

Статистическая конструкция/реконструкция структуры и численное определение эффективных свойств композитных материалов и сред

¹Карсанина Марина Владимировна,

³Герке Кирилл Миронович,

²Корост Дмитрий Вячеславович

²Васильев Роман Викторович,

¹*Институт динамики геосфер РАН, Москва*

²*Геологический факультет МГУ им. Ломоносова, Москва*

³*CSIRO Land and Water, Adelaide*

Строение и свойства

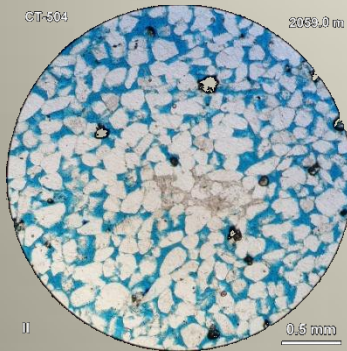
- Структура пористого материала почти целиком определяет его свойства (проницаемость, капиллярные и упругие свойства) [Torquato, 2002]
- Определение транспортных свойств пористых сред с известным внутренним строением представляет интерес для решения как фундаментальных научных так и различных прикладных задач
- Универсальность многих физических законов и связь величин давно известна, многие из них довольно схожи :

$$\langle F \rangle \sim K \langle G \rangle$$

| Свойство K | Градиент $\langle G \rangle$ | Осредненный поток $\langle F \rangle$ |
|----------------------|------------------------------|---------------------------------------|
| Теплопроводность | Градиент температуры | Тепловой поток |
| Электропроводность | Электрическое поле | Ток |
| Коэффициент диффузии | Градиент концентрации | Поток массы |
| Модуль упругости | Поле деформаций | Поле напряжений |
| Проницаемость | Градиент давления | Поле скоростей |
| Скорость осаждения | Сила | Подвижность |

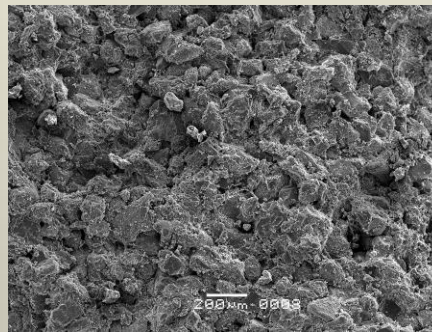
Каким образом мы можем получить данные о структуре?

2D



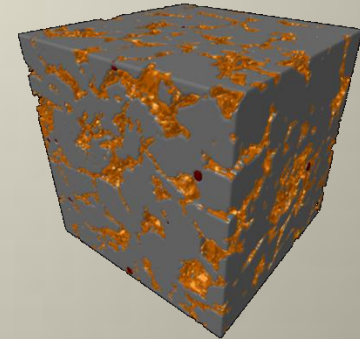
Шлифы и BSE

2.5D



SEM и конфокальная микроскопия

3D



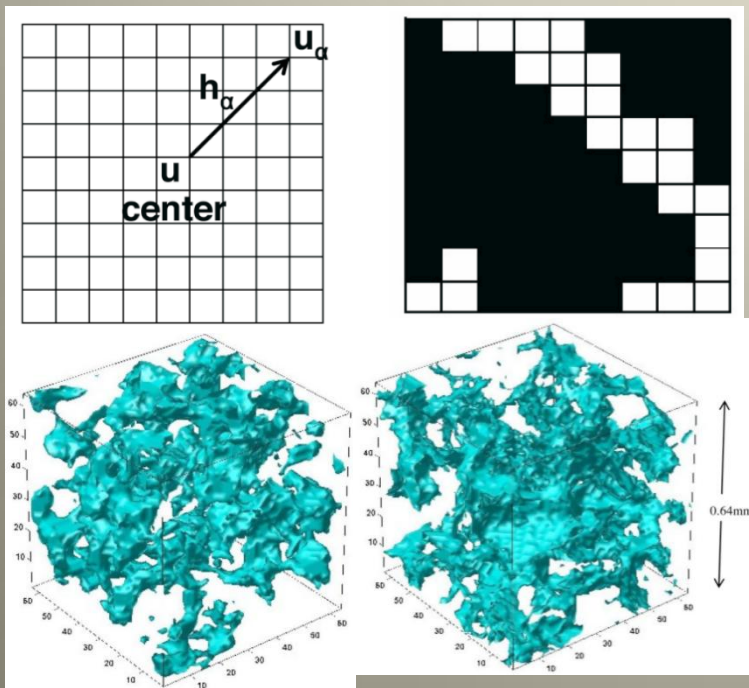
Микротомография (μКТ)

2D и 2.5D данные можно использовать для:

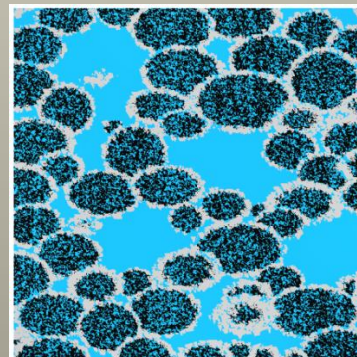
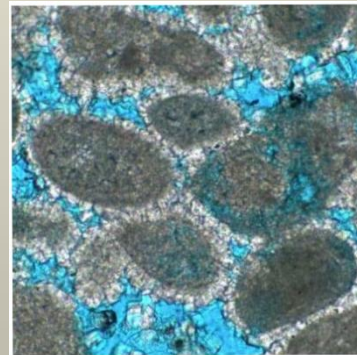
- Простых оценок транспортных свойств по моделям Козени-Кармана и их модификациям
- Оценки распределения размеров пор для конструкции pore-network моделей
- В качестве входных данных для проведения 3D стохастических и прочих типов реконструкций

Алгоритмы и методы с использованием 2D

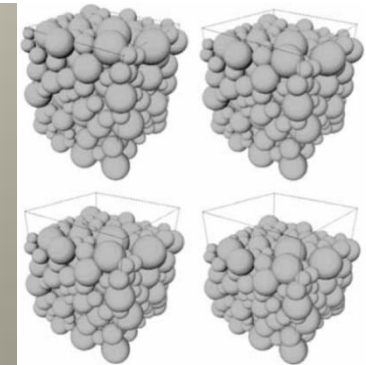
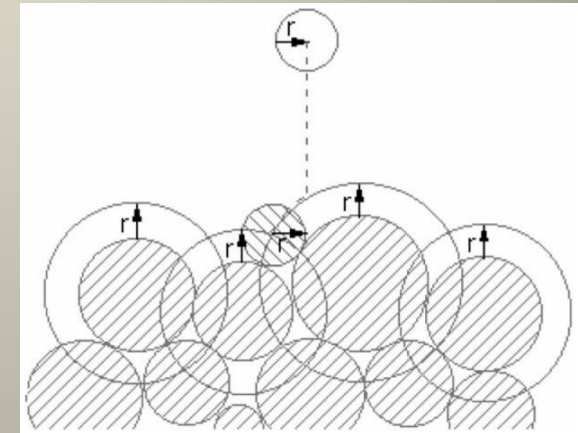
- 1) Статистические (корреляционные функции, multi-point statistics и энтропийные методы)
- 2) Последовательные/process-based методы
- 3) Морфологические методы



[Okabe and Blunt, 2004]



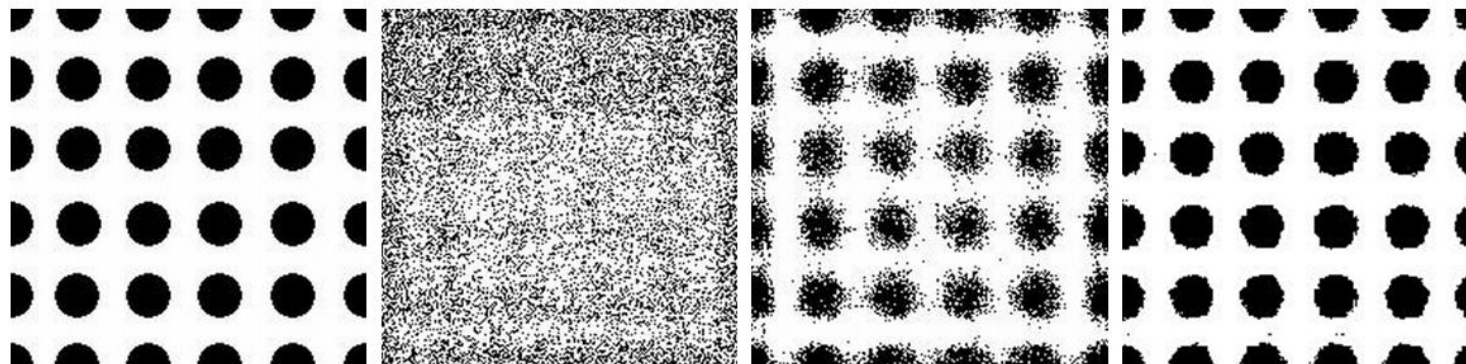
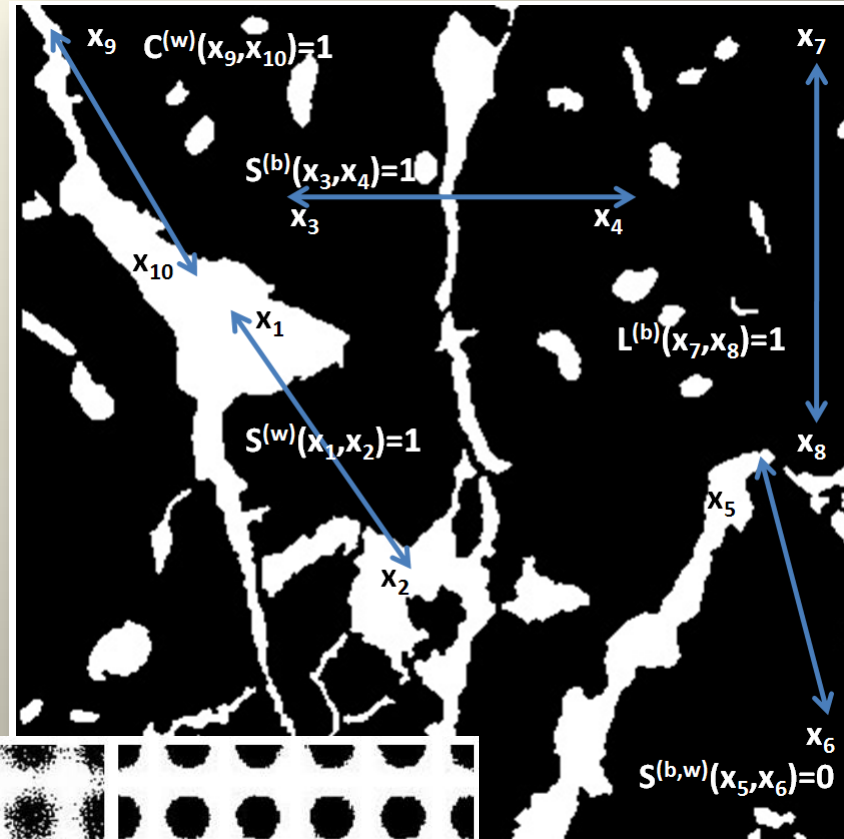
[Biswal et al., 2007]



[Oren and Bakke, 2002]

Корреляционные функции

- S2 – two point probability функция;
- L2 – линейная;
- C2 – two-point cluster функция;
- F2 – surface функция;
- P2 – pore-size функция.



Оригинал → Случайное распределение пикселей → Промежуточный результат → Реконструкция

Алгоритм simulated annealing

дает возможность использовать любой набор функций при реконструкции.

$$E = \sum_i [S_2(r_i) - \tilde{S}_2(r_i)]^2$$

-определение энергии для корреляционных функций.

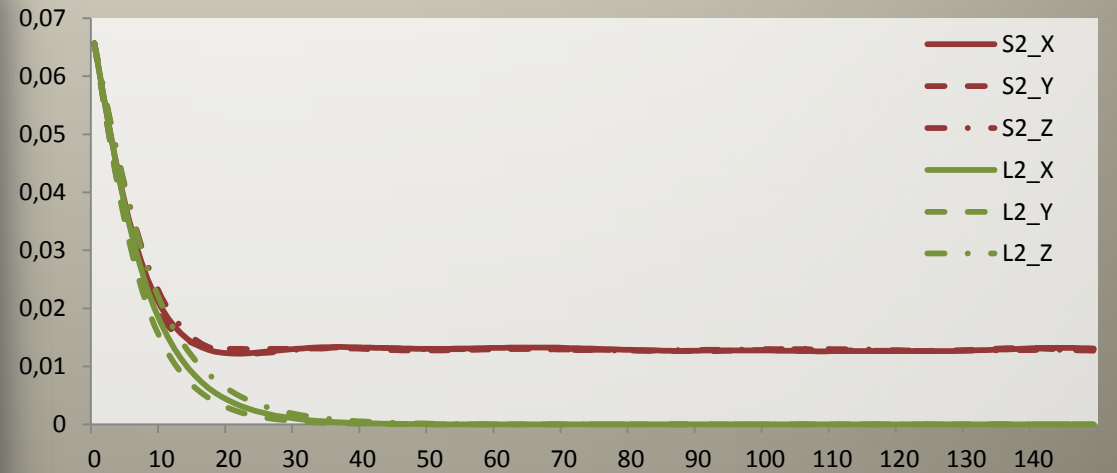
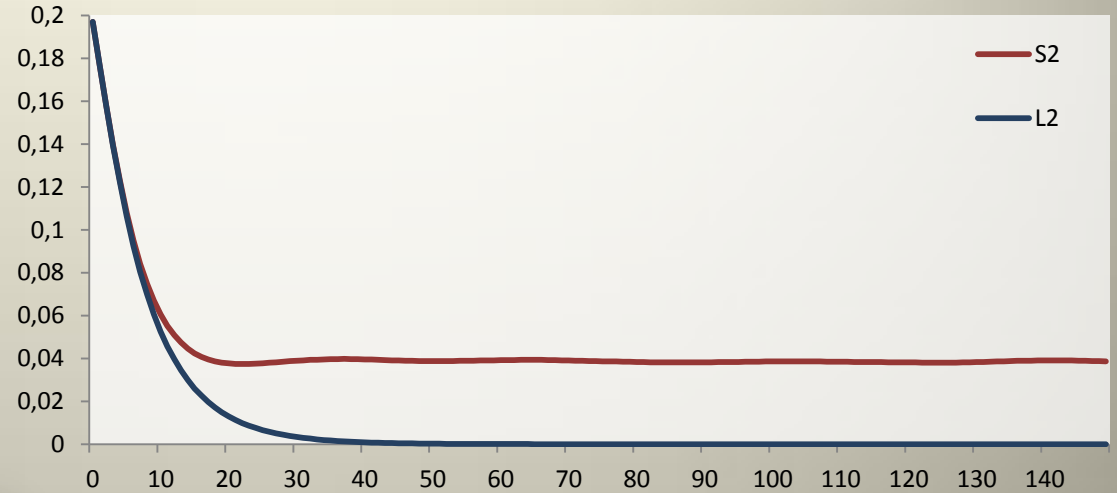
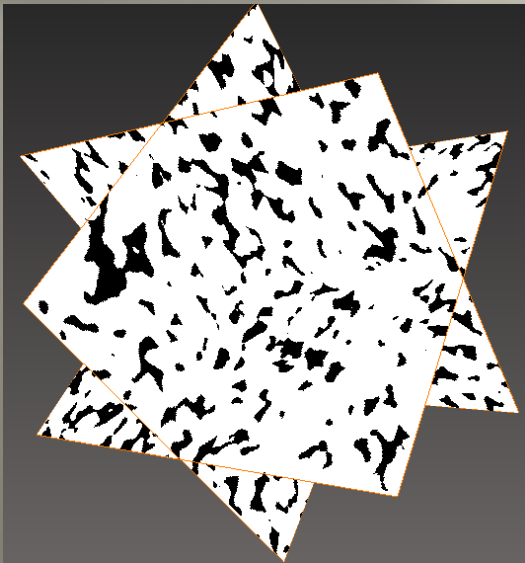
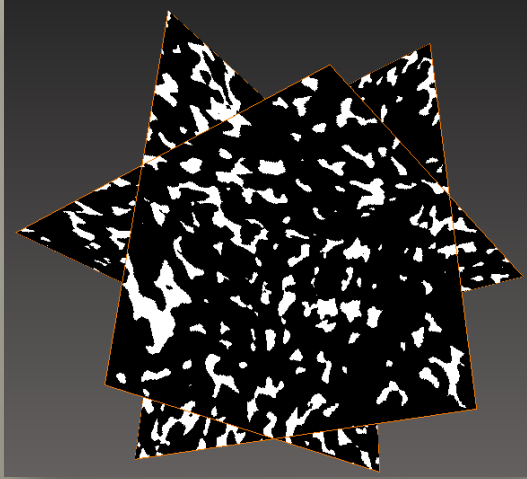
$$P(E_{old} \rightarrow E_{new}) = \begin{cases} 1, \Delta E < 0 \\ \exp(-\Delta E / T), \Delta E \geq 0 \end{cases}$$

- вероятность принятия случайной перестановки точек, где $\Delta E = E_{new} - E_{old}$, а T удовлетворяет условию $T(k)/T(0) = \lambda^k$, где λ - меньше, но близко к 1, а k - номер перестановки.

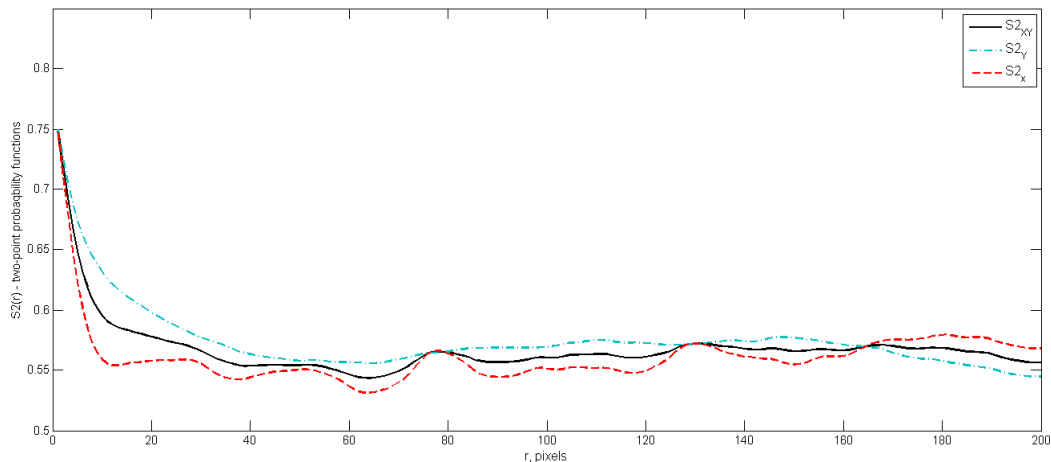
Существует два основных способа завершить алгоритм :

- выбрать пороговое значения ΔE , при котором процесс считается завершенным;
- завершить после некоторого значительного количества непринятых итераций подряд.

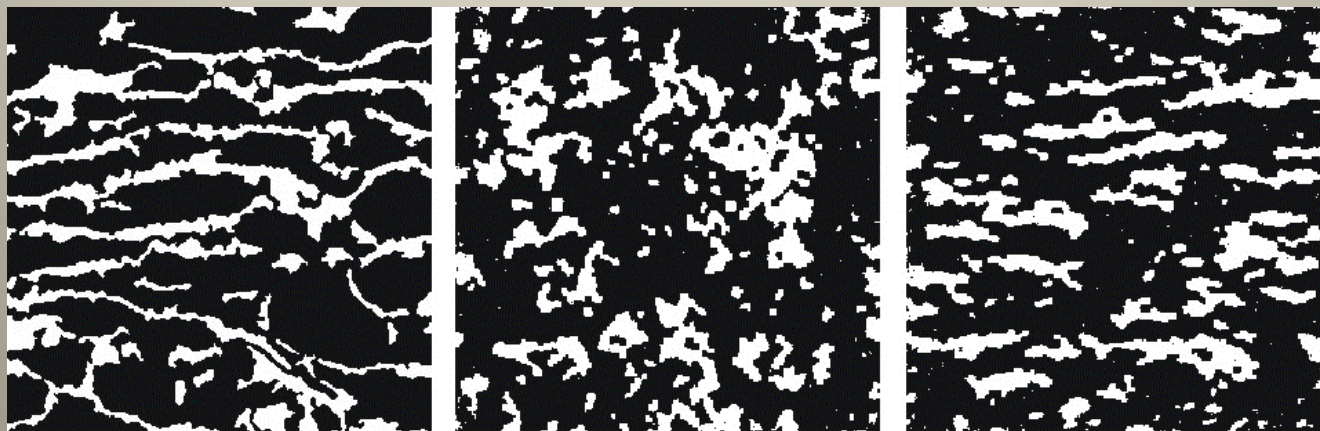
Проверка изотропности образцов



Моделирование анизотропных сред



Пример анизотропной two-point probability (S_2) функции

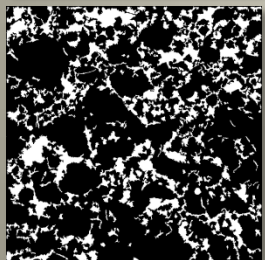
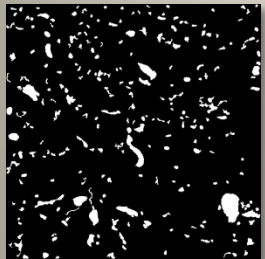


Анизотропная структура **Метод с усреднением по направлениям**

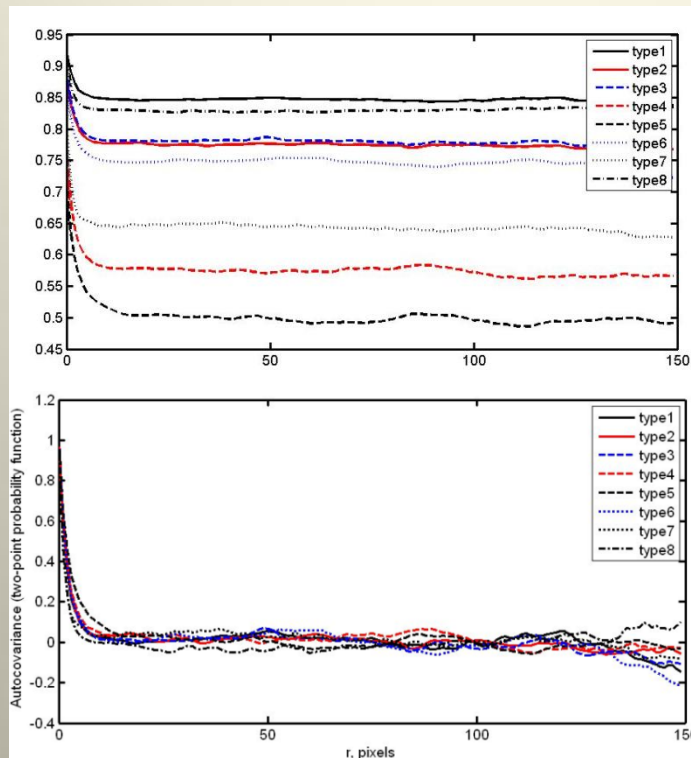
Метод с учетом ортогональных направлений

В настоящем примере не задействованы cluster функции, что приводит к недостаточной связности пор на изображении.

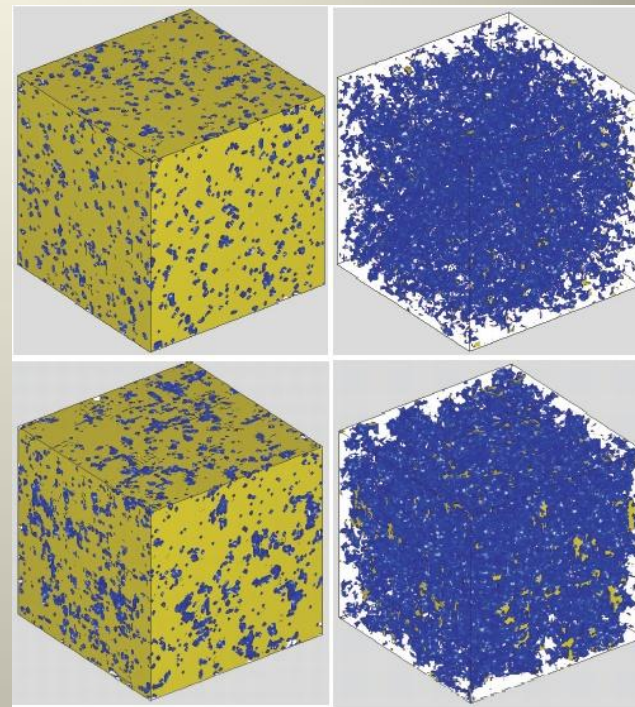
Схема 3D реконструкции



Оригинальные изображения



Корреляционные функции



Реконструкции

1) Расчет функций с учетом анизотропии

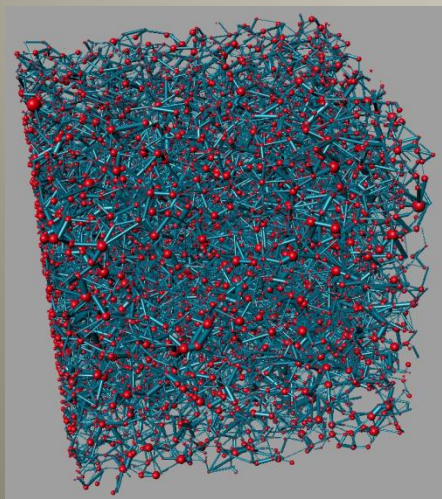
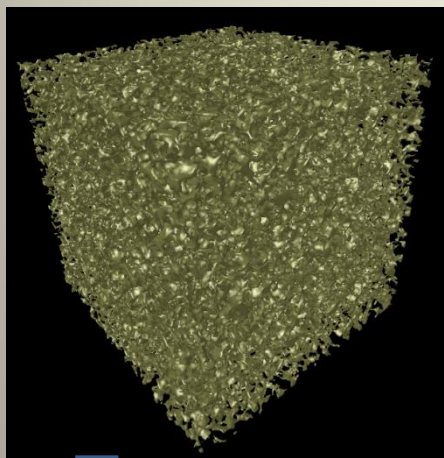
2) Обработка взаимно перпендикулярных срезов

3) Выделение иерархических уровней

4) Поуровневая и гибридная реконструкция

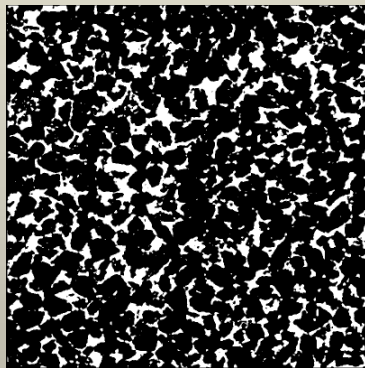
Полное описание сложной среды!

Свойства реконструкций (на примере two-point probability (S_2) функции)

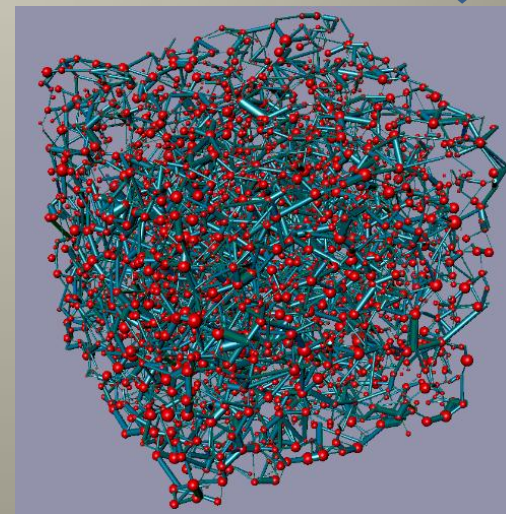
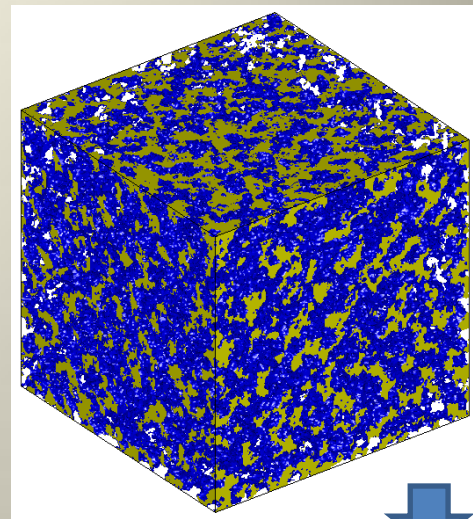


Проницаемость 203 мД

$300^3 \rightarrow 200^3$

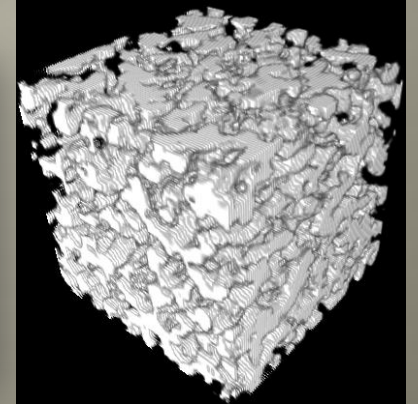
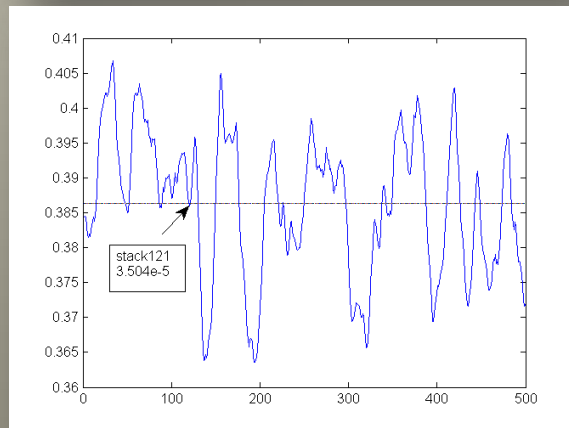
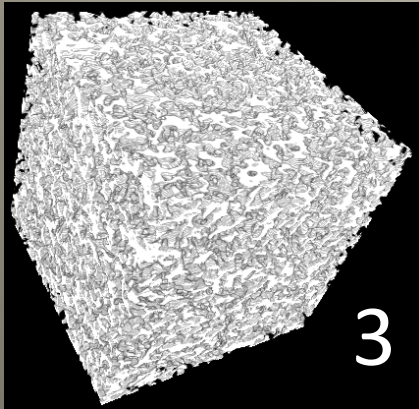
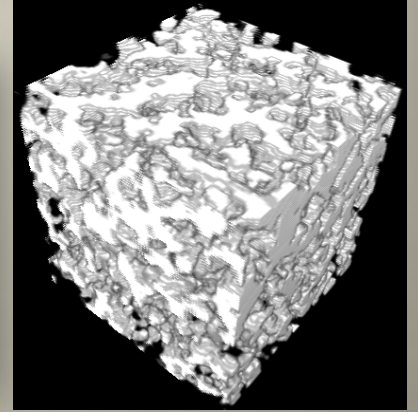
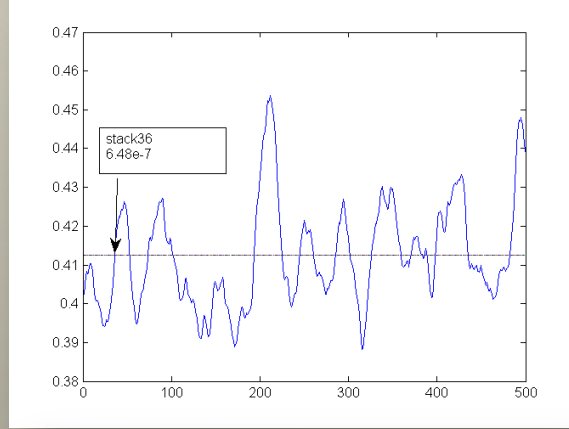
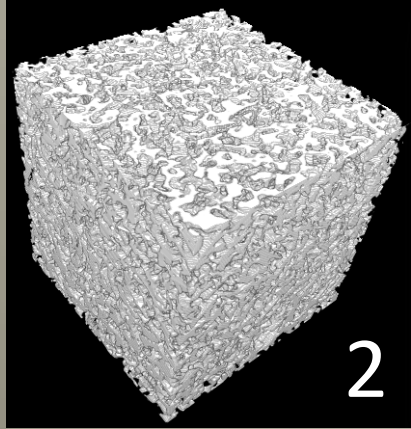
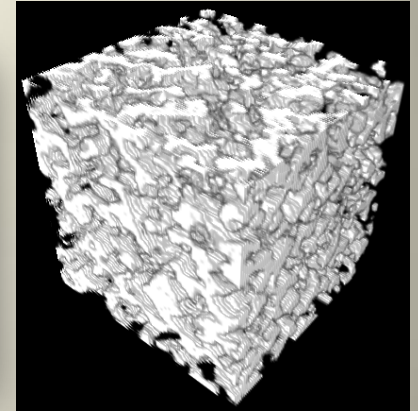
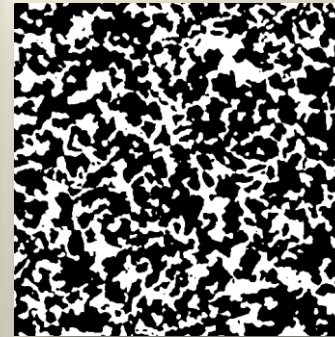
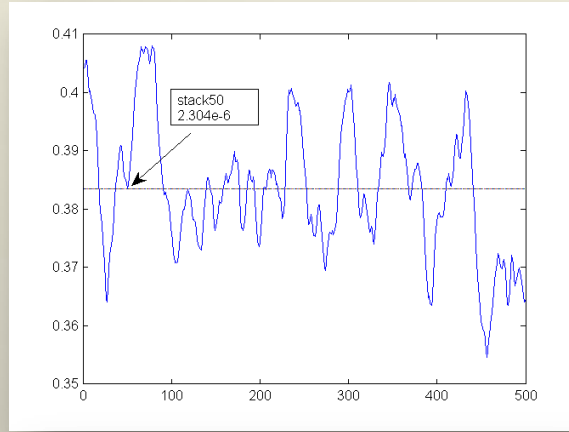
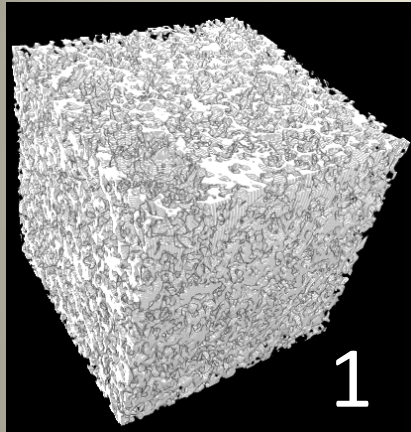


Расчеты проводились
на СК «Чебышев»



Проницаемость 80.2 мД

Реконструкции керамики S2 функциям



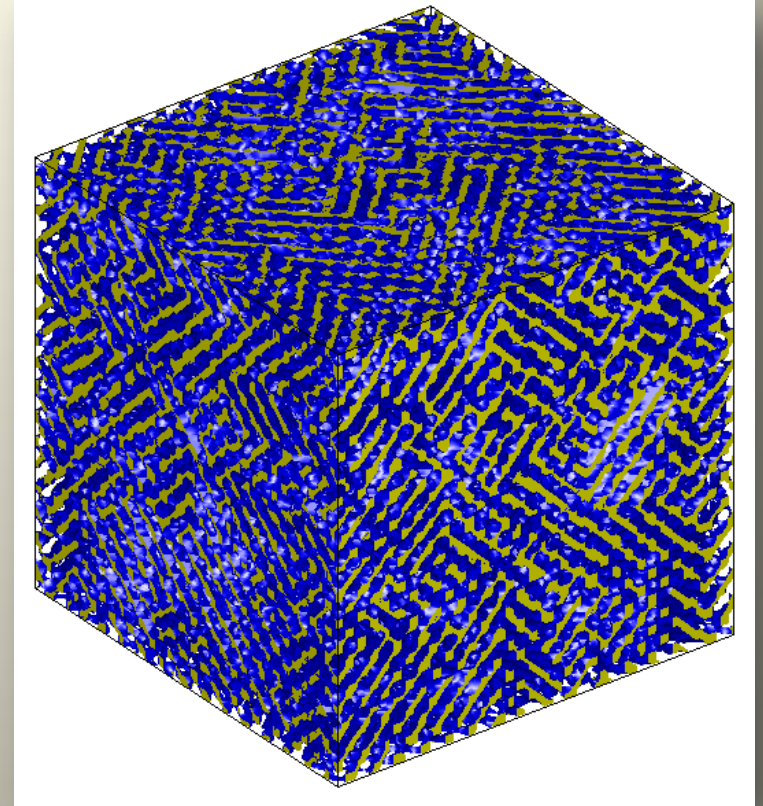
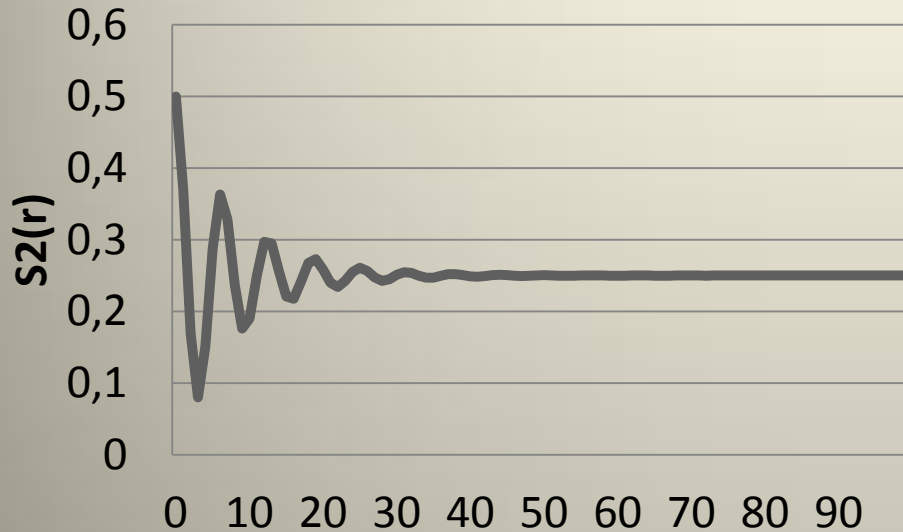
Сравнение результатов

| Sample | Porosity mCT | Kx (m2) | Ky(m2) | Kz(m2) | Fx(m2) | Fy(m2) | Fz(m2) | Keff (average xyz) | Feff (average xyz) |
|--------|-----------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------|---------------------|----------------------|------------------------------|-----------------------|
| 1 | 38.3434 | 2.314839e-12± 1.6949e-14 | 2.096535e-12± 2.1628e-14 | 2.17322e-12± 1.7127e-14 | 2.952391± 0.0096 | 3.303714± 0.0151 | 3.218734 ± 0.0067 | 2.194864e-12± 1.8568e-14 | 3.158279± 0.01046 |
| 2 | 41.2465 | 3.239653e-12± 2.1602e-14 | 3.028574e-12± 3.0478e-14 | 3.158208e-12± 2.2632e-14 | 2.56087± 0.0079 | 2.723834± 0.0167 | 2.720186 ± 0.0117 | 3.142145e-12± 2.4904e-14 | 2.668296± 0.0121 |
| 3 | 38.6397 | 2.53587e-12± 2.2706e-14 | 2.488575e-12± 2.0548e-14 | 2.258745e-12± 1.912e-14 | 2.910801± 0.0122 | 3.136238± 0.0129 | 3.209374 ± 0.013 | 2.42773e-12± 2.079133e-14 | 3.085471± 0.0127 |

| Sample | Keff (S2) | Feff (S2) | Keff (S2xyz) | Feff (S2xyz) |
|--------|---------------------------|---------------------|----------------------------|--------------------|
| 1 | 1.612958e-12± 7.31e-14 | 4.262359± 0.0691 | 2.1291e-12± 4.637e-14 | 3.3966± 0.0301 |
| 2 | 2.6738e-12± 8.39e-14 | 3.25083± 0.0245 | 2.93439e-12± 9.9345e-14 | 3.31981± 0.0834 |
| 3 | 2.39865e-12± 5.452e-14 | 3.41214± 0.4532 | 2.61426e-12± 7.3856e-14 | 3.36114± 0.0475 |

Учет функций по направлениям повышает качество реконструкций даже для, в целом, изотропных пористых сред

Обратная проблема



$$\frac{S_2(r) - \phi_2^2}{\phi_1 \phi_2} = \exp(-r/a) \cos(\omega r + \psi)$$

Конструкция необходимой структуры, основанная на аналитических данных о желаемых свойствах.

Когда можно применить pore-scale моделирование?

Для решения фундаментальных и прикладных научных задач:

- реконструкция трехмерных сред по двумерным срезам (геология, геофизика, материаловедение, биология и т.д.);
- описание и конструкция сложных многокомпонентных материалов;
- сжатие данных о структуре, создание банка данных структур с различными свойствами, классификация.

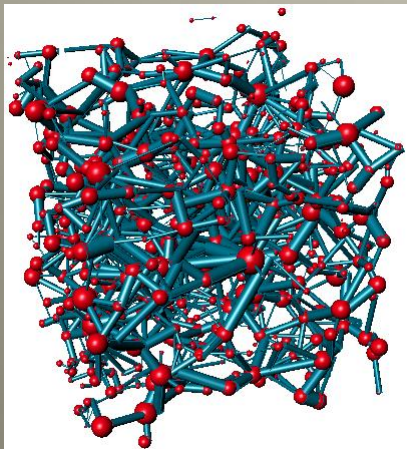
Для быстрого и точного определения петрофизических свойств образцов пород-коллекторов :

- быстрый расчет эффективных свойств пористых материалов (проницаемость, проводимость, упругость и т.д.);
- неконсолидированные образцы;
- неинвазивный метод: структура и целостность образца не меняется за счет лаб. измерений;
- образцы любой формы (шламм).

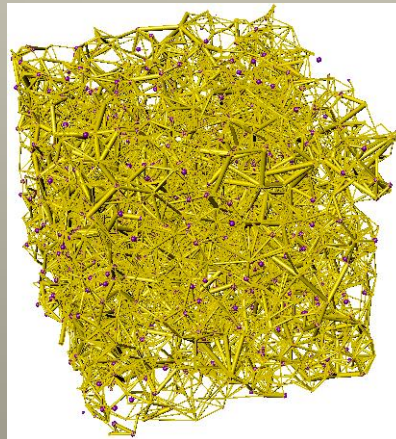
Выводы

- 1) Трехмерная структура пористых сред может быть восстановлена по 2D изображениям или исходя из других имеющихся данных.
- 2) Реконструкции могут быть использованы для точного петрофизического моделирования свойств пород-коллекторов.
- 3) Моделирование на микроуровне можно проводить по трехмерным структурам реконструкций, полученных по изображениям электронной микроскопии.

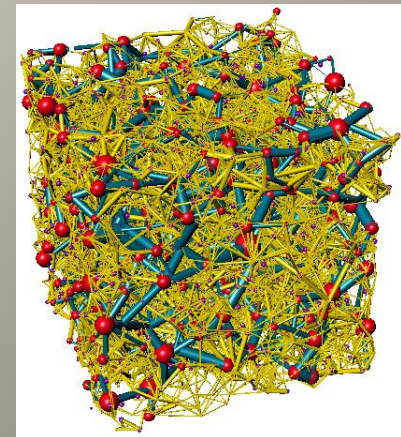
А при наличии 3D данных микротомографии в модель можно добавить информацию о «невидимой» пористости, используя 2D изображения с более высоким разрешением.



+



=



Спасибо за внимание

Вопросы?