

ANALIZA MOŻLIWOŚCI WYKORZYSTANIA ISTNIEJĄCYCH MODELI
OŚRODKÓW GRANULARNYCH DO OPISU BIOLOGICZNYCH
MATERIAŁÓW ZIARNISTYCH

J. Frączek, M. Wróbel

Katedra Podstaw Budowy Maszyn, Akademia Rolnicza, ul. Balicka 104, 30-149 Kraków
e-mail: fraczek@ar.krakow.pl mrkwrobel@poczta.onet.pl

Streszczenie. Roślinne materiały ziarniste zajmują w rolnictwie bardzo ważną pozycję. Właściwości tych złożonych struktur nie są do końca poznane. Badania przeprowadzane na całym układzie są trudne i uciążliwe a uzyskane wartości mierzonych wielkości są zazwyczaj obciążone dużymi błędami. Ocena właściwości poszczególnych ziaren nie w pełni odzwierciedla charakter całości. Dlatego też do opisu biologicznych struktur ziarnistych wskazane jest stosowanie modeli.

W pracy zamieszczono analizę możliwości zastosowania niektórych modeli ośrodków granularnych do opisu struktury ziarnistej pochodzenia roślinnego. Analizie poddano modele gęstego i ciasnego upakowania kul, losowego ciasnego upakowania kul oraz wirtualne modele ośrodków ziarnistych autorstwa Góździa i Pietrowa oraz Czachora.

Wykazano, że w badaniach roślinnych materiałów ziarnistych najbardziej przydatny jest model autorstwa Góździa i Pietrowa. Luki w stanie wiedzy o tych ośrodkach nie pozwalają jednak na wykorzystanie tego modelu do uzyskania pełnego formalnego opisu materiałów granularnych. Dlatego w pierwszej kolejności należy podjąć próbę poznania zjawisk i czynników decydujących o właściwościach tych ośrodków.

Słowa kluczowe: modelowanie struktury materiałów ziarnistych, punkty styku, powierzchnia kontaktu.

WSTĘP

W rolnictwie bardzo ważną pozycję zajmują roślinne materiały ziarniste. Stanowią je głównie ziarna zbóż oraz nasiona innych roślin uprawnych. Materiały te posiadają strukturę granularną, co oznacza, że cały ośrodek składa się z poje-

dynczych elementów tzw. granul. Właściwości tych złożonych materiałów nie są do końca poznane, czego powodem są trudności związane ze specyficzną budową tych materiałów. Można oczywiście zbadać właściwości poszczególnych ziaren, lecz uzyskanych wyników nie da się odnieść do całości. Materiały o takiej strukturze nie zachowują się bowiem jak ciała stałe bądź ciecze, zatem poznanie właściwości ich poszczególnych elementów składowych nie daje obrazu całości. Badania należy prowadzić na całym układzie, analizując punkty styku, jednostkowe naciski i inne relacje zachodzące pomiędzy poszczególnymi jego elementami. Jest to trudne i uciążliwe, a uzyskane wartości mierzonych wielkości są zazwyczaj obciążone dużymi błędami. Dlatego też do opisu struktur ziarnistych stosuje się modele. Dzięki nim istnieje możliwość poznania wybranych właściwości materiału bez konieczności przeprowadzania skomplikowanych i żmudnych badań. Obecnie w dobie rozwoju metod obliczeniowych przy pomocy symulacji komputerowych stworzone zostały dobre możliwości badania zachowania się materiałów ziarnistych.

Celem pracy było przeprowadzenie analizy modeli służących do opisu różnego rodzaju materiałów granularnych pod kątem oceny ich przydatności do opisu struktury roślinnego materiału ziarnistego (w skrócie RMZ).

MODELE

Istniejące modele materiałów granularnych bazują na matematycznym opisie sposobu ułożenia ziaren na płaszczyźnie i w przestrzeni trójwymiarowej. Są to struktury gęstego, ciasnego a w szczególności losowego ciasnego upakowania kul. Struktury te możemy scharakteryzować przy pomocy:

- współczynnika wypełnienia N określającego tą część dostępnej przestrzeni, którą zajmują kule,
- liczby koordynacyjnej $Z1$ oznaczającej liczbę najbliższych sąsiadów danej kuli,
- liczby sąsiadów drugiego stopnia $Z2$ oznaczającej liczbę następnych najbliższych sąsiadów.

Wartości liczbowe wymienionych parametrów zestawiono w Tabeli 1.

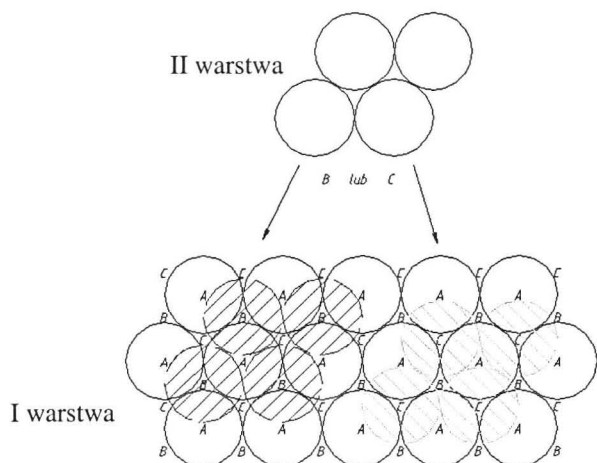
Tabela 1. Podstawowe parametry opisujące różne struktury upakowania kul**Table 1.** Basic parameters describing different structures of spheres packing

Parametr	Oznaczenie	Struktura		
		regularna		losowego ciasnego upakowania
		gęstego upakowania	ciasnego upakowania	
współczynnik wypełnienia	N	0,523	0,74	0,637
liczba koordynacyjna	Z ₁	6	12	6,4 - średnia
liczba sąsiadów drugiego stopnia	Z ₂	12	6	-

Jak powstają te struktury upakowania kul?

Zadanie sprowadza się do rozwiązania następującego problemu geometrycznego: jak ułożyć wielką liczbę identycznych sztywnych kul tak, aby najefektywniej zapełnić przestrzeń, przy założeniu, że kule mogą się stykać ze sobą, lecz nie mogą na siebie zachodzić. Jednym z rozwiązań jest sześcienna struktura gęstego upakowania (sc - square packing), charakteryzująca się najmniejszym współczynnikiem wypełnienia (Tab. 1). Tworzą ją kule ułożone w węzłach sześciennej siatki. Nie jest ona strukturą najgęstszego upakowania, ale struktury o takiej budowie są spotykane w przyrodzie.

W przyrodzie częściej występują struktury ciasnego upakowania, których współczynnik wypełnienia osiąga wartość maksymalną (por. Tab. 1). Strukturą taką, między innymi, jest sieć kubiczna powierzchniowo centrowana (fcc – face centered cubic) opisana przez Keplera już w 1611 roku. W chwili obecnej wiemy, że istnieje bardzo wiele odmian struktur ciasnego upakowania. Tworzenie tych struktur przebiega w sposób następujący: na warstwie kul ze środkami leżącymi w jednej płaszczyźnie układa się kolejną warstwę tak, aby były one jak najbliżej siebie. Istnieją dwa sposoby uzyskania najmniejszej odległości między tymi warstwami. Jeśli środki kul pierwszej warstwy oznaczymy A, a punkty międzywęzłowe B i C (jak na Rys. 1), to druga warstwa będzie najbliżej pierwszej, jeśli środki jej kul zajmą pozycje nad B lub C. Właśnie ze względu na dwie możliwości wyboru podczas dodawania kolejnych warstw istnieje duża różnorodność struktur ciasnego upakowania.



Rys. 1. Sposób tworzenia struktur ciasnego upakowania.

Fig. 1. The way of creating the close packing structure.

Trzecim rodzajem struktury opisującej materiały granularne jest struktura losowego ciasnego upakowania (rcp - random close packing). Charakteryzuje się ona losowym rozmieszczeniem składowych elementów. W wyniku doświadczeń przeprowadzanych między innymi przez Bernala [1] wiadomo że, współczynnik wypełnienia przestrzeni dla tej struktury wynosi 0,637. W strukturze rcp oprócz punktów styku występują tzw. niedalekie kontakty lub inaczej prawie kontakty (z angielskiego „near contact”). Prawie kontakt występuje wtedy, gdy dwie kule oddalone są od siebie na odległość nie większą niż 0,1 ich średnicy. Ze względu na losowe ułożenie elementów tej struktury jej opis polega na przedstawieniu rozkładu statystycznego charakteryzujących ją wielkości oraz średnich wartości tych wielkości. I tak liczba punktów styku i liczba wszystkich kontaktów (suma punktów styku i prawie kontaktów) zawiera się w przedziale od 3 do 12. Wg Bernala [1] na jedną kulę przypada średnio 8,5 wszystkich kontaktów oraz 6,4 punktów styku.

Prowadzenie badań na powyższych modelach jest z natury żmudne i czasochłonne, ze względu na liczbę ziaren jaka jest potrzebna by próba była reprezentatywna (oznacza to czasami nawet kilka tysięcy ziaren). Obecnie dąży się nawet do zwiększenia liczby elementów złoża do kilkudziesięciu tysięcy. Dlatego też, dla uzyskania większej wiarygodności wyników, do zasymulowania takiego układu stosuje się komputerowe techniki obliczeniowe. Efektem tych działań są wirtualne modele opracowane między innymi przez Góździa i Pietrowa [6] oraz Czachora [2]. Charakterystyczne cechy tych modeli zestawiono w Tabeli 2.

Tabela 2. Charakterystyka modeli wirtualnych**Table 2.** Characteristic of virtual models

Model	
Góździa, Pietrowa	Czachora
<ul style="list-style-type: none"> • istnieje możliwość uwzględnienia zaburzeń powodowanych przez ścianki zbiornika • możliwe jest określenie wartości i kierunków sił działających w punktach styku • istnieje możliwość symulacji różnych kształtów ziaren 	<ul style="list-style-type: none"> • brak zaburzeń powodowanych przez ścianki zbiornika • porowatość pokrywa się z porowatością ośrodka rzeczywistego • istnieje możliwość określenia liczby prawie kontaktów • elementy złoża są sztywne
Cechy wspólne	
<ul style="list-style-type: none"> • nieregularny charakter złoża • możliwość symulacji złóż o różnej średnicy ziaren • możliwość określenia liczby punktów styku ziaren 	

Góźdz i Pietrow [6] opracowali model opisujący materiały ziarniste który wykorzystuje elementy mechaniki kwantowej. Model ten uwzględnia dwa elementy opisujące ośrodek granularny - pierwszym z nich jest operator Hamiltona, drugim wektory stanów. Autorzy wprowadzają operatory deformacji działające na wektory stanów pojedynczych granul, dające globalną deformację całego ośrodka. Dzięki tym założeniom Góźdz [5] proponuje trzy podstawowe równania mechaniki ośrodków granularnych i komórkowych. Pierwsze dwa dotyczą energii oraz gęstości energii deformacji, trzecie można utożsamiać z energią wewnętrzną ośrodka. O ile jednak w przypadku ośrodków komórkowych występowanie dwuciałowych sił przyciągania wydaje się oczywiste, o tyle w przypadku biologicznych materiałów granularnych hamiltonian dwuciałowy w wielu przypadkach może mieć znikome znaczenie – szczególnie dla materiałów o niskiej zawartości wody. Powyższe stwierdzenie jest jedynie sygnałem o trudnościach występujących przy formalnym opisie biologicznych materiałów ziarnistych, bowiem jak stwierdza Góźdz [5] „Różnorodność zjawisk i zachowań się ośrodków granularnych i komórkowych jest tak wielka, że nie ma możliwości przeanalizowania większości z nich w ogólnej postaci. Należy w tym celu rozważyć konkretne modele i zbadać ich zachowania rozwiązując odpowiednie dla nich równania.” W powyższym modelu niezbędna jest wiedza dotycząca oddziaływań pomiędzy granulami oraz wektorów stanu reprezentowanych przez funkcje związane z kształtem, rozmiarem i masą.

W modelu Góździa i Pietrowa kształt ziarna rozpatrywanego ośrodka może odbiegać od kulistego. Jest również możliwe określenie wartości i kierunków sił działających w punktach styku. Jak zaznaczają to sami autorzy modelu, tworzenie złoza przebiega w obecności ścian zbiornika, co powoduje, że gęstość uzyskana w wyniku symulacji wyraźnie zależy od wysokości i średnicy zbiornika.

Wirtualny model ośrodka glebowego autorstwa Czachora [2] jest rekonstrukcją, odtworzeniem struktury badanego ośrodka. Tworzenie struktury odbywa się w tym przypadku stopniowo tzn. cząstka po cząstce. Każdej nowo przyłączanej cząstce znajduje się takie położenie, w którym jest ona styczna do trzech cząstek wcześniej przyłączonych, a jej powierzchnia nie przecina się z żadną poprzednią. Po tak przeprowadzonej symulacji otrzymujemy wirtualną strukturę, która nie jest ograniczona żadnymi płaszczyznami. Przy uzyskaniu porowatości powierzchniowej przekroju równej porowatości objętościowej możemy stwierdzić, że wygenerowany ośrodek ma charakter nieuporządkowany.

ANALIZA MODELI POD KĄTEM ICH ZASTOSOWANIA W BADANIACH RMZ

Powyższe modele służą do opisu różnego rodzaju struktur spotykanych w przyrodzie (Tab. 3). Modele na bazie struktur gęstego i ciasnego upakowania, czyli te o strukturze heksagonalnej i kubicznej, stosowane są zazwyczaj do opisu wielu materiałów o strukturze krystalicznej np. ułożenie atomów w monokryształach. Natomiast w odniesieniu do RMZ mają zbyt uporządkowany charakter. Zakładają bowiem bardzo regularne położenia wszystkich cząstek. Nie jest to zgodne z nieuporządkowanym charakterem RMZ, w którym wielkości charakteryzujące złoże, takie jak współczynnik wypełnienia czy liczba kontaktów, możemy określić tylko w sposób statystyczny. Zatem takie modele nie znajdują zastosowania do opisu RMZ.

Model o strukturze losowego ciasnego upakowania, ze względu na nieuporządkowany charakter złoza stał się podstawą badań mających na celu poznanie i opisanie właściwości różnego rodzaju ośrodków ziarnistych charakteryzujących się losowym ułożeniem granul (Tab. 3). Złoże tworzone jest zazwyczaj ze sztywnych kul. Możliwe jest także tworzenie złożeń składających się z ziaren podatnych. Szkielety takiego złoza mogą ponadto mieć kształt odbiegający od kulistego, czyli taki jaki posiadają ziarna rzeczywistych roślinnych ośrodków granularnych. Słusznym wydaje się więc stwierdzenie, że wiarygodny model RMZ powinien opierać się na strukturze losowego ciasnego upakowania.

Weryfikacja powyższego modelu jest oczywiście trudna. Dotychczas do określenia liczby punktów styku stosowano różne doświadczenia, np.:

- Przestrzeń wypełniano losowo rozmieszczonymi kulami ołowianymi bądź woskowymi o jednakowej średnicy, a następnie całość ściskano. Na kulach wykonanych z podatnego materiału po zakończeniu doświadczenia pozostawały różnej średnicy okrągłe znaki. Znaki o maksymalnej średnicy były dowodem na istnienie w tym miejscu punktów styku między kulami przed rozpoczęciem ściskania, a znaki o średnicy mniejszej świadczyły o prawie kontaktach między nimi. Uzyskiwane wyniki nie były do końca wiarygodne. Proces ściskania burzył początkową strukturę złoża i powodował przesuwanie się jego elementów składowych. Powstałe w ten sposób odciski nie do końca odzwierciedlały początkowy stan złoża, a wyznaczona w ten sposób liczba punktów styku zazwyczaj jest większa niż rzeczywista.
- Metoda stosowana przez Bernala wyraźnie rozgraniczała liczbę punktów styku i prawie kontaktów. Polegała ona na wypełnieniu przestrzeni twardymi kulami, najczęściej stalowymi, które następnie pokrywane były farbą. Po wyschnięciu farby otrzymywano dwa rodzaje znaków na kulach. W tak przeprowadzonym doświadczeniu można jednoznacznie określić liczbę punktów styku i liczbę prawie kontaktów bez naruszania struktury badanego złoża.

W RMZ oprócz punktów styku występują także powierzchnie styku. Metody ich określania nie są dotychczas opracowane. Jak dotąd prowadzone były nieliczne badania dotyczące tylko styku roślinnych materiałów ziarnistych z płaską powierzchnią [4,7]. Istnieje więc potrzeba przeprowadzenia wiarygodnych badań określających powierzchnie styku pomiędzy ziarnami RMZ.

Modelami bazującymi na strukturze losowego ułożenia granul są także wirtualne modele Góździa i Pietrowa oraz Czachora.

Model Góździa i Pietrowa posiada pewne cechy przydatne do opisu RMZ, a mianowicie:

- nieregularność złoża,
- możliwość zmiany kształtu ziaren,
- możliwość określenia liczby punktów styku ziaren,
- możliwość określania wartości i kierunków sił działających w punktach styku ziaren.

Zaletą tego modelu jest jego uniwersalność. Cecha ta wynika z uwzględnienia oddziaływań pomiędzy elementami składowymi złoża, które bezpośrednio wpływają na właściwości całego ośrodka.

Wirtualny model Czachora został stworzony do zastosowania w badaniach ośrodka glebowego (Tab. 3). W przypadku RMZ posiada on także pewne przydatne cechy takie, jak:

- nieregularność złoza,
- możliwość różnicowania średnicy ziaren w złożu,
- możliwość określenia liczby punktów styku ziaren,
- brak ścian zbiornika powodujących zaburzenia.

W modelu tym istnieje możliwość zweryfikowania czy wygenerowane złoże ma charakter nieregularny. Możliwe jest wyznaczenie porowatości wygenerowanego złoza i porównanie czy porowatość ta pokrywa się z porowatością ośrodka rzeczywistego. Jak stwierdza sam autor model nie zawsze generuje strukturę o zadanej porowatości. Oznacza to, że po każdorazowej symulacji musimy przeprowadzić weryfikację stwierdzającą na ile model jest podobny do rzeczywistego złoza.

Można stwierdzić, że wspólną bazą, na której opierają się prace mające na celu opracowanie modelu RMZ jest struktura losowego upakowania ziaren.

Tabela 3. Zastosowanie analizowanych modeli

Table 3. Application of analysed models

Model	Zastosowanie	Odniesienie do RMZ
gęstego i ciasnego upakowania	<ul style="list-style-type: none"> • opis struktur krystalicznych (monokryształów, stopów metali itp.) 	<ul style="list-style-type: none"> • zbyt uporządkowany charakter
losowego ciasnego upakowania	<ul style="list-style-type: none"> • podstawowe badania materiałów ziarnistych (określenie punktów kontaktu i prawie kontaktu) 	<ul style="list-style-type: none"> • przydatny w podstawowych badaniach z możliwością modyfikacji
Góździa i Pietrowa	<ul style="list-style-type: none"> • badanie materiałów ziarnistych w zbiornikach 	<ul style="list-style-type: none"> • symulacja różnych kształtów ziaren • określenie sił w punktach styku
Czachora	<ul style="list-style-type: none"> • głównie w badaniach ośrodków glebowych (symulacja złoź o zadanej porowatości i zadanym składzie granulometrycznym) 	<ul style="list-style-type: none"> • brak ścian zbiornika jako czynnika zaburzającego • oznaczenie liczby prawie kontaktów

PODSUMOWANIE

Trudności związane z badaniami RMZ spowodowane są głównie brakiem modelu tego typu materiałów. Badania na samym złożu są niezwykle żmudne i pracochłonne. Opracowanie wiarygodnego modelu RMZ ułatwi badania tych ośrodków.

Z przeprowadzonej powyżej analizy wynika, że spośród badanych modeli, model zaproponowany przez Góździa i Pietrowa pozwala w stosunkowo prosty sposób uchwycić naturę ośrodków granularnych dzięki uwzględnieniu potencjału wzajemnego oddziaływania elementów ośrodka. Model ten uwzględnia zależności występujące w punktach styku ziaren. Dodatkową zaletą wspomnianego modelu jest możliwość uwzględnienia w nim kształtu pojedynczego ziarna, innego niż kulisty.

Dla uzyskania pełnego formalnego opisu struktury RMZ przy wykorzystaniu powyższego modelu, konieczne jest uwzględnienie bardzo wielu zjawisk i czynników decydujących o właściwościach tych ośrodków. Wydaje się, że obecny stan wiedzy o wspomnianych ośrodkach nie daje możliwości uzyskania wymaganego opisu. Dlatego też, zdaniem autorów, w pierwszej kolejności należy podjąć próbę weryfikacji modelu losowego ciasnego upakowania (rnp random close packing).

Należy również podkreślić, że konsekwencją dokonanego wyboru jest konieczność opracowania metody oceny wiarygodności modelu o strukturze losowego ciasnego upakowania, która jest bazą wybranego modelu. Metoda ta powinna umożliwić doświadczalne określenie liczby punktów styku, powierzchni styku pomiędzy ziarnami, oraz, co najważniejsze, powinna dawać możliwość ustalenia wzajemnych zależności i oddziaływań pomiędzy ziarnami ośrodka.

PIŚMIENNICTWO

1. **Bernal J. D.:** Packing of spheres. *Nature* 188, 908-911, 1960.
2. **Czachor H.:** Badania struktury gleby za pomocą komputerowej symulacji upakowania cząstek. *Acta Agrophysica* 22, 39-52, 1999.
3. **Finney J. L.:** Relaxation of the Bernal model. *Nature* 257, 120-122, 1975.
4. **Frączek J.:** Tarcie ziarnistych materiałów roślinnych. *Zeszyty naukowe AR Kraków. Z.252*, 1999.
5. **Góźdz A.:** Mechanika ośrodków komórkowych i granularnych. *Acta Agrophysica* 24, 57-65, 1999.
6. **Góźdz A., Pietrow M.:** Quantum mechanical approach to sphere beds in the container-packing fractions and radial distribution function. *Int. Agrophysics* 14, 83-87, 2000.

7. **Molenda M., Horabik J., Grochowicz M., Szot B.:** Tarcie ziarna pszenicy. Acta Agrophysica, 4, 1995.
8. **Visscher W.M., Bolsterli M.:** Random packing of equal and unequal spheres in two and three dimensions. Nature 239, 505-507, 1972.
9. **Zallen R.:** Fizyka ciał amorficznych. PWN, Warszawa 1994.

ANALYSE OF POSSIBILITY OF APPLICATION OF EXISTING MODELS FOR DESCRIPTION OF PLANT GRANULAR MATERIALS

J. Frączek, M. Wróbel

Department of Machine Design, University of Agriculture, ul. Balicka 104, 30-149 Kraków
e-mail: fraczek@ar.krakow.pl mrkwrobel@poczta.onet.pl

Abstract. Plant granular materials are of a great importance in agriculture. They are composed of grains and seeds of cultivated plants. Studying the whole structure is to be rather difficult and arduous to take, and the final results of measuring dimension are usually burdened with serious incorrectness. On the other hand estimating the propriety of a separate seed does not show the character of the whole. The contest of the article is an analysis of the possibility of using some models for description the granular structure of a plant origin.

There are models of spheres close and ample packing, spheres random close packing and virtual models of granular materials by Góźdź, Pietrow and Czachor which have been under analysis.

The analysis has shown limited usability of virtual model by Góźdź, Pietrow in examination on plant granular materials. Blanks in the knowledge of these media make the model impossible to use in order to create complete formal descriptions of granular materials. So in the first place all the phenomena and factors which influence the properties of these media should be recognised and testified.

Key words: modeling of plant granular material, contact points, contact surface.