**PANDA-NN: улучшенный алгоритм для определения контактного угла по**

**одномерному профилю плотности и классификация поверхностей**

***Семенчук А.А.1, Кондратюк Н.Д.1,2,3, Копаничук И.В.1,4***

*Студент, 4 курс бакалавриата*

*1Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

*2Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

*3Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", Москва, Россия*

*4АНО "Институт искусственного интеллекта", Москва, Россия  
E-mail: semenchuk.aa@phystech.edu*

Поверхностные явления определяют поведение жидкостей в пористых средах и на смачиваемых поверхностях. Правильный учет этих явлений лежит в основе точных континуальных моделей [1]. Угол смачивания является ключевой величиной, количественно характеризующей поверхностные явления. Ранее была предложена модель для классификации поверхностей раздела в щелевых порах [2], на основе которой разработан метод PANDA для определения угла смачивания по одномерному профилю плотности [3]. Несмотря на высокую точность на синтетических данных, при анализе реальных систем, полученных в результате молекулярного моделирования, алгоритм демонстрирует существенную погрешность.

Целью данной работы является разработка усовершенствованного алгоритма PANDA-NN, учитывает наличие ненулевого слоя смачивания между жидкостью и твердой фазой как дополнительный оптимизируемый параметр, а также включает классификатор на основе графовой нейронной сети архитектуры PointNet++ [4]. Данный классификатор по трехмерному расположению атомов определяет тип поверхности раздела (капля, пончик, червь, рулет, дырка или слой) и автоматически выбирает соответствующее уравнение профиля плотности для последующей оптимизации.

Для валидации предложенного подхода было проведено молекулярное моделирование систем, состоящих из подложки кальцита и смеси н-декана с водой при различных объемных долях углеводорода. Каждая полученная поверхность раздела была классифицирована обученной нейронной сетью с достоверностью более 99%, после чего для определения угла смачивания применялись как исходный алгоритм PANDA, так и разработанный PANDA-NN. Среднеквадратичная погрешность (RMSE) предсказания угла смачивания относительно экспериментального значения 120° [5] при использовании PANDA-NN оказалась на 40% ниже по сравнению с исходным алгоритмом.

Таким образом, был разработан полностью замкнутый алгоритм PANDA-NN, который с высокой точностью классифицирует поверхности раздела и предсказывает угол смачивания по одномерному профилю плотности. Алгоритм успешно апробирован на реальных системах и демонстрирует значительное повышение точности по сравнению с предыдущей версией.

*Исследование выполнено при поддержке РНФ, проект № 24-73-00129.*

**Литература**

1. Nichita D. V. Volume-based phase stability analysis including capillary pressure // Fluid Phase Equilib. 2019. V. 492. P. 145-160.

2. Kopanichuk I. V. [et al]. The shape of the liquid-liquid interface for oil/water mixtures in slit pores // Colloids Surf., A. 2020. V. 601: 124884.

3. Semenchuk A. A., Kondratyuk N. D., Kopanichuk I. V. PANDA: Predicting angle from nanoscale density analysis // Colloids Surf., A. 2024. V. 135994 : 1-13.

4. Qi C. R., Yi L., Su H., Guibas L. J. PointNet++: Deep hierarchical feature learning on point sets in a metric space // Adv. Neural Inf. Process. Syst. 2017. V. 30.

5. Zhao J., Yao G., Wen D. Salinity-dependent alterations of static and dynamic contact angles in oil/brine/calcite systems: a molecular dynamics simulation study // Fuel. 2020. V. 272: 117615.