超快速三维多孔介质生成：GPU 加速的列表索引显式时间步进 QSGS 算法

Ruofan Wang、Mohammed Al Kobaisi*

哈利法大学化学与石油工程系，阿联酋阿布扎比 * 通讯作者：Mohammed.alkobaisi@ku.ac.ae

摘要

高分辨率合成微观结构的高效生成对数字岩石物理学至关重要，但经典四元结构生成集（QSGS）算法在大型三维网格上的计算成本高得难以承受。我们提出一种 QSGS 的列表索引显式时间步进（LIETS）方法，将随机生长操作限制在显式活动前沿，而非整个体素网格上。该方法使用 NumPy 在 CPU 上、使用 CuPy 在 GPU 上以 Python 实现，并通过菱形膨胀控制种子间距，同时采用依赖体积分数的方向生长概率。对于 400^3 计算域，LIETS 将生成时间从串行 CPU 实现所需的数十分钟、向量化 CPU 和 GPU QSGS 所需的数分钟缩短至消费级 RTX 4060 上约 24 秒，峰值吞吐量达 2.7×10^7 节点/秒。分辨率为 500^3 的枫丹白露砂岩基准测试表明，LIETS 能再现孔隙与颗粒尺寸分布对种子间距的依赖关系（最佳值为 s=30 个体素），并得出位于实验范围内且与先前发表的 Fast-QSGS 结果一致的渗透率–孔隙度趋势。

关键词：数字岩石重构、多孔介质、四元组结构生成集（QSGS）、GPU 加速、枫丹白露砂岩

1. 引言

孔隙尺度结构从根本上决定了地质材料和工程多孔介质的传输、力学及反应性质 [1–5]。过去几十年来，数字岩石物理学（DRP）已成为实验室岩心分析的标准补充手段，用于量化这些关系 [6–8]。近年来，DRP 工作流将高分辨率微型 CT 成像、分割和直接数值模拟与数据驱动分析相结合，在统一框架中关联岩石物理学、成像和机器学习 [9–14]。基于微型 CT 的数字岩石如今已常规用于提取岩石物理和弹性性质 [3,15,16]，并在多个长度尺度上进行多尺度重构

跨越数个数量级[11,17,18]，以及构建砂岩、碳酸盐岩、页岩[19–25]和合成岩石[26–28]的基准测试体积，且通常辅以实验室孔隙度—渗透率测量。

然而，要以多尺度流动与输运研究所需的分辨率和视场进行直接成像，成本仍然高昂且耗时；为不确定性量化扫描所需的大体积样本并生成多个实现，往往也不切实际。因此，合成微观结构生成器在 DRP 工作流中发挥着核心作用，并已发展出多种重建策略。基于过程的方法通过模拟沉积作用、压实作用和成岩作用，依据岩相学观察和有限的统计描述符直接重建砂岩，通常能与微米 CT 图像及测得的输运性质高度吻合[1,29]。其他框架则通过调整或优化微观结构，使其符合目标岩石物理响应或几何指标，例如利用整体岩石物理数据引导三维重建、增强孔隙连通性，或明确考虑大尺度各向异性[30,31]。近期，基于模拟退火及相关能量最小化方法的随机重建方案仍得到广泛应用，并已得到系统分析，且拓展至多尺度情境[32–35]。多点统计（MPS）方法是另一类重要方法，其中训练图像编码了高阶空间相关性[36–39]；单正态方程模拟（SNESIM）类算法及其 GPU 加速变体已成功应用于三维多孔介质和地质结构的重建[40–42]。近年来，人们还提出了基于深度学习的方法和监督学习方案，直接根据图像或统计描述符重建、模拟或设计多孔微结构，从而有效拓展了设计空间，使其超越了手动调参易于实现的范围[43–47]。

在这一广阔领域中，四元结构生成集（QSGS）作为一种多功能随机生成器脱颖而出。QSGS 最初由 Wang 及其合作者提出，是一种具有四个参数的随机生长算法，用于再现微尺度随机多孔介质和功能梯度材料。该方法以种子概率和三个方向生长概率描述微观结构，并成功与格子玻尔兹曼求解器耦合，用于预测有效热导率和电导率[48,49]。此后，QSGS 已应用于各种多孔系统，包括颗粒过滤器中的随机孔隙结构[50]、具有分形微孔网络的土壤[51]、岩石多孔介质[52]以及重构的多孔混凝土[53]，从而能够系统研究渗透率和代表性基本体积（REV）的行为。该方法的扩展版本已用于分析多相岩石中由矿物溶解与沉淀引起的孔隙尺度流动和溶质运移非均质性[54,55]。QSGS 生成的随机各向同性多孔介质还被用作评估有效热导率的基础，以研究受控孔隙度和孔径范围内的变化；与此同时，参数研究量化了四个生长参数对通用多孔材料孔隙形态和连通性的影响[56]。

尽管经典方法在概念上简单灵活，但其计算成本

对于大型三维体素网格而言，QSGS 实现的计算成本仍然很高。在典型的串行代码中，每次生长迭代都会遍历整个计算域，在每个网格单元生成随机数并评估邻域规则，尽管实际上只有生长前沿附近的位点可能发生相变。这种全场更新模式导致每一步的工作量随单元总数增加，而与当前固相体积分数无关；在边长数百个体素的网格上生成微观结构时，耗时可达数十分钟。针对这一瓶颈，近期研究采用了向量化和 GPU 加速：Fast-QSGS 程序将生长阶段改写为符合 NumPy 风格的数组操作，并通过 CuPy 在现代 GPU 上执行 [57–59]，在消费级和数据中心 GPU 上都比串行实现快一个数量级。然而，这些向量化的全场方案在每次全局迭代中，仍会对每个方向上的每个单元执行随机数生成、逻辑掩码和体素移位，因此大量计算和内存流量都耗费在远离演化界面、无法生长的位点上。在内存带宽有限的消费级 GPU 上，这一局限尤为明显，因为全局内存访问主导了运行时间。因此，亟需开发一种算法，既能保留 QSGS 的随机生长统计特性和参数化方式，又能将高成本操作限制在活跃生长前沿，同时兼容 DRP 工作流中使用的高级数组编程框架。

本文提出了一种基于列表索引的显式时间步进（LIETS）QSGS 算法公式，将所有繁重计算集中在活跃生长前沿。在该方案中，当前界面由活跃位点的显式列表表示；对于每次全局迭代和每个体素方向，仅将这些位点的邻居作为生长候选点，并在剔除被完全包围的位点后，将新占据的单元添加到活跃列表中，供下一时间步使用。该基于列表的生长规则保留了 QSGS 的随机特性，包括种子间距控制和依赖体积分数的方向生长概率，同时大幅减少了随机抽样和数组操作的次数。LIETS 公式使用 NumPy 在 CPU 上、使用 CuPy 在 GPU 上以 Python 实现，形成了简洁的高级代码库，可移植至消费级和专业级硬件。系统性性能基准测试表明，对于 $a400^3$ 体素，LIETS 实现可将生成时间从串行 QSGS 所需的数十分钟、向量化 CPU 和 GPU QSGS 所需的数分钟缩短至消费级 RTX 4060 上的数十秒；对于中等规模的计算域，其峰值吞吐量可达约 107 节点/秒。以枫丹白露砂岩为基准介质，我们进一步表明，LIETS 生成的微观结构再现了孔隙与颗粒尺寸分布随种子间距变化的预期规律；基于这些结构进行 pnflow 模拟得到的渗透率-孔隙度数据落在实验范围内，并与此前发表的 Fast-QSGS 结果吻合良好。总之，这些结果表明，LIETS QSGS 算法在保持物理真实性的同时实现了显著的算法性能提升，并且可在主流桌面硬件上高效生成颗粒无序介质的高分辨率微观结构。

2. 模型与方法

2.1 QSGS 基本流程

在基本的四元结构生成集（QSGS）方法[48]中，微观结构被离散到正交网格上，并按以下顺序依次生成各相：

1) 相分配。选定一个相作为基质相（非生长相）。所有其他相均视为生长相，并依次生成；当前处理的相称为第 n 相。

2) 第一个生长相的播种。为每个网格单元赋予一个 (0,1) 区间内的均匀随机数。随机数不大于第一相预设核心（种子）概率 c_d 的单元将被标记为该相的核心。c_d 的取值不大于该相的目标体积分数。

3) 第一相的生长。从所有属于第一相的单元出发，尝试向所有邻近单元生长。对于位于方向 i 上的邻近单元，生成一个新的随机数；如果该随机数不大于方向生长概率 D_i，则将该邻近单元转变为生长相。新占据的单元将加入生长位点集合，用于下一次迭代。重复进行这些生长迭代，直到第一相的体积分数达到预设值（对于孔隙相或气相，通常以孔隙度表示）。二维网格中单相生长过程的一种具体串行实现总结于**算法1**。

4) 后续生长相。其余相在尚未分配的单元上生成。如果新相表现为独立的离散相，则按照与第一相相同的方式放置其核心并使其生长，使用其自身的核心概率和生长概率。如果新相与已有相发生相互作用，则向当前属于相 m 的邻居生长时，会使用相互作用概率 $I_i^{n,\,m}$；该概率规定了第 n 相在与相 m的界面处沿方向 i 生长的可能性。当第 n 相达到规定的体积分数 P^n 时，其生长便会停止。

5) 基体相的分配。所有生长相生成后，将尚未被占据的网格单元标记为基体（非生长）相。由此得到的相分布图构成合成微观结构。

算法1串行生长过程

1: **当** $\phi_a < \phi_s$2: **对于每个** x, y **在** 计算域(Nx, Ny) 3: **如果** 相(x, y) = 14: **对于每个** d **在** 方向5: $nx = x + ex_d$, $ny = y + ey_d$6: **如果** (nx, ny) **在** 计算域 **且** 相$(nx, ny) = 0$ **且** 随机_数 < D_d7: 相$(nx, ny) = 1$

8: **结束如果**9: **结束循环**10: **结束如果**
11: **结束循环**12: ϕ_a = 体积_分数(
相 = 1) 13: **结束当**

2.2 QSGS 的向量化过程

为加速 QSGS，可将生长阶段改写为数组操作，这种操作非常适合向量处理器和 GPU [57]。为便于说明，考虑二维网格中的单一固相；固体单元编码为 1，空隙单元编码为 0。下面概述相应的向量化生长过程，其实现总结于 **算法 2**。

1) 初始状态。根据给定的种子概率 S_d，已放置固相种子。令 ϕ_a 为当前固相体积分数，ϕ_s 为目标值。2) 掩码构建。当 $\phi_a < \phi_s$时，执行一次生长迭代。创建一个布尔数组 固相_掩码，其中所有当前固体单元的位置值为 1，其余位置值为 0。3) 按方向生成候选单元。对于每个体素方向 i （例如上、下、左、右，以及可能的对角方向）：• 生成一个随机数组 R_i，其中的值均匀分布于 (0,1) 内。• 通过检验 $R_i \le G_i$ 生成候选数组，其中 G_i 为方向 i上的生长概率。• 将该候选数组与固相_掩码进行逻辑与运算，将潜在生长限制在现有固体单元附近。• 沿方向 i将所得数组平移（循环移位）一个网格单元；平移后的数组指示哪些相邻单元将从该方向被填充。

4) 固相更新。将所有方向上偏移后的数组通过逻辑或运算合并，得到本次迭代中待转换为固相的单元集合。相应地更新固相数组，并计算新的体积分数 ϕ_a。从多个方向收到生长尝试的单元只计数一次。

5) 迭代。重复步骤2–4，直到 ϕ_a 达到 ϕ_s。在这种向量化方案中，新形成的固体单元只有在下一次全局迭代中才会作为种子参与生长，而不像严格的串行实现那样在形成后立即参与；由于生长具有很强的随机性，所得结构在统计上仍然等价。**算法2**给出了单相向量化过程的简明伪代码实现。

算法2
向量化生长过程

1: **当** $\phi_a < \phi_s$
2: 固体_掩码 = (相 = 1)
3: **对于** d **中的** 方向
4: 生长 = **rand**$(Nx, Ny) <$ G_d
5: 生长 = 生长 * 固体_掩码
6: 相 = 相 OR **二维移位**(生长, ex_d, ey_d)
7: **结束循环**
8: 相 = (相 ≠ 0)
9: ϕ_a = 体积分数_(相 = 1)
10: **结束 while 循环**

2.3 基于列表索引的向量化显式时间步进 QSGS

为进一步减少生长阶段中的冗余操作，可以将 QSGS 方法重新表述为显式活跃生长位点列表上的操作，而不是在整个网格上进行操作。与向量化公式一样，考虑二维网格上的单一固相，其中固体单元编码为 1，空隙单元编码为 0。列表索引生长过程的主要步骤如下所述，并简要呈现于

算法 3.

1) 初始状态。固相的种子已根据给定的种子概率 S_d 放置。令 ϕ_a 表示当前固相体积分数，ϕ_s 表示目标值。固体-空隙映射存储在数组（x, y）中，$\in \{0,1\}$。2) 活动前沿构建。在基于列表的过程开始时，构建一个活动集 A，其中包含所有至少有一个相邻空隙单元的固体单元。因此，A 中的每个元素都是进一步生长的潜在来源。体素方向与基本 QSGS 表述和向量化 QSGS 表述中的相同，方向生长概率记为方向 i上的 G_i。3) 基于列表的方向生长。当 $\phi_a < \phi_s$ 且活动集 A 非空时，执行一次生长迭代。对于每个体素方向 i，收集当前活跃位点在该方向上的所有邻居，并将范围限制在计算域内的单元。从这些邻居中，只保留仍为空隙的单元作为候选。对于方向 i上的每个候选单元，独立抽取一个 (0,1) 区间内的随机数；若该随机数不超过生长概率 G_i，则将该候选单元转化为固体。方向 i 上被接受的单元会加入临时集合 A_{new}，并将其在相数组中的对应值设为 1。4) 活动前沿更新。处理完所有方向后，将所有方向上新占据单元的集合合并，形成 A_{new}。随后对该集合进行筛选：移除重复条目，并剔除不再有任何空隙邻居的单元，从而仅保留仍能支持进一步生长的位点。所得集合取代先前的活动集 $A \leftarrow A_{\text{new}}$，并根据更新后的相数组计算新的固相体积分数 ϕ_a。5) 迭代。重复执行基于列表的生长迭代，直到 ϕ_a 达到 ϕ_s 或活动集变为空集。在该方案中，新形成的固体单元会进入

活动集，但要到下一次全局迭代才会加入；这一点与向量化过程类似，但操作仅限于生长前沿附近，而不是遍及整个网格。单相对应的基于列表的算法总结于**算法 3**。

列表索引向量化显式时间步进 QSGS 公式相较于全场向量化方案具有明显的计算优势，因为它将所有高开销操作限制在活跃生长前沿，而不是整个体素域。在标准向量化 QSGS 过程中，每次生长迭代都会对 Ω 中的所有网格单元执行随机数生成、逻辑掩码和体素移位操作，且遍历 i 的每个体素方向，尽管实际上只有现有固体区域附近的一小部分单元会改变状态。因此，每步的开销随单元总数 N_{cells} 与方向数量的乘积而变化，不受当前固相体积分数 ϕ_a 的影响。相比之下，列表索引表述会维护一个显式活动集 A，其中仅包含至少有一个空隙邻居的固体单元。仅针对该集合及其邻居执行逐方向邻居构造、使用 G_i 进行概率检验以及相更新。每步的开销随生长前沿的规模 N_{active} 而变化；除生长极早期外，该规模通常远小于 N_{cells}。

处理的格点数量减少，在实现层面还带来了若干附带优势。首先，只为 C_i 中的候选邻居生成随机数，而不是针对整个计算域生成，从而减少了算术运算和内存流量。其次，内存访问模式更加局部化：相值的读取和写入集中在演化界面附近，这提高了 CPU 上的缓存复用率，也减少了 GPU 上带宽的浪费。第三，显式时间步进结构确保新生成的固体单元在每次全局迭代中只添加到活动集一次，避免对不再生长的单元重复处理。因此，对于典型的目标比例 ϕ_s 和实际的方向概率 G_i，列表索引方案能够实现与全场向量化 QSGS 相同的随机生长统计，同时显著减少每次迭代的数组操作和随机抽样次数，从而缩短运行时间，尤其是在大型和中等稀疏网格上。

为确保比较公平，并将算法影响与参数选择区分开来，本文的参数设置与 Yang 等人 [57] 报告的设置保持一致。他们引入了种子间距参数 s，用于定义种子之间允许的最小距离，从而提高初始晶核分布的空间均匀性。他们在研究中考察了多种确保种子间距的策略。本文采用了 Yang 等人选用的相同间距策略，即规则菱形膨胀方案 [57]。在该方法中，膨胀形状在二维中为正方形，在三维中为八面体，而非球体，如**图 1**所示。采用这种方法是出于计算效率的考虑：菱形区域可通过使用简单连通核进行连续膨胀操作生成，其计算成本远低于构造球形邻域。此外，本文还遵循 Yang 等人[57]的做法，采用可变方向生长概率 G_i（ϕ_a）

该概率取决于当前体积分数，而非原始 QSGS 表述中使用的恒定生长概率。相应的函数形式如下：

$$G_i(\phi) = G_{i,ref}\frac{\phi_s - 0.95\phi_a}{0.05\phi_s} \quad (1)$$

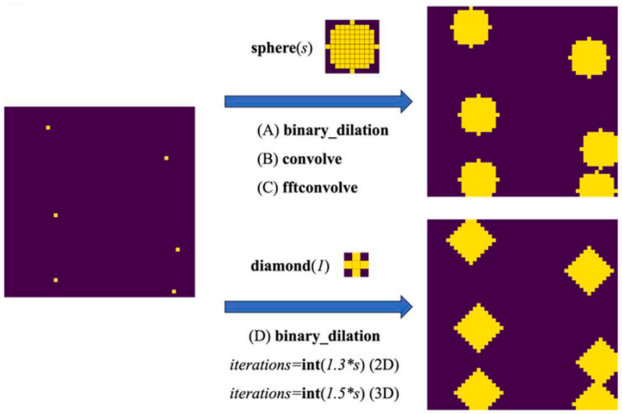


图 1。不同种子间距方法的示意图：(A) 球形膨胀；(B) 直接卷积；(C) FFT卷积；(D) 菱形膨胀 [Yang 等人 [57]]。对于前 3 种方法，膨胀使用较大的核进行，而菱形膨胀使用较小的核进行多次迭代。菱形的体积（面积）与球体相等。

算法 3列表索引向量化生长过程

1: A = {(x, y) **在** 计算域(Nx, Ny) | 相$(x, y) = 1$}
2: **当** $\phi_a < \phi_s$ **且** A **不** 为空
3: A_{new} = 空集
4: **对于** d **中的每个**方向
5: N_d = 计算域内的邻居$(A,\ ex_d,\ ey_d)$
6: C_d = {q **处于** N_d | 相$(q) = 0$}
7: **对于每个** q **在** C_d
8: **如果** 随机_数值 < G_d
9: 相$(q) = 1$
10: $A_{\text{new}} = A_{\text{new}} \cup \{q\}$
结束条件判断
11:
12: **结束循环**
13: **结束循环**
14: A = 剪枝$(A_{\text{new}},$ 相$)$
15: ϕ_a = 体积分数_(相 = 1)
16: **结束 while 循环**

---

3. 结果与讨论

3.1. 计算平台与硬件配置

受实际条件限制，本研究的所有计算均在一台标准消费级台式机上完成，而非专业工作站。该系统配备 Intel Core i7 14700KF CPU、64 GB DDR5 内存和 NVIDIA GeForce RTX 4060 GPU。RTX 4060 基于 Ada Lovelace 架构，单精度浮点数峰值性能为 15.11 TFLOPs，双精度浮点数峰值性能为 236.2 GFLOPs，配备 8 GB GDDR6 内存，峰值内存带宽为 272 GB/s。该显卡于 2023 年发布，属于主流型号，其内存容量和带宽均无法与典型高性能计算节点相媲美。在这些硬件条件下，本文报告的性能提升源于第 2 节所述算法的效率，尤其是列表索引向量化显式时间步进 QSGS 公式，而非 GPU 规格方面的优势。实际应用中，在该消费级平台上运行的优化实现，生成高分辨率多孔结构所需的时间可与采用专业级工作站或集群的研究相当，甚至更短。这表明，所观察到的加速主要归功于算法设计，而非高端计算资源。

3.2. 性能比较与可扩展性分析

为便于进行直接且严谨的比较分析，本研究采用的计算设置与 Yang 等人[57]建立的基准配置一致。模拟域由一个离散分辨率为400^3的立方体素网格构成。QSGS 的随机参数定义如下：种子概率为 $S_d = 2 \times 10^{-}$，参考方向生长概率为 $G_{i,ref}$ $=8 \times 10^{-}$，孔隙度固定为 ϕ 0.2。对于所有验证案例，均设置种子间距参数 s=15 。为满足这一约束，采用菱形膨胀方案，通过使用菱形核进行重复膨胀，而非采用球形邻域，从而优化内存访问模式。

采用单精度浮点运算（FP32）的各实现，其计算效率如**图 2(a)**所示。CPU 上运行的基线串行算法计算开销显著，在 400^3 体素上生成单个实现约需 23.5 分钟。在 CPU 并行框架中利用向量运算，可将运行时间缩短至约 5 分钟。移植到 GPU 后，向量化 QSGS 实现的运行时间约为 6 分钟。相比之下，我们的 LIETS 算法仅用 24 秒便完成结构生成；相较于 CPU 串行代码、 CPU 向量化版本和 GPU 向量化实现，其加速比分别约为 60 倍、12 倍和 15 倍。为便于比较，**图 2(b)**将我们的结果与[57]中报告的运行时间指标进行了对照。传统的基于 QSGS 的算法在 RTX 4060 GPU 上处理可比的

400^3 案例约需 100 秒，在数据中心级 A100 GPU 上则约需 30 秒，而我们的 LIETS 算法效率更高。值得注意的是，尽管运行于消费级 RTX 4060 上，我们的 LIETS 算法在结构生成速度上仍可与高端 A100 硬件相媲美，有时甚至更快。总体而言，这些基准测试证实，LIETS 算法在结构生成效率方面较现有 QSGS 实现取得了显著提升。

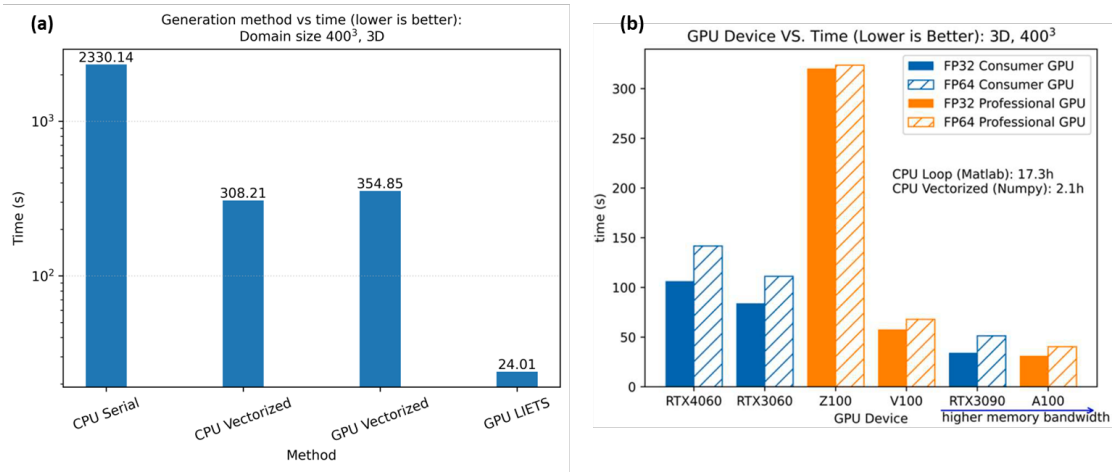


图 2。生成计算域尺寸为400^3的三维 QSGS 微结构的总体运行时间。(a) 在 RTX 4060 上采用 FP32 算术时，CPU 串行实现、CPU 向量化实现、GPU 向量化实现和 GPU LIETS 实现的墙钟时间。(b) Yang 等人[57]的 QSGS 实现在不同消费级和专业级设备上的 GPU 运行时间，以供比较。

图 3 展示了基于 LIETS 的结构生成器在 RTX 4060 GPU 上进行三维计算时的计算吞吐量，以单精度浮点数（FP32）和双精度浮点数（FP64）下每秒处理的节点数衡量。**图 3(a)** 展示了通过菱形膨胀实施种子间距约束（s=15）时的性能，而**图 3(b)** 展示了无约束情况下的性能。在间距约束s=15下，FP32 实现的速度在域尺寸为 200^3 至 600^3, 时介于 9.7×10^6 至 1.5×10^7 节点/秒之间，并在 600^3 计算域达到峰值 1.51×10^7 节点/秒。随着计算域进一步扩大（700^3 至 1000^3），计算速度有所下降，降至 6.1×10^6 至 2.1×10^6 节点/秒之间。这种性能下降可能是由于体素尺寸增大导致内存带宽饱和、缓存效率降低所致，也可能反映了个人台式机环境下消费级 RTX 4060 的功耗和热限制。FP64 结果也呈现出类似趋势：在 500^3 时峰值速度达到 8.12×10^6 节点/秒，并且在计算域扩大至 600^3之前始终保持较高水平（高于 7.0×10^6 节点/秒）。对于所研究的最大计算域，FP64 速度收敛至约 1.6×10^6 至 2.2×10^6 节点/秒。定量而言，与无约束情况相比，实施种子间距所带来的算法开销使生成速率降低了约 50%；尽管如此，

对于中等尺寸的计算域，该方法仍能维持约 10^7 节点/秒的高速度 .

如**图 3(b)**所示，解除间距约束显著提升了计算性能。在单精度浮点数模式下，速度随计算域增大而单调提升，从 200^3 时的 1.41×10^7 节点/秒提升至 800^3 时的最高 2.70×10^7 节点/秒。即使在最大分辨率 1000^3，下，单精度浮点数速度仍保持在 8.01×10^6 节点/秒。类似地，双精度浮点数实现的峰值速度为 500^3，时的 1.29×10^7 节点/秒；对于最大至 600^3 的计算域，速度均保持在 7.0×10^6 节点/秒以上。对于更大的网格（从 800^3 到 1000^3），双精度浮点数速度稳定在 4.52×10^6 至 3.57×10^6 节点/秒的范围内。对比**图 3(a)**和**3(b)**可知，消除间距约束后，计算域尺寸不超过 500^3，时，生成速度可提升 1.4 至 1.8 倍；对于更大的计算域，邻居检查操作的计算强度更为突出，生成速度则可提升约 2 至 4 倍。

Yang 等人 [57] 的外部基准测试以生成速度为指标重新表述，并展示于 **图4**。对于间距为 s=15 的菱形 QSGS 生成器，参考平台在 RTX 3060 上的速度约为 7.5×10^5 节点/秒（单精度浮点数）和 5.5×10^5 节点/秒（双精度浮点数），在 A100 GPU 上则分别约为 2.1×10^6 和 1.6×10^6 节点/秒。相比之下，我们的 LIETS 实现在消费级 RTX 4060 上，对于 400^3 至 500^3 的计算域，单精度浮点数速度约为 1.4×10^7 节点/秒，双精度浮点数速度最高可达 8.1×10^6节点/秒。与 RTX 3060 的结果相比，性能优势约为一个数量级；与 [57] 报告的 A100 数据相比，则实现了三至七倍的加速。此外，在没有间距约束的情况下，LIETS 生成器的峰值速度可达 2.7×10^7 节点/秒（单精度浮点数）和 1.3×10^7 节点/秒（双精度浮点数）。总的来说，**图2** 至 **4** 的对比证据表明，我们的算法在消费级和数据中心级图形处理器上均持续优于现有的基于 QSGS 的生成器，因此为多相多孔介质的大规模微结构生成提供了极具竞争力的计算工具。

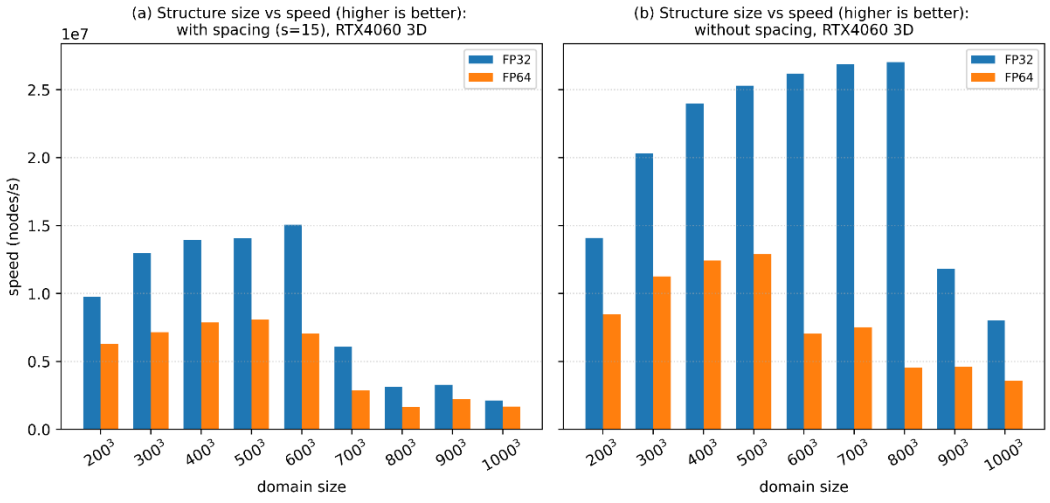


Fig. 3. 基于 LIETS 的结构生成器在 RTX 4060 GPU 上的吞吐量，作为

随三维域尺寸变化的函数，以每秒节点数为单位。(a) 对单精度浮点数和双精度浮点数，均通过菱形膨胀施加种子间距约束 s=15 时的结果。(b) 不施加种子间距约束时的对应结果。

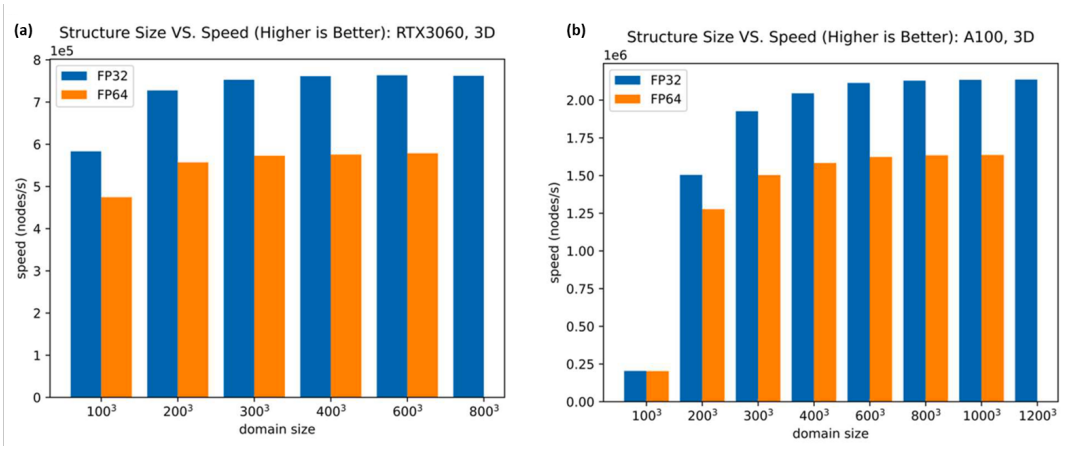


图4。Yang 等人提出的菱形 QSGS 生成器的参考吞吐量，针对不同三维域尺寸，以每秒节点数计量。(a) RTX 3060 GPU 在单精度浮点数和双精度浮点数下的性能。(b) NVIDIA A100 GPU 在单精度浮点数和双精度浮点数下的性能。

3.3. 基准测试

按照 Yang 等人 [57] 的做法，同样选用枫丹白露砂岩作为基于 QSGS 的结构生成的基准介质。枫丹白露砂岩是一种分选良好、以石英为主的颗粒多孔介质，黏土含量可忽略不计，文献报道的粒间孔隙率通常为 0.03~0.30，平均颗粒直径为 200~250 μm。在此基准测试中，砂岩的固体种子采用与 Yang 等人相同的表达式设定，即 $S_d = 6\phi_s\Delta^3/\pi d^3$，其中 ϕ_s 为固相分数，$\Delta = 4$ μm/体素为体素尺寸，d 表示目标颗粒直径。计算域为边长 500^3 个体素的立方体，孔隙度固定为 0.15，初始生长概率设为 $G_{i,\ ref} = 0.0008$。种子间距参数 s 从 0 变化至 40（即从 0 变化至 160 μm），步长为 5 个体素，以考察其对生成的枫丹白露型微观结构的影响。

为获得具有统计代表性的结果，对于间距参数 s 的每个取值，均生成五个独立实现。随后，在 PerGeos 中对所得数字岩石样本进行分析，以提取颗粒尺寸和孔径分布，结果汇总于**图5**。总体趋势与 Yang 等人[57]的结果完全一致，但由于采用了不同的分析工具，定量值并不完全相同。特别是，对于 s=30 ，数据表现出最佳的收敛性：在九种间距情况下，最大孔径最小；颗粒尺寸统计也呈现出最清晰的趋势，其平均值最小，且九组数据之间的范围最窄。

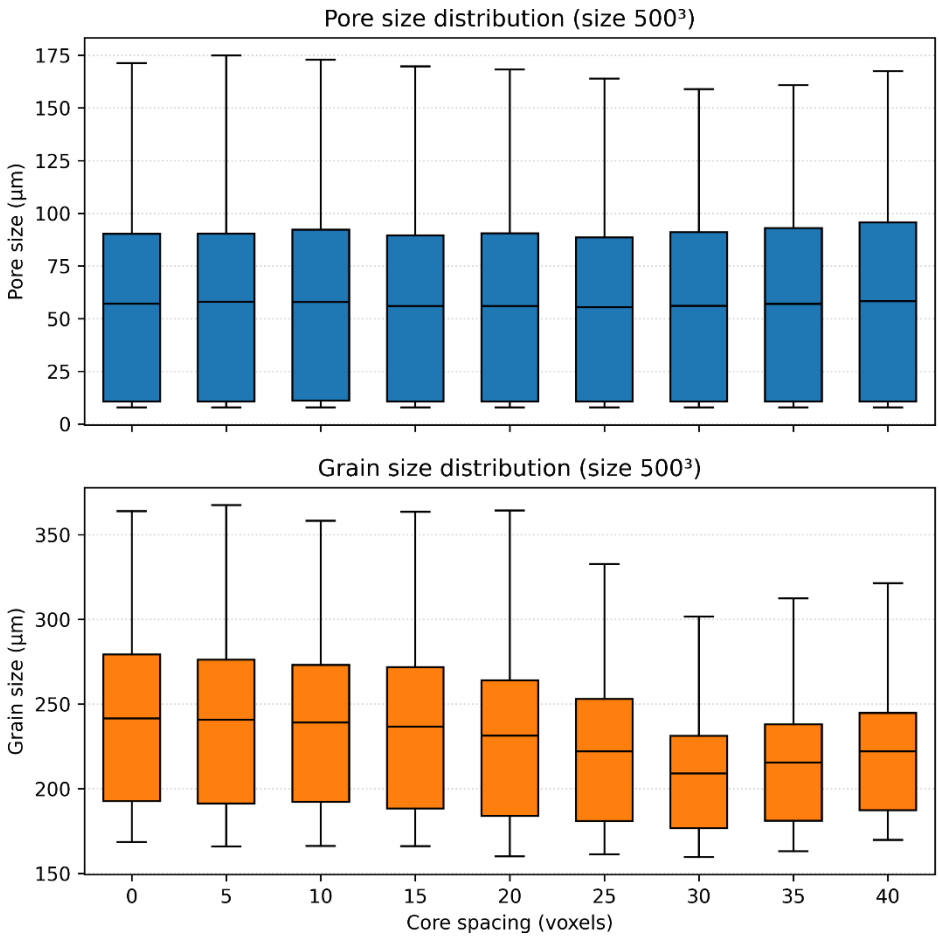


图5。种子间距对 QSGS 生成的枫丹白露砂岩孔隙与颗粒尺寸分布的影响（计算域尺寸 500^3）；孔径（上）和颗粒尺寸（下）的箱线图。

为验证流动性质，采用 LIETS-QSGS算法生成了十五个孔隙度介于 0.0542 和 0.2657 之间的数字岩石样本。除目标孔隙度外，所有微观结构生成参数均与前述基准测试保持一致。随后，使用开源求解器 pnflow 确定每个实现的绝对渗透率；该求解器基于从体素化结构中提取的孔隙网络进行流动模拟[60,61]。计算得到的渗透率-孔隙度数据与 Yang 等人汇编的枫丹白露砂岩实验数据集叠加显示，如**图 6** [57,62–67]所示，同时还展示了他们的数值预测结果。本研究结果全部落在实验范围内，表明 LIETS 生成的微观结构具有与实验室观测结果一致的输运性质。需要指出的是，在 $\phi = 0.10$ 和 0.15 处模拟得到的渗透率略低于 Yang 等人报告的数据。这一细微差异可能源于所采用数值方法的不同：Yang 等人采用了直接体素尺度格子玻尔兹曼方法（LBM），而本研究依赖孔隙网络建模（PNM）。网络提取和尺度放大过程所固有的几何简化

已知其得出的渗透率估算值略为保守。

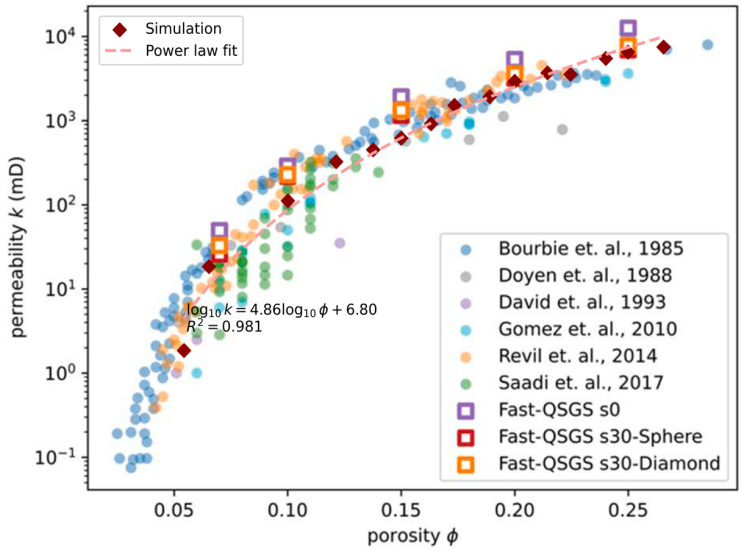


图 6。枫丹白露砂岩的渗透率-孔隙度关系。彩色圆圈和 Fast-QSGS 标记分别对应实验数据以及 Yang 等人汇编的基于 QSGS 的模拟结果 [57,62–67]；酒红色菱形符号和虚线幂律曲线则表示本研究获得的渗透率结果，并叠加在同一数据集上以便直接比较。

4. 结论

本研究开发了 QSGS 的列表索引显式时间步进（LIETS）向量化公式，并使用 NumPy 和 CuPy 在 Python 中实现。对于 400^3体素，我们的 LIETS 算法将生成时间从串行代码所需的几十分钟、向量化 CPU 和传统向量化 GPU QSGS 所需的几分钟，缩短至消费级 RTX 4060 上仅需 24 秒；在较大的计算域中，峰值吞吐量最高可达 2.7×10^7 节点/秒。针对枫丹白露砂岩开展的系统基准测试表明，该方法能够重现孔隙和颗粒尺寸对种子间距的预期依赖关系，并得出约为 $s=30$ 个体素的最佳间距。基于 LIETS 生成样本的模拟所得渗透率–孔隙度数据完全落在枫丹白露砂岩的实验范围内，并且与此前发表的 Fast-QSGS 结果 [57]高度吻合。这些发现表明，LIETS QSGS 算法在保留物理真实性的同时显著提升了性能；即使使用普通消费级硬件，也能够高效生成颗粒无序介质的高分辨率微观结构。

数据可用性声明: 本研究开发的代码已开源，且

可在此处获取 https://github.com/RonKU42/LIETS-QSGS

致谢: Ruofan Wang 感谢哈利法大学为其研究生学习提供奖学金。作者感谢人工智能工具在语言润色方面提供的帮助。

作者贡献: R. W.：撰写——初稿、软件、调查、数据整理、概念构思。M. A. K.：撰写——审阅与编辑、监督、调查、正式分析、概念构思。

利益冲突：作者声明不存在利益冲突。

参考文献

1. ØREN, P.-E. & Bakke, S. 基于过程的砂岩重建及输运性质预测。《多孔介质中的传输》 **46**, 311–343 (2002). 2. Zhao, Z. & Zhou, X.-P. 利用多类型孔隙结构分析和 X-μCT 成像评估多孔地质材料的孔隙尺度扩散率和渗透率。《水文地质学杂志》 **615**, 128704 (2022). 3. Liang, J. 等 基于显微断层图像的砂屑岩弹性模量：实用的数字岩石物理工作流。《地球物理研究杂志：固体地球》 **125**, e2020JB020422 (2020). 4. Wang, Z., Hu, M. & Steefel, C. 耦合矿物溶解与沉淀的反应性运移孔隙尺度建模。《水资源研究》 **60**, e2023WR036122 (2024). 5. Du, X., Liu, E., Shan, R., Yang, F. & Ling, B. 矿物溶解诱发的孔隙尺度流动与溶质运移非均质性。《流体物理学》 **37**, 066602 (2025). 6. Mehmani, A., Kelly, S. & Torres-Verdín, C. 在非常规岩石物理学中运用数字岩石物理工作流：机遇、挑战与基准测试综述。《石油科学与工程杂志》 **190**, 107083 (2020). 7. Huang, C. 等 基于实验室实验构建数字岩石物理学中的孔隙结构与岩性。《石油勘探开发技术杂志》 **11**, 2113– 2125 (2021). 8. Verri, I. 等 用于分析砂岩和致密岩石的数字岩石物理工作流开发。《石油科学与工程杂志》 **156**, 790–800 (2017). 9. Tembely, M., AlSumaiti, A. M. & Alameri, W. S. 利用机器学习和深度学习，根据 X 射线微型CT成像估算复杂碳酸盐岩的渗透率。《能源报告》 **7**, 1460–1472 (2021). 10. Wang, Z.（王梓）等 非均质结构中矿物溶解的孔隙尺度研究及渗透率的深度学习预测。《流体物理学》 **34**, 116609 (2022). 11. Jiang, F. 等 利用多尺度 X 射线 CT 图像、数字岩石建模和深度学习技术进行渗透率升尺度。《水资源研究》 **59**, e2022WR033267 (2023). 12. Xie, C.（谢驰宇）等 利用深度学习预测不同尺寸数字岩石的相对渗透率曲线。《流体物理学》 **35**, 096605 (2023). 13. Gärttner, S., Alpak, F. O., Meier, A., Ray, N. & Frank, F. 利用基于直接数值模拟的物理信息卷积神经网络估算三维微型CT图像的渗透率。《计算地球科学》 **27**, 245–262 (2023). 14. Wang, Z., Hou, Z. & Cao, D. 基于深度学习的数字岩石物理分析：从利用小样本学习进行图像分割和边缘检测到力学性质预测。《地热能科学与工程》 **256**, 214133 (2026)。

15. Saxena, N. 等 基于微型CT图像的岩石性质：用于分辨率、孔隙体积和视场的数字岩石变换。《水资源进展》 **134**, 103419 (2019). 16. Ahmad, R., Liu, M., Ortiz, M., Mukerji, T. & Cai, W. 利用分层均质化计算岩石的有效弹性模量。《固体力学与物理学杂志》 **174**, 105268 (2023). 17. Tian, Y. 等 基于原位应力加载CT成像和U-Net深度学习的深部油气藏变形多尺度介质数字岩石建模。《海洋与石油地质学》 **171**, 107177 (2025). 18. Lin, W. 等 使用模板匹配进行多尺度数字多孔岩石重建。《水资源研究》 **55**, 6911–6922 (2019). 19. Mayo, S. 等 利用同步辐射微型CT和氙K边减影对砂岩、碳酸盐岩、页岩和煤进行定量微孔隙表征。《燃料》 **154**, 167–173 (2015). 20. Pereira Nunes, J. P., Blunt, M. J. & Bijeljic. 微型CT图像中的碳酸盐溶解孔隙尺度模拟。《地球物理研究杂志：固体地球》**121**, 558–576 (2016). 21. Callow, B., Falcon-Suarez, I., Marin-Moreno, H., Bull, J. M. & Ahmed, S. 用于非均质砂岩孔隙度和渗透率定量的最优基于X射线微型CT图像的方法。《国际地球物理学杂志》 **223**, 1210–1229 (2020). 22. Lucas-Oliveira, E. 等 砂岩的微型计算机断层扫描：原始、滤波和分割数据集。《数据简报》 **41**, 107893 (2022). 23. Liu, J. (刘继龙), Xie, R. (谢然红), Guo, J. （郭江峰） , Xu, C. （徐陈昱） & Wei, H. （卫弘媛）。页岩多组分数字岩心构建及三维微孔隙结构表征。《流体物理学》 **35**, 082003 (2023). 24. Esteves Ferreira, M. 等 砂岩和碳酸盐岩的全尺度显微分辨率断层扫描图像，并附有实验孔隙度和渗透率值。《科学数据》 **10**, 368 (2023). 25. Ishola, O. & Vilcáez, J. 将MICP数据补充到X射线微型CT数据中，以实现碳酸盐岩流动性质的高分辨率孔隙尺度模拟。《地热能科学与工程》 **239**, 212982 (2024). 26. Wetzel, M., Kempka, T. & Kühn, M. 基于数字岩石物理学评估合成储层砂岩性质的成岩趋势。《矿物》 **11**, (2021). 27. Ibrahim, E. R., Jouini, M. S., Bouchaala, F. & Gomes, J. 利用三维打印和数字岩石物理学模拟并验证合成与真实岩石模型的孔隙度和渗透率。《*ACS*欧米伽》 **6**, 31775– 31781 (2021). 28. Song, R. 等 孔隙尺度天然砂岩的三维打印及微观结构与单相/两相流动性质的对比分析。《能源》 **261**, 125226 (2022). 29. Bryant, S. & Blunt, M. 简单多孔介质中相对渗透率的预测。《物理评论*A*》 **46**, 2004–2011 (1992). 30. Chi, P., Sun, J., Zhang, R., Luo, X. & Yan, W. 大尺度各向异性

利用二维页岩图像和生成对抗网络重建三维数字岩石。《海洋与石油地质学》 **170**, 107065 (2024). 31. Yan, W., Golsanami, N., Xing, H., Li, S. & Chi, P. 一种具有强孔隙连通性的三维数字岩石快速重建方法。《纯粹与应用地球物理学》**181**, 1601–1616 (2024). 32. Čapek, P. 论模拟退火算法对于受低阶微观结构描述符约束的随机重建的重要性。《多孔介质中的输运》 **125**, 59–80 (2018). 33. Song, S. 一种用于重建三维大尺度多孔介质的改进模拟退火算法。《石油科学与工程杂志》 **182**, 106343 (2019). 34. Gerke, K. M., Karsanina, M. V. & Mallants, D. 通用随机多尺度图像融合：页岩的应用实例。《科学报告》**5**, 15880 (2015). 35. Karsanina, M. V. & Gerke, K. M. 分层优化：采用重标度相关函数实现快速、稳健的多尺度随机重建。《物理评论快报》 **121**, 265501 (2018). 36. Xu, Z., Teng, Q., He, X., Yang, X. & Li, Z. 基于数组结构的多点统计方法：用于枫丹白露砂岩三维重建。《石油科学与工程杂志》 **100**, 71–80 (2012). 37. Zhang, T., Du, Y., Huang, T. & Li, X. 使用多点统计进行GPU加速多孔介质三维重建。《计算地球科学》 **19**, 79–98 (2015). 38. Wu, Y. 等 基于三维训练图像的多点统计多孔介质三维重建。《天然气科学与工程杂志》**51**, 129–140 (2018). 39. Xie, Q., Xu, J., Yuan, Y. & Niu, C. 使用多点统计进行多孔介质重建的定量分析。《地球流体》 **2020**, 8844968 (2020). 40. Okabe, H. & Blunt, M. J. 使用多点统计进行孔隙空间重建。《石油科学与工程杂志》 **46**, 121–137 (2005). 41. Huang, T., Lu, D.-T., Li, X. & Wang, L. 基于GPU的SNESIM实现，用于多点统计模拟。《计算机与地球科学》 **54**, 75–87 (2013). 42. Zhang, T., Du, Y., Huang, T. & Li, X. 使用多点统计进行GPU加速多孔介质三维重建。《计算地球科学》 **19**, 79–98 (2015). 43. Huang, Y., Xiang, Z. & Qian, M. 基于深度学习的多孔介质微观结构定量表征与重建方法。《物理评论*E*》 **105**, 015308 (2022). 44. Li, J., Teng, Q., Zhang, N., Chen, H. & He, X. 基于深度学习的二维图像三维数字岩心随机重建方法。《物理评论*E*》 **107**, 055309 (2023). 45. Zhang, T., Shen, T., Hu, G., Lu, F. & Du, X. 使用双判别器VAE-GAN进行数字岩心随机重建。《地热能科学与工程》**236**, 212744 (2024). 46. Li, Q. 等 使用全卷积神经网络重建三维数字岩心。《应用地球物理学》 **17**, 401–410 (2020). 47. Sepúlveda, E., Dowd, P. A. & Xu, C. 具有空间校正的模糊聚类

及其在地质冶金分区中的应用。《数学地球科学》*Math Geosci* **50**，895–928（2018年）。48. Wang, M., Wang, J., Pan, N. & Chen, S. 微尺度随机多孔介质有效热导率的介观预测。《物理评论E》*Phys. Rev. E* **75**，036702（2007年）。49. Wang, M., Pan, N., Wang, J. & Chen, S. 微颗粒多孔介质中相分布效应对有效热导率影响的介观模拟。《胶体与界面科学杂志》*Journal of Colloid and Interface Science* **311**，562–570（2007年）。50. Huang, H., Chen, R., Tao, S., Wang, Y. & Zhang, L. 柴油颗粒过滤器中烟炱动态行为与催化再生研究。《化学工程杂志》*ChemicalEngineering Journal* **489**，151498（2024年）。51. Xia, H.（夏胡熙）、Lai, Y.（赖远明）& Mousavi-Nezhad, M. 采用格子玻尔兹曼方法对冻土渗透率的介尺度研究。《流体物理学》*Physics of Fluids* **36**，093616（2024年）。52. Li, T., Li, M., Jing, X., Xiao, W. & Cui, Q. 孔隙尺度各向异性与孔隙分布非均质性对多孔介质渗透率的影响机制。《石油勘探与开发》*Petroleum Exploration and Development* **46**，594–604（2019年）。53. Zhao, D. 等 基于格子玻尔兹曼方法重构多孔混凝土渗透率的数值研究。《建筑》*Buildings* **14**，（2024年）。54. Ju, L., Wang, S., Shan, B., Sun, S. & Yan, B. 耦合非均质表面反应与矿物溶解的溶质传输孔隙尺度格子玻尔兹曼模型。《化学工程杂志》*Chemical Engineering Journal* **498**，155191（2024年）。55. Hao, H. & Xu, Z. G. 考虑溶解与沉淀的多孔介质形态演化孔隙尺度研究。《国际多相流杂志》*International Journal ofMultiphase Flow* **168**，104569（2023年）。56. Chen, S., Ai, B., Li, Y., Huang, X. & Yang, X. 随机各向同性多孔介质有效热导率的分析与预测。《边界元工程分析》*Engineering Analysiswith Boundary Elements* **167**，105895（2024年）。57. Yang, G., Liu, T., Lu, X. & Wang, M. Fast-QSGS：用于颗粒无序介质结构生成的GPU加速程序。《计算机物理通讯》*Computer PhysicsCommunications* **302**，109241（2024年）。58. Harris, C. R. 等 使用NumPy进行数组编程。《自然》*Nature* **585**，357–362（2020年）。59. Okuta, R., Unno, Y., Nishino, D., Hido, S. & Loomis, C. CuPy：用于英伟达GPU计算的NumPy兼容库。《神经信息处理系统会议》*NIPS*（2017年）。60. Valvatne, P. H. & Blunt, M. J. 混合润湿介质中两相流的预测性孔隙尺度建模。《水资源研究》*Water Resources Research* **40**，（2004年）。61. Dong, H. & Blunt, M. J. 从微型计算机断层成像图像中提取孔隙网络。《物理评论E》*Phys. Rev. E* **80**，036307（2009年）。62. Bourbie, T. & Zinszner, B. 枫丹白露砂岩的水力学性质和声学性质与孔隙度的关系。《地球物理研究杂志：固体地球》*Journal of Geophysical Research: SolidEarth* **90**，11524–11532（1985年）。63. Coker, D. A., Torquato, S. & Dunsmuir, J. H. 通过断层成像分析研究枫丹白露砂岩的形态与物理性质。《地球物理研究杂志：固体地球》*Journal of GeophysicalResearch: Solid Earth* **101**，17497–17506（1996年）。

64. Saadi, F. A., Wolf, K.-H. & Kruijsdijk, C. V. 枫丹白露砂岩的表征：石英加大及其对孔喉结构的影响。《石油环境与生物技术杂志》*J PetEnviron Biotechnol* **08**, （2017年）。65. Doyen, P. M. 砂岩的渗透率、电导率和孔隙几何形态。《地球物理研究杂志：固体地球》*Journalof Geophysical Research: Solid Earth* **93**，7729–7740（1988年）。66. Gomez, C. T., Dvorkin, J. & Vanorio, T. 枫丹白露砂岩孔隙度、渗透率、电阻率和速度的实验室测量。《地球物理学》*Geophysics***75**，E191–E204（2010年）。67. Revil, A., Kessouri, P. & Torres-Verdín, C. 枫丹白露砂岩的电导率、诱导极化和渗透率。《地球物理学》*Geophysics* **79**，D301–D318（2014年）。