

Фрактальный анализ трехмерной микроструктуры пористых материалов

© А.Н. Хлюпин,^{1,2} О.Ю. Динариев²

¹ Московский физико-технический институт,
141701 Москва, Россия

² Московский научно-исследовательский центр Шлюмберже,
119285 Москва, Россия
e-mail: khlyupin@phystech.edu

(Поступило в Редакцию 8 августа 2014 г.)

Исследованы статистические геометрические характеристики микроструктуры порового пространства образцов горных пород на основе трехмерных изображений, полученных с помощью рентгеновской микротомографии. Показано, что поверхность порового пространства имеет фрактальные свойства. В результате проведенного фрактального анализа трехмерных микромоделей получены значения ведущей фрактальной размерности, мультифрактальные спектры обобщенных размерностей и другие структурно-геометрические параметры.

Введение

Изучение особенностей микроструктуры горных пород тесно связано с рядом проблем петрофизики и петрографии. Так, создание адекватной классификационной системы, уточняющей сложившиеся представления о литотипах, позволило бы улучшить понимание признаков, определяющих петрофизические параметры и петрофизические зависимости. С другой стороны, в связи с развитием методов прямого расчета физических и гидродинамических характеристик на основе детальных трехмерных численных моделей возникла задача оценки представительности рассматриваемых малых участков среды по отношению к представляющему интерес объему среды в целом. Как ожидается, эта задача должна решаться путем поиска набора достаточных статистик для описания и классификации пород. С поиском достаточных статистик также тесно связана задача численной стохастической генерации микроструктур, статистически подобных реальным пористым средам. Целью такой численной генерации микромоделей является обоснование диапазона и средних значений расчетных физических и гидродинамических параметров среды.

Различные современные физические методы исследования позволяют оценить определенные характеристики микрон неоднородности среды. Так, двумерные изображения РЭМ (растровая электронная микроскопия) позволяют осуществить петрофизический анализ характерных форм и размеров неоднородностей среды [1,2]. Методы малоуглового рассеяния нейтронов или рентгеновского излучения связаны с двухточечной корреляционной функцией неоднородностей среды [3]. При этом изучение геометрических, топологических и статистических свойств неоднородного порового пространства оправдано тесной связью этих характеристик с физико-химическими процессами, протекающими в поровом пространстве [1,4]. В последнее время с бурным развитием возможностей микротомографии исследова-

ние трехмерных микромоделей, изначально использовавшихся для визуализации структуры пор и трещин, становится основой многих методов геостатистического анализа. При интерпретации микротомограмм как реализаций случайных полей в принципе можно оценить любые статистические параметры или функции, связанные с этими полями. Отметим, что таким образом полученные поля вариограмм дают содержательную информацию об анизотропии на различных масштабах и спектре корреляционных длин [5,6].

Среди задач микроструктурного анализа пористых материалов важную роль играет исследование статистических геометрических свойств поверхности порового пространства. Эти свойства необходимы для понимания явлений адсорбции, свойств поверхностных фаз, термодинамики и переноса в тонких пленках, гетерогенных химических реакций и прочее. Учитывая сложный и нерегулярный характер геометрии пор природных объектов, в таких ситуациях естественно использовать идеи фрактальной геометрии [7,8]. Примеры применения фрактальной геометрии к описанию нерегулярных поверхностей представлены в [9]. В определенных сложных случаях, когда геометрические свойства объекта меняются с масштабом, геометрию не удастся описать одной величиной фрактальной размерности. В этих случаях используется теория неоднородных фракталов или мультифракталов [10], которая позволяет вычислить спектр фрактальных размерностей и аналоги моментных функций.

Настоящая работа содержит результаты применения фрактального анализа к изучению поверхности порового пространства для ряда микротомограмм пористых материалов естественного и искусственного происхождения.

3D-микромоделели пористых сред

Были исследованы пористые образцы различной геологической природы, а также один трехмерный ис-

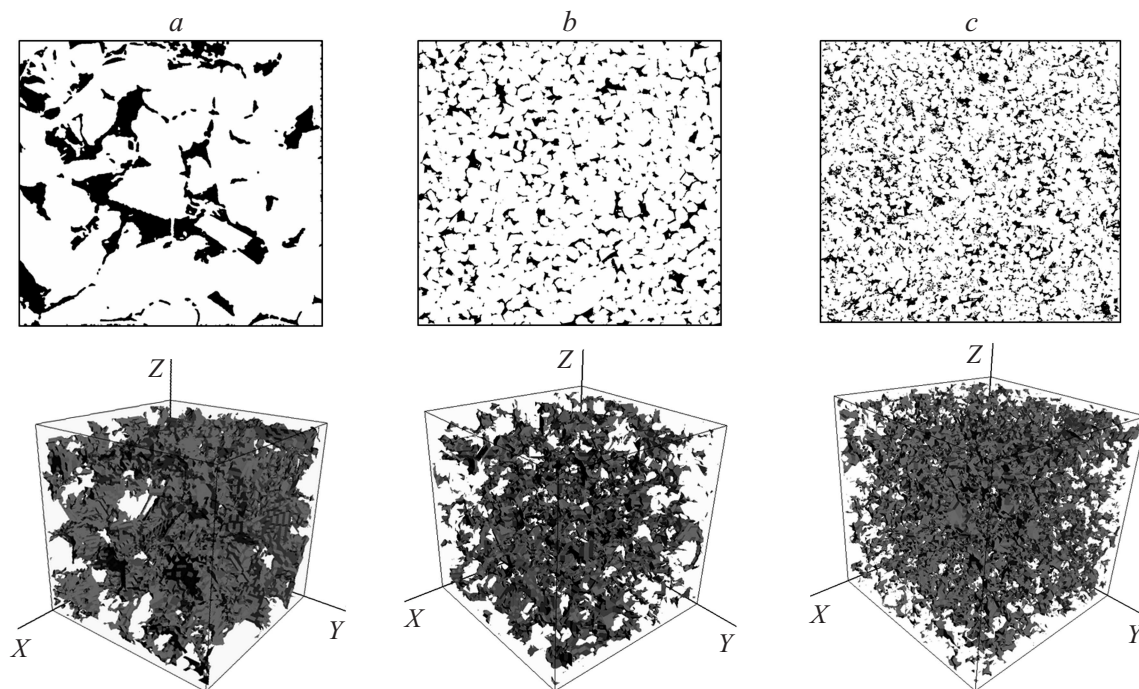


Рис. 1. Бинаризованные 2D-слои и восстановленные по ним 3D-модели пористых сред: Achimov structure (a), Fontainebleau structure (b), Gray Berea structure (c).

кусственный образец (рис. 1, 2). Образцы отличаются морфологией и структурой порового пространства, экспериментальными значениями пористости и проницаемости. Также различно относительное число пор, не попавших в допустимые пределы разрешения томографа. Исследуемые трехмерные микромоделли были получены

при помощи рентгеновской микротомографии [11,12]. А именно, при вращении конкретного образца вокруг своей оси с помощью томографии получается серия плоских проекций для углов от 0° до 360° . Из набора проекций при помощи алгоритма реконструкции [13] собирается трехмерная модель микроструктуры. Для численного анализа использовались трехмерные бинаризованные модели, т.е. двузначные поля признаков (полость–твердое тело).

Искусственный образец (sintered glass) был получен при нагревании под давлением объема, заполненного стеклянными шариками различного размера. Для исследования была использована часть трехмерной цифровой модели с размером $1000 \times 1000 \times 1000$ voxel и разрешением $2.49 \mu\text{m}$. Экспериментально измеренная пористость составила 34%, экспериментальная проницаемость — 23 D.

Реальные цифровые модели пород, полученные при помощи томографии:

- Образец песчаника структуры Фонтенбло (Fontainebleau sandstone). Была использована бинаризованная модель размером $1000 \times 1000 \times 1000$ voxel с разрешением $2.32 \mu\text{m}$. Экспериментальная пористость составила 16.5%, экспериментальная проницаемость — 389.7 mD.

- Образец песчаника Gray Berea (Gray Berea sandstone). Была использована бинаризованная модель размером $1000 \times 1000 \times 1000$ voxel с разрешением $2.32 \mu\text{m}$. Экспериментальная пористость составила 21.9%, экспериментальная проницаемость — 89.1 mD.

- Образец аркозового песчаника (Achimov sandstone). Была использована бинаризованная модель размером $1000 \times 1000 \times 1000$ voxel с разрешением $2.2 \mu\text{m}$.

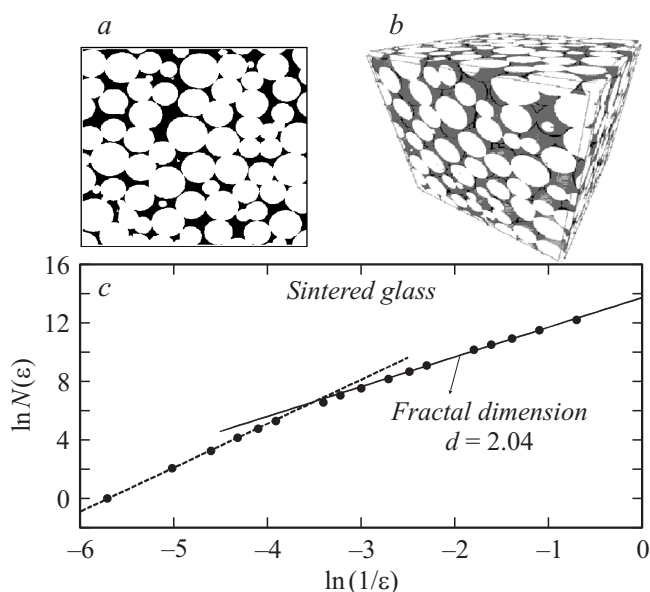


Рис. 2. Определение фрактальной размерности искусственной модели sintered glass: двумерный слой трехмерной модели (a); восстановленная трехмерная модель (b); график логарифма числа кубов, покрывающих поровую поверхность от логарифма обратной длины ребра куба (c).

Экспериментальная пористость составила 19.8%, экспериментальная проницаемость — 20.1 mD.

Фрактальная размерность

Будем следовать [9] и введем нестрогое определение фрактальной размерности, достаточное для наших целей. Более строгое изложение вопроса можно найти в [14]. Поверхность пор представляет собой множество точек, вложенное в евклидово пространство размерности E (в нашем случае $E = 3$). Будем делить микромодель на кубы с длиной ребра ε (в voxel). Определим меру множества:

$$M_d(\varepsilon) = N(\varepsilon)\varepsilon^d, \quad (1)$$

где $N(\varepsilon)$ — число кубов, покрывающих хотя бы одну точку из множества. Назовем фрактальной размерностью такое d , при котором $M_d(\varepsilon) \rightarrow \text{const} \neq 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$. В случае кусочно-гладкой линии или поверхности фрактальная размерность — целое число, равное 1 и 2 соответственно (совпадает с топологической размерностью). Для произвольного множества фрактальная размерность не является целым числом.

Существует эффективный способ вычисления фрактальной размерности, используя клеточный алгоритм (box covering algorithm). Для каждого ε вычисляется количество покрывающих поверхность пор кубов $N(\varepsilon)$, фрактальная размерность d оценивается по наклону графика $\ln N(\varepsilon)$ от $\ln 1/\varepsilon$:

$$N(\varepsilon) \propto \frac{1}{\varepsilon^d} \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0, \quad (2)$$

$$d = \frac{d \ln N(\varepsilon)}{d \ln(1/\varepsilon)}. \quad (3)$$

Поскольку на сложность клеточного алгоритма существенно влияет размер модели, то для прямого счета модели $1000 \times 1000 \times 1000$ voxel требуется значительное время. При модификации алгоритма для мультифрактального анализа сложность повышается, поэтому для 3D-моделей прямой счет не является оптимальным. Применение параллельной технологии MPI позволяет эффективно решать эту проблему для данного алгоритма [15].

Тестирование алгоритма проводилось на искусственно сгенерированной трехмерной модели из спаянных шариков разного размера (*sintered glass*) с заранее известной фрактальной размерностью поверхности, равной 2 (рис. 2). Как видно из рисунка, экспериментальные точки хорошо аппроксимируются прямой с угловым коэффициентом $d = 2.04$.

Заметно, что существует некая критическая точка, в окрестности которой происходит смена производной функции, причем экспериментальные точки до критической ложатся на прямую с углом наклона $k = 3$. Данная особенность присуща всем рассмотренным нами моделям. Это объясняется тем, что все кубы с длиной

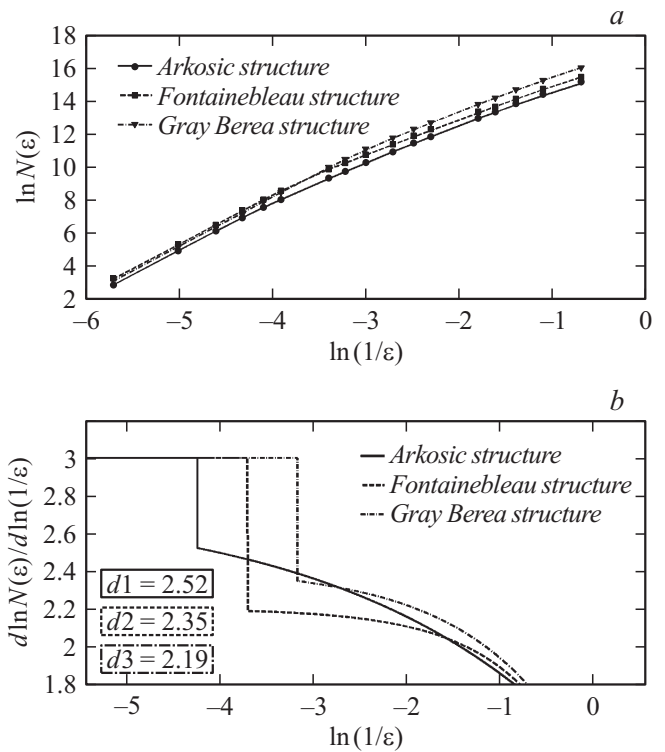


Рис. 3. Зависимость числа кубов от обратной длины ребра в двойном логарифмическом масштабе для трех микромоделей пористых сред (a); график производных (b).

ребра содержат хотя бы одну точку поверхности пор, и поэтому угол наклона кривой равен размерности пространства.

Фрактальный (линейный, с углом наклона $2 < d < 3$) характер проявляется после критической точки, причем при $\varepsilon \rightarrow 0$ производная плавно убывает. Это связано с конечным разрешением томографа. Можно показать, что при $\varepsilon \rightarrow 0$ происходит экспоненциальное убывание. Была проведена аппроксимация и построены графики производных для всех рассматриваемых моделей (рис. 3).

Все кривые испытывают скачок, но в разных точках, что связано с различными характерными масштабами неоднородностей в породах (с различными средними линейными размерами пор и гранул породы). Значения производных после скачка также различны. Именно этот параметр мы принимаем за оценку фрактальной размерности поверхности пористой структуры (см. таблицу). Можно интерпретировать фрактальную размерность как меру изрезанности, шероховатости поверхности. Раз-

ведущая фрактальная размерность, некоторые обобщенные мультифрактальные размерности для исследуемых моделей пористых сред

Образцы пористых сред	d	D_0	D_1	D_2
Arkosic sandstone	2.52	2.68	2.58	2.53
Gray Berea sandstone	2.35	2.38	2.25	2.21
Fontainebleau sandstone	2.19	2.13	1.97	1.89

личия в этих характеристиках дают нам возможность использовать их для набора достаточных статистик в задаче описания и классификации неоднородных пористых сред.

Важной особенностью является то, что производные плавно убывают при уменьшении ε . Возможно, это свидетельствует о том, что на разных масштабах система проявляет различные фрактальные свойства, и не достаточно одной фрактальной размерности для полной характеристики геометрии поверхности пор. Целесообразно привлечение более мощного аппарата — мультифрактального анализа, когда для описания системы используется не одна, а целый спектр размерностей.

Мультифрактальный анализ

Мультифрактальные меры связаны с исследованием поведения физических или других свойств, неравномерно распределенных на геометрическом носителе [10]. Мультифрактальный объект может быть представлен взаимосвязанными фрактальными подмножествами, имеющими свои фрактальные размерности. В отличие от „монофрактала“, чьи геометрические характеристики определены единственной фрактальной размерностью d , по спектру обобщенных фрактальных размерностей мультифрактала (неоднородного фрактала) можно судить о некоторых структурных и статистических свойствах системы. Теория мультифракталов привлекает к себе внимание исследователей из различных областей физики и математики, поскольку анализ экспериментальных результатов позволяет считать поведение многих систем мультифрактальным [16–27].

Кратко опишем инструментарий, необходимый для рассматриваемой практической задачи. Более подробный математический анализ вопроса можно найти в [9]. Как и раньше, представим поверхность пор в моделях пористых сред как множество, вложенное в евклидово пространство размерности $E = 3$, и будем делить пространство на кубы с длиной ребра ε . Для каждого такого куба определим вероятность $\mu_i = N_i/N$, где N_i — число элементов поверхности порового пространства в кубе с номером i , N — полное число таких элементов. Отметим, что ранее при определении фрактальной меры мы учитывали все кубы, покрывающие поверхность пор, с одинаковым весом. Введем новую меру:

$$M_d(q, \varepsilon) = \sum_{i=1}^N \mu_i^q \varepsilon^d \\ = N(q, \varepsilon) \varepsilon^d \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \begin{cases} 0, & d > \tau(q), \\ \infty, & d < \tau(q). \end{cases} \quad (4)$$

Эта мера обладает показателем массы $\tau(q)$, при котором она конечна при $\varepsilon \rightarrow 0$. Мера характеризуется всей последовательностью $\tau(q)$. Взвешенное число кубов

$N(q, \varepsilon)$ можно представить как

$$N(q, \varepsilon) = \sum_{i=1}^N \mu_i^q \propto \varepsilon^{-\tau(q)}. \quad (5)$$

А показатель массы определяется выражением

$$\tau(q) = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln N(q, \varepsilon)}{\ln \frac{1}{\varepsilon}}. \quad (6)$$

Заметим что при $q = 0$, $N(q = 0, \varepsilon) = N(\varepsilon)$ — число кубов, образующих покрытие, следовательно, $\tau(q = d) = d$ есть обычная фрактальная размерность множества.

Носитель мультифрактальной меры \mathcal{Z} может быть представлен как объединение фрактальных подмножеств, характеризующихся индексом α — показателем Липшица–Гельдера меры M на этих подмножествах

$$\mathcal{Z} = \bigcup_{\alpha} \mathcal{Z}_{\alpha}. \quad (7)$$

Говоря упрощенно, можно считать меру постоянной на подмножествах \mathcal{Z}_{α} . Существует функция $f(\alpha)$, определяющая фрактальную размерность подмножеств \mathcal{Z}_{α} , носителей сингулярности меры M с показателем α . Полезным для приложений является взаимнооднозначная зависимость между последовательностью показателей масс $\tau(q)$ и кривой $f(\alpha)$:

$$\begin{cases} \alpha(q) = -\frac{d}{dq} \tau(q), \\ f(\alpha(q)) = q\alpha(q) + \tau(q). \end{cases} \quad (8)$$

Пара уравнений задает преобразование Лежандра от переменных τ и q к переменным f и α , задавая при этом кривую $f(\alpha)$ в параметрическом виде.

Важной особенностью является точка максимума кривой $f_{\max}(\alpha)$. Максимум достигается при $df(\alpha)/d\alpha = 0$ в точке $q = 0$, что приводит к выводу $f_{\max}(\alpha) = d$, где d — фрактальная размерность носителя меры. Спектр обобщенных фрактальных размерностей Реньи вводят следующим образом:

$$D_q = \frac{\tau(q)}{1-q}. \quad (9)$$

Для обычного однородного фрактала все эти размерности совпадают и равны d — фрактальной размерности. С другой стороны, если функция D_q не постоянна по q , то система носит мультифрактальный характер. По спектру размерностей Реньи можно судить не только о геометрических свойствах носителя, но и о некоторых статистических характеристиках меры M . Так, при $q = 0$ имеем $D_{q=0} = d$ — фрактальная размерность множества носителя меры.

Рассмотрим D_q при $q = 1$, т. е. предел $\lim_{q \rightarrow 1} \frac{\tau(q)}{1-q}$. Заметим, что $\mu_i^q = \mu_i \mu_i^{q-1} = \mu_i \exp\{(q-1) \ln \mu_i\}$, и, используя приближение $\exp\{(q-1) \ln \mu_i\} \approx 1 + (q-1) \ln \mu_i$

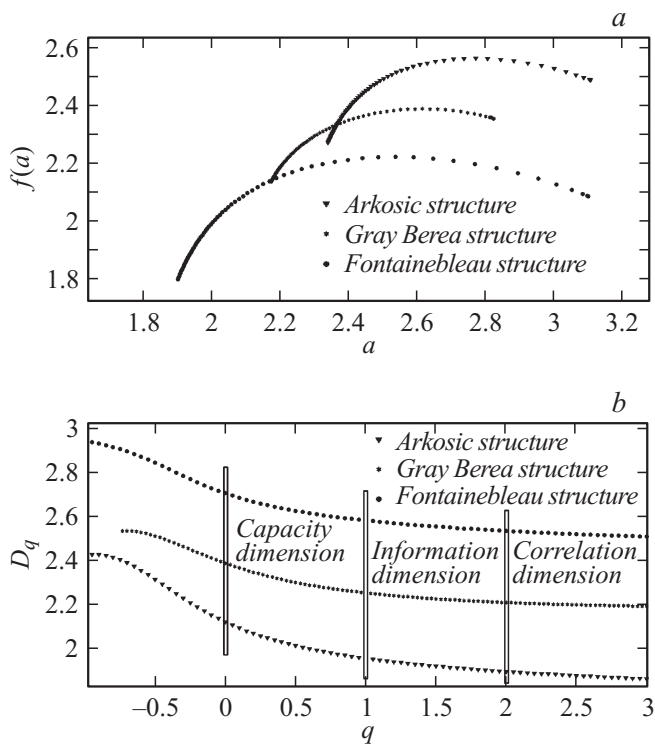


Рис. 4. Зависимость фрактальной размерности подмножеств носителя от показателя Липшица–Гельдера (a), спектр обобщенных размерностей Реньи (b) для трех микромоделей пористых сред.

при $q \approx 1$, получаем

$$\ln\left(\sum_i \mu_i^q\right) \rightarrow \ln\left\{1 + (q - 1) \sum_i \mu_i \ln \mu_i\right\} \approx (q - 1) \sum_i \mu_i \ln \mu_i, \quad (10)$$

$$D_1 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\sum_i \mu_i \ln \mu_i}{\ln \frac{1}{\varepsilon}}. \quad (11)$$

Эта размерность описывает скейлинговое поведение информационной энтропии используемой меры. Величину D_1 называют информационной размерностью системы, определяющей показатель, с которым изменяется энтропия при уменьшении масштаба. Рассмотрим $D(q = 2)$:

$$D_2 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln \sum_i \mu_i^2}{\ln \frac{1}{\varepsilon}}. \quad (12)$$

Здесь сумма в числителе по всем ячейкам представляет собой вероятность P того, что две произвольно выбранные точки из множества лежат внутри одной ячейки с размером ε . Обобщенную размерность D_2 называют корреляционной размерностью. Она определяет степенную зависимость вероятности P от ε при $\varepsilon \rightarrow 0$. На рис. 4 изображены кривые $f(a)$ и спектры обобщенных размерностей $D(q)$ для трех микромоделей.

Заметно, что пористые среды характеризуются различной шириной спектров, а также значениями всех трех размерностей D_0, D_1, D_2 (см. таблицу).

Заключение

Проведенный анализ выявил, что поверхность порового пространства образцов естественного происхождения может быть охарактеризована с помощью фрактальной геометрии. В определенном приближении можно использовать одну фрактальную размерность для каждого образца из интервала $2 < d < 3$, причем фрактальные размерности разных образцов различны. При более точном рассмотрении имеет место распределение фрактальных размерностей в рамках концепции мультифрактальной геометрии. Полученные результаты следует учитывать при теоретических и экспериментальных исследованиях, связанных с физико-химическими процессами на поверхностях пор. Отметим, что одним из перспективных путей развития фрактального и мультифрактального анализа является развитие фрактального формализма с использованием вейвлет-преобразования [28].

Список литературы

- [1] Levitz P. // Cement Concrete Res. 2007. Vol. 37. N 3. P. 351–359.
- [2] Levitz P., Tchoubar D. // J. Phys. 1992. Vol. 2. N 6. P. 771–790.
- [3] Guinier A., Fournet G. Small-angle scattering of X-rays. New York: Wiley, 1955. 268 p.
- [4] Mitra P.P. et al. // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 68. N 24. P. 3555–3558.
- [5] Свительман В.С., Динариев О.Ю. // Тр. МФТИ. 2012. Т. 4. № 3. С. 211–219.
- [6] Савельева Е.А., Динариев О.Ю., Свительман В.С. Использование вариограмм, ковариаций и спектральной плотности при геостатистическом анализе микроструктуры горных пород. Предпринт Института проблем безопасного развития атомной энергетики № ИВРАЕ-2013-02. М., 2013.
- [7] Мосолов А.Б., Динариев О.Ю. // ЖТФ. 1987. Т. 57. Вып. 9. С. 1679.
- [8] Мосолов А.Б., Динариев О.Ю. // ЖТФ. 1988. Т. 58. Вып. 2. С. 233.
- [9] Федер Е., Данилов Ю.А., Шукуров А. Фракталы. М.: Мир, 1991. 254 с.
- [10] Mandelbrot B.B. An Random Fluctuations and Pattern Growth: Experiments and Models. Springer Netherlands, 1988. P. 279–291.
- [11] Withjack E.M. et al. // SPE formation Evaluation. 1988. Vol. 3. N 04. P. 696–704.
- [12] Mees F. et al. // Geol. Soc. Eng. Geol. Sp. 2003. Vol. 215. N 1. P. 1–6.
- [13] Stock S.R. Microcomputed tomography: methodology and applications. CRC press, 2008. 336 p.
- [14] Falconer K.J. The geometry of fractal sets. Cambridge university, 1986. 162 p.
- [15] Антонов А.С. Параллельные программирования с использованием технологии MPI. М.: Изд-во МГУ, 2004. 71 с.

- [16] *Frisch U., Parisi G.* On the singularity structure of fully developed turbulence. Elsevier, 1985. P. 84–88.
- [17] *Meneveau C., Sreenivasan K.R.* // *Phys. Rev. Lett.* 1987. Vol. 59. N 13. P. 1424.
- [18] *Feigenbaum M.J., Jensen M.H., Procaccia I.* // *Phys. Rev. Lett.* 1986. Vol. 57. P. 1503–1506.
- [19] *Katzen D., Procaccia I.* // *Nucl. Phys. B-Proc. Sup.* 1987. Vol. 2. P. 517–520.
- [20] *Башикиров А.Г.* // Теоретическая и математическая физика. 2006. Т. 149. № 2. С. 299–317.
- [21] *Чумак О.В.* Энтропии и фракталы в анализе данных // Ижевск: НИЦ Регулярная и хаотическая динамика. 2011. 164 с.
- [22] *Tsybakov B., Georganas N.* // *IEEE Trans. Inform. Theor.* 1998. Vol. 44. P. 1713–1725.
- [23] *Queiros S.M.D.* et al. // *Eur. Phys. J. B.* 2007. Vol. 55. N 2. P. 161–167.
- [24] *Мейланов Р.П., Садыков С.А.* // *ЖТФ.* 1999. Т. 69. Вып. 5. С. 128–129.
- [25] *Zhang Q.* et al. // *Phys. A.* 2009. Vol. 388. N. 6. P. 927–934.
- [26] *Li B.G., Yu Z.G., Zhou Y.* // *J. Stat. Mech. Theory E.* 2014. Vol. 2014. N 2. P. 02020.
- [27] *Moreno P.A.* et al. // *BMC Genomics.* 2011. Vol. 12. N 1. P. 506.
- [28] *Scaling Fractals and Wavelets.* Ed.by P. Abry, P. Gonçalvès, J. Lévy-Véhel. Wiley-ISTE, 2005. 464 p.