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

№ 251 1970

Метод расчета случайных структур композиционных материалов

Воробьев В.А., Сесь 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, отсюда 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 согласовалось 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 структуры использовать вероятностно-геометрическую модель пространственного расположения структурообразователей с последующим обсчетом 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 обсчета модели предполагаем, что можно получить предельно плотную упаковку. Для пояснения обратимся к рис.I.

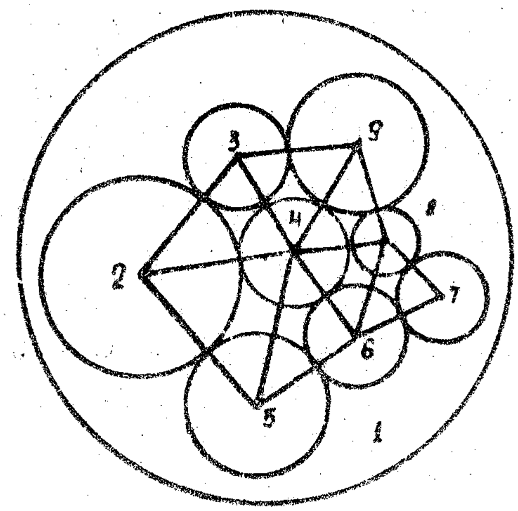

Рис.I

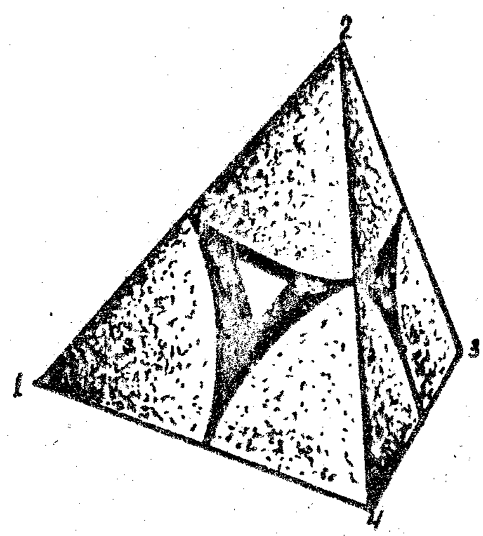

Рис.2

На рис.I 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 (I,2,3,4; I,3,4,9; I,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 I,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 [I] 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]

$$\frac{1}{r_o}=\frac{1}{2}\left\{\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}+\frac{1}{r_3}+\frac{1}{r_4}\right)+(3p)^{1/3}\right\}, \qquad (I)$$

где r_o - 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

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

Число соседей для сферы будет равно [2]

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

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 частостью f_1, f_2 и f_3, соответственно. Тогда частость тетраэдров, включающих i-ую сферу, будет пропорциональна числу i-х сфер и среднему числу тетраэдров, включающих одну i-ую сферу [2]

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

Общее число тетраэдров равно:

$$n = (F_1 + F_2 + F_3)^4 . \qquad (5)$$

При развертывании уравнения 5 получим сумму; каждое слагаемое содержит по четыре сомножителя F с соответствующими индексами (F_1 , F_2 , F_3), обозначающими радиусы сфер, образующих тетраэдр, частость которого и равняется данному произведению.

Расчет производится иттерационным методом. Сначала частостям, выраженным 5, присваивается произвольное значение, например, единица и производятся обсчеты тетраэдной системы, определяется средний телесный угол A_i для каждого размера сфер. Затем по известным значениям частостей 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

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

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

где ρ_M, $\rho_{ш}$ – плотность модели и упаковки шаров,
X_1, X_2, X_3 – относительные частости сфер с радиусами, равными I,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, нахождение наибольшой 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.

Литература

I. 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