Федеральное бюджетное учреждение науки

Институт динамики геосфер Российской академии наук

На правах рукописи

УДК 538-9, 51-72

# 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»

Диссертация на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: доктор физико-математических наук профессор Турунтаев С. Б.

Научный консультант: кандидат физико-математических наук Герке К. М.

Москва — 2016

### Оглавление

Введение	4
Глава 1. Пористые среды и многофазные материалы: структура и свойства	9
1.1 Определение пористых сред и многофазных материалов	9
1.2 Структура и свойства многофазных материалов	. 10
1.3 Типизация видов структуры многофазных материалов	. 14
1.4 Методы изучения внутренней структуры	. 15
1.5 Способы описания структуры	. 19
1.6 Стохастические реконструкции трехмерных моделей	. 22
1.7 Выводы по главе	. 23
Глава 2. Методы описания, восстановления пористых сред и верификации результатов	. 25
2.1. Корреляционные функции	. 25
2.2 Процедура стохастической реконструкции	. 29
2.3 Моделирование материалов и сред	. 34
2.4 Морфометрический анализ пористой среды	. 36
2.5 Анализ на основе теории локальной пористости и перколяции	. 37
2.6 Гибридный метод	. 39
2.7 Решение уравнения Стокса методом конечных разностей	. 44
2.8 Сеточные модели	. 49
2.9 Двухфазная фильтрация в сеточных моделях	. 54
2.10 Мультифизичная сеточная модель	. 55
2.11 Выводы по главе	. 58
Глава 3. Повышение точности стохастических реконструкций	. 59
3.1. Применение корреляционных функций, рассчитанных по направлениям	. 59
3.2. Добавление коэффициентов в целевую функцию	. 67
3.3. Выводы по главе	. 75

Глава 4. Моделирование структур пористых сред и материалов, в том числе с желаемыми
свойствами
4.1. Описание создания моделей и их анализ 77
4.2. Выводы по главе
Глава 5. Практическое применение корреляционных функций для реконструкции структуры
пористых сред
5.1 Описание и реконструкция структуры почв
5.2 Трехмерное моделирование структуры керамики 101
5.3 Реконструкция керогена в сланцеподобных образцах 106
5.4 Гибридная реконструкция песчаников114
5.5. Обсуждение результатов
5.6. Выводы по главе
Заключение
Список литературы 127

### Введение

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 производить обработку изображений, в 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 породколлекторов 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).

 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 на качество реконструкций и обнаружена необходимость «уравновешивания» корреляционных функций во 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.

<u>Научная и практическая значимость</u> 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 сравнению с предыдущими работами, в частности, полное совпадение реконструкций и оригиналов для некоторыхтестовых изображений. Кроме того, важным является создание простого и вычислительно эффективного универсального метода выбора весов для каждой корреляционной функции, используемой для реконструкции. Отработанные 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 и развитие подхода стохастических реконструкций позволит решать задачи составления многомасштабных моделей пористых сред, объединяя изображения из различных источников.

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

- «ХІV 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 аппаратное обеспечение», 14 – 15 ноября 2013 г., Москва;
- 5. «Практическая микротомография», 5 7 декабря 2012 г., Казань;
- 6. «Практическая микротомография», 2 4 октября 2013г., Москва;
- Балтийская школа-семинар «Петрофизическое моделирование осадочных пород», 17 –21 сентября 2012 г., Петергоф;
- Балтийская школа-семинар «Петрофизическое моделирование осадочных пород», 16–18 сентября 2013 г., Петергоф;
- Балтийская школа-семинар «Петрофизическое моделирование осадочных пород», 14 –18 сентября 2015 г., Петергоф;
- 10. «Ion transport in organic and inorganic membranes», 2 7 июня 2013 г., Краснодар
- 11. Техническая конференция SPE «ПЕТРОФИЗИКА XXI» 3 5 июня 2014г., Тюмень;
- 12. 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;
- 4. «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 2013г., Прага, Чехия;
- «International association of Hydrogeologists IAH 2013 Meeting, Solving the Groundwater Challenges of 21st century», 15 – 20 сентября, 2013г., Перт, Австралия;
- «SPE Unconventional Resources Conference and Exhibition», 11–13 ноября 2013 г., Брисбен, Австралия;
- 8. «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 реконструкции проведены стохастические 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.

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.

# Глава 1. Пористые среды и многофазные материалы: структура и свойства

#### 1.1 Определение пористых сред и многофазных материалов

Многофазными будем называть те материалы, которые состоят из двух и более фаз — составляющих их компонентов, отличающихся между собой химическими и/или физическими свойствами. Особым случаем таких материалов являются пористые среды, где одним из компонентов является поровое пространство, которое, в зависимости от исследуемых условий, может быть заполнено флюидом(ми) — водой, нефтью, газом и т.п. Важность изучения многофазных материалов и пористых сред трудно переоценить: проблемы описания их структуры, определения физических свойств и моделирования переноса энергии и вещества в таких материалах решаются в целом ряде научных дисциплин, начиная от теоретической физики, материаловедения и геофизики до биологии и аналитической химии (рис.1.1). Список не претендует на полноту и может быть значительно расширен.



Рисунок 1.1. Научные интересы различных дисциплин в изучении многофазных материалов и пористых сред (идея схемы из [10]).

Многофазные материалы и пористые среды могут быть как естественного происхождения, так и производиться человеком для применения в различных областях его деятельности. В качестве примеров первых приведем следующие: породы-коллектора нефти и газа; грунты и почвы; геологические формации, в том числе горные породы геотермальных зон, аквифиров; древесина, костная ткань, прочие ткани животных и растений. Примеров искусственных многофазных и пористых материалов возможно даже больше, с некоторыми из них мы сталкиваемся в повседневной жизни: пены; бумага; бетон; композиты и сплавы; коллоиды, полимеры, микроэмульсии и гели; ратификационные колонки; керамика; наноматериалы; батареи и аккумуляторы; катализаторы химических реакций; фильтры и мембраны.

Одна из основных задач современной науки заключается в описании, изучении физических свойств, разработке и создании материалов определенных свойств, необходимых в производственных и научно-технических приложениях [11]. Примерами таких приложений и использования естественных и искусственных пористых сред и многофазных материалов являются:

1) породы-коллектора нефти и газа, физические свойства которых определяют продуктивность освоения месторождений, а моделирование различных процессов улучшения нефте и газоотдачи невозможно без детального знания структуры таких пород [2, 6, 12-14], в особенности сложно изучение структуры нетрадиционных коллекторов, например, сланцев [9].

2) керамические и прочие фильтры для очистки воды, фильтрации чугуна, использования в качестве адсорбатов и катализаторов [7, 15];

3) биоматериалы, создаваемые, в том числе для протезирования [16];

4) текстиль и бумага для производства различных товаров широкого потребления [17];

5) топливные элементы для электрического питания различных устройств [18];

6) проппанты для заполнения трещин гидроразрыва, важные при добыче углеводородов [2, 12-13];

7) почвогрунты, структура и состав которых определяет плодородие и защиту водных ресурсов от проникновения загрязнителей [1, 19];

8) хлеб и другие пищевые продукты, производимые в целях питания [20].

Важность изучения пористых сред и многофазных материалов, таким образом, не вызывает сомнения.

#### 1.2 Структура и свойства многофазных материалов

Одним из важнейших факторов, влияющих на свойства исследуемого многофазного материала, является его внутреннее строение. Фазы, из которых состоит материал, могут различаться между собой химическим составом, агрегатным состоянием или другими параметрами. При этом взаимное расположение этих фаз в пространстве и времени будет определять статические и динамические свойства многофазного материала, такие как, например:

•абсолютная проницаемость;

•коэффициент диффузии;

• относительные проницаемости по нескольким флюидам, совместно протекающим через образец исследуемого материала (например, нефть и вода);

• электрическая проводимость;

- самодиффузия и диффузия с поглощением;
- •коэффициенты адсорбции;
- •контактные углы смачивания;

•механические свойства и скорость распространения в материале продольных и поперечных волн;

• теплопроводность.

Этот список можно значительно расширить. Ввиду интересов автора, лежащих в сферах технологии добычи нефти, гидрогеологии и почвоведения, в настоящей работе акцент будет сделан на так называемые транспортные свойства пористых материалов. Несмотря на то, что понимание связи структуры и различных свойств среды доказано и в некоторых аспектах хорошо изучено [10, 21-22], в множестве научных дисциплин по-прежнему популярны общие статистические методы. Так, в гидрологии и почвоведении можно отметить такой метод, как педотрансферные функции [23-24], в петрофизике похожий подход поиска зависимостей, например, между пористостью и проницаемостью лежит в основе интерпретации лабораторных исследований и данных ГИС [25].

Различными фазами, которые своим распределением в пространстве будут определять структуру пористых сред (например, нефтесодержащих и газосодержащих пород, почв, и т.п.) могут быть минералы, органическое вещество, вода, воздух, биологические объекты и многие другие. Представим, что точная структура исследуемой пористой среды, а также эффективные свойства каждой фазы, известны. В таком случае решить проблему определения свойств этой среды можно путем решения соответствующих уравнений, например, Навье-Стокса для течения флюида или Лапласа для течения электрического тока. Для описания течения нескольких флюидов помимо самой структуры твердых фаз составляющих скелет пористого образца необходимо также знать свойства взаимодействия этих твердых компонент с флюидами. Это можно сделать, например, с помощью учета контактных углов смачивания и поверхностного натяжения [26], которые можно получить с помощью моделирования молекулярной динамики [27-28], если химический состав флюидов и твердых компонент известен. Такой подход был бы точен и не имел множества проблем и неточностей классических методов на основе полуинтегральных характеристик (ОГХ, ртутная порометрия, адсорбционный анализ пор и т.п.), а также не требовал бы подгонки нефизических параметров, как, например, в моделях ван Генухтена-Муалема [29]. Более того, в последнее время

некоторые классические лабораторные методы, всегда считавшиеся эталонными в измерении физических величин пористых сред, были подвергнуты критике и пересмотру [30-31]. Также, в зависимости от структуры образца и составляющих его компонент лабораторные измерения могут привести к его разрушению, проявлению приграничных эффектов [32], растворению некоторой фазы и т.п., что в сумме приведет к ошибочной интерпретации получаемых в эксперименте данных.

Приверженцы классических подходов и измерений могут сразу возразить, что структура пористой среды обычно не известна, в то время как лабораторные методы являются эталоном получения информации о физических свойствах пористых сред. И действительно — до недавнего времени такая ситуация сохранялась. Однако в последние годы развитие, как технической базы, так и численных методов вкупе с вычислительными ресурсами, позволяет с уверенностью сказать, что ученые находятся лишь в одном шаге от возможности качественного изучения структуры практически любого материала. Описание и сравнение различных методов исследования структуры многофазных материалов и пористых сред представлено в следующем подразделе.

В случае если детальная информация о строении пористой среды известна с точностью до наиболее значимого для нее разрешения, то наиболее подходящим методом численного определения свойств являются так называемые методы моделирования в масштабе пор (рогеscale modeling). В настоящее время существует немало различных подходов, в зависимости от физического свойства, которое необходимо определить. Для большинства свойств, например, теплопроводности, электрических и механических свойств, наиболее популярными являются решения соответствующих дифференциальных уравнений методом конечных элементов [33]. Для диффузии и дисперсии, в случае, если известно поле скоростей, быстрым и простым методом является случайное блуждание (random walk) [34-36]. В методе конечных элементов/объемов поровое пространство дискретизируется путем наложения сетки и разбивается на конечное количество подобластей (элементов). Такой метод очень требователен к вычислительным ресурсам и количеству памяти, что особенно проявляется при моделировании многофазной фильтрации решением уравнения Навье-Стокса [37-38]. Исследование фильтрационных процессов часто является наиболее интересным и критическим для параметризации моделей течения жидкостей и растворов, но, вероятно, самым сложным для моделирования в масштабе пор. Решения основных дифференциальных уравнений методом конечных разностей: уравнения Лапласа для электрического тока [21] и уравнения Стокса (случай более общего уравнения Навье-Стокса для течения с низкими числами Рейнольдса для однофазной фильтрации [6, 39-40]), являются более быстрыми аналогами метода конечных элементов с незначительными потерями точности.

Другим популярным методом являются сеточные модели (pore-network models), которые значительно превосходят все остальные методы по скорости ввиду значительного упрощения структуры порового пространства, которое чаще всего представлено в виде пор и горловин круглого, треугольного и прямоугольного сечения [26, 41] (хотя существует множество других форм, они схожи по сложности аппроксимации пор). На сегодняшний день это единственный известный метод, с помощью которого проводилось моделирование трехфазной фильтрации [42-43]. Благодаря небольшой требовательности к вычислительным ресурсам, он позволяет проводить расчеты на наибольших объемах расчетной области.

Большой популярностью пользуется решеточный метод Больцмана (lattice-Bolzmann method), для которого необходимы значительные вычислительные ресурсы, но реализация которого хорошо поддается распараллеливанию и масштабированию. Этот метод подходит как для одно, так и многофазных течений. С использованием всех перечисленных методов была показана возможность по данным рентгеновской микротомографии (µKT) предсказывать такие свойства пород-коллекторов, как пористость [21, 26, 44], механические характеристики [33], проницаемость [39-40], относительные проницаемости по нескольким флюидам [26].

В последнее время были предложены и другие методы, такие как гидродинамика сглаженных частиц (smoothed particle hydrodynamics) [45], метод функционала плотности, адаптированный для моделирования течения флюидов [46]. Первый обладает потенциалом распараллеливания на графических процессорах и интересен для больших областей расчета, второй позволяет достаточно точно описать множество процессов, но сложен с вычислительной точки зрения.

В целом недостатками всех проведенных до настоящего времени исследований является небольшая выборка образцов пород-коллекторов для верификации, так как обычно вычисления производятся на менее чем десятке образцов Фонтенбло, Берии и Бетмиер песчаников малого размера и неизвестной представительности (representative elementary volume, REV). Разные исследовательские группы развивают разные методы моделирования фильтрационных и других физических свойств, универсального метода на сегодняшний день не существует. После изучения большого количества литературы наиболее перспективными представляются три подхода:

1) решеточный метод Больцмана ввиду его точности при моделировании как однофазного течения, что показано сравнением с аналитическими решениями для упаковок монодисперсных сфер [47], а так и многофазных процессов, в том числе для верификации сеточных моделей;

2) метод конечных разностей для решения уравнения Стокса, как наиболее быстрый среди методов прямого моделирования по дискретизированной структуре пористой среды, который дает быстрое схождение решения для поля скоростей;

3) сеточный метод, т.к. он позволяет быстро проводить моделирование на больших вычислительных областях, как минимум на порядок больше, чем у других методов, а также обладает способностью описывать течение на любом разрешении данных по пористой среде, так как аналитически описывает течение в упрощенных элементах пор.

Таким образом, чтобы адекватно описать/изучить свойства материалов в первую очередь необходимо описать их структуру.

#### 1.3 Типизация видов структуры многофазных материалов

Структура может сильно варьироваться как от материала к материалу, так и внутри одного образца некоторой среды. Поэтому важно понимать и систематизировать такие различия, а также понимать, какие ограничения они накладывают на различные методы описания структур реальных материалов (что будет обсуждаться в дальнейших главах).

Если структура материала не зависит от положения внутри материала, или более строго если локальный набор статистических параметров структуры не чувствителен к сдвигу центра расчетной области, то такой материал называют стационарным или статистически однородным. Если это правило не выполняется, то структура является статистически неоднородной или нестационарной. Классические примеры таких структур показаны на рис.1.2 и 1.3, соответственно. Структура называется анизотропной, если набор статистических параметров хотя и не зависит от положения расчетной области, но зависит от направления расчета таких параметров. Если же расчеты инвариантны еще и к повороту расчетной области, то такая структура является изотропной. Примеры анизотропной и изотропной структур показаны на рис.1.2.





Рисунок 1.2. Изображения стационарных сред: изотропной (справа) и анизотропной (слева)[10]



Рисунок 1.3. Изображения нестационарных сред: плотность черной фазы увеличивается на изображении снизу-вверх (слева), и с центром симметрии радиального увеличения плотности черной фазе, находящимся в центре изображения (справа) [10]

Типизация строения многофазных материалов и пористых сред таким подходом не ограничивается. Так, в зависимости от научной дисциплины пористым материалам даются различные классификации в зависимости от характеристического размера пор, в геологии — в зависимости от генезиса и т.п. Детальный обзор подобных типизаций выходит за пределы интересов настоящей работы и может быть найден в специализированной литературе. В последующих главах будут более детально рассмотрены и описаны с помощью математического аппарата некоторые типы пористых сред, например таких как, структуры с двумя пористостями.

#### 1.4 Методы изучения внутренней структуры

Для изучения строения и генезиса многофазных материалов и пористых сред традиционно используют двумерные изображения шлифов, которые в целом хорошо подходят для общей оценки структуры и текстуры. Однако возможности детального описания строения с помощью этого метода слишком ограничены из-за низкого разрешения (не выше толщины шлифа, около 5-40 мкм), присутствия минеральных зерен различной оптической плотности, которые не позволяют с необходимой точностью провести сегментацию изображения. Под сегментацией в данной работе понимается разделение общего изображения структуры на составляющие ее компоненты или фазы, например, минеральные зерна, глину, органическое вещество, поры и т.д. Примеры получаемых с помощью шлифов оптических изображений показаны на рис.1.4.



Рисунок 1.4. Примеры оптических изображений структуры пористых сред, полученных на основе шлифов: а) для карбоната (поры окрашены синим), б) для почвы

Метод растровой электронной микроскопии (РЭМ, Scanning Electron Microscopy, SEM), в том числе на отраженных электронах (Back Scattering Imaging Microscopy), позволяет получать изображения очень высокого разрешения (до единиц нанометров). Но получаемые изображения являются в первом случае двумерными проекциями трехмерных поверхностей сколов, во втором — образец требует шлифовки, которая может приводить к значительным искажениям изучаемой структуры. Примеры изображений, полученных с помощью РЭМ, показаны на рис.1.5.



Рисунок 1.5. Примеры изображений, полученных с помощью РЭМ: а) кварц и б) фламбоид пирита в отложениях баженовской свиты

Основным недостатком всех вышеперечисленных методов является их двухмерность, т.к. для понимания и моделирования большинства процессов, происходящих пористых средах, необходимо иметь детальное представление о ее трехмерном строении. В последние десятилетия активно внедрялся и использовался метод рентгеновской µКТ, позволяющий получать именно трехмерные изображения внутреннего строения многофазных материалов, разрешение которых зависит в частности от размера образца и может достигать 0.7-1 микрон. При этом метод является неразрушающим и, в некоторых случаях, позволяет выделять на изображении различные составляющие элементы и фазы. Примеры результатов исследования образцов с помощью томографии показаны на рис.1.6 (двумерные срезы через трехмерное изображение).



Рисунок 1.6. Двумерные срезы, получаемые методом рентгеновской µКТ при сканировании трехмерных образцов пористых сред: а) камчатский базальт, б) карбонат, в) упаковка кварцевых зерен, г) песчаная почва

Однако разрешения микротомографов недостаточно, чтобы различить элементы менее 2-5 микрон, которые могут доминировать в образцах некоторых пористых сред [13] и материалов. Для исследования нанопористости в таких образцах в настоящее время используются методы фокусируемого ионного пучка (ФИП, Focused Ion Beam, FIB-SEM) и Broad Ion Beam (BIB)-SEM

[48-51]. Данные методы с помощью ионной пушки срезают материал (так называемая процедура milling) и позволяют получить двумерное изображение с помощью РЭМ, причем в случае BIB-SEM просто увеличивается площадь зоны среза. Если срезать материал послойно, то можно получить серию двумерных изображений, т.е. аналог томографического исследования. Такие подходы также имеют свои недостатки в виде переноса срезанного вещества и прочих [52], но позволяют получить истинные двухмерные срезы через образец пористой среды и, таким образом, выгодно отличаются от стандартной РЭМ. Примеры работы FIB/BIB-SEM технологий показаны на рис.1.7.



Рисунок 1.7. Примеры двухмерных срезов, получаемых с помощью ионной пушки и РЭМ в органическом материале сланцев Барнетт [50]

В настоящее время становится понятно, что какого-либо одного метода для исследования структуры пористых сред и многофазных материалов в целом недостаточно из-за присутствия пор различных размеров. В поровом пространстве зачастую присутствуют разнообразные иерархические уровни, и слишком маленький образец, достаточный, чтобы получить изображения пор необходимого разрешения для одного из уровней, не будет представительным для других уровней. Каждый вид пористости может требовать своего подхода съемки, метода и разрешения, т.к. необходимо получить представительную информацию — значительный объем с пористостью данного типа. В таком случае необходимо проводить исследование структуры на разных масштабах. Не менее интересно получать и распределение различных твердых фаз, как минеральных, так и органических. Поэтому создание точной цифровой модели пористой среды, а именно трехмерная визуализация всех структурных элементов с необходимым разрешением, является одной их актуальнейших проблем современной науки. Созданием таких моделей для горных пород в течение последних десятилетий занимались петрофизики [53-56], в почвоведении, например, таких попыток практически не предпринималось. Отметим, что сложность строения большинства почв не позволяет применять петрофизические разработки напрямую. Поэтому очень важно понимать, что методы изучения структуры могут зависеть от конкретного образца.

#### 1.5 Способы описания структуры

Изучение строения пород и почв/грунтов, динамики структуры и связи с другими различными факторами и параметрами является основной задачей во всех разделах и приложениях изучения течения и массопереноса в пористых средах. Упаковка частиц и микроагрегатов, образование трещин, а также строение порового пространства определяют такие важные свойства как проницаемость, прочность, капиллярные свойства. теплопроводность, относительные проницаемость по нескольким флюидам и т.п. Эти свойства, в свою очередь, влияют на такие важные параметры как, например, условия жизнедеятельности почвенной мезофауны и микроорганизмов, протекание различных химических процессов при захоронении углекислого газа, перенос растворов, органических веществ, вирусов и частиц различного происхождения.

После того как двух или трехмерные данные о строении образца получены, следующим шагом в изучении пористых сред и многофазных материалов является описание структуры. Под описанием образца, в первую очередь, понимается его некоторое количественное представление, в том числе в виде набора определенных параметров или в виде математической функции (которая, в свою очередь, может быть параметризована в случае надобности). Такое количественное описание необходимо не только для описания структуры как таковой, но и для сравнения структур между собой, их классификации, анализа представительности, поиска корреляций с различными физическими свойствами и т.п. В зависимости от образца необходимо использовать не только различные методы исследования, но и описания структуры. Поэтому в различных областях науки сложились свои подходы для решения этой проблемы. Так, например, методы описания структуры биологических образцов значительно отличаются от петрографических и имеют свою специфику. Основной акцент данной работы сделан на

пористых средах, поэтому далее детально рассматриваются только методы описания для таких пористых материалов как горные породы и грунты.

Традиционно характеристики пористой среды включают в себя гранулометрический или агрегатный состав [57], плотность, пропорции содержащихся веществ (кварц, органическая фаза, карбонаты, пирит, различные типы глины и т.п.) и любые другие. Все эти показатели лишь косвенно характеризуют строение пористого материала и его порового пространства. Для прямого количественного описания структуры и порового пространства в шлифах и сколах используют различные характеристики размеров, формы и ориентации плоских срезов пор и агрегатов [58-60]. Однако и этих характеристик недостаточно, чтобы полностью описать именно трехмерное строение объекта, которое целиком определяет все его физические свойства [10, 21-22]. Часто по изображениям порового пространства или по данным капиллярометрии пытаются рассчитать параметры извилистости или связности порового пространства, на основе которых в дальнейшем предсказываются свойства пористой среды. Такие методы требуют подбора параметров, которые зачастую не имеют физического смысла [29, 61]. Неудивительно, что оценки по таким моделям для различных пористых материалов оказывались неточными, в особенности для фильтрационных характеристик [62-63]. По дискретизированным данным также можно рассчитывать фрактальные размерности порового пространства [64-66]. Еще одним интересным методом являются функционалы Минковского [53, 67-68], однако при близком рассмотрении становится понятно, что общее количество информации, содержащейся в функционалах Минковского, значительно меньше, чем необходимо для описания даже относительно простой структуры.

Одним из стандартных подходов к получению информации о физическом строении пористой среды является оценка распределения пор по размерам по данным капиллярной кривой, полученной вытеснением воздухом или ртутью, или по адсорбционной кривой [69-70]. Однако такие подходы не раз подвергались критике [13, 30] по целому ряду причин:

1. неспособностью модели капиллярных трубок (capillary bundle), на которой построено вычисление, передавать связность пор различного размера [66];

2. круглое сечение капилляров в модели, которое может содержать лишь воду или воздух, но не то и другое одновременно, как все реальные поры со сложной геометрией (этот момент недавно был проработан с помощью треугольных сечений пор [71], но это не устранило недостатки трубочной модели);

3. модель не учитывает постепенный дренаж из пор сложной геометрии при изменении порового давления, что приводит к появлению в полученном распределении пор по размерам слишком малых пор, в которых теоретически должна находиться связанная вода.

Двух- или трехмерную структуру пористой среды можно также охарактеризовать и одним из наиболее популярных методов описания строения порового пространства на основе теории локальной пористости [54]. Множество авторов показывали, например, [40], что для пористых сред зависимость между пористостью и проницаемостью (влагопроводностью) является ложной и не может быть использована для предсказания одного свойства через другое, а также для апскейлинга проницаемости. Последний представляет собой способ перехода от микроскопического свойства, например, влагопроводности, измеренной на ненарушенном цилиндрическом образце диаметром 5 см, к макроскопическому свойству — влагопроводности целого горизонта, из которого был взят этот ненарушенный образец. По этой причине, используя анализ локальной пористости, нужно понимать его ограничения. Тем не менее, одна из его основных частей, а именно распределение локальных перколяций, по-прежнему можно использовать как очень полезную характеристику связности порового пространства.

Трехмерное строение порового пространства можно описать с помощью морфологии выделенной сеточной модели — распределения пор по размерам, формам и их связности (так называемого connection number, который показывает количество соединений у каждой поры с соседями) [72-73].

Существует метод, который позволяет количественно описать внутреннее строение какого-либо объекта, он основан на расчете так называемых корреляционных функций [74]. Корреляционные функции имеют очень важное свойство — можно оценить, сколько информации они могут нести о данной структуре. Такая оценка производится путем исследования параметров алгоритма реконструкции и количества вырожденных состояний, когда один и тот же набор корреляционных функций соответствует разным структурам [75-76]. В настоящее время неизвестно, какой набор корреляционных функций является универсальным в каждом конкретном случае и достаточным для точного описания строения и свойств. Тем не увеличивать количество информации 0 структуре, которую несет менее, набор корреляционных функций, можно за счет увеличения их типов и количества. Различные корреляционные функции использовались для описания самых разных структур: гелей [77], песчаников [78-79], звезд и галактик [80], керогена в отложениях сланцеподобных пород [2], бетона [81], фильтров [35, 82], нанокомпозитов [83-84], и даже пищевых продуктов [20]. Корреляционные функции являются потенциальным способом описания любой структуры, так как позволяют решить обратную задачу и реконструировать структуру по значениям корреляционных функций (см. Главу 2).

#### 1.6 Стохастические реконструкции трехмерных моделей

Получение трехмерных изображений строения пористых сред часто связано с большими трудностями – дорогостоящее оборудование, специальные лабораторные навыки, значительное время для проведения исследования. В связи с этими фактами предпринимались попытки разработки методов реконструкции трехмерной структуры по двумерным данным [44, 53, 85-88 и др.]. Было предложено большое количество методов реконструкции: Гауссовы поля (Gaussian random fields) [89], мультиточечная статистика (multi-point statistics) [87, 90-91], энтропийный метод (entropic descriptors) [92], по фрактальным размерностям [93], по корреляционным функциям [31, 35, 85-86, 94-95], последовательный (process-based) метод [44, 53, 88].

Все эти методы описания структуры пористых сред и материалов, хотя и несут некоторую информацию о ее строении, но не могут быть использованы для того, чтобы реконструировать структуру любого типа, используя лишь значения своих характеристик. Например, даже монодисперсные упаковки сфер могут обладать достаточно сложной структурой [96-97]; а упаковать одинаковые наборы полидисперсных сфер можно множеством способов. Этот простой пример показывает ограничения информации о гранулометрическом составе. Реконструкции на основе данных о фрактальной размерности даже для достаточно простых изображений получаются очень низкого качества [93]. В случае относительно простых по структуре песчаников Berea и Fontainebleau двух и трехмерные морфологические данные в качестве входных параметров позволяли получать качественные реконструкции последовательным методом (process-based method) [44, 88]. Но такой подход не работает для прочих пористых сред, например, почв и грунтов в виду различия в их генезисе [53, 98]. Каждый из перечисленных методов имеет свои преимущества при описании некоторых конкретных элементов структуры определенного материала или его фазы, но их сравнение между собой не проводилось.

В настоящий момент метод с применением мультиточечной статистики, является, пожалуй, самым популярным методом как для реконструкции структур пористых сред [87], так и в геостатистике [90]. Недавно предложенная модификация этого метода с совмещением фрагментов оригинального изображения действительно эффективна [91], но не дает никакой информации о строении, так как лишь складывает фрагменты мозаики в подобласти изображения некоторого размера. То же относится и к другим вариациям метода мультиточечной статистики, которые строят граф всех возможных конфигураций структуры и ее повторяемости.

Наиболее универсальный метод – реконструкции с помощью корреляционных функций и стохастической оптимизации имитацией «отжига» (simulated annealing) [35, 85-86, 94]. Данный

подход не получил сразу широкого распространения, как мультиточечные методы, из-за появления научных статей с критикой результатов пионерской статьи с оригинальным методом Енга-Торквато [85-86]. Среди недостатков приводились: анизотропия реконструкций по диагональным направлениям [99], недостаточная связность реконструированного порового пространства [54], невозможность реконструировать анизотропные структуры [100]. В настоящее время интерес к методу корреляционных функций растет и это видно в увеличении количества публикаций по данной тематике, а проблема связности была решена с использованием дополнительных корреляционных функций [95, 101].

Корреляционные функции не только дают статистическое описание структуры, но и позволяют быстро оценить и произвести апскейлинг свойства [10] с помощью так называемых точных пределов (rigorous bounds). Благодаря универсальности корреляционных функций как метода описания и возможности оценки количества информации о структуре набора корреляционных функций, метод Енга-Торквато выглядит наиболее перспективным. В настоящей работе показано, что с помощью некоторых модификаций и использования расчета корреляционных функций по направлениям данный метод позволяет решить все вышеотмеченные проблемы и получать реконструкции на качественно новом уровне.

#### 1.7 Выводы по главе

В многообразии различных естественных и искусственных многофазных материалов особым случаем выступают пористые среды, где одной из наиболее интересных фаз является поровое пространство. Для того чтобы сравнивать различные материалы между собой или рассчитывать их эффективные свойства необходимо описать структуру материала, желательно в строгом математическом виде. Чтобы такой способ описания структуры был применим к реальным материалам для решения практических задач, он должен обладать еще одним важным свойством – возможностью проводить реконструкцию структуры по значениям набора фиксированных параметров. В настоящей главе был проведен краткий обзор разных материалов и их свойств. Показано, что проблема описания и реконструкции структуры таких пористых сред и материалов является актуальной. На основе обзора классических методов описания, которые используются в настоящее время, было также показано, что большинство из них не могут быть использованы для реконструкции. Несмотря на значительный прогресс в описании и восстановлении структур, достигнутый за последние 20 лет, многие задачи попрежнему остаются нерешеными, или же решены частично. Отметим наиболее актуальные вопросы:

1) невозможность реконструкции анизотропных структур;

2) недостаточная точность реконструкций на основе классических подходов;

3) плохая сходимость обратной задачи (например, при использовании метода оптимизации имитацией «отжига») при значительном количестве критериев.

Настоящая диссертация посвящена решению задач, которые ставят эти вопросы. Таким образом, является создание методов описания и реконструкции пористых сред и многофазных материалов на основе корреляционных функций и верификация разработанных методов на примере реальных прикладных объектов: горных пород, почвогрунтов, многофазных материалов.

На основе обзора популярных методов стохастических реконструкций отмечено, что реконструкции с помощью корреляционных функций являются наиболее перспективным методом. В работе будет предложен новый класс методов описания и реконструкции пористых сред и материалов на основе модифицированного метода стохастической реконструкции и корреляционных функций, рассчитываемых по направлениям. Новые методы будут применяться для решения актуальных задач геофизики, почвоведения и материаловедения.

## Глава 2. Методы описания, восстановления пористых сред и верификации результатов

Здесь представлено описание существующих методов, на которых будет основываться дальнейшая работа рамках диссертации. Обоснованию выбора использования В корреляционных функций для реконструкций посвящена предыдущая глава. Данные алгоритмы были оптимизированы во время разработки соответствующих программных кодов. Для анализа структуры получаемых двух и трехмерных моделей методами стохастических реконструкций необходимы специальные метрики, для этого были выбраны морфометрический анализ пористой среды и теория локальной пористости и перколяции. Моделирование в масштабе пор с расчетом эффективных фильтрационных свойств для верификации реконструкций планируется проводить численным решением уравнения Стокса методом конечных разностей. Параллельная реализация данного алгоритма позволила проводить расчеты на образцах представительного размера, которые невозможно было осуществить с использованием бесплатных или коммерческих ресурсов на персональном компьютере. Сеточные модели служат для быстрого решения задач двухфазной фильтрации и случая определения газопроницаемости в нанопористости. Хотя автор принимал непосредственное участие в реализации методов верификации и анализа, эти методы были разработаны в соавторстве и приводятся для полноты изложения работы.

### 2.1. Корреляционные функции

В настоящей работе под корреляционными функциями будем понимать все функции, применимые к описанию и реконструкции многофазных сред (кластерная, линейная и др.). Каждая корреляционная функция описывает вероятность определенной конфигурации изображения, например, что точки на концах произвольного отрезка, лежащего на исследуемом изображении, находятся в одной и той же фазе. Наиболее полное описание корреляционных функций представлено в книге С. Торквато [10]. Определим бинарную индикаторную функцию  $I^{(i)}(\mathbf{x})$ , которая описывает принадлежность точек (пикселей на двухмерном изображении, вокселей на трехмерном изображении) той или иной фазе изучаемой структуры [4]. Для двухфазной системы, например, для пористой среды, индикаторная функция в каждой точке  $\mathbf{x}$ *d*-мерного Евклидова пространства  $\mathbb{R}^d$  приобретает следующий вид:

$$I^{(i)}(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1, \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{V}_i \\ 0, \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\overline{V}}_i \end{cases},$$
(2.1)

где  $V_i \in \mathbb{R}^d$  область занятая фазой *i*, а  $\overline{V}_i \in \mathbb{R}^d$  область не занятая фазой *i*. Далее определим простейший тип корреляционной функции – *n*-точечную корреляционную функцию (*n*-point probability function)  $S_n^{(i)}$ , которая показывает вероятность нахождения *n* точек в одинаковой фазе *i*:

$$S_n^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \langle I^{(i)}(\mathbf{x}_1), I^{(i)}(\mathbf{x}_2), \dots, I^{(i)}(\mathbf{x}_n) \rangle,$$
(2.2)

где **х** радиус-вектор.

Для статистически стационарной среды (т.е. для такой среды, где ее статистические параметры не зависят от области расчета) *n*-точечная корреляционная функция зависит не от абсолютных координат, а от расстояний между точками, то есть:

$$S_n^{(i)}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_n) = S_n^{(i)}(\boldsymbol{x}_{12}, \boldsymbol{x}_{13}, \dots, \boldsymbol{x}_{1n}),$$
(2.3)

для всех  $n \ge 1$ , где  $x_{ij} = x_j - x_i$ .

Теоретически *п*-точечные корреляционные функции можно применять для характеризации шлифов или томографических сканов, но для этого потребуется большое количество вычислительных ресурсов, особенно если учитывать процедуру реконструкции, которая будет описана ниже. Кроме того использование функций с n > 3 также представляет многочисленные трудности и в приложениях, как правило, используется меньшее количество точек. Енг и Торквато [85] утверждают, что сложность расчетов для n > 2 не компенсируется повышением точности описания и качества реконструкций. Примеры использования 3-точечной корреляционной функции в литературе встречаются крайне редко [80].

Очевидно, что значение 1-точечной корреляционной функции равно объемной доли бинарной фракции *i*:

$$S_1^{(i)}(\boldsymbol{x}) = \langle I^{(i)}(\boldsymbol{x}) \rangle = \varphi_i, \qquad (2.4)$$

что есть не что иное, как вероятность того, что случайно выбранная точка принадлежит фазе *i*.

2-точечная корреляционная функция  $S_2^{(i)}$  определяется как вероятность одновременного нахождения точек  $x_1$  и  $x_2$  в одинаковой фазе *i* (поры или твердая фаза, показанные на рис.2.1 белым и черным цветом соответственно)

$$S_2^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle I^{(i)}(\mathbf{x}_1), I^{(i)}(\mathbf{x}_2) \rangle$$
(2.5)

и является наиболее изученной функцией для описания случайных сред [1, 102]. Для статистически гомогенных сред функция зависит только от расстояния (ур.2.3), а потому можно записать, что:

$$S_2^{(i)}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) = S_2^{(i)}(\boldsymbol{r}), \qquad (2.6)$$

где  $r = x_{12}$  вектор между точками  $x_1$  и  $x_2$ . Для статистически гомогенной и изотропной среды корреляционная функция будет зависеть только от скалярного расстояния между точками, то есть:



Рисунок 2.1. Иллюстрация идеи расчета некоторых корреляционных функций (для простоты показан двухмерный случай). После наименования функции в скобках указаны фаза интереса и показано направление расчета

Для двухфазной статистически однородной среды соотношение корреляционных функций обоих фаз можно записать в следующем виде:

$$S_2^{(b)}(\mathbf{r}) = S_2^{(w)}(\mathbf{r}) - 2\varphi_w + 1.$$
(2.8)

(2.7)

где верхний индекс b и w показывает черную и белую фазу соответственно (рис. 2.1).

Корреляционные функции обладают некоторыми свойствами, наиболее важными из которых можно считать необходимые свойства реализуемости (то есть условия, при которых данная функция может быть реализована в виде двухфазной среды) [1]. Наиболее полный анализ таких свойств можно найти в работах [85, 102]. Перечислим здесь лишь некоторые основные свойства 2-точечной корреляционной функции.

Для r = 0 можно записать:

$$S_2^{(i)}(0) = \varphi_i. \tag{2.9}$$

А в случае, если в среде нет корреляций на больших расстояниях:

$$\lim_{|\mathbf{r}| \to \infty} S_2^{(i)}(\mathbf{r}) = \varphi_i^2.$$
(2.10)

Остальные свойства не являются достаточно явными и в целом выполняются при процедуре восстановлении пористой среды. Таким образом, 2-точечная корреляционная функция является наиболее изученной, для нее существует множество аналитических решений для упрощенных сред (например, пересекающиеся и не пересекающиеся круги/сферы и пр., [10, 102].

Автокорреляционная функция записывается как:

$$\chi(\mathbf{r}) = S_2^{(w)}(\mathbf{r}) - \varphi_w^2 = S_2^{(b)}(\mathbf{r}) - \varphi_b^2, \quad (2.11)$$

откуда видно, что данная корреляционная функция не различает фазы, т.е., улучшение описания среды за счет вычисления независимых корреляционных функций для различных фаз невозможно.

Автоковариационная функция (нормированная через объемные доли каждой из фаз) может быть записана через автокорреляционную (ур.2.11) функцию в виде:

$$f(\mathbf{r}) = \frac{\chi(\mathbf{r})}{\varphi_1 \,\varphi_2} = \frac{S_2^{(l)}(\mathbf{r}) - \varphi_l^{\ 2}}{\varphi_1 \,\varphi_2},\tag{2.12}$$

где  $\phi_1$  доля первой фазы,  $\phi_2$  доля второй фазы.

В последнее время было показано, что для описания и восстановления гетерогенных сред недостаточно 2-точечных корреляционных функций [86, 102], что связано с некоторым (в целом небольшим) количеством вырожденных состояний. В сложившихся условиях наиболее правильным можно считать направление в повышении точности описания структур с помощью дополнительных функций низкого порядка ( $n \le 2$ ). Каждая из них представляет вероятность того, что положение точек на концах отрезка или отрезок целиком должны удовлетворять некоторым условиям. В качестве таких функций были предложены:

- кластерная функция (*C*<sub>2</sub>, cluster function) [103];
- линейная функция ( $L_2$ , lineal path function) [104];
- функция хорды (chord length function) [105];

•различные функции поверхностей (например, surface-void function и surface-surface function) [10, 102];

• функция размера пор (pore-size function) [10].

Кластерная функция ( $C_2$ ) представляет собой вероятность того, что оба конца отрезка находятся внутри одного кластера (см. рис.2.1), и таким образом описывает связность структуры, что особенно важно для большинства пористых сред. В этом заключается ее отличие от 2-точечной корреляционной функции ( $S_2$ ), которая описывает вероятность только того, что обе точки находятся в одной фазе. Линейная функция ( $L_2$ ) представляет собой вероятность, что весь отрезок находится в одной фазе, как показано на рис.2.1. Функция хорды представляет собой вероятность найти отрезок некоторой длины на линии пересекающей весь домен из фазы и связана с линейной функцией. Различные функции поверхности описывают вероятность того, что обе точки находятся на поверхности разделения фаз или в ее окрестности. Функция размера пор есть вероятность нахождения сферы определенного радиуса целиком в одной фазе.

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. Замечания для статистически гомогенных сред (ур.2.7 и ур.2.9) аналогично справедливы для функций  $L_2$  и  $C_2$ .

Для вычисления кластерной функции ( $C_2$ ) фаза интереса разделяется на отдельные домены (кластеры) с использованием алгоритма раскраски Хошена-Копельмана [106] с учетом граничных условий, предложенных в работе [107]. В результате вычислений получается зависимость между значениями функций и расстояния r в выбранном направлении на изображении.

В данной работе корреляционные функции применяются только к двухфазным пористым средам, однако, аналогичный подход можно использовать для описания и восстановления большего количества фаз [108]. Например, в реальных пористых средах это могут быть поры, минеральная матрица, цементирующий материал, органическое вещество и т.д.

#### 2.2 Процедура стохастической реконструкции

Восстановление структуры пористой среды проводится по рассчитанному набору корреляционных функций. Используемая процедура реконструкции основана на методе Енга-Торквато, который получил свое развитие из метода стохастической оптимизации имитацией «отжига» [109]. Целью данной процедуры является приближение корреляционных функций имеющейся бинарной среды к функциям целевой бинарной среды с помощью перестановок точек в разных фазах. Рассмотрим случай восстановления по заданному набору корреляционных функций:  $f_2^{\alpha}(\mathbf{r})$ , где  $\alpha$  – тип функции, а r определяется из ур.2.6. Разницу между статистическим описанием для двух сред можно рассчитать в виде суммы квадратов разностей между значениями функций:

$$E = \sum_{r} \sum_{\alpha} [f_{2}^{\alpha}(r) - \hat{f}_{2}^{\alpha}(r)]^{2}, \quad (2.13)$$

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, соответственно). Определенную в ур.2.13 «энергию» *E* можно рассматривать как некое состояние системы, для минимизации которой и применяется метод имитации «отжига» описанный ниже.

В случае исследования материалов и геофизических пористых сред данные о системе выглядят как цифровое представление в виде пикселей/вокселей. Для реконструкции достаточно взять случайную среду и начать переставлять в ней пиксели, на каждом шаге проверяя, как меняется «энергия» согласно выражению 2.13. Однако, ввиду незнания структуры, в начале процедуры имеет смысл делать больше перестановок, даже если они не приводят к уменьшению *E*. Для данной цели отлично подходит следующий алгоритм Метрополиса, когда вероятность того, что случайная перестановка принимается, записывается как:

$$p(E_{old} \to E_{new}) = \begin{cases} 1, \Delta E < 0\\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right), \Delta E \ge 0 \end{cases}, (2.14)$$

где T — «температура» системы, согласно интерпретации распределения Больцмана в нижней части ур.2.14 для  $\Delta E \ge 0$ , и

$$\Delta E = E_{new} - E_{old}.$$
 (2.15)

Начальная «температура» T устанавливается так, чтобы вероятность принятия случайной перестановки при  $\Delta E \ge 0$  равнялась 0,5 [85, 102]. Основной целью применения данного алгоритма является достижение «энергией» E глобального минимума. Поэтому «охлаждение» системы обратно пропорционально логарифму номера перестановки  $T(k) \sim 1/\ln(k)$ , где k — номер перестановки. Существуют и другие варианты «охлаждения» системы, зависящие от большого числа параметров [35]. Однако на практике чаще используется более быстрый «план охлаждения», а именно  $T(k)/T(0) \sim \lambda^k$ , где  $\lambda$  меньше, но близко к 1 [85, 102]. На основании большого количества тестов и работ по реконструкции различных пористых сред [1-4, 9] для применения был выбран следующий «план охлаждения» в виде геометрической прогрессии:

$$T(k) = T(0)\lambda^{(k-1)}$$
. (2.16)

При выполнении метод имитации «отжига» занимает длительное время и требователен к вычислительным ресурсам. На сегодняшний день существует несколько подходов к его оптимизации и ускорению. Например, широко известный алгоритм распараллеливания со сменой состояний (mixing-of-states method) [109] помогает с поиском наилучшей конфигурации системы, но не дает существенного выигрыша по времени, потому что из-за частого копирования большого объема данных между процессами наилучшие результаты будут достигаться только на многопроцессорных вычислительных машинах с общей памятью. Другой метод ускорения направлен на расчеты промежуточных значений корреляционных функций и основан на идее, что при каждой перестановке пересчета требует только некоторое подмножество точек на изображении, на которое могла повлиять последняя перестановка [85, 102, 108]. Это подмножество определяется изначальным выбором способа расчета (рис.2.2), типом корреляционной функции и размерностью восстанавливаемой пористой среды. Кроме того, сократить время выполнения процедуры реконструкции позволяет ограничение длины отрезка для вычислений корреляционной функции |r| в ур.2.6. Значение этого параметра должно быть значительно больше, чем средний размер структурных элементов на изображении [102] и может быть оценено по исходному набору корреляционных функций. Максимальное значение |r| не может превышать линейный размер исходного изображения.

Другой способ ускорить реконструкцию — это улучшить поиск точек для перестановки. Случайная перестановка пикселей/вокселей приводит к значительному замедлению процедуры реконструкции из-за неэффективного выбора пар для перестановок, особенно при приближении к минимуму «энергии», когда в системе присутствуют изолированные точки, которые предпочтительно было бы объединить с соответствующей фазой [111]. В настоящей работе используется упрощение метода, предложенного в статье [35]. При поиске пары точек для перестановки случайным образом выполняется следующая последовательность действий:

1) выбор одной случайной точки на изображении,

2) выбор двух случайных направлений из возможных в данной размерности,

3) поиск двух точек по одной в каждом из двух направлений, удовлетворяющих следующим условиям: точки должны лежать на границе раздела фаз и принадлежать двум различным фазам.

Все модификации процедуры стохастической реконструкции в данной работе реализованы с периодическими граничными условиями, т.е. противоположные границы изображений соединены.

Еще одним важным моментом сборки/реконструкции является остановка процесса, то есть условие, когда мы считаем, что мы достигли необходимой точности. Существует два основных подхода:

1) выбор порогового значения  $\Delta E$ , при котором процесс считается завершенным;

2) некоторое значительное количество непринятых перестановок (например,  $10^5$ ) подряд.

В зависимости от решаемой задачи хорошо подходит тот или другой вариант. Выбранное пороговое значение «энергии» может рассматриваться как среднеквадратическая ошибка

метода при сборке/реконструкции, а также использоваться для оценки фракции неправильно расставленных пикселей/вокселей [94].

В заключение приведем краткое описание всей используемой методики (рис.2.2). Для процедуры восстановления бинарного изображения вначале проводится расчет необходимых корреляционных функций по оригинальному изображению, данный набор является целевым. Затем создается прототип реконструируемой структуры со случайной конфигурацией точек с заданной пропорцией фаз, которая определяется напрямую из значений корреляционных функций. После инициализации всех параметров алгоритма имитации «отжига» начинаются перестановки пар точек в разных фазах. После каждой перестановки проверяется изменение «энергии» согласно формуле 2.13 и принимается решение об удачности изменений по ур. 2.14. Перестановки продолжаются циклично до достижения условий завершения процедуры реконструкции и получения результирующего изображения.



Рисунок 2.2. Блок-схема алгоритма восстановления структуры среды, дополненная примером реконструкции массива кругов

#### 2.3 Моделирование материалов и сред

Отдельного упоминания заслуживает моделирование материалов И сред С определенными свойствами. В качестве исходных данных для сборки можно использовать аналитически полученные корреляционные функции, рассчитанные с различными параметрами. Для этой цели были предложены базисные функции для конструкции сред и материалов, сильно напоминающих естественные или созданные человеком структуры. В качестве примеров приведем следующие базовые функции для описания S<sub>2</sub> функций:

$$f(r) = \exp(-r/a),$$
 (2.17)

$$f(r) = \exp(-r/a)\cos(qr + \psi),$$
 (2.18)

....

где *а* — амплитуда, *q* — волновое число, а  $\psi$  — фазовый угол. Ур.2.17 описывает случайную дебаевскую среду, а ур.2.18 — демпфированную осциллирующую функцию. Данные функции могут применяться по отдельности или объединяться в более сложные комбинации [94]:

$$f(r) = \alpha_1 \exp(\frac{-r}{a}) + \alpha_2 \exp(\frac{-r}{a}) \cos(qr + \psi) + \alpha_3 \begin{cases} (1 - \frac{r}{c})^2, 0 \le r \le c\\ 0, r > c \end{cases}.$$
 (2.19)

Данное выражение представляет собой суперпозицию затухающей, осциллирующей и полиномиальной функций с коэффициентами  $\alpha$ , такими, что  $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$ .

Масштабирование аналитической 2-точечной корреляционной функции проводится по ур.2.12.

Таким образом, мы получаем множество различных аналитических функций, которые могут использоваться для стохастической реконструкции двухмерных или трехмерных структур.

Если для S<sub>2</sub> автокорреляционная функция может быть записана с помощью ур.2.17 и/или 2.18, то для использования L<sub>2</sub> (для обеих фаз) необходимо масштабировать линейную функцию, нормируя ее на необходимое соотношение бинарных фаз. Для данной цели можно использовать ур.2.20 [10].

$$L(r) = \varphi_1^{1 + \frac{2r(m+1)}{[\pi r(m+2)]}},$$
(2.20)

где *т* – параметр в распределении Шульца.

Моделирование структур с различными видами корреляционных функций открывает много новых возможностей для создания материалов с нужными свойствами. Общий алгоритм сборки представлен на рис.2.3.



Рисунок 2.3. Блок-схема алгоритма моделирования структуры среды с заданными параметрами с использованием корреляционных функций, дополненная примером двухфазной среды [5]

#### 2.4 Морфометрический анализ пористой среды

Для сравнения двумерных оригинальных изображений и реконструкций реальных пористых сред хорошо подходит стандартный морфометрический анализ [4]. При его проведении все кластеры, не относящиеся к твердой фазе, на изображении определяются как поры (обычно это белые области) и сохраняются отдельно для анализа. Для каждой поры на изображении измеряется площадь (*S*), периметр (*P*), продольный (*L*) и поперечный (*D*) габариты, угол отклонения длинной оси детали от вертикали (показатель ориентации). Схема с примерами показана на рис.2.4. Фиксируется также количество измеренных объектов (общий объем выборки). На основании измеренных параметров для каждой поры рассчитывали обобщенный фактор формы [59]:

$$F = \left(\frac{4\pi A}{P^2} + \frac{D}{L}\right)/2,$$
 (2.21)

где первый член в ур.2.21 определяет показатель  $R = 4\pi A/P^2$ , характеризующий отличие контура детали от окружности, а второй - показатель I = D/L, характеризующий изометричность контура. Показатель *F* имеет определенные преимущества при характеристике формы пор в шлифах и позволяет классифицировать поры с различными срезами от трещиновидных до округлых [112].



Морфологические параметры

а) площадь, *A*;
б) периметр, *P*;
в) продольный размер, *L*;
г) поперечный размер, *D*;
д) угол отклонения длинной оси детали от вертикали, *α*

е) фактор формы 
$$F = \left(\frac{4\pi A}{P^2} + \frac{D}{L}\right)/2$$

Рисунок 2.4. Основные параметры морфометрического анализа на примере реальной пористой среды [4]

Для комплексной характеристики строения порового пространства в оригинальных и восстановленных изображениях определяются дополнительные показатели [1]:

1. Распределение пор по форме. Описывается пятью частотами: содержанием трещиновидных ( $0 < F \le 0,2$ ), вытянутых изрезанных ( $0,2 < F \le 0,4$ ), изометричных изрезанных
(0,4<F≤0,6), изометричных слабоизрезанных (0,6<F≤0,8) и округлых (0,8<F≤1,0) макропор. Подробная схема показана на рис.2.5

2. Распределение пор по ориентации. Описывается тремя частотами: содержанием пор с вертикальной, наклонной и горизонтальной ориентацией. Первую группу составляли поры с показателями ориентации в интервалах  $0-30^{\circ}$  и  $150-180^{\circ}$ , вторую группу — с показателями ориентации в интервалах  $30-60^{\circ}$  и  $120-150^{\circ}$ , третью группу — с показателями ориентации в интервале  $60-120^{\circ 0}$  (см. рис.2.6).



Классификация пор По форме: 1) трещиновидные, 0<F<0.2 2) вытянутые изрезанные, 0.2<F<0.4 3) изометричные изрезанные, 0.4<F<0.6 4) изометричныу слабоизрезанные, 0.6<F<0.8 5) округлых, 0.8<F<1 По ориентации: 6) вертикальной 0-30° и 150-180° 7) наклонной, 30-60° и 120-150° 8) горизонтальной ориентировкой, 60-120°

Рисунок 2.5. Классификация пор с примерами, показанными в координатных осях I = D/L и  $R = 4\pi A/P^2$  [4]

Получившиеся восемь классов используются для сравнения оригинала и восстановленной пористой среды.

#### 2.5 Анализ на основе теории локальной пористости и перколяции

Теория локальной пористости [113] отлично подходит для верификации методов стохастической реконструкции двумерных и трехмерных изображений пористых сред. Для каждого анализируемого образца предполагается расчет четырех основных параметров: распределения локальных пористостей (*LPD*), характеристической длины ( $L^*$ ), локальных перколяционных вероятностей (*LPP*), общей доли перколирующих ячеек (*TP*). Пусть S - объем исследуемого образца в евклидовом пространстве  $\mathbb{R}^d$ , а M и P - непересекающиеся подмножества S, обозначают, соответственно, твердую фазу и поровое пространство. Тогда локальная пористость *LP*( $\vec{x}$ , L) может быть рассчитана следующим образом:

$$LP(\vec{\mathbf{x}}, \mathbf{L}) = \frac{\mathbf{V}(\mathbb{P} \cap \mathbb{K}(\vec{\mathbf{x}}, \mathbf{L}))}{\mathbf{V}(\mathbb{K}(\vec{\mathbf{x}}, \mathbf{L}))},$$
(2.22)

где V(X) - объем d- мерного куба (передвигаемого по множеству S),  $\mathbb{K}(\vec{x}, L)$  – куб со стороной L с центральным вектором  $\vec{x}$ , представляющий собой расчетную ячейку, в которой определяются локальные пористости и параметры пекроляции. В таком случае распределение локальных пористостей *LPD*( $\phi$ , L) рассчитывается в виде:

$$LPD(\varphi, L) = \frac{1}{m} \sum_{\vec{x}} \delta(\varphi - \varphi(\vec{x}, L)), \qquad (2.23)$$

где m - общее число положений мерных ячеек  $\mathbb{K}(\vec{x}, L)$ ,  $\varphi$  - пористость,  $\delta$  - дельта-функция. Можно рассчитать локальную пористость в пределах *L* для бесконечно малой и большой расчетных ячеек:

$$LPD(\varphi, L = 0) = \overline{\varphi}\delta(\varphi - 1) + (1 - \overline{\varphi})\delta(\varphi), \qquad (2.24)$$

где  $\overline{\phi} = V(\mathbb{P} \cap \mathbb{S})/V(\mathbb{S})$  - объемная пористость. В случае если образец макроскопически однороден:

$$LPD(\varphi, L \to \infty) = \delta(\varphi - \overline{\varphi}).$$
 (2.25)

Если последние два уравнения выполняются, то должна существовать особая характеристическая длина *L*\* такая, что:

$$L^* = \min\{L: LPD(0, L) = LPD(1, L) = 0\}.$$
(2.26)

Локальные перколяционные вероятности определяют связность внутри мерной ячейки при заданной локальной пористости. Зададим индикаторную функцию  $LI_{\alpha}$ , которая равна 1, если ячейка перколирует (фаза связывает противоположные грани куба) в определенном случае  $\alpha$ , или 0 — если нет. Примеры возможных случаев перколяции см. на рис.2.6.



Рисунок 2.6. Случаи перколяции пористой среды

Тогда локальная перколяционная вероятность *LPP* в любом направлении может быть рассчитана согласно:

$$LPP_{\alpha}(\varphi, L) = \frac{\sum_{\vec{x}} LI_{\alpha}(\vec{x}, L)) \,\delta_{\varphi,\varphi(\vec{x},L)}}{\sum_{\vec{x}} \delta_{\varphi,\varphi(\vec{x},L)}}.$$
(2.27)

Общая доля перколирующих ячеек определяется интегрированием по всем локальным пористостям:

$$TP_{\alpha}(L) = \int_{0}^{1} LPD(\phi, L)LPP_{\alpha}(\phi, L)d\phi.$$
 (2.28)

Таким образом, получаем еще один набор инструментов для количественного описания пористости, анизотропности (по различным направлениям) и связности в пространстве на разных масштабах. Особый интерес представляет характеристическая длина, которая может показать, что при определенных условиях размер исследуемого образца может быть не представительным, а также выявить особенности внутренней структуры в различных генетических слоях.

## 2.6 Гибридный метод

Данный тип реконструкции соединяет в себе последовательный (process-based) метод и метод имитации "отжига" с корреляционными функциями. На первом этапе создается упаковка сфер/гранул, дискретизируется в трехмерном пространстве, а на втором этапе в ней происходит перестановка вокселей для совмещения реального и моделируемого набора корреляционных функций.

В основе последовательного метода лежит упаковка полидисперсных сфер заданного гранулометрического состава (рис.2.7). Паковка сфер происходит одним из двух алгоритмов: насыпной метод (drop and roll) с низкой или высокой энергией [44], и метод Любачевского-Стиллинжера. Последний метод молекулярной динамики для монодисперсных сфер [114] был модифицирован для упаковок полидисперсных сфер заданного гранулометрического состава. После проведения процедуры упаковки она дискретизируется для получения необходимого разрешения.



Рисунок 2.7. Пример упаковки сфер по заданному распределению диаметров (слева) и применения алгоритма огранки минеральных зерен (справа)

Пространство моделирования представляет собой множество  $V = [0,1)^3$ — брус в трехмерном евклидовом пространстве  $\mathbb{R}^3$ . Оно разбито на ячейки. Множество ячеек строится таким образом:

$$C = \left\{ c_{i,j,k} \middle| i, j, k \in \{1, 2, \dots, G\} \right\},$$
(2.29)

где *G* — натуральное число, обозначающее количество ячеек вдоль стороны куба *V*.

При этом

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in c_{i,j,k} \Leftrightarrow x_1 \in \left[\frac{i-1}{G}, \frac{i}{G}\right), x_2 \in \left[\frac{j-1}{G}, \frac{j}{G}\right), x_3 \in \left[\frac{k-1}{G}, \frac{k}{G}\right).$$
(2.30)

Для работы с многофазными материалами определим множество из h фаз, каждую из которых обозначим натуральным номером  $H = \{1, 2, ..., h\}$ . Цифра «0» будет в данном случае зарезервирована под фазу «поровое пространство». В пространстве моделирования присутствует N возможно движущихся сферических частиц, их можно представить математически множеством S:

$$S = \{s_1, s_2, \dots, s_N\},$$
 (2.31)

при этом

$$s_i = (\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, r_i, m_i, \xi_i). \tag{2.32}$$

Каждая сферическая частица  $s_i$  представима в виде вектора из 5 элементов:  $\mathbf{x}_i \in V$  — радиусвектор центра частицы;  $\mathbf{v}_i$  — вектор скорости движения частицы;  $r_i \in (0, 0.5)$  — радиус частицы;  $m_i$  — масса частицы;  $\xi_i \in H$  — фаза, к которой относится частица.

Для алгоритма Любачевского-Стиллинджера действует периодическое граничное условие. Для гравитационного алгоритма ситуация, когда какая-либо точка **х** ∉ *V*, запрещена и интерпретируется, как ошибочная.

Все сферы расположены в ячейках, т.е.

$$\forall s_n = (\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, r_i, m_i, \xi_i), n = \{1, 2, \dots, N\} \exists c_{i,j,k} \in C : \mathbf{x}_n \in c_{i,j,k}.$$
(2.33)

Отсюда можно определить функцию нахождения соседей порядка *t*:

$$S_R^t(s) = \{ s_n | s \in c_{i,j,k}, s_n \in c_{u,v,w}, |i - u| < t, |j - v| < t, |k - w| < t \}.$$
(2.34)

При дискретизации множество фаз остается тем же. Пространство моделирования делится на  $D^3$ подмножеств, представляющих собой одинаковые кубические брусы в  $\mathbb{R}^3$ , называемые вокселями. Таким образом, имеем множество вокселей, каждый из которых принадлежит к какой-либо одной фазе:

$$P = \left\{ p_{i,j,k} \middle| p_{i,j,k} \in H \cup \{0, 255\} \right\} : i, j, k \in \{1, 2, \dots, D\}.$$
(2.35)

Рассмотрим основные математические аспекты алгоритма Любачевского-Стиллинджера. Радиусы частиц задаются случайным образом, согласно распределению, переданному во входных данных. При этом распределение дает лишь множитель  $k_r$ , а сам радиус частицы рассчитывается по формуле:

$$r = k_r \sqrt[3]{\frac{3f_i}{4\pi NM(r^3)}},$$
 (2.36)

где N – число частиц;  $f_i$  – начальное значение коэффициента упаковки;  $M(r^3)$  – математическое ожидание куба радиуса частицы, соответствующее заданному распределению.

Давление в системе определяется следующим образом:

$$p = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{N} m_i \mathbf{v}_i^2.$$
 (2.37)

При столкновении частиц s<sub>i</sub> и s<sub>i</sub> происходит обмен скоростями по следующему правилу:

$$\mathbf{v}_{i}' = \left(\mathbf{v}_{j}, \frac{\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{j}}{\|\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{j}\|}\right) + \mathbf{v}_{i} - \left(\mathbf{v}_{i}, \frac{\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{j}}{\|\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{j}\|}\right);$$
$$\mathbf{v}_{j}' = \left(\mathbf{v}_{i}, \frac{\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{j}}{\|\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{j}\|}\right) + \mathbf{v}_{j} - \left(\mathbf{v}_{j}, \frac{\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{j}}{\|\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{j}\|}\right).$$
(2.38)

Начальное число ячеек на сторону куба в сетке определяется по формуле:

$$G = \left[\frac{1}{2\max_{s_i \in S} r_i}\right],\tag{2.39}$$

что справедливо и для гравитационного алгоритма.

Отдельно опишем алгоритмы моделирования строения агрегатов на основе оригинального гравитационного алгоритма. Радиусы частиц задаются выражением:

$$r = \frac{k_r}{8} \sqrt[3]{\frac{1}{NM(r^3)}},$$
(2.40)

где коэффициент  $k_r$  имеет тот же смысл, что и в аналогичных расчетах для предыдущего алгоритма.

Сила гравитации, действующая на движущуюся частицу, равна:

$$\mathbf{F}(s_{i}) = \begin{cases} gm_{i} \frac{\mathbf{x}_{0} - \mathbf{x}_{i}}{\|\mathbf{x}_{0} - \mathbf{x}_{i}\|^{3}} \sum_{j=1}^{i-1} m_{j}, S_{R}^{1}(s_{i}) = \emptyset; \\ gm_{i} \left( \mu \frac{\mathbf{x}_{0} - \mathbf{x}_{i}}{\|\mathbf{x}_{0} - \mathbf{x}_{i}\|^{3}} \sum_{j=1}^{i-1} m_{j} + \sum_{s_{k} = S_{R}^{1}} \frac{\mathbf{x}_{0} - \mathbf{x}_{k}}{\|\mathbf{x}_{0} - \mathbf{x}_{k}\|^{3}} m_{k} \right), S_{R}^{1}(s_{i}) \neq \emptyset. \end{cases}$$

$$(2.41)$$

При совершении т.н. дальнего шага, когда  $S_R^2(s_i) = \emptyset$ , координаты и скорость частицы изменяются следующим образом:

$$\mathbf{v}_{i}^{\prime} = \mathbf{v}_{i} + \frac{\mathbf{F}_{i} \sqrt{(\mathbf{v}_{i}, \mathbf{v}_{i}) + 2\sqrt{\left(\frac{\mathbf{F}_{i}}{m_{i}}, \frac{\mathbf{F}_{i}}{m_{i}}\right)} - \|\mathbf{v}_{i}\|}{2m_{i}};$$

$$\mathbf{x}_{i}^{\prime} = \mathbf{x}_{i} + \frac{1}{G}(\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{0}).$$
(2.42)

В ур.2.42 через  $\mathbf{x}_0$  обозначен центр масс.

Прежде чем перейти к расчетам для ближнего шага, определим функцию нахождения соседей частицы вдоль вектора **n**:

 $S_R^t(s_k, \mathbf{n}) = \{s_i | s_i \in S_R^t; (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i, \mathbf{n}) > 0; \exists \mathbf{x}' : \|\mathbf{x}' - \mathbf{x}_i\| \le r_i, \exists \tau \in \mathbb{R}: \mathbf{x}' = \mathbf{x}_k + \tau \mathbf{n}\}.$  (2.43) Для ближнего шага сначала происходит обнаружение возможных коллизий, т.е. ситуаций пересечения двух частиц после совершения перемещения, и при наличии таковых по следующей формуле рассчитывается максимальная длина шага:

$$d_{\max}(s_k) = \min_{s_i \in S_R^2(s_k, \mathbf{v}_k)} \left( \left( \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k, \frac{\mathbf{v}_k}{\|\mathbf{v}_k\|} \right) - r_k \right).$$
(2.44)

После этого частица смещается на длину  $d_{\max}$  в направлении движения, а затем останавливается, упираясь в одну из соседних. Если же потенциальных коллизий обнаружено не было, тогда ее движение продолжается, и ближний шаг выполняется в соответствии со схемой Эйлера интегрирования уравнения второго закона Ньютона, где сила рассчитывается по формуле, приведенной ранее.

Алгоритм добавления глины или органического вещества обрабатывает дискретную модель системы, при этом использует некоторые данные из непрерывной модели (рис.2.8). Математическая сторона его работы следующая. Возьмем частицу  $s_n \in S$  и определим новую величину:

$$r_N(s_n, \mathbf{n}, r_{\max}) = \begin{cases} \min_{s_i \in S_R^1(s_n, \mathbf{n})} (\|x_i - x_n\| - r_i), S_R^1(s_n, \mathbf{n}) \neq \emptyset; \\ r_{\max}, S_R^1(s_n, \mathbf{n}) = \emptyset. \end{cases}$$
(2.45)

Она показывает расстояние от поверхности частицы  $s_n$  до ближайшей соседней в направлении заданного вектора с учетом максимальной удаленности, это расстояние не может превысить некоторую величину. Данное ограничение необходимо, т.к. без него возможны случаи, когда искомое расстояние — бесконечно большая величина.

Далее для частицы *s*<sub>n</sub> зададим множество:

$$J(s_n, a, \gamma, r_{\max}) = \left\{ \mathbf{x} \middle| \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_n\| \le r_n + \min\left(a\left(r_N\left(s_n, \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_n}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_n\|}, r_{\max}\right)\right)^{\gamma}, r_N(s_n, \mathbf{x} - \mathbf{x}_n, r_{\max})\right) \right\}, (2.46)$$

которое будет отражать то, как на ней должно образовываться третья фаза, например, глина, органическое вещество. Тройка аргументов, стоящих после  $s_n$ , являются параметрами алгоритма.



Рисунок 2.8. Двумерная визуализация алгоритма образования органического вещества

Теперь определим образование третьей фазы, как отображение  $C: P \times \mathbb{R}^2_+ \times \mathbb{R} \to P$  такое, что:

$$C(p_{i,j,k}, a, \gamma, r_{\max}) = \begin{cases} p_{i,j,k}, p_{i,j,k} > 0;\\ 255, \exists s_n \in S: \mathbf{x}(p_{i,j,k}) \in J(s_n, a, \gamma, r_{\max}). \end{cases}$$
(2.47)

Как видно из предыдущей формулы, воксель может либо сохранить фазу, либо перейти в третью фазу при определенных условиях. Данная формула является определяющей для алгоритма образования третьей фазы.

Получив модель пористой среды можно ее модифицировать на втором этапе гибридного метода с помощью алгоритма «отжига» и расчетов корреляционных функций. Обязательным условием для этого является наличие изображения реальной пористой среды. В зависимости от задачи изменениям может подвергаться только одна фаза, две или все три, присутствующие в модели.

#### 2.7 Решение уравнения Стокса методом конечных разностей

Для верификации алгоритмов трехмерной реконструкции хорошо подходит сравнение расчетных абсолютных проницаемостей оригинальной и восстановленной пористой среды. Рассмотрим однофазное течение вязкой несжимаемой жидкости в пористой среде. В общем случае данное явление описывается уравнениями Навье-Стокса для несжимаемой жидкости [115]:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} - \frac{\eta}{\rho}\Delta\mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \text{ grad } p = 0\\ \text{div } \mathbf{v} = 0, \end{cases}$$
(2.48)

где  $v = (v_x, v_y, v_z)$ , — поле скоростей,  $\eta$  — вязкость флюида,  $\rho$  — его плотность, p — поле давлений. Считая число Рейнольдса малым для изучаемых процессов (фильтрация углеводородов в породах-коллекторах или подземных вод в аквиферах, течение в пористых фильтрах и т.д.):

$$R = \frac{\rho v l}{\eta}, R \ll 1, \tag{2.49}$$

можно пренебречь членом вязкости  $(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v}$  в уравнении движения, т.к.  $(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v}\propto \frac{v^2}{l}$ , а  $\frac{\eta}{\rho}\Delta\mathbf{v}\propto \frac{\eta v}{\rho l^2}$ , и отношение порядков величин составляет как раз число Рейнольдса *R* [115]. Здесь v — линейная скорость тока в точке (модуль вектора), *l* — характеристический размер канала. Предполагается также, что течение по завершении моделирования становится стационарным, т.е.  $\frac{\partial v}{\partial t} = 0$ , поэтому результирующие поля скоростей и давлений должны удовлетворять системе:

$$\begin{cases} \text{grad } p - \eta \Delta \mathbf{v} = 0\\ \text{div } \mathbf{v} = 0. \end{cases}$$
(2.50)

В выбранной расчетной области в начале моделирования создается разность давлений такая, что градиент давления всюду имеет одинаковую положительную величину и сонаправлен с осью, вдоль которой моделируется течение и определяется проницаемость. Всем элементам жидкости сообщается некоторая начальная скорость  $v_0$ . Далее через определенное число шагов моделирования, на каждом из которых пересчитывается сначала поле скоростей,

затем поле давлений, наблюдается сходимость поля  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$  к установившейся величине  $\mathbf{v}_{cm}(\mathbf{x})$ , удовлетворяющей системе 2.50 [6].

В процессе моделирования решается задача Стокса [115]. А именно, требуется в ограниченной липшицевой области  $\Omega \subseteq [0, N]^3$  найти вектор-функцию  $\mathbf{v} : \Omega \to R^3$  и скалярную функцию  $p : \Omega \to R$ , являющиеся соответственно скоростью и давлением потока жидкости, такие что:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} - \eta \Delta \mathbf{v} + \text{grad } p = 0 \text{ B } \Omega,$$
  
div  $\mathbf{v} = 0 \text{ B } \Omega,$   
 $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0} \text{ Ha } \partial \Omega,$   
 $\mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}).$  (2.51)

Расчетная область  $\Omega$  представляет собой подмножество кубического бруса  $B \subset R^3$ . Данный брус разбит на  $N^3$  равных элементарных областей – вокселей. Каждый из вокселей также является кубом и может целиком относиться либо к твердой фазе, либо к поровому пространству. Область  $\Omega$ , имеющая такое строение, очевидным образом поддается дискретизации, что необходимо для приближенных расчетов на ЭВМ. На внешних границах бруса *B* задано периодическое граничное условие, т.е. поведение процесса вблизи границы за ее пределами считается идентичным тому, которое имеет место внутри бруса *B* с противоположной стороны на том же расстоянии от его границы. Расчет течения производится только в поровом пространстве.

Пространственная дискретизация функций  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  и  $p(\mathbf{x})$  производится на разнесенной сетке, где давления определяются в центрах ячеек, а скорости — в центрах их границ [116]. Пример фрагмента такой сетки для двумерного случая изображен на рис.2.9.



Рисунок 2.9. Пример фрагмента двумерной разнесенной сетки с отмеченными на ней узлами, в которых задается давление p и компоненты скорости  $u = v_x$  и  $v = v_y$ .

Серым отмечена твердая фаза, внутри нее узлов нет [6]

Для решения выбран метод конечных разностей и явные условно устойчивые схемы второго и четвертого порядка точности по расстоянию. Проблему при численном интегрировании по времени создает наличие условия div v = 0 в постановке задачи. Для разрешения данной проблемы был применен метод искусственной сжимаемости [115], при котором вводится семейство возмущенных систем, описываемых уравнениями для слабо сжимаемой жидкости, где плотность  $\rho$  линейно зависит от давления p, и коэффициент пропорциональности  $\varepsilon > 0$  мал:

$$\rho = \rho_0 + \varepsilon p. \tag{2.52}$$

Без ограничения общности можно принять для простоты  $\rho_0 = 1$ , т.к. при делении членов уравнений движения на эту величину получаются те же результаты.

Рассмотрим уравнение неразрывности для общего случая, когда имеется зависимость от времени *t*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} + \mathbf{v} \operatorname{grad} \rho = 0.$$
(2.53)

Дифференцируем 2.52 по времени и преобразовываем члены ур.2.53:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial p}{\partial t},$$

grad 
$$\rho = \frac{\partial \rho}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial \rho}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial z} \mathbf{k} = \varepsilon \left( \frac{\partial p}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial p}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial p}{\partial z} \mathbf{k} \right) = \varepsilon \operatorname{grad} p,$$
 (2.54)  
**v** grad  $\rho = \varepsilon (\mathbf{v} \operatorname{grad} p).$ 

После подстановки выражений из 2.52 и 2.54 в ур.2.53 оно принимает вид:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{div} \mathbf{v} + p \operatorname{div} \mathbf{v} + \mathbf{v} \operatorname{grad} p = 0.$$
(2.55)

Принимая во внимание то, что течение происходит при малых числах Рейнольдса, а также то, что  $\varepsilon > 0$  мало, можно пренебречь четвертым и третьим членами ур.2.55 соответственно. Таким образом, расчеты основываются на уравнениях:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} - \eta \Delta \mathbf{v} + \text{grad } p = 0 \\ \varepsilon \frac{\partial p}{\partial t} + \text{div } \mathbf{v} = 0. \end{cases}$$
(2.56)

Для дискретизации используем конечные разности второго и четвертого порядков, а производную вдоль оси *x* представим одинаково для всех вокселей вне зависимости от геометрии области расчета:

$$\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} \approx \frac{v_x (x_0 - \delta x) - 2v_x (x_0) + v_x (x_0 + \delta x)}{2(\delta x)^2}$$
(2.57)

для второго порядка точности,

$$\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} \approx \frac{-v_x (x_0 - 2\delta x) + 16v_x (x_0 - \delta x) - 30v_x (x_0) + 16v_x (x_0 + \delta x) - v_x (x_0 + 2\delta x)}{12(\delta x)^2}$$
(2.58)

для четвертого порядка. Расчеты, касающиеся направлений, перпендикулярных оси *x*, выполняем с учетом геометрии области Ω. А именно, отслеживаем положение ближайших вокселей твердой фазы вдоль выбранных направлений, которые являются локальными границами. Для случая второго порядка точности рассматриваем два соседних вокселя, не отделенных от рассматриваемого твердой фазой, для четвертого — соответственно, четыре.

Приведем общее описание алгоритма расчета. Алгоритм состоит из двух основных этапов — предварительного анализа геометрии расчетной области и непосредственно моделирования течения. Анализ необходим для того, чтобы, с одной стороны, учесть особенности геометрии в каждой ячейке сетки и при этом избежать повторного выполнения одних и тех же операций, с другой стороны. В результате такого анализа мы получаем структуры данных, хранящие информацию о том, в каких узлах и каким образом необходимо пересчитывать поле давлений и каждую из трех ортогональных компонент поля скоростей [6]. Пересчет давления осуществляется только внутри порового пространства, поэтому все ячейки, занятые твердой фазой, пропускаются. Обязательным условием для пересчета компоненты поля скоростей, параллельной некоторой координатной оси, является то, чтобы обе ячейки, содержащие грань, на которой расположен узел сетки по компоненте скорости, были свободными, т.е. относящимися к пустотному пространству. Отметим, что расчетная область имеет увеличенный размер на границах для того, чтобы было возможно применение периодического граничного условия. Величина утолщения границ с каждой стороны равна пространственному порядку точности. Геометрия на данных границах повторяет геометрию той части области, которая находится около противоположной грани.

Расчет начинается с обнуления поля скоростей и давлений, после чего задается равномерный градиент давления вдоль оси *x*, величина которого равна 1 условной единице на воксель, если входные параметры не предполагают другого. Далее задается начальное поле скоростей, *y*- и *z*-компоненты которого равны нулю, а *x*-компонента задается входным параметром. От данного начального приближения может сильно зависеть скорость сходимости и перехода системы в стационарное состояние. После этого к полям применяется периодическое граничное условие, и затем следует итерационный процесс, в конечном счете приводящий к картине установившегося течения внутри расчетной области. На каждой итерации выполняется три действия: пересчет поля скоростей, пересчет поля давлений, применение периодического граничного условия.

На каждой из итераций проверяется условие останова, которое определяется относительным изменением средней скорости тока в области. Также алгоритм позволяет задавать следующие управляющие параметры: порядок точности, максимально возможное число итераций, вязкость, модуль искусственного сжатия, шаг по времени, градиент давления, начальное значение *x*-компоненты поля скоростей [6]. Результаты расчетов представлены полем скоростей (отдельно по каждой компоненте и по модулю), полем давлений, средним значением скорости и значением абсолютной проницаемости пористого образца.

После того, как поле скоростей рассчитано, необходимо определить абсолютную проницаемость среды согласно закону Дарси:

$$K = \frac{\eta LQ}{\Delta pS},\tag{2.59}$$

где K — абсолютная проницаемость,  $\eta$  — динамическая вязкость, L — толщина, между которой создается разность давлений  $\Delta p$ , Q — расход жидкости, S — площадь поперечного сечения. При этом считаем, что S — это полная площадь поперечного сечения куба, т.к.

48

разность давлений сообщается ей. Далее выберем произвольно некоторое сечение и вычислим расход жидкости через него:

$$Q = \langle v \rangle S_{eff} , \qquad (2.60)$$

где Q — искомый расход жидкости,  $\langle v \rangle$  — средняя по поровому пространству скорость в заданном сечении, например выходном, а  $S_{eff}$  — его эффективная площадь, равная площади поперечного сечения порового пространства. Отметим, что ввиду условия несжимаемости жидкости и справедливости условия неразрывности расход во всех остальных сечениях будет таким же. Теперь, принимая  $\Delta p/L = \text{grad } p = 1$ , как было задано начальными условиями, рассчитываем абсолютную проницаемость:

$$K = \frac{\eta \langle v \rangle S_{eff}}{S}.$$
 (2.61)

#### 2.8 Сеточные модели

Кроме прямого определения расчетной проницаемости по трехмерному дискретному изображению пористой среды существуют различные методы по упрощению порового пространства для уменьшения времени необходимого для расчетов. Одним из таких методов является хорошо зарекомендовавший себя метод выделения сеточных моделей (pore-network).

Сеточная модель (рис.2.10) условно представляет поровое пространство в виде объемных элементов упрощенной геометрии – пор, соединенных в единую систему каналами. Каналы могут иметь три основных типа поперечных сечений – круглое, треугольное и четырехугольное. Треугольные и прямоугольные сечения являются хорошей аппроксимацией реальных пор, так как позволяют одновременное течение нескольких флюидов (смачивающей и несмачивающей фаз) через одно поперечное сечение. Треугольник предполагается произвольной формы, что в свою очередь дает широкие возможности моделирования различных режимов двухфазного течения и придает модели высокую адекватность.



Рисунок 2.10. Трехмерная визуализация сеточной модели. Каналы всех типов поперечных сечений условно обозначены цилиндрами

В первую очередь все пустотное пространство подвергается анализу при помощи алгоритма вписания сфер максимального размера (maximal ball) (рис.2.11), который выделяет в нем сферические участки, каждый из которых содержит хотя бы один воксель, не принадлежащий ни одному другому участку [73, 117]. Выделение таких сфер происходит в три этапа: развертка, свертка, удаление вложенных. На этапе развертки из каждого вокселя, принадлежащего поровому пространству, ведется поиск соседних так же пустых вокселей по 26 направлениям, 6 из которых параллельны координатным осям, 12 диагональных, параллельных координатным плоскостям и 8 других определяются семейством векторов  $i_k = (\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ . Как только по одному из направлений найден воксель твердой фазы, развертка останавливается и фиксируется максимальный радиус сферы. Реальный же радиус определяется на этапе свертки, когда происходит проверка на принадлежность к поровому пространству всех вокселей, удаленных от центра не более чем на максимальный радиус. Ввиду дискретности модели целесообразно выделять верхнюю и нижнюю оценку радиуса. Верхняя оценка рассчитывается как расстояние от центра до ближайшего вокселя твердой фазы, нижняя – до наиболее удаленного пустого вокселя, принадлежащего сфере (рис.2.12). После выделения всех сфер происходит поиск и удаление вложенных в другие, т.к. они не несут полезной информации.



Рисунок 2.11. Иллюстрация к алгоритму вписания сфер максимального размера. Изображение фрагмента пустотного пространства (обозначено черным) (а), этап развертки (б), этап свертки (в), выделенная в результате сфера (г), поиск других сфер (д), удаление вложенных сфер (е)



Рисунок 2.12. Изображение сферы в дискретном пространстве, иллюстрирующее определение верхней (а) и нижней (б) оценки. Верхняя оценка при этом равна  $\sqrt{8}$ , а нижняя равна  $\sqrt{6}$  [73]

Чтобы выделить из полученного множества сфер непосредственно поры и каналы, их соединяющие, необходимо выполнить сортировку сфер по убыванию их радиуса и построить их иерархию. Сферы при этом ранжируются по размерам, начиная с самых больших. Те, что имеют более высокий ранг, поглощают все те, с которыми пересекаются и имеют меньший размер. Поглощенным сферам присваивается ранг на единицу ниже и т.д. и они именуются потомками той сферы, что их поглотила. При этом процесс поглощения производится одновременно для сфер с одинаковым рангом. Процесс завершается после того, как будут обработаны все имеющиеся сферы, в том числе и те, радиус которых наименьший. В полученной иерархии к каналам относятся те элементы, которые являются общими потомками

двух или более других. Соединенные иерархически в одно семейство сферы определяют положение, объем, сечение и форму поры или канала, который выделяется. Выделенные поры и каналы составляют сеточную модель, по которой ведутся все дальнейшие расчеты.

На основе выделенных сеточных моделей пустотного пространства можно проводить анализ пор и каналов, их распределения по размерам, объему, длине, связности (coordination number) (см. рис.2.13) и форме.



Рисунок 2.13. Связность порового пространства определяется количеством каналов, которые примыкают к поре

Следующим этапом обработки данных является расчет фильтрационных свойств образца – абсолютной проницаемости для случая однофазной фильтрации, а также фазовой и относительной проницаемости для случая двухфазной фильтрации. Рассмотрим способ определения абсолютной проницаемости для случая микропористости, т.е. все поры и каналы больше 1 мкм.

На первом этапе вся сеточная модель подразделяется на элементарные участки «пораканал» и «канал» (рис.2.14). Каждый элементарный участок обладает гидравлической проводимостью, определяемой из уравнения:  $g = k \frac{A^2 G}{\mu}$ , где коэффициент k зависит от типа поперечного сечения и равен 0.5 для круглого, 0.6 для треугольного и 0.5623 — для четырехугольного [26]; А — площадь поперечного сечения; G — фактор формы, равный отношению площади поперечного сечения к квадрату его периметра [41].



Рисунок 2.14. Разбиение сеточной модели на элементарные участки расчета течения и фильтрационных свойств [26]

Для того чтобы составить уравнения, необходимо сначала рассчитать  $g_{ij}$  — гидродинамическую проводимость участка, соединяющего поры *i* и *j*, ее можно выразить через следующее уравнение, в которое входят проводимости элементарных участков и их длины:

$$\frac{g_{ij}}{L_{ij}} = \frac{g_{p,i}}{L_{p,i}} + \frac{g_t}{L_t} + \frac{g_{p,j}}{L_{p,j}}.$$
(2.62)

Далее для каждого участка, соединяющего поры *i* и *j*, описываем течение, согласно формуле Хагена-Пуазейля:

$$\forall i, j = 1, ..., N \ q_{ij} = \frac{g_{ij} \Delta P_{ij}}{L_{ij}},$$
 (2.63)

где  $q_{ij}$  — поток флюида через участок,  $L_{ij}$  — длина участка,  $\Delta P_{ij}$  — разность давлений на его концах.

Система линейных уравнений составляется, исходя из того, что суммарный поток флюида через каждую пору равен нулю (жидкость предполагается несжимаемой):

$$\forall i = 1, ..., N \; \sum_{j} q_{ij} = 0,$$
 (2.64)

где i — номер поры, N — число пор. Неизвестными в системе являются значения давлений в центрах пор, а коэффициенты, тогда как остальные величины (длины участков между порами, их гидродинамические проводимости и давления на внешних входах и выходах сеточной модели) известны. Система решается алгебраическим мультисеточным решателем [118], после чего рассчитываются значения  $q_{ij}$ , суммированием которых для внешних входов и выходов вычисляется общий поток Q через сеть. Это дает возможность выразить проницаемость всего образца через закон Дарси (ур.2.59).

Кроме того рассчитывается параметр пористости — величина, являющаяся электродинамическим аналогом проницаемости и определяемая формулой:

$$F = \frac{R}{R_w},\tag{2.65}$$

где в числителе стоит электрическое сопротивление сеточной модели (т.е. предполагается, что твердая фаза не проводит электрический ток), полностью насыщенной водой, а в знаменателе — сопротивление воды, взятой в объеме образца породы. Общий принцип определения параметра пористости такой же, при помощи решения системы линейных уравнений, только в данном случае совместно используются первое и второе правила Кирхгофа.

## 2.9 Двухфазная фильтрация в сеточных моделях

При моделировании двухфазного течения ключевыми являются два процесса – дренаж (drainage) и насыщение (imbibition), когда несмачивающая фаза вытесняет смачивающую и Результатом последовательного моделирования этих наоборот. процессов являются капиллярные кривые и значения фазовых и относительных проницаемостей флюидов при различных значениях перепада внешнего давления. Для моделирования капиллярных явлений применяется квазистатический подход, который предполагает расчет установившегося положения менисков для каждого значения давления. Таким образом, эволюционное моделирование менисков проводить не нужно, а влияние вязких сил считается несущественным. Фильтрационные свойства определяются при помощи того же подхода, что был описан в предыдущем пункте, но с учетом специфики распределения флюидов в канале (рис.2.15), одновременного течения смачивающей и несмачивающей фаз и различных капиллярных явлений. Положение менисков, и радиусы кривизны границ раздела сред определяются из уравнения Юнга-Лапласа, площади поперечного сечения, занимаемые смачивающей и несмачивающей фазами, рассчитываются геометрически.



Рисунок 2.15. Возможное распределение флюидов в поперечном сечении каналов: изначальное состояние — насыщенное смачивающей фазой (а), частичное вытеснение смачивающей фазы в

результате дренажа (б), частичное или полное восстановление насыщенности смачивающей фазой в зависимости от величины капиллярного давления и изменения угла смачивания за счет

долговременного контакта несмачивающей фазы с твердой фазой (в), (г) [26]

Наиболее сложной задачей является моделирование насыщения, при этом необходимо учитывать следующие капиллярные явления:

1) вытеснение «по типу пистона», когда в условиях падения капиллярного давления смачивающая фаза вытесняет несмачивающую лишь за счет изгиба границы раздела фаз без перемещения мениска у стенок канала;

2) специфика заполнения пор, при которой характер процесса зависит от числа каналов, к ним подходящим, и заполнения каналов тем или иным флюидом;

3) полное вытеснение несмачивающей фазы, при котором сначала начинается движение менисков к центрам ребер сечения, а затем под действием капиллярных сил происходит «схлопывание» просвета (snap-off), заполненного несмачивающей фазой. В целом моделирование в квазистатических сеточных моделях напоминает подход инвазивной перколяции (invasion percolation) [119].

## 2.10 Мультифизичная сеточная модель

Физика течения газа в порах субмикронного размера отличается от описываемого уравнением Хагена-Пуазейля (ур.2.63). Это связано с тем, что в нанопорах в зависимости от давления изменяется длина свободного пробега молекул газа и начинают проявляться эффекты диффузии Кнудсена и проскальзывания на стенках пор. Чтобы смоделировать течение газа в отложениях сланцев и прочих пористых средах, где присутствуют поры как микронного, так и субмикронного размера, используется мультифизичная сеточная модель. В такой модели течение газа рассчитывается в зависимости от размера пор. Когда эффективный диаметр поры более одного микрона, поток рассчитывается также как и в ур.2.63:

$$V_{ij} = \frac{\pi r_{ij}^4}{8\mu} \cdot \frac{\Delta p_{ij}}{L} = \frac{Sr_{ij}^2}{8\mu} \cdot \frac{\Delta p_{ij}}{L}.$$
(2.66)

Для пор с радиусом менее одного микрона используется уравнение течения с учетом диффузии и проскальзывания [56]:

$$V_{ij} = \left[\frac{2Mr_{ij}}{3\cdot 10^3 RT} \sqrt{\frac{10^3 RT}{\pi M}} + \left(1 + \frac{\mu(2/\alpha - 1)}{\langle p \rangle r_{ij}} \sqrt{\frac{8\cdot 10^3 \pi RT}{M}}\right) \frac{\langle \rho \rangle r_{ij}^2}{8\mu} \right] \frac{S\Delta p_{ij}}{\langle \rho \rangle L}.$$
 (2.67)

Так как при выделении сеточной модели из трехмерных изображений порового пространства применяются три различные формы сечения пор — круглая, квадратная и треугольная, чтобы подставить эквивалентные диаметры пор, необходимые в ур.2.66 и ур.2.67, используется фактор формы [41]. Для треугольника:

$$r_{ij} = \sqrt{\frac{24}{5} \frac{S}{P}},$$
 (2.68)

а для квадрата:

$$r_{ij} = \sqrt{8 \cdot 0.5623} \frac{S}{P}.$$
 (2.69)

затем для расчетов используется ур.2.63 [26, 72],

Для того чтобы рассчитать проницаемость всей сеточной модели необходимо решить систему уравнений для нахождения неизвестных давлений в каждом элементе. Затем добавляются условия сохранения импульса (потока), т.е. количество вытекающего из каждого элемента флюида должно равняться втекающему. Сопротивление течению между соседними элементами сеточной модели рассчитывается как:

$$R_{1,2} = \left(\frac{V_{1,2}}{\Delta p_{1,2}}\right)^{-1}.$$
(2.70)

Далее сопротивление между *i*-той и *j*-той порами рассчитывается как алгебраическая сумма:

$$R_{ij} = R_{p1,t} + R_t + R_{t,p2} \tag{2.71}$$

И затем рассчитывается гидравлическая проводимость между двумя элементами:

$$C_{ij} = \frac{1}{R_{ij}}.$$
(2.72)

Поток между двумя порами тогда может быть рассчитан как:

$$V_{ij} = C_{ij} \Delta p_{ij}. \tag{2.73}$$

Уравнение непрерывности для одной поры будет выглядеть как:

$$\sum_{j \in Adj(i)} V_{ij} = \sum_{j \in Adj(i)} C_{ij} (p_i - p_j) = 0, \qquad (2.74)$$

где  $A_{di}(i)$  — набор других пор непосредственно контактирующих с *i*-ой.

После решения системы уравнений из ур.2.74, записанных для каждого элемента, поле давлений в сеточной модели известно. Полный поток газа через всю систему элементов сеточной модели вдоль заданного градиента давления можно рассчитать согласно:

$$Q = \frac{1}{2}(Q_{in} + Q_{out}) = \frac{1}{2} \left( \sum_{j \in I} C_{ij} (p_I - p_j) + \sum_{j \in O} C_{ij} (p_j - p_O) \right).$$
(2.75)

Градиент давления в модели задается на двух торцах моделируемой области  $p_I$  и  $p_0$ , где I — это входная поверхность (входное давление), а O – поверхность на выходе (выходное давление). Градиентом в таком случае является разница этих давлений, нормированная на расстояние между входной и выходной поверхностями. Проницаемость рассчитывается согласно уравнению Дарси (ур.2.59).

Как нетрудно заметить по ур.2.74, получаемая система уравнений является нелинейной и имеет зависимости по давлению. Для решения такой системы используется итерационный метод Ньютона. Рассмотрим следующее отображение:

$$\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{p}) = (q_1(\boldsymbol{p}), q_2(\boldsymbol{p}), \dots, q_N(\boldsymbol{p})),$$
(2.76)

где  $q_i(\mathbf{p})$  обозначает общий поток через *i*-ю пору,  $\mathbf{p} = (p_1, p_2, ..., p_N)$  — вектор давления во всех порах, а N — общее количество пор. Учитывая неразрывность, система для каждой итерации будет эквивалентна ур.2.74:

$$q_{i}(\boldsymbol{p}) = \sum_{j \in Adj(i)} C_{ij}(p_{i} - p_{j}) = 0, i = \overline{1, N}.$$
(2.77)

Затем к данной системе уравнений применим метод Ньютона. В качестве начального приближения решения системы  $p_{linear}$  линейной проблемы когда Q(p) = 0. Рекуррентная формула итеративного процесса может быть записана как:

$$\boldsymbol{p}_{i+1} = \beta \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{Q}}^{-1} \left( \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{Q}}(\boldsymbol{p}_i) \boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{p}_i) \right) + (1 - \beta) \boldsymbol{p}_i, \qquad (2.78)$$

где  $J_Q$  обозначает Якобиан отображения Q(p), а  $\beta = 0.9$  — коэффициент проскальзывания (выбран согласно данным [56]. Элементы Якобиана могут быть расписаны как:

$$\frac{\partial q_i}{\partial p_j} = \begin{cases} \sum_{k \in Adj(i)} \left[ C_{ik} + (p_i - p_k) \frac{\partial C_{ik}}{\partial p_i} \right], j = i \\ (p_i - p_j) \frac{\partial C_{ij}}{\partial p_j} - C_{ij}, j \in Adj(i) \\ 0, \ j \notin Adj(i) \cup \{i\} \end{cases}$$
(2.79)

Производные проводимостей по давлению будут равны:

$$\frac{\partial C_{ij}}{\partial p_i} = -C_{ij}^2 \rho(\varphi_{1i} + \omega_i), \qquad (2.80)$$

$$\frac{\partial C_{ij}}{\partial p_j} = -C_{ij}^2 \rho \left( \omega_j + \varphi_{2j} \right) \tag{2.81}$$

Значения параметров  $\omega$  и  $\varphi$  зависят от того, рассматривается ли данная пора как микро или нанопора. В первом случае, поток через такую пору не зависит от давления, а во втором зависит. В качестве отсечки нанопор от микропор выбран радиус поры в 1 микрон. В случае если пора представляет собой нанопору:

$$\varphi_{1i} = \frac{ABr_{p1}L_{p1}}{p_i^2 U_{p1}^2 S_{p1}}; \ \varphi_{2j} = \frac{ABr_{p2}L_{p2}}{p_j^2 U_{p2}^2 S_{p2}}; \ \omega_i = \frac{L_t}{U_t^2 S_t} \cdot \frac{2ABr_t(1+p_j)}{(p_i+p_j)^2}; \omega_j$$

$$= \frac{L_t}{U_t^2 S_t} \cdot \frac{2ABr_t(1+p_i)}{(p_i+p_j)^2}.$$
(2.82)

Здесь параметры рассчитываются для каждой поры согласно:

$$U_{1,2} = \frac{L_{1,2}\rho}{R_{1,2}S}, \qquad A = \frac{\rho}{8\mu}, \qquad B = \mu \left(\frac{2}{\alpha} - 1\right) \sqrt{\frac{8 \cdot 10^3 \pi RT}{M}}.$$
 (2.83)

В результате решения нелинейной системы уравнений получаем значение проницаемости с учетом нанопористости, т.е. когда поток через пору зависит от давления в ней (случай недарсианского течения).

#### 2.11 Выводы по главе

В данной главе перечислены все основные методы, использованные в настоящей работе. Определены корреляционные функции и методы их расчета, подробно описаны построенные на их основе методы восстановления и моделирования структур. Отдельно представлен новый гибридный метод реконструкции. Для сравнения реальных пористых сред и их реконструкций были детально описаны способы анализа бинарных изображений пористых сред морфометрический анализ, анализ на основе локальной пористости и перколяции, анализ пор по размерам на основе сеточной модели. Затем приведено описание основных методов моделирования в масштабе пор для расчета эффективных фильтрационных свойств пористых сред — конечно-разностное решение уравнения Стокса для моделирования насыщенного течения (одного флюида), и сеточных моделей для моделирования течения одного и двух несмешивающихся флюидов. Отдельно описана мультифизичная сеточная модель фильтрации газа, когда для описания течения газа в зависимости от размера поры (микро или нано пористость) используется различная физика. Все описанные методы будут использоваться в последующих главах.

# Глава 3. Повышение точности стохастических реконструкций

## 3.1. Применение корреляционных функций, рассчитанных по направлениям

Существует несколько способов вычисления корреляционных функций для данного бинарного изображения. В идеале, в случае двухточечной статистики, алгоритм просматривает все возможные соединения между всеми точками, а затем вычисляет средние значения функции с использованием, например, ур.2.6. Но этот метод требует значительного времени и вычислительной мощности, что очень замедляет процедуру оптимизации имитации «отжига» с увеличением размера и размерности изображения. Ускоренный способ получения такой статистики основан на быстром преобразовании Фурье (Fast Fourier Transforms, БПФ) [120]. Однако метод БПФ работает только для 2-точечной корреляционной функции.

Оригинальный метод Енга-Торквато был разработан для 2-точечной корреляционной и линейной функций [85]. В нем расчеты проводятся по изображению только в ортогональных направлениях, но как показали ученые Манварт и Хилфер [99], этот подход приводит к искусственной анизотропии в диагональных направлениях. В работе [102] был представлен решеточно-точечный метод (lattice-point method), который может применяться к любой суперпозиции корреляционных функций, но, как и предыдущие методы, оперирует усредненными по всему изображению значениями корреляционных функций. Такие подходы в расчете корреляционных функций не могут описать анизотропные структуры. В настоящей работе для учета сложной структуры пористых сред предложен новый метод расчета корреляционных функций по нескольким выбранным направлениям в пористой среде (рис.3.1). Это позволяет описывать не только изотропные среды со сложными конфигурациями, но и анизотропные среды. Выбранные направления дают возможность охарактеризовать элементы реальной пористой среды любой ориентации в пространстве [3].

59



Рисунок 3.1. Схематичное изображение направлений расчета корреляционных функций в двумерном (левая часть) всего 4 направления: два ортогональных и два диагональных; и трехмерном случае (правая часть): три ортогональных и по два диагональных в каждой из трех плоскостей — всего 6 диагональных направлений.

Оцифрованная двухфазная пористая среда представляет собой ортогональную решетку, ячейки которой могут принадлежать одной из двух фаз. При ортогональном расчете корреляционной функции любого типа ортогональный отрезок изменяющейся длины перемещается по решетке, длина этого отрезка определяется количеством занимаемых им ячеек. В случае добавления диагональных направлений, расчеты координат концов отрезка усложняются и требуют дополнительного времени на вычисления. При этом для линейной корреляционной функции необходимо рассчитывать расположение каждой точки, принадлежащей отрезку. Чтобы избежать вычислений с плавающей запятой в диагональных направлениях, все расчеты ортогональных и диагональных корреляционных функций проводятся независимо.

При анализе двумерного изображения определение диагоналей не вызывает затруднений. В случае трехмерного изображения выбор диагональных направлений усложняется. С учетом ограничений, которые накладываются необходимостью восстановления трехмерной структуры по двумерным данным, в трехмерном пространстве следует выделять диагонали, которые лежат в пересекающихся ортогональных плоскостях. Таким образом, получаем схему расчета, показанную на рис.3.1.

Методика реконструкций на основе корреляционных функций Енга-Торквато изначально применялась только для ортогональных направлений в изображении, а работы с использованием диагоналей [35, 99, 121] появились позднее. Однако почти во всех этих методах применялось осреднение данных, как по ортогональным, так и по диагональным направлениям в изображении, что накладывало ограничения в дальнейшей интерпретации данных и реконструкциях. Отличительной чертой настоящей работы является расчет корреляционных функций в каждом из направлений без дальнейшего осреднения.

С учетом добавления диагональных изображений получаем следующий набор данных для восстановления с корреляционными функциями трех типов

- 1.  $S_2^{(b)}$  двухточечная корреляционная функция;
- 2.  $L_2^{(b)}$  линейная корреляционная функция для черной фазы;
- 3. *L*<sup>(*w*)</sup> линейная корреляционная функция для белой фазы.

Каждый тип рассчитывается по ортогональным и диагональным направлениям в отдельности. Итого получаем набор из 12 функций для двумерного изображения и из 27 для трехмерного случая, каждая из которых учитывается отдельно в формуле расчета целевой функции:

$$E = \sum_{\boldsymbol{r}} \sum_{\alpha} w [f_n^{\alpha}(\boldsymbol{r}) - \hat{f}_n^{\alpha}(\boldsymbol{r})]^2, \qquad (3.1)$$

где *w* — коэффициент для усреднения получаемых энергий, равный 1/12 для двумерного и 1/27 для трехмерного случая.

Анализ качества получаемых новых моделей заключался в количественной оценке улучшений, получаемых за счет добавления диагональных направлений. Для этого случая были разработаны специальные искусственные изображений с периодическими граничными условиями следующего вида:

- а. ортогональные кресты,
- б. диагональные кресты,
- в. анизотропные диагональные кресты,
- г. анизотропные недиагональные кресты (рис. 3.2).

Периодические структуры, или еще иногда называемые «эргодическими», необходимы для проверки возможностей точного восстановления изображения [108, 122]. Размер каждого изображения 240<sup>2</sup> пикселей. Изображения именно такого вида позволяют получить различные значения корреляционных функций во всем наборе из 12 функций для двумерного случая. На рис. 3.3 можно увидеть, что с усложнением структуры изображения усложняется конфигурация набора корреляционных функций.



Рисунок 3.2. 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 [3]



Рисунок 3.3. Полные наборы корреляционных функций для тестовых изображений,

приведенных на рис.3.2

Для реконструкций были применены следующие параметры алгоритма: параметр графика охлаждения в алгоритме имитации «отжига»  $\lambda$ =0.999999; ограничение области расчета корреляционных функций |*r*|=100 пикселей достаточное для захвата всех структурных элементов на изображении. Выход из алгоритма реконструкции осуществлялся по двум критериям: после выполнения 10<sup>6</sup> непринятых перестановок пикселей или после достижения порогового значения "энергии" $\Delta E = 10^{-7}$ . Для минимизации вычислений с плавающей запятой расчеты ортогональных и диагональных направлений проводились отдельно в ур.3.1.

Для стабильного воспроизведения результатов и изучения статистики было проведено по 10 повторов реконструкций аналогичного размера (240×240 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.3.1.

Функции <sup>(a)</sup>	H <sup>(б)</sup>	Ср. <sup>(в)</sup>	E <sub>a</sub> <sup>(r)</sup>	В <sub>a</sub> <sup>(д)</sup>	$E_{\delta}$	$B_{\boldsymbol{\tilde{o}}}$	Ев	$B_{\scriptscriptstyle B}$	$E_{\Gamma}$	$B_{\Gamma}$	Ссылки (е)
<i>S</i> <sub>2</sub> <sup>(b)</sup>	+	нет	10	01	0	0	0	0	0	0	[108, 123]
		да	10	00	0	0	0	0	0	0	[85]
	+×	нет	10	10	1	5	0	0	1	6	-
		да	06	06	0	2	0	2	0	0	[99, 121]
$S_2^{(b)}$ $L_2^{(b)}$	+	нет	10	03	0	0	0	0	0	0	-
		да	02	01	0	0	0	0	0	0	[85. 121]
	+×	нет	10	10	5	7	1	7	1	7	-
		да	05	05	1	4	1	1	0	0	-
$S_2^{(b)} \ L_2^{(b)} \ L_2^{(w)}$	+	нет	00	02	1	2	0	1	0	2	-
		да	00	0	2	7	0	0	0	0	[35]
	+×	нет	00	10	0	7	0	5	0	6	-
		да	00	1	0	8	0	3	0	1	[35]

Таблица 3.1. 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 рис.3.2).

(д) Количество реконструкций, которые визуально аналогичны оригиналам (нижний индекс обозначает тип оригинала изображения в соответствии с рис.3.2).

(е) Ссылка на работы с аналогичным набором корреляционных функций.

Оценка результатов проводилась по двум критериям. Первый основывался на итоговом значении «энергии» E, если во время реконструкции было достигнуто пороговое значение E, значит результат считался удачным. Второй основывался на визуальной оценке изображения. Если элементы на полученном во время реконструкции изображении близки по форме к оригиналу, имеют аналогичную ориентацию в пространстве и не связаны дополнительными линиями между собой, то такой результат также считался удачным. Такой вид оценки был необходим из-за того, что иногда алгоритм имитации «отжига» не может привести энергию к пороговому значению, хотя визуально реконструкция выглядит похожей на оригинал, а «энергия» близка к пороговому значению. Из данных табл.3.1 видно, что все оригинальные изображения (рис.3.2) 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. Методы с применением только  $S_2^{(b)}$  + с осреднением значений и без не дают удовлетворительных результатов при визуальной оценке, хотя часто достигают порогового значения Е. На рис.3.4 представлены примеры таких реконструкций, они не передают все структурные особенности оригинального изображения (элементы различаются формой или размерами). Добавление  $L_2^{(b)}$  немного улучшает реконструкции, но в целом, полученные результаты подтверждают критику метода Енга-Торквато (случаи  $S_2^{(b)}$  + и  $S_2^{(b)}L_2^{(b)}$  + с осреднением) за неточности в восстановленных изображениях. Использование линейной функции по второй фазе  $(L_2^{(w)} +)$  показывает улучшение в случае анизотропных недиагональных крестов (рис.3.4к-м), но в общем, не приводит к значительным положительным изменениям. С полным набором результатов реконструкций можно ознакомиться в дополнительных материалах к статье [3].



Рисунок 3.4. Примеры неудачных реконструкций. Тип реконструкции и номер повтора указаны для каждого изображения.

В большинстве случаев ошибочные структуры на восстановленных изображениях соответствуют низким значениям пороговой «энергии», из чего можно сделать вывод, что достижение заданной точности алгоритмом не гарантирует успешной реконструкции. Хотя метод  $S_2^{(b)}$  +× показывает хорошие результаты, особенно в случае ортогональных крестов, и наиболее близок к работе с решеточно-точечным методом [102]. 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 получить большое количество удачных повторов (см. табл.3.1). С похожей проблемой при добавлении линейной функции столкнулись авторы работы [35] и использовали этот тип функций только на завершающем этапе процедуры реконструкции, при этом изменяя веса в целевой функции ур.3.1. Реконструкции с таким набором часто попадают в локальные минимумы даже при параметрах, соответствующих медленному охлаждению в методе имитации «отжига» и оптимизации перестановок пикселей. На рис.3.5 представлены графики изменения энергии *E* и температуры *T* во время работы алгоритма имитации «отжига» для шести случаев реконструкции изображения крестов типа рис. 3.2 а. На данном графике хорошо видно, что начальные значения энергий близки друг к другу и находятся в районе 0.5, но значения температуры, тем не менее, сильно различаются. Кроме того на рис.3.5 наглядно отображен случай, когда реконструкции с различными «энергиями» визуально выглядят очень похожими на оригинал. Изменения «энергии», которые изучены только для двухточечной корреляционной функции в работе [76], могут влиять на общий ход восстановления, и подразумевают неравнозначность весов различных наборов корреляционных функций, применяемых для реконструкции. Ур.3.1 как правило подразумевает равный вклад всех корреляционных функций в общее значение «энергии» [85, 95], но при таком условии применение большого набора различных функций, (например,  $S_2^{(b)}L_2^{(b)}L_2^{(w)}$ ) ведет к плохой сходимости алгоритмов реконструкции.



Рисунок 3.5. Анализ реконструкций крестов типа рис.3.2 б, отношение между энергией *E*, температурой *T* и количеством итераций *k* для шести случаев удачных и неудачных реконструкций [3]

## 3.2. Добавление коэффициентов в целевую функцию

Множество пористых сред и многофазных материалов имеют структуры более сложные, чем разобранные ранее периодические изображения крестов (рис.3.2). Для повышения качества описания структуры и стохастических реконструкций логично увеличивать количество информации, получаемой из набора корреляционных функций за счет увеличения их количества и разнообразия. Тем не менее, совместное использование всего лишь трех различных функций (S<sub>2</sub> и L<sub>2</sub> для обеих бинарных фаз [3, 35] приводит к схождению алгоритма оптимизации имитацией «отжига» не к глобальному, а к локальному минимуму. Хотя были описаны самые различные комбинации корреляционных функций, на практике количество независимых функций  $N(\alpha)$  редко насчитывало более трех, а обычно всего два типа функций использовались для реконструкций [3-4, 35, 79, 85-86, 124-125]. Во всех вышеупомянутых исследованиях каждая корреляционная функция имела равнозначный вес в целевой функции, т.е. предполагалось, что все корреляционные функции вносят равный вклад в оптимизационную функцию. Отдельно следует отметить работу Дейвиса и др. [126], которые использовали наборы с максимальным количеством в шесть независимых корреляционный функций и рассчитывали энергию согласно ур.3.1. Они пришли к выводу, что наборы из двух или трех разных функций были наиболее точными при реконструкции исследуемых бинарных сред, что, в целом, не согласуется с теорией информации и результатами в предыдущем пункте. Единственным исключением из общего подхода являются работы Чапека и соавторов [31,35], которые динамически настраивали коэффициент линейной функции для второй бинарной фазы во время алгоритма имитации «отжига», увеличивая ее вклад ближе к концу реконструкции.

Использование корреляционных функций, рассчитанных по направлениям, увеличивает общее количество параметров в целевой функции пропорционально количеству учитываемых направлений расчета. Следовательно, необходимо определить, каким образом изменение вклада каждой корреляционной функции в виде задаваемого весового параметра или коэффициента могут повлиять на качество стохастической реконструкции. Кроме того, необходим гибкий и вычислительно нетребовательный метод, позволяющий подбирать веса различных корреляционных функций.

Рассмотрим двумерные изображения «эргодических» структур [122], которые позволяют проводить 100% точные реконструкции [3, 108], и, таким образом, предоставляют возможность рассчитать ошибку каждой попытки реконструкции на основе различных подходов. В качестве «эргодических» структур использовались те же четыре изображения крестов с различной степенью анизотропии (рис.3.2). Следуя алгоритму Гоммеса и др. [75-76], можно вычислить энергетический ландшафт стохастической процедуры реконструкции. Пример такого анализа показан на рис.3.6 для изображения анизотропных диагональных крестов (рис.3.2в) и 12-ти ортогональных и диагональных корреляционных функций  $S_2-L_2^{b}-L_2^{w}$ . Из рисунка видно, что различные функции делают различный вклад в целевую энергетическую функцию, которая минимизируется по время алгоритма имитации «отжига». Энергия  $E_{\infty}$  определена как

68

максимальная энергия для каждой корреляционной функции после того как соответствующая кривая выходит на асимптоту.



Рисунок 3.6. Постепенное изменение «энергии» структуры креста типа рис.3.2в при последовательных случайных перестановках пар пикселей бинарных фаз. Изначальная структура на шаге 0 показана слева на вставке. Случайная структура после 50000 перестановок показана справа [8]

Далее проводилась реконструкция крестов всех четырех типов (рис.3.2) размером  $240 \times 240$  пикселей в 10 кратном повторении с использованием 12-ти вышеупомянутых функций, рассчитанных по направлениям с коэффициентами  $w_{\alpha}$ , взвешенными согласно пяти подходам, где  $\alpha$  это тип функции:

1) согласно общепринятому подходу считая  $w_{\alpha} = 1/N(\alpha)$  (в дальнейшем будем ссылаться на этот метод как Conv);

2) пропорционально максимальной энергии  $E_{\infty}(\alpha)$  для  $\alpha$  корреляционной функции (как показано на рис.3.6) и рассчитывая  $W_{\alpha}$  согласно ур.3.2;

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<sub>S2</sub> = w<sub>S2</sub>( $E_{\infty}$ ), w<sub>L2</sub><sup>b</sup> = 2 × w<sub>L2</sub><sup>b</sup>( $E_{\infty}$ ), w<sub>L2</sub><sup>w</sup> = 0.2 × w<sub>L2</sub><sup>w</sup>( $E_{\infty}$ ) (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:

$$w_{\alpha}(E_{\infty}) = \frac{E_{\infty}(\alpha)}{\max_{\alpha} E_{\infty}(\alpha)}.$$
(3.2)

Детали алгоритма реконструкции были описаны ранее в главе 2 и публикациях [3-4, 8]. Единственным отличием является использование весов  $w_{\alpha}$  для каждой корреляционной функции  $\alpha$ . Все рассчитанные коэффициенты  $w_{\alpha}(E_{\infty})$  для изображений крестов, в том числе используемые для расчета коэффициентов для подходов М#1 и М#2, даны в табл.3.2.

Изображение	Крест а	Крест б	Крест в	Крест г
$S_2(x)^a$	0.264558	0.492775	0.53239	0.290021
$S_2(y)$	0.263877	0.491365	0.530815	0.141992
$L_2(x)$	0.480164	0.958457	0.808245	0.713393
$L_2(y)$	0.479292	0.962681	0.813109	0.125979
$L_2^{w}(x)$	0.026045	0.047115	0.208985	0.121176
$L_2^{w}(y)$	0.026034	0.047021	0.209629	0.025691
$S_2(xy)$	0.309584	0.57298	0.427322	0.460643
$S_2(yx)$	0.310182	0.574051	0.547918	0.368817
$L_2(xy)$	0.993466	1	0.538183	1
$L_2(yx)$	1	0.99551	1	0.52147
$L_2^{w}(xy)$	0.111565	0.163141	0.201611	0.203738
$L_2^{w}(yx)$	0.111854	0.161793	0.394353	0.106478

Таблица 3.2. Коэффициенты весов  $E_{\infty}$  рассчитанные для двухмерных изображений крестов.

(а) Все используемые для расчета направления показаны на рис.3.1

Расчет точности для каждой реконструкции крестов проводился с помощью постепенного сдвига реконструкции для синхронизации периодических граничных условий и наложения на оригинал до наилучшего совпадения (рис.3.7). Полученная маска использовалась для расчета ошибки в процентах неправильно расставленных пикселей. Метод расчета можно описать в следующем виде: сначала реконструированное изображение сдвигается (т.к. из-за использования периодических граничных условий при реконструкции изображение может быть сдвинуто относительно оригинала на расстояние до размера периодической ячейки) до получения минимальной разницы с оригиналом. Затем рассчитывается маска согласно *Оригинал* Совиг (т.е. симметричная разница) и, таким образом, определяется точное количество пикселей с неправильным позиционированием. Подобный подход позволил

впервые провести точное сравнение оригинала и реконструкции; результаты сравнения для всех четырех крестов даны в табл.3.3.



Рисунок. 3.7. Схема методики расчета точности реконструкций для «эргодических» периодических структур.

Таблица 3.3. Сравнение точности реконструкций полученных с помощью различных методов взвешивания вклада корреляционных функций в целевую функцию.

Изображение	Conv, %	E <sub>∞</sub> , %	M#1, %	M#2, %	M#3, %
Крест а	1.23/0.82 <sup><i>a</i></sup>	0.42/0.43	0.21/0.65	0.0017/0.0018	0.95/0.81
Крест б	5.05/9.95	0.22/0.69	2.62/0.92	2.03/1.41	0.0017/0.0030
Крест в	8.85/7.53	7.54/7.18	3.7/5.51	7.92/7.67	8.35/8.57
_					
Крест г	4.51/1.81	1.85/2.3	5.23/1.2	1.87/2.29	1.82/2.33
-					

(а) Средняя ошибка приведена по 10 реконструкциям и выражена в процентах неправильно расставленных пикселей и стандартным отклонением между 10 повторностями.

Использование весов для параметризации вклада каждой корреляционной функции в энергетическую функцию привело к значительному увеличению сходимости и точности реконструкций. Процедура без взвешивания ни разу не привела к получению абсолютно точных реконструкций (0% неправильно расставленных пикселей). Абсолютно точные реконструкции крестов рис.3.2а-б были получены с помощью методов взвешивания  $E_{\infty}$  и М#3. Остальные

подходы к взвешиванию позволили получить реконструкции с 0% ошибкой только для креста типа рис.3.2а. Ни один из подходов не позволил получить 100% точные реконструкции для крестов рис.3.2в-г, но, за исключением метода М#1 для случая креста рис.3.2г, все подходы показали результаты лучше, чем реконструкции без взвешивания. Метод взвешивания  $E_{\infty}$ показал наилучшие результаты для креста типа рис.3.2г с ошибкой в два пикселя (минимальная возможная ошибка по одному для двух фаз). Из-за особенно сложного и неровного строения энергетического ландшафта для креста рис.3.2в его реконструкция представляет собой особо сложную задачу — все подходы к взвешиванию привели к ошибкам в 1.6944% неправильно расставленных пикселей, схожей с ошибкой при реконструкции без взвешивания. 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 (рис.3.8).



Рисунок 3.8. 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) [8]

Хотя изображения крестов позволяют сделать некоторые важные выводы и рассчитать точность реконструкции, они не отражают сложности трехмерной структуры различных пористых сред и материалов. Чтобы продемонстрировать применимость оценки коэффициентов вклада корреляционных функций для реконструкции реальных образцов таких сред,
необходимо провести анализ точности реконструкции для трехмерной структуры. С помощью каждого подхода были проведены реконструкции трехмерной бинарной структуры пористой керамики размером  $500^3$  вокселей в трех повторностях. В качестве входных данных использовалось сегментированное трехмерное изображение, полученное с помощью рентгеновской микротомографии ([7], также см. описание керамических образцов в разделе 5.2). Для реконструкций использовался аналогичный набор корреляционных функций S<sub>2</sub>-L<sub>2</sub><sup>b</sup>-L<sub>2</sub><sup>w</sup>, рассчитанных в ортогональном и диагональном направлениях. Ввиду трехмерности реконструируемой структуры общий набор корреляционных функций составил N( $\alpha$ )=27.

Исследование точности реконструкции с помощью метода, описанного выше для крестов не будет работать для «неэргодической» структуры. По этой причине для определения точности реконструкций керамики применяли другие подходы. Всего использовались две метрики:

1) сравнение проницаемости, рассчитанной для оригинальной и реконструированной структур;

2) сравнение статистики для кластерной корреляционной функции (не использовавшейся для реконструкции) рассчитанной для оригинала и реконструкции, осредненной по ортогональным направлениям.

Проницаемость рассчитывалась на трехмерных бинарных изображениях размером  $500^3$  вокселей решением уравнения Стокса конечно-разностным методом ([6], см. детальное описание метода в главе 2). Течение флюида с низкими числами Рейнольдса в порах моделировалось в трех ортогональных направлениях считая все параллельные градиенту давления стороны куба твердыми стенками. После схождения полей скоростей и давления проницаемость определялась согласно уравнению Дарси. Сравнение производилось по усредненным по трем направлениям значениям проницаемости. Различие в статистике кластерной функции  $C_2$  между томографическим изображением и реконструкциями рассчитывалось согласно:

$$Err_{C_2} = \frac{\sum_{r} \sum_{d} [C_2^d(\vec{r}) - \hat{C}_2^d(\vec{r})]^2}{N(d)},$$
(3.3)

где N(*d*)=3 — количество направлений расчета кластерной функции,  $C_2^d(\mathbf{r})$  и  $\hat{C}_2^d(\mathbf{r})$  — значения кластерной функции для оригинала и реконструкции, соответственно.

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 (рис.3.9). Для трехмерных реконструкций наблюдали:

1) повышение проницаемости, значение которой становилось ближе к проницаемости, рассчитанной на оригинальном микротомографическом изображении,



2) значительное улучшение статистики кластерной функции.

Рисунок 3.9. Значения точности реконструкций трехмерного изображения порового пространства керамики с использованием различных подходов к оценке вклада различных корреляционных функций. Показано сравнение на основе двух метрик — моделирования проницаемости и расчета кластерной корреляционной функции. Справа от графика показаны некоторые трехмерные изображения керамики (поры синие) [8]

Наблюдаемое повышение точности реконструкций связано с изменением вида ландшафта целевой функции, а также за счет решения проблемы перестановок с конфликтом энергии разных корреляционных функций (например, когда улучшение энергии одной функции ведет к значительному ухудшению энергии другой функции и возможные перестановки более не принимаются). Метод взвешивания на основе расчета  $E_{\infty}$  показал свою эффективность и для реальных трехмерных структур. Этот метод находит свои аналоги в статистических науках о Земле и при использовании обратного моделирования, где при решении задач оптимизации для параметризации энергетической функции используется среднее изменение энергии [127] или стандартное отклонение [128]. Подобные подходы к параметризации целевой функции необходимы, когда фронт Парето не может быть рассчитан, например, ввиду сложности и дороговизны вычислений. Следует заметить, что согласно численным экспериментам на

крестах подход на основе  $E_{\infty}$  не является оптимальным и возможны более эффективные стратегии оценки вклада корреляционных функций. Расчеты на случайных конфигурациях используемых как начальная структура для алгоритма «имитации отжига» показывают, что энергии таких конфигураций являются очень точными приближениями  $E_{\infty}$ . Это означает, что коэффициенты на основе метода  $E_{\infty}$  могут быть с легкостью рассчитаны в начале процедуры реконструкции без сложного анализа, показанного на рис.3.6. Полный набор реконструированных трехмерных изображений керамики с визуализациями поля скоростей моделировавшегося течения флюида можно найти в дополнительных материалах к статье [8].

#### 3.3. Выводы по главе

В настоящей главе были разработаны и протестированы новые методы расчета корреляционных функций и оптимизационной функции — энергетической. Предложенные модификации позволили более точно описывать структуру пористых сред и многофазных материалов, а также проводить стохастические реконструкции. Разработка метода весов приблизила стохастические реконструкции к использованию любого сколь угодно большого набора корреляционных функций. Выводы, которые можно сделать по материалам главы:

1. Предложенный метод расчета корреляционных функций в ортогональных и диагональных направлениях подходит для работы с анизотропными структурами. Данный метод показывает значительные улучшения по сравнению с предыдущими работами [108, 123], в которых использовались только ортогональные направления.

2. Усреднение значений корреляционных функций во всех направлениях в большинстве случаев ухудшает качество реконструкций, ввиду уменьшения количества статистической информации доступной алгоритмам восстановления. Добавление отдельных направлений дает стабильное улучшение качества реконструкций при минимальном усложнении расчетных алгоритмов.

3. Увеличение числа различных корреляционных функций, применяемых для восстановления, повышает точность процедуры реконструкции, но ухудшает способность алгоритма стохастической оптимизации достигать глобальной минимум. Последний недостаток может быть нейтрализован за счет добавления коэффициентов или другими словами «энергетических весов» в целевую функцию.

4. Использование весов для каждой корреляционной функции позволило значительно улучшить сходимость и качество реконструкций. На основе этого улучшенного метода реконструкции удалось получить 100% точные реконструкции структур, для которых стандартный метод без взвешивания коэффициентов никогда не производил таких результатов.

5. Был разработан простой и вычислительно эффективный универсальный метод выбора весов для каждой корреляционной функции, используемой для реконструкции. Следует отметить, что предложенный метод взвешивания на основе  $E_{\infty}$  не является оптимальным, и может быть усовершенствован в будущем.

# Глава 4. Моделирование структур пористых сред и материалов, в том числе с желаемыми свойствами

## 4.1. Описание создания моделей и их анализ

Для создания моделей структуры новых двухфазных материалов была применена аналитически полученная функция из ур. 2.19, рассчитанная с различными параметрами [5]. Коэффициенты были зафиксированы так, что  $\alpha_1$ =0.3,  $\alpha_2$ =0.2, и  $\alpha_3$ =0.5, q=1 и  $\psi$ =0 для всех случаев. При этом параметры а, b, с изменяются от 3 до 15, от 5 до 30, и от 5 до 20, соответственно (см. табл.4.1). Пропорции бинарных фаз при сборке равнялись  $S_2^{(черная)}(0) = 0.4$  и  $S_2^{(бехая)}(0) = 0.6$ . Примеры аналитических автокорреляционных (и соответствующих им корреляционных функций с  $\varphi$ =0.4) функций, рассчитанных согласно ур.2.12 и принятым параметрам, показаны на рис.4.1. Таким образом, получаем 60 различных аналитических функций, которые используются для стохастической реконструкции трехмерных структур методом Енга-Торквато для расчетной области 300<sup>3</sup> вокселей с параметрами максимальной длины корреляции 120 пикселей, параметром скорости охлаждения  $\lambda$ =0.999 и пороговой энергии  $\Delta E = 10^{-7}$ .



Рисунок 4.1. Примеры аналитических автокорреляционной и корреляционной (количество фазы 0.4) функций, полученных с помощью ур.2.19 и коэффициентов a, b и с согласно указанным на каждом графике.

Для каждого трехмерного образца, собранного по аналитической корреляционной функции, рассчитывалась эффективная проницаемость методом моделирования в масштабе пор на основе численного решения уравнения Стокса конечно-разностным методом с 4-м порядком точности [6]. При этом моделировалось однофазное течение жидкости в поровом пространстве обеих бинарных фракций (черной и белой с пропорциями 0.4 и 0.6, соответственно) упрощенным уравнением Навье-Стокса, считая влияние вязких сил пренебрежимо малым. На основе полученных в результате моделирования полей скоростей течения однофазного флюида эффективная проницаемость рассчитывается согласно уравнению Дарси. Используемые алгоритмы подробно рассмотрены в главе 2. Проницаемость определялась по трем ортогональным направлениям, но ввиду близости получаемых значений в данной работе приведены средние значения.

Таблица 4.1. Двумерные срезы (300<sup>2</sup> пикселей) трехмерных реконструированных образцов, полученных с использованием различных параметров a, b и с в ур.2.19. Рамкой помечены образцы, для которых не получилось достичь необходимой точности в 10<sup>-7</sup> (см. рис.4.2).

a	c b	5	10	15	30
3	5				
3	10				

3	20		
5	5		
5	10		
5	20		
7	5		
7	10		
7	20		



Все реконструкции сред, по 60 различным аналитическим корреляционным функциям были успешно получены с помощью метода Енга-Торквато (для наглядности двумерные версии всех сред показаны в табл.4.1). Процесс сборки занимал от 6 до 56 (последняя цифра представляет собой максимальное время ожидания сборки нереализуемых корреляционных функций) часов,

а расчет поля скоростей течения флюида в каждой из фаз — от 8 и 14 до 23 и 42 часов (для белой и черной фазы соответственно) в зависимости от использовавшейся аналитической функции. При этом, несмотря на общую завершенность всех полученных структур (четкие края разделов фаз и отсутствие «мусора» в виде отдельных пикселей, характерных для высоких значений энергии Е), для некоторых из них точность в  $10^{-7}$  не могла быть достигнута (такие образцы обведены рамкой в табл.4.1). При более близком рассмотрении оказалось, что заданная аналитически и получаемая методом «отжига» корреляционные функции для этих образцов не сходились лишь при малых значения г (рис.4.2) ввиду невыполнения условия отрицательной производной в точке г=0 [102]. Таким образом, ур.2.19 при определенном выборе параметров может приводить к генерации физически нереализуемой корреляционной функции. Для всех остальных образцов (не помеченных рамкой) процесс «отжига» был остановлен при достижении  $\Delta E = 10^{-7}$ , а совпадение аналитической и результирующих функций было почти точным и не различимым на графиках (а потому не показано).



Рисунок 4.2. Значения аналитической корреляционной функции, по которой проводилась сборка структуры с параметрами а=7, b=30, c=10, и результирующей функции у структуры полученной после завершения процедуры реконструкции с точностью 1.09×10<sup>-6</sup> (график слева). Справа отдельно показаны численные различия между двумя функциями на левом графике.

Примеры трехмерных структур, полученных по функциям, представленным в табл.4.1, показаны на рис.4.3 (слева). На этом же рисунке справа показаны результаты расчетов поля скоростей течения флюида при низких числах Рейнольдса, по которым согласно ур.2.59 были получены значения эффективной проницаемости. Данные о проницаемости всех образцов представлены в табл.4.2. Детальный анализ влияния параметров аналитической функции (a, b, и c) показывает, что в целом увеличение всех трех параметров ведет к повышению эффективной проницаемости как белой, так и черной фаз. Это в общем соответствует интуитивному предположению, которое можно сделать при рассмотрении получаемых структур (табл.4.1) —

при увеличении всех трех параметров наблюдается рост линейного размера объемов каждой из фаз.



Продолжение рисунка на следующей странице...



Рисунок 4.3. Трехмерные визуализации структуры (слева) и полей скоростей течения флюида в их поровом пространстве (пористость 0.4, справа) для четырех образцов с функциями, показанными на рис.4.1

Таблица 4.2. Значения эффективных проницаемостей (безразмерные единицы, соответствующие единичным длинам г) для образцов, собранным по аналитическим функциям, полученным с помощью ур.2.19. Таблица отсортирована по увеличению проницаемости образцов с пористостью 0.4. Также представлены значения полученной точности Е для образцов, помеченных рамками в табл.4.1.

0	h	0	E	Проницаемость	Проницаемость
a	U	C	E	$(\phi = 0, 4)$	$(\phi = 0, 6)$
3	5	5	-	0,060	0,373
3	10	5	-	0,073	0,456
3	15	5	-	0,079	0,491
3	5	10	-	0,080	0,505
3	30	5	-	0,084	0,534
5	5	5	-	0,095	0,593
3	5	20	-	0,097	0,634
3	10	10	-	0,100	0,626
3	15	10	-	0,110	0,676
5	10	5	-	0,122	0,740
3	30	10	-	0,122	0,737
7	5	5	-	0,122	0,780
3	10	20	-	0,124	0,783
5	15	5	-	0,132	0,805

9	h	C	F	Проницаемость	Проницаемость
a	0	C	L	$(\phi = 0, 4)$	$(\phi = 0, 6)$
5	5	10	-	0,135	0,832
3	15	20	-	0,138	0,854
5	30	5	-	0,144	0,885
3	30	20	-	0,150	0,943
10	5	5	-	0,155	1,026
7	10	5	-	0,161	0,972
5	5	20	-	0,164	1,074
7	15	5	-	0,176	1,074
7	5	10	-	0,179	1,119
5	10	10	-	0,180	1,029
15	5	5	-	0,188	1,374
7	30	5	-	0,196	1,188
5	15	10	-	0,198	1,131
10	10	5	-	0,201	1,280
5	30	10	-	0,223	1,239
7	5	20	-	0,228	1,455
5	10	20	-	0,230	1,349
10	15	5	-	0,232	1,403
10	5	10	-	0,235	1,466
7	10	10	-	0,244	1,389
15	10	5	-	0,257	1,689
5	15	20	-	0,259	1,452
10	30	5	-	0,270	1,542
7	15	10	-	0,272	1,505
5	30	20	-	0,289	1,601
15	15	5	-	0,298	1,823
15	5	10	-	0,302	1,938
7	30	10	1,10E-06	0,306	1,616
10	5	20	-	0,316	2,016
7	10	20	-	0,318	1,837
10	10	10	-	0,324	1,794
15	30	5	-	0,342	1,972
L	I	I	84		

a	h	b c	E	Проницаемость	Проницаемость
u	U	C	L	$(\phi = 0, 4)$	$(\phi = 0, 6)$
10	15	10	1,18E-06	0,349	1,926
7	15	20	7,01E-07	0,357	1,947
10	30	10	1,33E-05	0,376	1,981
7	30	20	1,22E-05	0,380	2,019
15	5	20	-	0,397	2,726
15	10	10	5,20E-07	0,414	2,342
10	10	20	8,91E-07	0,419	2,430
15	15	10	5,40E-06	0,432	2,451
15	30	10	4,04E-05	0,450	2,431
10	30	20	6,75E-05	0,453	2,421
10	15	20	9,31E-06	0,468	2,479
15	10	20	4,05E-06	0,536	3,099
15	15	20	2,81E-05	0,560	3,202
15	30	20	1,52E-04	0,561	3,028

Визуализация получаемых значений в пространстве этих трех параметров (рис.4.4) указывает на возможность подбора параметров аналитической функции с заданными проницаемостями и линейными размерами пор. Также очевидно, что можно подобрать значительное количество различных структур с одинаковой проницаемостью, 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. В настоящем виде метод получения структур с необходимыми физическими свойствами обладает рядом недостатков [5]. В первую очередь известно, что использование только ортогональных функций согласно методике Енга-Торквато приводит к анизотропии по диагональным направлениям [3, 99]. Во-вторых, ур.2.19, похоже, не может служить универсальным дескриптором корреляционной функции любой структуры, а так же, как показано на рис.4.2, в некоторых случаях приводит к получению физически нереализуемых функций. Однако указанные недостатки можно нейтрализовать с использованием не только ортогональных, но и диагональных направлений [3], а также других аналитических описаний, отличных от ур.2.19, или же его модификаций с использованием большего количества суперпозиций различных

простых функций [8]. Применение таких подходов зависит от практической решаемой задачи и в рамках настоящей главы не рассматривается.



Рисунок 4.4. Влияние параметров аналитической функции a, b, и c на эффективную проницаемость конструируемой среды для образцов с пористостью 0,4 (слева) и 0,6 (справа) Проницаемость дана в безразмерных единицах, соответствующих единичным длинам r [5]

### 4.2. Выводы по главе

Трехмерные структуры гипотетических бинарных материалов были сконструированы по аналитическим корреляционным функциям, полученным из общего уравнения с различными параметрами. Смоделированные структуры были различны лля различающихся корреляционных функций. Таким образом, различные структуры материалов могут быть аналитически получены/подобраны по (авто)корреляционным функциям и использованы для создания реальных материалов. Для всех полученных структур были рассчитаны значения эффективной проницаемости. Результаты исследования точно указывают на возможность подбора параметров аналитической функции таким образом, чтобы получать структуры с желаемым строением порового пространства и значением проницаемости, что может быть использовано для решения фундаментальных и прикладных задач материаловедения и смежных наук (создание фильтров для удаления частиц определенного размера; оптимизация работы очистных сооружений с перепадами давлений; создание строительных материалов с заданными теплопроводностью, проницаемостью для уменьшения деградации).

## Глава 5. Практическое применение корреляционных функций для реконструкции структуры пористых сред

### 5.1 Описание и реконструкция структуры почв

Для исследования возможности применения стохастических реконструкций В было почвоведении для описания структуры почв отобрано восемь бинарных (отсегментированных для разделения на две фракции — поры и твердое вещество) изображений шлифов почв Среднерусской возвышенности (см. табл.5.1) размером 2.1×2.1 см<sup>2</sup>. Все восемь изображений пронумерованы римскими цифрами I-VIII. Размер каждого изображения составляет 994×994 пикселя с разрешением 21.2 мкм на пиксель.

Таблица 5.1. Общие данные о почвенных шлифах.

Тип структуры	Тип почвы	Горизонт	Глубина взятия образца, см
Ι	Дерново- подзолистая	С (материнская порода)	170-180
II	Чернозем	С (материнская порода)	170-180
III	Серая лесная	ВС (переходный горизонт)	80-90
IV	Чернозем	Ар (пахотный гумусовый горизонт)	5-10
V	Чернозем	А (гумусовый горизонт)	5-10
VI	Серая лесная	В (иллювиальный горизонт)	60-70
VII	Дерново- подзолистая	EL (элювиальный горизонт)	20-25
VIII	Подзолистая	EL (элювиальный горизонт)	20-25

В общей сложности для каждого изображения шлифа было проведено по пять реконструкций. Реконструкции проводились с помощью двухточечных корреляционных функций  $S_2$  и линейной функции  $L_2$ , рассчитанной для обеих фаз. Такой подход к исследованию структуры почв используется впервые. Корреляционные функции были рассчитаны в ортогональных и диагональных направлениях, согласно методике описанной в разделах 2.1, 2.2 и 3.1. [3]. Размер реконструированных изображений равнялся оригиналу, т.е. тоже составлял

994<sup>2</sup> пикселей. Процедура стохастической реконструкции проводилась со следующими параметрами:

 параметр охлаждения λ=0.999999, значение которого гарантирует медленное охлаждение системы во время «отжига»;

2) длина расчетов корреляционных функций значением |r|=300 пикселей, такой длины корреляции было достаточно для учета всех наблюдаемых на изображениях неоднородностей (длина была выбрана согласно самой медленно затухающей функции  $L_2^{(b)}$  для почвы типа I, корреляционные функции для этого шлифа показаны на рис.5.1);

3) остановка алгоритма имитации «отжига» проводилась при достижении точности  $E = 10^{-7}$ , что примерно соответствует 1-2% неправильно расставленных пикселей [1, 94].



Рисунок 5.1. Корреляционные функции для пор (сплошные и пунктирные линии) и твердого вещества (линии с точками и тире) для типа І.  $S_2^{(w)}$  и  $L_2^{(w)}$  обозначают двухточечную и линейную функции для пор, а  $L_2^{(b)}$  — линейную для твердой фазы. Все корреляционные функции рассчитаны в четырех направлениях согласно рис.3.1. Затухание линейной корреляционной функции для твердой фазы имеет самую большую длину корреляции среди всех восьми изображений почв [4]

Строго говоря, так как при реконструкции используются случайные перестановки согласно алгоритму имитации «отжига», используемые подходы не требуют никакого подбора параметров. При реконструкции сохраняется общая пористость почвы, т.е. соотношение бинарных фаз на оригинале и на реконструкции идентичны. Это происходит автоматически, т.к. значение в нуле любой корреляционной функции равно соотношению фаз согласно ур.2.9 [10].

Сравнение всех восьми оригиналов с их пятью стохастическими реконструкциями проводилось с помощью различных метрик. Были проанализированы как поровое пространство, так и твердая фаза. В первую очередь, для каждого изображения почвы рассчитывались общее количество пор и распределение пор по размерам. Затем были рассчитаны кластерные функции  $C_2$  в двух ортогональных направлениях. Сравнение на их основе проводилось при помощи расчета «энергии» согласно ур.3.3 (квадрат разности между значениями кластерных функций оригинала и его реконструкции). Несмотря на то, что ранее было показано, что кластерная функция обладает значительной способностью описывать сложные структуры [95], оптимизация расчета этой функции далеко не так эффективна, как для  $S_2$  и  $L_2$  функций ввиду необходимости проверять динамику изменения кластеров после каждой перестановки [129]. Последнее делает применение реконструкций на основе кластерной функции слишком затратным вычислительно, и потому здесь не использовалось.

В заключение, для каждого изображения был проведен морфометрический анализ. Алгоритмы такого анализа с разделением на классы формы и ориентации согласно рис.2.4 и 2.5 были описаны в методическом разделе 2.4. На основе расчета суммы квадратов разностей для каждой рассчитанной метрики были выбраны лучшие реконструкции (наименьшее значение разности) для каждого из восьми типов почв. Расчет такого критерия, который позволяет рассматривать различные особенности почвенного строения, сделал возможным сравнение качества реконструкций и оценку их точности.



Продолжение рисунка на следующей странице...



Рисунок 5.2. Показаны все восемь оригинальных изображений различных типов почвенной структуры (левый столбец), а также лучшие реконструкции согласно анализу на основе кластерных корреляционных функций (средний столбец), и на основе морфометрического анализа (правый столбец). В случае если одна и та же реконструкция была лучше согласно обоим критериям, показано только ее изображение. Размеры всех шлифов составляют 2.1×2.1

см<sup>2</sup>. На оригинальных изображениях синим цветом выделены те особенности почвенного строения, которые были реконструированы с недостаточной точностью: тип II) вертикальная пора; III) сложные удлиненные поры; V) одна сильно связанная пора, простирающаяся по всему изображению; VI) одна связанная пора в виде трещины; VII) множественные горизонтальные трещины; VIII) горизонтальные поры выделенной области в верхнем правом углу изображения

Визуальное сравнение восьми оригиналов с их лучшими реконструкциями показало, что в целом реконструкции на основе выбранного набора корреляционных функций способны воспроизвести основные особенности почвенной структуры и агломераты пор (рис.5.2). Для всех реконструкций корреляционные функции были практически равны целевой функции. Среди очевидных недостатков сразу заметны:

1) отсутствие на реконструкциях длинных образований в виде связанных трещин для типов II, III, V и VI, а также

2) несколько укороченные вытянутые по горизонтали поры для почвенного типа VII.

Общее количество пор (рис.5.3) и распределение пор по размерам (рис.5.4) у оригиналов шлифов и стохастических реконструкций в целом хорошо согласуются.



Рисунок 5.3. Общее количество пор на оригинальном изображении и пяти реконструкций для всех восьми типов почвенной структуры (I-VIII) [5]



Рисунок 5.4. Сравнение распределения пор по размерам для оригинального изображения типа VII и его лучшей реконструкции согласно морфометрической метрике (данные для большего размера пор увеличены для улучшенного представления данных) [5]

Морфометрический анализ также показал хорошее соответствие между формой пор и их ориентацией на оригинальных изображениях и реконструкциях (рис.5.5). Наиболее заметные различия наблюдаются для округлых и изометричных изрезанных факторов формы (факторы формы 5 и 3). В случае округлых пор, их количество на реконструкциях обычно значительно меньше, чем на оригинале. Это в основном вызвано присутствием на оригинальных изображениях пор различной формы, что дает погрешность при восстановлении. В случае если все поры были бы округлыми, они были бы реконструированы правильно (см. например рис.2.2). По этой же причине количество пор с фактором формы 3 (изометричных изрезанных) гораздо выше на реконструкциях, чем на оригиналах. Этот эффект «обмена» между классами форм 3 и 5 особенно выражен для почвенного типа I, где большинство пор округлые. Ориентации пор (классы 6-8) были отлично описаны корреляционными функциями, рассчитанными в четырех (двух ортогональных и двух диагональных) направлениях. Это показывает эффективность методов при работе с анизотропными структурами, в том числе почвенными.



Рисунок 5.5. Сравнение всех морфологических классов факторов формы (1-5) и ориентации (6-8) между оригиналами и лучшими реконструкциями для всех типов почвенной структуры I-VIII [5]

Как упоминалось выше, для оценки качества реконструкций было использовано три различные метрики. Сначала лучшая реконструкция для каждого почвенного типа была выбрана согласно морфометрическим показателям (рис.2.4-2.5) на основе вычисления разностей каждого изображения квадратов (все вычисления ДЛЯ представлены В дополнительных материалах к статье [5]). Затем также на основе квадратов разностей рассчитывалась «энергия» кластерных функций на оригиналах и реконструкциях (рис.5.6) согласно ур.3.3, и на основе расчетов выбиралась лучшая реконструкция согласно сравнению связности фаз на изображении. Также, лучшая реконструкция определялась согласно сравнению общего количества пор (рис.5.3) и распределения пор по размерам (рис.5.4).



Рисунок 5.6. Сравнение энергий кластерных функций для всех восьми типов почвенной структуры и всех пяти реконструкций [5]

Табл.5.2 обобщает результаты сравнения на основе всех четырех метрик. В большинстве случаев количество пор и распределение пор по размерам давали один и тот же результат, а для шести типов почвенного строения (помеченных в таблице звездочкой) лучшая реконструкция согласно морфологии и связности, или связности и статистики пор совпадали. Это показывает достаточную степень соответствия между разными метриками и обосновывает выбор «лучшей» реконструкции. С другой стороны, различия, наблюдаемые между метриками, также позволяют заметить, что все существующие метрики не могут претендовать на роль универсальных способов описания структуры и служить в виде уникальных методов оценки качества реконструкций. Так как основной интерес при изучении структуры почв вызывает возможность определения физических и биологический свойств и функций почв, то лучшим критерием оценки качества реконструкций должны служить соответствия этих свойств реконструкций оригиналам. Для такого сравнения необходимы трехмерные реконструкции и привлечением методов моделирования в масштабе пор [130-131].

Таблица 5.2. Лучшие реконструкции согласно всем метрикам (все изображения представлены в дополнительных материалах к статье [5]).

Тип почвы								
Тип анализа	Ι	Π	III	IV	V	VI	VII	VIII
Распределение пор по размерам	2	1*	3*	4	1	1	1	1
Общее количество пор	2	1*	3*	3	1	1	1,3*	1
Кластерные функции $C_2^{(b)}$ , $C_2^{(w)}$	3*	2	4	1*	4	3*	3*	3
Морфометрический								
(8 параметров)	3*	1*	3*	1*	3	3*	3*	5

Анализ на основе кластерных функций показал, что реконструкции, по большей части, продемонстрировали удовлетворительное качество для большинства почвенных типов (см. рис.5.1 а также дополнительные материалы к статье [5]). Практически отличное согласие между кластерными функциями реконструкции и оригинала наблюдалось для почвенного типа I, для которого характерны несвязные поры (рис.5.7). Похожие результаты были получены и для типа IV, который в основном состоит из изометричных несвязных агломератов пор. Хорошие результаты также были получены для типов II и VIII. Кластерные функции оригиналов и реконструкций для этих типов различались незначительно. Так для типа II более низкая связность порового пространства в вертикальном направлении была вызвана неспособностью правильно реконструировать вертикальную трещину на оригинальном изображении в шлифе (рис.5.1). Более высокая связность для типа VIII вызвана областью с горизонтальными трещинами. Значительные расхождения для пор (в то время как связность твердой фазы находится в хорошем согласии с оригиналом) заметны для почвенных типов III и VII: заниженная связность на реконструкциях в горизонтальном направлении ввиду отсутствия трещин, видимых на шлифе типа III, и из-за горизонтальных вытянутых пор (сильно связанные горизонтальные трещины) на шлифе типа VII. Самой неуспешной реконструкцией согласно метрике кластерных функций является почвенный тип V (рис.5.8). Реконструкции не смогли воспроизвести поровое пространство этого типа, соединенное в единую пору (см. рис.5.1) небольшими трещинами. Заниженная связность пор также заметна на реконструкциях почвенного типа VI. Все используемые корреляционные функции  $S_2$ ,  $L_2$  и  $C_2$ , рассчитанные по направлениям, предоставили взаимодополняющую информацию об анизотропии структуры

почвы, но степень анизотропии, выявленная каждой из функций оказалась различной. Этот результат указывает на важность вклада, который каждая функция дает при описании структуры.



Рисунок 5.7. Сравнение кластерных функций оригинала и реконструкции для наилучшего случая почвенного типа I [5]



Рисунок 5.8. Сравнение кластерных функций оригинала и реконструкции для худшего случая для почвенного типа V [5]

Каждая реконструкция размером 944х944 пикселей требовала от 0.3 до 1.5 часов программного времени на ЦПУ Intel Xeon X7560 2.26 ГГц. Это время включает в себя порядка 10 минут на расчет набора корреляционных функций  $S_2$ - $L_2$ - $C_2$  оригинального изображения. Таким образом, рассчитывать корреляционные функции для почвенных изображений в шлифах достаточно просто и не требует особых вычислительных ресурсов. К тому же, процедура

стохастической реконструкции двухмерных изображений также нетребовательна к ресурсам и может быть с легкостью выполнена на обычном персональном компьютере.

Плохая точность реконструкции на основе набора из  $S_2$ - $L_2$  корреляционных функций для почвенных типов V и VI показывает их ограниченные возможности для описания структуры почв и подчеркивает необходимость включения дополнительных функций в набор для реконструкции. Несмотря на существующие неточности в реконструкции некоторых почвенных структур, корреляционные функции являются наиболее мощным из существующих инструментов для описания структуры пористых сред и многофазных материалов. По сравнению с реконструкциями оригинальным методом Енга-Торквато в первой работе посвященной почвам [1], на основе настоящего набора корреляционных функций очевидно значительное улучшение качества реконструкций. Насколько известно автору данной работы, корреляционные функции к структурам почв ранее не применялись.

Вероятной причиной, почему реконструкциям не удалось воспроизвести некоторые особенности почвенной структуры, такие как вытянутые поры, является статистическая неоднородность, или другими словами — нестационарность структуры почвы. Согласно определению в книге Торквато [10]: "структура является статистически однородной, если распределения вероятностей, описывающих стохастический процесс, инвариантны к сдвигу структуры или расчетной области". Иными словами, когда расчетные корреляционные функции не зависят от координат.

Некоторые области изображений с анизотропными, например, удлиненными порами, значительно отличаются от остальной части (выделены синим цветом на рис.5.1); другим характерным примером статистической неоднородности наблюдаемой в исследуемых почвенных шлифах является присутствие двух разных пористостей на одном изображении, например, округлых и трещиноватых пор. Это означает, что переходы от ур.2.2 к ур.2.3 и ур.2.6 в разделе 2.1, выполненные в предположении о статистической однородности, могут быть не совсем корректными. Корреляционные функции использовались многими исследователями для восстановления самых различных структур и материалов; однако, статистическая однородность входного изображения никогда не проверялась [1-2, 35, 79, 82, 85, 111]. В какой степени набор  $S_{2}-L_{2}-C_{2}$ корреляционных функций может решить проблему статистической ИЗ неоднородности/нестационарности в настоящее неизвестно. Сочетание время  $S_2-C_2$ применялось только для реконструкции очень простых структур [95, 111]. Периодические структуры могут быть реконструированы с полной точностью [3; 132], но они редко наблюдаются в почвах и других природных пористых средах.

Значение возможности описания структуры и проведения стохастических реконструкций на основе корреляционных функций для исследования пористых сред не следует недооценивать. Примеры потенциального использования в почвоведении включают в себя:

1) реконструкция трехмерной структуры по данным шлифов и других двухмерных методов исследования;

2) описание пространственной корреляции минералов, глин, органических веществ, активности микроорганизмов и т.п. в почве, а также их динамика в результате окультуривания и/или сельскохозяйственного использования;

3) мониторинг процессов деградации почв;

4) классификация почв.

Также реконструкции могут быть использованы для определения гидрофизических свойств почв, таких как, например, влагопроводность, водоудерживающие свойства и относительные фазовые проницаемости по воздуху/воде [26]. В последнем случае к трехмерным реконструкциям структуры почв по набору двухмерных срезов [86, 133] необходимо применять методы моделирования потоков жидкости в масштабе пор.

Настоящая часть исследования была ориентирована на описание двухмерных изображений структуры почвы, так как почвенные шлифы (а также полученные реконструкции, которые сравнивались с оригиналами) представляют только двухмерную информацию. Реконструкция трехмерной структуры почвы на основе набора сечений является логичным продолжением настоящей работы, и будет особенно актуально для исследования структуры почв с анизотропией в более чем одном направлении.

В данной части работы исследовались возможности универсальных корреляционных функций для описания и реконструкции бинарных (поровое пространство и твердое вещество) структур почв. В частности, впервые двухточечные корреляционные функции  $S_2$  и  $L_2$  применялись для описания и реконструкции двухмерных изображений почв. Также, кластерные корреляционные функции были предложены для улучшения описания связности почвы и определения качества реконструкций. Впервые корреляционные функции вычислялись в четырех направлениях и применялись к исследованию естественных пористых сред (почв).

При реконструкции восьми различных типов почв с контрастными особенностями структуры порового пространства были отмечены некоторые основные различия между реконструированными и оригинальными изображениями. Наблюдаемые различия были объяснены недостатком информативности в наборах корреляционных функций, использовавшихся для реконструкции. Сравнение почвенных шлифов и их стохастических реконструкций было проведено с использованием трех тестовых метрик и ни одна из них не оказалась достаточно уникальной, чтобы однозначно охарактеризовать различия между

оригинальными и реконструированными изображениями. Это демонстрирует, что стандартные метрики в виде распределения пор по размерам и им подобные недостаточны для описания структуры почвы. Лучшим способом определить точность реконструкций является использование моделирования в масштабе пор для определения физических свойств (например, влагопроводности или кривой влагоудержания) реконструированного трехмерного изображения почвенной структуры, с последующим сравнением с независимыми лабораторными измерениями.

## 5.2 Трехмерное моделирование структуры керамики

Для апробации разработанных методов реконструкции с помощью корреляционных функций были проведены расчеты по трехмерным данным и восстановление трехмерного изображения изотропной пористой среды. После чего сравнивались оригинал и модель на соответствие фильтрационных свойств. Такой метод верификации показывает способность предложенных методов воспроизводить трехмерную структуру пористых сред с соответствующими свойствами.

В качестве объектов исследования были выбраны образцы пористой проницаемой керамики из узкофракционированных порошков электрокорундов марки F-240 Alodur WSK, ZWSK, SWSK выпускаемых фирмой Traibacher Schleifmittel, Австрия [7]. Соотношение компонентов электрокорунд: алюмосиликатная связка в шихте для формования образцов составляло 85 : 15 (мас. %). В качестве временной технологической связки использовали связку фирмы Zscimmer&Schwarz GmbH, Германия, марки KB 2097, которую вводили в количестве 10 мас. % сверх 100 мас. % по отношению к шихте. Распределение частиц по размерам этих порошков электрокорунда приведено в табл.5.3. Распределение частиц электрокорунда по размерам и фактор формы измеряли на лазерном анализаторе частиц Analyzette 22, фирма Frutsch GmbH, Германия. Образцы проницаемой керамики готовили методом полусухого прессования при удельном давлении 30 МПа. Температура обжига 1280°С, время выдержки при максимальной температуре 2 ч. Микроструктуру порошков и пористой проницаемой керамики изучали на растровом электронном микроскопе JSM-6490 LV, фирма Jeol, Япония. Коэффициент газопроницаемости образцов керамики определяли лабораторно при расходе воздуха 10 см3/с и перепаде давления 314 Па.

Марка	Фактор	Распределения порошка по размерам, мкм				
порошка	формы	3% частиц имеют диаметр менее	средний диаметр частиц	94% менее		
F240 WSK	1.44	7.8	54.6	89.4		
F240 ZWSK	2.22	6.6	52.4	75.9		
F240 SWSK	2.47	14.1	62.1	102.5		

Таблица 5.3. Распределение частиц порошка электрокорунда по размерам

Три образца (F240 WSK, F240 ZWSK и F240 SWSK) исследовали с помощью микротомографа SkyScan-1172 с разрешением 2.24 мкм. Из полученных для каждого образца стеков двухмерных изображений вырезались области размером 500<sup>3</sup> вокселей, которые в дальнейшем использовались в качестве входных данных для процедур реконструкции, визуализации структуры и расчета эффективных физических свойств (проницаемости). Полученные трехмерные изображения бинаризировались (выделяли две фазы: твердое вещество и поры) на основе одного значения порога сегментации, выбираемого по гистограмме томографического изображения. градаций серого оригинального Сегментированные изображения использовались для реконструкции трехмерного строения пористой среды и для сравнения полученных моделей с оригиналами путем моделирования однофазного течения флюида (газа) через образец оригинальной и восстановленной керамики с помощью конечноразностного решения уравнения Стокса. В качестве результатов моделирования было получено поле скоростей течения газа в трехмерной геометрии порового пространства образца. Задача считалась решенной, когда разница между скоростями в каждом отдельно взятом срезе становилась меньше 10<sup>-7</sup>. Абсолютная проницаемость по газу рассчитывалась согласно закону Дарси.

Результаты стандартного РЭМ-исследования структуры полученного керамического образца показаны на рис.5.9. Несмотря на то, что в наблюдаемой структуре точно прослеживаются отдельности, соответствующие изначальным гранулам электроплавленного корунда, изображение скола не позволяет судить о связности порового пространства, анизотропии, а также недостаточно для прямого моделирования течения флюида. Аналогично выглядят и двухмерные срезы, полученные методом рентгеновской микротомографии, однако бинаризированный стек таких срезов позволяет представить строение образца керамики в трехмерном пространстве (рис.5.10).



Рисунок 5.9. Микроструктура пористой проницаемой керамики из узкофракционированных порошков электрокорунда: a – F240 Alodur WSK, б – F240 ZWSK, в – F240 SWSK [7]



Рисунок 5.10. Результаты микротомографического исследования структуры образцов керамики (сверху вниз: F-240 WSK, F-240 ZWSK и F-240 SWSK): изначальное изображение, отсегментированное бинарное изображение (поры белые), трехмерные визуализации строения

образцов с полями скоростей течения (слева на право) [7]

Полученные методом рентгеновской микртомографии трехмерные изображения позволяют провести детальное исследование возможностей алгоритмов реконструкции пористых сред и сравнение моделей с оригинальными изображениями. Для реконструкции трехмерной структуры образцов керамики использовались изображения размером 500<sup>3</sup> вокселей с разрешением 2.24 микрон. Реконструкции каждого образца выполнены в троекратном повторении, размер аналогичен оригинальных и диагональных направлениях без осреднения. В алгоритме «имитации отжига» использовались следующие параметры: параметр графика охлаждения  $\lambda = 0.999999$ , длина корреляций на изображении |r| = 250. Выход из процедуры реконструкции осуществлялся после  $10^6$  непринятых перестановок. Подробное описание всех алгоритмов находится в разделах 2.1 и 2.2.

Заметим, что объем области для моделирования на несколько порядков меньше, чем объем образца для лабораторных измерений. Проведение моделирования на таком же объеме керамики, как и для лабораторных измерений, невозможно из-за ограничений методов рентгеновской микротомографии, а также вычислительных требований при расчетах в трехмерной геометрии значительного размера. Основной проблемой томографии является необходимость поиска компромисса между размером сканируемого образца и разрешением съемки, т.е. для получения структуры керамики с необходимыми структурными отдельностями на микронном масштабе для моделирования с необходимой точностью, размер сканируемого образца должен быть значительно меньше, чем используемый для лабораторных измерений.

Результаты лабораторных измерений эффективной проницаемости по газу представлены в табл.5.4. Многие свойства керамики, изготовленной из порошка корунда с различной формой, значительно отличаются (не обсуждаются в настоящей работе). Интересно, что разница в проницаемости для образцов из порошков F240 WSK, F240 ZWSK, и F240 SWSK оказалась незначительной. Это наблюдение было объяснено особенностями строения порового пространства с помощью распределения пор и горловин по размерам и длине [7]. Для сравнения и анализа полученных моделей пористой керамики с оригинальными изображениями микротомографии была рассчитана эффективная проницаемость по газу (см. раздел 2.7). газопроницаемости, полученные конечно-разностным численным решением Значения уравнения Стокса (из-за изотропии образцов показано лишь среднее значение для вычислений по трем ортогональным направлениям), находятся в хорошем соответствии с лабораторными измерениями. В последнем столбце табл.5.4 приведены данные расчетов гозопроницаемости по трехмерным восстановленным с помощью корреляционных функций моделям керамики (среднее значение по трем повторам реконструкций). Расхождение в расчетах по реконструкциям можно объяснить нестационарным строением изучаемой пористой среды.

Например, на рис.5.10 на трехмерном изображении образца F240 ZWSK виден крупный кластер твердого вещества, который не может быть отображен в стохастической реконструкции выбранным методом. На основании полученных результатов можно заключить, что реконструкции изотропных пористых сред проведены успешно. Визуализации трехмерных восстановленных моделей показаны на рис.5.11. Количество твердой фазы и пор в реконструкциях равно данным микротомографии. Время расчетов каждой реконструкции размером 500<sup>3</sup> вокселей занимало от 35 до 70 часов программного времени на ЦПУ Intel Xeon X7560 2.26 ГГц. Это время включает в себя около 30 минут на расчет набора корреляционных функций  $S_2$ - $L_2$  оригинального изображения.

Таблица 5.4. Проницаемости образцов керамики измеренные экспериментально и полученные численно по данным томографии и по реконструкциям с помощью корреляционных функций

Марка порошка	Коэффициент газопроницаемости, мкм <sup>2</sup>						
	эксперимент	Расчет по ЦКТ	Расчет по				
	oneprineri						
			реконструкциям				
F240 WSK	1.97	2.01	1.76				
F240 ZWSK	1.91	1.83	1.64				
F240 SWSK	1.96	2.47	2.38				
	1.90	,	2100				



Рисунок 5.11. Трехмерные изображения реконструкций пористой керамики размером 500<sup>3</sup> вокселей (слева на право: F-240 WSK, F-240 ZWSK и F-240 SWSK), поры синие

Проведено восстановление трехмерной структуры пористой проницаемой керамики методом имитации «отжига» по данным корреляционных функций. Изображения для входных данных и сравнения с оригиналом получены методом рентгеновской микротомографии. Полученные оригинальные трехмерные данные о структуре порового пространства и

трехмерные реконструкции использованы для определения эффективных свойств керамического материала — проницаемости. Для всех трех исследуемых образцов, изготовленных из гранул корунда различного размера и формы, полученные численным методом величины проницаемости, отлично соответствовали результатам лабораторных измерений. При этом присутствует схождение по расчетным трехмерным реконструкциям, что доказывает способность предложенных методов восстанавливать трехмерные модели по расчетам на основании трехмерных изображений.

### 5.3 Реконструкция керогена в сланцеподобных образцах

Породы баженовской свиты являются, вероятно, наиболее изученным нетрадиционным коллектором Западной Сибири [134]. Бассейн залегания и мощность имеют площадь более 1 млн км<sup>2</sup> и толщину в пределах от 10 до 100 м (при среднем значении 60 м), соответственно. Этот тип сланцеподобной породы часто называют черными сланцами, так как они наполнены битумами и другими органическими материалами. По оценкам общий объем извлекаемых углеводородов варьируется от  $0.6 \times 10^9$  до  $30 \times 10^9$  тонн [135-136]. Такая неопределенность в оценках в первую очередь обусловлена невозможностью описать свойства пород баженовской свиты и их пространственную изменчивость. Из-за сильной неоднородности свойств пласта количество углеводородов извлекаемых из соседних и близко расположенных скважин может отличаться на порядки. Детальные исследования образцов таких горных пород сильно ограничено трудностью извлечения кернового материала и рисками разрушения структуры образцов при экстракции. Чтобы разработать общую схему исследования физических свойств нетрадиционных коллекторов нефти на основе лабораторных методов и моделирования в масштабе пор, рассмотрим несколько примеров из ранее опубликованной коллекции из 50 образцов баженовской свиты с глубин порядка 2 км [137].

Пористость и проницаемость по газу измерялась с помощью устройства Coretest AP-608 при атмосферных условиях и при повышенном давлении (поровое давление 1.38 МПа) и четырех различных давлениях обжима в 3.45, 10, 20 и 30 МПа. Для измерений использовали азот. Для каждого образца проводилось 12 измерений при пяти давлениях и, затем, вычисляли среднее значение. Результаты измерений на большой коллекции образцов приведены в работах [2, 137]. До сих пор точно не известно насколько изменяет проницаемость горных пород такого типа насыщение керосином и химическая экстракция. Скорее всего, любое химическое воздействие вымывает не только углеводороды, но и битумы и прочие органические вещества, включая кероген. Таким образом, нарушается структура изначального образца породы, и изменяются петрофизические свойства. Изучение ненарушенной структуры пород с

последующим моделированием в масштабе пор может послужить достойной, и возможно единственной, альтернативой деструктивным лабораторным методам.

Измерения пористости и проницаемости в образцах баженовской свиты проводимые с помощью стандартных методов, как правило, сильно завышают реальные значения. Это объясняется тем, что органическое вещество является частью матрицы и его удаление приводит к разрушению последней. В некоторых случаях после химической экстракции органического вещества, образец разваливается на части, что делает невозможным какие-либо дальнейшие измерения. Например, предыдущие исследования показали, что наиболее достоверные значения пористости получаются путем насыщения керосином без химической экстракции [137].

Все обсуждаемые в этой работе образцы были отсканированы с помощью рентгеновского микротомографа Skyscan-1772 с разрешением 1 мкм. Сканирующий электронный микроскоп использовался для исследования субмикронной пористости. Без использования таких современных методов как резка ионным пучком, на основе исследований пористости сланцев с помощью РЭМ получают 2.5D изображения. Для дальнейшего анализа и использования в виде входных данных для стохастической реконструкции, необходимо отсегментированное (разделенное на поры и твердую фазу) двухмерное изображение среза через структуру. Для выполнения сегментации использовался двухэтапный подход: 1) индикаторный кригинг (indicator kriging) [138] для первичной бинаризации изображения в оттенках серого, а затем 2) стереографический алгоритм для уточнения структуры [139].

Ранее множеством исследователей за рубежом было показано, что значительная часть пористости сланцеподобной породы находится в керогене [50, 140]. Недавно присутствие пористости в керогене было показано и для образцов баженовской свиты [2, 135-136]. В целом, работы российских ученых выявили, что на множественных РЭМ изображениях присутствуют поры округлой формы, находящиеся внутри органического вещества керогена. Такой тип пористости распространен в породах баженовской свиты и может составлять до 30% от общей пористости.

Микротомографические изображения высокого разрешения (1 мкм) показали, что основной пористостью в образцах баженовской свиты является смесь аморфного органического вещества и пор, заполненных свободными углеводородами и керогеном. В исследованных образцах не наблюдались трещины и наслоения глин. Коэффициенты поглощения рентгеновских лучей различных органических соединений очень близки, а потому отделить смеси пор, керогена и битумов невозможно. По результатам прецизионной обработки изображений было возможно отсегментировать только два типа органики: свободные углеводороды в больших порах (более нескольких мкм), и аморфное органическое вещество, в основном кероген [2, 135]. Из анализа трехмерных сегментированных изображений видно, что

большие поры, заметные на томографии не связаны с друг другом и не образуют достаточно большие кластеры, чтобы обладать проницаемостью (рис.5.12). В большинстве случаев на микротомографических изображениях выделяли следующие домены:

- 1) поры, содержание свободные углеводороды;
- 2) смесь органических веществ (включая кероген);
- 3) пирит;
- 4) твердую матрицу, в основном состоящую из кремнистых материалов.



Рисунок 5.12. Различные домены пористости (смесь органики, поры больше 1-5 мкм, пирит), выделенные на трехмерном томографическом изображении образца баженовской свиты (разрешение съемки 1 мкм), и их совмещение. Размер области – 100<sup>3</sup> вокселей [2]

На рис.5.13 показан пример в достаточном масштабе (ширина изображения 100 мкм), подчеркивающий связность/несвязность различных фаз и их комбинаций. Важно понимать, что проводить расчеты фильтрационных свойств сланцев на основе томографии невозможно ввиду недостаточного разрешения и несвязности видимых на изображениях пор.

Сочетание рентгеновской микротомографии и РЭМ изображений привело к выделению пять различных типов пористости (рис.5.13):

1) пористости керогена в домене смеси органически;
2) пористость пирита в домене пирита;

3) пористости в кварце;

4) пористости в халцедоне в домене матрицы;

5) большие поры, которые видны не только на томографии, но и на многих РЭМ изображения (например, вокруг пирита или между агрегатами в разных фазах).



Рисунок 5.13. Различные фазы (смесь органики, поры больше 1-5 мкм, пирит), выделенные на трехмерном томографическом изображении образца баженовской свиты (разрешение съемки 1 мкм), совмещенные с РЭМ изображениями соответствующих нанопористостей.

Размер области — 300<sup>3</sup> вокселей [2]

На рис.5.13 представлен тот же самый образец, что на рис.5.12, но в гораздо меньшем масштабе (образец шириной 300 мкм). После описания всех типов пористости и их пространственного распределения в масштабе микротомографии из этого рисунка очевидно, что связность пор внутри образца в основном обеспечена пористостью керогена, и, таким образом, он обеспечивает основной вклад в потоки флюидов и проницаемость. Все домены могут содержать некоторые количество нанопористости, невидимой на томографии, но,

потенциально, связанной с другими типам пористости. Общая пористость (сумма пористости всех пяти типов) в образцах на основе насыщения керосином варьировалось от 5 до 10%, в то время как пористость керогена достигает значений до 32% (согласно РЭМ изображениям) [2, 137]. Суммы больших пор и смеси органики дают значение, отлично согласующееся с общей пористостью образцов, показанных на рис.5.12 и 5.13. Это в очередной раз доказывает доминирующее значение этих двух типов пористости, их связность, и важность для моделирования фильтрационных свойств. Поэтому в настоящей части исследования остановимся на нанопористости керогена и попробуем определить его проницаемость с помощью стохастических реконструкций на основе РЭМ изображений. Верификацию результатов моделирования проведем по уже опубликованным лабораторным данным для упоминавшегося кернового материала.

Всего было подготовлено три разных РЭМ изображения керогена (см. примеры двух изображений на рис.5.14), которые использовались как входные данные для реконструкций с помощью корреляционных функций. Для каждого изображения проводилось по три реконструкции с помощью разных наборов корреляционных функций: 1) лишь осредненной корреляционной функции  $S_2$ , 2) рассчитанной в ортогональных направлениях функции  $S_2$ , и 3) рассчитанных в ортогональных направлениях функций соответствовали описанным в разделе 3.1 при реконструкции изображений крестов. Для каждого входного изображения и набора функций было получено по одной трехмерной реконструкции.



Рисунок 5.14. Оригинальные РЭМ изображения и их сегментации размером 400<sup>2</sup> пикселей, использовавшиеся для стохастических реконструкций (изображения 1 и 3). Разрешение РЭМ изображений 18 и 10 нм, соответственно [2]

Из каждой реконструкции выделяли сеточную модель на основе метода, описанного в разделе 2.9. Примеры реконструкций и сеточных моделей показаны на рис.5.15. В зависимости от реконструкции, сеточные модели насчитывали от трех до семи тысяч элементов, включая горловины. Ha полученных моделей рассчитывалась поры И основе сеточных газопроницаемость керогена согласно подходу, описанному в разделе 2.10. Используемые граничные условия для давления имели широкий диапазон значений (138 кПа-13.8 МПа), включая соответствовавшие лабораторным исследованиям. Реконструкции на основе ортогональных S<sub>2</sub> и L<sub>2</sub> функций визуально наиболее напоминали оригинальные изображения. По реконструкциям на основе этого набора корреляционных функций проводилось моделирование газопроницаемости с и без учета нелинейных эффектов давления (см. раздел 2.10) с граничными условиями давления, соответствующими лабораторным измерениям. Были получены следующие значения проницаемости для каждого входного изображения: 0.604, 0.57, и 0.52 мД соответственно (значения получены как среднее от трех ортогональных проницаемостей). Полученные численно значения проницаемости керогена оказались почти на

порядок выше лабораторных значений [2, 137]. Такое расхождение можно объяснить 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 (рис.5.12 и 5.13), 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 типа пористости с более низкими проницаемостями могут соединять кластеры пористости в керогене;

5) лабораторные методы измерения проницаемости могут обладать значительными ошибками [137].



Рисунок 5.15. Пример реконструкций размером 300<sup>3</sup> вокселей (поры красные) и выделенных из них сеточных моделей. Соответствуют исходным изображениям на рис.5.14

Результаты моделирования проницаемости керогена на основе стохастических реконструкций показаны на рис.5.16а. Различия при низких давлениях особенно заметны для изображения номер 3, на котором наблюдались наиболее мелкие поры. Чтобы сверить полученные результаты с работой [56] для каждой реконструкции также проводилось сравнение различия между проницаемостями, рассчитанными согласно стандартной физике без учета проскальзывания молекул газа у стенок пор и эффектов диффузии Кнудсена, и с учетом зависимости проницаемости от давления. Результаты на рис.5.16б показывают такие же зависимости, как и в работах [56, 141]. При малых давлениях проницаемости с учетом нелинейных эффектов значительно выше, различия постепенно сглаживаются с увеличением давления, но в зависимости от размеров пор, могут расходиться даже при высоких давлениях порядка 13.8 МПа.



Рисунок 5.16. Проницаемости по газу, рассчитанные для всех стохастических реконструкций (а), и сравнение расчетных результатов полученных с учетом нелинейных эффектов давления и без (б) [2]

Отдельно отметим один из важных выводов, полученных по данной части исследования – проницаемости керогена в различных точках внутри образца отличаются значительно. Что очевидно из анализа РЭМ изображений и расчетов по стохастическим реконструкциям. Этот вывод имеет очень важные приложения для исследования свойства сланцев — быстрая двухмерная съемка с помощью РЭМ или FIB-SEM и стохастические реконструкции имеют куда более значительные перспективы, нежели сложная и время затратная томография на основе FIB/BIB-SEM ввиду необходимости измерений вариативности локальных проницаемостей керогена и других доменов нанопористости для апскейлинга транспортных свойств породы до размера керна и больше [9].

Определение проницаемости только керогена не решает общей проблемы определения свойств сложных пород с многомасштабными 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 единственное 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. Трехмерные исследования структуры таких материалов и пористых сред либо слишком затратные, либо, как в случае со сланцами, требуют множество повторностей проведения исследования в различных частях образца. Рассчитанные по стохастическим реконструкциям проницаемости керогена в образцах баженовской свиты хорошо согласовались с измерениями на керновом материале.

### 5.4 Гибридная реконструкция песчаников

Недостатком реконструкций на основе корреляционных функций и метода оптимизации имитацией «отжига» являются достаточно длительное время вычислений. Это, в том числе, связано с тем, что перестановки пикселей/вокселей из случайных начальных конфигураций вначале медленно приобретают черты оригинала. Кроме того, на результаты алгоритма оптимизации будет влиять изначальная конфигурация структуры при размерности области вычислений в десятки миллионов ячеек. Исходя из этих логических предпосылок в работе [142] было предложено заменить изначально случайную конфигурацию вокселей на структуру, более близкую реконструируемому материалу. С помощью такого подхода, эти исследователи смогли

восстановить структуру металлокерамики и карбида более точно. В настоящей части исследования использовался похожий подход к породам-коллекторам нефти и газа и 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. Выбранные для исследования образцы песчаника были отсняты на микротомографе SkyScan-1172 с разрешением 5 мкм. Двухмерные срезы размером 700<sup>2</sup> пикселей через трехмерные изображения показаны на рис.5.17.



Рисунок 5.17. Результаты микротомографического исследования структуры образцов песчаника, отсегментированные бинарные изображения (поры белые)

Ha основе каждого трехмерного изображения проводились реконструкции с использованием только осредненной S<sub>2</sub> функций и гибридного метода с использованием только S<sub>2</sub>. В последнем случае была получена предварительная структура на основе последовательного метода частиц, описанного в разделе 2.6. Чтобы детально исследовать возможности ускорения вычислений при использовании гибридной реконструкции, использовалась только одна функция, так как скорость реконструкции на основе осредненной S<sub>2</sub> функций максимальна, а также для сравнения получаемых результатов с работой [113]. Размер реконструированных изображений был 300<sup>3</sup> вокселей. Для насыпной модели гранулометрический состав добавляемых сфер определяли двумя разными способами — на основе анализа двухмерных рис.5.17, срезов, показанных на или использовался лабораторно определенный гранулометрический состав на лазерном анализаторе частиц. Так как расчет корреляционных функций проводился по изображениям с разрешением 5 мкм, использовать сферы диаметром менее 20 мкм не имеет особого смысла, все более мелкие детали будут добавлены на изображение позже перед выполнением алгоритма имитации «отжига». При оценке гранулометрического состава по двухмерным изображениям сначала разделяли твердое вещество на гранулы с помощью метода «водораздела» (watersheds), а затем производился

переход от двухмерного гранулометрического состава к трехмерному с помощью метода из работы [143]. Все сферы после насыпания ограняли 24 плоскостью со случайными ориентацией и проникновением в сферу на не более чем 0,4 радиуса. Примеры полученных насыпных моделей до и после огранки показаны на рис.5.18 (также см. детальный пример ограненной насыпной упаковки сфер – на рис.2.7). При гибридной реконструкции перед алгоритмом восстановления с помощью корреляционных функций в случае надобности корректировалась пористость добавлением или удалением вокселей твердой фазы до совпадения значения с входным двухмерным изображением по аналогии с примером образования органического вещества на рис.2.8.



Рисунок 5.18. Модели песчаников, полученные последовательным методом, поры синие

Для всех реконструкций проводились расчеты проницаемости на основе сеточных моделей (см. раздел 2.8). При этом в гибридной модели расчеты проводились дополнительно до запуска алгоритма имитации «отжига» после огранки насыпной упаковки сфер. Результаты модельных исследований представлены в табл.5.5. За исключением образца 3, насыпные модели значительно завышали значения проницаемости. Это хорошо согласуется с предыдущими исследованиями на основе последовательных насыпных методов [113, 143], которые также показали, что имеет место значительное завышение значений. По окончании гибридной реконструкции, значения проницаемостей стали значительно ближе к оригинальным значениям, рассчитанным по трехмерным томографическим изображениям с использованием сеточных моделей. Что интересно, значения проницаемостей, полученных на гибридных и насыпных моделях по гранулометрическим составам, оцененным по изображениям и лабораторным данным, оказались очень близки. Это показывает будущие возможности метода по реконструкции песчаников по лабораторным данным гранулометрического состава и шлифам/аншлифам. Скорость реконструкций на основе гибридного метода была на порядок быстрее выполнения алгоритмов с применением только S<sub>2</sub> функции при одинаковом значении пороговой «энергии» E<10<sup>-6</sup>.

Таблица 5.5 Результаты моделирования проницаемости по результатам гибридной реконструкции песчаников.

Номер	Пористость	Источник	Расчет коэффициента проницаемости, мД		
образца	по µК I, %	модели	по µКТ	по реконструкциям последовательным методом	по реконструкциям гибридным методом
1	14.33	ГС *	105	116.46	74.34
		СИ *		175.21	105.89
2	19.22	ГС	260	379.22	281.17
		СИ		354.99	228.91
3	23.55	ГС	824	641.15	768.34
		СИ		887.75	750.84

\*ГС — гранулометрический состав, СИ — сегментированное изображение

Проницаемости реконструкций только по корреляционным функциям  $S_2$  имели ожидаемые заниженные значения (в 3-5 раз ниже), но при этом значительно выше, чем в работе [113]. Чтобы детальнее разобраться в результатах моделирования, были проведены исследования оригиналов и реконструкций с помощью теории локальной пористости. Результаты исследований показаны на рис.5.19 и 5.20. По распределениям локальных пористостей можно заключить, что размеры пор в гибридной реконструкции были гораздо ближе к оригиналу, в том числе характеристическая длина в реконструкции для образца 1 равнялась  $L^*=130$  мкм, для реконструкции на основе только корреляционной функции —  $L^*=100$  мкм, в то время как для оригинала  $L^*=150$  мкм. Общее количество перколирующих мерных ячеек для образца 1 также различалось между реконструкциями (рис.5.20), при этом гибридный метод показал наиболее близкие характеристики, почти соответствующее оригиналу.



Рисунок 5.19. Анализ с применением теории локальной пористости: локальные пористости и вероятности перколяции



Рисунок 5.20. Анализ с применением теории локальной пористости: общие доли перколирующих расчетных ячеек

Для полного сравнения оригинала и реконструкции рассчитывались характеристики двухфазного течения в оригиналах и гибридных реконструкциях с помощью сеточных моделей (раздел 2.9). Худший результат показала гибридная реконструкция для образца 1 (рис.2.21), тем

не менее, капиллярные кривые совпадают, а кривые относительных проницаемостей различаются незначительно. Для образца 2 получено отличное совпадение всех характеристик двухфазного течения (рис.2.22). Настоящие результаты показывают обширные возможности метода для решения прикладных задач петрофизики и апскейлинга основных эффективных свойств пород-коллекторов.



Рисунок 5.21. Результаты моделирования двухфазного течения в образце 1 (худшее совпадение оригинала и гибридной реконструкции). Слева показана капиллярная кривая, справа относительные проницаемости по воде и воздуху



Рисунок 5.22. Результаты моделирования двухфазного течения в образце 2 (лучшее совпадение оригинала и гибридной реконструкции). Слева показана капиллярная кривая, справа относительные проницаемости по воде и воздуху

Большинство наблюдаемых различий между оригиналами и гибридными реконструкциями, скорее всего, можно объяснить ошибками при оценке гранулометрического состава. Лабораторные данные усредняются по более большому объему образца, чем оригинальные трехмерные изображения, используемые в работе. Химическое и механическое воздействие на породу, необходимое для дисперсии частиц может значительно нарушать гранулометрический состав и приводить к завышению более маленьких по размеру фракций за счет разрушения агрегатов кварцевых частиц. Необходимый переход от двухмерного гранулометрического состава к трехмерному, при оценке по двухмерным срезам, был выполнен на основе весьма простой методики, которая не может претендовать на точность. Более точный переход может быть выполнен на основе корреляционных функций в модели пересекающихся сфер различного размера [53].

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. Для успешного применения метода в будущем необходимо решить ряд задач:

1) правильный переход от двух к трехмерному распределению гранул на изображениях;

2) дополнить набор корреляционных функций;

3) провести верификацию по трехмерным насыпным образцам с достоверно известными свойствами.

#### 5.5. Обсуждение результатов

В целом, можно отметить, что наблюдается ряд особенностей, с которыми в настоящий момент стохастические реконструкции справляются слабо. В первую очередь это касается связности порового пространства на реконструкциях, которое может быть занижено. Это, в свою очередь, отражается в различии в количестве и распределении пор по размерам. Степень различия, как уже обсуждалось, оказалась разной в зависимости от почвенного типа. Все расхождения можно объяснить недостаточным количеством информации о восстанавливаемой структуре, содержащейся в выбранном наборе корреляционных функций [75]. Некоторое улучшение также возможно за счет подбора весов вклада каждой корреляционной функции (раздел 3.2), так как настройка коэффициентов целевой функции проводилось только при реконструкции керамики (раздел 5.2). Нерешенной задачей, таким образом, является возможность определения, какие наборы корреляционных функций содержат достаточно чтобы описать заданную структуру пористой среды. Существование информации, вырожденных состояний корреляционной функции S<sub>2</sub> было ранее продемонстрировано для гипотетических структур и некоторых простых композиционных материалов [75, 144] и главе 3. Кроме того, было показано, что проведение реконструкции с использованием только S<sub>2</sub> корреляционной функции приводит к значительному занижению связности порового пространства [54, 145]. Поведение L<sub>2</sub> и C<sub>2</sub> корреляционных функций относительно их вырожденных свойств является активной областью исследований в теоретической физике. Хотя изотропные реконструкции на основе S<sub>2</sub> и L<sub>2</sub> функций хорошо зарекомендовали себя применительно к простым однородным материалам, таким как, например, композиты и

спеченные фильтры [10, 31, 35], что подтверждается результатами в разделе 5.2, возможность их применения для реконструкции сложных структур, например, почвенных, ограничена (раздел 5.1).

Добавление большего числа направлений для расчета корреляционных функций также может привести к улучшению качества реконструкций. Однако применение большого числа направлений приведет к существенному увеличению необходимых вычислительных ресурсов. И потенциально приведет к медленному увеличению результирующего информационного содержания в наборе функций, что делает увеличение числа направлений похожим на использовании корреляционных функций более высоких порядков [54]. Еще одним потенциальным способом улучшить связность пор на реконструированных изображениях является недавно предложенный метод эрозии-дилатации (erosion-dilation) [129, 146].

Третьим способом улучшить качество реконструкций является использование  $C_2$  функции для реконструкции. Использование кластерной функции должно привести к соединению всех разорванных связей между порами для почвенных типов V и VI, а также улучшить статистику для всех других реконструкций. Еще раз отметим, что  $C_2$  функция вычислялась в настоящей работе только для оценки качества реконструированного изображения за счет сравнения с оригиналом. Также важно понимать, что кластерные функции одного и того же образца почвы рассчитанная по двумерным и трехмерным изображениям принципиально отличаются; только трехмерная статистика предоставляет истинную информацию о связности. Использование функции  $C_2$  для реконструкции в настоящее время вычислительно слишком затратно; на сегодняшний день она применялась только в нескольких простых тестовых случаях и при моделировании структуры сплава Al-Si-Fe весьма ограниченного размера в работах [95, 111].

В дополнение к описанию структур и выполнению стохастических реконструкций, корреляционные функции могут также применяться для оценки многочисленных физических свойств с помощью, так называемых строгих пределов (rigorous bounds) [10]. Современные методы в основном включают в себя использование трех или четырехточечной корреляционных функций  $S_3$  и  $S_4$  [147]. Однако, эффективность таких подходов для оценки свойств пористых сред демонстрировалась на очень простых примерах. Так как недавно было показано, что функции  $S_3$  и  $S_4$  не предоставляют достаточной информации для полного описания большинства пористых сред [75, 95], можно с уверенностью ожидать, что применение строгих пределов и других методов теории эффективных сред на основе функций  $S_3$  и  $S_4$  приведет к неточным результатам. Тем не менее, такие подходы могут найти свое применение в обеспечении быстрой, но приблизительной оценки эффективных свойств без интенсивных вычислений.

Создание трехмерных реконструкций по корреляционным функциям, рассчитанным по двухмерным изображениям, представляется особенно привлекательным направлением, как для почв и сланцев, так и прочих сложных пористых сред, так как они часто имеют разномасштабные структуры на таких размерах, что комплексный многомасштабный трехмерный анализ (например, томография с разным разрешением) не будет возможен [9]. Например, пористость в наномасштабе может быть исследована с помощью двухмерных методов FIB-SEM/SEM, и уже по этим данным затем проведены трехмерные реконструкции [2] как это было сделано в разделе 5.3. Микро- и макро-пористости могут быть охарактеризованы с использованием томографии более низких разрешений, зато на более объемных образцах. Сборка всех масштабов в одно общее изображение является заключительным этапом исследования многомасштабного порового пространства [2, 9, 148].

Прежде чем корреляционные функции станут общепринятым методом и начнут применяться для решения основных задач в области изучения пористых сред исследователям необходимо ответить на целый ряд вопросов:

1) Является ли набор  $S_2$ - $L_2$ - $C_2$  корреляционных функций уникальным для каждого типа структуры?

2) Как повлияет включение функции  $C_2$  в общий набор на качество реконструкции?

3) Какой набор корреляционных функций необходим для точного описания структуры пористой среды?

4) Какие свойства пористых сред могут быть надежно рассчитаны с использованием корреляционных функций и стохастических реконструкций?

5) Можем ли мы использовать корреляционные функции для описания динамики структуры?

6) Какова степень полноты статистической информации, обеспечиваемой вычислением корреляционных функций в нескольких направлениях, и каково минимальное количество таких направлений?

В будущем, ответ на все или даже несколько из этих вопросов значительно увеличит возможности для описания структуры пористой среды и ее динамики.

### 5.6. Выводы по главе

В заключительной главе данной работы были представлены результаты верификации разработанных методов и их применение для описания и моделирования структуры пористых сред. Подробно изучены возможности описания двухмерных данных о пористых средах на примере различных типов почв. В этом исследовании были использованы различные метрики

для анализа и сравнения результатов, в том числе распределение пор по размерам, морфометрический анализ, расчеты кластерной функции и др. Показаны трехмерные реконструкции и данные расчетов газопроницаемости для образцов керамики. Предложен керогена, халцедона, пирита способ моделирования И микропор, составляющих сланцеподобные образцы баженовской свиты, и описаны его перспективы. Выполнены трехмерные реконструкции отложений керогена и рассчитана газопроницаемость в наномасштабе. Приведены результаты гибридного моделирования осадочных пород на примере песчаников, которое позволяет использовать сильные стороны двух различных методов стохастических реконструкций.

В целом можно заключить, что двухточечная корреляционная, линейная и кластерная функции могут точно описывать структурные свойства как твердой, так и поровой фаз пористых сред различной сложности. Кроме того, потенциально они могут быть задаваемы ограниченным количеством параметров или базисных функций. Это обеспечивает многочисленные возможности применения корреляционных функций в области петрофизики, почвоведения, материаловедения и др. дисциплин.

## Заключение

В настоящей диссертации проведено детальное рассмотрение современных методов описания и реконструкции пористых сред, которое показало, что по-прежнему остаются актуальными задачи, связанные с реконструкцией анизотропных структур, недостаточной точностью классических подходов и сходимостью задач оптимизации при восстановлении. Предлагаемым универсальным методом описания и восстановления многофазных сред являются корреляционные функции. Данный метод находит свое применение в различных дисциплинах от геофизики до аналитической химии.

В отдельной главе были описаны все применяемые в работе методы. Сюда вошли теоретические выкладки и алгоритмы расчетов корреляционных функций, оптимизации имитацией «отжига», последовательные методы частиц и их гибридизация, морфометрический анализ и теория локальной пористости, решение уравнения Стокса методом конечных разностей и различные подходы, связанные с сеточными моделями для моделирования течения одного и двух несмешивающихся флюидов. Далее процедура реконструкции с помощью корреляционных функций была значительно доработана и улучшена, предложен целый ряд инновационных методов. Моделированию трехмерных двухфазных структур с желаемыми физическими свойствами посвящена отдельная глава. Результаты предложенных модификаций показывают значительные улучшения по сравнению с предыдущими работами. Верификация разработанных методов и их применение для описания и моделирования структуры пористых сред представлены в заключительной главе. Среди основных достижений и результатов настоящей работы выделим следующие:

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 литературы

- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.

- Torquato S. Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties. New York, Springer-Verlag. — 2002.
- Torquato S. Optimal design of heterogeneous materials. // Annual Review of Materials Research. — 2010. — 40. — P. 101–129.
- Корост Д.В., Калмыков Г.А., Япаскурт В.О., Иванов М.К. Применение компьютерной микротомографии для изучения строения терригенных коллекторов // Геология нефти и газа. — 2010. — 2. — С. 36–42.
- Korost D.V., Gerke K.M. Computation of Reservoir Properties Based on 3D-Structure of Porous Media. // SPE Technical Paper 162023-MS. SPE Russian Oil and Gas Exploration and Production Technical Conference and Exhibition, 16–18 October 2012, Moscow, Russia. — DOI: 10.2118/162023-MS.
- Blunt M.J., Bijeljic B., Dong H., Gharbi O., Iglauer S., Mostaghimi P., Paluszny A., Pentland C. Pore-scale imaging and modeling. // Advances in Water Resources. — 2013. —51. — P. 197–216.
- Ohji T., Fukushima M. Macro-porous ceramics: processing and properties. // International Materials Reviews. — 2012. — 57(2). — P. 115–131.
- Jones A.C., Arns C.H., Hutmacher D.W., Milthorpe B.K., Sheppard A.P., Knackstedt M.A. The correlation of pore morphology, interconnectivity and physical properties of 3D ceramic scaffolds with bone ingrowth. //Biomaterials. 2009. 30. P. 1440–1451.
- Sejnoha M., Zeman J. Micromechanical modeling of imperfect textile composites. // International Journal of Engineering Science. — 2008. — 46. — P. 513–526.
- Grew K.N., Chiu W.K.S.A review of modeling and simulation techniques across the length scales for the solid oxide fuel cell. // Journal of Power Sources. — 2012. — 199. — P. 1–13.
- Герке К.М., Скворцова Е.Б., Корост Д.В. Томографический метод исследования порового пространства почв: состояние проблемы и изучение некоторых почв России. // Почвоведение. 2012. №.7. С. 781–791.
- Derossi A, De Pilli T, Severini C. Statistical description of food microstructure. extraction of some correlation functions from 2D images. // Food Biophys. 2013. 8 (4). P. 311–320.
- 21. Adler P. Porous media: geometry and transports. Butterworth-Heinemann. 1992. 560 p.
- Sahimi M. Heterogeneous materials I: Linear transport properties and optical properties. New York, Springer-Verlag. 2003.
- Vereecken, H., Weynants, M., Javaux, M., Pachepsky, Y., Schaap, M. G., & Genuchten, M. T. Using pedotransfer functions to estimate the van Genuchten–Mualem soil hydraulic properties: A review. // Vadose Zone Journal. 2010. 9(4). P. 795–820.

- Pachepsky, Y. A., Guber, A. K., Yakirevich, A. M., McKee, L., Cady, R. E., & Nicholson, T. J. Scaling and Pedotransfer in Numerical Simulations of Flow and Transport in Soils. // Vadose Zone Journal. — 2014. — 13(12).
- 25. Гудок Н. С., Богданович Н. Н., Мартынов В. Г. Определение физических свойств нефтеводосодержащих пород. М. ООО "Недра-Бизнесцентр. 2007.
- 26. Valvatne P.H, Blunt M.J. Predictive pore-scale modeling of two-phase flow in mixed wet media. // Water Resour Res. 2004. 40. W07406.
- 27. Haile, J. M. Molecular dynamics simulation. New York. Wiley-Interscience. 1997. 512 p.
- Iglauer S., Mathew M. S., Bresme F. Molecular dynamics computations of brine–CO<sub>2</sub> interfacial tensions and brine–CO<sub>2</sub>–quartz contact angles and their effects on structural and residual trapping mechanisms in carbon geo-sequestration. // Journal of colloid and interface science. 2012. 386(1). P. 405–414.
- 29. Schaap M., Leij J.F. Improved prediction of unsaturated hydraulic conductivity with the Mualemvan Genuchten model. // Soil Sci Soc Am J. — 2000. — 64. — P. 843–851.
- 30. Diamond, S. Mercury porosimetry: an inappropriate method for the measurement of pore size distributions in cement-based materials. // Cement and concrete research. 2000. 30(10). P. 1517–1525.
- Čapek P., Veselý M., Bernauer B., Sysel P., Hejtmánek V., Kocirik M., et al. Stochastic reconstruction of mixed-matrix membranes and evaluation of effective permeability. Computational Material Science. — 2014. — 89. — P. 142–156.
- Khirevich S., Höltzel A., Hlushkou D., Tallarek U. Impact of conduit geometry and bed porosity on flow and dispersion in noncylindrical sphere packings. Analytical chemistry. — 2007. — 79(24). — P. 9340–9349.
- 33. Shulakova V., Pervukhina M., Muller T.M., Lebedev M., Mayo S., Schmid S., et al. Computational elastic up-scaling of sandstone on the basis of X-ray micro-tomographic images. // Geophysical Prospecting. — 2013. — 61(2). — P. 287–301.
- Torquato S., Kim I. C. Efficient simulation technique to compute effective properties of heterogeneous media. // Applied physics letters. — 1989. — 55(18). — P. 1847–1849.
- Čapek P., Hejtmánek V., Kolafa J., Brabec I. Transport properties of stochastically reconstructed porous media with improved pore connectivity. // Transp Porous Media. 2011. 88. P. 87–106.
- Khirevich S., Daneyko A., Höltzel A., Seidel-Morgenstern A., Tallarek U. Statistical analysis of packed beds, the origin of short-range disorder, and its impact on eddy dispersion. // Journal of Chromatography A. — 2010. — 1217. — P. 4713–4722.

- Zaretskiy, Y., Geiger, S., Sorbie, K., & Förster, M. (2010). Efficient flow and transport simulations in reconstructed 3D pore geometries. // Advances in Water Resources. 2010. 33(12). P. 1508–1516.
- 38. Raeini A.Q., Blunt M.J., Bijeljic B. Modelling two-phase flow in porous media at the pore scale using the volume-of-fluid method. // Journal of Computational Physics. 2012. 231(17). P. 5653–5668.
- Garboczi E.J., Bentz D.P. Multi-scale analytical/numerical theory of the diffusivity of concrete. // J. Adv. Cement-Based. Mater. — 1998. — 8. — P.77–88.
- 40. Mostaghimi P., Blunt M.J., Bijeljic B. Computations of absolute permeability on micro-CT images. Math Geosci. 2013. 45. P. 103–125.
- 41. Mason G. and Morrow N.R. Capillary Behavior of a Perfectly Wetting Liquid In Irregular Triangular Tubes. // J. Coll. Inter. Sci. 1991. 141. P. 262–274.
- 42. Piri M., Blunt M.J. Three-dimensional mixed-wet random pore-scale network modeling of twoand three-phase flow in porous media. II. Results. // Phys. Rev. E. — 2005. —71(2). — 026302.
- van Dijke M.I.J., Sorbie K.S. Pore-scale network model for three-phase flow in mixed-wet porous media. // Phys Rev E. — 2002. — 66(4). — 046302.
- 44. Øren P.E., Bakke S. Process based reconstruction of sandstone and prediction of transport properties. // Transp Porous Media. 2002. 46. P. 311–343.
- 45. Pan W.X., Bao J., Tartakovsky A.M. Smoothed particle hydrodynamics continuous boundary force method for Navier-Stokes equations subject to a Robin boundary condition. // Journal of Computational Physics. — 2014. — 259. — P. 242–259.
- 46. Dinariev O.Y., Evseev N.V. Modeling of surface phenomena in the presence of surface-active agents on the basis of the density-functional theory. // Fluid Dynamics. 2010. 45(1). P. 85–95.
- 47. Khirevich S., Ginzburg I., Tallarek U. Coarse-and fine-grid numerical behavior of MRT/TRT lattice-Boltzmann schemes in regular and random sphere packings. // Journal of Computational Physics. — 2015. — 281. — P. 708–742.
- 48. Ambrose R.J., Hartman R.C., Diaz-Campos M., Akkutlu I.Y., Sondergeld C.H. Shale gas-in-place calculations. Part I. New pore-scale considerations. // SPE J. 2012. 17(1). P. 219–229.
- 49. Dewers T., Heath J., Ewy R., Duranti L. Three-dimensional pore networks and transport properties of a shale gas formation determined from focused ion beam serial imaging. // Int. J. Oil Gas Coal Technol. — 2012. — 5(2/3). — P. 229248
- Loucks R.G., Reed R.M., Ruppel S.C., Jarvie D.M. Morphology, genesis, and distribution of nanometer-scale pores in siliceous mudstones of the Missisipian Barnett Shale. // Journal of Sedimentary Research. — 2009. — 79. — P. 848–861.

- Giffin S.; Littke R.; Klaver J.; et al. Application of BIB-SEM technology to characterize macropore morphology in coal. // International Journal of Coal Geology. — 2013. — 114. — P. 85-95.
- Joos J., Carraro Th., Weber A., Ivers-Tiffee E. Reconstruction of porous electrodes by FIB/SEM for detailed microstructure modeling. // Journal of Power Sources. — 2011. — 196. — P.7302– 7307.
- 53. Thovert J.F., Adler P.M. Grain reconstruction of porous media: Application to a Bentheim sandstone. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. 2011. 83(5). 056116.
- Biswal B., Manwart C., Hilfer R., Bakke S., Øren P.E. Quantitative analysis of experimental and synthetic microstructures for sedimentary rock. // Physica A. — 1999. — 273(3–4). — P. 452– 475.
- 55. Latief F.D.E., Biswal B., Fauzi U., Hilfer R. Continuum reconstruction of the pore scale microstructure for Fontainebleau sandstone. // Physica A — Statistical Mechanics and Its Applications. — 2010. — 389. — P. 1607–1618.
- Mehmani, A., Prodanović, M., & Javadpour, F. (2013). Multiscale, multiphysics network modeling of shale matrix gas flows. // Transport in porous media. 2013. 99(2). P. 377–390.
- 57. Jury W., Horton R. Soil physics (6th Edition). Wiley. 2004. 384 p.
- 58. Скворцова Е. Б. Изменение геометрического строения пор и агрегатов как показатель деградации структуры пахотных почв. // Почвоведение. 2009. 11. С. 1345–1353.
- 59. Скворцова Е.Б., Калинина Н.В. Микроморфометрические типы строения порового пространства целинных и пахотных суглинистых почв. // Почвоведение. — 2004. — 9. — С. 1114–1125.
- 60. Bullock P., Federoff N., Jongerius A., Stoops G., Tursina T. Handbook for soil thin section description. London. Waine Research Publications. 1985.
- 61. Sevostianova E., Leinauer B., Sevostianov I. Quantitative characterization of the microstructure of a porous material in the context of tortuosity. // Int J Eng Sci. 2010. 48. P. 1693–1701.
- Jerauld G.R., Salter S.J. The effect of pore-structure on hysteresis in relative permeability and capillary pressure pore-level modeling. // Transp Porous Media. 1990. 5(2). P. 103–151.
- 63. Bryant S.L., Mellor D.W., Cade C.A. Physically representative network models of transport in porous-media. // AIChE J. 1993. 39(3). P. 387–396.
- 64. Crawford J.W., Matsui N., Young I.M.. The relationship between the moisture-release curve and the structure of soil. // Eur J Soil Sci. 1995. 46(3). P. 369-375.

- Ghanbarian-Alavijeh B., Skinner T.E., Hunt A.G. Saturation dependence of dispersion in porous media. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. — 2012. — 86(6). — 066316.
- Hunt A.G., Ghanbarian B., Saville K.C. Unsaturated hydraulic conductivity modeling for porous media with two fractal regimes. // Geoderma. — 2013. — 207. — P. 268-278.
- 67. Schluter S., Weller U., Vogel H.J. Soil-structure development including seasonal dynamics in a long-term fertilization experiment. // J Plant Nutr Soil Sci. 2011. 174(3). P. 395-403.
- Vogel H.J., Weller U., Schluter S. Quantification of soil structure based on Minkowski functions. // Comput Geosci. 2010. 36(10). P. 1236-1245.
- Durner W. Hydraulic conductivity estimation for soils with heterogeneous pore structure. // Water Resour Res. — 1994. — 30(2). — P. 211-223.
- Lindquist W.B., Lee S-M., Coker D.A., Jones K.W., Spanne P. Medial axis of void structure in three-dimensional tomographic images of porous media. // J Geophys Res: Solid Earth. — 1996. — 101. — P. 8297-8310.
- Diamantopoulos, E., Durner, W. Physically-based model of soil hydraulic properties accounting for variable contact angle and its effect on hysteresis. // Advances in Water Resources. — 2013. — 59. — 169-180.
- Patzek T.W., Silin D. B., Shape factor and hydraulic conductance in noncircular capillaries I. Onephase creeping flow. // Journal of Colloid and Interface Science. —2001. — 236. — P. 295304.
- Dong H., Blunt M.J. Pore-Network Extraction from Micro-Computerized-Tomography Images. // Phys. Rev., E. — 2009. — 80. — 036307.
- 74. Torquato S. Random heterogeneous media: Microstructure and improved bounds on effective properties. // Appl. Mech. Rev. 1991. 44. P. 37-76.
- 75. Gommes C.J., Jiao Y., Torquato S. Microstructural degeneracy associated with a two-point correlation function and its information content. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. 2012. 85(5). 051140.
- Gommes C.J., Jiao Y. and Torquato S. Density of states for a specified correlation function and the energy landscape. // Physical review letters. — 2012. — 108(8). — 080601.
- 77. Rintoul M.D., Torquato S., Yeong C., Keane D.T., Erramilli S., Jun Y.N., et al. Structure and transport properties of a porous magnetic gel via x-ray microtomography. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. — 1996. — 54(3). — P. 2663-2669.
- Coker DA, Torquato S, Dunsmuir JH. Morphology and physical properties of Fontainebleau sandstone via a tomographic analysis. // J Geophys Res: Solid Earth. 1996. 101(B8). P. 17497-17506.
- Manwart C., Torquato S., Hilfer R. Stochastic reconstruction of sandstones. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. — 2000. — 62(1). — P. 893-899.

- Takada M., Jain. B. The three-point correlation function in cosmology. // Mon Not R Astron Soc. — 2003. — 340(2). — P. 580-608.
- Sumanasooriya M.S., Bentz D.P., Neithalath N. Planar image-based reconstruction of pervious concrete pore structure and permeability prediction. // ACI Materials Journal. 2010. 107(4). P. 413-421.
- Zhao F., Landis H.R., Skerlos S.J. Modeling of porous filter permeability via image-based stochastic reconstruction of spatial porosity correlations. // Environ Sci Technol. 2005. 39(1). P. 239-247.
- Mortazavi B., Bardon J., Bomfim J.A.S., Ahzi S. A statistical approach for the evaluation of mechanical properties of silica/epoxy nanocomposite: Verification by experiments. // Computational Materials Science. — 2012. — 59. — P. 108-113.
- Sheidaei A., Baniassadi M., Banu M., Askeland P., Pahlavanpour M., Kuuttila N. et al. 3-D microstructure reconstruction of polymer nano-composite using FIB-SEM and statistical correlation function. // Compos Sci Technol. 2013. 80. P. 47-54.
- Yeong C.L.Y., Torquato S. Reconstructing random media. // Phys. Rev. E. 1998. 57. P. 495–506.
- Yeong C.L.Y., Torquato S. Reconstructing random media. II. Three\_dimensional media from two\_dimensional cuts. // Phys. Rev. E. — 1998. — 58. — P. 224–233.
- Okabe H., Blunt M.J. Pore space reconstruction of vuggy carbonates using microtomography and multiple-point statistics. // Water Resour Res. — 2007. — 43. — 0043-1397.
- Bakke S., Øren P. 3-D Pore-scale modelling of sandstones and flow simulations in the pore networks. // SPE J. — 1997. — 2. — P. 136-149.
- 89. Roberts A.P., Teubner M. Transport-properties of heterogeneous materials derived from Gaussian random-fields Bounds and simulation. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. 1995. 51(5). P. 4141-4154
- Tahmasebi P., Sahimi M. Reconstruction of three-dimensional porous media using a single thin section. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. 2012. 85(6). 066709.
- Tahmasebi P., Sahimi M. Cross-correlation function for accurate reconstruction of heterogeneous media. // Phys Rev Lett. — 2013. — 110(7). — 078002.
- 92. Piasecki R. Microstructure reconstruction using entropic descriptors. // Proc R Soc Lond A Math Phys Sci. — 2011. — 467(2127). — P. 806-820.
- 93. Saucier A., Richer J., Muller J. Assessing the scope of the multifractal approach to textural characterization with statistical reconstructions of images. // Physica A. 2002. 311(1-2). P. 231-259.

- 94. Jiao Y., Stillinger F.H., Torquato S. Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions. II. Algorithmic details and applications. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. — 2008. — 77(3). — 031135.
- 95. Jiao Y., Stillinger F.H., Torquato S. A superior descriptor of random textures and its predictive capacity. // Proc Natl Acad Sci U S A. 2009. 106. 17634.
- 96. Torquato S., Stillinger F.H. Jammed hard-particle packings: From Kepler to Bernal and beyond. // Rev Mod Phys. — 2010. — 82(3). — P. 2633-2672.
- 97. Baranau V., Hlushkou D., Khirevich S., Tallarek U. Pore-size entropy of random hard-sphere packings. // Soft Matter. 2013. 9(12). P. 3361-3372.
- 98. Thovert J.F., Yousefian F., Spanne P., Jacquin C.G., Adler P.M. Grain reconstruction of porous media: application to a low-porosity Fontainebleau sandstone. // Physical Review E. 2001. 63(6). 061307.
- Manwart C., Hilfer R. Reconstruction of random media using Monte Carlo methods. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. — 1999. — 59(5). — P. 5596-5599.
- 100.Wu K.J., Nunan N., Crawford J.W., Young I.M., Ritz K. An efficient Markov chain model for the simulation of heterogeneous soil structure. // Soil Sci Soc Am J. 2004. 68(2). P. 346-351.
- 101. Čapek P., Hejtmánek V., Brabec L., Zikánová A., Kočiřík M. Stochastic reconstruction of particulate media using simulated annealing: improving pore connectivity. // Transport in porous media. — 2009. — 76(2). — P. 179-198.
- 102.Jiao Y., Stillinger F.H., Torquato, S. Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions: Basic principles. // Physical Review E. — 2007. — 76(3). — 031110.
- 103.Torquato S., Beasley J. D. Chiew Y. C. Two-Point Cluster Function for Continuum Percolation. // Journal of Chemical Physics. — 1988. — 88. — 6540.
- 104. Lu B., Torquato S., Lineal Path Function for Random Heterogeneous Materials. // Physical Review A. —1992. — 45. — 922.
- 105.Torquato S., Lu B. Chord-Length Distribution Function for Two-Phase Random Media. // Physical Review E. —1993. 47. 2950.
- 106.Hoshen J., Kopelman R. Percolation and cluster distribution. 1.Cluster multiple labelling technique and critical concentration algorithm. // Phys Rev B. 1976. 14(8). P. 3438-3445.
- 107.Lee S.B., Torquato S. Pair connectedness and mean cluster size for continuum-percolation models computer-simulation results. // J Chem Phys. 1988. 89(10). P. 6427-6433.
- 108. Rozman M.G., Utz M. Efficient reconstruction of multiphase morphologies from correlation functions. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. — 2001. — 63(6). — 066701.
- 109. Kirkpatrick S., Gelatt C.D., Vecchi M.P. Optimization by simulated annealing. // Science. 1983. 220(4598). P. 671-680.

- 110. Chu K.W., Deng Y.F., Reinitz J. Parallel simulated annealing by mixing of states. // J Comput Phys. — 1999. — 148(2). — P. 646-662.
- 111. Jiao Y., Chawla N. Modeling and characterizing anisotropic inclusion orientation in heterogeneous material via directional cluster functions and stochastic microstructure reconstruction. // J Appl Phys. — 2014. — 115(9). — 093511.
- 112.Скворцова Е.Б., Морозов Д.Р. Микроморфометрическая классификация и диагностика строения порового пространства почвы. // Почвоведение. 1993. 6. С. 49–56.
- 113.Biswal B., Manwart C., Hilfer R.. Three-dimensional local porosity analysis of porous media. // Physica A. — 1998. — 255. — P. 221-241.
- 114.Donev A., Torquato S., Stillinger F. H. Neighbor List Collision-Driven Molecular Dynamics for Nonspherical Hard Particles: II. Applications to Ellipses and Ellipsoids, Journal of Computational Physics. —2005. — 202. — 765.
- 115. Темам Р. Уравнения Навье-Стокса. Теория и численный анализ. 2-е изд. М. Мир. 1981. 408 с.
- 116.Patankar S.V. Numerical heat transfer fluid flow. Hemisphere Publication. Washington. —
   1980. 197 p.
- 117. Silin D., Patzek T. Pore Space Morphology Analysis Using Maximal In-scribed Spheres. // Physica A. — 2006. — 371. — P. 336–360.
- 118.Ruge, J. W., Stueben, K. Algebraic multigrid. // Philadelphia, PA, Society for Industrial and Applied Mathematics. 1987. P. 73–130.
- 119.Wilkinson D., Willemsen J.F. Invasion percolation: a new form of percolation theory. // J. Phys.
  A: Math. Gen. 1983. 16. P. 3365-3376.
- 120.Cule D., Torquato S. Generating random media from limited microstructural information via stochastic optimization. // J Appl Phys. 1999. 86(6). P. 3428-3437.
- 121.Li D.S., Tschopp M.A., Khaleel M., Sun X. Comparison of reconstructed spatial microstructure images using different statistical descriptors. // Computational Materials Science. —2012. — 51(1). — P. 437-444.
- 122.Fullwood D.T., Niezgoda S.R., Kalidindi S.R. Microstructure reconstructions from 2-point statistics using phase-recovery algorithms. // Acta Materialia. 2008. 56(5). P. 942-948.
- 123.Singh S.S., Williams J.J., Jiao Y., Chawla N. Modeling anisotropic multiphase heterogeneous materials via directional correlation functions: Simulations and experimental verification. // Metallurgical and Materials Transactions A. — 2012. — 43(12). — P. 4470-4474.
- 124.Pant L.M., Mitra S.K., Secanell M. Stochastic reconstruction using multiple correlation functions with different-phase-neighbor-based pixel selection. // Physical Review E. — 2014. — 90(2). — 023306.

- 125.Talukdar M.S., Torsaeter O., Ioannidis M.A. and Howard J.J. Stochastic reconstruction, 3D characterization and network modeling of chalk. // Journal of Petroleum Science and Engineering. 2002. 35(1). P. 1-21.
- 126.Davis M.A., Walsh S.D.C., Saar M.O. Statistically reconstructing continuous isotropic and anisotropic two-phase media while preserving macroscopic material properties. // Physical Review E. —2011. — 83(2). — 026706.
- 127.Hamzehpour, H., Rasaei, M.R. and Sahimi, M. Development of optimal models of porous media by combining static and dynamic data: the permeability and porosity distributions. // Physical Review E, — 2007. — 75(5). — 056311.
- 128.Mertens J., Stenger R., Barkle G.F. Multiobjective inverse modeling for soil parameter estimation and model verification. // Vadose Zone Journal. — 2006. — 5(3). — P. 917-933.
- 129.Guo E.Y., Chawla N., Jing T., Torquato S., Jiao Y. Accurate modeling and reconstruction of three-dimensional percolating filamentary microstructures from two-dimensional micrographs via dilation-erosion method. // Materials Characterization. — 2014. — 89. — P. 33-42.
- 130.Zhang X.X., Deeks L.K., Bengough A.G., Crawford J.W., Young L.M. Determination of soil hydraulic conductivity with the lattice Boltzmann method and soil thin-section technique. // J Hydrol (Amst). — 2005. — 306(1-4). — P. 59-70.
- 131.Tahmasebi P., Sahimi M. Reconstruction of three-dimensional porous media using a single thin section. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. — 2012. — 85(6). — 066709.
- 132.Rozman M. G., Utz M. Uniqueness of reconstruction of multiphase morphologies from two-point correlation functions. // Phys Rev Lett. — 2002. — 89(13). — 135501.
- 133.Russ J.C., Dehoff R.T. Practical Stereology. 2nd ed. Kluwer. 2000.
- 134.Брадучан Ю.В., Гурари Ф.Г., Захаров В.А. и др. Баженовский горизонт Западной Сибири. — Новосибирск, "Наука" Сибирское отделение. — 1986. — 217 с.
- 135.Калмыков Г., Балушкина Н., Афанасьев И. Гаврилова Е.В., Бирун Е.М. Баженовская свита. Общий обзор, нерешенные проблемы. // Rogtec Российские нефегазовые технологии. — 2011. — 25. — С. 24–36.
- 136.Хамидуллин Р.А., Калмыков Г.А., Корост Д.В., Балушкина Н.С., Бакай А.И. Фильтрационно-емкостные свойства пород Баженовской свиты. // Вестник Московского университета. Серия 4. Геология. — 2013. — 5. — С. 57-64.
- 137.Khamidullin R.A., Kalmykov G.A., Korost D.V., Balushkina N.S. Bakay A.I. Reservoir properties of the Bazhenov formation. // SPE162094 Technical paper, presented at SPE Russian Oil and Gas Exploration and Production Technical Conference and Exhibition, 16-18 October 2012, Moscow, Russia.

- 138.Oh W., Lindquist B. Image thresholding by indicator kriging. // IEEE Trans. Pattern. Anal. Mach. Intell. — 1999. — 21. — P. 590-602.
- 139.Sergeev Y.M., Spivak G.V., Sasov A.Y., Osipov V.I., Sokolov V.N., Rau E.I. Quantitative morphological analysis in a SEM-microcomputer system-I. Quantitative shape analysis of single objects. // Journal of Microscopy. — 1984. — 135. — P. 13-25.
- 140.Curtis M.E., Amrrose R.J., Sondergeld C.H., Rai C.S. Structural characterization of gas shales on the macro- and nano-scales. // SPE-137693, CSUG/SPE Canadian Unconventional Resources and International Petroleum Conference October 19-21, 2010, Calgary, Alberta.
- 141.Ma J.S., Sanchez J.P., Wu K.J., Couples G.D., Jiang Z.Y. A pore network model for simulating non-ideal gas flow in micro-and nano-porous materials. // Fuel. 2014. 116. P. 498-508.
- 142.Politis M.G., Kikkinides E.S., Kainourgiakis M.E. Stubos, A.K. A hybrid process-based and stochastic reconstruction method of porous media. Microporous and Mesoporous Materials. — 2008. — 110(1). — P. 92-99.
- 143.Øren P.E., Bakke S., Arntzen O.J. Extending predictive capabilities to network models. // SPE Journal. — 1998. — 3. — P. 324-336.
- 144.Jiao Y., Stillinger F.H., Torquato S. Geometrical ambiguity of pair statistics. II. Heterogeneous media. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. — 2010. — 82. — 011106.
- 145.Hilfer R., Manwart C. Permeability and conductivity for reconstruction models of porous media // Phys Rev E. — 2001. — 64. — 021304.
- 146.Zachary C.E., Torquato S. Improved reconstructions of random media using dilation and erosion processes. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. 2011. 84. 056102.
- 147.Berryman J.G., Milton G.W. Microgeometry of random composites and porous media. // J Phys D. 1988. 21. P. 87-94.
- 148.Biswal B., Øren P.E., Held R.J., Bakke S., Hilfer R. Stochastic multiscale model for carbonate rocks. // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. — 2007. — 75. — 061303.