

THE USE OF THE FRACTAL GEOMETRY TO DESCRIBE THE PORE SPACE IN WET SOURCE CLAYS

ZASTOSOWANIE GEOMETRII FRAKTALNEJ DO OPISU PRZESTRZENI POROWEJ W WILGOTNYCH IŁACH

Abstract

In this paper the authors attempted to use the fractal geometry to describe the pore space of the water-clay systems. The analysis was carried out on the source clays STx-1b and SWy-2. The values of the constant parameter k and fractal dimension D was determined by means of statistic. On this basis of the analysis, it was found that the description of the pore space using fractal geometry is possible.

Keywords: fractal geometry, pore distribution, bentonite, montmorillonite, STx-1b, SWy-2

Streszczenie

W niniejszym artykule podjęto próbę zastosowania geometrii fraktalnej do opisu przestrzeni porowej systemów woda-ił. Analiza została przeprowadzona na iłach modelowych STx-1b, SWy-2. Statystycznie wyznaczono wartości parametrów stałej k i wymiaru fraktalnego D . Na podstawie przeprowadzonych analiz stwierdzono, że opis przestrzeni porowej przy użyciu geometrii fraktalnej jest możliwy.

Słowa kluczowe: geometria fraktalna, dystrybucja porów, bentonit, Montmoryllonit, STx-1b, SWy-2

1. Introduction

Determining the pore space in wet cohesive soils is very difficult. Because of this it was decided to try to use the statistical description of this space by fractal geometry. The tests were made on unmodified clay materials:

- bentonite STx-1b from Texas (USA),
- bentonite SWy-2 from Wyoming (USA).

These soils are considered as source model clays [1]. The soils were purchased in the Source Clays Repository of The Clay Minerals Society, Chantilly, Virginia, USA. They were well characterized in the paper [2].

There are many examples of the fractal objects in mathematics, such as the Sierpinski pyramid with a fractal dimension $D = 2$, which is presented in Figure 1. The objects with fractal structure are also common

1. Wprowadzenie

Ze względu na bardzo trudne określenie przestrzeni porowej w wilgotnych gruntach spoistych postanowiono podjąć próbę statystycznego opisu tej przestrzeni za pomocą geometrii fraktalnej. Badania zostały przeprowadzone na niemodyfikowanych materiałach ilastych:

- bentonit STx-1b z Teksasu (USA),
- bentonit SWy-2 z Wyoming (USA).

Grunty te są uznawane za iły modelowe [1]. Grunty zostały zakupione w Source Clays Repository przy The Clay Minerals Society, Chantilly, Virginia, USA. Zostały bliżej scharakteryzowane w pracy [2].

W matematyce istnieje wiele przykładów obiektów fraktalnych, takich jak np. piramida Sierpińskiego o wymiarze fraktalnym $D = 2$ pokazana na rysunku 1. Struktury o budowie fraktalnej są powszechnie spo-

in nature. Examples include crystalline dendrites (e.g. snowflakes), coastlines, Norwegian fjords, blood vessels, river systems or lightning. However, the fractal structure of natural objects may only have statistical character.



2. Fractal geometry theory

The concept of a fractal (Latin fractus - broken, partial, fractional) was first introduced into mathematics by French mathematician and computer scientist Benoît Mandelbrot (1924-2010). It concerns the mathematical description of certain specific repeatedly shaped objects regardless of the scale of observation and possible to describe by recursive formula. We can say, that fractal objects are self-similar at each level of observation

The fractal dimension D is one of the key concept of fractal description of reality. It was introduced by German mathematician Feliks Hausdorff (1868-1942) and, based on other grounds, by Russian mathematician Andrei Kolmogorov (1903-1987) independently. Although, strictly speaking, the dimensions of Hausdorff and Kolmogorov differ, it was assumed to be identified because, in one version, Hausdorff's complex definition is reduced to Kolmogorov's definition and as such was used in Mandelbrot's papers.

The idea of the Kolmogorov dimension is as follows [3]: let the geometric object F contained in the n -dimensional Euclidean space be covered with a set of cubes (i.e., squares or cubes respectively for $n = 2$ or $n = 3$) with sides equal h . Let $N(h)$ be the minimum number of cubes needed to cover the whole object.

tykane również w przyrodzie. Przykładem mogą być krystaliczne dendryty (np. płatki śniegu), linie wybrzeży, system fiordów norweskich, system naczyń krwionośnych, systemy wodne rzek lub błyskawica. Jednakże natura fraktalna obiektów naturalnych może posiadać charakter jedynie statystyczny.

Fig. 1. Example of a fractal object $D = 2$ (Sierpinski pyramid)

Rys. 1. Przykład obiektu o wymiarze fraktalnym $D = 2$ (piramida Sierpińskiego)

2. Teoria geometrii fraktalnej

Pojęcie fraktalu (łac. fractus – złamany, cząstkowy, ułamkowy) zostało wprowadzone do matematyki przez francuskiego matematyka i informatyka Benoît Mandelbrota (1924-2010). Dotyczy ono opisu matematycznego pewnych specyficznych obiektów o kształcie powtarzalnym, niezależnie od przyjętej skali obserwacji i możliwym do opisu wzorem rekurencyjnym. Innymi słowy, obiekty fraktalne są samopodobne na każdym poziomie obserwacji.

Jednym z kluczowych pojęć fraktalnego opisu rzeczywistości jest pojęcie tzw. wymiaru fraktalnego D . Został on wprowadzony przez niemieckiego matematyka Feliksa Hausdorfa (1868-1942) i niezależnie, na podstawie innych przesłanek, przez rosyjskiego matematyka Andrieja Kołmogorowa (1903-1987). Choć wymiary Hausdorfa i Kołmogorowa różnią się między sobą, jednak przyjęło się je utożsamiać, ponieważ w pewnej wersji skomplikowana definicja Hausdorfa sprowadza się do definicji Kołmogorowa i jako taka była używana w pracach Mandelbrota.

Idea wymiaru Kołmogorowa jest następująca [3]: niech obiekt geometryczny F zawarty w n -wymiarowej przestrzeni euklidesowej będzie pokryty zbiorem kostek (tj. kwadratów lub sześciątów odpowiednio dla $n = 2$ lub $n = 3$) o bokach równych h . Niech $N(h)$ oznacza minimalną liczbę kostek potrzebnych do pokrycia całego obiektu.

It is known that the following proportions occur for sufficiently small h (Fig. 2):

- for a smooth line: $N(h) \sim (1/h)$,
- for a smooth surface: $N(h) \sim (1/h)^2$,
- for space in R^3 : $N(h) \sim (1/h)^3$,
- for a certain geometric object (fractals): $N(h) \sim (1/h)^D$, where D is not the integer.

Wiadomo, że gdy h jest dostatecznie małe, to zachodzą następujące proporcjonalności (rys. 2):

- dla odcinka gładkiej linii: $N(h) \sim (1/h)$,
- dla płata gładkiej powierzchni: $N(h) \sim (1/h)^2$,
- dla obszaru w R^3 : $N(h) \sim (1/h)^3$,
- dla pewnych obiektów geometrycznych (fraktali): $N(h) \sim (1/h)^D$, gdzie D nie jest liczbą całkowitą.

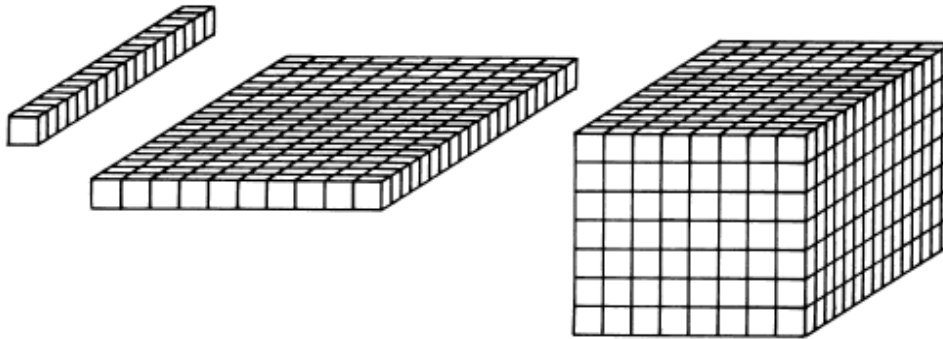


Fig. 2. Different methods of covering objects by one-, two- and three-dimensional set of cubes

Rys. 2. Sposoby pokrycia obiektów: jedno-, dwu- i trójwymiarowego zbiorami kostek

For dimension D there is following equality:

$$D = \log_{1/h} N(h) = \frac{\log N(h)}{\log(\frac{1}{h})} \quad (1)$$

The fractal dimension is defined as the limit value:

$$D = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\log N(h)}{\log(\frac{1}{h})} \quad (2)$$

Tak więc dla wymiaru D zachodzi równość:

$$D = \log_{1/h} N(h) = \frac{\log N(h)}{\log(\frac{1}{h})} \quad (1)$$

Wymiar fraktalny jest zdefiniowany jako wartość graniczna:

$$D = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\log N(h)}{\log(\frac{1}{h})} \quad (2)$$

3. Analysis and discussion

This section presents an attempt to use fractal geometry to describe the pore space of water-montmorillonite systems. These are systems in which pores satisfy the basic, but not the only one, postulate of fractal geometry: the dimensions of each object include a plurality of observation levels, starting with macropores of more than 10000 nm to micropores smaller than 1 nm. Particularly interesting is the question of the value of the fractal dimension and its possible dependence on the humidity.

The starting point of analysis was the equation presented in [4], describing the theoretical dependence of the volume derivative value of the radius PSD from the radius value:

$$\frac{dV}{dr} = kr^{(2-D)} \quad (3)$$

3. Omówienie i analiza

W niniejszej sekcji podjęto próbę zastosowania geometrii fraktalnej do opisu przestrzeni porowej systemów woda-montmorillonit. Są to układy, których pory spełniają podstawowy, jednak nie jedyny, postulat geometrii fraktalnej: wymiary poszczególnych obiektów obejmują wiele poziomów obserwacji, od makroporów o wymiarach ponad 10000 nm do mikroporów o wymiarach poniżej 1 nm. Szczególnie interesujące wydaje się pytanie o wartość wymiaru fraktalnego oraz jego ewentualną zależność od wilgotności.

Za punkt wyjścia przyjęto równanie, podane w pracy [4], opisujące teoretyczną zależność wartości pochodnej objętości po promieniu PSD od wartości promienia:

$$\frac{dV}{dr} = kr^{(2-D)} \quad (3)$$

where: V – the volume, r – the radius, k – a constant, D – fractal dimension.

Using differential distributions in the form $\Delta V/\Delta r = f(r)$, statistical matching of parameters of function given by equation (3) to empirical data on natural clays SWy2 and STx-1b was performed. The results are presented in Table 1.

SWy-2		
$w, \%$	k	D
34.01	0.005608	1.379527
72.46	0.018004	2.054189
85.82	0.015450	1.687320
86.38	0.013669	1.641999
88.41	0.016309	1.897470
98.11	0.020690	1.976451
117.51	0.044929	2.241638
STx-1b		
41.83	0.023559	1.904771
50.70	0.029647	2.122536
63.74	0.039284	2.320344
64.86	0.043647	2.323363
70.06	0.029297	2.060203
70.08	0.058824	2.209054
70.51	0.026927	2.074151
73.39	0.030209	2.082203
81.72	0.048018	2.303491

Using the analysis of variance, the significance of the influence of the ‘clay’ (soil type) and the ‘ w ’ (humidity) on the values of parameters k and D was evaluated. The results are shown in Tables 2 and 3.

The results of the analysis of variance confirm the statistically significant influence (significance level $p < 0.05$) of soil type and humidity on the values of the fractal dimension D .

Table 2. The significance of the influence of the ‘clay’ (soil type) and ‘ w ’ (moisture) on the values of the parameter k
Tabela 2. Istotność wpływu czynników ‘clay’ (rodzaj gruntu) i ‘ w ’ (wilgotność) na otrzymane wartości parametru k

	SS	Degr. of - Freedom	MS	F	p
Intercept	0.008156	1	0.008156	77.79746	0.000005
Clay	0.000997	1	0.000997	9.51438	0.011551
w	0.000794	2	0.000397	3.78606	0,059687
Clay*w	0.000025	2	0.000013	0.12103	0.887287
Error	0.001048	10	0.000105		

gdzie: V – objętość, r – promień, k – pewna stała, D – wymiar fraktalny.

Wykorzystując rozkłady różnicowe o postaci $\Delta V/\Delta r = f(r)$, przeprowadzono statystyczne dopasowanie parametrów funkcji danej równaniem (3) do danych empirycznych dotyczących naturalnych iłów SWy2 i STx-1b. Wyniki przedstawia tabela 1.

Table 1. Empirical values of the constant k and the fractal dimension D obtained by the equation (3)

Tabela 1. Otrzymane empirycznie wartości stałej k i wymiaru fraktalnego D z równania (3)

Teraz stosując analizę wariancji, oceniono istotność wpływu czynnika ‘clay’ (rodzaj gruntu) i ‘ w ’ (wilgotność) na otrzymane wartości parametrów k i D . Wyniki przedstawiono w tabelach 2 i 3.

Wyniki analizy wariancji potwierdzają istotny statystycznie (na poziomie istotności $p < 0,05$) wpływ rodzaju gruntu i wilgotności na wartości wymiaru fraktalnego D .

Table 3. The significance of the influence of the 'clay' (soil type) and 'w' (moisture) on the values of the parameter D
Tabela 3. Istotność wpływu czynników 'clay' (rodzaj gruntu) i 'w' (wilgotność) na otrzymane wartości parametru D

	SS	Degr. of - Freedom	MS	F	p
Intercept	40.78205	1	40.78205	1663.208	0.000000
Clay	0.41207	1	0.41207	16.805	0.002147
w	0.35420	2	0.17710	7.223	0.011456
Clay*w	0.06716	2	0.03358	1.369	0.298089
Error	0.24520	10	0.02452		

The influence of the 'clay' on the value of constant k is statistically significant (significance level $p < 0.05$); the influence of 'w' seems to be slightly less important, but still significant at the significance level $p < 0.1$.

Considering this, the function form was adjusted separately for each soil:

$$k = a \cdot w + b \quad (4)$$

$$D = a \cdot w + b \quad (5)$$

Matching results are shown in Table 4 and in Figures 3 and 4.

Wpływ czynnika 'clay' na wartość stałej k jest istotny statystycznie (na poziomie istotności $p < 0,05$); wpływ czynnika 'w' okazuje się nieco mniej istotny, choć nadal istotny na poziomie $p < 0,1$.

Biorąc powyższe pod uwagę, osobno dla każdego gruntu przeprowadzono dopasowanie funkcji postaci:

$$k = a \cdot w + b \quad (4)$$

$$D = a \cdot w + b \quad (5)$$

Wyniki dopasowania przedstawiono w tabeli 4 oraz na rysunkach 3 i 4.

Table 4. The results of fitting the functions given by equations (4) and (5)
Tabela 4. Wyniki dopasowania funkcji danych równaniami (4) i (5)

	SWy2				STx-1b			
	k		D		k		D	
	Estimate	p	Estimate	p	Estimate	p	Estimate	p
a	0.00038	0.0256	0.00891	0.0339	0.00047	0.1774	0.00617	0.1506
b	-0.0131	0.2753	1.0975	0.0092	0.005661	0.7947	1.7529	0.0002
R	0.81465		0.79154		0.49308		0.52066	

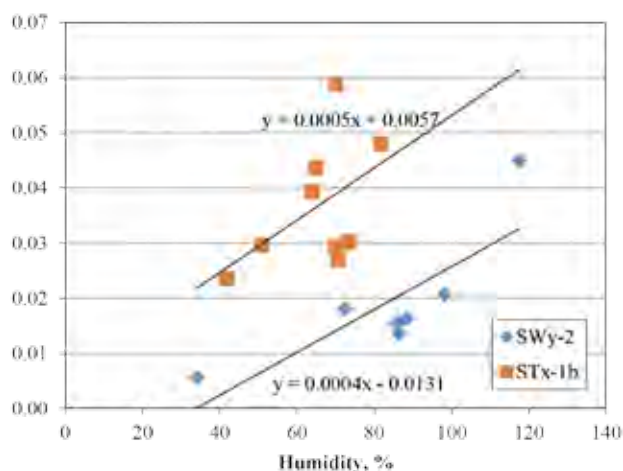


Fig. 3. The dependence of the constant k in equation (3) on the humidity

Rys. 3. Zależność stałej k w równaniu (3) od wilgotności

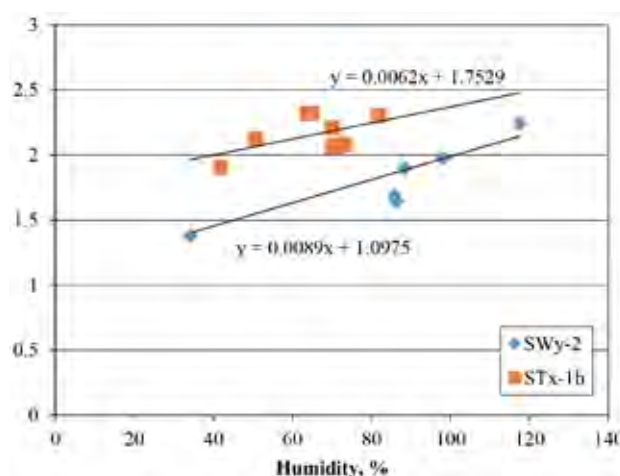


Fig. 4. The dependence of the fractal dimension D on the humidity

Rys. 4. Zależność wymiaru fraktalnego D od wilgotności

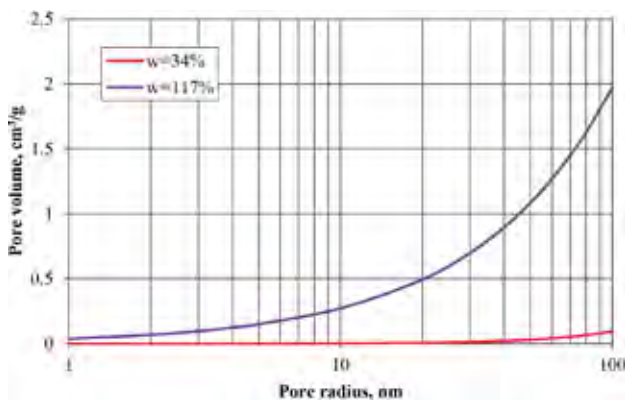


Fig. 5. The dependence of the cumulative pore volume on the pore radius obtained for two extreme humidities using fractal geometry (bentonite SWy2)

Rys. 5. Zależność kumulacyjnej objętości porów od promienia otrzymana dla dwóch skrajnych wilgotności przy zastosowaniu geometrii fraktalnej (bentonit SWy2)

Transforming the equation (3) and integrating both sides, we obtain an equation describing the volume of all pores with radii $\leq r$:

$$V = \frac{k}{3-D} r^{3-D} \quad (6)$$

Using the linear relationships described by equations (4) and (5) and the estimators of parameters a and b described in Table 4, the values of the constant k and the fractal dimension D for two extremes of humidity (a minimum and a maximum humidity in the population of the soil samples) were calculated. The obtained values of k and D were used in Equation (6). Received "fractal" volume dependence from the pore dimension is shown in Figures 5 and 6.

4. Conclusions

- The fractal description of the pore space of expansive soils is possible and its parameters, including the fractal dimension D , depend in a statistically significant way from the origin of bentonite and humidity.
- The fractal dimension D for both bentonites increases with increasing humidity, which can be explained as an increase in the degree of system differentiation.
- The obtained dependencies, describing the cumulative pore volume as a function of the radius, show two different effects for the two analyzed clays: in sodium SWy-2 a very pronounced influence of humidity is observed; the effect of humidity in the calcium STx-1b is not very significant.

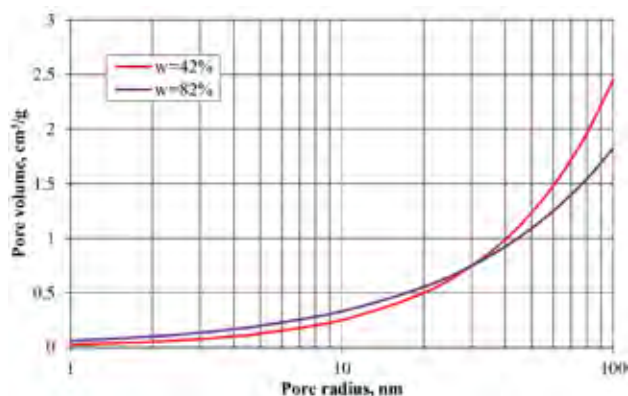


Fig. 6. The dependence of the cumulative pore volume on the pore radius obtained for two extreme humidities using fractal geometry (bentonite STx-1b)

Rys. 6. Zależność kumulacyjnej objętości porów od promienia otrzymana dla dwóch skrajnych wilgotności przy zastosowaniu geometrii fraktalnej (bentonit STx-1b)

Przekształcając równanie (3) i całkując jego obie strony, otrzymujemy równanie opisujące objętość wszystkich porów o promieniach $\leq r$:

$$V = \frac{k}{3-D} r^{3-D} \quad (6)$$

Wykorzystując zależności liniowe opisane równaniami (4) i (5) i estymatory parametrów a i b opisane w tabeli 4, obliczono wartości stałej k i wymiaru fraktalnego D dla dwóch skrajnych wilgotności (tzn. najmniejszej i największej wilgotności w populacji próbek danego gruntu). Tak otrzymane wartości k i D użyto w równaniu (6), otrzymując „fraktalne” zależności objętości od wymiaru poru, pokazane na rysunkach 5 i 6.

4. Wnioski

- Opis fraktalny przestrzeni porowej gruntów ekspansywnych jest możliwy, a jego parametry, w tym wymiar fraktalny D , zależą w sposób istotny statystycznie od pochodzenia bentonitu i wilgotności.
- Wymiar fraktalny D w przypadku obydwu analizowanych bentonitów rośnie wraz ze wzrostem wilgotności, co można tłumaczyć jako wzrost stopnia zróżnicowania układu.
- Otrzymane zależności, opisujące skumulowaną objętość porów w funkcji promienia, pokazują dla dwóch analizowanych ilów dwa odmienne typy zachowania: w sodowym SWy2 obserwuje się bardzo wyraźny wpływ wilgotności, w wapniowym STx-1b wpływ wilgotności okazuje się mało istotny.

- The fact that the two different types of $V = f(r, w)$ observed in Na and Ca clay are consistent with the generally accepted theory is an indirect positive validation of the fractal description of the pore space of expansive soils.
- Fakt, że opisane powyżej dwa różne typy zależności $V = f(r, w)$ obserwowane w ilach typu Na i Ca pozostają w zgodzie z ogólnie przyjętą teorią, stanowi pośrednią pozytywną walidację fraktalnego opisu przestrzeni porowej gruntów ekspansywnych.

References

- [1] Bergaya F., Lagaly G.: *Surface modification of clay minerals*, Applied Clay Science 19 (2001), pp. 1-30.
- [2] Kozłowski T., Walaszczyk Ł.: *Analyzing expanding clays by thermoporometry using a stochastic deconvolution of the DSC signal*, Clays and Clay Minerals, Vol. 62, No. 5 (2014), pp. 386-402.
- [3] Kudrewicz J.: *Fraktale i chaos*. Wyd. II. WNT, Warszawa 1993, pp. 89-101.
- [4] Rouquerol J., Avnir D., Fairbridge C.W., Everett D.H., Haynes J.M., Pernicone N., Ramsay J.D.F., Sing K.S.W., Unger K.K.: *Recommendations for the characterization of porous solids (Technical Report)*, Pure and Applied Chemistry, Vol. 66, No. 8 (1994), pp. 1739-1758.