

ПРИМЕНЕНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ α -ФОРМ ДЛЯ АНАЛИЗА ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА ПОЧВЫ ПО МИКРОТОМОГРАММАМ

© 2024 г. А.А. Владимиров^{a, b, *}, К.Н. Абросимов^a, Т.А. Васильев^a, Н.А. Васильева^a

^aПочвенный институт им. В.В. Докучаева, Пыжевский пер., 7, Москва, 119017 Россия

^bОбъединенный институт ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри, 6, Дубна, 141980 Россия

*e-mail: artem.a.vladimirov@gmail.com

Поступила в редакцию 02.05.2024 г.

После доработки 28.06.2024 г.

Принята к публикации 29.06.2024 г.

Предлагается новый подход анализа изображений внутренней структуры почвы (микротомограмм) и моделирования ключевых гидрофизических функций на основе томографических характеристик порового пространства. Подход основан на построении серии замкнутых оболочек (α -форм) вокруг исследуемого трехмерного участка томограммы. Эти оболочки способны проникать в поры объекта с диаметром больше заданного. Анализируется зависимость внутреннего объема оболочек от минимального размера пор. Алгоритм построения α -форм имитирует процесс вытеснения жидкости из пор, связанных с поверхностью твердой фазы почвы, и позволяет анализировать анизотропию связности пор путем ограничения проницаемости части поверхности объекта. Построенные α -формы моделируют поверхность жидкой фазы, а максимальная кривизна поверхности соответствует капиллярному давлению. Подход применен для анализа образцов почвенного микропрофиля коркового солонца с контрастной структурой порового пространства. Микроризонты солонца имеют выраженную закрытую пористость и анизотропию связности пор. Подход позволяет оценивать основную гидрофизическую характеристику (ОГХ) без учета усадки, связность и анизотропию пор. Результаты сравнивали с типичными известными ОГХ солонцовых горизонтов почв России. Проведено сравнение моделей ОГХ, получаемых на основе 2D- и 3D-изображений. Метод опробован на томограммах образцов эолового слоистого песчаника, для которых имелись томограммы и прямые измерения ОГХ.

Ключевые слова: томография почв, моделирование ОГХ, связность пор, анизотропия связности пор, томографические характеристики, структура порового пространства

DOI: 10.31857/S0032180X24120098, **EDN:** JCUJUN

ВВЕДЕНИЕ

Количественная характеристика структуры порового пространства применяется в различных областях, включая почвоведение, экологию, фармацевтику и др. В пористых средах поток жидкости и перенос веществ тесно связаны с такими характеристиками порового пространства, как форма, количество пор и их связность. Поры в почве могут быть разделены на макро- (>75 мкм), мезо- (30–75 мкм), микро- (5–30 мкм), ультрамикро- (0.1–5 мкм) и крипторпоры (<0.1 мкм) [6, 7]. Считается, что поры, имеющие разный характерный размер, участвуют в разных процессах. В почве макропоры в наибольшей степени определяют водопроницаемость, в то время как поры мезоразмера менее важны для капиллярных явлений,

влагоудержания, матричного всасывания, диффузии и химических реакций.

Распределение пор по размерам является основной количественной характеристикой порового пространства, однако не существует единого определения этого понятия. В настоящее время используются различные подходы для ее определения по томографическим изображениям. Первый основан на построении модели порового пространства (pore network model) путем выделения отдельных пор и определения их размеров [20, 22]. Второй подход использует функцию вероятности того, что шар заданного радиуса, центр которого находится в случайной точке порового пространства, целиком находится внутри порового пространства (pore-size function) [19], распределение пор по размеру в

в этом случае является распределением точек порового пространства по расстоянию до ближайшей точки твердой фазы. Третий подход, метод наибольшего шара, основан на присвоении каждой точке порового пространства значения, равного радиусу наибольшего шара, целиком принадлежащего поровому пространству, который включает в себя эту точку, 2D-вариация этого метода – метод наибольшего диска используется для анализа порового пространства по микрофотографиям [17, 18]. Для одного и того же объекта три приведенных подхода анализа порового пространства по томографическим изображениям дают различные распределения пор по размерам. Причем невозможно выбрать один вариант, и выбор наиболее подходящего зависит от решаемой задачи. Метод наибольшего шара представляется наиболее подходящим для реконструкции гидрологических свойств пористой среды, таких как основная гидрофизическая характеристика (**ОГХ**) и влагопроводность.

Предлагаемый в настоящей работе подход является дальнейшим развитием метода наибольшего шара и позволяет учитывать связность пор через капилляры различного диаметра.

ОГХ, представляющая собой изотермическую равновесную зависимость между капиллярно-сорбционным (матричным) давлением почвенной влаги и влажностью почвы, является основной характеристикой почв для описания структурных изменений и обеспечения разнообразных прогнозных почвенных моделей [7]. Однако различные пористые среды могут иметь схожие ОГХ при существенных различиях в поровой структуре, особенно в отношении анизотропии связности пор, которую сложно оценить экспериментально. Анизотропия связности пор приводит к возникновению анизотропии проницаемости, например, если поры связаны в основном вертикальными капиллярами, проницаемость почвы для вертикальных потоков будет существенно больше, чем для латеральных. В полевых условиях явно выраженная анизотропия проницаемости может приводить к значительным различиям в формировании потоков воды в вертикальном и горизонтальном направлениях, влиять на скорости впитывания и испарения воды. Поэтому дополнение ОГХ информацией об анизотропии связности пор является важным для анализа гидрофизических свойств почвы.

В настоящее время одновременно развиваются три направления моделирования ОГХ и почвенно-гидрологических констант: 1) методы расчета, основанные на моделировании процесса заполнения пор жидкостью; 2) регрессионные методы расчета почвенно-гидрологических констант; 3) методы расчета параметров аппроксимационных зависимостей ОГХ. Наименее разработанными в силу сложности поровой геометрии являются методы моделирования процесса заполнения пор

жидкостью [2, 7]. Ожидается, что новые томографические методы и математический анализ порового пространства выдвинут на первый план новые модели движения и статики веществ в почве, включающие томографические характеристики структуры порового пространства почв [8]. Томографический анализ уже прошел этапы качественного и количественного изучения порового пространства. На современном этапе решаются вопросы, связанные с возможностью томографической реконструкции важнейших в теоретическом и практическом аспектах гидрофизических свойств почв: ОГХ, функции влагопроводности и т.д. [1, 4].

Типичный анализ почвенных пор в двумерных срезах, даже при большой статистике, имеет существенные методические ограничения и недостаточен для анализа анизотропного порового пространства [6]. Среди стандартных методов анализа порового пространства на основе 3D-изображений (томограмм) для получения распределения пор пористой среды по размерам и ОГХ развиваются физически обоснованные алгоритмы анализа, которые заключаются в моделировании экспериментального метода измерения – процесса закачки ртути, при этом получаемое распределение пор по размерам является непрерывным [10, 15, 18, 21]. Ртутная порометрия работает в широком диапазоне 75 мкм–1.8 нм, однако в результате применения высоких давлений (достигается 3–4 тыс. атм.) метод является инструментально сложным, дорогим и деструктивным для почвенного образца [5]. В численных алгоритмах, имитирующих ртутную порометрию, сферы итеративно вписываются в видимое томографическое поровое пространство, начиная с самого большого помещающегося диаметра до одного пикселя (вокселя). При этом на каждом шаге увеличивается заполненный объем, а распределение пор по размерам оценивается по приращению заполненной области на каждом шаге с учетом размера пикселя. Процедура вписывания сфер с последовательным уменьшением радиуса позволяет более точно и физически обоснованно характеризовать дискретизированное поровое пространство по сравнению с часто используемым подходом, основанным на выделении отдельных пор и определении их объемов. Данная процедура имитирует процесс заполнения порового пространства жидкостью, что обеспечивает получение более реалистичного распределения пор по размерам для моделирования ОГХ. Тем не менее, эта процедура не позволяет исключить закрытую пористость, которая не имеет связи с поверхностью образца и, соответственно, определить связность порового пространства. Анализ закрытой пористости несет важную информацию, поскольку потенциально закрытая пористость может стать открытой при деформациях в почве. Примерами успешного применения описанных выше численных

методов анализа томограмм для реконструкции ОГХ могут служить работы [13, 14]. В работе [13] для реконструкции ОГХ используется метод построения модели порового пространства совместно с методом наибольшего шара. ОГХ строится для трехмерной модели упаковки твердых частиц с заданным распределением по размерам и сравнивается с экспериментальным результатом для смеси молотого кварца и стеклянных шариков. Получено очень хорошее согласие модели и эксперимента для искусственного объекта. В работе [14] комбинация метода наибольшего шара и модели порового пространства использовалась для анализа томографических изображений осадочных пород, содержащих газовые гидраты с глубины 1091 м.

Предлагаемый в настоящей работе подход является еще более близким к реальному процессу заполнения пор жидкостью, поскольку основан на построении серии замкнутых поверхностей раздела фаз, каждая из которых строится с поверхности непрерывным образом и, таким образом, учитывается связность порового пространства. Он стал возможен благодаря появлению нового, более эффективного численного алгоритма построения трехмерных α -форм, предложенного в 2022 г. [16]. Моделирование гидрофизических характеристик почвы исходя из ее трехмерной структуры особенно важно для построения многомасштабных самосогласованных моделей эволюции почвы, в которых сама трехмерная структура почвы моделируется исходя из почвенных процессов. Например, при образовании солонцового горизонта почвы гидрологический режим определяет отложение солей и изменение структуры порового пространства, которое, в свою очередь, меняет гидрологический режим. Другим важным примером для возможного использования предлагаемого подхода является реконструкция гидрофизических характеристик почв в прошлом, для которых существуют архивныешлифы. Реконструкция возможна непосредственно из 2D-изображения или через промежуточное 3D-изображение, получаемое стохастическими методами.

Цель работы – разработка подхода для получения количественных характеристик параметров порового пространства почв и других пористых тел по томографическим изображениям, основанного на построении и анализе последовательности α -форм. Предлагаемый подход анализа порового пространства реализован на примере моделирования ОГХ и анизотропии связности пор по микротомографическим изображениям контрастных микрогоризонтов коркового солонца и слоистого песчаника [12], а также для трехмерных моделей структуры песчаников с различной степенью цементации и, соответственно, пористостью [9].

ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ

Объект исследования. Почвенным объектом служил солонцовый горизонт солонца светлого коркового (по классификации почв России (2004)), у которого эродирован природный поверхностный надсолонцовый горизонт за счет перевыпаса. За 1.5 года отмечено образование в столбчатых агрегатах вышедшего на поверхность солонцового горизонта нового микропрофиля мощность 5 см, который по международной классификации WRB (2014) можно классифицировать как Nudinatric Solonetz. Этот микропрофиль образован в небольшом микропонижении вблизи тропинки прогона скота на целинной территории участка “Госфонд” Джаныбекского стационара Института лесоведения РАН, на котором изучено микростроение целинных корковых солонцов. Отбор образца проводили в 2015 г., время формирования микропрофиля Nudinatric Solonetz оценивается интервалом в 1.5 года. Растительность вокруг профиля почти отсутствовала и состояла из нескольких растений: *Artemisia pauciflora* и *Kochia prostrata*.

Новообразованный микропрофиль по микроморфологическим признакам можно разделить на четыре микрогоризонта: пузырчатый микрогоризонт (надсолонцовый ксерогумусовый АКЛ, 0–8 мм), который постепенно переходит в микрогоризонт с признаками разрушения глинистого вещества (Е/В, 8–16 мм), который ниже переходит в микрогоризонт с признаками иллювирированной глины (Ви, 16–29 мм), а затем в остаточный от стадии целинного коркового солонца микрогоризонт Вsn (29–45 мм) (рис. 1). Отбор материала из каждого тонкого микрогоризонта для химического

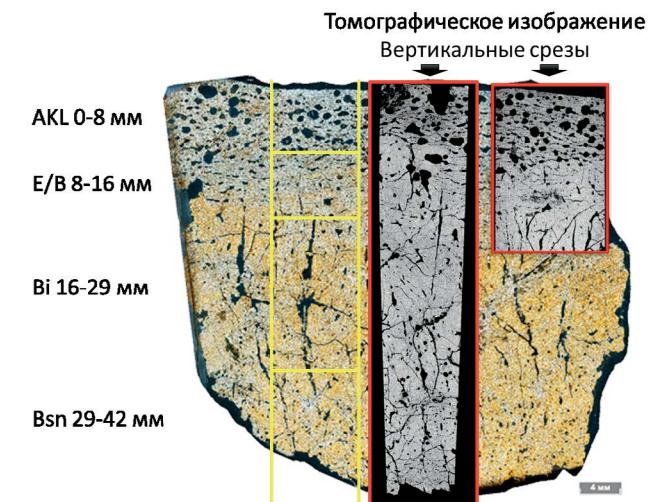


Рис. 1. Шлиф из микропрофиля солонца с новообразованными микрогоризонтами (желтые квадраты) и разметкой под образцы для томографической съемки (красные квадраты).

анализа был невозможен, поэтому было выполнено определение содержание обменного натрия в ППК из общего образца, которое составило 32%. Это подтверждает, что новообразованный микропрофиль сформировался в материале солонцового горизонта.

Для валидации предлагаемого метода использовали данные микроКТ и ОГХ, полученные в работе [12] для образца горной породы, который представлял собой эоловый слоистый песчаник из глубокопогребенного газового резервуара Ротлигенд в Германии (исходные данные доступны по адресу <https://www.digitalrocksportal.org/projects/361>). Эти эоловые отложения дюн характеризуются отдельными пластинками шириной от миллиметра до сантиметра с различными размерами зерен. Образцы микроКТ были высверлены в цилиндрические керны (диаметром 6.0 мм и длиной 23.5 мм) из исходного керна (диаметром 30 мм). Гелиевая пористость образца составляла 0.219 ± 0.015 . Для валидации подхода использовали томограмму сухого образца, для которой строилась серия α -форм. ОГХ, реконструированную из томограммы, сравнивали с экспериментальной ОГХ, полученной путем вытеснения жидкости из образца азотом в диапазоне давлений до 1000 кПа [12].

В качестве примера модельной 3D-структуры использовали полученные в работе [9] модели песчаников Fontainebleau (данные доступны по адресу <https://www.digitalrocksportal.org/projects/57>) с различной степенью цементации порового пространства. Они были созданы с использованием коммерчески доступного программного обеспечения e-Core. Авторы использовали идентичные параметры процессов осаждения зерен, уплотнения и диагенеза для серии модельных реконструкций. Различные значения пористости от 8 до 26% были получены только за счет изменения степени цементации.

Пробоподготовка, томография и бинаризация изображений. Образец солонца габаритами (Д Ш В) $5 \times 5 \times 6$ см извлекали из верхней части профиля почвы, он состоял из четырех микрогоризонтов. Почву подготовили для микроморфологического исследования, пропитали эпоксидной смолой и зашлифовали в вертикальной ориентации (аншилиф). Из левой части образца, наибольшей по толщине (были взяты образцы прямоугольной формы для томографического исследования внутренней структуры. Из-за малого размера образцов, неоднородной пропитки и повреждений краев при выпиливании было решено томографическое исследование структуры проводить только по внутренней области, полностью исключив поврежденные края).

Томографическую съемку проводили на рентгеновском микротомографе Bruker Skyscan 1172

при разрешении 6.84 мкм с угловым шагом 0.4° и общим углом съемки в 360° , что позволило качественно отснять и реконструировать образцы угловатой формы с разным поглощением по ширине и толщине. Настройки съемки и реконструкции объемной структуры представлены в табл. 1.

Реконструкцию объемной структуры из теневых проекций проводили в формат файлов BMP с минимальной коррекцией цифрового шума и кольцевых артефактов реконструкции с использованием ПО Bruker Nrecon с вычислениями на видеокартах (GPUReconServer). Баланс сигнал/цифровой шум в данных томографии солонца находится на приемлемом уровне, не требующем серьезных программных корректировок.

Сегментация порового пространства проведена по методу General segmentation с использованием ПО Bruker CTan, при этом эпоксидная смола и не пропитавшиеся остатки порового пространства отсегментированы как одна рентген-контрастная фаза (воздух). На рис. 2 представлены объемные модели порового пространства, полученные из результатов сегментации реконструированных данных с помощью ПО Bruker CTvox.

Метод α -форм. Понятие α -формы в двумерном случае было предложено Гербертом Эдельсбруннером в 1983 г. как обобщение понятия выпуклой оболочки [11]. В 2022 г. специалистами в области вычислительной геометрии был предложен алгоритм “alpha wrapping with an offset”, который является реализацией дальнейшего обобщения понятия α -форм в трехмерном случае [16]. По оценкам данный алгоритм эффективен по быстродействию и требованиям к оперативной памяти при работе с томографическими данными. В зависимости от геометрии, для исследованных томограмм построение α -формы требовало 20–40 байт оперативной памяти на воксель исходной томограммы, и примерно такие значения ожидаются также для других томограмм физических объектов (в настоящем случае для участков томограмм $300 \times 300 \times 300$ требовалось примерно 0.5–1 ГБ оперативной памяти на один процесс). По теоретическим оценкам, потребность в памяти может повышаться с увеличением площади поверхности твердой фазы вплоть до 160 байт на воксель в случае, когда анализируемая геометрия представляет собой чередование вокселей порового пространства и твердой фазы, напоминающее трехмерную шахматную доску. Построение одной α -формы в один поток на процессоре Intel Core i5 4GHz занимало от нескольких секунд до 3 мин в зависимости от значения параметра α . Для построения кривой ОГХ требуется серия α -форм (в настоящем случае строились 20 точек в четырех повторностях, для трех вариантов граничных условий для каждого образца), вычисление которых выполняли параллельно.

Таблица 1. Технические параметры томографической съемки и реконструкции данных

Основные настройки томографической съемки	
Энергия съемки, кВ	70
Ток питания, мА	129
Пространственное разрешение, мкм	6.84
Положение образца в камере томографа по вертикальной оси, мм	42.535
Металлический фильтр спектра	Al 0.5 мм
Формат теневых проекций	TIFF
Бит на пиксель	16
Время экспозиции, мс	600
Угловой шаг, град	0.400
Количество накоплений на одну теневую проекцию	ON (3)
Контрольные проекции	ON (10)
Съемка с поворотом на 180° или 360°	360°
Коррекция яркости и артефактов изображения	ON
Траектория сканирования	ROUND
Основные параметры реконструкции объемной структуры образцов солонца	
Программа для реконструкции + версия	NRecon 1.7.4.6
Оборудование для реконструкции – видеокарта	GPURecon Server
Версия	1.7.4
Время реконструкции всех данных	372.000000
Формат томографических срезов	BMP
Размер пикселя, мкм	6.84
Угловой диапазон реконструкции	360°
Use 180+	OFF
Подавление шумов	4
Ядро сглаживания	2 Гаусс
Подавление кольцевых артефактов	14
Режим Объект больше, чем зона съемки	OFF
Подавление битых пикселей, %	3
Коррекция градиента на горизонтальных срезах, %	50
Границы градаций серого	min = -0.022889 max = 0.122072

Алгоритм позволяет построить замкнутую оболочку, состоящую из треугольников, вокруг заданного множества точек или других геометрических объектов. Его можно описать как оборачивание объекта выпуклой оболочкой с последующим вдавливанием этой оболочки внутрь пустого пространства, находящегося внутри объекта. Работа алгоритма управляется двумя параметрами: α задает минимальный диаметр пор, в которые оболочка может проникать, а смещение (offset) задает минимальное расстояние от вершин оболочки до точек объекта. В процессе выполнения алгоритма оболочка все время остается замкнутой и, соответственно, отделяет поровое пространство, связанное с поверхностью капиллярами диаметром $d > \alpha$, от твердой фазы и остального порового пространства.

По мнению авторов этот алгоритм очень хорошо подходит для анализа свойств порового пространства, в частности заполнения пор жидкостью, связности пор с поверхностью, а также анизотропии проницаемости (например, ситуации, когда существуют поры, которые связаны только с горизонтальными границами объекта). При этом связность пор анализируется относительно заданного диаметра капилляра. Параметр offset может использоваться для имитации неподвижно адсорбированного слоя жидкости.

Алгоритм получения ОГХ. Для моделирования заполнения порового пространства жидкостью строится серия α -форм, с различными значениями параметра α , который определяет максимальную кривизну поверхности и, соответственно, капиллярное давление. Каждая получаемая α -форма является моделью границы раздела фаз при заданном капиллярном давлении. При этом твердая фаза и жидкость находятся внутри α -формы, а воздух снаружи. Объем жидкости для заданного капиллярного давления получается вычитанием объема твердой фазы из внутреннего объема α -формы. Сам алгоритм построения каждой отдельной α -формы похож на вытеснение жидкости из объема порового пространства. Вытеснение начинается с самых крупных пор, связанных с поверхностью, при этом жидкость не вытесняется из пор, связанных с поверхностью капиллярами диаметром меньше α . Таким образом, модельная кривая соответствует ветви снижения влажности на петле гистерезиса ОГХ.

Предложенный подход существенно отличается от метода моделирования ртутной порометрии, в котором производится заполнение порового пространства шарами различного радиуса с присвоением каждому voxelю изображения значения, равного максимальному радиусу шара, включающего данный voxel [16]. В реализованном в настоящей работе подходе заполнение порового пространства происходит не для всей томографически видимой пористости, а только для пор, связанных с поверхностью образца. Величина порового

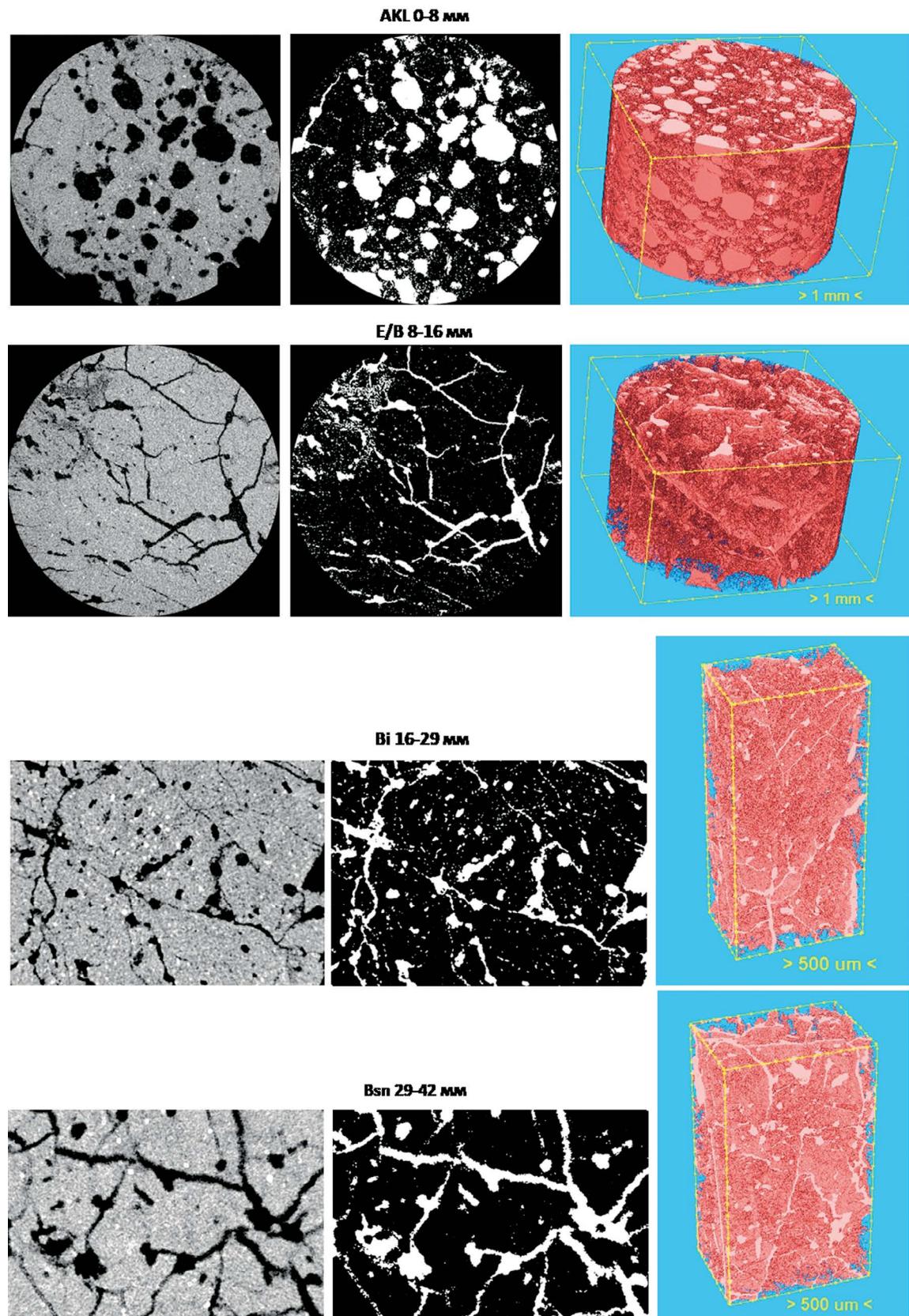


Рис. 2. Модели порового пространства солонца разных горизонтов, созданные программой Bruker СТ vox по данным компьютерной томографии.

пространства, вычисленная таким образом, может существенно отличаться от суммы объемов всех шаров диаметром $d > \alpha$, которые могут быть вписаны в поровое пространство известными методами моделирования ртутной порометрии.

Таким образом, метод α -форм предоставляет эффективный инструмент для анализа свойств порового пространства, учитывающий связность пор с поверхностью и позволяющий моделировать заполнение пор жидкостью при различных капиллярных давлениях. Он отличается от традиционных методов моделирования ртутной порометрии тем, что учитывает не только размер пор, но и их связность с поверхностью образца, что делает его более реалистичным и информативным при исследовании пористых материалов.

Для построения ОГХ из последовательности α -форм использовалась следующая процедура: из бинаризованного томографического изображения создавалось множество точек, соответствующих центрам voxelей твердой фазы, при этом за единицу длины принимался размер voxelей томограммы 6.84 мкм. Для такого множества точек на значения параметра α накладываются ограничения, поскольку расстояние между соседними voxelами, расположенными по диагонали (11.8 мкм), является минимальным значением параметра α , для которого имеет смысл построение α -формы.

Для каждого образца выбирали четыре области на микротомограмме размером $2 \times 2 \times 2$ мм и для каждой области строили последовательность α -форм с параметром α в диапазоне от 35 до 750 мкм. Таким образом моделировали заполнение образца водой при различных значениях потенциала почвенной влаги, который вычисляли по приближенной формуле $pF = \lg(0.15/r)$, где r – радиус пор в сантиметрах. Диапазон изменения параметра α соответствовал значениям капиллярного давления до 90 см водяного столба. Нижняя граница диапазона значений параметра α была выбрана в 3 раза больше минимально возможного значения этого параметра чтобы исключить возможное влияние дискретности томографического изображения на результат моделирования ОГХ. Увеличение диапазона капиллярного давления возможно при использовании 3D-изображений в более высоком разрешении.

Анализ анизотропии проницаемости. Для анализа анизотропии связности порового пространства предлагается выделение и вычисление объема областей, которые доступны только вертикально, и, соответственно, становятся недоступными если томограмму ограничить непроницаемыми горизонтальными плоскостями. Аналогично поры, доступные только горизонтально, исчезают при ограничении образца непроницаемыми вертикальными плоскостями. Для обоих случаев строили серии α -форм. Объем порового пространства,

доступного только в одном направлении, получали как разницу между объемами порового пространства открытого и ограниченного объекта.

Предложенный подход позволяет количественно оценить анизотропию связности порового пространства и выявить направления преимущественной проницаемости в образце. Это может быть полезно для понимания особенностей переноса жидкостей и газов в пористых средах, а также для прогнозирования анизотропии физических свойств, таких как электропроводность или теплопроводность, которые зависят от структуры порового пространства.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В рамках данного исследования были проанализированы четыре микророгизонта солонца с использованием предложенной методики. Для каждого горизонта была построена последовательность α -форм при 20 значениях параметра α , варьирующихся от 35 до 750 мкм. Полученные результаты для микротомограмм коркового солонца, в соответствие с разрешением снимков, представляют собой область насыщения ОГХ (правый хвост криевой влагодержания), включающую влагопроводящие макропоры (>75 мкм) и мезопоры (35–75 мкм), сохраняющие доступные для растений запасы влаги и веществ (рис. 3). Для сравнения приведены

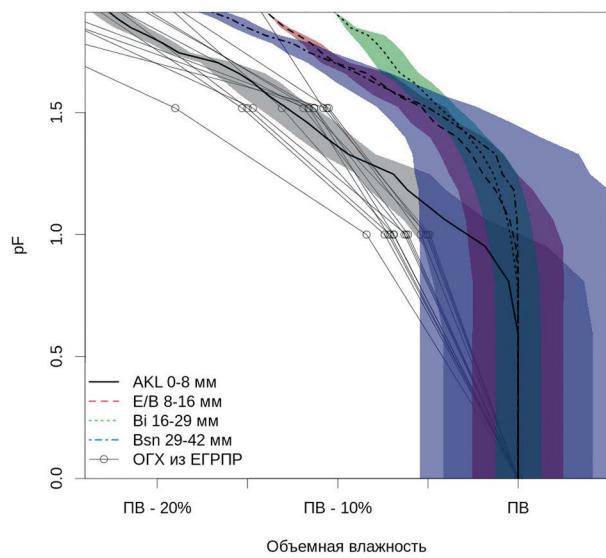


Рис. 3. Модельная зависимость влажности от pF , приведенная к полной влагоемкости (ПВ) для различных микророгизонтов. Линиями показано среднее значение, закрашенными областями – стандартная ошибка среднего. Для сравнения приведены характерные для солонцовых горизонтов экспериментальные ОГХ, взятые из базы данных [3] и показанные тонкими линиями.

несколько характерных экспериментальных ОГХ солонцовых горизонтов, взятых из базы данных [3].

Зависимость между потенциалом почвенной влаги и влажностью моделировали для четырех случайных непересекающихся областей томограммы. На рис. 3 показано среднее значение (линии) и стандартная ошибка среднего (закрашенные области на графике). Поскольку общая пористость образцов всегда превышает видимую томографическую пористость, в качестве точки отсчета на оси влажности была выбрана величина полной влагоемкости. Можно заметить, что на масштабе макропор неоднородность модельной ОГХ внутри верхнего и нижнего микрогоризонтов сопоставима с различиями между микрогоризонтами и объясняется наличием больших пузырей в верхнем микрогоризонте и трещин в нижнем (рис. 1). В то же время часть кривой, соответствующая мезопорам, является более однородной внутри микрогоризонтов и существенно отличается между ними. Тест Стьюдента показывает, что при значениях $pF > 1.3$ горизонт AKL статистически значимо отличается от горизонтов E/B и Bi, при $pF > 1.6$ горизонт AKL также отличим от горизонта Bsn; при $pF > 1.7$ горизонты E/B и Bi значимо отличаются от горизонта Bsn. Между горизонтами E/B и Bi статистически значимых различий нет. Диапазон значений pF , для которых получено ОГХ определяется разрешением томографа и может быть расширен для томографических изображений с большим разрешением.

На рис. 4 представлена иллюстрация трех α -форм из последовательности. Можно заметить, что с уменьшением параметра α поверхность α -формы становится все более детальной.

Рис. 5 демонстрирует анизотропию связности пор в зависимости от их размера. Видно, что в

среднем анизотропия порового пространства для макропор существенно различается между микрогоризонтами и позволяет характеризовать их неоднородность. Во всех образцах доля горизонтальных пор превышает долю вертикальных на исследованном масштабе. Наиболее анизотропным по связности из исследованных микрогоризонтов является верхний микрогоризонт AKL. В нем до 12% общего объема составляют поры, доступные только в горизонтальном направлении.

На рис. 6 представлено сравнение модельных ОГХ, полученных двумя различными методами: методом α -форм из трехмерной микротомограммы и методом наибольшего диска [18] из двумерной микрофотографии. Для обеспечения сопоставимости результатов, полученные значения нормированы на полную влагоемкость (ПВ), которая принята за точку нормировки.

Сравнение результатов двух моделей показывает корреляцию в диапазоне объемной влажности почвы от ПВ до ПВ – 15%. Однако наблюдается систематическое отличие результатов 2D-модели: распределение пор по размерам смещено в сторону большего размера пор. Это может быть обусловлено значительной анизотропией связности пор, которая достигает половины объема всего порового пространства (рис. 5). А также наличием закрытых пор, которые попадают в объем связного порового пространства в 2D-модели, но исключаются в 3D-модели, которая учитывает связность порового пространства.

Следует отметить, что микрофотография и микротомограмма одного и того же образца имеют разное разрешение, что сказывается на левой части графика. ОГХ, полученная из 2D-изображения,

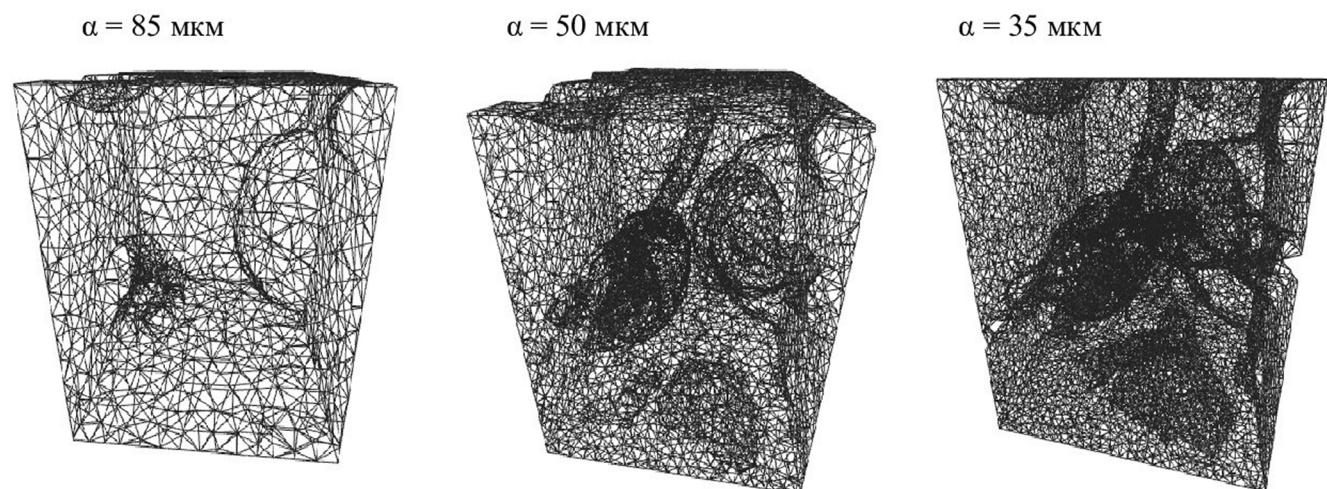
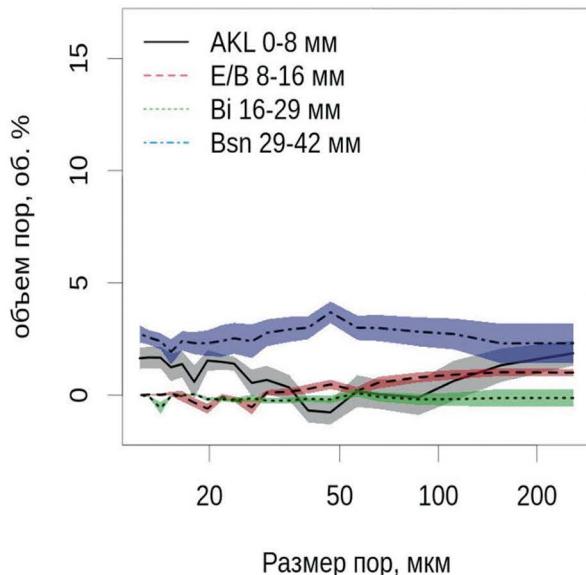


Рис. 4. Иллюстрация последовательности α -форм, построенных вокруг одной из выбранных областей томограммы при значениях диаметра наименьшей проницаемой поры (параметр α) 85, 50, 35 мкм.

Вертикально-связанные поры



Горизонтально-связанные поры

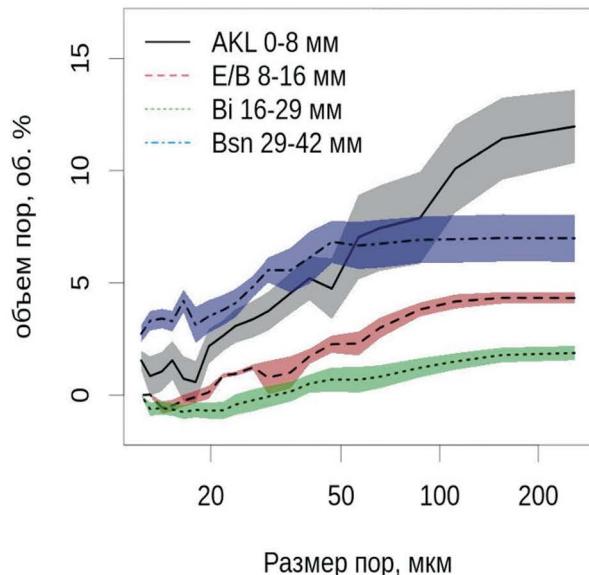


Рис. 5. Анизотропия связности пор для микрогоризонтов микропрофиля солонца в зависимости от размера пор: объем вертикальных пор (левый рис.), объем горизонтальных пор (правый рис.) в зависимости от размера пор. Линиями показано среднее значение, закрашенными областями – стандартная ошибка среднего.

охватывает больший диапазон размеров пор и, соответственно, значений pF .

Представленное сравнение демонстрирует различия между 2D- и 3D-подходами к моделированию ОГХ. Метод α -форм, основанный на трехмерной микротомограмме, по мнению авторов может обеспечить более реалистичное представление процесса заполнения пор жидкостью, поскольку учитывает связность и анизотропию порового пространства. В то же время 2D-метод наибольшего диска может давать смещенные оценки распределения пор по размерам из-за наличия закрытых пор и ограничений, связанных с двумерным представлением порового пространства.

В настоящий момент в литературе отсутствуют открытые наборы данных микротомограмма – ОГХ для ненарушенных образцов почв. Поэтому для проверки предложенного подхода были взяты данные слоистого песчаника. На рис. 7 представлены результаты валидации предложенного подхода путем сопоставления модельной ОГХ, полученной из томограммы образца слоистого песчаника, описанного в работе [12], с его экспериментальной ОГХ, определенной методом вытеснения воды азотом. Отсутствие информации о стандартном отклонении для экспериментальных данных затрудняет оценку статистической значимости различий между двумя кривыми. В целом наблюдается удовлетворительное соответствие между модельной ОГХ, полученной предлагаемым методом на основе

микротомографических данных, и экспериментальной ОГХ.

С другой стороны, при построении многомасштабных самосогласованных моделей почв и процессов почвообразования, включающих как модели гидрологии на масштабе ландшафта, так и модели агрегации почвенных частиц и формирования пористой структуры за счет физических и биологических процессов, требуется установление связи между микроскопической структурой почвы и ее гидрофизическими свойствами. Предложенный в работе подход может быть использован для решения этой задачи путем вычисления гидрофизических характеристик для модельных объектов. Стоит отметить, что при анализе томограмм сухого образца предлагаемый подход не позволяет учесть усадку почвы. В то же время при моделировании структуры почвы с процессом усадки, предлагаемый подход позволит учесть эффект от усадки на ОГХ. На рис. 8 представлены ОГХ, полученные методом α -форм для трехмерных моделей песчаников Fontainebleau, полученных в работе [9] методом плотной упаковки твердых частиц. Полученные ОГХ демонстрируют смещение распределения пор по размеру в область крупных пор в процессе цементирования мелких пор, как и ожидается соответственно моделированию серии трехмерных структур с постепенной цементацией порового пространства, начиная с мелких пор.

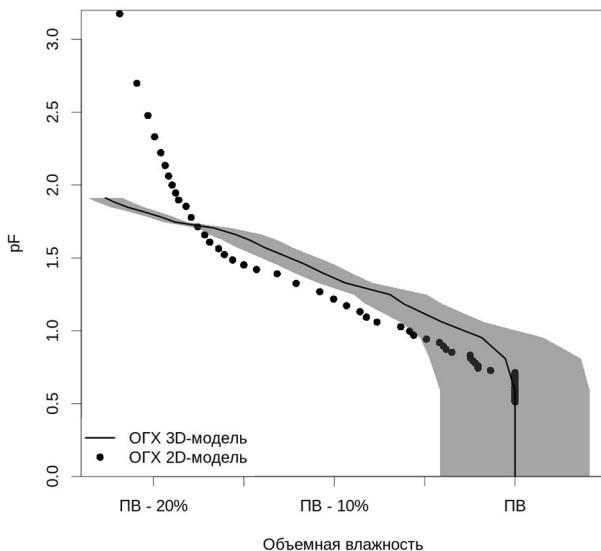


Рис. 6. Сравнение 2D- и 3D-моделей ОГХ, приведенных к полной влагоемкости (ПВ). Реконструированная по микрографии методом наибольшего диска ОГХ (точки) и по микротомограмме методом α -форм (линия) для микрогоризонта AKL 0–8 мм. Серым цветом показано стандартное отклонение для 3D-модели.

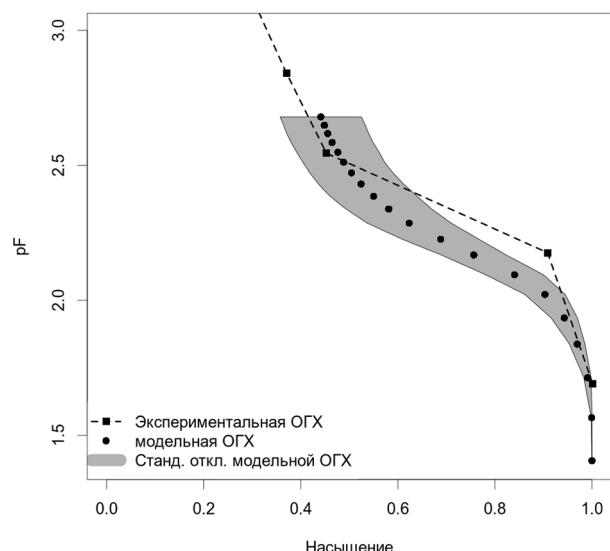


Рис. 8. Модель ОГХ реконструированная методом α -форм для Fontainebleau песчаников различной пористости [9]. Серым цветом показано стандартное отклонение модели.

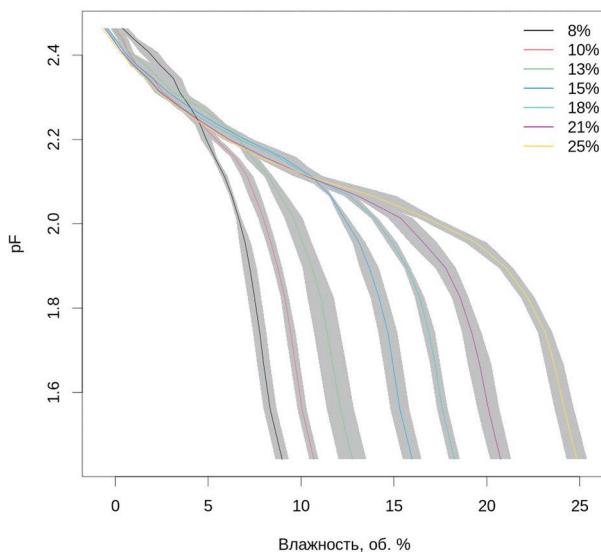


Рис. 7. Сравнение ОГХ, реконструированной по микротомограмме методом α -форм, и экспериментальной ОГХ для слоистого песчаника [12].

Основной целью разработанного подхода является анализ геометрических параметров порового пространства почв и других пористых тел. Сравнение с ОГХ приводится потому что ОГХ является экспериментально измеряемой кривой, близкой по сути к моделируемой характеристике порового

пространства. Считаем, что предлагаемый подход в комбинации с другими методами может позволить намного более точное моделирование гидрофизических характеристик почвы (ОГХ и функции влагопроводности), однако это требует большого объема экспериментальной работы и выходит за рамки данного исследования. Предлагаемый подход может быть использован для анализа геометрии двухфазных систем, в которых обе фазы являются твердыми, что может быть полезно в некоторых задачах геологии и почвоведения, например, при реконструкции гидрофизических свойств палеопочв.

Предлагаем данный подход как дополнение к другим методам анализа порового пространства. Например, анализ разности объемов α -форм и объемов порового пространства, методом, описанным в работе [18], не учитывающим закрытость части пор, может быть использован для оценки связности пор через капилляры различного диаметра. Наш подход также позволяет учесть удержание воды в сложной капиллярной структуре типа жамновских цепочек. Кроме того, характеристики получаемой непрерывной поверхности раздела между заполненной жидкостью и пустой частью порового пространства, например, отношение ее площади к внутреннему объему, могут использоваться как дополнительные параметры, характеризующие поровое пространство, при поиске корреляций с физическими свойствами почвы или при сравнении образцов между собой, в частности, при исследовании динамики структуры порового пространства. Содержащаяся в модельной ОГХ информация о связности и анизотропии порового пространства

может быть использована для более точного расчета функции влагопроводности на основе модели ван Генухтена, поскольку томографические данные получаются для ненарушенных образцов, и предложенный подход позволяет раздельно анализировать вертикально и горизонтально связанные поры.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен новый подход анализа порового пространства почв по микротомограммам. Настоящий подход основан на новом численном методе построения трехмерных сеточных моделей (α -форм), принцип которого обеспечивает физичность подхода, а производительность алгоритма позволяет работать с томографическими изображениями. Подход позволяет получать важные гидрофизические характеристики почв и протестирован на микротомограммах четырех контрастных микрогоризонтов коркового солонца. Результаты демонстрируют возможность физически обоснованного моделирования части ОГХ и явные различия в анизотропии связности пор для микрогоризонтов солонца. Предложенный анализ на томографических изображениях с более высоким разрешением позволит моделировать более широкий диапазон ОГХ.

Разработанный метод анализа порового пространства и определения гидрологических характеристик может быть применен не только к томографическим изображениям реальных образцов, но и к трехмерным моделям, полученным с использованием различных подходов. Примерами могут служить моделирование образования почвенной структуры и почвенных агрегатов, моделирование плотной упаковки твердых частиц с заданным распределением по размерам [11] или стохастические реконструкции 3D-структур из 2D-микрофотографий.

Предложенный подход представляет перспективный инструмент для углубленного изучения геометрии порового пространства почв и других пористых тел, получения важных гидрофизических характеристик и развития многомасштабного моделирования почвенных процессов. Дальнейшие исследования и экспериментальная валидация метода на различных типах почв позволят повысить точность и расширить область применения разработанного подхода.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследование выполнено с привлечением оборудования Центра коллективного пользования научным оборудованием “Функции и свойства почв и почвенного покрова” Почвенного института им.

В. В. Докучаева. Авторы выражают признательность О. Л. Борисовой за помощь в оформлении статьи.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 21-74-20121.

ВКЛАД АВТОРОВ

Участие соавторов: В.А.А., В.Т.А., В.Н.А. – разработка подхода для анализа томографических данных и написание статьи, А.К.Н. – предоставление томографических изображений образцов почвы.

СОБЛЮДЕНИЕ ЭТИЧЕСКИХ СТАНДАРТОВ

В данной работе отсутствуют исследования человека или животных.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абросимов К.Н., Герке К.М., Фомин Д.С., Романенко К.А., Корост Д.В. Томография в почвоведении: от первых опытов к современным методам (обзор) // Почвоведение. 2021. № 9. С. 1097–1112. <https://doi.org/10.31857/S0032180X21090021>
2. Белолюбцев А.И., Болотов А.Г. Моделирование гидрофизических параметров почв склонов Нечерноземной зоны // Вестник АГАУ. 2018. № 6(164). С. 86–91.
3. Единый государственный реестр почвенных ресурсов России. Версия 1.0: Коллективная монография М.: Почв. ин-т им. В.В. Докучаева, 2014. 768 с. <https://egrpr.esoil.ru/>
4. Иванов А.Л., Шеин Е.В., Скворцова Е.Б. Томография порового пространства почв: от морфологической характеристики к структурно-функциональным оценкам // Почвоведение. 2019. № 1. С. 61–69. <https://doi.org/10.1134/S0032180X19010064>
5. Плаченов Т.Г., Колосенцев С.Д. Порометрия. Л.: Химия, 1988. 175 с.
6. Скворцова Е.Б., Герке К.М., Корост Д.В., Абросимов К.Н. Строение порового пространства в подзолистых горизонтах суглинистых почв (анализ 2d и 3d изображений) // Бюл. Почв. ин-та им. В.В. Докучаева. 2013. № 71. С. 65–79. <https://doi.org/10.19047/0136-1694-2013-71-65-79>
7. Шеин Е.В. Курс физики почв. М.: Изд-во МГУ, 2005. 432 с. ISBN 5-211-05021-5

8. Шеин Е.В. Современное состояние, перспективы и актуальные вызовы в физике почв // Почвы – стратегический ресурс России. Тез. докл. VIII съезда Общества почвоведов им. В.В. Докучаева и Школы молодых ученых по морфологии и классификации почв. М., 2021. С. 66–67.
9. Berg C.F., Held R. Fundamental Transport Property Relations in Porous Media Incorporating Detailed Pore Structure Description // Transp. Porous Media 2016. V. 112. P. 467–487.
<https://doi.org/10.1007/s11242-016-0661-7>
10. Cássaro F.A.M., Durand A.N.P., Gimenez D., Vaz C.M.P. Pore-Size Distributions of Soils Derived using a Geometrical Approach and Multiple Resolution MicroCT Images // Soil Sci. Soc. Am. J. 2017. V. 81. P. 468–476.
<https://doi.org/10.2136/sssaj2016.09.0291>
11. Edelsbrunner H., Kirkpatrick D.G., Seidel R. On the shape of a set of points in the plane // IEEE Transactions on Information Theory. 1983. V. 29. P. 551–559.
<https://doi.org/10.1109/TIT.1983.1056714>
12. Lin Q., Bijeljic B., Ali Q., Raeini Rieke H., Blunt M.J. Drainage capillary pressure distribution and fluid displacement in a heterogeneous laminated sandstone // Geophys. Res. Lett. 2021. V. 48.
<https://doi.org/10.1029/2021GL093604>
13. Mahabadi N., Dai S., Y. Seol Y., Sup Yun T., Jang J. The water retention curve and relative permeability for gas production from hydrate-bearing sediments: pore-network model simulation // Geochem. Geophys. Geosyst. 2016 V. 17. P. 3099–3110.
<https://doi.org/10.1002/2016GC006372>
14. Mufti S., Arghya D. Pore network modeling approach for simulating soil water retention curve under different stress conditions // E3S Web of Conferences. 2023. V. 382. P. 10004.
<https://doi.org/10.1051/e3sconf/202338210004>
15. Münch B., Holzer L. Contradicting Geometrical Concepts in Pore Size Analysis Attained with Electron Microscopy and Mercury Intrusion // J. Am. Ceram. Soc. 2008. V. 91. P. 4059–4067.
<https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2008.02736.x>
16. Portaneri C., Rouxel-Labbé M., Hemmer M., Cohen-Steiner D., Alliez P. Alpha Wrapping with an Offset // ACM Transactions on Graphics. Proceedings of the ACM SIGGRAPH conference. 2022. V. 41. P. 1–22.
<https://doi.org/10.1145/3528223.3530152>
17. Silin D., Patzek T. Pore space morphology analysis using maximal inscribed spheres // Physica A. 2006. V. 371. P. 336–360.
<https://doi.org/10.1016/j.physa.2006.04.048>
18. Song S., Qile D., Jingna W. Improved algorithm for estimating pore size distribution from pore space images of porous media // Phys. Rev. E. 2019. V. 100. P. 053314.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.053314>
19. Torquato S. Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties // Springer-Verlag. 2002.
<https://doi.org/10.1007/978-1-4757-6355-3>
20. Xiong Q., Baychev T.G., Jivkov A.P. Review of pore network modelling of porous media: Experimental characterisations, network constructions and applications to reactive transport // J. Contam. Hydrol. 2016. V. 192. P. 101–117.
<https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2016.07.002>
21. Yang Z., Peng X.F., Lee D.J., Chen M.Y. An image-based method for obtaining pore-size distribution of porous media // Environ. Sci. Technol. 2009. V. 43(9). P. 3248–3253.
<https://doi.org/10.1021/es900097e>
22. Zubov A.S., Murygin D.A., Gerke K.M. Pore-network extraction using discrete Morse theory: Preserving the topology of the pore space // Phys. Rev. E. 2022. V. 106. P. 055304.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.106.055304>

Application of Geometric α -Shapes to Analyze Soil Pore Space Using Microtomograms

A.A. Vladimirov^{1, 2, *}, K.N. Abrosimov¹, T.A. Vasiliev¹, and N.A. Vasilyeva¹

¹Dokuchaev Soil Science Institute, Moscow, 119017 Russia

²Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 141980 Russia

*e-mail: artem.a.vladimirov@gmail.com

This study proposes a new approach for analyzing images of the internal structure of soil (microtomograms) and modeling key hydrophysical functions based on the tomographic characteristics of the pore space. The approach is based on constructing a series of closed shells (α -shapes) around the studied three-dimensional section of the tomogram. These shells are capable of penetrating into the pores of the object with a diameter greater than a specified value. The dependence of the internal volume of the shells on the minimum pore size is analyzed. The algorithm of α -shapes construction

simulates the process of drying pores connected to the surface and allows for analyzing the anisotropy of pore connectivity by limiting the permeability of a part of the object's surface. The constructed α -shapes model the surface of the liquid phase, and the maximum curvature of the surface corresponds to the capillary pressure. The approach is applied to analyze samples of the soil microprofile of a crusty solonetz with a contrasting pore space structure. The microhorizons of the solonetz demonstrate pronounced closed porosity and anisotropy of pore connectivity. The approach allows for estimating the Water Retention Curve (WRC), pore connectivity, and anisotropy. The results were compared with typical known WRCs of solonetzic soil horizons in soils of Russia. A comparison of WRC models obtained based on 2D and 3D images was conducted. The method was also tested on tomograms of samples of aeolian laminated sandstone, for which both tomograms and direct WRC measurements were simultaneously available.

Keywords: soil tomography, WRC modeling, pore connectivity, anisotropy of pore connectivity, tomographic characteristics, pore space structure