

## СТОХАСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МНОГОЧАСТИЧНОЙ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДИСПЕРСНЫХ СТРУКТУР

**Введение.** Одной из ключевых проблем разработки и исследования дисперсных систем и композиционных материалов (композигов) с сильной механической неоднородностью компонентов является получение достоверной информации об их внутренней структуре. Структура дисперсных систем, как правило, неупорядочена и сложна, поэтому ее адекватное описание при помощи детерминированных методов невозможно. Получить необходимые результаты позволяют развивающиеся в последнее время стохастические методы анализа сложных структур с применением имитационного компьютерного моделирования. Моделирование случайных структур должно базироваться на применении надежных и эффективных алгоритмов синтеза геометрических структур, адекватно отражающих реальную морфологию композита.

Стандартные методы представления многочастичных структур на регулярных пространственных или плоских решетках мало пригодны для моделирования полидисперсных неупорядоченных систем, поскольку либо не позволяют добиться требуемой плотности упаковки дисперсных частиц, либо не обеспечивают макроскопическую однородность их расположения. Эффективным средством моделирования структуры в этих случаях является внеячейный метод, подразумевающий размещение составляющих систему элементов (дисперсных частиц) без использования какой-либо пространственной сетки [1, 2].

Среди динамических методов, позволяющих генерировать модели многочастичных систем с высокой плотностью упаковки, важное место занимают насыпные алгоритмы – они имитируют реальный процесс заполнения контейнера падающими сверху сферическими частицами [3, 4].

В работе описан алгоритм синтеза внеячейных моделей плотных случайных упаковок методом «насыпки» с генерацией соответствующей матрицы связности частиц, применимой для последующего топологического анализа неупорядоченных структур.

**Синтез нерегулярных плоских структур методом «насыпки».** Алгоритм синтеза моно- и полифракционных плотных случайных упаковок из жестких частиц сферической формы (плоских дисков в двумерном случае) основывается на методе «насыпки» и заключается в последовательном заполнении контейнера падающими частицами таким образом, что каждая новая частица укладывается в углубление между уже упакованными. Синтез стохастической структуры (случайно неупорядоченной упаковки частиц) включает следующие этапы.

0) Определение исходных данных: гранулометрического состава дисперсной фазы – распределения  $g(R)$  дисков по размерам (для монодисперсной системы  $R = R_0 = const$ ), а также длины  $L$  и высоты  $H$  контейнера (центр системы координат  $(xOy)$  при этом соответствует его левому нижнему углу).

1) Генерация случайных значений: радиуса  $R_j$  очередной размещаемой частицы (в диапазоне  $R_{min} \dots R_{max}$  согласно распределению  $g(R)$ ) и ее начальной координаты  $x_{j0}$  (равновероятно в диапазоне  $0 \dots L$ ). При этом начальная координата  $y_{j0} = H$  является постоянной, а падение частицы имитируется

уменьшением координаты  $y_j$  с некоторым шагом  $\Delta y \ll R_{min}$ .

2) Ограничение области по ширине контейнера, в которой расположены частицы-«препятствия», с которыми потенциально может соприкоснуться падающая частица. Для монодисперсной системы данную область достаточно определить диапазоном  $x_{j0} \pm 10R_0$ , в полидисперсной системе она будет зависеть от соотношения  $R_{max}/R_{min}$ . Если в этой области нет ни одной ранее упакованной частицы – падающая частица помещается с координатами  $(x_{j0}, R_j)$  на дне контейнера, с переходом к этапу 6. В противном случае номера найденных в заданной области частиц сохраняются в массиве возможных препятствий.

3) Пошаговое уменьшение координаты  $y_j$  с поиском в массиве возможных препятствий таких частиц, с которыми падающая частица фактически соприкасается или пересекается, посредством анализа Евклидова расстояния

$D_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$  между ней и препятствием.

Пересечение частиц, которое может возникнуть вследствие ненулевого шага  $\Delta y$  и соответствует условию по условию

$D_{ij} < R_i + R_j$ , устраняется корректировкой координат падающей частицы (обратным ее движением) до выполнения равенства  $D_{ij} = R_i + R_j$ . Если условие выполняется –  $j$ -я частица помещается в список  $B_i = \{j\}$  номеров частиц-соседей, с переходом к этапу 4. Если не найдено ни одной частицы-соседа, падающая частица помещается на дно контейнера ( $y_j = 0$ ) с достигнутым значением координаты  $x_j$ , с переходом к этапу 6.

4) Столкнувшись с одной из уже упакованных частиц (в списке  $B_i$  одна частица), падающая частица продолжает движение: сначала скатывается (пока не оторвется от частицы-соседа), затем может продолжить падение. Пересчет координат при скатывании осуществляется по условию  $D_{ij} = const$  в сторону снижения координаты  $y_j$ . При каждом пересчете осуществляется поиск новой частицы-соседа из массива возможных препятствий, аналогично этапу 3. Если такая частица найдена, она дополняет список частиц-соседей, после чего этап 4 выполняется сначала (контакт падающей частицы с предыдущим соседом может при этом прекратиться, что вызовет сокращение списка  $B_i$ ). В противном случае скатывающаяся частица срывается, имея в этот момент координаты

$(x_i = \sqrt{D_{ij}^2 - x_j^2}; y_i = y_j)$ , и продолжает вертикальное падение, с переходом к этапу 3.

Описанные действия выполняются до тех пор, пока частица не займет устойчивое положение. Устойчивым, в двумерной модели, является положение, при котором выполняется одно из условий, иллюстрированных рисунком 1:

- частица достигает горизонтальной стенки (дна контейнера);
- частица касается как минимум двух других частиц;

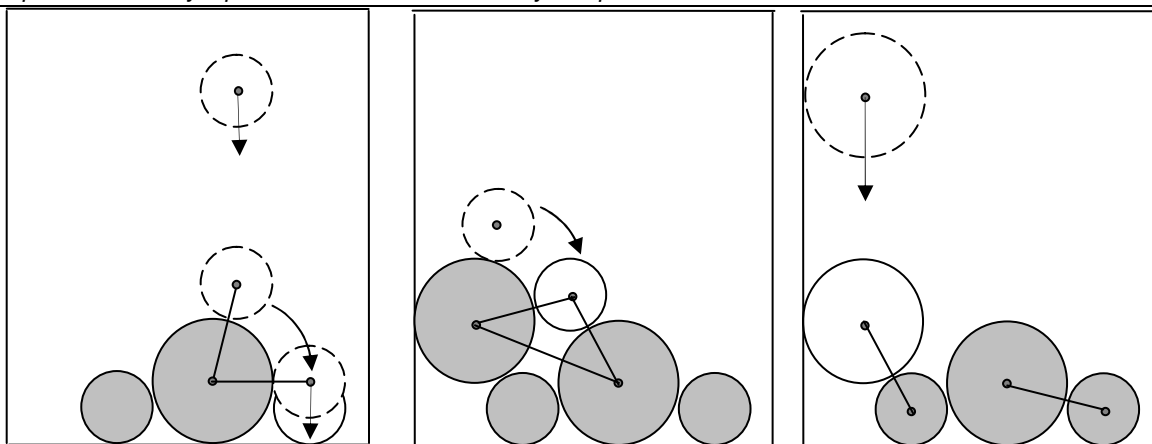


Рис. 1. Варианты перехода падающей частицы в устойчивое положение

• частица касается хотя бы одной частицы и вертикальной стенки.  
 5) Если падающая или скатывающаяся частица коснулась двух или трех ранее упакованных частиц, она устойчиво помещается между соседями. Окончательные координаты  $i$ -ой частицы рассчитываются по условиям вида  $D_{i \bullet} = R_i + R_{\bullet}$  для каждой частицы из списка  $B_i = \{\bullet\}$  номеров ее соседей, при необходимости – также по граничному условию  $x_i = R_i$  либо  $x_i = L - R_i$ . Массив размещенных частиц дополняется параметрами очередной частицы: радиусом  $R_i$ , найденными окончательными координатами  $(x_i^*; y_i^*)$ , списком  $B_i$  номеров частиц-соседей. В списке также могут присутствовать особые номера, присвоенные стенкам контейнера. После этого для каждой частицы (или стенки), вошедшей в список  $B_i$ , ее аналогичный список дополняется номером  $i$ . Далее осуществляется переход к этапу 1, если в контейнер еще возможно поместить новую частицу. Процесс заполнения контейнера иллюстрирован рисунком 2.

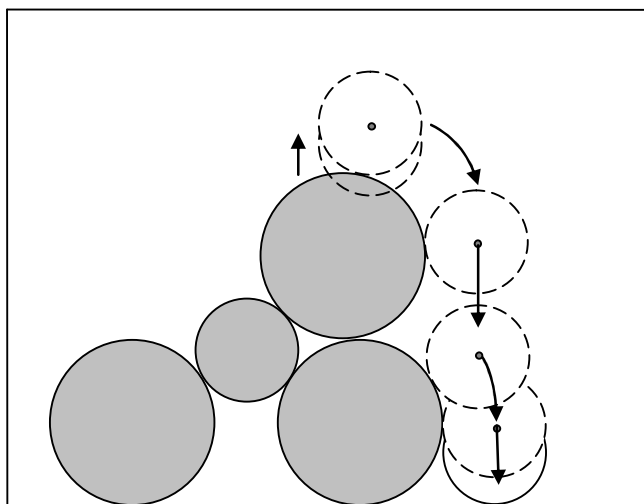


Рис. 2. Пример процесса заполнения контейнера

**Формирование стохастической матрицы связности частиц структуры.** Информация, содержащаяся в итоговом массиве размещенных частиц впоследствии, в ряде случаев, может оказаться избыточной. Так, при топологических исследованиях структур не требуется знания координат частиц, т.к. координата топологическим свойством не является. Местоположение частиц не влияет также и на интегральные метрические характеристики полученной структуры, например, на коэффициент плотности упаковки.

Для решения задач такого типа предлагается формировать матрицу  $C \equiv [c_{ij}]$  связности частиц, содержащую всю необходимую и достаточную информацию о полученной случайной структуре. Размер матрицы  $(n+4) \times (n+4)$  соответствует  $n$  размещенным частицам и четырем стенкам контейнера. Элементы матрицы определяются условием соприкосновения, с допустимым зазором  $\varepsilon \ll R$ , частицы со стенкой контейнера или с другой частицей, например:  $c_{ij} = \{1: D_{ij} \leq R_i + R_j + \varepsilon; 0: \text{иначе}\}$ . Для полидисперсной структуры, кроме того, матрица содержит дополнительный столбец с характеристикой размера частиц:  $c_{i, n+5} = R_i$ . Так как алгоритм синтеза структур имитирует стохастический процесс, матрица  $C$  также является стохастической.

Указанное матричное представление случайной неупорядоченной структуры позволяет определить следующие базовые метрические и топологические характеристики:

- 1) коэффициент плотности упаковки:  $\eta = \frac{\pi}{L \times H} \sum_{i=1}^n R_i^2$ ;
- 2) координационное число любой частицы как число ее частиц-соседей:  $f_i = \sum_{j=1}^n c_{ij}$ ;
- 3) распределение параметра  $f$  и среднее координационное число:  $\bar{f} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i$ .

Возможны и более сложные топологические исследования, связанные с изучением важных эксплуатационных свойств дисперсных структур и композиционных материалов, например – моделирование протекания (перколяции) в неупорядоченной многочастичной структуре с определением порога перколяции, величины и размерности перколяционных кластеров и т.п. [5]. В некоторых практических задачах моделирования протекания вводят также понятие наибольшего размера (радиуса  $r$ ) частицы протекающей среды. Модификация описанного выше алгоритма в части условия  $D_{ij} \approx R_i \cos r/R_i + R_j \cos r/R_j$  обеспечивает синтез случайной упаковки с заданным перекрытием дисперсных частиц.

**Анализ моделей случайно неупорядоченных моно- и полидисперсных структур.** Разработанный алгоритм генерации случайной структуры дисперсной системы и соответствующей ей матрицы связности был реализован программно в среде C++ Builder. Матрица связности, с целью последующей обработки в среде MatLab, представлялась в виде текстового файла. Итоговый массив с координатами размещенных частиц использовался для визуализации синтезированных структур.

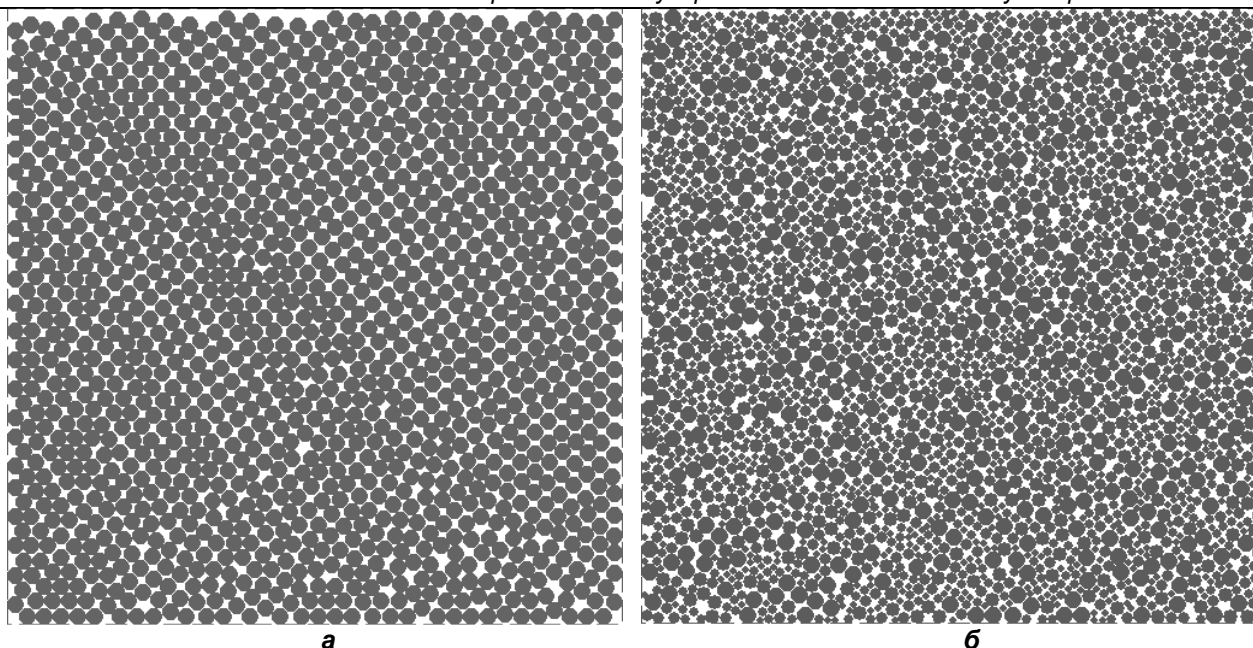


Рис. 3. Модели случайных структур из плоских дисков: монодисперсная из 1358 частиц с плотностью упаковки 0,798 (а), полидисперсная из 2908 частиц с плотностью упаковки 0,805 (б)

Для тестирования созданной программной системы была проведена серия вычислительных экспериментов для следующих исходных данных: размер контейнера  $L \times H = 512 \times 512$ , гранулометрический состав дисперсной фазы – монодисперсная ( $R = 7$ ) либо полидисперсная ( $R = 3 \dots 7$ , равновероятное распределение). Примеры изображений полученных структур представлены на рисунке 3.

Средние коэффициенты упаковки моно- и полидисперсных систем, рассчитанные в каждом случае по 20 различным структурам, оказались практически одинаковыми (в пределах доверительного интервала  $\pm 0.01$ ). Плотность упаковки на уровне 0.80 является достаточно высокой, и может быть еще незначительно повышена дополнительными динамическими методами (например, методом утряски).

Важнейшим фактором геометрической устойчивости и других топологических особенностей структуры является ее координационное число. В плотной упаковке координационное число  $f$  определяется как число непосредственных контактов данной частицы с соседними, а в неплотной – как число граней полиэдра Вороного (сторон многоугольника в двумерном случае) [6]. В моделях рассматриваемого типа следует учитывать граничный эффект – заведомое снижение значения  $f$  вблизи стенок контейнера. Предыдущими исследованиями установлено, что размер зоны влияния граничного эффекта в подобных моделях не превышает  $4R_{\max}$  [7]. В монодисперсных системах, изученных в ходе тестирования, координационное число для частиц, лежащих вне пределов граничной зоны, имело размах  $f = 2 \dots 6$ , составляя в среднем  $\bar{f} = 3.96$ . В полидисперсных структурах данный параметр зависит от гранулометрического состава. В некоторых случаях, как, например, в упаковке набора частиц двух возможных размеров (бидисперсная фаза), с соотношением  $R_2/R_1 = 2:1$  и долей малых частиц 70%, можно получить среднее значение  $\bar{f} = 3.96$ , идентичное варианту монодисперсной системы, при большей величине размаха координационного числа:  $f = 2 \dots 8$ .

**Выводы.** Разработан и программно реализован стохастический алгоритм синтеза неупорядоченных многочастичных структур в двумерной модельной области, основанный на методе «насыпки» частиц, приближаемых круглыми дисками, и позволяющий получать случайные упаковки моно- и полидисперсных фаз с высоким коэффициентом плотности. Предложено компактно представлять результат синтеза в виде матрицы связности частиц, содержащей инфор-

мацию, необходимую и достаточную для последующего топологического анализа структуры – определения координационного числа, изучения процесса протекания (перколяции) в случайной неоднородной среде и т.п.

На тестовых примерах подтверждены эффективность алгоритма моделирования случайных структур и их анализа с использованием матрицы связности частиц. Показано, что алгоритм легко модифицируется: например, для решения некоторых практических задач моделирования протекания вводится заданное перекрытие частиц.

Результаты работы применимы для имитационного моделирования дисперсных систем и композиционных материалов с целью исследования их структурно-топологических свойств, в том числе особенностей перколяции в неоднородных пористых средах.

#### СПИСОК ЦИТИРОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Разумейчик, В.С. Проблемы решеточного представления вне-решеточной модели полидисперсной системы / В.С. Разумейчик, А.С. Дереченник // Современные проблемы математики и вычислительной техники: матер. IV респ. науч.-техн. конф. молодых ученых и студентов, Брест, 28-30 ноября 2005 г. – Брест: БрГТУ, 2005. – С. 58-60.
2. Ballani, F. Modelling the microstructure of concrete with spherical grains // F. Ballani, D.J Daley, D. Stoyan // Computational Materials Science. – 2006. – Vol. 35. – P. 399-407.
3. Роговой, А.А. Модель слабосжимаемого и несжимаемого упругого тела при конечных деформациях / А.А. Роговой // Структурные механизмы формирования механических свойств зернистых полимерных композитов / В.В.Мошев [и др.]; под ред. В.В.Мошева. – Екатеринбург: УрО РАН, 1997. – С. 48-60.
4. Eisenberg, E. Random closest packing in a 2D lattice model / E. Eisenberg, A. Baram // Physica A. – 2000. – Vol. 33. – P. 1729-1734.
5. Федер, Е. Фракталы / Е.Федер. – М.: Мир, 1991. – 262 с.
6. Медведев, Н.Н. Метод Вороного-Делоне в исследовании структуры некристаллических систем / Н.Н.Медведев. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000. – 213 с.
7. Ртищева, М.В. Анализ топологических характеристик неплотных неупорядоченных монодисперсных структур / М.В. Ртищева, В.С. Разумейчик, С.С. Дереченник // Проблемы проектирования и производства радиоэлектронных средств: матер. IV междунар. науч.-техн. конф., Новополоцк, 25-26 мая 2006 г. – Т.2. – Новополоцк: ПГУ, 2006. – С. 214-217.

Материал поступил в редакцию 20.11.2008

The 2D disordered dispersed structures synthesis algorithm was developed and tested on model samples, based on the filling method. Density coefficient is about 0.80 for received models of random packs of mono- and polysized particles in a disc approach. Synthesized structures models are compactly presented for further topological study in terms of stochastic connectivity matrixes. Results are applicable for disperse systems and composite materials simulation modeling, purposed to structural and topological properties study, including distinctive features in the non-homogeneous porous mediums.

УДК 539.3

Босяков С.М.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХМЕРНЫХ ФРОНТОВ ВОЛН ДЕФОРМАЦИЙ, РАСПРОСТРАНЯЮЩИХСЯ В НЕУПРУГИХ СРЕДАХ ОТ ТОЧЕЧНОГО ИСТОЧНИКА ВОЗМУЩЕНИЙ

**Введение.** Анализ закономерностей распространения одномерных и двумерных волновых движений в неупругих материалах, работающих при динамических нагрузках за пределами упругих состояний, рассматривались в работах [1, 2]. В настоящей работе представлены результаты исследования трехмерных волновых движений, распространяющихся от сосредоточенного источника возмущений для сред, описываемых определяющими соотношениями в форме произвольных перекрестных зависимостей между первыми инвариантами тензоров и вторыми инвариантами девиаторов напряжений и деформаций. В качестве конкретных примеров таких зависимостей рассматриваются неупругие материалы с малыми упругопластическими деформациями и среды, обладающими внутренним трением.

**Координаты точек волновых фронтов.** Определяющие соотношения для неупругих сред имеют форму произвольных перекрестных зависимостей между первыми инвариантами тензоров и вторыми инвариантами девиаторов напряжений и деформаций:

$$T = T(\Gamma, \theta), \sigma = \sigma(\Gamma, \theta),$$

где  $T$  - интенсивность касательных напряжений (второй инвариант девиатора напряжений),  $\sigma$  - среднее напряжение (первый инвариант тензора напряжений),  $\Gamma$  - интенсивность деформаций сдвига (второй инвариант девиатора деформаций),  $\theta$  - объемная деформация (первый инвариант тензора деформаций).

Динамические уравнения равновесия в отсутствие массовых сил представим в виде [2]:

$$\sum_{j=1}^3 \left( \left( \frac{\partial \sigma}{\partial \theta} + \frac{T}{3\Gamma} \right) \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{2e_{ij}}{\Gamma} \left( \frac{\partial T}{\partial \theta} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{2}{\Gamma} \left( \frac{\partial T}{\partial \Gamma} - \frac{T}{\Gamma} \right) \sum_{k=1}^3 \sum_{m=1}^3 e_{km} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_m \partial x_j} \right) + \frac{2}{\Gamma} \frac{\partial \sigma}{\partial \Gamma} \sum_{m=1}^3 e_{jm} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_m \partial x_j} + \frac{T}{\Gamma} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j^2} \right) = \rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2}, i = \overline{1, 3}. \quad (1)$$

Начальные данные к системе (1) зададим на поверхности  $z(x_1, x_2, x_3, t) = 0$  и перейдем к новым переменным  $g = z(x_1, x_2, x_3, t)$ ,  $g_i = z_i(x_1, x_2, x_3, t)$ ,  $i = \overline{1, 3}$ . После преобразования системы (1), приравняв нулю определитель, составленный из коэффициентов при частных производных второго порядка по  $g$ , получим следующее характеристическое уравнение:

Босяков Сергей Михайлович, доцент каф. теоретической и прикладной механики Белорусского государственного университета. Беларусь, БГУ, 220050 Беларусь, Минск, пр. Независимости, 4.

$$\frac{q_0 p_0^6}{c_2^6} + \frac{q_1 p_0^4}{c_2^4} + \frac{q_2 p_0^2}{c_2^2} + q_3 = 0. \quad (2)$$

Здесь коэффициенты  $q_k$  имеют вид:

$$q_0 = -1, q_1 = \frac{1}{\Gamma} \sum_{k=1}^3 p_k^2 (2T + c_{kk}\Gamma),$$

$$q_2 = -\frac{1}{\Gamma^2} \left( \sum_{k \neq l \neq m=1}^3 (T p_k^4 (T + 2\Gamma c_{kk}) + p_l^2 p_m^2 (3T^2 + \Gamma T (c_{ll} + c_{mm}) - \Gamma^2 (c_{lm} c_{ml} - c_{ll} c_{mm}))) \right),$$

$$q_3 = \left( \frac{T}{\Gamma} \right)^3 (p_1^2 + p_2^2)(p_1^2 + p_3^2)(p_2^2 + p_3^2) + p_1^2 p_2^2 p_3^2 (c_{12} c_{23} c_{31} + c_{13} c_{32} c_{21} + c_{11} c_{22} c_{33}) + \frac{T}{\Gamma} \sum_{k \neq l \neq m=1}^3 \left( \frac{T}{\Gamma} c_{kk} p_k^2 (p_k^2 + p_l^2)(p_k^2 + p_m^2) + (c_{kk} p_k^4 (c_{ll} p_l^2 + c_{mm} p_m^2) - c_{lm} c_{ml} p_l^2 p_m^2 (p_l^2 + p_m^2)) - p_1^2 p_2^2 p_3^2 c_{kk} c_{lm} c_{ml} \right),$$

где  $p_k = \partial z / \partial x_k$ ,  $p_0 = \partial z / \partial t$ ,  $c_2 = \sqrt{G_0 / \rho}$ ,  $G_0$  - начальный модуль сдвига. Отметим, что характеристическое уравнение (2) получено в предположении, что система координат  $(x_1, x_2, x_3)$  совпадает с направлениями главных осей деформаций (напряжений) и в этом случае  $e_{ij} = 0$ ,  $i \neq j = \overline{1, 3}$ .

Рассмотрим уравнение характеристик (2) как алгебраическое уравнение третьего порядка относительно  $p_0^2$  и представим его решение в виде:

$$p_0^{(n)} = c_2 \sqrt{2 \sqrt{\frac{p}{3}} \cos \left( \frac{\Lambda + 2\pi(4-n)}{3} \right) - \frac{q_1}{3q_0}}, \quad (3)$$

$$\Lambda = \arccos \left( -\frac{q}{2} \sqrt{-\left( \frac{3}{p} \right)^3} \right),$$