2. Roozbahani, M.M. Effect of rectangular container's sides on porosity for equal-sized sphere packing / M.M. Roozbahani, B.B.K. Huat, A. Asadi // Powder Technology. – 2012, №224. – P. 46-50.

3. Wensrich, C.M. Boundary structure in dense random packing of monosize spherical particles / C. M. Wensrich // Powder Technology. – 2012, №219. – P. 118-127.

4. Scott, G.D. Packing of equal spheres / G.D. Scott // Nature. – 1960. – Vol.188, № 4754. – P. 908-909.

5. Бондарев, В.Г. Случайная 3D-упаковка и пристенный эффект [Текст] / В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль, Т.П. Бондарева // Теоретические и прикладные аспекты современной науки: сб. научных трудов по материалам международной научно-практической конференции, 31 мая 2015 г. – Белгород. – 2015.

ПРЕДЕЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ СЛУЧАЙНОЙ УПАКОВКИ

Бондарев В.Г.
доцент кафедры информационных систем управления НИУ «БелГУ»,
канд. техн. наук, доцент,
Россия, г. Белгород

В статье рассматривается общий подход к определению предельной плотности упаковки систем частиц со стороны статистического описания случайного размещения геометрических элементов регулярных упаковок как в двух-, так и трехмерном пространствах.

Ключевые слова: моделирование, случайная упаковка, плотность упаковки.

Случайная упаковка представляет собой сложную структурно-неоднородную систему, состоящую из совокупности частиц, находящихся в контактном взаимодействии [1]. Одной из наиболее актуальных проблем, стоящих в теории плотноупакованных систем, является оценка предельных значений плотностей упаковки частиц, расположенных случайным образом, в пространствах различной размерности.

Наиболее значимые результаты по определению предельной плотности случайных упаковок были получены экспериментально, либо путем компьютерного моделирования. Наиболее достоверные сведения для двумерного случая можно найти в работе Дж. Берримана [2], в которой плотность упаковки определена с точностью до третьего знака: 0,817±0,003 и в работе П. Меакин и Р. Джулиен [3], определивших плотность упаковки с точностью до четвертого знака: 0,8180±0,0001. В трехмерном случае можно выделить работу того же Дж. Берримана [2], получившего значение: 0,64±0,02. Другой подход, предложенный П. Джалали и М. Ли [4], и основанный на геометрическом анализе возможных локальных конфигураций твердых сфер, дает оценку для предельной плотности случайной упаковки равную: 0,6394.

Решение поставленной задачи в данной работе основывается на подходе построения случайной упаковки систем сферических частиц, в предположении, что структуру упаковки можно приближенно описать как совокупность структурных элементов регулярных упаковок, базовые конфигурации которых представлены с одинаковой вероятностью. При этом изменение значений предельной плотности упаковки определяется только взаимным расположением структурных элементов при сохранении их формы или же наличия достаточно малых искажений.

При построении математической модели случайной упаковки рассматривалась модель структуры, сформированной многократным повторением базовых конфигураций, образованных на основе регулярных структурных элементов, имеющих форму в виде прямоугольного и равностороннего треугольника. Анализ возможных конфигураций показал, что достаточно сформировать всего два типа базовых конфигураций (рис. 1).

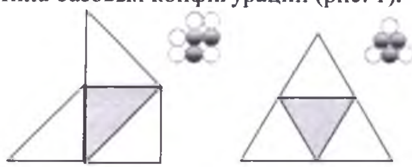

Рис. Типы базовых конфигураций

Каждая из представленных базовых конфигураций обладает собственными наборами структурных характеристик, таких как площадь частицы s_p, средняя площадь s_i, занимаемой структурным элементом в i-той базовой конфигурации, а также плотность упаковки η_i i-той базовой конфигурации

$$\eta_i = \frac{n s_p}{\sum_i^n s_i} \qquad (1)$$

Если считать, что упаковка частиц представляет собой систему, в которой базовые конфигурации представлены с одинаковой вероятностью, то плотность предельной упаковки $\eta_{пред}(2)$ можно определить следующим выражением

$$\eta_{пред}(2) = \frac{3s_p}{2s_1 + s_2} \qquad (2)$$

где s_1 и s_2 – средние площади, занимаемые частицами, находящимися в разных конфигурациях. Здесь, при определении предельной плотности упаковки, учитывается тот факт, что число прямоугольных структурных элементов в упаковке должно быть в два раза большим, по сравнению с количеством равносторонних структурных элементов, что связано с обязательной установкой возле каждого прямоугольного элемента дополнительно аналогичного структурного элемента. Расчет по формуле (2) приводит к численной оценке плотности свободной упаковки: $\eta_{пред}(2) = 0{,}8221$. Сравнение данного значения для предельной плотности упаковки с ранее полученными данными показывает, что оно представляет собой верхнее граничное значение для экспериментального и компьютерного моделирования данной характеристики. Аналогичное значение было ранее получено в [1], однако в этой работе оно рассматривалось не как значение предельной плотности упаковки, а величина плотности свободной упаковки, что в дальнейшем не получило достаточно весомых аргументов для своего подтверждения.

В плотных системах частицы могут объединяться в локальные конфигурации, получившие название тетраэдрических, на основе которых могут формироваться более крупные агрегаты. Такой принцип организации структуры позволяет реализовать многообразие плотных локальных конфигураций. Для нахождения предельной плотности 3D-упаковки необходимо выбрать базовые конфигурации на основе трехмерных регулярных упаковок. В качестве базовых конфигураций можно рассматривать отдельные ячейки пяти основных регулярных упаковок (таблица).

Таблица

Структурные характеристики регулярных 3D-упаковок

Тип упаковки	Коорд. число	Плотность упаковки
Простая кубическая	6	0,5236
Кубо-гексагональная	8+(6)	0,6046
Объемно-центрированная кубическая (ОЦК)	8+(4)	0,6802
Тетрагональная	10	0,6981
Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	12	0,7405

Воспользуемся вышеприведенным подходом для 3D-упаковки и определим предельную плотность упаковки в виде

$$\eta_{пред}(3) = \frac{nv}{\sum_{i=1}^{n} v_{0i}} , \qquad (3)$$

где n – количество регулярных упаковок (n=5); v – объем сферы; v_{0i} – объем, занимаемый ячейкой i-той регулярной упаковки, который можно выразить через i-тую плотность упаковки: $v_{0i} = v/\eta_i$. Тогда

$$\eta_{пред}(3) = \frac{n}{\sum_{i=1}^{n} \eta_i^{-1}}, \qquad (3)$$

Подставляя значения i-тых плотностей упаковки, взятые из таблицы, можно просчитать предельную плотность упаковки, значение которой численно равно: $\eta_{пред}(3)$ = 0,63964. Здесь мы имеем достаточно хорошее совпадение, до третьего знака после запятой, со значением, полученным П. Джалали и М. Ли [4] и рядом других исследователей [5], что указывает на правильность выбранного подхода в расчете предельной плотности 3D-упаковки.

Список литературы

1. Мигаль, Л.В. Стохастическая упаковка систем сферических моночастиц на плоскости [Текст] / Л.В. Мигаль, В.Г. Бондарев // Региональный вестник молодых ученых. – 2005. – №3/4(6). – С.5-7.

2. Berryman, J.G. Random close packing of hard spheres and disks / J.G. Berryman // Phys. Rev. A. – 1983. – Vol.27, №2. – P. 1053-1061.

3. Meakin, P. Simple three–dimensional models for ballistic deposition and restructuring / P. Meakin, R. Jullien // J. Phys. France. – 1987. – Vol.48. – P. 1651.

4. Jalali, P. An estimate of random close packing density in monodisperse hard spheres / P. Jalali, M. Li // J. Chem. Phys. – 2004. – Vol.120, № 2. – P. 1138-1139.

5. Бондарева, Т.П. Моделирование случайной упаковки систем сферических частиц [Текст] / Т.П. Бондарева, В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль // В кн.: Материалы международного семинара «Физико-математическое моделирование систем», Воронеж, 2012. – С. 22-28.

СЛУЧАЙНАЯ 3D-УПАКОВКА И ПРИСТЕННЫЙ ЭФФЕКТ

Бондарев В.Г.
доцент кафедры информационных систем НИУ «БелГУ»,
канд. техн. наук, доцент,
Россия, г. Белгород

Мигаль Л.В.
доцент кафедры информационных систем управления НИУ «БелГУ»,
канд. физ.-мат. наук, доцент,
Россия, г. Белгород

Бондарева Т.П.
ассистент кафедры информационных систем управления
НИУ «БелГУ»,
Россия, г. Белгород

В статье путем моделирования случайной упаковки системы жестких сфер исследуется влияние масштаба пористой среды на изменение пространственной плотности упаковки. Проведены численные эксперименты по выявлению распределения линейной плотности упаковки вблизи пристенной области установки системы жестких сфер.

Ключевые слова: моделирование, случайная упаковка, плотность упаковки, численный эксперимент.

Ограничение области формирования случайной упаковки системы частиц вызывает явление так называемого пристенного эффекта [1]. Причина изменения плотности упаковки частиц в пристенном слое носит двоякий характер. С одной стороны стенки области установки частиц препятствуют плотной укладке частиц, вследствие отсутствия у них степеней свободы, а с другой – вызывают упорядочивание частиц системы [2]. Влияние расстояния между стенками области установки полностью определяется соотношением размера области установки частиц и размера частиц системы. Так, считается, что при соотношении размера области установки D и диаметра d частицы менее четырех-пяти (D/d<4-5) пристенный эффект оказывает существенное влияние на структуру системы частиц [3]. Основываясь на представленных данных, было решено посвятить эту работу разработке модели случайной упаковки, ограниченной с одной стороны границей, и определению изменения плотности упаковки в отдельных слоях. Цель самого исследования состоит в том, чтобы проанализировать изменения плотности упаковки путем