

## SYMULACJA STRUKTUR GLEBOWYCH I ICH PARAMETRYZACJA

*H. Czachor*

Instytut Agrofizyki im. B. Dobrzańskiego, Polska Akademia Nauk, ul. Doświadczalna 4,  
P.O. Box 201, Lublin 27

**Streszczenie.** Przedstawiono metodę komputerowej rekonstrukcji struktury ośrodków granularnych na podstawie ich składu granulometrycznego i porowatości. Opisano algorytm tworzenia wirtualnej struktury i określono warunki jej reprezentatywności. Przedstawiono koncepcje pojedynczego poru ośrodka i sieci porów całego ośrodka. Stwierdzono dobrą zgodność otrzymanych wartości porowatości z danymi doświadczalnymi w odniesieniu do ośrodków o składzie piasku i piasku pylastego.

**Słowa kluczowe:** struktura gleby, skład granulometryczny, symulacja

### WSTĘP

Gleba jest ośrodkiem heterogenicznym i wielofazowym, ma swoją budowę morfologiczną będącą wynikiem procesów glebotwórczych.

Skład granulometryczny jest podstawową charakterystyką każdego ośrodka ziarnistego, a więc i gleby również. Najważniejszą cechą tego rozkładu jest niezmiennosc w czasie. Poza nim i składem chemicznym fazy stałej, pozostałe właściwości zmieniają się zależnie od porowatości, wilgotności, koncentracji i składu soli mineralnych w roztworze glebowym, temperatury, zawartości materii organicznej, warunków tlenowych lub też dowolnej kombinacji tych czynników.

W praktyce rolniczej i gleboznawstwie od bardzo dawna używane są takie pojęcia jak "gleba lekka", "gleba średnia", "gleba ciężka" czy "gleba ciepła". W potocznym rozumieniu np. termin "gleba ciężka" jest skrótową, przybliżoną, opartą na doświadczeniu, charakterystyką gleby. Termin ten odnosi się do gleby trudnej do uprawy, tzn. wymagającej maszyn o dużej mocy, o słabej przepuszczalności wodnej, dużej porowatości i pojemności wodnej, lecz o znacznej ilości wody niedostępnej dla roślin, o dużej pojemności sorpcyjnej, niekiedy oglejonej, a więc o słabej aeracji. Jednocześnie termin ten związany jest zawsze z glebą o dużej zawartości części ilastych.

Analogicznie termin "gleba lekka" kojarzony jest z glebą o odwrotnych właściwościach, w której dominuje frakcja piasku.

Rozwój metod obliczeniowych stworzył nowe możliwości również w zakresie badań ośrodków ziarnistych. Wydaje się że, przy pomocy komputerowej symulacji można badać nawet tak skomplikowane układy jak ośrodki glebowe.

Analiza granulometryczna jest standardową charakterystyką wykonywaną przy niemal każdych badaniach gleby. Stanowi ona m.in. podstawę klasyfikacji gleb.

#### CEL PRACY

Mimo olbrzymiej wiedzy empirycznej dotyczącej różnych właściwości gleb i ich składu granulometrycznego nie udało się do tej pory stworzyć uniwersalnego modelu pozwalającego przewidywać parametry lub charakterystyki na podstawie ustalonego zbioru określonych, łatwo mierzalnych danych wejściowych.

Najwięcej prac poświęcono związkowi składu granulometrycznego z porowatością [4,5,20], krzywą retencji wodnej i przewodnictwem wodnym [1-3,12].

Zarówno transport jak i retencja wody zależą od struktury gleby. Powyższe stwierdzenie można rozszerzyć na przenoszenie gazów, ciepła i soli mineralnych, jak również na procesy mechaniczne związane z uprawą gleby. W konsekwencji można wyrazić opinię, że wszystkie procesy fizyczne, fizykochemiczne czy biologiczne zachodzące w glebie są zależne od jej struktury.

Podstawowy problem mikrostruktury gleby można jak się zdaje sprowadzić do 3-ch następujących pytań:

- 1) Jak określić związek między geometrią cząstek fazy stałej gleby, a jej składem granulometrycznym?
- 2) Jak kwantyfikować powstałe struktury granularne i będący ich konsekwencją układ porów ?
- 3) Jak powiązać geometrię fazy stałej z fizycznymi właściwościami ośrodka glebowego?

Przy czym termin geometria fazy stałej dotyczy położenia i wielkości cząstek tworzących badany ośrodek. Celem pracy jest próba odpowiedzi na postawione wyżej pytania [6].

#### WIRTUALNA STRUKTURA GRANULARNA

Pierwszym krokiem do rozwiązania wyżej zarysowanych problemów było stworzenie algorytmu, którego celem byłoby stworzenie wirtualnego ośrodka granularnego, który miałby wybrane cechy, będącego przedmiotem badań, ośrodka rzeczywistego. Cechami tymi powinny być porowatość i skład granulometryczny ośrodka rzeczywistego. Uznano, że dwa jednorodne ośrodki mające takie same wyżej wymienione charakterystyki są identyczne.

Badania symulacyjne obiektów rzeczywistych wymagają na ogół uproszczeń dotyczących ich budowy i oddziaływań wewnętrznych elementów składowych, których celem jest przyspieszenie obliczeń lub uczynienie ich w ogóle wykonalnymi. W tym przypadku uproszczenia dotyczą kształtu cząstek i oddziaływań między nimi. Ponieważ

promień geometryczny cząstek określony jest przez analizę granulometryczną, postanowiono wykorzystać dane w niej zawarte. Analiza ta segreguje rozmiary cząstek na podstawie związku oporu hydrodynamicznego z szybkością sedymentacji, przypisując danej klasie cząstek promień kuli, która poruszałyby się w tym samym ośrodku z identyczną prędkością. Wybór takiego kształtu cząstki podyktowany był zarówno realnością planowanych obliczeń numerycznych jak i zamiarem wykorzystywania istniejących danych dotyczących składu granulometrycznego gleb i ich charakterystyk fizycznych.

Bliższa analiza stereologiczna [16] różnych brył pokazuje, że ich współczynniki kształtu często mają podobne wartości jak kula o tej samej objętości (Tabela 1), co pozwala sądzić, że przyjęcie innego kształtu cząstek, np. elipsoidy obrotowej, nie miałyby istotnego wpływu na wyniki modelowania, a mogłyby znacznie utrudnić obliczenia.

Innym czynnikiem decydującym o przyjęciu takiego kształtu cząstek były względy rachunkowe: obliczenia z innymi bryłami wymagałyby dodatkowych informacji wejściowych, byłyby znacznie bardziej skomplikowane i długotrwałe, co stawiałyby pod znakiem zapytania realizację całego założonego programu obliczeniowego.

**Tabela 1.** Współczynniki kształtu wybranych brył [16]

**Table 1.** Shape coefficient of some 3D figures

Rodzaj bryły	Współczynnik kształtu (*)
Kula	1.000
Ośmiościan trójkątny (octahedron)	1.217
Walec 2:1 (**)	1.123
Elipsoidalna podłużna 2:1 (***)	1.095
Elipsoidalna poprzeczna 2:1	1.076
Sześcian	1.209
Dwunastościan pięciokątny (dodecahedron)	1.081
Dwudziestościan trójkątny (icosahedron)	1.083

(\*) stosunek średnicy Fereta bryły i średnicy kuli o tej samej objętości.

(\*\*) 2:1 tzn. wysokość = 2\* średnica podstawy.

(\*\*\*) 2:1 tzn. długość półosi dużej=2\*długość półosi małej.

### Opis algorytmu tworzenia wirtualnego ośrodka granularnego poprzez upakowanie pojedynczych ziaren

Danymi wejściowymi do programu tworzącego wirtualną strukturę ośrodka ziarnistego jest jego skład granulometryczny przedstawiony w postaci proporcji ilości cząstek w poszczególnych klasach. Ogólna zasada jej tworzenia polega na przyłączaniu rozpatrywanej cząstki do struktury już istniejącej. Innymi słowy, każda z nich traktowana jest indywidualnie, a tworzenie układu odbywa się stopniowo, cząstka po cząstce.

Położenie cząstki kulistej o znanym promieniu  $R(i)$  i numerze  $i$ -tym, w przestrzeni trójwymiarowej uznajemy za określone, jeśli znane są 4 liczby: współrzędne środka  $X[i]$ ,  $Y[i]$ ,  $Z[i]$  i promień  $R[i]$ .

Wartości promienia cząstki  $R[i]$  przyłączanej określane są stochastycznie. Przyjęto, że rozkład promieni cząstek można przybliżyć funkcją ciągłą, powstałą z sumowania udziałów poszczególnych frakcji histogramu przedstawiającego skład granulometryczny. W związku z tym, dana frakcja granulometryczna jest reprezentowana przez cząstki o promieniach zawartych między odpowiadającymi jej wartościami granicznymi, a nie tylko przez jedną z nich, co wydaje się lepiej odzwierciedlać warunki rzeczywiste. W efekcie cząstki z frakcji dominujących będą pojawiały się częściej, niż z pozostałych.

Stochastyczny charakter wyboru cząstki realizowany jest przy pomocy funkcji paskalowych *RANDOMIZE* i *RANDOM*.

Trzy punkty kontaktu określają jednoznacznie położenie i warunki równowagi kuli o znanym promieniu w przestrzeni. Aby określić współrzędne  $X[i]$ ,  $Y[i]$ ,  $Z[i]$  kuli o promieniu  $R[i]$  należy rozwiązać układ równań:

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

przy czym  $i > m > l > k$ ,

gdzie: indeksy  $k$ ,  $l$ ,  $m$  odnoszą się do cząstek przyłączonych wcześniej do tworzonej struktury, podczas gdy  $i$  jest numerem cząstki przyłączanej. Aby dana cząstka mogła być przyłączona, muszą być spełnione dwa warunki:

- 1) musi istnieć struktura początkowa, czyli tzw. zarodek, do której będą "przyklejane" kolejne cząstki,
- 2) musi być podana ogólna zasada, według której następuje tworzenie całej struktury.

Zarodek struktury składa się z 3-ch (niekiedy 5-ciu) jednakowych cząstek, realizujących upakowanie tetragonalne. Reprezentują one zawsze najliczniejszą frakcję granulometryczną, którą na ogół jest frakcja najdrobniejsza.

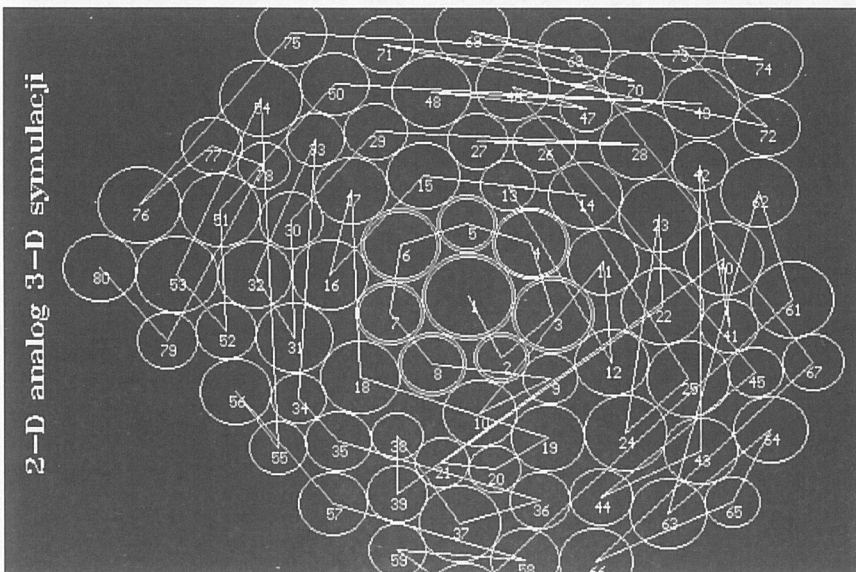
Algorytm upakowania powinien zapewniać powstanie struktury zwartej, przez co należy rozumieć takie ułożenie cząstek kulistych, wewnątrz którego nie istnieją przestrzenie wolne (pory) większe od największej z upakowywanych cząstek. Ten istotny problem rozwiązano przyjmując, że rozbudowa struktury następuje poprzez "przyklepianie" kolejnych cząstek do tzw. cząstki centralnej (o możliwie najniższym numerze tzn. do cząstki  $k$ -tej). Poza nią, w "przyklepianiu" uczestniczą jeszcze dwie inne cząstki, znajdujące się w jej sąsiedztwie o numerach  $l$  i  $m$ . Proces wzrostu struktury zaczyna się od otaczania cząstki pierwszej, do której muszą być styczne następne przyłączane. Ilość jej potencjalnych sąsiadów jest ograniczona, więc w końcu, dla

kolejnej przyłączanej cząstki (o numerze 9 na Rys. 1) niemożliwe będzie znalezienie dla niej miejsca przy cząstce 1. W tej sytuacji cząstką centralną staje się cząstka następna, tzn. 2-ga, po czym, rozpoczyna się proces jej otaczania.

Następnie ta sama procedura powtarzana jest w odniesieniu do cząstki 3,4,... Egzekucja programu zostaje wstrzymana, gdy całkowita liczba cząstek osiągnie zadaną z góry liczbę.

Rysunek 1 przedstawia dwuwymiarowy analog trójwymiarowej symulacji upakowania cząstek. Numery cząstek i odcinki prostych określają kolejność przyłączania cząstek do powstającego agregatu. W tym przypadku zarodek struktury składa się z 2-ch cząstek o numerach 1 i 2 (a nie z trzech jak dla 3D). Cząstki od 2 do 8 są styczne do cząstki 1-jej. Dla cząstki 9-jej nie ma miejsca w pobliżu 1-jej i dlatego "przyklejana" jest do kolejnej, tzn. do drugiej cząstki.

W trzech wymiarach obliczenia są bardziej skomplikowane, lecz zasada jest ta sama. Proces poszukiwania położenia przyłączanej cząstki odbywa się na zasadzie prób i błędów. Celem algorytmu jest znalezienie takiego położenia, w którym rozpatrywana cząstka jest styczna do 3-ch cząstek i nie przecina powierzchni żadnej z pozostałych. Analizowane powinny być wszystkie kombinacje trójcząstkowe  $k, l, m$  cząstki centralnej  $k$  z pozostałymi, których numery są większe od  $k$ , tzn.  $l=k+1, k+2, \dots, n-1$  i  $m=l+1, l+2, \dots, n$ , gdzie  $n$  oznacza aktualną liczbę cząstek. Tym samym potencjalna liczba prób może wynosić  $(n-k)^2$ . Ponieważ liczba  $n$  może być rzędu  $10^3-10^4$ , a  $n/k=3-4$ , więc można oczekiwać, że mogłyby pojawić się przypadki, dla których znalezienie poszukiwanej



**Rys. 1.** Dwuwymiarowy analog tworzenia struktury przestrzennej (numery wskazują kolejność przyłączania cząstek do układu).

**Fig. 1.** 2D analog of 3D coming into being structure (numbers indicate the order of the particle unification to the structure).

pozycji dla pojedynczej cząstki będzie związane z ilością repetycji rzędu  $10^5-10^7$ , co praktycznie oznaczałoby niemożność realizacji programu w rozsądnym czasie.

Chcąc uniknąć takich przypadków postanowiono ograniczyć liczbę cząstek, które mogą tworzyć poszukiwaną konfigurację do tych, których odległość od powierzchni cząstki centralnej nie przekracza  $2 \cdot R[i]$ , gdzie  $R[i]$ - promień cząstki przyłączanej. W rezultacie liczba powtórzeń procedury związanej z poszukiwaniem położenia równowagi dla nowej cząstki maleje o kilka rzędów wielkości.

Powyżej omówiono pierwszy algorytm generujący wirtualną strukturę ośrodka ziarnistego. Opracowano również drugi, służący temu samemu celowi, którego działanie w początkowej fazie jest identyczne. Różnica polega na tym, że przyłączana cząstka może być umieszczona nie tylko na powierzchni struktury, lecz również wewnątrz niej. W tym celu, na każdym etapie jej tworzenia, znajdowane są w niej i zapamiętywane "dziury", o ile tylko są na tyle duże, aby mogły pomieścić cząstki, których skład granulometryczny jest znany. Połowa cząstek przyłączana jest wg algorytmu pierwszego, druga - poprzez wynajdowanie w zbiorze "dziur" o wymiarach zbliżonych do niej i wypełnienie jej tą cząstką.

Oba algorytmy mają charakter iteracyjny, tzn. struktura już istniejąca jest bazą dla przyłączenia kolejnej cząstki. Program wykonywany jest dopóty, dopóki liczba cząstek nie osiągnie określonej na wejściu programu wartości.

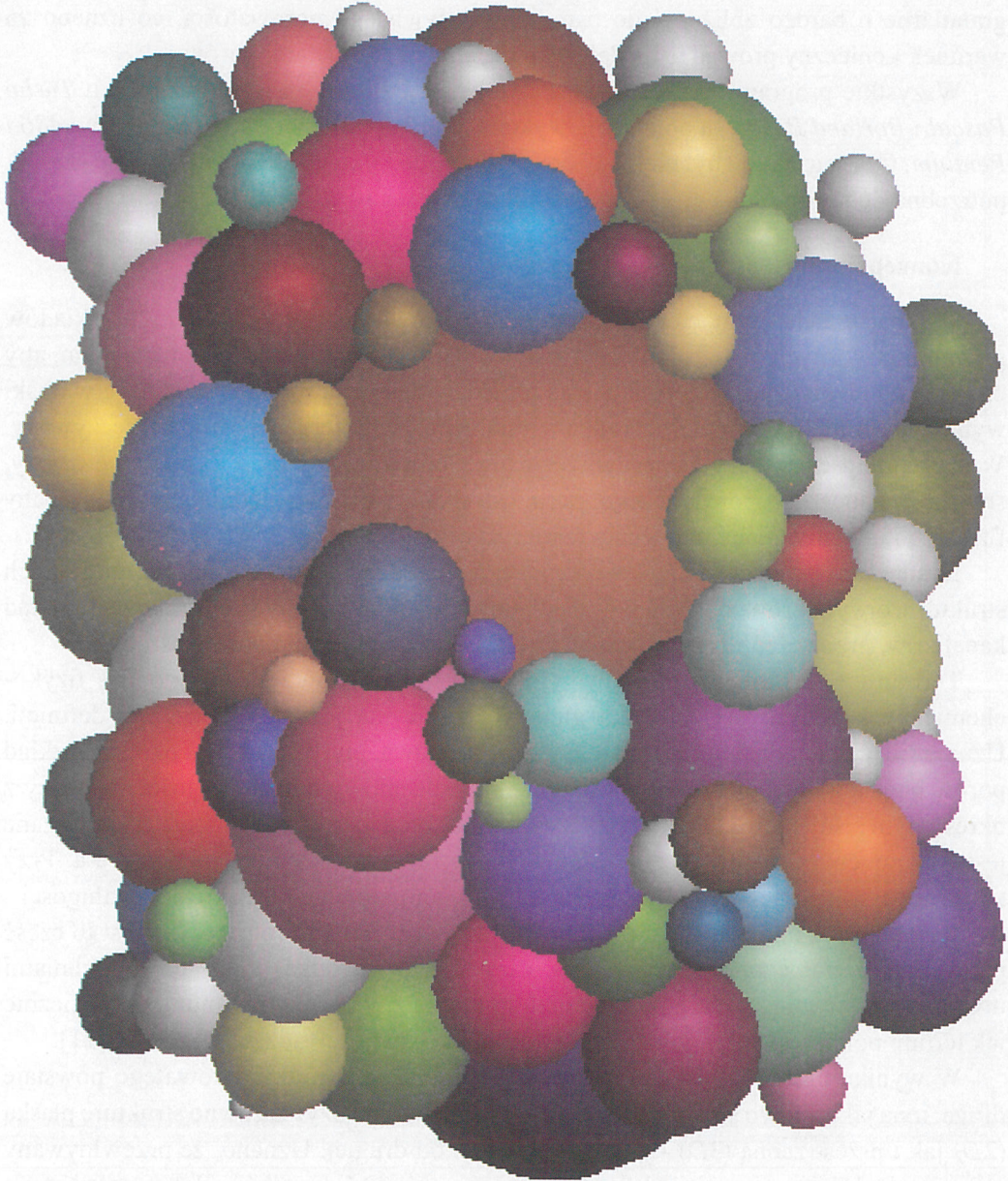
W wyniku egzekucji programu powstaje wirtualna struktura trójwymiarowa, składająca się z cząstek o składzie granulometrycznym badanej gleby. Rysunek 2 przedstawia przybliżoną jej wizualizację. Widać, że struktura nie jest ograniczona żadnymi fizycznymi płaszczyznami (ścianki, dno), co można uważać za zaletę przyjętej metody. Z literatury [11,17,18] wiadomo bowiem, że ich obecność zaburza geometrię

**T a b e l a. 2.** Porównanie zmierzonych i przewidywanych porowatości teksturalnych dla wybranych ośrodków piaszczystych i piaszczysto-pylastych

**T a b l e 2.** Measured and calculated porosity values of investigated sandy and sandy loam materials

Procentowy udział masowy frakcji granulometrycznych (promienie ekwiwalentne frakcji w $\mu\text{m}$ )	Porowatość objętościowa (%)	
	z symulacji $P_{sym}$	zmierzona $P_{pom}$
kulki szklane:(10-31)-1,3%, (31-50)-16,0%, (50-62,5)-66,4%, (62,5-80,0)-14,1%	36,1	34,9
frakcja piasku 1, (125-250)-100%	37,1	37,0
frakcja piasku 2, (88,5-105,0) -100%	36,6	36,5
frakcja piasku 3; (52,0-62,5)- 100%	40,1	39,5
piasek rzeczny: (<25)-4,0%, (25-40)-1,0%, (40-50) -1,5%, (50-70)-3,0%, (75-100) -4.0%, (100-150) -15.5%, (150-250)- 25,0%, (250-350) -16,5%, (350-500) -14,3%, (500 -600)-5,2%, (600-750)-5,5%, (750-1000)-4,2%	34,7	34,2

cząstek w stosunku do obszarów oddalonych od nich. W warstwie przyściennej o grubości 3-4 średnic występują, zanikające z odległością, fluktuacje porowatości. Efekt ten byłby niekorzystny z punktu widzenia planowanych badań, gdyż interesuje nas ośrodek nie zaburzony. W tym przypadku problem ten nie istnieje, ponieważ nie ma żadnych płaszczyzn ograniczających układ.



**Rys. 2.** Wizualizacja fragmentu trójwymiarowej wirtualnej struktury ośrodka.  
**Fig. 2.** Visualisation of 3D virtual granular structure.

Powyższe algorytmy zastosowano do stworzenia struktur wirtualnych ośrodków o zróżnicowanych składach granulometrycznych. Zestawienie ośrodków, do których zastosowano algorytm przedstawia Tabela 2. Oprócz składu granulometrycznego zawiera ona porównanie porowatości zmierzonej, odnoszącej się do ośrodka rzeczywistego, i porowatości ośrodka wirtualnego, będącej rezultatem obliczeń numerycznych.

Z danych tych wynika, że metoda ta pozwala uzyskiwać wirtualne struktury granularne o bardzo zbliżonej do ośrodka rzeczywistego porowatości, co uznano za warunek konieczny prowadzenia dalszych badań nad rozkładami porów.

Wszystkie programy przedstawione w tej pracy zostały napisane w języku *Turbo Pascal* i *Borland Pascal*, a obliczenia wykonano przy pomocy mikrokomputerów 486 i *Pentium*. Czas egzekucji był niekiedy dosyć długi (do kilkunastu godzin), a ilość cząstek potrzebna do stworzenia wirtualnego ośrodka osiągała 30 000.

### Koncepcja poru ośrodka wirtualnego

W badaniach przyjęto założenie, że równość porowatości i składów granulometrycznych dwóch ośrodków glebowych jest warunkiem wystarczającym, aby uznać je za identyczne. Jeśli uznać je za prawdziwe, można również sądzić, że wnioski wynikające z analizy struktury ośrodka wirtualnego charakteryzują ośrodek rzeczywisty. W szczególności dotyczy to porów wewnątrz. Jednakże, aby było to możliwe należy, stworzyć koncepcję pojedynczego poru ośrodka, która uwzględniałaby jego cechy fizyczne i umożliwiałyby obliczenia numeryczne.

Rysunek 3 przedstawia przekrój poprzeczny przez jedną z otrzymanych wirtualnych struktur trójwymiarowych. Między cząstkami fazy stałej istnieje skomplikowany układ kanalików, przewężeń i rozszerzeń, które określane są pojęciem porów ośrodka.

Termin ten, jakkolwiek podstawowy i używany bardzo często przy opisie fizykochemicznych właściwości ośrodka glebowego, nie ma jednak precyzyjnej definicji. Uznaje się, że metoda pomiaru (porozymetria rtęciowa, płyty porowate) określa rozkład porów badanego ośrodka przez co rozumie się procentowy udział objętości związany z określonym ciśnieniem charakterystycznym poru. Zakłada się, że ciśnienie to powiązane jest z parametrem geometrycznym poru poprzez równanie Young'a -Laplace'a. Przy takim podejściu por jest cylindryczną kapilarą o znanej średnicy i nieokreślonej długości.

Jedyna próba innej definicji pojedynczego poru brzmi następująco: "... jest to część przestrzeni ograniczona powierzchnią fazy stałej (ośrodka) oraz powierzchniami utworzonymi w miejscach, gdzie promień hydrauliczny osiąga minimum, analogicznie jak termin pokój jest zdefiniowany przez ściany i drzwi prowadzące do niego"[21].

W wyniku przekroju trójwymiarowego wirtualnego ośrodka porowatego powstaje druga, inna jakościowo struktura. Do badań postanowiono użyć zarówno strukturę płaską (2D) jak i przestrzenną (3D) - jedną niezależnie od drugiej. Uznano, że przewidywany program badań stwarza unikalne możliwości porównań wyników dotyczących tego



samego ośrodka i pochodzących z dwóch źródeł - powiązanych ze sobą lecz jakościowo różnych.

Procedury określania porów 2D i 3D są analogiczne. W obu przypadkach polegają one na rozwiązaniu układu równań :

a) dla dwóch wymiarów

$$\begin{aligned}(a(i) - x(k))^2 + (b(i) - y(k))^2 &= (r(k) + d(i))^2 \\ (a(i) - x(l))^2 + (b(i) - y(l))^2 &= (r(l) + d(i))^2 \\ (a(i) - x(k))^2 + (b(i) - y(k))^2 &= (r(k) + d(i))^2\end{aligned}$$

gdzie:  $x, y$  - współrzędne cząstek  $k, l, m$ ;  $r(k), r(l), r(m)$  - promienie 3-ch cząstek;  $a(i), b(i), d(i)$  - współrzędne i promień okręgu  $i$ -tego (identyfikatora) wpisanego między cząstki  $k, l, m$ .

b) dla trzech wymiarów

$$\begin{aligned}(A[i] - X[k])^2 + (B[i] - Y[k])^2 + (C[i] - Z[k])^2 &= (D[i] - R[k])^2 \\ (A[i] - X[l])^2 + (B[i] - Y[l])^2 + (C[i] - Z[l])^2 &= (D[i] - R[l])^2 \\ (A[i] - X[m])^2 + (B[i] - Y[m])^2 + (C[i] - Z[m])^2 &= (D[i] - R[m])^2 \\ (A[i] - X[n])^2 + (B[i] - Y[n])^2 + (C[i] - Z[n])^2 &= (D[i] - R[n])^2\end{aligned}$$

gdzie: indeksy  $k, l, m, n$  określają numery cząstek, między którymi określany jest por (3) o numerze  $i$ , a  $X, Y, Z$  - współrzędne przestrzenne cząstek,  $A, B, C$  - współrzędne środka identyfikatora poru o numerze  $i$ ,  $R$  i  $D$  - promienie cząstek i identyfikatora poru, odpowiednio.

Identyfikator poru jest okręgiem (dla 2D) lub kulą (dla 3D) który jest styczny do określających go cząstek. Warunek wystarczający istnienia poru w rozpatrywanym miejscu jest następujący: okrąg/sfera kulista identyfikatora nie może przecinać powierzchni żadnej cząstki ośrodka.

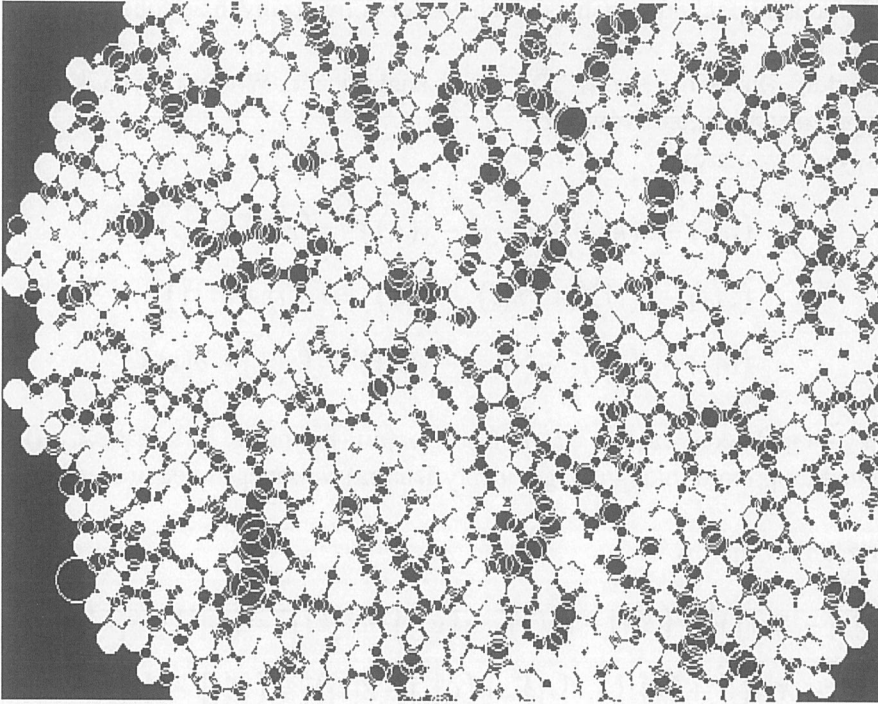
Rysunek 3 przedstawia strukturę granularną 2D składającą się z fazy stałej (białe koła) między którymi zaznaczono identyfikatory porów (białe okręgi).

Zgodnie z przedstawioną powyżej koncepcją

*por 2D jest częścią trójkąta, utworzonego przez środki 3-ch cząstek określających identyfikator, pomniejszoną o wycinki kół należące do tych cząstek.*

Przez analogię

*por 3D jest częścią czworościanu, powstałego z połączenia środków kul określających jego identyfikator, z którego usunięto cztery należące do nich sektory sferyczne.*



**Rys. 3.** Przekrój przez trójwymiarowy agregat (cząstki- białe koła) wraz z identyfikatorami porów (białe okręgi).

**Fig. 3.** Cross section through the 3D aggregate (particle - white circle) with the pore identifiers (white rings).

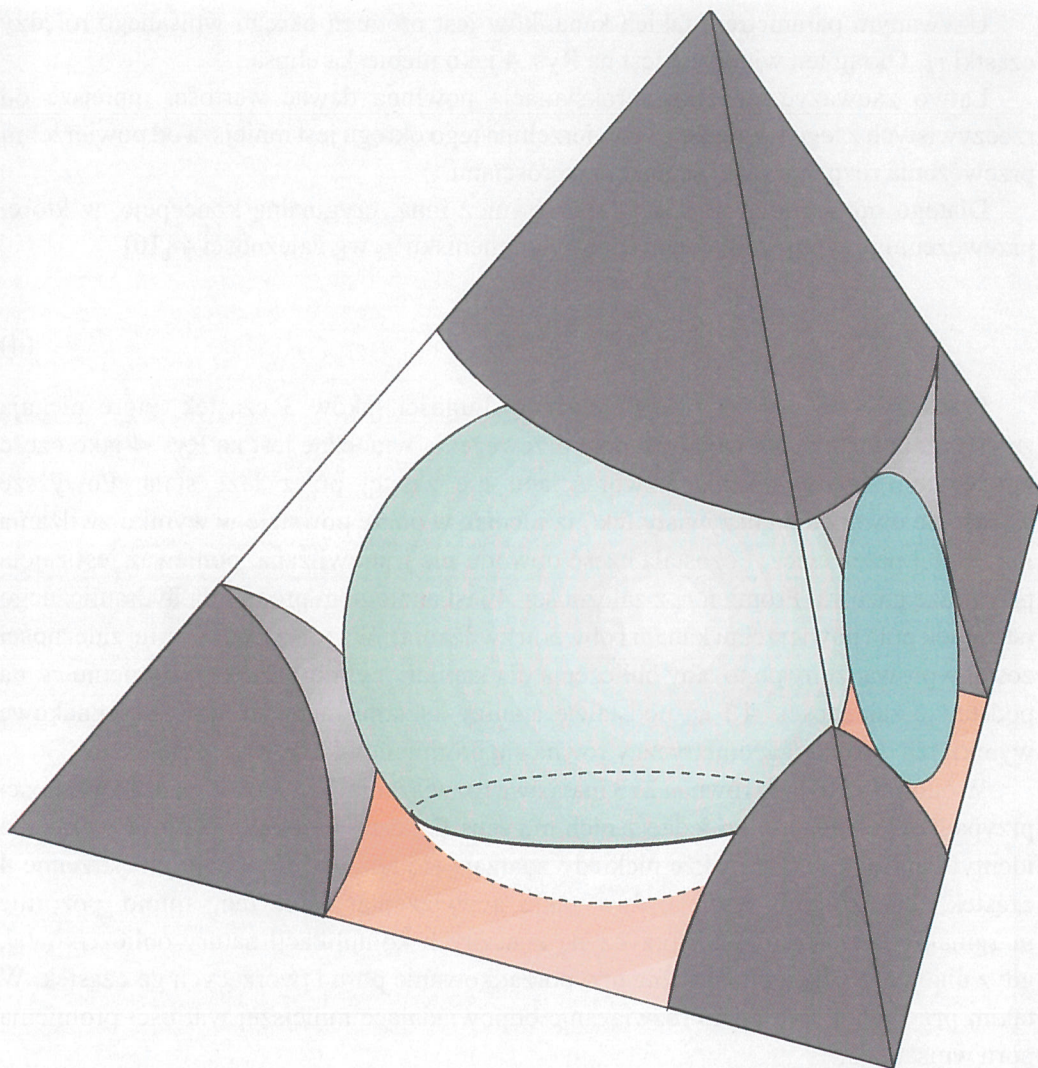
Jeśli połączyć środki cząstek kulistych tworzących por odcinkami prostych, otrzyma się czworościan o ścianach trójkątnych. Wewnątrz czworościanu znajdują się sektory sferyczne (fragmenty) 4 cząstek.

Por ten, przedstawiony schematycznie na Rys. 4, może być charakteryzowany następującymi parametrami:

- a) objętością,
- b) 4-ma przewężeniami,
- c) promieniem kuli wpisanej (identyfikator poru),
- d) powierzchnią cząstek stałych ograniczających.

Na rysunku tym powierzchnie koloru szarego odpowiadają fazie stałej, zielonego kuli wpisanej w por.

Interpretacja fizyczna przewężenia wymaga dokładniejszego opisu. Ściany boczne czworościanu tworzą umowną granicę między porami, tak jak to widać na rysunku. Poszczególne pory łączą się z otoczeniem, tzn. z sąsiednimi porami, poprzez przewężenia, tzn. nieregularne kanaliki o zmiennym przekroju. Na ścianie bocznej, pole powierzchni tego kanalika musi być najmniejsze z możliwych i dlatego przyjęto, że ten przekrój charakteryzuje właściwości kapilarne przewężenia.



**Rys. 4.** Idea czworościennego poru trójwymiarowego (3D) utworzonego przez 4 cząstki (faza stała - kolor szary).

**Fig. 4.** The idea of tetrahedral 3D pore created by 4 particles (solid phase - grey color).

Ponieważ obliczenie analityczne promienia krzywizny menisku związanego z taką geometrią jest niemożliwe [19], z tego względu, próbując jakoś kwantyfikować przewężenia, postanowiono posłużyć się stosowanymi, częściowo zmodyfikowanymi, przybliżeniami opisu kanałów nieregularnych. Punktem odniesienia jest kapilara cylindryczna, tzn. każde zaproponowane przybliżenie dla kształtów nieregularnych, zastosowane do przekroju kołowego, winny dawać wartości znane z rozwiązań analitycznych.

Używanym parametrem takich kanalików jest promień okręgu wpisanego między cząstki  $r_k$ . Okrąg ten widoczny jest na Rys. 4 jako niebieska elipsa.

Łatwo zauważyć, że taka aproksymacja powinna dawać wartości mniejsze od rzeczywistych z tego względu, że powierzchnia tego okręgu jest mniejsza od powierzchni przewężenia rozpatrywanej ścianki czworościanu.

Dlatego oprócz niej przetestowano również inną, oryginalną koncepcję, w której przewężeniu przyporządkowuje się promień menisku  $r_k$  wg zależności 4 [10]

$$r_k = 2 \frac{\text{pole}}{\text{obwód}}. \quad (4)$$

Przy czym za obwód uważa się sumę długości łuków 3 cząstek, które ulegają zwilżeniu przez menisk wodny, a pole przewężenia widoczne jest na Rys. 4 jako część powierzchni ściany bocznej czworościanu nie zajętej przez fazę stałą. Powyższe wyrażenie uwzględnia oczywisty fakt, iż menisk w porze powstaje w wyniku zwilżania fazy stałej przez ciecz. Pozostała część obwodu nie jest zwilżana, ponieważ jest zajęta przez fazę gazową. Promień  $r_k$  z zależności 4 jest analogiem promienia hydraulicznego (stosunek pola powierzchni kanału i obwodu zwilżania). Współczynnik 2 w tej zależności został wprowadzony po to, aby obliczenia dla kapilary cylindrycznej o promieniu  $r_k$ : na podstawie zależności 4 i na podstawie analizy kształtu menisku, dawały jednakowe wyniki, tzn. promień geometryczny równa się promieniowi krzywizny menisku.

W ogólności układy równań 2 i 3 mają dwa rozwiązania. W zdecydowanej większości przypadków (>99%) tylko jedno z nich ma sens fizyczny (dodatnia wartość promienia identyfikatora poru). Jednakże niekiedy zdarzają się takie konfiguracje przestrzenne 4 cząstek, dla których istnieją dwa takie rozwiązania. Fakt ten, mimo pozornie marginalnego znaczenia, był przyczyną znacznych komplikacji natury obliczeniowej, gdyż uniemożliwiał jednoznaczne przyporządkowanie poru i tworzących go cząstek. W takim przypadku wybierano rozwiązanie odpowiadające mniejszej wartości promienia poru wpisanego.

Relacja między ilością cząstek i porów jest inna w porównaniu do modelu 2D. Na każdą cząstkę średnio przypada w tym przypadku 6-8 porów (2,0-2,2 dla 2D). Stosunek ten jest różny dla różnych składów granulometrycznych i zależy od porowatości ośrodka.

Reasumując obie zaproponowane definicje porów, tzn. 2D i 3D, należy podkreślić, że każda z nich uwzględnia podstawowe cechy realnych układu porów, tzn. fakt istnienia połączeń międzyporowych i zmienność ich promienia geometrycznego. Wilgotność przy danym potencjale będzie zależeć od kierunku zmian: osuszanie lub nawilżanie ośrodka.

### Podział ośrodka wirtualnego na indywidualne pory

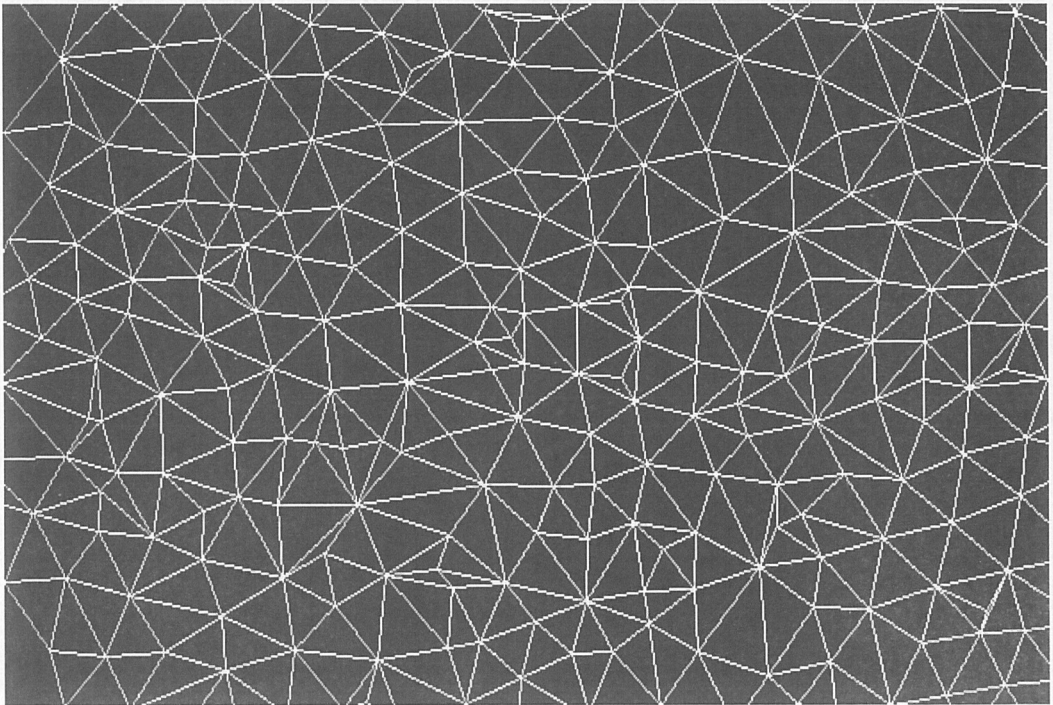
Modelowanie numeryczne wymaga operowania ścisłym pojęciem poru. Poszukując sposobu, umożliwiającego opis tak złożonej struktury jak porowaty ośrodek granularny,

posłużono się ideą tesselacji powierzchniowej i przestrzennej, stosowanej do opisu i badania różnych struktur i procesów stochastycznych [13,14,22].

Tesselacja umożliwia podział dowolnego obiektu (dwu-, trój- lub więcej-wymiarowego), składającego się ze skończonej liczby punktów, na związane z nimi obszary, które całkowicie wypełniają jego powierzchnię (lub przestrzeń).

Spośród dwóch podstawowych jej typów, wybrano metodę tesselacji Delaunay'a [22], która dzieli obiekty płaskie na trójkąty lub przestrzenne - na czworościany. Cechą szczególną tego podziału jest jego spójność, co oznacza, że suma powierzchni trójkątów równa się powierzchni obiektu, a dla 3D analogiczny związek występuje w odniesieniu do objętości czworościanów.

Rysunek 5 powstał z Rys. 3 przez połączenie ze sobą środków cząstek tworzących każdy por i jednocześnie pominięcie wszystkich okręgów. Widać, że zbiór porów i związanych z nimi cząstek, przedstawiony przy pomocy trójkątów, pokrywa całkowicie powierzchnię przekroju. W zasadzie bok trójkąta należy do dwóch sąsiadujących ze sobą porów. Każdy trójkąt zawiera jeden por i trzy fragmenty tworzących go cząstek. Punkt, w którym zbiegają się boki trójkątów jest środkiem cząstki. Ilość porów związanych z daną cząstką równa się ilości odcinków zbiegających się w jej środku. Długość tych odcinków daje przybliżony obraz wielkości cząstek współtworzących dany por, ponieważ jest ona



**Rys. 5.** Sieć trójkątów porowych utworzonych z Rys. 3 w wyniku triangulacji.

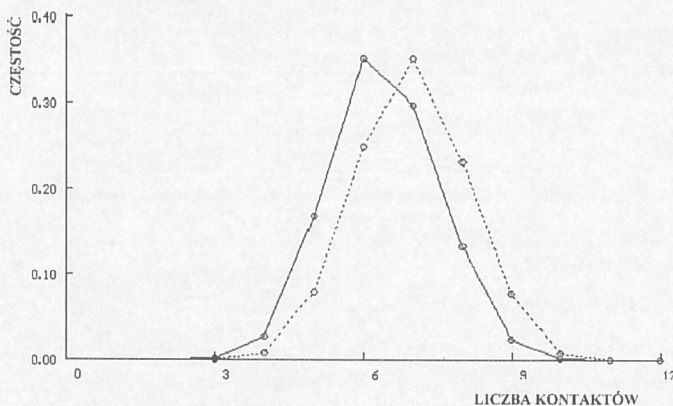
**Fig. 5.** The network of triangle pores obtained from Fig. 3 via triangulation.

sumą dwóch promieni geometrycznych cząstek, powiększoną o odległość między ich powierzchniami. Nawet pobieżna analiza Rys. 5 wykazuje, że ilość porów związanych z cząstką jest zależna od jej promienia, a ściślej mówiąc od wielkości jej promienia w stosunku do promieni cząstek sąsiednich. W tym konkretnym przypadku minimalna ilość porów związanych z cząstką wynosi 3, a maksymalna 10. Rysunek 6 przedstawia sieć trójkątów porowych dla bardzo drobnoziarnistego piasku rzecznoego o znacznie większym zakresie zmienności wielkości cząstek (skład granulometryczny w Tabeli 2).

Analogiczne rachunki przeprowadzono również w odniesieniu do przypadku 3D. Opracowanie programów analizujących wirtualną strukturą trójwymiarową były znacznie trudniejsze pod względem koncepcyjnym i rachunkowym m.in. z powodu trudności z wizualizacją obiektów trójwymiarowych. Pytanie czy powstałe w wyniku tesselacji Delannauy'a czworościany kompletnie wypełniają przestrzeń ośrodka okazało się skomplikowanym problemem. W tym przypadku czworościany stykają się ze sobą ścianami o kształcie trójkąta. Każda ściana należy do dwóch czworościanów zawierających pory, a przewężenie z nią związane, umożliwia fizyczny kontakt porów ze sobą. Liczba porów związanych z pojedynczą cząstką zawierała się w granicach od 4 do kilkudziesięciu, podczas gdy dla przypadku 2D wynosiła 6-8. Podobnie jak w przypadku 2D, zależy ona od relacji między wielkościami cząstek, tworzących ośrodek.

#### LICZBA PUNKTÓW KONTAKTU CZĄSTKI W OŚRODKU GRANULARNYM

Cząstki każdego ośrodka sypkiego stykają się ze sobą tworząc jego strukturę. Poprzez punkty kontaktu przekazywane są naprężenia determinujące stan mechaniczny a więc i



Rys. 6. Rozkład liczby punktów kontaktu (linia ciągła) i prawie-kontaktów (linia przerywana) monodispersyjnego ośrodka o porowatości 42,2%.

Fig. 6. Distribution of number of contacts (solid line) and of near contacts in monodisperse granular medium of 42.2% porosity.

strukturę całego ośrodka. Ich liczba jest funkcją składu granulometrycznego i wewnętrznej struktury ośrodka.

Badania symulacyjne upakowania cząstek stwarzają możliwość stosunkowo łatwego określenia związków między składem granularnym i liczbą kontaktów cząstek badanego ośrodka.

### **Rozkład liczby punktów kontaktu układu ziarnistego**

Układ monodispersyjny składający się z kulek jest często używanym ośrodkiem modelowym przy badaniach właściwości ośrodków granularnych. Udowodniono, że przestrzeni wypełnionej jednakowymi kulami nie da się zbudować z czworościanów regularnych. Wbrew pozorom struktura jego jest dosyć złożona, czego dowodzą wyniki dotyczące rozkładu porów (przedstawione w poprzednich rozdziałach) idane literaturowe [7-9,22].

Potwierdzeniem tego spostrzeżenia jest rozkład liczby punktów kontaktu monodispersyjnego ośrodka wirtualnego, który wcześniej już został opisany. Na Rys. 6 przedstawiono dwa rozkłady: 1-szy dotyczy liczby kontaktów, 2-gi - liczby kontaktów i prawie-kontaktów łącznie. Termin "prawie-kontakt" dotyczy takiej geometrii cząstek, dla której odległość między powierzchniami cząstek jest mniejsza od 0,1 promienia geometrycznego cząstki.

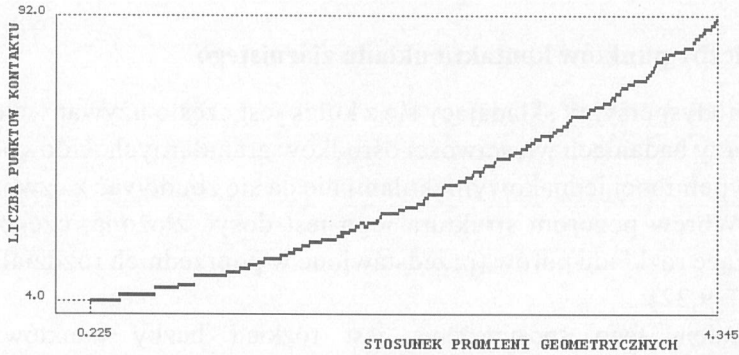
Obie krzywe z Rys.6, odnoszące się do układu monodispersyjnego, mają wyraźne maksima dla 6 i 7 punktów kontaktu odpowiednio. Maksymalna liczba kontaktów wynosi 12, przy czym liczba takich cząstek jest zupełnie marginalna.

### **Liczba kontaktów cząstki w monodispersyjnym ośrodku ziarnistym**

Wydaje się oczywiste, że istnieje związek między ilością sąsiadów danej cząstki i jej wielkością w stosunku do pozostałych cząstek. Wiadomo, że ich liczba zależy również od składu granulometrycznego i porowatości. Wiedza na ten temat jest fragmentaryczna [15,19,20].

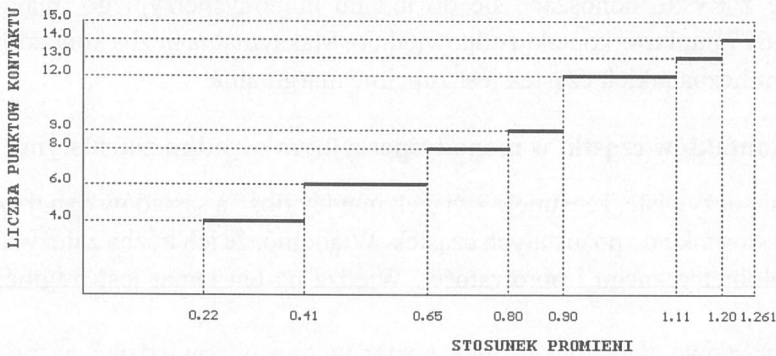
Chcąc częściowo wypełnić tę lukę postanowiono odpowiedzieć na podstawowe pytanie dotyczące ilości możliwych sąsiadów stykających się z daną cząstką. Ogólna odpowiedź na tak postawione pytanie nie wydaje się możliwa, gdyż istnieje nieskończenie dużo możliwych kombinacji dotyczących składu granulometrycznego. Dla uproszczenia problemu założono, że rozpatrywana cząstka (kula centralna) znajduje się w ośrodku monodispersyjnym. Wynik przeprowadzonych badań numerycznych przedstawiono na Rys. 7. Liczba punktów kontaktu rośnie ze wzrostem promienia kuli centralnej, powierzchnia której pokrywana jest monowarstwą jednakowych cząstek kulistych. Algorytm upakowania skonstruowano tak, aby nowo pojawiające się cząstki były w każdym przypadku styczne do kuli centralnej  $k$ , a ponadto - do dwóch cząstek  $l$  i  $m$ , które spełniają warunki  $l=k+1$ ,  $k+2,..$  oraz  $m=l+1$ ,  $l+2,....$  W ten sposób tworzono strukturę o najgęstszym, jak się zdaje, upakowaniu elementów składowych.

Bliższa analiza tego wykresu pokazuje pewne zaskakujące właściwości upakowania jednakowych cząstek na powierzchni sferycznej o zmiennym promieniu. Rys.8 przedstawia powiększony początkowy fragment wykresu z Rys. 7. Ponieważ liczba



Rys. 7. Liczba punktów kontaktu kuli o zmiennym promieniu geometrycznym w ośrodku monodispersyjnym.

Fig.7. Contact number of "swelling" sphere in monosize medium.



Rys. 8. Fragment początkowej części wykresu z Rys. 7.

Fig. 8. Beginning part of the curve from Fig. 7.

kontaktów musi wyrażać się liczbą naturalną, więc wykres tej zależności nie jest ciągły i przypomina schody, których wysokość i szerokość są na ogół dla każdego stopnia różne. Widać, że liczbą kontaktów nie jest ciągiem kolejnych liczb naturalnych.

Dla przyjętego algorytmu, tworzącego jak się zdaje najgęstsze upakowanie, nie znaleziono cząstki mającej kontakt z 5,7,10,11 jednakowymi cząsteczkami.

Jeśli zamiast liczby kontaktów  $N$  na osi pionowej umieścić pierwiastek kwadratowy z  $N$ , okazuje się, że zależność powyższa daje się przybliżyć prostą jak to widać na Rys. 9.

Na tej podstawie można sformułować następujący wniosek:



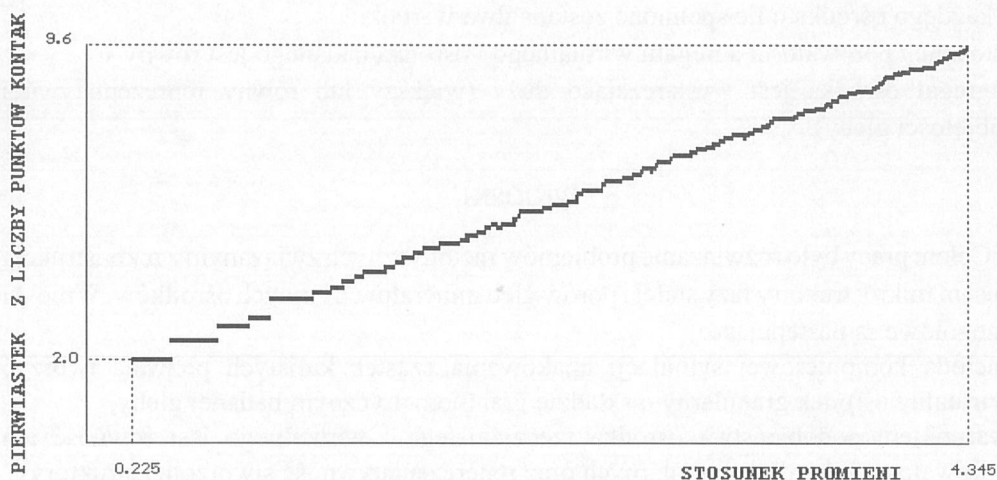
pierwiastek kwadratowy z liczby punktów kontaktu cząstki o dowolnym promieniu, znajdującej się w granularnym ośrodku monodispersyjnym, jest liniową funkcją stosunku jej promienia geometrycznego i promienia cząstek otaczających.

Można go zapisać w postaci:

$$\sqrt{N_c} = a R_c / R_m + b \quad (11)$$

gdzie:  $N_c$  - liczba punktów kontaktu;  $R_c$  - promień geometryczny kuli centralnej;  $R_m$  - promień geometryczny cząstek ośrodka monodispersyjnego;  $a, b$  - stałe, których wyliczone wartości wynoszą 1,845 i 1,636 odpowiednio.

Najmniejsza wartość na osi poziomej wykresu Rys. 9 wynosi 0,225. Odpowiada ona promieniowi kuli wpisanej w regularną komórkę tetraedryczną.



Rys. 9. Pierwiastek kwadratowy z liczby punktów kontaktu  $N_c$  w funkcji stosunku promienia cząstki centralnej i promienia monodispersyjnych cząstek otaczających.

Fig. 9. Square root of contacts number of "swelling" sphere in monosize medium.

Na uwagę zasługuje nieciągłość liczby kontaktów w otoczeniu rzędnej równej jedności. Z wykresu wynika, że dwie cząstki, jedna o promieniu 0,90 i druga o promieniu 1,11 promienia cząstek monodispersyjnych, mają taką samą liczbę kontaktów, tzn. 12. Należy zauważyć, że powierzchnia drugiej cząstki jest o ponad 50% większa od pierwszej.

Ponadto ciąg liczb określający liczbę punktów kontaktu nie jest ciągiem rosnącym. "Schody" wykresu na Rys. 8 niekiedy "idą nieznacznie w dół", co oznacza, że liczba cząstek stycznych do kuli centralnej może maleć mimo wzrostu jej powierzchni. Po raz pierwszy taką sytuację obserwuje się przy stosunku promieni bliskim 2, kiedy to liczba punktów kontaktu maleje z 29 do 28, mimo wzrostu promienia kuli centralnej  $R_c$  o 0,01

$R_m$ . Oznacza to, że w drugim przypadku upakowanie cząstek na powierzchni kuli jest luźniejsze niż w pierwszym. Mimo, że przedstawione powyżej wyniki badań symulacyjnych dotyczą wyidealizowanego przypadku, można przypuszczać, że w pewnych sytuacjach mogą być one pomocne w ocenie liczby kontaktu cząstek rzeczywistego ośrodka glebowego. Jeśli ośrodek składa się z np. z dwóch frakcji i jedna z nich ma znacznie większy udział jak druga wówczas należy domyślać się, że cząstki frakcji dominującej stykają się bądź ze sobą, bądź z cząstkami frakcji mniejszościowej. Prawdopodobieństwo zetknięcia się ze sobą cząstek drugiej rodzaju winno być tym mniejsze im więcej jest cząstek z frakcji pierwszej. W takim przypadku można przypuszczać że, te cząstki stykają się niemal wyłącznie cząstkami z frakcji dominującej. Wówczas, znając stosunek średnic cząstek obu frakcji, można ocenić liczbę kontaktów cząstek obu rodzajów.

Należy podkreślić, że opracowane algorytmy pozwalają określać tę charakterystykę dla każdego ośrodka o ile spełnione zostaną dwa warunki:

1. stosunek porowatości agregatu wirtualnego i ośrodka badanego jest równy 1,
2. agregat ośrodka jest wystarczająco duży (większy lub równy reprezentatywnej objętości gleby).

## WNIOSKI

Celem pracy było rozwiązanie problemów metodycznych związanym z rekonstrukcją i opisem mikrostruktury fazy stałej i porów gleb mineralnych i innych ośrodków. Wnioski szczegółowe są następujące:

- metoda komputerowej symulacji upakowania cząstek kulistych pozwala tworzyć wirtualny ośrodek granularny o składzie granulometrycznym badanej gleby,
- warunkiem podobieństwa ośrodka rzeczywistego i wirtualnego jest równość ich porowatości i składów granularnych oraz reprezentatywność stworzonej struktury,
- opracowana koncepcja pojedynczego poru ośrodka w powiązaniu z metoda tesselacji pozwala podzielić go na sieć porów spójnie wypełniającą cały ośrodek wirtualny,
- przedstawiono metodę pozwalającą określać liczbę punktów kontaktu cząstki dowolnej wielkości w ośrodku dyspersyjnym.

## PIŚMIENNICTWO

1. **Arya L.M., Dierlof T.S.:** Predicting soil moisture characteristics from particle- size distributions: an improved method to calculate pore radii from particle radii. Proc. Int. Workshop for Estimating the Hydraulic Properties of unsaturated Soil, Riverside, California, USDA, ARS, 1989.
2. **Arya L.M., Paris J.F.:** A physicoempirical model to predict the soil moisture from partcle size distribution and bulk density data. Soil Sci. Soc . Amer. J., v.45. 1981.
3. **Bloemen G.W.:** Calculation of Hydraulic conductivities of soils from texture and organic mater matter content. Z. Pflanzenernaehr. Bodenkd., 14, 1980.
4. **Chretien J.:** Role du Squelette dans l'Organisation des Sols. INRA Paris, 1986.
5. **Czachor H.:** Granulometric distribution and soil porosity. Zesz. Probl. Post. Nauk Roln., 312, 11-19, 1990.

6. **Czachor H.:** Geometria fazy stałej i przestrzeni porów w rolniczych ośrodkach granulanych na przykładzie gleby mineralnej. *Acta Agrophysica*, 7, 1997.
7. **Finnay J.L.:** Random packings and structures of simples liquids. The geometry of random close packing. *Proc. Roy. Soc. London*, A, 319, 1970.
8. **Finnay J.L., Wallace J.:** Intersaction correlation function: new sensitive characterisation of noncrystaline packed structure. *J. Non-cristaline Solid*, 49, 1981.
9. **Finnay J.L.:** Modelling of liquid and amorphous solids. Inter. Center for Theoretical Physics, Spring Collage on Amorphous solids. Trieste, 1982.
10. **Gołębiewski C., Luczywek E., Walicki E.:** Zbiór Zadań z Mechaniki Płynów. PWN, Warszawa, 1975.
11. **Govindarao VMH.:** Prediction of location of partcles in the wall region of a randomly packed bed of spheres. *J. Soil. Sci.*, 39, 1988.
12. **Gupta S.C., Larson W.E.:** Estomating soil water characteristics from particle size distribution. Organic percent, and bulk density. *Soil Water Res.*, 15, 6, 1979.
13. **Lorz U., Ohser J.:** Course of Stochastic Geometry. Freiberg University of Mining and Technology. Slasky dvur., 1993
14. **Okabe A., Boots B., Sugihara K.:** Spatial Tesselation. Concept and application of Voronoi diagrams. J. Wiley&Sons. Chichester, N-Y. Brisbane, Singapore, 1992.
15. **Panayiotopoulos K.P.:** Packing of sands- A review. *Soil and Tillage Research*, 13, 101-118, 1988.
16. **Russ J.C.:** Practical Sterology. Plenum Press, N-Y London, 1986.
17. **Roblee L.H.S., Baird R.M., Tierne J.W.:** Radial porosity variations in packed beds. *A.I.Ch.E.J.*, 4.4, 1958.
18. **Ridgway K., Tarbuck K.J.:** Voidage flocculations in a randomly-packed beds of spheres adjacent to containing wall. *Chem. Eng. Sci.*, 23, 1989.
19. **Smith W.O., Foote P.D., Busang P.G.:** Capillary rise in sands of uniform spherical grains. *Physics*, 1, 1931.
20. **Staple W.J.:** The influence of size Distribution on bulk density of uniformly packed Glass Particles. *Soil Sci. Soc. Amer. Proc.*, 39, 408-409, 1975.
21. **Wu L., Vomocil J.A., Childs S.W.:** Pore size, particle size, agreggate size and water retention. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 54, 952-956, 1990.
22. **Zallen R.:** *Fizyka Ciał Amorficznych*. PWN, Warszawa, 1994.

## SIMULATION INVESTIGATIONS OF SOIL MICROSTRUCTURE AND ITS PARAMETRISATION

*H. Czachor*

Institute of Agrophysics, Polish Academy of Sciences, Doświadczalna 4  
P.O. Box 201, Lublin 27, Poland, email: hczachor@demeter.ipan.lublin.pl

### SUMMARY

Computer method for a reconstruction of granular medium structure and for its quantification has been presented. An algorithm for a virtual structure creation on the basis of grain size distribution and of porosity data is described. The whole medium can be divided onto a network of single pores where each of them is build up from 4 particles (in 3D) and is characterized by several independent parameters. The porosity of virtual bodies agree well with the real one. Some results concerning the point of contacts distribution inside the mono and polisize media has been presented.

**K e y w o r d s:** soil structure, particle size distribution, virtual medium