УДК 519.876.5

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛУЧАЙНОЙ УПАКОВКИ СИСТЕМЫ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕ R^2

В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль
Белгородский государственный университет

Проведено имитационное моделирование случайной упаковки системы сферических частиц в виде совокупности случайно упакованных слоев Для разработки алгоритма предложен новый метод «размерной упаковки». Путем реализации разработанного алгоритма получены анизотропные упаковки. Определена максимальная плотность случайной двумерной упаковки, которая составила величину η_{max}=0,822±0,003.

Проблема случайной упаковки системы сферических частиц имеет приложения в самых различных областях, таких как металлургия, керамика, науках о земле, биология, химия, физика и во многих инженерных областях. Анализ подходов и методов, применяемых в моделировании, показывает, что наиболее перспективным является имитационное моделирование структуры системы частиц. Для имитационного моделирования случайной упаковки частиц используется целый ряд различных методов, таких как метод «перекатывания» («drop and roll») [1], метод «центральной частицы» [2, 3], эвристические методы [4]. В данной работе рассматривается задача разработки алгоритма имитационного моделирования случайной упаковки системы сферических частиц в пространстве R^2 на базе нового метода «размерной упаковки».

В самой общей постановке задача плотной упаковки системы двумерных сфер может быть сформулирована как задача определения числа и координат расположения сфер нового слоя упаковки путем выбора такого расположения новых сфер, при котором минимизируется общее расстояние между ними и уже ранее установленными сферами нижнего слоя. Тогда пусть имеется некоторая область упаковки T, представляющая собой прямоугольную полосу заданной ширины L и имеющая неограниченную высоту. Также пусть имеется совокупность n сфер заданного диаметра d: $P=\{p_1, ..., p_n\}$ и дана некоторая начальная полоса ϖ, на которой случайным образом расположено исходное множество, состоящее из m сфер такого же диаметра d: $G=\{g_1, ..., g_m\}$. Произвольную фиксированную точку c сферы назовем ее центром. Требуется найти максимально плотную упаковку сфер в рассматриваемой области, имеющей минимальную высоту, при следующих условиях: $c_i \in R^2$, $|c_i-c_j| \geq d$ для $\forall\ i \neq j$.

Для решения поставленной задачи нами был разработан метод, который получил название «размерной упаковки». Суть данного метода заключается в последовательном формировании слоев случайной упаковки частиц в зависимости от размерности пространства, начиная с размерности R^1 и завершая заданной размерностью пространства, в которой происходит формирование упаковки частиц. Рассмотрим принцип применения данного метода относительно пространства R^2. Для этого разобьем нашу задачу на две независимые подзадачи. На первом этапе сформируем случайную упаковку одномерных сфер с последующим выбором случайного распределения центров двумерных сфер по координате y в пределах начальной полосы ϖ упаковки. Высоту начальной полосы определим по известному значению высоты локального слоя двумерной упаковки [4]. Для решения второй подзадачи поочередно организуются новые слои путем разбиения множества возможных центров сфер на отдельные подмножества непересекающихся сфер. Для этого центры a_i всех вновь установленных сфер слоя сортировались в порядке увеличения по координате x. Определялись пересекающиеся сферы и путем последовательного выбора формировали подмножества непересекающихся сфер. Далее, по значению целевой функции, производилось определение подмножеств соответствующих слоев, имеющих минимальную сумму расстояний между центрами всех сфер рассматриваемых смежных слоев

$$\min\Psi = \frac{1}{m-1}\sum_{i=1}^{m-1} D\left(X_i, X_{i+1}\right) + \frac{1}{m(n-2)}\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{m} z_{ji} D\left(P_j, X_i\right),$$

где P_t – множество двумерных сфер последнего установленного слоя; P_t – множество сфер нового слоя; z_{ji} равно 0, если j-й новая сфера контактно связан с i-й установленной сферой, и равно 1 в противном случае. Формирование последующих слоев производится исходя из условий, определяющих требования к рассматриваемой упаковке частиц.

На основе данного подхода разработан алгоритм формирования двумерной случайной упаковки сфер. Построение программы по данному алгоритму позволило дать количественную оценку интегральной плотности упаковки. Максимальная плотность случайной двумерной упаковки составила величину η_{max}=0,822±0,003. В дальнейшем возможно распространение рассмотренного алгоритма на упаковки сфер, организованных в трехмерном пространстве.

Литература

1 Исследование плотностных характеристик трехмерных стохастических упаковок сферических частиц с использованием компьютерной модели / Е.Ю. Нурканов, Р.М Кадушников, И.Г. Каменин, Д.М Алиевский, В.В. Карташов // Порошковая металлургия. – 2001. – № 5/6. – С. 34-42.
2. A.R. Kansal, T.M. Truskett, S. Torquato Nonequilibrium hard-disk packings with controlled orientational order / J. Chem. Phys., vol.113, No 12, 2000, p. 4844-4851.
3. Kausch H.H., Fesko D.G., Tschoegl N.W. The random packing of circles in a plane / J of Colloid and Interface Sci. – V. 37. – № 3. – 1971. – P. 603-611.
4. Верхотуров М.А. Задача нерегулярного раскроя плоских геометрических объектов // Информационные технологии. – 2000. – № 5. – С. 37-42.