ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

DOI: 10.17223/9785946218412/126

СОВРЕМЕННЫЕ СПОСОБЫ ОПИСАНИЯ СТРУКТУРЫ ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

^{1,2}Смолин А.Ю., ^{1,2}Еремина Г.М., ¹Коростелев С.Ю.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

В связи с существенным влиянием структуры порового пространства на прочностные и упругие свойства пористых материалов, а также широкими возможностями современных технологий по формированию сложных многоуровневых поровых структур, определённый интерес представляет вопрос о современных способах достаточно полного описания и характеристики таких структур.

Традиционно считается, что структура порового пространства характеризуется следующими параметрами: пористость, её распределение по объёму, вид пор (открытые или закрытые, и т.д.), просвет, форма и коэффициент извилистости пор, распределение пор по размерам, удельная поверхность пор, проницаемость и распределение проницаемости по площади фильтрации.

Анализ современной литературы показывает, что в настоящее время для описания структуры различных сложных сред наиболее часто используются три новых подхода. Первый основан на интегральной геометрии и использует так называемые функционалы Минковского. Второй использует тензоры строения (*fabric tensors*), которые могут быть основаны как на геометрическом подходе, так и на механике деформируемого тела и морфологии. Третьим подходом является использование корреляционных функций.

Использование функционалов Минковского. Известно, что в топологии морфология трёхмерных структур полностью определяется четырьмя значениями функционалов Минковского (теорема Хадвигера [1])

$$\begin{aligned} V_0 &= \iiint dV \\ V_1 &= \frac{1}{6} \iint dS \\ V_2 &= \frac{1}{6\pi} \iint (\kappa_1 + \kappa_2) dS \\ V_3 &= \frac{1}{4\pi} \iint \kappa_1 \kappa_2 dS \end{aligned} \quad (1)$$

где κ_1 и κ_2 – главные кривизны. При этом V_0 – это объём, V_1 – площадь поверхности структуры, а их отношение даёт её толщину $T=V_0/2V_1$. Физический смысл значений V_2 и V_3 не так однозначен, но с их помощью можно вычислить ширину W и длину L структуры. Кроме того, используются понятия уплощённости P и нитевидности F . Тогда, например, простейшие структуры характеризуются следующими их значениями: линия $P = 0, F = 1$; плоскость $P = 1, F = 0$; сфера $P = F = 0$.

Если с помощью сканера или томографии перевести какую-либо структуру в сеточное представление, то существует алгоритм Олдера вычисления функционалов Минковского через такие величины, как n_0 – число узлов сетки внутри структуры; n_1 – число полных рёбер; n_2 – число полных граней; n_3 – число полных кубов; N – общее число узлов сетки. В таком виде, например, анализ топологии по значениям функционалов Минковского используется в вычислительной магнитогидродинамике для понимания структуры завихрённости потока и возникающих магнитных полей.

Использование тензоров строения. В современной научной литературе для описания особенностей структуры различных материалов широко используется понятие *fabric tensor*, которое на русский язык можно перевести как тензор структуры или тензор строения [2]. По-видимому, изначально он стал применяться для описания строения геологических сред [3], затем в медицине для изучения строения костных тканей [4], и, наконец, в материаловедении

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

для композитов [5]. Вообще говоря, под fabric tensor понимаются различные тензорные величины, которые так или иначе характеризуют структурную чувствительность материала. Поэтому в обзоре [2] методы их вычисления подразделяются на механические (простейший – тензор жёсткости), морфологические (те же функционалы Минковского), объёмные (тензор инерции) и текстурные (фрактальная размерность, частота отклонения текстуры от прямых линий).

Использование корреляционных функций. В работе [6] отмечается, что общее количество информации, содержащейся в функционалах Минковского, значительно меньше, чем необходимо для описания даже относительно простой структуры. В то же время существует метод, который позволяет количественно описать внутреннее строение какого-либо объекта, и основан на расчёте так называемых корреляционных функций [7]. Важно, что корреляционные функции позволяют оценить, сколько информации они могут нести о данной структуре. Такая оценка производится путём исследования параметров алгоритма реконструкции и количества вырожденных состояний, когда один и тот же набор корреляционных функций соответствует разным структурам [8]. Простейший тип корреляционной функции (n -точечная корреляционная функция) показывает вероятность нахождения n точек в одинаковой фазе. При этом значение 1-точечной корреляционной функции равно объёмной доли бинарной фракции. 2-точечная корреляционная функция определяется как вероятность одновременного нахождения точек x_1 и x_2 в одинаковой фазе (поры или твёрдая фаза пористого материала) и является наиболее изученной функцией для описания случайных сред.

В работе [6] отмечается, что для описания и восстановления гетерогенных сред недостаточно 2-точечных корреляционных функций и в сложившихся условиях наиболее правильным можно считать направление в повышении точности описания структур с помощью дополнительных функций низкого порядка ($n \leq 2$). Каждая из них представляет вероятность того, что положение точек на концах отрезка или отрезок целиком должны удовлетворять некоторым условиям. В качестве таких функций были предложены: а) кластерная функция (концы отрезка находятся внутри одного кластера); б) линейная функция (весь отрезок находится в одной фазе); в) функция хорды; г) различные функции поверхностей; д) функция размера пор.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований Российской академии наук на 2013–2020 гг. (приоритетное направление III.23).

1. Klain, D.A. Introduction to geometric probability / D.A. Klain, G.-C. Rota. – Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
2. Moreno, R. Techniques for computing fabric tensors: a review / R. Moreno, M. Borga, Ö. Smebby // C.-F. Westin et al. (eds.), Visualization and processing of tensors and higher order descriptors for multi-valued data, mathematics and visualization, Berlin: Springer-Verlag. – 2014. – P. 271–292.
3. Launeau, P., Robin, P.Y.F.: Fabric analysis using the intercept method / P. Launeau, P.Y.F. Robin // Tectonophysics. – 1996. – Vol. 267(1–4). – P. 91–119.
4. Tabor, Z., Quantifying anisotropy of trabecular bone from gray-level images / Z. Tabor, E. Rokita // Bone. – 2007. – Vol. 40(4). – P. 966–972.
5. Voyiadjis, G.Z. Advances in Damage Mechanics: Metals and Metal Matrix Composites with an Introduction to Fabric Tensors / G.Z. Voyiadjis, P.I. Kattan. 2006. – Elsevier, Oxford.
6. Карсанина, М.В. Моделирование и реконструкция структуры и свойств пористых сред с помощью корреляционных функций / М.В. Карсанина // дисс... канд. физ.-мат. н., Институт динамики геосфер Российской академии наук, 2016. – 137 с.
7. Torquato, S. Random heterogeneous media: Microstructure and improved bounds on effective properties / S. Torquato // Appl. Mech. Rev. – 1991. – 44. – P. 37–76.
8. Gommes, C.J. Microstructural degeneracy associated with a two-point correlation function and its information content / C.J. Gommes, Y. Jiao, S. Torquato // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. – 2012. – 85(5). – 051140.