

УДК: 519.6

Оптимизационный подход к имитационному моделированию микроструктур

В. В. Мизгулин^{1,а}, В. В. Косульников², Р. М. Кадушников²

¹ Уральский федеральный университет,
Россия, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

² ООО «СИАМС»,
Россия, 620078, г. Екатеринбург, ул. Коминтерна, д. 16, оф. 604

E-mail: ^а mizgulin@gmail.com

Получено 19 июня 2013 г.,
после доработки 13 сентября 2013 г.

В работе предложен оптимизационный подход к имитационному моделированию микроструктур. Решены задачи оптимизации функции пористости, поиска оптимальной модели гранулометрического состава и введен критерий качества моделирования. Проведена проверка адекватности предложенных методов на примерах и предложена регрессионная модель качества имитационного моделирования микроструктур. Актуальным приложением предложенного подхода является задача 3D-реконструкции микроструктуры зерна. Полученные результаты дают основания для продолжения исследований в выбранном направлении.

Ключевые слова: имитационное моделирование микроструктур, плотная упаковка, оптимизация, 3D-реконструкция

The optimization approach to simulation modeling of microstructures

V. V. Mizgulin^{1,а}, V. V. Kosulnikov², R. M. Kadushnikov²

¹ Ural federal university, 19 Mira st., Yekaterinburg, 620002, Russia

² SIAMS, 604 office, 16 Komintern st., Yekaterinburg, 620078, Russia

Abstract. — The paper presents an optimization approach to microstructure simulation. Porosity function was optimized by numerical method, grain-size model was optimized by complex method based on criteria of model quality. Methods have been validated on examples. Presented new regression model of model quality. Actual application of proposed method is 3D reconstruction of core sample microstructure. Presented results suggest to prolongation of investigations.

Keywords: microstructure simulation, dense packing, optimization, 3d reconstruction

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2013, vol. 5 no. 4, pp. 597–606 (Russian).

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (ГК №14514114042).

© 2013 Вячеслав Владимирович Мизгулин, Всеволод Владимирович Косульников, Радий Михайлович Кадушников

Введение

Основной проблемой математического описания произвольной микроструктуры является дефицит исходных данных о ее гранулометрическом составе, то есть неполнота сведений о расположении микрочастиц в пространстве и их геометрической форме [Мизгулин и др., 2012]. В результате построение модели упаковки микрочастиц, с достаточной точностью имитирующей микроструктуру, сводится к задаче поиска значений блока входных параметров модели, отвечающего за характеристики гранулометрического состава.

Актуальным приложением имитационного моделирования микроструктур является задача 3D-реконструкции микроструктуры зерна породы. Поскольку исследования зерна входят в число наиболее затратных этапов разработки месторождений нефти и газа, то даже частичная замена натуральных экспериментов имитационными может существенно сэкономить денежные средства и время. Последние достижения в этой области связаны с развитием технологий компьютерной микротомографии [Рассел, 2006]. Учитывая технические, организационные и финансовые сложности, связанные с данными технологиями, необходимо развитие альтернативных способов исследования 3D-микроструктуры зерна. Стоит отметить, что моделирование зерна будет экономически выгодно только при условии минимизации затрат на проведение натуральных экспериментов. В данной работе будем использовать в качестве исходных данных оптические изображения шлифов, поскольку метод цифровой микроскопии, используемый для их получения, является наиболее распространенным и доступным. Кроме того, дополним набор исходных данных коэффициентом пористости образца, который легко может быть измерен методом гидростатического взвешивания.

Конечной целью работы является новое качество системы имитационного моделирования микроструктуры зерна (далее СИМ МК), которое позволит частично заменить натурные исследования фильтрационно-емкостных свойств зерна имитационными экспериментами, сократив тем самым временные и финансовые затраты при разработке месторождений нефти и газа. В данной статье рассмотрим вопрос применимости оптимизационного подхода к имитационному моделированию микроструктур.

Модели и методы

Оптимизация функции пористости

Модифицируем метод упаковки сферополиэдров [Мизгулин и др., 2012] (рис. 1) путем добавления процедуры дилатации, чтобы учесть деформацию микрочастиц, наблюдаемую на изображениях шлифа. В результате данной процедуры модель микроструктуры будет описываться взаимопроникающими сферополиэдрами, другими словами, каждое из зерен будет менять свою форму. Аналогичный подход уже использовался ранее в работах [Dong, Blunt, 2009; Garcia et al., 2009]. Математическое описание дилатированного сферополиэдра будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} SP(O, p_1, p_2, \dots, p_M, r, K_d) &= \{O\} \oplus l_1 \oplus \dots \oplus l_M \oplus S, \\ l_i &= \{tp_i : -\frac{1}{2} \leq t \leq \frac{1}{2}\} i = 1 \dots M, \\ S &= \{r : |r| \leq r(1 + K_d)\}, \\ O &\in R^3, p_i \in R^3, r \in R. \end{aligned} \quad (1)$$

С помощью дилатации оптимизируем абсолютную ошибку моделирования объемной пористости. Для этого введем общий параметр дилатации для всех сферополиэдров в упаковке:

$$\Delta K_n(SP_1, SP_2, \dots, SP_n, K_d) \rightarrow \min(K_d \in [K_d^{\min}, K_d^{\max}]), \quad (2)$$

где:

1. ΔK_n — функция абсолютной ошибки моделирования объемной пористости плотной упаковки сферополиэдров;
2. n — количество сферополиэдров в упаковке;
3. K_d — параметр дилатации;
4. K_d^{\min}, K_d^{\max} — допустимые границы дилатации.

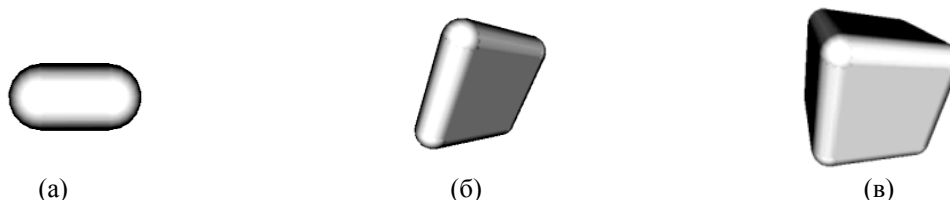


Рис. 1. Примеры сферополиэдров: (а) — сфероцилиндр; (б) — сфероквадрат; (в) — сферокуб

Поскольку целевая функция на исследуемом отрезке является непрерывной, нелинейной и одномодальной, для решения задачи оптимизации будем использовать метод бисекции. Для обработки полученной модели получим бинарное цифровое изображение микроструктуры заданного размера [Рассел, 2006]. В нем воксели с интенсивностью 1 соответствуют областям пространства, лежащим внутри зерен породы, а воксели с интенсивностью 0 принадлежат поровому пространству. Пористость при этом рассчитаем как отношение количества вокселей с нулевой интенсивностью к общему количеству вокселей. Применение модифицированного метода упаковки сферополиэдров позволит моделировать микроструктуру зерна с требуемой пористостью в соответствии с исходными данными. Изображения сечения модели представлены на рисунке 2а, б (до и после дилатации соответственно).

Оптимизация модели гранулометрического состава

Получим количественные характеристики изображений шлифа с помощью анализатора фрагментов микроструктуры твердых тел «Керн С7» (свидетельство об утверждении типа средств измерений № 40862 от 01.11.2010), в частности максимальные и минимальные проекции каждой микрочастицы. Рассчитаем для каждой микрочастицы значение фактора удлинения, равное отношению минимальной и максимальной проекций. В итоге получим функции распределения количества частиц по максимальным проекциям и факторам формы. Два этих распределения будут являться эталонными при оценке качества имитационных моделей микроструктуры.

Сравнение изображений сечений модели и шлифа осложняется в результате выполнения процедуры дилатации, поскольку встает вопрос выделения границ зерен, проникших друг в друга на этапе дилатации (рис. 2б). В случае упаковки сфер данная задача решается с помощью полиэдров Вороного. Для сепарации микрочастиц в упаковке дилатированных сферополиэдров предлагается следующая процедура, включающая пять этапов:

- 1) поиск пересечений сферополиэдров в сечении;
- 2) построение бинарного изображения сечения, где 1 — пересечения сферополиэдров, 0 — прочие области (рис. 2в);
- 3) построение скелетона [Blum, 1967] по изображению, полученному на этапе 2 (рис. 2г);
- 4) построение бинарного изображения сечения, где 1 — микрочастицы, 0 — поры (рис. 2б);
- 5) наложение изображения скелетона (этап 3) на изображение сечения модели (этап 4) (рис. 2д).

Наложение скелетона на изображение сечения модели следует выполнять с помощью процедуры логического побитового умножения, предварительно инвертировав скелетон. Полученное изображение далее анализируется с помощью «Керн С7», в результате чего измеряются

статистические параметры: средние значения максимальных проекций и факторов формы микрочастиц, а также соответствующие им дисперсии. Соответствующие распределения сохраняются в дискретном виде для последующего сравнения с исходными данными.

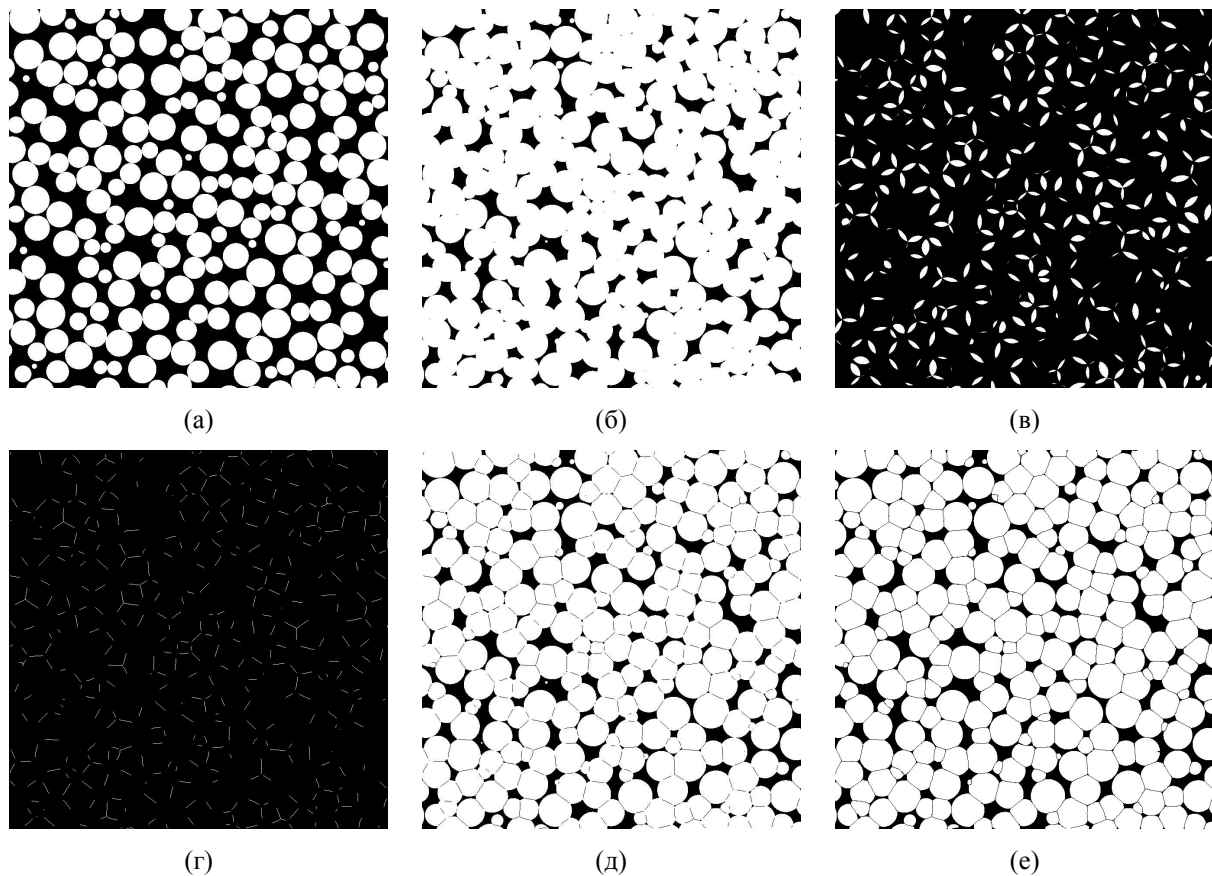


Рис. 2. Иллюстрации к алгоритму разделения частиц: (а) — сечение эталонной модели до дилатации; (б) — сечение эталонной модели после дилатации без сегментации зерен; (в) — выделенные области пересечения частиц; (г) — скелетон, построенный по изображению 2в; (д) — наложение инвертированного скелетона 2г на сечение эталонной модели 2б; (е) — сечение эталонной модели с сегментацией зерен (после фильтрации, выполненной в анализаторе «Керн С7»)

При сравнении функций распределений, полученных по модели, с эталонными распределениями, полученными по шлифу, необходимо учитывать ряд критериев. Во-первых, поскольку вид функций распределения может быть разным, следует проверить корреляцию. Для случая больших дисперсий необходима проверка средних значений. Дисперсия также является важным критерием сравнения. Будем считать модель верифицированной только в случае удовлетворения всем критериям. Введем функцию качества в соответствии с предъявленными требованиями:

$$f(a_1(x), a_2(x), a_3(x), b_1(x), b_2(x), b_3(x)) = a_1^{p_1}(x) \cdot a_2^{p_2}(x) \cdot a_3^{p_3}(x) \cdot b_1^{p_4}(x) \cdot b_2^{p_5}(x) \cdot b_3^{p_6}(x), \quad x \in X, \quad (3)$$

где

p_i — весовые коэффициенты,

a_1 — коэффициент корреляции для распределений размеров микрочастиц;

a_2 — относительная погрешность средних размеров микрочастиц;

a_3 — относительная погрешность дисперсии размеров микрочастиц;

b_1 — коэффициент корреляции для распределений факторов удлинения;
 b_2 — относительная погрешность среднего значения фактора удлинения;
 b_3 — относительная погрешность дисперсии фактора удлинения,
 X — n -мерное пространство поиска входных параметров.

Эта функция зависит от значений входных параметров модели, тем не менее критерий (3) не дает представления о зависимости функции качества от входных аргументов в явном виде.

Чтобы ограничить пространство поиска, для каждого компонента необходимо задать диапазоны значений геометрических характеристик. Предположим, что статистические параметры, измеренные на изображениях шлифа, отклоняются от объемных статистических параметров гранулометрического состава не более чем на $\alpha\%$. Тогда пространство поиска можно ограничить системой неравенств вида:

$$(1 - \alpha/100)x_i^{2d} \leq x_i^{3d} \leq (1 + \alpha/100)x_i^{2d}, \quad (4)$$

где: x_i^{2d} — значение характеристики, полученное в результате 2D-анализа, x_i^{3d} — искомое значение той же характеристики в 3D-пространстве.

Сформулируем задачу 3D-реконструкции:

Необходимо найти такое значение $x = x_0, x \in X$, что

$$f(a_1(x), a_2(x), a_3(x), b_1(x), b_2(x), b_3(x)) \rightarrow \max \quad (5)$$

в заданной области (4).

Учитывая многообразие параметров имитационного моделирования микроструктуры зерна и их комбинаций, поиск оптимального качества нельзя свести ни к какой классической задаче, поскольку ситуация осложнена следующими факторами:

- неизвестен характер зависимости функции качества от блока входных параметров в пространстве поиска;
- размерность пространства поиска растет пропорционально числу компонент микроструктуры зерна;
- для расчета одного значения функции качества необходимо полностью построить соответствующую модель микроструктуры.

Предлагается следующий алгоритм оптимизации модели гранулометрического состава:

1. вычисление набора экспериментальных значений функции качества в заданном пространстве поиска при фиксированных исходных данных;
2. получение параметрической оценки функции качества $f = f(x)$, $x \in X$ путем решения задачи регрессионного анализа полученных на этапе 1 данных по известной регрессионной модели целевой функции;
3. решение задачи оптимизации найденной на этапе 2 функции $f(x)$ для поиска локального максимума в заданном пространстве поиска.

На этапе 1 необходимо вычислить m значений функции качества, где m зависит от размерности пространства поиска. Одним из возможных методов получения набора экспериментальных значений является перебор входных параметров по сетке, то есть

$$X_i = x_0 + kx_s, \quad k = 0, 1 \dots k_n, \quad x_0 = \min(X^i), \quad x_0 + k_n x_s = \max(X^i), \quad X^i \subset X, \quad (6)$$

где k_n — необходимый размер сетки, x_s — шаг по сетке. Преимуществом этого метода является полнота генерируемой информации, однако с увеличением размерности пространства поиска число необходимых экспериментов растет в геометрической прогрессии, что требует большого количества машинного времени.

На этапе 2 необходимо решить задачу подбора коэффициентов регрессионной модели целевой функции одним из известных численных методов (например, методом Левенберга—

Марквардта). Необходимым условием для этого этапа является задание регрессионной модели; в данной работе на основании характера полученных данных такая модель предложена в разделе «Вычислительные эксперименты».

На этапе 3 требуется выполнить оптимизацию известной (полученной на этапе 2) функции одним из численных методов. Выбор метода оптимизации будет зависеть от вида регрессионной модели целевой функции.

Для проверки адекватности предложенного подхода предлагается использовать в качестве исходных данных изображения сечений эталонных моделей микроструктур. По таким моделям будем также рассчитывать объемную пористость, чтобы зафиксировать параметр дилатации. Сравнение сечений эталонных моделей с сечениями других моделей из некоторого допустимого множества в соответствии с предложенной функцией качества даст представление о предпочтительных видах целевой функции и применимых методах оптимизации.

Вычислительные эксперименты

Первым этапом проводились однофакторные вычислительные эксперименты. В качестве эталона использовалась плотная стохастическая упаковка шаров с нормальным распределением размеров и дилатацией (среднее значение максимальной проекции зерен $\mu_{\max \text{ proj}} = 0.8$; дисперсия среднего значения максимальной проекции зерен $\sigma_{\max \text{ proj}} = 0.3$; фиксированная пористость, $K_n = 10\%$). Изображение фрагмента сечения эталонной модели представлено на рисунке 2б. Параметры пробных моделей гранулометрического состава задавали следующими отрезками:

- $[0.3, 1.3]$ при варьировании среднего значения максимальной проекции;
- $[0, 0.6]$ при варьировании дисперсии максимальной проекции.

На рисунках 3 и 4 приведены графики экспериментальной зависимости функции качества от блока входных параметров. На этом этапе была предложена следующая регрессионная модель:

$$Q(x) = Ax^2 + Bx + C, \quad (7)$$

где x — варьируемый параметр.

Эта модель с высокой степенью достоверности (0.92 и 0.93 при варьировании среднего размера частиц и дисперсии соответственно) описала экспериментальные данные. В таблице 1 приведены соответствующие результаты экспериментов: значения относительной ошибки, достоверности аппроксимации. Также приведены значения предсказанного (полученного по параметрическому уравнению в точке его максимума) и рассчитанного (по результатам построения модели микроструктуры с входными данными, полученными после регрессионного анализа) качества моделирования

Убедившись в адекватности выбранного метода в случае одномерной области поиска, перейдем к рассмотрению исходной задачи целиком — восстановления трехмерных статистических параметров частиц исследуемой эталонной упаковки. Для упаковки шаров пространство поиска будет иметь два измерения — среднее значение максимальной проекции, а также ее дисперсия. Будем использовать ту же упаковку в качестве эталона. Воспользуемся методом равномерного поиска в заданной области.

Для аппроксимации трехмерной поверхности модель полинома второй степени оказалась неприменима из-за малой достоверности аппроксимации (0.56). Исходя из характера полученной поверхности было предложено следующее параметрическое уравнение:

$$Q(x) = \exp\left(-\sum_i P_i^{(2)}(x_i)\right) + \sum_i N_i^{(2)}(x_i), \quad (8)$$

где x_i — варьируемые параметры (в данном случае это средний размер частиц и его дисперсия), $P_i^{(2)}, N_i^{(2)}$ — полиномы второй степени. С использованием такой регрессионной модели

достоверность достигает достаточно высоких значений (0.93). Внешний вид экспериментальной и регрессионной поверхностей приведен на рисунках 5а, б.



Рис. 3. Зависимость функции качества моделирования от максимальной проекции шаров

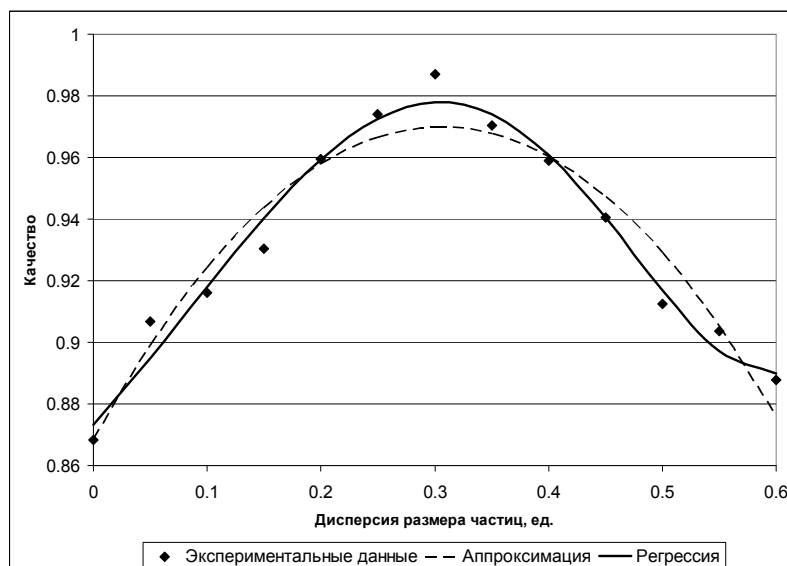


Рис. 4. Зависимость функции качества моделирования от дисперсии максимальной проекции шаров

Результаты моделирования для обоих вариантов — одномерной и двумерной областей поиска — представлены в таблице 1. Видно, что при варьировании двух входных параметров значительно падает достоверность аппроксимации. Несмотря на то, что предсказанное качество моделирования остается почти неизменным, регрессионная модель (7) неприменима по двум причинам: низкая достоверность аппроксимации и большое отклонение значений предсказанного и рассчитанного качества моделирования. Относительная ошибка моделирования также увеличивается, но укладывается в пределы случайной погрешности, из чего можно сделать вывод, что регрессионная модель выбрана удачно. Это позволит в перспективе оптимизировать метод равномерного поиска по сетке (6), использовавшийся при написании данной статьи.

Кроме того, после анализа трехмерной поверхности функции качества моделирования та же регрессионная модель (8) была использована и для двумерных случаев (рис. 3 и 4 — сплошная линия). Видно, что эта кривая гораздо лучше описывает экспериментальную зависимость.

Для сравнения в таблице 1 приведены значения относительной ошибки, качества и достоверности соответствующих моделей.

Таблица 1. Результаты проверки адекватности предлагаемых моделей и методов на примере плотной стохастической упаковки шаров с дилатацией

Варьируемые параметры	Способ анализа	Средняя относительная ошибка имитационного моделирования микроструктуры	Среднее предсказанное качество имитационного моделирования микроструктуры по критерию	Среднее рассчитанное качество имитационного моделирования микроструктуры по критерию	Средняя достоверность аппроксимации функции качества моделирования
Средний размер частиц	(7)	0.017	0.962	0.968	0.923
Средний размер частиц	(8)	0.011	0.982	0.984	0.993
Дисперсия среднего размера частиц	(7)	0.019	0.970	0.972	0.930
Дисперсия среднего размера частиц	(8)	0.014	0.978	0.983	0.973
Средний размер частиц Дисперсия среднего размера частиц	(7)	0.244	0.950	0.894	0.558
Средний размер частиц Дисперсия среднего размера частиц	(8)	0.035	0.947	0.954	0.925

Аналогичным образом получим экспериментальную зависимость и регрессионную модель качества для плотной стохастической упаковки сфероцилиндров с дилатацией ($\mu_{\max \text{ proj}} = 0.8$; $\sigma_{\max \text{ proj}} = 0.3$; $K_{\Pi} = 10\%$; средний фактор удлинения 0.75; дисперсия фактора удлинения 0.1). Соответствующие поверхности представлены на рисунках 5в, г. Предложенная регрессионная модель с высокой степенью достоверности (0.94) описала результаты проведенных экспериментов, что дает основания сделать предположение о применимости данной модели к задачам с более высокой размерностью пространства поиска.

Обозначим проблемы, возникающие при усложнении задачи (при увеличении размерности пространства поиска):

1. Большое количество рассчитываемых моделей. Понятно, что с увеличением размерности пространства поиска количество уникальных комбинаций входных параметров растет в геометрической прогрессии, что ведет к существенному увеличению требуемого времени нахождения решения. Возможным путем уменьшения требуемого машинного времени будет применение методов искусственного интеллекта [Oren, Bakke, 2002].
2. Неоднозначность решения задачи восстановления регрессии.
3. Целевая функция может иметь достаточно сложный вид на всем пространстве поиска (рис. 6г), о чем будет свидетельствовать низкая достоверность аппроксимации. В таком случае для поиска решения необходимо ограничить исследуемую область границами, в пределах которых целевая функция принимает значение не меньше критического;
4. Наличие нескольких пиков в случае варьирования параметров, имеющих схожее значение, как, например, на рисунке 6д. Физически оба параметра идентичны, поэтому имеется два

максимума, соответствующие верному составу компонент. В таком случае выбор верного результата должен осуществляться, во-первых, по абсолютной величине качества моделирования, и, во-вторых, по дополнительным данным из натуральных экспериментов, таких как фазовый состав исследуемого образца.

Вычислительные эксперименты выполнялись с использованием системы мониторинга и динамической балансировки нагрузки, созданной при поддержке федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России 2007–2013» в рамках ГК № 14514114042.

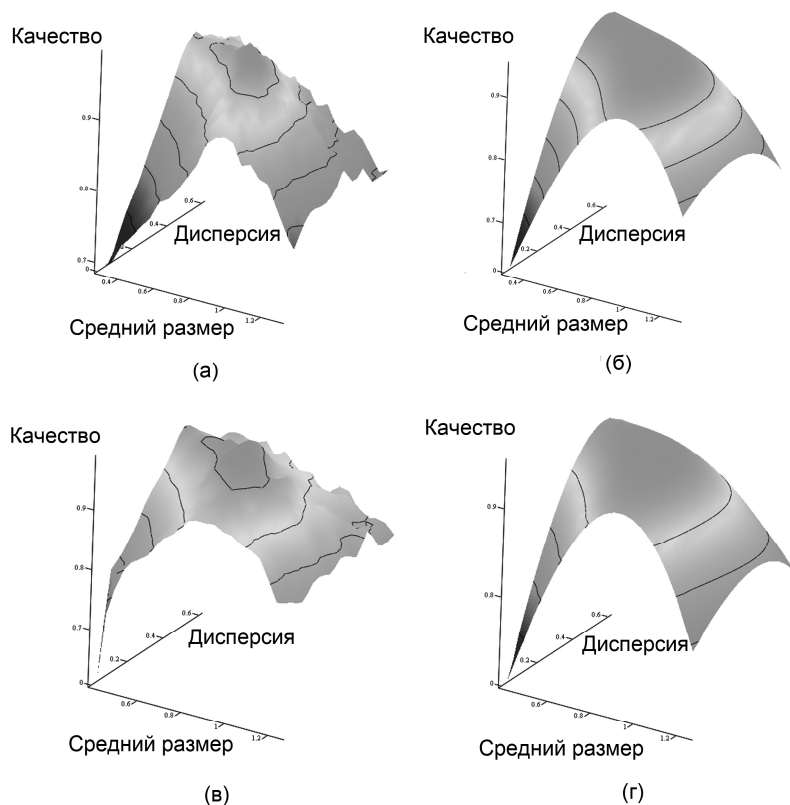


Рис. 5. Функция качества моделирования в двумерном пространстве поиска: (а) — непараметрическая поверхность для упаковки сфер, (б) — параметрическая поверхность регрессии для упаковки сфер, (в) — непараметрическая поверхность для упаковки сфероцилиндров, (г) — параметрическая поверхность регрессии для упаковки сфероцилиндров

Заключение

Оптимизационный подход к имитационному моделированию микроструктур позволил получить следующие результаты:

- метод плотной упаковки сферополлиэдров модифицирован путем добавления процедуры дилатации и цикла оптимизации для получения моделей микроструктур с заданной пористостью;
- предложен метод оценки качества имитационного моделирования микроструктур на основе сравнительного анализа изображений сечений;
- предложен комбинированный метод поиска оптимальной модели гранулометрического состава, включающий метод равномерного поиска, метод Монте-Карло, регрессионный анализ и оптимизацию;
- проведена проверка адекватности предложенных методов на примерах;
- предложена регрессионная модель качества имитационного моделирования микроструктур.

Полученные результаты дают основания для продолжения исследований в направлении оптимизации качества имитационного моделирования микроструктур.

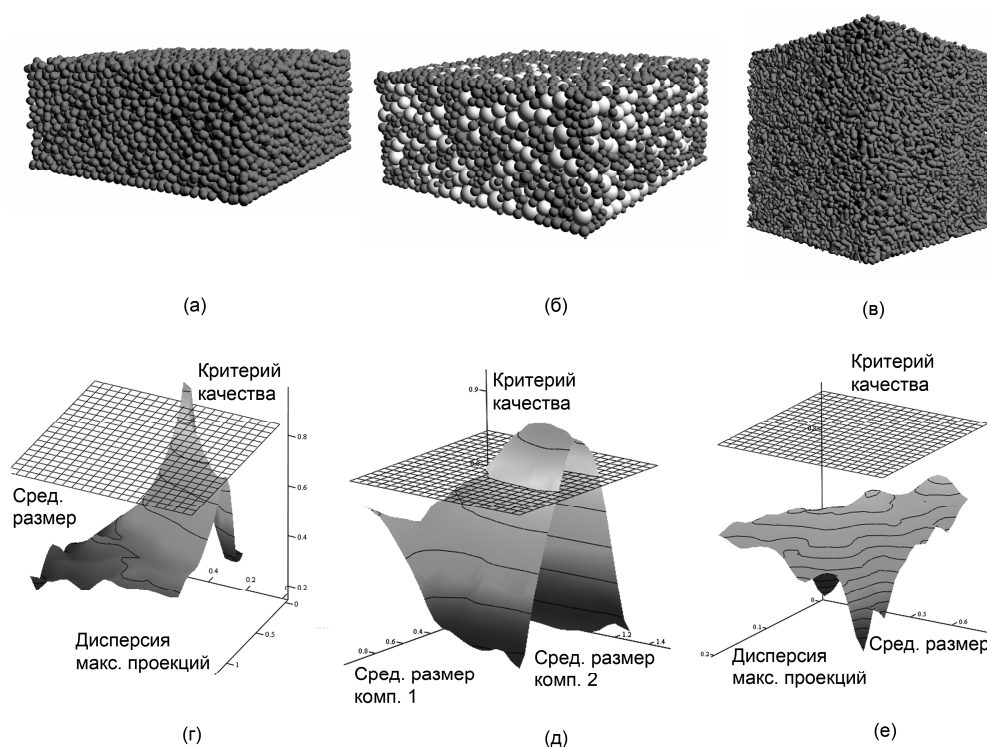


Рис. 6. На рисунке показаны результаты экспериментов для трех примеров: (а) эталонная упаковка одинаковых сфероцилиндров, (б) эталонная двухкомпонентная упаковка сфер, (в) эталонная полидисперсная упаковка сфероцилиндров; (г–е) соответствующие эталонным упаковкам функции качества, определенные в различных поисковых пространствах: (г) поиск по среднему размеру и дисперсии размеров частиц, (д) поиск по среднему размеру компонент, (е) поиск по среднему размеру и дисперсии размеров частиц при некорректно заданном распределении фактора формы

Список литературы

- Мизгулин В. В., Кадушников Р. М., Алиевский В. М., Алиевский Д. М. Моделирование плотных материалов методом упаковки сферополиэдров // Компьютерные исследования и моделирование. — 2012. — Т. 4, № 4. — С. 757–766.
- Рассел С. Искусственный интеллект: современный подход. Пер. с англ / С. Рассел, П. Норвиг, 2-е изд.: — М.: Издательский дом «Вильямс», 2006. — 1408 с.
- Blum H. A Transformation for Extracting New Descriptors of Shape in Wathen-Dunn, W., Models for the Perception of Speech and Visual Form, Cambridge, MA: MIT Press, 1967. — P. 362–380.
- Dong H., Blunt M. J. Pore-network extraction from micro-computerized-tomography images // Phys. Rev. E. — 2009. — Vol. 80. — P. 1539–3755.
- Garcia X., Akanji L. T., Blunt M. J., Matthai S. K., Latham J. P. Numerical study of the effects of particle shape and polydispersity on permeability // Physical Review E. — 2009. — Vol. 80. — P. 1539–3755.
- Oren P., Bakke S. Process Based Reconstruction of Sandstones and Prediction of Transport Properties // Transport in Porous Media. — 2002. — Vol. 46. — P. 311–343.