На правах рукописи



## Карсанина Марина Владимировна

# МОДЕЛИРОВАНИЕ И РЕКОНСТРУКЦИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПОРИСТЫХ СРЕД С ПОМОЩЬЮ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ

Специальность 25.00.10 — «Геофизика, геофизические методы поисков полезных ископаемых»

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

Москва — 2016

Работа выполнена в федеральном бюджетном учреждении науки Институте динамики геосфер Российской академии наук (ИДГ РАН)

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук <b>Турунтаев Сергей Борисович</b> кандидат физико-математических наук <b>Герке Кирилл Миронович</b>					
Научный консультант:						
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук Любушин Алексей Александрович, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики Земли им. О.Ю. Шмидта Российской академии наук, заведующий лабораторией физики колебаний пробных масс					
	кандидат физико-математических наук <b>Михайлов Дмитрий Николаевич</b> , Московский научно-исследовательский центр Шлюмберже, старший научный сотрудник					
Ведущая организация:	Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский					

физико-технический институт (государственный университет)»

Защита состоится «<u>12</u>» <u>мая</u> 2016 г. в <u>11-00</u> часов на заседании диссертационного совета Д002.050.01 на базе федерального бюджетного учреждения науки Института динамики геосфер Российской академии наук по адресу: 119334 г. Москва, Ленинский проспект, д.38, корпус 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института динамики геосфер Российской академии наук, а так же на сайте института http://idg1.chph.ras.ru/

Автореферат разослан «\_\_\_\_» \_\_\_\_ 2016 года.

Ученый секретарь диссертационного совета Д002.050.01, к.ф.-м.н.

n.

Рыбаков В.А.

#### Общая характеристика работы

При всем многообразии естественных и искусственных многофазных материалов особый интерес представляют пористые среды. Для расчета эффективных физических свойств пористых сред, в том числе фильтрационных характеристик пород, требуется трехмерная информация о внутреннем строении пористых образцов. Стохастическая реконструкция структуры пористых сред с помощью корреляционных функций является актуальной ввиду необходимости получать трехмерные данные в случае, когда доступна только двухмерная информация о строении пористой среды. Так, многие методы изучения структуры пористых образцов такие как, например, электронная микроскопия, шлифы, изначально позволяют получить только двухмерную информацию. Большинство существующих трехмерных методов исследования структуры либо слишком затратные и требуют специализированной приборной базы, либо не предоставляют необходимого соотношения между размером исследуемого образца и разрешением съемки. Двухмерные методы имеют больший диапазон размеров изучаемых образцов и разрешений, дешевле и позволяют точнее обработку изображений, В производить частности, сегментацию на составляющие образец фазы. Проблемы трехмерного моделирования строения породы особенно существенны для активно развивающегося направления цифровой петрофизики. Данное направление ставит своей целью определение физических свойств пород-коллекторов нефти и газа по данным об их строении. Решение задач петрофизического моделирования на основе трехмерных стохастических реконструкций позволяет значительно повысить точность информации о структуре породы и снизить издержки ее исследования.

Применение статистических методов описания структуры, таких как корреляционные функции, использовавшиеся в работе, позволяют решать не только обратную, но и прямую задачу создания структур пористых сред, обладающих желаемыми физическими свойствами. Существующие методы стохастической реконструкции либо не обладают достаточной точностью, либо не позволяют реконструировать анизотропные структуры ввиду использования осреднения статистической информации по всему объему. Всё это обуславливает актуальность и практическую важность разработки новых методов реконструкции, а также фундаментальной проработки вопросов оценки точности реконструкций и верификации методики на различных искусственных и естественных пористых средах.

<u>Целью данной работы</u> является создание методов описания и реконструкции пористых сред на основе корреляционных функций и верификация разработанных методов на примере реальных геофизических объектов: горных пород, почвогрунтов, и прочих многофазных материалов.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Разработать и оптимизировать методы описания и реконструкции внутреннего строения анизотропных пористых сред с помощью корреляционных функций.

2. Исследовать влияние количества информации, содержащейся в различных наборах корреляционных функций, на качество и сходимость реконструкций. По результатам исследования предложить метод расчета вклада каждой функции в алгоритм реконструкции.

3. Разработать методы моделирования структур пористых тел с желаемыми физическими свойствами на примере проницаемости.

4. Предложить метод численного описания внутреннего строения пористой среды на основе корреляционных функций.

5. Апробировать разработанные методы на различных пористых средах с определением физических свойств с помощью моделирования в масштабе порового пространства, оценить применимость методик к исследованию фильтрационных характеристик пород-коллекторов нефти и газа, включая нетрадиционные.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Метод расчета корреляционных функций в ортогональных и диагональных направлениях без усреднения данных по пространству, который позволяет восстанавливать внутреннее строение анизотропных пористых сред и повышает точность реконструкций в целом.

2. Способ расчета вклада каждой корреляционной функции при реконструкции пропорционально максимальной энергии в алгоритме оптимизации имитацией «отжига».

3. Метод построения численных моделей пористых структур с желаемыми физическими свойствами на основе аналитически заданных корреляционных функций (на примере проницаемости).

4. Метод численной оценки газопроницаемости керогена в отложениях баженовской свиты по данным стохастических реконструкций, полученным из двухмерных РЭМ изображений.

<u>Научная новизна</u>: Методы, разработанные в рамках данной диссертационной работы, расширяют возможности построения численных моделей анизотропных пористых сред. Метод описания и реконструкции двухфазных структур с помощью корреляционных функций, рассчитанных по ортогональным и диагональным направлениям, и метод стохастической оптимизации имитации «отжига» с упрощенным пересчетом корреляционных функций впервые сделали возможным применение данных подходов для анизотропных структур.

Впервые проведен численный анализ влияния используемого набора корреляционных функций качество реконструкций обнаружена на И корреляционных необходимость «уравновешивания» функций BO время реконструкции согласно их информационной значимости. В отличие от ранее опубликованных работ предложен универсальный метод расчета коэффициентов корреляционных функций и обоснована его эффективность.

В развитие предыдущих работ показана возможность создания численных моделей пористых структур на основе аналитически заданных корреляционных функций, в том числе с желаемыми физическими свойствами (на примере проницаемости).

Более точно проведено определение эффективных физических свойств пористых материалов по двухмерным и трехмерным данным об их строении с помощью стохастической реконструкции на основе корреляционных функций и последующего моделирования в масштабе пор. Гибридная реконструкция развила идеи предыдущих авторов и объединила преимущества двух различных подходов к

моделированию структуры пористых сред: метода корреляционных функций и последовательного метода частиц для моделирования осадочных пород. Впервые выполнен расчет газопроницаемости керогена в отложениях баженовской свиты. Впервые было предложено использовать корреляционные функции для описания и реконструкции структуры почвогрунтов.

Научная и практическая значимость состоит в разработанном методе расчета корреляционных функций в ортогональных и диагональных направлениях без усреднения по пространству, который применим для работы с анизотропными структурами. Данный метод демонстрирует значительные улучшения точности по предыдущими работами, В сравнению С частности, полное совпадение реконструкций и оригиналов для некоторыхтестовых изображений. Кроме того, вычислительно эффективного важным является создание простого И универсального метода выбора весов для каждой корреляционной функции, используемой реконструкции. Отработанные для приемы описания И характеризации пористых сред, включающие в себя расчеты корреляционных функций различных типов, морфометрический анализ распределения пор по размерам, параметры теории локальной пористости и др., могут применяться для комплексного анализа пористых сред.

Предложенная трехмерная модель керогена в сланцеподобных горных породах дает возможность рассчитывать газопроницаемость, тогда как обычные лабораторные методы не имеют возможности получить достоверные данные. Логичное дополнение методологии другими фазами развитие И подхода стохастических реконструкций позволит решать задачи составления многомасштабных моделей пористых сред, объединяя изображения из различных источников.

подтверждением достоверности научных выводов Основным служит сопоставление полученных теоретических результатов с данными лабораторных и экспериментов широком наборе фактического численных на материала. Достоверность проработанных теоретических выкладок И разработанных алгоритмов подтверждается публикациями в ведущих рецензируемых журналах и международных конференциях. Достоверность результатов докладами на

численного моделирования и стохастических реконструкций подтверждается многократной повторяемостью и воспроизводимостью полученных результатов и их верификацией на аналитических решениях. Результаты находятся в соответствии с результатами, полученными другими авторами.

Промежуточные и итоговые результаты работы докладывались на семинарах ИДГ РАН в 2011 – 2014 годах, в устных докладах на российских научных конференциях: «XIV совещание географов Сибири и Дальнего Востока», 14-16 сентября 2011 г., Владивосток; «Суперкомпьютерные технологии в нефтегазовой отрасли», 6-8 декабря 2011 г., Москва; «Суперкомпьютерные технологии в нефтегазовой отрасли», 28-30 ноября 2012 г., Москва; «Суперкомпьютерные технологии в нефтегазовой отрасли. Математические методы, программное и 14-15 ноября 2013 г., Москва; «Практическая аппаратное обеспечение», 5 - 72012 микротомография». декабря Г., Казань: «Практическая микротомография», 2-4 октября 2013 г., Москва; Балтийская школа-семинар «Петрофизическое моделирование осадочных пород», 17-21 сентября 2012 г., Петергоф; «Петрофизическое Балтийская школа-семинар моделирование осадочных пород», 16-18 сентября 2013 г., Петергоф; Балтийская школа-семинар «Петрофизическое моделирование осадочных пород», 14-18 сентября 2015 г., Петергоф; «Ion transport in organic and inorganic membranes», 2-7 июня 2013 г., Краснодар; Техническая конференция SPE «ПЕТРОФИЗИКА XXI» 3-5 июня 2014г., Тюмень; Геокрым-2015, 18-22 мая 2015 г., Алушта; а так же на международных научных конференциях в устных и стендовых докладах: «Pedometrics 2011 – Innovations in pedometrics», 31 августа-2 сентября 2011 г., Трест, Чехия; «EGU General Assembly», 22–27 апреля 2012 г., 7–12 апреля 2013 г. и 12–17 апреля 2015 г., Вена, Австрия; «Flow & Transport in Permeable Media Gordon Research Conference», 24–29 июня 2012 г., Лес Диаблеретс, Швейцария; «EUROSOIL 2012», 2-6 июля 2012 г., Бари, Италия; «5th International Conference on Porous Media and Annual Meeting of the International Society for Porous Media», 22-24 мая 2013 г., Прага, «International association of Hydrogeologists IAH 2013 Meeting, Solving the Groundwater Challenges of 21st century», 15–20 сентября, 2013 г., Перт, Австралия; «SPE Unconventional Resources Conference and Exhibition», 11–13 ноября

2013 г., Брисбен, Австралия; «AGU Fall Meeting 2013», 9–13 декабря, 2013 г., Сан-Франциско, США; «CSIRO CSS TCP & eResearch Annual Conference & Workshops», 10–13 февраля 2015 г., Мельбурн, Австралия.

При подготовке диссертации автор принимал активное участие в разработке и совершенствовании численных алгоритмов: им был разработан и успешно реализован метод оптимизации корреляционных функций, что позволило значительно ускорить скорость реконструкции, программные решения и код целиком разработаны автором работы. Автором проведены стохастические реконструкции различных пористых сред. Методы, использовавшиеся для расчета фильтрационных свойств, были разработаны при непосредственном участии автора. На основании результатов проведённых численных экспериментов автором была подготовлена серия статей в ведущие рецензируемые научные издания. Разработанные и реализованные в программном коде алгоритмы позволяют проводить реконструкции и создавать модели пористых сред по двухмерным изображениям и аналитическим корреляционным функциям.

Основные результаты по теме диссертации изложены в 9 работах [1–9], опубликованных в периодических научных изданиях и журналах, рекомендованных ВАК, а также более чем в 30 тезисах докладов.

<u>Благодарности</u>. Автор выражает глубокую благодарность к.ф.-м.н. К.М. Герке за помощь на всех этапах работы и вдохновение; к.г.-м.н. Д.В. Коросту за помощь в получении данных томографии и навыки публичных выступлений; Р.В. Васильеву за плодотворное сотрудничество и советы в реализации программной части, док. Д. Маллантсу за превосходную ревизию публикаций; д.с.-х.н. Е.Б. Скворцовой за предоставление данных о почвах, д.ф.-м.н. С.Б. Турунтаеву за обсуждение работы; Д.Р. Гилязетдиновой, к.т.н. Г.А. Калмыкову и Н.С. Балушкиной за РЭМ и µКТ изображения пород баженовской свиты; к.г.-м.н. В.В. Шаниной и д.ф.-м.н. И.О. Баюк за поддержку; а также всему коллективу лаборатории Геомеханики и флюидодинамики ИДГ РАН и проф. Ю.И. Зецеру за содействие в работе.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 137 страниц с 57 рисунками и 10 таблицами. Список литературы содержит 148 наименований.

Работа выполнена при поддержке программы У.М.Н.И.К.; грантов РФФИ 12-04-32264 мол\_а, 12-05-01130 a, 12-05-33089 мол\_а\_вед, 13-04-00409 a, 13-05-01176 a, 15-34-20989 мол а вед и РНФ 14-17-00658.

#### Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулированы задачи работы, положения, выносимые на защиту, новизна результатов, полученных в диссертации, описана ее структура.

В обзорно-аналитической главе 1 в разделе 1.1 дается общее определение пористых сред и многофазных материалов, которые являются основными объектами исследования; приводятся примеры дисциплин, изучающих пористые структуры, и актуальных практических задач. В разделе 1.2 дается первичное описание зависимостей между структурой и свойствами таких материалов и сред, перечисляются подходы к определению свойств пористых сред. Типизация различных видов структуры описана в разделе 1.3. Методы изучения внутренней структуры рассматриваются в разделе 1.4, начиная с двухмерных подходов и заканчивая методами получения трехмерной информации, в каждом случае указаны преимущества и недостатки, которые позволяют сделать вывод о зависимости выбора способа изучения структуры от конкретного образца. В разделе 1.5 дается обзор существующих методов описания структуры пористых сред и многофазных материалов и обосновывается выбор корреляционных функций дальнейшего исследования. Обшая для идея стохастических реконструкций и ее важность обсуждаются в разделе 1.6. Глава заканчивается выводами.

Глава 2 посвящена методам описания, восстановления пористых сред и верификации результатов. В разделе 2.1. дается определение корреляционных функций, каждая из которых описывает вероятность определенной конфигурации изображения, например, того, что точки на концах произвольного отрезка, лежащего на исследуемом изображении, находятся в одной и той же фазе. Бинарная индикаторная функция  $I^{(i)}(x)$  описывает принадлежность точек (пикселей на двухмерном изображении, вокселей на трехмерном) той или иной

фазе изучаемой структуры. Для двухфазной системы (например, для пористой среды) индикаторная функция в каждой точке x *d*-мерного Евклидова пространства  $\mathbb{R}^d$  приобретает следующий вид:

$$I^{(i)}(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1, \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{V}_i \\ 0, \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\overline{V}}_i \end{cases}$$
(1)

где  $V_i \in \mathbb{R}^d$  — область, занятая фазой *i*, а  $\overline{V}_i \in \mathbb{R}^d$  — область, не занятая фазой *i*. Определим *n*-точечную корреляционную функцию  $S_n^{(i)}$ , которая показывает вероятность нахождения *n* точек в одинаковой фазе *i*:

$$S_n^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \langle I^{(i)}(\mathbf{x}_1), I^{(i)}(\mathbf{x}_2), \dots, I^{(i)}(\mathbf{x}_n) \rangle,$$
(2)

где  $\mathbf{x}$  — радиус-вектор. Для статистически стационарной среды *n*-точечная корреляционная функция зависит не от абсолютных координат, а от расстояний между точками, то есть:  $S_n^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_n) = S_n^{(i)}(\mathbf{x}_{12}, \mathbf{x}_{13}, ..., \mathbf{x}_{1n})$ , для всех  $n \ge 1$ , где  $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i$ . 2-точечная корреляционная функция  $S_2^{(i)}$  определяется как вероятность одновременного нахождения точек  $\mathbf{x}_1$  и  $\mathbf{x}_2$  в одинаковой фазе *i* (поры или твердая фаза, показанные на *Puc.1* белым и черным цветом соответственно)  $S_2^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle I^{(i)}(\mathbf{x}_1), I^{(i)}(\mathbf{x}_2) \rangle$ . Для статистически гомогенной и изотропной среды корреляционная функция будет зависеть только от скалярного расстояния между точками, то есть:  $S_2^{(i)}(\mathbf{r}) = S_2^{(i)}(\mathbf{r})$ , где  $\mathbf{r} = \mathbf{x}_{12}$  вектор между точками  $\mathbf{x}_1$  и  $\mathbf{x}_2$ . Наиболее важными свойствами корреляционных функций являются свойства реализуемости и  $S_2^{(i)}(\mathbf{0}) = \varphi_i$  для  $\mathbf{r} = 0$ .

В данной работе применяются три типа кластерных функций: 2-точечная корреляционная функция ( $S_2$ ), линейная функция ( $L_2$ ) и кластерная функция ( $C_2$ ). Последние два типа функций несут важную информацию о связности фаз пористой среды и, в отличие от  $S_2$ , могут использоваться для описания каждой фазы в отдельности, дополняя друг друга. Это означает, что  $L_2^{(w)}$ ,  $L_2^{(b)}$ , как и  $C_2^{(w)}$ ,  $C_2^{(b)}$  являются независимыми. Переход к статистически гомогенным средам аналогично справедлив для функций  $L_2$  и  $C_2$ .



Рисунок 1. Иллюстрация идеи расчета некоторых корреляционных функций (для простоты показан двухмерный случай). После наименования функции в скобках указаны фаза интереса и показано направление расчета

• Значение = 0 • Значение = 1

Раздел 2.2 посвящен особенностям процедуры стохастической реконструкции, *Puc.2*. процедура которую иллюстрирует блок-схема на Используемая восстановления основана на методе Енга-Торквато, который получил свое развитие из стохастической оптимизации имитацией «отжига». Целью данной процедуры является приближение корреляционных функций имеющейся бинарной среды к функциям целевой бинарной среды с помощью перестановок точек в разных фазах. Рассмотрим восстановление бинарной структуры ПО заданному набору корреляционных функций  $f_2^{\alpha}(\mathbf{r})$ , где  $\alpha$  — тип функции. Разницу между статистическим описанием для двух сред можно рассчитать в виде суммы квадратов разностей между значениями функций:

$$E = \sum_{\boldsymbol{r}} \sum_{\alpha} [f_2^{\alpha}(\boldsymbol{r}) - \hat{f}_2^{\alpha}(\boldsymbol{r})]^2, \qquad (3)$$

где  $f_2^{\alpha}(\mathbf{r})$  и  $\hat{f}_2^{\alpha}(\mathbf{r})$  — значения функций для двух различных конфигураций пористых сред (при реконструкции, как правило, первая — это целевая контрольная среда, а вторая — это восстановленная пористая среда). Определенную таким образом «энергию» Е можно рассматривать как некое состояние системы, для минимизации которой и применяется метод имитации «отжига».



Рисунок 2. Блок-схема алгоритма восстановления структуры среды, дополненная примером реконструкции массива кругов

В разделе 2.3 приводятся результаты моделирования материалов и сред по аналитически заданным корреляционным функциям. В качестве исходных данных можно использовать аналитически полученные корреляционные функции, например, в виде суперпозиции затухающей, осциллирующей и полиномиальной функций с коэффициентами  $\alpha$ , такими, что  $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$ , где а – амплитуда, q – волновое число, а  $\psi$  – фазовый угол:

$$f(r) = \alpha_1 \exp(\frac{-r}{a}) + \alpha_2 \exp(\frac{-r}{a}) \cos(qr + \psi) + \alpha_3 \begin{cases} (1 - \frac{r}{c})^2, 0 \le r \le c\\ 0, r > c \end{cases} .$$
(4)

Раздел 2.4 описывает морфометрический анализ пористой среды, а раздел 2.5 анализ локальной пористости и перколяции — основные метрики для верификации морфологических параметров в реальных и восстановленных пористых средах. Раздел 2.6 посвящен гибридному методу, который соединяет в себе И "отжига" последовательный метод частиц метод имитации С корреляционными функциями. В разделе 2.7 описывается решение уравнения Стокса методом конечных разностей, используемое для сравнения расчетных абсолютных проницаемостей оригинальной и восстановленной пористой среды. Рассматривается случай однофазного течения вязкой несжимаемой жидкости в пористой среде. В разделе 2.8 описываются детали построения сеточных моделей, используемых для упрощения строения порового пространства с целью уменьшения времени, необходимого для расчетов проницаемости. Раздел 2.9 описывает принципы моделирования двухфазной фильтрации в сеточных моделях. Результатом последовательного моделирования дренажа и насыщения являются капиллярные кривые и значения фазовых и относительных проницаемостей флюидов при различных значениях перепада внешнего давления. Для моделирования течения газа в отложениях сланцев и прочих пористых средах, где поры микронного и субмикронного размера, присутствуют используется мультифизичная сеточная модель, описанная в разделе 2.10. В такой модели течение газа рассчитывается в зависимости от размера пор. Это связано с тем, что в нанопорах в зависимости от давления изменяется длина свободного пробега начинают проявляться эффекты диффузии Кнудсена молекул газа и И проскальзывания на стенках пор.

Глава 3 посвящена исследованию точности стохастических реконструкций и способам ее повышения. В разделе 3.1 описано использование корреляционных функций, рассчитанных по направлениям. Для учета сложной структуры пористых сред предложен новый метод расчета корреляционных функций по нескольким направлениям в пористой среде. В двумерном случае анализируются всего четыре направления: два ортогональных и два диагональных; в трехмерном случае три ортогональных и по два диагональных в каждой из трех плоскостей — всего шесть диагональных направлений. Отличительной чертой настоящей работы является расчет корреляционных функций в каждом из направлений без дальнейшего осреднения. Это позволяет описывать не только изотропные среды со сложными конфигурациями, но и анизотропные среды [3].

Анализ качества получаемых новых моделей заключался в количественной оценке улучшений реконструкций, получаемых за счет добавления диагональных направлений. Для проверки возможностей точного восстановления изображения были разработаны специальные искусственные изображения с периодическими граничными условиями, показанные на *Puc.3*.

Было проведено по 10 повторов реконструкций аналогичного размера (240<sup>2</sup> пикселей) с различными наборами корреляционных функций; с осреднением или без осреднения по направлениям; по ортогональным или по ортогональным и диагональным направлениям. Все использованные варианты отображены в сводной *Табл.1*. Оценка результатов проводилась по двум критериям. Первый основывался на итоговом значении «энергии» Е, второй — на визуальной оценке изображения.

Рисунок 3. Изображения, используемые для тестирования точности реконструкции (размер 240<sup>2</sup> пикселей): а — ортогональные кресты, б диагональные кресты, в — анизотропные диагональные кресты, г — анизотропные недиагональные кресты.

Функции <sup>(a)</sup>	Н <sup>(б)</sup>	Ср. <sup>(в)</sup>	Е <sub>а</sub> <sup>(г)</sup>	В <sub>a</sub> <sup>(д)</sup>	$E_{\delta}$	$B_{\delta}$	Ев	Вв	Er	Br
$S_2^{(b)}$	+	нет	10	1	0	0	0	0	0	0
		да	10	0	0	0	0	0	0	0
	+×	нет	10	10	1	5	0	0	1	6
		да	6	6	0	2	0	2	0	0
$S_2^{(b)} L_2^{(b)}$	+	нет	10	3	0	0	0	0	0	0
		да	2	1	0	0	0	0	0	0
	+×	нет	10	10	5	7	1	7	1	7
		да	5	5	1	4	1	1	0	0
$S_2^{(b)} \\ L_2^{(b)} \\ L_2^{(w)}$	+	нет	0	2	1	2	0	1	0	2
		да	0	0	2	7	0	0	0	0
	+×	нет	0	10	0	7	0	5	0	6
		да	0	1	0	8	0	3	0	1

Таблица 1. Виды наборов корреляционных функций и сводные результаты реконструкций

(а) Типы корреляционных функций, использованные для реконструкции. (б) Направления расчета (+— ортогональные; × — диагональные). (в) Применение осреднения полученных функций. (г) Показывает количество (из 10) реконструкций, которые достигли заданной точности (нижний индекс обозначает тип оригинала изображения в соответствии с *Puc.3*). (д) Количество реконструкций, которые визуально аналогичны оригиналам (нижний индекс обозначает тип оригентов с *Puc.3*).

Из данных *Табл.1* видно, что все оригинальные изображения (*Puc.3*) могут быть восстановлены с применением некоторого набора корреляционных функций, но не всегда удается добиться достижения заданной точности реконструкции. В общем случае, чем сложнее структура на изображении, тем больший набор корреляционных функций необходим для ее восстановления. С полным набором результатов реконструкций можно ознакомиться в [3]. Все методы с усреднением данных и часто ортогональные методы не могут распознавать направления анизотропии структуры и, следовательно, могут восстанавливать изображения с зеркальным отражением или поворотом элементов. Такие результаты не могут считаться удачной реконструкций, потому как направление анизотропии играет важную роль в изучении пористых сред. Например, трещины в сланцах могут полностью изменить расчетный тензор проницаемости. Таким образом, можно сделать вывод, что только корреляционные функции без усреднения расчетных данных следует применять для реконструкций анизотропных пористых сред и многофазных материалов.

Реконструкции с помощью набора  $S_2^{(b)}L_2^{(b)}L_2^{(w)}$  не сходятся также хорошо как  $S_2^{(b)}L_2^{(b)}$  и не дают возможность получить большое количество удачных повторов (см. *Табл.1*). С похожей проблемой при добавлении линейной функции для второй бинарной фазы сталкивались и другие исследователи. Очевидно, что для реконструкции более сложных структур необходимо использовать больше корреляционных функций, однако это требует решения проблемы плохой сходимости реконструкции «отжигом».

**Раздел 3.2** посвящен добавлению коэффициентов в целевую функцию . На *Рис.4* показано, что различные функции дают различный вклад в целевую энергетическую функцию, которая минимизируется во время алгоритма имитации «отжига». Энергия  $E_{\infty}$  определена как максимальная энергия для каждой корреляционной функции после того как соответствующая кривая выходит на асимптоту.



Рисунок 4. Постепенное изменение «энергии» структуры при последовательных случайных перестановках пар пикселей бинарных фаз. Изначальная структура на шаге 0 показана слева на вставке. Случайная структура после 50000 перестановок справа.

Рисунок. 5. Схема методики расчета точности реконструкций для «эргодических» периодических структур. Проводилась реконструкция крестов четырех типов (*Puc.3*) с использованием 12-ти ортогональных и диагональных корреляционных функций  $S_2^{(b)}L_2^{(b)}L_2^{(w)}$  с коэффициентами  $w_{\alpha}$ , взвешенными согласно пяти подходам, где  $\alpha$  это тип функции: 1) согласно общепринятому подходу считая  $w_{\alpha} \sim 1$  (в дальнейшем будем ссылаться на этот метод как Conv); 2) пропорционально максимальной энергии  $E_{\infty}(\alpha)$  для  $\alpha$  корреляционной функции (как показано на *Puc.4*) и рассчитывая $w_{\alpha}$ согласно *Ур.5*; 3) с заданными значениями параметров согласно  $w_{S_2} = w_{S_2}(E_{\infty})$ ,  $w_{L_2^b} = 4 \times w_{L_2^b}(E_{\infty}), w_{L_2^w} = 0.1 \times w_{L_2^w}(E_{\infty})$  (M#1);

4) или  $w_{S_2} = w_{S_2}(E_{\infty}), w_{L_2^b} = 2 \times w_{L_2^b}(E_{\infty}), w_{L_2^w} = 0.2 \times w_{L_2^w}(E_{\infty})$  (M#2); 5) или  $w_{S_2} = 1, w_{L_2^b} = 2, w_{L_2^w} = 0.2$  (M#3). В случае использования значения  $E_{\infty}(\alpha)$  коэффициенты весов рассчитываются как:

$$w_{\alpha}(E_{\infty}) = \frac{E_{\infty}(\alpha)}{\max_{\alpha} E_{\infty}(\alpha)}.$$
(5)

Впервые был применен новый способ расчета симметрической разницы на основе сдвига и наложения оригинала и реконструкции (*Puc.5*). Подобный подход позволил впервые провести точное сравнение оригинала и реконструкции. Результаты сравнения для всех четырех типов крестов показаны на *Puc.6*. Использование весов для параметризации вклада каждой корреляционной функции в энергетическую функцию привело к значительному улучшению сходимости метода и увеличению точности реконструкций [8]. В целом, можно отметить, что разные подходы дали различные результаты, а метод  $E_{\infty}$  оказался универсально лучше других и в среднем позволял получать наиболее точные реконструкции всех 4 типов крестов.

Чтобы продемонстрировать применимость оценки коэффициентов вклада корреляционных функций для реконструкции реальных образцов пористых сред, проводили анализ точности реконструкции для трехмерных структур. С помощью каждого из пяти предложенных подходов было проведено по три повтора реконструкций трехмерной бинарной структуры пористой керамики размером 500<sup>3</sup> вокселей.



Рисунок 6. Значения точности реконструкции для четырех изображений крестов разной степени анизотропии в зависимости от использовавшегося метода взвешивания вклада корреляционных функций в энергетическую функцию. Каждый столбец представляет результаты 10 реконструкций: показаны средние, минимальные и максимальные значения, а также реконструкции с лучшими и худшими результатами (показаны стрелками).

В качестве входных данных использовали сегментированное трехмерное изображение, полученное с помощью рентгеновской микротомографии. Исследование точности реконструкции проводили с использованием двух метрик: 1) сравнение проницаемости, рассчитанной ДЛЯ оригинальной И реконструированной структур решением уравнения Стокса В трехмерной геометрии; 2) сравнение статистики для кластерной корреляционной функции (не использовавшейся реконструкции) рассчитанной оригинала ДЛЯ ДЛЯ И осредненной реконструкции, ПО ортогональным направлениям (*Yp.3*).Реконструкции трехмерной структуры керамики в целом полностью подтверждают наблюдения, полученные при восстановлении двухмерных изображений крестов правильное взвешивание вклада корреляционных функций в энергетическую функцию позволяет значительно улучшить сходимость и качество реконструкций (*Puc.7*). Таким образом, метод взвешивания на основе расчета  $E_{\infty}$  показал свою универсальную эффективность и для реальных трехмерных структур. Расчеты на случайных конфигурациях, используемых как начальная структура для алгоритма имитации «отжига» показывают, что энергии таких конфигураций являются очень точными приближениями Е<sub>∞</sub>. Это означает, что коэффициенты вклада каждой

корреляционной функции на основе метода  $E_{\infty}$  могут быть с легкостью рассчитаны в начале процедуры реконструкции без сложного анализа, показанного на *Puc.4*. Глава заканчивается выводами по данной части исследования.



Рисунок 7. Значения точности реконструкций трехмерного изображения порового пространства керамики с использованием различных подходов к оценке вклада различных корреляционных функций. Справа показаны некоторые трехмерные изображения керамики (поры синие).

В главе 4 приведено описание моделирования структур пористых сред и материалов, в том числе с желаемыми свойствами. В разделе 4.1 приводится описание создания моделей и их анализ. На базе Ур.4 с  $\alpha_1$ =0.3,  $\alpha_2$ =0.2, и  $\alpha_3$ =0.5, q=1 и  $\psi=0$  для всех случаев. При этом параметры *a*,*b*,*c* изменялись от 3 до 15, от 5 до 30, и от 5 до 20, соответственно. Пропорции бинарных фаз при сборке равнялись  $S_2^{(черная)}(0) = 0.4$  и  $S_2^{(белая)}(0) = 0.6$ . На основе полученных таким образом 60 различных аналитических функций было проведено стохастические реконструкции трехмерных структур с расчетной областью в 300<sup>3</sup> вокселей. Для каждого такого трехмерного образца эффективная проницаемость на основе численного решения уравнения Стокса конечно-разностным методом [6] рассчитывалась в двух вариантах: считая порами черную или белую фазу с пропорциями 0.4 и 0.6, Проницаемость определялась соответственно. трем ортогональным по направлениям, но ввиду близости получаемых значений использовались средние.



Рисунок 8. Трехмерные визуализации структуры (слева) и полей скоростей течения флюида в их поровом пространстве (пористость 0.4, справа)

Примеры трехмерных структур и расчетов течения флюида показаны на *Puc.8*. Анализ влияния параметров аналитической функции Ур.4 (a, b, и c) показывает, что, в целом, увеличение всех трех параметров ведет к повышению эффективной проницаемости как белой, так и черной фаз. Визуализация получаемых значений в пространстве этих трех параметров (Рис.9) указывает на возможность подбора параметров аналитической функции с заданными проницаемостями и линейными размерами пор [5]. Также очевидно, что можно подобрать значительное количество различных с одинаковой проницаемостью, структур но различными конфигурациями порового пространства. С более практической точки зрения имеет значение подбор не только эффективной проницаемости, но и распределения пор по размерам, что, например, позволит создавать фильтры с необходимыми пропускными свойствами. Глава заканчивается выводами 4.2.



Рисунок 9. Влияние параметров аналитической функции a, b, и с на эффективную проницаемость конструируемой среды для образцов с пористостью 0,4 (слева) и 0,6 (справа). Проницаемость дана в безразмерных единицах, соответствующих единичным длинам г.

Глава 5 целиком посвящена практическому применению корреляционных для реконструкции структуры пористых сред. В разделе 5.1 функций исследуется возможность описания и реконструкции структуры почв на основе изображений в шлифах. При реконструкции восьми различных типов почв с контрастными особенностями структуры порового пространства были отмечены некоторые основные различия между реконструированными и оригинальными Наблюдаемые изображениями. различия были объяснены недостатком информативности в наборах корреляционных функций, использовавшихся для Сравнение почвенных шлифов реконструкции. И их стохастических реконструкций было проведено с использованием трех тестовых метрик, и ни одна из оказалась достаточно уникальной, чтобы однозначно НИХ не охарактеризовать различия между оригинальными и реконструированными изображениями. Это демонстрирует то, что стандартные метрики в виде распределения пор по размерам и им подобные недостаточны для описания структуры почвы. На основе данной части исследования была показана универсальность подхода и впервые предложено использовать корреляционные функции для численного описания почвенной структуры [4].

В разделе 5.2 описанные ранее в разделе 3.2 методы верифицируются на трех образцах керамики, структура которых была исследована с помощью компьютерной томографии, а газопроницаемости были измерены в лаборатории [7]. Для каждого образца керамики были проведены стохастические реконструкции на основе набора из 27 корреляционных функций, рассчитанных по направлениям, с взвешиванием вклада каждой функции в целевой функцию пропорционально максимальной энергии E<sub>∞</sub>(α). После этого сравнивались фильтрационные свойства оригинала и модели. Значения проницаемости, полученные численным методом, для всех трех реконструкций исследуемых образцов, изготовленных из гранул корунда различного размера и формы, отлично соответствовали результатам лабораторных измерений.

Раздел 5.3 посвящен определению газопроницаемости керогена в образцах сланцеподобной породы на основе моделирования в масштабе пор по трехмерным реконструкциям на основе РЭМ изображений. Породы Баженовской свиты являются, вероятно, наиболее изученным и важным нетрадиционным коллектором Западной Сибири. Детальные исследования образцов таких горных пород сильно ограничены трудностью извлечения кернового материала и рисками разрушения структуры образцов при экстракции. Вследствие этого моделирование в масштабе пор является потенциальной альтернативой лабораторным методам. Как томографические, так и РЭМ исследования структуры образцов сланцеподобных пород не позволяют получить полную картину строения ввиду ограничений на размер образца/разрешение каждого из методов. С помощью этих двух методов в образцах баженовской свиты можно выделить различные домены микро и нанопористости (*Puc.10*). Ранее многими исследователями за рубежом отмечалось, что значительная часть пористости сланцев находится в керогене. Недавно наличие пористости в керогене (до 30% от общей пористости) было показано и для образцов Баженовской свиты [2]. После описания всех типов пористости и их пространственного распределения в масштабе микротомографии из *Puc.10* очевидно, что связность пор внутри образца в основном обеспечена пористостью керогена, и, таким образом, он обеспечивает основной вклад в потоки флюидов и проницаемость.



Рисунок 10. Различные фазы (смесь органики, поры больше 1-5 мкм, пирит), выделенные на трехмерном томографическом изображении образца Баженовской свиты, совмещенные с РЭМ изображениями соответствующих нанопористостей. Размер области — 300<sup>3</sup> вокселей.

Поэтому в настоящей части исследования остановились на нанопористости керогена и определили его газопроницаемость с помощью стохастических реконструкций на основе РЭМ изображений. Для каждого изображения провели по три реконструкции с помощью разных наборов корреляционных функций: 1) с помощью только осредненной корреляционной функции  $S_2$ , 2) используя рассчитанную в ортогональных направлениях функцию  $S_2$ , и 3) применяя рассчитанные в ортогональных направлениях функции для пор  $S_2$  и  $L_2$ . Для каждого входного изображения и набора функций было получено по одной трехмерной реконструкции.

Из каждой реконструкции выделяли сеточную модель, на основе которой рассчитывали газопроницаемость керогена с учетом нелинейных эффектов давления (*Puc.11*). Используемые граничные условия для давления имели широкий диапазон значений (138 кПа – 13.8 МПа), соответствовавшие условиям в лабораторных экспериментах. Были получены следующие значения проницаемости для каждого входного РЭМ изображения: 0.604, 0.57, и 0.52 мД, соответственно (*Puc.12*). Значения проницаемости керогена, полученные численно, оказались почти на порядок выше лабораторных значений [2]. Такое расхождение объясняется целым рядом причин: 1) пористость керогена на изображениях,

выбранных для реконструкции, не репрезентативна для всего образца, другими словами, она выше, чем среднее значение; 2) пористость керогена неравномерно распределена в образце, и потому имеет проницаемость ниже, чем если бы весь образец состоял целиком из пористого керогена; 3) выбранные для реконструкции корреляционные функции и высокая пористость на изображении привели к завышенной связности пор на реконструкции [9]; 4) другие типы пористости с более низкими проницаемостями могут соединять кластеры пористости в керогене; 5) лабораторные методы измерения проницаемости могут обладать значительными ошибками [2].



Рисунок 11. Пример реконструкций размером 300<sup>3</sup> вокселей (поры красные) и выделенных из них сеточных моделей



Рисунок 12. Зависимость газопроницаемости керогена от порового давления. Показаны значения, рассчитанные для всех стохастических реконструкций

Отдельно отметим один из важных выводов, полученный по данной части исследования — проницаемости керогена в различных точках внутри образца отличаются значительно. Этот вывод имеет очень важные приложения для исследования свойств сланцев — быстрая двухмерная съемка с помощью РЭМ или

FIB-SEM и стохастические реконструкции имеют куда более значительные перспективы, нежели сложная и затратная по времени томография на основе FIB/BIB-SEM. Определение проницаемости только керогена не решает общей свойств пород с многомасштабными проблемы определения сложных пористостями. Хотя апскейлинг как таковой не входит в рамки настоящей работы, следует отметить, что в будущем корреляционные функции и стохастические реконструкции имеют значительный потенциал и для решения таких задач. Так, с помощью масштабирования корреляционных функций можно совмещать изображения, полученные на разных масштабах [9]. Такой подход в будущем позволит соединить все пористости в сланцах в одно единое трехмерное изображение пористости и получить общую картину, как строения породы, так и ее фильтрационных характеристик. В целом по результатам этой части работы можно отметить, что метод стохастических реконструкций имеет несомненный потенциал для определения свойств наноматериалов по данным двухмерных исследований.

разделе 5.4 показаны B возможности определения фильтрационных характеристик песчаников на основе гибридной реконструкции. В основе гибридного подхода лежит идея замены изначально случайной конфигурации вокселей на структуру, более близкую реконструируемому материалу. Были исследованы возможности гибридного метода на основе последовательного метода частиц и корреляционных функций для реконструкции трех различных песчаников с пористостью от 14,3% до 23,5% воробьевского горизонта Степновского месторождения. С этой целью была получена предварительная структура на основе частиц, 2.6. последовательного Оценка метода описанного В разделе состава гранулометрического проводилась по двухмерным изображениям структуры образцов, которые являлись частью трехмерных микротомографических данных. На основе расчета фильтрационных характеристик в сеточных моделях изображений гибридных для оригинальных трехмерных песчаников И реконструкций, оценивали качество последних.

Как абсолютные, так и относительные проницаемости по двум флюидам (воздух-вода) для оригиналов и реконструкций отлично соответствовали друг другу (*Puc.13*). Результаты настоящего раздела демонстрируют широкие возможности метода для решения прикладных задач петрофизики и апскейлинга

основных эффективных свойств пород-коллекторов, так как позволяют не только на порядок ускорить процедуру реконструкции, но и повышать качество реконструкций. В целом можно отметить, что гибридные реконструкции являются перспективным методом, в особенности для таких гранулированных пористых сред, как песчаники, почвы, керамические фильтры, карбиды и т.п.



Рис. 13. Результаты моделирования двухфазного течения в образце 2 (лучшее совпадение оригинала и гибридной реконструкции). Слева показана капиллярная кривая, справа относительные проницаемости по воде и воздуху.

Общее обсуждение результатов главы 5 представлено в **разделе 5.5**, в котором на основе полученных результатов, обсуждаются основные направления будущей работы. <u>Основные достижения и результаты</u> настоящей работы:

1. Показано, что алгоритмы расчетов корреляционных функций в ортогональных и диагональных направлениях без усреднения позволяют работать с анизотропными структурами.

2. После добавления большого количества независимых слагаемых в оптимизационную функцию метода имитации «отжига» потребовалось решить задачу нахождения весов различных корреляционных функций при выполнении реконструкции. Предложены и проанализированы несколько методов «взвешивания» слагаемых и найден наиболее универсальный алгоритм их расчета.

3. Продемонстрировано создание пористых сред с желаемыми физическими свойствами и контролируемыми структурными характеристиками по аналитически заданным (авто)корреляционным функциям. Для полученных структур рассчитаны значения эффективной проницаемости. Данный численный эксперимент демонстрирует возможность подбора параметров аналитической функции для управления моделированием структуры с необходимым строением порового

пространства и значением проницаемости, что может быть использовано для решения задач материаловедения и смежных наук.

4. Предложено использовать корреляционные функции для описания и реконструкции структуры почв. Показаны возможности описания двухмерных данных о пористых средах на примере восьми типов почв и проведен детальный анализ с привлечением различных метрик: распределение пор по размерам, морфометрический анализ, расчеты кластерной функции и др.

5. Выполнены трехмерные реконструкции и рассчитаны газопроницаемости для образцов керамики. Полученные данные позволили верифицировать эффективность разработанных методов расчета коэффициентов целевой функции для трехмерных изображений.

6. Описан способ моделирования/реконструкции отдельных составляющих сланцеподобных пород Баженовской свиты и описаны его перспективы. По трехмерным реконструкциям керогена была рассчитана газопроницаемость нанопористости этих горных пород. При расчете газопроницаемости учитывались эффекты кнудсеновской диффузии и проскальзывания молекул газа при движении вдоль стенок пор, что позволило изучить зависимость недарсианской проницаемости от давления.

7. Предложен гибридный метод моделирования на основе корреляционных функций и последовательного метода частиц. Применение данного подхода к песчаникам сделало реальным использование преимуществ двух различных методов стохастических реконструкций: имитация генезиса естественных пористых сред и соблюдение статистических параметров, а также позволило ускорить и повысить точность стохастических реконструкций для осадочных пористых сред.

Таким образом, исследование стохастических реконструкций с применением корреляционных функций показало свои сильные стороны и практическую применимость. Развитие данного направления позволит создавать многомасштабные модели пористых сред, производить быструю оценку свойств материалов по ограниченному набору информации и классифицировать породы согласно универсальным метрикам.

### Список публикаций автора по теме диссертационной работы

- 1. Герке К.М., Карсанина М.В., Скворцова Е.Б. Описание и реконструкция строения порового пространства почвы с помощью корреляционных функций. // Почвоведение. 2012. 45(9). С. 962–973.
- Gerke K.M., Vasilyev R.V., Korost D.V., Karsanina M.V., Balushkina N., Khamidullin R., Kalmykov G.A., Mallants D. Determining physical properties of unconventional reservoir rocks: from laboratory to pore-scale modeling. // SPE 167058 Technical paper, presented at SPE Unconventional Resources Conference and Exhibition, 11–13 November 2013, Brisbane, Australia. — DOI: 10.2118/167058-MS.
- 3. Gerke K.M., Karsanina M.V., Vasilyev R.V., Mallants D. Improving pattern reconstruction using directional correlation functions. // EPL (Europhysics Letters). 2014. 106(6): 66002. DOI: 10.1209/0295-5075/106/66002.
- 4. Karsanina M.V., Gerke K.M., Skvortsova E.B., Mallants D. Universal spatial correlation functions for describing and reconstructing soil microstructure. // PLoS ONE. 2015. 10(5). e0126515. DOI:10.1371/journal.pone.0126515.
- 5. Карсанина М.В., Герке К.М., Васильев Р.В. Корост Д.В Моделирование структуры материалов, обладающих желаемыми свойствами, с помощью корреляционных функций. // Математическое Моделирование. 2015. 27(4). С. 50–63.
- 6. Васильев Р.В., Герке К.М., Карсанина М.В., Корост Д.В. Решение уравнения Стокса в трехмерной геометрии конечно-разностным методом. // Математическое Моделирование. 2015. 27(6). С. 67–80.
- Герке К.М., Корост Д.В., Васильев Р.В., Карсанина М.В., Тарасовский В.П. Изучение строения и определение эффективных свойств материалов на основе данных об их строении полученных методом рентгеновской микротомографии (на примере пористой проницаемой керамики). // Неорганические материалы. — 2015. — 51(9). —С. 951-957. — DOI: 10.1134/S002016851509006X.
- Gerke K.M., Karsanina M.V. Improving stochastic reconstructions by weighing correlation functions in an objective function. // EPL (Europhysics Letters). 2015. 111(5). —56002. DOI: 10.1209/0295-5075/111/56002.
- Gerke K.M., Karsanina M.V., Mallants D. Universal stochastic multi-scale image fusion: An example application for shale rock. // Scientific Reports. — 2015. — 5. — 15880. — DOI: 10.1038/srep15880.