

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СЛУЧАЙНОЙ УПАКОВКИ СИСТЕМ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ¹

Т.П. Бондарева

*Белгородский государственный на-
циональный
исследовательский университет*

*e-mail:
tbondareva@bsu.edu.ru*

В статье рассматривается обобщённый алгоритм моделирования структуры случайной плотноупакованной системы сферических частиц. Приведены результаты компьютерного моделирования процессов формирования случайной упаковки твёрдых сфер, представленной в виде совокупности случайно упакованных слоев. Дана оценка структурных характеристик упаковки как в связанном, так и в свободном состояниях.

Ключевые слова: алгоритм, случайная упаковка, компьютерное моделирование, сферические частицы.

Введение

Современное состояние исследований в структурной теории плотноупакованных систем показывает на возросший интерес к проблеме изучения случайных упаковок твердых частиц (random close packing, RCP), которые представляют собой полезные модели физических систем, таких как простые жидкости, стекла и аморфные материалы [4]. Кроме того, данные объекты имеют фундаментальное значение и для исследований в области гранулированных и пористых материалов [2]. Подходы, основанные на результатах изучения случайных упаковок, также вносят определенный вклад и в понимание закономерностей возникновения беспорядка в твердых телах [10]. Это связано с тем, что структура плотноупакованных систем частиц является именно тем фактором, который определяет многие физические и химические свойства вещества.

Теоретические и экспериментальные исследования процессов, происходящих при упаковке частиц, пока не дают четкой картины образования систем такого типа. В этом случае компьютерное моделирование реального экспериментального процесса может стать полезным компромиссом, в рамках которого проводится построение случайной упаковки частиц. Преимущество такого подхода заключается в возможности анализа качественных и количественных свойств исследуемых плотноупакованных систем частиц, а также в рассмотрении вопросов взаимодействия частиц между собой и с граничными объектами.

При компьютерном моделировании обычно рассматривается общая постановка задачи в виде заполнения ограниченного пространства ансамблем частиц при условии отсутствия их пересечения между собой, а также без наличия пустот, в которые могут быть размещены дополнительные частицы. Здесь уже априори учитываются вероятностные аспекты формирования RCP-упаковок. Влияние в этом случае второстепенных факторов может быть либо полностью устранено, либо их можно учесть в процессе построения упаковки.

В представленной статье предложен обобщенный алгоритм, реализующий новый подход, при котором учитываются механизмы формирования упаковки, влияющие на структурные характеристики случайной упаковки. Для достижения этой цели предлагается использовать метод послойной упаковки с дополнительным выбором возможных локальных кластеров частиц, положение которых соответствует требуемым условиям, необходимым для формирования плотноупакованной системы частиц. Представленная работа является составной частью большого проекта, одной из прикладных целей которого является создание виртуальной лаборатории, предназначенной для изучения структуры дисперсных материалов.

Компьютерные методы генерирования случайных упаковок

Все методы формирования случайных упаковок можно разделить на два класса: динамические методы сжатия случайной свободной конфигурации системы частиц, а

¹ Работа выполнена на основе реализации краткосрочного проекта по направлениям развития науки, технологий и техники «Инициатива» в НИУ «БелГУ» (грант ВКГИ 039-2012).

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. Обзор основных динамических методов можно найти в [6]. 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 частиц 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. Отметим, что 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 проводить 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. 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. Обзор таких методов можно найти в [6]. Самыми известными из них являются модель «водоем лилий» и модель Метрополиса-Гастинга.

В модели «водоем лилий» [7] процесс подготовки упаковки начинается со случайного размещения центров частиц в 3D-мерной области установки. Частицы первоначально определены с нулевым радиусом. Радиусы частиц постепенно увеличивают и рост определенной частицы останавливается, когда она входит в контакт с другой частицей. Здесь каждая частица имеет, по крайней мере, хотя бы один контакт с соседней частицей.

Алгоритм Метрополиса-Гастинга [8] является более эффективным, чем модель «водоем лилий». Сущность метода в следующем. 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 данным частицам. Расположения принимаются с вероятностями, названными отношениями Гастингса, которые отличны для операций вставки, удаления и перемещения частиц. В случае малых значений вероятностей расположение частиц системы остается неизменным. Недостатком всех вышеупомянутых методов является то, что они приводят к упаковкам с довольно низкими плотностями упаковки и координационными числами.

Методы роста, например метод «струя частиц» (stream of particles, SP) представлен алгоритмом, основная идея которого состоит в поочередном размещении частиц [1]. Исходный набор частиц упорядочивается каким-либо образом, например, по увеличению x -координаты на каждом из уровней установки. На самом нижнем из свободных уровней размещается очередная частица вплотную к левой границе рабочей области. Эффективность данных алгоритмов в значительной степени зависит от метода, применяемого для упорядочивания частиц.

К более сложным алгоритмам относится способ последовательно-одиночного размещения (sequentially-individual allocation, SIA), предложенный Ю.Г. Стояном [5]. Этот метод состоит в том, что все элементы размещаются последовательно по одному, причем ранее размещенные считаются неподвижными, то есть их параметры размещения имеют определенные фиксированные значения. Каждый элемент размещается так, что значение

целевой функции достигает минимума только по тем переменным, которые являются параметрами этого элемента. Однако многие из этих методов не позволяют проводить управление структурными характеристиками случайной упаковки частиц, в качестве которых могут рассматриваться такие параметры, как плотность упаковки и координационное число. Также недостатком методов роста можно считать наличие незаполненных пустот вблизи границ установочной области.

Развитием данных методов можно считать метод послойной упаковки [7]. Предложенный вариант метода несколько отличается от ранее рассмотренных, так как базируется на методе формирования случайной упаковки частиц, расположенных в виде отдельных слоёв. На первом этапе случайным образом подготавливается базовый слой частиц. На втором этапе, после установки частиц нижнего слоя, определяются вакантные места для центров частиц следующего, верхнего слоя. Затем производится поиск всех возможных последовательностей непересекающихся частиц будущего слоя. В случае нахождения удовлетворяющего выбранным условиям слоя частиц, производится их включение в состав упаковки. Преимуществом данного метода можно считать получение достаточно плотного расположения частиц в установочной области, а также довольно высоких значений координационных чисел частиц.

Обобщённый алгоритм формирования случайной упаковки сфер

В самой общей постановке задача плотной упаковки систем трёхмерных сфер может быть сформулирована как задача определения числа и координат частиц нового слоя упаковки, путем выбора такого расположения сфер, при котором минимизируется общее расстояние между ними и уже ранее установленными сферами нижнего слоя. Тогда, пусть дано некоторое множество $G = \{g_1, \dots, g_n\}$, состоящее из N сферических частиц диаметра σ , находящихся под действием слабой гравитационной силы в трёхмерной прямоугольной области, определенной в виде: $M = \{x, y, z \mid 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq S, 0 \leq z \leq H\}$, где L, S, H – ширина, глубина и высота области установки частиц системы.

В основу построения компьютерной модели положим метод послойной упаковки частиц [7] и в качестве базовой выберем плотноупакованную систему сфер, структуру S которой можно описать следующим образом

$$S = \{(x_j, y_j, z_j) : x_j \in R^3, y_j \in R^3, z_j \in R^3, j = \overline{1, N}\}, \quad (1)$$

где x_j, y_j и z_j – координаты центра j -й сферы, N – число сфер в структуре. Для исключения краевых эффектов и эффектов, связанных с конечным размером моделируемой системы, рассмотрению была подвергнута случайная упаковка частиц, расположенных в прямоугольной области с «проницаемыми» стенками. Каждая из сфер обладает набором собственных параметров, таких как координаты центра, её диаметр, а также координационное число и межчастичные расстояния до ближайших соседей. Требуется расположить частицы таким образом, чтобы в результате процесса формирования случайной упаковки число попавших в установочную область частиц было максимально возможным, при следующих условиях:

- частицы системы представляют собой абсолютно жесткие сферы, взаимодействующие друг с другом посредством контактных сил;
- область размещения системы частиц имеет «прозрачные» границы, не влияющие на расположение частиц в упаковке;
- каждая частица контактирует как минимум с четырьмя соседними частицами из данной конфигурации;
- установленные частицы не имеют общих внутренних точек ни с одной из частиц данной конфигурации;
- сумма всех расстояний между частицами конфигурации является близкой к наименьшей из возможных.

Упаковка сфер формируется на основе компьютерного моделирования случайного расположения сферических частиц в соответствии с принципом минимума потенциальной энергии. Алгоритмы компьютерного моделирования реализуют поэтапную схему случайных процессов формирования локальных слоев упаковки. При этом возможно выделение пяти основных этапов построения и расчёта структурных характеристик случайной упаковки:

1. Построение базового слоя сфер в полосе (начальный этап).
2. Формирование нового слоя сфер (основной этап).

3. Уплотнение слоя за счет заполнения пустот в верхнем слое.
4. Построение конечного слоя сфер.
5. Оценка структурных характеристик полученной случайной упаковки (заключительный этап).

Для реализации данных этапов разработаны соответствующие алгоритмы.

На первом этапе для построения базового слоя сфер в полосе, ограниченной плоскими проницаемыми стенками, предложен алгоритм, физическая идея которого заключается в следующем. В нижней части области установки частиц размещается слой сфер в виде гексагональной плотной двумерной упаковки. Все сферы имеют одинаковые значения z -координат своих позиций. Затем проводятся смещения сфер по z -координате. Выполнение данного смещения проводится путем генерации случайных чисел. Диапазон разброса значений z -координат определяется случайным образом, с учетом расстояний r_{ij} между центрами i -той сферой и j -той соседними сферами, которые ограничиваются в пределах: $\sigma \leq r_{ij} \leq 2\sigma\sqrt{3}$ (σ – диаметр сферы). Дополнительно для каждой сферы формируется список её соседей, который впоследствии позволит нам проводить анализ размещения частиц, а также определять локальные характеристики случайной упаковки. Следовательно, на основе данных, полученных методом Монте-Карло, для значений z -координат и межцентровых расстояний r_{ij} можно однозначно определить позиции частиц базового слоя упаковки (рис.1).

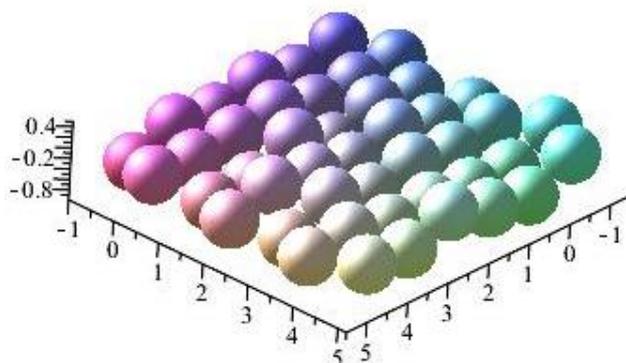


Рис. 1. Базовый слой случайной плотной упаковки

Второй этап соответствует основной фазе построения плотноупакованной системы сферических частиц путём многократного повторения процесса формирования локальных слоёв упаковки. Здесь, в качестве отдельных функций, реализованы процедуры поиска и анализа пересекающихся сфер. На этом этапе моделирования необходимо произвести выбор позиций сфер верхнего слоя, отвечающих условию, определенному в виде минимума межчастичных расстояний в рассматриваемом слое [8].

Процесс установки сфер верхнего слоя осуществляется путем выбора положения возможных центров устанавливаемых сфер, которые описываются координатами из множества $\{x_i, y_i, z_i\}$ вакантных позиций сфер. Полученное множество вакантных позиций сфер разбивается на отдельные подмножества позиций для непересекающихся сфер. Для этого последовательно выбираются сферы и путем анализа расстояний между ними и её соседями определяются подмножества непересекающихся сфер. Результатом данной работы является установление соответствия между координатами $\{x_i, y_i, z_i\}$ из множества вакантных позиций сфер и некоторым числовым значением, характеризующим номер конкретной сферы в соответствующем подмножестве. Для построения плотной случайной упаковки данную подзадачу можно сформулировать следующим образом. Задано конечное множество $U = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ n вакантных мест в верхнем слое; требуется выполнить разбиение множества U на непересекающиеся подмножества U_1, U_2, \dots, U_k и найти среди них такое подмножество U_i , центры сфер которого лежат настолько близко друг к другу. Другими словами, нужно разбить исходное множество вакантных позиций на ряд подмножеств, которые, при совмещении данных позиций с центрами сфер, дают нам набор возможных локальных слоёв, состоящих из совокупностей непересекающихся сфер. Затем, по значению целевой функции Ψ , необходимо произвести выбор подмножества, имеющего минимальную сумму расстояний между центрами сфер соседних локальных слоёв

$$\min \Psi = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^{m-1} D(i, i+1) + \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} D(j, j+1) + \frac{1}{m^n} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n D(i, j), \quad (2)$$

где m и n – число сфер, соответственно, в нижнем и верхнем слоях упаковки; $D(i, j)$ – расстояние между i -той установленной сферой из нижнего слоя и j -той сферой верхнего слоя. Предложенная целевая функция позволяет из набора подмножеств непересекающихся сфер возможных локальных слоёв выбрать необходимое подмножество устанавливаемых частиц верхнего слоя.

Для построения свободной упаковки, то есть случайной упаковки, в которой имеется аспект случайности не только при формировании базового слоя, но и при установке частиц верхнего слоя, требуется произвести случайный выбор любого подмножества вакантных позиций сфер.

Важным условием для получения плотноупакованной структуры является требование полностью закрытых поверхностей нижнего локального слоя сферами верхнего слоя случайной упаковки. Это условие должно исключить возможность перекрытия сфер несоприкасающихся локальных слоёв. Поэтому, если в слое остаются потенциально «незакрытые» пустоты, то в его состав необходимо включить дополнительные сферы. Для выполнения данного условия, на третьем этапе формирования плотной случайной упаковки, после завершения размещения сфер верхнего слоя, дополнительно проверяются размеры пустот между триадами частиц.

При этом используются списки соседей, сопоставление пар которых вместе с выбранной частицей позволяют выявить наличие пустот, размеры которых позволяют устанавливать дополнительные сферы. После того, как все пустоты верхнего слоя заполнены, анализируется положение сфер вблизи границ установочной области. В случае наличия возле границ пустот, в список сфер верхнего слоя также включаются сферы, размещаемые в данных пустотах. Когда список содержит все возможные сферы, процесс установки сфер верхнего слоя завершается.

На четвертом этапе, при заполнении конечного слоя формируемой случайной упаковки, необходимо дополнительно контролировать выход сферических частиц за пределы установочной области. Решение данной подзадачи проводилось путем исключения из списка установленных сфер конечного слоя тех частиц, расположение центров которых оказались вне пределов установочной области. В данном случае также возможно появление пустот вблизи верхней границы. Обнаружение таких пустот позволяет включить в состав списка сфер конечного слоя дополнительных частиц, установка которых завершает формирование случайной упаковки (рис.2).

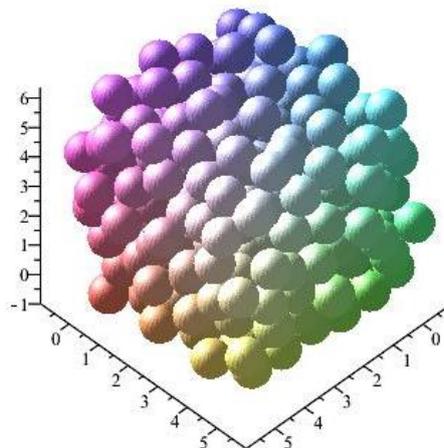


Рис. 2. Случайная плотноупакованная система частиц

Результаты и обсуждение

Компьютерное моделирование проводилось методом послойной упаковки [7] на области установки частиц системы размерами 15×15 диаметров сфер, позволяя расположить в них более 3000 сфер в каждой конфигурации, при отсутствии граничных условий. С этой целью было сгенерировано более 100 различных упаковок, находящихся в различ-

ных структурных состояниях. По результатам компьютерных расчетов получены данные по количеству частиц, координатам центров частиц и межчастичным расстояниям. После завершения компьютерного моделирования проводилась оценка структурных характеристик полученной случайной упаковки, в качестве которых принято рассматривать среднестатистические значения интегральной плотности упаковки и среднего координационного числа. На выходе создавалась визуализация пространственной структуры случайной упаковки сфер.

Плотность упаковки. Плотность упаковки является одной из наиболее важных характеристик случайной структуры и определяется как отношение объема твердой фазы к объему 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. Интегральную плотность упаковки можно рассчитать по формуле

$$\eta = \frac{(n_1 + n_2/2)v_p}{LSH}, \quad (3)$$

где n_1 и n_2 – число частиц, соответственно, находящихся внутри установочной области и на ее границах; v_p – объем сферы.

Для контроля правильности проведенных расчетов значений плотности упаковки дополнительно проводилось построение гексагональной и кубической регулярных упаковок (рис. 3). Проводя смещение данных упаковок как целых объектов, относительно границ установочной области, тестировали возможные отклонения в значениях плотности упаковки.

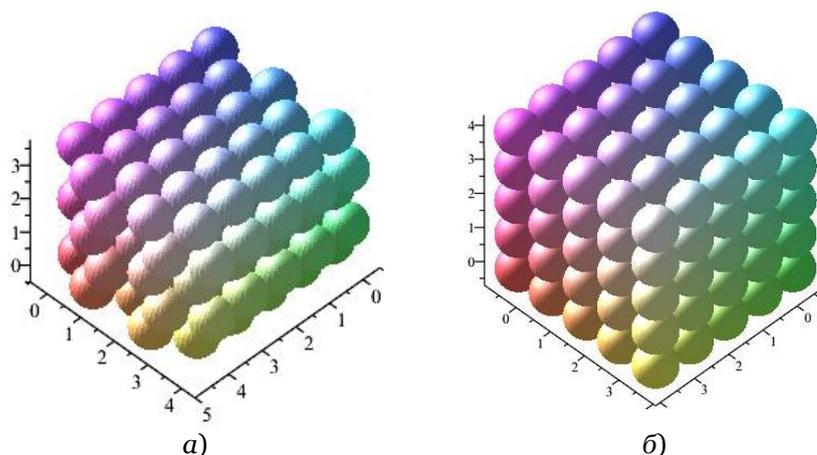


Рис. 3. Регулярная плотноупакованная система частиц: а) гексагональная упаковка; б) кубическая упаковка

Статистическая оценка плотности случайной упаковки приводит к среднему значению $\eta_{\text{связ}}=0,623\pm 0,005$ для связанной упаковки и к значению $\eta_{\text{своб}}=0,581\pm 0,005$ – для свободной упаковки. Полученные данные указывают на несколько более низкую плотность упаковки, что можно объяснить процессами кластеризации частиц, приводящими к возникновению дефектов в упаковке.

Координационное число. Координационное число частицы рассчитывалось по формуле, основанной на выборе экспоненциального закона распределения, близкого к пуассоновскому [9]

$$z = \sum_{i=1}^w \exp \{1 - (r_i / \sigma)^k\}, \quad (4)$$

где r_i – расстояние между выбранной сферой и i -той частицей; w – число частиц, входящих в область первой координационной сферы. Граничным значением для первого координационного слоя выбиралось расстояние численно равное радиусу второй координационной сферы в кубической регулярной упаковке. Коэффициент k подбирался эмпи-

рически, путем получения значения координационного числа для частиц второй координационной сферы близким к нулю ($k=6$). Среднее координационное число определялось как среднестатистическое значение координационных чисел всех частиц, входящих в состав упаковки, за исключением частиц расположенных на границах установочной области. Статистическая оценка среднего координационного числа приводит к значению $Z_{\text{связ}}=8,3\pm 0,3$ для связанной упаковки и к значению $Z_{\text{своб}}=7,6\pm 0,3$ – для свободной упаковки. Сопоставление полученных с помощью компьютерного моделирования данных с экспериментальными результатами, выполненными различными исследователями [3, 4, 10], показывает на правильность выбранного подхода при проведении моделирования случайной упаковки систем сфер в 3D-пространстве.

Заключение

В представленной работе приведены результаты разработки обобщённого алгоритма и компьютерного моделирования плотноупакованных систем частиц, которые позволили проанализировать процессы формирования случайной упаковки твёрдых сфер в трёхмерном пространстве, а также провести ряд компьютерных экспериментов по определению структурных характеристик случайной упаковки. Установлено, что несколько более низкая плотность упаковки объясняется процессами кластеризации частиц, причём полученные в результате моделирования значения среднего координационного числа достаточно хорошо совпадают с экспериментальными данными.

Таким образом, основное достоинство предлагаемого обобщённого алгоритма заключается в том, что он, используя информацию только о частицах предыдущего слоя и соседних частицах, значительно уменьшает число обрабатываемых частиц и, следовательно, позволяет существенно увеличить скорость нахождения устойчивых положений частиц. В дальнейшем возможно распространение рассмотренного алгоритма на упаковки сфер, организованных в четырёхмерном пространстве.

Автор выражает особую благодарность А.Н. Хархардину, В.Г. Бондареву и Л.В. Мигаль за полезные обсуждения, ценные предложения и замечания, а также за помощь в разработке ряда программных модулей, включающих средства визуализации и обработки результатов расчетов.

Литература

1. Bagi, K. An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies // Granular Matter. – 2005. – No.7. – P.31-43.
2. Kansal, A.R. Nonequilibrium hard-disk packings with controlled orientational order / A.R. Kansal, T.M. Truskett, S. Torquato // J. Chem. Phys. – 2000. -- Vol. 113, No.12. – P. 4844-4851.
3. Klumov, B.A. Structural properties of dense hard sphere packings // B.A. Klumov, S.A. Khrapak, G.E. Morfill / Phys. Rev. B, 2011. – Vol. 83, No.18. – P.184105-08
4. Parisi, G. Mean-field theory of hard sphere glasses and jamming / G. Parisi, F. Zamponi // Rev. Mod. Phys, 2011. – Vol. 82, No.1, P. 789-845.
5. Stoyan, D.: Random systems of hard particles: Models and statistics // Chinese journal of stereology and image analysis. – 2002. – Vol.7, No.1. – P.1-13.
6. Torquato, S. Jammed hard-particle packings / S. Torquato, F.H. Stillinger // Rev. Mod. Phys., 2010. – Vol. 82, No.3, P. 2633-2672.
7. Бондарев, В.Г. Структурные механизмы формирования стохастической упаковки / В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль, Т.П. Бондарева // Вестник Херсонского технического университета. – 2008. – Вып. 2(33). – С. 248-260.
8. Бондарев, В.Г. Имитационное моделирование структуры систем дисков [Текст] / В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль, Т.П. Бондарева // Научные ведомости БелГУ. Сер. Физика. Математика. – 2008. – № 9 (49). – Вып. 14. – С. 248-260.
9. Бондарев, В.Г. Компьютерное моделирование структуры плотноупакованных систем твердых дисков / В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль, Т.П. Бондарева // Материалы VIII Международного семинара «Физико-математическое моделирование систем» 2011. г. Воронеж. – С. 248-260.
10. Хархардин, А.Н. Уравнения для координационного числа в неупорядоченных системах / А.Н. Хархардин, А.И. Топчиев // Успехи современного естествознания. – 2003, № 9. – С.47-53

COMPUTER MODELLING OF STRUCTURE RANDOM PACKING OF SYSTEM OF SPHERICAL PARTICLES

T.P. Bondareva

*Belgorod National Research
University*

*e-mail:
tbondareva@bsu.edu.ru*

In article the generalised algorithm of modelling of structure random densepacking systems of spherical particles is considered. Results of computer modelling of processes of formation of random packing of the firm spheres presented in the form of set of randomly packed layers are resulted. The estimation of structural characteristics of packing both in connected, and in free statuses is given.

Keywords: algorithm, random packing, computer modelling, spherical particles.