МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ СТОХАСТИЧЕСКИХ УПАКОВОК НЕПЕРЕСЕКАЮЩИХСЯ ОДНОМЕРНЫХ СФЕР

В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль

Белгородский государственный университет
РФ, Белгород, ул. Победы, 85; bondarev@bsu.edu.ru

1. Введение. Одной из задач исследования по теории плотноупакованных систем частиц является задача по определению плотности упаковки случайной системы монодисперсных сферических частиц. Проблему стохастического расположения сфер в пространстве размерности R^1 можно определить следующим образом. Последовательно выберем случайным образом координаты на линии конечного размера. Центры сфер совместим с данными координатами, отбросив те, которые перекрываются. Затем продолжим наш эксперимент до тех пор, пока все промежутки между сферами не будут по своей величине меньше диаметра сферы. Однако следует констатировать, что данная задача до настоящего времени полностью не решена. Так, в 1958 году А. Реньи [1] получил решение задачи об определении плотности упаковки η на основе итерационного выражения, где численная оценка предельной плотности случайной упаковки одномерных сфер достигала значения 0,7476 [2]. Позже Р. Грит [3] использовал подход, основанный на определении плотности упаковки системы одномерных сфер методами статистической механики, в результате которого им было получен несколько иной результат равный 0,6667. Возможно, это покажется несколько неожиданным, но оба результата, полученные как Реньи, так и Гритом, являются правильными. Как мы считаем, основная причина отличия между ними заключается в различном подходе к определению области установки частиц. Здесь, под областью установки частиц L, мы будем понимать эвклидово пространство, предназначенное для стохастического расположения одномерных сфер. Отметим, что теория Реньи позволяет рассчитать плотность упаковки в случае, если размер область установки стремится к бесконечности, в то время как Грит вообще не учитывал данный параметр при оценке плотности упаковки одномерных сфер (далее частиц). Следовательно, можно полагать, что анализ зависимости плотности упаковки от размера области установки частиц предоставит нам возможность определить весь диапазон значений плотности упаковки, что позволит в дальнейшем управлять величиной плотности упаковки системы частиц. Именно поэтому, целью данной работы явилась попытка показать возможность управления плотностью случайной упаковки одномерной системы частиц путем ее математического и имитационного моделирования с учетом такого параметра, как размер области установки частиц.

2. Математическая модель. Вначале несколько изменим постановку задачи. Для этого зафиксируем размер области установки частиц L, и будем считать, что каждая j-тая частица занимает в данной области определенное место, характеризующееся координатой X_j центра данной частицы. Кроме того, на начальной стадии исследования, рассмотрим систему частиц, обладающих относительно слабыми корреляционными эффектами, то есть практически являющиеся независимыми друг от друга. Размер всей области L_0 определим как аддитивную сумму всех областей установки частиц (рис. 1), за исключением расположенных в конце каждой из областей установки частиц пустых промежутков Δ_{k+1} (k_i – общее число частиц, находящихся в i-той установочной области).

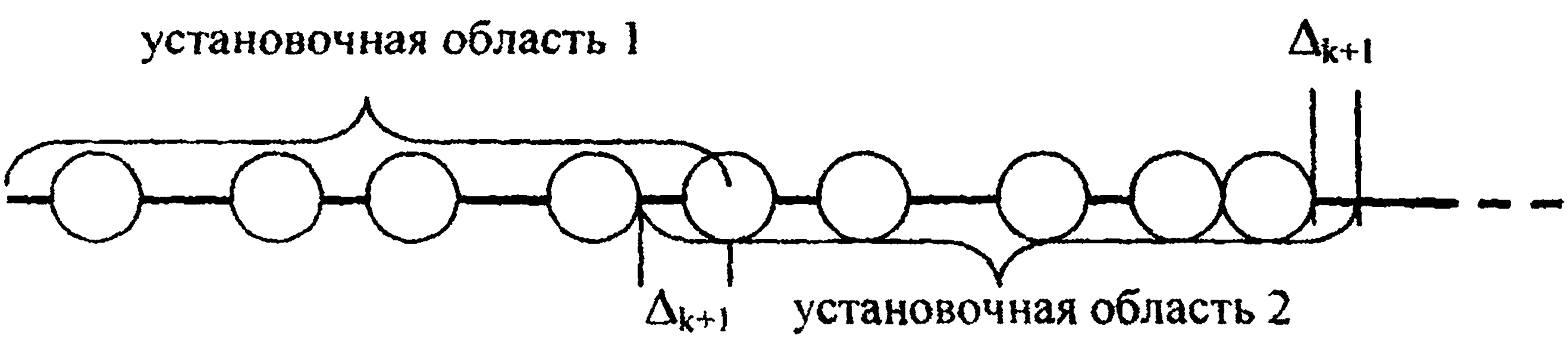

Рис. 1. Схема расположения частиц в установочных областях.

При попытке описать одномерную стохастическую систему идентичных частиц сразу возникает вопрос о методе определение координат центров частиц. В нашем случае, когда имеется система независимых частиц, определение координат центров частиц в установочной области можно произвести, используя следующее выражение

$$X_j = X_{j-1} + \frac{L - X_{j-1} - a}{2(k-j+1)} + a, \qquad j = 1,2,...,k, \tag{1}$$

где L – длина установочной области; j – номер устанавливаемой частицы; X_j – координата центра j-той частицы ($X_0=0$); a – диаметр частицы.

При таком методе определения координат центров первая из частиц занимает L/k предоставленного для ее установки интервала, располагаясь в центре данной области, вследствие априорно нами выбранного для нее равномерного закона распределения. Все остальные частицы устанавливаются аналогичным порядком, с учетом оставшейся части установочной области и количества недоустановленных частиц.

Пусть в установочной области можно разместить систему, состоящую из k частиц таким образом, что число установленных частиц $\xi(L)$ в данной области есть однородный марковский процесс с состояниями $m=1,2,\ldots$ Также будем считать, что из состояния m можно непосредственно перейти только в состояние $m+1$. Кроме того, в связи с независимостью частиц, будем считать, что плотности перехода из каждого состояния одинаковы и равны λ. Вероятности P_m состояний системы можем найти, с учетом однонаправленности, происходящих случайных процессов, воспользовавшись уравнениями Колмогорова [4]

$$\frac{dP_m(L)}{dL} = \lambda P_m(L). \qquad (2)$$

Интегрирование данного дифференциального уравнения первого порядка позволяет получить следующее выражение

$$P_m(L) = A\frac{L-L_m^{\min}}{L-a}\exp(-\lambda\frac{L-L_m^{\max}}{L-a}), \qquad (3)$$

где $L_m^{\min}$ и $L_m^{\max}$ – начальные и конечные размеры установочной области для системы частиц, находящейся в состоянии m. Здесь безразмерная постоянная A выбирается равной двум, с целью нормировки предельного значения вероятности до значения равного единице. Плотность перехода λ по определению равна количеству частиц, приходящихся на единицу объема, занимаемого системой: $\lambda=\eta/a$.

Вид уравнения для плотности упаковки η_i системы частиц, расположенных в i-той установочной области можно определить по формуле

$$\eta_t = (\sum_m k_m \frac{P_m(L)}{\eta_m})^{-1}, \quad (4)$$

где k_m – число частиц в состоянии m; $P_m(L)$ – вероятность нахождения системы в состоянии m; η_m – плотность упаковки системы в состоянии m (определяется стандартным образом по формуле: $\eta_m = ka/(L-\Delta_{k+1})$).

3. Имитационная модель. Для проверки математической модели нами были проведены эксперименты по имитационному моделированию случайной упаковки одномерных сфер. Наиболее удобным для создания имитационной модели является метод частиц [4], или по-иному, метод Монте-Карло, поскольку используется датчик случайных чисел для процедуры установки частиц. В качестве инструментального средства проведения имитационного моделирования был выбран пакет символьных вычислений Maple. Величина установочной области регулировалась в пределах от 1 до 13 диаметров частицы.

Создание имитационной модели основано на следующем алгоритме. Вначале выбирается размер установочной области L. Процедура заполнения установочной области начинается с выбора места для расположения центра первой устанавливаемой частицы. Выбор реализации случайных чисел, равномерно распределенных на отрезке [0,1] производился путем применения функции генерации случайных чисел, с последующим умножением полученного случайного числа на величину установочной области. На следующей стадии занятая установленной частицей часть отрезка, вместе с исключенным объемом удаляется, и на его концах остаются два отрезка меньшей длины, которые мы затем объединяем. На последующих стадиях выполнение процедуры установки отдельной частицы повторяется, с одновременным пересчетом координат центров частиц, до тех пор, пока каждый из двух оставшихся отрезков не будет иметь длину менее диаметра частицы. Граничные условия формулируются как условие выхода частицы за пределы рассматриваемой установочной области: $a/2 \geq X_k \leq L-a/2$. 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 0,001%) измерения среднего значения плотности упаковки.

4. Обсуждение результатов. На рис. 2 приведены соответствующие нашему эксперименту данные о зависимости плотности упаковки η от размера области установки L частиц, полученные посредством математического моделирования и рассчитанные путем имитационного моделирования.

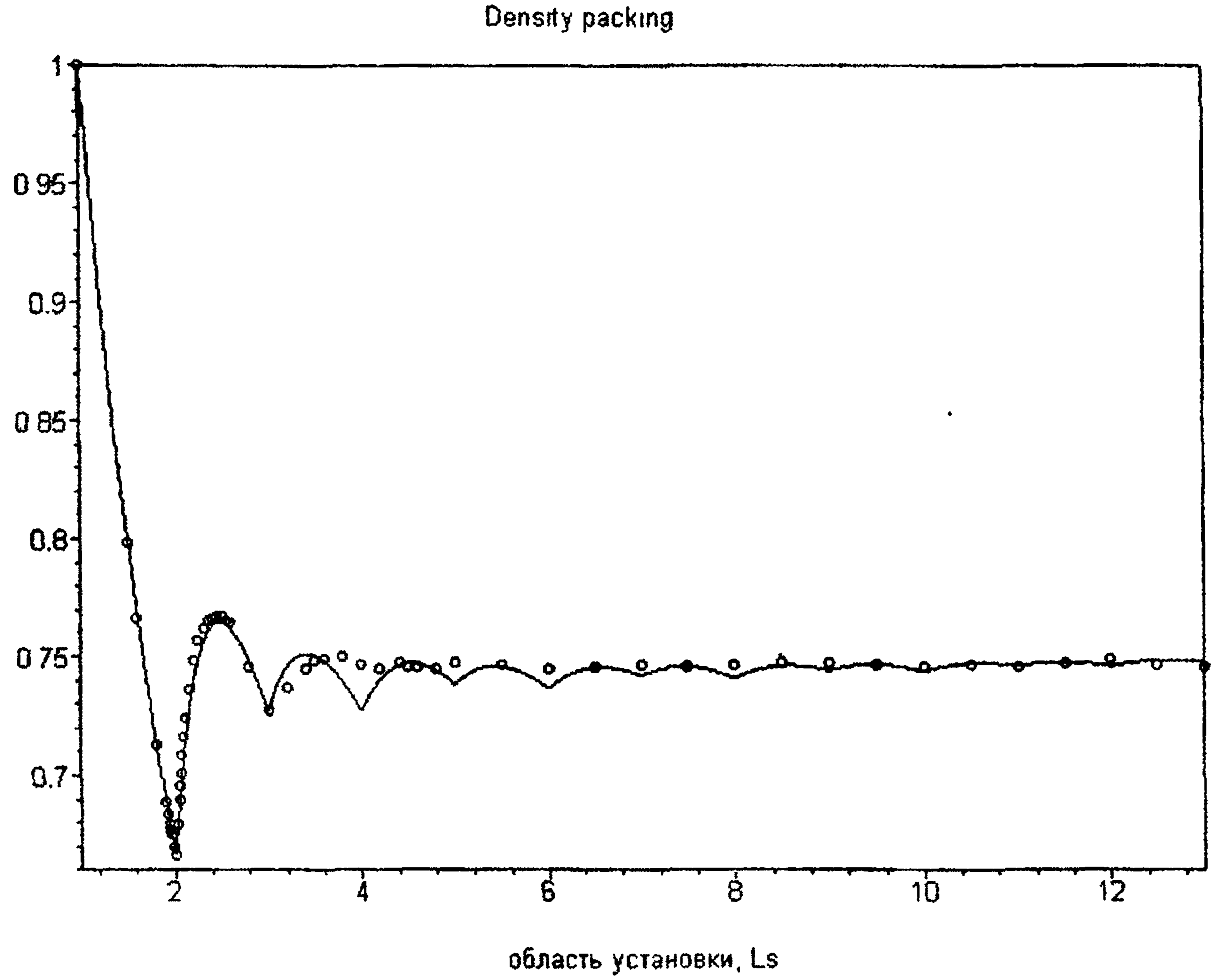

Рис. 2. Зависимость плотности упаковки η от размера области установки L частиц. Сплошная линия – результат математического моделирования; маркеры в виде точек – результат имитационного моделирования.

Результаты моделирования показали, что поведение кривой носит осциллирующий характер. Увеличение размера установочной области от значения равного диаметру частицы до величины, численно равной двум диаметрам, приводит к резкому уменьшению плотности упаковки, и на правой границе этого участка кривой достигается глобальный минимум плотности упаковки (η=0,667), соответствующий расчетам по теории Р. Грита. При этом кривая, вблизи данного минимума, имеет вид типа клина. С дальнейшим увеличением размера установочной области значения плотности упаковки начинают возрастать до тех пор, пока не будет достигнут первый максимум (η=0,765), получаемый при значении L=2,5a, что позволяет говорить о возможности достижения более высоких значений плотности упаковки при достаточно большой величине области установки частиц. Дальнейшее увеличение интервала установки сферы вызывает затухающие осцилляции кривой зависимости плотности упаковки от величины установочной области вблизи значения η=0,748 (теория А. Реньи).

Некоторую трудность представляют вычисления вероятностей для третьего и ряда последующих участков кривой, требующих учета наличия тесной корреляции между установленными соседними частицами. Дальнейшие участки, из-за невысоких значений вероятностей, достаточно адекватно описываются полученными при построении математической модели уравнениями.

5. Заключение. Исследования по стохастической упаковке одномерных твердых сфер, путем математического и имитационного моделирования, позволили проанализировать процессы формирования систем частиц в зависимости от размера области установки частиц. Одним из наиболее интересных результатов данного исследования, можно считать обнаружение затухающих осцилляций кривой зависимости плотности упаковки от размера установочной области. Полученные зависимости плотности упаковки от величины установочной области показывают на возможность управления формированием достаточно плотных упаковок одномерных сфер в областях установок, превышающих двойной диаметр устанавливаемых сфер.

1. Renyi A. On a one-dimensional space-filling problem, Comm. Math. Research Inst., Hungarian Acad. Sci., 3, 1958, pp.109-127

2. Mathematical Constants. Cambridge, England: Cambridge University Press, 2003, pp. 278-284

3. Greet R.J. Random-line and hard-spheres models. – J. Appl. Phys., vol 37, № 12, 1966, pp. 4377-4380

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

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