

Метод расчета случайных структур композиционных материалов

Воробьев В.А., Сось В.И.

Представлена объединенным семинаром секторов
ДСМ и МРД НИИ ЭИ

На различных стадиях работ по изучению композиционных материалов возникает необходимость знания статистических характеристик их внутренней структуры. Дисперсная фаза — это могут быть молекулы, атомы, зерна песка или гравия — имеет частицы случайной формы и размеров, расположенные нерегулярным, случайным образом. Основная трудность теоретического исследования таких структур возникает вследствие того, что частицы обладают непроницаемыми замкнутыми телами, откуда невозможно ожидать независимости их расположения относительно друг друга. Этот очевидный факт настолько существен, что до сих пор не найдено никакого удовлетворительного определения для случайных плотных упаковок, способных выдержать строгую логическую критику и в то же время согласоваться бы с нашими практическими представлениями. Довольно часто подобные структуры иллюстрируются сферами, но характеристики структур определяются по полуэмпирическим формулам.

В данной работе предлагается для получения численных характеристик внутренней структур использовать вероятностно-геометрическую модель пространственного расположения структурообразователей с последующим обчетом этой модели на ЦВМ.

В качестве удобной модели многих структур может служить случайная упаковка неодинаковых сфер с распределением сфер по размерам аналогичным распределению размеров частиц. Для облегчения обчета модели предполагаем, что можно получить предельно плотную упаковку. Для пояснения обратимся к рис.1.

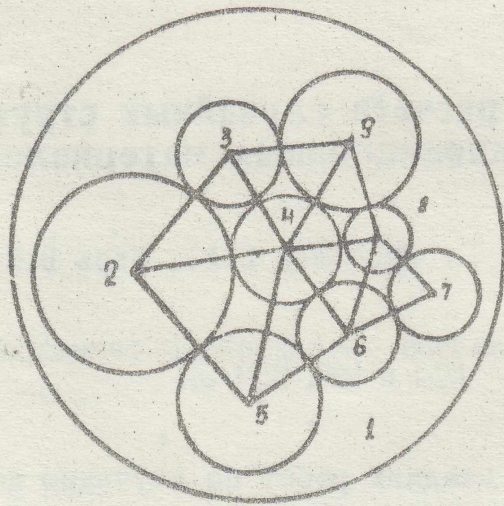


Рис. 1

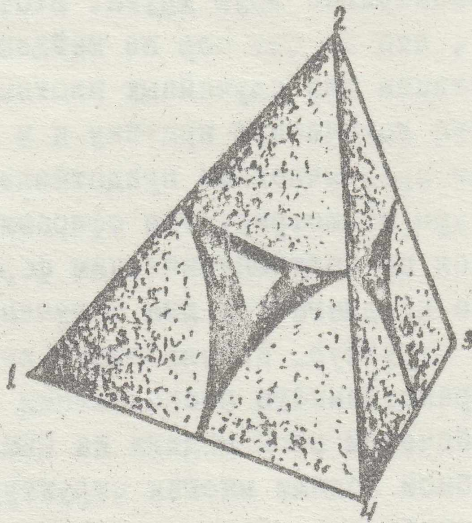


Рис. 2

На рис.1 изображен схематично фрагмент упаковки около сферы, обозначенной I; все сферы 2-9 касаются сферы I. Имеется несколько групп, в которых каждая сфера касается тремя другими (1,2,3,4; 1,3,4,9; 1,4,9,8; ...). Между сферами 4-5 и 6-8 нет контактов, их сближению препятствуют ранее уложенные сферы. В предельно плотной упаковке такие зазоры между ближайшими соседями отсутствуют, тогда, соединяя отрезками центры касающихся сфер, все пространство упаковки будет заполнено системой тетраэдров, вершины которых лежат в центрах четырех сфер. Каждая сфера, принадлежащая данному тетраэдру, будет касаться с тремя остальными.

В этом случае для получения геометрических характеристик упаковки можно использовать подобные характеристики, полученные для системы тетраэдров. На рис.2 изображен пример тетраэдра, образованного сферами 1,2,3,4. В тетраэдре известны ребра, которые равны сумме соприкасающихся сфер, поэтому определить объем его не трудно. Исследуя треугольники, которые являются гранями тетраэдра, по формулам [1] можно найти все телесные углы, которые измеряются частью площади сферы, заключенной в тетраэдре или частью объема, так как телесные углы - центральные. Отношение суммы объемов, вырезаемых тетраэдром из шаров к объему тетраэдра, определяет его геометрическую плотность. Отношение суммы площадей частей сфер, заключенной в тетраэдре, к объему тетраэдра даст удельную поверхность.

Наименьшее сечение пор, важный параметр в теории фильтрации, определится разностью площадей грани и секторов, а наибольшее сечение можно определить по формуле [2]

$$\frac{1}{r_0} = \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r_3} + \frac{1}{r_4} \right) + (3\rho)^{1/3} \right\}, \quad (1)$$

где r_0 - радиус пятой сферы контактирующей с данными r_1, r_2, r_3, r_4 , образующими тетраэдр.

Если телесный угол, вырезаемый j -ым тетраэдром из i -ой сферы обозначить A_{ij} , то число j -ых тетраэдров, включающих i -ую сферу, будет равно

$$N_{ij} = \frac{1}{A_{ij}} \quad (2)$$

Число соседей для сферы будет равно [2]

$$T = \frac{1}{2} N + 2. \quad (3)$$

Кроме указанных можно оценить еще ряд характеристик в зависимости от назначения модели.

Таким образом, перебираются все возможные комбинации сфер, образующих различные тетраэдры, вычисляются интересующие характеристики для каждого типа и усредняются с учетом частоты повторения данного типа в системе. В работе [2] описывается метод определения относительной частоты данного типа тетраэдра в системе, который заключается в следующем. Пусть упаковка состоит из сфер трех размеров r_1 , r_2 и r_3 с относительной частотой f_1 , f_2 и f_3 , соответственно. Тогда частота тетраэдров, включающих i -ую сферу, будет пропорциональна числу i -х сфер и среднему числу тетраэдров, включающих одну i -ую сферу [2]

$$F_1 : F_2 : F_3 = f_1 \bar{N}_1 : f_2 \bar{N}_2 : f_3 \bar{N}_3. \quad (4)$$

Общее число тетраэдров равно:

$$N = (F_1 + F_2 + F_3)^4. \quad (5)$$

При разворачивании уравнения 5 получим сумму; каждое слагаемое содержит по четыре множителя F_i с соответствующими индексами (F_1, F_2, F_3), обозначающими радиусы сфер, образующих тетраэдр, частота которого и равняется данному произведению.

Расчет производится итерационным методом. Сначала частотам, выраженным 5, присваивается произвольное значение, например, единица и производятся обсчеты тетраэдрной системы, определяется средний телесный угол A_i для каждого размера сфер. Затем по известным значениям частот сфер f_i (исходные данные) и по вычисленным значениям A_i , с учетом 2, определяем уточненные значения F_i , формула 4. Вычисления повторяются до тех пор, пока вновь полученное значение F_i отличается от предыдущего на заданную величину. Процесс сходится быстро и обычно можно ограничиться тремя циклами.

В целях оценки эффективности описанного метода расчета упаковок авторами проведен факторный эксперимент на стальных шарах, а затем такие же гранулометрические составы были обсчитаны на М-20. По данным эксперимента и расчетным были построены уравнения регрессии для плотности упаковки

$$\rho_M = 0.8046 + 0.0044X_1 - 0.0089X_2 - 0.0005X_3,$$

$$\rho_{ш} = 0.5975 + 0.01X_1 - 0.01X_2 - 0.0035X_3,$$

где - ρ_M , $\rho_{ш}$ - плотность модели и упаковки шаров,
 X_1 , X_2 , X_3 - относительные частоты сфер с радиусами, равными 1, 2 и 3 соответственно в штуках.

Вполне понятно завышенное значение плотности, расчетной, кроме того, плотность на шарах определялась без уплотнений, так как при вибрации мелкие и крупные шары расслаиваются.

Более благоприятно использовать описанный метод для случаев, когда важно не абсолютное значение характеристик, а направление их движения, то есть для решения экстремальных задач, нахождения наибольшей плотности, удельной поверхности и т.д.

Достоинством данного метода расчета является то, что вычисления осуществляются на ЦВМ, и при трех размерах шаров требуется машинного времени около 7 сек. Сравнение с экспериментальными данными показывают, что такая модель применима для получения характеристик несколько смещенных, реальных упаковок.

Л и т е р а т у р а

1. Бронштейн И.Н. и Семендяев К.А. Справочник по математике. Изд. "Наука", Москва, 1964.

2. M.J. Hogendijk.

*Random dense packing of
spheres with a discrete
distribution of the radii
Philips Res. Repts 18, 109-126, 1963*