

**Instytut Agrofizyki
im. Bohdana Dobrzańskiego PAN
w Lublinie**

ACTA AGROPHYSICA

7

Henryk Czachor

**GEOMETRIA FAZY STAŁEJ I PRZESTRZENI PORÓW
W ROLNICZYCH OŚRODKACH GRANULARNYCH
NA PRZYKŁADZIE GLEBY MINERALNEJ**

Rozprawa habilitacyjna

Lublin 1997

Komitet redakcyjny
prof. dr hab. Jan Gliński, czł. koresp. PAN
doc. dr hab. Krystyna Konstankiewicz
doc. dr hab. Ryszard Dębicki

Opiniowała do druku
doc. dr hab. Krystyna Konstankiewicz

Publikacja indeksowana przez
POLISH SCIENTIFIC JOURNALS CONTENTS – AGRIC. & BIOL. SCI.
w sieci INTERNET pod adresem <http://saturn.ci.uw.edu.pl/psjc/>
lub <http://ciuw.warman.net.pl/alf/psjc/>

Adres redakcji
Instytut Agrofizyki im. Bohdana Dobrzańskiego PAN
ul. Doświadczalna 4, 20-036 Lublin
tel. (0-81) 744-50-61

Pracę wykonano w ramach projektów badawczych nr 5 F 306 030 04
w latach 1993-1995 i nr 5 P 06 F 00310 w latach 1996-1997
finansowanych przez Komitet Badań Naukowych

© Copyright by Instytut Agrofizyki im. Bohdana Dobrzańskiego PAN, Lublin 1997

ISBN 83-87385-01-8
ISSN 1234-4125

Wydanie I. Nakład 150 egz.
Ark. wyd. 6,0. Ark. druk. 5,0.
Skład komputerowy: Wojciech Olech
Druk: „Tekst”, ul. 1 Maja 51, 20-410 Lublin

SPIS TREŚCI

1. WSTĘP	7
2. CEL PRACY	9
3. DEFINICJA REPREZENTATYWNEJ OBJĘTOŚCI GLEBY (ROG)	13
4. WIRTUALNY OŚRODEK GRANULARNY	15
5. SKŁAD GRANULOMETRYCZNY GLEBY	16
6. TWORZENIE WIRTUALNEJ STRUKTURY OŚRODKA GRANULARNEGO	20
6.1. Założenia modelu	20
6.2. Opis algorytmu tworzenia wirtualnego ośrodka granularnego poprzez upakowanie pojedynczych ziaren	21
7. POROWATOŚĆ I REPREZENTATYWNA OBJĘTOŚĆ GLEBY (ROG) WIRTUALNEJ STRUKTURY ZIARNISTEJ	26
8. POROWATOŚĆ MODELOWYCH OŚRODKÓW GLEBOWYCH	30
9. LICZBA PUNKTÓW KONTAKTU ZIAREN OŚRODKA GRANULARNEGO	32
9.1. Rozkład liczby punktów kontaktu układu ziarnistego	32
9.2. Liczba kontaktów cząstki w monodispersyjnym ośrodku ziarnistym	33
10. KONCEPCJA POJEDYNCZEGO PORU OŚRODKA WIRTUALNEGO	37
10.1. Por dwuwymiarowy (2D)	38
10.2. Por trójwymiarowy (3D)	40
11. ZASTOSOWANIE TESSELACJI DO TWORZENIA SIECI PORÓW OŚRODKA GRANULARNEGO	44
12. ROZKŁADY I KORELACJE ESTYMATORÓW PORÓW WIRTUALNEGO OŚRODKA MONODYSPERSYJNEGO	46
12.1. Rozkłady i korelacje estymatorów porów dwuwymiarowych 2D dla wirtualnego ośrodka monodispersyjnego	46
12.2. Rozkłady i korelacje estymatorów porów trójwymiarowych 3D dla wirtualnego ośrodka monodispersyjnego	49
13. STEREOMETRYCZNA INTERPRETACJA RÓŻNIC MIĘDZY PORÓWNYWALNYMI ROZKŁADAMI ESTYMATORÓW PORÓW DWU- I TRÓJWYMIAROWYCH	54

14. OKREŚLANIE ZALEŻNOŚCI POTENCJAŁ KAPILARNY – WILGOTNOŚĆ GLEBY NA PODSTAWIE GEOMETRII FAZY STAŁEJ	58
14.1. Określanie zależności potencjał kapilarny – wilgotność, na podstawie przekroju przez wirtualny ośrodek glebowy (2D)	60
14.2. Określanie zależności potencjał kapilarny – wilgotność trójwymiarowego, polidispersyjnego ośrodka glebowego (3D)	67
14.3. Podsumowanie przedstawionych metod określania zależności wilgotność – potencjał kapilarny ośrodka porowatego	71
15. UWAGI KOŃCOWE	72
16. WNIOSKI	73
LITERATURA	75
SUMMARY	79

Acta Agrophysica NO. 1 ERKATA

	jest	winno być
str.16, Tab.1	Średnica cząstki	Średnica cząstki [10^{-9} m]
str.17, rys.1	Promień cząstki	Promień cząstki [10^{-9} m]
str.34, 1wd	1.845 i 1.636	1.891 i 1.381
str.40, podpis rys.15	białe koła	czarne koła
	układ równan 14 winien zawierać również czwarte postaci	
	$(A(i) - X(m))^2 - (B(i) - Y(m))^2 - (C(i) - Z(m))^2 = (D(i) + R(m))^2$	
str.42, 11wd	13	13 i 14
str.55	rys.30 winien znajdować się na str.66, podpis prawidłowy	
str.56 6wg	3D	2D
str.66	rys.39 winien znajdować się na str.55, podpis prawidłowy	
str.73 wzór 24	$\sqrt{Nc} = 1.845R_c/R_m + 1.636$	$\sqrt{Nc} = 1.891R_c/R_m + 1.381$

SPIS OZNACZEŃ

Oznaczenie	Opis
a, b	– stałe
a(i)	– współrzędna x-owa i-tego identyfikatora poru 2D
A(i)	– współrzędna x-owa i-tego identyfikatora poru 3D
b(i)	– współrzędna y-owa i-tego identyfikatora poru 2D
B(i)	– współrzędna x-owa i-tego identyfikatora poru 3D
C(i)	– współrzędna x-owa i-tego identyfikatora poru 3D
d(i)	– promień i-tego identyfikatora poru 2D
D(i)	– promień i-tego identyfikatora poru 3D
f	– odległość między powierzchniami cząstek 2D tworzącymi por
g	– przyspieszenie ziemskie
g _i	– udział masowy cząstek frakcji i-tej gleby
h	– wysokość słupa wody
h(i)	– odległość płaszczyzny przecięcia od środka cząstki i-tej
i	– indeks
j	– ilość frakcji granulometrycznych
k	– indeks
L	– wysokość próbki
l	– indeks
L _L	– udział liniowy związany z daną fazą
m	– indeks
n	– liczba porów ośrodka
n _i	– udział ilościowy cząstek frakcji i-tej gleby
N _c	– liczba punktów kontaktu
N _N	– udział ilości punktów związany z daną fazą
p	– ciśnienie
P _a	– porowatość średnia
p _{c1}	– ciśnienie kapilarne pierwszego rodzaju
p _{c2}	– ciśnienie kapilarne pierwszego rodzaju
P _d	– porowatość różnicowa
P _{pom}	– porowatość rzeczywista
P _{sym}	– porowatość agregatu z symulacji

P_v	– porowatość objętościowa
r	– promień geometryczny cząstki 2D
r_k	– promień geometryczny kapilary
r_1, r_2	– główne promienie krzywizny menisku
r_i	– promień ekwiwalentny cząstek frakcji i-tej gleby
$r(j)$	– promień okręgu powstałego w wyniku przecięcia cząstki o promieniu $R(i)$
r_p	– promień przewężenia = $f/2$
R	– promień geometryczny cząstki 3D
R_c	– promień cząstki centralnej
R_m	– promień cząstki ośrodka monodispersyjnego
S_i	– powierzchnia trójkąta zawierającego i-ty por 2D
$S_{pi}(h_i > h)$	– powierzchnia i-tego poru „wilgotnego”, którego ciśnienie kapilarne h_i , związane z największym przewężeniem, jest większe od ciśnienia zewnętrznego
S_{sol}	– powierzchnia fazy stałej przekroju
S_s	– udział powierzchniowy danej fazy
S_t	– powierzchnia przekroju próbki
S_{2D}	– powierzchnia poru 2D
V_i	– objętość komórki czworościennej zawierający i-ty por 3D
$V_{pi}(h_i > h)$	– objętość i-tego poru „wilgotnego”, którego ciśnienie kapilarne h_i , związane z największym przewężeniem, jest większe od ciśnienia zewnętrznego
V_s	– objętość fazy stałej
V_t	– objętość całkowita układu
V_v	– udział objętościowy danej fazy
X, Y, Z	– współrzędne środka cząstki w przestrzeni
x, y	– współrzędne środka cząstki 2D
z	– odległość pionowa od punktu pomiaru potencjału do poziomu odniesienia
ρ_w	– gęstość wody
$\theta(h)$	– wilgotność objętościowa (powierzchniowa) przy ciśnieniu h
α_w	– graniczny kąt zwilżania
σ	– napięcie powierzchniowe wody
Ψ_t	– potencjał całkowity
Ψ_p	– potencjał ciśnienia P
Ψ_m	– potencjał matrycowy wilgotności θ
Ψ_s	– potencjał osmotyczny
Ψ_z	– potencjał grawitacyjny

1. WSTĘP

Materiały ziarniste stanowią surowiec bądź produkt finalny wielu gałęzi działalności gospodarczej. Do tej klasy ośrodków należy zaliczyć: materiały budowlane (piasek, cement, żwir) i ceramiczne (proszki, gliny i glinki), znaczną część produktów pochodzenia rolniczego (ziarna zbóż i produkty pochodne: mąka, kasza, a oprócz tego cukier itp.), jak również produkty przemysłu chemicznego (niektóre nawozy sztuczne, siarka, sól). Można do nich również zaliczyć odpady będące niepożądanym wynikiem przemysłowych procesów technologicznych: popioły, miał węglowy czy odpady poflotacyjne powstające przy produkcji np. siarki. Roczna produkcja wyżej wymienionych materiałów, w skali kraju, liczona jest w dziesiątkach milionów ton.

Najważniejszym jednak, z gospodarczego i ekologicznego punktu widzenia, ośrodkiem wykazującym strukturę ziarnistą jest gleba. Szczególna jej właściwość, w porównaniu do wyżej wymienionych ośrodków polega przede wszystkim na tym, że stanowi ona układ ożywiony, a więc zmienny w czasie. Poza tym 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. Zmiany uziarnienia, zachodzące w wyniku procesów glebotwórczych, są bardzo powolne i na ogół niezauważalne w okresie porównywalnym z długością ludzkiego życia.

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”. Już w 1681 roku pierwszy prawdopodobnie gleboznawca polski Wojciech Tytkowski (1629–1695) w traktacie *De re Agraria Insignis tractatus oeconomis...* sformułował 14 punktów „wiedzy o glebie” z których dziesiąty głosił:

„Ciężka ziemia czarna, od spodu gliniasta, jest dobra i ciepła, lecz podatna na chwasty, powinna być później zasiewana” [79].

W potocznym rozumieniu np. termin „gleba ciężka” jest skrótową, przybliżoną, opartą na doświadczeniu, charakterystyką gleby. Charakterystyką nieprecyzyjną, ale wszechstronną. 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.

Można więc przyjąć, że od wielu wieków dostrzegano istnienie związku między właściwościami fizycznymi, fizykochemicznymi, mechanicznymi gleb mineralnych, a ich składem granulometrycznym.

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

2. CEL PRACY

Analiza granulometryczna jest standardową charakterystyką wykonywaną przy niemal każdym badaniu gleby. Stanowi ona m.in. podstawą klasyfikacji gleb.

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 porowatości [12, 14, 18, 76], krzywej retencji wodnej i przewodnictwa wodnego ze składem granulometrycznym [2, 3, 5, 43, 64].

W ogólności próby te można podzielić na statystyczne i fizyko-empiryczne.

W pierwszym podejściu, na podstawie wyników doświadczalnych, próbuje się określać statystyczne zależności między poszukiwanymi wielkościami, a znanymi parametrami gleby takimi jak: zawartość poszczególnych frakcji (piasek, pył, il), zawartość materii organicznej, porowatość. Im większa populacja jest podstawą modelu, tym większa jest jego moc predykcyjna. Zawsze jednak w indywidualnych przypadkach wyniki mogą znacznie odbiegać od wartości realnych [42, 86].

Modele fizykoempiryczne [36, 37, 45, 58, 59] biorą za podstawę te same dane wyjściowe. Na podstawie mniej lub bardziej uzasadnionego hipotetycznego związku między danymi wejściowymi i przewidywaną wielkością, sprawdzana jest prawdziwość przyjętego modelu. Wymagają na ogół dodatkowych parametrów ośrodka jak: wilgotność rezydualną, wilgotność nasycenia i współczynników normalizujących (matching factor), których wyznaczenie jest często problemem samym w sobie.

Gleba jest naturalnym ośrodkiem wzrostu systemu korzeniowego roślin. Jego rozwój uzależniony jest od stanu gleby i możliwości zaspokajania potrzeb fizjologicznych rośliny podczas okresu wegetacyjnego. Część z nich, tzn. woda i sole mineralne, pobierana jest z gleby. Inne, jak dwutlenek węgla, tlen i energia – z atmosfery. W tym sensie roślina może być traktowana jak ujemne (lub dodatnie) źródło dla wyżej wymienionych czynników. Warunki panujące w jej otoczeniu są wypadkową procesów związanych z ich transportem – do i od rośliny. Na przykład wilgotność gleby w jej strefie korzeniowej można uważać za sumę wilgotności na początku okresu wegetacyjnego (stan początkowy) pomniejszoną, wskutek ujemnego strumienia wynikającego z transpiracji i ewapotranspiracji oraz powiększoną w wyniku dodatniego strumienia związanego z opadami i przewodnictwem hydraulicznym z części profilu glebowego otaczającego strefę korzeniową.

Podobnie upraszczając problem można powiedzieć, że rozkład temperatury w tej strefie jest rezultatem strumieni ciepła związanego z przewodzeniem oraz ruchu wody poprzez powierzchnię graniczną, który może być dodatni bądź ujemny, oraz strumienia ujemnego wynikającego z transpiracji.

Dla większości roślin istotnych dla produkcji rolniczej ilość wody potrzebna do wyprodukowania jednostkowej masy suchej wynosi od 300 do 1000. Oznacza to, że przez każdy metr kwadratowy pola uprawnego, w okresie wegetacyjnym, przenikają setki litrów wody. Podlega ona transpiracji, redystrybucji i akumulacji w wyniku procesów transportu oraz zjawisku retencji wodnej.

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.

Termin „struktura gleby” używany w literaturze jest nieprecyzyjny i wieloznaczny.

Do celów porównawczych, spośród wielu definicji struktury gleby, przytaczam kilka najczęściej spotykanych:

„... konfiguracja fazy stałej...” [82],

„... rozmiary, kształty i ułożenie cząstek fazy stałej i porów, które jest bardzo zmienne i połączone z oddziaływaniami między czynnikami mineralogicznymi, chemicznymi i biologicznymi” lub krócej „architektura ułożenia cząstek pierwotnych” [53],

„... fizyczny stan budowy wewnętrznej, określony wielkością, kształtem i zespoleniem poszczególnych ziaren, cząstek lub agregatów...” [85],

„Stan fizyczny materiału glebowego jest określony przez rozmiary, kształty i ułożenie cząstek stałych i porów, włączając agregację cząstek pierwotnych tworzących mikroagregaty (compound particles) jak również agregację mikroagregatów” [8].

Wszystkie te określenia mają jedną wadę: **ogólnikowość sformułowań uniemożliwia praktyczne określenie struktury gleby odpowiadające powyższym definicjom.**

Możliwy jest wprawdzie pomiar rozkładu rozmiarów cząstek, natomiast charakterystyka ich kształtu jest trudna, praktycznie niewykonalna.

Jakiegokolwiek natomiast sformułowania dotyczące porów w powyższych definicjach są niezasadne, ponieważ nie wiadomo, tzn. nie ma ścisłej, ogólnie przyjętej definicji, co to jest pojedynczy por [22, 26]. Tym samym pojęcia: rozkład porów, kształt poru również muszą być – i są – nieprecyzyjne.

Natomiast używany niemal zawsze przy definiowaniu struktury gleby termin „geometria” lub „ułożenie” cząstek, mimo iż intuicyjnie podstawowy, nie wyjaśnia wiele. Wręcz przeciwnie – termin „ułożenie” sugeruje istnienie jakiegoś obiektywnego układu odniesienia w glebie. Za takie układ odniesienia można uznać powierzchnię gleby. Jeśli jednak rozpatrywać ją w skali mikro, a więc takiej gdzie widoczne są pojedyncze cząstki, łatwo stwierdzić, że nie jest to powierzchnia ściśle, ostro określona (relief gleby) i w związku z tym nie może być uważana za dobry układ odniesienia.

Termin ten może sugerować również obecność jakiegoś podstawowego, przestrzennego elementu struktury gleby lub jej poziomu genetycznego. Badania morfologiczne na

zgladach i cienkich szlifach nie potwierdzają jednak istnienia powtarzalnych komórek struktur międzyagregatowych lub międzygranularnych, które byłyby analogami komórek sieci krystalicznych kryształów w odniesieniu do gleby.

Wręcz przeciwnie – nawet gleba jednorodna wydaje się być układem nieuporządkowanym, nie charakteryzującym żadną periodycznością przestrzenną elementów składowych.

Oprócz omówionego powyżej podejścia w literaturze częściej spotykane są próby określania struktury gleby poprzez podanie wartości konkretnych jej właściwości takich jak: skład granularny i agregatowy, krzywa retencji wodnej, współczynniki przewodnictwa wodnego, cieplnego, dyfuzji tlenu itp. lub po prostu płon. Podejście to w literaturze anglojęzycznej określane jest angielskim terminem „functionality of soil structure” [53], co w wolnym tłumaczeniu można rozumieć jako „zachowanie się” pod wpływem określonych bodźców.

Reasumując oba podejścia należy stwierdzić, że podejście „funkcjonalne” wynika z niemożności powiązania ze sobą składu granulometrycznego i/lub agregatowego z właściwościami gleby. Właściwości, tzn. charakterystyki i parametry porowatego ośrodka granularnego, określone są przede wszystkim przez aktualnie istniejącą w nim przestrzenną konfigurację ziaren fazy stałej, ponieważ istniejące w nim pory można traktować jako konsekwencję, wynik tej konfiguracji.

W literaturze spotyka się próby przewidywania właściwości ośrodków glebowych (krzywa retencji, współczynnik przewodnictwa wodnego) na podstawie składu granulometrycznego oraz modeli, w których mikrostrukturę gleby przybliża się przy pomocy jednego lub kilku regularnych układów cząstek fazy stałej: tetragonalnego, kubicznego itp. [43, 57, 59, 76, 83]. Podejście to ma przynajmniej dwie wady:

- 1) przyjmuje się, że cząstki ośrodka są monodispersyjne, (co w odniesieniu do gleby z reguły nie jest prawdą),
- 2) zakłada się, że ośrodek składa się ze skończonej (najczęściej 1, 2) liczby rodzajów elementów strukturalnych np. czworościanów regularnych.

Oba powyższe uproszczenia wynikają z braku wiedzy na temat związku mikrostruktury ze składem granulometrycznym ośrodka. Stan ten wynika z braku metody pozwalającej badać ten związek, który dla każdej gleby i każdego jej stanu jest inny.

Podstawowe problemy mikrostruktury gleby można sprowadzić więc do trzech 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?**

Termin geometria fazy stałej dotyczy położenia i wielkości wszystkich cząstek tworzących badany ośrodek i zostanie dokładnie omówiony w rozdziale 6.

Celem pracy jest próba odpowiedzi na postawione wyżej pytania.

Tak określony cel narzuca ograniczenia na głębę mogący być przedmiotem badań. Wyniki przedstawione w niniejszej pracy dotyczą, ośrodków modelowych, przez co należy rozumieć maksymalne ograniczenie różnorodności elementów składowych. Uznałem, że z metodologicznego punktu widzenia badania mikrostruktury gleb mineralnych należy rozpocząć od uwzględnienia jedynie ich składu granulometrycznego i kapilarno-porowatego charakteru. W dalszej kolejności można przewidywać rozszerzenie zakresu tych badań poprzez uwzględnienie frakcji ilastej oraz próchnicy.

Należy podkreślić, że ewentualna realizacja następnych etapów uzależniona jest od wyników wstępnych.

Uproszczenia powyższe mają zaletę uniwersalności – otrzymane wyniki i opracowane metody mogą być użyte do badań innych rolniczych ośrodków sypkich np. ziarno w silosie, cukier lub też nie rolniczych np. granulaty siarki czy nawozów sztucznych itp.

3. DEFINICJA REPREZENTATYWNEJ OBJĘTOŚCI GLEBY (ROG)

Jakkolwiek odpowiedź na te pytania będzie niemożliwa, o ile nie zostanie uściślone pojęcie geometrii fazy stałej. Gleba jest ośrodkiem nie uporządkowanym i praktycznie nieskończenie dużym w stosunku do rozmiaru tworzących ją ziaren. Z tego względu pytanie o geometrię może mieć sens jedynie w odniesieniu do ograniczonego przestrzennie jej fragmentu.

Wydaje się, że problem geometrii fazy stałej można sprowadzić do 3 pytań:

1) czy istnieje najmniejszy element struktury ośrodka glebowego?

2) jeśli istnieje, to jak określić jego wielkość?

3) jak określić przestrzenny układ elementów strukturalnych wewnątrz niego?

Wszystkie prace empiryczne wykonywane w laboratorium prowadzone są przy milczącym założeniu, że pobrana próbka materiału glebowego jest reprezentatywna dla badanego poziomu genetycznego lub całej badanej gleby [67]. Dla wielu analiz takim standardem jest cylinder Kopecky'ego o objętości 100 cm^3 . Jakkolwiek nie jest mi znane uzasadnienie tego standardu, można się domyślać, że jego pomysłodawcy chodzilo o względy praktyczne, tzn. łatwość transportu i wykonywania obliczeń związanych z próbką. Kopecky uznał objętość 100 cm^3 za reprezentatywną dla wszystkich gleb. Niekiedy takim standardem jest objętość 250 cm^3 [87]. W doświadczeniach wazonowych czy fitotronowych natomiast, objętości te są znacznie większe.

Te przykłady dowodzą, że pojęcie próbki reprezentatywnej gleby funkcjonuje od dawna w gleboznawstwie, mimo, że nie sformułowano ścisłych podstaw jej wyznaczania.

Aby odpowiedzieć na dwa pierwsze pytania przeprowadźmy następujące rozumowanie. Oznaczmy dowolny, jednakowy parametr dla dwóch próbek wziętych z dwóch punktów jednorodnego pola uprawnego, przy czym stosunek ich objętości niech wynosi np. 2. Jeśli wyniki są takie same to mamy prawo uważać, że w obu przypadkach objętości gleby wzięte do badań są większe (lub równe) od minimalnego elementu objętościowego, reprezentatywnego dla badanej gleby. Wydaje się logicznie uzasadnionym przypuszczenie, że dzieląc tę objętość wielokrotnie na pół i wykonując po każdym podziale pomiary tej samej wielkości, otrzyma się w końcu wynik różny od początkowego. Rezultat taki oznacza, że objętość gleby użyta w ostatnim pomiarze nie jest już dla niej reprezentatywna.

Jeśli jednak już po pierwszym podziale wyniki pomiarów wybranego parametru będą różne, oznacza to, że objętość wyjściowa jest zbyt mała i należy ją powiększyć.

Reprezentatywna objętość gleby lub ośrodka glebowego (ROG) definiowana jest tutaj jako **minimalna jej objętość posiadająca te same właściwości jakie, ma cały jednorodny ośrodek, będący przedmiotem badań.**

Ogólna zasada określania ROG polega na znalezieniu takiej objętości (V_1), aby po podziale jej na pół ($V_2 = \frac{V_1}{2}$) otrzymać takie same wyniki mierzonej wielkości ($T_{V1} = T_{V2}$)

dla obu objętości, a po drugim podziale ($V_3 = \frac{V_2}{2}$) – różne od pozostałych ($T_{V3} \neq T_{V2}$).

ROG równa się w podwojonej objętości końcowej $2V_3$.

Na ogół uważa się, że struktura gleby jest wielopoziomowa, w tym sensie, że składniki niższego rzędu tworzą element rzędu wyższego. Na każdym poziomie tak rozumianej struktury mamy do czynienia z upakowaniem granul i agregatów różnej wielkości. Można więc przyjąć, że na poziomie pierwszym mamy do czynienia z mikroagregatami, które zbudowane są wyłącznie z granul pierwotnych.

W tym ujęciu wielkość ROG ośrodka zależy od zakresu zmienności rozmiarów elementów składowych jego struktury. Im mniejszy jest ten zakres, tym mniej potrzeba elementów, aby powstała struktura reprezentatywna danego ośrodka, a więc tym mniejszy jest ROG. Należy podkreślić, że miarą ROG jest nie tyle objętość, co ilość elementów strukturalnych i sposób ich upakowania.

Prezentowana idea jest uniwersalna, tzn. może być zastosowana do wszystkich ośrodków ziarnistych. Istotna zmiana w stosunku do podejścia tradycyjnego polega tym, że w tym ujęciu strukturę ma każdy ośrodek glebowy, niezależnie od stanu jego agregacji [71].

4. WIRTUALNY OŚRODEK GRANULARNY

Rozwój metod obliczeniowych stwarza możliwości badań symulacyjnych coraz bardziej skomplikowanych układów rzeczywistych. Ogólna zasada tych badań polega na tworzeniu modelu badanego obiektu, który posiadałby istotne, wybrane jego cechy i przewidywaniu jego zachowania w oparciu o zapisane w języku matematyki, podstawowe prawa (fizyczne, chemiczne, biologiczne czy socjologiczne) danej dyscypliny.

Chcąc analizować strukturę ośrodka granularnego takiego jak gleba na poziomie elementów podstawowych, można posłużyć się, bądź ośrodkiem rzeczywistym, bądź jego modelem numerycznym. Oba podejścia mają swoje wady i zalety. Badanie układu rzeczywistego wiąże się z koniecznością zakupu wyrafinowanego, kosztownego zestawu aparatury, oprogramowania i wyposażenia, które konieczne są już na wstępnym etapie rekonstrukcji struktury. Jego zaletą jest brak uproszczeń charakterystycznych dla każdej symulacji numerycznej. Z drugiej strony ograniczona zdolność rozdzielcza każdego układu mikroskopowego, będącego częścią ww. aparatury do badań gleby, stanowi istotne ograniczenie badań strukturalnych. Interpretacja obrazu z cienkich szlifów i zglądów wymaga poza tym znajomości stereologii i zakupu lub sporządzenia niezbędnego oprogramowania.

Z powodu tych trudnych do realizacji wymagań, choć nie tylko, ostatnio bada się różne układy rzeczywiste przy pomocy ich komputerowych symulacji. W każdym przypadku na wstępie należy stworzyć numeryczny, zwany często wirtualnym [62, 63], model obiektu będącego przedmiotem badań. Wielką zaletą tej metody jest jej elastyczność polegająca na możliwości szybkiego testowania modelu dla różnych wartości parametrów wejściowych charakteryzujące różne gleby.

Wymienione zalety metody symulacyjnej zdecydowały o użyciu przeze mnie tej metody do badań fizycznych właściwości ośrodka glebowego.

Pierwszy krok badań polegał na stworzeniu programu numerycznego tworzącego wirtualny model ośrodka glebowego, który uwzględniałby wybrane, istotne dla zaplanowanych badań, jego cechy.

Ponieważ zdecydowaną większość masy gleb mineralnych stanowi faza stała, w niniejszej pracy przyjęto, że podstawową ich charakterystyką jest skład granulometryczny.

5. SKŁAD GRANULOMETRYCZNY GLEBY

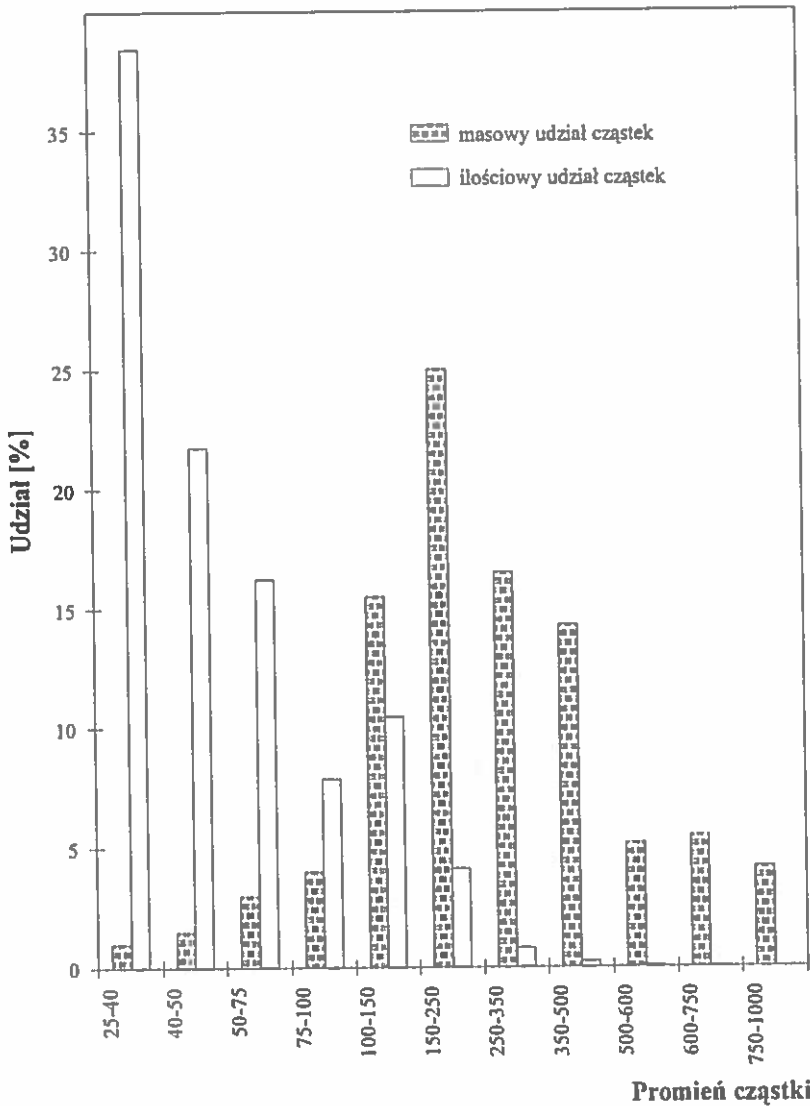
Każdy sypki ośrodek ziarnisty może być scharakteryzowany przez właściwy dla niego skład granulometryczny, który określa udział masowy poszczególnych frakcji ziarnowych. Polskie Towarzystwo Gleboznawcze w 1979 roku określiło rozmiary frakcji granulometrycznych gleb (tab. 1) (BN-79/9180-11). Należy wspomnieć, że podział na frakcje granulometryczne zaproponowany przez Międzynarodowe Towarzystwo Gleboznawcze (ISSS) różni się od polskich norm w tym zakresie, szczególnie w odniesieniu do frakcji piasku [21].

Tab. 1. Frakcje granulometryczne wg. PTGleb (1979)

Frakcje granulometryczne			Średnica cząstki
Części szkieletowe	kamienie		> 20
	żwir	gruby	20-10
		drobny	10-1
Części ziemiste	piasek	gruby	1,0-0,5
		średni	0,5-0,25
		drobny	0,25-0,10
	pył	gruby	0,10-0,05
		drobny	0,05-0,02
	il	gruby	0,02-0,006
		drobny	0,006-0,002
		koloidalny	< 0,002

Często skład granulometryczny charakteryzowany jest jedynie przez zawartość frakcji piaszczystej, pyłowej, ilastej i ewentualnie części szkieletowej, bez podziału szczegółowego na podfrakcje [24].

Rozmiary ziaren charakteryzowane są przez podanie ich średnicy. Definicję tak rozumianej średnicy określa użyta do analizy metoda. W praktyce stosowane są dwie metody: sitowa i sedymentacyjna (pipetowa, areometryczną, przepływowa).



Rys. 1. Histogram składu granulometrycznego dla piasku rzecznego (tab. 3) przedstawiony w postaci udziałów mas i ilości cząstek

W pierwszej z nich, za miarę średnicy uważa się długość boku kwadratowej siatki lub średnicą okręgu otworu sita, przez które przesiewana jest gleba. W drugiej – cząstkę dowolnego kształtu opisuje się średnicą kuli, która poruszałaby się w ośrodku o znanej lepkości, z taką samą jak ona prędkością.

W gleboznawstwie polskim na ogół stosowana jest metoda arcometryczna w modyfikacji Prószyńskiego, który stworzył zestaw tabel pozwalających zaszeregować badaną

glebę do grupy i podgrupy granulometrycznej, co z kolei pozwala określić, właściwe dla niej, czasy pomiarów gęstości zawiesiny, a w dalszej kolejności – gatunek gleby.

Dokładniejsze wyniki składu granulometrycznego można uzyskać stosując licznik Coulter'a [1]. W tym przypadku, zasada pomiaru polega na rejestracji zmian oporności elektrycznej zawiesiny przepływającej przez diafragmę o znanej średnicy. Jeśli przechodząca przez nią cząstka ma niewiele od niej mniejszą średnicę, wówczas zmiana oporności jest bardzo wyraźna i może być łatwo zarejestrowana. Zmieniając wymiary difragm można określić rozmiary cząstek w dowolnym zakresie wielkości.

W ciągu ostatnich dziesięciu lat pojawiły się przynajmniej dwie nowe techniki pomiaru uziarnienia.

Pierwsza z nich jest w swej istocie udoskonaloną metodą sedymentacyjną. Różnica między nimi jest jednak istotna i polega na sposobie pomiarze gęstości zawiesiny. Pomiar odbywa się w sposób ciągły przez pochłanianie wiązki miękkiego promieniowania rentgenowskiego, którego układ detekcyjny (źródło–detektor) wykonuje ruchy oscylacyjne wzdłuż cylindra z zawiesiną. Komputer rejestruje wyniki pomiarów w funkcji czasu, wykonuje obliczenia składu i przedstawia je w kilku opcjonalnych wersjach (np. aparatura SediGraph 5100 firmy Micromechanics – USA).

Drugi sposób wykorzystuje zjawisko dyfrakcji wiązki promieniowania laserowego na cząstkach mierzonego ośrodka w trakcie ich przechodzenia przez wiązkę lasera. Rejestrowane ugięcie promieniowania jest tym większe, im mniejsza jest cząstka. Pomiar odbywa się w fazie gazowej (lub w zawiesinie), więc jego czas jest krótki i wynosi kilka minut. Podobnie jak w poprzednim przypadku integralną częścią aparatury jest komputer zbierający i przetwarzający dane pomiarowe. Zakres pomiarowy wielkości cząstek wynosi od 2 do 1000 mikrometrów (np. zestaw Analisette-22 firmy Fritsch – Niemcy).

Obie wspomniane techniki charakteryzują się znacznie większą szybkością i precyzją pomiaru w stosunku do metod tradycyjnych.

Reasumując powyższy przegląd metod pomiaru składu uziarnienia gleb można powiedzieć, że wszystkie z nich charakteryzują cząstki badanego ośrodka jedną liczbą, której wartość milcząco utożsamiana jest ze średnicą (lub promieniem) równoważnej kuli. Kształt cząstek nie jest brany pod uwagę mimo, iż musi on wpływać zarówno na szybkość ruchu w zawiesinie jak i sposób upakowania.

Granulacja gleby może być przedstawiona również w inny sposób. Proporcje masowe można zamienić na proporcje dotyczące ilości cząstek w poszczególnych frakcjach na podstawie zależności:

$$n_i = \frac{\frac{g_i}{r_i^3}}{\sum_{k=1}^i \frac{g_k}{r_k^3}} \quad (1)$$

gdzie:

n_i – udział ilościowy cząstek frakcji i -tej gleby,

g_i – udział masowy frakcji i -tej,

r_i – promień reprezentatywny frakcji i -tej wyznaczony w trakcie analizy składu granulometrycznego,

j – ilość frakcji granulometrycznych.

Uzyskana w ten sposób charakterystyka granulometryczna ma, w porównaniu do wyjściowej, inny przebieg ze względu na trzecią potęgę promienia geometrycznego występującą w mianowniku. Rys. 1 przedstawia przykład pozwalający porównać oba histogramy dla pewnego drobnoziarnistego piasku rzeczego: słupki kropkowane dotyczą rozkładu mas, białe – ilości cząstek.

Z punktu widzenia planowanych badań, taki sposób przedstawiania uziarnienia gleby będzie miał istotne znaczenie.

Wadą tego podejścia jest brak możliwości uwzględnienia frakcji ilastej – nawet niewielka, kilkuprocentowa zawartość łu koloidalnego zmienia radykalnie proporcje ilościowe cząstek. Ponadto cząstki ilaste mają kształt zbliżony bardziej do blaszek niż do kuli, a mała ich masa, w połączeniu z dużą powierzchnią właściwą, nie pozwala pominąć oddziaływań powierzchniowych mogących mieć wpływ na ich upakowanie. Z tego względu frakcja ilasta ma szczególne właściwości i niekiedy (od pewnej wilgotności) jest traktowana jak ciecz, a nie jak element fazy stałej [65]. Z powyższych powodów frakcja ilasta nie będzie brana pod uwagę w planowanych badaniach. Ponadto skład granulometryczny blisko połowy gleb polskich jest zdominowany przez frakcje piaskowe i pylaste. Dlatego badanie struktur pozbawionych łu wydają się celowe i uzasadnione. W podsumowaniu i wnioskach problemowi temu będzie poświęcone więcej miejsca.

6. TWORZENIE WIRTUALNEJ STRUKTURY OŚRODKA GRANULARNEGO

Badania modelowe ośrodków rzeczywistych przy pomocy zbioru kul mają swoją wielowiekową historię. Ich początek należy wiązać z Eulerem, który w 1711 r. postawił pytanie o najgęstsze upakowanie zbioru jednakowych kul [78], które na dobrą sprawę do dzisiaj pozostaje aktualne. Kierunek ten rozwinął się przy okazji badań nad strukturą cieczy i ciał amorficznych [7, 31, 32, 34].

W ostatnich latach można mówić o powstaniu nowej gałęzi fizyki, a mianowicie fizyki ośrodków nie uporządkowanych [57, 88]. Od kilkunastu lat metodą badań modelowych coraz bardziej złożonych obiektów jest metoda symulacji komputerowej. Wydaje się, że przy jej pomocy można badać również tak skomplikowane układy jak gleba. Pierwszy krok takich badań musi polegać na odtworzeniu, rekonstrukcji struktury badanego ośrodka.

6.1. Założenia modelu

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 doznawanych przez nie oddziaływań. Ponieważ promień geometryczny cząstek określony jest przez analizę granulometryczną badanego ośrodka glebowego, postanowiłem wykorzystać te dane przybliżając kształt wszystkich cząstek przy pomocy kuli. Wybór takiego kształtu cząstki podyktowany został również tym, że zbiór kul musi tworzyć ośrodek porowaty, czego nie można powiedzieć np. o zbiorze sześcianów. Bliższa analiza stereologiczna różnych brył [70] pokazuje, że ich średnice Fereta często mają podobne wartości jak kula o tej samej objętości (tab. 2), co pozwala sądzić, że przyjęcie innego kształtu cząstek, np. elipsoidy obrotowej, nie miałyby istotnego wpływu na wyniki modelowania.

Innym czynnikiem decydującym o przyjęciu takiego kształtu cząstek były względy rachunkowe: obliczenia z innymi, niż kula bryłami, byłyby znacznie bardziej skomplikowane i długotrwałe, co stawiałoby pod znakiem zapytania realizację całego założonego programu obliczeniowego. Poza tym upakowywanie cząstek o innym kształcie wymagałoby dodatkowych danych wejściowych dotyczących orientacji cząstki, (np. elipsoidy obrotowej) w przestrzeni.

Tab. 2. Współczynniki kształtu wybranych brył

Rodzaj bryły	Współczynnik kształtu*
kula	1,000
ośmiościan trójkątny (octahedron)	1,217
walec 2:1**	1,123
elipsoida podłużna 2:1***	1,095
elipsoida poprzeczna 2:1	1,076
sześćcian	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. wysokości = $2 \times$ średnica podstawy,

*** 2:1 tzn. długość półosi dużej = $2 \times$ długość półosi malej.

Drugie uproszczenie zakładało sztywność mechaniczną kul. Warunek ten jest uzasadniony zarówno właściwościami mechanicznymi ziaren glebowych, jak i tym, że planowane badania dotyczą statycznych właściwości ośrodka glebowego.

6.2. 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 wzrost układu odbywa się stopniowo, cząstka po cząstce.

Polożenie cząstki kulistej o znanym promieniu 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 $R(i)$.

Określenie wartości promienia cząstki $R(i)$ ma charakter stochastyczny. 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 promienia 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:

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

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 trzech (niekiedy pięciu) jednakowych cząstek, realizujących upakowanie tetragonalne. Reprezentują one zawsze najliczniejszą frakcję granulometryczną, którą na ogół jest frakcja najdrobniejsza.

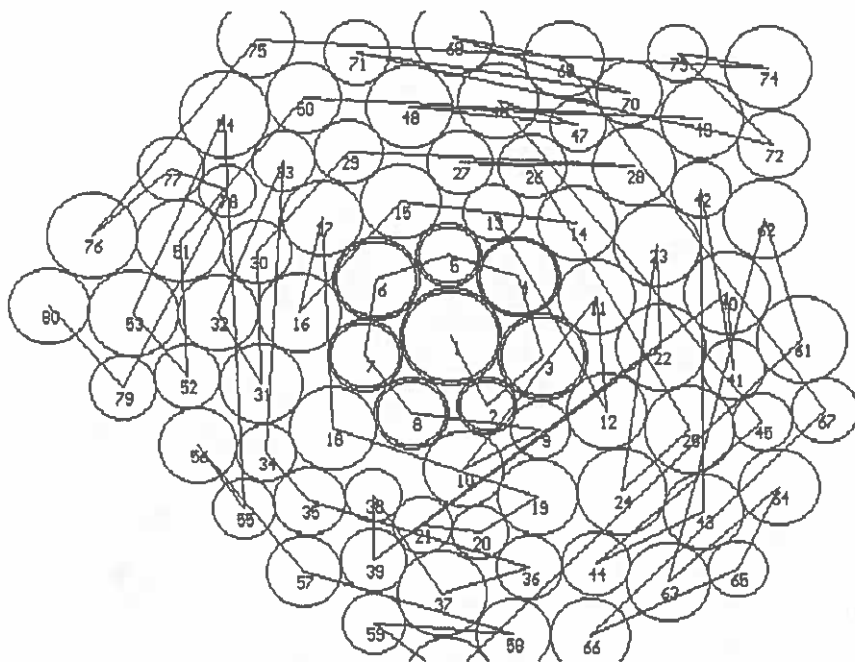
Algorytm upakowania powinien zapewniać powstanie struktury zwartej, przez co należy rozumieć takie ułożenie cząstek kulistych, wewnątrz którego nie istnieją przestrzenie wolne (pory) większe od największej z upakowywanych cząstek. Ten istotny problem rozwiązałem przyjmując, że rozbudowa struktury następuje poprzez „przyklepianie” kolejnych cząstek do tzw. cząstki centralnej (o możliwie najniższym numerze tzn. cząstka k -ta). Poza nią, w „przyklepianiu” uczestniczą jeszcze dwie inne cząstki, znajdujące się w jej sąsiedztwie (numery l , m). Oczywiście, 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 niemożliwe będzie znalezienie miejsca przy cząstce 1.

W tej sytuacji cząstką centralną staje się cząstka następna, tzn. druga, po czym, rozpoczyna się proces jej otaczania.

Jeśli i ona zostanie pokryta warstwą cząstek, ta sama procedura powtórzy się w odniesieniu do cząstki 3, 4, ... Egzekucja programu zostaje wstrzymana, gdy całkowita liczba cząstek osiągnie zadaną z góry liczbę.

Rys. 2 przedstawia dwuwymiarowy analog trójwymiarowej symulacji upakowania cząstek. Numery cząstek i odcinki prostych określają pozycję i kolejność przyłączania nowej cząstki do układu. W tym przypadku zarodek składa się z dwóch cząstek o numerach 1 i 2. Cząstki od 2 do 8 są styczne do cząstki 1-ej. Dla cząstki 9-ej nie ma miejsca w pobliżu 1-ej i dlatego „przyklejana” jest do kolejnej, tzn. do drugiej. Następnie powyższa procedura jest kolejno powtarzana dla cząstki 3, 4, ... itd.

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 trzech cząstek i nie przecina powierzchni żadnej z pozostałych. Analizowane powinny być wszystkie kombinacje trójcząstkowe k , l , m cząstki centralnej



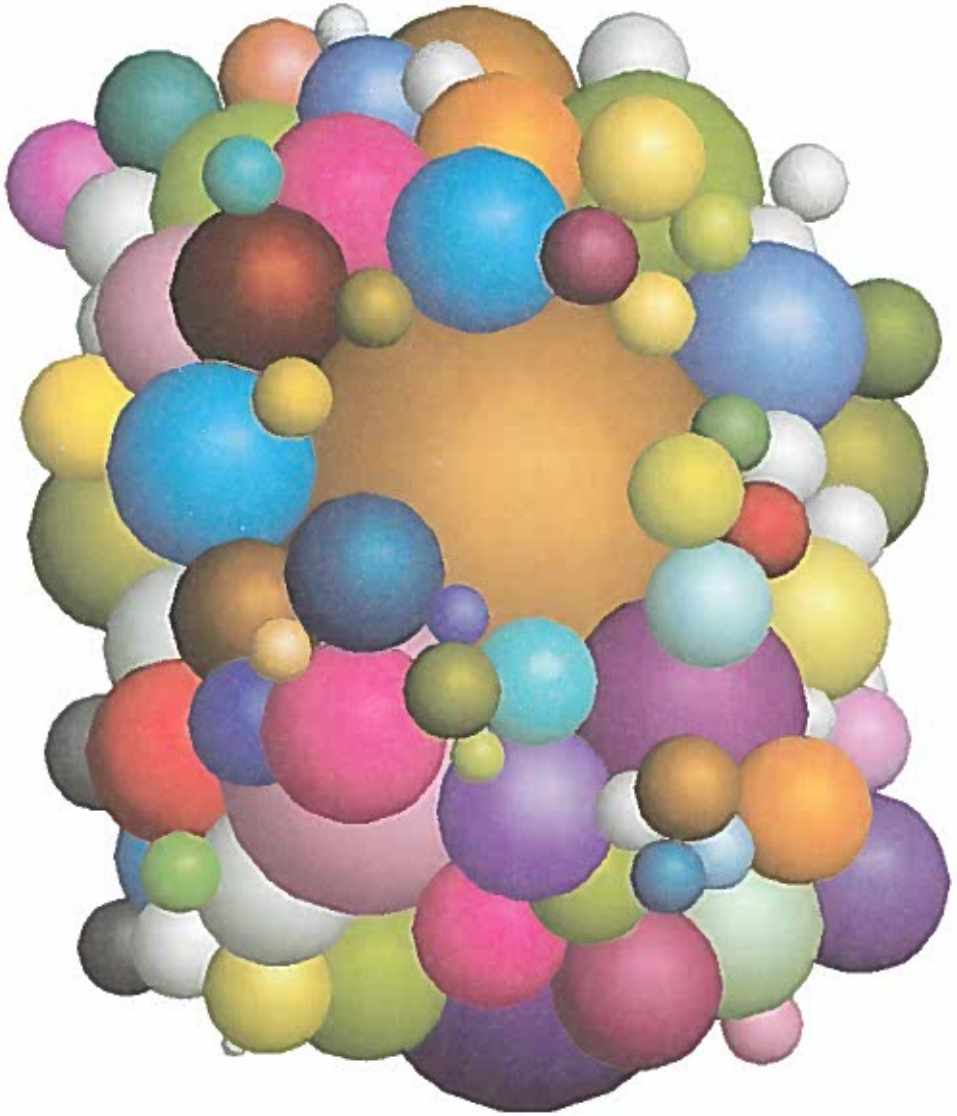
Rys. 2. Dwuwymiarowy analog tworzenia struktury przestrzennej

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 niekiedy pojawią się przypadki, dla których znalezienie poszukiwanej pozycji będzie związane z ilością repetycji rzędu 10^5-10^7 , co praktycznie oznaczałoby niemożność realizacji programu w rozsądnym czasie.

Chcąc uniknąć takich przypadków postanowiłem ograniczyć liczbę cząstek, które mogą tworzyć poszukiwaną konfigurację do tych, których odległość od powierzchni cząstki centralnej nie przekracza $2R(i)$, 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 omówiłem pierwszy algorytm generujący wirtualną strukturę ośrodka ziarnistego. Opracowałem 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 tworzonej 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 rozkład jest znany. Połowa cząstek przyłączana jest wg. algorytmu pierwszego, druga – poprzez wyznajdowanie w zbiorze „dziur” o wymiarach zbliżonych do niej i zapelnienie jej tą cząstką. Zasada wynajdywania „dziur” będzie omówiona w rozdziale 10.



Rys. 3. Wizualizacja trójwymiarowej wirtualnej struktury ośrodka glebowego o zadanym składzie granulometrycznym

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. Rys. 3 przedstawia przybliżoną jej wizualizację. Widać, że struktura nie jest ograniczona żadnymi fizycznymi płaszczyznami (ścianki, dno), co można uważać za zaletę przyjętej metody. Z literatury wiadomo bowiem, że ich obecność zaburza geometrię cząstek w stosunku do obszarów oddalonych od nich [40, 41, 44, 66, 68]. W warstwie przyściennej o grubości równej ca 3–4 średnicom występują, zanikające z odległością, fluktuacje porowatości. Efekt ten jest niekorzystny z punktu widzenia planowanych badań, gdyż interesuje nas ośrodek niezaburzony. W tym przypadku problem ten nie istnieje, ponieważ nie ma żadnych płaszczyzn ograniczających układ.

Wszystkie programy przedstawione w tej pracy zostały napisane w języku Turbo Pascal i Borland Pascal, a obliczenia wykonałem przy pomocy mikrokomputerów 486 i Pentium. Należy nadmienić, że czas realizacji był niekiedy dosyć długi (do kilkunastu godzin).

7. POROWATOŚĆ I REPREZENTATYWNA OBJĘTOŚĆ GLEBY (ROG) WIRTUALNEJ STRUKTURY ZIARNISTEJ

Powstały w wyniku upakowywania wirtualnych kul zbiór, ma szereg właściwości ośrodka ziarnisto-porowatego, jakim jest ośrodek glebowy. Jego cechą szczególną jest znajomość dosłownie rozumianej geometrii – znane są położenia i promienie geometryczne wszystkich elementów tej struktury, co stwarza nowe możliwości w zakresie jego analizy i opisu.

Na wstępie jednak należy odpowiedzieć na dwa podstawowe pytania:

- 1) czy powstały ośrodek wirtualny jest nie uporządkowany?
- 2) czy wielkość wirtualnej struktury mierzona ilością ziaren jest wystarczająca, aby uznać ją za reprezentatywną (ROG) dla badanych ośrodków?

Wydaje się, że na oba pytania można udzielić odpowiedzi analizując porowatość ośrodka, która jest łatwo mierzalnym, podstawowym, makroskopowym parametrem ośrodka porowatego.

W badaniach przyjęto następujące założenie – jeśli porowatości i składy granulometryczne dwóch ośrodków są jednakowe, to charakteryzujące je rozkłady porów są identyczne.

Inaczej mówiąc zakłada się, że powstały w obu przypadkach układ cząstek i porów ma takie same właściwości fizyczne. Powyższe założenie dotyczy również ośrodków: rzeczywistego i wirtualnego. W praktyce oznacza to, że wyniki uzyskane z badań ośrodka wirtualnego można odnieść do ośrodka rzeczywistego.

Porowatość objętościową P_v wyznaczałem na podstawie zależności

$$P_v = \frac{(V_t - V_{sol})}{V_t} \quad (3)$$

gdzie:

V_t – objętość całkowita układu,

V_{sol} – objętość fazy stałej.

Wykonując przekrój trójwymiarowej struktury, otrzymywano zbiór okręgów pochodzący z przecięcia wszystkich cząstek kulistych, znajdujących się w odległości $h(i)$,
 $h(i) \leq R(i)$ (4)

tzn. mniejszej od ich promieni geometrycznych $R(i)$.

Promień powstałego okręgu $r(j)$ można wyliczyć na podstawie zależności (5) i jest on zawsze mniejszy (równy) od promienia $R(i)$ kuli, z której został utworzony.

$$r(j) = [R(i)^2 - h(i)^2]^{1/2} \quad (5)$$

Dla przekroju przedstawionego na rys. 4 można określić porowatość powierzchniową P_s :

$$P_s = (S_t - S_s)/S_t \quad (6)$$

gdzie: S_t – powierzchnia całkowita przekroju,
 S_s – powierzchnia przekroju związana z fazą stałą.

Wartości P_v i P_s mogą, ale nie muszą być sobie równe. Równość zachodzi wtedy, gdy ośrodek jest **nie uporządkowany** [20].

Wykonując całkowanie wyrażenia (7) po długości cylindrycznej próbki o wysokości L otrzymuje się porowatość objętościową P_v :

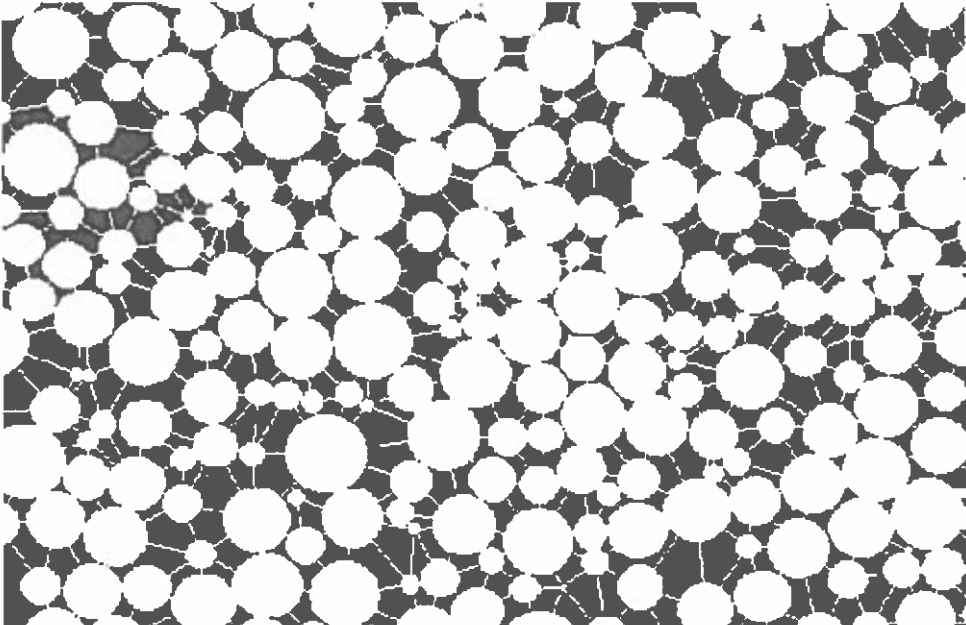
$$P_v = \frac{\int_0^L P_s S_t dx}{S_t L} \quad (7)$$

Jeśli porowatość powierzchniowa P_s jest stała, tzn. nie zależy od położenia przekroju, wówczas jej wartość równa się porowatości objętościowej P_v .

$$P_v = P_s \quad (8)$$

Sprawdzenie tego warunku uznałem za celowe ze względu na to, że brak periodyczności struktur przestrzennych jest istotną cechą gleby i większości ośrodków ziarnistych.

Równość powyższa wynika z zasady Delesse'a-Rosiwala, która mówi, że udział danej fazy w ośrodku jednorodnym i nieuporządkowanym można ocenić na podstawie objętości (V_v), powierzchni (S_s), długości linii (L_L), ilości punktów (N_N) z nią związanych i obecnie przedstawiana jest w postaci [34, 50].

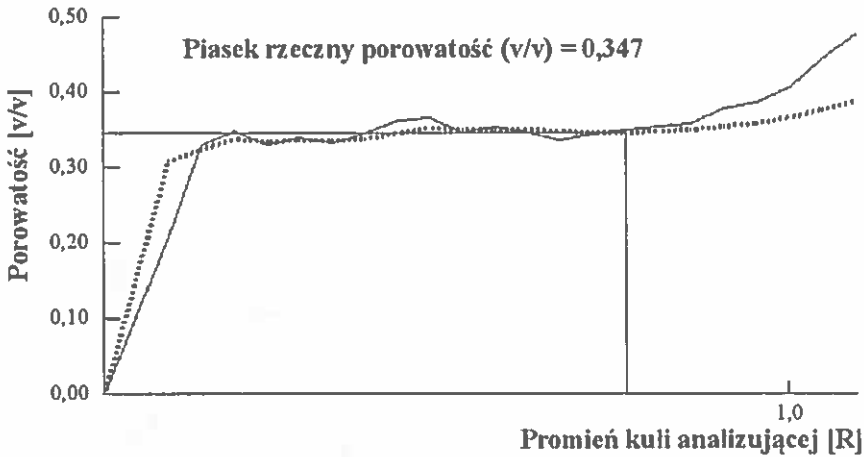


Rys. 4. Przekrój przez wirtualną strukturę trójwymiarową

$$V_V = S_S = L_L = N_N \quad (9)$$

Opracowana zasada obliczania porowatości P_V i P_S polega na określaniu powierzchni (lub objętości) fazy związanej z cząstkami wewnątrz (tzw. okręgu (lub kuli) analizującego). Jego środek pokrywa się na ogół ze środkiem pierwszej cząstki, a promień rośnie krok po kroku o stałą wartość ΔR .

Porowatość objętościową P_V obliczana jest w analogiczny sposób, lecz w trzech wymiarach. Dla każdego kroku liczone są dwie porowatości: średnia – charakteryzująca wnętrze całego okręgu analizującego oraz różnicowa, która odnosi się do pierścienia o promieniach: wewnętrzny R i zewnętrzny $R + dR$. Typowy przebieg tej zależności przedstawia rys. 5. Po początkowych fluktuacjach porowatość średnia P_a (linia przerywana) i różnicowa P_d (linia ciągła) zbliżają się do siebie pozostając prawie niezmiennie dla pewnego zakresu R . Dalszy stosunkowo szybki wzrost wartości świadczy o tym, że kula (okrąg) analizująca zaczyna „zauważać” przestrzeń poza agregatem, co nie ma sensu fizycznego.



Rys. 5. Zależność porowatości średniej (linia przerywana) i różnicowej (linia ciągła) wirtualnej struktury piasku rzeczynego o zadanym składzie granulometrycznym w funkcji promienia kuli analizującej

Za porowatość układu przyjmuje się wartość porowatości średniej P_a , dla której różnica między nią i porowatością różnicową P_d osiąga pierwsze minimum (analiza rozpoczyna się od wartości końcowych).

$$\text{abs}(P_a - P_d) = \min \quad (10)$$

Opisane procedury pozwalają określić porowatości: powierzchniową P_S i objętościową P_V .

Ponieważ obie te wartości, dla wszystkich badanych składów granulometrycznych, były praktycznie jednakowe ($P_V/P_S = 1,00 \pm 0,03$), więc uznałem to za dowód nieuporządkowanego charakteru upakowań realizowanych w przeprowadzonych badaniach symulacyjnych.

Tym samym otrzymałem twierdzącą odpowiedź na pierwsze z postawionych, na początku rozdziału 7, pytań. Należy wspomnieć, że powyższy wniosek dotyczy również układu monodispersyjnego, co oznacza, że może on również tworzyć układy nie uporządkowane.

Próbując odpowiedzieć na drugie z postawionych pytań, przyjęto, że najodpowiedniejszym parametrem makroskopowym charakteryzującym ośrodek gębowy jest jego porowatość. Najmniejszy, wymagany w tego typu badaniach, element struktury ośrodka gębowego (ROG) musi być na tyle duży, aby wartość porowatości z rysunku 5 nie zależała od promienia analizującego. Uznano, że **istnienie plateau na krzywej jest warunkiem koniecznym i wystarczającym, aby uznać ośrodek za nieskończenie duży.**

W praktyce warunek ten oznacza, że upakowanie kul winno być kontynuowane tak długo, aż powyższy warunek będzie spełniony [23]. Na rys. 5 wartość l na osi x odpowiada odległości między pierwszą i ostatnią przyłączoną cząstką agregatu. Ponieważ granica agregatu nie jest ostra więc porowatość różnicowa, odpowiadająca większym niż l wartościom promienia kuli analizującej, nie od razu osiąga wartość 1, tzn. $P_v = 100\%$.

8. POROWATOŚĆ MODELOWYCH OŚRODKÓW GLEBOWYCH

Jak wspomniano wcześniej, tworzenie wirtualnego ośrodka odbywa się krok po kroku, tzn. warunkiem przyłączenia cząstki $n + 1$ jest znalezienie odpowiedniego położenia dla cząstki n -tej.

Z powyższego wynika, że skład granulometryczny musi być przedstawiony w postaci proporcji liczby cząstek w klasach, co pociąga za sobą konieczność operowania większą liczbą cząstek małych niż wynikałoby to z proporcji masowych. Jeśli np. zawartość piasku grubego (1 mm) i pyłu drobnego (0,05 mm) w glebie są te same, oznacza to, że zachowanie proporcji wymaga uwzględnienia, (patrz wzór 1) ca. $20^3 = 8000$ cząstek pyłu na każde ziarno piasku. Jeśli stosunek promieni geometrycznych ziaren ze skrajnych frakcji wynosiłby np. 100 wówczas przy podobnej proporcji udziałów masowych liczba małych cząstek wynosiłby 1 000 000 na każdą cząstkę piasku.

Tab. 3. Porównanie zmierzonych i przewidywanych porowatości teksturalnych [30]
dla wybranych ośrodków piaszczystych i piaszczysto-pyłastych

Opis ośrodka (frakcje granulometryczne w mikrometrach)	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	39,0
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

Wykonanie obliczeń dla układów składających się z wielu milionów cząstek było niemożliwe przy pomocy posiadanego sprzętu i oprogramowania. Z powyższych ograniczeń wyniknął ważny wniosek dotyczący zakresu zastosowań modelu: przedstawiony algorytm może służyć do badań symulacyjnych utworów piaszczysto – pyłastych, tzn.

takich dla których stosunek średnic frakcji największej i najmniejszej < 30 . Z drugiej strony kształt cząstek ilastych bardzo odbiega od kuli – przypomina raczej kartkę papieru. Z tego względu należy przypuszczać, że przyjęty model i tak nie mógłby dawać zadawalających rezultatów w odniesieniu do gleb o znacznej zawartości ilu.

Z tego względu przedmiotem badań szczegółowych były ośrodki modelowe, o względnie „prostym” składzie granulometrycznym, bez próchnicy. Tabela 3 zawiera składy granulometryczne badanych ośrodków oraz wartości zmierzonych i przewidzianych, przez przedstawiony model, porowatości.

Należy podkreślić, że znalezienie upakowania o porowatości zbliżonej do rzeczywistej, wymagało niekiedy wielokrotnych egzekucji algorytmu z różnymi parametrami wejściowymi. Przedstawione rezultaty dotyczą najlepszych, spośród uzyskanych, wyników. Poszukiwania prowadzono dopóki względny błąd porowatości z symulacji w stosunku do wartości zmierzonej ΔP , nie przekraczał 5%.

$$\Delta P = \text{mod} [(P_{\text{pom}} - P_{\text{sym}})/P_{\text{pom}}] \leq 5\% \quad (11)$$

Jak widać z tab. 3 warunek ten udało się osiągnąć w odniesieniu do wszystkich badanych ośrodków.

Na przykład dla kulek szklanych (porowatość zmierzona $P_{\text{pom}} = 34,9\%$, porowatość struktury wirtualnej najbliższa tej wartości $P_{\text{sym}} = 36,1\%$), inne algorytmy upakowania generowały struktury o następujących wartościach porowatości, mimo tego samego składu granulometrycznego: 58,0%, 44,6%, 39,1%, 38,5%.

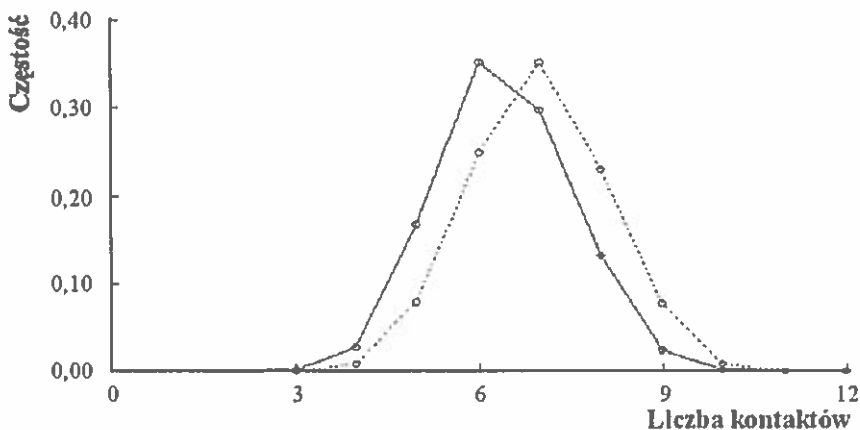
9. LICZBA PUNKTÓW KONTAKTU ZIAREN OŚRODKA GRANULARNEGO

Cząstki każdego ośrodka sypkiego stykają się ze sobą tworząc jego strukturę. Poprzez punkty kontaktu przekazywane są naprężenia determinujące stan mechaniczny całego ośrodka [74]. Liczba tych kontaktów jest funkcją składu granulometrycznego i wewnętrznej struktury ośrodka.

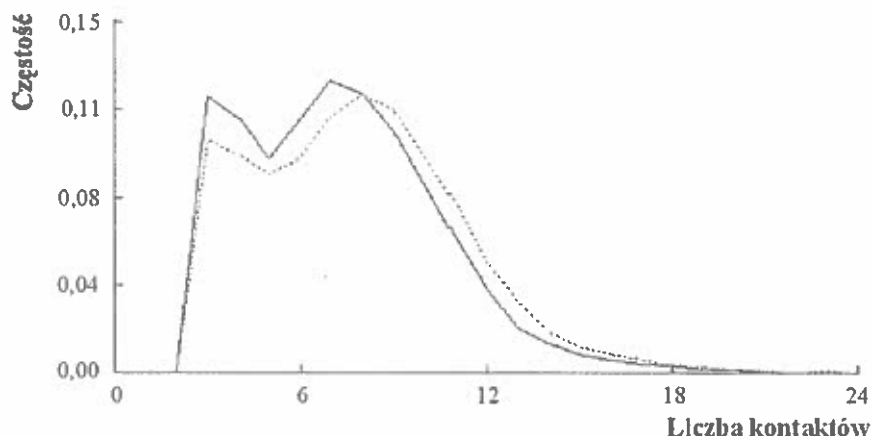
Badania symulacyjne upakowania cząstek stwarzają możliwość stosunkowo łatwego określenia związków między składem granularnym i liczbą kontaktów cząstek oraz charakterystyk struktur przestrzennego badanego ośrodka.

9.1. Rozkład liczby punktów kontaktu układu ziarnistego

Układ monodispersyjny składający się z kulek jest często używanym ośrodkiem modelowym przy badaniach właściwości ośrodków granularnych. Udowodniono [81], że w przestrzeni wypełnionej jednakowymi kulami nie da się zbudować z czworościanów regularnych. Wbrew pozorom struktura jego jest dosyć złożona, czego dowodzą wyniki



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



Rys. 7. Rozkład liczby kontaktów (linia ciągłą) i prawie-kontaktów (linia kropkowana) w agregacie składających się z kuleczek szklanych o porowatości 35,2% (tab. 3)

dotyczące rozkładu porów (przedstawione w rozdziale 13, jak również dane literaturowe [33, 87]).

Potwierdzeniem tego spostrzeżenia jest rozkład liczby punktów kontaktu monodispersyjnego ośrodka wirtualnego, którego procedura tworzenia została już przedstawiona. Na rys. 6 przedstawiłem dwa rozkłady: pierwszy dotyczy liczby kontaktów, drugi – liczby kontaktów i prawie-kontaktów łącznie.

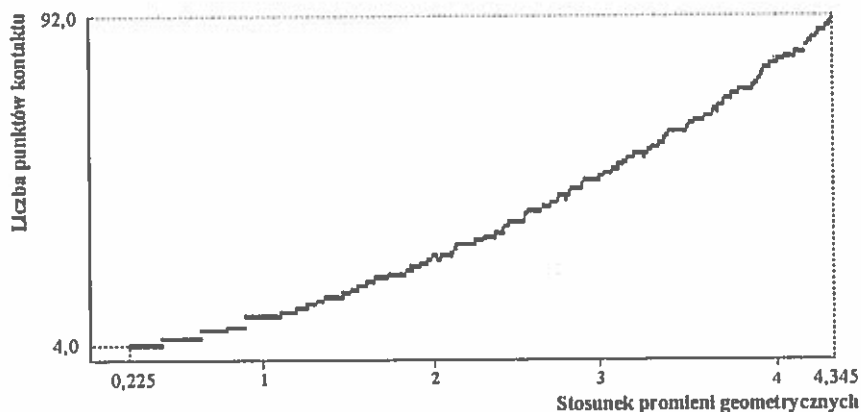
Termin „prawie-kontakt” dotyczy takiej geometrii cząstek, dla której odległość między powierzchniami cząstek jest mniejsza od 0,1 promienia geometrycznego cząstki.

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

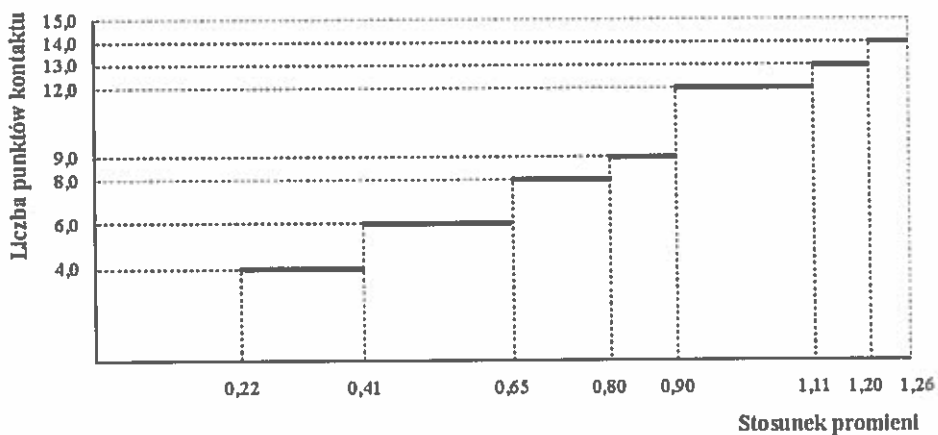
Zupełnie inny przebieg ma krzywa odnosząca się do ośrodka polidispersyjnego. Na rys. 7 przedstawiłem analogiczne wyniki dotyczące modelowego ośrodka złożonego z kulek szklanych o składzie granulometrycznym podanym w tab. 3. Algorytm użyty do tworzenia wirtualnego ośrodka miał za zadanie stworzenie możliwie „ciasnego” upakowania cząstek. Mimo to, znaczny procent cząstek ma jedynie trzech sąsiadów, chociaż pod uwagę nie były brane cząstki znajdujące się na powierzchni struktury trójwymiarowej. Poza tym zakres zmienności liczby punktów kontaktu jest dwukrotnie większy, tzn. od 3 do 24, w porównaniu do układu monodispersyjnego (od 3 do 12).

9.2. Liczba kontaktów cząstki w monodispersyjnym ośrodku ziarnistym

Na podstawie ostatniego wykresu można wnioskować, że istnieje związek między ilością sąsiadów danej cząstki i jej wielkością. Wydaje się oczywiste, że ich liczba musi zależeć również od składu granulometrycznego i porowatości. Wiedza na ten temat jest fragmentaryczna [61, 73, 76]. Chcąc częściowo wypełnić tę lukę postanowiłem



Rys. 8. Liczba punktów kontaktu kuli o zmiennym promieniu geometrycznym w ośrodku monodispersyjnym



Rys. 9. Fragment początkowej części wykresu z rys. 8

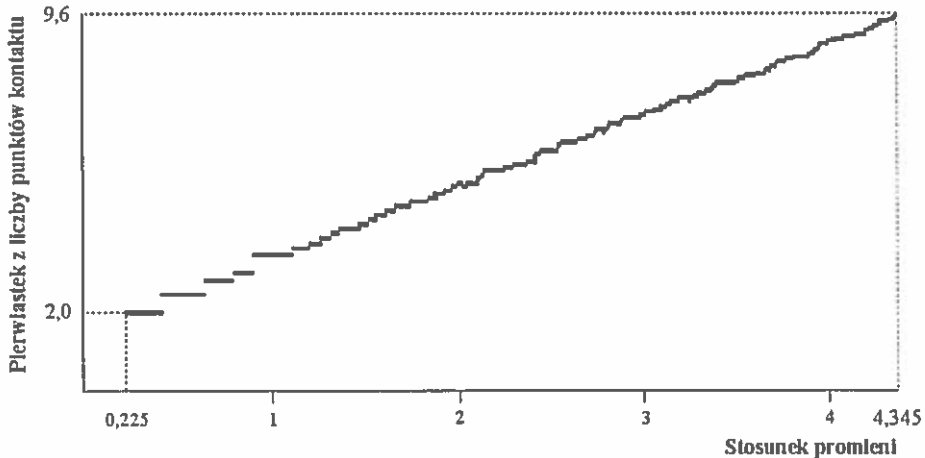
odpowiedzieć na podstawowe pytanie dotyczące ilości możliwych sąsiadów stykających się z daną cząstką. Ogólna odpowiedź na tak postawione pytanie nie wydaje się możliwa, gdyż istnieje nieskończenie dużo możliwych kombinacji dotyczących składu granulometrycznego. Dla uproszczenia problemu założyłem, że rozpatrywana cząstka znajduje się w ośrodku monodispersyjnym. Wynik przeprowadzonych badań numerycznych przedstawiono na rys. 8. 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 stykne do kuli centralnej k , a ponadto – do dwóch cząstek

l i m , których numery spełniają warunki $l = k + 1, k + 2, \dots$ oraz $m = l + 1, l + 2, \dots$ 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. 9 przedstawia powiększony początkowy fragment wykresu z rys. 8. Widać, że liczbą kontaktów nie jest ciągiem kolejnych liczb naturalnych. Ponieważ liczba 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.

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. 10.



Rys. 10. Pierwiastek kwadratowy z liczby punktów kontaktu N_c w funkcji stosunku promienia cząstki centralnej i promienia monodispersyjnych cząstek otaczających

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:

$$\sqrt{N_c} = aR_c/R_m + b \quad (12)$$

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.

Powyższy wniosek można również sformułować następująco: **liczba punktów kontaktów cząstki w monodispersyjnym ośrodku granularnym można opisać funkcją kwadratową, której argumentem jest stosunek promienia geometrycznego rozpastrywanej cząstki do promienia cząstek ośrodka.**

Najmniejsza wartość na osi poziomej wykresu rys. 10 wynosi 0,225. Odpowiada ona promieniowi kuli wpisanej w regularną komórkę tetraedryczną.

Na uwagę zasługuje nieciągłość liczby kontaktów w otoczeniu rzędnej równej jedności. Z wykresu wynika, że dwie cząstki, jedna o promieniu nieco większym od 0,90 i druga o promieniu nieco mniejszym niż 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. Spostrzeżenia te potwierdzają fakt o największej z możliwych liczbie kontaktów jednakowych cząstek. Ponadto dowodzą, że taką samą liczbę sąsiadów może mieć zarówno cząstka o promieniu o 10% większym, jak i o 10% mniejszym od promienia cząstek ośrodka monodispersyjnego.

Ponadto ciąg liczb określający liczbę punktów kontaktu nie jest ciągiem monotonicznym. „Schody” wykresu na rys. 42 niekiedy „idą nieznacznie w dół”, co oznacza, że liczba cząstek stykających się 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 $0,01R_m$. 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 gębowego. Jeśli ośrodek składa się z np. z dwóch frakcji i drobniejsza 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 składzie granulometrycznym zbliżonym do gleby piaszczysto – pyłowej, o ile spełnione zostaną trzy warunki

- 1) stosunek porowatości agregatu wirtualnego i ośrodka badanego jest bliski 1,
- 2) cząstki ośrodka można uznać za wypukłe,
- 3) agregat ośrodka jest wystarczająco duży (większy lub równy ROG).

10. KONCEPCJA POJEDYNCZEGO PORU OŚRODKA WIRTUALNEGO

Jak już powiedziano, równość porowatości i składów granulometrycznych dwóch ośrodków glebowych uznałem za warunek wystarczający, aby uznać je za identyczne.

Jeśli uznać powyższe stwierdzenie za prawdziwe, można również sądzić, że wnioski wynikające z analizy struktury porów ośrodka wirtualnego charakteryzują pory ośrodka rzeczywistego. Jednakże, aby było to możliwe należy stworzyć koncepcję pojedynczego poru ośrodka, która uwzględniałaby jego cechy fizyczne i umożliwiałaby obliczenia numeryczne.

Rys. 4 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 rzęciowa, 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 znana mi próba innej definicji pojedynczego poru brzmi następująco [86]: „... 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”.

Wydaje się, że w odniesieniu do ośrodka nienasyconego właściwsza byłaby definicja odwołująca się do promienia krzywizny menisku, a nie do promienia hydraulicznego.

W wyniku przekrojenia trójwymiarowego wirtualnego ośrodka porowatego powstaje druga struktura. Do badań postanowiłem użyć zarówno strukturę płaską (2D) jak i przestrzenną (3D), jedną niezależnie od drugiej. Uznałem, że przewidywany program badań stwarza unikalne możliwości porównań wyników dotyczących tego samego ośrodka i pochodzących z dwóch źródeł – powiązanych ze sobą, lecz jakościowo różnych.

10.1. Por dwuwymiarowy (2D)

Opracowany przeze mnie algorytm podziału powierzchni przekroju na pory dwuwymiarowe składa się z dwóch części:

- 1) określenia cząstek tworzących por,
- 2) określenia parametrów poru.

ad 1) Przyjąłem, że określenie poru oznacza przyporządkowanie części powierzchni trzem cząstkami o numerach 1, 2, 3. Znajdowanie trójki cząstek tworzących por odbywa się na zasadzie prób i błędów wg. poniższego schematu. Niech przekrój składa się z n okręgów przedstawiających cząstki fazy stałej, których promienie i współrzędne środka są znane.

Rozwiązując układ trzech poniższych równań względem $a(i)$, $b(i)$, $d(i)$, między dowolną trójkę cząstek na ogół można wpisać styczny do nich okrąg:

$$\begin{aligned} (a(i) - x(k))^2 + (b(i) - y(k))^2 &= (r(k) + d(i))^2 \\ (a(i) - x(l))^2 + (b(i) - y(l))^2 &= (r(l) + d(i))^2 \\ (a(i) - x(m))^2 + (b(i) - y(m))^2 &= (r(m) + d(i))^2 \end{aligned} \quad (13)$$

gdzie: x , y – współrzędne cząstek k , l , m ,

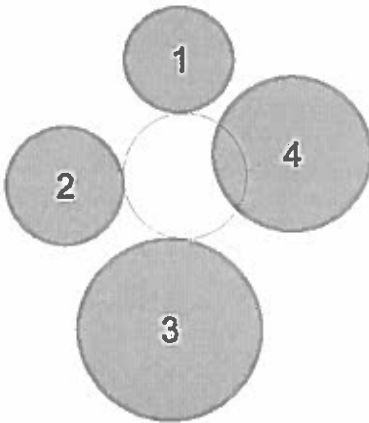
$r(k)$, $r(l)$, $r(m)$ – promienie trzech cząstek,

$a(i)$, $b(i)$, $d(i)$ – współrzędne i promień okręgu i -tego wpisanego między cząstki k , l , m .

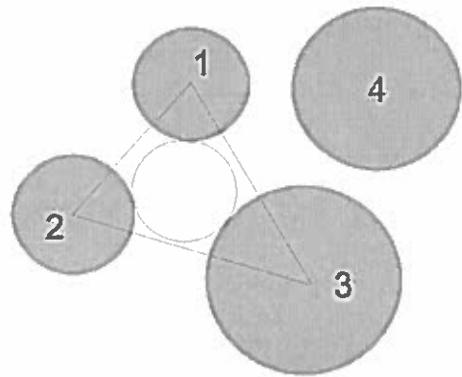
W ogólności można wszystkie przeprowadzone próby podzielić na dwa rodzaje, przedstawione na rysunkach 11 i 12. Na pierwszym z nich (rys. 11) okrąg styczny do cząstek 1, 2, 3 ma części wspólne z innymi cząstkami (np. 4), „zahacza” o jedną lub więcej z nich (ang. overlapping).

Na drugim (rys. 12) znajduje się on między cząstkami i kontaktuje się jedynie z tymi do których jest styczny.

Przyjęto uważać, że drugi z przedstawionych przypadków (rys. 12) definiuje por dwuwymiarowy między cząstkami 1, 2, 3.



Rys. 11. Układ cząstek nie spełniający warunku identyfikacji poru (overlapping)



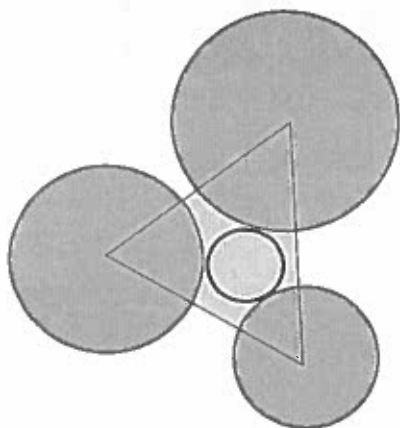
Rys. 12. Układ cząstek spełniający warunek identyfikacji poru

ad 2) Współrzędne i promienie cząstek 1, 2, 3 określają położenie poru na powierzchni. Łącząc środki tych cząstek otrzymuje się trójkąt, wewnątrz którego znajdują się sektory 3 okręgów.

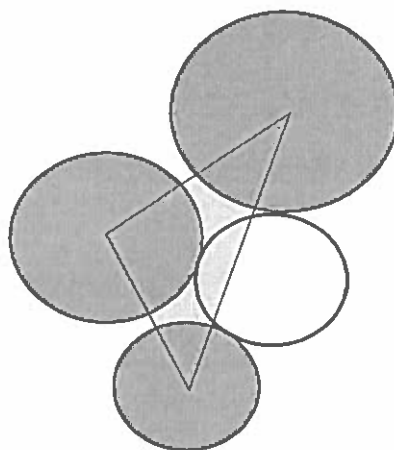
Część powierzchni trójkąta nie związana z żadnym sektorem nazwana została **por** dwuwymiarowym.

Tak zdefiniowanemu porowi można przypisać następujące parametry geometryczne: powierzchnie S_{2D} , 3 odległości między nimi f^i_{2D} dla $i = 1, 2, 3$ oraz promień okręgu wpisanego. Parametry geometryczne powiązałem z parametrami fizycznymi według następującego schematu:

powierzchnia S_{2D}	→	powierzchnia poru
odległości f	→	promień przewężenia r_p odpowiedzialny za osuszanie na krzywej retencji wodnej $r_p = f/2$,
promień okręgu wpisanego	→	promień związany z procesem nawilżanie na krzywej retencji wodnej



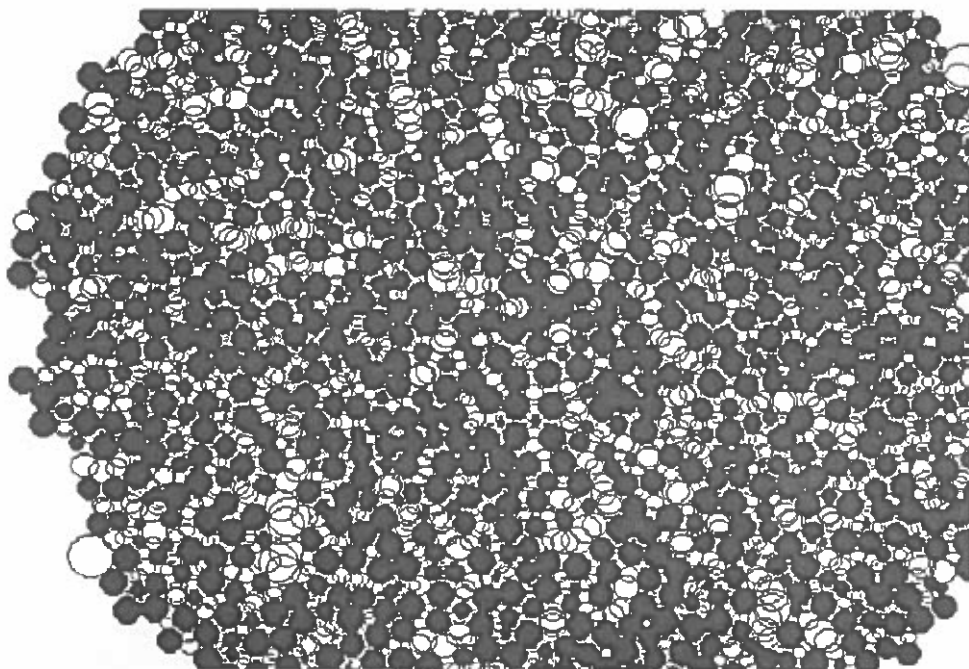
Rys. 13. Por zamknięty (jasno szara powierzchnia) między trzema cząstkami. Środek okręgu wpisanego wewnątrz poru



Rys. 14. Przykład poru otwartego (środek okręgu wpisanego poza jasno szarą powierzchnią poru, cząstki tworzące por – ciemno szare)

Przykłady tak określonych porów przedstawiono na rys. 13 i 14. Topologia porów okazała się bardzo zróżnicowana. Podzielono je na dwa rodzaje: zamknięte (środek okręgu wpisanego znajduje się wewnątrz poru – rys. 13) i otwarte (środek okręgu wpisanego znajduje się na zewnątrz poru – rys. 14).

Rys. 15 przedstawia przykład przekroju przez wirtualną strukturę wraz z okręgami identyfikującymi pory (czarne kola – cząstki, białe okręgi – identyfikatory porów). Celem procesu identyfikacji jest eliminacja przypadków, których dotyczy rys. 11.



Rys. 15. Przekrój przez trójwymiarowy agregat (cząstki – białe koła) wraz z identyfikatorami porów (białe okręgi)

Ilość tak rozumianych porów jest około 2–2,2 razy większa od liczby tworzących je cząstek.

10.2. Por trójwymiarowy (3D)

Procedura określania porów 3D jest analogiczna jak w poprzednim przypadku. Układ równań określających położenie poru ma postać następującą:

$$\begin{aligned}
 (A(i) - X(k))^2 + (B(i) - Y(k))^2 + (C(i) - Z(k))^2 &= (D(i) + R(k))^2 \\
 (A(i) - X(l))^2 + (B(i) - Y(l))^2 + (C(i) - Z(l))^2 &= (D(i) + R(l))^2 \\
 (A(i) - X(n))^2 + (B(i) - Y(n))^2 + (C(i) - Z(n))^2 &= (D(i) + R(n))^2
 \end{aligned} \tag{14}$$

gdzie: indeksy k, l, m, n określają numery cząstek, między którymi określany jest por 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.

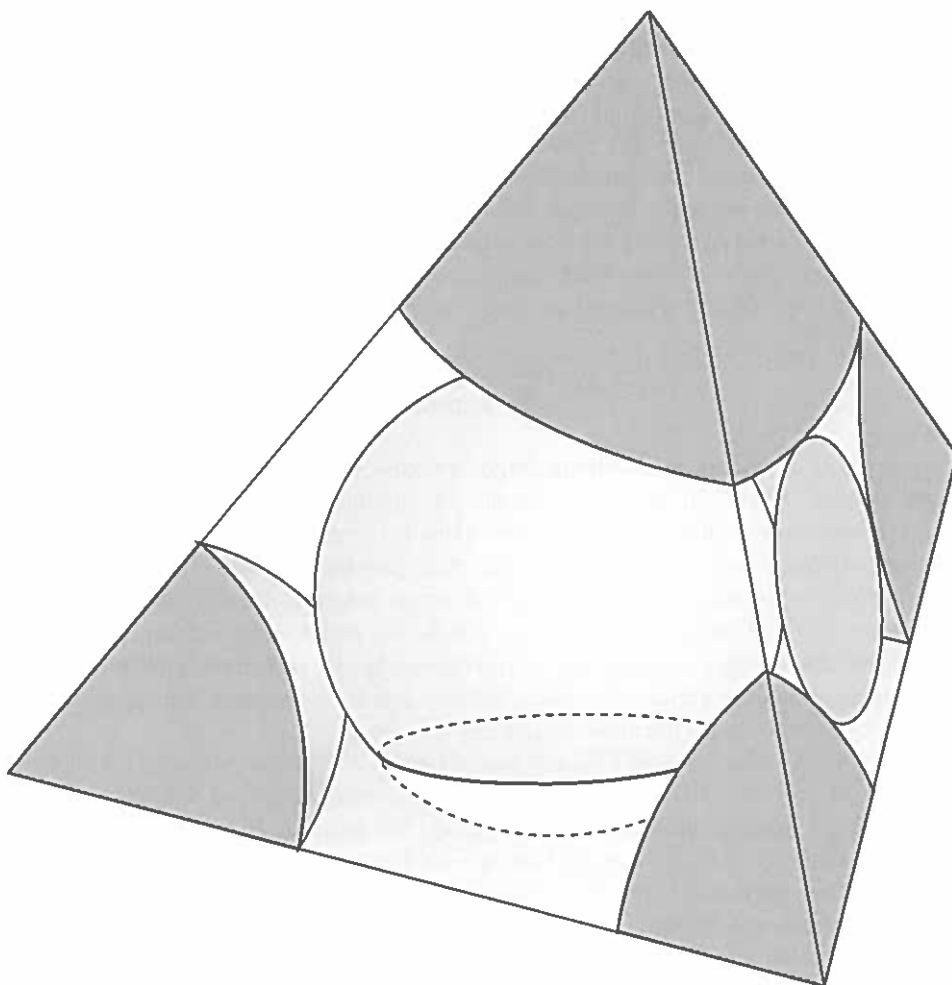
Jeśli połączyć środki cząstek kulistych tworzących por odcinkami prostymi, otrzyma się czworościan o ścianach trójkątnych. Wewnątrz czworościanu znajdują się sektory sferyczne (fragmenty) czterech cząstek.

W przyjętym modelu przestrzeń ograniczona czterema trójkątami sferycznymi, należącymi do czterech cząstek, i powierzchnią ścian bocznych, uważana jest za pojedynczy por przestrzenny (por 3D).

Por ten, przedstawiony schematycznie na rys. 16, może być charakteryzowany następującymi parametrami:

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

Na rys. 16 powierzchnie koloru szarego odpowiadają fazie stałej, zielonej – kuli wpisanej w por.



Rys. 16. Idea czworościennego poru trójwymiarowego utworzonego przez 4 cząstki (faza stała – kolor szary)

Interpretacja fizyczna przewężenia wymaga dokładniejszego opisu. Ściany boczne czworoscianu 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 poru.

Ponieważ obliczenie analityczne promienia krzywizny menisku związanego z taką geometrią jest niemożliwe [73], 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 kanałków [46] jest promień okręgu wpisanego między cząstki r_k . Okrąg ten widoczny jest na rys. 16 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 czworoscianu.

Dlatego oprócz niej postanowiłem przetestować również inną, oryginalną koncepcję, w której przewężeniu przyporządkowuje się promień menisku r_k wg. zależności (15)

$$r_k = 2 \times \frac{\text{pole przewężenia poru}}{\text{obwód przewężenia}} \quad (15)$$

przy czym za obwód uważa się sumę długości łuków 3 cząstek, które ulegają zwilżeniu przez menisk wodny. Powyższe wyrażenie uwzględnia oczywisty fakt, iż menisk w porze powstaje w wyniku zwilżania fazy stałej przez ciecż. Pozostała część obwodu nie jest zwilżana, ponieważ jest zajęta przez fazę gazową. Promień r_k z zależności (15) jest analogiem promienia hydraulicznego (stosunek pola powierzchni kanału i obwodu zwilżania) [39]. Współczynnik 2 w tej zależności został wprowadzony po to, aby obliczenia dla kapilary cylindrycznej o promieniu r_k : na podstawie zależności (15) i na podstawie analizy kształtu menisku, dawały jednakowe wyniki, tzn. promień geometryczny równa się promieniowi krzywizny menisku.

W ogólności układ równań (13) ma 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 wybierałem 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. Stosunek ten jest różny dla różnych składów granulometrycznych i zależy od porowatości osrodka.

Wizualizacja układu porów 3D jest znacznie trudniejsza w porównaniu z porami 2D (rys. 15), właśnie ze względu na trójwymiarowy jego charakter.

Reasumując obie zaproponowane definicje porów, tzn. 2D i 3D, należy podkreślić, że każda z nich uwzględnia podstawowe cechy realnych układu porów, tzn. histereza zależności wilgotność – potencjał wodny i fakt istnienia połączeń międzyporowych. Wilgotność przy danym potencjale będzie zależeć od kierunku zmian: osuszanie lub nawilżanie ośrodka. Dla procesu osuszania istotne są wielkości przewężeń, a nawilżanie winno być związane z promieniem kuli (okręgu) wpisanej w por.

11. ZASTOSOWANIE TESSELACJI DO TWORZENIA SIECI PORÓW OŚRODKA GRANULARNEGO

Modelowanie numeryczne wymaga operowania ścisłym pojęciem poru. Poszukując sposobu, umożliwiającego opis tak złożonej struktury jak porowaty ośrodek granularny, posłużyłem się metodą tessellacji powierzchniowej i przestrzennej, stosowanej do opisu różnych struktur i procesów stochastycznych [54, 60].

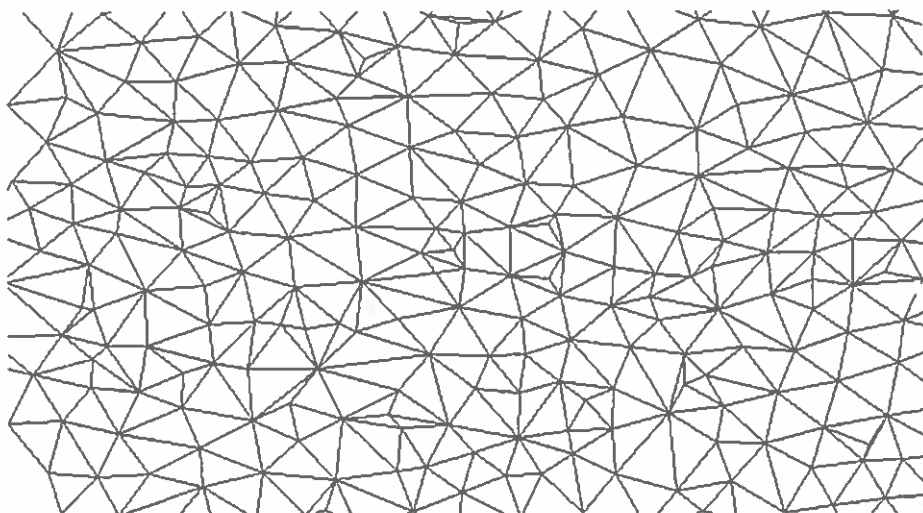
Tesselacja umożliwia podział dowolnego obiektu (dwu-, trój- lub więcej- wymiarowego), składającego się ze skończonej liczby punktów, na związane z nimi obszary, które całkowicie wypełniają jego powierzchnię (lub przestrzeń).

Spośród dwóch podstawowych jej typów, wybrałem metodę tessellacji Delaunay'a, która umożliwia podział obiektu płaskiego na trójkąty lub przestrzennego – 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.

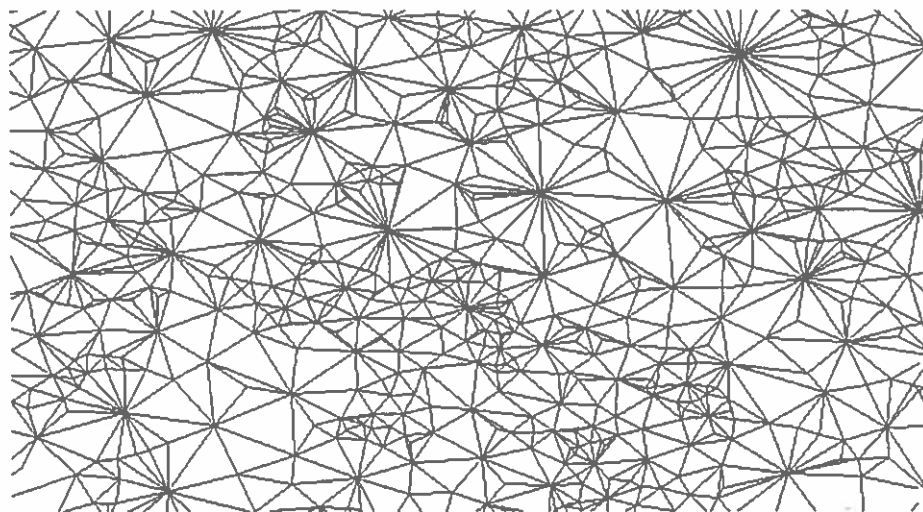
Rys. 17 powstał z rys. 4 przez połączenie ze sobą środków cząstek tworzących każdy por i jednoczesne pominięcie wszystkich okręgów. Widać, że zbiór porów i związanych z nimi cząstek, przedstawiony przy pomocy trójkątów, pokrywa całkowicie powierzchnię przekroju. Część każdego boku trójkąta, nie związana z cząstką należy do dwóch sąsiadujących ze sobą porów (za wyjątkiem porów skrajnych). Punkt, w którym zbiegają się boki 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 sumą dwóch promieni geometrycznych cząstek powiększoną o odległość między ich powierzchniami. Nawet pobieżna analiza rys. 17 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.

Rys. 18 przedstawia sieć trójkątów porowych pylistego piasku rzecznego, o znacznie większym zakresie zmienności wielkości cząstek (tab. 3).

Analogiczne rachunki przeprowadziłem również w odniesieniu do przypadku 3D. Opracowane programy analizujące wirtualną strukturę trójwymiarową były znacznie trudniejsze pod względem koncepcyjnym i rachunkowym m.in. z powodu trudności z wizualizacją obiektów trójwymiarowych. Na przykład pytanie czy powstałe w wyniku



Rys. 17. Sieć trójkątów porowych utworzonych z rys. 4 w wyniku triangulacji.
Każdy trójkąt zawiera jeden por i trzy fragmenty tworzących go cząstek



Rys. 18. Przykład triangulacji przekroju ośrodka o większym, w stosunku do rys. 17, zakresie zmienności wielkości cząstek

tessalacji Delannauy'a czworościany kompletnie wypełniają przestrzeń ośrodka okazało się dosyć skomplikowanym problemem. W przypadku 3D czworościany stykają się ze sobą ścianami o kształcie trójkąta. Każda ściana należy do dwóch czworościanów zawierające pory, a przewężenie z nią związane, umożliwia fizyczny kontakt porów ze sobą. Liczba porów związanych z pojedynczą cząstką jest w tym przypadku znacznie większa: od 4 do kilkudziesięciu. Podobnie jak w przypadku 2D, zależy ona od relacji między wielkościami, tworzących ośrodek, cząstek.

12. ROZKŁADY I KORELACJE ESTYMATORÓW PORÓW WIRTUALNEGO OŚRODKA MONODYSPERSYJNEGO

Badania symulacyjne pozwalają w zasadzie na określenie dowolnego parametru mikrostruktury ośrodka. Stwarzają więc unikalną możliwość badania korelacji między wybranymi estymatorami.

Dla wszystkich ośrodków przedstawionych w tab. 3 określiłem pory według wyżej opisanych procedur. Ośrodek dwuwymiarowy analizowałem niezależnie od trójwymiarowego. Ze względu na bardzo dużą liczbę uzyskanych danych dotyczących badanych ośrodków, postanowiłem przedstawić jedynie wyniki dotyczące ośrodka monodispersyjnego.

Wybór ten podyktowany był możliwością porównania wielkości porów z wielkością tworzących je cząstek, ale bardziej istotny był powód następujący: **jeśli okazałoby się, że między pewnymi estymatorami ośrodka monodispersyjnego istnieje ścisła korelacja, wówczas można oczekiwać, że takie zależności istnieją również dla ośrodka polidispersyjnego.**

W przypadku przeciwnym nie byłoby podstaw do przypuszczeń, że prostsze zależności wystąpią w układzie bardziej złożonym do jakich należą wszystkie gleby.

12.1. Rozkłady i korelacje estymatorów porów dwuwymiarowych 2D dla wirtualnego ośrodka monodispersyjnego

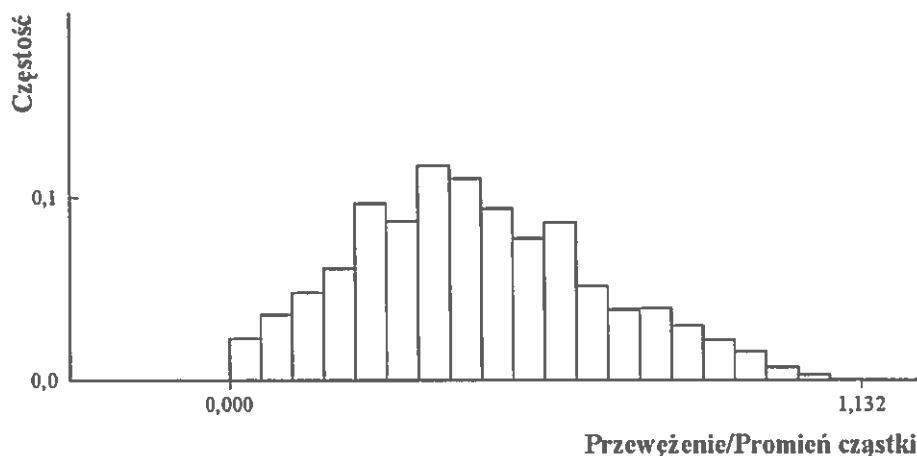
Każdy z porów, przedstawionych na rys. 12, może być opisany pewną liczbą parametrów. Wydają się, że najistotniejsze z nich to:

- a) promień największego przewężenia poru (spośród trzech istniejących),
- b) promień okręgu wpisanego w por,
- c) powierzchnia poru.

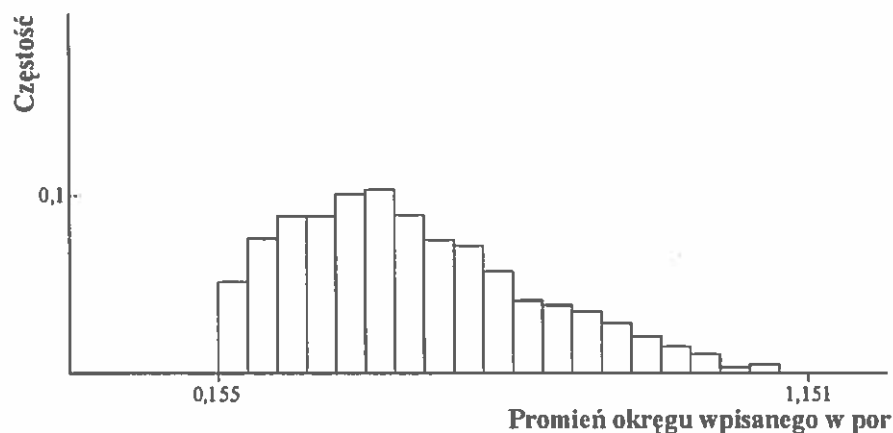
Rozkłady tych estymatorów porowych przedstawione na rys. 19–21 mają pewne cechy wspólne:

- a) istnienie granic lewo- i prawostronnej,
- b) istnienie maksimum rozkładów,
- c) brak symetryczności rozkładów.

Najistotniejszym jest jednak fakt, że nawet w przypadku nieuporządkowanego układu monodispersyjnego mamy do czynienia z rozkładem parametrów w pełnym tego słowa znaczeniu, tzn. rozkład nie składa się z jednej czy dwóch linii, lecz może być opisywany



Rys. 19. Rozkład największych przewężeń porów trójkątnych 2D dla układu monodispersyjnego



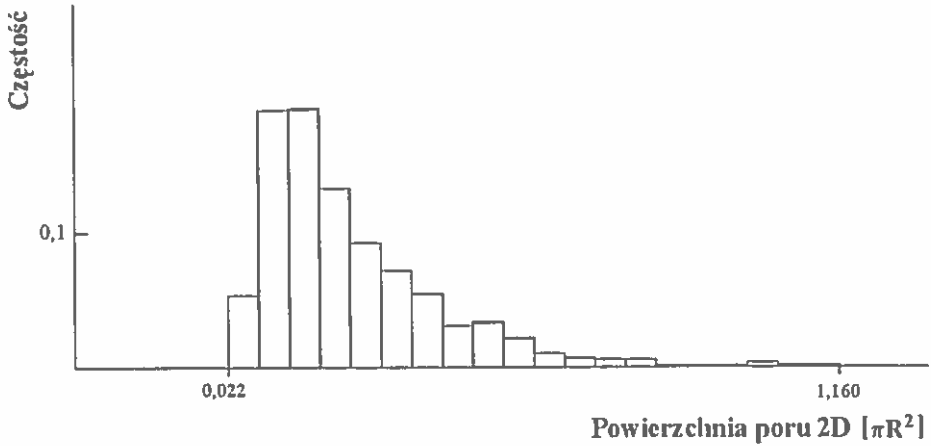
Rys. 20. Rozkład promienia okręgu wpisanego w por 2D dla układu monodispersyjnego

funkcją ciągłą. Należy wspomnieć, że oś pozioma estymatorów wyrażona jest w jednostkach R (lub πR^2), gdzie R jest promieniem cząstki kulistej ośrodka trójwymiarowego.

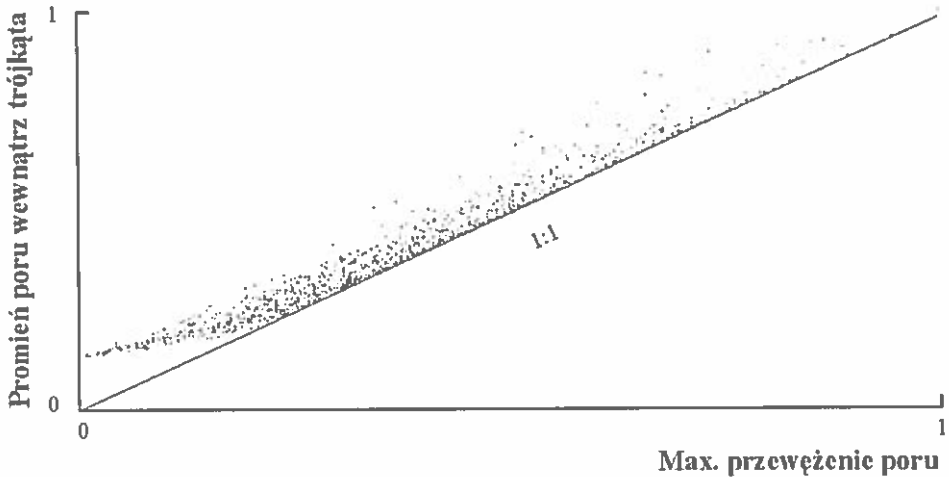
Rozkład promieni okręgów $f(r)$ powstałych z przecięcia zbioru jednakowych kul o promieniu R nie jest monodispersyjny, lecz określony jest zależnością:

$$f(r) = \frac{r}{R \sqrt{R^2 - r^2}} \quad (16)$$

Rys. 22 i 23 przedstawiają korelacje między wybranymi estymatorami ośrodka dwuwymiarowego powstałego z monodispersyjnego ośrodka 3D. Przedstawiłem tylko te przypadki dla których korelacja była najlepsza.



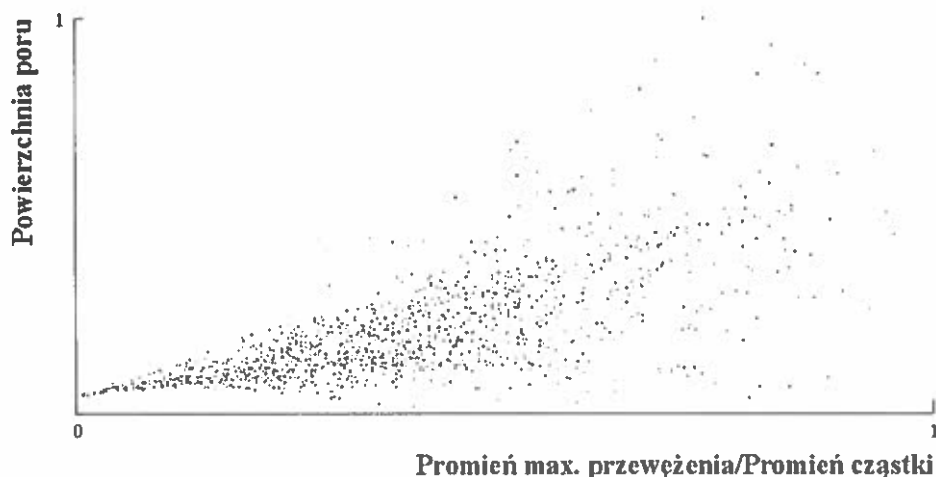
Rys. 21. Rozkład pola powierzchni poru 2D dla układu monodispersyjnego



Rys. 22. Korelacja promienia okręgu wpisanego w por dwuwymiarowy i promienia największego przewężenia dla układu monodispersyjnego (R – promień cząstki 3D)

Na ich podstawie można stwierdzić, że:

- a) pole powierzchni i jego dyspersja są dodatnio skorelowane z promieniem maksymalnego przewężenia poru,
- b) promienie: maksymalnego przewężenia i okręgu wpisanego w por są również dodatnio skorelowane.



Rys. 23. Korelacja pola powierzchni poru 2D i jego największego przewężenia

Z założenia promień okręgu wpisanego jest nie mniejszy od promienia największego przewężenia, jednakże w znacznej liczbie przypadków wartości ich są bliskie sobie (patrz punkty leżące na prostej, której przedłużenie przechodzi przez początek układu współrzędnych). Liczba punktów, do których odnosi się wyżej przedstawiona statystyka, wynosi ca 2000.

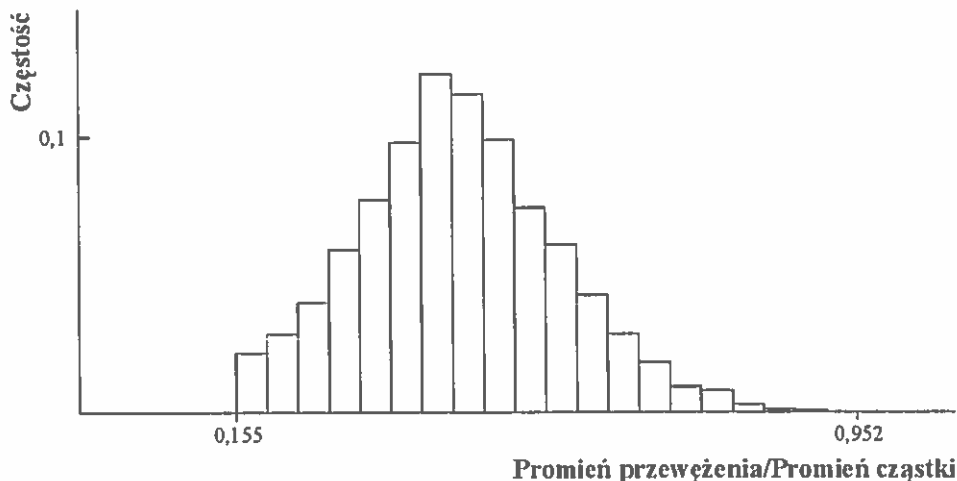
12.2. Rozkłady i korelacje estymatorów porów trójwymiarowych 3D dla wirtualnego ośrodka monodispersyjnego

Podobne zależności, jak dla porów powierzchniowych, otrzymano również dla porów trójwymiarowych. W tym przypadku wielkością analogiczną do powierzchni poru 2D jest objętość poru 3D. Dodatkowo analizowano również pole powierzchni i objętość cząstek wewnątrz poru tetraedrycznego.

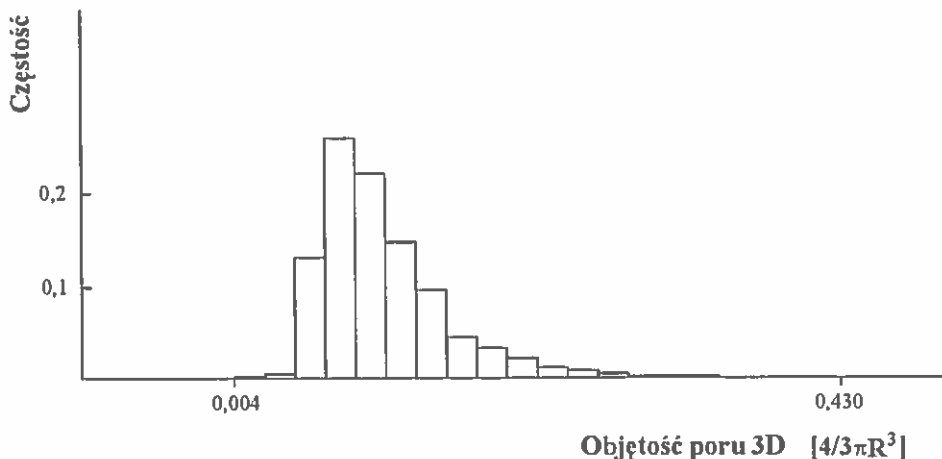
Rys. 24–26 przedstawiają rozkłady estymatorów porów trójwymiarowych: największego przewężenia (spośród czterech możliwych), promienia wewnętrznego i objętości.

Podobnie, jak w przypadku 2D, rozkłady 3D są ograniczone lewo- i prawostronnie. Mimo zbliżonego przebiegu różnią się między sobą w istotny sposób – zakres zmienności parametrów porów 2D jest większy niż odpowiadający mu zakres odnoszący się do 3D.

I tak zakres wartości przewężenia poru mierzonego wielkością promienia cząstki R zmienia się w zakresie: 0,000–1,132 dla 2D i 0,155–0,930 dla 3D (rys. 19 i 24), natomiast wielkość porów wyrażona promieniem okręgu (lub kuli) wpisanego leży w zakresie: 0,155–1,151 (2D) i 0,225–0,930 (3D) (rys. 20 i 26). Z kolei powierzchnię poru 2D można porównywać z objętością poru 3D. Jeśli powierzchnię wyrazić w



Rys. 24. Rozkład promienia przewężenia porów 3D w wirtualnym ośrodku monodispersyjnym

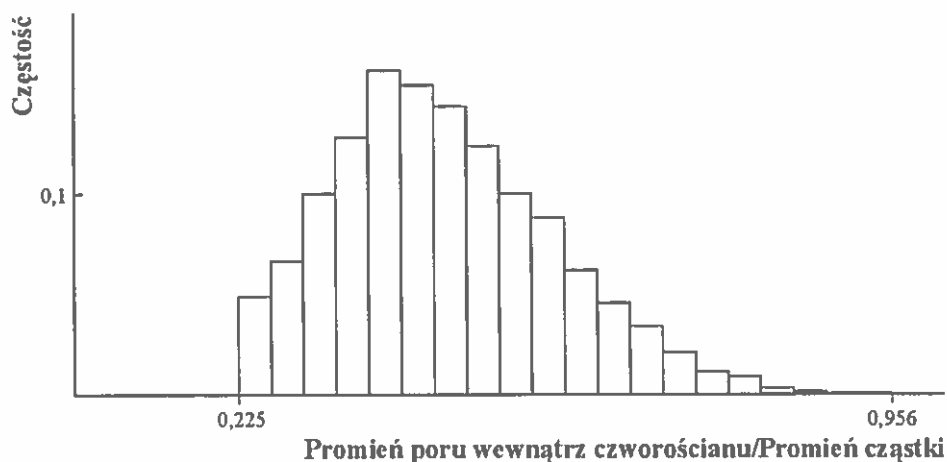


Rys. 25. Rozkład objętości porów trójwymiarowych dla przypadku monodispersyjnego
(R – promień cząstki 3D)

jednostkach πR^2 , a objętość w $4/3\pi R^3$ wówczas odpowiednie wielkości mieszczą się w zakresach: 0,022–1,160 (2D) i 0,004–0,430 (3D) (rys. 21 i 25).

Tab. 4 przedstawia porównanie głównych estymatorów rozkładów dwu- i trójwymiarowego ośrodka monodispersyjnego. Wynika z niej ważny wniosek praktyczny, dotyczący metodyki określania rozkładu porów na podstawie zglądów i cienkich szlifów [9].

Mimo, iż porowatość przekroju jest taka sama jak porowatość ośrodka z którego on powstał, to jednak **rozkład porów uzyskany na jego podstawie jest różny od rozkładu rzeczywistego, za jaki należy uznać rozkład charakteryzujący ośrodek trójwymiarowy.**

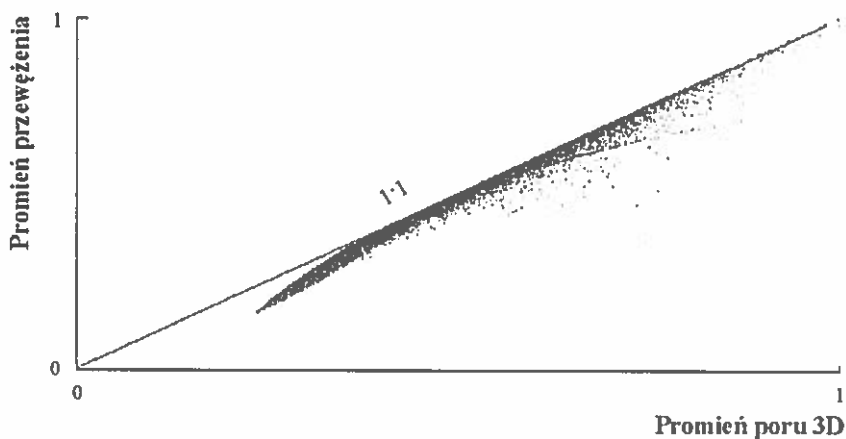


Rys. 26. Rozkład promienia kuli wpisanej w por trójwymiarowy dla układu monodispersyjnego (R – promień cząstki 3D)

Tab. 4. Estymatory rozkładów monodispersyjnego ośrodka dwu- i trójwymiarowego

		Rodzaj obiektu	
		2D	3D
Przewężenie poru (R)	granica dolna	0,000	0,155
	granica górna	1,132	0,930
	maksimum	0,396	0,465
Kula (okrąg) wpisany (R)	granica dolna	0,155	0,225
	granica górna	1,151	0,930
	maksimum	0,454	0,462
2D – pole (πR^2), 3D – objętość ($4/3\pi R^3$)	granica dolna	0,022	0,004
	granica górna	1,160	0,430
	maksimum	0,170	0,189

Wniosek powyższy jest zaskakujący, gdyż stawia pod znakiem zapytania użyteczność metody określania rozkładu porów na podstawie zglądów i szlifów w ogóle. Mimo, iż został wyciągnięty na podstawie analizy układu monodispersyjnego, można przyjąć, że ma znaczenie ogólne i dotyczy również układów polidispersyjnych, co zostanie udowodnione w rozdziale 13. Rys. 22–24 przedstawiają niektóre korelacje między



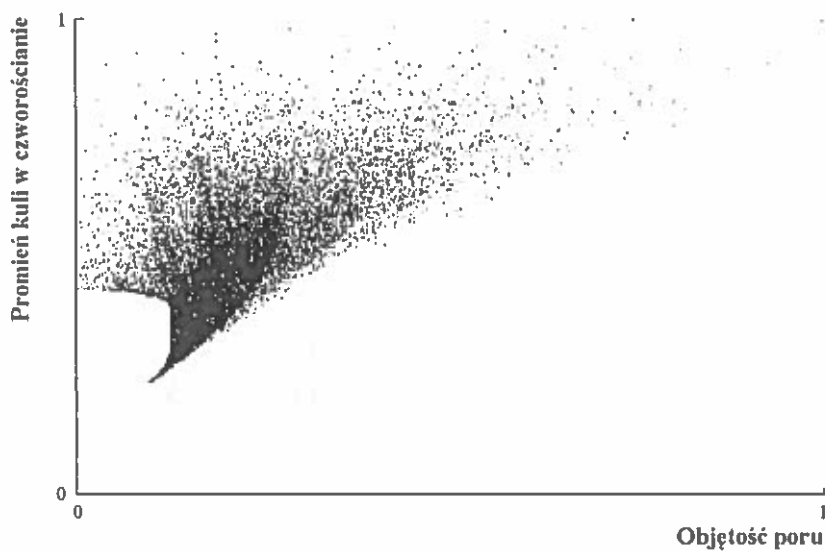
Rys. 27. Korelacja promienia poru i promienia największego przewężenia poru dla monodispersyjnego układu trójwymiarowego



Rys. 28. Korelacja objętości fazy stałej w porze i objętości poru dla układu trójwymiarowego, monodispersyjnego

wybranymi parametrami porów [6]. Liczba punktów przedstawiona na każdym rysunku wynosi 30 000.

Rys. 27 przedstawia związek między promieniem największego przewężenia i promieniem kuli wpisanej w por 3D. Korelacja jest dodatnia i w pierwszym przybliżeniu może być opisana linią prostą, szczególnie dla większych wartości promieni. Promienie przewężeń są zawsze nie większe od promienia wewnętrznego poru. Ponieważ dla



Rys. 29. Korelacja promienia wewnętrznego i objętości poru dla układu trójwymiarowego, monodispersyjnego

wielu porów obie wartości są zbliżone, dowodzi to, że znaczna część porów jest porami otwartymi (dla nich obie wartości są z założenia równe).

Badania korelacji innych estymatorów wewnątrzporowych nie pozwalały nawet na wyciągnięcie wniosków jakościowych (rys. 28, 29). Spostrzeżenie to potwierdza złożoność struktury wewnętrznej tego prostego, pod względem składu granulometrycznego, układu.

13. STEREOMETRYCZNA INTERPRETACJA RÓŻNIC MIĘDZY PORÓWNYWALNYMI ROZKŁADAMI ESTYMATORÓW PORÓW DWU- I TRÓJWYMIAROWYCH

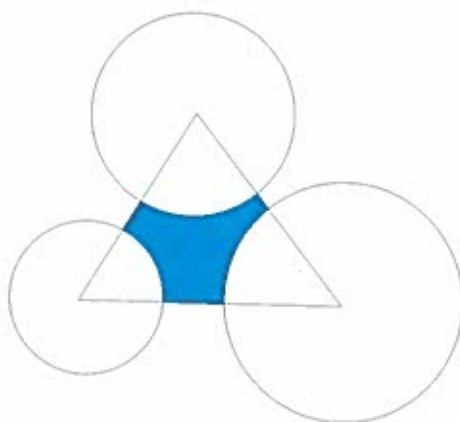
Metoda symulacji komputerowej stwarza unikalną możliwość analizy badanych ośrodków. W rozdziale poprzednim przedstawiłem tab. 4, porównującą estymatory 2 obiektów: ziarnistego ośrodka trójwymiarowego z powstałym z niego przekrojem poprzecznym.

Na jej podstawie można powiedzieć, że odpowiadające sobie rozkłady nie są jednakowe. Potwierdzeniem tych spostrzeżeń są wyniki testów zgodności: Kolmogorowa-Smirnowa (K-S) i χ^2 wykonane dla obu rozkładów.

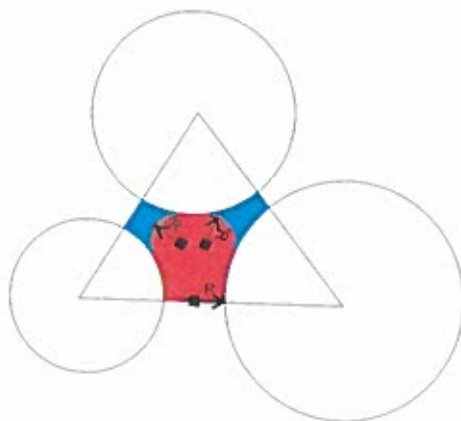
Wydaje się, że pytanie: **dłaczego istnieją te różnice?** jest ciekawym problemem stereologicznym z zakresu ośrodków granularno-porowatych, a rozwiązanie tego zadania może przyczynić się do lepszej, bardziej poprawnej interpretacji wyników analiz zglądów i szlifów glebowych [17].

Poniżej, przedstawiłem próbę odpowiedzi na to pytanie. Rys. 30 przedstawia dwie wybrane komórki sieci czworościanów 3D powstałej w wyniku tesselacji Delaunay'a przestrzennej struktury składającej się z cząstek kulistych. Komórka pierwsza utworzona jest przez cząstki: szarą, zieloną, niebieską, żółtą, a druga – zieloną, niebieską, żółtą i czerwoną. Każdą z tych komórek można przeciąć na wiele sposobów. Powstałe w ten sposób przekroje można podzielić na pięć rodzajów, odpowiadających pięciu zaznaczonym płaszczyznom cięcia. Zazaczyłem je na rys. 30 ponumerowanymi prostymi (płaszczyznami). Powstałe przekroje przedstawiłem w dolnej części strony (rysunki w ramkach o numerach 1–5). Wynika z nich, że powstały obraz może składać się z 0, 1, 2, 3, 4 cząstek (proste 1, 2, 3, 4, 5 odpowiednio). Jedynie w przypadku przekroju składającego się z 3 cząstek, można przyjąć, że jednemu porowi trójwymiarowemu odpowiada jeden por dwuwymiarowy. Dla przekroju czterocząsteczkowego liczba porów z nim związana, może wynosić nawet 4 (liczba kombinacji trójelementowych w zbiorze czteroelementowym). W pozostałych przypadkach, gdy liczba cząstek przekroju wynosi 2, 1, 0 nie ma jednoznacznego związku między porem trójwymiarowym i , powstałym z niego, porem dwuwymiarowym. W takiej sytuacji por 2D tworzony jest przez 3 cząstki pochodzące z dwóch lub nawet trzech różnych komórek sieci trójwymiarowej. Szczególnie interesujący przypadek zachodzi, gdy płaszczyzna przekroju nie przecina żadnej cząstka rozpatrywanego czworościanu sieci. Powstała w tym miejscu wolna powierzchnia zostanie przyporządkowana porowi dwuwymiarowemu powstałemu z cza-

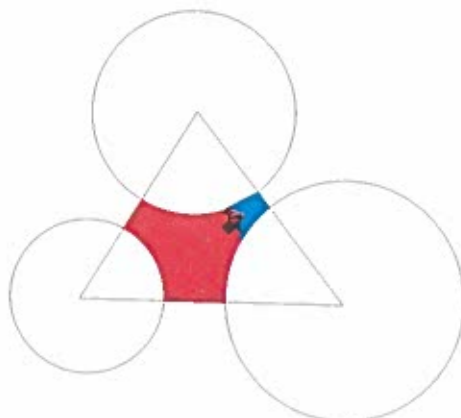
a)



b)



c)



Rys. 30. Dwie komórki tetraedyczne ośrodka 3D z zaznaczonymi płaszczyznami przecięć i odpowiadające im powstałe obrazy płaskie (2D)

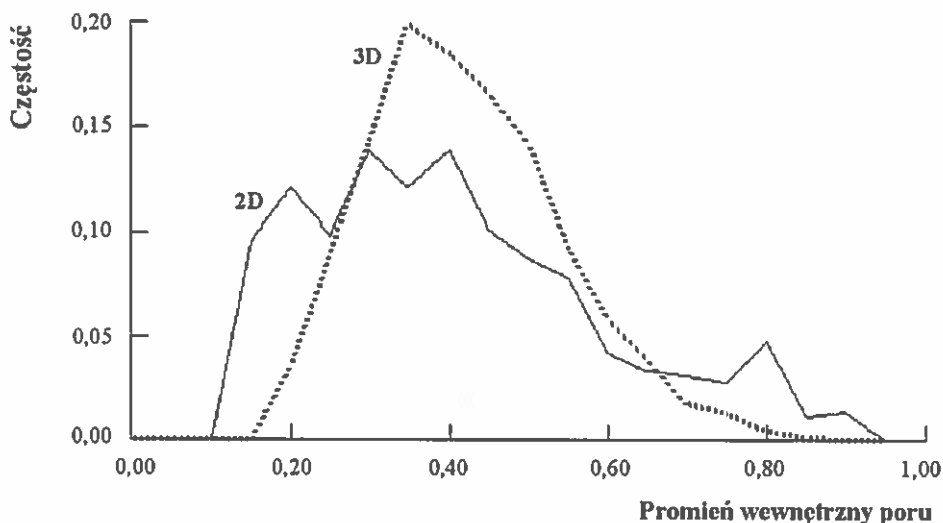
stek pochodzących z sąsiednich porów trójwymiarowych. Powstały por dwuwymiarowy może być na tyle duży, że odpowiadający mu promień okręgu wpisanego będzie większy od promienia cząstki ośrodka monodispersyjnego, mimo, iż procedura upakowania ośrodka 3D nie pozwalała na to. W wyniku tego na przekroju można zaobserwować pory większe od największej cząstki, co z założenia jest niemożliwe w strukturze 3D. Dlatego właśnie granica prawostronna rozkładu 3D ma większą wartość od promienia cząstki R i wynosi $1,151 \times R$.

Inna różnica obu rozkładów dotyczy granicy lewostronnej przewężeń porów. Dla przekroju wynosi ona zero, co jest fizycznym nonsensem. Takie przewężenie powstanie jednak, gdy płaszczyzna przekroju przechodzi przez środki dwóch stykających się cząstek. Rozkład z rys. 19 pokazuje, że 2,4% wszystkich przewężeń porów dwuwymiarowych są bardzo małe lub zerowe. Pory takie mogą powstać jedynie z najmniejszych porów trójwymiarowych, których udział wynosi 3,2%. Pory te tworzone są w wyniku regularnego, tetraedrycznego upakowywania jednakowych cząstek.

Powyższa analiza pozwala zrozumieć dane z tabeli 4.

Należy podkreślić, że powyższe spostrzeżenia są słuszne dla każdego ośrodka ziarnistego, o ile tylko kształt jego ziaren można przybliżyć figurą wypukłą.

Próbowano porównać odpowiadające sobie rozkłady 2D i 3D układów polidispersyjnych z tab. 3. Okazało się, że nie podlegają one żadnemu ze znanych typów rozkładów. Ponieważ wszystkie uzyskane rozkłady mają dosyć wyraźnie zaznaczone maksimum i podobny przebieg, uznano, że szerokość połówkowa może być ich obiektywnym parametrem. Stosunek szerokości połówkowych ekwiwalentnych rozkładów dla dwóch i trzech wymiarów wynosił: dla przewężeń – 1,57, dla promieni porów – 1,81, dla powierzchni i objętości porów – 2,66.



Rys. 31. Porównanie wielkości porów dwu- i trójwymiarowych (krzywa gruba i cienka odpowiednio) dla kulek szklanych (skład granulometryczny w tab. 3)

Wyniki te pozwalają na sformułowanie następującego wniosku: **rozkłady porów ośrodka granularnego i powstałego z niego przekroju płaskiego są różne mimo równych porowatości obu obiektów.**

Wniosek ten sformulowałem na podstawie analizy rozkładów porów dotyczących ośrodka monodispersyjnego. Należy przypuszczać że pozostaje on również słuszny dla ośrodków polidispersyjnych. Można jednak oczekiwać, że różnice między obydwoimi typami rozkładów będą mniejsze, w miarę różnicowania się składu granulometrycznego ośrodka. Potwierdzeniem tych przypuszczeń jest rys. 26 na którym przedstawiłem wyliczone rozkłady promieni wewnętrznych porów dwu- i trójwymiarowych dla drobnoziarnistych kulek szklanych o wymiarach średnic od 62 do 180 mikrometrów, przy czym 66,4% kulek miało średnice między 100 i 125 mikrometrów. Krzywe zaznaczone cienką i grubą linią przerywaną odnoszą się odpowiednio do porów trój- i dwuwymiarowych. Wartość 1 na osi poziomej odpowiada promieniowi największej cząstki użytej w symulacji. Z rys. 31 wynika, że oba rozkłady różnią się w mniejszym niż poprzednio stopniu; stosunek szerokości połówkowych równa się w tym przypadku 1,48, podczas gdy dla układu monodispersyjnego wynosił on 1,81.

14. OKREŚLANIE ZALEŻNOŚCI POTENCJAŁ KAPILARNY – WILGOTNOŚĆ GLEBY NA PODSTAWIE GEOMETRII FAZY STAŁEJ

Retencja wodna ośrodka glebowego jest wynikiem oddziaływań atrakcyjnych między powierzchnią jego fazy stałej i cząsteczkami roztworu glebowego. Ilościowo stan energetyczny roztworu określany jest przez potencjał całkowity Ψ_t , który liczbowo równy jest pracy związanej z izotermicznym, odwracalnym przeniesieniem jednostki masy wody z gleby do warunków standardowych, tzn. do czystej, nie związanej wody znajdującej się na tym samym poziomie pod ciśnieniem atmosferycznym. Na ogół uważa się, że jest on sumą kilku niezależnych składowych [10, 47, 51, 52, 80]:

$$\Psi_t = \Psi_p + \Psi_m + \Psi_s + \Psi_z \quad (17)$$

gdzie:

$\Psi_p = \partial\Psi_t/\partial p\Delta p$ – potencjał ciśnienia p ,

$\Psi_m = \partial\Psi_t/\partial\theta\Delta\theta$ – potencjał matrycowy wilgotności θ ,

$\Psi_s = \sum\partial\Psi_t/\partial n_j\Delta n_j$ – suma potencjałów osmotycznych składników roztworu o koncentracji n_j ,

$\Psi_z = \rho_w g z$ – potencjał grawitacyjny,

ρ_w – gęstość wody,

g – przyspieszenie ziemskie,

z – pionowa odległość od punktu pomiaru do poziomu odniesienia.

W praktyce pomiar potencjału wody glebowej sprowadza się na ogół do określenia jego składowej matrycowej (czyli potencjału macierzystego), ponieważ pozostałe z nich są często bardzo małe lub łatwo je określić niezależnymi metodami. Potencjał matrycowy związany jest z istnieniem w ośrodku powierzchni rozdziału między fazą stałą, ciekłą i gazową (powietrzem). Roztwór glebowy tworzy w nienasyconym ośrodku meniski i błonki wodne, z czy związane są zjawiska kapilarne pierwszego i drugiego rodzaju [38, 69]. Pierwsze z nich wynika z geometrii menisku, która określona jest przez napięcia powierzchniowe na granicy rozdziału faz oraz przez geometrię fazy stałej [4, 13, 15, 16, 25]. Z kształtem menisku związane jest ciśnienie kapilarne p_c , którego wartość określona jest przez równanie Young'a-Laplace'a:

$$p_{c1} = \sigma \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \cos(\alpha_w) \quad (18)$$

gdzie:

σ – napięcie powierzchniowe wody,

α_w – graniczny kąt zwilżania,

r_1 i r_2 – główne promienie krzywizny menisku.

Promienie krzywizny mają wartość dodatnią, jeśli środek okręgu z nim związany znajduje się wewnątrz cieczy zwilżającej. Suma $1/r_1 + 1/r_2$ jest krzywizną menisku w danym punkcie. Analityczne określenie krzywizny menisku jest możliwe jedynie dla nielicznych, stosunkowo prostych kształtów kapilar, np. kapilary cylindrycznej o przekroju kołowym. Jeśli przyjąć, że kąt zwilżania $\alpha_w = 0$, wówczas ciśnienie kapilarne jest ujemne, gdyż oba promienie są również ujemne i równe, a ich wartości bezwzględne równają się promieniowi geometrycznemu kapilary:

$$p_{c1} = -\frac{2\sigma}{r_k} \quad (19)$$

Ciśnienie kapilarne drugiego rodzaju p_{c2} jest związane z istnieniem cienkiej warstwy wodnej na powierzchni fazy stałej. Ma ono istotne znaczenie przy grubościach błonek wodnych rzędu 10^{-9} m, tzn. odgrywa istotną rolę dla gleb o znacznej zawartości cząstek ilastych, charakteryzujących się znaczną powierzchnią właściwą i dla niskich ich wilgotności. Na przykład przy powierzchni właściwej $40 \cdot 10^3 \text{ m}^2 \text{ kg}^{-1}$ ciśnienie błonkowe $p_{c2} = 500 \text{ cm H}_2\text{O}$ co odpowiada grubości błonki $4 \cdot 10^{-9} \text{ m}$ (40 \AA) lub wilgotności wagowej $0,12 \text{ kg H}_2\text{O} / \text{kg}$ gleby. Powierzchnia właściwa gleb piaszczystych jest co najmniej o rząd wielkości mniejsza i znaczenie wody błonkowej jest niewielkie.

Chcąc określić wartość liczbową całkowitego ciśnienia kapilarnego $p_{c1} + p_{c2}$, porównuje się je z ciśnieniem hydrostatycznym:

$$\rho_w g h = p_{c1} + p_{c2} \quad (20)$$

gdzie: h – wysokość słupa wody o gęstości ρ_w .

Wysokość słupa wody h jest ciśnieniowym równoważnikiem potencjału wody glebowej. W praktyce potencjał wody przy danej wilgotności $\Psi(\theta)$ wyrażany jest w cm słupa wody $h(\theta)$ lub też jako tzw. pF .

$$pF(\theta) = \log h \quad (21)$$

Składowa macierzysta potencjału wody glebowej związana jest więc z rozwinięciem powierzchni (p_{c2}) i jej geometrią (p_{c1}).

W glebach piaszczystych i pyłowych, przy wilgotnościach średnich i wysokich, zdecydowana większość wody wiązana jest przy pomocy menisków.

Znajomość wirtualnej struktury pozwala więc na podjęcie próby określenia retencji wodnej gleb o małej powierzchni właściwej zarówno na podstawie geometrii ośrodka trójwymiarowego, jak i na podstawie jego przekroju.

14.1. Określanie zależności potencjał kapilarny – wilgotność, na podstawie przekroju przez wirtualny ośrodek glebowy (2D)

Przedstawiony na rys. 15 przekrój trójwymiarowego ośrodka wirtualnego i związana z nim sieć porów dwuwymiarowych, (rys. 17, 18) mogą być podstawą wyznaczenia zależności wilgotność objętościowa – potencjał kapilarny osuszania. Założyłem, że wilgotność ośrodka przy danym potencjale jest wypadkową stanów wszystkich porów i równa się stosunkowi powierzchni porów „wilgotnych” do powierzchni przekroju ośrodka dwuwymiarowego [55]:

$$\theta(h) = \frac{\sum_{i=1}^n S_{pi}(h_i > h)}{\sum_{i=1}^n S_i} \quad (22)$$

gdzie:

$S_{pi}(h_i > h)$ – powierzchnia i-tego poru „wilgotnego”, którego ciśnienie kapilarne h_i , związane z największym przewężeniem równaniem 19, jest większe od ciśnienia h (tzn. ciśnienia wymuszającego osuszanie),

S_i – powierzchnia trójkąta, którego część stanowi por i-ty, suma ich równa się powierzchni przekroju,

n – liczba porów ośrodka.

Ponieważ nie wiadomo dokładnie jak zachodzi proces osuszania na poziomie pojedynczego poru, zbadalem więc dwa prawdopodobne jego mechanizmy:

1) por i-ty ulega osuszeniu jeśli ciśnienie zewnętrzne h jest większe od ciśnienia największego, a więc „najsłabszego” spośród trzech możliwych, przewężenia,

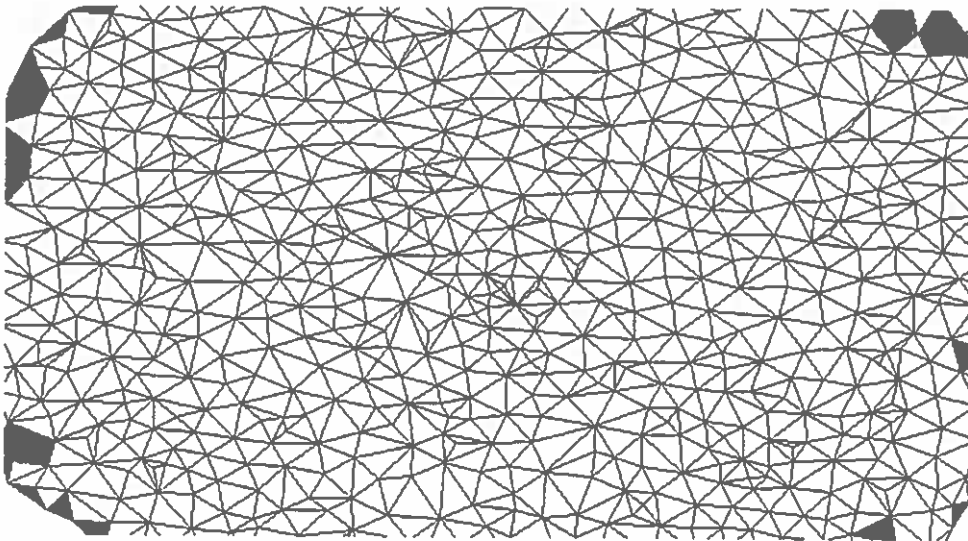
2) por i-ty ulega osuszeniu, jeśli co najmniej jeden por sąsiedni jest „suchy” i jeśli ciśnienie kapilarne przewężenia łączącego oba pory ze sobą jest mniejsze od ciśnienia zewnętrznego.

W pierwszym przypadku założyłem całkowitą niezależność procesu osuszania poszczególnych porów od siebie.

W drugim – osuszanie danego poru jest zależne od stanu porów sąsiednich. Osuszanie ośrodka porowatego traktowane jest tu jak propagacja fazy gazowej, krok po kroku zajmującej miejsce cieczy. W takim ujęciu faza gazowa tworzy układ połączonych ze sobą kanalików, mających zawsze kontakt z otoczeniem. Nie istnieją więc pory „suche” otoczone ze wszystkich stron przez pory „mokre”.

W pierwszym przypadku procedura obliczeniowa ma przebieg następujący. Przyjmowałem, że na początku procesu osuszania ośrodek jest nasycony. Dane wejściowe są następujące:

- a) powierzchnia porów,
- b) powierzchnia trójkątów porowych, tzn. zawierających pory,
- c) promień największego przewężenia każdego poru,
- d) liczba porów.



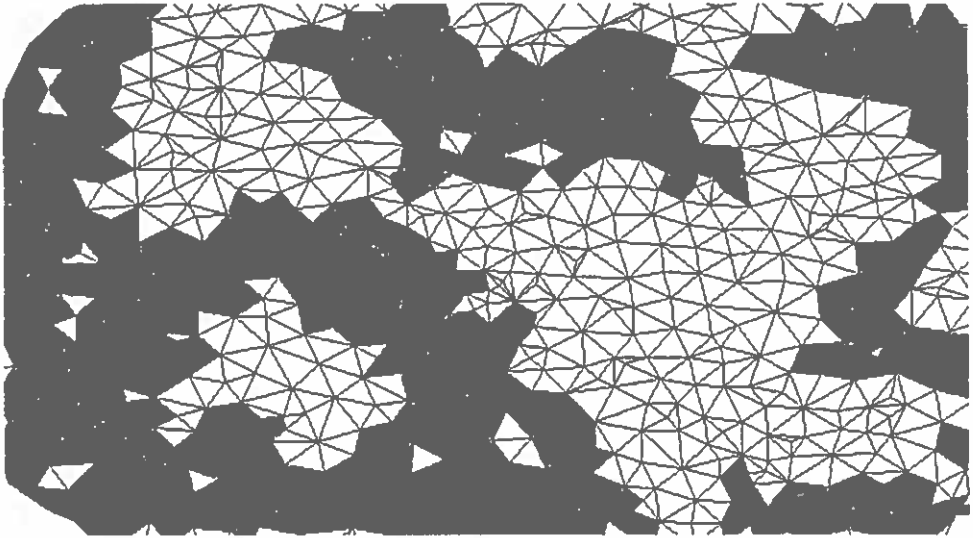
Rys. 32. Początkowy etap perkolacji sieci porów 2D nasyconych wodą
(kolor czarny – pory osuszone, białe – nasycone wodą)

Zakres zmienności promieni podzieliłem na określoną liczbę podzakresów np. 20, od największych do najmniejszych, przypisując im jednocześnie ciśnienie kapilarne. Następnie dla danego podzakresu sumowano powierzchnie porów, które nie ulegały „osuszeniu”, a na podstawie zależności 22 określałem wilgotność odpowiadającą przyjętemu potencjałowi h .

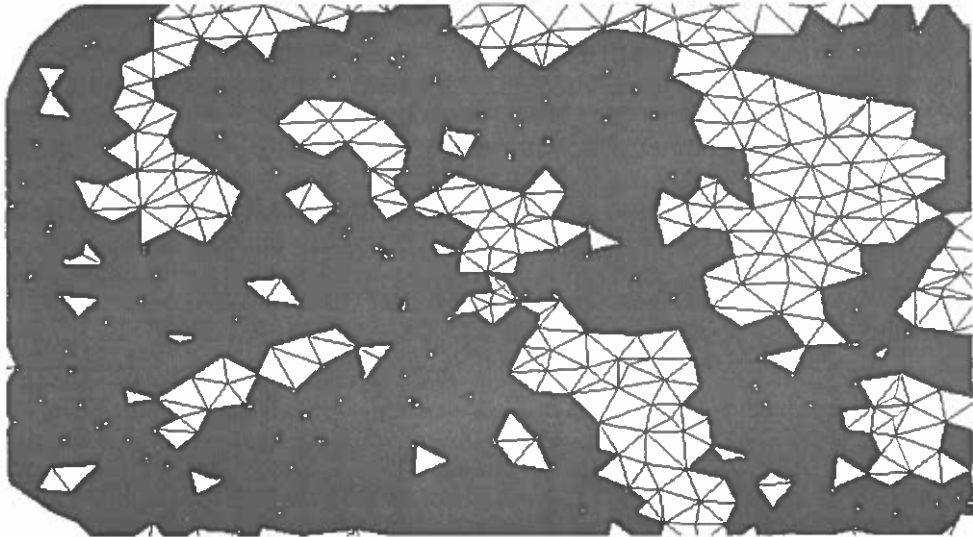
Obliczenia w drugim przypadku są bardziej skomplikowane. Procedura wstępna określa i zapamiętuje parametry poru, tak jak w pkt. 10.2, wraz z numerami tworzących go cząstek. Na tej podstawie dla każdego poru określone zostają pory sąsiednie. Jest oczywiste, że dwa przewężenia, tzn. rozpatrywanego poru i poru sąsiedniego, które łączą pory ze sobą, są sobie równe na zasadzie tożsamości. Dla większości porów liczba sąsiadów wynosi 3. Dla tych spośród nich, które znajdują się na powierzchni liczba ta może wynosić 2 lub 1. Jeśli np. dany por ma tylko dwóch sąsiadów oznacza to, że ma on kontakt z otoczeniem ośrodka (atmosferą) poprzez jedno przewężenie.

Por mający kontakt bezpośredni lub pośredni (tzn. poprzez inne pory) z otoczeniem nazwałem **porom aktywnym**. Na każdym etapie osuszanie ośrodka warunkiem koniecznym ewakuacji cieczy z poru jest jego kontakt z co najmniej jednym porom aktywnym. W tym przypadku por może być opróżniony przy udziale wszystkich trzech przewężeń, a nie tylko największego z nich, jak to miało miejsce w pierwszym przypadku.

Dlatego osuszanie ośrodka nasyconego rozpoczyna się od porów powierzchniowych, które są zawsze aktywne. Rys. 32 przedstawia początkowy etap osuszania sieci porów, na którym kolor czarny i biały odpowiada porom „suchym” i „mokrym” (odpowiednio). Kolor czarny widoczny jest tylko w pobliżu obwodu układu, ponieważ na tym etapie osuszania pory aktywne mogą znajdować się jedynie w tych miejscach. Proces ten jest przykładem perkolacji sieci dwuwymiarowej o liczbie koordynacyjnej węzłów 3 [11, 27, 28, 29, 35, 72, 77], ponieważ każdy por ma taką właśnie ilość połączeń z porami



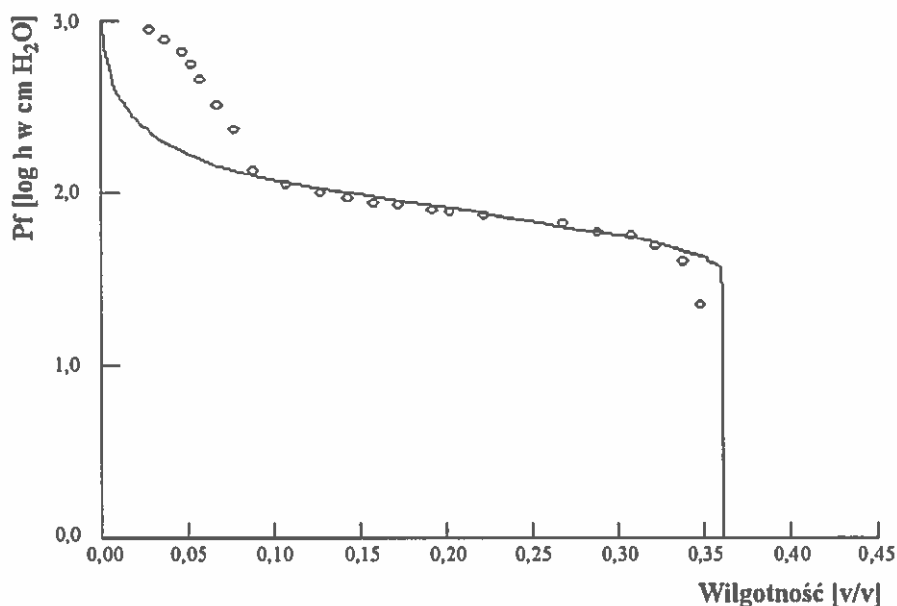
Rys. 33. Perkolacja sieci tuż przed osiągnięciem ciśnienia krytycznego



Rys. 34. Perkolacja sieci tuż po przekroczeniu ciśnienia krytycznego

sąsiednimi. Istotna różnica w stosunku do cytowanych prac polega na tym że, przedmiotem badań jest sieć realnego układu porów oraz to że, każdy element sieci (przewężenie) ma znaną wartość ciśnienia kapilarnego (wyznaczoną na podstawie stworzonej wcześniej geometrii ośrodka).

Prezentowane podejście opisu osuszania układu porowatego nie ma odnośników w literaturze z zakresu fizyki gleby i jest oryginalnym osiągnięciem niniejszego opracowania.



Rys. 35. Zależność potencjał wodny-wilgotność dla kulek szklanych obliczona na podstawie modelu 2D, przy założeniu niezależności osuszania porów

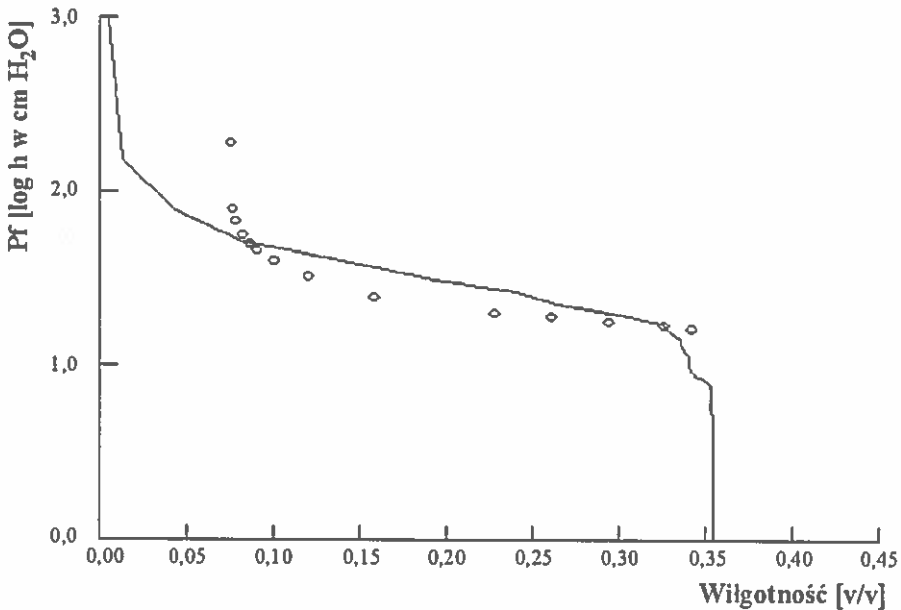
Rys. 33, 34 przedstawiają kolejne fazy procesu osuszania. Pierwszy z nich pokazuje stan sieci porów tuż przed osiągnięciem ciśnienia krytycznego, przy którym znaczna ich ilość jest już aktywna, jednak nie istnieje jeszcze ciągła ścieżka tych porów łącząca przeciwległe strony układu.

Stan taki został osiągnięty w następnym kroku (przyrost ciśnienia o dP), a odpowiadający mu obraz perkolacji sieci przedstawiłem na rysunku 34.

Ciśnienie krytyczne ośrodka glebowego jest mierzalnym i często mierzonym jego parametrem, nazywanym niekiedy ciśnieniem przebiccia (ang. bubbling pressure lub air-entry suction). Należy podkreślić, że jego wartość jest niezależna od rozmiarów sieci (liczby jej elementów). Zgodnie z teorią perkolacji po przekroczeniu tego ciśnienia, przeciwległe powierzchnie dowolnie dużego ośrodka można połączyć linią łamaną przechodzącą tylko przez pory „suche”. Przykładowe porównanie wyników pomiarów próbek rzeczywistych dwóch ośrodków piaszczysto-pylastych z tab. 3 z wynikami obliczeń, wykonane przy założeniu niezależności osuszania porów (mechanizm pierwszy), przedstawiłem na rysunkach 35 i 36.

Pełniejsza dokumentacja dotycząca uzyskanych krzywych pF dostępna jest w publikacji [19]. Punkty odnoszą się do pomiarów, linie ciągłe – do wyników obliczeń. Obliczenia wykonałem dla wszystkich ośrodków przedstawionych w tab. 3. Współczynnik korelacji dla nich wynosił od 86 do 95%.

Wcześniej wspomniano, że tworzone przy pomocy opisanych procedur ośrodki wirtualne wykazują nieuporządkowany charakter. Jeśli jest to prawdą, należy oczekiwać,

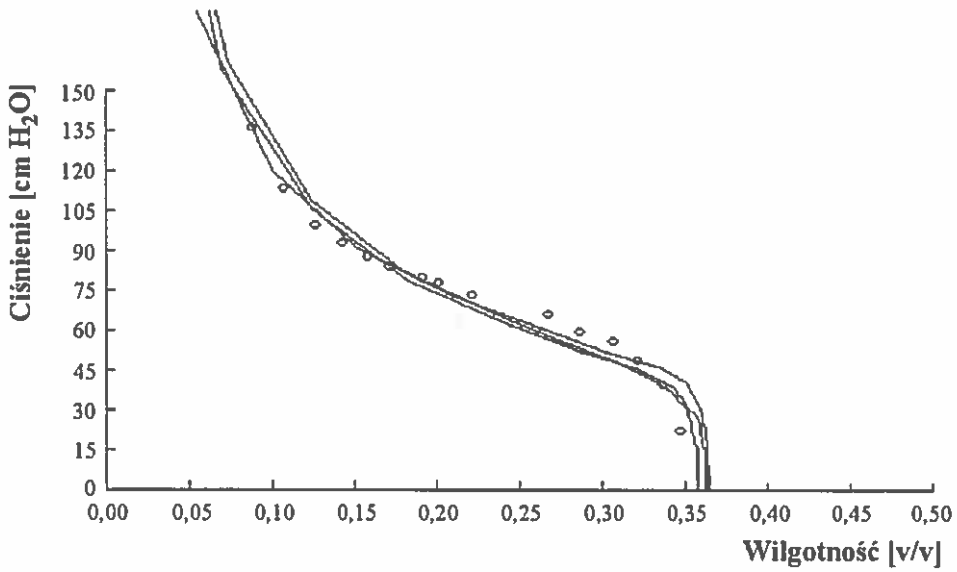


Rys. 36. Potencjał wodny-wilgotność dla piasku rzecznego z tab. I obliczona na podstawie modelu 2D, przy założeniu niezależności osuszania porów

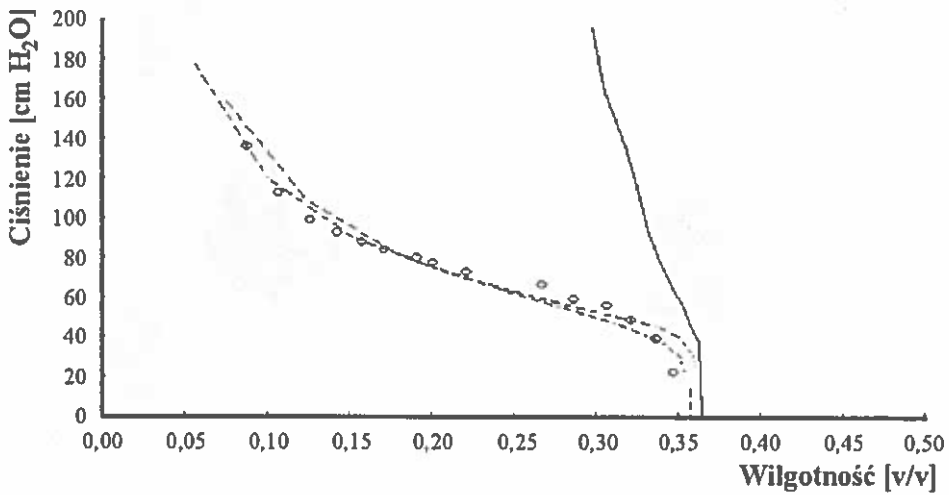
że krzywe retencji określone na podstawie różnych przekrojów, winny być identyczne. Przykład takiej weryfikacji przedstawiono na rys. 37. Trzy linie ciągłe odnoszą się do trzech wzajemnie prostopadłych przekrojów wirtualnego ośrodka składającego się z kuleczek szklanych (patrz tab. 3). Wyniki doświadczalne zaznaczono punktami. Widać, że otrzymane przebiegi różnią się nieznacznie, co jest dobrym potwierdzeniem wcześniej postulowanego nieuprządkowanego charakteru ośrodka.

Należy podkreślić, że przedstawione na tym rysunku wyniki uzyskano wprowadzając pewną modyfikację do pierwszego mechanizmu opróżniania porów. Mechanizm pierwszy dopuszcza tylko dwa stany poru: pełny ("mokry") lub pusty ("suchy"). Wiadomo jednak, że taki mechanizm jest uproszczeniem rzeczywistego. Proces osuszanie pojedynczego poru powinien przebiegać wg. schematu przedstawionego na rys. 39 a, b, c. Pierwszy z nich przedstawia stan początkowy, w którym por jest wypełniony wodą (39a).

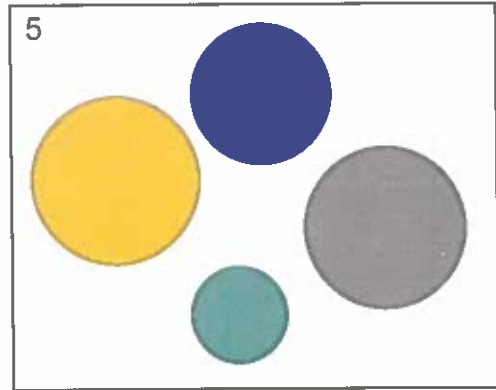
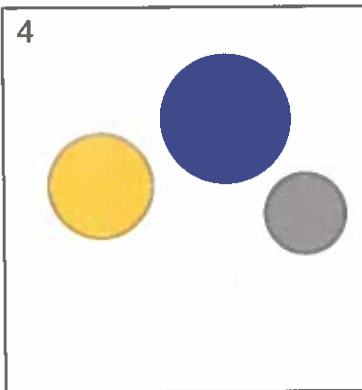
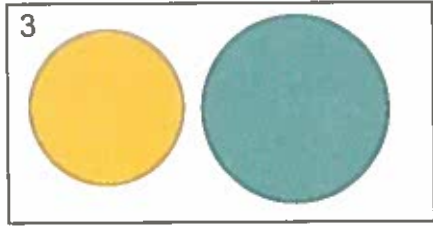
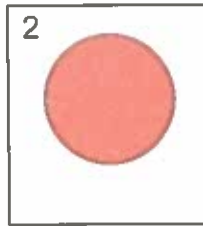
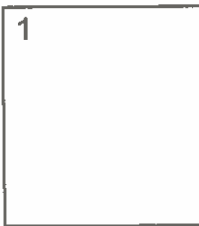
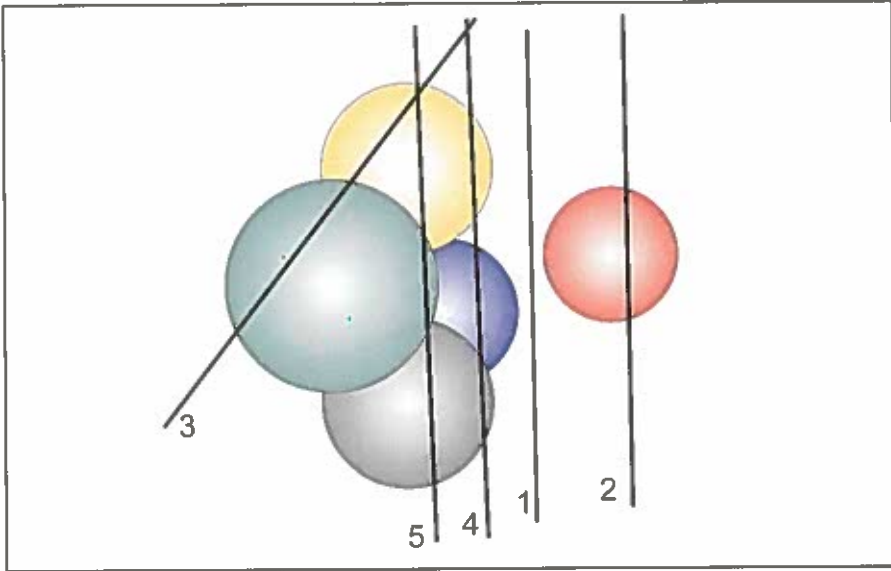
Spośród trzech przewężeń, „najsłabszym” jest największe z nich. Opróżnianie poru rozpocznie się od niego. Gdy ciśnienie zewnętrzne osiągnie wartość ciśnienia kapilarnego właściwą dla tego przewężenia, nastąpi ewakuacja jedynie części, a nie całości, wody z poru (rys. 39b). Trwa ona do chwili, gdy ciśnienia kapilarne menisków, powstających w pobliżu obu pozostałych przewężeń, nie zrównają się z ciśnieniem zewnętrznym. Na tym etapie z opróżnianych porów usuwana jest na ogół większość zawartej w nich wody. Reszta, tzw. woda manżetowa (ang. lens water [49]), ewakuowana jest stopniowo w miarę wzrostu ciśnienia (rys. 39c). Ilość wody związanej z manżetą wodną, utworzoną



Rys. 37. Trzy krzywe retencji otrzymane na podstawie trzech wzajemnie prostopadłych przekrojów ośrodka trójwymiarowego



Rys. 38. Krzywa wilgotność-potencjał wodny przy różnych mechanizmach opróżniania porów (punkty – wyniki doświadczeń)



Rys. 39. Trzy fazy osuszania pojedynczego poru 2D:
 a) por pełny, b) ciśnienie zewnętrzne > ciśnienia kapilarnego przewężenia,
 c) stan przy dalszym wzroście ciśnienia zewnętrznego

przez dwie cząstki, wyliczałem z powierzchni trójkąta utworzonego przez środki dwóch cząstek i okręgu krzywizny menisku, pomniejszą o sumę pól trzech wycinków kół zawartych w tym trójkącie: dwóch należących do cząstek i trzeciego – do menisku.

Wyniki uzyskane na podstawie tego modelu, przedstawione na rys. 37, wykazują lepszą korelację z wynikami eksperymentu, szczególnie w odniesieniu do wysokich i średnich wilgotności.

Wszystkie powyżej przedstawione wyniki uzyskałem zakładając pierwszy mechanizm opróżniania porów (lub jego modyfikację).

Częściowo można przewidzieć konsekwencje przyjęcia drugiego, tzn. perkolacyjnego mechanizmu osuszania porów. Ponieważ proces ten, w odniesieniu do każdego poru, uzależniony jest od jednoczesnego spełnienia dwóch warunków, więc w początkowej fazie osuszanie zachodzi powoli. Po przekroczeniu ciśnienia krytycznego osuszanie powinno następować bardzo szybko, tzn. małym przyrostom ciśnienia winny odpowiadać duże zmiany wilgotności. Tego jednak nie stwierdziłem, co widać na rys. 38. Krzywa ciągła, odpowiadająca perkolacyjnemu osuszaniu, przebiega powyżej zarówno dwóch krzywych otrzymanych na podstawie mechanizmu omawianego wcześniej, jak i punktów doświadczalnych.

Podobną prawidłowość obserwuje się w odniesieniu do pozostałych ośrodków z tab. 3, co dowodzi, że ten mechanizm osuszania źle opisuje proces osuszania porów ośrodka dwuwymiarowego.

Wytłumaczenie tego faktu związane jest ze spostrzeżeniem dotyczącym różnic między ośrodkiem trójwymiarowym i, powstałym z niego w wyniku przekroju, obiektem płaskim, które przedstawione zostały w rozdziałach 12 i 13. Ośrodek dwuwymiarowy może mieć, i ma, pory o przewężeniach bliskich zera. Nawet pobieżna analiza rys. 15, przedstawiającego przekrój wirtualnego ośrodka, pozwala zauważyć istnienie ścieżki składającej się ze stykających, i niemal stykających się, cząstek łączących przeciwległe boki sieci. Przewężenia między nimi są bardzo małe lub zerowe, co odpowiada dużym wartościom ciśnienia kapilarnego. W takim przypadku drenaż układu musi być utrudniony, co tłumaczy wynik przedstawiony na rys. 38.

W rzeczywistości wielkość przewężeń jest pochodną upakowania wypukłych cząstek fazy stałej i w żadnym przypadku nie może być zerowa. W tym sensie wyniki analizy przekroju należy uważać za nieadekwatne do struktury ośrodka trójwymiarowego.

14.2. Określanie zależności potencjał kapilarny – wilgotność trójwymiarowego, polidispersyjnego ośrodka glebowego (3D)

Procedury obliczeń w przypadku wirtualnego ośrodka trójwymiarowego były analogiczne, lecz bardziej skomplikowane ze względu na blisko 30-krotnie większą liczbę strukturalnych elementów składowych, w porównaniu z ośrodkiem dwuwymiarowym. Ponieważ Borland PASCAL nie ma udogodnień językowych umożliwiających operowanie na zmiennych większych jak 64 kB, a zbiory jakie były niezbędne, musiały być przynajmniej 20 razy większe, należało stworzyć kilka podprogramów powiększających możliwości pamięciowe tego języka.

Wilgotność ośrodka w funkcji ciśnienia $\theta(h)$ określano na podstawie zależności:

$$\theta(h) = \frac{\sum_{i=1}^n V_{pi} (h_i > h)}{\sum_{i=1}^n V_i} \quad (23)$$

gdzie:

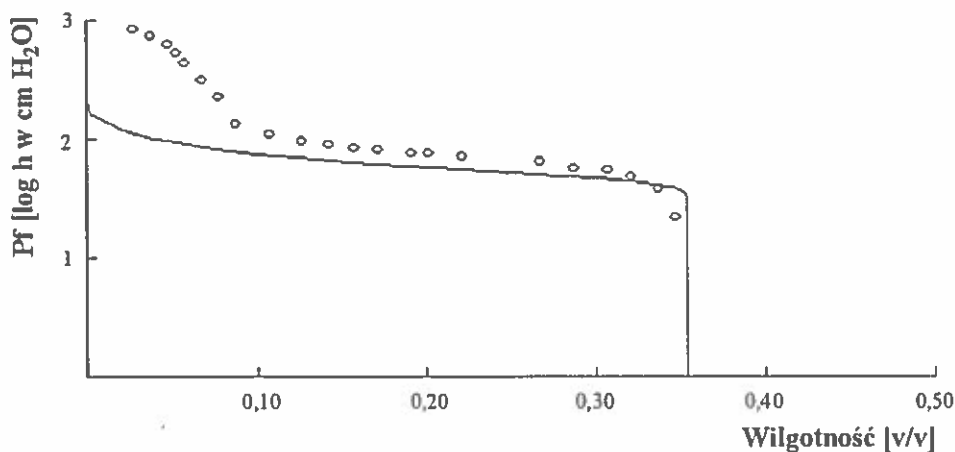
$V_{pi} (h_i > h)$ – objętość poru i-tego, którego ciśnienie kapilarne h_i , związane z przewężeniem jest większe niż ciśnienie zewnętrzne h ,

V_i – objętość komórki czworościennej zawierającej por i-ty.

Por może mieć tylko dwa stany: pusty lub pełny. Sumowanie przeprowadza się po tych spośród nich, które przy danym ciśnieniu h , pozostają pełne, co oznacza, że ciśnienie kapilarne największego przewężenia jest większe od ciśnienia zewnętrznego.

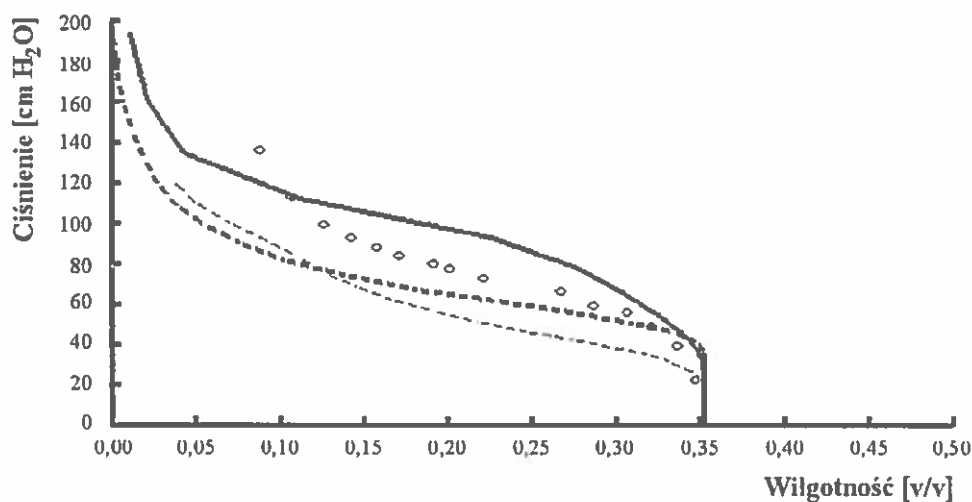
Podobnie jak poprzednio, możliwe są tu dwa podejścia w zależności od przyjętego mechanizmu opróżniania porów.

W pierwszym zakłada się, że pory opróżniają się niezależnie od siebie, a czynnikiem decydującym jest ciśnienie kapilarne „najsłabszego” przewężenia. Wielkość przewężenia określano na dwa sposoby przypisując im promień geometryczny, zgodnie z opisem przedstawionym w pkt. 9.2. Przyjmowałem cylindryczny jego kształt, co pozwalało utożsamiać go z promieniem krzywizny menisku. Przykładowy wynik obliczeń dla kuleczek szklanych przedstawia rys. 40. Porównując go z rys. 35, przedstawiającym



Rys. 40. Zależność potencjał-wilgotność dla kuleczek szklanych z tab. 3 na podstawie modelu 3D (przewężenie określone na podstawie promienia okręgu wpisanego)

tę samą zależność uzyskaną na podstawie modelu dwuwymiarowego, widać, że wyniki uzyskane na podstawie modelu 3D wykazują gorszą korelację z punktami doświadczalnymi, dając zbyt niskie wartości wilgotności, szczególnie w niskim ich zakresie. Lepszą



Rys. 41. Porównanie wyników trzech modeli 3D retencji wodnej kuleczek szklanych z punktami doświadczalnymi (objaśnienia w tekście)

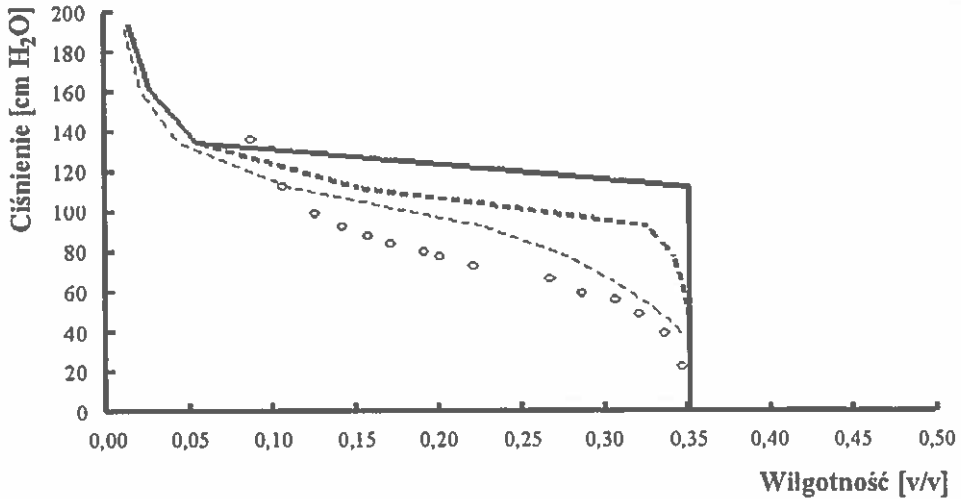
niewielką zgodność z doświadczeniem uzyskałem charakteryzując przewężenia przy pomocy wzoru 15. W tym przypadku, w znacznym zakresie wilgotności oba przebiegi (teoretyczny i doświadczalny) są prawie równoległe, co pokazuje rys. 41. Na rysunku tym wartości doświadczalne zaznaczono kółkami, linią przerywaną cienką – przebieg krzywej z modelu 1, a przerywaną grubą – z modelu 2.

Krzywa gruba, ciąga dotyczy wyników modelu perkolacyjnego osuszania ośrodka 3D. Tym razem model ten najlepiej zgadza się z punktami doświadczalnymi, jakkolwiek w zakresie niskich wilgotności różnice są znaczne. Wynika to z rozkładu przedstawionego na rys. 24, na którym granica lewostronna przewężenia jest większa od zera. W konsekwencji perkolacja ośrodka 3D nie napotyka na przeszkody, jakie miały miejsce podczas analogicznego procesu w przypadku 2D.

Z analizy mechanizmu procesu perkolacyjnego osuszania ośrodka porowatego wynika, że winien być on zależny nie tylko od jego struktury wewnętrznej, lecz również od warunków zewnętrznych na jego powierzchni. Bezpośrednim potwierdzeniem tych przypuszczeń są wyniki doświadczalne [84].

Występowanie tego efektu można dostrzec w eksperymentach w, których prowadzone są pomiary profilu wilgotności próbek glebowych w trakcie procesu osuszania na płytach porowatych [75]. Termin „warunki zewnętrzne na powierzchni” odnosi się do wspomnianych już wcześniej porów aktywnych, tzn. do porów, które mają kontakt bezpośredni, lub pośredni tzn. poprzez inne pory aktywne, z otoczeniem.

Jest oczywiste że, proces osuszania nasyconej próbki gleby, znajdującej się na płycie porowatej, musi rozpocząć się od porów powierzchniowych, tzn. znajdujących się w górnej warstwie, ponieważ tylko one mają kontakt z otoczeniem, więc są porami aktywnymi. W miarę osuszania liczba takich porów wzrasta, szczególnie po przekroczeniu ciśnienia krytycznego. Ponieważ w początkowym stadium desaturacji pory aktywne



Rys. 42. Zależność wilgotność–potencjał dla kulek szklanych przy różnej ilości początkowej porów aktywnych (punkty – wartości pomiarowe)

znajdują się tylko w górnej (powierzchniowej) warstwie, należy przypuszczać, że geometria próbki może mieć wpływ na wyniki pomiarów. Na przykład próbka wysoka winna mieć inną charakterystykę wilgotność – potencjał w porównaniu do próbki niskiej i płaskiej, gdyż w obu przypadkach stosunek całkowitej liczby porów i porów aktywnych na początku eksperymenty są różne, to oznacza że, w obu przypadkach drenaż porów będzie zachodził inaczej. Hipotezę tą potwierdzają badania symulacyjne, których wyniki przedstawiłem na rys. 42. Dotyczą one zależności wilgotność – potencjał dla kulek szklanych (tab. 3) obliczonych na podstawie geometrii trójwymiarowego ośrodka przy założeniu perkolacyjnego charakteru osuszania jego porów [56].

Analogicznie jak w przypadku 2D, osuszenie dowolnego poru może nastąpić przy jednoczesnym spełnieniu 2 warunków:

- 1) ciśnienie kapilarne przynajmniej jednego spośród czterech jego przewężeń jest mniejsze (równe) ciśnieniu zewnętrznemu,
- 2) sąsiedni por, w stosunku do osuszanego, kontaktujący się z nim poprzez przewężenie spełniające warunek 1, musi być porow aktywnym.

Parametrem krzywych jest początkowa ilość porów aktywnych, których wartości wynoszą: krzywa ciągła gruba – 3, gruba przerywana – 332, cienka przerywana – 3571, tzn. całkowitej liczbie porów na powierzchni. Liczba analizowanych porów tego układu była równa maksymalnej dostępnej dla Borland PASCALA w tej konfiguracji ilości, tzn. 30 000, co wiązało się z plikiem o objętości 2 Mb. Otrzymane wyniki są teoretycznym uzasadnieniem rezultatów doświadczalnych [84] i sugerują, że krzywa retencji wodnej gleby jest zależna nie tylko od rozkładu porów, lecz również od przyjętej metodyki pomiaru.

14.3. Podsumowanie przedstawionych metod określania zależności wilgotność – potencjał kapilarny ośrodka porowatego

Określenie retencji wodnej na podstawie składu granulometrycznego jest od dawna celem wielu prac dotyczących ośrodków rozdrobnionych, a w szczególności fizyki gleby. Powyżej przedstawiłem kilka oryginalnych propozycji, których wspólną cechą i punktem wyjścia jest wirtualny ośrodek granularny. Powstaje on w wyniku symulacji upakowania cząstek, których skład granulometryczny jest taki sam jak badanego ośrodka.

Przedstawione modele obliczania krzywej retencji wodnej ośrodka porowatego mają jedną wspólną cechę: **wielkość makroskopowa (wilgotność) określana na podstawie uśrednienia stanów mikro wszystkich porów układu.**

Można je podzielić w zależności od:

- a) typu analizowanego obiektu (dwu- lub trójwymiarowy),
- b) przyjętego mechanizmu osuszania porów (niezależny lub perkolacyjny),
- c) sposobu określania promienia krzywizny menisku związanego z przewężeniem.

Ad a) badałem wirtualną strukturę trójwymiarową oraz obraz powstały z niej w wyniku przekroju płaskiego.

Ad b) por ulega osuszeniu gdy ciśnienie zewnętrzne będzie równe ciśnieniu kapilarnemu związanemu z jednym przynajmniej jego przewężeniem. Warunek ten był wystarczający dla mechanizmu zakładającego wzajemną niezależność osuszania porów.

W mechanizmie perkolacyjnym był to warunek jedynie konieczny – drugi warunek także uwzględnić stan (aktywny lub nie) przewężeń porów sąsiednich.

Ponadto analizując mechanizm osuszania pojedynczego poru uwzględniono wariant w którym może znajdować się nie tylko w stanie „mokry – suchy” lecz, że osuszany jest on stopniowo w miarę wzrostu ciśnienia. Obliczenia tego typu udało się wykonać tylko dla niezależnego mechanizmu osuszania porów dwuwymiarowych, a ich rezultaty wykazywały najlepszą zgodność z doświadczeniem.

Ad c) zastosowałem dwa różne sposoby określania promienia krzywizny tylko dla układów trójwymiarowych, dla przekrojów promień ten równał się zawsze połowie odległości między powierzchniami cząstek tworzących por.

Reasumując wyniki dotyczące wyliczania krzywych retencji na podstawie składu granulometrycznego można stwierdzić, że najlepszą zgodność z doświadczeniem otrzymałem dla krzywej uzyskanej na podstawie przekroju, w których osuszanie porów było niezależne, przy czym odbywało się ono stopniowo w miarę wzrostu ciśnienia zewnętrznego (rys. 37).

15. UWAGI KOŃCOWE

Ze względu na wielką różnorodność gleb trudno, wyobrazić sobie rozwiązanie ogólne wszystkich problemów mogących mieć związek z tytułem niniejszej pracy. Jak wiadomo istnieje bardzo niewiele technik pomiarowych, które dają zastosować się do wszystkich gleb. Przewidywanie ich właściwości jest zadaniem prawdopodobnie jeszcze trudniejszym.

Z tego powodu badania ograniczyłem do wybranych ośrodków modelowych o składzie granulometrycznym piasku i pyłu. Względy techniczne nie pozwalają na razie badać przy pomocy tej metodyki gleb zawierających frakcję ilastą z dwóch powodów:

- 1) kształt cząstek ilastych znacznie odbiega od kształtu kuli,
- 2) proporcje ilościowe liczby cząstek są w zasadzie zawsze zdominowane w takich przypadkach przez frakcje najdrobniejszą tzn. przez il.

Wydaje się jednak, że istnieje teoretyczna możliwość przezwyciężenia tej trudności przez tworzenie wirtualnej struktury powstałej nie tylko z granul pierwotnych (z tzw. elementarnych cząstek szkieletu glebowego), tak jak to robiono w całej niniejszej pracy, lecz poprzez upakowywanie:

- 1) bądź tylko agregatów,
- 2) bądź cząstek frakcji piaszczystej i pyłowej oraz agregatów ilastych.

W obu powyższych przypadkach dane wejściowe do symulacji muszą być poszerzone o skład agregatowy badanej gleby.

W takim przypadku przedmiotem zainteresowania byłyby nie pojedyncze cząstki ilaste, lecz ich agregaty składające się z np. 10 000 czy 20 000 cząstek.

Z przeprowadzonych badań wynika, że na podstawie stanu mikrostruktury można przewidywać również inne niezmiernie istotne charakterystyki fizyczne gleby, takie jak: współczynnik przewodnictwa wodnego, współczynnik przewodnictwa ciepła i dyfuzji gazów [48]. Przewidywania te oparte są na faksie, że każdy z wymienionych współczynników określony jest, bądź przez strukturę porów (przestrzenną i ich rozkład), bądź przez strukturę fazy stałej ośrodka, bądź też przez oba wymienione czynniki jednocześnie. Dane dotyczące porów i fazy stałej nie są w świetle przeprowadzonych badań problemem. Jest nim natomiast sposób ich powiązania z ww. charakterystykami fizycznymi gleby.

Równie interesujących rezultatów można oczekiwać w dziedzinie mechaniki ośrodków rozdrobnionych.

16. WNIOSKI

Celem pracy było rozwiązanie problemów metodycznych związanych z opisem mikrostruktury fazy stałej i porów mineralnych gleb piaszczysto-pyłastych i innych ośrodków ziarnistych z jednej, oraz predykcja wybranych właściwości fizycznych z drugiej strony.

Realizacja tych zadań pozwala na sformułowanie następujących wniosków szczegółowych:

a) metoda komputerowej symulacji upakowania cząstek kulistych pozwala odtwarzać geometrię ośrodka granularnego o znanym składzie granulometrycznym,

b) warunkiem podobieństwa dwóch ośrodków: rzeczywistego i wirtualnego jest ich reprezentatywność oraz równość porowatości i składów granulometrycznych,

c) opracowane modele porów oraz stworzony program tesselacji pozwalają podzielić objętość (lub powierzchnię) ośrodka na elementy składowe spójnie wypełniające badany obiekt,

d) metoda symulacji upakowania cząstek sferycznych pozwala sposób określać rozkład liczby punktów kontaktu dowolnego ośrodka granularnego o ile kształt jego cząstek daje przybliżyć się bryłą wypukłą,

e) liczbą punktów kontaktu dowolnej cząstki w granularnym ośrodku monodispersyjnym może być obliczona na podstawie zaproponowanej zależności:

$$\sqrt{N_c} = 1,845 \frac{R_c}{R_m} + 1,636 \quad (24)$$

f) porównanie odpowiadających sobie rozkładów estymatorów porów dwu- i trójwymiarowych ośrodka granularnego dowodzi że, są one różne mimo równych ich porowatości, a przedstawiona interpretacja stereologiczna pozwala wyjaśnić przyczynę stwierdzonych różnic,

g) otrzymane rozkłady porów dwu- i trójwymiarowych stworzyły możliwość wyznaczenia zależności wilgotność – potencjał macierzysty ośrodków,

h) przedstawiono kilka modeli pozwalających określać zależność wilgotność – potencjał macierzysty, których wyróżnikami są:

- wymiar analizowanego ośrodka: 2D lub 3D,
- założony mechanizm osuszania porów: niezależny lub perkolacyjny,
- dopuszczalne stany pojedynczego poru: pusty – pełny lub częściowo pełny,

– formuła opisująca promień przewężenia.

i) w opracowanych modelach wielkość makroskopowa, tzn. wilgotność, jest wynikiem uśrednienia stanów wszystkich porów ośrodka,

j) najlepszą zgodność uzyskanych krzywych retencji wodnej badanych ośrodków piaszczysto – pylastych uzyskałem na podstawie modelu porów dwuwymiarowych przy założeniu niezależnego mechanizmu ich osuszania. Jeszcze lepszą zgodność, co prawda w ograniczonym zakresie wilgotności, uzyskano uwzględniając wodę manżetową znajdującą się w pobliżu punktów styku cząstek.

k) badania nad perkolacyjnym mechanizmem procesu osuszania ośrodka, pozwalają stwierdzić że:

– krzywe retencji wyliczone na podstawie analizy przekrojów znacznie różnią się od wyników doświadczalnych, co wynika z braku drożności układu porów na przekroju,

– uwzględnienie zależnego mechanizmu osuszania porów 3D pozwala uzyskać lepszą zgodność teoretycznej krzywej retencji z wynikami doświadczalnymi, (w porównaniu do modelu 3D, w którym osuszanie porów było niezależne od siebie).

l) geometria próbki glebowej wpływa na wyniki pomiarów wilgotność – potencjal wodny gleby.

LITERATURA

1. Allen T.: *Particle size measurement*. London, Chapman and Hall, 1975.
2. 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. of Int. Workshop for Estimating the Hydraulic Properties of Unsaturated Soil, Riverside, California, USDA, ARS 1989.
3. Arya, L. M., Paris J. F.: *A physicoempirical model to predict the soil moisture from particle size distribution and bulk density data*. Soil. Sci. Soc., Am. J. vol. , 45.
4. Bayramilli E., Ven van de G. M., Mason S. G.: *Tensiometric studies on wetting I. Some effects of surface roughness (theoretical)*. Can. J. of Chemistry. 59. 1981.
5. Bloemen G. W.: *Calculation of Hydraulic conductivities of soils from texture and organic matter content*. Z. Pflanzenernahr. Bodenkd. 143. 1980.
6. Bodziony J.: *On the relationship between basic stereological characteristics*. Stereol. Jugosl. 3. 1981.
7. Boerdijk A. H.: *Some remarks concerning close-packing of equal spheres*. Philips Res. Rep. 7, 1952.
8. Brewer R.: *Fabric and Mineral analysis of soil*. Kreger. N-Y. 1976.
9. Buabid R., Nater E. A., Barak P.: *Measurement of pore size distribution in a Lamellar Bt horizon using epifluorescence microscopy and image analysis*. Geoderma, 53, 1992.
10. Case C. M.: *Physical principles of flow in unsaturated porous media*. Oxford Univ. Press. New York, 1994.
11. Chatzis I., Dullien F. A. L.: *Modelling pore structure by 2-D and 3-D networks with application to sandstones*. J. Canad. Petrol. Technology. 1. 1977.
12. Chretien J.: *Role du squelette dans l'organisation des sols*. INRA, Paris 1986.
13. Czachor H.: *Essais sur modele de l'influence d'hydrophobisation de surface et de geometrie de la phase solide du milieu poreux sur la tension capillaire*. ZPPNR z. 312. 1986.
14. Czachor H.: *Granulometric distribution and soil porosity*. ZPPNR. 388. 1990.
15. Czachor H.: *Laplace's pressure in noncylindrical capillary tubes*. ZPPNR. 281. 1982.
16. Czachor H.: *Modeling of capillary phenomena in soil*. ZPPNR. 304. 1985.
17. Czachor H., Guc A.: *2D- versus 3D- pore size distributions- Equal or different*. Proceedings of International Conference on the Quantitative Description of Materials Microstructure – QMat -97. Warsaw 1997.
18. Czachor H., Guennelon R., Gros R.: *Base de la modelisation d'un espace poral des mileux formes des particules*. Materiały 3 Konferencji ISTVS Off the road vehicles and machinery in agriculture, earthwork and forestry. Warszawa 1986.
19. Czachor H., Konstankiwicz K.: *Simulating particle packing for soil porosity investigations*. Intern Agrophysics. 9. 1995.
20. Debbas S., Rumpf H.: *On the randomness of beds packed with spheres or irregular shaped particles*. Chem Eng. Sci. 21. 1966.
21. Dobrzański B., Zawadzki S.: *Gleboznawstwo*. PWRiL. Warszawa 1995.
22. Dullien F. A. L.: *Porous Media. Fluid transport and pore structure*. Academic Press, Inc. 1992.

23. Eggeleston J. R., Peirce J. J.: *Dynamic programming analysis of pore space*. Europ. J. Soil. Sci. 46, 4. 1995.
24. Elonen P.: *Particle-size analysis of soil*. Suomen Maataloustieteellisen Seuran Julkaisuja, Acta Agraria Fennica. 122. 1971.
25. Everett D. H.: *Some thermodynamic aspects of wetting and adhesion*. Pure and Appl. Chem. 52. 1980.
26. Ewing R. P.: *A study of surface sealing using network modelling and image analysis*. Praca doktorska wykonana na Wydz. Rolniczym University of Minnesota 1992.
27. Fatt I.: *The network model of porous media. I. Capillary pressure characteristics*. Petroleum Transc. AIME. v. 207. 1956.
28. Fatt I.: *The network model of porous media. II Dynamic properties of a single size tube network*. Petroleum Transc. v. 207. 1956.
29. Fatt I.: *The network model of porous media. III. Dynamic properties of network with tube radius distribution*. Petroleum Transc. AIME. v. 207. 1956.
30. Fies J. C.: *Analysis of textural porosity relative to skeleton particle size, using mercury porosimetry*. Soil Sci Soc. Amer J. v. 56. no. 4. 1992.
31. Finney J. L.: *Modelling of liquid and amorphous solids*. Inter. Center for Theoretical Physics, Spring Collage on Amorphous solids. Trieste 1982.
32. Finney J. L.: *Random packings and structures of simplex liquids. The geometry of random close packing*. Proc. Roy. Soc. London. A. 319. 1970.
33. Finney J. L.: *Random packing and the structure of simple liquids. II. The molecular geometry of simple liquids*. Proc. Roy. Soc. Lond. A. 319. 1970.
34. Finney J. L., Wallace J.: *Interaction correlation function: new sensitive characterisation of noncrystalline packed structure*. J. Non-crystalline Solid. 49. 1981.
35. Fogelholm R.: *The conductivity of large percolation network samples*. J. Phys. C: Solid St. Physics. 13. 1980.
36. Genuchten van M. Th., Leij F. J.: *On estimating the hydraulic properties of unsaturated soils*. Proceeding of the international Workshop on Indirect Methods for estimating the hydraulic properties of unsaturated soils. Riverside. CA, U. S Salinity Laboratory. 1989.
37. Genuchten van R.: *Calculating the unsaturated hydraulic conductivity with a new closed-form analytical model*. Res. Report No. 78-WR-08, Water Resources Program, Department of Civil Engineering, Princeton University, Princeton, New Jersey 1978.
38. Globus A. S.: *Ekspierimentalna gidrofizika poczw*. Nauka, Leningrad. 1968.
39. Gołębiewski C., Luczywek E., Walicki E.: *Zbiór zadań z mechaniki płynów*. PWN, Warszawa, 1975.
40. Govindarao V. M. H.: *Prediction of location of particles in the wall region of a randomly packed bed of spheres*. J. Soil. Sci. 39. 1988.
41. Govindarao V. M. H.: *Voidage profile in packed beds by multi-channel model: effect of curvature of the channels*. Chem. Eng. Sci. Eng. 45. 1. 1990.
42. Gupta S. C., Larson W. E.: *A model for predicting packing density of soils using particle size distribution*. Soil Sci. Soc. Amer. Journal 45. 1979.
43. Gupta S. C., Larson W. E.: *Estimating soil water characteristics from particle size distribution, organic percent, and bulk density*. Soil Water Res. 15. 6. 1979.
44. Haughey D. P., Beveridge G. S.: *Local voidage variation in a randomly packed beds of equals-sized spheres*. Chem. Eng. Sci. 21. 1966.
45. Haverkamp R., Vauclin M.: *A comparative study of three forms of the Richard's equation used for predicting one-dimensional infiltration in unsaturated soil*. Soil Sci. Soc. Amer. Journal 45. 1981.
46. Heines W. B.: *Studies in the physical properties of soils. V. The hysteresis effect in capillary properties and the modes of moisture distribution associated therewith*. J. Agric. Sci. 20. 1930.
47. Hillel D.: *Introduction to soil physics*. Academic press. 1982.
48. Horgan G. W., Ball B. C.: *Simulating diffusion in a Boolean model of soil pores*. European J. Soil Sci. 45, 1994.

49. Iwata S., Tabuchi T., Warkentin B. P.: *Soil-water interactions. Mechanisms and applications*. M. Dekker, Inc, N-Y Bassel. 1988.
50. Kok L. P.: *100 problems of my wife and their solution in theoretical stereology*. Coulomb Press Leyden. Leiden 1990.
51. Kowalik P., Zaradny H.: *Ruch wody glebowej*. Archiwum Hydrotechniki. XVII. 4. 1970.
52. Kutilek M.: *Vliv Jilovyyh mineralu na retenčni krivky vlhosti*. Vodohospodarski Cas. XVIII, 6, 1970.
53. Latey J.: *The study of soil Structure: Science and Art*. Aust. J. Soil Res. 29. 1991.
54. Lorz U., Ohser J.: *Course Stochastic Geometry*. Freiberg University of Mining and Technology. Slasky dvur. 1993.
55. Mason G.: *Desaturation of porous media. I Unconsolidated Materials*. J. Colloid and Interface Sci. 2. 41. 1972.
56. Mason G., Mellor D. W.: *Analysis of the percolation properties of a real porous material*. Studies in surface science and catalysis. 62. 1991.
57. Metha A.: *The physics of powders*. in Correlation and connectivity. Kluwer Acad. Publ. 1990.
58. Mualem Y.: *A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media*. Water Resource Research. 12. 3. 1976.
59. Mualem Y.: *Hydraulic conductivity of unsaturated porous media. Generalized Macroscopic Approach*. Water Res. Resarch v.14.2.1978.
60. Okabe A., Boots B., Sugihara K.: *Spatial tessellation. Concept and application of Voronoi diagrams*. J. Wiley&Sons. Chichester. N-Y. Brisbane. Singapore. 1992.
61. Panayiotopoulos R.: *Packing of sands – A review*. Soil and Tillage research 13. 1988.
62. Perrier E.: *A simulator to generate virtual soil structure and to investigate their hydraulic behaviour*. IMACS Proc. Bruxelles, 1995.
63. Perrier E.: *Structure geometrique et fonctionnement hydrique des sols*. Simulation exploratoires. Praca doktorska na Uniwersytecie Pierre et Marie Curie. Paris VI. 1994.
64. Puckett W. E., Dane J. H., Hajek B. F.: *Physical and mineralogical data to determine soil hydraulic properties*. Soil Sci. Soc. Amer. J. v. 49. 1985.
65. Pukos A.: *Okształcenia gleby w zależności od rozkładów porów i cząstek fazy stałej*. Probl. Agrofizyki. 61. 1991.
66. Ridgway K., Tarbuck K. J.: *Voidage flocculations in a randomly-packed beds of spheres djacent to containing wall*. Chem. Eng Sci. 23. 1989.
67. Ringrose-Voase A. J.: *Micromorphology of soil structure: Description, quantification, Application*. Aust. J. Soil Res. 29. 1991.
68. Roblee L. H. S., Baird R. M., Tierne J. W.: *Radial porosity variations in packed beds*. A. I. Ch. E. J. 4. 4. 1958.
69. Rode A. A.: *Osnovy uczenija o poczwiennoj wlagie. t. 1. Osnownyje cwojstwa poczw i pierdwiżenie poczwiennoj wlagi*. Gidromet Izdat. Leningrad 1965.
70. Russ J. C.: *Practical Sterology*. Plenum Press. N-Y London. 1986.
71. Rząsa S., Owczarzak W.: *Modelling of soil structure and examination methods of water resistance, capillary rise and mechanical strenght of soil aggregates*. Annals of Poznan Aric. Univ. 135. 1983.
72. Scher H., Zallen R.: *Critical density in percolation processes*. J. Chem. Phys. 53. 1970.
73. Smith W. O., Foote P. D., Busang P. G.: *Capillary rise in sand of uniform spherical grains*. v. I Physics 1931.
74. Snyder V. A.: *Mechanical equilibrium in externally loaded unsaturated granular similar media*. Soil Sci. Soc. Amer. Proc. 51. 1987.
75. Sobczuk H. A., Plagge R., Walczak R. T., Roth C. H.: *Laboratory equipment and calculation procedure to rapidly determine hysteresis of some soil hydrophysical properties under nonsteady flow conditions*. Z. Pflanzenenahr. Bodenk. 155. 1992.
76. Staple W. J.: *The influence of size Distribution on the bulk density of uniformly packed Glass Particles*. Soil Sci. Soc. Amer. Proc. 39. 1975.

77. Stauffer D.: *Percolation (statistical physics). w Introduction to percolation theory.* Taylor, Francis. Philadelphia. 1985.
78. Stewart I.: *How to succeed in stacking.* New Scientist. 1777. 1991.
79. Strzemiński M.: *Historia gleboznawstwa polskiego.* PWRiL. Warszawa 1980.
80. Taylor S. A., Ashcroft G. L.: *Physical edaphology.* Freeman and Co. San Francisco. 1972.
81. Villian J., Szeto K. Y., Minchau B., Renz W.: *Dense packings of hard spheres.* Proceedings of Workshop Competing Interactions and Microstructures: Statics and Dynamics. Los Alamos. Springer. 1987.
82. Walczak R.: *Nowe aspekty metrologii agronomicznej.* Nauka Polska. 4. 1993.
83. Warrington G. E., Daddow R. L.: *Feasibility study for a soil bulk density model.* Raport Watershed System Development Group, Fort Collins, Colorado, 1981.
84. White N. F., Sunda D. K., Duke H. R., Corey A. T.: *Boundry effects in desturation of porous media.* Soil Sci. 113. 1. 1972.
85. Witkowska-Walczak B.: *Fizyka z elementami agronomicznej.* Materiały II Szkoły Letniej, Lublin 1991.
86. Wu L., Vomocil J. A., Childs S. W.: *Pore size, particle size, Aggregate size and water retention.* Soil Sci. Soc. Am. J. vol. 54. pp. 952-956 (1990).
87. Zallen R.: *Fizyka ciał amorficznych.* PWN, Warszawa 1994.
88. Zasoński S.: *Studia mikromorfologiczne i chemiczne nad procesem płowienia gleb pyłowych.* Roczn. Gleboznawcze. t. XXV. z. 3. 1974.
89. Zisman J. S.: *Models of disorder.* Cam. Univ. Press. 1979.

SOLID PHASE AND PORE SPACE GEOMETRY OF AGRICULTURE GRANULAR MATERIALS FOR EXAMPLE MINERAL SOILS

SUMMARY

The physical properties of granular loose materials depend on their internal structure, which can be regarded as the geometry of solid particles in space. The purpose of this paper is to find the method for solid phase reconstruction of the granular medium and then to describe a created structure of pores and solid particles.

Packing simulation procedure has been elaborated to find the geometry of a virtual solid grain body. The particle shape has been approximated by means of a sphere. The grain size distribution converted to the number proportions in the classes and the porosity of the investigated body are the input data. The representative volume and the disordered character of the virtual structure have been examined via 3D- and 2D porosities analysis. It was found that the packing procedure can create the structures of such grain size distributions where the ratio of left and right diameter limits is < 30 . The above limitations follow from the software (Pascal) and hardware (486 and Pentium) used for the investigation.

The concept of a single 2D- and 3D- pores has been proposed. The single 3D-pore is a part of space limited by 4 particle surfaces and 4 necks., while 2D-one is determined by 3-cross-sectioned particles and 3 necks. Such tessellation allowed to divide the medium space (or area) on a set of tetrahedrons (or triangles) which fill this space coherently. Each tetrahedron (triangle) contains one 3D- (or 2D-) pore.

It was found that maximum contact number of the particle in monosize grain medium can be described by a square function where the argument is the ratio of the radii of both: the investigated and the monosize particles.

The knowledge of the parameters and connectivity of the pores in the network allowed for the determination of the moisture retention curve for some sands and sandy loam body. Several approaches have been presented which differ from each other by dimension of the body (2D and 3D), mechanism of the pore drainage (independent of the state of the neighbours or dependent on it), type of the formula for neck radius determination. The best correlations with the experiment data were found for 2D where the drying of the pore has been assumed to be independent of the state of the neighbour pores and when the lens water is taken into consideration. It was suggested that moisture

retention is dependent on the geometry of sample used for the measurement. The comparison of the compatible 2D and 3D pore estimators distributions shows that they are not equal: the 2D- is wider than 3D. The stereological interpretation of the noticed differences explaining this relation was proposed.

Key words: grain size distribution, packing simulation, grain microstructure, pore modeling, pore size distribution, stereology, moisture retention.