研究论文

DOI：10.11949/0438-1157.20251451

基于DNS和高量描述符ANN的多孔介质渗透率预测

蔡至憧，刘晓雯，熊勤钢

（华南理工大学轻工科学与工程学院，广东 广州 510641）

摘要： 多孔介质渗透率的精确预测对能源开发、环境工程等领域具有重要意义。针对传统经验公式预测精确度不足的问题，提出了一种基于人工神经网络（artificial neural network，ANN）的渗透率预测模型。通过格子玻尔兹曼方法（lattice Boltzmann method，LBM）模拟620组人工多孔介质渗流过程获取其渗透率数据，结合MATLAB程序与分水岭分割（subnetwork of the oversegmented watershed，SNOW）算法量化表征孔隙结构，提取32项空间结构特征参数。采用L1正则化和递归特征消除法优化特征子集，发现总周长、孔隙率、平均喉道直径等11项关键参数对渗透率影响显著。通过对比，确定神经网络结构为11-55-44-33-22-1。交叉验证表明，模型预测决定系数（R^2）均高于0.95，平均绝对百分比误差（mean absolute percentage error，MAPE）均小于4%。该模型在简单性与精确性之间实现了较好的平衡，且体现出良好的泛化能力，为多孔介质“结构-渗透率”关系提供了新见解，可以作为多孔介质渗透率预测的有力替代方案。

关键词： 计算流体力学；神经网络；多孔介质；渗透率；格子玻尔兹曼方法

中图分类号： TB 126；TP 183　　**文献标志码：** A

文章编号： 0438-1157（2026）10-5787-14

Permeability prediction of porous media based on DNS and high-dimensional descriptor ANN

CAI Zhichong, LIU Xiaowen, XIONG Qingang

(*School of Light Industry and Engineering*, *South China University of Technology*, *Guangzhou* 510641, *Guangdong*, *China*)

Abstract: Accurate prediction of permeability in porous media is of great significance in fields such as energy development and environmental engineering. To address the problem of insufficient prediction accuracy of traditional empirical formulas, a permeability prediction model based on artificial neural network (ANN) is proposed. Permeability data of 620 artificial porous media samples were obtained by simulating their seepage processes using the lattice Boltzmann method (LBM). Combined with MATLAB programs and the subnetwork of the oversegmented watershed (SNOW) algorithm, the pore structures were quantitatively characterized and 32 spatial structural feature parameters were extracted. The feature subset is optimized using L1 regularization and recursive feature elimination, revealing that 11 key parameters, including total perimeter, porosity, and average throat diameter, significantly affect permeability. Through comparative analysis, the neural network architecture was determined to be 11-55-44-33-22-1. Cross-validation results demonstrated that the model's coefficient of determination (R^2) consistently exceeded 0.95, with a mean absolute percentage error (MAPE) of less than 4%. This

收稿日期： 2025-12-24　　**修回日期：** 2026-01-28

通信作者： 熊勤钢(1982—)，男，博士，教授，qingangxiong@scut.edu.cn

第一作者： 蔡至憧(2000—)，男，硕士研究生，1551476983@qq.com

基金项目： 广东省自然科学基金项目(2023A1515011419)；国家自然科学基金项目(22208109)

引用本文： 蔡至憧, 刘晓雯, 熊勤钢. 基于DNS和高量描述符ANN的多孔介质渗透率预测[J]. 化工学报, 2026, 77(10): 5787-5800

Citation： CAI Zhichong, LIU Xiaowen, XIONG Qingang. Permeability prediction of porous media based on DNS and high-dimensional descriptor ANN [J]. CIESC Journal, 2026, 77(10): 5787-5800

model achieves an excellent balance between simplicity and accuracy, exhibits strong generalization capability, provides new insights into the "structure-permeability" relationship of porous media, and can serve as a powerful alternative for permeability prediction in porous media.

Keywords: computational fluid dynamics; neural networks; porous media; permeability; lattice Boltzmann method

引 言

多孔介质流动常见于化工、能源、环境等领域，如木材浸渍[1]、石油天然气开采[2]、CO_2捕集及封存[3]等。渗透率常被用于定量描述多孔介质流动的难易，是反映孔隙率、孔隙结构等多孔介质空间特征对流体阻力的关键指标之一。因此，获得多孔介质渗透率对多孔介质的设计和利用具有极为重要的意义。然而，由于常见多孔介质的孔隙结构一般较为复杂，多孔介质流动涉及孔隙-表征体单元-整体三个尺度[4]，多孔介质空间结构的微小改变都有可能带来渗透率在几个数量级上的巨大差异。

获得多孔介质渗透率的手段主要分为理论、实验和模拟方法。理论上，常用Kozeny-Carman方程[5-6]、Timur-Coates方程[7-8]等计算孔隙结构非常简单的多孔介质的渗透率。然而，Kozeny-Carman方程将复杂的孔隙结构简化为均一分布的孔道[9]，忽略了孔喉尺寸分布、连通性等关键孔隙特征对渗透率的影响；Timur-Coates方程假设多孔介质为均质且各向同性，无法反映复杂多孔介质中因孔隙非均质性引起的渗透率各向异性。因此，常见多孔介质孔隙结构的复杂性及非均质性通常会严重降低理论方法的预测精度。实验上，常用稳态达西法[10]、脉冲衰减法[11]等直接测量多孔介质的渗透率。然而，由于难以全面精确测量多孔介质的关键孔隙结构，实验手段仅能获得多孔介质的整体渗透率而难以得到渗透率与孔隙结构特征的定量关联。模拟上，基于流体力学第一性原理来直接模拟流体和孔隙边界的直接数值模拟(direct numerical simulation，DNS)是关联渗透率与孔隙结构特征的最常见方式。然而，尽管具有极高的精度，但受限于直接求解孔隙壁面处流体流动所需的巨大计算量，DNS在预测具有复杂孔隙结构的多孔介质渗透率时仍显不足。

多孔介质的渗透率由孔隙率、孔喉尺寸、各向异性等多项特征共同决定，且特征间存在强耦合，呈现复杂非线性关联。近年来，人工智能和大数据技术快速发展，其中人工神经网络(artificial neural network，ANN)通过多层结构和非线性激活函数，拥有强大的非线性映射能力，在预测极端值或与训练数据存在分布差异的新数据时，ANN展现出优秀的泛化能力[12]，为复杂孔隙结构的渗透率精准预测提供了有效途径。Kamrava等[13]通过结合深度学习与ANN，实现了从图像到渗透率的快速预测。Wang等[14]收集大量多孔介质的孔隙结构参数，利用ANN预测Forchheimer系数，提供了比其他经验公式更准确的结果。Yalamanchi等[15]采用扫描电子显微镜(scanning electron microscope，SEM)扫描重建碳酸盐样品结构，并通过ANN构建碳酸盐渗透率预测模型。然而，这些模型在特征参数刻画的全面性和精确性上仍有不足，仅聚焦孔隙率、孔喉尺寸、迂曲度等参数，忽略了孔隙连通性、各向异性、非均质性等关键特征。由于常见多孔介质的孔隙结构一般都较为复杂，较为完整地描述多孔介质的孔隙结构需要高量的参数(描述符)，在ANN框架内提升预测精度的常见思路一般是增加样本量。然而，由于多孔介质孔隙结构的各描述符之间极有可能存在强关联和耦合，一味地增加样本量可能只是增加了数据准备的负担，对预测精度的提升能力可能较为有限。因此，Zhang等[16]指出，定量刻画出多孔介质孔隙结构各描述符之间的关联，筛选出具有强关联的描述符以优化特征参数的选取，是在不过于增加样本量前提下显著提升ANN预测精度的可行方式。

为提升多孔介质结构刻画的全面性，本研究在常见的参数外，增加了连通性、各向异性、非均质性等刻画多孔介质结构复杂性与异质性的特征参数，整合形成32项特征参数，实现对多孔介质孔隙结构的全方位、精细化表征。ANN训练所需的多孔介质渗透率的常见获取途径为实验测量与DNS[17]，但实验手段难以获取本研究所需的部分特征参数，而DNS不仅在多孔介质渗流模拟中具备极高精度，还能提供实验难以测得的微观结构参数与流场信息。其中，格子玻尔兹曼法(lattice Boltzmann method，LBM)凭借处理复杂边界的天然优势与并行化实现的便利性，近几十年来已被广泛应用于多孔介质渗流模拟[16, 18-19]。本研究首先使用LBM进行大量多孔介质流动的DNS并计算其渗透率。进而，通过自编

程序及分水岭分割(subnetwork of the oversegmented watershed, SNOW)算法[20]分析多孔介质结构,得到32项特征参数。之后,通过L1正则化法和Spearman相关系数分析各特征参数在预测模型中的重要性,并进行递归特征消除以优化得到关键的特征参数集,最后以输入层节点数为基准,通过对比分析得到最佳ANN结构,从而得到同时具有较好预测速度和精度的高量描述符ANN渗透率预测模型。

1 数据集和方法

1.1 多孔介质生成

考虑到多孔介质普遍存在的强异质性,为构建一个覆盖面广、特征可控的模型数据集,本研究采用四参数随机生长法[21](quartet structure generation set, QSGS)构建人工多孔介质。传统实验重建方法(如CT扫描)成本高昂且样本量有限,结构变异性不足;传统数值生成方法(如随机颗粒堆积法)虽能批量生成样本,但多依赖单一控制参数,难以同时实现孔隙尺寸、迂曲度、各向异性等参数的独立调控。QSGS的核心优势在于通过4个独立可控的关键参数,实现对多孔介质孔隙结构的精细化、多维度调控,具体参数及作用如表1所示。

图1展示的是QSGS生成的部分多孔介质。通过对生长核密度、生长概率比、固相体积分数进行有序的定量设置以控制多孔介质的孔隙率、孔隙尺寸、各向异性等孔隙结构特征,让生成的多孔介质在更大程度上展现出孔隙结构的多样性。可以看出,随着固相体积分数增大,固体占比增大,多孔介质的孔隙率减小;随着生长核密度增大,固体变得密集,孔隙尺寸随之变小;随着生长概率比增大,固体生长方向发生变化,多孔介质的各向异性随之改变。基于上述方法,本研究构建了一个包含620个样本的人工多孔介质数据集。该数据集在关键结构特征上(如孔隙率、迂曲度、各向异性)表现出较大的变异性,其渗透率数值跨越了4个数量级。这种宽范围的、具有明确物理意义的样本设计,确保了后续训练的预测模型能够学习到"结构-渗透率"之间普适的、而非局部的映射关系,从而显著地增强其泛化能力与预测的鲁棒性。

表1 QSGS具体参数及其作用

Table 1 Specific parameters of QSGS and their functions

参数	定义	作用
体素尺寸	多孔介质整体尺寸大小	限定固体相的生长范围
生长核密度	固相初始生长点的疏密程度	控制固体颗粒和孔隙的尺寸
生长概率比	固相在各方向的生长概率比	控制多孔介质的各向异性特征
固相体积分数	多孔介质中固相体积占比	控制多孔介质的孔隙率

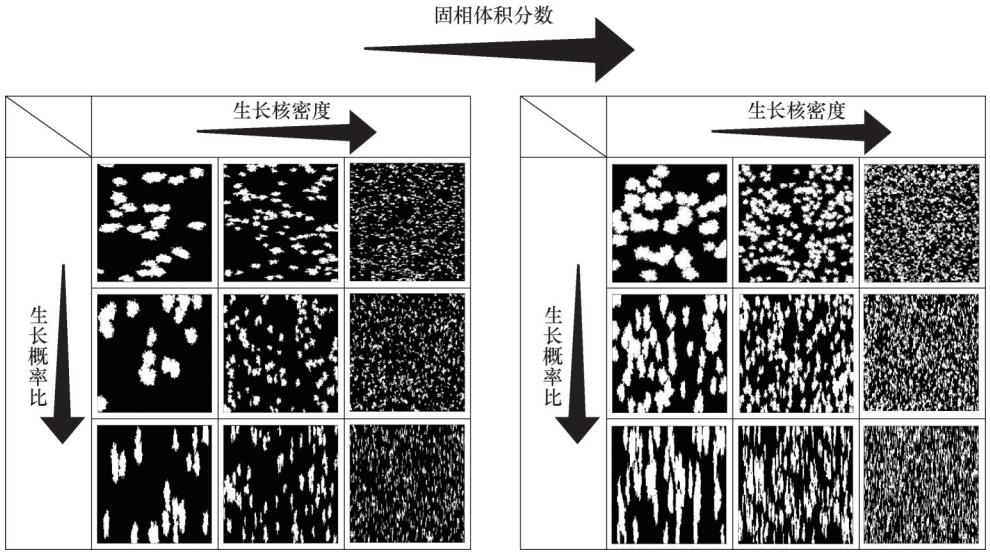


图1 QSGS法生成的部分多孔介质

Fig.1 Representative samples of porous media generated by the QSGS method

1.2 基于LBM的多孔介质流动DNS

1.2.1 LBM LBM是一种在速度、时间和空间维度上均采用离散化处理的数学模型。它通过对特定时空节点处粒子分布函数进行迭代求解，将连续的物理量转化为离散的计算单元，为复杂流场分析提供了一种有效的计算途径。本研究使用不可压缩的Lattice Bhatnagar-Gross-Krook（LBGK）模型[22]，其密度分布函数演化方程为：

$$f_i\left(x + c\boldsymbol{e}_i\Delta x, t + \Delta t\right) = f_i(x,t) + \Omega_i\left(f_i(x,t)\right) \tag{1}$$

式中，c为格子声速，$c = \Delta x/\Delta t$；Δx为网格步长；Δt为时间步长；$\boldsymbol{e}_i$为离散速度，为第i个离散方向的速度向量；$\Omega_i(f_i(x,t))$为碰撞算子，其中$\Omega_i = -(f_i - f_i^{\mathrm{eq}})/\tau$，$\tau$为无量纲的弛豫时间[23]，$f_i^{\mathrm{eq}}$为离散速度空间的局部平衡态分布函数[24]。

Qian等[25]提出的DnQb模型是LBM的基本模型，其中n代表n维空间，b代表有b个离散速度。本文中所用的基本模型为D2Q9模型，其示意图如图2所示，该模型共有9个运动方向，其离散速度$\boldsymbol{e}_i$满足下式：

$$\boldsymbol{e}_i = c\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

D2Q9模型权系数配置为：

$$w_i = \begin{cases} \dfrac{4}{9}, i = 0 \\ \dfrac{1}{9}, i = 1,2,3,4 \\ \dfrac{1}{36}, i = 5,6,7,8 \end{cases} \tag{3}$$

式中，w_i为第i个离散方向的权系数。

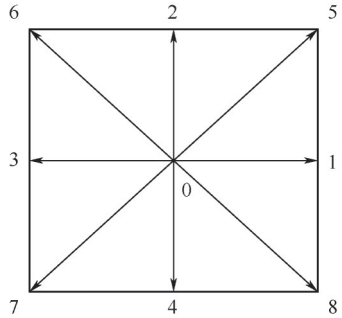


图2 D2Q9模型示意图

Fig.2 Schematic diagram of the D2Q9 model

1.2.2 边界条件 如图3所示，本研究的多孔介质渗流模拟中，出口和入口设置为固定压力边界，用于在模拟中维持流场的压力梯度，通过压力差驱动流体流动；出入口之外的边界则设置为周期性边界，其在指定方向上的计算域是周期性的，常用在以有限尺寸计算域模拟流体域无穷大的数值模拟中[26]；孔隙通道壁面的边界条件设置为标准反弹边界，以实现孔隙通道壁面与流体间无滑移流动的模拟[27]。

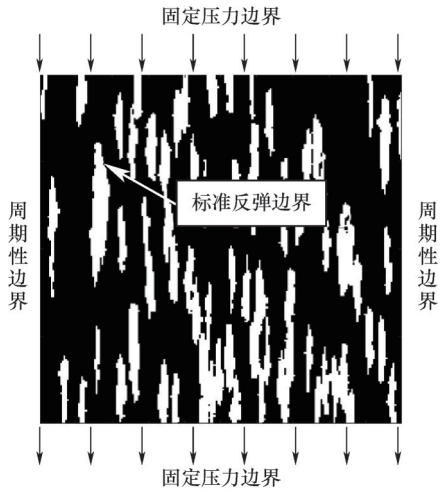


图3 边界条件示意图

Fig.3 Schematic diagram of boundary conditions

1.2.3 模型验证 本研究以二维顶盖驱动方腔流（图4）为例，对Re=100、400、1000（Re为Reynolds数）下的方腔流进行数值模拟，并与基准解[28]进行对比，以验证本研究所用程序的准确性。该经典流动案例被广泛用于验证LBM程序的准确性[29-31]，其合理性与有效性得到了学界普遍认可。该模型中，顶盖边界采用非平衡态外推边界，其余壁面采用标准反弹边界，网格数为256×256，流场初始密度$\rho_0 = 1.0$，方腔长宽皆为L，顶盖移动速度为U。

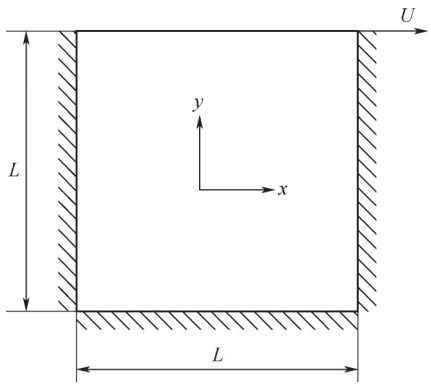
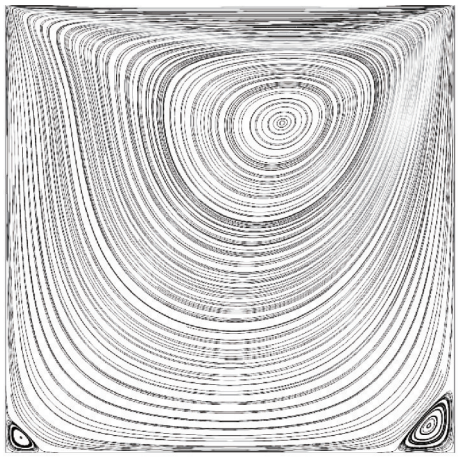


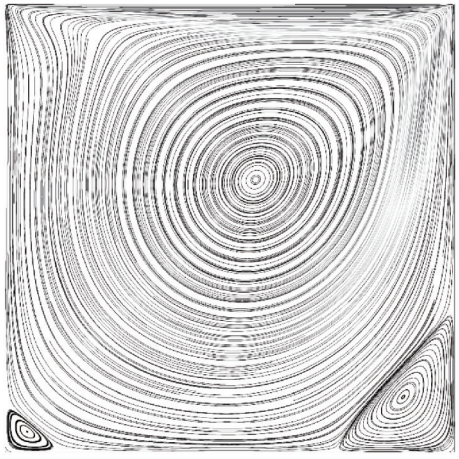
图4 二维顶盖驱动方腔流示意图

Fig.4 Schematic of 2D lid-driven cavity flow simulation

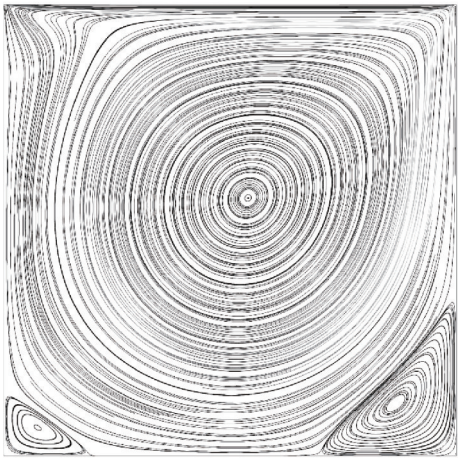
图5展示了不同Re下方腔内部的流迹图。可以看出，随着Re增大，方腔左下角和右下角的两个二级涡持续增大，主涡的涡心逐渐靠近方腔的中心位置，变化趋势与Hou等[32]的结果相符。图6中所示



(a) *Re*=100



(b) *Re*=400



(c) *Re*=1000

图5 不同*Re*下二维顶盖驱动方腔内部流迹图

Fig.5 Internal streamline diagrams of 2D lid-driven cavity flow simulation under different *Re*

的是在$x=L/2$、$y=L/2$截面上LBM程序计算结果与基准解[28]的对比。可以看出，LBM程序计算结果与基准解[28]吻合良好。

1.3 ANN模型构建

本研究采用基于反向传播(back propagation，BP)算法的前馈神经网络[33]构建预测模型，围绕多孔介质渗透率预测的“特征强耦合、非线性关联、宽数值范围”核心需求，设计网络结构、训练策略及优化方法，具体配置与选用如表2所示。

表2 ANN模型核心配置参数

Table 2 Core configuration parameters of the ANN model

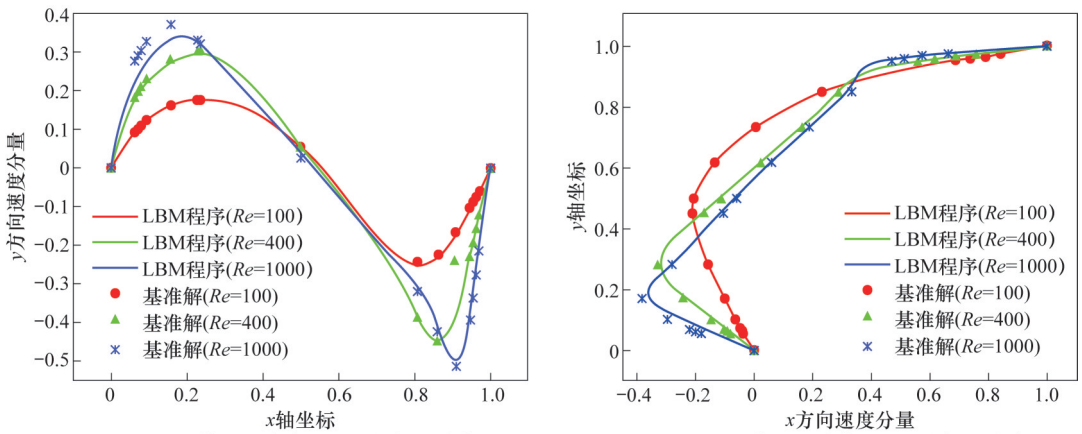
核心配置项	具体参数/方法
基础算法	BP算法
激活函数	ReLU非线性激活函数
优化器	Adam优化器
初始学习率	0.001
损失函数	rRMSE
正则化策略	L1正则化
数据标准化方法	*Z*-score标准化

激活函数选用修正线性单元(rectified linear unit，ReLU)非线性激活函数[34]为模型引入非线性映射，并缓解深层网络梯度消失问题；优化器采用自适应动量估计优化器(adaptive moment estimation，Adam)[35]，初始学习率设为0.001，Adam算法结合动量梯度下降为每一个网络参数自适应调整学习率，提升模型的收敛速度和鲁棒性；损失函数选用相对均方根误差(relative root mean square error，rRMSE)，聚焦相对误差，避免因渗透率跨4个数量级导致的误差失真，确保不同渗透率区间预测精度均衡；正则化策略采用L1(lasso)正则化[36]，通过惩罚低贡献特征权重，引导模型聚焦于关键特征，抑制模型过拟合风险；数据预处理采用*Z*-score(standard score)标准化，将各特征转化为均值为0、方差为1的统一尺度，消除量纲差异对训练的干扰。

2 结果与分析

2.1 多孔介质孔隙结构特征参数

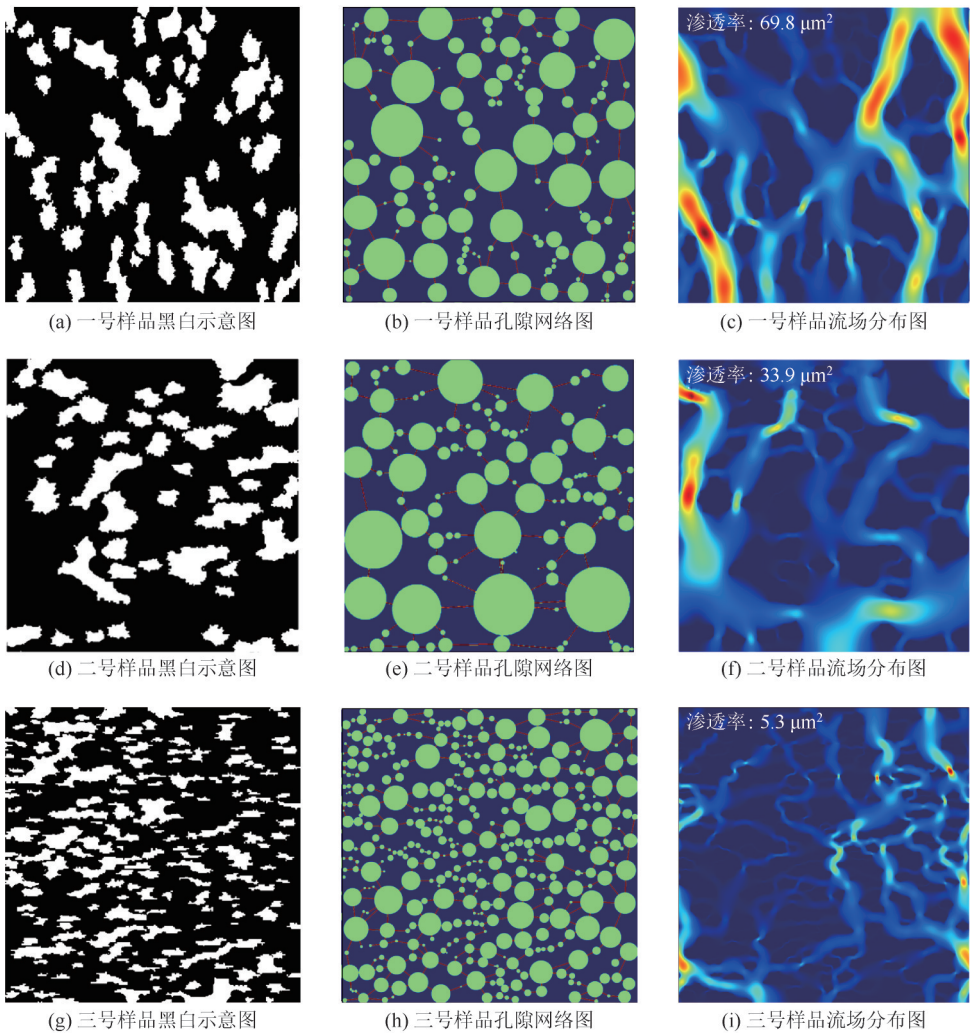
多孔介质的渗透率为介质本身的固有物理属性，其与多孔介质的孔隙率、迂曲度、各向异性、孔隙和喉道尺寸等结构属性密切相关。然而，不同多孔介质的内部结构差距巨大。图7分别展示了本研究模拟的3个同孔隙率样品的黑白示意图、孔隙网络图、流场分布图。黑白示意图中黑色部分为孔隙，白色部分为固体；孔隙网络图则是通过SNOW算法[20]分割孔隙与喉道，将孔隙简化为圆、喉道简化



(a) $x=L/2$截面上x方向无量纲速度u的分布　(b) $y=L/2$截面上y方向无量纲速度v的分布

图6　二维顶盖驱动方腔流模拟验证结果

Fig.6　Verification results of 2D lid-driven cavity flow simulation



(a) 一号样品黑白示意图　(b) 一号样品孔隙网络图　(c) 一号样品流场分布图

(d) 二号样品黑白示意图　(e) 二号样品孔隙网络图　(f) 二号样品流场分布图

(g) 三号样品黑白示意图　(h) 三号样品孔隙网络图　(i) 三号样品流场分布图

图7　多孔介质样品的结构与流场可视化

Fig.7　Visualization of the structure and flow field in porous media samples

为线段，提取得到多孔介质的孔隙网络；流场分布图为LBM数值模拟结果。可以看出，尽管这3个样品孔隙率相同，但其内部流道连通情况、固体分布趋势、孔隙与喉道尺寸的差异导致渗透率出现数量级上的不同。

为较为全面地对多孔介质复杂的孔隙结构进

行表征，本研究综合了主流的教科书和文献[20, 37-41]中的参数集，系统性地选取了孔喉尺度类参数、形态拓扑类参数、统计分布类参数共32个特征参数，其符号、描述、单位详见表3。其中，孔隙率、迂曲度、各向异性、非均匀性等特征参数由自编程的Matlab程序计算所得，孔隙和喉道尺寸、孔隙分支数等特征参数由基于增强分水岭方法的SNOW算法[20]计算所得。

表3 特征参数

Table 3 Feature parameters

序号	符号	描述	单位
1	φ	孔隙率	—
2	φ_{eff}	有效孔隙率	—
3	P_{total}	总周长	m
4	τ_{geo}	几何迂曲度	m
5	τ_{h}	水力迂曲度	m
6	A_{nei}	邻位各向异性	—
7	A_{vec}	向量各向异性	—
8	N_{pore}	孔隙数量	—
9	N_{throat}	喉道数量	—
10	N_{branch}	平均孔隙分支数	—
11	$N_{\mathrm{b>3}}$	分支数3以上的孔隙数量	—
12	$N_{\mathrm{b>4}}$	分支数4以上的孔隙数量	—
13	$N_{\mathrm{b>5}}$	分支数5以上的孔隙数量	—
14	D_{p}	平均孔隙直径	m
15	$D_{\mathrm{p10\%}}$	10%分位孔隙直径	m
16	$D_{\mathrm{p50\%}}$	50%分位孔隙直径	m
17	$D_{\mathrm{p90\%}}$	90%分位孔隙直径	m
18	D_{t}	平均喉道直径	m
19	$D_{\mathrm{t10\%}}$	10%分位喉道直径	m
20	$D_{\mathrm{t50\%}}$	50%分位喉道直径	m
21	$D_{\mathrm{t90\%}}$	90%分位喉道直径	m
22	L_{t}	平均喉道长度	m
23	$L_{\mathrm{t10\%}}$	10%分位喉道长度	m
24	$L_{\mathrm{t50\%}}$	50%分位喉道长度	m
25	$L_{\mathrm{t90\%}}$	90%分位喉道长度	m
26	Δ_{φ}	孔隙率的空间非均匀性	—
27	Δ_{pore}	孔隙直径的空间非均匀性	—
28	Δ_{throat}	喉道直径的空间非均匀性	—
29	Δ_{length}	喉道长度的空间非均匀性	—
30	$R_{\mathrm{geo-spa}}$	几何迂曲度与空间距离之比	—
31	$R_{\mathrm{h-spa}}$	水力迂曲度与空间距离之比	—
32	$R_{\mathrm{geo-h}}$	几何迂曲度与水力迂曲度之比	—

2.2 特征参数重要性评估

本研究先采用Spearman相关系数法构建“特征参数-特征参数”及“特征参数-预测目标”的全方位相关系数热力图用以分析各特征参数与预测目标之间的相关度。再使用L1正则化法惩罚输入参数权重的绝对值，促使不重要的特征参数对应的权重趋近于零，然后将ANN第一层的权重绝对值作为特征重要性的度量。通过此方法，找出对预测目标影响较大的特征参数，并排除或合并相关系数过高的特征参数。最后，通过优化预测模型的输入特征，达到提升渗透率估算的精确度与可靠性的目的。

2.2.1 Spearman相关系数 图8为各特征参数与渗透率之间的Spearman相关系数热力图。该热力图中的每个单元格颜色表示了两个特征参数之间的相关程度，单元格中的数字为对应的相关系数，越接近1说明正相关性越强，越接近-1则说明负相关性越强。可以看出，特征参数之间并不是独立的，许多特征参数之间有很强的相关性，这是因为不同特征参数之间存在内在联系。例如，孔隙数量与喉道数量之间的相关系数为0.99，这是因为喉道是连接不同孔隙的通道，孔隙数量的增加往往伴随着喉道数量的增加。同样，各向异性与迂曲度的相关系数高达0.9左右，这是因为各向异性直接影响着流体的流动路径。

图8中最右边一列展示的是各特征参数与渗透率之间的相关系数。可以看出，绝对值最高的是平均喉道直径，对应的相关系数为0.94。这说明喉道直径对于渗透率有着非常重要的影响，喉道是孔隙网络中连接孔隙的狭窄通道，在流体流动过程中起到瓶颈的效果，较大的喉道直径可以显著降低流动过程中的阻力，从而使多孔介质拥有较高的渗透率。总周长与渗透率同样有着较高的相关性，其相关系数为-0.92。在孔隙率不变的前提下，总周长的增加往往代表着孔隙数量的增加以及孔隙、喉道尺寸的降低，这会使多孔介质的渗透率降低。

2.2.2 特征参数重要性分析 ANN是一种受生物神经系统启发的计算模型，通过模拟神经元间的信息传递机制建立输入与输出的非线性映射关系，其内部运行机制很难理解和解释。尽管如此，提高模型的可解释性，在构建模型的过程中可以更好地对特征参数选择进行优化。考虑到ANN通过迭代调整网络中神经元连接权重以最小化损失函数的训练机制[33]，本研究采用L1正则化来评估特征参数的重要性。

L1正则化是一种通过在损失函数中添加惩罚项，以降低模型中低贡献特征参数的权重，从而减

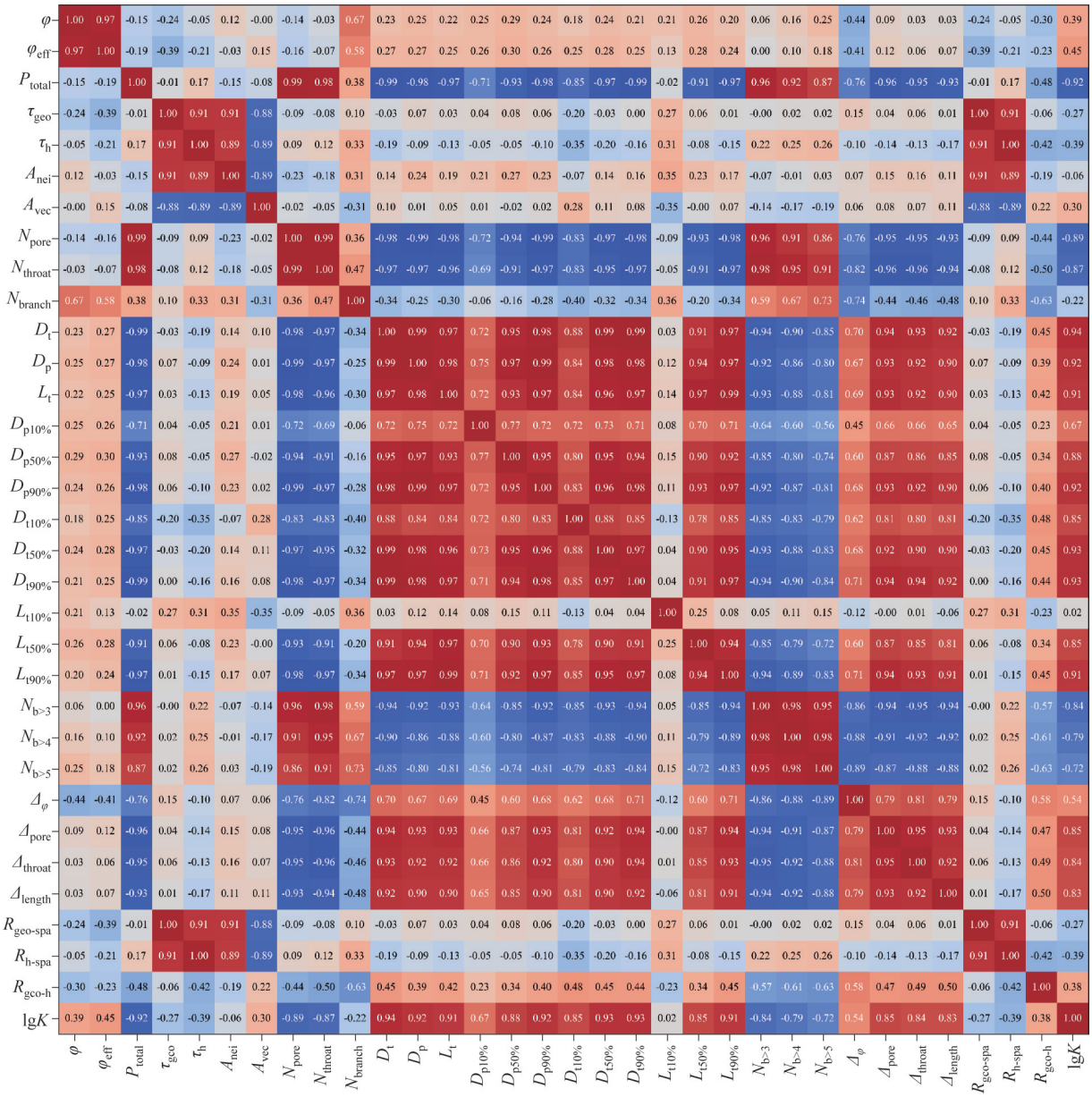


图8 Spearman相关系数热力图

Fig.8 Spearman correlation coefficient heatmap

少这些特征参数对模型影响的方法[36]。在使用L1正则化训练模型后，通过提取每个特征参数的权重并进行排序，量化特征参数在模型中的贡献，以评估各特征参数的重要性。如图9(a)所示，总周长有着最高的重要性，这意味着在预测中总周长对渗透率的影响最为显著，重要性排在第二、第三的分别是孔隙率和10%分位孔隙直径，但其与渗透率的相关系数分别只有0.39和0.67，与渗透率相关性最高的平均喉道直径的重要性只排在第四位。这是因为相关系数仅衡量单个特征与渗透率的直接线性关联，而L1正则化下的特征重要性是特征在多变量体系中的综合贡献。通过图8可以看到，孔隙率与10%分位孔隙直径都和总周长等核心特征的共线性较低，两者能为预测模型提供不可替代的独立信息；而与渗透率相关性最高的平均喉道直径与总周长的相关系数为-0.99，存在严重的共线性，这可能会导致其在模型中的权重降低。

在得到特征参数的重要性排序后，可以通过递归特征消除法简化得到最佳特征子集。递归特征消除法通过递归迭代的方式从重要性最低的特征开始逐步消除不重要特征，从而达到消除冗余特征、简化模型的目的。图9(b)展示了递归特征消除的结果，每个点为5次随机分配训练集和验证集的拟合结果的平均值，误差棒为标准差。可以看出，

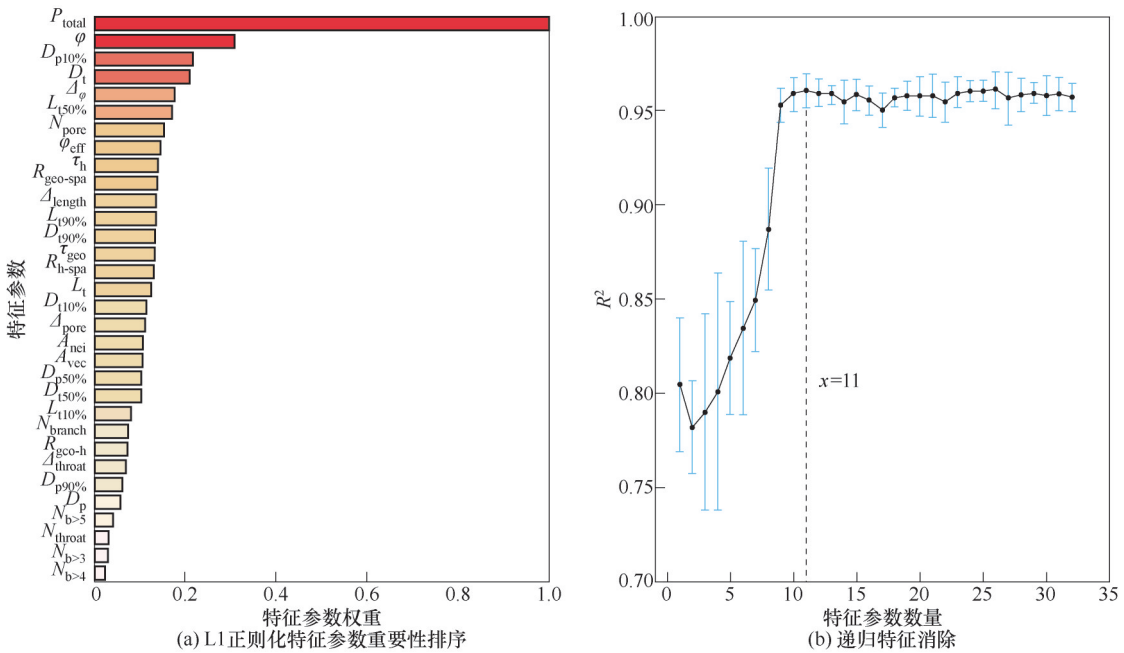


图9 特征参数重要性分析

Fig.9 Feature importance analysis

随着逐步消除不重要特征，决定系数(R^2)先是小幅度振荡，在特征参数数量达到11时达到拐点，开始持续下降。随着R^2下降，标准差也开始增大，这说明预测结果的波动性增大，模型开始变得不稳定。

根据上述特征参数重要性排序与递归特征消除结果，本研究最终确定了最佳特征子集，分别为总周长、孔隙率、10%分位孔隙直径、平均喉道直径、孔隙率空间非均匀性、50%分位喉道长度、孔隙数量、有效孔隙率、水力迂曲度、几何迂曲度与空间距离之比、喉道长度空间非均匀性。其中总周长重要性最高，这是因为总周长在一定程度上反映了孔隙结构的全局复杂性，从图8中也可以看到总周长与孔喉尺度类参数都有着很高的相关性，更大的总周长往往意味着更大的孔喉数量、更小的孔喉直径，进而导致更大的流动阻力。可以看出，孔隙率和有效孔隙率都在该子集中。孔隙率决定了多孔介质容纳流体总量的理论上限，而有效孔隙率则描述了实际连通的、可参与输运的孔隙空间占比，两者相结合精确量化了多孔介质的有效输运能力。10%分位孔隙直径、平均喉道直径、50%分位喉道长度、孔隙数量则都属于孔喉尺度类参数。渗流过程往往由最狭窄的瓶颈所控制，10%分位孔隙直径反映了孔隙的尺寸下限，通常接近喉道尺寸；平均喉道直径则代表了喉道尺寸的整体平均水平；50%分位喉道长度避免了极端值的影响，反映了流体穿越两个孔隙之间的阻力；在固定尺寸的多孔介质中孔隙数量的多少往往反映孔隙直径的大小进而影响流体受到的阻力，在图8中可以看到两者相关度为−0.99，说明它们之间存在极强的负相关。孔隙率空间非均匀性、喉道长度空间非均匀性都属于描述对应属性空间分布情况的参数，高的非均匀性意味着介质内部存在优先流通道和死区，其对于渗流率的影响难以单独判断，需结合其他参数综合判断。水力迂曲度、几何迂曲度与空间距离之比为描述输运路径曲折程度的形态拓扑参数，量化了流体流过的路径与表观直线路径的差异，更大的迂曲度意味着流体流过的阻力更大。

2.3 ANN结构选择

ANN模型训练前，需通过超参数优化确定最优神经网络结构。常见的网格搜索法虽能保证找到全局最优解，但其计算成本随参数维度和隐藏层数增加呈指数级增长[42]，对于本研究中相对复杂的网络结构而言，时间和算力成本过高。为此，本研究参考金字塔拓扑规则[43]进行ANN结构设计，其核心逻辑是通过收缩节点数，逐层过滤冗余信息。通过在隐藏层深度上由浅入深迭代，在隐藏层广度上金字塔式递减，既解决了网格搜索法成本过高的缺陷，又通过理论约束确保了探索方向的科学性，避免结构设计的主观性。

本研究中输入层节点数为11，输出层节点数为

1，隐藏层节点数以输入层节点数为基准，根据金字塔结构逐层增加基数的倍数，隐藏层深度则从1层逐渐增加到4层，通过探索不同深度和广度的组合以找到最优的神经网络结构。不同神经网络结构及其对应的预测结果见表4，比较后可以看到，有4个隐藏层，节点数分别为55、44、33、22的神经网络结构表现出最佳的性能，其决定系数（R-square，R^2）在所有的13种结构中最高，为0.9574，同时其均方根误差（root mean square error，RMSE）与平均绝对百分比误差（mean absolute percentage error，MAPE）也是13种结构中最低，分别为0.0527及3.93%。故选择神经网络结构为11-55-44-33-22-1。

表4 神经网络结构选择

Table 4 Neural network structure selection

序号	神经网络结构	决定系数	均方根误差	平均绝对百分比误差/%
1	11-22-1	0.9540	0.0544	3.98
2	11-22-11-1	0.9341	0.0656	4.59
3	11-33-11-1	0.8996	0.0807	5.44
4	11-33-22-1	0.9237	0.0701	5.11
5	11-33-22-11-1	0.9412	0.0616	4.54
6	11-44-22-11-1	0.9487	0.0578	4.24
7	11-44-33-11-1	0.9483	0.0578	4.24
8	11-44-33-22-1	0.9533	0.0550	4.05
9	11-44-33-22-11-1	0.9528	0.0554	4.17
10	11-55-33-22-11-1	0.9524	0.0555	4.08
11	11-55-44-33-22-1	0.9574	0.0527	3.93
12	11-55-44-22-11-1	0.9516	0.0560	4.04
13	11-55-44-33-11-1	0.9553	0.0539	3.95

2.4 神经网络模型性能评估

2.4.1 *渗透率预测性能* 使用上文中得到的结构与特征参数构建ANN模型。数据集由620个QSGS法构建的人工多孔介质样本组成，随机分为训练集（80%）和测试集（20%）。采用5种不同的随机分组方案进行交叉验证，以全面评估该人工神经网络模型的性能。如图10所示，一号分组方案的R^2为0.9681，在5种方案中最接近1，说明其拟合优度最高；同时一号分组方案的RMSE为0.0465，为5种方案中最低，说明其绝对误差最小；四号分组的MAPE为3.36%，为5种方案中最低，说明其相对误差最小。总体来说，5种分组方案的R^2皆高于0.95且MAPE皆小于4%，5种分组方案间模型表现出的性能差距并不大，表明模型可以提供有效且稳定的预测。

图10(f)为5次测试所有数据的误差统计图。可以看出，这些误差近似于正态分布，正负误差基本持平，均值接近于零。这种分布特征表明模型整体无偏，误差主要是随机性而非系统性。

图11展示了不同渗透率区间的预测误差分布。可以看出，$1.0 \leqslant \lg K < 1.5$与$\lg K \geqslant 3.5$两个区间的MAPE均超过5%。究其原因，这两个区间的样本数量相对较少。通过对比各区间MAPE与样本数量的变化趋势可以发现，二者呈现一定程度的负相关关系，样本数量较少的区间因训练数据不足，导致模型在该类渗透率范围的预测能力欠佳。

2.4.2 *计算效率比较* 本研究通过特征参数重要性分析及递归特征消除得到的最佳特征子集，将输入特征数从32个缩减至11个，通过消除冗余特征、简化模型的方法提高了模型的效率。简化前后的计算时间对比如表5所示。可以看出，通过特征选择将输入参数从32个减少到11个后，训练时间减少了约52.5%，预测时间减少了约34.2%。这是因为输入参数的减少意味着神经元的减少，这一改进不仅提高了计算效率，还减少了过拟合的风险，使模型更加专注于真正影响渗透率预测的关键因素，这有助于提高模型的可解释性，为多孔介质渗流机理研究提供了更清晰的物理洞察。

2.4.3 *实际多孔介质验证* 为验证本研究提出的方法，尝试预测实际多孔介质渗透率。本研究中所用实际多孔介质的数字模型来自数字多孔介质门户（https://digitalporousmedia.org），由CT断层扫描建模所得。本研究共使用LBM模拟了92个实际多孔介质的渗透率，将其中46个样本加入训练集供人工神经网络模型学习拟合，另外46个样本作为验证集用于检测预测效果，结果对比如图12所示。可以看到，实际多孔介质渗透率预测中RMSE为0.0394，MAPE为3.21%，均低于生成多孔介质，说明预测实际多孔介质的准确率高于预测生成多孔介质；但预测实际多孔介质的决定系数为0.5604，远低于生成多孔介质，这是因为实际多孔介质的渗透率都分布在较小的范围内，导致其总平方和比起渗透率范围更大的生成多孔介质小很多，在残差平方和变化不大的情况下，决定系数便出现明显下降。验证结果表明，本研究建立的高量描述符ANN模型具有良好的泛化能力，预测新类型的多孔介质时仅需补充少量新的训练样本，便可精准捕捉到新多孔介质的结构-渗透率关系规律，提供有效且稳定的预测。

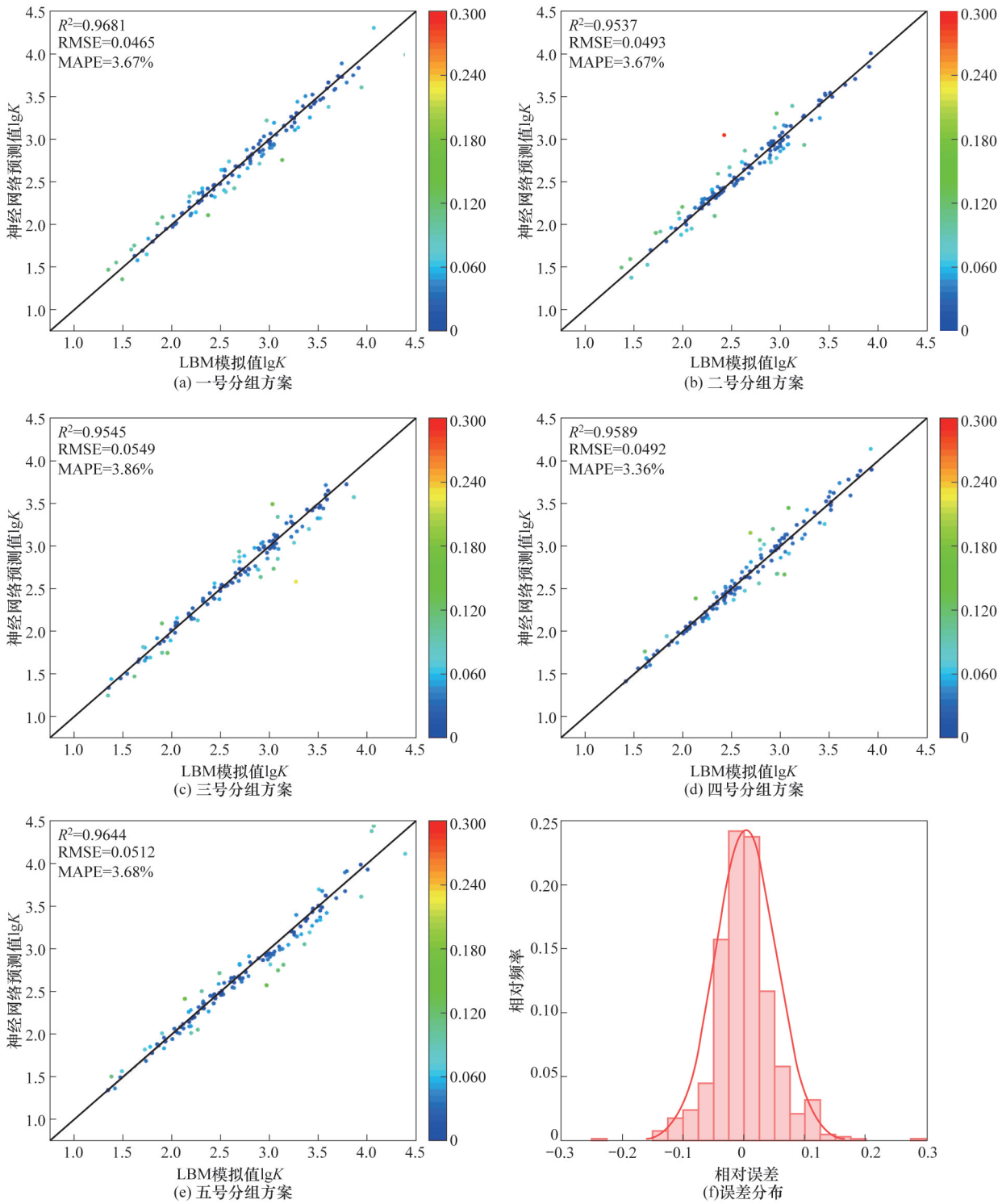


图10 模型预测结果散点图与误差分布

Fig.10 Scatter plot of model predictions and error distribution

2.5 与现有研究的对比分析

为验证本研究方法的有效性，选取近年来多孔介质渗透率预测领域的相关研究成果，从预测精度、计算效率、数据规模3个维度展开比较分析，结果如表6所示。

预测精度方面，本研究的模型R^2达0.9599（取5种分组方案平均值），在全部对比研究中处于领先水平。同类模型对比中，Yalamanchi等[15]采用ANN模型仅实现R^2为0.921，Kang等[18]仅实现R^2为0.914，本研究通过高量描述符全面刻画多孔介质结构再

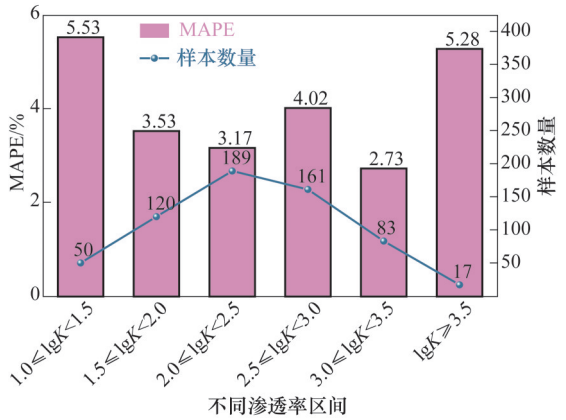


图11 不同渗透率区间误差分布

Fig.11 Distribution of errors across different permeability intervals

表5 简化前后计算时长对比

Table 5 Comparison of computation time before and after simplification

输入参数/个	训练轮数/epoch	训练时长/s	预测时长/s	计算资源规格
32	20000	569.54	0.000517	i5-12400
11	20000	270.57	0.000340	i5-12400

进行特征优化，实现了R^2约4%的超越，证明模型对孔隙结构与渗透率的关联挖掘更深入。

计算效率方面，本研究同样表现出色。首先，在训练时长上，本模型仅需270.57 s，远低于UNet的6300 s，也低于ADCRNN模型的411.67 s；在预测时长上，本模型的单样本预测时长为0.000340 s，对比其他方法具备数量级优势，意味着模型具备大规模多孔介质样本快速评估的潜力。值得注意的是，Zhang等[44]的模型训练时长虽小于60 s，但其模型R^2最高才0.88，难以兼顾效率与精度的平衡。

数据规模方面，Kumar等[45]基于ADCRNN构建的模型R^2为0.953，其样本数量为2976个；Kang等[18]基于AdaBoost构建的模型R^2为0.957，其样本数量为1000个，这两个模型都实现了较高的R^2，但都是在更大数据规模的基础上实现的。本研究通过优化特征选取，提升单位样本的信息利用率，仅基于620个样本，即实现更高的预测精度，印证了“提升特征质量优于单纯增加样本数量”的核心理念。

3 结 论

本研究通过LBM模拟得到多孔介质渗透率，并通过算法对多孔介质结构特征进行全面精准的刻画，然后通过对比筛选出最佳特征集和最佳神经网络结构，最终构建了一种基于多孔介质结构特征参数的渗透率预测模型。主要结论如下。

(1)多孔介质的渗透率由其空间结构的综合特性主导，即使宏观特征(如孔隙率、总周长)相近，微观流道连通性、孔喉拓扑关系等关键特征的差异仍可能导致渗透率相差数个数量级，凸显了结构异质性对渗透率的决定性作用。

(2)本研究采取“相关性分析-重要性量化-递归特征消除”的三阶特征优化策略。首先通过Spearman相关系数揭示特征间内在关联，再利用L1正则化量化各特征对渗透率预测的贡献权重，最终通过递归特征消除法筛选得到11项核心特征参数。优化特征参数集后，在预测精准度没有下降的前提下，预测模型的训练时间减少了约52.5%，预测时间减少了约34.2%。

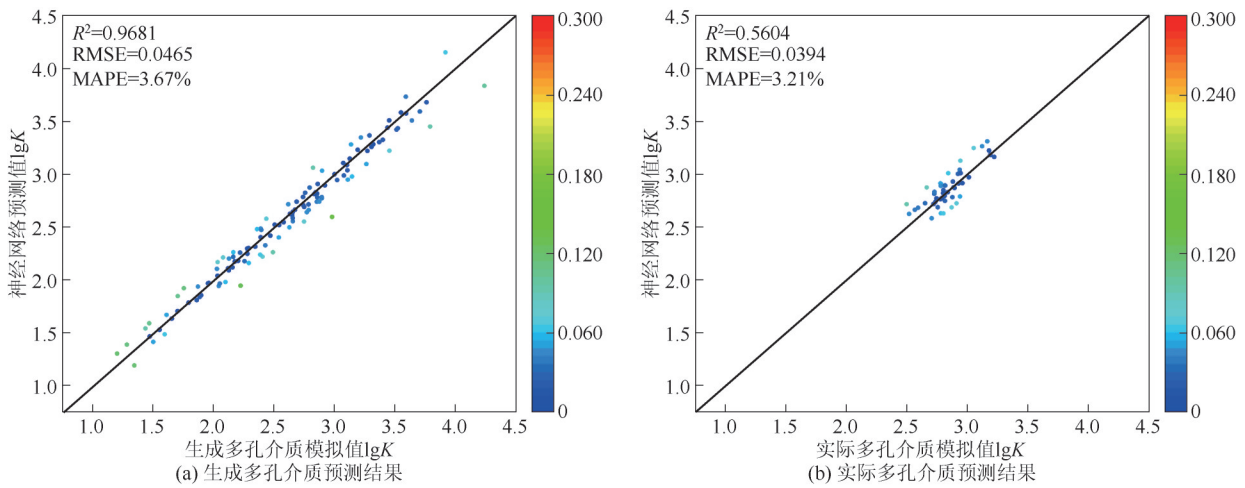


图12 生成多孔介质与实际多孔介质预测结果对比

Fig.12 Comparison of prediction results between synthetic porous media and actual porous media

表6 不同研究渗透率预测模型性能对比

Table 6 Performance comparison of permeability prediction models in different studies

数据来源	方法	R^2	训练时长/s	预测时长/s	样本数量
本研究	ANN	0.9599	270.57	0.000340	620
Takbiri等[46]	U型网络(U-shaped network,UNet)	0.932	6300	小于60	512
Kumar等[45]	注意力基深卷积循环神经网络(attention-based deep convolutional recurrent neural network,ADCRNN)	0.953	411.67	1.32	2976
Yalamanchi等[15]	支持向量机(support vector machine,SVM)	0.849	—	—	200
Yalamanchi等[15]	ANN	0.921	—	—	200
Kang等[18]	自适应提升算法(adaptive boosting,AdaBoost)	0.957	—	—	1000
Kang等[18]	ANN	0.914	—	—	1000
Kang等[18]	卷积神经网络(convolutional neural network,CNN)	0.944	—	—	1000
Zhang等[44]	支持向量回归(support vector regression,SVR)	0.83	小于60	—	709
Zhang等[44]	随机森林(random forest,RF)	0.82	小于60	—	709
Zhang等[44]	残差神经网络(residual neural network,ResNet)	0.88	60~120	—	709
Kamrava等[13]	CNN-ANN	0.91	—	小于2	910

(3)本研究建立了一个新的渗透率预测模型,在训练集、测试集随机分组测试中,所有分组方案中R^2皆高于0.95且MAPE皆小于4%,且不同分组方案的性能波动极小,表明模型预测结果的有效性与稳定性。针对新型多孔介质,该模型只需补充少量新训练样本,便可精准捕捉到新多孔介质的"结构-渗透率"关系规律,体现了该模型良好的泛化能力。

参考文献

[1] Zhang X T, Ning G Y, Chen P, et al. Realizing mechanically robust and electrically conductive wood *via* vacuum pressure impregnation[J]. ACS Applied Bio Materials, 2020, **3**(9): 6071-6078.

[2] Wang Y D, Xue J K, Wang D S, et al. Lattice Boltzmann method for simulation of shale gas flow in kerogen nano-pores considering temperature dependent adsorption[J]. International Journal of Oil, Gas and Coal Technology, 2020, **23**(4): 409-426.

[3] Tian Z W, Wang J Y. Lattice Boltzmann simulation of CO_2 reactive transport in network fractured media[J]. Water Resources Research, 2017, **53**(8): 7366-7381.

[4] 王灵权. 格子Boltzmann方法在多孔介质流中的多尺度应用研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2017.
Wang L Q. A research on the lattice Boltzmann method for its application in multi-scale porous flows[D]. Chongqing: Chongqing University, 2017.

[5] Kozeny J. Uber kapillare leitung des wassers im boden[J]. Sitzungsberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften, 1927, **136**(2a): 271-306.

[6] Carman P C. Fluid flow through granular beds[J]. Chemical Engineering Research and Design, 1997, **75**: S32-S48.

[7] Timur A. An investigation of permeability, porosity, & residual water saturation relationships for sandstone reservoirs[J]. The Log Analyst, 1968, **9**(4): 8-17.

[8] Coates G R, Xiao L Z, Prammer M G. NMR Logging: Principles and Applications[M]. Houston: Halliburton Energy Services, 1999: 45-67.

[9] Costa A. Permeability-porosity relationship: a reexamination of the Kozeny-Carman equation based on a fractal pore-space geometry assumption[J]. Geophysical Research Letters, 2006, **33**(2): 2005GL025134.

[10] Cui X, Bustin A M M, Bustin R M. Measurements of gas permeability and diffusivity of tight reservoir rocks: different approaches and their applications[J]. Geofluids, 2009, **9**(3): 208-223.

[11] Darabi H, Ettehad A, Javadpour F, et al. Gas flow in ultra-tight shale strata[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2012, **710**: 641-658.

[12] Nabipour I, Mohammadzadeh-Shirazi M, Raoof A, et al. A data-driven approach for efficient prediction of permeability of porous rocks by combining multiscale imaging and machine learning[J]. Transport in Porous Media, 2025, **152**(4): 29.

[13] Kamrava S, Tahmasebi P, Sahimi M. Linking morphology of porous media to their macroscopic permeability by deep learning [J]. Transport in Porous Media, 2020, **131**(2): 427-448.

[14] Wang Y, Zhang S X, Ma Z, et al. Artificial neural network model development for prediction of nonlinear flow in porous media[J]. Powder Technology, 2020, **373**: 274-288.

[15] Yalamanchi P, Datta Gupta S. Estimation of pore structure and permeability in tight carbonate reservoir based on machine learning (ML) algorithm using SEM images of Jaisalmer sub-basin, India[J]. Scientific Reports, 2024, **14**: 930.

[16] Zhang J, Ma G, Yang Z B, et al. Knowledge extraction *via* machine learning guides a topology-based permeability prediction model [J]. Water Resources Research, 2024, **60**(7): e2024WR037124.

[17] Ma S J, Liu J F, Lin Y J, et al. Prediction of permeability of various geotechnical materials under different temperatures based on physical characteristics and machine learning[J]. Fuel, 2025, **379**: 133109.

[18] Kang Q, Li K Q, Fu J L, et al. Hybrid LBM and machine learning algorithms for permeability prediction of porous media: a

comparative study[J]. Computers and Geotechnics, 2024, **168**: 106163.

[19] 侯亚祺, 张玮, 张鸿, 等. 基于机器学习与粒子群算法的LBM多相流模型优化[J]. 化工学报, 2025, **76**(3): 1120-1132.
Hou Y Q, Zhang W, Zhang H, et al. Optimization of LBM multiphase flow models based on machine learning and particle swarm algorithm[J]. CIESC Journal, 2025, **76**(3): 1120-1132.

[20] Gostick J T. Versatile and efficient pore network extraction method using marker-based watershed segmentation[J]. Physical Review E, 2017, **96**(2): 023307.

[21] Wang M R, Wang J K, Pan N, et al. Mesoscopic predictions of the effective thermal conductivity for microscale random porous media [J]. Physical Review E, 2007, **75**(3): 036702.

[22] 何雅玲, 王勇, 李庆. 格子Boltzmann方法的理论及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2009: 31-51.
He Y L, Wang Y, Li Q. Lattice Boltzmann Method: Theory and Applications[M]. Beijing: Science Press, 2009: 31-51.

[23] Yin P J, Song H H, Ma H R, et al. The modification of the Kozeny-Carman equation through the lattice Boltzmann simulation and experimental verification[J]. Journal of Hydrology, 2022, **609**: 127738.

[24] 阙云, 陈宪, 蒋国平, 等. 基于LBM的2D/3D原状花岗岩残积土细观渗流模拟[J]. 应用基础与工程科学学报, 2024, **32**(1): 193-207.
Que Y, Chen X, Jiang G P, et al. Simulation of 2D/3D mesoscopic seepage in undisturbed granite residual soils based on the LBM[J]. Journal of Basic Science and Engineering, 2024, **32**(1): 193-207.

[25] Qian Y H, D'Humières D, Lallemand P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation[J]. Europhysics Letters (EPL), 1992, **17** (6): 479-484.

[26] 刘洋. 基于格子Boltzmann方法的多孔介质微观渗吸机理研究[D]. 武汉: 中国地质大学, 2022.
Liu Y. Microscopic mechanism study of imbibition in porous media based on lattice Boltzmann method[D]. Wuhan: China University of Geosciences, 2022.

[27] 郭照立, 郑楚光. 格子Boltzmann方法的原理及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2009: 57-74.
Guo Z L, Zheng C G. Theory and Applications of Lattice Boltzmann Method[M]. Beijing: Science Press, 2009: 57-74.

[28] Ghia U, Ghia K N, Shin C T. High-*Re* solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method[J]. Journal of Computational Physics, 1982, **48** (3): 387-411.

[29] 任俊杰. 基于格子Boltzmann方法的页岩气微观流动机理研究[D]. 成都: 西南石油大学, 2015.
Ren J J. Study of microscopic transport mechanisms of shale gas using the lattice Boltzmann method[D]. Chengdu: Southwest Petroleum University, 2015.

[30] 林涛. 多孔介质内单相流动与传热的格子Boltzmann数值研究[D]. 东营: 中国石油大学(华东), 2016.
Lin T. Numerical study on single phase flow and heat transfer in porous media with lattice Boltzmann method[D]. Dongying: China University of Petroleum, 2016.

[31] 谢颖颖. 利用格子Boltzmann方法预测多孔介质中非牛顿流体的渗透率[D]. 武汉: 华中科技大学, 2020.
Xie Y Y. A study on the lattice Boltzmann models for predicting effective permeability of non-Newtonian fluid in porous media[D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2020.

[32] Hou S L, Zou Q S, Chen S Y, et al. Simulation of cavity flow by the lattice Boltzmann method[J]. Journal of Computational Physics, 1995, **118**(2): 329-347.

[33] Basheer I A, Hajmeer M. Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application[J]. Journal of Microbiological Methods, 2000, **43**(1): 3-31.

[34] Nair V, Hinton G E. Rectified linear units improve restricted Boltzmann machines[C]//Proceedings of the 27th International Conference on International Conference on Machine Learning. Haifa, Israel: ACM, 2010: 807-814.

[35] Kingma D P, Ba J. Adam: a method for stochastic optimization[PP/OL]. V9. arxiv(2017-01-30) [2026-01-28]. https://doi. org/10.48550/arXiv.1412.6980.

[36] Tibshirani R. Regression shrinkage and selection *via* the lasso: a retrospective[J]. Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology, 2011, **73**(3): 273-282.

[37] 郁伯铭. 分形多孔介质输运物理[M]. 北京: 科学出版社, 2014: 8-44.
Yu B M. Transport Physics of Fractal Porous Media[M]. Beijing: Science Press, 2014: 8-44.

[38] van der Linden J H, Narsilio G A, Tordesillas A. Machine learning framework for analysis of transport through complex networks in porous, granular media: a focus on permeability[J]. Physical Review E, 2016, **94**(2): 022904.

[39] 孔祥言. 高等渗流力学[M]. 2版. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2010: 26-53.
Kong X Y. Advanced Seepage Mechanics[M]. 2nd ed. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2010: 26-53.

[40] Yasuda T, Ookawara S, Yoshikawa S, et al. Machine learning and data-driven characterization framework for porous materials: permeability prediction and channeling defect detection[J]. Chemical Engineering Journal, 2021, **420**: 130069.

[41] 朱维耀, 王玉普, 邓庆军. 多孔介质细观流动理论及模拟方法[M]. 北京: 科学出版社, 2021: 1-25.
Zhu W Y, Wang Y P, Deng Q J. Mesoscopic Flow Theory and Simulation Method in Porous Media[M]. Beijing: Science Press, 2021: 1-25.

[42] Nie F, Wang H C, Zhao Y X, et al. A universal correlation for flow condensation heat transfer in horizontal tubes based on machine learning[J]. International Journal of Thermal Sciences, 2023, **184**: 107994.

[43] Nguyen Q, Mondelli M. Global convergence of deep networks with one wide layer followed by pyramidal topology[C]//Proceedings of the 34th International Conference on Neural Information Processing Systems, 2020: 11961-11972.

[44] Zhang G Y, Wang Z Z, Mohaghegh S, et al. Pattern visualization and understanding of machine learning models for permeability prediction in tight sandstone reservoirs[J]. Journal of Petroleum Science and Engineering, 2021, **200**: 108142.

[45] Kumar I, Tripathi B K, Singh A. Velocity field prediction for digital porous media using attention-based deep convolutional recurrent neural network[J]. Chemical Engineering Science, 2025, **314**: 121825.

[46] Takbiri S, Kazemi M, Takbiri-Borujeni A, et al. A deep learning approach to predicting permeability of porous media[J]. Journal of