

MODELOWANIE ZJAWISK FIZYCZNYCH W OŚRODKACH
TRÓJFAZOWYCH METODAMI DETERMINISTYCZNYMI,
STATYSTYCZNYMI I PROBABILISTYCZNYMI

A. Pukos

Instytut Agrofizyki im. B. Dobrzańskiego, Polska Akademia Nauk
20-290 Lublin 27, P.O.Box 201, Doświadczalna 4, e-mail: Pukos@demeter.ipan.lublin.pl

Streszczenie. W pracy przedstawiono trzy sposoby formułowania modeli fizycznych: deterministyczny, statystyczny i probabilistyczny. Pokazano na przykładzie modeli odkształceń gleb, że już w momencie formułowania definicji naprężenia i odkształcenia podejmuje się decyzję wyboru aparatu matematycznego.

Słowa kluczowe: modelowanie matematyczne, odkształcenia gleb

WSTĘP

Porównując sformułowane zależności opisujące odkształcenia i przepływy w ośrodkach trójfazowych można wyróżnić trzy metody ich formułowania już w momencie definicji gradientów, przepływów, naprężeń i odkształceń (Tabela 1). Liniowe równania różniczkowe fizyki wymagają założenia ciągłości i jednorodności oraz niewielkich odchyłeń od stanu równowagi termodynamicznej, aby spełnione były równania Onsagera. Uogólnienie w postaci nieliniowych równań różniczkowych pozwala wprowadzić bardziej realistyczne metody fizyki statystycznej, chociaż nadal układ powinien być blisko stanu równowagi termodynamicznej, chociażby w celu określenia entropii.

Zastąpienie zmiennych niezależnych i funkcji ciągłych zmiennymi i funkcjami losowymi istotnie zbliża modele do rzeczywistości, gdyż pozwala stosować metody matematyczne rachunku różnicowego i całkowego. Pozwala to uwolnić się od tradycyjnych sztucznych założeń ciągłości i jednorodności oraz badane

różniczkowalności badanych funkcji i ich pochodnych. Na to aby funkcja była całkowalna wystarczy dużo mniej założeń niż wymaga warunek różniczkowalności (zwykle wraz z pierwszą i drugą pochodną).

LINIOWE ZWIĄZKI FIZYCZNE

Tradycyjna metoda deterministyczna oparta jest na założeniu ciągłości i jednorodności ośrodka, naprężenia, odkształcenia i przepływy wprowadzone są w postaci odpowiednich pochodnych a procesy mechaniczne są traktowane jako ruchy w „zwykłej” przestrzeni xyz . W konsekwencji otrzymuje się równania różniczkowe zgodne z liniową termodynamiką procesów nieodwracalnych i zasadą Onsagera [4, 5, 6, 7]. W pracy [6] pokazano, że liniowe równania przepływów i odkształceń wynikają bezpośrednio z zasady Onsagera.

Tabela 1. Metody modelowania w mechanice

Table 1. Method of modeling in mechanics

deterministyczna	Ośrodek ciągły i jednorodny, ruch w „zwykłej” przestrzeni xyz, gradienty, przepływy są definiowane jako pochodne np. naprężenie i odkształcenie: $\sigma = \frac{dF}{ds}, \quad \varepsilon = \frac{dL}{dL_0}$	Liniowa termodynamika procesów nieodwracalnych, zasada Onsagera, liniowe prawa fizyczne
Statystyczna	Dyskretny ośrodek jednakowych elementów, „ruch” (zmiana w czasie) w przestrzeni fazowej uogólnionych współrzędnych i pędów (qpt), naprężenia i odkształcenia są sumami: $\sigma = \sum \frac{df}{ds}, \quad \varepsilon = \sum \frac{dl}{dl_0}$	Statystyczna termodynamika procesów nieodwracalnych w pobliżu równowagi, nieliniowe prawa fizyczne
Probabilistyczna	Dyskretny ośrodek niejednakowych elementów, „ruch” w przestrzeni zmiennych losowych uzyskanych eksperymentalnie, naprężenia i odkształcenia są całkami: $\sigma = \int d\sigma, \quad \varepsilon = \int d\varepsilon$	Probabilistyczne prawa fizyczne uzyskane przez całkowanie po wartościach zmiennych losowych

Zakres stosowalności tych metod jest ograniczony „ukrytymi” założeniami, że przepływy powinny być laminarne, naprężenia, odkształcenia oraz ich gradienty i pochodne po czasie – matematycznie infinitezymalnie małe a funkcje stanu – różniczkowalne. W rezultacie otrzymuje się liniowe prawa fizyczne ważne w bliskim otoczeniu stanu równowagi termodynamicznej (prawo Darcy dla ruchu wody, prawo Ficka - dla dyfuzji, liniowe równania reologiczne dla odkształceń).

METODY STATYSTYCZNE

Gdy struktura może być sensownie przybliżona zbiorem jednakowych elementów (kryształy, ciecze, gazy, kulki) wówczas stosuje się termodynamikę statystyczną i odkształcenia oraz naprężenia definiowane są jako suma (iloczyn) rzeczywistych efektów dla jednego elementu struktury. W efekcie, jeśli układ jest w pobliżu równowagi termodynamicznej, można sformułować bardziej realistyczne, nieliniowe prawa fizyczne (Tabela 1). Proces mechaniczny jest wówczas opisywany jako „ruch” w przestrzeni fazowej uogólnionych współrzędnych q , pędów p oraz czasu t w sensie ewolucji układu termodynamicznego.

Metoda ta była zastosowana w pracach [4,5] przy założeniu, że energia ośrodka jest opisany równaniem Hamiltona oraz ciecz w kontaktach cząstek glebowych decyduje o właściwościach lepkosprężystych ośrodka glebowego i w miejsce stałych uzyskano nieliniowe modele zjawisk lepkich (zależnych od czasu) oraz sprężystych:

$$\eta = \frac{fl_1 h \exp \frac{E_s}{kT}}{2lkT \sinh \frac{fl_2 l_3}{2kT}}, \quad E = \frac{fad \exp \frac{E_s}{kT}}{kT \operatorname{arcsinh} \frac{fd^2}{M\alpha}}, \quad (1)$$

gdzie η oznacza nieliniowy model lepkości zależnej od naprężenia, E – nieliniowy model sprężystości zależnej od naprężenia, l, l_1, l_2, l_3 – rozmiary elementów lepkich, E_s – energię swobodną, k – stałą Boltzmanna, h – stałą Plancka, f – naprężenie, T – temperaturę, $\sinh$ oraz $\operatorname{arcsinh}$ – sinus hiperboliczny i funkcję do niego odwrotną, M , a oraz α - parametry potencjału, d – średnią średnicę cząstki glebowej. Występowanie stałych mikroskopowych nie oznacza, że opis jest na poziomie molekularnym, można równania zapisać np. w ilości moli.

Wyniki pomiarów istotnie lepiej pasowały do danych eksperymentalnych uzyskanych przez autora, w szczególności został ustalony zakres stosowalności

liniowych modeli zjawisk lepkich i sprężystych. Wyznaczona została też objętość elementu lepkiego $l_2 l_3$ [7] i wynosi ona dla typowych gleb $10^{-27} - 10^{-24} \text{ m}^3$ co wydaje się sensowne dla cieczy łożowo-wodnej w glebie. Stwierdzono, że warunkiem liniowości jest paraboliczny kształt funkcji potencjału od odległości między cząstkami gleby.

Równania uzyskane w pracach [4,5] były po uproszczeniu sprawdzane przez Konstankiewicz dla przypadku bardzo mocno zagęszczonych gleb i uzyskana zgodność pomiarów z przewidywaniami była zadowalająca. Model ten pozwolił też wyjaśnić niezgodności w wynikach pomiarów przedstawionych w pracach [3, 10], również w przypadku gleb mocno zagęszczonych.

METODY PROBABILISTYCZNE

Ośrodki odkształcalne w stanie luźnym, które są obiektem zainteresowania agrofizyki wyróżniają się budową trójfazową i każda faza wyraźnie objawia się w trakcie deformacji. W materiałach rolniczych, które są ośrodkami nieuporządkowanymi, składającymi się z elementów różnych pod względem wymiarów i kształtów (ziarna, agregaty, pory, komórki, ściany komórkowe, włókna) naturalne jest wprowadzenie zmiennych losowych i ich funkcji jako niezależnych zmiennych stanu. Wówczas proces mechaniczny traktowany jest jako „ruch” w przestrzeni eksperymentalnie wyznaczonych zmiennych losowych, a odkształcenia, naprężenia, potencjały i gradienty są definiowane jako odpowiednie całki. Struktura i jej zmiany wprowadzone są na samym początku do modelu, a probabilistyczne równanie dla jednego elementu jest całkowane dla wszystkich wartości niezależnych zmiennych losowych.

Metodę wykorzystania zmiennych losowych jako niezależnych zmiennych stanu wyznaczonych z eksperymentu zastosował w 1977 r. Walczak [9] do przedstawienia stanu energetycznego wody w glebie przy pomocy dwuwymiarowej funkcji rozkładu opisującej zależność potencjału wody – wilgotność. Wartościami tych zmiennych były ciśnienia, przy których następowało napełnianie się i opróżnianie porów przez wodę. W szczególności udało się tą metodą opisać stan energetyczny wody w glebie [1, 8, 9] oraz kształt krzywych pF w zależności od rozkładów porów i soczewek wodnych w kontaktach ziaren fazy stałej.

Podstawową zmienną losową wykorzystaną w pracach [1, 7, 8, 9] jest rozkład granulometryczny gleby. Autor użył tego rozkładu w 1990 r. do konstrukcji mo-

delu zagęszczania gleb, a w szczególności ewolucji rozkładu wielkości porów glebowych w zależności od naprężenia zewnętrznego i czasu jego działania. Końcowe równanie opisujące objętości poszczególnych frakcji porów ma postać [7]:

$$V_t = \sum_{k=0}^n V_{ok} \frac{2}{3} \left[\frac{\bar{V}_{pk}}{E Ds} (1 - p_{\min}) \right] c_3(f_m) \int_{h(AABt)}^{2f_m} g_2(f) df \times$$

$$\min(Dp, Ds \max) \quad (2)$$

$$\times \int_{Dp \in II} \frac{\int_{Ds \min}^{Ds} (Ds)^3 g_1(Ds) d(Ds)}{Dp} g_4(Dp) \frac{N_p}{N_k}$$

gdzie $[]$ oznacza funkcję Entier, V_t – objętość porów glebowych w funkcji czasu, V_{ok} – początkową objętość porów frakcji k , $\bar{V}_{pk}$ – początkową średnią objętość poru z frakcji k , $E Ds$ – średnią średnicę cząstki, $p_{\min}$ – minimalną porowatość końcową, $Ds \min$ – minimalną średnicę cząstki, a górna granica całkowania $\min(Dp, Ds \max)$ oznacza, że cząstka przemieszczająca się do poru jest mniejsza niż jego średnica. Stałą normalizacji c_3 obliczamy z (2) dla dostatecznie dużego t :

$$c_3(f_m) = \frac{V_t}{\sum_{k=1}^n V_{ok} \left[\frac{\bar{V}_{pk}}{E Ds} (1 - p_{\min}) \right] \int_{Dp \in IIk} \frac{EV(Dp, l)}{Dp} g_4(Dp) d(Dp) \frac{N_p}{N_k}} \quad (3)$$

W równaniu (2) występują jednocześnie cztery zmienne losowe związane z przekrojem i objętością porów glebowych, rozkładem rozmiaru cząstek i agregatów oraz sił w ich punktach kontaktu. Właśnie zmienne losowe reprezentują początkową strukturę i jej zmiany podczas odkształcania w stopniu najważniejszym. Tradycyjne zmienne „deterministyczne” to czas t oraz średnie naprężenie zewnętrzne f_m , natomiast parametry $A, a, B, h, p_{\min}, \mu, c$ są „wrażliwe” na wilgotność, temperaturę, tarcie „suche” (niezależne od prędkości) i lepkie (zależne od niej).

Wydaje się, że ośrodki trójfazowe są zbyt skomplikowane, aby formułować dla nich modele w postaci równań różniczkowych, gdyż nawet próby opisanie tak prostych zjawisk jak pełzanie, relaksacja naprężeń czy współczynniki tłumienia drgań prowadzą do sprzeczności. Dlatego próby opisanie odkształceń tych ośrodków metodami mechaniki kwantowej są cofaniem się na drodze do poznania tych

ośrodków w krainę równań różniczkowych. Najbardziej widoczną sprzecznością jest fakt, że odkształcenia gleby w fazie początkowej są jednocześnie natychmiastowe i nieodwracalne wbrew wszelkim modelom lepkosprężystym. Wyjaśnia to metoda probabilistyczna, gdyż mechanizm zaproponowany polega na przemieszczaniu się cząstek glebowych do porów i ciągłej zmiany struktury.

LITERATURA

1. **Czachor H.:** Geometria fazy stałej i przestrzeni porów w rolniczych ośrodkach granularnych na przykładzie gleby mineralnej, *Acta Agrophysica*, 7, 1997.
2. **Konstankiewicz K.:** Wpływ prędkości odkształceń na charakterystyki mechaniczne gleb, *Problemy Agrofizyki*, 51, 1987.
3. **Oida A., Yoshimura K., Tanaka T.:** Analysis of viscoelastic behaviour of soil in halfspace by means of FEM, *Proc. IInd International Conference on Agricultural Materials*, Godollo, Hungary, August 1980.
4. **Pukos A.:** On the applicability of viscoelastic models in soil mechanics, *ibid.*
5. **Pukos A.:** Thermodynamical interpretation of soil medium deformation, *ZPPNR*, 220, 367 – 389, 1983.
6. **Pukos A., Walczak R.:** Podstawy teoretyczne badania właściwości mechanicznych gleb, *Problemy Agrofizyki*, 7, 1973.
7. **Pukos A.:** Zagęszczenie gleby w zależności od rozkładów wielkości porów i cząstek glebowych, *Problemy Agrofizyki*, 61, 1990.
8. **Sobczuk H.:** Opis stanu fizycznego gleby jako ośrodka nieuporządkowanego na przykładzie krzywych retencji wody, *Acta Agrophysica*, 11, 1998.
9. **Walczak R.:** Model investigations of water binding energy in soils of different compaction, *ZPPNR*, 197, 11 – 43, 1977.
10. **Wolski W. et al.:** Embarkments on organic soils, *Dept. of Geotechn., Warsaw Agricultural University*, 1983 report.

MODELING OF PHYSICAL PROCESSES IN THREE PHASE MEDIA USING DETERMINISTIC, STATISTICAL AND PROBABILISTIC METHODS

Institute of Agrophysics, Polish Academy of Sciences

20-290 Lublin 27, P.O.Box 201, Doświadczalna 4, e-mail: Pukos@demeter.ipan.lublin.pl

Summary. Three methods of formulation of the physical models has been presented. It was shown, for the case of the models of soil deformation, that the mathematical description of the model is chosen at the moment of the definition of stress and strain.

Keywords: mathematical modeling, soil deformation