

黏土颗粒表面分维模型的构建及其应用

吴成宝¹, 胡小芳^{1,2}, 胡大为¹

(1 华南理工大学工业装备与控制工程学院粉体工程实验室, 广州 510640;

2 华南理工大学聚合物成型加工工程教育部重点实验室, 广州 510640)

摘要: 构建了黏土颗粒表面分维数学模型, 并以高精度数字光学显微系统为基础, 测算了部分黏土样品的颗粒表面分维, 结果验证了表面分维数学模型的合理性, 形成了一套简约的黏土颗粒表面分维分析方法。

关键词: 土壤颗粒; 表面分维; 数字显微系统

中图分类号: S152

黏土的颗粒结构状况是工业、农业、环境工程等学科的基础性课题^[1-4]。由于黏土颗粒形态及其表面具有自相似形态特征, 即所谓分形特征^[5-11], 用分形这一强有力的数学工具^[10-12]进行分析, 将比传统的欧氏几何更为方便和有效。

目前国内外测定表面分维的方法主要有扫描电镜法^[6]、压汞法、吸附法等^[13-14], 这些方法以测量颗粒大小(粒径)的分布和表观比表面积为主, 而计算颗粒表面分维则同时需要粒径和颗粒几何特征数据, 并且对几何形态的测量精度有较高要求。

本文采用德国 Leica DMR 研究级透射和反射偏光数字显微系统, 该系统能有效地消除显微成像中的球差、象散、畸变和色差, 为精确分析黏土颗粒打下了基础。在此系统上采集了部分不同质地的黏土颗粒的显微图像, 探索了土壤颗粒表面分维测定的有关问题, 并构造了一个纯几何模型, 用以方便在数字显微条件下的土壤和黏土颗粒表面分维分析。

1 模型构建

Avnir 等^[15]和黄冠华等^[16]根据若干矿物颗粒材料表观比表面积实测结果, 建立了基于吸附法的颗粒材料表观比表面积 $A(dI)$ (m_2/g) 与颗粒两粒级平均半径 \bar{d}_I ($\bar{d}_I < \bar{d}_{I+1}, I=1,2,\dots$) 之间的幂函数关系:

$$A(\bar{d}_I) = k \cdot \bar{d}_I^{D_s} \quad (1)$$

式中, \bar{d}_I 表示两粒级 d_I 和 d_{I+1} 间粒径的平均值, k 是描述形状和尺度的常数, D_s 是颗粒表面分维, 其范围限定在 $2 \leq D_s \leq 3$ 之间。

常规的表现比表面积 $A(\bar{d}_I)$ 是采用一定粒级间

隔的颗粒体积比颗粒重量表示的, 即:

$$A(\bar{d}_I) = S_I / (\rho_I \cdot V_I) \quad (2)$$

式中, S_I 表示同一粒级中所有颗粒表面积之和, V_I 表示同一粒级中所有颗粒体积之和。即:

$$S_I = \sum_{i=1}^n s_i \quad (3)$$

$$V_I = \sum_{i=1}^n v_i \quad (4)$$

若忽略粒级间黏土颗粒密度 ρ 差异, 也就是认为, $\rho_I = \rho (I=1,2,\dots)$ 则(2)式转化为:

$$A(\bar{d}_I) = \sum_{i=1}^n s_i / \left(\rho \cdot \sum_{i=1}^n v_i \right) \quad (5)$$

式中 s_i 表示第 I 粒级中第 i 个土壤颗粒的表面积, v_i 表示第 I 粒级中第 i 个土壤颗粒的的体积。

采用式(5)计算颗粒表面积需要黏土颗粒平均密度 ρ , 这往往不方便。本文利用数字显微系统的特点, 引入颗粒的几何特征改进式(5)。具体做法是在测量颗粒粒径的同时, 测定颗粒形态的其他征数据, 包括“投影面积 (area)”、“最大投影直径 (diameter (max))”和“最小投影直径 (diameter (min))”等, 不失一般性地假定颗粒的表面积、体积与投影面积成正比, 于是单个颗粒的表面积、体积可按以下公式计算^[17]:

$$s_i = k_0 \cdot S_p \quad (6)$$

$$v_i = k_1 \cdot S_p \cdot \frac{d_{\max} + d_{\min}}{2} \quad (7)$$

式中, k_0 为 Cauchy 系数, 根据 Cauchy 定理: 一般情况下其值为 4, 但是由于放在平面上的颗粒总是处于稳

定的位置上, 颗粒的投影并非完全随机, 所以 Cauchy 系数的实测值大约为 3.1 ~ 3.4^[17]。 k_1 为与颗粒形态相关的常数, S_p 为单个颗粒的投影面积, d_{max} 为单个颗粒最大投影直径, d_{min} 为单个颗粒最小投影直径。将式 (6)、(7) 代入式 (5) 有:

$$A(\bar{d}_l) = \left(k_0 \sum_{i=1}^n s_{ip} \right) / \left(k_1 \cdot \rho \cdot \sum_{i=1}^n \left(s_{ip} \cdot \frac{d_{imax} + d_{imin}}{2} \right) \right) \quad (8)$$

亦为:

$$A(\bar{d}_l) = \frac{k_0}{k_1 \cdot \rho} \cdot \sum_{i=1}^n s_{ip} / \sum_{i=1}^n \left(s_{ip} \cdot \frac{d_{imax} + d_{imin}}{2} \right) \quad (9)$$

对式 (1) 和式 (9) 取对数有:

$$\begin{aligned} & \log \left(\frac{k_0}{k_1 \cdot \rho} \cdot \sum_{i=1}^n s_{ip} / \sum_{i=1}^n \left(s_{ip} \cdot \frac{d_{imax} + d_{imin}}{2} \right) \right) \\ &= \log (k \cdot \bar{d}_l^{D_s - 3}) \end{aligned} \quad (10)$$

即:

$$\begin{aligned} & \log \left(\sum_{i=1}^n s_{ip} / \sum_{i=1}^n \left(s_{ip} \cdot \frac{d_{imax} + d_{imin}}{2} \right) \right) = \\ & (D_s - 3) \log (\bar{d}_l) + \log \frac{k \cdot k_1 \cdot \rho}{k_0} \quad (2 \leq D_s \leq 3) \quad (11) \end{aligned}$$

式 (11) 即为考虑几何特征的计算颗粒表面分维的数学模型。根据式 (11), 以

$\log \left(\sum_{i=1}^n s_{ip} / \sum_{i=1}^n \left(s_{ip} \cdot \frac{d_{imax} + d_{imin}}{2} \right) \right) \sim \log (\bar{d}_l)$ 作图, 并线性拟合各数据点得到拟合直线, 设直线的斜率为 d , 则:

$$D_s = 3 + d \quad (2 \leq D_s \leq 3) \quad (12)$$

式 (11) 中的 S_p 源于投影直径和投影面积等颗粒几何特征, 因而 D_s 包含了更丰富的颗粒形貌要素, 具

有明晰的物理意义。式 (11) 不再需要测定颗粒的比表面积, 因此使用上比其他方法更简便。

2 实验步骤

2.1 实验材料制备

取华南地区 6 种不同质地的土壤, 分别为: 黄壤, 黄红壤表面覆盖层, 黄红壤粘化层, 黄色石灰土, 河流沉积表层土壤, 石灰性褐土, 每种土壤分别取 5 个样品, 按照中华人民共和国土壤环境监测技术规范 (HJ/T 166-2004) 处理土壤样品, 过 60 目筛后备用。

2.2 实验方法

2.2.1 装片制作与图像采集 将载玻片在 1% ~ 2% 浓度的盐酸中浸泡, 除去表面杂物后用蒸馏水洗净晾干备用。过筛的土壤黏土颗粒分散到载玻片上^[18], 在透射偏光显微镜上放大 100 倍 (10 × 10), 每个载玻片取 5 个不同部位用数码相机拍片, 取得的图像处理后再取平均值作为相应载玻片上黏土颗粒的统计数据。

粒径 > 280 μm 的粒子可视为颗粒团需分散后分析, 本文分两部分考察了粒径范围约在 0.5 ~ 280 μm 之间 (放大 100 倍后的可见颗粒) 和粒径 < 0.5 μm (放大 200 ~ 300 倍后的可见颗粒) 的颗粒。

2.2.2 图像和数据处理 将拍摄的图片导入计算机分析。经图像锐化、设置灰度阈值等操作后, 选择统计“面积 (area)”、“最大投影直径 (diameter (max))”、“最小投影直径 (diameter (min))”, 统计后导出数据到 Excel、Origin 中进行数据处理。

处理过程实例: 实验过程中, 每个样品拍摄的 5 个图片分别称为采样 1 ~ 5。现列举河流沉积表层土壤黏土样品的采样 1、采样 2 的处理过程, 如图 1 ~ 6。河流沉积表层土壤黏土样品的其他采样点, 以及其他样品的处理过程与此相同, 故略。

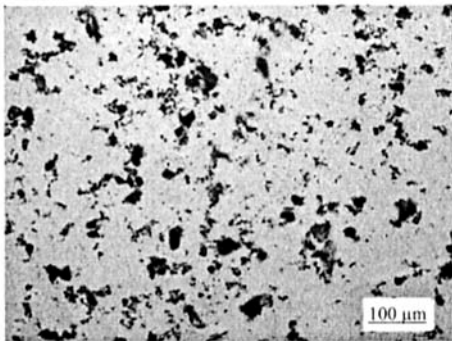


图 1 河流沉积表层土壤显微采样 1

Fig. 1 Soil micro-sample 1 from the surface layer of river deposition

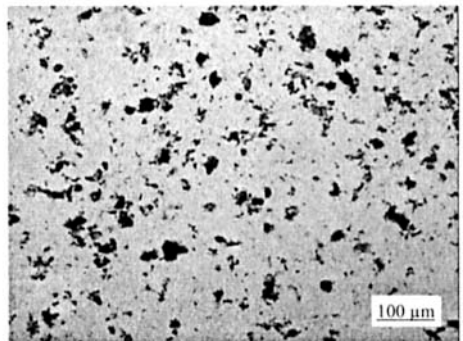


图 2 河流沉积表层土壤显微采样 2

Fig. 2 Soil micro-sample 2 of the surface layer of river deposition

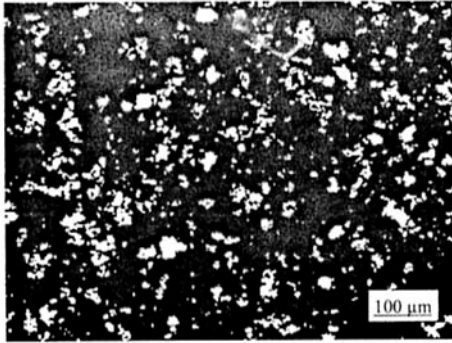


图 3 对图 1 的显微图像的处理结果

Fig. 3 Micro-image processing of the sample in Fig. 1

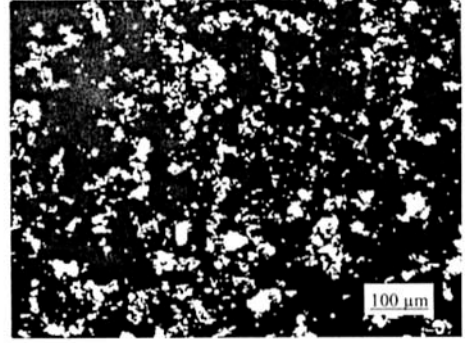


图 4 对图 2 的显微图像的处理结果

Fig. 4 Micro-image processing of the sample in Fig. 2

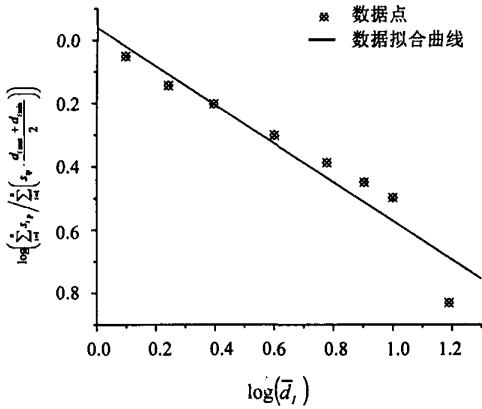


图 5 对图 3 的数据拟合 (D = 2.5138)

Fig. 5 Fitting of the data of Fig. 3

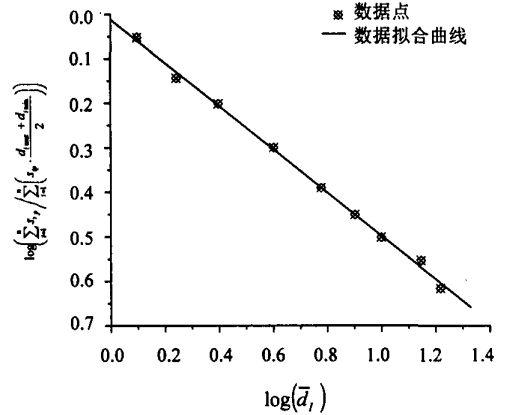


图 6 对图 4 的数据拟合 (D = 2.5150)

Fig. 6 Fitting of the data of Fig. 4

3 结果与讨论

以 $\log(\bar{d}_i)$ 为横坐标, $\log\left(\frac{\sum_{i=1}^n S_{ip}}{\sum_{i=1}^n \left(S_{ip} \cdot \frac{d_{i\max} + d_{i\min}}{2}\right)}\right)$

为纵坐标, 根据数字显微系统测算的 6 种土壤样品的比表面积数据作图, 并采用线性回归拟合出土壤颗粒表面分维, 具体数据如表 1 所示。

表 1 6 种土壤样品表面分维

Table 1 Surface fractal dimensions of six soil samples

	黄壤		黄红壤表面覆盖层		黄红壤粘化层		河流沉积表层土壤		黄色石灰土		石灰性褐土	
	分维	R ²	分维	R ²	分维	R ²	分维	R ²	分维	R ²	分维	R ²
采样 1	2.4950	0.9992	2.5111	0.9989	2.5488	0.9589	2.5138	0.9977	2.5213	0.9974	2.4752	0.9973
采样 2	2.4993	0.9991	2.5127	0.9291	2.5147	0.9988	2.5150	0.9984	2.5171	0.9895	2.5406	0.9797
采样 3	2.4910	0.9993	2.5090	0.9990	2.5151	0.9992	2.5095	0.9984	2.5171	0.9895	2.4810	0.9962
采样 4	2.4962	0.9992	2.4954	0.9988	2.5111	0.9993	2.5158	0.9992	2.5230	0.9871	2.5196	0.9965
采样 5	2.4970	0.9989	2.4914	0.9980	2.4900	0.9994	2.5192	0.9970	2.4760	0.9964	2.4941	0.9881
分维值	2.4957	-	2.5039	-	2.5160	-	2.5147	-	2.5109	-	2.5021	-

由表 1 可知, 土壤颗粒表面分维介于 2.4957 ~ 2.5160 之间。将表 1 中数据与文献[12, 16, 19-20]对比基本吻合。

因此, 本文的工作可为评价土壤结构和质量, 研究土壤分维与土壤粘附性、持水性、流动性等物理性能关系提供新的简易的处理方法。

参考文献:

- [1] 李成亮, 何园球, 熊又升, 杨芳. 四种不同母质发育的红壤水分状况研究. 土壤, 2004, 36 (3): 310-317
- [2] 张崇玉, 李生秀. 土壤颗粒组成与固定态铵之间的关系. 土壤学报, 2004, 41 (4): 649-654
- [3] 赵斌, 李静, 马丽, 郑耀. 土壤不同形态钾含量与土壤颗粒的关系. 土壤, 2002 (3): 164-169
- [4] 刘付程, 史学正, 王洪杰, 张庆利. 苏南典型地区土壤锌的空间分布特征及其与土壤颗粒组成的关系. 土壤, 2003, 35 (4): 330-333
- [5] 彭志忠. 准晶体的构筑原理及微粒分维结构模型. 地球科学, 1985 (4): 50-54
- [6] Tyler SW, Wheatcraft SW. Fractal scaling of soil particle-size distributions: Analysis and limitations. Soil Sci. Soc. Am. J., 1992, 56: 326-369
- [7] 王国梁, 周生路, 赵其国. 土壤颗粒的体积分形维数及其在土地利用中的应用. 土壤学报, 2005, 42 (4): 545-550
- [8] 杨秀春, 刘连友, 严平. 土壤短期吹蚀的粒度分维研究. 土壤学报, 2004, 41 (2): 176-182
- [9] Horgan GW. Mathematical morphology for analyzing soil structure from images. European Journal of Soil Science, 1998, 49: 161-173
- [10] 杨培岭, 罗远培, 石元春. 用粒径的重量分布表征的土壤分形特征. 科学通报, 1993, 38 (20): 1896-1899
- [11] Avnir D, Farin D, Pfeifer P. Surface geometric irregularity of particulate materials: The fractal approach. J. Colloid Interface Sci., 1985, 103 (1): 112-123
- [12] 佟金, 任露泉, 陈秉聪, 阎备战. 土壤颗粒尺寸分布分维及对粘附行为的影响. 农业工程学报, 1994, 10 (3): 28-33
- [13] Falconer KJ. Techniques in Fractal Geometry. Chichester: John Wiley & Sons, 1997
- [14] 陆厚根. 粉体技术导论. 上海: 同济大学出版社, 1998: 23-28
- [15] Avnir D, Farin D, Pfeifer P. Molecular fractal surface. Nature, 1981, 308: 261-263
- [16] 黄冠华, 詹卫华. 土壤颗粒的分形特征及其应用. 土壤学报, 2002, 39 (4): 490-497
- [17] 王奎升. 工程流体与粉体力学基础. 北京: 中国计量出版社, 2002
- [18] 王佳建, 徐宏恩. 佳木斯市大气中总悬浮颗粒的显微镜下观察. 黑龙江环境通报, 2001, 25(4): 76-79
- [19] 刘云鹏, 王国栋, 张社奇, 党亚爱. 陕西 4 种土壤粒径分布的分形特征研究. 西北农业大学学报 (自然科学版), 2003, 31 (2): 92-94
- [20] 华孟, 王坚. 土壤物理学. 北京: 北京农业大学出版社, 1992

Modeling of Surface Fractal Dimension of Clay Particles and Its Application

WU Cheng-bao¹, HU Xiao-fang^{1,2}, HU da-wei¹

(¹ Laboratory of Powder Engineering College of Industrial Equipment and Control Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China; ² Key Laboratory of Polymer Processing Engineering, Ministry of Education, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)

Abstract: A mathematical model was built up for calculating surface fractal dimension of clay particles. Clay samples were collected and measured for surface fractal dimension of clay particles using a high precision digital optical microscopic system. Results of the experiment showed that the mathematic model was rational and proved to be a simple method for analysis of surface fractal dimension of clay particles.

Key words: Clay particles, Surface fractal dimension, Digital optical micro-system