ИЗВЕСТИЯ
ТОМСКОГО ОРДЕНА ОКТЯБРЬСКОЙ РЕВОЛЮЦИИ
И ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА имени С. М. КИРОВА

Том 187 1974

ВОПРОСЫ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ ДИСКРЕТНЫХ СТРУКТУР

И. Э. НААЦ

(Представлена научным семинаром вычислительной лаборатории)

Некоторые вопросы изучения физических свойств тел, образующих, с определенной точки зрения, дискретные структуры, приводят к необходимости изучения геометрических свойств этих структур. В частности, к таким вопросам относится изучение радиационного повреждения кристаллической решетки и дефектоскопии бетонных изделий (галька-цемент). В соответствии с этим возникает необходимость введения характеристик, в терминах которых возможно однозначное и полное описание геометрических свойств дискретных структур, образующих исследуемое тело. Построение таких характеристик и является предметом настоящей работы.

Известно, что для описания твердого тела как дискретной структуры используют геометрическую модель заполнения эвклидова пространства шарами [1]. Аналогичная модель в определенных пределах может быть применена при изучении структуры бетонных изделий, и в частности распределения крупного заполнителя как системы выпуклых тел в объеме изделения. Используя геометрическую модель структуры, можно подойти к вопросу построения характеристик для описания ее геометрических свойств.

В задаче заполнения важной характеристикой является плотность заполнения ρ объема V в эвклидовом пространстве системой выпуклых тел $\{v_i\}$ $(i=1,2...N)$, которая определяется как отношение заполненного пространства в объеме тела к объему этого тела [2], т. е.

$$\rho=\frac{1}{V}\sum_{i=1}^{N}v_i. \tag{1}$$

Плотность заполнения физически характеризует степень однородности дискретной структуры. В случае шаров система $\{v_i\}$ $(i=1,2...N)$ не образует системы замещающих тел, поэтому $\sum\limits_{i=1}^{N} v_i<V$ и $0<\rho<1$. Соответственно неоднородность тела (структуры) можно характеризовать величиной $(1-\rho)$, которая по смыслу есть отношение объема незанятого пространства $\left(V-\sum\limits_{i=1}^{N}v_i\right)$ в объеме тела к объему этого тела. Плотность заполнения ρ является интегральной характеристикой, т. е. характеризует структуру в целом.

Для оценки локального распределения тел заполнения по объему исследуемого тела, что особенно необходимо в задачах определения дефекта структуры в том или ином смысле, удобно ввести коэффициент линейной однородности. Математически определить коэффициент линейной однородности (для простоты рассматриваем заполнение и плоскости) можно как отношение суммы отрезков к траектории луча, заключенных внутри тел заполнения, к толщине тела, т. е.

$$l=\frac{1}{a}\sum_{k=1}^{M}a_{\kappa}, \tag{2}$$

где обозначено: a — толщина тела, a_k — длина отрезка внутри κ-го тела заполнителя на траектории луча (рис. 1, а), M — число тел заполнителя, пересекаемых лучом в данном направлении.

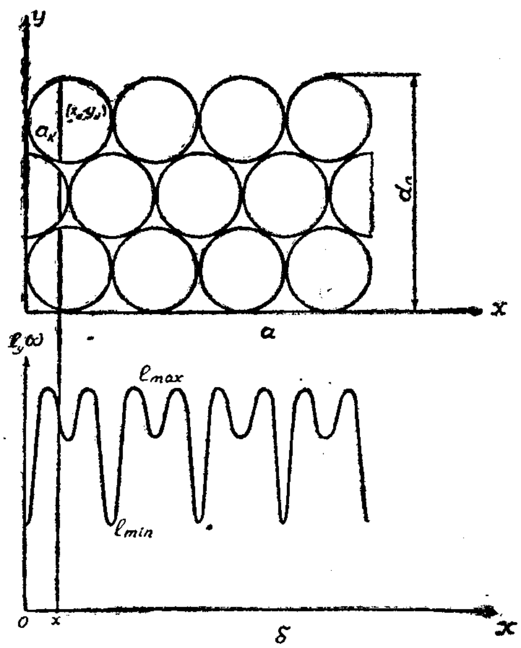

Рис. 1. a — пример дискретной структуры на плоскости;
$б$ — кривая распределения линейной однородности для данного примера

Коэффициент линейной однородности при параллельном переносе луча меняется, характеризуя тем самым локальное распределение однородности (соответственно неоднородности) по длине исследуемого тела в фиксированном направлении.

Рассмотрим подробнее заполнение прямоугольной области на плоскости. В направлении, параллельном оси y (рис. 1, $б$), коэффициент линейной однородности l является функцией x, т. е. можно ввести обозначение $l_y(x)$. Совершенно аналогично можно рассматривать коэффициент линейной однородности в направлении оси x как функцию $l_x(y)$. Справедливо утверждение: среднее значение функции $l(x)$ по длине тела b $(0\leqslant x\leqslant b)$ равно плотности заполнения ρ этого тела, т. е.

$$\frac{1}{b}\int_{0}^{b} l_y(x)\,dx=\rho. \tag{3}$$

Справедливость утверждения доказывается подстановкой в (3) (2) с учетом того, что в данном примере

$$a_\kappa(x)=\begin{cases}2\sqrt{R^2-(x-x_\kappa)^2} & \text{при } (x-x_\kappa)<R,\\ 0 & \text{при } (x-x_\kappa)\geqslant R,\end{cases} \tag{4}$$

где R — радиус круга.

Важность соотношения (3) состоит в том, что оно дает возможность практического определения величины ρ, поскольку значения коэффициента l могут быть получены экспериментально радиационными методами. В свою очередь величина ρ определяет физические свойства исследуемого тела. Отметим, что соотношение (3) справедливо для тел любой формы и для любого направления.

В заключение рассмотрим геометрические свойства простейшей дискретной структуры: множества кругов на плоскости, заполняющих прямоугольную полосу в n плотно уложенных слоев ($0\leqslant x\leqslant b$, $b\gg 2R$). Для такой области [2] $\rho\leqslant 0{,}9069...$,где равенство достигается на полосе бесконечных размеров. Найдем оценку наибольшего и наименьшего значения $l_y(x)$ для $0\leqslant x\leqslant b$. Построив систему замещающих правильных шестиугольных ячеек, описанных около кругов заполнения, на плоскости нетрудно подсчитать, что

$$\max_{0\leqslant x\leqslant b} \sum_{i\in I(x)} a_\kappa = \frac{\sqrt{3}}{2}\cdot nD, \tag{6}$$

где D — диаметр круга и $I(x)$ — множество индексов кругов, пересекаемых лучом в направлении, параллельном оси y из точки x (рис. 1). Соответственно находим

$$\min_{0\leqslant x\leqslant b} \sum_{i\in I(x)} a_k = \begin{cases} \dfrac{nD}{2} & \text{при } n \text{ четном,} \\ \dfrac{(n-1)D}{2} & \text{при } n \text{ нечетном.} \end{cases} \tag{7}$$

Нетрудно подсчитать ширину полосы, составленную n слоями плотно упакованных кругов:

$$d_n = nD\left[\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{2-\sqrt{3}}{2n}\right]. \tag{8}$$

При больших n можно пользоваться приближенным равенством

$$d_n = \frac{nD\sqrt{3}}{2}\ . \tag{9}$$

Используя (6) и (8), находим

$$l_{\max} = \frac{1}{1+\dfrac{2-\sqrt{3}}{\sqrt{3}\ n}}. \tag{10}$$

При $n\longrightarrow\infty$ получим предельное значение **для максимальной величины** коэффициента однородности.

$$\lim_{n\to\infty} l_{\max} = 1. \tag{11}$$

Аналогично имеем соотношения

$$l_{\min} = \frac{1}{\sqrt{3}+\dfrac{2-\sqrt{3}}{n}}. \tag{12}$$

$$\lim_{n\to\infty} l_{\min} = \frac{1}{\sqrt{3}}\ . \tag{13}$$

Таким образом, для n-слойной системы кругов, плотно уложенных, значение линейного коэффициента однородности лежит в интервале $[l_{\min}(n),\ l_{\max}(n)]$. Из (6) и (7) следует, что для любого n

$$\frac{l_{\min}}{l_{\max}} \leqslant \frac{1}{\sqrt{3}}, \tag{14}$$

причем равенство достигается для четных n.

Рассмотренная совокупность кругов образует на плоскости правильную сотообразную систему, плотно заполняющую прямоугольную область. Поэтому полученные значения геометрических характеристик позволяют судить о значении соответствующих геометрических характеристик для произвольного заполнения прямоугольных областей системой равных кругов, т. е. для множества упаковок, не обладающих экстремальными свойствами в смысле плотности заполнения. В частности, $l_{\max}$ дает нижнюю грань возможных значений, $l_{\min}$ — верхнюю.

Подобный анализ может быть проведен для плотных упаковок в трехмерном пространстве, однако вычисления при этом становятся более сложными.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Спайс. Химическая связь и строение. «Мир», М., 1966.
2. Л. Ф. Тот. Расположение на плоскости, на сфере и в пространстве. Физматгиз. М., 1958.