УДК 339.215

В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СТОХАСТИЧЕСКОЙ УПАКОВКИ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ

Введение. Структура плотноупакованных систем частиц представляет собой один из наиболее интересных объектов для научных исследований Это связано с тем, что взаимное расположение частиц является именно тем фактором, который определяет многие физические и химические свойства вещества. Понимание процессов, отвечающих за формирование структуры системы частиц, способствует дальнейшему развитию самых различных направлений в современной науке и технике [1].

В настоящее время разработана математическая модель стохастической упаковки бинарной системы частиц [2], в рамках которой выполнен теоретический вывод уравнения для плотности стохастической упаковки η. В основу данного исследования был положен принцип о возможности обобществления пустот между частицами компонентов системы. В этом случае все пустоты системы подразделяются на три различных типа. Под первым типом пустот понимаются пустоты вблизи поверхности частиц первого компонента, которые не могут быть заняты частицами второго компонента Такие пустоты принято называть исключенными пустотами. Объем исключенных пустот в системе, совместно с объемом твердой фазы первого компонента, определяется как исключенный объем V_e [3], то есть объем недоступный для частиц второго компонента. Пустоты между частицами второго компонента считаются пустотами второго типа, и называются связанными пустотами. Под третьим типом пустот принято понимать оставшиеся пустоты между частицами первого компонента, то есть пустоты не занятые частицами второго компонента системы. Такие пустоты называются свободными пустотами, а их объем – объемом свободных пустот. При таком разбиении порового пространства можно считать, что изменение общего объема системы является прямо пропорциональным объему добавляемых частиц второго компонента, что в дифференциальной форме можно записать в следующем виде

$$dV = \mu \, dV_2 , \tag{1}$$

где V – общий объем бинарной системы частиц, V_2 – объем частиц второго компонента; μ – функция, отражающая вероятность участия частиц второго компонента в изменении объема системы, и которая определяется выражением

$$\mu = \frac{\frac{z}{2} r^3}{\frac{z}{2} r^3 + \frac{V}{V_{10}} - \frac{V_e}{V_{10}} - c/(1-c)}, \tag{2}$$

где z – среднее координационное число для частиц первого компонента; r – соотношение размеров частиц компонентов системы; V_{10} – объем, занимаемый частицами первого компонента; V_e – исключенный объем.

Выбрав в качестве граничных условий для уравнения (1): $V(c=0) = V_{10}$, $V(c=1) = V_{20}$ (V_{20} – объем, занимаемый частицами второго компонента) для бинарной системы частиц было получено уравнение, позволяющее определить общий объем системы как функцию содержания частиц второго компонента c, отношения размеров частиц компонентов r и среднего координационного числа для частиц первого компонента z

$$V = V_e + V_{20} + (V_{10} - V_e)\exp(-\frac{2(V - V_{10})}{\bar{z}r^3V_{10}}) \quad (3)$$

Однако задача существенно усложняется при переходе к многокомпонентным системам, причем аналитическое решение имеется только в случае рассмотрения бинарной системы частиц Существует несколько подходов к решению данной задачи Например, можно решать исходное дифференциальное уравнение численно, применив метод конечных разностей Другой подход заключается в представлении многокомпонентной системы частиц в виде набора псевдобинарных упаковок [4] В основе такого подхода лежат теоретические расчеты для бинарных систем, где один из компонентов является вмещающей средой, в то время как частицы второго компонента размещаются внутри этой среды Настоящая работа, в основу которой был положен данный подход, имеет своей целью построение математической модели стохастической упаковки многокомпонентной системы частиц

Постановка задачи. Пусть у нас есть многокомпонентная плотноупакованная система, состоящая из n компонентов, частицы которых расположены случайным образом Плотность упаковки η такой системы можно определить как функцию плотностей упаковки η_i отдельных компонентов системы, содержания c_i компонентов в системе, а также соотношения размеров частиц соседних компонентов r_i ($r_i=d_i/d_{i-1}$) $\eta=f(\eta_i, c_i, r_i)$ Требуется найти выражение, позволяющее определить плотность упаковки η системы

Основная часть. В основу математической модели положим принцип последовательного включения компонентов в состав системы с учетом их содержания [4] Причем, основной акцент поставим на определение максимальной плотности упаковки В нашем случае процесс перехода многокомпонентной системы из одного состояния в другое носит поэтапный характер Сначала происходит эволюция распределения второго компонента, приводящая бинарную систему в состояние с максимальной плотностью упаковки Соответствующее данному состоянию значение содержания второго компонента обозначим через c_2 Первая компонента при этом играет роль «среды» На следующем этапе необходимо учесть эволюцию третьего компонента, при котором уже первые два компонента играют роль среды и т д Тогда, изменение общего объема ΔV данной системы можно представить в виде

$$dV(n) = \sum_{i=1}^{n} \mu_i dV_i\,, \quad (4)$$

где μ_i – функция, определяющая вероятность участия добавляемых частиц в увеличении объема, занимаемого системой частиц i-го компонента системы, V_i – объем, частиц i-го компонента

На первом этапе построения математической модели стохастической упаковки многокомпонентной системы частиц будем считать, что добавление в систему частиц i-го компонента не влияет на значения функций μ_i ранее установленных компонентов Тогда

$$\mu_i = \frac{\frac{z}{2}\sum_{i=1}^{n}\frac{V_i}{v_i}}{\frac{z}{2}\sum_{i=1}^{n}\frac{V_i}{v_i} + V(n-1) - \sum_{i=1}^{n-1}V_{ei} - V_{n0}}\,, \quad (5)$$

здесь V_{ei} – исключенный объем i-го компонента системы, V_{n0} – объем, занимаемый частицами n-го компонента системы, v_i – объем частицы i-го компонента системы

Решение дифференциального уравнения (4), при граничных условиях: $V(c_i = 1) = V_{i0}$ (i=1, 2, . . n), позволяет нам получить систему алгебраических уравнений для определения объема стохастической упаковки многокомпонентной системы частиц

$$V(n) = \sum_{i=1}^{n-1} V_{ei} + V_{n0} + (V(n-1) - \sum_{i=1}^{n-1} V_{ei})\exp(-\frac{V(n)-V(n-1)}{aV(n-1)}), \tag{6}$$

где a – функция соотношения объемов частиц n-го и i-го компонентов и относительных содержаний данных компонентов в системе, определяемая формулой

$$a = \frac{z}{2}[\frac{v_n}{v_1} + \sum_{i=2}^{n-1} \frac{v_n c_i}{v_i(1-c_i)}] \tag{7}$$

Исходя из определения плотности упаковки частиц, которая представляет собой отношение объема твердой фазы к общему объему системы можно представить также формулу для плотности упаковки такой системы частиц, которая имеет следующий вид

$$\eta(n) = \{\sum_{i=1}^{n-1} \frac{c_i}{\eta_{ei}} + \frac{c_n}{\eta_n} + (\frac{\sum_{i=1}^{n-1} c_i}{\eta(n-1)} - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{c_i}{\eta_{ei}})\exp[-\frac{1}{a}(\frac{\eta(n-1)}{\eta(n)} - 1)]\}^{-1}. \tag{8}$$

В качестве примера рассмотрим тернарную систему Пронумеруем компоненты в порядке убывания размеров их частиц и распределение компонентов в тернарной системе зададим их локальными содержаниями c_i Вначале определим плотность упаковки бинарной системы, содержащей частицы первых двух компонентов

$$\eta(2) = \{\frac{c_1}{\eta_{e1}} + \frac{c_2}{\eta_2} + c_1(\frac{1}{\eta_1} - \frac{1}{\eta_{e1}})\exp\{-\frac{2}{zr^3}[\frac{\eta_1}{\eta(2)} - 1]\}^{-1}. \tag{9}$$

Зная плотность упаковки бинарной системы из формулы (7) выразим плотность упаковки тернарной системы частиц

$$\eta(3) = \{\sum_{i=1}^{2} \frac{(1-c_i)}{\eta_i} + \frac{c_3}{\eta_3} + (\frac{\sum_{i=1}^{2} c_i}{\eta(2)} - \sum_{i=1}^{2} \frac{(1-c_i)}{\eta_i})\exp[-\frac{1}{a}(\frac{\eta(2)}{\eta(3)} - 1)]\}^{-1}. \tag{10}$$

Функция a в тернарной системе, определяется формулой

$$a = \frac{z}{2}[\frac{v_3}{v_1} + \frac{v_3 c_2}{v_2(1-c_2)}]. \tag{11}$$

Система уравнений (9-11) обобщает уравнение (8) для многокомпонентной системы на случай квазибинарной системы, в которой первые два компонента играют роль среды для эволюции третьего компонента Поскольку третий компонент изменяет соотношение содержаний первых двух компонентов системы в сторону его уменьшения, то для перехода к более плотной упаковке системы необходимо итерационным образом достигнуть данного значения плотности упаковки тернарной системы, путем повторного просчета значений плотности упаковки квазибинарной системы частиц, где частицы первого и второго компонентов представляют основной компонент, а третий – представляет собой частицы добавляемого компонента тернарной системы частиц

Выводы. Таким образом, плотность упаковки многокомпонентной системы частиц можно определить, представив такую систему в виде совокупности квазибинарных систем. При этом в системе одновременно протекают процессы как заполнения свободных пустот, так и раздвижки частиц компонентов среды. Основной результат работы состоит в том, что впервые для общей модели стохастической упаковки многокомпонентной системы частиц предложено уравнение, позволяющее однозначно описать характер изменения плотности упаковки многокомпонентной системы частиц в зависимости от содержания и размеров частиц компонентов Недостатком данного подхода является приближенный характер определения плотности упаковки многокомпонентной системы В тоже время полученный результат можно дополнительно учитывать при численном решении уравнений, определяющих плотность стохастической упаковки многокомпонентной системы частиц

ЛИТЕРАТУРА

1 Займан Дж Модели беспорядка Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем – М Мир, 1982 – 592 с
2 Бондарев В Г Математическое моделирование случайной упаковки бинарной системы частиц // Научн ведомости БелГУ – 2005 № 7 – С 78-82
3 Бондарев В Г Исключенный объем бинарной системы сферических частиц // Горн информ -анал бюл – 1999 – № 8 – С 87-94
4 Орлов В Н Способ определения физических параметров гетерогенной смеси // Патент № 2065042 – 10 08 96 – Бюл № 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 – ассистент кафедры информатики и вычислительной техники Белгородского государственного университета

Научные интересы

– математические модели в физике конденсированного состояния, компьютерное моделирование