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

№ 251 1970

Статистическое исследование случайных структур на цифровых моделях

Воробьев В.А., Наац И.Э., Парватов Г.Н.

Представлена объединенным семинаром секторов
ДСМ и МРД НИИ ЭИ

Большинство задач радиационной химии и дефектоскопии имеют дело с материалами, в структуре которых отсутствует дальний порядок. Для определения взаимосвязи структурных особенностей с физическими свойствами таких материалов необходимо знать параметры, характеризующие структуру. Основными из них являются радиальная функция, функция распределения пар и координационное число [I].

При определении этих параметров структуры полезными оказываются физические модели различного типа [2, 3].

Физические модели случайных структур представляют собой громозкие инженерные сооружения [3], поэтому возможности их при статистическом исследовании ограничены.

Более перспективны в этом отношении математические модели [4, 5], позволяющие применение современных ЦВМ для их статистического исследования.

В настоящей работе проводится статистическое исследование случайных структур на примере одноатомных флюидов на ЦВМ М-20 с помощью их математических моделей.

В работе [5] описаны две математические модели флюидов, представляющие молекулы в виде случайных совокупностей непересекающихся шаров в ограниченном пространстве с плотностями заполнения 0,32 .. 0,6I. Вычислим для этих моделей функцию распределения пар $g_i(R_j)$ центров шаров, находящихся на определенном расстоянии друг от друга и радиальную функцию $\rho_i(R_j)$.

Для определения радиальной функции рассмотрим шар с центром в точке "O" и элемент объема dV на расстоянии R от

" 0 ", тогда произведение $\rho_i(R_j)dV$ есть вероятность того, что центр другого шара лежит в dV.

Аналогично, для ансамбля из N шаров функция пар $g_i(R_j)$ определяет вероятность того, что два элемента dV_1 и dV_2, содержащие центры шаров, разделены расстоянием R, точнее, произведение $Ng_i(R_j)dV_1 dV_2$ есть взаимная вероятность найти пару шаров, разделенных расстоянием R. Здесь N число шаров в единице объема.

Вычисления функций выполнены методом статистических испытаний на ЦВМ М-20 по следующим алгоритмам для обоих моделей. Для вычисления радиальных функций в центральной области упаковки (для уменьшения влияния границ [6]) центр произвольно выбранного шара принимался за точку отсчета и подсчитывались шары, находящиеся от неё на расстоянии $R_i + 0{,}005$. Вычисления повторялись для десяти произвольных центров и для каждого интервала находилось среднее число шаров $\bar{N}_i$. Вычисление среднего значения радиальной функции для каждого интервала производилось по формуле

$$\rho(R_i) = \bar{N}_i \, V_ш / V_i \, .$$

Здесь V_i - объем i-ой сферы,

$V_ш$ - объем шара,

$\bar{N}_i$ - среднее число центров в i-ой сфере.

Функции распределения пар получены для центральных областей упаковок прямым перебором, то есть считались шары с одинаковыми расстояниями между центрами. Таким образом, получили общее число переборов для фиксированного расстояния равное $2N_{пар} = n(n-1)$, где n - число шаров участвующих в проверке.

Функция $g_i R_j$ находилась в интервале между R и $R_i + 0{,}005$. Наименьшее расстояние между шарами равно диаметру шара 0,I , а наибольшее - диаметру внутренней области, равному 0,6. Результаты вычислений представляют собой средние значения из десяти реализаций со стандартным отклонением 3%. Время вычисления 20 мин.

Из анализа функций распределения пар (рис.3) видно, что чаще всего встречаются пары с расстояниями между центрами в интервалах 0,2-0,3 для модели плотной упаковки и 0,25-0,45 для модели редкой упаковки.

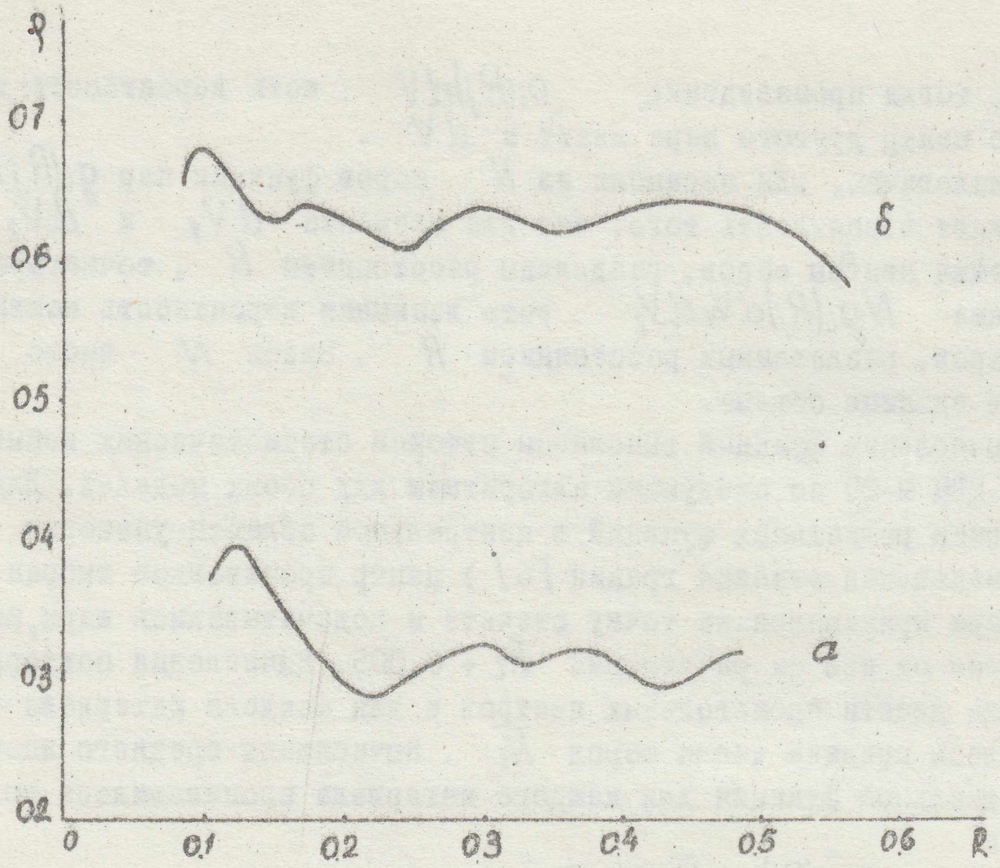

Рис. I. Зависимость

а – для первой модели

б – взято из работы 4

R – измерение в диаметрах шара

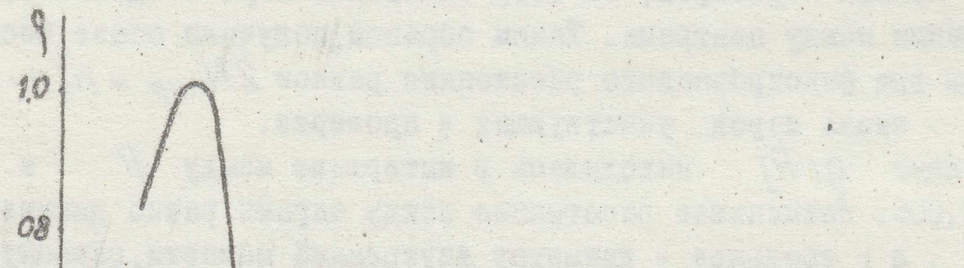

Рис. 2. Зависимость

Вторая модель

R – в диаметрах шара

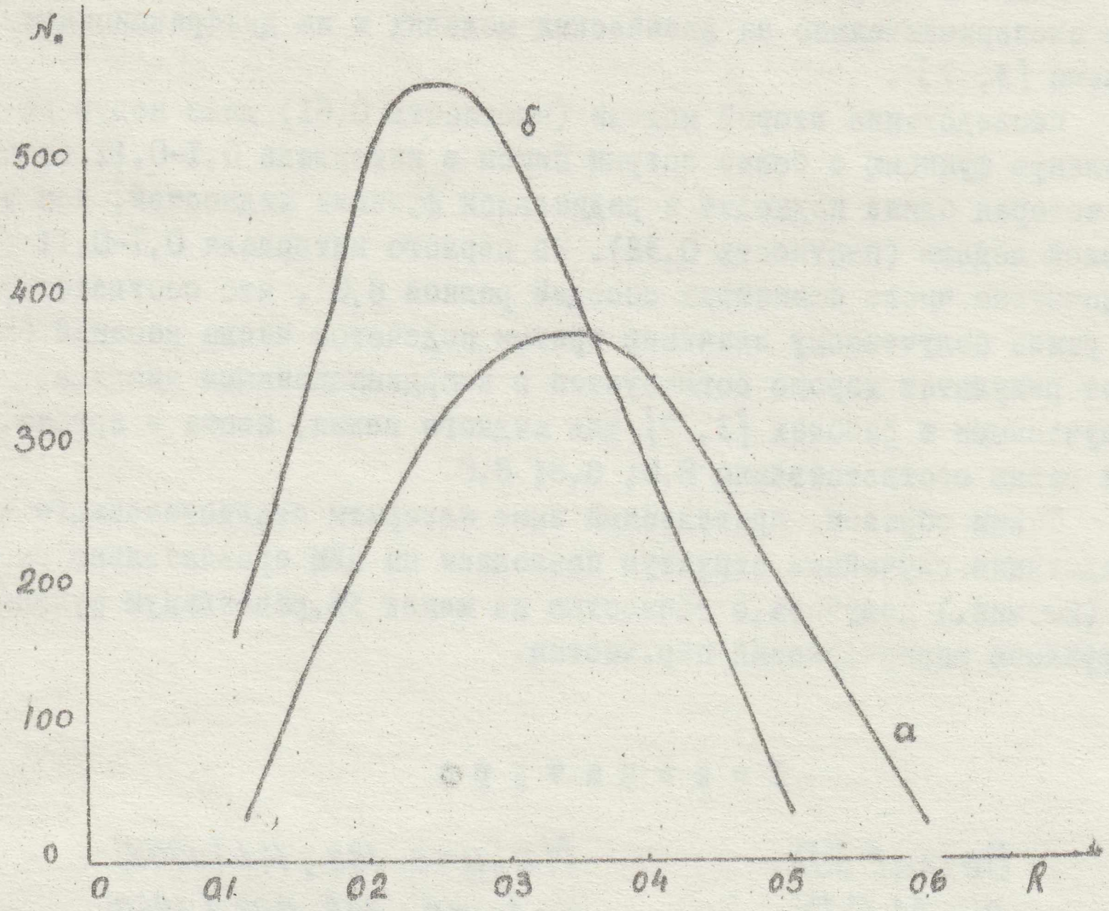

Рис. 3. Функция распределения пар.
а – первая модель
б – вторая модель
R – расстояние в диаметрах шара
N_n – среднее число пар

Радиальные функции (рис.I, 2) согласуются с полученными ранее экспериментально на физических моделях и из диффракционных картин [3, 7] .

Исследование второй модели (плотность 0,6I) дало новую радиальную функцию с более острым пиком в интервале 0,I-0,II (рис. 2), которая ближе подходит к радиальной функции жидкостей, чем в первой модели (плотность 0,32). Из первого интервала 0,I-0,II подсчитано число ближайших соседей равное 8,0 , что соответствует ранее полученному значению прямым подсчетом числа касаний [5]. Этот результат хорошо согласуется с координационными числами, полученными в работах [3, 7] для жидкого гелия, неона и аргона. Они равны соответственно 8,5; 8,8; 8,0.

Таким образом, приведенный выше алгоритм статистического исследования случайных структур позволяет на ЦВМ сравнительно быстро (20 мин.) получить, с точностью не менее 3%, радиальную функцию и функцию распределения пар.частиц.

Литература

I. Bernal J.D., Nature 183, 141 (1959)

2. Scott G.D., Nature 188, 908 (1960)

3. Bernal J.D., Mason J., Nature 188, 910 (1960)

4. Воробьев В.А., Кивран В.К., Наац И.Э. "Цифровое моделирование случайных упаковок сфер равных диаметров с малой плотностью заполнения". Сборник ТПИ I969.

5. Наац И.Э., Парватов Г.Н. "Цифровые модели структур флюидов". Настоящий сборник.

6. Наац И.Э., Парватов Г.Н. "К оценке плотности при цифровом моделировании". Сборник ТПИ I969.

7. Furukawa K., Nature 184, 1208 (1959)