

СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТОХАСТИЧЕСКОЙ УПАКОВКИ СИСТЕМЫ ДВУМЕРНЫХ МОНОСФЕР

Бондарев В.Г., канд. техн. наук, доц.,

Мигаль Л.В., аспирант

Белгородский государственный университет

Изучение стохастических упаковок твердых частиц представляет большой интерес для моделей структуры гранулированных сред, жидкостей биологических клеток, стекол. Одной из основных задач исследований по теории плотноупакованных систем частиц является оценка распределений структурных характеристик стохастической упаковки, таких как локальная и интегральная плотности упаковки, координационные числа системы. Наиболее значимые результаты по определению плотности стохастических упаковок были получены путем компьютерного моделирования [1,2]. Однако полученные результаты дают значения интегральной плотности упаковки, лежащие в довольно широком диапазоне, от 0,80 до 0,84. Наличие такого разброса данных по плотности упаковки не позволяет выявить существование двух видов плотноупакованных систем свободной и связанной, которые имеют место в трехмерных упаковках. Именно поэтому, основной целью настоящей работы явилось применение имитационного моделирования к стохастической упаковке системы сферических частиц в двумерном пространстве, с целью доказательства возможности существования как свободной, так и связанной упаковок, а также оценки значений структурных характеристик плотноупакованной системы частиц.

Для решения данной задачи в двумерном пространстве методом Монте-Карло моделировались стохастические упаковки сферических одномерных частиц (двумерных моносфер), путем формирования свободной и связанной упаковок. На выходе производился расчет данных локальной и интегральной плотностей упаковки и значений координационных чисел. Также фиксировались координаты центров частиц и рассчитывались межчастичные расстояния. Имитационное моделирование проводилось методом послойной упаковки [3] на области установки частиц системы размером 50×50 диаметров дисков, позволяя расположить в данной области более 3000 дисков в каждой конфигурации, при исключении граничных условий.

На рис. 1 показаны, соответствующие проведенному эксперименту, данные о распределении локальной плотности упаковки φ_{lok} , рассчитан-

ной путем численного моделирования системы монофер для свободной и связанной стохастических упаковок.

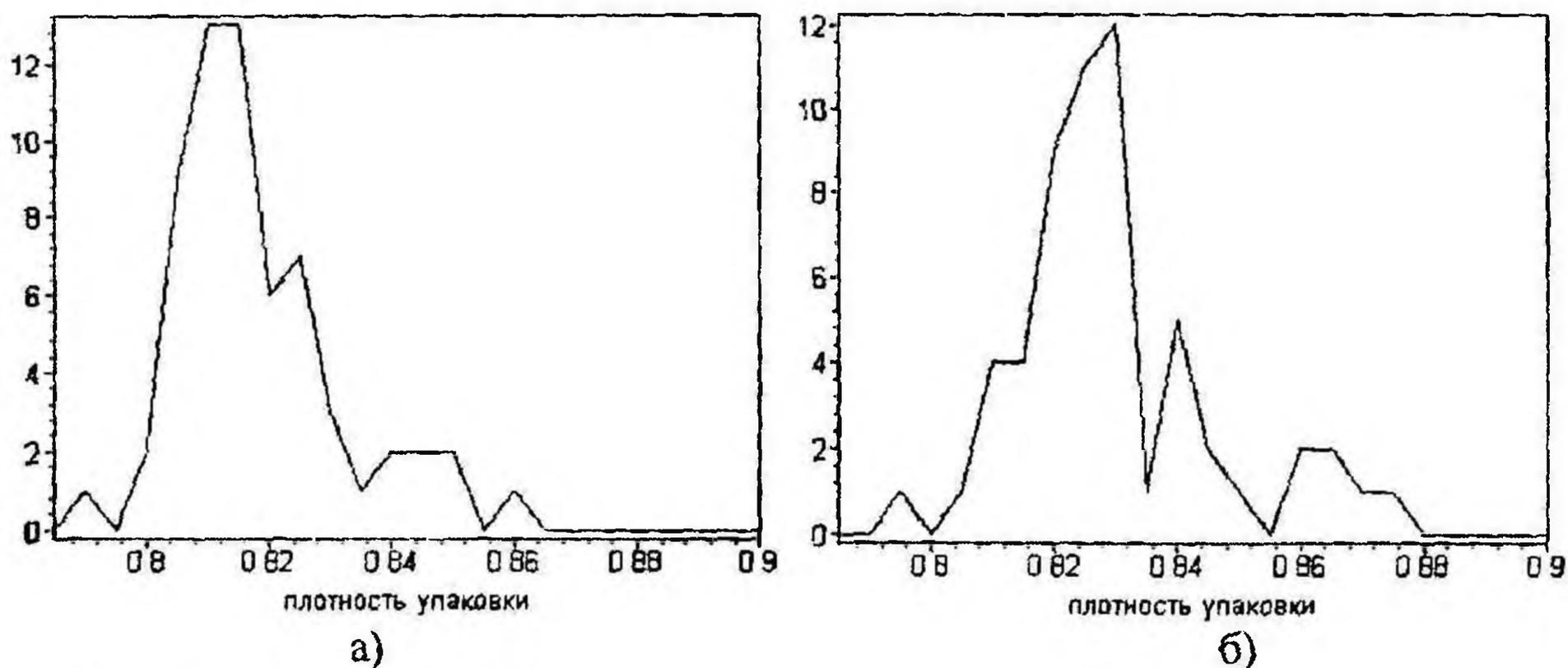


Рис. 1. Кривые распределения локальных плотностей упаковки системы двумерных монофер в свободном (а) и связанном (б) состояниях

Анализ поведения кривых распределения плотности упаковки показывает на наличие ряда пиков, которые соответствуют определенным дискретным значениям плотностей упаковки локальных слоев, независимо от того, в каком состоянии находится стохастическая упаковка (табл. 1).

Таблица 1

Максимальные значения пиков кривых распределения локальных плотностей упаковки системы двумерных монофер

Упаковка	Дискретные плотности упаковки локальных слоев					
	0,79	0,815	0,83	0,845	0,86	-
Свободное состояние	1	13	7	2	1	-
Связанное состояние	0,795	0,815	0,83	0,845	0,86	0,875
	1	4	12	5	2	1

Как видно из данной таблицы различие в значениях интегральной плотности упаковки для различных состояний может быть связано, в основном, с величиной предельных пиков на кривых распределения локальной плотности упаковки. Кроме того, имеется некоторое различие в появлении пика в диапазоне значений локальных плотностей упаковки 0,84-0,85. Однако на аналогичных графиках в ряде других испытаний данные пики практически полностью соответствовали друг другу. В тоже время на кривой для свободной упаковки также имеется некото-

рая размытость ряда пиков. В случае связанной упаковки размытость пиков носит менее выраженный характер.

Сопоставление максимальных значений пиков кривых распределения локальных плотностей упаковки показывает, что основное отличие свободной упаковки от связанной заключается в смещении глобального максимума с пика, имеющего плотность упаковки 0,815 на пик с плотностью упаковки 0,83. Также имеется ряд отличий в положении крайних пиков. Так, имеется небольшое смещение первого пика в сторону увеличения плотности упаковки для связанной упаковки. Кроме того, возникает дополнительный пик на правой границе для данной упаковки, имеющий значение плотности упаковки равное 0,875. Статистическая оценка интегральной плотности упаковки приводит к среднему значению $\varphi_{\text{связ}} = 0,8224 \pm 0,0006$ для связанной упаковки и к значению $\varphi_{\text{своб}} = 0,8163 \pm 0,0024$ - для свободной упаковки.

На рис. 2 приведены данные о распределении координационных чисел, рассчитанные путем имитационного моделирования также для свободной и связанной стохастических упаковок.

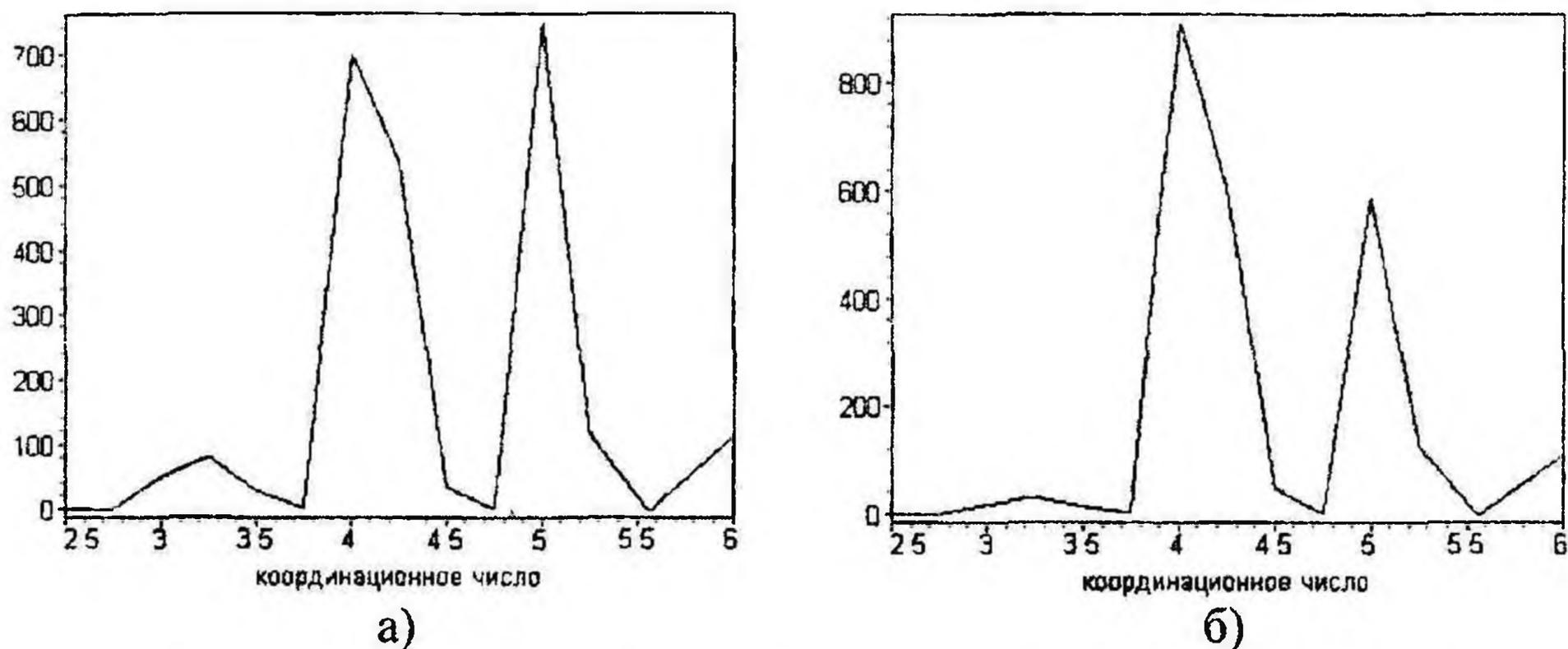


Рис. 2. Распределение координационных чисел системы двумерных моносфер в свободном (а) и связанном (б) состояниях

Координационное число рассчитывалось по предложенной авторами формуле, основанной на выборе экспоненциального закона распределения, близкому к пуассоновскому

$$z = \sum_{i=1}^m e^{-A(r-a)/a}, \quad (1)$$

где r_i – расстояния между основной и другими частицами; a – диаметр частицы; m – число частиц, входящих в область первой координацион-

ной сферы. Граничным значением для первого координационного слоя выбиралось расстояние числовое равное радиусу второй координационной сферы в квадратной регулярной упаковке. Коэффициент A подбирался эмпирически, путем получения значения координационного числа для частиц второй координационной сферы близким к нулю ($A=12$).

Результаты моделирования показали, что поведение кривых распределения координационного числа носит существенно дискретный характер. Причем, пики строго соответствуют конкретным целым значениям координационного числа, за исключением первого пика, где максимум достигается при значении: $z=3,3$. Смещение значения координационного числа для свободной упаковки практически полностью связано с количеством частиц имеющих низкие координационные числа. При этом, в свободной упаковке обнаружено некоторое увеличение количества частиц, имеющих максимальное координационное число, однако данный эффект не играет существенной роли при оценке средней величины координационного числа стохастической упаковки, находящейся в разных состояниях. Статистическая оценка координационных чисел приводит к среднему значению $z_{\text{связ}}=4,91\pm 0,26$ для связанной упаковки и к значению $z_{\text{своб}}=4,41\pm 0,12$ - для свободной упаковки.

Проведенные исследования по стохастической упаковке твердых моносфер, путем имитационного моделирования, позволили проанализировать процессы формирования плотноупакованных систем частиц в двумерном пространстве. Одним из наиболее интересных результатов данного исследования, можно считать экспериментальное подтверждение возможности нахождения стохастической упаковки в свободном и связанном состояниях. Полученные кривые распределения локальных плотностей упаковки и координационных чисел позволяют объяснить причину существования двух данных состояний.

Список литературы

1. Berryman J.G. Random close packing of hard-spheres and disks // Phys. Rev. A. vol.27, 1983, p.1053-1061.
2. Kansal A.R., Truskett T.M., Torquato S. Nonequilibrium hard-disk packings with controlled orientational order // J. Chem. Phys., vol.113, No.12, 2000. p.4844-4851.
3. Бондарев В.Г., Мигаль Л.В. Моделирование случайной упаковки системы сферических частиц в пространстве R^2 // Компьютерные технологии в науке и производстве: Тр. межд. научно-практ. конференции. - Новочеркасск, 2003.