

NUMERYCZNA REKONSTRUKCJA MIKROSTRUKTURY GLEBY MINERALNEJ

H. Czachor

Instytut Agrofizyki im. B. Dobrzańskiego PAN, ul. Doświadczalna 4, 20-290 Lublin
hczachor@demeter.ipan.lublin.pl

Streszczenie. Podstawowymi wyznacznikami struktury ośrodka ziarnistego są: skład granulometryczny i porowatość. Innymi słowy struktura jest określona przez przestrzenny rozkład tworzących go cząstek. Rozkład ten można wyznaczyć poprzez komputerową symulację upakowania zbioru cząstek kulistych o składzie granulometrycznym badanej gleby czyli stworzenie ośrodka wirtualnego. Przedstawiono opis takiego algorytmu oraz warunki jakie muszą być spełnione aby ośrodek wirtualny odzwierciedlał najistotniejsze cechy gleby mineralnej. Wykonano symulacje upakowania dla 5 różnych składów granulometrycznych odpowiadających glebom piaszczystym i pylasto - piaszczystym. Wyliczono porowatości otrzymanych ośrodków wirtualnych i porównano je z wartościami doświadczalnymi. Stwierdzono że różnica względna między porowatością układów rzeczywistych i wirtualnych w żadnym przypadku nie była większa jak 5%, co było potwierdzeniem możliwości wykorzystania tej metody do badań realnych ośrodków granularnych w tym gleb mineralnych.

Słowa kluczowe: granularny ośrodek wirtualny, symulacja, skład granulometryczny.

WSTĘP

Procesy transportu masy i energii zachodzące w układzie: gleba - roślina - atmosfera opisywane są przy pomocy układu równań różniczkowych typu dyfuzyjnego dotyczących: wody, soli mineralnych, ciepła, gazów (powietrza, dwutlenku węgla) itp. W równaniach tych właściwości gleby uwzględniane są przy pomocy odpowiednich współczynników przenoszenia poszczególnych strumieni. Współczynniki te zależą przede wszystkim od składu granulometrycznego oraz geometrii i rozkładu porów w glebie i dlatego można je uważać za

pochodne struktury gleby, rozumianej jako przestrzenna konfiguracja cząstek fazy stałej gleby [5,8]. Poznanie jej jest więc potrzebne, lecz praktycznie niemożliwe lub bardzo trudne do wykonania.

Na podstawie przeprowadzonych badań wydaje się że, metoda symulacji komputerowej może być bardzo pomocna w przewycięzeniu tych trudności. Ogólna zasada tych badań polega na tworzeniu tzw. struktury wirtualnej uwzględniającej istotne dla prowadzonych badań właściwości badanego układu. Szczególną cechą takiej struktury jest dokładna znajomość przestrzennego rozkładu elementów składowych. Fakt ten stwarza podstawę do wszechstronnych badań rzeczywistych układów granularnych.

Podstawowym celem pracy jest przedstawienie algorytmu tworzenia wirtualnej struktury granularnej, określenie jego możliwości i ograniczeń w zastosowaniu do badań mikrostruktury struktury gleby.

WIRTUALNY OSRODRK GRANULARNY

W prezentowanym opracowaniu przedstawiono zasadę tworzenia numerycznej reprezentacji mikrostruktury ośrodek glebowy, przy założeniu kulistości cząstek, których rozkład średnic określony jest przez skład granulometryczny gleby. Drugim czynnikiem brany pod uwagę przy rekonstrukcji jest porowatość objętościowa gleby [2,3]. Zbiór takich cząstek, upakowanych według określonych zasad, tworzy wirtualny (numeryczny) ośrodek granularny.

Problem który należało rozwiązać, polegał na znalezieniu algorytmu umożliwiającego "upakowanie" polidispersyjnego zbioru cząstek kulistych w taki sposób, aby powstały układ przestrzenny miał porowatość identyczną/zbliżoną do porowatości badanej gleby. Termin "upakowanie" oznacza ułożenie zbioru cząstek zgodnie z podstawowymi zasadami równowagi mechanicznej i geometrii.

W przyjętym modelu tworzenie struktury wirtualnych cząstek ma charakter iteracyjny, tzn. cząstka po cząstce. Zasada upakowania dla każdej z nich sprowadza się do znalezienia położenia w którym:

- jest ona styczna do trzech cząstek wcześniej przyłączonych do tworzonego agregatu,
- jej powierzchnia nie przecina (ang. non overlapping) żadnej z wcześniej przyłączonych cząstek.

Dla cząstki o numerze i -tym mającym promień $R(i)$ określenie współrzędnych środka $X(i)$, $Y(i)$, $Z(i)$ sprowadza się do rozwiązania układu równań:

$$\begin{aligned}
 (X(i)-X(k))^2+(Y(i)-Y(k))^2+(Z(i)-Z(k))^2 &= (R(i)+R(k))^2 \\
 (X(i)-X(l))^2+(Y(i)-Y(l))^2+(Z(i)-Z(l))^2 &= (R(i)+R(l))^2 \\
 (X(i)-X(m))^2+(Y(i)-Y(m))^2+(Z(i)-Z(m))^2 &= (R(i)+R(m))^2
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

gdzie: indeksy k, l, m określają numery cząstek do których styczna jest i -ta cząstka.

Algorytm tworzenie wirtualnej struktury trójwymiarowej składa się z kilku bloków, których celem kolejno jest:

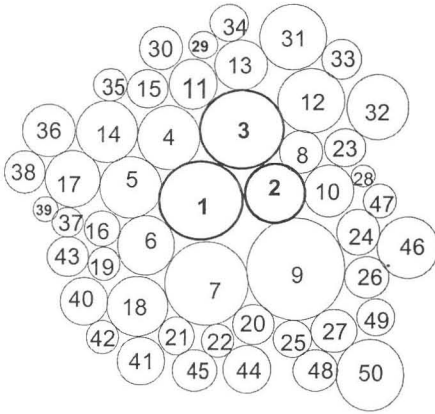
- a) zamiana udziałów masowych składu granulometrycznego na udziały ilościowe cząstek w poszczególnych klasach granulometrycznych,
- b) utworzenie "zarodka" składającego się z trzech do pięciu stycznych cząstek z najdrobniejszej frakcji,
- c) określenie zbioru potencjalnych sąsiadów przyłączanej cząstki,
- d) przyłączenie kolejnej cząstki, które realizowane przy pomocy iteracyjnej procedury, wewnątrz której można wyróżnić:
 - określenie promienia cząstki,
 - określanie położenia w którym jest ona styczna do trzech cząstek o numerach k, l, m
 - sprawdzenie warunku overlapping i ewentualne powtórzenie procedury z poprzedniego punktu w odniesieniu do innej trójki cząstek. Dla cząstki k -tej ta część programu realizowana jest wewnątrz podwójnie zagnieżdżonej pętli w której $l=k+1, k+2..$, oraz $m=l+1, l+2..$,
 - przyłączenie cząstki do struktury poprzez przypisanie jej numeru.

Celem ostatecznym programu jest stworzenie wirtualnej struktury, która miałaby taki sam skład granulometryczny i porowatość jak badana gleba. W badaniach przyjęto założenie, że dwa układy rzeczywisty i wirtualny, spełniające powyższe warunki:, są podobne, co oznacza możliwość wnioskowania o właściwościach gleby na podstawie wyników uzyskanych z analizy układu wirtualnego.

Ogólną zasadę działania opracowanego algorytmu upakowywania trójwymiarowej (3D) struktury wirtualnej przedstawiono przy pomocy dwuwymiarowego (2D) analogu (Rys.1).

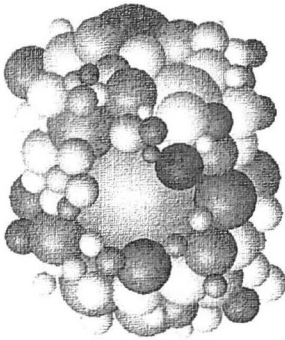
Rysunek przedstawia zbiór cząstek (okręgów) o różnych średnicach. Każda cząstka ma numer określającą kolejność jej przyłączenia do układu. Analiza rysunku pozwala zauważyć prawidłowość rządzącą tworzeniem struktury: cząstki przyłączane do układu otaczają możliwie "szczelnie" cząstki już w nim istniejące. Otaczanie następuje w kolejności liczb naturalnych, tzn. najpierw otaczana jest

cząstka 1-a (numery cząstek otaczających 2,3,4,5,6,7,8). Następna z nich tzn. druga jest styczna do cząstek o numerach 1 i 3, a przyłączone zostały do niej cząstki 9,10. Dla 3-ej cząstki odpowiednio numery 1,2,4,9 określają cząstki pierwotnie styczne, a przyłączone mają numery 11,12, itd. Taki sposób upakowywania w znacznym stopniu zapobiega powstawaniu wewnątrz struktury pustych obszarów o wymiarach większych od średnicy przyłączanych cząstek lub struktur nie mających cech badanego ośrodka.



Rys. 1. Dwuwymiarowy analog 3-wymiarowej struktury granularnej

Fig. 1. 2D analog of 3D granular structure.



Rys. 2. Wizualizacja agregatu wirtualnego.

Fig. 2. Visualisation of a virtual granular aggregate.

Tworzenie wirtualnej struktury 3D odbywa się analogicznie jak dla przypadku 2D, z tą różnicą, że obliczenia są bardziej złożone. Liczba kombinacji trójcząstkowych, jakie należy zbadać aby określić położenie przyłączanej cząstki, rośnie bardzo szybko ze wzrostem ich liczby w układzie. Zmniejszenie tej liczby było warunkiem realności planowanych obliczeń. Dlatego ograniczono zbiór cząstek mogących tworzyć poszukiwaną konfigurację do tych które, znajdowały się w sąsiedztwie cząstki otaczanej, tzn. w odległości nie większej niż średnica przyłączanej cząstki.

Rysunek 2 przedstawia wizualizację agregatu wirtualnego składającego się z kilkudziesięciu cząstek kulistych. Numery cząstek określają kolejność ich przyłączania do struktury.

Aby ośrodek wirtualny, tworzony według opisanej procedury, mógł służyć badaniu realnego układu glebowego musi być do niego podobny tzn. charakteryzować się pewnymi jego cechami. Uznano że najistotniejsze z nich to:

1. nieuporządkowany charakter struktury ,
2. porowatość i skład granulometryczny układu wirtualnego i rzeczywistego muszą być takie same,
3. wielkość utworzonej struktury musi być na tyle duża aby mogła symulować ośrodek nieskończenie duży (w stosunku do rozmiarów tworzących go cząstek).

Brak którejkolwiek z tych cech przez uzyskiwane wirtualne układy granularne dyskwalifikowałoby przedstawioną metodę.

WERYFIKACJA METODY

Odpowiedź na pytanie czy układy wirtualne generowane przy pomocy opracowanych programów mają wymienione w poprzednim rozdziale cechy, jest możliwa na podstawie analizy ich porowatości.

Wykonując przekrój struktury trójwymiarowej (3D) otrzymuje się obraz składający się ze zbioru okręgów o znanych promieniach i współrzędnych środków. W stereologii układ uważa się za nieuporządkowany jeśli porowatość objętościowa P_v równa się porowatości powierzchniowej dowolnego przekroju P_s [1,3,8]. Ponadto wartości porowatości powierzchniowej P_s dowolnych przekrojów płaskich winny być również sobie równe. Porowatości P_v i P_s określono analitycznie na podstawie zależności geometrycznych i znajomości geometrii struktury dwu-i trójwymiarowej tzn. 2D i 3D [2].

Przedmiotem badań były modelowe struktury : frakcje piasku i piasek pylasty o składach granulometrycznym przedstawionych w Tabeli 1. W Tabeli podane są porowatości: ośrodków rzeczywistych P_{ex} , które określono doświadczalnie i układów wirtualnych P_{sym} , które zostały wyliczone z zależności geometrycznych.

Z przeprowadzonych obliczeń wynika, że porowatości przekrojów niewiele różniły się od porowatości objętościowej, tzn. $P_v = P_s$, co dowodziło nieuporządkowanego charakteru struktur układów wirtualnych i potwierdzało poprawność algorytmu symulacji.

Z Tabeli 1 wynika, że porowatości układów wirtualnych jest bliska (błąd względny $\leq 5\%$) porowatości ośrodków rzeczywistych, co oznacza spełnienie drugiego warunku ich podobieństwa.

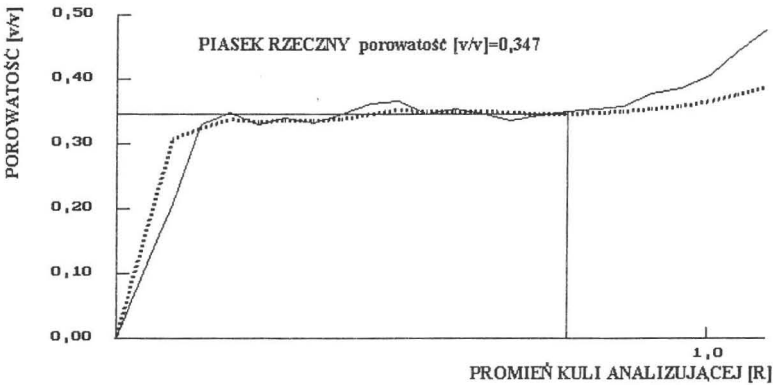
Określenie minimalnej ilości cząstek (objętości ośrodka), powyżej której układ mógłby być uznany za reprezentatywny dla danego składu granulometrycznego, wymagało stworzenie prostego kryterium weryfikującego. Kryterium to może być określone na podstawie wyliczonej zależności porowatości objętościowych od

analizowanej objętości ośrodka, tzn. $P_v = f(V)$. Minimalną objętość ośrodka powyżej której porowatość jest stała, tzn. nie zależy od objętości analizowanego obszaru, przyjęto uważać za objętość reprezentatywną (ang. Representative Elementary Volume REV). Rysunek 3 przedstawia porowatość otrzymanej struktury wirtualnej piasku rzecznego (patrz Tabela 1) w zależności od promienia tzw. kuli analizującej. Kula ta umożliwia obliczenie porowatości ośrodka znajdującej się w jej wnętrzu. W miarę wzrostu jej promienia rośnie objętość analizowanej części ośrodka. Dla małych promieni zmiany porowatości są stosunkowo duże, ale począwszy od pewnej wartości prawie nie zmieniają się, co świadczy tym że objętość wewnątrz kuli analizującej jest wystarczająco duża aby być uznana za reprezentatywną.

Tabela 1. Skład granulometryczny, porowatości badanych układów piaszczysto - pylastych: rzeczywiste P_{ex} i ośrodka wirtualnego P_{sym}

Table 1. Grain size distributions, porosity of investigated media: real and virtual

Opis ośrodka (promień cząstek w mikronach i udział frakcji granulometrycznej)	Porowatość objętościowa (%)	
	z symulacji	z doświadczenia
	P_s	P_{ex}
kulki szklane: 10-31)-1,3%; 31-50)-16,0%; 50,0-62,5)-66,4%; (62,5-80,0)-14,1%	36,1	34,9
frakcja piasku 1 (125-250)-100,0%	37,1	37
frakcja piasku 1 (88-105)-100,0%	36,6	36,5
frakcja piasku 1 (52,0-62,5)-100,0%	40,1	39
piasek pylasty: (<25)-4%; (25-40)-1,0% ; (40-50)-1,4%; (50-70,0)-3,0% (75-100)-4%; (100-150,0)-15,5% (150-250)-25%; (250-350)-16,51% (350-500)-14,3%; (500 600)-14,1% (600-750)-5,5%; (750-1000)-14,1%	34,7	34,2



Rys. 3. Zależność porowatości średniej całego agregatu (linia kropkowana) i warstwy kulistej (ciągła) od promienia kuli analizującej (objętości).

Fig. 3. Porosity of whole aggregate (dashed line) and of spherical layer (solid line) vs analysed volume.

Tworzone układy granularne składały się z 10 000 - 30 000 cząstek kulistych. Kryterium powyższe zastosowane do zbadanych ośrodków pozwoliło na sformułowanie wniosku ogólnego dotyczącego objętości reprezentatywnej dla ośrodka granularnego: im większy jest stosunek skrajnych średnic klas granulometrycznych, tym większa ilość cząstek jest wymagana aby powstała objętość reprezentatywna. O ile dla układu monodispersyjnego ilość ta wynosi ca 8000, o tyle dla piasku pylastego z Tabeli 1 - ca 30 000, co stanowiło górną granicę możliwości sprzętowych dla PC Pentium i Borland Pascala.

OGRANICZENIA METODY

Konieczność przedstawienie składu granulometrycznego badanej gleby w postaci udziałów ilości cząstek w klasach powoduje pewne ograniczenie możliwości badań układów granularnych przy opisanej pomocy metody. Wynika to z faktu, że liczba cząstek związana z daną frakcją jest odwrotnie proporcjonalna do trzeciej potęgi średnicy (promienia) geometrycznej. Jeśli np. w glebie pyłowej udziały odpowiadające piaskowi grubemu i pyłowi drobnemu są jednakowe to stosunek ilości cząstek związanych z tymi frakcjami wynosi około 1:10 000. W konsekwencji struktura wirtualna dla takiej gleby musi składać się z przynajmniej z kilkudziesięciu tysięcy cząstek. Uwzględnienie iłu w identyczny

sposób jak piasku i pyłu wiązałoby się z koniecznością rozpatrywania zbiorów około 1000 razy większych, co jest teoretycznie tylko możliwe do zrobienia. Istnieje jeszcze przynajmniej jedna przyczyna dla której uwzględnienie iłu w taki sam sposób jak piasku jest nieracjonalne : kształt cząstek iłu jest zbliżony bardziej do kartki papieru niż do kuli. Z tego względu (mała masa i duża powierzchnia właściwa) zasady upakowania cząstek iłu muszą być inne. Wydaje się więc uzasadnione traktowanie iłu na zupełnie innych zasadach, jak oddzielną fazę gleby. Jednym ze sposobów umożliwiających uwzględnienie frakcji iłu może być model w którym przyjmuje się, że cząstki piasku i pyłu otoczone są warstwą iłu o grubości wynikającej z jego udziału masowego. Należałoby wówczas przypisać tej warstwie określoną porowatość i właściwe dla iłu charakterystyki mechaniczne, po czym dla takich cząstek stosować algorytmy upakowania cząstek kulistych.

WNIOSKI

Przedstawiono nowy sposób badania granulanych ośrodków glebowych polegający na komputerowej rekonstrukcji ich struktury przy pomocy upakowania zbioru poldispersyjnych cząstek kulistych i tworzeniu tzw. wirtualnego ośrodka . W przyjętym modelu zakłada się, że identyczność składów granulometrycznych ośrodka rzeczywistego i wirtualnego oraz równość ich porowatości dowodzi ich podobieństwa, co pozwala wnioskować o właściwościach ośrodka rzeczywistego na podstawie wyników uzyskanych z analizy ośrodka wirtualnego.

Przedstawiono opis algorytmu tworzenia ośrodka wirtualnego, określono warunki jakie musi on spełniać aby mógł być reprezentatywny dla ośrodka rzeczywistego (ang. Representative Element Volume REV) [7].

Celem stworzonego numerycznego modelu struktury gleby jest umożliwienie dokonywania wszechstronnej analizy badanej struktury i przewidywanie jej charakterystyk fizycznych , jak krzywa pF, współczynnik przewodnictwa wody itp., bez konieczności wykonywania długotrwałych i kosztownych pomiarów.

Przedstawiona metoda może służyć do badań gleby jak i innych ośrodków: granulanych: proszki, granulaty, ziarniste materiały budowlane, ziarno w silosach itp.

PIŚMIENNICTWO

1. **Bodziony J.:** On the relationship between basic stereological characteristics. *Stereol. Jugosl.*, 3, 97-102, 1981.
2. **Czachor H.:** Geometria fazy stałej i przestrzeni porów w rolniczych ośrodkach granulanych na przykładzie gleby mineralnej. *Acta Agrophysica*, 7, 1997.

3. **Czachor H., Gózdź A.:** Modeling of granular and cellular materials. Transactions of the ASAE, vol.44(2), 439-445, 2001.
4. **Kok L.P.:** 100 Problems of My Wife and their Solution in Theoretical Stereology. Coulomb Press Leyden, Leyden, 1990.
5. **Latey J.:** The Study of Soil Structure. Science or Art. Australian J. Soil Res., 29, 1991.
6. **Ringrose-Voase A.J.:** Micromorphology of soil structure: Description, Quantification, Application. Australian J. Soil Res., 19, 1991.
7. **Russ J.C.:** Practical stereology. Olenum Press. N-Y, London, 1986.
8. **Walczak R.:** Nowe aspekty metrologii agrofizycznej. Nauka Polska 4. 1991.

NUMERICAL RECONSTRUCTION OF A MINERAL SOIL MICROSTRUCTURE

H. Czachor

Institute of Agrophysics, Polish Academy of Sciences, ul. Doświadczalna 4, 20-290 Lublin

Summary. The granular medium structure is mainly determined by its grain size distribution and the porosity or another words by space distribution of medium particles. The possibilities of computer packing simulation method for the reconstruction of granular structure has been examined. The idea of the algorithm for a tight particle packing in 3D is described. Five virtual polydispersive aggregates of different grain size distributions composed of up to 30,000 particles have been created. It was proved that their sizes are representative for the appropriate soil - like materials (sand and loamy sand). For all examined cases the calculated volume porosity of virtual structures agree well with the experimental data (relative difference <5%). Such virtual structure can be useful for the determination of physical properties of different granular materials (mineral soils, wheat and rape grains etc).

Key words: soil structure, grain size distribution, packing simulation.