

УДК 539.215

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

ИМИТАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ СТОХАСТИЧЕСКОЙ УПАКОВКИ БИНАРНЫХ СИСТЕМ ДИСКОВ

Постановка проблемы. Современное состояние исследований в структурной теории плотноупакованных систем показывает возросший интерес к проблеме изучения физических процессов, протекающих при формировании стохастических упаковок многокомпонентных систем частиц, в частности, бинарных систем дисков. Это связано с тем, что структура плотноупакованных систем частиц является именно тем фактором, который определяет многие физические и химические свойства вещества. Как правило, для решения указанной проблемы применяется имитационное моделирование структуры, в рамках которого проводится построение стохастической упаковки частиц. Преимущество такого подхода заключается в возможности анализа качественных и количественных свойств поведения исследуемых плотноупакованных систем частиц, а также в рассмотрении вопросов взаимодействия частиц между собой и с граничными объектами.

Анализ достижений и публикаций по теме исследования. Систематические исследования упаковки твердых частиц путем компьютерного моделирования имеют большую историю, которая описана в первоисточниках по теории жидкости и стекла, механике сыпучих сред, порошковой металлургии. Одним из наиболее перспективных направлений изучения упаковки частиц является применение имитационного моделирования.

Для имитационного моделирования случайной упаковки частиц (random close particles, RCP) наиболее широко применяются алгоритмы, основанные на методе Монте-Карло [1-3]. В настоящее время известен целый ряд алгоритмов, генерирующих требуемое расположение частиц в рабочей области. Простейший - «струя частиц» (stream of particles, SP) представляет алгоритм, который состоит в поочередном размещении частиц [4]. Исходный набор частиц упорядочивается по каким-либо признакам, например, по возрастанию x -координат на каждом из уровней установки. Затем на самом нижнем из свободных уровней последовательно размещаются частицы, заполняя свободные позиции, начиная с левой границы области установки. 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. Каждая частица размещается таким образом, чтобы значение целевой функции достигало минимума только по тем переменным, которые являются параметрами устанавливаемой частицы.

Авторами данной статьи разработан метод послойной упаковки (level-by-level packing, LLP) [6]. В рамках этого подхода формирование плотноупакованных систем частиц производится в виде совокупности горизонтальных слоев, каждый из которых имеет собственный набор структурных параметров. Выбор значений целевой функции, отвечающих требуемому параметру порядка, позволяет выполнять управление структурой создаваемой стохастической упаковки системы частиц.

Имитационных моделей, предназначенных для формирования плотноупакованных бинарных систем частиц, со структурными характеристиками близкими к реальным объектам в мире не имеется. В настоящее время разработана имитационная модель для управления структурными параметрами только однокомпонентной системы дисков [7]. Однако она не позволяет получать достаточно плотные упаковки, что связано с выбором подхода к построению структуры упаковки, основанного на рассмотрении формирования структуры упаковки под воздействием центральной силы. Этот недостаток преодолен в имитационной модели, предназначенной для создания стохастических упаковок монодисков, находящихся под воздействием слабой однонаправленной силы [8]. Положенный в основу разработанного алгоритма метод LLP позволяет производить построение упаковок, имеющих структурные параметры близкие к реальным плотноупакованным системам частиц.

Цель статьи. Для построения плотноупакованных бинарных систем дисков метод LLP в варианте, примененном к однокомпонентным системам, приводит к созданию довольно громоздких алгоритмов, не позволяющих получать плотноупакованные системы частиц с требуемыми структурными свойствами. В тоже время, комбинирование данного метода с методом SIA, является интересным подходом, реализация которого, по нашему мнению, позволит существенно продвинуться в направлении изучения плотноупакованных систем частиц. Именно по этой причине, настоящая работа имеет своей целью создание имитационной модели построения стохастической упаковки бинарной системы дисков, в основу которой был положен данный подход.

Основная часть. Пусть у нас имеется два множества, одно из которых состоит из n частиц диаметра a , а другое – из m частиц диаметра b , находящихся под действием слабой однонаправленной силы. Требуется определить координаты частиц, расположенных в выбранной прямоугольной области $\{x, y \mid 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq H\}$, где L – ширина, а H – высота области установки, таким образом, чтобы в результате процесса формирования стохастической упаковки число попавших в данную область частиц было максимально возможным, при следующих условиях

- каждая частица касается как минимум двух соседних частиц из данной конфигурации;
- установленные частицы не пересекаются (не имеют общих внутренних точек) ни с одной другой частицей из данной конфигурации.
- все частицы лежат как можно ближе к нижней линии области их установки.

Сферичность частиц является общепринятым модельным приближением для начальных стадий рассмотрения формирования упаковки. Поэтому, в качестве геометрической модели упаковки, была выбрана бинарная система дисков, структуру S которой можно описать следующим образом

$$S = \{(x_i, y_i) \mid x_i \in R^2, y_i \in R^2, i = \overline{1, n} \} \& \{(x_j, y_j) \mid x_j \in R^2, y_j \in R^2, j = \overline{1, m} \}, \quad (1)$$

где x_i и y_i – координаты центра i -го диска, n – число дисков первого компонента системы, x_j и y_j – координаты центра j -го диска, m – число дисков второго компонента системы.

Для исключения влияния краевых эффектов и эффектов, связанных с конечным размером моделируемой бинарной системы, рассмотрению будет подвергнута стохастическая упаковка частиц, расположенных в прямоугольной области с проницаемыми стенками.

Предложенный нами вариант построения стохастической упаковки бинарной системы дисков несколько отличается от общепринятого метода слабого поля [9], так как базируется на способе формирования ансамбля частиц, межчастичные расстояния

между которыми должны быть минимальными. Такой метод позволяет не только получать плотноупакованные бинарные системы, но и дает возможность управления ее структурными параметрами.

Физическая идея алгоритма заключается в следующем. Упаковка дисков в установочной области формируется на основе имитационного моделирования стохастических последовательностей частиц по принципу "минимума потенциальной энергии". Алгоритмы моделирования реализуют поэтапную схему стохастических процессов формирования локальных слоев упаковки. При этом выделяются три основных этапа описания процессов:

- построение начальной цепочки дисков в полосе (первый этап)
- установка последующих дисков (основной этап)
- определение условий завершения построения упаковки (заключительный этап)

На первом этапе, на основе вероятностного подхода к расположению отдельных дисков в упаковке, проводится формирование начального слоя дисков в некоторой полосе. Для этого, на данной полосе длиной L , определяются координаты центров дисков, число которых выбирается в соответствии с содержанием отдельных компонентов бинарной системы. Для учета случайного выбора позиции устанавливаемой частицы, при установке частиц начальной цепочки, применены случайности двух различных типов. Вначале случайным образом определяются значения y -координат, с учетом известной средней высоты локального слоя дисков первого компонента системы. Затем аналогично выбираются расстояния r между центрами устанавливаемых дисков, которые ограничиваются в пределах $b \leq r \leq b\sqrt{3}$ (b – диаметр дисков второго компонента системы). Выполнение данных условий производится путем применения счетчика случайных чисел для оценки y -координат и межцентровых расстояний, с последующим расчетом x -координат центров частиц.

На следующем этапе выполняются процедуры по выбору возможных конфигураций дисков, контактирующих с уже ранее установленными дисками. Алгоритм моделирует установку добавляемых дисков на уже установленные диски, представленные в виде беспорядочно упакованного рабочего слоя. Диски вводятся по одному в областях рабочих дисков, имеющих наименьшие y -координаты. Позиция устанавливаемого диска вычисляется с учетом положения соседних дисков. В случае наложения устанавливаемого диска на соседний, еще не установленный диск, проводится сравнение их позиций и для установки выбирается тот диск, который в наибольшей степени отвечает условиям формирования стохастической упаковки. Выбор возможных конфигураций дисков проводится с помощью целевой функции, которая позволяет отбирать только те конфигурации дисков, которые наиболее полно отвечают требованиям, предъявляемым к структуре формируемой плотноупакованной системы частиц. Например, если имеется группа из двух перекрывающихся частиц, то методом Монте-Карло выбирается в качестве основной позиции вакантное место для одной из данных частиц. Координаты положения второй частицы пересчитываются, с учетом позиций соседних частиц. В случае наличия трех перекрывающихся частиц рассматриваются все возможные варианты расположения данных частиц относительно друг друга, а затем также по методу Монте-Карло случайным образом выбирается один из вариантов, который и реализуется при построении упаковки. В процессе формирования такой системы существенную роль играет элемент случайности, определяющий, в конечном счете, конфигурацию дисков в упаковке с учетом выбранного коэффициента степени порядка.

Использование единственным образом алгоритма, описанного выше, оказывается недостаточно для формирования двумерной структуры стохастической

упаковки бинарной системы дисков. Данная проблема может быть решена на основе анализа положения дисков рабочего слоя, которые полностью закрываются вновь устанавливаемыми дисками. Также, в процессе формирования упаковки, дополнительно анализируются позиции дисков, которые располагаются вдоль левой и правой границ установочной области. В случае выхода дисков за пределы установочной области, последние игнорируются и не включаются в состав системы.

Для определения условий завершения построения упаковки, на заключительном этапе работы имитационной модели, проводится контроль за положением устанавливаемых дисков относительно верхней границы установочной области. При этом, даже при выходе новых дисков за пределы установочной области, закрытые ими диски исключаются из множества дисков рабочего слоя для рассматриваемого компонента системы. Завершение построения имитационной модели происходит при полном отсутствии дисков, относящихся к рабочему слою формируемой стохастической упаковки бинарной системы дисков.

Выводы и перспективы дальнейших исследований. Таким образом, комбинирование метода последовательно-одиночного размещения с методом послойной упаковки показало значительное преимущество перед используемыми ранее методами центрального поля. Основное достоинство предлагаемого гибридного метода заключается в том, что он, используя информацию только о частицах предыдущей цепочки, значительно уменьшает число обрабатываемых частиц и, следовательно, позволяет существенно увеличить скорость нахождения устойчивых положений дополнительно устанавливаемых дисков.

В настоящее время имитационная модель стохастической упаковки бинарных систем дисков рассматривается нами как постепенно дополняемая многоцелевая система имитации упаковок с заданными свойствами, ориентированная на IBM-совместимые компьютеры. Полученные результаты дают возможность более полного понимания особенностей изучаемых процессов, с их помощью решаются вопросы совершенствования структуры упаковки. В дальнейшем возможно включение в состав имитационной модели стохастической упаковки бинарных систем дисков ряда дополнительных возможностей, таких как расчет структурных параметров, учет пристенного эффекта и формы частиц системы, отличной от рассмотренной в данной статье. Кроме того, данная модель является прообразом имитационных моделей, которые позволят в дальнейшем производить построение плотноупакованных многокомпонентных систем частиц как двумерном, так и в трехмерном пространстве.

Данная работа поддержана грантом РФФИ, проект № 07-01-12067 © 2007-2008.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц / Пер. с англ. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
2. Jodrey W.S., Tory E.M. Rate-dependent RCP densification algorithm // *Physics Review*. - 1985. – A 32. – P. 2347-2358.
3. Kausch H.H., Fesko D.G., Tschoegl N.W. The random packing of circles in a plane // *J. of Colloid and Interface Sci.* – 1971. – V. 37, № 3. – P. 603-611.
4. Алиевский Д.М., Каменин И.Г., Кадушников Р.М., Алиевский В.М. Геометрическое моделирование плотных упаковок сферополиэдров // *Реологические модели и процессы деформирования пористых и композиционных материалов.* – Екатеринбург, 1997. – С. 64-65.
5. Стоян Ю.Г., Гиль Н.И. Методы и алгоритмы размещения плоских геометрических объектов. Киев: Наукова думка, 1976. - 144 с.

- 6 Бондарев В Г , Мигаль Л В Моделирование случайной упаковки системы сферических частиц в пространстве R^2 // Компьютерные технологии в науке и производстве – Новочеркасск 2003 – С 7-8
- 7 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
- 8 Мигаль Л В , Чеканов Н А , Бондарев В Г Алгоритмы управления структурой стохастической упаковки системы жестких дисков // Математическое моделирование в образовании, науке и промышленности – СПб, 2005 – С 62-66
- 9 Бондарев В Г , Мигаль Л В Структурные характеристики стохастической упаковки системы двумерных моносфер // Информационные технологии в управлении и моделировании – Белгород, 2005 – С 19-22

БОНДАРЕВ Владимир Георгиевич – к т н , доцент кафедры информатики и вычислительной техники Белгородского государственного университета

Научные интересы

– информационные технологии в образовании, математическое и имитационное моделирование

МИГАЛЬ Лариса Владимировна – к ф -м н , ст преподаватель кафедры информатики и вычислительной техники Белгородского государственного университета

Научные интересы

– математические модели в физике конденсированного состояния, компьютерное моделирование

БОНДАРЕВА Татьяна Павловна – ассистент кафедры информатики и вычислительной техники Белгородского государственного университета

Научные интересы

– математические модели, компьютерное моделирование