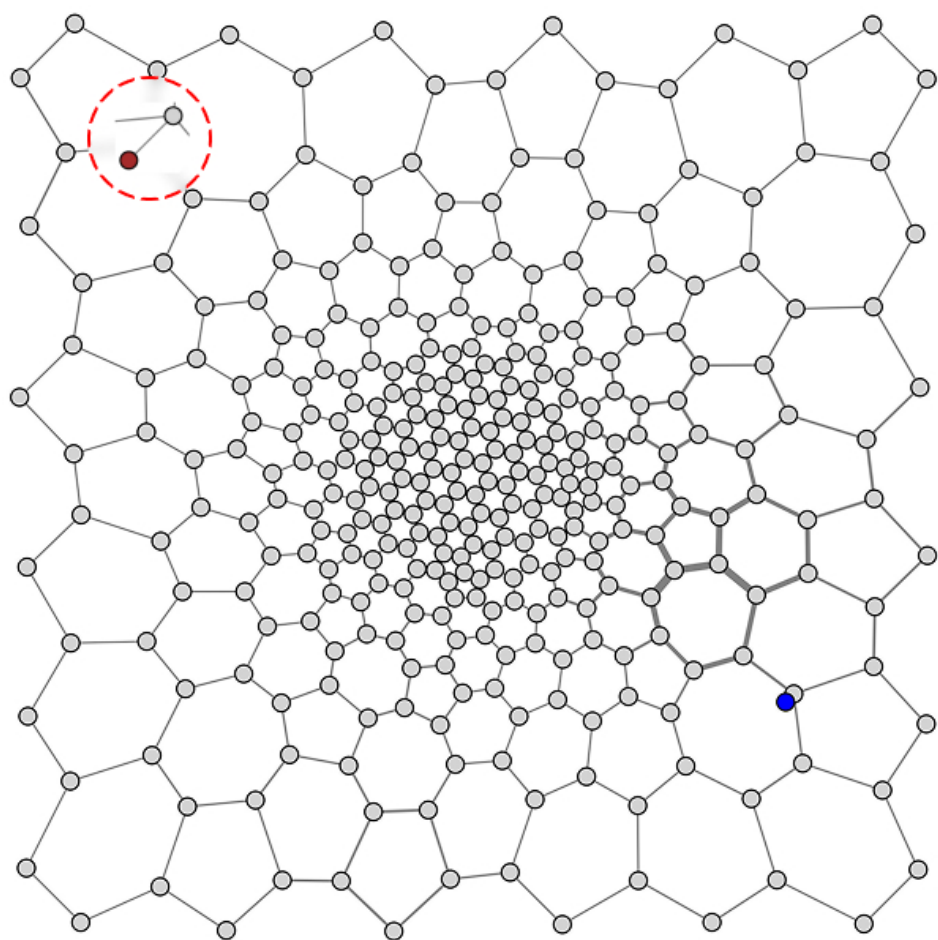


Рисунок 2.6 – Полный граф $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, построенный по неструктурированной треугольной сетке (рисунок 2.1). Узлы–ячейки показаны серым цветом, нагнетательная скважина (синий узел) и добывающая скважина (красный узел) соединены с ближайшими ячейками (см. красный пунктир, где увеличен соответствующий фрагмент)

Как видно из рисунка 2.6, графовая формулировка не зависит от топологии исходной сетки: любой конечный набор локальных связей (в том числе в трёхмерном случае) может быть кодирован в виде множества пар (i, j) с соответствующими T_{ij} .

Представление численных данных в виде графа обеспечивает не только соответствие физической структуре задачи, основанной на локальных взаимодействиях, но и позволяет построить универсальный формат данных, независимый от размерности и конкретной геометрии расчётной области. Лю-

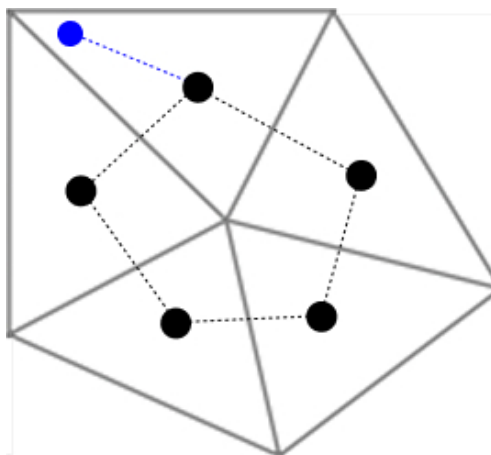


Рисунок 2.7 – Локальная конфигурация двух соседних треугольников: чёрные точки – центры ячеек (узлы графа), пунктир – рёбра графа, синий узел – скважина, подключённая к ближайшей ячейке

бая дискретизация, допускающая локальные связи между элементами, может быть приведена к графовой форме, что делает разработанный симулятор совместимым с широким классом геометрий. Такой подход обеспечивает гибкость и обобщаемость, необходимые для последующего использования суррогатных моделей в задачах предсказательного моделирования фильтрационных процессов.

2.3 Цель работы

Целью настоящей работы является разработка и исследование графовой нейронной сети, способной выступать в роли суррогатной модели численного симулятора для задачи двухфазной фильтрации на неструктурированной сетке, с возможностью осуществлять прогноз приращений давления и насыщенности на последующих временных шагах по известному состоянию системы на текущем шаге.

2.4 Новизна работы

В данной работе рассматривается задача моделирования двухфазной фильтрации с использованием графовой нейронной сети, обучаемой на дан-

ных, полученных с помощью численного симулятора. Несмотря на то, что графовое представление геологических структур и применение графовых нейронных сетей к задачам моделирования физических процессов уже исследовались в ряде работ, предлагаемое решение обладает рядом специфических особенностей, которые придают работе прикладную и инженерную новизну.

Ключевая особенность состоит в строгом разделении геометрии и параметров модели: в отличие от классических симуляторов, основанных на геометрическом описании сетки, разработанная нейронная модель оперирует исключительно графом трансмиссивностей, вектором поровых объёмов и признаками узлов. Это позволяет исключить необходимость хранения и обработки геометрических данных при прогнозировании, тем самым снижая объём входной информации и повышая универсальность модели.

Кроме того, модель обучается не на абсолютные значения физических параметров, а на их приращения между временными шагами. Это решение позволяет реализовать авто-регрессионную стратегию предсказания, при которой текущее состояние модели служит входом для следующего прогноза. Такой подход позволяет снизить эффект накопления ошибок и делает модель устойчивой при длительных горизонтах предсказания.

Таким образом, новизна настоящей работы заключается не в переосмыслении архитектурных решений, а в целостной инженерной реализации – от построения графа до обучения и применения нейросетевой модели в условиях, приближённых к практическим сценариям фильтрации в пористой среде.

2.5 Практическая значимость

Практическая значимость данной работы определяется актуальной потребностью в быстрой и надёжной оценке сценариев разработки месторожде-

ний, особенно в условиях ограниченного времени и вычислительных ресурсов. В нефтегазовой отрасли такие задачи, как оптимизация расположения скважин, history matching и анализ чувствительности, традиционно решаются с использованием численных симуляторов. Однако полное моделирование требует значительных затрат, особенно при необходимости многократного пересчёта под различные конфигурации параметров.

Разработанная в работе графовая нейронная сеть позволяет аппроксимировать поведение системы фильтрации – изменение давления и насыщенности – без необходимости оперировать полной геометрией расчётной сетки. Это снижает требования к входным данным и существенно ускоряет процесс моделирования. Такая модель может использоваться в инженерной практике для предварительного анализа, экспресс-оценки эффективности проектных решений, а также в составе цифровых двойников, где важна возможность быстрой переоценки состояния системы.

Отдельное значение имеет возможность авто-регрессионного прогнозирования: модель способна предсказывать динамику системы на несколько шагов вперёд, что делает её применимой в задачах краткосрочного планирования и мониторинга. Благодаря сочетанию скорости, универсальности и физической интерпретируемости, предлагаемая модель может служить вспомогательным инструментом при принятии оперативных решений в процессе разработки и эксплуатации месторождений.

3 ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

3.1 Численный симулятор двухфазной фильтрации на неструктурированных сетках

3.1.1 Введение

В данной главе представлена разработка собственного численного симулятора двухфазной фильтрации на неструктурированной треугольной сетке. Цель разработки – создание инструмента для генерации синтетических данных, предназначенных для обучения суррогатных моделей на основе методов машинного обучения, применяемых в задачах моделирования фильтрационных процессов в пористых средах.

Разработка симулятора обусловлена необходимостью в быстром прототипе, пригодном для многократных экспериментов с архитектурами суррогатной модели, оценкой обобщающей способности моделей, а также контролем качества синтетических данных. В отличие от промышленных симуляторов (таких как INMOST, AD-GPRS, Eclipse и др.), реализуемая модель опирается на ряд допущений, упрощающих численную реализацию: применяется двумерная постановка задачи, расчётная область представлена в виде неструктурированной треугольной сетки, флюиды считаются несжимаемыми, а фазовые проницаемости описываются моделью Брукса–Кори с фиксированными параметрами [20—22]. Вместе с тем, геофизические свойства среды (проницаемость и пористость) задаются на основе реального набора данных SPE10 как описано в разделе 2.1, что позволяет сохранить пространственную неоднородность и приближённую реалистичность среды. Такой подход обеспечивает баланс между вычислительной эффективностью и сохранением ключевых физических характеристик.

Отдельное внимание уделено графовой интерпретации расчётной схе-

мы, представленной в главе 2.2, где описывается преобразование симуляционного вывода в формат, пригодный для обучения суррогатных моделей на основе графовых нейронных сетей. Используемый подход вдохновлён работой [2].

Несмотря на практическую применимость, симулятор обладает рядом ограничений, связанных как с физической постановкой, так и с численной реализацией. Эти ограничения подробно анализируются в последующих разделах главы.

3.1.2 Математическая постановка задачи

Настоящая работа опирается на классическую двухфазную модель, изложенную в [2]. В пористую среду закачивается вода ($j = w$), вытесняя нефть ($j = o$). Ниже приводится полный набор исходных уравнений и определений, используемых в упомянутой работе.

Для каждой фазы $j \in \{o, w\}$ выполняется закон сохранения массы:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho_j S_j) + \nabla \cdot (\rho_j \mathbf{v}_j) = -\tilde{q}_j^m, \quad (3.1)$$

где ϕ – пористость, ρ_j – плотность фазы, S_j – её насыщенность, $\mathbf{v}_j$ – скорость Дарси, а $\tilde{q}_j^m$ – массовый источник/сток (с учётом положительного знака для добычи и отрицательного – для закачки).

Скорость Дарси:

$$\mathbf{v}_j = -\frac{\mathbf{K} k_{rj}(S_j)}{\mu_j} \nabla p_j, \quad (3.2)$$

где $\mathbf{K}$ – тензор абсолютной проницаемости, k_{rj} – относительная проницаемость, μ_j – вязкость, p_j – фазовое давление.

При отсутствии капиллярных сил принимается: $p_o = p_w = p$. При

несжимаемых флюидах ($\rho_j = \text{const}$, $\partial\phi/\partial p = 0$) система (3.1)–(3.2) сводится к эллиптическому уравнению давления

$$\nabla \cdot [\lambda_t(S_w) k \nabla p] = q_t^v, \quad \lambda_t(S_w) = \frac{k_{rw}}{\mu_w} + \frac{k_{ro}}{\mu_o}, \quad (3.3)$$

и гиперболическому уравнению водонасыщенности

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{v}_t f(S_w)] = -q_w^v, \quad \mathbf{v}_t = -\lambda_t k \nabla p, \quad f(S_w) = \frac{k_{rw}/\mu_w}{\lambda_t}. \quad (3.4)$$

Здесь $q_t^v = q_w^v + q_o^v$ – суммарный объёмный источник.

Объёмный расход через скважину рассчитывается как $q_j^v = W_j(p_{\text{bh}} - p_j)$, где коэффициент W_j вычисляется по формуле Писмана [23]:

$$(q_j^v)_i = W_i \left(\frac{k_{rj}}{\mu_j} \right)_i (p_i - p^w), \quad (3.5)$$

где индекс i означает ячейку сетки, p^w – забойное давление, а W_i – индекс скважины

$$W_i = \frac{2\pi k_i \Delta z}{\ln(r_w/r_0)}, \quad r_0 \approx 0.2 \sqrt{V_i/\Delta z}, \quad (3.6)$$

r_w – радиус ствола, V_i – объём ячейки. В (3.6) предполагается изотропная проницаемость k_i .

Относительные проницаемости задаются моделью Брукса–Кори (рисунк 3.1) [20–22].

$$S_e(S_w) = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{or}}, \quad k_{rw} = S_e^2, \quad k_{ro} = (1 - S_e)^2, \quad (3.7)$$

где $S_{wr} = 0.2$ – остаточная вода, $S_{or} = 0.2$ – остаточная нефть.

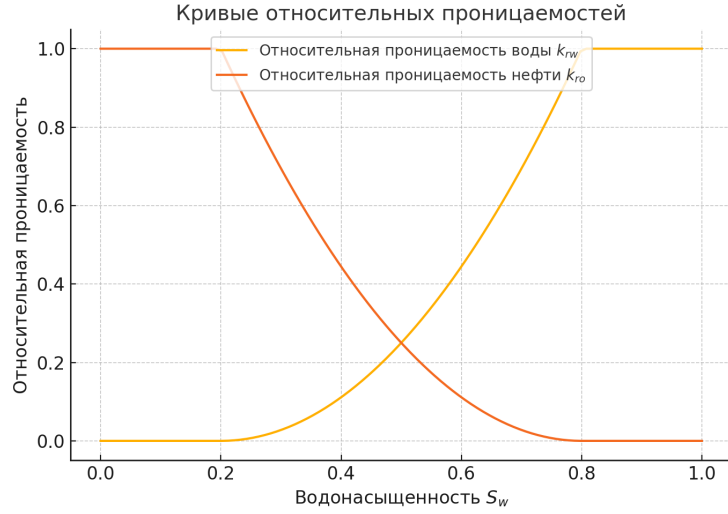


Рисунок 3.1 – Кривые относительных проницаемостей, используемые в расчетах

3.1.3 Упрощённая математическая постановка задачи

Разработанный симулятор наследует базовые уравнения (3.3)–(3.4), однако включает ряд существенных упрощений, продиктованных целью – быстрой генерации синтетических данных для обучения GNN.

Геометрия. Двумерная область $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ покрыта неструктурированной треугольной сеткой.

Постоянные свойства. Пористость $\phi(\mathbf{x})$ и абсолютная проницаемость $k(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}_+$ берутся из реализаций SPE10, но k рассматривается *скалярной* (изотропной). Вязкости $\mu_w = 10^{-3}$ Pa·s, $\mu_o = 1$ Pa·s постоянны; плотности фаз предполагаются постоянными и не участвуют явно в расчётах.

Отсутствие капиллярных сил и гравитации. $p_o = p_w = p$, член $\rho_j g z$ отсутствует.

Граничные условия. Внешний контур непроницаем:

$$(k \nabla p) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{на } \partial\Omega, \quad (3.8)$$

что реализуется отсутствием трансмиссивностей через границу сетки. Един-

ственные граничные условия $p = p^w$ задаются в искусственных узлах–скважинах (inj, prod).

Начальные условия.

$$p(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad S_w(\mathbf{x}, 0) = S_{w0} = 10^{-3}, \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (3.9)$$

Модель относительных проницаемостей. Используется выражение (3.7).

С учётом изложенных упрощений итоговая система дифференциальных уравнений в частных производных формулируется следующим образом: найти $p(\mathbf{x}, t)$ и $S_w(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{x} \in \Omega$, $t \in (0, T]$, такие что

$$\nabla \cdot [\lambda_t(S_w) k \nabla p] = q_t^v, \quad \text{в } \Omega \times (0, T], \quad (3.10a)$$

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot [-\lambda_w(S_w) k \nabla p] = -q_w^v, \quad \text{в } \Omega \times (0, T], \quad (3.10b)$$

где $\lambda_w = k_{rw}/\mu_w$, $\lambda_t = \lambda_w + k_{ro}/\mu_o$, q_t^v , q_w^v задаются формулами (3.5)–(3.6) с постоянным k_i .

3.1.4 Дискретизация на треугольной сетке

Рассмотренная в разд. 3.1.3 непрерывная система (3.10) решается методом конечных объёмов на неструктурированной треугольной сетке $\mathcal{T}_h = \{\tau_k\}_{k=1}^{N_c}$.

Каждый треугольник $\tau_k \in \mathcal{T}_h$ рассматривается как контрольный объём V_k , а узел графа v_k совпадает с центром масс $\mathbf{x}_k = \frac{1}{3}(\mathbf{x}_{k1} + \mathbf{x}_{k2} + \mathbf{x}_{k3})$. Инте-

гирование уравнений (3.10a)–(3.10b) по V_k даёт

$$\sum_{e \in \partial V_k} F_{t,ke} = Q_{t,k}, \quad (3.11a)$$

$$\phi_k \frac{S_{w,k}^{n+1} - S_{w,k}^n}{\Delta t} + \sum_{e \in \partial V_k} F_{w,ke}^n = -Q_{w,k}. \quad (3.11b)$$

Здесь:

- ϕ_k – пористость ячейки k ;
- $S_{w,k}^n$ – водонасыщенность в ячейке k на временном шаге n ;
- $S_{w,k}^{n+1}$ – водонасыщенность в ячейке k на следующем шаге $n + 1$;
- Δt – шаг по времени;
- $F_{t,ke}$ – суммарный поток через грань e , примыкающую к ячейке k ;
- $F_{w,ke}^n$ – фазовый поток воды через грань e на временном шаге n ;
- $Q_{t,k}$ – величина объёмного притока или оттока флюида в ячейке k , обусловленного действием нагнетательной или добывающей скважины;
- $Q_{w,k}$ – источник воды в ячейке k .

3.1.5 Трансмиссивности на общей грани

Рассмотрим пару соседних ячеек V_i и V_j , делящих общую грань e_{ij} площадью L_{ij} . Обозначим $\mathbf{x}_i$ и $\mathbf{x}_j$ – центры ячеек, k_i и k_j – их абсолютные проницаемости.

Введём:

$$\mathbf{n}_{ij} = \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|}, \quad (3.12)$$

$$d_i = \text{dist}(\mathbf{x}_i, e_{ij}), \quad d_j = \text{dist}(\mathbf{x}_j, e_{ij}), \quad (3.13)$$

где $\text{dist}(A, B)$ – расстояние между точкой и множеством. Относительные подвижности фаз:

$$\lambda_i = \lambda_t(S_{w,i}), \quad \lambda_j = \lambda_t(S_{w,j}). \quad (3.14)$$

Тогда *геометрическая* (фазонезависимая) проницаемость грани

$$T_{ij}^{\text{geo}} = \frac{k_i k_j}{k_i d_j + k_j d_i} L_{ij} \quad (3.15)$$

с поправкой на подвижность даёт итоговую трансмиссивность

$$T_{ij} = \frac{\lambda_i \lambda_j}{\lambda_i d_j + \lambda_j d_i} L_{ij}. \quad (3.16)$$

Поток полной фазы через грань определяется как

$$F_{t,ij} = T_{ij} (p_i - p_j), \quad F_{t,ji} = -F_{t,ij}, \quad (3.17)$$

что обеспечивает локальную сохранность объёма.

3.1.6 *Аппроксимация против потока для фазовых подвижностей*

Фазовые подвижности в численных потоках выбираются по схеме аппроксимации против потока:

$$\lambda_{\text{up}} = \begin{cases} \lambda_i, & p_i - p_j \geq 0, \\ \lambda_j, & p_i - p_j < 0. \end{cases} \quad (3.18)$$

Аналогично для водной подвижности λ_w . Тогда дискретный фазовый поток через грань

$$F_{w,ij} = T_{ij} \lambda_{\text{up}}^{(w)} (p_i - p_j), \quad F_{w,ji} = -F_{w,ij}. \quad (3.19)$$

Подробное применение этого правила в численной схеме для потока воды приведено в разделе [3.1.8](#).

3.1.7 *Учёт скважинных узлов*

Скважины моделируются дополнительными узлами графа с фиксированным давлением p^w , соединёнными с ближайшей ячейкой V_i ребром с весом W_i (индекс продуктивности) – согласно [2.2](#). Для такого ребра поток вычисляется как [\(2.5\)](#), где роль подвижности на скважинной стороне играет величина, выбранная по схеме аппроксимации против потока.

3.1.8 *Алгоритм решения*

С учётом разной жёсткости эллиптического уравнения давления и гиперболической транспортной задачи [\(3.10a\)](#)-[\(3.10b\)](#) используется схема “Implicit Pressure / Explicit Saturation” (IMPES). На n -м шаге по времени она

состоит из двух стадий

$$t_n \longrightarrow t_{n+1} = t_n + \Delta t, \quad (3.20)$$

1. Неявная схема для давления. При фиксированной водонасыщенности S_w^n решается линейная система, соответствующая дискретизации уравнения

$$\nabla \cdot [\lambda_t(S_w^n) k \nabla p^{n+1}] = q_t^{v,n+1}, \quad (3.21)$$

обеспечивающая безусловную (по Δt) устойчивость эллиптической подсхемы.

2. Явная схема для насыщенности. Полученное поле скоростей $\mathbf{v}_t^{n+1} = -\lambda_t(S_w^n) k \nabla p^{n+1}$ подставляется в явную формулу переноса

$$S_w^{n+1} = S_w^n - \frac{\Delta t}{\phi} \nabla \cdot [\mathbf{v}_t^{n+1} f(S_w^n)] - \frac{\Delta t}{\phi} q_w^{v,n}. \quad (3.22)$$

Выбор IMPES оправдан балансом *устойчивость/стоимость*: (а) давление, определяющее глобальные потоки, вычисляется устойчиво, (б) уравнение переноса обновляется без решения нелинейной системы, что особенно важно для генерации больших обучающих выборок.

В разработанном симуляторе задача для давления формулируется в виде линейной системы $A\mathbf{p} = \mathbf{b}$, где матрица $A \in \mathbb{R}^{M \times M}$ собирается в разреженном формате LIL (список списков) с последующим преобразованием в формат CSR (Compressed Sparse Row) для решения с использованием метода прямого разложения.

Линейная система $A\mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{b}$, возникающая на каждом временном шаге, решается с использованием метода `scipy.sparse.linalg.spsolve`, реализующего прямое LU-разложение разреженной матрицы в формате CSR. Матрица A предварительно собирается в формате LIL, после чего преобра-

зуется в CSR перед решением.

Поток воды через грань (i, j) рассчитывается по схеме аппроксимации против потока:

$$F_{w,ij}^{n+1} = T_{ij} \lambda_{w,\text{up}}^n (p_i^{n+1} - p_j^{n+1}), \quad (3.23)$$

$$\lambda_{w,\text{up}}^n = \begin{cases} \lambda_w(S_{wi}^n), & p_i^{n+1} \geq p_j^{n+1}, \\ \lambda_w(S_{wj}^n), & p_i^{n+1} < p_j^{n+1}. \end{cases} \quad (3.24)$$

После расчёта потоков водонасыщенность S_w^{n+1} обновляется согласно уравнению (3.22), после чего применяется ограничение значений в допустимом физическом диапазоне:

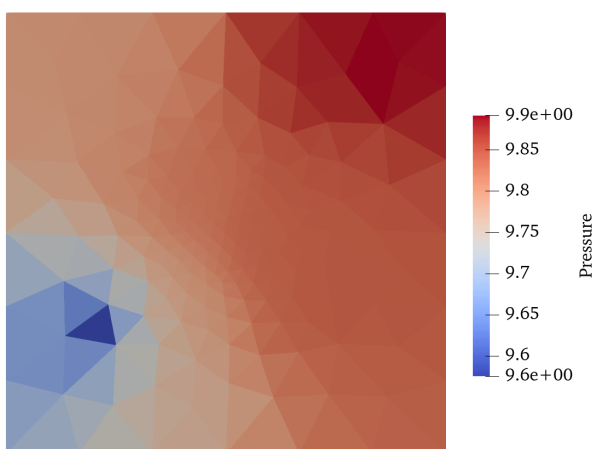
$$S_w^{n+1} \leftarrow \min\{1, \max\{0, S_w^{n+1}\}\}. \quad (3.25)$$

CFL-условие. Для устойчивости явной схемы выбираем шаг

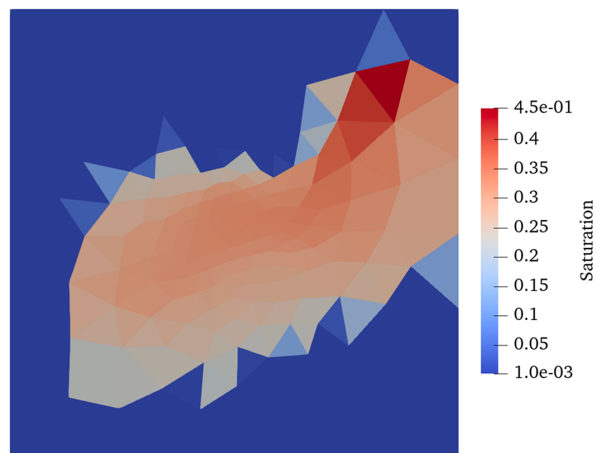
$$\Delta t \leq \min_i \frac{\phi_i |V_i|}{\sum_{j:(i,j) \in \mathcal{E}} |F_{w,ij}^{n+1}|}, \quad (3.26)$$

где:

- $\mathcal{E}$ – множество рёбер/граней сетки
- $F_{w,ij}^{n+1}$ – поток воды через грань между ячейками i и j
- ϕ_i – пористость ячейки i

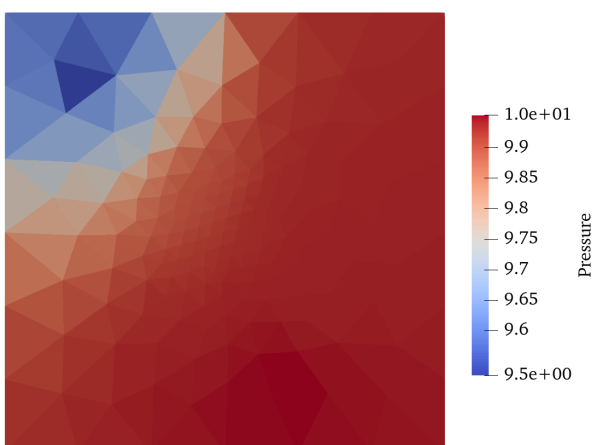


(a) Поле давления на последнем временном шаге

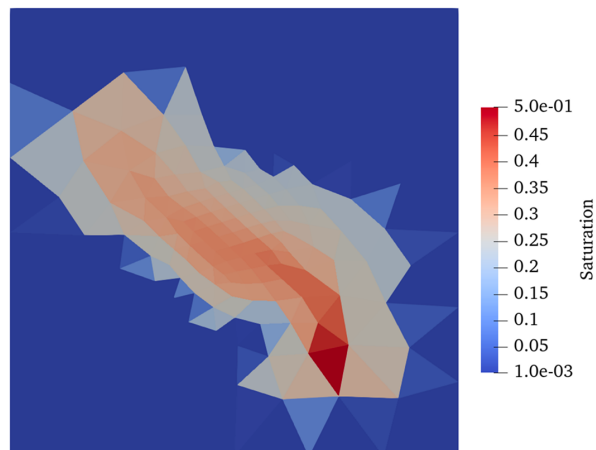


(b) Поле насыщенности воды на последнем временном шаге

Рисунок 3.2 – Результаты моделирования на последнем временном шаге. Добывающая скважина расположена в нижней левой части области, нагнетательная – в правой верхней



(a) Поле давления на последнем временном шаге



(b) Поле насыщенности воды на последнем временном шаге

Рисунок 3.3 – Результаты моделирования на последнем временном шаге. Добывающая скважина расположена в верхней левой части области, нагнетательная – в правой нижней

3.1.9 Ограничения модели и область применимости

Разработанная численная модель предназначена для генерации обучающих выборок и тестирования суррогатных графовых моделей. В связи с этим она намеренно упрощена. Ниже обобщены основные физико-

математические и численные допущения, определяющие область применимости и возможные направления развития.

Модель реализована на графе, соответствующем двумерной области, однако она непосредственно переносима на трёхмерный случай. Для этого достаточно использовать графовую структуру с узлами в $\mathbb{R}^3$ и модифицированными весами рёбер, отражающими геометрию 3D-ячейки. Абсолютная проницаемость K предполагается скалярной величиной и учитывается только вдоль нормали к граням. Плотности фаз ρ_j и пористость среды ϕ считаются постоянными (что эквивалентно принятию нулевых коэффициентов сжимаемости $c_f = c_r = 0$).

Дополнительные физические эффекты, такие как силы тяжести, капиллярное давление, теплоперенос, а также зависимость вязкостей μ_j от давления и температуры, в расчётах не учитываются. Для относительных проницаемостей используется модель Брукса–Кори с квадратичными зависимостями. Скважинный приток рассчитывается на основе простой оценки эффективного радиуса дренажа r_b по обрамляющему прямоугольнику (согласно (2.6)), что может приводить к систематическим ошибкам на вытянутых или остроугольных треугольниках. Для повышения точности на неструктурированных сетках необходима геометрически корректная аппроксимация, например, через эквивалентный круг той же площади или коррекция по усреднённому множителю [19].

Используемая схема IMPES ограничивает шаг по времени Δt в соответствии с CFL-условием. Переход к неявной схеме в уравнении насыщенности позволит существенно увеличить шаг без потери устойчивости. В текущей реализации также применяется фиксированный шаг по времени; использование адаптивного выбора Δt , основанного на локальной оценке ошибки, позволит обеспечить баланс между точностью и вычислительной эффективностью.

3.1.10 Генерация обучающего набора на основе численного симулятора

Разработанный численный симулятор используется в качестве генератора обучающих данных для построения суррогатной модели, способной приближённо воспроизводить динамику фильтрации без явного решения уравнений. Один обучающий пример определяется как упорядоченное множество, состоящее из следующих данных:

$$(G, \mathbf{c}, \Phi, \hat{p}, \{p_n\}_{n=1}^{N_t}, \{S_{w,n}\}_{n=1}^{N_t}), \quad (3.27)$$

где:

- $G = (V, E, w)$ – граф, порождённый по геометрии сетки и значению проницаемости, с весами рёбер w_{ij} , отражающими трансмиссивность;
- $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^{|V| \times 3}$ – матрица кодировки узлов по типу (ячейка, нагнетательная, добывающая);
- $\Phi \in \mathbb{R}^{|V|}$ – вектор поровых объёмов;
- $\hat{p}$ – стационарное решение уравнения давления при $S_w \equiv 1$, вычисляемое отдельно перед запуском моделирования;
- $p_n, S_{w,n}$ – значения давления и водонасыщенности на дискретных временных шагах $n = 1, \dots, N_t$.

Пары скважин (нагнетающая, добывающая) отбираются заранее по случайным координатам с жёстким метрическим ограничением на минимальное расстояние между ними. Это позволяет обеспечить разнообразие конфигураций, избежать переобучения и гарантировать устойчивость зада-

чи. Координаты всех сгенерированных пар сохраняются в отдельной таблице, что обеспечивает воспроизводимость симуляций.

Для каждой пары запускается моделирование в течение фиксированного времени $T = 3$ при малом шаге по времени $\Delta t = 10^{-5}$, что обусловлено явным характером используемой схемы. Решения сохраняются с шагом по индексу n , кратным 500, что соответствует выборке $N_t = 600$ дискретных шагов на одну симуляцию и позволяет адекватно захватывать эволюцию насыщенности и давления при сохранении вычислительной эффективности.

Всего было сгенерировано $M = 50$ различных скважинных конфигураций, каждая из которых представляет собой независимую симуляцию. Для обучения использовано $M_{\text{train}} = 40$ конфигураций, оставшиеся $M_{\text{val}} = 10$ использованы для валидации, чтобы обеспечить проверку обобщающей способности модели на ранее не встречавшихся геометриях скважин.

Общий объём обучающих данных составляет $M_{\text{train}} \cdot N_t = 24\,000$ временных срезов. Для каждой симуляции сохраняются все необходимые данные в структурированном виде, что позволяет напрямую использовать их в процессе обучения без дополнительной обработки.

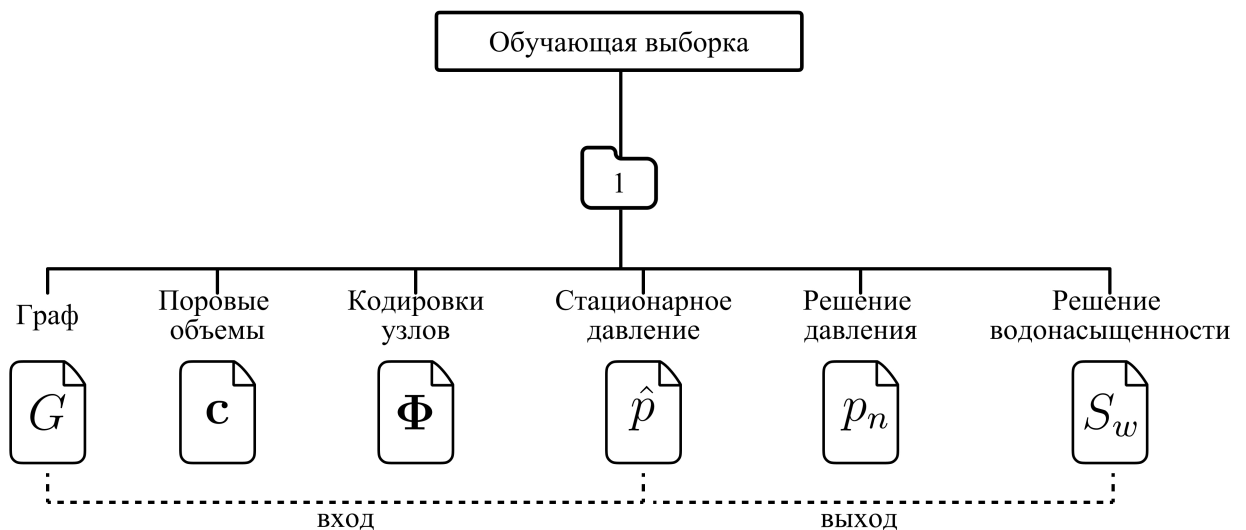


Рисунок 3.4 – Структура одного обучающего примера, сгенерированного симулятором

3.2 Графовые суррогатные модели динамики двухфазной фильтрации

Численный симулятор, описанный в предыдущем разделе, был создан с прицелом не только на воспроизведение физического процесса, но и на генерацию обучающей выборки для последующего построения приближённой модели. Такая модель должна уметь по заданным входным данным – проницаемости, поровому объёму, конфигурации скважин – воспроизводить поведение системы без необходимости заново решать уравнения фильтрации.

Мы исходим из предположения, что в задачах, требующих многократного моделирования (оптимизация, сценарный анализ, адаптация под данные), точный расчёт становится узким местом. Поэтому основная цель данного этапа – построить приближенную, но достаточно точную модель, способную в десятки и сотни раз быстрее давать решение с приемлемой ошибкой.

В этой главе мы опишем, как была организована работа по созданию суррогатной модели: какие данные использовались, как были выбраны входы и выходы, на основе какой архитектуры построена модель, как она обучалась и проверялась. Особое внимание будет уделено структуре графа, особенностям динамики в данных и способу авторегрессионного прогнозирования.

3.2.1 Постановка задачи прогнозирования

Пусть $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ – неориентированный взвешенный граф, полученный из расчётной треугольной сетки согласно 3.1.4. Множество вершин $\mathcal{V} = \{1, \dots, N\}$ включает N_c ячеек и два искусственных узла–скважины ($N = N_c + 2 = 340$), а множество рёбер $\mathcal{E}$ содержит все пары (i, j) , для которых ячейки i и j имеют общую грань, либо i соединена со скважинным узлом. Каждому ребру приписан вес $T_{ij} > 0$ – трансмиссивность, вычисляемая по уравнению (3.16) (или индекс продуктивности W_i для скважины).

Обозначим

$$\mathbf{P}_n = (P_{n,1}, \dots, P_{n,N_c})^\top, \quad \mathbf{S}_n = (S_{n,1}, \dots, S_{n,N_c})^\top \quad (3.28)$$

вектор пластового давления и водонасыщенности, соответствующий моментам времени $t_k = k \cdot \Delta T$, где ΔT – интервал сохранения (каждые 500 численных шагов явной схемы)

Требуется построить суррогатную модель

$$\mathcal{F}_\vartheta : (\mathcal{G}, \mathbf{X}_n) \mapsto \widehat{\Delta \mathbf{P}}_n \approx \Delta \mathbf{P}_n := \mathbf{P}_{n+1} - \mathbf{P}_n, \quad (3.29)$$

реализуемую графовой нейронной сетью с обучаемыми параметрами ϑ . После предсказания приращения давление на следующем временном шаге t_k восстанавливается простым явным шагом

$$\widehat{\mathbf{P}}_{n+1} = \mathbf{P}_n + \widehat{\Delta \mathbf{P}}_n, \quad (3.30)$$

что позволяет использовать (3.29)–(3.30) рекуррентно (многошаговое прогнозирование) для сколь угодно длинного прогноза.

Обучающая выборка состоит из пар

$$\{(\mathcal{G}, \mathbf{X}_n), \Delta \mathbf{P}_n\}, \quad n = 0, \dots, N_T - 1, \quad (3.31)$$

где $\mathbf{X}_n$ – матрица входных признаков, определённая ниже. *Задача обучения* формулируется как

$$\min_{\vartheta} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \mathcal{L}(\mathcal{F}_\vartheta(\mathcal{G}^{(m)}, \mathbf{X}_n^{(m)}), \Delta \mathbf{P}_n^{(m)}), \quad (3.32)$$

где M – число наблюдений, $\mathcal{L}$ – комбинированный функционал ошибки,

включающий узловую, градиентную и сглаживающую составляющие (согласно [3.2.11](#)).

3.2.2 Структура входных и выходных векторов

Рёбра графа кодируются тройками $(T_{ij}, i, j) \in \mathbb{R} \times \mathbb{N} \times \mathbb{N}$, причём каждое внутреннее ребро хранится однократно, а в обучающем тензоре используется ориентированное дублирование (i, j) и (j, i) . Вектор реберных признаков $\mathbf{e}_{ij} = [T_{ij}]^\top \in \mathbb{R}^1$ нормализуется по правилу min-max, вычисленному на всей обучающей совокупности.

Для каждой вершины $v \in \mathcal{V}$ формируется

$$\mathbf{x}_v(t_n) = [\sigma_v, \phi_v V_v, P_v^{\text{stat}}, P_v(t_n), S_v(t_n), \tau_n]^\top \in \mathbb{R}^8, \quad (3.33)$$

где $\sigma_v \in \{(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)\}$ – код типа узла (*обычная ячейка / нагнетательная скважина / добывающая скважина*), $\phi_v V_v$ – нормализованный поровый объём, P^{stat} – стационарное давление для $S_w \equiv 1$, $P_v(t_n)$ и $S_v(t_n)$ – текущие значения, $\tau_n = n/N_T$ – безразмерное время. Все скалярные величины, кроме насыщенности ($S \in [0, 1]$), подвергаются линейной min-max нормализации. Таким образом матрица признаков имеет вид $\mathbf{X}_n \in \mathbb{R}^{N \times 8}$.

В качестве целевой переменной используется разность давлений $\Delta \mathbf{P}_n = \mathbf{P}_{n+1} - \mathbf{P}_n \in \mathbb{R}^{N_c}$, поскольку именно эта величина, а не абсолютное давление, обладает более узким динамическим диапазоном и, согласно [\[2\]](#), способствует устойчивому многошаговому прогнозированию обученной сети. По аналогии с описанной схемой был сформирован и обучающий набор данных для модели прогнозирования приращения водонасыщенности. Использовались те же графовые структуры $\mathcal{G}$ и те же матрицы признаков $\mathbf{X}_n$, содержащие насыщенность $S_v(t_n)$ как один из входов. Отличие заключалось в целевой переменной: вместо приращения давления модель обучалась при-

ближать величину

$$\Delta \mathbf{S}_n = \mathbf{S}_{n+1} - \mathbf{S}_n \in \mathbb{R}^{N_c},$$

представляющую изменение водонасыщенности на очередном временном шаге. Независимое обучение позволило сохранить специфику каждой из задач, при этом обеспечив единообразие формата входных данных.

3.2.3 Формирование тренировочной выборки

Для генерации разнообразных гидродинамических сценариев создано 50 уникальных *пар* скважин ($\mathbf{x}^{\text{inj}}$, $\mathbf{x}^{\text{prod}}$). Координаты каждой пары выбираются случайно по следующему правилу.

- Нагнетающая и добывающая скважины располагаются на *разных* сторонах внешнего контура $\partial\Omega$ (лево–право–низ–верх).
- Евклидово расстояние между ними не менее 45 (в единицах координатной сетки симулятора), что исключает «почти симметричные» случаи.
- После отбора точек их координаты фиксируются и сохраняются в файл `well_coords_random.json` для последующего воспроизведения эксперимента.

Из полученного множества 40 конфигураций используются для обучения, а оставшиеся 10 – исключительно для проверки обобщающей способности (*валидационный набор*).

Для каждой конфигурации симулятор проходил $N_T = 600$ шагов ($T = 3$, $\Delta\tau = 500 \Delta t$), что даёт $600 \times 50 = 30\,000$ потенциальных пар (t_n, t_{n+1}) . Однако в выборку попадают лишь те пары, для которых $\Delta \mathbf{P}_n \neq 0$, то есть фронт давления действительно продвинулся. Эта простая эвристика позволяет исключить тривиальные («нулевые») примеры, где отсутствует изменение

давления, и тем самым делает обучающую выборку более сбалансированной по значимым случаям.

Для обучения авторегрессионной схемы используются фрагменты временных рядов длины $K + 1 = 4$ шагов: первые $K = 3$ шагов подаются на вход модели, а следующий, $(K + 1)$ -й, используется в качестве целевого значения для расчёта ошибки прогноза:

$$\{(\mathcal{G}, \mathbf{X}_{n+k})\}_{k=0}^K, \quad (3.34)$$

что соответствует многошаговому прогнозу на $K = 3$ шага. $\Delta \mathbf{P}_{n+k}$, $k = 0, 1, 2$, ненулевые.

Из-за наличия скважин число узлов в графах может незначительно варьироваться ($N = 338$ или 340). Для обеспечения единообразия размерностей все векторы, определённые на графе, приводятся к общей длине $N_{\max} = 340$ путём дополнения нулями. Параметры min–max нормализации определяются единожды на обучающем подмножестве и неизменно применяются к валидационной и тестовой частям.

В результате процедура, описанная в [3.2.3](#), даёт согласованную коллекцию графов $\mathcal{G}$ и матриц признаков $\mathbf{X}_n$ с соответствующими целями $\Delta \mathbf{P}_n$, которая и послужит основанием для обучения и последующего анализа суррогатных моделей для прогнозирования приращения давления и водонасыщенности.

3.2.4 Архитектура графовой нейронной сети для прогнозирования приращения давления

При решении задачи двухфазной фильтрации ключевым этапом является вычисление поля давления. Предлагается заменить численный симулятор на суррогатную модель $\mathcal{F}_\theta$, аппроксимирующую приращение давления

между последовательными временными шагами:

$$\Delta p_n^{\text{pred}} := \mathcal{F}_\theta(\mathcal{G}, X_n), \quad \Delta p_n := p_{n+1} - p_n, \quad (3.35)$$

где $\mathcal{G} = (V, E, T)$ – граф, полученный из расчетной сетки, а $X_n \in \mathbb{R}^{N \times d_{\text{in}}}$ – матрица признаков на текущем шаге времени.

Выбранная архитектура основана на парадигме распространения сообщений между узлами графа [24]. Впоследствии по аналогичному принципу была реализована вторая модель, предназначенная для прогнозирования приращения водонасыщенности ΔS_w . Обе модели – для давления и насыщенности – были обучены независимо друг от друга, но используют единую архитектурную основу, что обеспечивает согласованность предсказаний при совместном использовании. В последующих подразделах подробно описана структура модели, состоящая из фаз кодирования, итеративной обработки и декодирования, а также обсуждаются гиперпараметры, эвристики и связь с аналогичными подходами из литературы.

3.2.5 Блок кодирования–обработки–декодирования

Модель прогнозирования приращения давления имеет трёхчленную структуру

$$\underbrace{(\mathcal{G}, X_n)}_{\text{вход}} \xrightarrow{\phi_e, \phi_v} \underbrace{(E^{(0)}, H^{(0)})}_{\text{скрытый размер } d} \xrightarrow{\Psi} \underbrace{H^{(L)}}_{\text{обработанные признаки}} \xrightarrow{\phi_d} \Delta \hat{p}_n,$$

где $X_n \equiv [\mathbf{x}_1 | \dots | \mathbf{x}_N]^\top \in \mathbb{R}^{N \times d_{\text{in}}}$ – матрица исходных признаков узлов, $E^{(0)} \in \mathbb{R}^{|E| \times d}$, $H^{(0)} \in \mathbb{R}^{N \times d}$ – их d -мерные кодировки, а Ψ – стек из L слоёв обмена сообщениями. Далее каждый компонент рассматривается подробно.

3.2.6 Кодировщик вершин

Вектор признаков ячейки $\mathbf{x}_i = (e_i^\top, \varphi_i, V_i, p_i^*, p_{n,i}, S_{w,n,i}, t_n)^\top \in \mathbb{R}^{d_{\text{in}}}$, $d_{\text{in}} = 8$ поступает в двухслойный персептрон [25; 26]

$$\phi_v: \mathbb{R}^{d_{\text{in}}} \longrightarrow \mathbb{R}^d, \quad d = 64 : \quad (3.36)$$

$$H_i^{(0)} := \mathbf{h}_i^{(0)} = \sigma(W_2^v \sigma(W_1^v \mathbf{x}_i + b_1^v) + b_2^v), \quad (3.37)$$

где W_k^v, b_k^v – параметры, активация задаётся функцией [27; 28]

$$\sigma(x) = \max(0, x), \quad (3.38)$$

Решение с двумя нелинейными слоями позволяет избирательно усиливать информативные компоненты $(p_{n,i}, S_{w,n,i})$ и подавлять шум. До подачи в многослойный полносвязный персептрон каждый скаляр масштабируется на отрезок $[0, 1]$ по min–max нормализации, причём параметры шкалы фиксируются на обучающей части.

3.2.7 Кодировщик рёбер

Для ребра $(i, j) \in E$ имеется единственный скаляр T_{ij} (либо индекс продуктивности W_i , когда j – узел, соответствующий скважине), поэтому

$$E_{ij}^{(0)} := \mathbf{e}_{ij}^{(0)} = \phi_e(T_{ij}) \in \mathbb{R}^d, \quad (3.39)$$

где $\phi_e = \text{MLP}_{1 \rightarrow 64 \rightarrow 64}$ совпадает по глубине с ϕ_v . Отдельная ветка $\phi_w: \mathbb{R} \rightarrow (0, 1)$ порождает аддитивный вес

$$w_{ij} := \sigma(\phi_w(T_{ij})) \in (0, 1), \quad (3.40)$$

который модулирует величину сообщения; аналогичный подход положительно зарекомендовал себя в [29].

Описанный блок $\mathcal{M}^{(\ell)}: (H^{(\ell)}, E^{(\ell)}) \mapsto H^{(\ell+1)}$ повторяется $L = 4$ раз.

Этап 1: формирование сообщений. Для каждой пары вершин $(i, j) \in E$ составляется вектор

$$\mathbf{z}_{ij}^{(\ell)} = [\mathbf{h}_i^{(\ell)}, \mathbf{h}_j^{(\ell)}, \mathbf{e}_{ij}^{(\ell)}] \in \mathbb{R}^{3d},$$

который пропускается через $\psi_m^{(\ell)} = \text{MLP}_{3d \rightarrow d \rightarrow d}$:

$$\mathbf{m}_{ij}^{(\ell)} = w_{ij} \psi_m^{(\ell)}(\mathbf{z}_{ij}^{(\ell)}). \quad (3.41)$$

Масштабирование сообщений с помощью весов w_{ij} позволяет адаптивно подавлять вклад рёбер с низкой трансмиссивностью ($T_{ij} \ll 1$), что способствует уменьшению дисперсии градиентов в процессе обратного распространения ошибки и тем самым стабилизирует обучение.

Этап 2: агрегация. Собираем вклад соседей по среднему значению

$$\tilde{\mathbf{h}}_i^{(\ell)} = \frac{1}{|\mathcal{N}(i)|} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \mathbf{m}_{ij}^{(\ell)}. \quad (3.42)$$

Этап 3: обновление. Конкатенация $[\mathbf{h}_i^{(\ell)}, \tilde{\mathbf{h}}_i^{(\ell)}] \in \mathbb{R}^{2d}$ обрабатывается $\text{MLP } \psi_u^{(\ell)}: \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^d$, после чего добавляется к исходному $\mathbf{h}_i^{(\ell)}$ с обучаемым

коэффициентом α_ℓ :

$$\mathbf{h}_i^{(\ell+1)} = \text{LN}\left(\mathbf{h}_i^{(\ell)} + \alpha_\ell \psi_{\mathbf{u}}^{(\ell)}[\mathbf{h}_i^{(\ell)}, \tilde{\mathbf{h}}_i^{(\ell)}]\right). \quad (3.43)$$

Введённый гибридный остаточный ход со скалярной α_ℓ следует рекомендациям [30] и облегчает сходимость при глубине $L > 3$. Нормализация слоя сохраняет статистическую стабильность между блоками.

3.2.8 Декодер и явное обновление состояния

Декодер $\phi_d = \text{MLP}_{d \rightarrow \frac{d}{2} \rightarrow 1}$ вычисляет $\hat{\delta p}_i := \phi_d(\mathbf{h}_i^{(L)})$. Это приближение можно интерпретировать как явную эволюционную схему для давления, где роль оператора обновления играет обученная модель $\mathcal{F}_\theta$.

$$\hat{p}_{n+1,i} = p_{n,i} + \hat{\delta p}_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.44)$$

что принципиально упрощает многошаговую схему по сравнению с неявными рекуррентными схемами. Таким образом, модель прогнозирования приращения давления не генерирует непосредственно p_{n+1} , а лишь корректирует известное p_n , что уменьшает накопление ошибок при длительном моделировании.

3.2.9 Выбор гиперпараметров

- $d = 64$ – минимальное значение, при котором тестовая ошибка перестаёт уменьшаться;
- $L = 4$ – подобрано эмпирически с учётом конкретной геометрии задачи и не является универсальным: для более плотных или разреженных сеток оптимальное число слоёв может отличаться;
- функцией агрегации выбрана mean . Выбор усреднения обусловлен эм-

пирическим анализом: в процессе отладки рассматривались различные схемы агрегации, включая `sum`, `max` и их комбинации, однако именно `mean` показала наилучшую устойчивость и качество предсказаний на обучающей выборке. Тем не менее, нельзя исключать, что специально сконструированная агрегация (например, адаптивная, с обучаемыми весами) может дать прирост точности, особенно при переносе модели на геометрически отличные сетки или иные физические режимы, чтобы сохранить масштаб инвариантным при изменении степени узла;

- активация `ReLU` показала более быструю сходимость, чем `tanh` или `ELU`, хотя конечная точность не менялась;

- для стабилизации обучения и уменьшения разброса градиентов при использовании малых наборов данных ($B = 1$), нормализация по набору выполняется до нелинейной активации в каждом слое многослойного перцептрона. Такой порядок, хотя и не является обычным в большинстве фреймворков, на практике демонстрирует более стабильное распространение градиента по слоям, что положительно сказывается на сходимости процедуры оптимизации параметров модели при обучении на цепочках единичного размера.

3.2.10 Прикладной вывод

Разработанная архитектура обладает прикладной универсальностью в пределах рассматриваемого класса задач. При сохранении общей структуры графа и механизма передачи сообщений, ту же модель можно адаптировать для прогноза других величин, имеющих аналогичную динамику. В частности, после соответствующей подготовки признаков и обучающей выборки, модель прогнозирования приращения давления была переобучена для моделирования приращения водонасыщенности. Хотя архитектура оказалась применимой и к задаче насыщенности, необходимо отметить, что для дости-

Таблица 3.1 – Гиперпараметры, используемые для обучения графовых нейросетей при прогнозе приращения давления и насыщенности воды

Гиперпараметр	Значение
1. число скрытых слоёв	2 (MLP до/после GNN)
2. размер скрытого слоя	64
3. число слоёв передачи сообщений	4
4. тип передачи сообщений	агрегация соседей
5. функция агрегации	mean
6. размерность входного признака	8
7. функция активации	ReLU
8. batch-нормализация	да (до активации)
9. размер батча	1
10. оптимизатор	Adam
11. скорость обучения	10^{-3}
12. patience ранней остановки	5 эпох
13. порог ранней остановки	10^{-12}
14. количество эпох обучения	200
15. длина rollout при обучении	3
16. размер обучающей выборки	24000 обучающих пар
17. нормализация	min-max

жения более высокой точности, вероятно, следовало бы разработать специализированную архитектуру, учитывающую уникальные особенности поведения насыщенности. Однако в рамках настоящей работы было принято решение использовать ту же модель, что и для давления, что позволило обеспечить сопоставимость подходов и упростить процесс переноса архитектурных решений.

3.2.11 Критерий оптимизации и функция потерь

Постановка задачи оптимизации. Сеть $\mathcal{F}_\vartheta$ обучается методом обучения с учителем. Имеется набор из M конфигураций пар «нагнетатель–добыча», для каждой из которых известен временной ряд давления $\{p_{m,n}\}_{n=0}^{N_T}$, где

n – номер шага моделирования с шагом $\Delta\tau = 500 \Delta t$. Цель состоит в том, чтобы найти параметры сети ϑ , минимизирующие среднюю ошибку прогноза приращения давления $\mathbf{y}_{m,n} = p_{m,n+1} - p_{m,n}$ на заданном горизонте предсказания длиной $K = 3$:

$$\min_{\vartheta} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \frac{1}{N_T - K} \sum_{n=0}^{N_T-K-1} \mathcal{L}(\hat{\mathbf{y}}_{m,n}(\vartheta), \mathbf{y}_{m,n}), \quad \hat{\mathbf{y}}_{m,n} = \mathcal{F}_{\vartheta}(\mathcal{G}, \mathbf{X}_{m,n}). \quad (3.45)$$

Мотивация выбора функции потерь. В рамках текущего исследования были подробно изучены существующие подходы к выбору функций потерь для задач моделирования физики с помощью графовых нейронных сетей. В литературе представлены различные подходы: от простых точечных ошибок (например, среднеквадратичная ошибка MSE и средняя абсолютная ошибка MAE) до более сложных функционалов, штрафующих несогласованности в градиентах и производных [31–33]. Некоторые из этих подходов были протестированы на текущем наборе данных, однако из-за специфики нашей задачи, состоящей в моделировании потоков на единственной геометрии сетки с фиксированными полями проницаемости и пористости, многие общие решения оказались неэффективны.

Экспериментальные исследования показали, что чистая MSE хорошо работает как базовая метрика точности, однако имеет существенные недостатки: во-первых, она не чувствительна к масштабным сдвигам в результатах (визуально корректные, но количественно неверные результаты), во-вторых, не штрафует локальные всплески давления, которые явно противоречат физике.

Для задачи прогнозирования насыщенности была выбрана комбинация MSE и MAE. Это решение обусловлено тем, что в отличие от распределения давления, которое характеризуется плавными переходами от высоких к низким значениям в окрестностях скважин, распределение насыщенности от-

личается наличием частых и резких скачков значений. Штрафовать модель насыщенности исключительно с помощью MSE, аналогично задаче прогнозирования давления, было бы некорректно. Поэтому для прогнозирования насыщенности принята комбинация MSE и MAE, позволяющая сохранить точность значений в отдельных ячейках (благодаря MSE) и учесть масштаб ошибок и резкие изменения (благодаря MAE):

$$\mathcal{L}_{\text{saturation}} = \frac{1}{|V_{\text{vm}}|} \sum_{i \in V_{\text{vm}}} [(\hat{y}_i - y_i)^2 + |\hat{y}_i - y_i|], \quad (3.46)$$

где V_{vm} – множество ячеек с валидными значениями.

Составляющие функции потерь и их роль. Для решения указанных проблем была разработана комбинированная функция потерь, включающая три компоненты: среднеквадратичную ошибку MSE, штраф за несогласованность градиентов, масштабированный трансмиссивностью, и регуляризацию по лапласиану:

- Точечная ошибка (MSE):

$$\mathcal{L}_{\text{data}} = \frac{1}{|V_{\text{mat}}|} \sum_{i \in V_{\text{mat}}} (\hat{y}_i - y_i)^2. \quad (3.47)$$

Эта часть функции потерь отвечает за общую точность предсказаний. Без неё модель не будет стремиться минимизировать разницу между предсказанием и эталоном.

- Градиентный штраф:

$$\mathcal{L}_{\text{grad}} = \frac{1}{|E_{\text{mat}}|} \sum_{(i,j) \in E_{\text{mat}}} T_{ij}^2 [(\hat{y}_i - \hat{y}_j) - (y_i - y_j)]^2. \quad (3.48)$$

Эта компонента введена для борьбы с локальными физически не реалистичными всплесками давления, наблюдавшимися при использовании MSE.

Штраф пропорционален квадрату трансмиссивности, что позволяет эффективно ограничивать градиенты в областях с высокой проводимостью между ячейками.

- Регуляризация по Лапласиану:

$$\mathcal{L}_{Lap} = \frac{1}{|E_{mat}|} \sum_{(i,j) \in E_{mat}} (\hat{y}_i - \hat{y}_j)^2. \quad (3.49)$$

Эта часть дополнительно подавляет локальные аномалии, сглаживая излишне резкие перепады предсказанного поля давления. Без неё возможны небольшие, но явно физически некорректные всплески.

Таким образом, итоговая функция потерь на K шагов имеет вид:

$$\mathcal{L} = \sum_{k=0}^{K-1} \left(\mathcal{L}_{grad}^{(k)} + 0.20 \mathcal{L}_{data}^{(k)} + 0.05 \mathcal{L}_{Lap}^{(k)} \right). \quad (3.50)$$

Выбор весовых коэффициентов. Коэффициенты при составляющих функции потерь были подобраны экспериментально:

- Вес 0.20 при MSE выбран так, чтобы её вклад был сопоставим с градиентным штрафом. Меньшие веса приводили к чрезмерному влиянию градиентного штрафа и ухудшали глобальную точность.

- Коэффициент 0.05 при лапласиановой регуляризации был определён как минимальный, при котором визуально исчезали аномальные пики, без существенного ухудшения точности и замедления сходимости. При значениях выше 0.1 наблюдалось нежелательное чрезмерное сглаживание.

Область применимости функции потерь. Важно отметить, что разработанная функция потерь и параметры были специально подобраны для текущей геометрии сетки и специфического набора физических данных (SPE10-подобные поля). Для других геометрий или задач (например, модели про-

гнозирования водонасыщенности) такой подход может быть не оптимален. Для задачи прогнозирования насыщенности планируется использовать другие схемы с включением MAE-компоненты.

3.2.12 Стратегия обучения модели

Для эффективного обучения графовой нейронной сети была использована многошаговая схема прогнозирования. В рамках этой схемы модель обучается последовательно предсказывать приращения давления на нескольких временных шагах, причём каждое следующее предсказание основывается на предыдущем результате самой сети. Такой подход позволяет минимизировать накопление ошибок на длительном горизонте прогнозирования.

Формально, имея последовательность графов $\{\mathcal{G}_n\}_{n=0}^{N_T}$, соответствующих шагам моделирования с шагом по времени $\Delta\tau = 500 \Delta t$, обучение сети $\mathcal{F}_\vartheta$ проводится по следующей схеме. Пусть текущий граф с состоянием давления на шаге n обозначен как $\mathcal{G}_n$, при этом задача сети – предсказать приращение давления $\Delta\mathbf{P}_n$ так, чтобы:

$$\hat{\mathbf{P}}_{n+1} = \mathbf{P}_n + \mathcal{F}_\vartheta(\mathcal{G}_n). \quad (3.51)$$

Этот шаг повторяется рекурсивно для горизонта прогнозирования длиной $K = 3$, получая:

$$\hat{\mathbf{P}}_{n+k} = \hat{\mathbf{P}}_{n+k-1} + \mathcal{F}_\vartheta(\hat{\mathcal{G}}_{n+k-1}), \quad k = 1, \dots, K, \quad (3.52)$$

где граф $\hat{\mathcal{G}}_{n+k-1}$ формируется на основе предыдущего прогноза сети $\hat{\mathbf{P}}_{n+k-1}$, обновляя значения давления в признаках узлов графа.

В ходе обучения на каждом шаге развёртки вычисляется частичная функция потерь $\mathcal{L}^{(k)}$, отражающая соответствие прогноза и истинных данных на текущем шаге. Итоговая функция потерь $\mathcal{L}$ является суммой ошибок

на всех шагах горизонта:

$$\mathcal{L} = \sum_{k=1}^K \mathcal{L}^{(k)}(\hat{\mathbf{P}}_{n+k}, \mathbf{P}_{n+k}). \quad (3.53)$$

Обучение сети $\mathcal{F}_\vartheta$ проводится с использованием стохастического градиентного спуска с оптимизатором Adam. На каждой эпохе обучения для каждой конфигурации скважин формируется цепочка графов из последовательных шагов моделирования, по которым проводится многошаговая развёртка. Градиенты вычисляются по суммарной ошибке всех шагов горизонта развёртки, после чего параметры сети обновляются одним шагом оптимизатора:

$$\vartheta \leftarrow \vartheta - \eta \nabla_{\vartheta} \mathcal{L}, \quad (3.54)$$

где η – скорость обучения.

Важным аспектом используемой стратегии оптимизации параметров является контроль динамики шага обучения в процессе градиентного спуска. Для этого применяется так называемое *расписание скорости обучения*, автоматически уменьшающее величину шага обучения по мере продвижения оптимизации.

Суть данного метода заключается в постепенном уменьшении шага обучения по мере приближения параметров модели к локальному минимуму функции потерь. Это позволяет снизить риск «перешагивания» через оптимум и обеспечить более плавную и стабильную сходимость параметров. В будущих исследованиях планируется интегрировать подобные методы (например, циклические или экспоненциальные расписания скорости обучения) для возможного улучшения производительности и повышения обобщающей способности модели на более сложных наборах данных.

Важной особенностью схемы обучения является использование стратегии ранней остановки. Обучение прекращается, если на протяжении пяти эпох подряд улучшение значения функции потерь становится меньше заданного порога 10^{-12} . Такой подход предотвращает переобучение и обеспечивает устойчивость решения задачи оптимизации параметров модели.

После завершения обучения проводится валидация на тестовых конфигурациях с аналогичной многошаговой процедурой прогнозирования. Это позволяет убедиться в том, что модель корректно обобщает закономерности, заложенные в обучающих данных, и способна качественно воспроизводить физически обоснованные решения на продолжительном горизонте прогнозирования.

3.2.13 Прогнозирование и оценка качества модели

После завершения обучения модели $\mathcal{F}_\vartheta$ осуществляется её валидация и последующее тестирование на независимых наборах данных. Процедура прогнозирования проводится по двум сценариям: одностадийный прогноз (один шаг вперёд) и многошаговое развёртывание модели, аналогичное работе численного симулятора на длительном горизонте времени (до 600 временных шагов).

Процедура одностадийного и многошагового прогнозирования. При запуске модель работает в режиме последовательного прогнозирования давления на каждом следующем шаге по формуле:

$$\hat{\mathbf{P}}_{t+1} = \mathbf{P}_t + \mathcal{F}_\vartheta(\mathcal{G}_t), \quad (3.55)$$

где $\mathbf{P}_t$ – давление, заданное на текущем шаге времени t , а $\mathcal{F}_\vartheta(\mathcal{G}_t)$ – прогнозируемое приращение давления на основании графовой структуры $\mathcal{G}_t$.

При одностадийном прогнозе модельное давление $\hat{\mathbf{P}}_{t+1}$ непосредствен-

но сравнивалось с истинным давлением, полученным из симулятора. При многошаговом прогоне аналогичная схема применялась рекурсивно, формируя серию прогнозов:

$$\hat{\mathbf{P}}_{t+k} = \hat{\mathbf{P}}_{t+k-1} + \mathcal{F}_{\vartheta}(\hat{\mathcal{G}}_{t+k-1}), \quad k = 1, \dots, 600, \quad (3.56)$$

что позволяет оценить накопленную модельную ошибку и способность сети к длительному стабильному прогнозированию.

Дополнительно на каждом шаге производилось прямое сравнение прогнозируемых приращений давления $\Delta \mathbf{P}_{\text{pred}}$ с истинными значениями приращений из симулятора $\Delta \mathbf{P}_{\text{sim}}$.

Аналогичная процедура анализа была выполнена и для модели графовой нейросети, прогнозирующей приращения насыщенности воды $\Delta \mathbf{S}_{w,\text{pred}}$, которые также сопоставлялись с истинными значениями насыщенности, полученными из симулятора $\Delta \mathbf{S}_{w,\text{sim}}$.

Калибровка результатов модели. В процессе применения модели были выявлены систематические расхождения шкал модельных и симуляторных полей давления. Визуально поля имели схожие структуры, однако наблюдался систематический сдвиг масштабов. Чтобы устранить это расхождение без переобучения модели, была применена процедура пост-калибровки с использованием линейной регрессии:

$$\mathbf{P}_{\text{corr}} = \alpha \cdot \mathbf{P}_{\text{pred}} + \beta, \quad (\alpha, \beta) = \underset{a,b}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{P}_{\text{sim}} - a\mathbf{P}_{\text{pred}} - b\|_2^2. \quad (3.57)$$

Такая калибровка, проведённая на всех валидационных примерах, оказалась исключительно эффективной и вычислительно дешёвой. Более того, она была признана корректной, поскольку позволяла добиться практически идеального соответствия между модельными и симуляторными полями дав-

ления без необходимости дополнительной настройки модели или изменения схемы нормализации данных.

Метрики качества прогнозов. Количественная оценка точности прогнозов выполнялась на основе стандартных регрессионных метрик:

- Среднеквадратичная ошибка (MSE):

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2. \quad (3.58)$$

- Среднеквадратичное отклонение (RMSE):

$$\text{RMSE} = \sqrt{\text{MSE}}. \quad (3.59)$$

- Средняя абсолютная ошибка (MAE):

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i|. \quad (3.60)$$

- Коэффициент детерминации (R^2):

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}, \quad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i. \quad (3.61)$$

Несмотря на использование комплексного набора регрессионных метрик, опыт показал, что ни одна из них не является полностью универсальной для оценки качества прогнозов в рассматриваемой задаче. Так, например, хорошее значение MSE не всегда свидетельствовало о точном совпадении полей давлений. Наиболее информативным предварительно оказался коэффициент детерминации R^2 : в большинстве случаев его высокие значения коррелировали с визуально качественными прогнозами, однако при умеренных

значениях ($R^2 \approx 0.6$) наблюдались явные расхождения в пространственной структуре полей давлений. Это подчеркивает необходимость обязательного визуального анализа прогнозов, помимо чисто регрессионных метрик, для адекватной оценки качества работы модели.

Результаты количественного и качественного анализа прогнозов, включая сравнения приращений ΔP_{pred} и ΔP_{sim} , подробно приведены и обсуждены в следующем разделе.

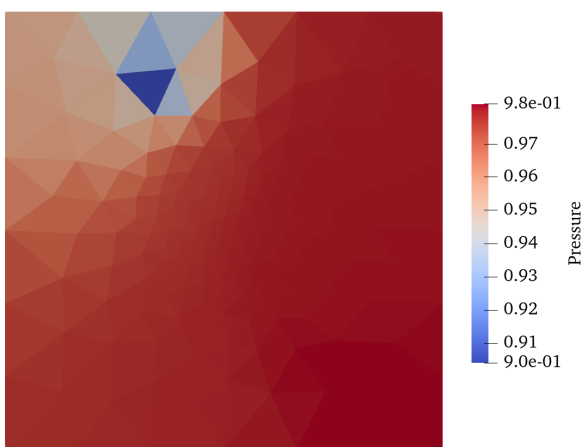
3.2.14 Результаты для модели прогнозирования приращений давления

На рисунках 3.5, 3.6 и 3.7 представлены результаты одномоментного прогноза давления нейросетевой моделью на один временной шаг вперёд. Во всех трёх примерах визуально предсказанное распределение практически полностью совпадает с симуляторным решением, что также подтверждается количественными метриками, приведёнными в таблице 3.2.

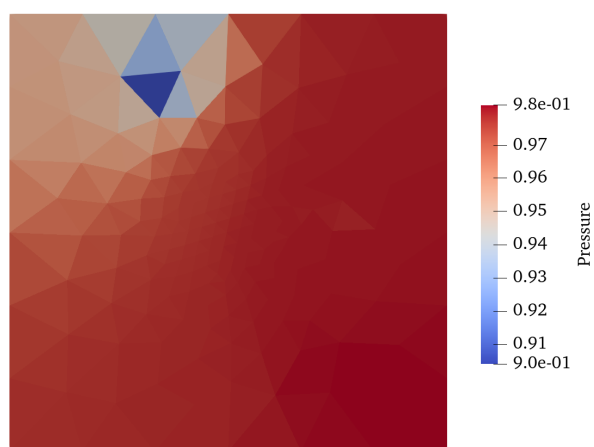
Таблица 3.2 – Метрики качества модели прогнозирования давления на один шаг вперёд

Пример	RMSE	MAE	MSE	R^2
рисунок 3.5	$9.67 \cdot 10^{-5}$	$3.21 \cdot 10^{-5}$	$9.36 \cdot 10^{-9}$	0.99987
рисунок 3.6	$6.08 \cdot 10^{-5}$	$1.97 \cdot 10^{-5}$	$3.69 \cdot 10^{-9}$	0.99980
рисунок 3.7	$5.99 \cdot 10^{-5}$	$2.39 \cdot 10^{-5}$	$3.59 \cdot 10^{-9}$	0.99987

Таким образом, можно заключить, что модель демонстрирует высокую точность при краткосрочном прогнозировании давления, практически полностью воспроизводя данные, полученные при помощи симулятора как по численным метрикам, так и визуально.

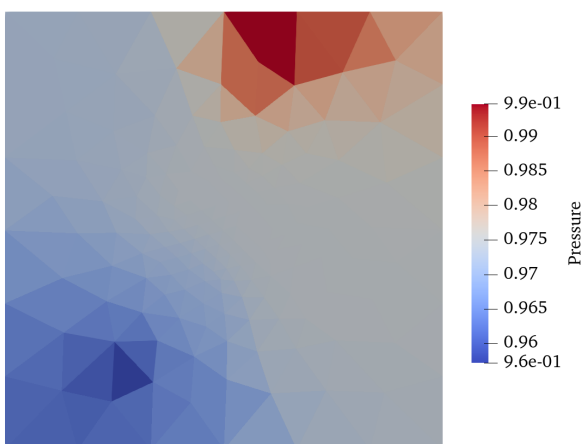


(a) Результат симулятора

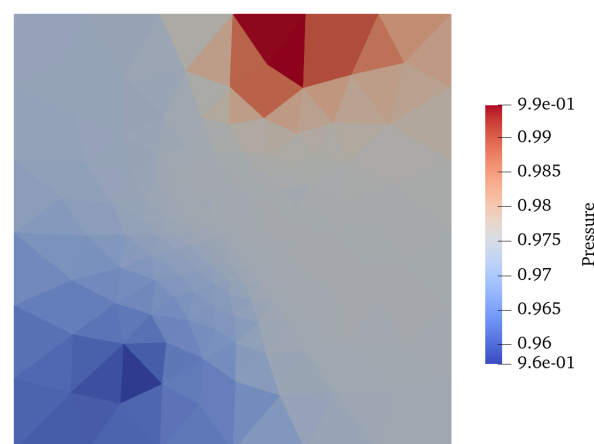


(b) Результат модели

Рисунок 3.5 – Сравнение результата предсказания поля давления на следующий временной шаг. (Пример 1)



(a) Результат симулятора



(b) Результат модели

Рисунок 3.6 – Сравнение результата предсказания поля давления на следующий временной шаг. (Пример 2)

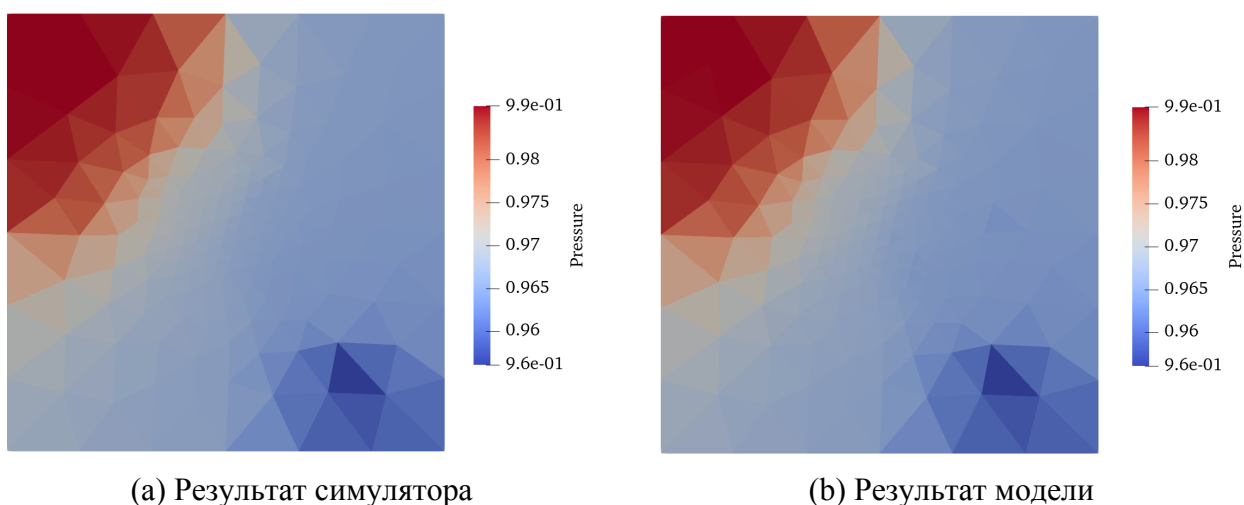


Рисунок 3.7 – Сравнение результата предсказания поля давления на следующий временной шаг. (Пример 3)

На рисунке 3.8 сравниваются три распределения приращения давления ΔP : симуляторное решение, прогноз модели и откалиброванный прогноз. В процессе анализа было замечено, что несмотря на визуальную схожесть распределений, предсказанные моделью значения отличаются от истинных на порядок по шкале. Особенно это заметно при сравнении изображений 3.8a и 3.8b, где видно, что форма распределения сохраняется, но значения существенно занижены.

После изучения причины было выявлено, что ошибка возникла на этапе подготовки обучающей выборки: при формировании целевой переменной y использовалась разность нормализованного и физического давления, что привело к несоответствию масштабов. Поскольку повторное обучение модели представляло бы значительную вычислительную нагрузку, была применена посткалибровка предсказаний с помощью простой линейной регрессии, как указано в уравнении (3.57). Результат после калибровки представлен на рисунке 3.8c, где наблюдается совпадение не только формы, но и шкалы значений.

Данный подход был протестирован на всём валидационном наборе данных и показал устойчивое поведение: откалиброванная модель адекватно

воспроизводит данные, полученные при помощи симулятора. В дальнейшем, при обучении модели для прогнозирования водонасыщенности, эта ошибка была устранена на этапе подготовки данных, и необходимость в калибровке отпала.

Для наглядности в таблице 3.3 представлены значения метрик модели до и после калибровки.

Таблица 3.3 – Сравнение метрик модели до и после калибровки

Вариант	RMSE	MAE	MSE	R ²
Без калибровки	$4.36 \cdot 10^{-4}$	$1.93 \cdot 10^{-4}$	$1.90 \cdot 10^{-7}$	0.19
После калибровки	$4.66 \cdot 10^{-7}$	$3.77 \cdot 10^{-7}$	$2.18 \cdot 10^{-13}$	0.999

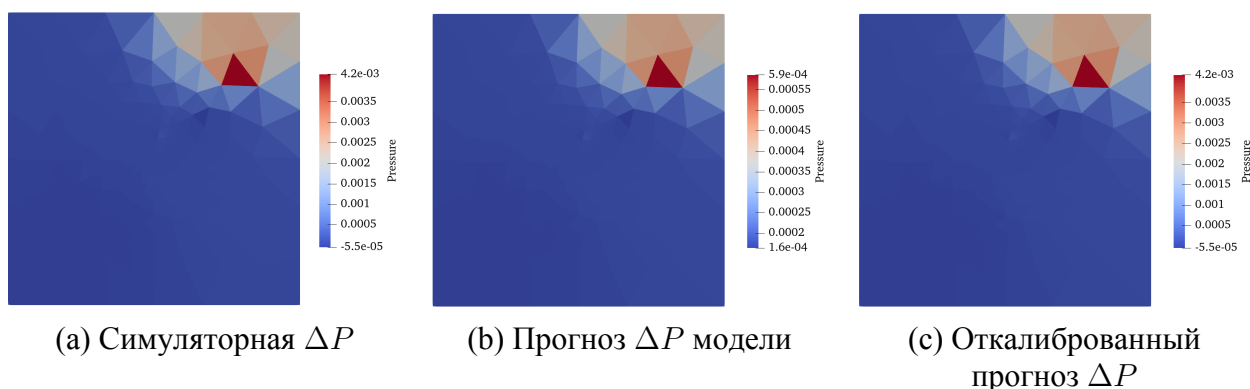


Рисунок 3.8 – Сравнение распределения приращения давления (ΔP) на одном временном шаге: симулятор, исходный прогноз модели и откалиброванный прогноз

На рисунке 3.9 представлено сравнение распределения приращения давления ΔP между симулятором и откалиброванным прогнозом модели. В данном примере, несмотря на общее качественное совпадение пространственного распределения, на этапе применения модели была выявлена аномалия: в одной из ячеек (в нижней центральной части области) наблюдается существенно завышенное значение давления, выходящее за физически обоснованные пределы. При этом численные метрики остаются на высоком

уровне: $RMSE = 1.55 \cdot 10^{-5}$, $MAE = 2.37 \cdot 10^{-6}$, $MSE = 2.39 \cdot 10^{-10}$, $R^2 = 0.9801$. Это указывает на то, что стандартные метрики могут быть нечувствительны к локальным ошибкам, особенно если они возникают в ограниченном числе ячеек.

Подобная особенность представляет значительный интерес с точки зрения оценки надёжности модели: графовая нейросеть может воспроизвести глобальное распределение давления, но при этом допустить физически некорректное поведение в отдельных точках. Это подчёркивает важность как визуального анализа результатов, так и разработки специальных метрик, чувствительных к локальным выбросам.

Аналогичная ситуация наблюдается и на рисунке 3.10, где расхождения между симулятором и предсказанием сосредоточены ближе к центру области. Однако численные характеристики в данном случае указывают на ещё более высокую точность: $RMSE = 9.91 \cdot 10^{-6}$, $MAE = 1.50 \cdot 10^{-6}$, $MSE = 9.81 \cdot 10^{-11}$, $R^2 = 0.997$. Это демонстрирует, что подобные аномалии носят редкий и изолированный характер, однако не могут быть проигнорированы при верификации моделей, ориентированных на физическую интерпретируемость.

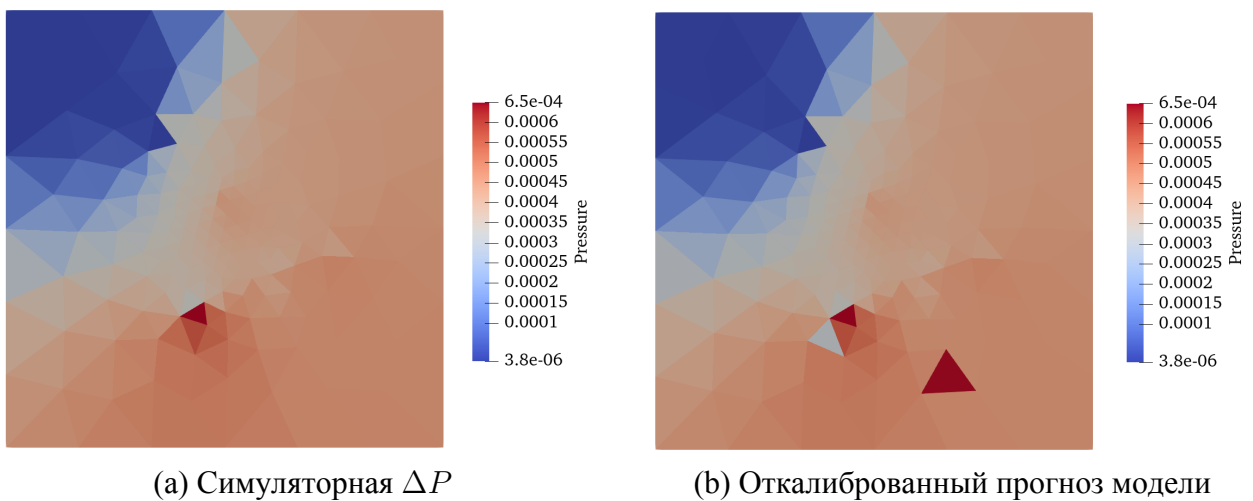


Рисунок 3.9 – Сравнение распределения приращения давления (ΔP) на одном временном шаге: симулятор, и откалиброванный прогноз модели

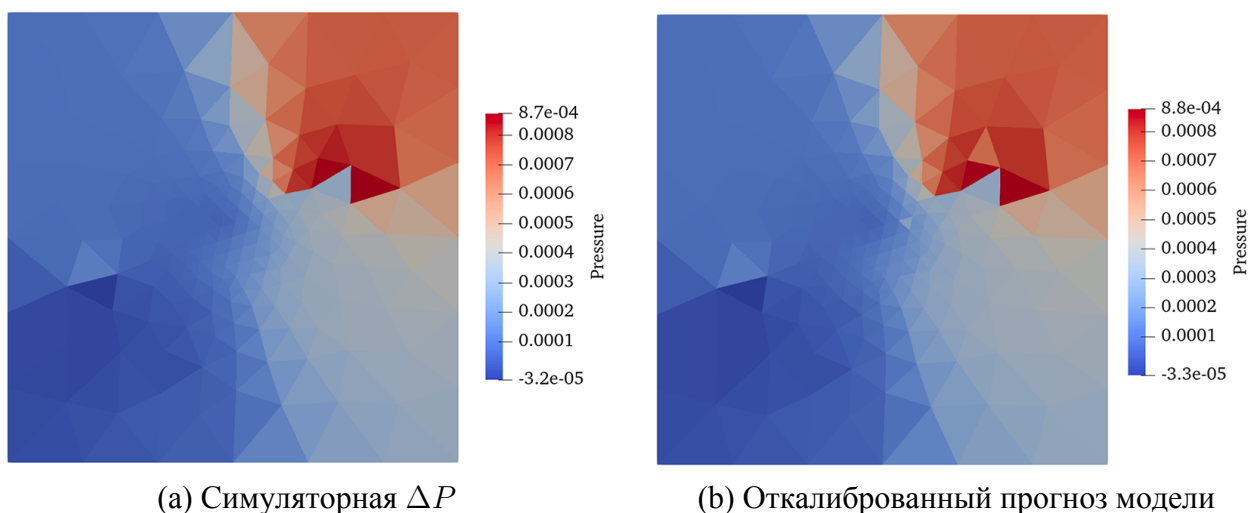


Рисунок 3.10 – Сравнение распределения приращения давления (ΔP) на одном временном шаге: симулятор, и откалиброванный прогноз модели

Наконец, на рисунке [3.11](#) продемонстрирован один из лучших результатов полной прогонки модели прогнозирования приращения давления, в которой прогноз выполняется на всю временную глубину последовательности. Видно, что несмотря на общее качественное совпадение распределения давления между симулятором и моделью, в центральной части области накапливаются незначительные нефизичные отклонения. Эти искажения становятся особенно заметны на последнем временном шаге, где модель предсказывает небольшую, но устойчивую аномалию. При этом метрики ошибки указывают на высокую точность прогноза: $RMSE = 3.05 \cdot 10^{-3}$, $MAE = 1.30 \cdot 10^{-3}$, $MSE = 9.28 \cdot 10^{-6}$, $R^2 = 0.9939$.

Природа появления подобных отклонений требует дополнительного исследования. Учитывая, что глобальное распределение воспроизводится верно, можно предположить, что источник ошибки кроется не в самой архитектуре модели, а в особенностях обучающего набора данных. В частности, вероятно, что в процессе подготовки данных или формирования обучающих последовательностей могли возникнуть локальные несоответствия или перекосы, которые и приводят к накоплению таких аномалий при длительном

прогнозировании.

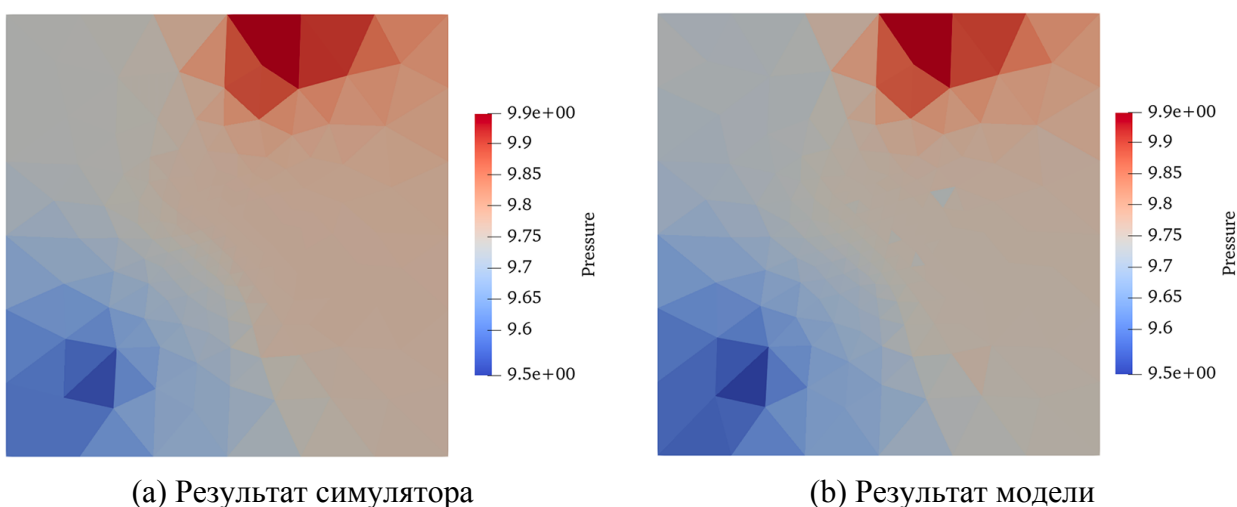


Рисунок 3.11 – Сравнение истинного распределения давления на последнем временном шаге с предсказанным значением, полученным путём пошагового применения нейросетевой модели

3.2.15 Результаты для модели прогнозирования приращений водонасыщенности

На рисунках 3.12 и 3.13 представлены результаты прогноза поля водонасыщенности на один временной шаг вперёд. Модель предсказывает приращение ΔS_w , которое далее прибавляется к текущему значению S_w^t , формируя итоговое распределение $S_w^{t+1} = S_w^t + \Delta S_w$. В обоих случаях визуально наблюдается почти полное совпадение с симулятором, без заметных искажений.

Таблица 3.4 – Метрики качества модели прогнозирования водонасыщенности на один шаг вперёд

Пример	RMSE	MAE	MSE	R ²
рисунок 3.12	$1.13 \cdot 10^{-5}$	$6.16 \cdot 10^{-7}$	$1.28 \cdot 10^{-10}$	0.99997
рисунок 3.13	$1.23 \cdot 10^{-5}$	$3.28 \cdot 10^{-6}$	$1.51 \cdot 10^{-10}$	0.99

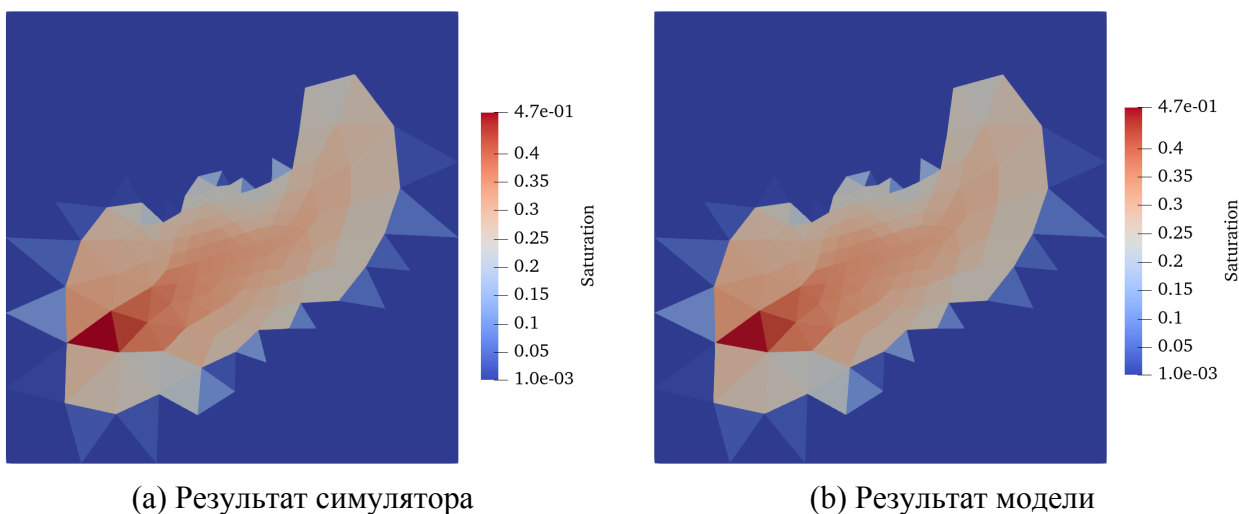


Рисунок 3.12 – Сравнение результата предсказания поля насыщенности воды на следующий временной шаг. (Пример 1)

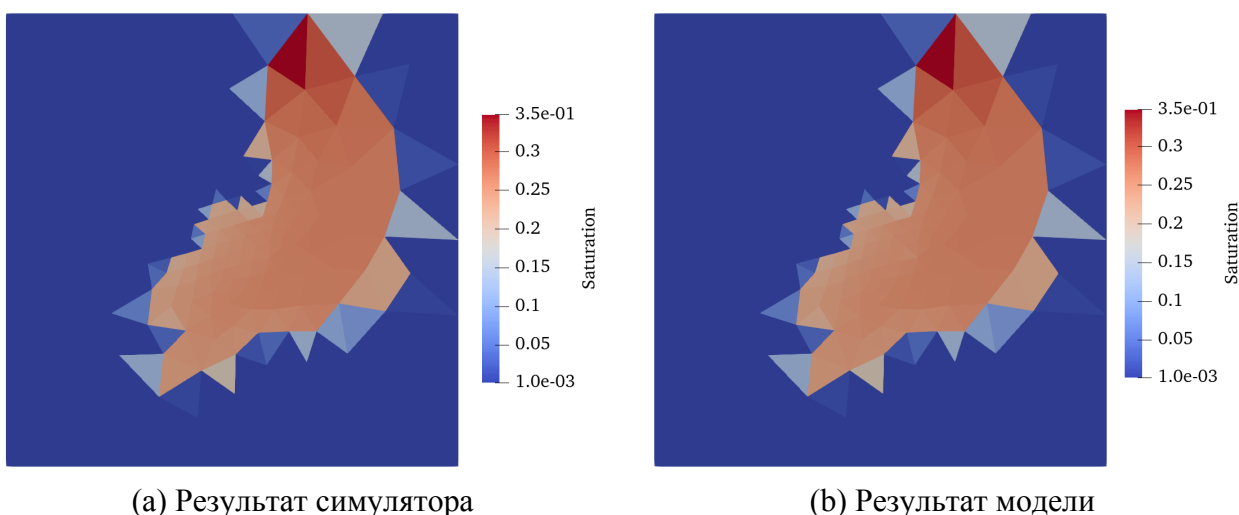


Рисунок 3.13 – Сравнение результата предсказания поля насыщенности воды на следующий временной шаг. (Пример 2)

Несмотря на высокие значения метрик, важно отметить, что приращения водонасыщенности представляют собой величины малых порядков, поэтому даже при наличии незначительной ошибки визуально результат выглядит достоверно. В связи с этим полезно дополнительно проанализировать непосредственно распределения ΔS_w .

На рисунках [3.14](#) и [3.15](#) показано сравнение прогнозируемого и симуляторного распределения приращений. В первом примере достигаются сле-

дующие численные характеристики: $RMSE = 6,7 \cdot 10^{-4}$, $MAE = 4,5 \cdot 10^{-5}$, $MSE = 4,49 \cdot 10^{-7}$, $R^2 = 0,9305$. Для второго случая значения были сопоставимыми: $RMSE = 8,4 \cdot 10^{-4}$, $MAE = 6,1 \cdot 10^{-5}$, $MSE = 7,81 \cdot 10^{-7}$, $R^2 = 0,9221$.

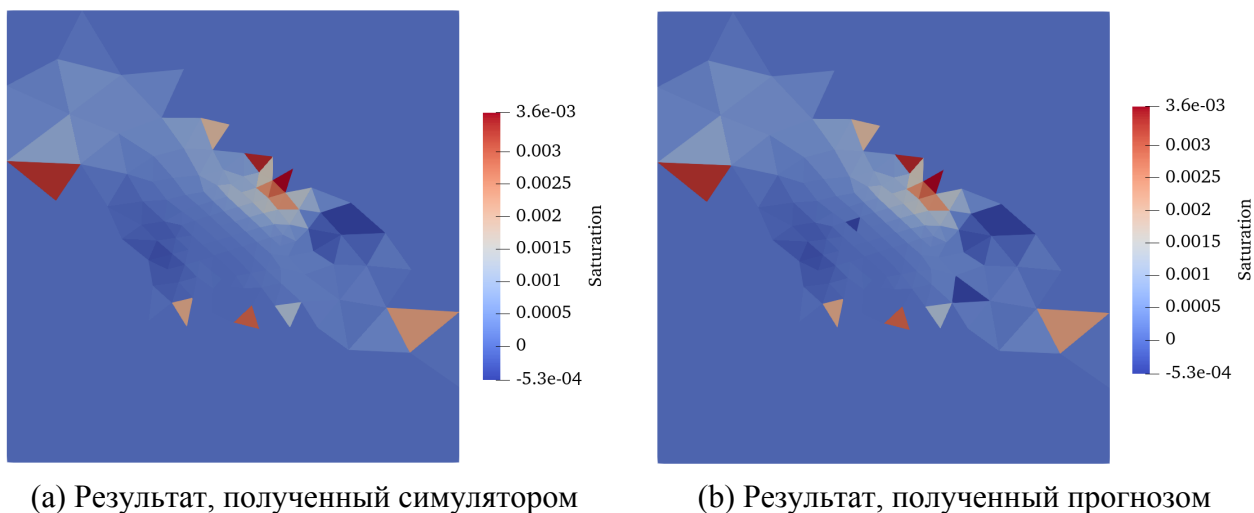


Рисунок 3.14 – Сравнение распределения приращения насыщенности воды (ΔS_w) на одном временном 200500 шаге : симулятор, исходный прогноз

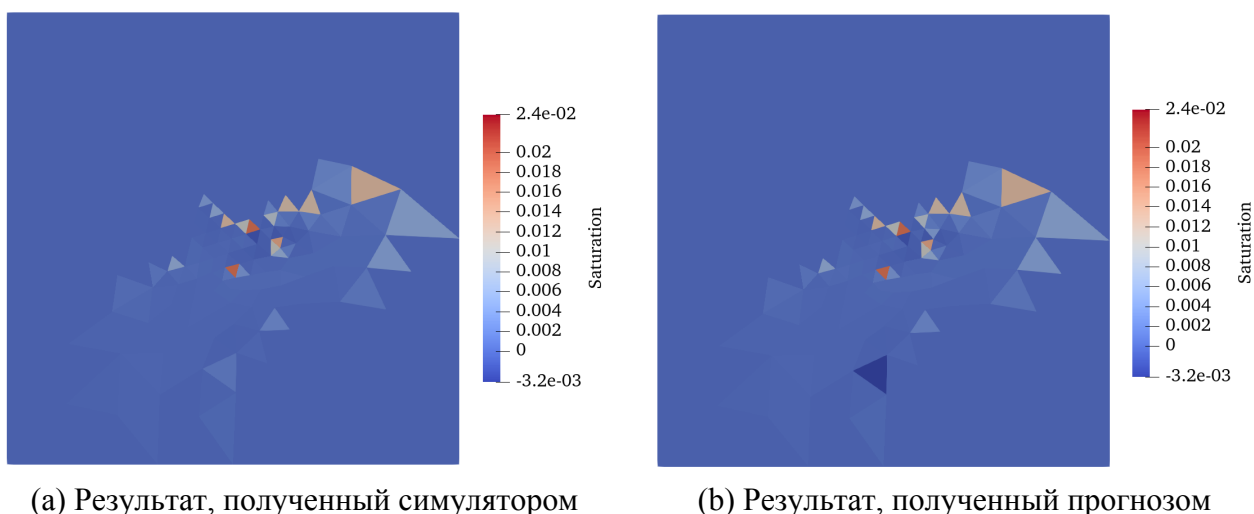


Рисунок 3.15 – Сравнение распределения приращения насыщенности воды (ΔS_w) на одном временном 100500 шаге: симулятор, исходный прогноз

Наконец, на рисунках [3.16](#) и [3.17](#) демонстрируются результаты пошагового применения модели с накоплением приращений на протяжении всей временной последовательности. Сравнение с симуляторным значением на последнем шаге показывает, что ошибки, накапливающиеся от шага к шагу,

приводят к заметным нефизичным искажениям в распределении.

Таблица 3.5 – Метрики качества многошагового прогноза водонасыщенности (последний шаг)

Пример		RMSE	MAE	MSE	R ²
рисунок	3.16	$4.47 \cdot 10^{-3}$	$1.99 \cdot 10^{-3}$	$2.00 \cdot 10^{-5}$	0.99834
рисунок	3.17	$6.00 \cdot 10^{-3}$	$3.23 \cdot 10^{-3}$	$3.60 \cdot 10^{-5}$	0.99774

Таким образом, можно заключить, что модель успешно воспроизводит значения приращений водонасыщенности на ближайший шаг, что подтверждается как визуальным совпадением, так и численными метриками. Однако при многошаговом прогнозировании наблюдаются накопления ошибок, что приводит к искажениям в последующих распределениях и ограничивает применимость модели для задач оптимизации без дополнительной коррекции. Это поведение аналогично наблюдаемому в модели прогнозирования давления (согласно 3.2.14), где также отмечено, что визуальные и количественные совпадения на кратком горизонте не гарантируют устойчивости долгосрочного прогноза.

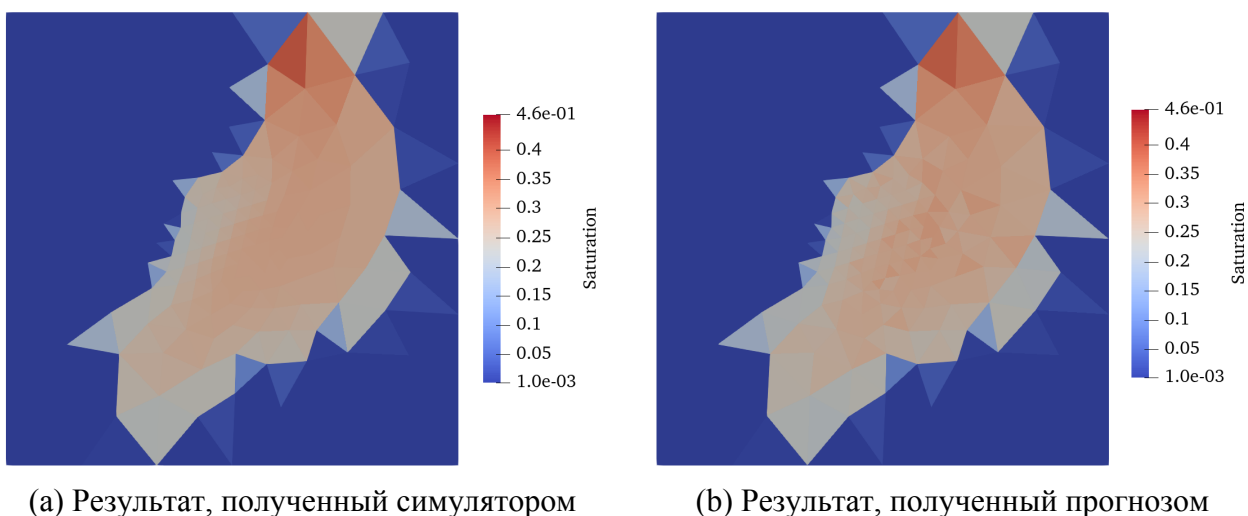
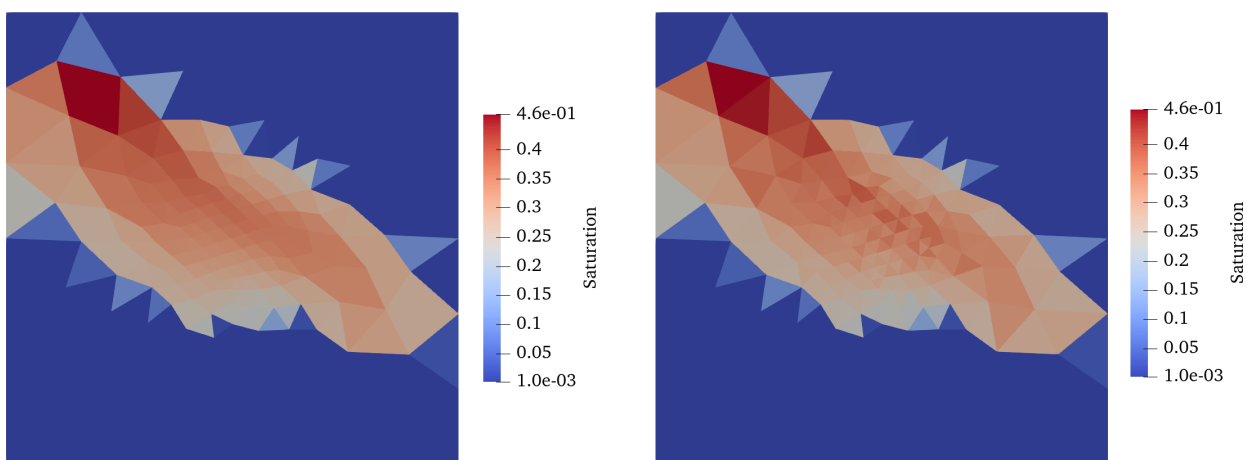


Рисунок 3.16 – Сравнение распределения приращения насыщенности воды (ΔS_w) на последнем временном шаге после проведения многошагового прогноза с помощью графовой нейронной сети. (Пример 1)



(a) Результат, полученный симулятором

(b) Результат, полученный прогнозом

Рисунок 3.17 – Сравнение распределения приращения насыщенности воды (ΔS_w) на последнем временном шаге после проведения многошагового прогноза с помощью графовой нейронной сети. (Пример 2)

Заключение

Настоящее исследование было вдохновлено работой [2], в которой предлагалась архитектура графовой нейронной сети для моделирования фильтрационных процессов в пористых средах. В процессе работы отдельное внимание было уделено воспроизведению полученных в этой статье результатов и проверить эффективность предложенных подходов на собственной реализации. В результате экспериментов удалось подтвердить, что методы, изложенные в референсной работе, позволяют построить модель, способную устойчиво прогнозировать распределение давления как на один временной шаг вперёд, так и на всю временную последовательность.

Несмотря на общее соответствие распределения давления и его физического смысла, в некоторых случаях наблюдались локальные аномалии, проявляющиеся в виде нефизичных значений давления в отдельных ячейках. Однако такие ошибки носят единичный характер и, как правило, не влияют на глобальное поведение модели. Предполагается, что их возникновение связано с техническими особенностями реализации или ограничениями обучающей выборки и может быть устранено в процессе доработки.

В рамках работы также была проведена модификация архитектуры: вместо одного общего кодировщика для всех входных признаков были использованы два отдельных – для признаков узлов и рёбер. Этот приём положительно сказался на устойчивости модели и, по мнению автора, может быть использован в будущих исследованиях в данной области.

Ограничения построенной модели обусловлены спецификой обучающего набора данных. В ходе генерации набора данных для обучения фиксировались начальные и граничные условия, структура графа, геометрия сетки и забойные давления на скважинах. Менялось только расположение самих скважин. В результате, разработанная модель показывает хорошие резуль-

таты в условиях, близких к обучающим, но её способность к обобщению на другие сетки, геометрии и начальные условия остаётся неизученной.

Планируется дальнейшее развитие работы в следующих направлениях: выяснение причин возникновения локальных аномалий в прогнозе; расширение обучающего набора данных за счёт варьирования параметров генерации – геометрии сетки, структуры графа, граничных условий, забойных давлений и начальных распределений; проверка способности модели к обобщению и переносимости на новые задачи. Для этого предполагается использовать разработанный симулятор, адаптированный к генерации разнообразных конфигураций задач фильтрации.

Исходный код реализованных моделей и используемых архитектур доступен в репозитории: <https://github.com/Maksim339/GNN-Surrogate>.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Aziz K., Settari A. Mathematical modelling of reservoir systems. – Izhevsk Institute for Computer Research, 2004.
2. Tang H., Durlofsky L. J. Graph network surrogate model for subsurface flow optimization // Journal of Computational Physics. – 2024. – Vol. 512. – P. 113132.
3. Shi N. и др. Gnn-surrogate: A hierarchical and adaptive graph neural network for parameter space exploration of unstructured-mesh ocean simulations // IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics. – 2022. – Vol. 28, No. 6. – P. 2301–2313.
4. Jiang J., Guo B. Graph convolutional networks for simulating multiphase flow and transport in porous media // arXiv preprint arXiv:2307.04449. – 2023.
5. Terekhov K. M., Vassilevski Y. V. Finite volume method for coupled subsurface flow problems, II: Poroelasticity // Journal of Computational Physics. – 2022. – Vol. 462. – P. 111225.
6. Terekhov K. M., Vassilevski Y. V. Finite volume method for coupled subsurface flow problems, I: Darcy problem // Journal of Computational Physics. – 2019. – Vol. 395. – P. 298–306.
7. Tang M., Ju X., Durlofsky L. J. Deep-learning-based coupled flow-geomechanics surrogate model for CO₂ sequestration // International Journal of Greenhouse Gas Control. – 2022. – Vol. 118. – P. 103692.
8. Zheng F., Jha B., Jafarpour B., Qin Z. A Deep Learning-Based Geomechanical Surrogate Model for Rapid Risk Assessment in Geologic CO₂ Storage // ECMOR 2024. — 2024. — European Association of Geoscientists & Engineers. — C. 1—13.
9. Wu T. и др. Learning large-scale subsurface simulations with a hybrid graph network simulator // Proceedings of the 28th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. — 2022. — C. 4184—4194.

10. Huang H., Gong B., Sun W. A deep-learning-based graph neural network-long-short-term memory model for reservoir simulation and optimization with varying well controls // SPE Journal. — 2023. — Т. 28, № 06. — С. 2898—2916.
11. Kobaisi M. A., Zhang W., Diab W., Hajibeygi H. Learning multi-phase flow and transport in fractured porous media with auto-regressive and recurrent graph neural networks // arXiv preprint arXiv:2502.17512. — 2025.
12. Li J., Liu W., Yu M., Xu W. Reservoir production prediction based on improved graph attention network // IEEE Access. — 2023. — Т. 12. — С. 50044—50056.
13. Illarionov E. и др. End-to-end neural network approach to 3D reservoir simulation and adaptation // Journal of Petroleum Science and Engineering. — 2022. — Т. 208. — С. 109332.
14. Lam R. и др. Learning skillful medium-range global weather forecasting // Science. — 2023. — Т. 382, № 6677. — С. 1416—1421.
15. Zhao Y. и др. A review of graph neural network applications in mechanics-related domains // Artificial Intelligence Review. — 2024. — Т. 57, № 11. — С. 315.
16. Alzahrani M. K., Shapoval A., Chen Z., Rahman S. S. Pore-GNN: A graph neural network-based framework for predicting flow properties of porous media from micro-CT images // Advances in Geo-Energy Research. — 2023. — Т. 10, № 1. — С. 39—55.
17. Maurizi M., Gao C., Berto F. Predicting stress, strain and deformation fields in materials and structures with graph neural networks // Scientific Reports. — 2022. — Т. 12, № 1. — С. 21834.
18. Meguerdjian S. и др. Physics-informed machine learning for fault-leakage reduced-order modeling // International Journal of Greenhouse Gas Control. — 2023. — Т. 125. — С. 103873.

19. Chen Z., Huan G., Li B. Modeling 2D and 3D horizontal wells using CVFA. — 2003.
20. Brooks R. H., Corey A. T. Properties of porous media affecting fluid flow // J. Irrig. Drain. Div. — 1966. — T. 92. — C. 61—88.
21. Corey A. T. The interrelation between gas and oil relative permeabilities // Prod. Month. — 1954. — T. 19. — C. 38—41.
22. Genuchten M. T. van. A closed for equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils // Soil Sci. Soc. — 1980. — T. 44. — C. 892—898.
23. Peaceman D. Fundamentals of numerical reservoir simulation. — 1977.
24. Gilmer J. и др. Neural message passing for quantum chemistry // International Conference on Machine Learning — PMLR. — 2017. — C. 1263—1272.
25. Rumelhart D. E., Hinton G. E., Williams R. J. Learning representations by back-propagating errors // Nature. — 1986. — T. 323, № 6088. — C. 533—536.
26. Orbach J. Principles of neurodynamics. Perceptrons and the theory of brain mechanisms // Archives of General Psychiatry. — 1962. — T. 7, № 3. — C. 218—219.
27. Fukushima K. Cognitron: A self-organizing multilayered neural network // Biological Cybernetics. — 1975. — T. 20, № 3. — C. 121—136.
28. Nair V., Hinton G. E. Rectified linear units improve restricted boltzmann machines // Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning (ICML-10). — 2010. — C. 807—814.
29. Dwivedi V. P. и др. Graph neural networks with learnable structural and positional representations // arXiv preprint arXiv:2110.07875. — 2021.

30. Trockman A., Kolter J. Z. Orthogonalizing convolutional layers with the Cayley transform // arXiv preprint arXiv:2104.07167. — 2021.
31. Pfaff T., Fortunato M., Sanchez-Gonzalez A., Battaglia P. Learning mesh-based simulation with graph networks // International Conference on Learning Representations. — 2020.
32. Brandstetter J., Worrall D., Welling M. Message passing neural PDE solvers // arXiv preprint arXiv:2202.03376. — 2022.
33. Li Z. и др. Fourier neural operator for parametric partial differential equations // arXiv preprint arXiv:2010.08895. — 2020.