Diss. ETH No. 17549

Modelling of Random Porous Media Using Minkowski-Functionals

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

for the degree of
Doctor of Sciences ETH

presented by
MAIK BERCHTOLD
Dipl. Math. ETH
born December 17, 1976
citizen of Busswil BE

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. H. R. Künsch, examiner
Prof. Dr. V. Schmidt, Prof. Dr. P. Bühlmann, co-examiner

2008

Abstract

Porous structures frequently arise in nature and belong to the preferred materials studied in materials science. They are encountered in a myriad of shapes and structural variations. Among the examples of natural porous media we find rocks, soils, sponges or biological tissue and the most prominent porous basic materials being concrete, ceramics or foams. It is therefore not surprising that since the seventies of the last century porous media have belonged to the core focus of interdisciplinary research. They are of interest not only to the mathematician, geo-physicist, biologist and chemist but - not least in consideration of the sheer mass of data to be handled - also for the computer science and image-processing communities. Due to the fast-paced development of synchrotron technology, high-resolution images of three-dimensional porous specimens have finally become available in recent years. The Institute for Terrestrial Ecology at the Swiss Federal Institute of Technology (ETH) and the Paul-Scherrer-Institut (PSI) in Villigen are involved in the making of such high-resolution images for sand soils of various granularity which by courtesy they made available to us for use in the present thesis.

The geometrical structure of the pore space is known to have a major impact on the flow- and transport-properties in porous media such as permeability. Unfortunately neither the specific nature of this impact is presently known nor which exactly are the decisive characteristics of the pore space responsible for this impact. In this thesis we mainly concentrate on a certain simple class of geometrical characteristics, the so-called Minkowski-functionals. They comprise well-known elementary geometrical quantities such as volume (of the pore and also the solid phase), surface (of the boundary between pore and solid phase), the integral of mean curvature and the Euler-characteristic, the latter being an important connectivity-measure well-known in differential topology. The use of Minkowski-functionals to summarize the information content of a porous specimen can be theoretically justified by the famous Hadwiger-Theorem.

For the modelling of porous media in this thesis we avail ourselves of the methods of stochastics. Hence the goal we pursue cannot be the exact artificial reconstruction of a natural porous structure but rather the analysis of its stochastic properties. This will allow us to quantitatively compare different realizations of the same stochastic model with respect to their geometrical properties and analyse their variability. Our basic procedure is as follows: We first measure the properties of interest (mainly the Minkowski-functionals) and then fit a stochastic model such that in average the realizations of the model reproduce the measured values for those characteristics. In this thesis, we basically concentrate on three simple stochastic models, which are the germ-grain type Boolean Model, the Truncated Gaussian Fields and the Gibbsian Model. Our focus regarding the selection of stochastic models to consider was more on analytical tractability of a specific model than on its power to generate realistic artificial reproductions of porous structures. This is the main reason why we did not consider in this thesis the more complicated realistic models of the hard-core type (such as the cherry-pit model).

The main goals of our project were to investigate whether we can generate artificial random structures with predetermined Minkowski functionals and to examine to which extent the Minkowski functionals are able to summarize the geometrical information inherent in a porous structure. We had to develop algorithms to fit these simple models to real data which can cope with the enormous data sizes and at the same time keep processing time reasonably low. Together with the Institute of Terrestrial Ecology of ETH we have further investigated whether our artificially generated random media exhibit liquid transport- and flow properties comparable to their real world counterparts. The present thesis is structured as follows:

An introductory chapter deals with the abstract model-independent description of the basic modelling process we use to generate artificial random porous media with predetermined Minkowski-functionals. This procedure is then adapted in later chapters to the specific models. Furthermore in this introductory chapter we present the synchrotron sand data we have used all the time to test our algorithms on.

The second chapter is devoted to the theoretical foundations needed to understand this thesis. We give an introduction to Brunn- Minkowski-Theory where we introduce Minkowski-functionals on the convex ring and discuss their basic properties. Special attention is given to the Euler-characteristic from which all the other Minkowski functionals can be derived by means of the Crofton-formulae. To discuss these formulae we also give a brief introduction into the subject of integral geometry. Furthermore the chapter deals with the question how to measure or estimate the specific Minkowski functionals of a porous structure from a pixel image. To do this we use the so-called Ohser-Mücklich estimators which arise from discretizing the integral geometric expressions of the Crofton formulae. So far all the concepts introduced are purely deterministic. Towards the end of the chapter we demonstrate how stochastics can be incorporated into this geometrical framework. This leads us to the basic concepts of stochastic geometry which we also introduce briefly. The focus here lies on point and particle processes and also random sets in general. The chapter is concluded by listing some of the most frequently used geometrical characteristics for modelling porous media discussed in literature.

The third chapter deals with the Boolean germ-grain model. We interpret the Boolean Model as a particle process and demonstrate how the results of point process theory combined with integral geometry can be combined to derive explicit expressions for the specific Minkowski functionals for the Boolean Model. We discuss which values for the specific Minkowski functionals are attainable within the limits of the Boolean Model and describe algorithms to generate two and three dimensional Boolean structures with spherical or ellipsoidal grains and predetermined Minkowski functionals. In the results section we display two- and three-dimensional images generated according to these algorithms and conclude the chapter with a discussion of sensitivity of the Boolean structures with respect to variation of a single Minkowski characteristic while keeping the others constant.

In the fourth chapter we treat the Thresholded Gaussian Field Model. Binary images can be obtained from a Gaussian Random Field by painting a pixel black whenever the Gaussian random variable associated with this pixel exceeds a certain threshold and keep it white otherwise. Also for the Gaussian Model explicit formulae for the specific Minkowski functionals are known. We show that in the Gaussian setting the Ohser-Mücklich estimators are asymptotically unbiased if we let the spacing of the pixel grid tend to zero and provide explicit expressions for the bias of these estimators. Furthermore we consider a certain class of general surface estimators based on the two-point covariance function. We prove asymptotical unbiasedness in the Gaussian Model also for estimators of this more general class and again give explicit expressions for the bias. In the one-dimensional case we additionally consider the variance of these estimators and prove asymptotic normality. We provide algorithms how to generate two- and three-dimensional artificial structures with predetermined specific Minkowski functionals in the Thresholded Gaussian Model and show results from our experiments which share their Minkowski-functionals with the synchrotron sand-data shown in the introduction. Recent experiments at the Institute of Terrestrial Ecology have proved that our artificial Gaussian structures are able to mimic the flow- and transport properties of their real world counterparts quite well.

The fifth chapter is devoted to the Gibbsian Model known from statistical mechanics. We discuss the equivalence of neighbourhood-Gibbs-Fields with Markovian Random Fields given by the Hammersley-Clifford Theorem and describe how the Gibbs-potential must be chosen to generate artificial structures with predetermined Minkowski functionals. Next we deal with the variational principle of statistical mechanics which characterizes the Gibbsian model as the one maximizing entropy for a given energy. This makes the Gibbsian Model a natural choice to generate porous structures arising in nature. We also describe the equivalence of ensembles which states that in the thermodynamic limit (on large lattices) the Gibbsian distribution with a suitably chosen potential is in fact equivalent to the uniform distribution on the set of images with the same specific Minkowski functionals. This result will be useful later on to simulate from the Gibbsian model without having to estimate any parameters at all! The rest of the chapter deals with simulation within the Gibbsian Model. We discuss the well-known Gibbs sampler and describe how it can be used to efficiently simulate from the Gibbsian distribution even on large lattices due to the Markov property. We describe methods how those parameters of the Gibbsian distribution which correspond to the predetermined values for the Minkowski functionals can be estimated and provide a method to simulate from the Gibbsian Model with predetermined Minkowski functionals which gets along without any parameter-estimation at all. This works because due to the equivalence of ensembles we can simulate from the uniform distribution of images with the desired specific Minkowski functionals instead of the Gibbsian distribution. To simulate from this uniform distribution we use a combination of the Gibbs-Sampler with the Simulated-Annealing-technique for optimization. With this Simulated-Annealing-method we are able to generate artificial random structures which not only share the same specific Minkowski functionals with their real world counterparts but also (at least in principle) the same values for arbitrarily many additional geometrical characteristics. At the end of the chapter we show two-dimensional Gibbsian realizations whose Minkowski functionals agree with those of selected cross-sections taken from the synchrotronized sand-images.

Finally some concluding remarks are given in chapter six. The appendix contains the proof of asymptotic normality for general surface estimators in the continuous Markovian on-off-system. This example is meant to be an introductory example for the same proof for Thresholded Gaussian Fields presented in chapter four. It can be used as a first approach to the concepts of chapter four in an easily tractable setting. The appendix contains further the proofs of some fundamental theorems used to outline the basic theory which were omitted in the main text and also contains alternative proofs to some of our own results.

Maik Berchtold Zurich, November 2007

Zusammenfassung

Poröse Strukturen treten in der Natur und den Materialwissenschaften sehr häufig und in den mannigfaltigsten Ausprägungen auf. Beispiele aus der Natur sind etwa Gesteine, Bodenstrukturen, Schwämme, oder biologisches Gewebe. Zu den porösen Werkstoffen zählen Zement, Keramik und Schäume. Es ist daher kaum verwunderlich, dass das Studium der porösen Medien schon seit geraumer Zeit, insbesondere aber seit den 70er Jahren des letzten Jahrhunderts grosses interdisziplinäres Interesse geniesst. Nicht nur für Mathematiker, Geophysiker, Ingenieurwissenschaftler (Material-und Werkstoffwissenschaften) Biologen und Chemiker ist die Modellierung poröser Medien von Interesse, sondern nicht zuletzt aufgrund der gewaltigen Flut zu bearbeitender Datenmengen auch für Informatiker und die Community der Bildverarbeitung. Dank der rasanten Entwicklung der Synchrotron-Technologie sind in den letzten paar Jahren hochaufgelöste Darstellungen von dreidimensionalen Proben solcher Medien verfügbar geworden. Das Insitut für terrestrische Ökologie der ETH Zürich und das Paul Scherrer Institut (PSI) in Villigen sind in die Herstellung solcher Bilder für Sandbodenstrukturen verschiedener Granularität involviert und haben uns diese, für die vorliegende Doktorarbeit freundlicherweise zur Verfügung gestellt.

Die geometrische Struktur des Porenraums beeinflusst wesentlich die Fliess- und Transporteigenschaften von Flüssigkeiten, wie etwa die Permeabilität in porösen Medien. Dabei ist es allerdings noch weitgehend unklar, welcher Art diese Beeinflussung ist und welche geometrischen Charakteristika des Porenraums entscheidend sind. Wir konzentrieren uns in dieser Arbeit hauptsächlich auf eine bestimmte einfache Klasse solcher Charakteristika, die sog. Minkowski-Funktionale. Zu ihnen gehören die elementaren geometrischen Grössen Volumen (des Poren- bzw. Komplementärraums), Oberfläche (der Grenze zwischen Poren- und Komplementärraum), das mittlere Krümmungsintegral (dieser Grenzfläche) und die Euler-Chararkteristik. Letztere ist eine wichtiges Mass aus der Differentialtopologie, welches den Grad des Zusammenhangs einer Struktur misst. Es gibt eine theoretische Rechtfertigung dafür, dass Minkowski-Funktionale gut dafür geeignet sind, die in einem Bild vorhandene geometrische Information zusammenzufassen. Diese wird durch den fundamentalen Satz von Hadwiger geliefert.

Zur Modellierung der porösen Strukturen bedienen wir uns in dieser Arbeit der Stochastik. Unser Ziel ist es daher nicht, eine gegebene natürliche Struktur zu reproduzieren, sondern nur ihre stochastischen Eigenschaften. Dies hat den Vorteil, dass wir verschiedene Realisierungen eines Modells bezüglich ihrer geometrischen Eigenschaften miteinander vergleichen und ihre Variabilität untersuchen können. Wir gehen dabei wie folgt vor: Wir messen die geometrischen Eigenschaften (vorwiegend die Minkowski-Funktionale) einer gegebenen Struktur und bestimmen dann die Parameter eines statistischen Modells so, dass dessen zufällige Realisierungen im Mittel dieselben geometrischen Eigenschaften haben wie die gegebene poröse Struktur. Wir betrachten hauptsächlich drei einfache stochastische Modelle: das Boolesche Keim-Korn Modell, trunkierte Gausssche Zu-

fallsfelder und das Gibbs-Modell aus der statistischen Mechanik. Bei der Auswahl der Modelle war uns wichtig, dass die betrachteten Modelle bis zu einem gewissen Grad analytisch zugänglich sind, wohlwissend, dass zur Modellierung poröser Medien oft realistischere Modelle, wie etwa das Kirschkern-Modell (cherry-pit, Hardcore-Type) vorgezogen werden, die für analytische Betrachtungen aber weit weniger geeignet sind. Die Hauptziele der vorliegenden Arbeit waren herauszufinden, in welchem Mass wir mit diesen einfachen Modellen künstliche Strukturen mit vorgegebenen geometrischen Charakteristiken erzeugen können und inwieweit diese künstlichen Realisierungen sich trotz übereinstimmender Charakteristiken von der gegebenen natürlichen Struktur unterscheiden. Desweiteren mussten Algorithmen entwickelt werden, die mit der beträchtlichen Grösse der zu verarbeitenden Datenmengen umgehen können, um diese einfachen Modelle den Daten anzupassen, und wir haben diese Algorithmen anhand der hochauflösenden Synchrotron-Sandbilder getestet. Zusammen mit dem Institut für terrestrische Ökologie der ETH Zürich haben wir ferner untersucht, ob unsere künstlichen Realisierungen ähnliche Fluss- und Transporteigenschaften aufweisen, wie die realen Sandstrukturen.

Im Detail gliedert sich die vorliegende Arbeit wie folgt:

In einem Einführungskapitel wird kurz der allgemeine Modellierungsprozess beschrieben, den wir im Rest der Arbeit für die spezifischen Modelle adaptieren und es werden die Synchrotron-Sanddaten, die wir zum Testen unserer Algorithmen verwenden, vorgestellt und analysiert.

Das zweite Kapitel beschäftigt sich mit den theoretischen Grundlagen, die wir in dieser Doktorarbeit benötigen. Es beginnt mit einer Einführung in die Brunn-Minkowski-Theorie, wo Minkowski-Funktionale auf dem Konvexring eingeführt und ihre Eigenschaften diskutiert werden. Ein besonderer Fokus liegt dabei auf der Eulercharakteristik, aus welcher sich die anderen Minkowski-Funktionale ableiten lassen. Dies ist im wesentlichen die Bedeutung der Crofton-Formeln, die wir in der anschliessenden Einführung in die Integralgeometrie diskutieren. Desweiteren beschreiben wir, wie sich die spezifischen Minkowski-Funktionale einer porösen Struktur aus einem Pixelbild approximieren lassen. In der ganzen Arbeit verwenden wir dabei die sogenannten Ohser-Mücklich-Schätzer, welche sich direkt aus der Diskretisierung der Integrale in den Crofton-Formeln ableiten lassen. Nach diesen rein deterministisch-geometrischen Betrachtungen folgt eine kurze Einführung in die stochastische Geometrie, wo vor allem die Konzepte der Punkt- und Partikelprozesse und allgemeiner der zufälligen Mengen erläutert werden. Das Kapitel schliesst mit einer Zusammenstellung derjenigen geometrischen Charakteristiken, die nebst den Minkowski-Funktionalen in der Literatur zur Beschreibung poröser Strukturen am häufigsten verwendet werden.

Das dritte Kapitel ist dem Booleschen Keim-Korn-Modell gewidmet. Wir fassen das Boolesche Modell als einen Partikelprozess auf und zeigen, wie sich die spezfischen Minkowski-Funktionale im Booleschen Modell aus den Beziehungen der Integralgeometrie ableiten lassen. Wir diskutieren, welche spezifischen Minkowski-Funktionale überhaupt mit dem Booleschen Modell erreichbar sind. Dann widmen wir uns der Simulation von zwei und dreidimensionalen Booleschen Strukturen mit vorgegebenen spezifischen Minkowski-Funktionalen. Wir geben Algorithmen an für das Boolesche Modell mit sphärischen und ellipsoidalen Körnern und zeigen zwei und dreidimensionale künstliche Boolesche Strukturen aus unseren Experimenten mit denselben spezifischen Minkowski-Funktionalen wie die Synchrotron-Sandbilder. Zum Schluss dieses Kapitels diskutieren wir die Sensitivität der Booleschen Strukturen, wenn einzelne spezifische Minkowski-Funktionale variiert werden.

Das vierte Kapitel widmet sich hauptsächlich dem Gaussschen Zufallsfeld-Modell. Wir können binäre Bilder erzeugen, indem wir bei einer beliebigen Schwelle trunkieren. Auch im Gausschen Modell sind explizite Formeln für die spezifischen Minkowski-Funktionale bekannt. Wir zeigen, dass die Ohser-Mücklich-Schätzer asymptotisch erwartungstreu sind, wenn die Gitterkonstante gegen null geht. Wir geben auch explizite Ausdrücke für den Bias dieser Schätzer an. Desweiteren betrachten wir eine allgemeinere Klasse von Oberflächenschätzern, die auf der Kovarianzfunktion des Zufallsfeldes basieren. Auch hier beweisen wir asymptotische Erwartungstreue und geben den Bias explizit an. Im eindimensionalen Fall berechnen wir auch die Varianz solcher Oberflächenschatzer und beweisen asymptotische Normalität für das trunkierte Gausssche Zufallsfeld-Modell. Desweiteren geben wir Algorithmen an, wie man in zwei und drei Dimensionen im Gaussschen Zufallsfeld-Modell Realisierungen mit vorgegebenen spezifischen Minkowski-Funktionalen erzeugen kann und zeigen solche zwei- und dreidimensionale Realisierungen aus unseren Experimenten mit denselben spezifischen Minkowski-Funktionalen wie die Synchrotron-Sandbilder. Neue Experimente am Insitut für terrestrische Ökologie haben gezeigt, dass unsere Gauss-Realisierungen, die Fluss- und Transporteigenschaften des realen Mediums sehr gut wiedergeben können.

Im fünften Kapitel verwenden wir das Gibbssche Modell aus der statistischen Mechanik, um zufällige Strukturen mit vorgegebenen Minkowski-Funktionalen zu erzeugen. Am Anfang des Kapitels arbeiten wir die Äquivalenz von Gibbsschen Feldern mit Nachbarschaftspotentialen und Markkovfeldern heraus (Hammersley-Clifford-Theorem). Wir beschreiben, wie das Gibbspotential gewählt werden muss, um vorgegebene spezifische Minkowski-Funktionale zu erzeugen. Dann beschäftigen wir uns mit dem Variationsprinzip der statistischen Mechanik, welches das Gibbs-Modell als dasjenige mit der maximalen Entropie auszeichnet und es deshalb als Modell für natürliche Porenstrukturen geeignet erscheinen lässt. Als nächstes gehen wir auf die Äquivalenz von Teilchenensembles ein, die besagt, dass sich im thermodynamischen Limes (grosse Gitter) die Gibbsverteilung mit geeignetem Potential als die Gleichverteilung auf der Menge aller Bilder mit den vorgegebenen Minkowski-Funktionalen herausstellt. Diese Erkenntnis kann später zum Simulieren, ohne vorher Parameter schätzen zu müssen, verwendet werden. Als nächstes wenden wir uns der Simulation von Gibbs-Modellen zu. Wir diskutieren den Gibbs-Sampler, der die Simulation von der Gibbs-Verteilung dank der Markov-Eigenschaft sehr einfach macht. Dann wenden wir uns dem Problem der Parameterschätzung zu und diskutieren verschiedene Methoden, wie man diejenigen Parameter im Gibbs-Modell schätzen kann, die den vorgegebenen Minkowski-Funktionalen entsprechen. Schliesslich diskutieren wir auch eine völlig parameterfreie Methode. Dank der Äquivalenz der Teilchenensembles können wir statt von der Gibbs-Verteilung von der Gleichverteilung auf der Menge aller Bilder mit den vorgegebenen Minkowski-Funktionalen simulieren. Dies erreichen wir durch eine Kombination des Gibbs-Samplers mit der Simulated-Annealing-Optimierungstechnik. Diese Simulated-Annealing-Methode erlaubt es uns, Gibbs-Realisierungen zu erzeugen, die nicht nur vorgegebene Minkowski-Funktionale aufweisen, sondern zusätzlich vorgegebene Werte für (zumindest im Prinzip) beliebig viele andere geometrische Charakteristiken. Wir schliessen das Kapitel ab mit zweidimensionalen Bildern aus unseren Experimenten, welche in verschiedenen geometrischen Charakteristiken mit den Synchrotron-Sandbildern übereinstimmen.

Das abschliessende sechste Kapitel enthält einige Schlussbemerkungen. Im Appendix findet man den Beweis der asymptotischen Normalität der verallgemeinerten Oberflächenschätzer für das stetige Ein-/Ausschalt-Markovmodell. Dieses Beispiel ist als Einführungsbeispiel für denselben Beweis aus Kapitel vier für das Gausssche Zufallsfeld-Modell gedacht und eignet sich für eine erste Annäherung an die im Kapitel vier verwendeten Konzepte in einem einfach behandelbaren Rahmen. Weiter befinden sich im Appendix die Beweise zu einigen der im Aufbau der Theorie benötigeten Sätze, die wir im Haupttext ausgelassen haben. Der Leser findet dort auch alternative Beweise zu einigen unserer eigenen Resultate.

Maik Berchtold Zürich, im November 2007