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 $\rho_i$.

Метод основан на предположении, что координационное число для сферы с радиусом $\rho_i$ существенно зависит от функции $\psi(\rho_j, \rho_i^{-1})$, которая равна возможному числу соседей сферы с радиусом $\rho_i$ при покрытии ее сферами с радиусом $\rho_i$. Функция $\psi(\rho_j\ \rho_i^{-1})$ дискретна и зависит лишь от отношения радиусов $\rho_j$ к $\rho_i$. Координационное число для сферы с радиусом $\rho_i$ 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 $\rho_j$ 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 $\psi$. Ниже приведены вычисленные на ЦВМ значения $\psi$ для $\rho = 1, 2, 3$.

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\psi(\rho_j\,\rho_1^{-1})$ | 3,13 | 4,06 | 5,35 | 7,34 | 13,85 | 17,95 | 35,1 |
| $\rho_j\ \rho_1^{-1}$ | 3 | 2 | 3/2 | 1 | 2/3 | 1/2 | 1/3 |

Значения $\psi$ 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 $\rho_1 = 6{,}5$ с соответствующим координационным числом. В третьей графе координационное число выборки и в четвертой графе приведено расчетное значение $\langle\psi_1\rangle$, полученное по формуле (1) с учетом табличных значений функции $\psi(\rho_j\,\rho_1^{-1})$.

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

| | | $f_1$ | $f_2$ | $\Psi_1^*$ | | | | | | | | $\langle\Psi_1^*\rangle$ | $\langle\Psi_1\rangle$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 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.