АЛГОРИТМ ФОРМИРОВАНИЯ СТОХАСТИЧЕСКОЙ УПАКОВКИ СИСТЕМЫ СФЕРИЧЕСКИХ МОНОЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕ R^2

Л.В Мигаль

Белгородский государственный университет

Введение. Одной из наиболее актуальных проблем теории плотноупакованных систем является оценка предельных значений плотностей упаковки частиц, расположенных случайным образом, в пространствах различных размерностей. Как правило, для решения указанной проблемы используется подход, предусматривающий имитационное моделирование структуры путем формирования плотных стохастических упаковок сферических частиц.

Наиболее распространёнными алгоритмами упаковки сферических частиц являются 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» (streem of particles, SP) представляет алгоритм, который состоит в поочередном размещении частиц [4]. 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 его левой границе. 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]. Он состоит в том, что все элементы размещаются последовательно по одному, причем ранее размешенные считаются неподвижными, то есть их параметры размещения имеют определенные фиксированные значения. Каждый элемент размещается так, что значение функции цели достигает минимума только по тем переменным, которые являются параметрами этого элемента. В представленной работе предложен алгоритм, реализующий процессы формирования стохастической упаковки, состоящей из совокупности плотноупакованных слоев.

Постановка задачи. Здесь предлагается алгоритм решения следующей задачи. Пусть дано некоторое множество, состоящее из n сферических частиц одинакового диаметра a, находящихся под действием слабой однонаправленной силы. Требуется расположить частицы в выбранной прямоугольной области, определенной при помощи $\{x,y| 0\leq x\leq L,\ 0\leq y\leq H\}$, где L - ширина, а H - высота области установки, таким образом, чтобы в результате процесса формирования стохастической упаковки число попавших в область частиц было максимально возможным, при следующих условиях:

1. Каждая частица касается как минимум двух соседних частиц из данной конфигурации.
2. Упакованные частицы не пересекаются (не имеют общих внутренних точек) ни с одной частицей из данной конфигурации
3. Все частицы лежат как можно ближе к нижней линии области их установки.

Алгоритм стохастической упаковки. Упаковка двумерных сфер на плоскости формируется на основе имитационного моделирования стохастических последовательностей частиц по принципу «минимума потенциальной энергии». Алгоритмы компьютерного моделирования реализуют поэтапную схему стохастических процессов формирования локальных слоев упаковки. При этом выделяются три основных этапа описания процесса:

1. Построение одномерной цепочки сфер в полосе (начальная стадия).
2. Построение двумерного слоя сфер (основная стадия).
3. Доуплотнение локального слоя сфер (заключительная стадия).

На первом этапе, на выбранной полосе длиной L, случайным образом определяются координаты центров частиц в соответствии с равномерным законом распределения вероятностей. Диапазон разброса значений y-координаты определяется априорно, с учетом возможной толщины локального слоя частиц. Расстояния $r_{i,i+1}$ между центрами i-й и $i+1$-й частицами ограничивались в пределах $a \le r_{i,i+1} \le a\sqrt{3}$. Выполнение данного условия производилось путем применения счетчика случайных чисел с последующим определением x-координат центров частиц.

На втором этапе, после установки частиц начальной цепочки в полосе, определяются вакантные позиции для центров частиц следующей, верхней, цепочки. Процесс выбора вакантных позиций можно осуществить путем расчета их координат как равноотстоящих на величину диаметра от двух соседних сфер нижней цепочки. Положение центра сферы в плоскости XY описывается двумя координатами из множества $u_i=\{x_i,y_i\}$ вакантных позиций для установки сфер рабочей цепочки. Результатом работы является установление соответствия между каждой парой координат из множества $U=\{u_1,u_2,..,u_n\}$ и некоторым числовым значением, характеризующим номер вакантной позиции.

На этом этапе моделирования также необходимо произвести выбор позиций для сфер верхней цепочки, отвечающих условию, который определяется в соответствии с принципом «минимума потенциальной энергии». Таким образом, необходимо разбить исходное множество вакантных позиций на ряд подмножеств $U_1, U_2,.., U_k$ и найти среди них такое подмножество U_j, в котором средняя y-координата, приходящаяся на одну частицу, обладает минимальным средним значением.

Использование единственным образом алгоритма, описанного выше, недостаточно для формирования двумерной структуры стохастической упаковки системы сферических моночастиц, поскольку время просчета всех ветвей дерева оказывается довольно большим. Данная проблема может быть решена разбиением множества вакантных центров частиц на отдельные подмножества, которые бы рассматривались как отдельные деревья с собственными наборами ветвей. Однако такой подход может привести к повторному перекрытию сфер, или возникновению открытых поверхностей нижних цепочек формируемых слоев стохастической упаковки. Такие проблемы решаются на третьем этапе построения алгоритма путем доуплотнения локального слоя за счет перераспределения позиций сфер верхней цепочки или включения в ее состав дополнительных сфер (заключительная стадия). На этом же этапе выполняется контроль за граничными сферами.

Основное достоинство предложенного алгоритма заключается в том, что он, используя информацию только о положении сфер предыдущей цепочки, значительно уменьшает число обрабатываемых одновременно сфер и, следовательно, позволяет существенно увеличить скорость нахождения реальных позиций сфер, включенных в верхнюю цепочку.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц / Пер. с англ. – М.: Мир, 1987.
2. Tory E.M., Church B.H., Tam M.K., Ratner M. Simulated random packing of equal spheres // Can. J. Chem. Eng. – 1971. – Vol. 51.
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. – Vol.37, № 3.
4. S. Torquato, Nearest-Neighbor Statistics for Random Packings of Hard Spheres and Disks // Physical Review E. – 1995. – № 51. – P. 3170.
5. Стоян Ю.Г., Гиль Н.И. Методы и алгоритмы размещения плоских геометрических объектов. – Киев: Наукова думка, 1976. – 144 с.

ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОТОКА ОБРАЩЕНИЙ В БЕСКОНЕЧНОЛИНЕЙНОЙ СМО С ПОВТОРНЫМ ОБСЛУЖИВАНИЕМ

С.П. Моисеева, А.С. Морозова

Филиал Кемеровского государственного университета в г. Анжеро-Судженске

Рассматривается математическая модель страхования, которая описывается бесконечнолинейной системой массового обслуживания с повторным обслуживанием [1].