

УДК 631.42

А. К. Балалаев

ОПЫТ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА ПОЧВЫ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

О. К. Балалаев

Дніпропетровський національний університет

ДОСВІД КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ ПОРОВОГО ПРОСТОРУ ҐРУНТУ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Запропоновано комп'ютерну модель синтезу зображень порового простору. Проведено статистичний аналіз модельних порових структур. Виявлено залежності кількості, розміру, форми та орієнтації пор від аналогічних характеристик модельних ґрунтових часток.

Ключові слова: комп'ютерна модель, мікроморфометрія, шліф, зображення, ґрунтові частки, поровий простір.

A.K. Balalayev

Dnipropetrovsk National University

EXPERIENCE OF COMPUTER MODELLING OF FRAME OF SOIL PORE SPACE BY MONTE-CARLO METHOD

The computer program synthesizes a model image of a soil section. The statistical analysis calculates parameters of pores. The dependences of number, size, form and orientation of pores from the similar characteristics of model soil particles are defined.

Key words: computer model, micromorphometry, microsection, image, soil particles, pore space.

Основным предметом изучения в почвенной микроморфологии является шлиф с ненарушенным строением почвы. Объект, безусловно, интересный, сложный и очень информативный. Одним из направлений нашей деятельности является расшифровка той экологической информации, которую несет в себе изображение почвенного шлифа. О важности такой информации, как характеристика биогеоценоза, известно и написано много (Парфенова, Ярилова, 1977; Белова, 1997; Белова, Травлеев, 1999). Почвенная структура, отраженная в шлифе, – важнейшее качество почвы, с одной стороны, отражающее условия ее формирования, а с другой – определяющее ее физические, химические, экологические и другие свойства.

Для качественного изготовления микрошлифа при всех его многочисленных достоинствах необходимо применение сложной и дорогостоящей технологии. Поэтому для получения статистически надежных результатов и проведения обширного мониторинга сложно набрать большой объем выборки и обычно ограничиваются тремя почвенными шлифами на пробную площадь, выбранными в характерных местах и взятых на разных глубинах. Такой недостаток можно было бы исправить, если бы в нашем распоряжении был метод создания «искусственных» шлифов, а точнее, их изображений. Моделирование, с нашей точки зрения, является именно таким безальтернативным подходом в решении вышеуказанной проблемы. Споры могут вестись, пожалуй, только вокруг выбора метода моделирования, его конкретной реализации и степени упрощения реальных процессов. Компьютерная программа должна при заданных начальных условиях выдавать любое n -ное количество вариантов изображений шлифов, по которым определяются характерные параметры, затем они статистически обрабатываются с необходимой точностью и сравниваются с аналогичными характеристиками немногочисленных природных шлифов. При этом возникает проблема выбора таких характеристик, которые наилучшим образом описывают полезные свойства созданных моделей и природных шлифов.

Временная изменчивость почвенных структур является другой проблемой, которую позволяет решить модельный подход. Здесь имеется в виду, что на формирование почвенных структур влияют сложные периодические и взаимозависимые процессы, описание которых в большинстве случаев известно, но как они влияют на почвенные структуры и поровое пространство, точно не может сказать никто. Почвенный микрошлиф –

своего рода срез на временной шкале результата деятельности этих процессов. Если ввести закономерности формирования структуры порового пространства в динамическую модель, то можно наблюдать, какая структура сформируется через заданный промежуток времени, и делать соответствующие выводы. Однако динамические модели в данной публикации не рассматриваются, но они, несомненно, являются темой будущих изысканий.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Поиски соответствующих моделей в литературе и сети Интернет выявили применение аналогичных методов в физической химии и геологии. В физической химии пористых тел модельные подходы развиты достаточно хорошо (Хейфец, Неймарк, 1982), но их основная направленность – прогнозирование физико-химических свойств пористых материалов. Это не совсем подходит для решения наших задач, такие модели не могут быть использованы в чистом виде без существенных изменений. Модели, применяемые в геологии горных пород (Ромм, 1985; Осипов и др., 1989), по своей сути больше подходят для достижения поставленных нами целей. Однако они в основном направлены на изучение структуры мертвых горных пород на основе снимков, сделанных электронным сканирующим микроскопом, т. е. в гораздо меньших масштабах, чем используемые при изучении почв. Структура верхнего слоя почвы как наиболее биологически активного элемента экосистемы, несомненно, гораздо сложнее структуры почвообразующей породы.

Для описания свойств пористых материалов применяют различные модели структуры порового пространства, представляя сложное пространство пор совокупностью характерных элементов – пор определенной формы и размера. В отдельную группу можно выделить модели, развиваемые теорией перколяции (Эфрос, 1982; Stauffer, 1985; Тарасевич, 2002). Задачи, решаемые такими моделями, тесно связаны с поставленными перед нами задачами.

Между тем структура почвенных пор чрезвычайно сложна и разнообразна. Для упрощения рассмотрения такой структуры примем за основу следующий двухфазный модельный подход. Твердую фазу (почвенные частицы, агрегаты и т. д.) определим как скелет почвы, а систему пустот – как пространство пор.

Почвенное пространство пор обладает сложной нерегулярной стохастической структурой. Стохастические модели в общем случае представляют пористую структуру в виде статистического ансамбля взаимосвязанных структурных элементов, свойства и взаимное расположение которых случайны и подчиняются некоторым вероятностным законам. Отдельные поры, составляющие в совокупности поровое пространство, отличаются по форме, размерам, ориентации, разветвленности, кривизне поверхности и т. д.

Основную идею описываемой здесь модели можно упрощенно изложить следующим образом. Предположим, у нас имеется большое количество элементарных почвенных частиц разных размеров, формы и ориентации. Смешаем эти частички на квадратной плоскости с определенным размером (500×500 пикселей), задавая случайным образом (метод Монте-Карло) координаты центра масс частичек в пределах плоскости. При этом точкам, принадлежащим частицам, присваивается «0», они отображаются черным цветом. Не заполненным частицами точкам, соответствующим порам, присваивается «1», они отображаются белым цветом на экране компьютера. Необходимо задавать высокий коэффициент заполнения (80 %). Это требование имеет принципиальное значение, так как 80 %-ное заполнение всегда превышает предел протекания (перколяции), и при его уменьшении появляются мегاپоры, которые начинаются и заканчиваются вне исследуемой плоскости. В этом случае значения измеряемых параметров существенно меняются. Количество частиц устанавливается обратно пропорциональным их площади, что не является существенным недостатком, так как в природе число маленьких частиц значительно превышает число больших на единицу площади. Заметим, если число частиц, участвующих в моделировании, не обратно пропорционально их площади, мы получим тривиальный результат, когда выходные параметры существенно зависят только от размера частиц, что не соответствует действительности. Полученное модельное изображение анализируется теми же методами, что и сканированный почвенный шлиф (Претт, 1982; Gonzalez, Wintz, 1987; Балалаев, 2002). Для получения необходимых выводов полу-

ченные данные подвергаются статистическому анализу (Афифи, Эйзен, 1982; Балалаев, 2002). Наглядно принцип функционирования модели изображен на блок-схеме (рис. 1).

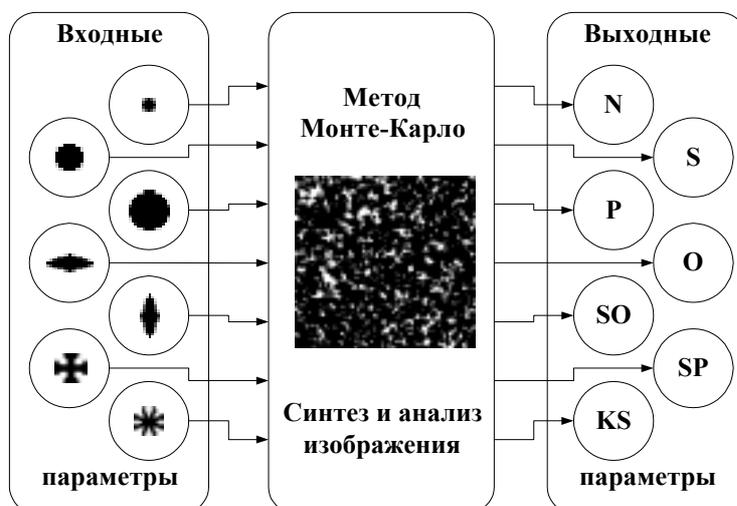


Рис. 1. Блок-схема модельного эксперимента: N – общее число найденных пор на изображении, S – площадь пор, P – длина периметра частицы, O – ориентация частицы, SO – коэффициент выпуклости частицы, SP – отношение площади частицы к ее периметру, KS – коэффициент сложности частицы

Рассмотрим подробнее входные и выходные параметры. Входные переменные, или элементарные частицы и их геометрические характеристики, приведены в табл. 1. Напомним, что коэффициент выпуклости равен отношению площади к выпуклой площади объекта и отражает особенности формы частицы, остальные характеристики в комментариях

Таблица 1

Геометрические характеристики модельных почвенных частиц и их изображения

Условное обозначение частицы	X0	X1	X2	X3	X4	X5	X6
Изображение частицы							
Площадь, пк.	81	210	387	210,5	210,5	212,5	219
Периметр, пк.	34,14	53,46	72,77	71,11	71,11	105,74	152,65
$\frac{\text{Площадь}}{\text{Периметр}}$	2,37	3,93	5,32	2,96	2,96	2,01	1,43
Коэффициент выпуклости	0,91	0,95	0,95	0,87	0,87	0,63	0,6
Ориентация, град.	0	0	0	0	90	0	0

не нуждаются. Из многообразия плоских фигур 7 тестовых выбраны не случайно. Три круга разных диаметров $X0$ ($d = 10$ пк.), $X1$ ($d = 16$ пк.) и $X2$ ($d = 22$ пк.) используются для выяснения зависимости выходных переменных от размера входных частичек. Фигуры $X3$ и $X4$, напоминающие вытянутые эллипсы, ориентированы взаимно перпендикулярно, площадь их приблизительно равна площади круга $X1$, используются в модели для выяснения зависимости от ориентации входных показателей. Связь выходных параметров с формой входных выявляется с помощью фигур $X5$ и $X6$, которые имеют низкие значения отношения площади к периметру и коэффициента выпуклости, нулевую ориентацию и площадь, соответствующую $X1$.

После предварительных расчетов и экспериментов из большого количества выходных переменных, которые, в принципе, можно посчитать, были выбраны наиболее значимые исходя из поставленных целей. Сюда вошли: общее число найденных пор на изображении (N), средняя площадь пор ($MEAN_S$), суммарная длина периметра (SUM_P), усредненная ориентация ($MEAN_O$), средний коэффициент выпуклости ($MEAN_SO$), усредненное отношение площади к периметру ($MEAN_SP$), коэффициент сложности (KS). Коэффициент сложности (дробности) является интегральным показателем сложности (или пестроты) геометрического строения комбинаций объектов на изображении (Фридланд, 1972) и вычисляется по формуле

$$KS = \frac{(A - S_{max}) * \sum_{k=1}^N \frac{P_k}{\sqrt{S_k}}}{3,54 * A * \sum_{k=1}^N S_k}$$

где A – площадь всего изображения; S_{max} – площадь самой крупной поры; N – общее число пор на изображении; P_k и S_k – периметр и площадь каждой поры.

Для оптимизации вычислительного процесса модельного эксперимента был составлен полный ортогональный 7-факторный план (Кормен и др., 2000). Принцип формирования изображений согласно плану следующий: если в какой-либо позиции строки плана стоит «1», то соответствующая фигура используется в тестировании, если «0» – не используется. Случай, когда все элементы строки плана равны 0, не используется, так как формируется пустое изображение. При этом каждая строка плана использовалась в трех повторностях для повышения статистической значимости и выяснения степени зависимости выходных характеристик от алгоритма синтеза изображений. Таким образом, общее число синтезированных и обработанных изображений составило $2^7 * 3 - 3 = 381$. Для желающих повторить подобные исследования необходимо отметить, что вычисления занимают много компьютерного времени. На ЭВМ с процессором 800 МГц и шиной памяти 100 МГц вычисления длились около 25 часов. Правда, автор не ставил перед собой задачу оптимизации алгоритма. Судя по всему, даже при оптимальной программе и на более производительном компьютере на быстрый результат рассчитывать не приходится. В будущем, по мере накопления входных и выходных данных, решение этой проблемы возможно на основе применения нейросетевого подхода, то есть обучение многослойной нейронной сети для имитации выходных параметров на базе входных (Горбань, 1990; Уоссерман, 1992).

Теперь остается выяснить, как зависят макроскопические характеристики порового пространства от размера, формы и ориентации почвенных частиц.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Примеры изображений, сформированных в рамках описываемого модельного подхода с обозначенными входными параметрами, приведены на рис. 2. Визуально можно заметить существенные различия геометрии пор на четырех изображениях. Теперь покажем это на цифрах, полученных методами статистического анализа. Для этого изучим коэффициенты корреляции, приведенные в табл. 2.

Обращает на себя внимание тот факт, что входная переменная X_6 тесно связана со всеми выходными, кроме среднего коэффициента выпуклости и усредненной ориентации. Причем с увеличением доли фигур X_6 на изображении количество пор растет, а средняя площадь уменьшается, судя по всему, за счет пор малого размера. Также увеличивается коэффициент сложности, что, в принципе, не противоречит нашим представлениям о структурообразовании. При этом суммарная длина периметра и среднее отношение площади к периметру снижается и этот факт требует осмысления. Ярким подтверждением того, что программа работает правильно, являются максимальные коэффициенты корреляции усредненной ориентации и содержанием ориентированных эллипсов X_3 , X_4 по сравнению с другими входными параметрами. Связь, пусть и не такая сильная, фигуры иной формы X_5 со средним коэффициентом выпуклости свидетельствует о том, что этот коэффициент несет определенную информацию о геометрии порового про-

странства. На удивление, входные переменные X0, X1, X1 слабо связаны со всеми выходными переменными.

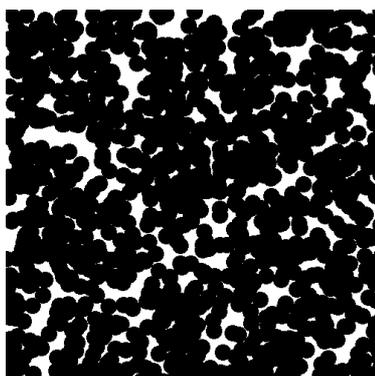
Таблица 2

Коэффициенты взаимной корреляции входных и выходных параметров модели

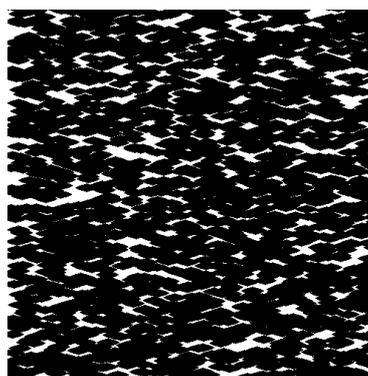
Тестовая частица	Зависимая переменная						
	N	MEAN_S	SUM_P	MEAN_O	MEAN_SO	MEAN_SP	KS
X0	-0,07	0,13	0,27	0,10	-0,30	0,13	-0,15
X1	-0,28	0,31	0,28	0,10	-0,22	0,26	-0,33
X2	-0,38	0,31	0,24	0,08	-0,15	0,20	-0,33
X3	-0,12	0,06	0,04	-0,50	-0,01	0,17	-0,09
X4	-0,13	0,09	0,09	0,57	-0,02	0,17	-0,12
X5	0,26	-0,32	-0,31	0,12	0,47	-0,01	0,25
X6	0,66	-0,71	-0,69	-0,28	-0,02	-0,79	0,67

Примечание. Жирным шрифтом выделены коэффициенты на уровне значимости 0,05.

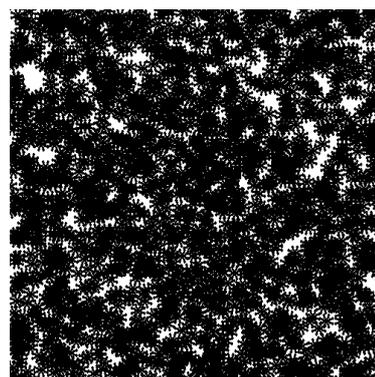
Для окончательного прояснения ситуации и обнаружения скрытых общих факторов используем факторный анализ. Применим метод главных компонент с *Varimax* вращением координатных осей. Предварительно центрируем и нормируем все переменные.



X0 = 0, X1 = 1, X2 = 0, X3 = 0,
X4 = 0, X5 = 0, X6 = 0



X0 = 0, X1 = 0, X2 = 0, X3 = 1,
X4 = 0, X5 = 0, X6 = 0



X0 = 0, X1 = 0, X2 = 0, X3 = 0,
X4 = 0, X5 = 0, X6 = 1



X0 = 1, X1 = 1, X2 = 1, X3 = 1,
X4 = 1, X5 = 1, X6 = 1

Рис. 2. Примеры синтезированных модельных изображений

Результаты расчетов приведены в табл. 3. Выбор четырех факторов производили на основе критерия каменистой осыпи. Первый наиболее мощный фактор, объясняющий 38 % общей дисперсии, связан с фигурой X6. Факторные нагрузки имеют те же знаки, что и соответствующие коэффициенты корреляции, но значения их выше. Это неудивительно, так как факторные нагрузки считаются на основе таблицы коэффициентов взаимной корреляции. Второй фактор (13 % дисперсии) связан с ориентацией частиц, причем здесь

Таблица 3

Факторные нагрузки, собственные значения и доля общей дисперсии для входных и выходных признаков модели

Признак	Фактор				Признак	Фактор			
	1	2	3	4		1	2	3	4
X0	0,12	0,07	-0,28	0,77	MEAN_S	0,93	0,05	-0,31	-0,08
X1	0,26	0,05	-0,24	-0,02	SUM_P	0,91	0,08	-0,34	0,08
X2	0,22	0,08	-0,27	-0,62	MEAN_O	0,30	0,90	0,10	0,04
X3	0,17	-0,69	0,07	0,01	MEAN_SO	-0,20	-0,01	0,84	-0,17
X4	0,10	0,66	0,04	-0,02	MEAN_SP	0,97	0,05	0,03	0,02
X5	-0,07	0,09	0,74	0,09	KS	-0,94	-0,06	0,28	0,08
X6	-0,84	-0,01	-0,27	-0,07	Собственные значения	5,39	1,76	1,92	1,08
N	-0,92	-0,05	0,25	0,18	Доля дисперсии	0,38	0,13	0,14	0,08

Примечание. Жирным шрифтом выделены факторные нагрузки более 0,6 и менее -0,6

имеют влияние только ориентированные фигуры X3 и X4. Третий фактор (14 % дисперсии) связан с влиянием фигуры X5 на коэффициент выпуклости и объясняет какие-либо особенности формы частиц и пор. Четвертый, самый малозначимый, фактор (8 % дисперсии) не связан ни с одним выходным параметром модели. Он дает высокие значения факторных нагрузок на признаки X0, X2 с разными знаками и, возможно, отражает скрытые закономерности, которые мы упустили из виду. В любом случае значение последнего фактора невелико, и в некоторых случаях его можно не учитывать.

ВЫВОДЫ

Итак, какую пользу нам принесло использование модели? Известно, что размер, форма и ориентация пор в почвах определяется размером, формой и ориентацией составляющих их частиц, а также их взаимным расположением. Однако модельные эксперименты показали, что это не совсем так. Во-первых, размер и площадь частиц правильной формы имеет второстепенное влияние на основные показатели порового пространства. Поэтому примитивные модели, основанные на представлении о почвенных частицах как о шариках разного размера, не точно отражают действительность. Во-вторых, форма частиц является наиболее важным и информативным признаком, определяющим особенности геометрии порового пространства. Причем форму необходимо рассматривать как сборный признак, состоящий из нескольких компонент, изучить которые еще предстоит. И в-третьих, только ориентация пор напрямую зависит от ориентации почвенных частиц, что, в принципе, очевидно и не требует доказательства.

Мы отдаем себе отчет в том, что сделанные выводы предварительные и предложенная модель не является универсальной. Например, при изменении способа укладки частиц в пространстве результаты расчетов могут существенно измениться. Необходимо проведение дополнительных модельных экспериментов с частицами различной формы и различными способами формирования изображений до тех пор, пока модель не будет адекватно отражать ту структуру, которую имеют природные почвенные объекты.

Ясно одно: дальнейшее развитие модельных подходов, подобных описанному, значительно продвигает нас в понимании процессов формирования эдафотопов по схеме *частица – пора*, а также облегчает расшифровку изображений почвенных шлифов реальных природных объектов.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- Афифи А., Эйзен С. Статистический анализ: Подход с использованием ЭВМ. – М.: Мир, 1982. – 488 с.
- Балалаев А.К. Опыт применения компьютерных технологий в морфометрических исследованиях почвенных микрошлифов // *Грунтознавство*. – 2002. – Т. 2, № 1-2. – С. 88-69.
- Балалаев А.К. Основные принципы статистического анализа и обработки многомерной информации в почвенной микроморфометрии // *Вестник ДНУ. Биология. Экология*. Вып. 10, Т. 1. – Д.: ДНУ, 2002. – С. 60-66.
- Белова Н.А. Экология, микромофология, антропогенез лесных почв степной зоны Украины. – Д.: Изд-во ДГУ, 1997. – 264 с.
- Белова Н.А., Травлев А.П. Естественные леса и степные почвы. – Д.: Изд-во ДГУ, 1999. – 348 с.
- Горбань А.Н. Обучение нейронных сетей. – М.: СП ПараГраф, 1990. – 160 с.
- Кормен Т., Лейзерсон Ч., Ривест Р. Алгоритмы: построение и анализ. – М.: МЦНМО, 2000. – 960 с.
- Парфенова Е.И., Ярилова Е.А. Руководство к микроморфологическим исследованиям в почвоведении. – М.: Наука, 1977. – 197 с.
- Осипов В.И., Соколов В.Н., Румянцева Н.А. Микроструктура глинистых пород. – М.: Недра, 1989. – 211 с.
- Претт У. Цифровая обработка изображений. – М.: Мир, 1982. – 790 с.
- Ромм Е.С. Структурные модели порового пространства горных пород. – Ленинград.: Недра, 1985. – 240 с.
- Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. – М.: Эдиториал УРСС, 2002. – 112 с.
- Уоссерман Ф. Нейрокомпьютерная техника: Теория и практика. – М.: Мир, 1992. – 237 с.
- Фридланд В.М. Структура почвенного покрова. – М.: Мысль, 1972. – 422 с.
- Хейфец Л.И., Неймарк А.В. Многофазные процессы в пористых средах. – М.: Химия, 1982. – 320 с.
- Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка. – М.: Наука, 1982. – 176 с.
- Gonzalez R.C., Wintz P. Digital Image Processing. – Addison-Wesley. Reading. Massachusetts. – 1987. – 505 p.
- Stauffer D. Introduction to percolation theory. Taylor & Francis, 1985. – 256 p.

Надійшла до редколегії 14.04.03