

基于图卷积神经网络和钻孔数据的地层体素建模方法研究

1.1 引言

和地球 46 亿年的历史相比,人类文明历史的万年时间不过是短暂的一瞬间。地球的地质作用及地质对象和人类命运息息相关,一方面,地质作用为人类孕育了丰富的矿产资源,同时也是地震和火山爆发等自然灾害的驱动因素;另一方面,人类活动,如矿产资源开采、工程建设等正在改变地球的生态环境和地下空间^[1]。当前,人类社会正快速发展步入数字时代,但土木、水利等工程建设活动的数字化转型相对滞后。工程地质条件是决定土木、水利等工程建设活动设计与施工方案的根本,因此,建立精细化的三维地质模型是实现岩土与地下工程数字化的一项重要任务。为了建立精细化的地质模型,需要对地层界面和岩土参数的空间分布及其不确定性进行准确表征。

精细化的三维地质建模必须准确再现地质构造(断层、褶皱)、岩层或地层类别(花岗岩、砂土、粉土)、岩土体性质(密度、孔隙率、饱和度等)、地下水位等信息。地质建模的复杂性和地质结构的类型有关。长期的地壳运动形成了 3 种典型的地质构造,分别为倾斜岩层构造、断层构造和褶皱构造,如图 1-1 所示。倾斜岩层构造是最简单的地质结构,其岩层界面一般呈倾斜状态(水平岩层很少见),可以采用插值技术进行地质建模,如多项式插值及克里金方法。断层构造和褶皱构造的地质建模较为复杂,须采用特殊的结构单元^[1-2],并考虑多个岩层界面之间的相互关系,包括岩层在水平方向的不连续性、岩层之间相互交叉或倒置(如逆断层可能导致在相同的钻探位置多次遇到同一地层界面),简单的插值方法已无法适用^[3]。同时,复杂的地质作用造成了岩土材料的空间变异性,不同岩层间岩土体的密度、孔隙率、渗透性、抗剪强度和压缩性存在显著差异,同一岩层内的岩土体亦呈现较强的各向异性和非均质性。例如,河流沉积形成的砂岩与湖泊沉积形成的砂岩的孔隙率和渗透率大相径庭,这是由于不同沉积相的沉积环境和水流强度不同,导致砂岩颗粒的几何形态、泥砂比率和沉积密度不同^[4]。断层不仅会改变岩层的几何布局,如岩层错位,还会改变岩石的物理力学特性,如由于剪切作用,断层构造附近的岩石密度、孔隙率和抗剪强度与距断层较远区域会有一定差异^[5]。褶皱使得倾斜岩层发生弯曲和翘曲,也会导致褶皱区岩石的压缩和张拉特性与其他区域不同^[6]。

在工程建设开始前,岩土工程勘察人员会运用测试手段直接或者间接地获取

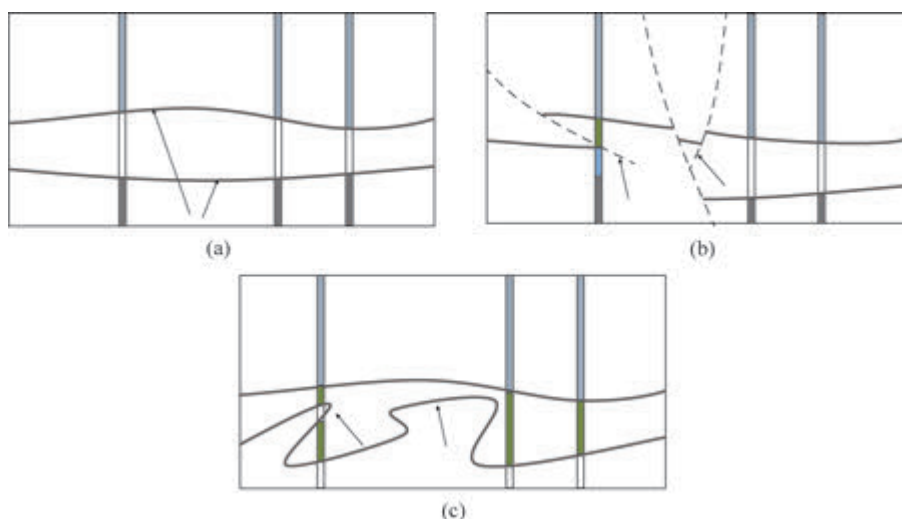


图 1-1 地层分布类型

(a) 倾斜岩层；(b) 断层；(c) 褶皱

工程建设场地的水文、地质、环境特征和岩土体性质,进而为岩土工程的施工、设计和稳定性评价提供工程资料。在岩土工程勘察中,可以通过勘探钻孔直接得到地层类别的信息,但是由于钻孔数量有限,工程师只能获取局部地层分布和岩土体参数信息。因此,工程地质建模的过程中充满着不确定性,其来源主要有 3 类:①观测误差;②地层分布和岩土参数固有的空间变异性;③地质知识的缺乏。其中,观测误差和地层分布及岩土参数固有的空间变异性可以通过增加测量次数或使用更先进的测量设备来减少,它们的不确定性可以通过概率密度函数进行量化分析。因此,如何融合多源数据,考虑地层分布和岩土参数的空间变异性并量化其不确定性,从而进行三维精细化地质建模是当前的研究热点。

1.2 岩土工程地层模型不确定性量化及预测研究现状

利用岩土勘察数据对地层分布及其边界进行推断(如上软下硬地层交界面)是岩土工程三维地质建模的研究热点。由于地层分布复杂多变以及钻探数据具有稀疏性,尚未有一种有效的准确预测地层分布的方法。在利用钻孔或原位测试数据对地层的三维空间分布进行重构方面,国内外学者做了大量的研究工作,主要包括表面建模方法和体素建模方法^[7-18]。表面建模对地层界面进行建模,不同界面之间的地层属于同一种地层类型,即将地层界面的高度视为与水平位置相关的数学函数,该方法主要适用于序列沉积的地层分布类型^[10-12]。体素建模将建模区域离散为结构化的体素网格,每个体素代表一种地层类型。体素建模没有层面约束,适

合处理复杂多变的地质情况^[13-14]。两点地质统计和多点地质统计是广泛应用的体素建模方法。两点地质统计方法通过分析两个空间点之间的相关性进行地层分布建模,每个体素的地层类型被视为随机变量,主要方法包括泊松过程^[19]、高斯过程^[20]和马尔可夫过程^[21]。泊松过程假设每个体素的地层类型服从泊松分布,具有稳定且独立的增量,该模型只能分析两种地层类型^[22]。高斯过程适用于连续变量,而地层类型属于离散变量,因此,研究人员将高斯过程转换为截断高斯过程和指示克里金法,使其适用于地层分类问题^[23-24]。然而,高斯过程的计算负担与空间点数量的二次方呈正相关,限制了其在大规模地质建模中的适应性^[25]。马尔可夫过程假设不同点之间的相关性服从马尔可夫特性^[26],减轻了计算需求^[27],使其适用于大尺度区域的建模分析。基于马尔可夫过程的地层分布建模方法有一维马尔可夫链、耦合马尔可夫链和马尔可夫随机场。然而,马尔可夫过程在估计水平转移概率矩阵时存在困难,这主要是因为钻孔位置在水平方向上不连续^[28]。为了准确估计水平转移矩阵,研究人员利用瓦尔特(Walther)定律将水平转移概率矩阵与垂直转移概率矩阵关联^[22]。需要注意的是,瓦尔特定律只对同源地层的序列沉积地层有效^[29-30]。一般来说,两点地质统计方法采用平稳假设,即不同空间点之间的相关性保持不变,相关性大小仅取决于它们之间的距离。这种平稳假设可能与实际不一致,在实际工程中,不同空间点之间的相关性随它们之间的距离变化而变化^[31]。多点地质统计方法是一种基于像素块的体素地质建模方法,它通过从训练图像中提取和利用相似的地层变化特征,克服了两点地质统计方法的局限性^[32]。多点地质统计方法不依赖于平稳相关性假设,与实际工程情况更加接近^[33]。研究人员探索将多点地质统计方法与机器学习技术相结合,以进一步增强其适应性和准确性,例如迭代卷积极限梯度提升模型^[31]。相对于两点地质统计方法,多点地质统计方法依赖于高质量的训练图像。然而,训练图像的获取通常是主观的,与待建模场地真实地层分布可能存在一定出入^[20]。

综上所述,目前针对岩土工程地层体素建模的研究主要集中于两点地质统计方法和多点地质统计方法,对基于深度学习的地质建模方法的研究较少^[31]。传统的两点地质统计方法和多点地质统计方法存在计算消耗大或建模精度低的问题,而图卷积神经网络能够有效捕捉复杂的空间相关性并处理非平稳数据,从而构建更加精细的地质模型。图卷积网络是一种半监督学习方法,其输入包含整个建模区域,只在标记的钻孔数据上进行训练。这种方法不仅提高了地质模型的准确性,还解决了多点地质统计方法依赖训练图像的问题。此外,图卷积网络通过对图结构数据进行卷积操作,减少了大型协方差矩阵求逆的计算消耗,有效地降低了计算复杂度,使其在处理大量工程地质数据时更加高效。

1.3 基于马尔可夫链模型的地层体素建模

1.3.1 随机过程简介

随机过程是一种用于描述系统在时间或空间上随机变化的数学模型,广泛应用于物理、金融、工程和生物学等领域。随机过程定义为一系列随机变量的集合,用来表示系统随空间或时间演化的随机行为。形式上,随机过程可以表示为 $\{X_t: t \in T\}$,其中,指标 t 为时间, T 为随机过程的指标集,随机变量 X_t 为过程在 t 处的状态。指标集 T 亦可以是离散的或连续的,如 $\{X_t: t=0,1,2,\dots\}$ 表示以非负整数为指标的离散时间随机过程, $\{X_t: t \geq 0\}$ 表示以非负实数为指标的连续时间随机过程。随机过程的状态空间为随机变量 X_t 所有可能取值的集合,状态空间可以是离散的或连续的。离散状态随机过程指 X_t 只能取有限或可数的多个值,例如标准贯入试验锤击数、掷硬币的正反面;连续状态随机过程是指 X_t 可以取连续的数值,如土的黏聚力、气温的变化。常见的随机过程有马尔可夫链、马尔可夫随机场、独立增量过程、泊松过程、高斯随机过程等。

1.3.2 马尔可夫链模型

马尔可夫链(Markov chain)是一类满足“马尔可夫性”的随机过程。考虑一个时间离散的马尔可夫链 $\{X_t: t=0,1,2,\dots\}$,其状态空间为有限集合 $S=\{s_1, s_2, \dots, s_n\}$ 。为了描述马尔可夫链的概率性质,需要给出不同时间点时系统处于某一状态的概率,即 $p\{X_0=s_0, X_1=s_1, \dots, X_n=s_n\}$ 的值。初始概率分布为初始时间点时系统处于各个状态的概率分布,记 π_i 为系统在初始时刻处于状态 s_i 的概率,则 $\pi_i=p\{X_0=s_i\}, i=1,2,\dots,n$,其中 X_0 为系统在初始时刻的状态。系统从一个状态转移到另一个状态的“转移概率”记为 $p\{X_n=s_n | X_0=s_0, X_1=s_1, \dots, X_{n-1}=s_{n-1}\}$ 。根据马尔可夫性质,条件概率 $p\{X_n=s_n | X_0=s_0, X_1=s_1, \dots, X_{n-1}=s_{n-1}\}$ 只依赖于当前状态 $X_{n-1}=s_{n-1}$,而与之前的状态序列 $\{X_0, X_1, \dots, X_{n-2}\}$ 无关,即 $p\{X_n=s_n | X_0=s_0, X_1=s_1, \dots, X_{n-1}=s_{n-1}\}=p\{X_n=s_n | X_{n-1}=s_{n-1}\}$ 。这意味着,满足“马尔可夫性”的系统当前所处的状态已知,就可以完全确定其未来的行为,而无须知道系统之前经历的状态序列。记 $p_{ij}=p\{X_{t+1}=s_j | X_t=s_i\}$,即给定当前状态 $X_t=s_i$,系统在下一时刻 $t+1$ 转移到状态 s_j 的概率为 p_{ij} 。为了描述系统所有可能的状态转移,将所有的转移概率 p_{ij} 组织成一个矩阵,这个矩阵称为状态转移矩阵 \mathbf{P} 。对于一个有 n 个状态的系统,转移矩阵 \mathbf{P} 是一个 $n \times n$ 的矩阵,其中第 i 行第 j 列的元素表示从状态 s_i 转移到状态 s_j 的概率。转移矩阵 \mathbf{P} 的每一行之和为1。通过对状态转移矩阵的分析,可以获得系统的长期行

为和稳态分布。稳态分布是指当时间趋于无限长时,系统达到稳定状态的概率分布。在稳态下,各状态的概率分布不再随时间变化。稳态分布 π 满足以下方程:

$$\pi P = \pi \quad (1-1)$$

其中, π 是一个行向量,其元素之和为1。

具体而言,要找到稳态分布需要求解以下线性方程组:

$$\pi_j = \sum_{i=1}^{n_1} \pi_i P_{ij} \quad (1-2)$$

其中, π_j 为系统在长期运行后处于状态 s_j 的概率; n_1 为转移步数。

在一些马尔可夫链中,某些状态一旦被访问就无法离开,这些状态称为吸收状态。如果状态 s_i 是吸收状态,则 $p_{ii}=1$ 且 $p_{ij}=0$ (对于 $j \neq i$)。常返态是指系统从该状态出发,最终一定能够返回该状态。暂态是指系统从该状态出发,可能永远不会返回该状态。以 f_i 表示初始状态为 i 的马尔可夫链迟早再进入状态 i 的概率,若 $f_i=1$,则状态 i 为常返态;若 $f_i<1$,则状态 i 为暂态。如果一个马尔可夫链中的所有状态都是常返态,并且从任意状态都可以到达其他任意状态,则该马尔可夫链称为遍历的。具有遍历性的马尔可夫链,所有状态的稳态分布都存在且唯一。遍历性可保证模型在长期预测中的稳定性和一致性。

将马尔可夫链模型应用于地质建模包括几个关键步骤:数据收集,定义状态空间,网格划分,确定初始概率分布,估计转移概率矩阵,模拟和预测地层分布,模型验证。其中,第一步即数据收集是建模的基础。地质建模的数据通常来自现场勘探钻孔、物探等,包括地层类型、岩土体属性(如密度、孔隙度、剪切强度等)、地质构造等。这些数据的质量和数量直接影响模型的精度和可靠性,应尽可能确保数据的真实性和代表性。第二步是定义状态空间,明确状态空间的范围和各状态的具体含义。在地质建模中,状态空间是一个有限集合,对应不同的地层类型,例如黏土、砂岩、页岩、石灰岩等。第三步,网格划分并确定初始概率分布。将待建模的二维或三维物理空间划分成一系列的小矩形或小长方体,根据钻孔数据统计不同地层类型在初始位置的出现频率,从而估计初始状态的概率分布。第四步,估计转移概率矩阵,主要通过统计已有的钻孔数据或其他地质信息对转移概率矩阵进行估计。具体来说,通过统计相邻钻孔中地层类型的变化情况,计算不同地层类型之间的转移频率,得到从一种地层类型转变到另一种地层类型的转移概率。第五步,利用已经确定的初始概率分布和转移概率矩阵,对未知区域的地层分布进行模拟和预测。通过蒙特卡罗模拟随机采样,生成多组地层分布模型,以量化地层分布的不确定性。最后的环节是模型验证,常用的方法为交叉验证。

以上步骤中,利用钻孔数据估计转移概率矩阵是难点。建模过程通常会引入竖直转移矩阵和水平转移矩阵,以模拟竖直和水平方向上地层类型的转换概率。由于钻孔的竖直方向有连续的样本,竖直方向转移概率矩阵可根据钻孔资料直接

统计得到^[21]。但钻孔在水平方向是稀疏分布的,水平方向没有连续的地层样本信息,因此水平转移概率矩阵难以通过统计方法直接估计^[21]。有学者提出,可以先估计竖直转移矩阵,然后根据瓦尔特定律建立水平转移矩阵和竖直转移矩阵的联系,从而估计水平转移矩阵^[21,34]。

1.4 基于马尔可夫随机场模型的地层体素建模

马尔可夫随机场(Markov random field, MRF)是具有“马尔可夫性”的随机场,是一种用于描述空间数据特征的统计模型,广泛应用于图像处理、计算机视觉和地质建模等领域。随机场是随机过程在多维空间的拓展,两者之间的区别在于:随机过程的指标参数一般是标量实数,随机场的指标参数为多维矢量(如二维或三维空间坐标)。为了利用马尔可夫随机场模型进行地层体素建模,采用矩形网格对待建模的二维区域进行划分和标记,所有矩形单元的集合记为 $M = \{1, 2, \dots, m_r\}$, 其中 m_r 为矩形网格的个数。第 i 个矩形单元和它周围的 8 个矩形单元共节点或边,这 8 个矩形单元定义为该矩形单元的邻域,记为 U_i 。邻域系统可用以分析空间上的马尔可夫性。邻域的定义可以根据具体应用场景确定,例如图像处理中的四邻域、八邻域等。在地层分布建模中,邻域可以根据地质结构和采样位置的分布确定。

在离散的网格区域上定义 m 个随机变量组成的随机场 $X = \{X_1, X_2, \dots, X_m\}$, $X_i (i \in M)$ 从状态空间 $S = \{s_1, s_2, \dots, s_n\}$ 中取值。记事件 $X = s$ 表示联合事件($X_i = s_i, i \in M$), $s = \{s_1, s_2, \dots, s_m\}$ 表示对所有网格单元的一次赋值,即随机场 X 的一次抽样的样本,则 $S = \{s = \{s_1, s_2, \dots, s_m\} \mid s_i \in S, i \in M\}$ 表示随机场 X 所有可能的取值情况。满足以下条件的随机场 X 称为马尔可夫随机场^[35-36]:

$$p\{X = s\} > 0, \quad s \in S \quad (1-3)$$

$$p(X_i = s_i \mid X_{M-\{i\}} = s_{M-\{i\}}) = p(X_i = s_i \mid X_{U_i} = s_{U_i}) \quad (1-4)$$

式中, $X_{M-\{i\}}$ 表示除第 i 个网格单元的其他所有网格单元对应的随机变量的集合; X_{U_i} 表示第 i 个矩形单元的邻域网格单元的随机变量的集合。式(1-4)表示马尔可夫随机场的马尔可夫性,即对于任意位置 i , 其状态 X_i 仅依赖于其邻域 U_i 的状态。根据马尔可夫性假设,系统的联合概率分布可以分解为条件概率的乘积:

$$p(X) = \frac{1}{Z} \prod_i p(X_i \mid X_{U_i}) \quad (1-5)$$

式中, Z 为归一化常数,用于确保概率分布的总和为 1。

根据 Hammersley-Clifford 定理与吉布斯分布,系统的联合概率分布可以进一步写为

$$p(X) = \frac{1}{Z} \exp[-E(X) \mid T_t] \quad (1-6)$$

式中, T_i 表示温度; $E(X)$ 为能量函数, 其计算表达式为

$$E(X) = \sum_{c \in C} V(X) \quad (1-7)$$

其中, $V(X)$ 为团势函数; C 为马尔可夫无向图中所有团的集合。有关团和团势的详细解释可参考文献[37-38]。团势函数的选择和设计是马尔可夫随机场模型构建的关键之一, 它决定了模型如何捕获空间数据的内在结构和相互依赖关系。势函数的具体形式通常包含一系列参数, 这些参数决定了模型的行为。常见的势函数形式包括一阶势函数和二阶势函数。一阶势函数描述单个位置的状态能量, 二阶势函数描述相邻位置之间的状态能量。在地层分布建模中, 团势函数须要反映地层类型之间的空间连续性和相似性, 例如, 两个相邻位置具有相似地层类型的概率较高, 相应的势函数值较低, 表示这种状态配置的能量较小, 更有可能出现。团势函数的构建可参考文献[36]。通过合理设计势函数, 可以准确地表征地层的空间分布特征。马尔可夫随机场模型参数估计通常采用最大似然估计或贝叶斯理论等方法。

1.5 基于图卷积网络模型的地层体素建模

1.5.1 图卷积网络算法简介

图卷积网络(graph convolutional networks, GCN)是一种专为处理图结构数据而设计的神经网络。在图卷积网络中, 数据被概念化为一个图 $G=(V, E)$, 其中 V 表示节点集合, E 表示连接这些节点的边集合, 图中每个节点 v 都对应一个特征向量 \mathbf{x}_v 。整个图由表示节点之间连接的邻接矩阵 \mathbf{A} 和表示每个节点特征的特征矩阵 \mathbf{X}_f 组成。图卷积网络的基本操作是图卷积, 它通过聚合其邻居节点的特征来更新每个节点的特征向量 \mathbf{x}_v 。这种卷积操作是从欧几里得数据到图结构数据的传统卷积的泛化, 旨在学习一个函数, 该函数能够利用节点本身及其邻居节点的特征, 生成更新后的节点特征向量。图卷积操作的数学形式如下:

$$\mathbf{H}^{(l+1)} = \sigma(\tilde{\mathbf{D}}^{-1/2} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{D}}^{-1/2} \mathbf{H}^{(l)} \mathbf{W}^{(l)}) \quad (1-8)$$

式中, $\mathbf{H}^{(l)}$ 为第 l 层的特征矩阵; $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \mathbf{I}$, 且 \mathbf{A} 为邻接矩阵; $\tilde{\mathbf{D}}$ 为 $\tilde{\mathbf{A}}$ 的度矩阵; $\mathbf{W}^{(l)}$ 为第 l 层的可训练权重矩阵; σ 为非线性激活函数。

图 1-2 所示为图卷积网络的邻域聚合过程, 其输入的拓扑图具有 4 个节点和 5 条边。在邻域聚合过程中, 需要分别计算邻接矩阵 \mathbf{A} 、度矩阵 \mathbf{D} 和特征矩阵 $\mathbf{H}^{(l)}$ 。邻接矩阵 \mathbf{A} 表示节点之间的连接特征, 其中非零元素表示两个节点之间存在边。度矩阵 \mathbf{D} 是一个对角矩阵, 其中每个对角元素对应于连接到该节点的边的数目。特征矩阵 $\mathbf{H}^{(l)}$ 包含每个节点的特征向量 \mathbf{x}_v 。将单位矩阵 \mathbf{I} 添加到邻接矩阵 \mathbf{A} , 得

到新的邻接矩阵 $\tilde{\mathbf{A}}$ 。类似地,将度矩阵 \mathbf{D} 更新为 $\tilde{\mathbf{D}}$ 以反映 $\tilde{\mathbf{A}}$ 的变化。然后利用新的度矩阵 $\tilde{\mathbf{D}}$ 标准化新的邻接矩阵 $\tilde{\mathbf{A}}$ 以得到缩放的邻接矩阵 $\hat{\mathbf{A}}$ 。该缩放的邻接矩阵 $\hat{\mathbf{A}}$ 表示邻居节点的特征矩阵 $\mathbf{H}^{(l)}$ 的权重,反映特征聚合过程中相邻节点特征向量对目标节点的影响。在此步骤中,相邻节点和目标节点的特征向量被聚合以更新目标节点的特征向量。图 1-3 表示图卷积网络的信息更新过程。在此步骤中,更新后的节点特征矩阵作为多层感知机的输入,并根据钻孔位置的已知地层类型数据通过反向传播训练不断迭代优化权重。

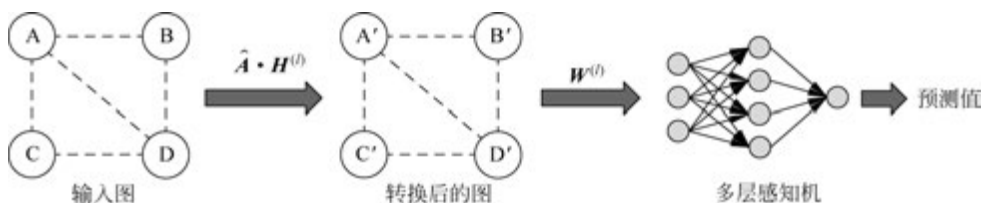


图 1-3 图卷积网络信息更新过程示意图

图卷积网络模型的训练过程在于优化其各层的权重矩阵 $\mathbf{W}^{(l)}$,使损失函数最小。该损失函数通常与拓扑图中的节点分类或链接预测等具体需求对应。三维地质建模的需求是利用钻孔揭露的已知地层类型对每个空间点进行分类。因此,地质建模采用交叉熵损失函数,以衡量地层的预测概率分布与实际概率分布之间的差异。交叉熵的表达式如下:

$$H(p, q) = - \sum_i p(i) \lg q(i) \quad (1-9)$$

式中, $H(p, q)$ 为两个概率分布 p 和 q 之间的交叉熵; $p(i)$ 代表实际的地层分布; $q(i)$ 代表由图卷积网络预测的地层分布。

1.5.2 拓扑图构建

在地质建模的拓扑图构建过程中,首先将待建模区域离散化为图节点,并通过这些离散节点构建拓扑图来表征整个建模区域。拓扑图中每个节点的特征向量 \mathbf{x}_v 由地层类型和对应的空间坐标 (x, y, z) 组成。这种将空间坐标包含于特征向量的设定符合托布勒地理学第一定律,即空间位置更近的地质体的特性更相似。在三维地质建模中,每个节点的空间坐标包括三个空间分量。因此,每个节点的特征向量大小为 1×4 ,包括地层类型及其空间坐标。这种定义特征向量的方式可以确保模型能够准确捕捉地层分布的复杂空间相关性。在地质建模中,不同空间点之间的连接并不像社交或引用网络中的连接那样明确,需要开发新的方法来建立图节点之间的边。借鉴马尔可夫随机场模型中的邻域概念,本节采用长方体邻域系统构建每个空间点与邻域内其他点之间的连接。该长方体邻域系统的特征为

3 个超参数(即长方体的长度、宽度和高度),分别表示为 I_x 、 I_y 和 I_z 。这些参数确定了一个空间点的影响范围,定义了单个节点的地层类型在拓扑图中的传播范围。为了准确反映不同空间点之间的复杂关系,采用高斯核对节点之间的边赋予权重。高斯核的公式如下:

$$Q(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp \left\{ -\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2\eta^2} \right\} \quad (1-10)$$

式中, $Q(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 表示连接第 i 个节点和第 j 个节点的边的高斯权重; $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$ 为第 i 个节点和第 j 个节点之间的欧几里得距离; η 为高斯核的空间方差。显然上式亦满足托布勒地理学第一定律。

如果将每个节点与其长方体邻域内的所有节点以及钻孔位置节点都建立连接,将导致图卷积网络在三维地质建模中的计算负担过重。为提高计算效率,使用地层的全局分布特征优化建模过程:首先统计所有钻孔中各类地层出现的概率,然后将这些统计概率嵌入节点的特征向量 \mathbf{x}_v 中。因此,每个节点的特征向量 \mathbf{x}_v 包含 3 个部分:标记的地层类型、空间坐标和地层类型的统计概率^[39]。图 1-4 展示了三维地质建模的拓扑图构建过程,以 x 、 y 和 z 方向上的 $4 \times 1 \times 4$ 建模区域为例。图中左侧为已知的钻孔数据区域,右侧为待预测区域。钻孔数据显示存在 2 种地层类型,分别标记为第 0 层和第 1 层。拓扑图的具体构建步骤如下:首先将建模区域离散化为 $4 \times 1 \times 4$ 节点网格,每个节点对应一个空间点;然后建立包含所有节点属性的特征向量(16×4),其中每行代表一个节点的特征向量,包含地层类型和空间坐标信息。接着在相邻系统内建立节点间的连接关系(如图 1-4 中绿色长方体所示),将空间相关性转化为拓扑图中的边,并基于节点对之间的欧几里得距离计算高斯权重,形成 16×16 的加权邻接矩阵。图 1-4 右下角的示例节点通过深色虚线展示了与其他节点的连接关系,其中红色虚线表示已赋权的边。最后,利用钻孔揭示的地层类型概率分布更新特征矩阵,形成 16×6 的增强特征矩阵,从而更好地体现地层分布的全局特征。

1.5.3 模型架构

图卷积网络模型架构如图 1-5 所示。该模型包括一个输入层、三个图卷积层(graph convolution layer, GCL)和一个输出层。输出层的预测转换采用 Softmax 函数以实现不确定性量化。三个 GCL 均采用 ReLU 激活函数。此外,每个 GCL 后面都加入一个 Dropout 层,以降低过拟合的风险,提高模型的泛化能力。GCL 的通道数分别为 32、16 和 16。图卷积网络模型的超参数包括长方体邻域系统的长度、宽度和高度(即 I_x 、 I_y 和 I_z)以及高斯核的方差 η 。这些超参数采用贝叶斯优化程序进行优化,以确定最有效的参数组合,从而确保在不同地质情景下模型性能最佳。