

Jarosław Frączek, Zbigniew Ślipek  
Katedra Inżynierii Mechanicznej i Agrofizyki  
Akademia Rolnicza w Krakowie

## MODELE ROŚLINNYCH STRUKTUR ZIARNISTYCH

### Streszczenie

Przedstawiono przegląd kierunków rozwoju modelowania roślinnych ośrodków ziarnistych. Koncepcja rozwiązania tego zagadnienia zmienia się wraz z rozwojem nowoczesnych technik pomiarowych oraz obliczeniowych. Początkowe próby prowadzone były w skali makro i wykorzystywano w nich podstawowe prawa mechaniki ośrodków ciągłych. Następne próby dotyczyły modeli tworzonych na poziomie mikro, w których podstawowym elementem struktury jest szkielet, czyli pojedyncze ziarno. Aktualnie podejmowane są próby budowania struktur na poziomie nano. Punktem wyjściowym jest wówczas założenie, że właściwości danego układu są funkcją ułożenia poszczególnych atomów i cząstek, a zatem kontrolę zachowania się tych obiektów można uzyskać poprzez określenie tego ułożenia. Należy podkreślić, że w ostatnich latach podejmowane są szerokie badania mające na celu powiązanie badań mikrostruktury do opisu właściwości makroskopowych. Z przeprowadzonego przeglądu wynika, że jednym z najszybciej rozwijających się kierunków tworzenia modeli roślinnych materiałów ziarnistych jest modelowanie wirtualne.

**Słowa kluczowe:** materiał ziarnisty, modelowanie, model wirtualny

### Wstęp

Wymagania stawiane maszynom oraz urządzeniom służącym do przetwarzania roślinnych materiałów ziarnistych stale rosną. Wymuszone jest to m.in. poprzez szeroką automatyzację procesów. Dla jej prawidłowego wprowadzenia niezbędna jest wiedza zarówno o wzajemnych relacjach między materiałem a systemem technicznym jak i o właściwościach fizycznych przetwarzanego materiału.

Nowoczesne metody badania zjawisk i procesów przetwarzania oparte są o komputerową symulację. Skraca to zdecydowanie czas poszukiwania optymalnych rozwiązań i umożliwia wielokrotne, szybkie powtarzanie obliczeń. Podstawowym

warunkiem przeprowadzania takich operacji jest utworzenie modelu przetwarzanego materiału. Modele te są ciągle doskonalone i zapewniają coraz bardziej wiarygodny opis struktury materialnej.

Powszechność zabiegów i operacji przetwarzania roślinnych materiałów ziarnistych jest duża. Wspólną cechą tych materiałów jest brak zdolności do przenoszenia naprężeń rozciągających oraz stosunkowo niewielka zdolność do przenoszenia naprężeń stycznych. Stąd też wielu badaczy porównuje te materiały do cieczy. Jednak wobec istnienia tarcia statycznego, niesprężystych zderzeń oraz znikomej energii ruchów termicznych (w porównaniu do energii potencjalnej) porównanie to nie jest w pełni uzasadnione i materiały ziarniste często są określane jako oddzielny stan skupienia materii [Horabik, Molenda 2003].

Najlepiej rozpoznanymi materiałami granularnymi są grunty. Jednak, mimo ponad dwustuletnich intensywnych badań nie zdołano sformułować sensownych i przekonujących fizykalnych zależności ilościowych wiążących odkształcenie, naprężenie i czas. Badania dotyczące roślinnych materiałów ziarnistych są dużo młodsze, a opisanie tego typu struktury trudniejsze.

Praca zawiera przegląd i analizę najważniejszych kierunków w modelowaniu roślinnych materiałów ziarnistych w celu wyłonienia koncepcji opisu struktury materiału najlepiej odzwierciedlającej stan rzeczywisty.

## Makrostruktura

Początkowe modele struktur ziarnistych bazowały na prawach mechaniki ośrodków ciągłych. Dla ich zastosowania naprężenie zastępcze musi spełniać pewne warunki:

- stan mechaniczny nie zależy od przyjętego układu współrzędnych, więc naprężenie zastępcze może być tylko funkcją niezmienników tensora naprężenia:

$$\sigma_{red} = \sigma_{red}(I_1, I_2, I_3) \quad (1)$$

- niezmienniki naprężeń zależą od wszystkich współrzędnych tensora naprężeń i naprężenia zastępcze można zapisać:

$$\sigma_{red} = \sigma_{red}(\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{22}, \sigma_{23}, \sigma_{33}) \quad (2)$$

Najczęściej rozgranicza się poszczególnych stanów mechanicznych (warunek graniczny):

$$F(\sigma_{ij})=0 \quad (3)$$

Zależność graniczna wiąże ze sobą współrzędne tensora naprężeń odpowiadające osiągnięciu stanu niebezpiecznego w danym punkcie. Stan mechaniczny określony jest przez więcej niż jeden parametr i definiowanie naprężenia zastępczego jest utrudnione. Z tych względów stosowane są różne hipotezy wytrzymałościowe.

W przypadku roślinnych materiałów ziarnistych zastosowano hipotezy dotyczące materiałów plastyczno-kruchych, czyli takich, które podczas ściskania wykazują cechy plastyczne, a podczas rozciągania zachowują się liniowo-sprężyste, aż do momentu osiągnięcia wytrzymałości na rozciąganie, w którym następuje kruche pęknięcie. Ponieważ określenie stanu mechanicznego zależy od większej liczby parametrów, poprzestaje się na podaniu zależności granicznych. W większości przypadków wykorzystywany jest warunek Coulomba-Mohra. Jest to uogólnienie warunku Treski poprzez wprowadzenie wpływu tensora naprężenia  $I_1$ . W myśl hipotezy Mohra zarówno zniszczenie poślizgowe, jak i rozdzielcze występuje na pewnych określonych powierzchniach. Dlatego uzasadnione jest założenie, że o zniszczeniu decyduje wektor naprężenia (tzn. naprężenie normalne  $\sigma$  i styczne  $\tau$ ) na tych właśnie powierzchniach. Można więc przyjąć, że wyteżenie materiału jest określone funkcją  $f(\sigma, \tau)$ . Gdy funkcja ta, wyznaczona doświadczalnie, osiągnie wartość graniczną, to materiał ulega zniszczeniu. Wartości  $\sigma$  i  $\tau$  tworzą wówczas krzywą graniczną stanowiącą granicę obszaru bezpiecznego i zwaną obwiednią Mohra. Zniszczenie materiału następuje najpierw w tym punkcie i tej płaszczyźnie, dla których naprężenia  $\sigma$  i  $\tau$  osiągną wartości wyznaczone punktami obwiedni. U podstaw przytoczonej hipotezy leży analogia związana ze zjawiskami tarcia. Jak stwierdził Coulomb [1776] naprężenie styczne potrzebne do zainicjowania procesu plastycznego płynięcia na pewnej płaszczyźnie zwiększa się wraz ze wzrostem naprężenia normalnego do tej płaszczyzny, czyli pokonanie sił tarcia w spoczynku zależy od siły przesuwałcej i od nacisku normalnego do powierzchni tarcia:

$$|\tau| = c - \delta \cdot \operatorname{tg} \varphi \quad (4)$$

gdzie:

- $c$  – spójność
- $\varphi$  – kąt tarcia wewnętrzznego

Do opisu zachowania się materiału ziarnistego wykorzystywane są również modele uwzględniające wzmocnienie materiału. Warunek plastyczności obejmuje wówczas dodatkowo parametr wzmocnienia, którym zazwyczaj jest gęstość zależna od największego naprężenia głównego  $\rho(\sigma)$  [Roscoe 1970].

Dla materiałów wykazujących efekt Bauschingera dochodzi do przesunięcia powierzchni plastyczności jako bryły sztywnej w przestrzeni naprężeń. Dlatego takie

wzmocnienie nazywamy wzmocnieniem kinematycznym. Deformacja plastyczna powoduje, że granice plastyczności na ściskanie i rozciąganie w każdym z kierunków głównych są różne. Przesunięcie powierzchni plastyczności ilustruje więc także zjawisko anizotropii plastycznej pojawiającej się wskutek deformacji plastycznej i stąd wzmocnienie kinematyczne nazywa się czasami wzmocnieniem anizotropowym. Warunek plastyczności można wówczas zapisać:

$$F[(\sigma_{ij} - \Delta\sigma_{ij}), \sigma_p] = 0 \quad (5)$$

gdzie:

- $\Delta\sigma_{ij}$  – współrzędne wektora przesunięcia powierzchni plastyczności w przestrzeni naprężeń
- $\sigma_p$  – granica plastyczności

Inną koncepcją wzmocnienia jest wzmocnienie izotropowe, które odpowiada równomiernemu powiększaniu powierzchni plastyczności. Warunek plastyczności można wówczas zapisać następująco:

$$F[\sigma_{ij}, \sigma_p(\chi)] = 0 \quad (6)$$

gdzie:

- $\chi$  – parametr wzmocnienia.

Obie koncepcje wzmocnienia są jedynie elementami hipotezy wzmocnienia i mogą być stosowane równocześnie:

$$F[\sigma_{ij}, (\sigma_{ij} - \Delta\sigma_{ij}), \sigma_p(\chi)] = 0 \quad (7)$$

Bazując na powyższym Ghamboussiegu i Momenie [1982] sformułowali model zachowania się materiałów sypkich w złożonym stanie naprężeń. Autorzy założyli, że całkowity przyrost odkształcenia jest sumą przyrostu odkształcenia sprężystego  $d\epsilon_{ij}^E$  oraz plastycznego  $d\epsilon_{ij}^P$ :

$$d\epsilon_{ij} = d\epsilon_{ij}^E + d\epsilon_{ij}^P \quad (8)$$

Lande i in. [1987] rozdzielił natomiast odkształcenie plastyczne na dwie składowe: odkształcenie powstające w wyniku zagęszczenia  $d\epsilon_{ij}^C$  oraz odkształcenie powstające w wyniku dylatacji  $d\epsilon_{ij}^D$ :

$$d\epsilon_{ij} = d\epsilon_{ij}^E + d\epsilon_{ij}^C + d\epsilon_{ij}^D \quad (9)$$

Jednak żaden z powyższych modeli nie opisuje w sposób zadawalający struktury roślinnych materiałów ziarnistych [Horabik i Molenda 2003]. Próby wykorzystania równań liniowych i nieliniowych, w których zastosowano elementy teorii sprężystości, plastyczności i płynięcia nie dały spodziewanego rezultatu [Kruszewski i in. 2001]. Stosowane uproszczenia pozwalają na ograniczone prognozowanie zachowania się masy ziarnistej. Traktowanie ośrodka jako ciągłego stwarza trudności związane z precyzyjnym określeniem niezbędnych stałych materiałowych. Chodzi tu m.in. o gęstość materiału, moduł sprężystości  $E$  czy też współczynnik tarcia wewnętrznego. Sytuację dodatkowo komplikuje brak norm i standardów pomiarowych [Frączek i in. 2004]. Oddzielnym, równie ważnym utrudnieniem jest anizotropia tego typu ośrodków oraz wpływ sposobu formowania złoża (decydujący o orientacji ziaren) na zmienność właściwości mechanicznych materiału [Molenda i in. 2005]. Pojedyncze ziarna rozłożone są w przestrzeni w sposób chaotyczny i korelacja położenia widoczna jest jedynie pomiędzy najbliższymi sąsiadami. W miarę wzrostu odległości od rozpatrywanego elementu (ziarna) korelacja zanika i zwiększa się nieuporządkowanie. Trudno zatem stosować proste opisy deterministyczne i coraz częściej, do wyznaczania makroskopowych właściwości fizycznych tych materiałów stosowane są metody statystyki matematycznej. Jest to kierunek, który – dzięki stosowaniu nowoczesnych metod i urządzeń obliczeniowych, rozwija się w sposób dynamiczny.

### Mikrostruktura

Wobec wątpliwości odnośnie zastosowań teorii bazujących na elementach mechaniki ośrodków ciągłych badania ukierunkowane zostały na analizę mikrostruktury. U ich podstawy leży założenie, iż o zachowaniu się całego ośrodka decydują właściwości pojedynczych ziaren oraz relacje zachodzące między stykającymi się nasionami. Tensor naprężenia  $\sigma_{ij}$  obliczany jako średnia dla dużej liczby cząstek zawartych w pewnej objętości  $V$  (przyjmuje się, że odpowiada tensorowi naprężenia w sensie mechaniki ośrodków ciągłych). Do jego wyznaczenia niezbędna jest jednak wiedza na temat wektorów sił oraz interakcji między stykającymi się nasionami.

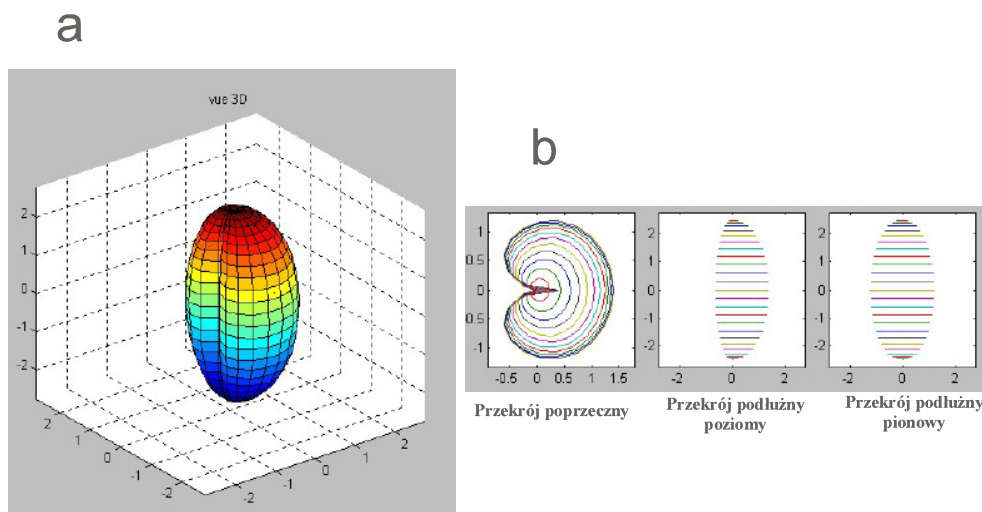
W przypadku materiałów roślinnych istotne jest uwzględnienie dużej odkształcalności pojedynczych nasion. Powoduje ona, iż pod wpływem nacisku punkty styku nasion zmieniają się w powierzchnię kontaktu. W miejsce punktowego przyłożenia siły normalnej i stycznej na powierzchni styku pojawia się więc naprężenie i dodatkowo występuje moment. Powyższą sytuację opisuje model MDEM zastosowany przez Iwashitę i Odę [2000], którzy zaproponowali modyfikację opracowanej przez Cundall'a i Strack'a [1979] metody elementów dyskretnych DEM.

## Modelowanie wirtualne

O różnym sposobie podejścia do zagadnienia modelowania roślinnych materiałów ziarnistych świadczą choćby badania prowadzone przez Mabilie'a i Abecassis'a [2003]. Zaproponowany przez nich parametryczny model ziarna pszenicy uwzględnia szczegółowo zmienność jego cech morfologicznych. Model ten składa się z prostych równań matematycznych opisujących kształt ziarna, przy wykorzystaniu podstawowych wymiarów geometrycznych. Metoda pozwala na uzyskanie trójwymiarowego, geometrycznego reprezentanta struktury ziarna pszenicy. Morfologiczne różnice między ziarnami pszenicy zwykłej i pszenicy durum uwzględniono poprzez różny kształt bruzdki. Jak stwierdzają autorzy, model ten może zostać użyty do obliczenia objętości ziarna (poprzez rozwiązanie całki potrójnej), jego powierzchni (rozwiązanie całki podwójnej) oraz dostarcza nowej i dokładnej metody dla oceny podatności ziarna na przemiał. Jednakże należy być ostrożnym przy praktycznym stosowaniu równania, ponieważ błędny wybór wielomianów może doprowadzić do negatywnych skutków modelowania.

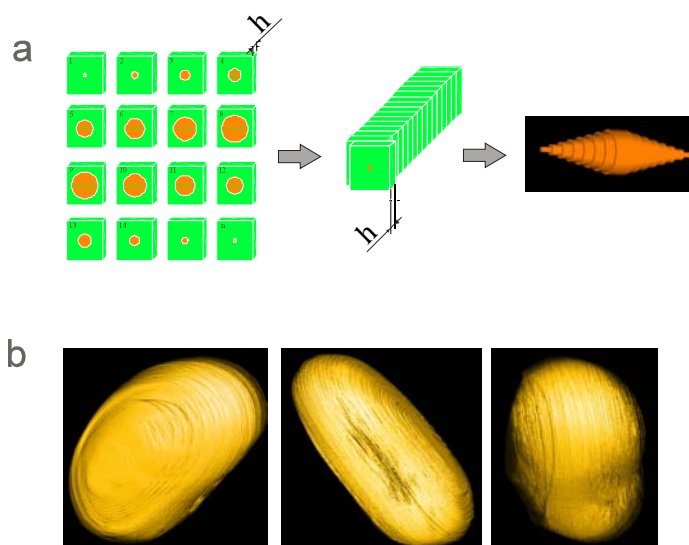
Jak przykładowo pokazano na rys. 1 dla każdej odmiany pszenicy utworzony został wzorcowy ziarniak („wirtualne jądro”), który umożliwia obliczenie dużej liczby cech geometrycznych. Wprowadzenie dodatkowego parametru w równaniach przekształca szkielet ziarna w pełną strukturę uwzględniającą siatkę endospermu. Wirtualne ziarno mogłoby stać się wizualnym wsparciem, pomocnym w rozpoznaniu lokalizacji i dystrybucji komponentów zmieniających wewnętrzne właściwości ziarna.

Modelowanie wirtualne różnych nasion przeprowadzone było również przez Frączka i Wróbla [2003]. Autorzy uzyskiwali wirtualne modele dzięki zestawieniu kolejnych obrazów binarnych ciętego ziarna. Uzyskane przy pomocy aparatu cyfrowego kolorowe obrazy poddawano obróbce odpowiednio dobranym zestawem filtrów. Filtrację przeprowadzono w programie MULTISCAN v.14.02 i XnView6. Generowanie modeli przeprowadzono w programie KSRUN firmy Carl Zeiss. Zasadę generowania modelu przedstawia rys. 2. Aplikacja ta składa w stos serie binarnych obrazów. Odległość pomiędzy obrazami w stosie odpowiada grubości cięcia na mikrotomie. Z serii obrazów wyodrębniane są obszary zajmowane przez przekroje ziarna. Płaszczyzny te otrzymują trzeci wymiar przez dodanie wysokości  $h$ . Powstałe w ten sposób plastry łączą się w jednolitą bryłę będącą trójwymiarowym modelem ziarna.



Rys. 1. Parametryczny model ziarna pszenicy (wg Mabilie'a i Abecassis'a):  
 a – wirtualne ziarno, b – przekroje wirtualnego ziarna

Fig. 1. Parametric model of grain seed (according to Mabilie and Abecassis):  
 a – virtual grain, b – virtual grain sections



Rys. 2. Wirtualne modelowanie ziarna pszenicy (wg Frączka i Wróbla):  
 a – zasada modelowania, b – uzyskany model

Fig. 2. Virtual modelling of wheat grains (according to Frączek and Wróbel):  
 a – modelling principle, b – obtained model

Autorzy stwierdzili, iż zgodnie z uzyskanymi wynikami niezbędne jest tworzenie modelu 3D oddzielnie dla każdej odmiany. Wynika to z dużego zróżnicowania kształtu i wymiarów badanych nasion. Dzięki zaproponowanym modelom możliwe jest dokonywanie pomiarów geometrii (długości, szerokości, promieni krzywizny) w dowolnej płaszczyźnie przekroju. Może to znaleźć zastosowanie zarówno przy obliczaniu modułu sprężystości według standardów ASAE, jak i przy ocenie poprawności innych modeli wirtualnych, których koncepcja tworzenia bazuje na aproksymacji ziarna różnymi powierzchniami.

### **Podsumowanie**

Jak stwierdza Zięba [2001] złożoność układów biologicznych wymaga stosowania coraz to nowych „aksjomatów” niezbędnych do ich opisu. Traktuje układy tego typu jako otwarte i uważa, że wiedza o nich jest procesem ewolucyjnym. Trudno się nie zgodzić z tym poglądem. W świetle przeprowadzonej analizy należy stwierdzić, że dotychczasowe poszukiwania modelu ziarnistych struktur roślinnych ciągle ewoluują, a koncepcja podejścia do zagadnienia zmienia się wraz z rozwojem nowoczesnych technik pomiarowych oraz obliczeniowych. Początkowe próby prowadzone były w skali makro i wykorzystywano w nich podstawowe prawa mechaniki ośrodków ciągłych. Następne próby dotyczyły modeli tworzonych na poziomie mikro, w których podstawowym elementem struktury jest szkielet czyli pojedyncze ziarno. W chwili obecnej podejmowane są próby budowania struktur na poziomie nano. Punktem wyjściowym jest wówczas założenie, że właściwości danego układu są funkcją ułożenia poszczególnych nanocząstek układu materialnego.

Z przeprowadzonego rozeznania wynika, że najbardziej obiecującym kierunkiem tworzenia modeli roślinnych materiałów ziarnistych jest modelowanie wirtualne. Stworzone programy numeryczne pozwalają na wielostronne badania ziarnistej struktury wirtualnej m.in. poprzez symulację upakowania cząstek w przestrzeni [Gliński, Konstankiewicz 1999]. Dzięki wirtualnemu odwzorowaniu kształtu pojedynczych ziaren realne jest modelowanie przebiegu wielu procesów technologicznych. Sądząc po wynikach badań uzyskanych w gleboznawstwie [Czachor 1997] i przemyśle farmaceutycznym (<http://smartimtech.com>) tego typu modelowanie powinno w przyszłości przynieść największe wymierne efekty.

Bez względu jednak na rodzaj zastosowanego modelu niezbędne jest przeprowadzenie jego eksperymentalnej weryfikacji. Wzrost stopnia komplikacji modelu zwiększa zakres weryfikacji i wymusza stosowanie nowych, coraz dokładniejszych metod i procedur pomiarowych. Problemy związane z pomiarami i standaryzacją metod pomiaru podstawowych właściwości fizycznych roślinnych materiałów ziarnistych zostały szeroko opisane w pracy Frączka i in. [2004].



Należy podkreślić, że do chwili obecnej nie zostały opracowane metody pomiaru wielu wielkości uwzględnianych w omówionych pokrótce modelach. Do najważniejszych zagadnień należy określenie liczby punktów styku (średnia liczba najbliższych sąsiadów) ośrodka zbudowanego z ziaren oraz pomiar powierzchni kontaktu między nasionami. Określenie tych wielkości daje podstawy do prognozowania rzeczywistych sił i nacisków występujących w złożu.

### **Bibliografia**

Barley Technical/Cereal Chemistry 2003. 7–10 September 2003 Materiały z 53rd Australian Cereal Chemistry Conference.

Czachor H. 1997. Geometria fazy stałej i przestrzeni porów w rolniczych ośrodkach granularnych na przykładzie gleby mineralnej. *Acta Agrophysica*. 7: 1-80.

Cundall, P.A. and O.D.L. Strack. 1979. A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies. *Geotechnique*, Vol. 29, pp. 47-65.

Fraćzek J., Kaczorowski J., Ślipek Z., Horabik J., Molenda M. 2003. Standaryzacja metod pomiaru właściwości fizyczno-mechanicznych roślinnych materiałów ziarnistych. *Acta Agrophysica*. 92.

Fraćzek J., Wróbel M. 2003. Analiza możliwości wykorzystania istniejących modeli ośrodków granularnych do opisu biologicznych materiałów ziarnistych. *Acta Agrophysica*. 83: 83-92.

Ghaboussi, J. and H. Momen. 1982. Modeling and Analysis of Cyclic Behavior of Sand. *Soil Mechanics-Transient and Cyclic Loads*, John Wiley & Sons, New York, pp. 313-342.

Gliński J., Konstankiewicz K. 1999. Agrofizyka dla środowiska bezpiecznej produkcji biologicznej. *Acta Agrophysica* 20: 36-40.

Horabik J., Molenda M. 2003. Makro- i mikroskopowe modele materiałów sypkich. *Acta Agrophysica*. 93:17-31.

Iwashitę K., Oda M. 2000. Micro-deformation mechanism of shear banding process based on modified distinct element method. *Power Technology*. 109: 192-205.

Kruszewski Z., Pukos A., Frąk W. 2001. Ilościowe badania struktury trójfazowych ośrodków granularnych i komórkowych – fakty i fikcje. *Agrofizyka na początku XXI wieku*. Wydawnictwo Naukowe FRNA, 3: 53-54.

Lande P.V., Nelson B.R., Marvin Y. 1987. Nonassociated flow and stability of granular materials. *J. of Agric. Engineering Res.* 113(9): 1302-1318.

Mabille F., Abecassis J. 2003. Parametric modelling of wheat grain morphology: a new perspective. *J. of Cereal Science*. 37: 43-53.

Molenda M., Horabik M., Laskowski J., Łysiak G., Skonecki S. 2005. Mechanical properties of granular agro-materials and food powders for industrial practice. Institute of Agrophysics PAS.

Roscoe K.H. 1970. The influence of strains in soil mechanics. *Geotechnique*. 20(2): 127-170. (<http://smartimtech.com>)

Zięba S. 2001. Algorytm organizacji układów biologicznych. *Agrofizyka na początku XXI wieku*. Wydawnictwo Naukowe FRNA, 3: 21-22.

## **MODELS OF VEGETABLE GRANULAR STRUCTURES**

### **Summary**

The paper presents review of trends in development of vegetable granular centre modelling. The concept to solve this issue is changing with the development of modern measuring and computing techniques. Initial tests were carried out in macro scale, making use of basic laws of continuous media mechanics. Next tests were carried out for micro-level models. In these models, basic structure element is skeleton, that is a single grain. Current tests involve building nano-level structures. In this case we start from the assumption that properties of a given system constitute the function of arrangement of individual atoms and particles, and thus it is possible to control behaviour of these objects by determining this arrangement. It should be emphasized that in recent years there are extended studies carried out in order to link research in microstructure with specification of macroscopic properties. Completed review indicates that virtual modelling is one of the fastest growing trends in building of vegetable granular material models.

**Key words:** granular material, modelling, virtual model