

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПЛОТНОУПАКОВАННЫХ СИСТЕМ ТВЕРДЫХ ДИСКОВ

В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль, Т.П. Бондарева

Белгородский государственный университет, 308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 14
Bondarev@bsu.edu.ru

Предложена имитационная модель, предназначенная для изучения структуры плотноупакованных систем твердых дисков. Основываясь на физических механизмах, ответственных за формирование плотноупакованных систем частиц: базовый слой, случайный выбор и пристенный эффект, разработан новый метод «близкие соседи» и алгоритм, позволяющий управлять формированием структуры случайной упаковки. Проведены компьютерные эксперименты, с целью анализа зависимости структурных характеристик, таких как интегральная плотность упаковки и среднее координационное число от вероятности выбора позиций устанавливаемых частиц. Выявлено новое состояние RCP-упаковки, получившее название полусвязанного состояния.

Ключевые слова: случайная упаковка, система частиц, плотность упаковки, координационное число.

Введение

Случайные упаковки однородных твердых частиц (random close packing, RCP), взаимодействующих контактным путем и обладающие неограниченными парными силами отталкивания, представляют большой интерес как полезные модели физических систем, таких как простые жидкости, стекла и аморфные материалы [1-3]. Кроме этого, данные объекты имеют фундаментальный характер и для исследований в области гранулированных порошков и пористых материалов [4]. Подходы, основанные на результатах изучения случайных упаковок, также вносят определенный вклад и в понимание закономерностей возникновения беспорядка в твердых телах. Так, например, выявлено, что плотноупакованные системы могут находиться в двух различных состояниях: связанном (dense random packing, DRP), а также в виде случайной свободной упаковки (random loose packing, RLP) [5]. Здесь, под DRP-упаковкой мы будем понимать наиболее плотную случайную упаковку системы частиц, а под RLP-упаковкой – систему частиц, находящуюся в состоянии, которому соответствует наименьшая плотность упаковки.

В двух измерениях, экспериментальные данные для случайных упаковок практически отсутствуют. В основном принято оперировать данными по компьютерному моделированию двумерных случайных упаковок (табл. 1). В данном направлении было проведено достаточное большое число попыток построения плотноупакованных систем частиц, главным образом, путем разработки алгоритмов, основанных на методах их имитационного моделирования [6-8]. Результаты компьютерных экспериментов по определению плотности η RCP-упаковок позволили получить значения, расположенные в диапазоне $0,80 < \eta < 0,89$ [9]. При этом ряд авторов считают, что $\eta = 0,82 \pm 0,02$ является только верхним пределом для плотности RCP-упаковки, другие же утверждают, что это значение также является и нижним пределом. Наличие двух состояний, таких как RLP и DRP для 2D-упаковок, было показано авторами данной статьи еще в 2005 году [11]. В тоже время других данных, подтверждающих возможность существования двух состояний для 2D-упаковок, в научной литературе не обнаружено, что указывает на необходимость проведения дальнейших исследований в данном направлении.

Таблица 1

Плотность упаковки η_{RCP} случайной системы жестких дисков

№ п/п	Плотность упаковки	Год	Ссылка	Авторы
1.	$0,81 \pm 0,02$	1964	[14]	F.H. Stillinger et al.
2.	$0,821 \pm 0,002$	1971	[6]	H.H. Kausch et al.
3.	0,82	1972	[10]	W.M. Visscher, M. Bolsterli
4.	$0,830 \pm 0,015$	1974	[16]	T.J. Quickenden, G.K. Tan
5.	0,82	1977	[40]	D. N. Sutherland
6.	0,85	1980	[41]	K. Kanatani
7.	0,84	1980	[42]	M. Sugiyama
8.	$0,866-0,874$	1982	[17]	W. Schreiner, K.W. Kratky
9.	0,846	1982	[43]	M. Shahinpoor
10.	$0,81 \pm 0,02$	1983	[9]	J.G. Berryman
11.	$0,8180 \pm 0,0001$	1987	[44]	P.Meakin, R. Jullien
12.	$0,795 \pm 0,01$	1993	[45]	M. Acharyya
13.	0,842	2002	[46]	C.S. O'Hern et al.
14.	$0,817 \pm 0,004$ (RLP) $0,823 \pm 0,004$ (DRP)	2005	[11]	В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль

В ряде работ большой интерес вызывает исследование мезоструктуры двумерных случайных упаковок, особенно идентификации регулярных областей. Так, Кауш (Kausch) и др. [6], при моделировании процесса роста упаковки под влиянием центральной силы, нашел небольшие треугольные регулярные области. После устранения этих областей им была получена плотность упаковки $\eta_{RCP} \approx 0,82$. Висшер (Visscher) и Болстерли (Bolsterli) [10] моделировали рост двумерных случайных упаковок под влиянием гравитационной силы, и нашли большие области почти квадратной структуры наклоненными на угол приблизительно в 45° от вертикального положения. Увеличение плотности упаковки от $\eta = \pi/4 = 0,785$ для квадратной упаковки до наблюдаемого значения $\eta = 0,82$ ими объясняется более высокой плотностью в граничной области. Они также считают, что и Кауш должен «видеть» эти области для больших кластеров, так как действие центральной силы аналогично одноосному сжатию.

Несмотря на все проведенные исследования, множество вопросов о механизмах и поведении случайных упаковок пока не имеют однозначного ответа. Острота этих проблем, по нашему мнению, связана с отсутствием общего подхода к построению случайных упаковок. Именно по этой причине целью данной работы является создание имитационной модели, основанной на анализе механизмов физических процессов, протекающих при формировании структуры случайной упаковки.

Механизмы формирования плотноупакованных систем

Анализ поведения RCP-упаковок, находящихся в различных структурных состояниях, позволил предложить ряд механизмов формирования плотноупакованных систем частиц. В качестве таких механизмов принято рассматривать механизмы, описывающие возникновение пристенного эффекта [12], наличия затравки, являющейся основой на начальной стадии подготовки к построению упаковки [8], а также механизмы, описывающие способы поиска оптимального расположения частиц [13]. Однако во многих ранее проведенных исследованиях не имеется удовлетворительного описания физических закономерностей, возникающих при действии указанных выше механизмов. Отсутствие адекватного описания структурных механизмов формирования упаковок обусловлено, в первую очередь, тем, что до сих пор так и не выяснено, какие про-



цессы отвечают за изменение структурных свойств случайных упаковок, какова природа образования структуры плотноупакованной системы частиц [13].

В процессе изучения плотноупакованных систем частиц, с целью описания их свойств, авторами были выдвинуты ряд гипотез о структурных механизмах наблюдаемых процессов в исследуемой RCP-упаковке. По нашему мнению, процессы формирования RCP-упаковки протекают в результате комплексного воздействия трех механизмов, таких как (1) построения затравочной области, (2) приоритетности выбора позиций устанавливаемых частиц, (3) возникновения пристенного эффекта.

При формировании случайной упаковки необходимо выбрать определенный вид затравочной области [8], в качестве которой может рассматриваться кластерное образование определенной формы и размера. Форма затравочной области может быть представлена, в случае действия вертикальной однонаправленной силы, в виде «цепочки» частиц, расположенных в некоторой начальной полосе. Концепцию наличия затравочной области в данном случае можно сформулировать следующим образом. Частицы, включенные в состав затравочной области, располагаются в позициях, расстояния между которыми с одной стороны не позволяют иметь перекрывающиеся частицы в самой затравочной области, а с другой стороны – частицам последующего слоя перекрываться с ранее установленными частицами. При этом необходимо выполнение ряда условий, заключающихся в определенных требованиях по ширине полосы установки частиц, а также некоторых ограничений по выбору координат позиций частиц, исключающих возникновение пустот между частицами, которые могут быть больше, чем размер самих частиц. Генерируя различные последовательности позиций частиц, при построении затравочной области, мы также можем выполнять варьирование конечных значений структурных характеристик плотноупакованных систем частиц.

Вторым механизмом, отвечающим за формирование случайной упаковки, нами предлагается механизм приоритетности выбора возможных позиций устанавливаемых частиц. Организация DRP-упаковки требует учета, в качестве основного критерия – принципа минимума потенциальной энергии. В этом случае, приоритетом будут обладать позиции устанавливаемых частиц, которые имеют наименьшие y -координаты. Однако, при переходе к RLP-упаковке, возможные позиции устанавливаемых частиц будут иметь одинаковый приоритет, что можно оценить, используя параметр, который мы будем в дальнейшем называть вероятностью v выбора позиции устанавливаемой частицы. Задавая различные значения вероятности выбора позиции, мы можем проводить управление структурными характеристиками создаваемой упаковки. Так, для получения DRP-упаковки необходимо выбрать численное значение вероятности равное единице, а для RLP-упаковки – значение, равное: $v = 1/2$. Кроме того, возможно построение случайной упаковки, используя и более низкие значения вероятности выбора позиций частиц. Состояние, при котором вероятность выбора позиций частиц будет принимать значение равное нулю, в дальнейшем, мы будем называть полусвязанным состоянием случайной упаковки (*semiconnected random packing, SRP*). Однако в этом случае, для реального управления RCP-упаковкой, мы должны включить в рассмотрение, кроме однонаправленной вертикальной силы (например, гравитационной), дополнительную внешнюю силу, имеющую противоположную направленность. В качестве такой силы можно рассматривать газовый или жидкостный поток, препятствующий частицам занимать позиции с минимальной y -координатой. Важной особенностью такого потока является его пульсирующий характер, позволяющий выполнять фиксацию установленных частиц в выбранных позициях.

При формировании случайной упаковки имеет место и третий механизм возникновения случайного процесса, получивший название пристенного эффекта [12]. Пристенный эффект выполняет роль дополнительного фактора, позволяющего вносить ис-

кажения в структуру создаваемой случайной упаковки. При этом важную роль играют форма и положение (например, угол наклона) границы установочной области. Однако при исследовании механизма, ответственного за возникновение пристенного эффекта, необходимо очень тщательно изучить структурные свойства упаковки в приграничной области, поэтому в данной статье мы исключим из нашего рассмотрения анализ данного механизма.

Компьютерные методы генерирования случайных упаковок

Все методы формирования случайных упаковок можно разделить на два класса: динамические методы сжатия случайной свободной конфигурации или расширения системы частиц, а также методы последовательного заполнения некоторого пространства в центральном или одноосном силовом поле при формировании упаковки с наличием затравочной области.

Динамические методы. В большинстве исследований, в качестве основы для динамического метода, принято использовать метод дискретного элемента DEM как непосредственно для подготовки начального расположения частиц, так и для генерации упаковок [14-19]. Обзоры основных динамических методов можно найти в [20-22].

Общий подход, при применении динамических методов, состоит в том, чтобы поместить необходимое число частиц, с диаметрами, намного меньшими, чем их конечный размер, в область установки. Затем диаметры частицы постепенно увеличивают до тех пор, пока не будет достигнуто плотное расположение частиц. Другой вариант подобного подхода, состоит в назначении конечного размера частиц, помещенных в установочную область, стенки которой медленно смещаются внутрь до тех пор, пока необходимая плотность не будет достигнута. Оба способа приводят к практически одинаковым конфигурациям систем частиц. В ряде случаев принято использовать подход, который состоит в моделировании некоторого гравитационного смещения частиц начальной затравки. При этом, частицы определенного размера, попадая в установочную область, находят позицию равновесия, находясь под воздействием гравитационной силы.

В динамических методах движение каждой частицы должно моделироваться с учетом многократных столкновений частиц в течение всего процесса уплотнения, что приводит к большим временным затратам. Кроме того, данные методы также не позволяют выполнять управление состоянием плотноупакованной системы частиц.

Методы последовательного заполнения. Другая группа подходов, названных методами последовательного заполнения, рассматривает системы, подготовленные путем геометрических вычислений, без моделирования динамики частиц [6, 10, 15, 23, 24]. Все методы последовательного заполнения можно, в свою очередь, подразделить на методы перестановок и роста.

В научной литературе описаны несколько методов перестановок, используемых при формировании случайных упаковок одно- и многокомпонентных систем частиц. Обзоры таких методов можно найти в работах Д. Стояна (Stoyan) [25, 26]. Самыми известными из них являются: модель Стиенена, модель прудовых лилий, простая модель последовательного запрета и алгоритм Метрополиса-Гастинга.

В модели Стиенена (Stienen) [25] процесс подготовки упаковки начинается со случайного размещения центров частиц в 2D или 3D-мерной области установки. Каждая частица в упаковке определена с радиусом, равным половине расстояния между ней и ее ближайшим соседом. Полученные частицы системы в этом случае могут об-



ладать либо одним контактом с соседней частицей, либо вообще не иметь каких-либо контактов.

Модель «водоем лилий» [27] также основана на генерации ряда беспорядочно расположенных центров частиц. Частицы первоначально определены с нулевым радиусом. Радиусы частиц постепенно увеличивают и рост определенной частицы останавливается, когда она входит в контакт с другой частицей. Здесь уже каждая частица имеет, по крайней мере, хотя бы один контакт с соседней частицей.

Распределение размера частицы в представленных моделях не может быть заранее определено, можно оказывать влияние только в начальный момент, при определении местоположения генерируемых центров частиц. Также данные модели нельзя применять для моделирования моносистем частиц.

Простая модель последовательного запрета SSI (Simple Sequential Inhibition) [28] определена следующим образом. Частицы одинакового диаметра помещаются случайным образом в область установки. Если новая частица, помещенная таким способом, пересекается с ранее установленной, то данная частица будет отклонена. Процесс останавливается, когда вся установочная область будет заполнена частицами. Отметим, что данный метод генерирует системы частиц, которые практически не имеют никаких контактов друг с другом.

Алгоритм Метрополиса-Гастинга [29, 30] или его различные версии [31] является более эффективным, чем рассмотренные ранее. Сущность метода следующая. Рассмотрим начальное случайное расположение частиц в области установки. Возможно, что при этом, несколько частиц оказались расположены далеко друг от друга в установочной области. Следующее состояние упаковки достигается путем вставки, удаления или перемещения частиц, с определенными вероятностями, которые могут быть предписаны пользователем. Расположения принимаются с вероятностями, названными отношениями Гастинга, которые отличны для операций вставки, удаления и перемещения частиц. В случае отклонения расположение частиц системы остается неизменным. Все вышеупомянутые методы приводят к упаковкам с довольно низкими плотностями упаковки и координационными числами.

В заключение можно также отметить различные коллективно-перестановочные методы [33, 34]. В данных методах число частиц заранее определено в течение процесса подготовки. Первоначально частицы помещены беспорядочно в установочную область. Наложения разрешаются, но их величина уменьшается в течение процесса, путем перемещения, а иногда и изменением размера частиц. При каждом шаге смещения частиц вычисляется от значений величины наложений с её соседями, подобно динамическим методам. Следовательно, эти алгоритмы также являются довольно затратные по времени.

Методы роста, например [7, 32], позволяют получить более плотные расположения. Типичное выполнение производится следующим образом [20]. Упаковки моделируются очень медленной установкой твердых частиц в беспорядочно упакованный слой. Частицы вводятся по одной в потенциальной области падения или перекатывания. Каждый последующий шаг помещает новую частицу в область установки, и переводит ее вниз, пока она не занимает один из доступных ей участков. Позиция поступающей частицы вычисляется чисто геометрически, без анализа динамики системы. Периодические граничные условия устраняют воздействие пристенного эффекта, а начальный слой задает случайность расположения частиц на первом этапе формирования упаковки. Сохранение координат частиц упрощает последующий анализ для близко установленных соседей. В методах роста диаметры частиц могут быть одинаковыми, или могут определяться на основе любого распределения.

Развитием данного метода можно считать метод послойной упаковки, предложенный авторами данной статьи [11]. Предложенный вариант метода несколько отличается от ранее рассмотренного, так как он базируется на методе формирования случайной упаковки частиц, расположенных в виде отдельных цепочек. На первом этапе случайным образом подготавливается начальная цепочка частиц. На втором этапе, после установки частиц нижней цепочки, определяются вакантные места для центров частиц следующей, верхней цепочки. Затем, основываясь на понятии графа-дерева, производится поиск всех возможных ветвей, состоящих из последовательностей непрерывающихся частиц. В случае нахождения удовлетворяющей выбранным условиям цепочки частиц, производится их включение в состав упаковки. Преимуществом данного алгоритма можно считать получение достаточно плотного расположения частиц в установочной области, а также высокие значения координационных чисел частиц.

Понижающийся метод, предложенный Баги (Bagi) [35] для 2D-упаковок дисков, можно рассматривать как двумерную версию алгоритма роста. Необходимая область заполняется, начиная от основания, и всегда добавляя по одной частице к уже существующему набору частиц. Геометрическая позиция новой частицы определяется при касании двух предыдущих частиц ниже, или одной из стенок области (без наложений с другими частицами). Новая частица помещается таким образом, чтобы, если бы предыдущие частицы были установлены без смещений, то новая частица была бы в устойчивой позиции, находясь под воздействием направленной вниз силы.

Более эффективный алгоритм, который был разработан Фенгом (Feng) и др. [36, 37], получил название фронтального метода. Фронтальный метод основан на заполнении установочной области по спирали. Вначале в центр установочной области помещается затравка из трех контактирующих между собой частиц. Затем дополнительные частицы одна за другой добавляются к двум ранее установленным частицам. Предложенный метод позволяет производить изотропное геометрическое расположение, однако в случае многокомпонентной системы частиц, по границам области могут остаться большие пустоты, что приводит к отсутствию контактов между сгенерированной упаковкой и границами установочной области.

Полностью отличный алгоритм роста для 2D и 3D-мерных упаковок сферических частиц предлагается Куи (Cui) и Суливаном (O'Sullivan) [38]. Этот метод основан на создании в области установки случайных ячеек, представленных в виде треугольников или тетраэдров. Вписанные в треугольники частицы затем включаются в состав упаковки. Установочная область далее может быть дозаполнена, путем размещения дополнительных частиц в узлах ячеек, которые не накладываясь на установленные ранее частицы, могут контактировать с близкими соседями, аналогично подходу, применяемому в модели «водоем лилий». Однако полученные таким методом упаковки менее плотны, а координационные числа значительно ниже, чем в случае применения других методов роста. Преимуществами данного алгоритма является его простота, а также возможность его обобщения для трехмерного случая.

Формирование случайной упаковки можно проводить, используя так называемый метод многогранников Вороного. Многогранник Вороного представляет собой область пространства, все точки которой расположены ближе к "центральной" частице, чем к любым другим частицам [25]. Для однокомпонентных систем плоскости, образующие грани многогранника Вороного, перпендикулярны отрезкам, соединяющим центральную частицу с ее ближайшими соседями, и делят их строго пополам. В общем случае, для систем с частицами, отличающимися по размерам, разбиение пространства на многогранники, возможно, осуществлять двумя способами: либо проводя радикальные плоскости, либо рассекая отрезки соединяющие ближайших соседей перпендикулярными плоскостями в соотношении радиусов частиц компонентов. Многогранники в



этом случае являются выпуклыми и заполняют все пространство без "зазоров". Метод многогранников Вороного, дает наиболее наглядную геометрическую информацию.

Общий недостаток, присущий большинству методов роста, заключается в возникновении анизотропии структуры системы частиц, приводящей к тому, что сгенерированные случайные упаковки более жестки при вертикальном, чем при горизонтальном сжатии. Также другим недостатком ряда методов роста можно считать наличие незаполненных пустот вблизи границ установочной области.

Алгоритмы генерации случайных плотных упаковок

Алгоритмы генерации случайных плотных упаковок были разработаны на основе предлагаемого нами метода, получившего название «близкие соседи». При моделировании случайной упаковки, в соответствии с данным методом, после построения базового слоя, частицы вводятся по одной вблизи ранее установленных частиц, обладающих наименьшей потенциальной энергией. Вероятности для выбора одной из двух пересекающихся частиц, назначаются, в зависимости от требуемых условий получения структурного состояния, что позволяет выполнять управление формированием случайной упаковки. Наличие «прозрачных» границ установочной области приводит к устранению пристенных эффектов, возникающих вследствие частичного упорядочивания частиц на границах установочной области. Базовый слой упаковки также способен влиять на структурные характеристики, однако данное влияние оказалось существенным только для DRP-упаковки. Эти особенности делают плотноупакованную систему частиц, после окончания ее формирования, действительно случайной независимо от того, в каком состоянии она находится. Сохранение координат позиций установленных частиц упрощает последующий анализ структурных характеристик получаемой упаковки. Предложенный метод размещения частиц в пространстве позволяет исследовать системы с плотностями заполнения, близкими к максимальным, и является, по нашему мнению, наиболее общим методом решения подобных задач.

Рассмотрим алгоритм роста, разработанный на базе метода «близкие соседи». По сравнению с известными методами преимущества предложенного метода могут быть перечислены следующим образом:

1. Генерированные системы частиц представлены в виде случайных упаковок дисков, имеющих геометрическую анизотропию, вызванную воздействием односторонней слабой силы.
2. Диски в установочной области размещены без наложений.
3. Установочная область ограничена «прозрачными» стенами, что позволяет граничным дискам частично располагаться за пределами данной области.

Общий алгоритм имитационного моделирования при этом распадается на три подзадачи:

1. Построение базового (начального) слоя в полосе – задача определения координат центров частиц слоя.
2. Определение механизма установки частиц – задача выбора вариантов расположения частиц, в зависимости от значения вероятности их участия в построении упаковки.
3. Анализ положения граничных частиц – задача контроля размещения частиц вблизи границ установочной области.

Процесс формирования случайной упаковки может быть описан в виде набора следующих этапов. На первом этапе, в пределах нижней границы установочной области, располагается базовый слой (рис. 1), полученный из плотноупакованной регулярной цепочки дисков, имеющих случайные смещения Δy по y -координате в пределах: $0 \leq \Delta y \leq \sigma \sqrt{2}$ (σ – диаметр диска). Величина смещения определялась таким образом, что-

бы расстояние между частицами не превышало значения, которое привело бы к перекрытию устанавливаемых соседних частиц. Массив дисков базового слоя формирует нижнюю границу случайной упаковки.

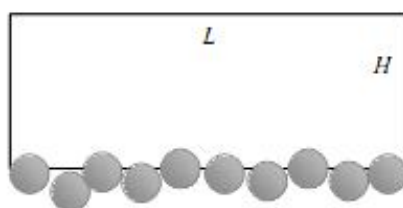


Рис. 1. Базовый слой (L , H – ширина и высота установочной области)

Как только базовый слой сформирован, на втором этапе из массива установленных частиц выбирается рабочий диск. В качестве критерия выбора позиции нового диска берется принцип минимума потенциальной энергии, при его расположении относительно двух ранее установленных дисков. Установка новых дисков производится путем выполнения ряда шагов.

Шаг 1. Выбирается рабочий диск, имеющий наименьшую y -координату и формируется набор дисков, включающий выбранный диск совместно с его соседями.

Шаг 2. Вблизи рабочего диска задаются координаты возможных позиций устанавливаемых дисков. Позиции для установки новых дисков определяются путем геометрических вычислений и исходя из рассматриваемого состояния случайной упаковки. Выбор конкретной позиции новой частицы производится на конкурентной основе, с учетом вероятности ее возможной установки в данной позиции.

Шаг 3. Выполняется проверка на возможность наложения нового диска на другие, ранее установленные частицы, и если имеются такие наложения, то производится пересчет координат центра новой частицы, с учетом его контакта с другим диском, с целью снятия обнаруженного наложения.

Шаг 4. Если сгенерированная частица не выходит за границы установочной области, а также если отсутствуют пересечения с ранее размещенными частицами, то координаты ее центра фиксируются, а сгенерированная частица «включается» в структуру упаковки. Определяются его близкие соседи и сам диск также включается в состав соседей окружающих его частиц. Выход позиции диска за пределы границ установочной области дает право исключить данный диск из состава системы. Однако при установке последующих дисков такая частица также может принимать участие в качестве граничного диска.

Шаг 5. Шаги 1-4 многократно повторяются, пока следующая новая частица не оказывается за пределами верхней границы установочной области. В случае выхода устанавливаемого диска за пределы верхней границы установочной области, определяются правила останова процесса формирования случайной упаковки.

Структурные характеристики случайной упаковки системы дисков

Параллельно с имитационным моделированием также были разработаны алгоритмы расчета таких структурных характеристик как интегральная плотность упаковки η и среднее координационное число Z .

Плотность упаковки. Плотность упаковки является одной из наиболее важных характеристик случайной структуры и определяется как отношение суммарной площади дисков к площади установочной области. Принято различать локальную и интегральную плотности упаковки. Локальная плотность упаковки дает нам информацию о



размещении частиц в отдельном слое случайной упаковки, в то время как интегральная плотность упаковки позволяет нам оценить степень заполнения всего доступного пространства, предоставленного системе частиц. Здесь мы ограничиваемся рассмотрением только интегральной плотности упаковки.

Интегральная плотность упаковки рассчитывалась нами по формуле

$$\eta = \frac{(n_1 + n_2 / 2)S}{LH}, \quad (1)$$

где n_1 и n_2 – число частиц, соответственно, находящихся внутри установочной области и на ее границах; S – площадь диска; L и H – ширина и высота установочной области. При этом предполагалось, что в состав случайной системы будет включена только половина граничных частиц. Это позволяет устранить громоздкие расчеты по определению площадей сегментов граничных дисков и, соответственно, ускорить работу программного комплекса, практически не сказываясь на полученных результатах расчета интегральной плотности упаковки.

Координационное число частицы. Под координационным числом z частицы здесь будем понимать число ее соседей, которые могут быть включены в состав первой координационной сферы, с учетом расстояний между ними и самой частицей. Для расчета координационного числа авторами предложена формула, основанная на выборе экспоненциального закона распределения, близкого к пуассоновскому

$$z = \sum_{i=1}^m \exp\{1 - (r_i / \sigma)^n\}, \quad (2)$$

где r_i – расстояние между частицей и ее i -тым соседом; σ – диаметр частицы; m – число частиц, входящих в область первой координационной сферы.

Таблица 2

Значения степени n для расчета координационных чисел

Степень	Межчастичное расстояние					
	1,1	1,2	1,3	1,4	1,5	1,6
1	0,904837	0,818731	0,740818	0,67032	0,606531	0,548812
2	0,810584	0,644036	0,501576	0,382893	0,286505	0,210136
3	0,718205	0,482874	0,302099	0,17482	0,093014	0,04523
4	0,628701	0,341776	0,156281	0,058332	0,017206	0,003873
5	0,543074	0,225752	0,066342	0,012547	0,001369	7,59E-05
6	0,462291	0,137245	0,021779	0,00146	3,07E-05	1,41E-07
7	0,387237	0,075533	0,005119	7,18E-05	1,03E-07	5,97E-12

Граничным значением для первой координационной сферы было выбрано расстояние численно равное радиусу второй координационной сферы в квадратной регулярной упаковке. Значение степени n подбиралось эмпирически (табл. 2), путем получения значения координационного числа для частиц второй координационной сферы достаточно близким к нулю ($n=6$). В дальнейшем, на основании данных о значениях координационных чисел частиц определялось среднее координационное число Z каждой генерации случайной упаковки.

Результаты компьютерных экспериментов

Применение улучшенной модификации программного комплекса PackLD [39] позволило нам провести ряд компьютерных экспериментов по определению структурных характеристик случайной упаковки. С этой целью было сгенерировано более 200 различных упаковок, находящихся в различных структурных состояниях. Генерации произ-

водились в области $50 \times 50 \sigma$ (σ – диаметр частицы), что позволило исследовать объем совокупности в пределах от 3000 и более частиц и получать стабильные значения структурных характеристик. По результатам компьютерных расчетов строились графики поведения интегральной плотности упаковки и среднего координационного числа в зависимости от значений вероятности выбора позиций устанавливаемых дисков. На выходе создавалась визуализация пространственной структуры случайной упаковки.

Статистическая оценка структурных характеристик приводит к среднему значению интегральной плотности упаковки $\eta_{DRP}=0,829 \pm 0,004$ (среднее координационное число $Z=5,2 \pm 0,3$) для связанной упаковки, к значению $\eta_{RLP}=0,817 \pm 0,004$ (среднее координационное число $Z=4,8 \pm 0,3$) – для свободной упаковки, и к значению $\eta_{SRP}=0,823 \pm 0,004$ (среднее координационное число $Z=5,1 \pm 0,3$) – для полусвязанной упаковки. Интересно отметить, что применение метода «близкие соседи» привело практически к тому же значению интегральной плотности RLP-упаковки, которое было получено нами ранее [11]. Причем это относится не только к усредненному значению плотности упаковки, но и к ее среднеквадратическому отклонению. В тоже время, полученные значения DRP-упаковки уже максимально приблизились к теоретически предсказанному пределу плотности упаковки, численно равному $\eta_{DRP}=0,8295$ [47]. К сожалению, теоретические данные для SRP-упаковки на данный момент отсутствуют, что не позволяет судить о достоверности полученных оценок для полусвязанного состояния. Величину среднего координационного числа для всех состояний RCP-упаковки можно считать удовлетворительной, так как литературные данные имеют достаточно близкие значения, что говорит о надежности полученных данных.

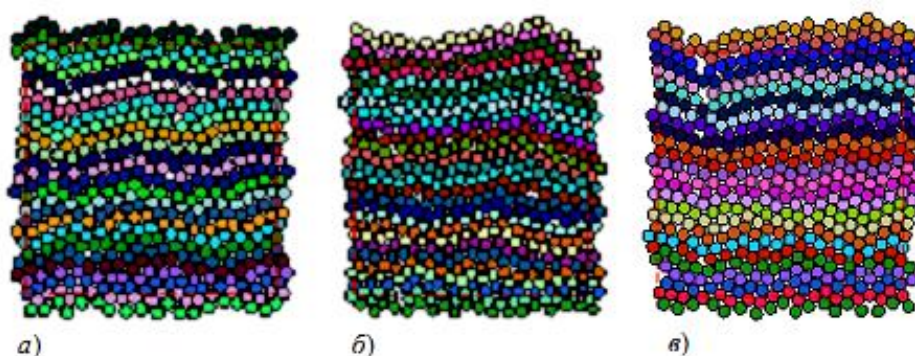


Рис. 2. Результаты имитационного моделирования случайной 2D-упаковки для области генерации $20 \times 20 \sigma$: а) связанное состояние ($\nu=1$); б) свободное состояние ($\nu=0,5$); в) полусвязанное состояние ($\nu=0$)

Анализ построенных, путем имитационного моделирования, случайных упаковок показывает на существенные отличия в топологии данных структур. Так, при рассмотрении плотноупакованной системы частиц, находящейся в связанном состоянии (DRP-упаковка), видно практически полное отсутствие пустот, сравнимых с размерами частиц, составляющих данную упаковку (рис. 2а). В случае перехода в свободное состояние (RLP-упаковка) уже наблюдается появление в упаковке пустот, размеры которых сопоставимы с размерами частиц (рис. 2б). Этот факт приводит к существенному снижению количественных значений структурных характеристик (рис. 3). При формировании полусвязанного состояния такие пустоты объединяются между собой, приводя к появлению в упаковке линейных дислокаций (рис. 2в). При топологии такого типа значения структурных характеристик повышаются, вследствие появления в упаковке доменов, обладающих ярко выраженной гексагональной структурой.



Возвращаясь к рассмотрению структурных механизмов, можно отметить, что при формировании плотноупакованной системы частиц, находящейся в связанном и полусвязанном состояниях, доминирует механизм построения базового слоя. Расположение частиц в базовом слое системы полностью определяет порядок установки последующих частиц системы, приводя к детерминации механизма приоритетности выбора позиций устанавливаемых частиц. Причем, выбор базового слоя в виде сегмента квадратной или гексагональной решетки, при отсутствии пристенного эффекта, может приводить к построению полностью регулярных структур.

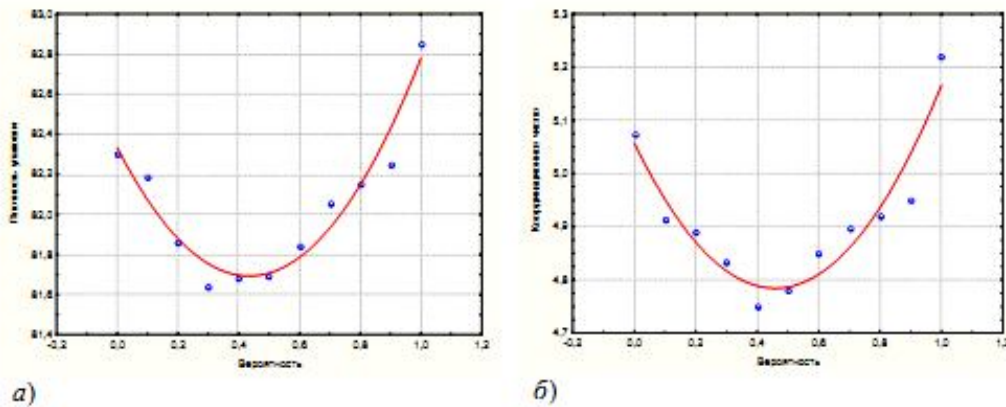


Рис. 3. Зависимости интегральной плотности η 2D-упаковки (а) и среднего координационного числа Z системы (б) от вероятности v выбора позиции установки частиц (область генерации $50 \times 50 \sigma$)

В случае перехода случайной упаковки в свободное состояние, доминирующим становится механизм приоритетности выбора позиций устанавливаемых частиц. Это приводит к появлению плотноупакованной системы частиц, в которой практически полностью отсутствует корреляция между топологией базового слоя и конечными значениями структурных характеристик. В случае же выбора произвольных значений вероятности установки частиц, механизмы построения базового слоя и приоритетности выбора позиций действуют совместно, приводя к получению промежуточных значений структурных характеристик.

Заключение

В представленной работе приведены результаты анализа структурных механизмов, отвечающих за процессы формирования плотноупакованной системы частиц. При этом рассмотрению подверглись три основных механизма: (1) построения базового слоя, (2) приоритетности выбора возможных позиций устанавливаемых частиц, (3) возникновения пристенного эффекта. Показано, что механизм формирования базового слоя, а также установочный механизм являются основными, в то время как пристенный эффект носит характер вспомогательного механизма.

Основываясь на рассмотренных физических механизмах предложен новый метод «близкие соседи» и на его основе разработан алгоритм, позволяющий управлять формированием структуры случайной упаковки. Построенная, на базе данного алгоритма, имитационная модель предоставляет возможность получать случайные упаковки не только в предельных, но также и в любых других промежуточных состояниях. Кроме того, выявлено новое состояние RCP-упаковки, получившее название полусвязанного состояния. Полученная с помощью имитационной модели визуализация случайной

упаковки также позволила напрямую учитывать особенности ее внутреннего строения. Проведенные компьютерные эксперименты, дали возможность выполнить анализ зависимости интегральной плотности упаковки и среднего координационного числа от вероятности выбора позиций устанавливаемых частиц.

В процессе дальнейших исследований необходимо продолжить исследования в направлении изучения воздействия на структурные характеристики случайных плотноупакованных систем пристенного эффекта, а также применения разработанного алгоритма для формирования трехмерных случайных упаковок.

Литература

1. Bernal J.D., Finney J.L. Random close-packed hard hard-sphere model. II. Geometry of random packing of hard spheres //Discussions of the Faraday Society. – 1967. – V.43. – P.62-69.
2. Bennett C.H. Serially deposited amorphous aggregates of hard spheres //J. Appl. Phys. – 1972. – №43. – P.2727-2734.
3. Truskett T.M., Torquato S., Debenedetti P.G. Quantifying disorder in equilibrium and glassy sphere packings //Phys. Rev. E. – 2000. – V.62, №2. – P.993-998.
4. Martys N.S., Torquato S., Bentz D.P. Universal scaling of fluid permeability for sphere packings //Phys. Rev. E. – 1994. – V.50, №1. – P.403-408.
5. Clarke A.S., Jonsson H. Structural changes accompanying densification of random hard-sphere packings //Phys. Rev. E. – 1993. – V.47, №6. – P.3975-3984.
6. Kausch H.H., Fesko D.G., Tschoegl H.W. The random packing of circles in a plane //J. Colloid Interface Sci. – 1971. – V.37, №3. – P.603-611.
7. Jodrey W.S., Tory E.M. Computer simulation of close random packing of equal spheres //Phys. Rev. A. – 1985. – V.32, №4. – P.2352-2358.
8. Kansal A.R., Truskett T.M., Torquato S. Nonequilibrium hard-disk packings with controlled orientational order //J. Chem. Phys., 2000. – V.113, №12. – P.4844-4851.
9. Berryman J.G. Random close packing of hard spheres and disks //Phys. Rev. A. – 1983. – V.27, №2. – P.1053-1061.
10. Visscher W.M., Bolsterly M. Random packing of equal and unequal spheres in two and three dimensions //Nature. – 1972. – V.239, №11. – P.504-507.
11. Бондарев В.Г., Чеканов Н.А., Мигаль Л.В. Алгоритмы управления структурой стохастической упаковки системы жестких дисков //В кн.: Математическое моделирование в образовании, науке и промышленности. – СПб, 2005. – С.62-66.
12. Jodrey W.S., Tory E.M. Rate-dependent RCP densification algorithm //Phys. Rev. A. – 1985. – V.32, №4. – P.2347-2358.
13. Стоян Ю.Г., Гиль Н.И. Методы и алгоритмы размещения плоских геометрических объектов. Киев: Наукова думка, 1976. – 144 с.
14. Stillinger F.H., Dimerzio Jr.E.A., Kornegay R.L. Systematic approach to explanation of the rigid disc phase transition //J. Chem. Phys. – 1964. – Vol.40. – P.1564-1576.
15. Bideau D., Troadee J.P. Compactness and mean coordination number of dense packings of hard discs //J. Phys C: Solid State Phys. – 1984. – V.17. – P.731-735.
16. Quickenden T.J., Tan G.K. Random packing in two dimensions and the structure of monolayers //J. Colloid Interface Sci. – 1974. – V.48. – P.382.
17. Schreiner W., Kratky K.W. //J. Chem. Soc. Faraday Trans. II. – 1982. – V.78. – P.379.
18. Mason G. Computer simulation of hard disc packings of varying packing density //J. Coll. Interface Sci. – 1976. – V.56, Issue 3. – P.483-491.
19. Ross J.W., Miller W.A., Weatherly G.L. //Acta Metall. – 1982. – V.30. – P.203.
20. Stoyan, D.: Random systems of hard particles: Models and statistics //Chinese Journal of Stereology and Image Analysis. – 2002. – V.7, №1. – P.1-13.
21. Feng Y.T., Owen D.R.J. Filling domains with disks: an advancing front approach //Int. J. Numer. Meth. Engng. – 2003. – No 56. – P.699-713.
22. Bagi K. An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies //Granular Matter. – 2005. – №7. – P.31-43.
23. Rubinstein M., Nelson D.R. //Phys. Rev. B. – 1982. – V.26. – P.6254.
24. Kuno H. //J. Jpn. Soc. Powder Powder Metall. – 1972. – №19. – P.85.
25. Stoyan D. Models of random systems of non-intersecting spheres //In: Prague Stochastics'98, JCMF. – 1998. – P.543-547.
26. Stoyan D., Stoyan H. Improving ratio estimators of second order point process characteristics //Scand. J. Statist. – 2001. – №27. – P.641-656.



27. Häggström O., Meester R. Nearest neighbour and hard sphere models in continuum percolation // *Random Struct. Algor.* – 1996. – №9. – P.295-315.
28. Evans J.W. Random and cooperative sequential adsorption // *Rev. Mod. Phys.* – 1993. – №65. – P.1281-1304.
29. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E. Equations of state calculations by fast computing machines // *J. Chem. Phys.* – 1953. – №21. – P.1087-1092.
30. Hastings W.K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications // *Biometrika.* – 1970. – №57. – P.97-109.
31. Torquato, S.: *Random heterogeneous materials: Microstructure and Macroscopic Properties.* – NewYork: Springer-Verlag, 2002. – P.275-294.
32. Jodrey W.S., Tory E.M. Simulation of close random packing of spheres // *J. Simulation.* – 1979. – №32. – P.1-12.
33. Moscinski J., Bargiel M., Rycerz Z.A., Jacobs P.W.M. The force biased algorithm for the irregular close packing of equal hard spheres // *Molecular Simulation.* – 1989. – №3. – P.201-212.
34. Lubachevsky D., Stillinger F.H. Geometric properties of random disk packings // *J. Stat. Phys.* – 1990. – №60. – P.561-583.
35. Bagi K.: Geometrical modeling of granular assemblies // *Acta Technica Acad. Sci. Hung.* – 1995. – V.107, №1-2. – P.1-16.
36. Feng, Y.T., Han, K., Owen, D.R.J. Filling domains with disks // In: Bicanic N. (ed): *Proc. ICADD-4, 6-8 June 2001, Glasgow, University of Glasgow, 2001.* – P.239-250.
37. Feng Y.T., Owen D.R.J. Filling domains with disks: an advancing front approach // *Int. J. Numer. Meth. Engng.* – 2003. – №56. – P.699-713.
38. Cui L., O'Sullivan C. Analysis of a triangulation based approach for specimen generation for discrete element simulations // *Granular Matter.* – 2003. – V.5, №3. – P.135-145.
39. Бондарев В.Г., Мигаль Л.В. Стохастическая упаковка систем сферических моночастиц в пространствах низкой размерности // *Компьютерные учебные программы и инновации.* – 2005. – №12. – С. 23-24.
40. Sutherland D.N. Random packing of circles in a plane // *J. Coll. Interface Sci.* – 1977. – V.60(1). – P.96-102.
41. Kanatani K-I. An entropy model for shear deformation of granular materials // *Lett. Appl. Engng. Sci.* – 1980. – №18. – P.989-998.
42. Sugiyama M. A New approach to hard sphere system in equilibrium. III – Two dimensional hard disk system // *Prog. Theor. Phys.* – 1980. – V.63, №6. – P.1848-1853.
43. Shahinpoor M. A model for crystallization of monomolecular layers on contracting surfaces // *J. Coll. Interface Sci.* – 1982. – V.85(1). – P.227-234.
44. Meakin P., Jullien R. Simple three-dimensional models for ballistic deposition and restructuring // *J. Phys. France.* – 1987. – V.48. – P.1651-1655.
45. Acharija M. Structural properties of planar random heap of hard discs // *J. Phys. I France.* – 1993. – №3. – P.905-908.
46. O'Hern C.S., Silbert L.E., Liu A.J., Nagel S. Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder // *Phys. Rev. E.* – 2003. – V.68. – P.011306-13.
47. Мигаль Л.В. Математическое и имитационное моделирование стохастической упаковки систем сферических моночастиц в пространствах низкой размерности // *Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук.* – Белгород, 2005. – 21 с.

IMITATING MODELLING OF STRUCTURE DENSEPACKING SYSTEMS OF HARD DISKS

V.G. Bondarev, L.V. Migal, T.P. Bondareva

Belgorod State University, Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia
Bondarev@bsu.edu.ru

The imitating model intended for studying of structure of densepacking systems of hard disks is proposed. Being based on the physical mechanisms responsible for formation of densepacking systems of particles: the base layer, a casual choice and near-wall effect, is developed a new method «intimate neighbours» and the algorithm, allowing to operate formation of structure of random packing. Computer experiments, for the purpose of the analysis of dependence of structural characteristics, such as integrated density of packing and average coordination number from probability of a choice of positions of established particles are made. The new state of the RCP-packing which have received the name of the semiconnected state is revealed.

Key words: random packing, system of particles, packing density, coordination number.