

**К ОЦЕНКЕ ПЛОТНОСТИ ПРИ ЦИФРОВОМ МОДЕЛИРОВАНИИ
СЛУЧАЙНЫХ ЗАПОЛНЕНИЙ**

И. Э. НААЦ, Г. Н. ПАРВАТОВ

(Представлена научным семинаром УВЛ)

В теории равновесной статистической механики и задачах моделирования одним из основных условий является условие статистической однородности рассматриваемой структуры.

В случае бесконечно больших систем условие однородности выполняется. Однако для реально существующих систем наличие поверхностей, ограничивающих рассматриваемый объем, нарушает однородность системы частиц. Условием однородности в статистической механике является инвариантность функций распределения частиц относительно координат в рассматриваемой области [1].

В работе [2] получена оценка расхождения от границ, начиная с которого граничным эффектом можно пренебречь при изучении распределения частиц в одномерной модели газа.

В настоящей работе дается оценка влияния граничного эффекта на плотность случайного заполнения пространства системой непересекающихся шаров в цифровых моделях, применяемых в задачах исследования структуры неоднородных материалов [3].

Предположим, что случайное заполнение единичного куба системой шаров в цифровом эксперименте осуществляется согласно одному из алгоритмов, описанных в работах [4, 5]. Определив плотность заполнения данного единичного куба, требуется оценить плотность заполнения по данному алгоритму трехмерного пространства, т. е. исключить влияние границ куба в цифровом эксперименте.

Достаточно надежную и в то же время простую оценку можно получить методом переноса границ.

Суть метода состоит в построении нового куба меньших размеров. Иными словами, из данного в эксперименте куба «вырезается» внутренний куб, на заполнение которого влияние прежних границ пренебрежимо мало. Обозначим через ρ_1 плотность заполнения единичного куба системой непересекающихся шаров, а через ρ_2 — плотность внутреннего куба. Тогда отношение

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = k$$

может характеризовать влияние границ на плотность случайного заполнения. Получим численную характеристику « k » для случайного заполнения единичного куба по алгоритму [4].

Для получения оценки значений « k » на ЦВМ осуществлялись случайные заполнения единичного куба с плотностью ρ_1 в пределах 0,0104—0,229 и шагом 0,0104. При этом для каждого значения ρ_1 получали куб меньших размеров (с ребром длиной $(1-2d)$), отступив от каждой грани на диаметр шара « d », и затем находили соответствующее значение плотности ρ_2 . Повторяя процедуру случайного заполнения по 10 раз для каждого значения ρ_1 , получим соответствующее ему среднее значение ρ_2 , и дисперсию плотности малого объема как функцию от ρ_1 .

Результаты цифрового эксперимента по оценке ρ_2 и σ_2^2 , выполненного на ЦВМ М-20, сведены в табл. 1, из которой видно, что значения « k » лежат в пределах 1,15—1,35. При этом наименьшее значение соответствует более плотному случайному заполнению единичного куба. Это объясняется тем фактом, что при большем числе пакуемых шаров в кубе конечных размеров одно случайное заполнение мало отличается от другого по конфигурации пространственного расположения шаров. Поэтому влияние границ с ростом ρ_2 на оценку плотности ρ_2 уменьшается.

Используя результаты расчетов табл. 1, можно оценить плотность случайного заполнения больших областей трехмерного пространства согласно описанному алгоритму упаковки, если цифровой эксперимент проводился лишь по пакованию выборочного единичного куба. Для рассматриваемого диапазона плотностей эта поправка в среднем составляет 1,2 раза.

Таблица 1

№ п/п	Число шаров в v	ρ_1	Среднее число шаров в v	$\bar{\rho}_2$	$\bar{\rho}_2/\rho_1$	$\sigma_2^2 \times 10^6$
1	20	0,010	13,7	0,014	1,35	8,6
2	40	0,021	28,1	0,029	1,38	5,8
3	60	0,031	41,5	0,042	1,36	10,1
4	80	0,042	55,6	0,056	1,36	12,3
5	100	0,052	68,1	0,069	1,33	17,7
6	120	0,062	81,7	0,083	1,33	14,5
7	140	0,073	94,5	0,096	1,32	20,9
8	160	0,083	106,6	0,108	1,31	28,9
9	180	0,094	118,5	0,120	1,29	28,7
10	200	0,104	131,0	0,133	1,29	30,2
11	220	0,114	142,0	0,145	1,27	33,8
12	240	0,124	154,4	0,157	1,27	30,0
13	260	0,135	165,5	0,169	1,25	29,4
14	280	0,145	175,8	0,179	1,23	30,7
15	300	0,156	186,7	0,190	1,22	30,5
16	320	0,166	197,1	0,201	1,21	43,3
17	340	0,177	208,3	0,212	1,20	47,4
18	360	0,187	218,8	0,223	1,19	52,9
19	380	0,197	228,7	0,233	1,18	40,0
20	400	0,208	238,8	0,244	1,17	38,7
21	420	0,218	249,1	0,254	1,16	36,4
22	440	0,229	257,8	0,263	1,15	32,5

На рис. 1 приведена блок-схема алгоритма для оценки влияния границ пакуемого объема на плотность упаковки. Она состоит из четырех основных блоков: блока поиска случайных координат X, Y, Z , блока упаковки единичного куба, блока упаковки малого куба и блока вычисления $\bar{\rho}, \sigma_2^2$. Первые два блока полностью совпадают с блок-схемой алгоритма случайной упаковки по работе [4], с той лишь разницей, что в данном случае упаковка большого куба осуществляется с заданной плотностью от 20 до 440 шаров с шагом в 20 шаров. Блок упаковки малого объема представляет собой последовательность операции проверки

условия попадания шаров в малый куб, упакованных ранее в большой, операции счета шаров малого и большого объемов, записи координат и передачи управления.

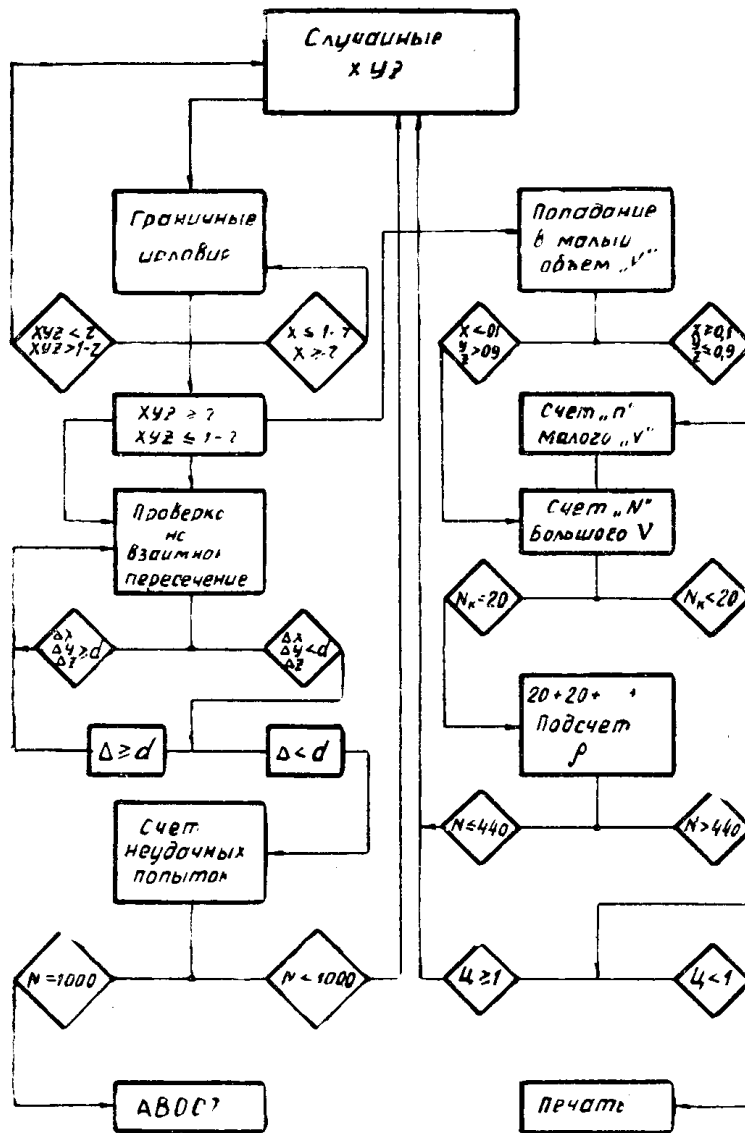


Рис. 1. Блок-схема программы случайного заполнения и вычисления характеристик

Операция проверки условий попадания шара в малый куб заключается в проверке координат центра шара на выполнение условий:

$$X, Y, Z \geq d; X, Y, Z \leq 0,9, \quad (1)$$

где d — граница «слева»,

$0,9$ — граница «справа» (или $0,9 = 1 - d$).

Шар считается упакованным в малый куб, если удовлетворяет этим условиям. Особенность алгоритма состоит в том, что оба счетчика числа шаров N_k в большом кубе и счетчик числа шаров n_k относятся к блоку упаковки малого куба и следуют один за другим. Это вызвано тем, что каждый шар, попадающий в большой куб и непересекающийся с ранее упакованными, сразу же проверяется на условие попадания его в малый объем. Шар, удовлетворяющий условиям (1), фиксируется в обо-

их счетчиках. Но если хотя бы одна координата центра пакуемого шара не удовлетворяет условию (1), то шар фиксируется только в счетчике для большого куба, а затем осуществляется запись координат шаров большого куба. После записи координат происходит сравнение содержимого счетчика шаров N_k большого куба с числом $20i$, где i — номер цифрового эксперимента (номер строки табл. 1). Если $N_k = 20i$, то передается управление в блок вычисления, если $N_k < 20i$, то управление передается на начало поиска случайных чисел X, Y, Z для продолжения упаковки.

Блок вычисления предназначен для выполнения вычисления ρ_2 .

На счет программы, составленной по этому алгоритму, требуется 18 минут машинного времени М-20.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. E. Fisher. J. Math. Phys., 6, 1943 (1965).
2. H. S. Ziff and H. H. Coopers with, J. of Mathematical Physics, v. 8, № 2, p. 306 (1967).
3. И. Э. Наац, А. А. Воробьев, В. А. Воробьев. Применение вероятностно-геометрических методов в радиационной дефектоскопии тел с неоднородной структурой. Доклады на III межвузовской конференции по радиационным методам и средствам неразрушающего контроля материалов и изделий. Томск. Изд-во ТГУ, 1968. (в печати).
4. В. А. Воробьев, В. К. Кивран, И. Э. Наац. Цифровое моделирование случайных упаковок сфер равных диаметров с малой плотностью заполнения. Настоящий сборник.
5. В. А. Воробьев, В. К. Кивран, И. Э. Наац. Моделирование случайных плотных упаковок равных сфер на цифровых электронно-вычислительных машинах. Настоящий сборник.