01

О модификации алгоритма Фосса при моделировании внутренней структуры пористой среды

© В.В. Шитов, П.В. Москалев

Международный институт компьютерных технологий,
394026 Воронеж, Россия
e-mail: moskaleff@mail.ru

(Поступило в Редакцию 25 февраля 2004 г.)

Рассматривается практическое применение модификации алгоритма случайных сложений Фосса для моделирования стохастической фрактальной функции, описывающей распределение характеристик системы капилляров в локально-неоднородной пористой среде, с учетом данных порометрических испытаний. Анализируется влияние вида функций дисперсии и численности пор на характер распределения эквивалентного диаметра капилляров в заданной области.

Широкий диапазон струкурных и теплофизических свойств порошковых пористых материалов, сравнительная простота технологии изготовления из них деталей сложной формы, развитая внутренняя поверхность и высокая интенсивность теплообмена — все это дает возможность использовать капиллярно-пористые структуры в самых разнообразных условиях.

Для создания физически корректных методов теплового и гидравлического моделирования устройств с пористыми элементами необходимо обладать достоверной информацией о внутренней структуре и характере процессов переноса массы и энергии в проницаемых материалах.

Важным этапом на пути практического решения указанной задачи является создание эффективного алгоритма для моделирования распределения эквивалентного диаметра (равно как и любой другой характеристики пористой среды) по ее обобщенным характеристикам в заданной области.

Заметим, что в ряде публикаций, рассматривающих структуру капиллярно-пористых материалов, речь идет о характерных размерах пористой среды [1,2]. Однако при рассмотрении динамики движения жидкостей и газов во внутренних каналах порового пространства следует учитывать неравномерность размеров и профиля скоростей в поперечном сечении канала, а также эффекты уменьшения действительного сечения канала за счет местного отрыва потока от стенок. В связи с этим представляется уместным применение термина эквивалентного диаметра (по аналогии с каналами некруглого сечения), получившего распространение в прикладной гидродинамике [3].

В настоящее время имеются веские основания считать, что значительная часть локально-неоднородных проницаемых структур обладает свойствами стохастического самоподобия в некотором диапазоне характерных масштабов [4].

Одной из наиболее эффективных процедур для формирования пространственного распределения с фрактальными характеристиками является обобщение алгоритма случайных сложений, впервые предложенного Р. Фоссом в 1985 г. на Берлинской конференции по фундаментальным алгоритмам компьютерной графики [5].

Базовый вариант алгоритма Фосса представляет собой рекурсивную последовательность сложений начальных значений некоторой псевдослучайной функции d_{i-1} с дополнительными приращениями Δd_i, подчиняющимися несмещенному нормальному закону распределения с заданным показателем среднеквадратического отклонения σ_i. Изменение числа точек определяется величиной некоторого коэффициента разбиения

$$r = \Delta l_i / \Delta l_{i-1}, \tag{1}$$

где $\Delta l_i, \Delta l_{i-1}$ — приращения по независимой переменной для двух последовательных поколений фрактальной кривой. В случае построения одномерной кривой Фосса необходимо потребовать, чтобы дисперсия приращений по зависимой переменной подчинялась соотношению

$$\sigma^2(d_i) = r^{2H} \cdot \sigma^2(d_{i-1}), \tag{2}$$

где $\sigma^2(d_i)$ — дисперсия приращений по зависимой переменной для i-го поколения последовательности случайных сложений; H — показатель Херста, в общем случае принадлежащий открытому интервалу $H \in (0; 1)$.

Заметим, что при алгоритмической реализации описанной процедуры для каждого элемента множества значений функции текущего поколения удобно использовать рекурсивное представление в виде нормально распределенного псевдослучайного числа с математическими ожиданием, равным значению функции предыдущего поколения, и дисперсией, определяемой в соответствии с (2).

Число точек определения фрактальной функции от поколения к поколению также имеет рекурсивное представление с учетом коэффициента разбиения (1) в виде

$$H(d_i) = r \cdot N(d_{i-1}). \tag{3}$$

Дополним систему уравнений (2) и (3) выражением для определения безразмерного пространственного разрешения $\delta(d_i)$, нормированного по амплитудным значениям переменной d_i,

$$\delta(d_i) = (d_b - d_i)/(d_b - d_a), \tag{4}$$

где d_a, d_b — минимальная и максимальная величины в области значений независимой переменной d_i.

Независимое решение уравнений (2) и (3) с учетом выражения для показателя пространственного разрешения (4) показывает (рис. 1, a), что классическая реализация алгоритма Фосса предполагает монотонное

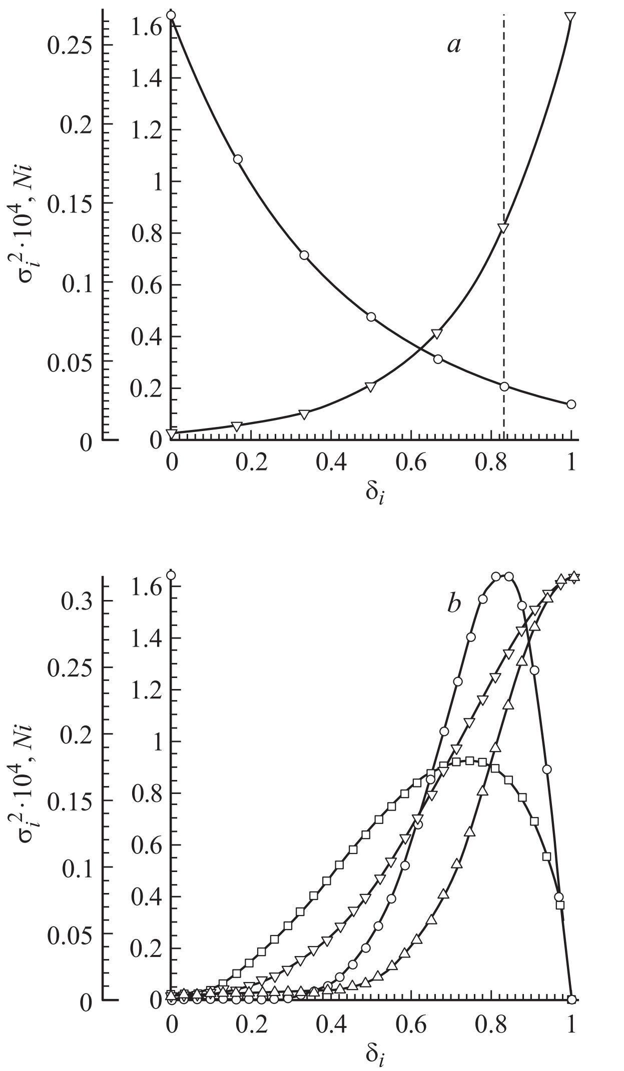

Рис. 1. Функции распределения показателей σ_i^2 и N_i в зависимости от текущего пространственного разрешения δ_i при реализации стандартного (a) и модифицированного (b) алгоритма случайных сложений Фосса. –○– или –□– — зависимости для $\sigma^2(d_i)$, –△– или –▽– — зависимости для $N(d_i)$. Значения основных показателей для рассматриваемых распределений: a — $\delta(d_a) = 1.000$, $\delta(d_a)' = 0.833$; -○- — $H = 0.600$, $\sigma^2(d_b) = 0.268$; –▽– — $r = 0.500$, $N(d_a) = 1.638 \cdot 10^4$, $N(d_a)' = 0.410 \cdot 10^4$; b — –○– — $\alpha_\sigma = 8.0$, $\beta_\sigma = 2.5$, $(\sigma^2)_{\max} = 0.320$, –□– — $\alpha_\sigma = 3.0$, $\beta_\sigma = 1.7$, $(\sigma^2)_{\max} = 0.181$; –△– — $\alpha_N = 8.0$, $\beta_N = 2.5$, $N(d_a) = 1.638 \cdot 10^4$; –▽– — $\alpha_N = 3.0$, $\beta_N = 1.7$, $N(d_a) = 1.638 \cdot 10^4$.

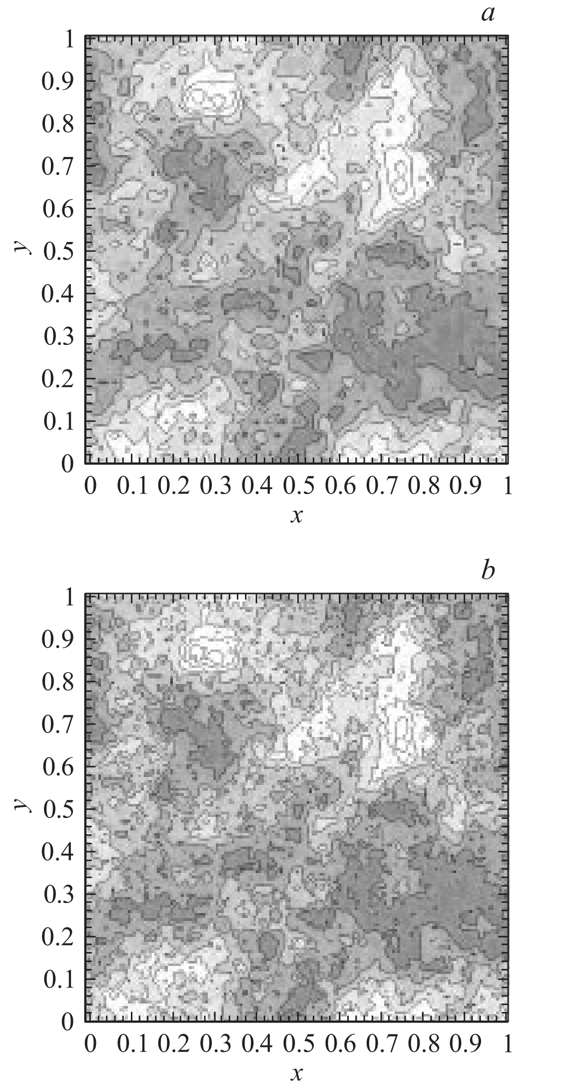

Рис. 2. Две реализации стандартного алгоритма случайных сложений Фосса для стохастической фрактальной функции $d(x, y)$, описывающей распределение эквивалентного гидравлического диаметра порового пространства локальнонеоднородной пористой среды. Значения основных показателей для рассматриваемых реализаций: $r = 0.500$, $H = 0.600$, a — $\sigma^2(d_b) = 0.268$, $\delta(d_a) = 0.833$, $N(d_a) = 0.410 \cdot 10^4$; b — $\sigma^2(d_b) = 0.268$, $\delta(d_a) = 1.000$, $N(d_a) = 1.638 \cdot 10^4$.

увеличение числа точек $N(d_i)$ в каждом следующем поколении стохастической фрактальной функции d_i при аналогичном уменьшении дисперсии $\sigma^2(d_i)$ ее дополнительных амплитудных значений Δd_i.

В дополнение к сказанному заметим, что описанный выше алгоритм случайных сложений допускает вполне тривиальное обобщение на случай построения фрактальной функции от двух и более независимых переменных.

Примеры реализаций такой функции для двух уровней максимального пространственного разрешения $\delta(d_a) = 0.833$, 1.000 при постоянных значениях остальных показателей приведены на рис. 2. Реализация (a) соответствует меньшему, а реализация (b) — большему уровню максимального пространственного разрешения $\delta(d_a)$. Минимальное значение пространственного разрешения для всех реализаций сохранялось постоянным $\delta(d_b) = \text{const}$.

При моделировании проницаемой структуры порошковых пористых материалов с заранее заданным фракционным составом это означает, что в первом случае из исходного материала исключаются частицы наиболее мелких фракций.

Начальное состояние функции, производящей псевдослучайную числовую последовательность, от которой зависит локальное распределение дополнительных приращений искомой функции Δd_i, во всех случаях устанавливалось идентичным.

Однако при использовании данного алгоритма в практических задачах, предполагающих моделирование пространственной структуры локально неоднородных капиллярных сетей, следует учитывать характер распределения показателей $\sigma^2(d_i)$ и $N(d_i)$ на различных уровнях пространственного разрешения в реальных пористых материалах.

Анализ данных экспериментальных исследований структурных характеристик, реально используемых в машиностроении пористых материалов, показывает [2,6], что поведение функций дисперсии и плотности эквивалентного диаметра капилляра отличается от показанного на рис. 1, *a*.

Типичное распределение эквивалентного диаметра пор в реальных порошковых пористых материалах показано на рис. 3. При формировании исследуемых образцов были использованы оловянно-фосфористая литейная бронза БрОФ10-1 (по ОСТ 1.90054-72) (*a*), нержавеющая сталь 12Х18Н10Т (по ГОСТ 5632-72) (*b*). Приведенные экспериментальные кривые были получены методом инвазивной ртутной порометрии в МВТУ им. Н.Э. Баумана [6].

По результатам испытаний распределение объемной пористости в зависимости от эквивалентного диаметра пор для всех фракций не мельче текущей определяется выражением

$$\Pi(d_i) = \frac{\Sigma_{k-i}^{n} \Delta V_k}{V_0}, \qquad (5)$$

где ΔV_k — приращение суммарного объема пор за счет текущей фракции пористого материала d_i при последовательном увеличении давления подаваемой ртути, V_0 — полный объем образца исследуемого пористого материала.

На рис. 3 $-\nabla-$ — интегральная зависимость общей численности пор $N(d_i)$ для всех фракций не мельче текущей от их эквивалентного диаметра. Данная кривая построена на основе экспериментальной зависимости $\Pi(d_i)$ при наличии следующих допущений: а) размер пор в пределах каждой фракции постоянен и равен среднему эквивалентному диаметру для данной фракции, б) все поры имеют сферическую форму и могут пересекаться между собой, в) доля исключенного объема при взаимопересечении двух пор составляет не менее 1/2 от наименьшей из них.

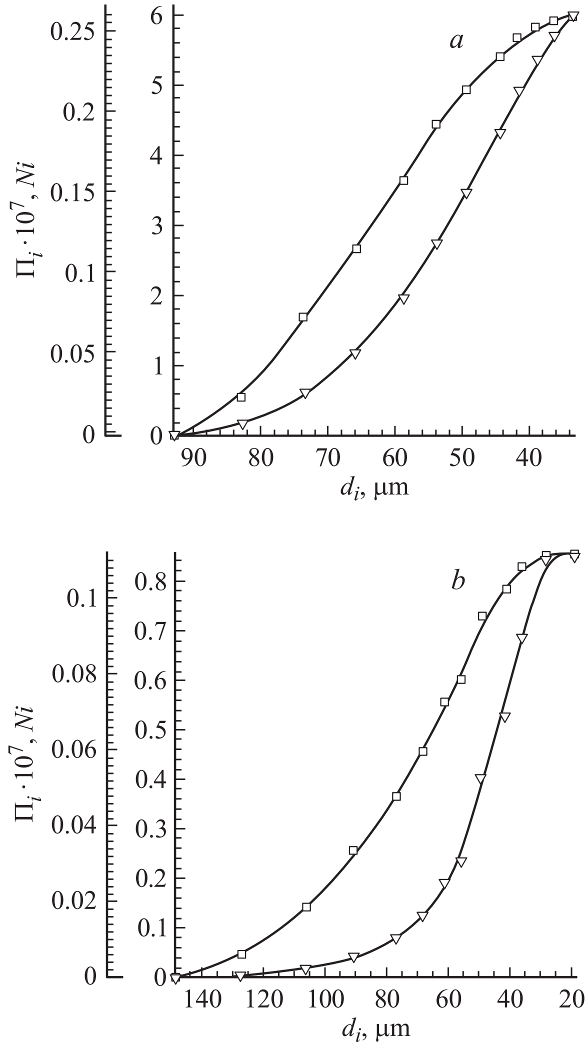

Рис. 3. Интегральные функции распределения объемной пористости Π_i и численности пор N_i для основных фракций в зависимости от среднего эквивалентного диаметра d_i. $-\square-$ — зависимости $\Pi(d_i)$, $-\nabla-$ — зависимости $N(d_i)$. Значения основных показателей для исследуемых образцов: *a* — пористая бронза $d_0 = 25$ mm, $h_0 = 20$ mm, $\Pi_0 = 0.260$, $N_0 = 6.067 \cdot 10^7$; *b* — пористая нержавеющая сталь $d_0 = 20$ mm, $h_0 = 10$ mm, $\Pi_0 = 0.111$, $N_0 = 0.858 \cdot 10^7$.

В этом случае нижняя оценка численности пор для каждой фракции определяется долей порового пространства ΔV_i, занимаемого этой фракцией, в виде

$$N(d_i) = 2\frac{\Delta V_i \cdot 6}{\pi \cdot d_i^3}. \qquad (6)$$

Сравнительный анализ функций распределения $N(d_i)$, полученных в результате совместного решения уравнений (5) и (6), показывает, что наилучшую аппроксимацию экспериментальных кривых обеспечивает семейство интегральных функций бета-распределения [7]

$$N(d_i) = \frac{1}{\mathrm{B}(\alpha, \beta)} \int\limits_{d_a}^{d_i} (d_i)^{\alpha-1}(1-d_i)^{\beta-1} d(d_i), \qquad (7)$$

где α, β — параметры распределения; $\mathrm{B}(\alpha, \beta)$ — бета-функция, определяемая интегральным соотношением

$$\mathrm{B}(\alpha, \beta) = \int\limits_0^1 (t)^{\alpha-1}(1-t)^{\beta-1} dt, \qquad (8)$$

где t — переменная интегрирования, такая что

$$t = \frac{d_x - d_a}{d_b - d_a}.$$

Примеры аппроксимации функций распределения численности пор от их эквивалентного диаметра $N(d_i)$ с помощью соотношений (7) и (8) приведены на рис. 1, b.

При моделировании распределения дисперсии по уровням пространственного разрешения использовано соотношение, описывающее дифференциальную функцию бета-распределения,

$$\sigma^2(d_i) = \frac{1}{\mathrm{B}(\alpha, \beta)} (d_i)^{\alpha-1}(1-d_i)^{\beta-1} I(d_i), \qquad (9)$$

где $I(d_i)$ — индикатор события $\{d_i < d_x\}$, определяемый как кусочно-постоянная функция,

$$I(d_i) = \begin{cases} 1, & d_i < d_x, \\ 0, & d_i \geq d_x. \end{cases}$$

Коэффициенты распределения $\sigma^2(d_i)$ для всех рассматриваемых случаев были приняты идентичными распределению $N(d_i)$: $\alpha_\sigma = \alpha_N$, $\beta_\sigma = \beta_N$. Подобный выбор означает, что график функции σ_i^2 будет иметь асимметричную форму с максимумом в области максимального градиента функции N_i (рис. 1, b), что удовлетворительно согласуется с экспериментальными кривыми дифференциального распределения пор по эквивалентным размерам в исследуемых материалах [6].

Примеры двух реализаций модифицированного алгоритма Фосса с применением функций распределения показателей N_i и σ_i^2 в форме (7) и (9) показаны на рис. 4. Структурные характеристики указанных реализаций соответствуют параметрам реальных образцов: a — пористой бронзы, b — пористой нержавеющей стали. Исключение составляет только суммарная численность эквивалентных пор N_0, формирующих капиллярную структуру в исследуемых образцах.

Общее число пор в реальных пористых материалах чрезвычайно велико. С учетом принятых ранее допущений оно определяется по результатам порометрических испытаний как интегральная сумма численности пор по всем выделенным фракциям: a) для цилиндрического

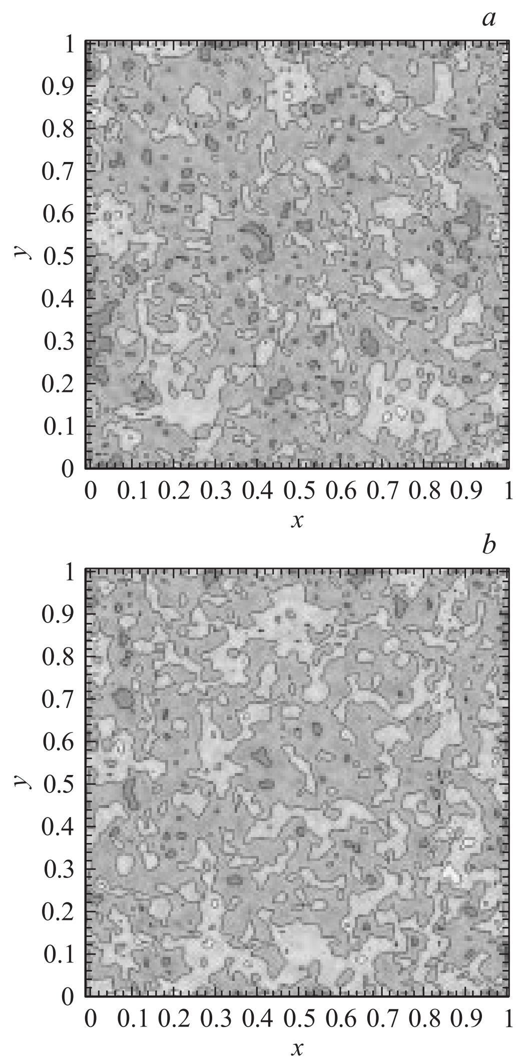

Рис. 4. Две реализации модифицированного алгоритма случайных сложений Фосса для стохастической фрактальной функции $d(x, y)$, описывающей распределение эквивалентного гидравлического диаметра порового пространства локальнонеоднородной пористой среды. Законы распределения основных показателей для рассматриваемых реализаций по уровням пространственного разрешения показаны на рис. 1, b. Приведенные реализации имеют структурные характеристики, соответствующие образцам (рис. 3) пористой бронзы $\alpha_\sigma = \alpha_N = 3.0$, $\beta_\sigma = \beta_N = 1.7$ (a); пористой нержавеющей стали $\alpha_\sigma = \alpha_N = 8.0$, $\beta_\sigma = \beta_N = 2.5$ (b).

образца из пористой бронзы при характерных размерах $d_0 = 25\,\mathrm{mm}$, $h_0 = 20\,\mathrm{mm}$ и объемной пористости $\Pi_0 = 0.260$ нижняя оценка для численности пор в образце составляет $N_0 = 6.067 \cdot 10^7$; b) для образца из пористой нержавеющей стали при $d_0 = 20\,\mathrm{mm}$, $h_0 = 10\,\mathrm{mm}$, $\Pi_0 = 0.111$, $N_0 = 0.858 \cdot 10^7$.

При моделировании капиллярной системы пористого тела с использованием алгоритма Фосса предельная размерность расчетной сетки по соображениям трудоемкости расчетов была ограничена величиной $N_0' = (128)^2 = 1.638 \cdot 10^4$.

Практически подобное ограничение означает уменьшение линейных размеров моделируемой области, в двумерном случае пропорциональное отношению

$$\mu_0 = \frac{l_0'}{l_0} = \sqrt{\frac{N_o'}{N_0}}, \qquad (10)$$

где l_0', l_0 — характерный линейный размер исследуемой области при моделировании и в экспериментах.

Решение уравнения (10) относительно неизвестной величины l_0' дает нам нижние оценки для характерных линейных размеров областей, показанных на рис. 4: a — для модели пористой бронзы при $l_0 = d_0 = 25\,\text{mm}$, $l_0' = 0.411\,\text{mm}$; b — для модели пористой нержавеющей стали при $l_0 = d_0 = 20\,\text{mm}$, $l_0' = 0.874\,\text{mm}$.

Сравнительный анализ результатов моделирования с применением стандартного и модифицированного алгоритмов Фосса показывает, что учет особенностей поведения структурных показателей, характерных для реальных капиллярно-пористых материалов, на различных уровнях пространственного масштаба в модифицированном алгоритме приводит к существенному изменению в структуре получаемой системы капилляров: а) малая величина и медленный рост показателя σ_i^2 в интервале малых значений пространственного разрешения δ_i создает более равномерное стохастическое распределение эквивалентного диаметра за счет снижения доли наиболее крупных фракций и смещения основных флуктуаций функции $d(x, y)$ в область средних масштабов; б) интенсивное падение показателя σ_i^2 в области высоких значений пространственного разрешения δ_i существенно повышает „гладкость“ стохастической функции $d(x, y)$ в связи с уменьшением вклада самых мелких фракций в результирующее распределение эквивалентного диаметра.

Заключение

В заключение следует отметить, что предлагаемая модификация алгоритма Фосса обладает весьма высокой гибкостью, чрезвычайно важной в прикладных исследованиях. Применение бета-функций для моделирования дифференциальных и интегральных законов распределения позволяет вопроизводить на ограниченном интервале определения практическое большинство гладких функций. Кроме того, нет никаких ограничений для задания указанных функций в табличной форме (например, исходя из эмпирических данных) с последующей интерполяцией недостающих значений по опорным точкам. При этом на методы интерполяции никаких особых ограничений не накладывается. Как показано в настоящей работе, исследуемая пористая структура может быть воспроизведена с требуемой степенью детализации по данным порометрических испытаний. Благодаря рекурсивной структуре предлагаемый алгоритм порождает стохастически самоподобные реализации многомерной фрактальной функции с заданными характеристиками в выделенной области пространства независимых переменных. Все это позволяет говорить о значительном потенциале предлагаемой методики в теоретических и прикладных исследованиях локально-неоднородных пористых структур. В то же время вопрос о связи фрактальных характеристик полученной функции с показателями исходных распределений нуждается в дополнительном исследовании.

Список литературы

[1] *Полежаев Ю.В., Юревич Ф.Б.* Тепловая защита. М.: Энергия, 1976. 392 с.
[2] *Поляев В.М., Майоров В.А., Васильев Л.Л.* Гидродинамика и теплообмен в пористых элементах конструкций летательных аппаратов. М.: Машиностроение, 1988. 168 с.
[3] *Идельчик И.Е.* Справочник по гидравлическим сопротивлениям. М.: Машиностроение, 1975. 384 с.
[4] *Федер Е.* Фракталы. М.: Мир, 1991. 254 с.
[5] *Voss R.F.* // Fundamental Algorithms in Computer Graphics. Berlin: Springer Verlag, 1985. P. 805–835.
[6] *Белов С.В.* Пористые металлы в машиностроении. М.: Машиностроение, 1981. 248 с.
[7] *Evans M., Hastings N., Peacock J.B.* Statistical Distributions. 3rd edition. New York: John Wiley & Sons, 2000. 221 p.