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

Том 223 1972

К ОПРЕДЕЛЕНИЮ СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ СЛУЧАЙНЫХ ЗАПОЛНЕНИЙ НА ЦИФРОВЫХ МОДЕЛЯХ

И. Э. НААЦ, Г. Н. ПАРВАТОВ

(Представлена научным семинаром УВЛ)

Структурные свойства материалов можно оценить с помощью физических моделей, представляющих собой случайные ансамбли конечного числа шаров [1].

Одним из важных параметров, связанных со случайной структурой модели, является радиальная функция $g(r)$ случайного заполнения. Определим радиальную функцию как плотность заполнения случайным ансамблем шаров сферы радиуса r. При малых значениях r $(2R \leqslant r \leqslant 4R)$ поведение $g(r)$ нерегулярно и описывает в определенной степени локальные свойства заполнения. При $r = \infty$ $g(\infty) = \rho_0$, т. е. плотности заполнения пространства.

В работах [2, 3] приведены радиальные функции, полученные из опытов с физическими моделями случайных упаковок жестких шаров.

Целью настоящей работы является расчет радиальной функции путем цифрового моделирования случайного заполнения непересекающихся шаров в выборочном единичном кубе.

Рассмотрим порядок расчета радиальной функции для случайной упаковки, реализуемой цифровым моделированием по алгоритму [4]. Пусть плотность заполнения единичного куба ρ_1 принимает дискретные значения в промежутке 0,0104—0,229 с шагом 0,0104. В начале в упакованном кубе с значением ρ_1 найдем шар, по возможности ближайший к центру куба. Затем из центра этого шара проведем сферу радиуса $R = d$, где d — диаметр шара, и найдем все координаты центров шаров, попадающих на эту сферу. Численные значения радиальной функции определяются вычислением выражения

$$g(r) = N \cdot \frac{v}{V},$$

где N — число шаров, попавших в сферу радиуса r;

v — объем шара;

V — объем сферы радиуса.

Далее увеличиваем радиус сферы на величину 0,25 d и повторяем процедуру определения числа шаров, центры которых попали в увеличенную сферу. Увеличение радиуса сферы происходит до тех пор, пока сфера не коснется какой-нибудь грани куба. На этом расчет радиальной функции $g(r)$ для данного куба, заполненного шарами до значения плотности ρ_1, заканчивается. Вычисления $g(r)$ проводились десятикратно

для каждого значения ρ_1 в интервале от 0,0104 до 0,229 с шагом 0,0104. Затем определялось среднее значение этой функции, соответствующее данной плотности заполнения.

На рис. 1 приведена блок-схема программы. Блок-схема состоит из программы упаковки единичного куба, программы поиска центра

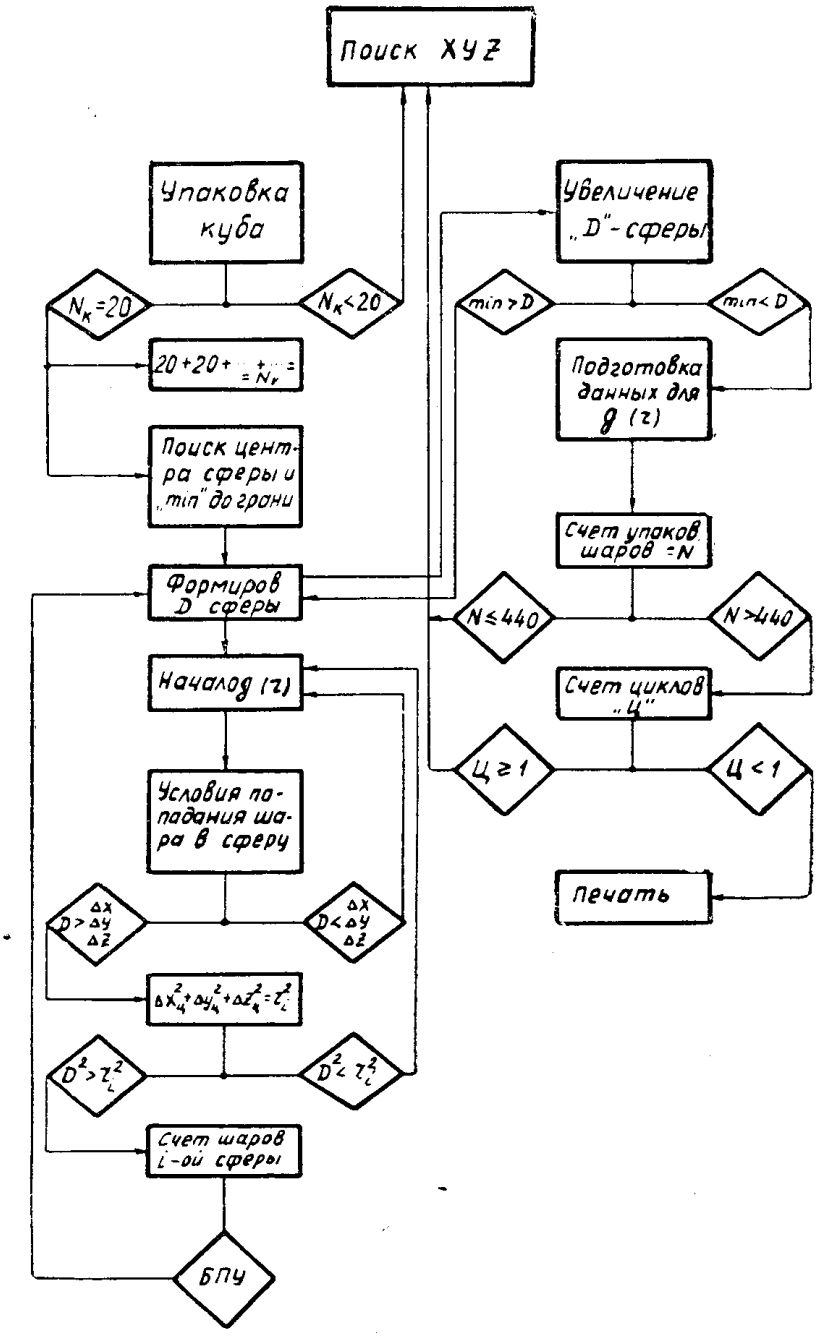

Рис. 1. Блок-схема программы вычисления радиальной функции

сфер, программы формирования условий попадания шара в сферу, программы формирования радиуса сферы, программы вычисления $g(r)$ и нескольких счетчиков.

Программа упаковки единичного куба полностью соответствует алгоритму упаковки [4].

Следует отметить некоторые особенности работы блок-схемы в целом. Операция нахождения «min» состоит в нахождении минимального радиуса, при котором сфера касается какой-нибудь грани. Вся программа охвачена циклом по числу опытов «Ц».

По этой блок-схеме составлена программа для ЦВМ М-20 и произведен счет. Время счета 18 *мин.* Результаты цифрового эксперимента представлены в виде графиков $g(r)$ (рис. 2) для различных значений ρ_1.

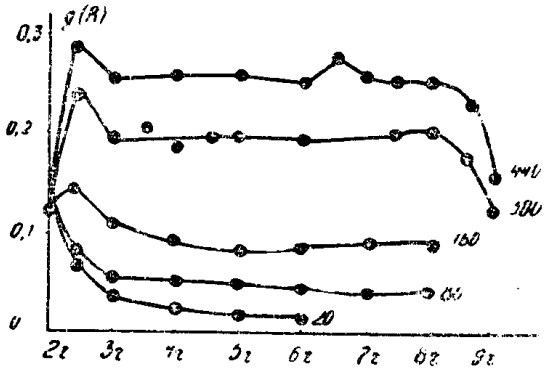

Рис. 2. Зависимость плотности от расстояния

Кривые на рис. 2 вполне совпадают с кривыми, полученными для радиальных функций на физических моделях [5]. Это подтверждает эффективность исследования структуры случайных упаковок путем цифрового моделирования случайных заполнений на ЦВМ, что позволяет получить более точные результаты с меньшими затратами.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. D. Bernal. Nature, 183, 141 (1959).
2. G. D. Scott. Nature. 188, 908 (1960).
3. D. Z. Evans and S. King. Nature. 212, 1353 (1966).
4. А. А. Воробьев, В. К. Кивран, И. Э. Наац. Цифровое моделирование случайных упаковок сфер равных диаметров с малой плотностью заполнения. (Настоящий сборник).
5. G. D. Scott. Nature 194, 956 (1962).