



Общероссийский математический портал

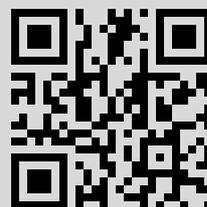
М. В. Карсанина, К. М. Герке, Р. В. Васильев, Д. В. Корост, Моделирование структуры материалов, обладающих желаемыми свойствами, с помощью корреляционных функций, *Матем. моделирование*, 2015, том 27, номер 4, 50–63

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением  
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 128.0.137.192

7 апреля 2021 г., 19:25:41



УДК 519.8, 66

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ, ОБЛАДАЮЩИХ ЖЕЛАЕМЫМИ СВОЙСТВАМИ, С ПОМОЩЬЮ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ**

© 2015 г. *М.В. Карсанина<sup>1,2</sup>, К.М. Герке<sup>3,1</sup>, Р.В. Васильев<sup>4,2</sup>, Д.В. Корост<sup>4</sup>*

<sup>1</sup>Институт динамики геосфер РАН, 119334, Москва

<sup>2</sup>ООО «Эйр Технолоджи» (AIR Technology), Москва

<sup>3</sup>CSIRO Land and Water, PB2, Glen Osmond SA 5064, Australia

<sup>4</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова, геологический факультет, Москва  
mary\_o\_kors@list.ru

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 12-05-33089\_мол\_а\_вед, 12-04-32264\_мол\_а, 13-04-00409\_а, 13-05-01176\_а и 12-05-01130\_а.

Для решения множества фундаментальных и прикладных задач самых различных научных дисциплин и производственных направлений необходимо проектировать материалы с заданными структурными характеристиками и физико-химическими свойствами. Одним из методов количественного описания микроструктуры пористых материалов и сред являются корреляционные функции, с помощью алгоритма оптимизации «отжигом» на их основе можно проводить сборки/реконструкции структур. В настоящей работе мы производим создание 60 образцов гипотетических материалов различной структуры по аналитически заданным корреляционным функциям с тремя изменяемыми параметрами. В дальнейшем для каждого образца рассчитывается эффективная проницаемость на основе численного решения уравнения Стокса в его трехмерной геометрии. На основе анализа полученных результатов наглядно показано, что можно сконструировать пористый материал с желаемыми физическими (проницаемость) и структурными (линейные размеры порового пространства) свойствами.

Ключевые слова: конструирование материалов, пористые среды, сплавы, проницаемость, эффективные свойства, моделирование в масштабе пор (pore-scale modeling).

### **USING CORRELATION FUNCTIONS TO MODEL MATERIAL'S STRUCTURE WITH DESIRED PHYSICAL PROPERTIES**

*M.V. Karsanina<sup>1,2</sup>, K.M. Gerke<sup>3,1</sup>, R.V. Vasilyev<sup>4,2</sup>, D.V. Korost<sup>4</sup>*

<sup>1</sup>Institute of Geosphere Dynamics of the Russian Academy of Sciences, Moscow

<sup>2</sup>AIR Technology, Moscow

<sup>3</sup>CSIRO Land and Water, PB2, Glen Osmond SA 5064, Australia

<sup>4</sup>Lomonosov Moscow State University, Geology Faculty, Moscow

To solve numerous fundamental and applied problems across different scientific disciplines and industrial applications it is crucial to design materials with desired structural and physicochemi-

cal properties. One of the methods to quantify microstructure of a porous material is by means of correlation functions. Using so-called simulated annealing stochastic optimization method one can use correlation functions to construct/reconstruct of different structures. In this study we use analytical correlation functions with three parameters to construct 60 different structures of hypothetical porous materials. Using finite-difference solution of Stokes equation effective permeability values are obtained for each constructed 3D structure. Based on the results we show that it is possible to design a porous material with desired physical (permeability) and structural (characteristic pore size) properties.

Key words: material design, porous media, alloys, permeability, effective property, pore-scale modeling.

## 1. Введение

Одна из основных задач современной науки заключается в разработке и создании материалов определенных свойств, необходимых в производственных и научно-технических приложениях [1]. Примерами являются самые разные типы естественных и искусственных пористых сред и многофазных материалов: 1) керамические и прочие фильтры для очистки воды, фильтрации чугуна, используемые в качестве адсорбатов и катализаторов [2]; 2) биоматериалы, создаваемые в том числе для протезирования [3]; 3) текстиль и бумага [4]; 4) топливные элементы [5]; 5) породы-коллекторы и проппанты для заполнения трещин гидроразрыва, важные для добычи углеводородов [6-8]; 6) почвогрунты, структура и состав которых определяет плодородие и защиту водных ресурсов от проникновения загрязнителей [9]. В настоящее время не вызывает сомнения, что микроструктура таких материалов и сред целиком определяет их физико-химические свойства, такие как, например, фильтрационные и прочностные характеристики, электрические, ёмкостные, диффузионные свойства, теплопроводность [10]. Под микроструктурой понимается распределение различных фаз (поры, зерна, металлы, флюиды и т.п.) в пространстве.

Существует множество методов получения как двух-, так и трехмерной информации о строении материала: РЭМ-микроскопия [11], шлифы/аншлифы, рентгеновская микротомография [6,12], FIB-SEM (focused ion beam-scanning electron microscopy) [13], конфокальная микроскопия. Последние три метода позволяют получать трехмерные данные о микроструктуре в различных масштабах, при этом нельзя выделить какой-либо метод как наилучший, т.к. у каждого есть свои ограничения по размеру образца и разрешению получаемых изображений, также все они имеют различную чувствительность к различным фазам, что может влиять на качество сегментации (выделения фаз на двух- и трехмерных изображениях). Полученные сегментированные данные о микроструктуре можно использовать для численного моделирования свойств материала с использованием богатого набора возможных решений и моделей. Например, можно определять следующие свойства: 1) проницаемость – решеточным методом Больцмана [14] или в сеточных моделях (pore-networks) [15], 2) теплопроводность – методом конечных элементов [4], 3) электрические свойства – конечно-разностным методом [16], 4) упругие свойства – методом конечных элементов [17], и т.п.

В связи с тем, что в некоторых случаях трехмерные изображения получить затруднительно ввиду проблем, обозначенных выше (ввиду того, что не может быть выполнено необходимое соотношение размер образца-разрешение, или же отсутствия сложного

и дорогого оборудования), была предложена реконструкция трехмерной микроструктуры по двумерным срезам [18]. Такая процедура выполнима при условии, что материал изотропен, т.е. его микроструктура в неизвестном сечении статистически не отличается от представленной на двумерном изображении. Данное направление получило значительное развитие, и были предложены самые различные методы реконструкций: 1) гауссовы поля (обрезание плоскостью поля со сходной двухточечной статистикой) [18], 2) мультиточечная статистика (поиск всех возможных комбинаций в окне заданного размера) [19], 3) последовательные методы (process-based method, упаковка частиц) [20], 4) алгоритм Yeong-Torquato [21,22] на основе корреляционных функций. Последний метод представляет особый интерес, так как в нем двумерная микроструктура описывается с помощью корреляционной функции (экспериментально полученной), а затем случайная трехмерная структура модифицируется перестановками с помощью оптимизационного алгоритма «отжига» (simulated annealing) до совпадения ее функции с экспериментальной. Таким образом можно провести процедуру реконструкции по любой гипотетической функции, полученной не экспериментально, а заданной исходя из некоторых соображений.

Основной целью настоящей работы является проверка возможности моделирования структуры пористого материала с желаемыми эффективными свойствами (на примере абсолютной проницаемости) по модельной корреляционной функции.

## 2. Основы моделирования структуры корреляционными функциями и процедуры сборки

Существует много различных корреляционных функций, применимых к описанию многофазных сред (кластерная, линейная, пор по размерам и др.) [10,23], однако, если не оговорено иначе, под этим понятием будем подразумевать вероятность нахождения  $n$  точек в одной и той же фазе ( $S_n$ ). Рассмотрим некоторую гипотетическую двухфазную среду в  $n$ -мерном евклидовом пространстве ( $\mathfrak{R}^d$ ). Рассчитать корреляционную функцию для такой среды можно следующим образом:

$$S_n^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \langle I^{(i)}(\mathbf{x}_1)I^{(i)}(\mathbf{x}_2)\dots I^{(i)}(\mathbf{x}_n) \rangle, \quad (1)$$

где  $\mathbf{x}$  – радиус-вектор, а  $I^{(i)}(\mathbf{x})$  – функция-индикатор для характеристики бинарной системы ( $i=1, 2$ ), определенная как

$$I^{(i)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in V_i, \\ 0, & \mathbf{x} \in \bar{V}_i, \end{cases} \quad (2)$$

где  $V_i \in \mathfrak{R}^d$  – объем, занятый одной из бинарных фракций, а  $\bar{V}_i \in \mathfrak{R}^d$  – другой. Для статистически стационарной среды  $n$ -точечная корреляционная функция зависит не от абсолютных координат, а от расстояний относительно друг друга, то есть

$$S_n^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = S_n^{(i)}(x_{12}, \dots, x_{1n}) \quad (3)$$

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

Очевидно, значение 1-точечной корреляционной функции равно объемной доле бинарной фракции  $i$ :

$$S_1^{(i)} = \langle I^{(i)}(\mathbf{x}) \rangle = \phi_i, \quad (4)$$

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

Корреляционная функция с  $n=2$  определяется как

$$S_2^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle I^{(i)}(\mathbf{x}_1)I^{(i)}(\mathbf{x}_2) \rangle \quad (5)$$

и является наиболее изученной функцией для описания случайных сред [24]. Данное выражение имеет смысл вероятности одновременного нахождения точек  $\mathbf{x}_1$  и  $\mathbf{x}_2$  в фазе  $i$ . Для статистически однородных сред функция зависит только от расстояния (3), а потому можно записать, что

$$S_2^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = S_2^{(i)}(\mathbf{r}), \quad (6)$$

где  $\mathbf{r} = \mathbf{x}_{12}$ . Для статистически однородной и изотропной среды корреляционная будет зависеть только от скалярного расстояния между точками, то есть

$$S_2^{(i)}(\mathbf{r}) = S_2^{(i)}(r). \quad (7)$$

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

$$S_2^{(2)}(\mathbf{r}) = S_2^{(1)}(\mathbf{r}) - 2\phi_1 + 1. \quad (8)$$

Автокорреляционная функция записывается как

$$\chi(\mathbf{r}) = S_2^{(1)}(\mathbf{r}) - \phi_1^2 = S_2^{(2)}(\mathbf{r}) - \phi_2^2, \quad (9)$$

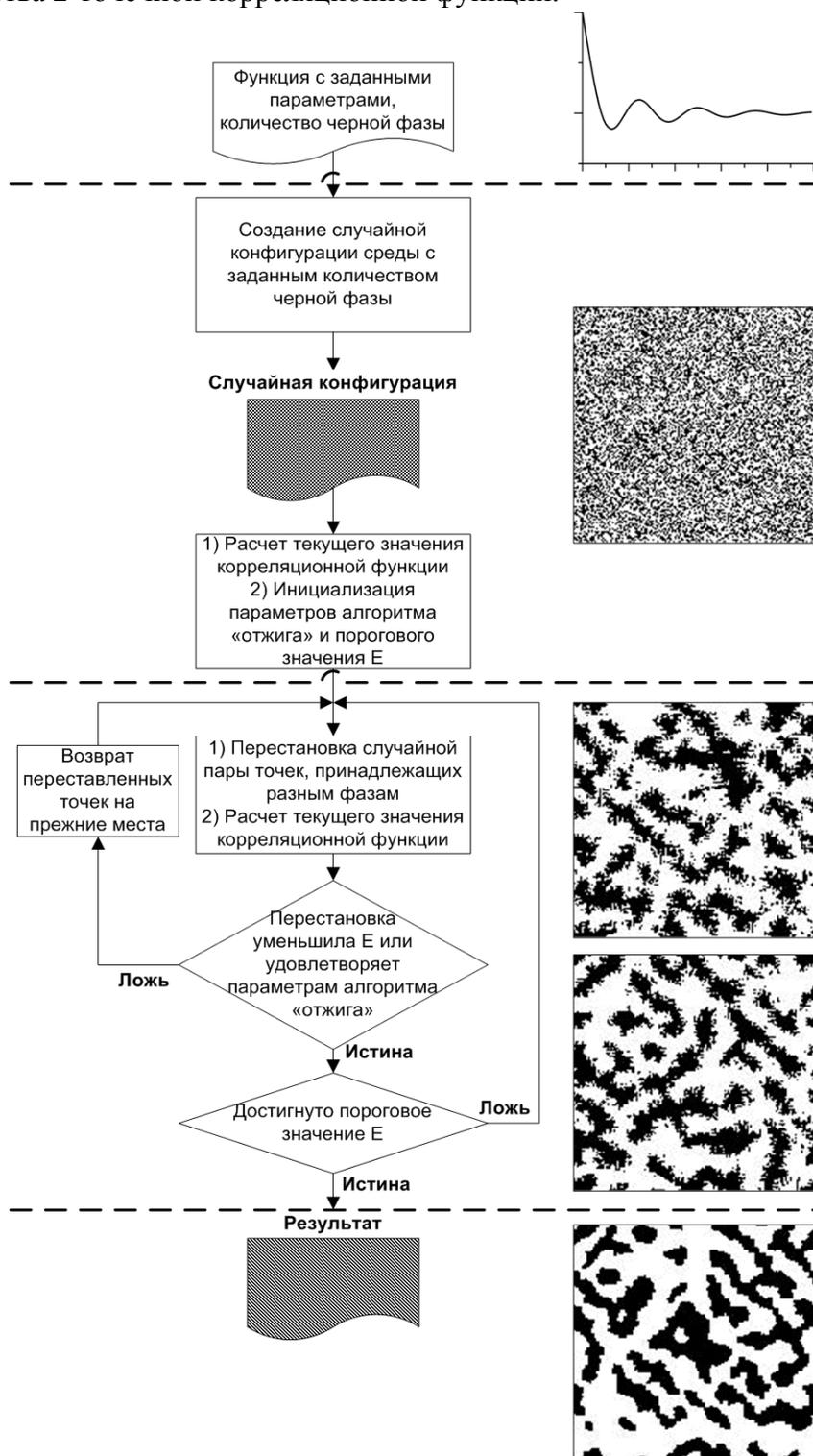
откуда видно, что данная корреляционная функция не различает фазы, т.е. улучшение описания среды за счет вычисления независимых корреляционных функций для различных фаз невозможно, что, однако, неверно для многих других функций.

Автоковариационная функция (нормированная через объемные доли каждой из фаз) может быть записана через автокорреляционную (9) функцию в виде

$$f(\mathbf{r}) = \frac{\chi(\mathbf{r})}{\phi_1\phi_2} = \frac{S_2^{(i)}(\mathbf{r}) - \phi_i^2}{\phi_1\phi_2}. \quad (10)$$

Такие функции обладают некоторыми свойствами, наиболее важными из которых можно считать необходимые условия реализуемости (то есть условия, при которых данная функция может быть реализована в виде двухфазной среды). Наиболее полный ана-

лиз таких свойств можно найти в работах [10,24]. Перечислим здесь лишь некоторые основные свойства 2-точечной корреляционной функции.



**Рис.1.** Блок-схема алгоритма моделирования структуры среды с заданными параметрами с использованием корреляционных функций.

Для  $\mathbf{r} = 0$  можно записать

$$S_2^{(i)}(\mathbf{0}) = \phi_i. \quad (11)$$

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

$$\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} S_2^{(i)}(\mathbf{r}) \rightarrow \phi_i^2. \quad (12)$$

Остальные свойства не являются основными и в целом характерны для функций среды, полученных при восстановлении методом «отжига». Таким образом, двухточечная корреляционная функция является наиболее изученной, для нее существует множество аналитических решений, применимых к упрощенным средам (например, пересекающиеся и непересекающиеся круги/сферы и пр. [10,25]).

Считается установленным фактом, что любая структура и ее свойства могут быть точно описаны бесконечным набором  $n$ -точечных корреляционных функций (1). Однако на практике вычисление корреляционных функций с  $n > 2$  сопряжено с множеством трудностей, связанных в основном с вычислительными ресурсами. В [21] авторы приводят доводы в пользу того, что даже уже при  $n = 3$  сложность расчетов не окупается точностью получаемой информации. Это приводило к тому, что на практике пользовались лишь функцией  $S_2$ . В последнее время было показано, что для описания гетерогенных сред недостаточно двухточечных корреляционных функций [26,27], что связано с некоторым количеством вырожденных состояний. Качество такого описания можно повышать за счет использования дополнительных функций, перечисленных выше [23,26].

Для начала рассмотрим случай сборки структуры по заданной корреляционной функции  $S_2$ . Разницу между статистическим описанием структуры двумя различными наборами функций можно рассчитать в виде суммы квадратов разностей между значениями функций:

$$E = \sum_i [S_2(r_i) - \hat{S}_2(r_i)]^2, \quad (13)$$

где  $S_2$  и  $\hat{S}_2$  – две различные функции (при выполнении процедуры сборки по заданной функции:  $S_2$  – заданная функция,  $\hat{S}_2$  – функция среды, полученной на каком-либо шаге процесса сборки, соответственно). Определенную таким образом «энергию»  $E$  можно рассматривать как некое состояние системы, для минимизации которой подходит метод «отжига», описанный ниже.

В случае исследования различных материалов и пористых сред данные о строении представляют в цифровом виде пикселей/вокселей. Для сборки достаточно взять случайную среду и начать переставлять в ней пиксели/воксели, на каждом шаге проверяя, как меняется энергия согласно уравнению (13) (рис.1). Однако из-за 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, когда вероятность того, что случайная перестановка принимается, записывается как

$$P(E_{old} \rightarrow E_{new}) = \begin{cases} 1, & \Delta E < 0, \\ \exp(-\Delta E / T), & \Delta E \geq 0, \end{cases} \quad (14)$$

где  $\Delta E = E_{new} - E_{old}$ . Начальная температура  $T$  (трактовка согласно распределению Больцмана в нижней части уравнения (14)) устанавливается так, чтобы вероятность при-

нения случайной перестановки при  $\Delta E \geq 0$  равнялась 0.5. Охлаждение системы, обратно пропорциональное логарифму в виде  $T(k) \propto 1/\ln(k)$ , должно привести к минимуму энергии, однако это потребует значительного времени, поэтому на практике используется более быстрый план охлаждения, а именно,  $T(k)/T(0) = \lambda^k$ , где  $\lambda$  меньше, но близко к 1 [21]. Результат сборки/реконструкции будет также зависеть от того, каким образом рассчитываются значения функций. Наиболее простым и не требующим серьезных затрат машинного времени является ортогональный алгоритм, предложенный в [21], когда вычисление функций  $S_2$  проводится только по ортогональным направлениям перемещением по области моделирования отрезка изменяющейся длины  $r$  ( $0 \leq r \leq N/2$ , где  $N$  – размер области моделирования) согласно уравнениям (5) и (7).

Случайная перестановка пикселей/вокселей приводит к значительному замедлению процедуры сборки/реконструкции, поэтому после приобретения конструируемой средой своего примерного очертания имеет смысл перестановка отдельно стоящих пикселей/вокселей на границе раздела между фазами. Для ускорения процедуры мы используем оптимизацию выбора точек для перестановки [23], согласно которой случайным образом выбирается только одна точка, принадлежащая моделируемой среде. Затем также случайным образом выбираются два направления, в которых начинается поиск пары ближайших точек, удовлетворяющих следующим условиям: точки должны лежать на границе раздела фаз и принадлежать двум различным фазам.

Еще одним важным моментом сборки/реконструкции является остановка процесса, то есть условие, когда мы считаем, что достигли необходимой точности. Существует два основных подхода: 1) выбор порогового значения  $\Delta E$ , при котором процесс считается завершенным, или 2) некоторое значительное количество не принятых перестановок (например,  $10^5$ ) подряд. Первый метод кажется более предпочтительным, так как позволяет оценить количественно степень соответствия двух сред (рис.1). Данный показатель энергии может рассматриваться как среднеквадратическая ошибка метода при сборке/реконструкции, а также использоваться для оценки фракции неправильно расставленных пикселей/вокселей [28].

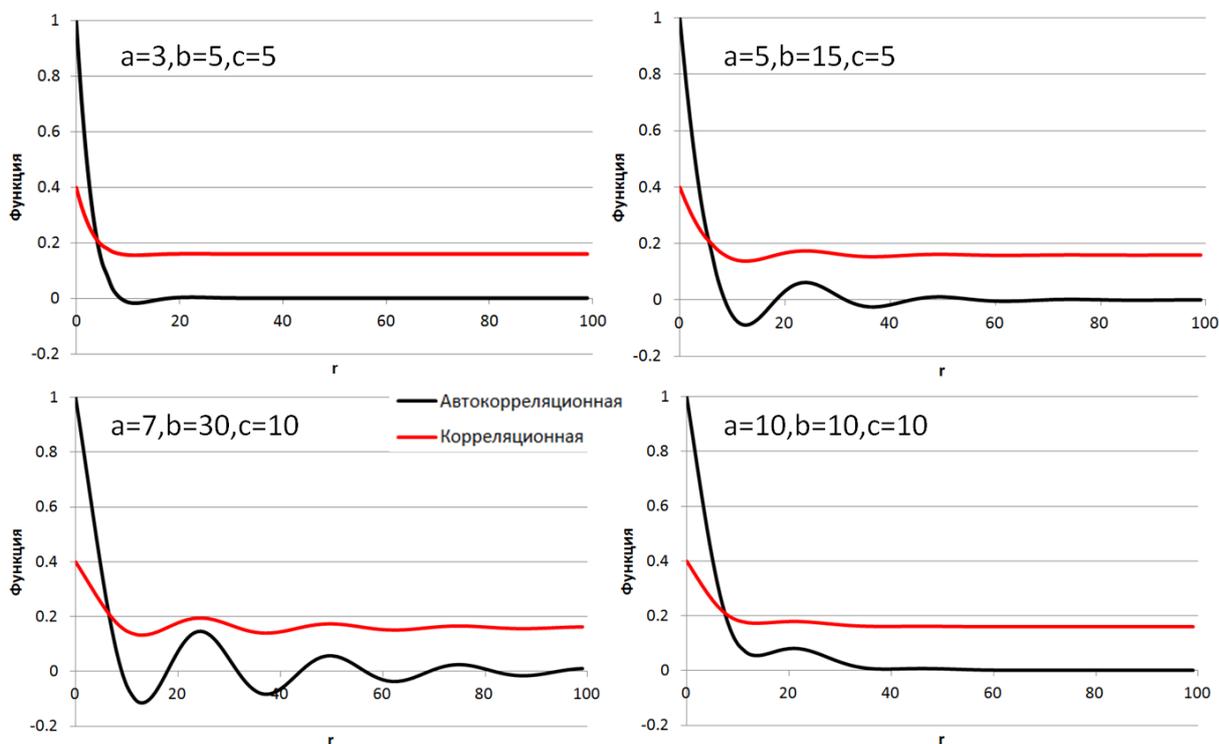
### 3. Объекты и методы

В качестве исходных данных для сборки использовали аналитически заданные корреляционные функции, полученные параметризацией следующего уравнения [28]:

$$f(r) = \alpha_1 \exp(-r/a) + \alpha_2 \exp(-r/b) \cos(qr + \psi) + \alpha_3 \begin{cases} (1-r/c)^2, & 0 \leq r \leq c, \\ 0, & r > c. \end{cases} \quad (15)$$

Данное выражение представляет собой суперпозицию затухающей, осциллирующей и полиномиальной функций с коэффициентами  $\alpha$  такими, что  $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$ . Мы фиксируем данные коэффициенты 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  $a, b, c$  изменяются от 3 до 15, от 5 до 30 и от 5 до 20, соответственно (см. табл.1). Пропорции бинарных фаз при сборке равнялись  $S_2^{(черная)}(0) = 0.4$  и  $S_2^{(белая)}(0) = 0.6$ . Примеры аналитически заданных автокорреляционных (и соответствующих им корреляционных функций с  $\phi = 0.4$ ) функций, рассчитанных согласно (15) и принятым параметрам, показаны на рис.2. Таким образом, мы получаем 60 различных

функций, заданных аналитически, которые используются для стохастической реконструкции трехмерных структур методом Yeong-Torquato для расчетной области  $300^3$  вокселей с параметрами максимальной длины корреляции 120 пикселей, параметром скорости охлаждения  $\lambda = 0.999$ , пороговой энергии  $\Delta E = 10^{-7}$ .



**Рис.2.** Примеры автокорреляционной и корреляционной (количество фазы 0.4) функций, описанных аналитически с помощью (15) и коэффициентов  $a, b, c$ , указанных на каждом графике.

Для каждого трехмерного образца, собранного по аналитически заданной корреляционной функции, рассчитывалась эффективная проницаемость методом моделирования в масштабе пор на основе численного решения уравнения Стокса конечно-разностным методом с четвертым порядком точности. Мы моделируем 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:

$$\begin{cases} \eta \Delta \mathbf{v} - \nabla \mathbf{p} = 0, \\ \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \end{cases} \quad (16)$$

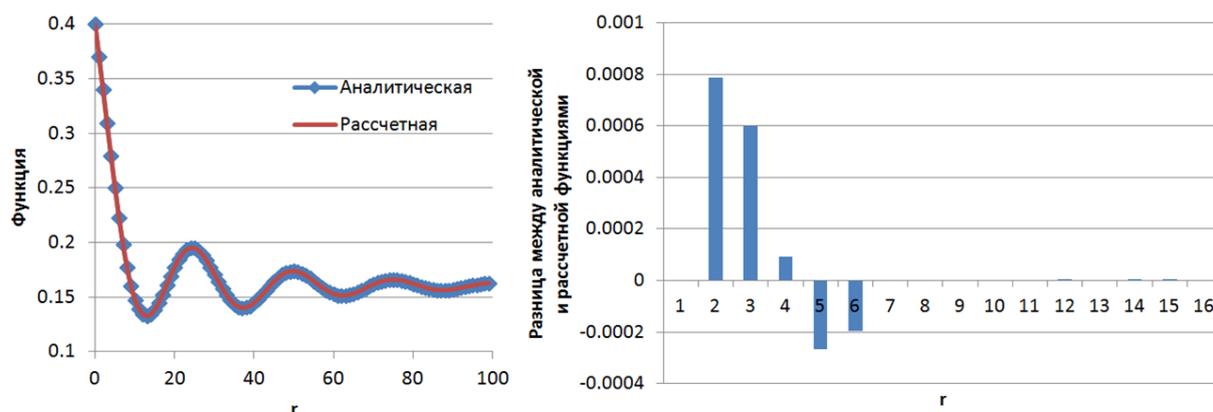
где  $\mathbf{v} = (\vec{v}_x, \vec{v}_y, \vec{v}_z)$  – поле скоростей,  $\eta$  – вязкость флюида,  $p$  – поле давлений. На основе полученных в результате моделирования полей скоростей течения однофазного флюида эффективная проницаемость рассчитывается согласно уравнению Дарси

$$K = \frac{\eta \langle v \rangle S_{eff}}{S}, \quad (17)$$

где  $\langle v \rangle$  – средняя скорость в заданном сечении, например, выходном,  $S_{eff}$  – его эффективная площадь, равная площади поперечного сечения порового пространства, а  $S$  – это полная площадь поперечного сечения расчетной области. Обработка изображений и моделирование проводились на современном персональном компьютере с помощью программных решений авторов. Проницаемость определялась по трем ортогональным направлениям, но из-за близости получаемых значений мы используем среднее значение.

#### 4. Результаты и обсуждение

Все реконструкции сред по 60 различным корреляционным функциям, заданным аналитически, были успешно получены с помощью метода Yeong-Torquato (для наглядности двумерные срезы некоторых конструкций показаны в табл.1). Процесс сборки занимал от 6 до 56 часов (последняя цифра представляет собой максимальное время ожидания сборки нереализуемых корреляционных функций), 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 функции, описанной аналитически. 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  $E$ ), для некоторых из них точность в  $10^{-7}$  не могла быть достигнута (такие образцы обведены рамкой в табл.1).



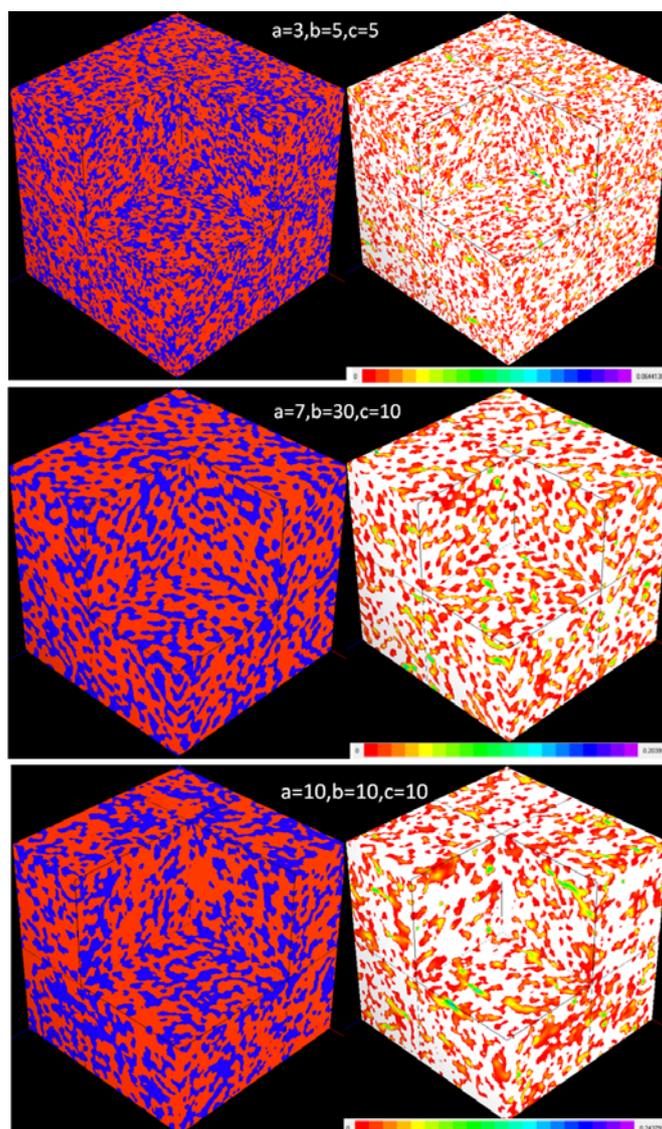
**Рис.3.** Значения корреляционной функции, заданной аналитически, по которой проводилась сборка структуры с параметрами  $a=7$ ,  $b=30$ ,  $c=10$ , и результирующей функции у структуры, полученной после завершения процедуры реконструкции с точностью  $1.09 \times 10^{-6}$  (график слева). Справа отдельно показаны численные различия между двумя функциями на левом графике.

При более близком рассмотрении оказалось, что заданная аналитически и получаемая методом «отжига» корреляционные функции для этих образцов не сходились лишь при малых  $r$  (рис.3) ввиду невыполнения условия отрицательной производной в точке  $r(0)$  [24].

Таким образом, уравнение (15) 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  $E=10^{-7}$ , а совпадение заданных и результирующих функций было почти точным и не различимым на графиках (а потому не показано).

**Таблица 1.** Двумерные срезы ( $300^2$  пикселей) некоторых трехмерных реконструированных образцов, полученных с использованием различных параметров  $a$ ,  $b$  и  $c$  в уравнении (15). Рамкой помечены образцы, для которых не получилось достичь необходимой точности в  $10^{-7}$  (см. рис.2).

| $a$ | $b$      | 5 | 10 | 15 | 30 |
|-----|----------|---|----|----|----|
| 3   | $c$<br>5 |   |    |    |    |
| 5   | 10       |   |    |    |    |
| 7   | 10       |   |    |    |    |
| 10  | 10       |   |    |    |    |
| 15  | 5        |   |    |    |    |
| 15  | 20       |   |    |    |    |

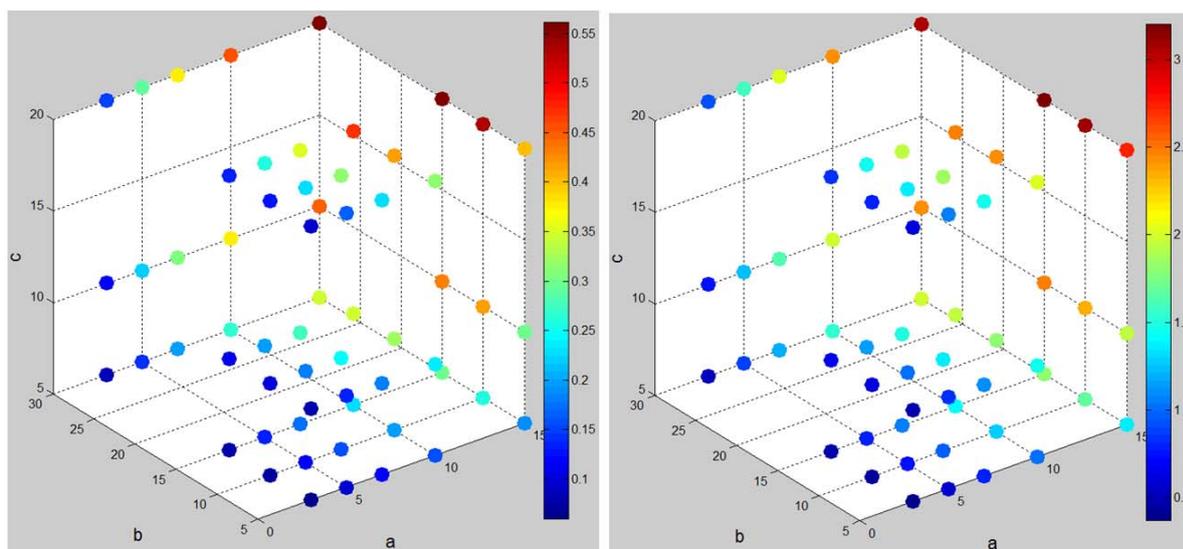


**Рис.4.** Трехмерные визуализации структуры (слева) и полей скоростей течения флюида в их поровом пространстве (пористость 0.4, справа) для трех образцов с функциями, показанными на рис.2.

Примеры трехмерных структур, полученных по функциям, представленным в табл.1, показаны на рис.4 (слева). На этом же рисунке справа показаны результаты расчетов поля скоростей течения флюида при низких числах Рейнольдса, по которым согласно (17) были получены значения эффективной проницаемости. Данные о проницаемости всех образцов представлены на рис.5. Детальный анализ влияния параметров 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.1) – при увеличении всех трех параметров наблюдается рост линейного размера каждой из фаз.

Визуализация получаемых значений в пространстве этих трех параметров (рис.5) указывает на возможность подбора параметров описанной аналитически 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. Во-первых, известно, что использование только ортогональных функций согласно методике Yeong-Torquato приводит к анизотропии по диагональным направлениям [29]. Во-вторых, в некоторых случаях, как показано на рис.2, уравнение (15) может приводить к получению физически нереализуемых функций. В будущих работах мы планируем проводить сборку с использованием не только ортогональных, но и диагональных направлений [30], а также других аналитических описаний, отличных от уравнения (15), или же его модификаций с использованием большего количества суперпозиций различных простых функций. Особый интерес вызывает сравнение рассчитанных напрямую методами моделирования в масштабе пор в образцах эффективных свойств с теоретическими, полученными с помощью точных пределов [10].



**Рис.5.** Влияние параметров  $a$ ,  $b$  и  $c$  заданной аналитически функции в уравнении (15) 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. Выводы

Трехмерные структуры гипотетических бинарных материалов были сконструированы по корреляционным функциям, заданным аналитически (полученными из общего уравнения с тремя изменяемыми параметрами). Все сконструированные методом «отжига» структуры были различны для различающихся корреляционных функций. Для всех полученных структур были рассчитаны значения эффективной проницаемости. Результаты исследования указывают на возможность подбора параметров заданной аналитически функции таким образом, чтобы получать структуры с желаемым строением порового пространства и значением проницаемости, что может быть использовано для решения множества фундаментальных и прикладных задач материаловедения и смежных наук.

Авторы выражают благодарность Брендану Спиту (CSIRO Land and Water) и проф. Воеводину В.В. (НИВЦ МГУ) за помощь в организации компьютерных вычислений. Мы благодарим анонимного рецензента, который способствовал значительному улучшению общей структуры статьи и качества преподнесения материала.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *S. Torquato*. Optimal design of heterogeneous materials // *Annual Review of Materials Research*, 2010, v.40, p.101-129.
2. *T. Ohji, M. Fukushima*. Macro-porous ceramics: processing and properties // *International Materials Reviews*, 2012, v.57, №2, p.115-131.
3. *A.C. Jones, C.H. Arns, D.W. Hutmacher, B.K. Milthorpe, A.P. Sheppard, M.A. Knackstedt*. The correlation of pore morphology, interconnectivity and physical properties of 3D ceramic scaffolds with bone ingrowth // *Biomaterials*, 2009, v.30, p.1440-1451.
4. *M. Sejnoha, J. Zeman*. Micromechanical modeling of imperfect textile composites // *International Journal of Engineering Science*, 2008, v.46, №6, p.513-526.
5. *K.N. Grew, W.K.S. Chiu*. A review of modeling and simulation techniques across the length scales for the solid oxide fuel cell // *Journal of Power Sources*, 2012, v.199, p.1-13.
6. *Д.В. Корост, Г.А. Калмыков, В.О. Япаскурт, М.К. Иванов*. Применение компьютерной микротомографии для изучения строения терригенных коллекторов // *Геология нефти и газа*, 2010, №2, с.36-42;  
*D.V. Korost, G.A. Kalmykov, V.O. Iapaskurt, M.K. Ivanov*. Primenenie kompiuternoi mikrotomografii dlia izucheniia stroeniia terrigennykh kollektorov // *Geologiya nefi i gaza*, 2010, №2, s.36-42.
7. *D.V. Korost, K.M. Gerke*. 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.
8. *K.M. Gerke, R.V. Vasilyev, D.V. Korost, M.V. Karsanina, N. Balushkina, R. Khamidullin, G.A. Kalmykov, D. Mallants*. Determining Physical Properties of Unconventional Reservoir Rocks: from Laboratory Methods to Pore-Scale Modeling // *SPE 167058 Technical paper*, presented at SPE Unconventional Resources Conference and Exhibition, 11-13 November 2013, Brisbane, Australia.
9. *К.М. Герке, Е.Б. Скворцова, Д.В. Корост*. Томографический метод исследования порового пространства почв: состояние проблемы и изучение некоторых почв России // *Почвоведение*, 2012, №7, с.781-791;  
англ. пер.: *K.M. Gerke, E.B. Skvortsova, D.V. Korost*. Tomographic method of studying soil pore space: Current perspectives and results for some Russian soils // *Eurasian Soil Science*, 2012, № 7. p.700-709.
10. *S. Torquato*. *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer Verlag. New York, 2002, 701 p.
11. *В.И. Осипов, В.Н. Соколов, Н.А. Румянцева*. Микроструктура глинистых пород. – М.: Недра, 1989, 211 с.;  
*V.I. Osipov, V.N. Sokolov, N.A. Rumiantseva*. Mikrostruktura glinistykh porod. – М.: Nedra, 1989, 211 s.
12. *К.М. Герке, М.В. Карсанина, Е.Б. Скворцова*, Описание и реконструкция строения порового пространства почвы с помощью корреляционных функций // *Почвоведение*, 2012, №9, с.962-973;  
англ. пер.: *K.M. Gerke, M.V. Karsanina, E.B. Skvortsova*. Description and reconstruction of the

- soil pore space using correlation functions // *Eurasian Soil Science*, 2012, 45(9): 861-872.
13. *N. Vivet, S. Chupin, E. Estrade, T. Piquero, P.L. Pommier, D. Rochais, E. Bruneton*. 3D microstructural characterization of a solid oxide fuel cell anode reconstructed by focused ion beam tomography // *Journal of Power Sources*, 2011, v.196, p.7541-7549.
  14. *L. Talon, D. Bauer, N. Gland, S. Youssef, H. Auradou, I. Ginzburg*. Assessment of the two relaxation time Lattice-Boltzmann scheme to simulate Stokes flow in porous media // *Water Resources Research*, 2012, 48: W04526.
  15. *P.H. Valvatne, M.J. Blunt*. Predictive pore-scale modeling of two phase flow in mixed wet media // *Water Resources Research*, 2004, 40: W07406.
  16. *P.M. Adler, C.G. Jacquin, J.-F. Throvert*. The formation factor of reconstructed porous media // *Water Resources Research*, 1992, v.28, p.1571-1576.
  17. *D. Makarinska, B. Gurevich, R. Ciz, C.H. Arns, M.A. Knackstedt*. Finite element modeling of the effective elastic properties of partially saturated rocks // *Computer and Geosciences*, 2008, v.34, p.647-657.
  18. *J.A. Quiblier*. A new three-dimensional modeling technique for studying porous media // *Journal of Colloid and Interface Science*, 1984, v.98, p.84-102.
  19. *H. Okabe, M.J. Blunt*. Pore space reconstruction of vuggy carbonates using microtomography and multiple-point statistic // *Water Resour. Res.*, 2007, v.43, p.0043-1397.
  20. *P.E. Øren, S. Bakke*. Process based reconstruction of sandstones and prediction of transport properties // *Transport in Porous Media*, 2002, v.46, p.311-314.
  21. *C.L.Y. Yeong, S. Torquato*. Reconstructing random media // *Phys. Rev. E.*, 1998, v.57, p.495-506.
  22. *C.L.Y. Yeong, S. Torquato*. Reconstructing random media. II. Three dimensional media from two dimensional cuts // *Phys. Rev. E.*, 1998, v.58, p.224-233.
  23. *P. Čapek, V. Hejtmánek, J. Kolafa, I. Brabec*. Transport properties of stochastically reconstructed porous media with improved pore connectivity // *Transp. Porous. Med.*, 2011, v.88, p.87-106.
  24. *Y. Jiao, F.H. Stillinger, S. Torquato*. Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions: Basic principles // *Phys. Rev. E.*, 2007, 76: 031110.
  25. *S. Torquato*. Random heterogeneous media: Microstructure and improved bounds on effective properties // *Appl. Mech. Rev.*, 1991, v.44, p.37-76.
  26. *Y. Jiao, F.H. Stillinger, S. Torquato*. A superior descriptor of random textures and its predictive capacity // *Proceedings of National Academy of Science*, 2009, v.106: 17634.
  27. *Y. Jiao, F.H. Stillinger, S. Torquato*. Geometrical ambiguity of pair statistics. II. Heterogeneous media // *Phys. Rev. E.*, 2010, 82: 011106.
  28. *Y. Jiao, F.H. Stillinger, S. Torquato*. Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions. II. Algorithmic details and applications // *Phys. Rev. E.*, 2008, 77: 031135.
  29. *C. Manwart, R. Hilfer*. Reconstruction of random media using Monte-Carlo methods // *Phys. Rev. E.*, 1999, 59: 5596-5599.
  30. *K.M. Gerke, M.V. Karsanina, R.V. Vasilyev, D. Mallants*. Improving pattern reconstruction using directional correlation functions // *Europhysics Letters*, 2014, 106 66002.