

УДК: 519.6

Моделирование плотных материалов методом упаковки сферополиэдров

В. В. Мизгулин^{1,а}, Р. М. Кадушников²,
Д. М. Алиевский², В. М. Алиевский²

¹ Уральский федеральный университет,
Россия, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

² ООО «СИАМС»,
Россия, 620078, г. Екатеринбург, ул. Коминтерна, д. 16

E-mail: ^а mizgulin@gmail.com

Получено 27 ноября 2012 г.,
после доработки 4 декабря 2012 г.

В работе предложен новый метод моделирования плотных материалов на основе алгоритма упаковки сферополиэдров, описана математическая модель сферополиэдра и обсуждены результаты вычислительных экспериментов на различных упаковках сферополиэдров. Результаты экспериментов показали сходимость метода. Проведенные эксперименты включают исследования упаковок сферополиэдров различной формы, полидисперсных и ориентированных структур. Метод может быть применен для виртуального проектирования плотных материалов, имеющих в составе несферические частицы.

Ключевые слова: плотная упаковка, моделирование материалов, сферополиэдры

The modeling of dense materials with spherepolyhedra packing method V. V. Mizgulin¹, R. M. Kadushnikov², D. M. Alievsky², V. M. Alievsky²

¹ Ural federal university, Russia, 620002, Yekaterinburg, Mira 19.

² SIAMS, Russia, 620078, Yekaterinburg, Komintern 16.

Abstract. — The paper presents a new dense material modeling method based on spherepolyhedra packing algorithm, describes mathematical model of spherepolyhedra and discuss the results of computation experiments on different spherepolyhedra packs. The results of experiments show convergence of proposed method. Experiments include investigations of spherepolyhedra packs with different shapes, polydisperse and oriented structures. Presented method would be applied to virtual design of dense materials composed of non-spherical particles.

Keywords: dense packing, materials modeling, spherepolyhedra

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2012, vol. 4, no. 4, pp. 757–766 (Russian).

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ.

Введение

Методы моделирования материалов активно используются в образовании, науке и промышленности. Авторами давно исследуются различные особенности построения моделей и применения численных методов для виртуального проектирования новых материалов. Несмотря на обилие известных методов моделирования упаковок сфер, часто приходится сталкиваться с материалами, в структуре которых преобладают частицы сложной формы. Упаковка частиц произвольной формы является ресурсоемкой задачей даже для современных компьютеров. Учитывая, что для достаточной точности моделирования требуется не менее 100 000 частиц, подобные задачи могут решаться лишь на суперкомпьютерах. Другим подходом к решению задачи упаковки частиц сложной формы может быть очередное приближение, не такое простое как сфера, но не столь сложное, как реальная частица. В данной работе будет предложено такое приближение, позволяющее более точно моделировать пространственную структуру материалов.

Выделим также задачу исследования свойств пространственной структуры материала от форм, размеров и ориентированности составляющих его частиц. Цель исследования заключается в получении наиболее плотных пространственных структур материалов из частиц сложной формы. В силу трудности проведения соответствующих натуральных экспериментов для решения задачи воспользуемся методами компьютерного моделирования.

Модели и методы

Для моделирования формы частиц в составе материала предлагается использовать сферополлиэдры. Сферополлиэдры ранее применялись в работе [Petrov M.S., 2004]. Определим более подробно понятие сферополлиэдра и его составных частей. Сферополлиэдр представляет собой некоторое обобщение обычного многогранника. А именно, *сферополлиэдр* $SP(O, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_M, r)$ ($O \in \mathbf{R}^3, \mathbf{p}_i \in \mathbf{R}^3, r \in \mathbf{R}$) — это сумма Минковского: $\{O\} \oplus l_1 \oplus \dots \oplus l_M \oplus S$, где: $l_i = \{t\mathbf{p}_i: -\frac{1}{2} \leq t \leq \frac{1}{2}\}$,

$$i=1, \dots, M, S = \{\mathbf{r}: |\mathbf{r}| \leq r\}.$$

Точка O называется *центром* сферополлиэдра, отрезки l_i называются *образующими отрезками* сферополлиэдра, сфера S называется *образующей сферой* сферополлиэдра. Сферополлиэдр $\mathbf{g} = l_1 \oplus \dots \oplus l_M \oplus S = SP(O, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_M, r)$ называется *образующим множеством* данного сферополлиэдра; сферополлиэдр $SP(O, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_M, r)$ мы также будем обозначать $SP(O, \mathbf{g})$.

Использование более трех образующих векторов на данном этапе исследования не представляется целесообразным, поскольку не внесет ясности в понимание свойств пространственных структур материалов и значительно увеличит время счета. Во избежание роста числа факторов эксперимента предлагается также ограничить количество типов сферополлиэдров следующими вариантами: $SP(O, r)$, $SP(O, (2R, 0, 0), r)$, $SP(O, (2R, 0, 0), (0, 2R, 0), r)$, $SP(O, (2R, 0, 0), (0, 2R, 0), (0, 0, 2R), r)$. Таким образом, форма сферополлиэдра в данном исследовании будет определяться двумя параметрами: r — радиус образующей сферы, R — длина любого из образующих векторов. В результате будем иметь упаковки сфероцилиндров, сфероквадратов и сферокубов.

Упаковку сферополлиэдров будем моделировать методом, использованным в оригинальной работе [Petrov M.S., 2004]. Опишем этот метод более подробно. Пусть дана некоторая конфигурация из N сферополлиэдров $SP(O^{(k)}, \mathbf{g}^{(k)})$, $k = 0, \dots, N-1$ (т. е. даны N структур $(O^{(k)}, \mathbf{p}_1^{(k)}, \mathbf{p}_2^{(k)}, \dots, \mathbf{p}_{M_k}^{(k)}, r^{(k)})$). Далее, пусть дано некоторое образующее множество $\mathbf{g} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_M, r)$. Наконец, пусть дана некоторая точка либо плоскость β (называемая *базой* упаковки). Требуется найти сферополлиэдр $\mathbf{P} = SP(O, \mathbf{g})$ (т. е. найти точку O), такой, что:

1. \mathbf{P} касается как минимум трех сферополлиэдров из данной конфигурации;
2. \mathbf{P} не пересекается (не имеет общих внутренних точек) ни с одним сферополлиэдром из данной конфигурации;
3. \mathbf{P} лежит как можно ближе к точке или плоскости β ;

4. (не обязательно) P содержится в некотором бункере, заданном как пересечение нескольких полупространств.

С помощью этого алгоритма мы можем, начиная с простейшей упаковки трех сферополиэдров, построить упаковку любого числа сферополиэдров. При $\beta = \mathbf{0} = (0,0,0)$ мы получим *центральную упаковку*; при $\beta =$ (плоскость Oxy) и при наличии бункера $\{(x, y, z): 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, 0 \leq z\}$ мы получим *бункерную упаковку*.

Предлагаемый алгоритм основан на двух процедурах, решающих следующие подзадачи.

S1. Даны 3 сферополиэдра P_k, P_i, P_j и образующее множество g ; требуется найти все точки O , такие что сферополиэдр $P = SP(O, g)$ касается P_k, P_i и P_j .

S2. Даны 2 сферополиэдра P_k и $P = SP(O, g)$; требуется проверить, имеет ли их пересечение $P \cap P_k$ ненулевой объем.

В общем случае эти задачи эквивалентны следующим:

S1'. Даны 3 сферополиэдра P_k, P_i, P_j и образующее множество g ; требуется найти все точки пересечения поверхностей 3 сферополиэдров: $P'_k = P_k \oplus (-g), P'_i = P_i \oplus (-g), P'_j = P_j \oplus (-g)$. Здесь $-g = \{(-x, -y, -z): (x, y, z) \in g\}$. Если $g = (p_1, p_2, \dots, p_K, r)$, то $-g = (-p_1, -p_2, \dots, -p_K, r)$.

S2'. Даны 2 сферополиэдра P_k и $P = SP(O, g)$; требуется проверить, является ли O внутренней точкой $P_k \oplus (-g)$.

Здесь важно, что сумма Минковского $A \oplus B$ 2 сферополиэдров A и B снова является сферополиэдром, и инверсная фигура $-A$ для сферополиэдра A также является сферополиэдром. Такое условие выполнено для шаров, многогранников, но не выполнено, например, для произвольных эллипсоидов.

Сферополиэдр $P = SP(O, p_1, p_2, \dots, p_M, r)$ представляет собой объединение ядра $P_0 = SP(O, p_1, p_2, \dots, p_M, 0)$ (пусть F, E, V будут число его граней, ребер и вершин), F прямых призм с высотой r , построенных на гранях P_0 как на основаниях, E круглых цилиндров радиуса r с ребрами P_0 в качестве осей и V шаров радиуса r с вершинами P_0 в качестве центров. Многогранник P_0 (набор его граней, ребер и вершин) может быть построен многократным вызовом простой процедуры, прибавляющей (по Минковскому) отрезок $l_i = \{tp_i: -1/2 \leq t \leq 1/2\}$ к заданному многограннику.

Решение подзадачи **S1'**. Поверхность произвольного сферополиэдра P есть подмножество объединения F многоугольников (верхних оснований призм), E боковых поверхностей цилиндров и V сфер. Таким образом, для решения подзадачи достаточно:

1. найти точки пересечения всех троек (α, β, γ) , где $\alpha/\beta/\gamma$ — один из элементов (многоугольников, цилиндрических поверхностей и сфер), образующих поверхность сферополиэдра $P'_k/P'_i/P'_j$;

2. проверить все найденные точки пересечения, не являются ли они внутренними точками P'_k, P'_i or P'_j (см. подзадачу **S2'**).

Отыскание точек пересечения $\alpha \cap \beta \cap \gamma$ можно свести к решению квадратного уравнения, когда элементы α, β, γ представляют собой сферы или многоугольники или когда один из них — цилиндр, а остальные два — многоугольники. В других случаях задача сводится к решению уравнения 4-й (цилиндр \cap сфера \cap многоугольник, цилиндр \cap сфера \cap сфера) или 12-й степени (цилиндр \cap цилиндр \cap любой тип); для его решения нужно использовать численные методы (в случае 4-й степени можно также использовать формулы Феррари).

Подзадача **S2'** решается просто: достаточно проверить, является ли O внутренней точкой ядра либо одной из призм, одного из цилиндров или шаров, образующих сферополиэдр $P_k \oplus (-g)$.

Мы реализовали два алгоритма, упаковывающих новый сферополиэдр на существующую конфигурацию с помощью процедур, решающих подзадачи **S1'** и **S2'**. Первый алгоритм — простой и медленный. Мы проверяем все тройки существующих сферополиэдров P_k, P_i, P_j и находим точки пересечения поверхностей $P'_k = P_k \oplus (-g), P'_i = P_i \oplus (-g), P'_j = P_j \oplus (-g)$. Если точки пересечения существуют, мы проверяем, не являются ли они внутренними точками $P_m \oplus (-g)$ для

одного из существующих сферополиэдров P_m , $m \neq k, I, j$. Если некоторые из точек не являются таковыми, мы выбираем среди них ближайшую к заданной точке или плоскости β . Конечно, мы оптимизировали этот *очень* медленный алгоритм. Например, нет необходимости искать точки пересечения P_k', P_i', P_j' , если описанные сферы P_k' и P_i' не пересекаются. Аналогично, нет необходимости проверять, является ли точка пересечения P_k', P_i', P_j' внутренней точкой $P_m \oplus (-g)$, если описанные сферы P_k' и $P_m \oplus (-g)$ не пересекаются. Тем не менее этот алгоритм полезен только при упаковке небольшого числа (≤ 100) сферополиэдров.

Второй алгоритм сложен и строит несколько менее компактные упаковки, но работает на порядок быстрее. Основная идея алгоритма следующая. Возьмем случайный луч с началом внутри «кома» уже упакованных объектов (для центральной упаковки около базовой точки в качестве начала луча можно взять эту точку). Можно очень быстро найти последнюю (самую далекую от начала) точку пересечения этого луча с одним из сферополиэдров $P_k' = P_k \oplus (-g)$. Пусть сферополиэдр, дающий последнюю точку пересечения, есть P_L . Сферополиэдр P_L лежит на «поверхности» «кома» уже упакованных сферополиэдров. Будем проверять точки пересечения поверхностей только сферополиэдров $P_L' = P_L \oplus (-g)$, $P_i' = P_i \oplus (-g)$, $P_j' = P_j \oplus (-g)$; здесь сферополиэдры P_i' и P_j' должны пересекать P_L' , и число таких сферополиэдров («соседей» P_L') невелико. (Мы используем трехмерную сетку для ускорения поиска сферополиэдра P_L и его соседей.) Наилучшая (ближайшая к β) среди проверенных точек может быть взята в качестве центра нового упаковываемого сферополиэдра. Компактность упаковки, строящейся этим алгоритмом, может быть повышена путем повторения вычислений для нескольких лучей и выбора лучшего (ближайшего к базовой точке или плоскости β) среди всех найденных решений. В данной работе будем пользоваться вторым алгоритмом упаковки сферополиэдров.

Для упаковки сфер будем пользоваться алгоритмами «центральный» и drop & roll [Nurkhanov E.Yu., 2001]. Будем пользоваться функцией автобункер, которая автоматически подбирает габариты бункера под количество частиц, чтобы конечная упаковка получилась близкой к кубической. Это сократит количество факторов эксперимента.

Результаты экспериментов

Экспериментальные исследования проводились в четыре этапа:

1. Проверка сходимости методов упаковки.
2. Исследование упаковок сферополиэдров различной формы.
3. Исследование полидисперсных упаковок сферополиэдров.
4. Исследование ориентированных упаковок сферополиэдров.

Проверка сходимости методов осуществлялась при постепенном увеличении числа частиц в системе. При этом замерялись плотность и СКЧ. Соответствующие эксперименты проводились с использованием «центральной» упаковки сфер, упаковки сфер drop & roll и «центральной» упаковки сферополиэдров. Для центральных упаковок измерения проводились внутри сферы радиусом $0.8R_s$ и центром в начале координат, где R_s — радиус сферы, описывающей упаковку. Для упаковки «drop & roll» расчеты проводились внутри куба с измерением $0.8L$, где L — наименьшее измерение бункера.

Вторым этапом исследований являлось выявление зависимости плотности и СКЧ упаковки сферополиэдров от соотношения длины образующих векторов и радиуса образующей сферы (R/r). Эксперименты проводились с помощью метода «центральной» упаковки сфероцилиндров, сфероквадратов и сферокубов.

Третий этап осуществлялся с использованием параллельного метода, так как при $R/r < 1$ алгоритм на начальном этапе останавливается, не имея возможности найти положение сферополиэдра, пересекающегося хотя бы с двумя другими. При использовании метода «параллельной» упаковки в качестве недостающего объекта выступает бункер. Разброс размеров частиц моделировался отдельно для параметров r и R с помощью нормального распределения. Использовались сфероцилиндры и, для сравнения, сферы.

На четвертом этапе также применялся метод «параллельной» упаковки. Получены зависимости плотности и СКЧ упаковки от угла отклонения от предпочтительного направления упаковки. Под предпочтительными направлениями понимается такой набор векторов, с которым сонаправлены соответствующие образующие вектора каждого нового сферополиэдра, генерирующегося в процессе упаковки. Эксперименты были проведены с использованием сфероцилиндров, поскольку частицы подобной формы часто встречаются в реальных материалах и ощутимо влияют на анизотропию порового пространства.

Всего было проведено более 1000 вычислительных экспериментов. Планирование, расчет и обработка выходных данных производились в автоматизированной системе научных исследований на базе интернет-ресурса «nanoModel.ru» [В. Мизгулин, 2011]. Основные результаты экспериментов представлены на рис. 1, 2.

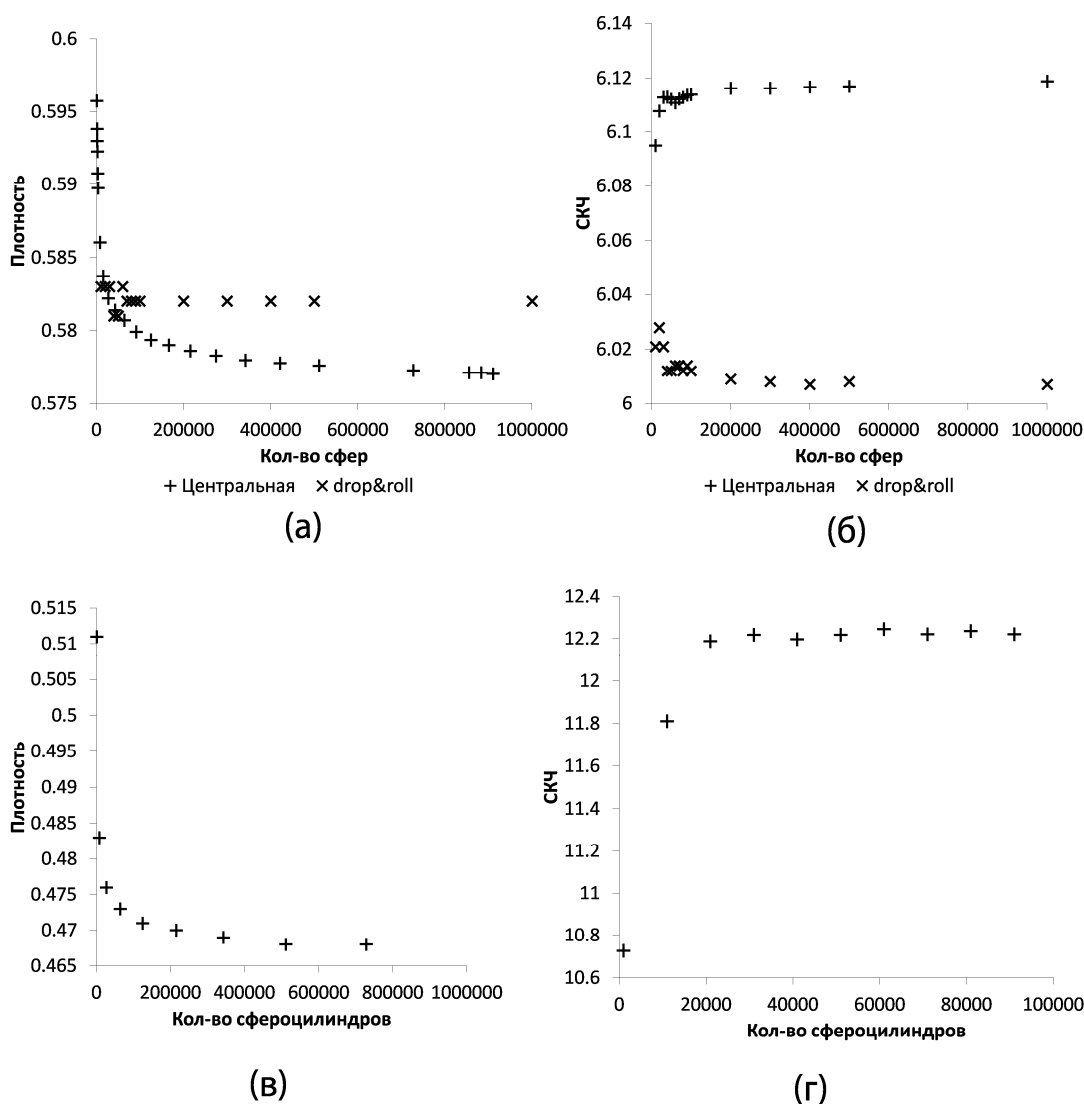
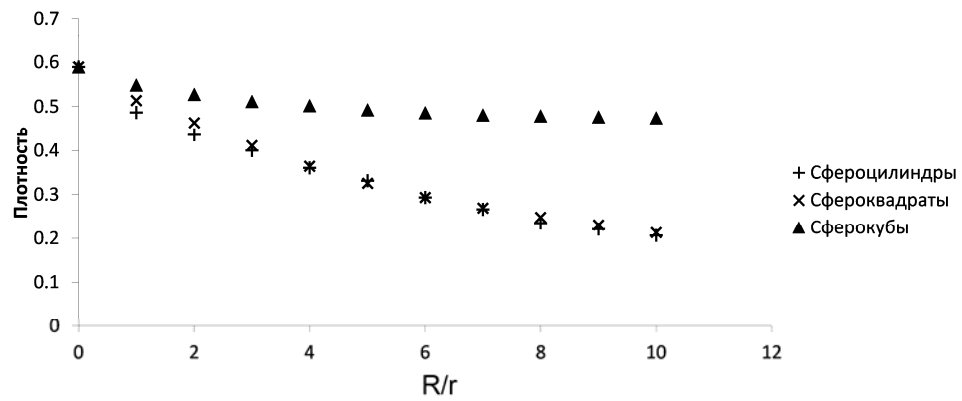
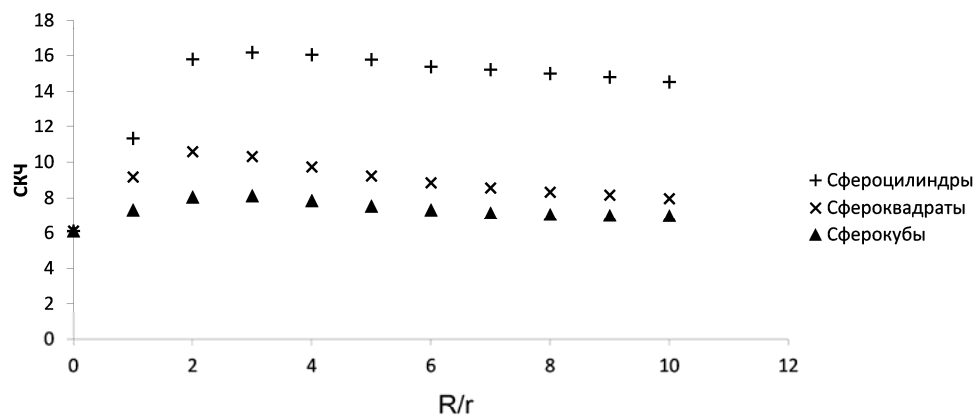


Рис. 1. На рисунке показаны результаты проверки сходимости метода: (а) по плотности упаковки сфер; (б) по СКЧ упаковки сфер; (в) по плотности упаковки сфероцилиндров; (г) по СКЧ упаковки сфероцилиндров



(а)



(б)

Рис. 2. На рисунке показаны результаты исследования зависимости свойств упаковок от формы сферополлиэдров: (а) исследование плотности; (б) исследование СКЧ

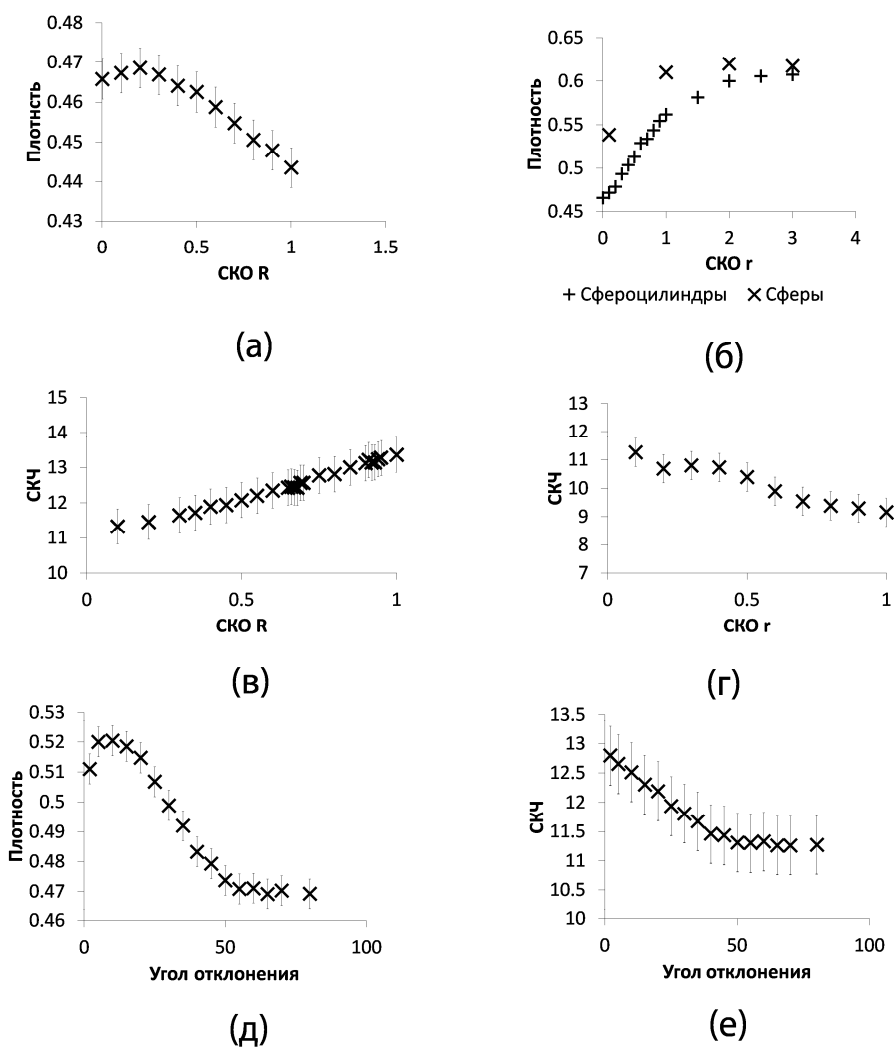


Рис. 3. На рисунке показаны результаты исследования зависимости свойств упаковок: (а) зависимость плотности от СКО длин образующих векторов; (б) зависимость плотности от СКО образующего радиуса; (в) зависимость СКЧ от СКО длин образующих векторов; (г) зависимость СКЧ от СКО образующего радиуса; (д) зависимость плотности от угла отклонения предпочтительного направления упаковки; (е) зависимость СКЧ от угла отклонения предпочтительного направления упаковки

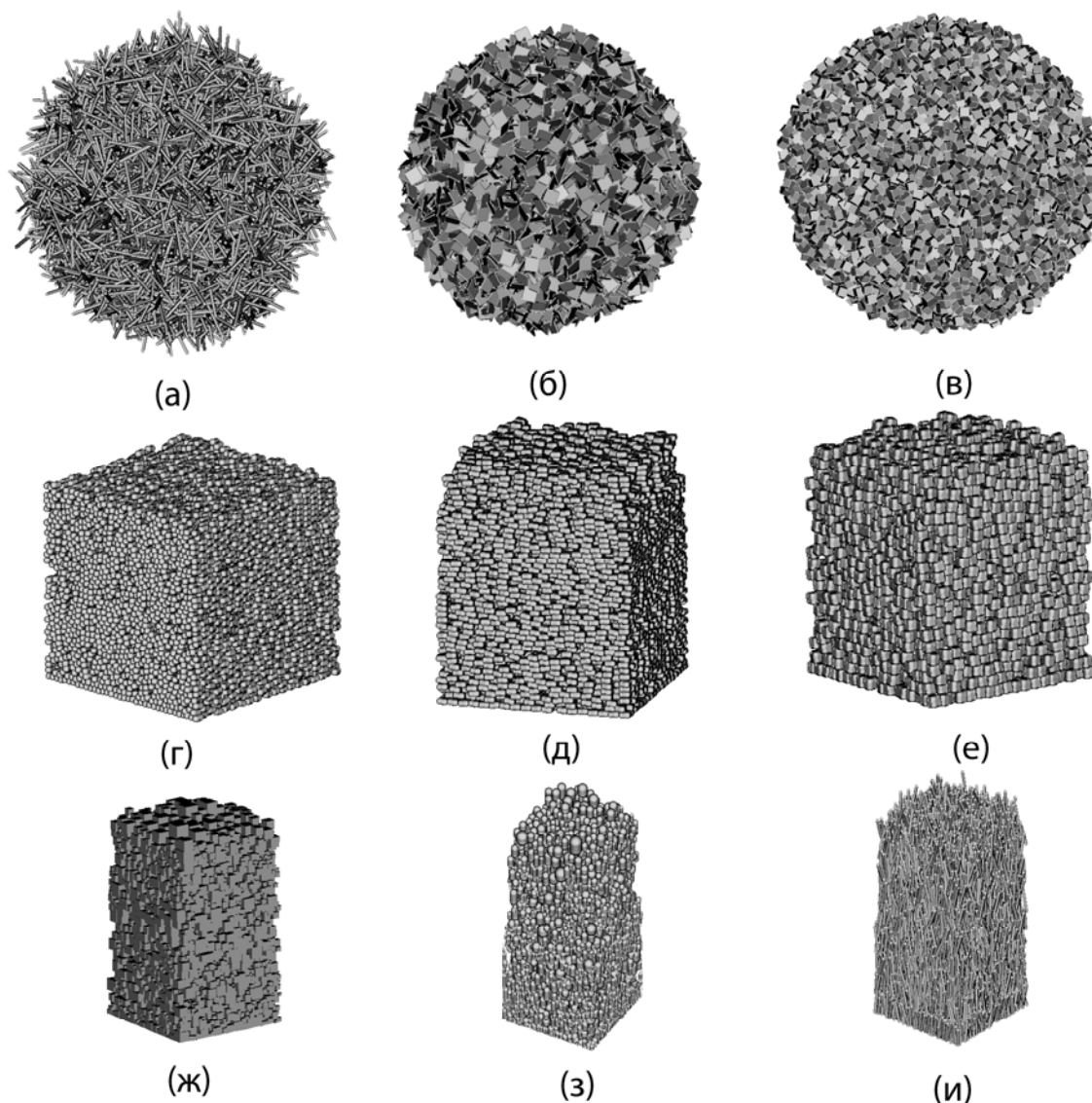


Рис. 4. На рисунке показаны примеры упаковок сферополиэдров: (а) «центральная» упаковка сфероцилиндров; (б) «центральная» упаковка сфероквадратов; (в) «центральная» упаковка сферокубов; (г) «горизонтальная» упаковка сфероцилиндров; (д) «горизонтальная» упаковка сфероквадратов; (е) «горизонтальная» упаковка сферокубов; (ж) горизонтальная полидисперсная упаковка кубов; (з) «вертикальная» полидисперсная упаковка сфероцилиндров; (и) «вертикальная» упаковка длинных сфероцилиндров

Обсуждение результатов

Обсудим полученные результаты в порядке решения поставленных задач.

1. Проверка сходимости методов дала положительные результаты. Первые эксперименты были проведены на сферах, так как давно известны теоретические и эмпирические сведения о плотностях различных упаковок сфер [Nolan G.T., 1992]. Алгоритм «drop & roll» показал хорошую сходимость по плотности и СКЧ (рис. 1а, б) *drop & roll*. Плотность упаковок колеблется около значения 0.582, и с увеличением количества частиц амплитуда колебаний резко уменьшается, что согласуется с теорией. Поведение СКЧ при увеличении числа частиц аналогично, и в больших упаковках его значение колеблется в пределах погрешности около 6.008, что также согласуется с теорией. Алгоритм «центральной» упаковки сфер, в отличие от предыдущего,

показал асимптотическую сходимость (рис. 1а, б). Плотность такой упаковки стремится к значению 0.577 на бесконечности, что немногим меньше плотности полученных упаковок drop & roll. СКЧ стремится к значению 6.12 на бесконечности, немного превышая предыдущий результат. Разницу в поведении функций на бесконечности можно объяснить особенностями алгоритмов упаковок. Полученная разность плотностей упаковок не дает оснований выделять какой-либо метод в качестве более эффективного. Далее проводились эксперименты по проверке сходимости метода упаковки сфероцилиндров, таких что $R/r = 1$ (рис. 1в, г). Поведение зависимостей плотности и СКЧ от количества частиц аналогично предыдущим экспериментам на сферах и демонстрирует сходимость метода на бесконечности.

2. Результаты исследования зависимости СКЧ и плотности упаковки от формы сферополиэдра представлены на рис. 2. Подобные исследования проводились в работе [Williams S.R., 2003] в части сфероцилиндров. Надо сказать, что общие закономерности результатов исследований согласуются, однако в силу использования различных алгоритмов, имеются нюансы. Например, зависимость плотности от отношения длины образующего вектора и радиуса сферы в работе [Williams S.R., 2003] достигает максимума в точке (0.4, 0.7). Полученная в данном исследовании зависимость медленно убывает. Тем не менее у рассчитанных в данной работе функций СКЧ имеется максимум при небольших R/r . Следует отметить, что последовательно исследованные упаковки сфероцилиндров, сфероквадратов и сферокубов показали общие закономерности зависимости плотности и СКЧ от фактора R/r . Возникновение максимума на графике СКЧ может быть связано с особенностями алгоритма упаковки. При малых R система сводится к обычной упаковке сфер. Рост R приводит к усложнению формы частиц, и увеличению потенциального числа контактов сферополиэдров, а это сначала способствует резкому увеличению СКЧ. При определенном значении R/r СКЧ начинает падать. Это можно объяснить тем, что при больших длинах сторон сферополиэдра для его оптимальной упаковки требуется много больше итераций (нужно проверить больше вариантов). В натурном эксперименте это означало бы то, что каждую частицу требуется паковать индивидуально. Используемый алгоритм прерывается на определенной итерации, и если частица слишком сложна (например, длинный сфероцилиндр), то количество найденных соседей не будет оптимальным. При этом чем сложнее частица, тем больше требуется итераций. Соответственно при дальнейшем росте R , СКЧ начинает медленно убывать, что мы и видим в эксперименте. Примеры «центральных» упаковок сферополиэдров приведены на рис. 7.

3. Результаты исследования зависимости плотности и СКЧ от распределений размеров сферополиэдров представлены на рис. 3, а–г. Небольшой разброс длин образующих отрезков сфероцилиндров положительно сказывается на плотности упаковки, однако большие отклонения приводят к постепенному уменьшению плотности. СКЧ при этом постоянно растет. При увеличении отклонения образующего радиуса наблюдается постепенный рост плотности с сопутствующим уменьшением СКЧ. Это связано с вырождением сфероцилиндров в сферы. При больших СКО нормальное распределение становится близким к равномерному, в связи с чем значение плотности достигает насыщения. Для сравнения на рис. 3б изображены точки, соответствующие экспериментам на сферах. Видно, что даже полидисперсные упаковки сфероцилиндров уступают соответствующим упаковкам сфер по плотности.

4. Интересные результаты получились при исследовании зависимости плотности и СКЧ от предпочтительного направления упаковки сфероцилиндров (рис. 3д, е). Увеличение угла отклонения от направления оси абсцисс дало два эффекта: появление максимума плотности при небольших отклонениях и стабилизация плотности и СКЧ при отклонениях больше 45 градусов. Второй эффект легко объяснить, поскольку увеличение угла отклонения постепенно приводит к построению обычной неориентированной упаковки. Возникновение максимума может быть связано с особенностью метода: при небольших отклонениях алгоритм получает некоторую свободу при выборе положения нового объекта, что ускоряет упаковку и делает её более плотной.

Заключение

Поставленные в работе задачи были успешно решены с помощью предложенного метода упаковки сферополиэдров. Метод может быть применен для виртуального проектирования плотноструктурированных материалов, имеющих в составе несферические частицы. Используя предпочтительные направления упаковки можно моделировать материалы с различными типами структур (рис. 4). Варьирование параметров распределений размеров частиц позволяет получать модели полидисперсных материалов. Возможность использовать различные типы сферополиэдров при построении упаковки открывает перспективы моделирования композитных материалов. Отдельный интерес в дальнейших исследованиях представляет применение метода упаковки сферополиэдров для моделирования пористых материалов и изучения их фильтрационных свойств.

Список литературы

- Мизгулин В., Гольдштейн С., Кадушников Р.* Облачная платформа для проведения НИОКР в нанотехнологиях // Наноиндустрия, 2011. № 5.
- Nolan G. T., Kavanagh P. E.* Computer simulation of random packing of hard spheres // Powder Technology. 1992. № 72. P. 149–155.
- Nurkanov E. Yu., Kadushnikov R. M., Kamenin I. G.* Investigation of the density characteristics of three-dimensional stochastic packs of spherical particles using a computer model // Powder Metallurgy and Metal Ceramics. 2001. V. 40. № 5–6. — P. 229–235.
- Petrov M. S., Gaidukov V. V., Kadushnikov R. M.* Numerical method for modelling the microstructure of granular materials // Powder Metallurgy and Metal Ceramics. 2004. V.43. № 7–8. P. 330–335.
- Williams S. R., Philipse A. P.* Random packings of spheres and spherocylinders simulated by mechanical contraction // Physical review. 2003. E 67.