УДК 622.273.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТОХАСТИЧЕСКОЙ УПАКОВКИ БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ ОДНОМЕРНЫХ ЧАСТИЦ

В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль

Проведено математическое и имитационное моделирование стохастической упаковки бинарной системы одномерных частиц. Получено аналитическое уравнение для определения плотности упаковки бинарной системы одномерных частиц. Показано, что вычисленные и наблюдаемые значения плотностей упаковки находятся в достаточно хорошем согласии

1. **Введение**. Определяющее влияние на свойства естественных и искусственных конгломератов оказывают структурные характеристики сыпучих материалов. В связи с этим большую важность приобретают научные исследования, направленные на разработку структурной модели упаковки сыпучих сред. Решение задачи о расчете плотности стохастической упаковки бинарной системы частиц может иметь практический выход в самые различные отрасли народного хозяйства, такие как строительство, горное дело, порошковая металлургия, транспорт, сельское хозяйство. Кроме того, модель стохастической упаковки сыпучих сред может найти применение при изучении структурных образований в физике (структура жидкостей и аморфных тел, упаковка элементов ядерного горючего), в геологии (прочностные свойства грунтов и горных пород), в биологии (структурная модель биологической клетки), в химии (структура полимеров, коллоидные системы и фильтрация жидкости сквозь пористую среду). Представленная, на ваше рассмотрение, статья посвящена одной из наиболее важных проблем теории упаковки сыпучих сред, а именно – моделированию стохастической упаковки бинарной системы одномерных частиц.

2. **Математическая модель**. Рассмотрим систему, состоящую из частиц двух компонентов, диаметрами, соответственно, d_1 и d_2, расположенных случайным образом на одномерном отрезке длиной D. Плотность упаковки η такой системы можно определить как функцию плотностей упаковки отдельных компонентов системы, содержания c частиц второго компонента в системе, а также соотношения размеров частиц r ($r = d_2/d_1$) компонентов: $\eta = f(\eta_1, \eta_2, c, r)$. В качестве рабочей гипотезы модели примем положение о возможности обобществления пустот между частицами компонентов системы. В этом случае все пустоты системы можно разделить на три различных типа. Под первым типом пустот, в дальнейшем, будем понимать исключенные пустоты, т.е. пустоты, расположенные вблизи поверхности частиц первого компонента, и которые не могут быть заняты частицами второго компонента бинарной системы. Объединив исключенные пустоты системы с твердой фазой первого компонента, получим исключенный интервал D_e системы частиц [1], то есть область на установочном отрезке, недоступную для частиц второго компонента. Пустоты между частицами второго компонента будем считать пустотами второго типа, которые будем называть связанными пустотами, а сумму связанных пустот и твердой фазы второго компонента – связанным интервалом D_{20}, т.е. областью на отрезке D, который занимают частицы второго компонента. Под третьим типом пустот будем понимать оставшиеся пустоты между установленными частицами, то есть пустоты не занятые частицами второго компонента системы. Такие пустоты будем называть свободными пустотами, а занимаемый ими интервал – свободным интервалом.

Добавим в систему ΔN_2 частиц второго компонента, которые займут интервал длиной ΔD_{20}. Это приведет к увеличению размера системы на некоторую величину ΔD. Будем считать, что данное изменение размера системы является прямо пропорциональным размеру ΔD_{20} добавляемых частиц второго компонента системы. Тогда мы можем записать данную зависимость следующим образом

$$\Delta D = \mu \Delta D_{20}, \tag{1}$$

где μ – коэффициент, определяющий вероятность участия частиц второго компонента в увеличении размера бинарной системы частиц.

Разобьем общий отрезок D, занимаемый системой частиц, на отдельные ячейки, каждая из которых будет иметь размер d_{20}, т.е. численно равны интервалам, занимаемым отдельными частицами второго компонента. Тогда, вероятность μ можно определить как отношение числа таких ячеек N_z, попадание в которые может приводить к увеличению размера системы, к общему числу ячеек в системе, которые могут быть заняты частицами второго компонента

$$\mu = \frac{N_z}{N_z + N_w}, \tag{2}$$

где N_w – число пустотных ячеек, попадание в которые не приводит к увеличению размера системы. Количество ячеек N_z будем считать пропорциональным общему числу контактов между частицами первого компонента

$$N_z = A\frac{z}{2}\frac{D_{10}}{d_{10}}, \tag{3}$$

где A – коэффициент пропорциональности; D_{10} – часть отрезка D, занимаемая частицами первого компонента; z – координационное число плотноупакованной системы частиц первого компонента (z=2); d_{10} – размер области, занимаемый частицей первого

Бондарев Владимир Георгиевич – Белгородский государственный университет, канд. техн. наук, доцент
Мигаль Лариса Владимировна – Белгородский государственный университет, канд. физ.-мат. наук, ст. преп.

компонента. Коэффициент 1/2 введен в связи с тем, что каждый контакт между частицами первого компонента принадлежит одновременно двум частицам.

Число пустотных ячеек $N_{п}$ можно определить как отношение размера пустотных ячеек, которое можно определить как разность между размером D системы и исключенным D_e и связанным D_{20} интервалами, к интервалу d_{20}, занимаемому отдельной частицей второго компонента

$$N_{п} = \frac{D - D_e - D_{20}}{d_{20}}. \quad (4)$$

Подставив в формулу (2) выражения (3) и (4) и произведя необходимые преобразования, получим

$$\mu = \frac{A\frac{z}{2}\frac{d_{20}}{d_{10}}}{A\frac{z}{2}\frac{d_{20}}{d_{10}} + \frac{D}{D_{10}} - \frac{D_e}{D_{10}} - x}, \quad (5)$$

где $x = D_2/D_1$ – относительное содержание частиц второго компонента в системе, определяемое как отношение интервалов, занимаемых твердыми фазами, соответственно, второго и первого компонентов системы ($D_i = N_i d_i$, $i = 1, 2$).

Введем некоторые формальные обозначения с целью упрощения вида полученного уравнения

$$a = A\frac{z}{2}\frac{d_{20}}{d_{10}} = A\frac{z}{2}r; \quad b = a - \frac{D_e}{D_{10}}.; \quad y = \frac{D}{D_{10}}.$$

В этом случае уравнение (1) примет вид

$$\Delta y = \frac{a\Delta x}{b + y - x}. \quad (6)$$

Устремив Δx к нулю, запишем данное уравнение в дифференциальной форме

$$\frac{dy}{dx} = \frac{a}{b + y - x}. \quad (7)$$

Уравнение (7) представляет собой дифферечциальное уравнение, имеющее в качестве начального условия: $y(0) = 1$, решением которого является выражение

$$y = a - b + x + (1 - a + b)\exp(-\frac{y-1}{a}). \quad (8)$$

Переходя от формальных обозначений к реальным физическим величинам для отрезка D, занимаемого бинарной системой, получим следующее уравнение

$$D = D_e + D_{20} + (D_{10} - D_e)\exp(-\frac{2(D - D_{10})}{zrD_{10}}). \quad (9)$$

Зная выражение для отрезка D, занимаемого бинарной системой, запишем окончательное уравнение для плотности стохастической упаковки η бинарной системы частиц

$$\eta = \eta_1 \Big/ \{(1-c)\frac{\eta_1}{\eta_e} + c\frac{\eta_1}{\eta_2} + (1-c)(1-\frac{\eta_1}{\eta_e})\exp[-\frac{2}{Azr}((1-c)\frac{\eta_1}{\eta} - 1)]\}, \quad (10)$$

где η_1 и η_2 – плотности упаковки, соответственно, первого и второго компонентов системы; η_e – плотность упаковки исключенного интервала; c – содержание частиц второго компонента в системе ($c = D_2/(D_1 + D_2)$).

В завершение данного исследования выполним определение вида уравнения для плотности упаковки η_e исключенного интервала. Вначале рассмотрим случай, когда соотношение размеров частиц компонентов бинарной системы, представляет собой величину, которая много меньше единицы: $r \ll 1$. По определению, единичный исключенный интервал d_e представляет собой величину, численно равную сумме размера частицы первого компонента d_1 и пустотного промежутка вблизи ее поверхности: $d_e = d_1 + d_{20} - d_2$ (рис. 1).

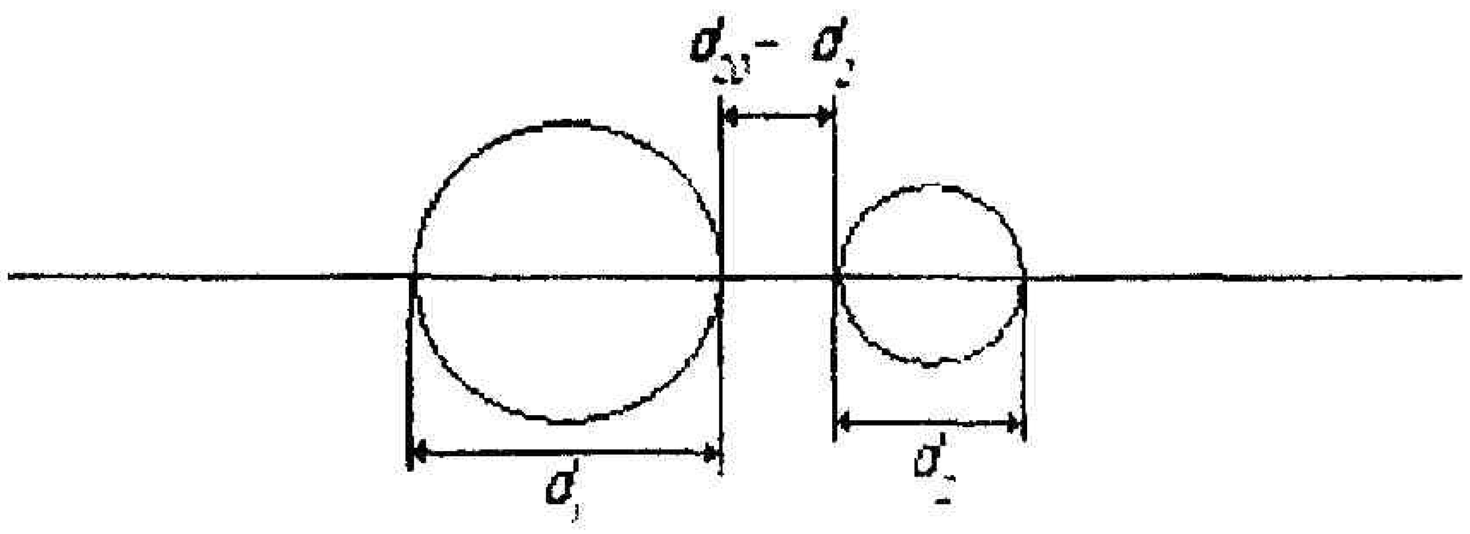

Рис 1. Схема расположения частиц компонентов бинарной системы. Для наглядности частицы показаны в виде дисков

Учитывая, что выражение для интервала d_{20}, занимаемого частицей второго компонента, можно представить в виде: $d_{20} = d_2/\eta_2$, то плотность упаковки исключенного интервала η_e можно рассчитать по формуле

$$\eta_e = \frac{1}{1 + r(1/\eta_2 - 1)}. \quad (11)$$

Однако уравнение (11) не может быть применено в случае, когда размеры частиц компонентов системы имеют близкие значения, т.е. при $r \to 1$. Именно по этой причине уравнение (11) необходимо уточнить путем возведения в степень $1+r$ отношения размеров частиц r, т.е. уравнение для плотности упаковки η_e исключенного интервала примет следующий вид

$$\eta_e = \frac{1}{1 + r^{1+r}(1/\eta_2 - 1)}. \quad (12)$$

3. **Имитационная модель**. Для проверки математической модели нами были проведены эксперименты по имитационному моделированию случайной упаковки бинарной системы одномерных частиц. Наиболее удобным для создания имитационной модели является метод Монте-Карло [2, 3]. В качестве инструментального средства проведения имитационного моделирования был выбран пакет символьных вычислений Maple.

Построение имитационной модели основано на следующем алгоритме. Вначале выбирается размер установочной области D, а также определяется тип устанавливаемой частицы, в зависимости от выбранного случайным образом компонента бинарной системы. Процедура заполнения установочной области начинается с выбора места для расположения

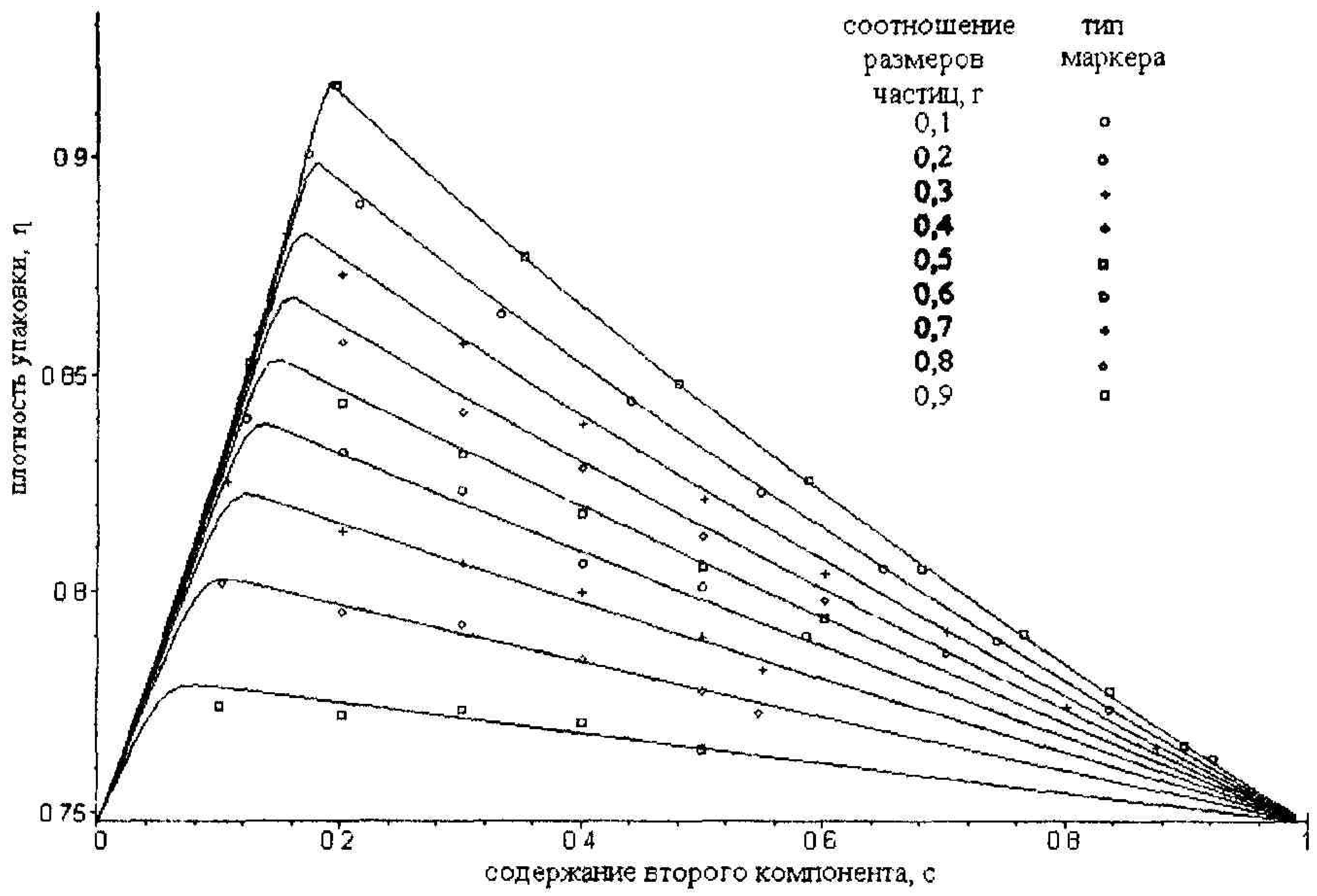

Рис. 2. Зависимость плотности упаковки η от содержания частиц второго компонента c (сплошная линия – математическое моделирование; маркеры – имитационное моделирование)

центра первой устанавливаемой частицы. Выбор реализации случайных чисел, равномерно распределенных на отрезке [0,1] производился путем применения функции генерации случайных чисел, определяющей псевдослучайное число с учетом текущего времени. На следующей стадии оставшиеся свободные интервалы разделенного отрезка включаются в составы массивов, в соответствии с возможностью установки в них частиц определенных типов. Сохранению подлежат как размеры интервалов, так и их начальные координаты. Координаты самой установленной частицы заносятся в собственный массив данных, организуемый для определенного типа частиц. На последующих стадиях выполнение процедуры установки отдельной частицы повторяется до полного заполнения всех свободных интервалов. Далее по стандартной формуле рассчитывается плотность полученной стохастической упаковки.

На втором этапе выполнение описанного выше алгоритма заполнения установочной области повторяется многократно до достижения требуемой погрешности (менее 0,005%) измерения среднего значения плотности упаковки.

4. **Обсуждение результатов**. Анализ уравнения (10) для плотности упаковки бинарной системы частиц показал непротиворечивость данного уравнения его граничным условиям. Неявный вид уравнения для плотности упаковки бинарной системы частиц делает затруднительным его полный элементарный анализ. Именно поэтому в основу алгоритма по численному моделированию бинарной системы частиц был положен метод итераций. Коэффициент пропорциональности A в математической модели принимался равным 0,01. Рассчитанные с помощью данного уравнения теоретические значения сравнивались с данными, полученными в результате имитационного моделирования (рис. 2). Из графика на рис. 1 видно, что вычисленные и рассчитанные значения плотности упаковки бинарной системы частиц находятся в достаточно хорошем согласии. Полученный коэффициент нормированной детерминации R^2 составил величину 0,987, при стандартной ошибке: α=0,01, что говорит о достаточно сильной достоверной связи между теоретическими значениями и расчетными данными, полученными в результате имитационного моделирования.

5. **Заключение**. Исследования по стохастической упаковке бинарной системы одномерных частиц, проведенные путем математического и имитационного моделирования, позволили проанализировать процессы формирования бинарной системы частиц. Полученное аналитическое уравнение для плотности упаковки в зависимости от размеров частиц и содержания компонентов в системе, указывает на возможность управления формированием плотноупакованных бинарных систем одномерных частиц.

Литература

1. Займан Дж. Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. М.: Мир, 1982. 592 с.

2. Розанов Ю.А. Случайные процессы. М.: Наука, 1976. 184 с.

3. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982. 296 с.

Белгородский государственный университет

MODELLING OF STOCHASTIC PACKING BINARY SYSTEM OF ONE-DIMENSIONAL PARTICLES

V.G. Bondarev, L.V. Migal

Mathematical and imitating modelling stochastic packing of binary system of one-dimensional particles is carried out. The analytical equation for definition of density of packing of binary system of one-dimensional particles is received. It is shown, that the calculated and observable values of density of packing are in good enough consent