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

Том 296 1976

ВЫЧИСЛЕНИЕ КООРДИНАЦИОННОГО ЧИСЛА СЛУЧАЙНЫХ СТРУКТУР

В. И. СЕСЬ, А. Б. ЧИГОРКО

(Представлена научным семинаром научно-исследовательского института электронной интроскопии)

В работах [1, 2] показана связь физико-механических свойств композиционных материалов со структурными характеристиками заполнителя и обосновывается применение модели для нахождения оценок этих характеристик. В качестве модели предлагается упаковка жестких неравных сфер с заданным распределением по размерам.

В настоящей работе предлагается метод нахождения координационного числа описанной выше упаковки, в которой распределение сфер по размерам задается частостью (f_i) сфер с радиусом ρ_i.

Метод основан на предположении, что координационное число для сферы с радиусом ρ_i существенно зависит от функции $\psi(\rho_j, \rho_i^{-1})$, которая равна возможному числу соседей сферы с радиусом ρ_i при покрытии ее сферами с радиусом ρ_i. Функция $\psi(\rho_j\, \rho_i^{-1})$ дискретна и зависит лишь от отношения радиусов ρ_j к ρ_i. Координационное число для сферы с радиусом ρ_i определяется случайными комбинациями взаимноконтактирующих сфер.

Ожидаемая частость контакта i-ой сферы с j-ой пропорциональна относительной частости сфер $f_j f_i^{-1}$ в упаковке и величине $(\rho_i+\rho_j)^2$, а выражение для нахождения $<\psi_i>$ как средне-взвешенного значения функции $\psi(\rho_j\, \rho_i^{-1})$ запишется в следующем виде:

$$<\Psi_i> = \frac{\Sigma\, f_j\, f_i^{-1}\, (\rho_i + \rho_j)^2\, \Psi\, (\rho_j\, \rho_i^{-1})}{\Sigma\, f_j f_i^{-1}\, (\rho_i + \rho_j)^2}. \tag{1}$$

В выражение (1) входит функция $\psi(\rho_j\, \rho_i^{-1})$, которая точно найдена для шести значений $(\rho_j \rho_i^{-1})$.

$\psi(\rho_j\, \rho_i^{-1})$	3	6	12	16	24	32
$\rho_j \rho_i^{-1}$	$\sqrt{3}(2-\sqrt{3})^{-1}$	$(\sqrt{2}-1)^{-1}$	1	$1{,}17^{-1}$	$1{,}63^{-1}$	$2{,}02^{-1}$

Приведенные значения $\psi(\rho_j\, \rho_i^{-1})$ предельны и для реальных упаковок несколько меньше, кроме того, функция неизвестна для промежуточных значений аргумента, поэтому нами предлагается находить функцию методом цифрового моделирования. На ЦВМ получается случайная упаковка сфер с радиусом ρ_j на поверхности i-й сферы. Функция $\psi(\rho_j\, \rho_i^{-1})$ численно равна числу упакованных сфер. Из центра i-й сферы касающие сферы видны под некоторым телесным углом, который вырезает из поверхности i-ой сферы окружность. Таким образом, задача по отысканию функции $\psi(\rho_j\, \rho_i^{-1})$ сводится к получению случайной упаковки окружностей на сфере.

Алгоритм получения упаковки предусматривает датчик случайных чисел для разыгрывания координат центра очередной укладываемой окружности и процедуру проверки на пересечении этой окружности с уже уложенными. Упаковка считается законченной, если число отказов подряд достигает заданного значения. Отказом считается пересечение пробной окружности с уложенными.

В приложении приведена программа нахождения функции ψ. Ниже приведены вычисленные на ЦВМ значения ψ для $\rho=1, 2, 3$.

$\psi(\rho_j \rho_i^{-1})$	3,13	4,06	5,35	7,34	13,85	17,95	35,1
$\rho_j \rho_i^{-1}$	3	2	3/2	1	2/3	1/2	1/3

Значения ψ находились по нескольким реализациям и поэтому получились дробными. В табл. 1 приведены результаты факторного эксперимента для упаковки стальных шаров, залитых парафином; гранулометрический состав в опытах выбирался в соответствии с матрицей плана; координационное число определялось непосредственным подсчетом для случайно выбранных шаров. Радиусы стальных шаров в трехфракционной упаковке равны 6,5; 9,9; 14,4. Во второй графе таблицы в четвертой строке указано координационное число, а ниже число шаров в выборке с $\rho_i=6{,}5$ с соответствующим координационным числом. В третьей графе координационное число выборки и в четвертой графе приведено расчетное значение $\langle\psi_i\rangle$, полученное по формуле (1) с учетом табличных значений функции $\psi(\rho_j \rho_i^{-1})$.

Расчетные значения $\langle\psi_{6,5}\rangle$ отклоняются от экспериментальных не более чем на 11%. Наибольшее отклонение наблюдается в первом опыте для выборки 25 шаров со стандартом 1,1. Доверительная оценка в соответствии с выражением $|a-\bar{x}|<t(P(k)\frac{s}{\sqrt{n}}$ и вероятностью 0,99 будет

$$\varepsilon = 2{,}787\ \frac{11}{\sqrt{25}} \approx 0{,}61\ .$$

Наибольшее отклонение, равное 0,5, не превышает доверительной оценки.

Таблица 1

		f_1	f_2	Ψ_i^*								$\langle\Psi_i^*\rangle$	$\langle\Psi_i\rangle$
Верхний уровень		28	19										
Нижний уровень		8	1										
Нулевой уровень		18	10										
Интервал варьирования		10	9										
1													
Опыт I	+	+	+	4	7	10	2	1	1	—	—	4,68	52
Опыт II	+	—	+	6	14	3	1	—	—	—	—	4,2	4,5
Опыт III	+	+	—	—	—	5	6	10	2	1	1	6,64	6,6
Опыт IV	+	—	—	2	7	11	4	1	—	—	—	4,8	5,4

Незначимое в статистическом смысле отклонение экспериментальных результатов от расчетных подтверждает состоятельность оценки координационного числа предлагаемым методом. И хотя оценки несколько смещены, но смещение не превышает доверительного интервала. Таким образом, предлагаемый метод можно использовать для нахождения абсолютных значений координационных чисел в зависимости от гранулометрического состава упаковки.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. И. Сорокер, В. И. Галактионов. Выбор оптимальных смесей фракционированных заполнителей для бетона заводов железобетонных изделий. Известия вузов, «Строительство и архитектура», Новосибирск, 1966, № 5.
2. В. А., Воробьев, И. Э. Наац, В. И. Сесь. Расчет гранулометрического состава заполнителей бетона. Известия вузов, «Строительство и архитектура», Новосибирск, 1970, № 10.