

ИРРЕГУЛЯРНЫЕ УПАКОВКИ ФИГУР РАЗНЫХ РАЗМЕРОВ И ФОРМ*

IRREGULAR PACKING OF FIGURES WITH VARIABLE SIZE AND SHAPE

A.S. ГОЛУБЕВ, М.Ю. ЗВЯГИН, В.Г. ПРОКОШЕВ, Л.И. САМОЙЛОВА
A.S. GOLUBEV, M.YU. ZVYAGIN, V.G. PROKOSHEV, L.I. SAMOYLOVA

(Владимирский государственный университет)
(Vladimir State University)

E-mail: andrey.golubev@vlsu.ru muz1953@yandex.ru prokoshev_vg@vlsu.ru amlubov@mail.ru

Описан обобщенный подход моделирования иррегулярных структур материалов и многокомпонентных смесей на основе плотных упаковок шаров. Предложен алгоритм и экспериментальная реализация расчета средней плотности смеси.

We consider a generalized approach for modeling of irregular structures of materials and multicomponent mixtures based on the close-packing of spheres. The algorithm and the experimental implementation of mixture's average density calculation are provided.

Ключевые слова: упаковки шаров, плотность смеси, иррегулярные структуры материалов.

Keywords: packing of spheres, density of the mixture, irregular structures of materials.

Тема плотных упаковок шаров разрабатывается давно и интенсивно [1], [2]. Результаты, полученные в рамках этого направления, имеют широкие и, зачастую, неожиданные приложения во многих сферах. Вместе с тем они применяются и в традиционных областях – химии, кристаллографии и т.д. Особенностью подобного рода упаковок является регулярный характер, наличие некоторой повторяемости, что приводит к такому понятию, как "структурный элемент заполнения". Под этим понимается некоторое специальное заполнение части пространства, которое потом регулярно воспроизводится во всем пространстве. В основу подобных структур положены принципы детерминированности и повторяемости. В то же время идеология, заложенная в изучение анонсированной в названии статьи темы "иррегу-

лярные упаковки фигур разных размеров и форм", является в некотором смысле антиподом данных принципов. Невозможность точно описать характер заполнения той или иной части пространства приводит к мысли о необходимости выделения лишь некоторых общих положений, фиксирующих тенденции в заполнении пространства.

Отметим, что задачи, связанные с изучением иррегулярных структур, весьма распространены. Они обусловлены широким использованием материалов на основе многокомпонентных смесей, например, в пищевой, легкой и строительной промышленности. Для определенности мы сконцентрируем внимание на проблеме подбора фракционного состава смеси для достижения требуемых характеристик.

* Работа выполнена в рамках государственного задания ВлГУ №2014/13 в сфере научной деятельности.

Рассмотрим общие положения.

1. "Твердой частице" сопоставляется другое тело – "ассоциированный шар", – шар, объем которого равен объему частицы, а центр находится в центре ее тяжести. Частицы касаются, а ассоциированные шары, возможно, и нет. Поэтому следует ввести еще один шар – "контактный шар". Иными словами, частица заменяется на два, вложенных друг в друга шара. Таким образом, появляется такое понятие, как "пленка". Именно она должна отслеживать различие типов контактов частиц разной формы наиболее простым способом. Рассмотрим конкретно два варианта задания толщины пленки, а именно: $x = r + f(r)$, где 1) $f(r) = d$ ($d \equiv \text{const}$); 2) $f(r) = kr$ ($k \equiv \text{const}$).

2. Касающиеся частицы имеют существенно отличающиеся размеры. Поэтому следует выбрать наиболее простую фигуру в пространстве, которая моделирует это обстоятельство. Простейшая фигура – тетраэдр. Так появляется понятие "случайной конфигурации" и ее плотности заполнения (рис. 1 – конфигурация частиц, расположенных в вершинах тетраэдра).

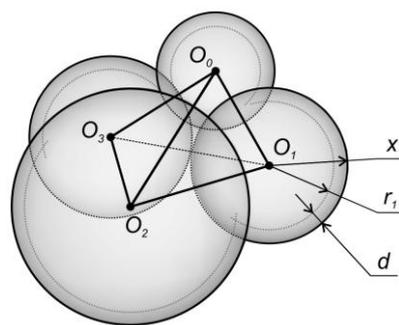


Рис. 1

3. Предполагается, что частицы (или заменяющие их шары) встречаются с определенными частотами. То есть изначально задается состав (табл. 1 – исходный минеральный состав смеси), сформированный из размеров частиц (шаров) r_i и частот их использования p_i ($i = 1, \dots, n$). При этом, очевидно, $\sum p_i = 1$. Понятно, что и конфигурации также возникают с разными частотами. Простейший способ, но необязательно самый верный, это свободный розыгрыш. Возникает необходимость на введение некоторых ограничений (фильтров). Они контролируют, используя те или иные причины, возможность или невозможность некоторых конфигураций.

Таблица 1

Фракция смеси (тип частиц)	1	2	...	n-1	n
Размер частиц	r_1	r_2	...	r_{n-1}	r_n
Частота частиц	p_1	p_2	...	p_{n-1}	p_n

Алгоритм расчета следующий. Приведем рабочие вычисления. Пусть три вектора a_j ($j = 1, 2, 3$) имеют единичную длину, то есть $\|a_j\| = 1$. Обозначим:

$$a'_1 = \frac{a_1 - a_3 \langle a_1, a_3 \rangle}{\langle a_1, a_3 \rangle}, \quad a'_2 = \frac{a_2 - a_3 \langle a_2, a_3 \rangle}{\langle a_2, a_3 \rangle}.$$

Тогда:

$$\langle a'_1, a'_2 \rangle = \frac{\langle a_1, a_2 \rangle - \langle a_1, a_3 \rangle \langle a_2, a_3 \rangle}{\langle a_1, a_3 \rangle \langle a_2, a_3 \rangle},$$

$$\langle a'_1, a'_1 \rangle = \frac{1 - \langle a_1, a_3 \rangle^2}{\langle a_1, a_3 \rangle^2},$$

$$\langle a'_2, a'_2 \rangle = \frac{1 - \langle a_2, a_3 \rangle^2}{\langle a_2, a_3 \rangle^2},$$

$$\cos \phi_3 = \frac{\langle a_1, a_2 \rangle - \langle a_1, a_3 \rangle \langle a_2, a_3 \rangle}{\sqrt{1 - \langle a_1, a_3 \rangle^2} \cdot \sqrt{1 - \langle a_2, a_3 \rangle^2}},$$

$$\langle a_1, a_2 \rangle = \cos \alpha_{12}, \quad \langle a_1, a_3 \rangle = \cos \alpha_{13},$$

$$\langle a_2, a_3 \rangle = \cos \alpha_{23}.$$

Объем параллелепипеда, построенного на векторах a_j , легко можно вычислить при помощи определителя Грама G :

$$G^2 = \begin{vmatrix} 1 & \langle a_1, a_2 \rangle & \langle a_1, a_3 \rangle \\ \langle a_1, a_2 \rangle & 1 & \langle a_2, a_3 \rangle \\ \langle a_1, a_3 \rangle & \langle a_2, a_3 \rangle & 1 \end{vmatrix}. \quad (1)$$

Здесь $\langle a_u, a_v \rangle$ означает скалярное произведение векторов a_u и a_v ; α_{12} , α_{13} , α_{23} – плоские углы между соответствующими векторами a_j ; ϕ_3 – двугранный угол, образованный плоскостями, построенными на векторах $\{a_1, a_3\}$, $\{a_2, a_3\}$. Два других двугранных угла ϕ_1 , ϕ_2 вычисляются по аналогичной схеме путем перестановки индексов. В итоге получаем рабочую формулу для вычисления двугрannого угла через плоские углы:

$$\cos \phi_3 = \frac{\cos \alpha_{12} - \cos \alpha_{13} \cdot \cos \alpha_{23}}{\sqrt{1 - \cos^2 \alpha_{13}} \cdot \sqrt{1 - \cos^2 \alpha_{23}}}.$$

Объем части шара, которую выделяют векторы единичной длины a_j внутри шара (сегмент), вычисляется по формуле:

$$V = 1/3(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 - \pi). \quad (2)$$

Пусть $\{O_0, O_1, O_2, O_3\}$ – тетраэдр, образованный центрами четырех касающихся шаров. Обозначим радиусы этих шаров через x_0 , x_1 , x_2 , x_3 , причем $x_i = r_i + d$. Таким образом, длины векторов O_0O_j , исходящих из O_0 , имеют величины $x_0 + x_j$ (то же самое справедливо для любой пары вершин O_iO_j). Нормируем O_0O_j , получаем векторы a_j , о которых шла речь выше. Нам, собственно, нужны только косинусы плоских углов при вершине O_0 , а именно α_{12} , α_{13} , α_{23} . Их легко найти, зная длины сторон граней тетраэдра. Например, грань $O_0O_1O_2$ (треугольник) имеет длины $x_0 + x_1$, $x_0 + x_2$, $x_1 + x_2$. Таким образом, косинус угла треугольника при вершине O_0 имеет вид:

$$\cos \alpha_{12} = 1 - \frac{2x_1x_2}{(x_0 + x_1)(x_0 + x_2)}.$$

Аналогично вычисляются и другие плоские углы граней при вершине O_0 , точнее, их косинусы. Объем сегмента, то есть части шара радиуса x_0 с центром в точке O_0 , который содержится внутри тетраэдра, вычисляется с небольшой коррекцией по формуле (2), а именно:

$$V(O_0; r_0) = 1/3(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 - \pi)r_0^3.$$

Проделав то же самое для остальных вершин, найдем объемы всех четырех сегментов. Недостающим элементом является сам объем тетраэдра $\{O_0, O_1, O_2, O_3\}$. Его легко вычислить, используя (1) и некоторую коррекцию объема. Объем параллелепипеда, построенного на векторах O_0O_1 , O_0O_2 , O_0O_3 , получится, если G (см. (1)) умножим на $(x_0 + x_1)(x_0 + x_2)(x_0 + x_3)$. Объем тетраэдра V_T получится, если еще дополнительно умножить на $1/6$. Итак, доля "условно твердой" составляющей заполнения внутренностей тетраэдра дается формулой:

$$\rho = [V(O_0; r_0) + V(O_1; r_1) + V(O_2; r_2) + V(O_3; r_3)] / V_T.$$

Сразу оговоримся, что иногда будем пользоваться двойственным понятием – "пористость заполнения тетраэдра" – это величина $1 - \rho$.

Фильтр 1. Изначально все три грани $O_0O_2O_3$, $O_0O_1O_3$, $O_0O_1O_2$ мы рассматриваем изолировано, как отдельные треугольники. Поэтому $\cos \alpha_{12}$, $\cos \alpha_{13}$, $\cos \alpha_{23}$ можно вычислить по формуле без каких-либо сложностей. Следовательно, можно составить определитель G формально. Он принимает смысл определителя Грама, если радиусы шаров x_0 , x_1 , x_2 , x_3 сбалансированы, то есть из шаров можно выложить тетраэдр. Для этого наименьший шар должен иметь радиус, не превосходящий высоту тетраэдра. Будем считать, что шары упорядочены по размеру, значит x_0 – минимальный радиус. Ве-

личины $x_1 + x_3$, $x_1 + x_2$, $x_2 + x_3$ – это длины сторон грани $O_1O_2O_3$, площадь которой $S = \sqrt{x_1x_2x_3(x_1 + x_2 + x_3)}$ (формула Герона). Высота H , опущенная на нее из вершины O_0 , определяется соотношением $V/6 = HS/3$. Ограничение состоит в выполнении неравенства $H \geq x_0$. Таким образом, условие, которое составляет смысл первого фильтра, имеет вид:

$$x_0 \leq \sqrt[3]{2S}.$$

Фильтр 2. Он состоит из двух неравенств, которые накладывают ограничения на величину ρ – плотность заполнения конфигурации:

$$0,01s_1 < \rho < \frac{1}{1 + 0,01s_2}.$$

Здесь s_1, s_2 – числа в диапазоне от 0 до 100. Сама необходимость введения "коридора плотностей", а также форма ограничений обусловлена особенностями предполагаемого использования алгоритма.

Имплементация алгоритма состоит в последовательном переборе конфигураций. Вероятность w конфигурации определяется свободным розыгрышем, который осуществляется на основе соотношения фракций смеси. Если выполняются ограничения фильтров, то происходит следующее. По плотности ρ определяется "карман", в который помещается соответствующая частота w . В итоге в карманах накапливаются частоты конфигураций. После нормировки, сумма частот должна быть равна 1, получается гистограмма. Она и средняя величина плотности $P_{cp} \equiv \sum w\rho$ и есть итог работы алгоритма. Суть настройки алгоритма заключается в подборе значений фильтров, которые являются входными параметрами. Используя последовательность корректирующих итераций, добиваемся нужного эффекта. Заметим, что алгоритм носит формальный ха-

рактер. Он является общим, и не связан с каким-либо конкретным приложением.

Программная реализация. Испытания предложенного алгоритма выполнялись при помощи специально разработанной программы на языке JavaScript, имеющей html-интерфейс. Такой "своеобразный" для задач математического моделирования выбор был сделан вследствие того, что объем и сложность вычислений здесь сравнительно небольшие, а удобства как для разработчика, так и для специалиста-экспериментатора – значительные, так как нет необходимости заботиться о сложностях конфигурирования или о наличии "тяжелых" математических пакетов.

Приложение состоит из одной html-страницы, файла с исходными данными и нескольких популярных JavaScript-библиотек: jQuery (<https://jquery.com>) в сочетании с jQueryUI (<https://jqueryui.com>) и Highcharts (<http://www.highcharts.com>). Они используются для манипулирования структурой html-документа, отображения типовых интерфейсных блоков и построения гистограммы распределения плотности.

Для начала работы пользователю достаточно открыть в браузере html-файл приложения. Оконный интерфейс страницы включает следующие разделы.

- Количество фракций смеси: поле, позволяющее задать параметр n – число типов частиц, используемых в модели.
- Состав фракций: таблица, содержащая для каждого типа частиц i поле для ввода размера частицы r_i и процентной доли p_i данного типа частиц в смеси.
- Общие параметры смеси: поля для задания толщины пленки d , ограничений s_1 и s_2 на плотность смеси.
- Визуализация результатов расчета: гистограмма распределения частот конфигурации частиц в зависимости от плотности.
- Вычисленное значение средней плотности P_{cp} .
- Таблица частот: отображаемое по запросу пользователя диалоговое окно с детальной таблицей, содержащей по каждой

реализуемой (не отброшенной фильтрами) конфигурации частиц вычисленную для нее плотность ρ и частоту w . Эту таблицу можно использовать для дальнейшего статистического анализа.

Поскольку количество фракций может быть достаточно большим, для удобства ввода параметров смеси в состав программы включен текстовый файл, позволяющий задать исходные значения размеров и долей частиц.

Как уже говорилось, алгоритм носит общий характер, его имплементация в приложения потребует тщательной проработки и, возможно, добавления некоторых дополнительных структур и атрибутов. Нужно отметить, что в ранних работах один из авторов статьи успешно применял в расчетах свойств грунтов подобный алгоритм [3], [4].

Опишем принципиальную схему применения современной версии алгоритма, например, для расчета физических характеристик асфальтобетонов. Допустим, имеется некоторая интересующая нас группа асфальтобетонов, про которую известно: 1) возможные диапазоны вариации фракций минеральной части; 2) возможный диапазон изменения "вяжущей" составляющей (битум). Для некоторых смесей из группы проводился натурный эксперимент, в результате чего были измерены физические характеристики (зерновой состав, содержание битума, плотность, водонасыщение). Состав фракций и содержание вяжущей подвергаются некоторой вариативности. Хотелось бы получать список физических параметров иных смесей из группы расчетным способом, не прибегая к трудоемкому эксперименту.

Схема действий следующая. Главной характеристикой, на основании которой строится расчет плотности минеральной составляющей P_{cp} , является приведенная выше табл. 1. Управляющими параметрами являются значения фильтров. Конвертируем физические характеристики смеси в формальные параметры таблицы, полученные значения вводим в алгоритм. Устанавливаем начальные значения фильтров. Рассчитываем P_{cp} , совершаем обрат-

ную конвертацию в физические характеристики. Сравняем их с имеющимися экспериментальными данными. Корректируем результаты расчетов, меняя значения параметров фильтров. Считается, что результат достигнут, если расчетные значения и экспериментальные данные совпадают. В этом случае найденные значения управляющих параметров применяются уже для всей изучаемой группы.

Приведем пример применения алгоритма для конкретной ситуации расчета свойств асфальтобетона. Для этого, прежде всего, необходимо организовать прямую и обратную конвертацию формальных параметров, используемых в работе алгоритма, и реальных физических характеристик материалов.

Часть 1. Здесь и далее используется ГОСТ 12801. Материалы на основе органических вяжущих для дорожного и аэродромного строительства. Методы испытаний. Стандартные данные о составе задаются табл. 1, но доли минеральной части соотносятся с числом сто, то есть $q_m = q_1 + \dots + q_n = 100$ ($p_i = 0,01 \cdot q_i$). К данным таблицы добавляются плотности минеральной части ρ_1, \dots, ρ_n и битума ρ^6 в физических единицах ($г/см^3$) и количество битума q_6 (г), сверх массы минеральной части $q_m = 100$. Дополнительно вычисляются:

$$\rho^m = \frac{q_m}{q_1/\rho_1 + q_2/\rho_2 + \dots + q_n/\rho_n}$$

– истинная плотность минеральной части,

$$\rho = \frac{q_m + q_6}{q_m/\rho^m + q_6/\rho^6}$$

– истинная плотность смеси.

Вводятся дополнительные параметры:

$$p_6 = 0,01 q_6 \text{ и } p'_6 = 0,01 \frac{\rho^m}{\rho^6} q_6.$$

Часть 2. Далее проводится натурный эксперимент. Основным результатом эксперимента является "средняя плотность образ-

цов" ρ_m ; подчеркнем, что она определяется экспериментально по методике ГОСТа 12801. После чего только на его основе и при помощи параметров, введенных в части 1, вычисляются некоторые другие производные экспериментальные характеристики. А именно: 1) средняя плотность смеси ρ_m/ρ ; 2) средняя плотность минеральной части $\rho_m^m = \rho_m/(1+0,01q_6)$. Как следствие, вводятся различные виды пористости:

$$V_{пор}^m = (1 - \rho_m^m / \rho^m) \cdot 100$$

– пористость минеральной части;

$$V_{пор}^o = (1 - \rho_m / \rho) \cdot 100$$

– остаточная пористость.

Часть 3. Запускаем приложение, реализующее алгоритм расчета. На вход подаются данные табл. 1. В числовые поля данные о составе заносятся в процентах, то есть вводим значения q_1 . Также в процентах задается и $s_2 = 100p'_6$, то есть в соответствующие поля заносятся s_1 и s_2 . Добавляется дополнительный параметр – толщина пленки d . Вместе с s_1 , s_2 она играет роль управляющего параметра. Итак, на выходе появляется число P_{cp} . Ему придается смысл доли объема, заполняемого минеральной компонентой. Это ключевой расчетный параметр. Используя его и параметры, введенные в части 1, формируются некоторые дополнительные характеристики. Они призваны играть роль аналогов параметров, введенных в части 2 на основе эксперимента. В итоге они должны их заменить.

Пористости измеряются в долях 1 (или процентах). Итак, $1 - P_{cp}$ – пористость минеральной составляющей; $1 - P_{cp}(1 + \rho'_6)$ – остаточная пористость. Вводим также другие физические параметры. А именно: физическая плотность ($г/см^3$) асфальтобетона

$\rho^m P_{cp}(1 + \rho_6)$. Существенно, что эти параметры не используют данные эксперимента (часть 2). Теперь нужно сопоставить их с аналогами, которые строятся на основе другого источника информации, то есть уже эксперимента. Приводим список соответствия:

$$\rho_m \sim \rho^m P_{cp}(1 + \rho_6)$$

– плотность смеси;

$$1 - \rho_m^m / \rho^m \sim 1 - P_{cp}$$

– пористость минеральной части;

$$1 - \rho_m / \rho \sim 1 - P_{cp}(1 + 0,01(\rho^m / \rho^6)q_6)$$

– остаточная пористость.

Теперь приведем данные расчетов, которые были получены с помощью применения алгоритма для реального асфальтобетона. Для расчета взят непрерывный зерновой состав минеральной части асфальтобетонной смеси для плотного асфальтобетона типа А – из ГОСТа 9128. Смеси асфальтобетонные, полимерасфальтобетонные, асфальтобетон, полимерасфальтобетон для автомобильных дорог и аэродромов. Технические условия – для верхнего слоя покрытия при минимальном и максимальном содержании минерального порошка (табл. 2 – зерновой состав асфальтобетонной смеси по ГОСТу 9128). Ниже приведены результаты расчета плотности и остаточной пористости для плотного асфальтобетона типа А при разном количестве битума (табл. 3 – результаты расчета "плотной упаковки" для асфальтобетона). Ориентировочное содержание битума (сверх 100%) в смесях принято по ГОСТу 9128. Истинная плотность материалов, применяемых в асфальтобетонных смесях Владимирской области: щебня, песка, минерального порошка, соответствует средним условиям.

Таблица 2

Вид и тип асфальтобетона		Радиус зерен, мм										
		15,00	8,75	6,25	3,75	1,88	0,94	0,47	0,24	0,12	0,06	0,02
		Частные остатки на ситах (частота использования), %										
Плотный тип А	min	10	15	13	22	12	8	6	4	4	2	4
	max	-	-	-	50	12	10	8	4	4	2	10

Таблица 3

Вид и тип асфальтобетона	Содержание битума, %	Доля зерен P_{min}	Доля зерен и битума ρ_{AB}	Плотность асфальтобетона, ρ_{AB}	Остаточная пористость, $V_{пор}$, %	Пористость минеральной части $V_{м пор}$, %
Тип А min	4,5	0,850	0,953	2,431	4,747	15,01
	5	0,846	0,960	2,432	4,015	15,37
	5,5	0,843	0,967	2,433	3,316	15,75
	6	0,839	0,974	2,434	2,592	16,1
Тип А max	4,5	0,850	0,952	2,427	4,774	15,02
	5	0,850	0,963	2,438	3,670	15,05
	5,5	0,839	0,963	2,419	3,725	16,09
	6	0,838	0,972	2,426	2,787	16,25
ГОСТ 9128	-	-	-	-	2,5...5,0	14...19

ВЫВОДЫ

Сопоставляя остаточную пористость, полученную по результатам расчета алгоритма для асфальтобетона, с требованиями ГОСТа 9128 для плотного типа А: 2,5...5%, получаем полное соответствие. По пористости минеральной части требования ГОСТа 9128 для типа А: 14...19% сопоставимы с расчетными.

Аналогичные выводы были сделаны и для других видов и типов асфальтобетона.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шаскольская М.П. Кристаллография. – М.: Высшая школа, 1984.
2. Conway J.H. and Sloane N.J.A. Sphere Packings, Lattices and Groups, 3rd ed. – Springer 1998.
3. Самойлова Л.И. Метод назначения требуемой плотности грунта // Автомобильные дороги. – № 8, 1986. С. 10.

4. Самойлова Л.И. Теоретический аппарат расчета оптимальных характеристик грунта // Сб. трудов МАДИ: Повышение сроков службы и качества автомобильных дорог. – М., 1986. С. 25...35.

REFERENCES

1. Shaskol'skaja M.P. Kristallografija. – М.: Vysshaja shkola, 1984.
2. Conway J.H. and Sloane N.J.A. Sphere Packings, Lattices and Groups, 3rd ed. – Springer 1998.
3. Samojlova L.I. Metod naznachenija trebuemoj plotnosti grunta // Avtomobil'nye dorogi. – № 8, 1986. С. 10.
4. Samojlova L.I. Teoreticheskij apparat rascheta optimal'nyh harakteristik grunta // Sb. trudov MADI: Povyshenie srokov sluzhby i kachestva avtomobil'nyh dorog. – М., 1986. S. 25...35.

Рекомендована кафедрой менеджмента и маркетинга. Поступила 26.10.16.