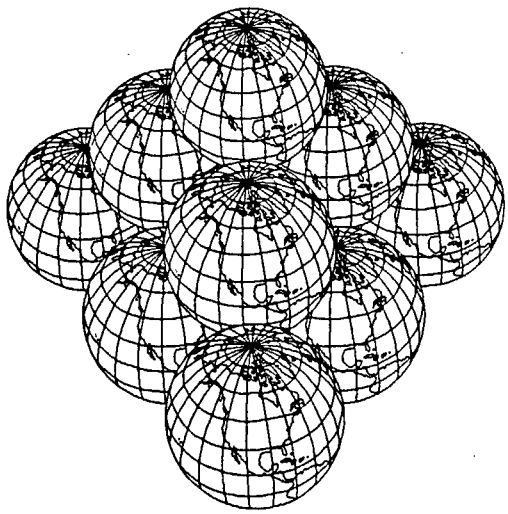
TEKST NR 253 1993

# Kuglepakning

## Teori og model



Lise Arleth • Kåre Fundal • Nils Kruse
Vejleder : Mogens Niss

TEKSTER fra
IMFUFA ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
INSTITUT FOR STUDIET AF MATEMATIK OG FYSIK SAMT DERES FUNKTIONER I UNDERVISNING, FORSKNING OG ANVENDELSER

IMFUFA, Roskilde Universitetscenter, Postbox 260, DK-4000 Roskilde

Kuglepakning
Teori og model

af: Lise Arleth
Kåre Fundal
Nils Kruse

Vejleder: Mogens Niss

IMFUFA tekst nr. 253/93, RUC.100 sider ISSN 0106-6242

Copyright © 1993 Arleth, Fundal, Kruse

---

## Abstract:

Projektrapporten består af to dele; en teoridel og en modeldel.
Teoridelen er et sammendrag af nogle af de eksisterende metoder til at beskrive kuglepakninger og af nogle af de resultater, der haves med hensyn til henholdsvis regelmæssige og uregelmæssige kuglepakninger.
I modeldelen bliver det problemområde, vi har beskæftiget os med, beskrevet. Der bliver argumenteret for, at problemet kan betragtes som et kuglepakningsproblem, nemlig at skulle finde porestørrelsesfordelingen i en uregelmæssig polydispers kuglepakning. Der bliver opstillet en model for porestørrelsesfordelingens afhængighed af kuglestørrelsesfordelingen.

MATEMATIK

# Kuglepakning

## Teori og model

Af:
Nils Kruse
Lise Arleth
Kåre Fundal

Vejleder :
Mogens Niss

Modul 3
R U C
Forår 1993

# Indholdsfortegnelse


**Indholdsfortegnelse** . . . . . 3

**Indledning** . . . . . 5

**Kapitel 1 : Introduktion til kuglepakning** . . . . . 9
1.1 Hvad er en n-dimensional kugle? . . . . . 9
1.2 Hvad er en n-dimensional kuglepakning? . . . . . 11
1.3 Kuglepakningsegenskaber . . . . . 15
1.4 Matematisk repræsentation af kuglepakninger . . . . . 17
1.5 Opsamling . . . . . 27

**Kapitel 2 : Regelmæssige kuglepakninger** . . . . . 29
2.1 Hvad er en regelmæssig kuglepakning? . . . . . 29
2.2 Rogers' øvre grænse . . . . . 30
2.3 Tætteste regelmæssige pakninger i to og tre dimensioner . . . . . 32
2.4 Polydisperse pakninger . . . . . 36
2.5 Anvendelser . . . . . 37
2.6 Opsamling . . . . . 39

**Kapitel 3 : Tilfældige pakninger** . . . . . 41
3.1 Monodisperse tilfældige pakninger . . . . . 41
3.2 Metoder til beskrivelse af tilfældige pakninger . . . . . 44
3.3 Polydisperse pakninger . . . . . 46
3.4 Anvendelsesområder for tilfældige pakninger . . . . . 50
3.5 Opsamling . . . . . 51

**Kapitel 4 : Beskrivelse af bremseklodsproblemet** . . . . . 53
4.1 Bremseklodser . . . . . 53
4.2 Produktion . . . . . 54
4.3 Opsamling . . . . . 57

Kapitel 5 : Modeludvikling . . . . . 59
5.1 Systemafgrænsning og grundlæggende antagelser . . . . . 59
5.2 Modellen . . . . . 60
5.3 Matematisk modelleringsarbejde . . . . . 65
5.4 Teoretisk evaluering af modellens validitet . . . . . 67
5.5 Praktisk vurdering af model . . . . . 69
5.6 Modelresultater . . . . . 72
5.7 Opsamling . . . . . 74

Kapitel 6 : Diskussion . . . . . 75

Appendix A : Beviser for sætninger i kapitel 1 . . . . . 77
A.1 Beviser for sætningerne V1–V5, side 18 . . . . . 77
A.2 Beviser for sætningerne D1–D5, side 19 . . . . . 79
A.3 Beviser for sætningerne R1–R5, side 23 . . . . . 81
A.4 Beviser for sætningerne K1–K5, side 25 . . . . . 82

Appendix B : Porerne i den fladecentrerede kubiske kuglepakning . . . . . 85

Appendix C : Størrelsen af en porekanal . . . . . 89

Litteraturliste . . . . . 93

Stikordsregister . . . . . 97

# Indledning

Udgangspunktet for dette projekt var, at det skulle handle om kuglepakninger. At valget af emne faldt netop på kuglepakningsteori skyldtes, at vi havde læst og hørt, at det er en gren af matematikken, som i vid udstrækning anvendes i praktiske problemer. Desuden var der her mulighed for at komme til at arbejde med en ny side af matematikken.

Allerede fra starten stod det klart, at projektet skulle beskæftige sig med kuglepakninger både fra den teoretiske og den anvendelsesmæssige side. På denne måde kom projektet til at bestå af to dele:

Den første del er en indføring i de forskellige grundlæggende dele af kuglepakningsteorien – en slags oversigt over, hvad man ved om kuglepakninger.

Den anden del, modeldelen, skal vise et eksempel på, hvordan kuglepakningsteori kan anvendes til løsning af praktiske problemstillinger og som forståelsesmodeller i teoretisk fysik.

## Formål

Projektets formål blev således følgende:

> *At få indblik i kuglepakningsteori og undersøge, hvordan den kan anvendes udenfor matematikken.*

Vi ledte derfor efter et egnet anvendelsesområde, hvor vi kunne behandle et kuglepakningsproblem. Med et kuglepakningsproblem mener vi et problem, hvor det er egentlige kuglepakningsegenskaber, der er relevante for problemets løsning.

I faststof-fysik kan man med rimelighed anskue stoffernes bestanddele – atomer og molekyler – som kugler. Derved kan man bruge kuglepakninger som forståelsesmodeller for amorfe og krystallinske stoffer. Men for at behandle den slags ting skal man tage højde for mange fysiske aspekter, og projektet risikerede derfor at ende med mere fysik end matematik.

I bøger om kuglepakninger kan man finde alenlange lister over praktiske anvendelsesområder, men da det ofte drejer sig om tænkte, mulige anvendelser, har mange af dem intet hold i virkeligheden. De fleste steder, hvor der forekommer kuglepakningslignende fænomener, arbejder man kun empirisk med problemerne, enten fordi det er lettere, eller fordi det i virkeligheden ikke er kuglepakningsegenskaber, der er væsentlige for problemet, selvom det kunne se sådan ud.

Det var af ovenstående årsager ikke så let som ventet at finde et anvendelsesområde udenfor matematikken, hvor vi kunne bruge en kuglepakningsmodel som løsningsredskab. Efter at have talt med forskellige industrivirksomheder (blandt andet Leca, Dansk Sintermetal og Densit) og fysikere, kom vi i kontakt med Afdeling for Industriel Metallurgi på Teknologisk i Tåstrup. De

var umiddelbart meget interesserede i at få os til at behandle et problem, de havde, og vi holdt derfor et møde med Knud Strande og Niels Bramsø, hvor de fortalte om deres arbejde.

## Problemet

Teknologisk er med i et projekt, bestilt af Roulunds Fabriker i Odense, som går ud på at finde en ny måde at fremstille bremseklodser på. Bremseklodser lyder som en simpel ting, men er faktisk et teknisk kompliceret produkt, idet det skal opfylde mange krav, f.eks. høj trykstyrke, lavt slid af bremseskive, høj ensartet friktion og varmebestandighed.

Teknologisk forestiller sig, at et nyt materiale til bremseklodser kan opbygges af en masse af jernpartikler, som er presset og sintret[1] sammen og bagefter fyldt ud med en speciel pasta-masse, som nedsætter sliddet.

Der er dog opstået et problem med at få fyldt pastaen ind i metalmassen. Der sker det, at hullerne i metalmassen tilstoppes af pastaen, således at den kun trænger ind i det yderste lag af klodsen. Da metalmassen er fremstillet af små tilnærmelsesvis kugleformede jernpartikler (evt. tilsat fibre), mente de på Teknologisk, at problemet måske kunne løses ved hjælp af kuglepakningsteori.

I dette problem er det mellemrummene mellem kuglerne, der er det interessante. Derfor handler det om at finde ud af nogle egenskaber ved porerne i kuglepakninger.

Pastaen indeholder nogle meget små partikler, og det antages, at det er disse partikler, som tilstopper porerne og forhindrer pastaen i at trænge yderligere ind. Det gælder således om at finde frem til en pakning, hvor porerne er store nok til at tillade passage af de små partikler i pastaen.

Da kuglerne, som udgør pakningen, ikke er lige store, er der tale om en såkaldt polydispers kuglepakning, hvorfor vi vil undersøge porestørrelser i polydisperse kuglepakninger, og hvordan disse afhænger af kuglestørrelserne.

## Problemformulering

Efter at have fundet et passende problem hos Teknologisk var vi i stand til at lave en problemformulering:

*Hvordan kan sammenhængen mellem fordelingen af porestørrelser og kuglestørrelser i en polydispers kuglepakning modelleres?*

*Hvordan kan en sådan model anvendes til forbedring af Teknologisk's pulverstøbte bremseklodser?*

1: Ved sintring opvarmes emnet til en temperatur under smeltepunktet, hvorved partiklernes overflader "smelter" sammen ved diffusion.

## Projektets opbygning

Kapitel 1, 2 og 3 indeholder den ovenfor omtalte gennemgang af kuglepakningsteori. Det er selvsagt ikke nogen grundig indføring i alle kuglepakningsteoriens afkroge men en oversigt over de vigtigste områder.

I kapitel 4 gives en uddybende forklaring af bremseklodsproblemet, samt de ønsker Teknologisk har med henblik på dets løsning. Dette munder ud i en mere præcis formulering af det problem, som den matematiske model skal forsøge at give svar på.

I kapitel 5 konstrueres den matematiske model. Dette indebærer en simplificering og matematificering af problemstillingen samt opbygning af en model, som bedst muligt beskriver problemet. Der foretages derefter beregninger med modellen, og disse resultater vurderes, så vidt det er muligt.

Kapitel 6 indeholder en diskussion dels af kuglepakningsteori og dels af vores model set i forhold til det opstillede formål. Desuden fremhæves modellens svage og stærke sider.

# Kapitel 1

# Introduktion til kuglepakning

Kuglepakning er fællesbetegnelsen for alle former for arrangementer af en mængde kugler. Kuglepakning har matematiske såvel som fysiske aspekter. I dette indledende kapitel vil der først blive givet generelle definitioner af henholdsvis en kugle, en kugles volumen og en kuglepakning. Derefter vil der blive givet en række eksempler på klassiske kuglepakningsproblemer. I den sidste del af kapitlet vil der blive beskrevet en række metoder, der blandt andet kan være nyttige, hvis man vil forsøge at karakterisere kuglepakninger.

## 1.1 Hvad er en n-dimensional kugle?

Normalt forstås en kugle som en tredimensional mængde, bestående af de punkter, hvor afstanden mellem kuglens centrum og hvert af punkterne er mindre end eller lig med en konstant. En n-dimensional kugle kan generelt defineres således:

**Definition**

*En n-dimensional kugle er en mængde bestående af de punkter $X = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \mathbf{R}^n$, der opfylder følgende ulighed*

$$(a_1 - x_1)^2 + (a_2 - x_2)^2 + \ldots + (a_n - x_n)^2 \leq r^2 \tag{1.1}$$

*for et givet punkt $(a_1, a_2, \ldots, a_n)$ og et givet $r>0$.*

*Punktet $(a_1, a_2, \ldots, a_n)$ kaldes kuglens centrum; afstanden r kaldes kuglens radius.*

Ud fra definitionen ses det, at en éndimensional kugle er givet som et liniestykke med længden 2r, en todimensional kugle er givet som en cirkel med radius r, og en tredimensional kugle er givet som det, der normalt forstås ved en kugle. Det ses endvidere, ud fra definitionen, hvordan en n-dimensional kugle skal forstås for $n > 3$. I det følgende vil vi bruge betegnelsen kugle i alle dimensioner, og i stedet vil de pågældende kuglers dimension blive specificeret, hvor det er nødvendigt.

### Volumenet af en n-dimensional kugle

Normalt forstås et volumen som et mål for det indre af en tredimensional mængde, men i det følgende vil der blive givet et mål for volumenet af en n-dimensional kugle. Udtrykket for volumenet vil blive givet ved en rekursionsformel.

Volumenet af en éndimensional kugle med radius r (et liniestykke) sættes til at være 2r.

For dimensionen n=2 sættes volumenet til at være integralet over cirkelskiven fra −r til r langs $x_1$, hvor radius r til enhver tid er den samme som den, den éndimensionale kugle havde.

Volumenet bliver:

$$\begin{aligned} V_2 &= \int_{-r}^{r} 2\sqrt{r^2 - x_1^2}\, dx_1 \\ &= 2\left[\frac{x_1\sqrt{r^2 - x_1^2}}{2} + \frac{r^2}{2}\sin^{-1}\frac{x_1}{r}\right]_{-r}^{r} \\ &= \pi r^2 \end{aligned} \tag{1.2}$$

For n=3 benyttes det volumen, der blev beregnet for n=2. Dermed fås følgende integration

$$V_3 = \int_{-r}^{r} \pi(r')^2\, dx_2 \text{ , hvor } r' = \sqrt{r^2 - x_2^2} \tag{1.3}$$

Dette giver

$$\begin{aligned} V_3 &= \int_{-r}^{r} \pi(r^2 - x_2^2)\, dx_2 \\ &= \pi r^2[x_2]_{-r}^{r} - \pi\left[\tfrac{1}{3}x_2^3\right]_{-r}^{r} \\ &= \frac{4}{3}\pi r^3 \end{aligned} \tag{1.4}$$

hvilket ses at være det almindelige mål for volumenet af en tredimensional kugle.

Det kan ved rekursion vises, at volumenet af en n-dimensional kugle generelt er givet ved følgende rekursive integral

$$V_n = \int_{-r}^{r} V_{n-1}^{*}(r^2 - x_1^2)^{\frac{n-1}{2}}\, dx_1 = V_n^{*} r^n \tag{1.5}$$

hvor konstantleddet $V^{*}_n$ ved induktion kan vises at have værdien

$$V_n^{*} = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)} \tag{1.6}$$

hvor Γ(x) er gammafunktionen[1] [29].

---

1: Gammafunktionen Γ(x) er generelt defineret som

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt, \quad \text{for } x > 0$$

gammafunktionen har den egenskab at

$$\Gamma(n) = (n-1)!$$

$$\Gamma(n+\tfrac{1}{2}) = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \ldots \cdot (2m-1)}{2^m}\sqrt{\pi}\ , \quad \text{for } n \in \mathbf{N}$$

# 1.2 Hvad er en n-dimensional kuglepakning?

Helt generelt er en kuglepakning defineret som følger:

**Definition**

*En **kuglepakning** er et hvilket som helst arrangement af én eller flere kugler. Således er en n-dimensional kuglepakning et arrangement af n-dimensionale kugler.*

Ordet arrangement skal opfattes helt bredt og henviser ikke til nogle specielle former for arrangementer.

De kuglepakninger, vi vil se på i det følgende, vil endvidere være såkaldte sammenhængende kuglepakninger, hvor dimensionen $n \geq 2$.

Man kan definere en sammenhængende kuglepakning ved hjælp af nogle simple definitioner fra grafteorien:

**Definitioner**

*Grafen $G = (V,E)$ udgøres af den endelige mængde $V$ af knuder og af den endelige mængde $E$ af par af forskellige knuder. Parrene $(a,b)$ i $E$ kaldes kanter; knuderne $a,b$ $(\in V)$ kaldes også enderne af kanten $(a,b)$.*

*En **delgraf** $G'$ af en graf $G$, består af delmængderne $(V', E')$, hvor $V' \subseteq V$ og $E' \subseteq E$, og hvor enhver ende af enhver kant i $E'$ er en knude i $V'$.*

*En **vej** i en graf er en delgraf bestående af knudepunkterne $\{a, b, \ldots, f\}$ $(\in V)$ og kanterne $\{ab, bc, \ldots, ef\}$ $(\in E)$. Vejen siges at løbe fra $a$ til $f$.*

*En graf er **sammenhængende fra a til f**, hvis og kun hvis der eksisterer en vej fra $a$ til $f$.*

*En graf er **sammenhængende**, hvis og kun hvis der eksisterer en vej mellem alle par af knudepunkter i grafen.*

For at få etableret en sammenhæng mellem en graf og en kuglepakning, vil en kuglepakningsgraf blive defineret som følger:

**Definition**

*En **kuglepakningsgraf** er en graf tilknyttet en kuglepakning på en sådan måde, at der er en knude i ethvert kuglecentrum og der er en kant mellem et par af knuder, hvis og kun hvis det tilhørende par af kugler rører hinanden.*

Ved brug af disse definitioner kan der nu gives følgende generelle definition af en sammenhængende kuglepakning:

**Definition**

*En kuglepakning er **sammenhængende**, hvis og kun hvis den tilknyttede kuglepakningsgraf er sammenhængende.*

Man kan overordnet skelne mellem regelmæssige, semiregelmæssige og uregelmæssige kuglepakninger. I dette projekt vil følgende definitioner for en kuglepaknings struktur blive benyttet:

**Definitioner**

*En **regelmæssig kuglepakning** kan defineres som en pakning, hvor man, langs en hvilken som helst linie trukket gennem pakningen, vil se et mønster, der gentager sig selv, forudsat at pakningen er tilstrækkelig stor.*

*En **semiregelmæssig kuglepakning** er en pakning, hvor man, langs visse linier trukket gennem pakningen, vil se mønstre, der gentager sig og langs andre linier ikke. Igen forudsat at pakningen er tilstrækkelig stor.*

*En **uregelmæssig pakning** er en pakning, hvor man, langs en hvilken som helst linie trukket igennem pakningen, ikke kan finde noget mønster, der gentager sig selv. Igen forudsat at pakningen er tilstrækkelig stor. Uregelmæssige pakninger kaldes også ofte tilfældige pakninger.*

Det skal bemærkes, at definitionerne ikke er strengt matematiske. Det kan for eksempel være svært at diskutere, hvornår et mønster gentager sig selv, og hvornår det ikke gør det. For eksempel kunne man forestille sig, at man havde et volumen, som man fyldte op med en tilfældig kuglepakning. Denne tilfældige kuglepakning lavede man så en række kopier af, som bagefter blev sammensat på en regelmæssig måde. Ville pakningen så være regelmæssig eller uregelmæssig? På makroskopisk plan ville den selvfølgelig være regelmæssig, da der ville være et mønster der gentog sig, men pakningen var jo samtidig sammensat af uregelmæssige pakninger, sådan at den på mikroskopisk plan ville være uregelmæssig. I praksis har man dog sjældent problemer med at afgøre, hvornår en pakning er regelmæssig, semiregelmæssig eller uregelmæssig.

Senere i dette kapitel vil der også blive brugt en definition på en tilfældig pakning, der både er strengere og mere strengt matematisk end ovenstående. Den lyder som følger:

**Definition**

*At en kuglepakning er tilfældig betyder, at kuglecentrene skal have tilfældige positioner. Kuglecentre har tilfældige positioner, hvis og kun hvis man i pakningen hverken kan finde en hyperplan indeholdende $n+1$ kuglecentre eller en $n$-dimensional kugle indeholdende $n+2$ kuglecentre på randen og centrum, som ikke falder sammen med centrummet af en af kuglerne i pakningen* [23].

Definitionen har for eksempel den konsekvens, at man i en todimensional tilfældig pakning ikke må kunne finde tre kugler, hvis centre ligger på en ret linie.

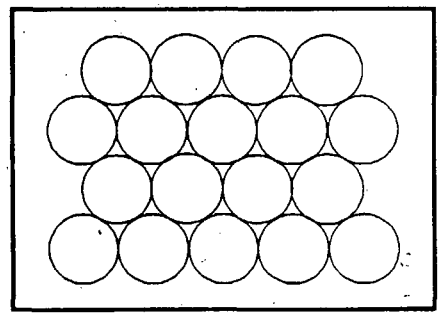
Derudover skelnes der også ofte mellem monodisperse kuglepakninger, det vil sige kuglepakninger, hvor størrelserne af kuglerne er spredt omkring én middelværdi, og polydisperse kuglepakninger, hvilket er kuglepakninger, sammensat af to eller flere populationer af kugler, med hver deres middelværdi for kuglestørrelserne.

Fra et matematisk synspunkt kan man godt opgive størrelsen af en kugle nøjagtigt, men set fra et fysisk synspunkt vil størrelserne af de kugler, man ser på, altid være spredt indenfor et eller flere intervaller. Derfor bruges ordet dispers i stedet for størrelse.

## Anvendelser af kuglepakninger samt klassiske kuglepakningsproblemer

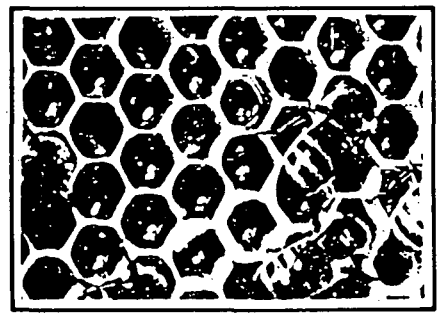
Regelmæssige kuglepakninger af højere dimensioner har overraskende vist sig at have anvendelser indenfor områder som kodningsteori (indenfor datalogien) og i gruppeteori [8].

De regelmæssige to og tredimensionale pakninger ses der desuden ofte eksempler på i naturen. For eksempel genfinder man den såkaldte hexagonale pakning i bikubers struktur.



*Figur 1.1* Den hexagonale pakning.

Som et andet eksempel kan nævnes, at det gitter, der beskrives af kuglecentrene i den såkaldte fladecentrerede kubiske pakning, er den gitterstruktur, som argon har, når det er på krystallinsk form. De regelmæssige kuglepakninger vil blive behandlet i kapitel 2.



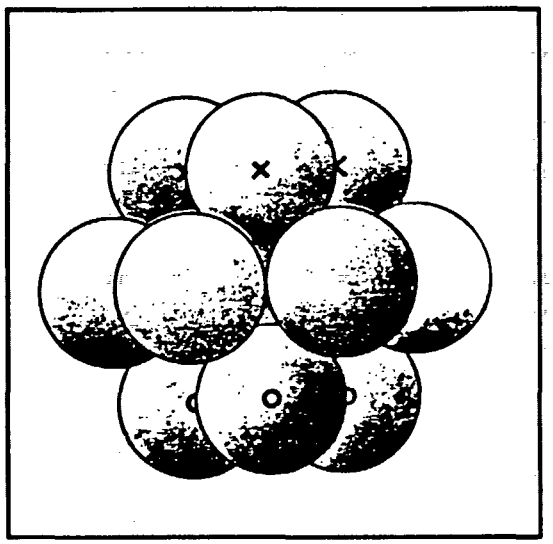
*Figur 1.2* Voksstrukturen på en bitavle.

At en kugles position er entydigt bestemt ud fra dens centrumkoordinater og dens radius, gør det bekvemt at bruge kugler som model for grundbestanddelene i stoffer. Hvis man i stedet havde valgt at bruge ellipser, kuber eller andre figurer, ville det – ud over kendskab til figurens centrumposition og form – også være nødvendigt at have kendskab til, hvordan figuren var drejet i forhold til koordinatsystemet. Derudover kan nævnes, at kugler ofte er en god approksimation til grundbestanddelene i stoffer. Fysikerne benytter derfor tit kuglepakninger, når de skal beskrive eller forstå et stof. De ser kuglerne i pakningen som idealiseringer af de partikler eller grundbestanddele, som de betragtede materialer er opbygget af, og kan så bruge en kuglepakning som model for det materiale, de betragter. Der kan dog godt være vanskeligheder forbundet med at benytte en uregelmæssig kuglepakning som model, idet man, da pakningen netop er uregelmæssig, ikke kan udtale sig så præcist om det indbyrdes arrangement af kuglerne men må nøjes med at se på sandsynlighederne for forskellige indbyrdes arrangementer af kugler. De uregelmæssige pakninger vil blive taget under grundigere behandling i kapitel 3.

Blandt de klassiske matematiske problemer indenfor kuglepakning kan nævnes følgende:

### Kontakttalsproblemet

Isaac Newton og David Gregory Newton diskuterede i slutningen af 1600-tallet, om der med monodisperse kugler kunne arrangeres 12 eller 13 kugler rundt om én central kugle således, at de alle rørte den. Det har senere vist sig, at Isaac Newton, som hævdede at der kun var plads til 12, havde ret (se figur 1.3). Det samme problem kan generelt formuleres for alle dimensioner: Hvor mange n-dimensionale kugler kan placeres omkring én central kugle, således at de alle rører den?



*Figur 1.3* Det maksimale antal kugler af samme størrelse, der kan placeres omkring én central kugle sådan, at den centrale kugle rører alle de omkringliggende kugler, er 12 [26].

### Den tætteste tredimensionale kuglepakning

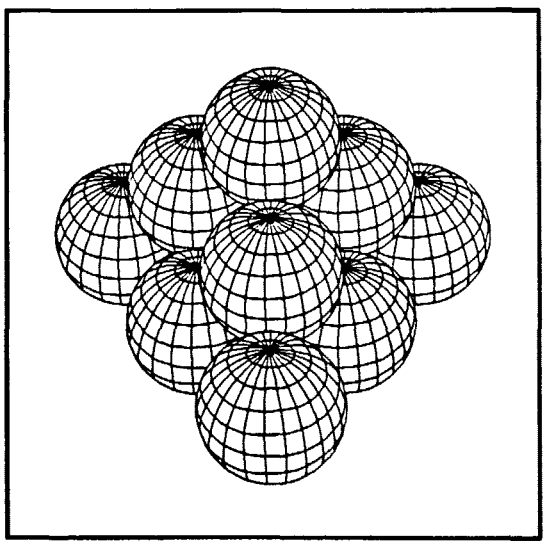
Det har indtil for nylig været et uløst problem blandt matematikerne at bestemme, hvilken monodispers kuglepakning, der er den tætteste i tre dimensioner.

Ifølge Conway og Sloane [8] har alle fysikere og de fleste matematikere længe vidst, at den pakning, der kaldes den fladecentrerede kubiske pakning[1], er den tætteste kuglepakning i tre dimensioner. Det er muligt at bevise, at den fladecentrerede kuglepakning er den tætteste **regelmæssige** tredimensionale kuglepakning, hvilket vil blive gjort i kapitel 2, men man har dog først for nylig bevist, at denne pakning også er den tætteste blandt **alle** tredimensionale kuglepakninger; regelmæssige, semiregelmæssige og uregelmæssige.

Blandt andre kuglepaknings-relaterede problemer kan nævnes:

### Dækningsproblemet

Hvordan fylder man på mest økonomisk vis et rum ud med overlappende kugler? Rummet kunne for eksempel være et gulv, og kuglerne kunne være runde tæpper, som man ville dække gulvet til med, sådan at bare pletter på gulvet blev undgået. Det viser sig, at dette problem faktisk svarer nøjagtigt til at skulle finde den tætteste ikke-overlappende kuglepakning i samme rum [8].



*Figur 1.4* Den fladecentrerede kubiske pakning.

1: Pakningen bliver også ofte kaldt appelsinpakningen, da den ofte benyttes når der stables appelsiner på grøntmarkederne.

**Diktatorproblemet**

Hvordan kan et givet antal diktatorer placeres på jordkuglen, sådan at der, for at krig kan undgås, er størst mulig afstand mellem hver diktator? Dette problem svarer til at skulle finde den tætteste ikke-overlappende kuglepakning på en kugleoverflade.

# 1.3 Kuglepakningsegenskaber

En kuglepakning kan beskrives ved hjælp af en række forskellige karakteristika og egenskaber. I det følgende vil de, der oftest ses på, blive beskrevet.

## Pakningstæthed

Pakningstætheden af en ikke-overlappende kuglepakning er et udtryk for, hvor stor en del af et rum med et endeligt volumen, der er udfyldt med kugler. Den er altså bestemt ved brøken:

$$\rho = \frac{\textit{Samlet volumen af kuglerne}}{\textit{volumen af rummet}} \tag{1.7}$$

Tætheden af en kuglepakning må nødvendigvis altid være et tal mellem 0 og 1. Af og til bliver pakningstætheden opgivet i procent.

Hvis det betragtede rum ikke har endeligt volumen, kan det alligevel give mening at tale om pakningstætheden, idet pakningstætheden så er defineret som grænseværdien for pakningstætheden i et endeligt volumen, når dette volumen går mod uendelig, forudsat at der eksisterer en grænseværdi.

Det kan nævnes, at pakningstætheden for den tætteste regelmæssige tredimensionale kuglepakning, den fladecentrerede kubiske pakning, er ca. 0,74, mens den observerede middelværdi for pakningstætheden for tilfældige tredimensionale monodisperse kuglepakninger i et tyngdefelt er noget lavere, nemlig ca 0,64.

## Porøsitet

Porøsiteten af en kuglepakning er givet som

$$\varsigma = 1 - \rho \tag{1.8}$$

Da pakningstætheden altid er et tal mellem 0 og 1, er porøsiteten det ligeledes. Porøsiteten er altså et mål for volumenet af hulrummet per samlet volumen.

## Kuglestørrelsesfordeling

Kuglestørrelsesfordelingen er den fordeling, der angiver sandsynlighedstæthedsfunktionen for de kugler, en kuglepakning er sammensat af. Størrelsesfordelingen kan angives i antal- eller volumendel kugler.

Størrelsesfordelingen kan være kontinuert eller diskret. Hvad enten man har med en diskret eller kontinuert fordeling at gøre, skal summen henholdsvis integralet af tæthedsfunktionen være 1.

Hvis partiklerne, som et givent materiale er sammensat af, med rimelighed kan tilnærmes med kugler, vil kuglestørrelsesfordelingen af materialet være givet som fordelingen af de forskellige størrelser kugler, som partiklerne tilnærmes med. Set fra et fysisk synspunkt har man, hvis man skal være pedantisk, altid med en diskret størrelsesfordeling at gøre, da man kun kan betragte et endeligt antal kugler. Men da man hverken er i stand til, eller interesseret i, at måle størrelserne af partiklerne uendeligt nøjagtigt, fittes fordelingen ofte med en kontinuert fordelingskurve, der så bruges som partikelstørrelsesfordeling.

## Kontakttal

Kontakttallet N for en kugle i en pakning, er antallet af andre kugler, der rører ved den. I den fladecentrerede kubiske pakning er kontakttallet for en vilkårlig kugle, som ikke ligger på randen af pakningen, tolv, idet der er tre kugler i laget under den betragtede kugle, seks kugler fra samme lag, som kuglen ligger i, og tre kugler fra laget over den betragtede kugle, der rører den (se figur 1.3).

I en tilfældig kuglepakning er kontakttallet selvfølgelig forskelligt fra kugle til kugle, og i stedet for at se på kontakttallet af hver enkelt kugle ses ofte på kontakttalsfordelingen. Det er klart, at denne fordeling vil blive diskret, da en kugles kontakttal tælles i hele tal.

## Stabilitet

At en kuglepakning er stabil overfor en given kraftpåvirkning betyder, at pakningen ikke ændrer sig, når den bliver udsat for påvirkningen. Stabilitet er altså et rent fysisk begreb, som ikke umiddelbart giver mening set fra et matematisk synspunkt.

Det er ikke muligt at opstille et generelt stabilitetskriterium. I stedet skal der tages stilling fra specialtilfælde til specialtilfælde. Med andre ord kan en pakning godt være stabil overfor kræfter i nogle retninger, uden at den er det i andre retninger. Som eksempler på stabilitetskriterier kan nævnes følgende:

I en todimensional kuglepakning i et tyngdefelt kan et stabilitetskrav være, at hver kugle skal understøttes af mindst to faste punkter. De faste punkter kan enten være andre kugler, som så igen er understøttet af faste punkter, eller kanten af den boks, hvori kuglerne pakkes. Man kan forestille sig, at kuglernes indbyrdes gnidningsmodstand også får indflydelse på pakningen.

Stabilitetskravet i det tilsvarende tredimensionale tilfælde kan være, at hver kugle skal understøttes af mindst tre faste punkter.

Det anes måske, at der er en sammenhæng mellem stabiliteten og kontakttallet af en kuglepakning. Har man med en tilfældig monodispers kuglepakning at gøre, vil det gennemsnitlige kontakttal være mindst seks, idet hver kugle minimum skal hvile på tre andre og gennemsnitligt tre kugler vil hvile ovenpå hver kugle. Hvis pakningen skal være stabil, må der ikke være for mange kugler, der kun har kontakttallet tre [15].

# 1.4 Matematisk repræsentation af kuglepakninger

I det følgende vil forskellige metoder til at give en matematisk repræsentation af de indbyrdes arrangementer af kuglerne i en kuglepakning blive beskrevet. Metoderne adskiller sig hovedsageligt fra de foregående ved, at de er af mere teoretisk karakter.

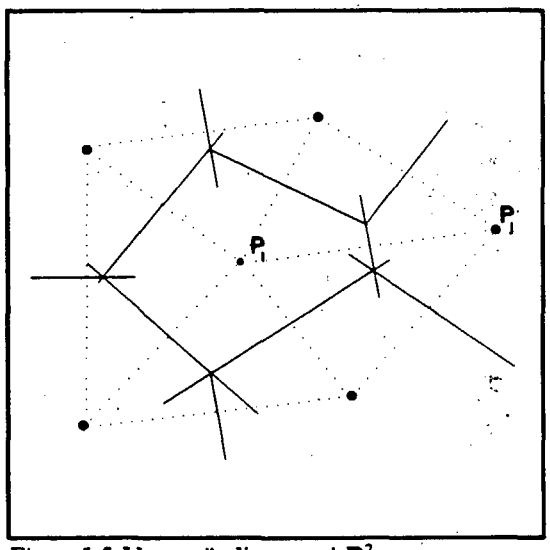
## Voronoï-celler

At dele et rum op i Voronoï-celler er en kendt metode til opdeling af et rum med et endeligt antal punkter, som ikke kun kan benyttes til at beskrive kuglepakninger. Hvis man har med monodisperse kugler at gøre i stedet for med punkter, erstattes punkterne med kuglecentrene, og opdelingen laves på samme måde.

Lad $(P_i)$, $0 \le i \le k$, være en familie[1] af k punkter i $\mathbf{R}^n$, hvor $n \ge 2$.

Lad $H(P_i,P_j)$ være det lukkede halvrum af $\mathbf{R}^n$, der indeholder $P_i$ men ikke $P_j$, og hvor hyperplanen, der deler rummet mellem $P_i$ og $P_j$ er bisektionsplanen på forbindelseslinien mellem $P_i$ og $P_j$.

Voronoï-cellen til et givent punkt er den celle, der fremkommer, hvis man laver sådanne halvrum mellem alle par af det valgte punkt og andre punkter og derefter tager fællesmængden af disse halvrum.



*Figur 1.5* Voronoï-diagram i $\mathbf{R}^2$.

**Definition**

*Voronoï-cellen $V_i$ til punktet $P_i$ er defineret som*

$$V_i = V(P_i) = \bigcap_{j \neq i} H(P_i,P_j), \text{ for } i \neq j \tag{1.9}$$

**Definition**

*Mængden af $V_i$'erne, hvor $0 \le i \le k$, kaldes Voronoï-diagrammet tilknyttet punkterne $P_i$ [23].*

**Følgesætning**

*$V_i$ er mængden af punkter $x \in \mathbf{R}^n$, sådan at $d(x,P_i) \le d(x,P_j)$ for alle j ($d(x,y)$ er afstanden mellem x og y).*

Dette kan også skrives

$$V_i = \{x \in \mathbf{R} \mid d(x,P_i) \le d(x,P_j), \forall j\} \tag{1.10}$$

1: En familie af punkter er en indiceret mængde af punkter.

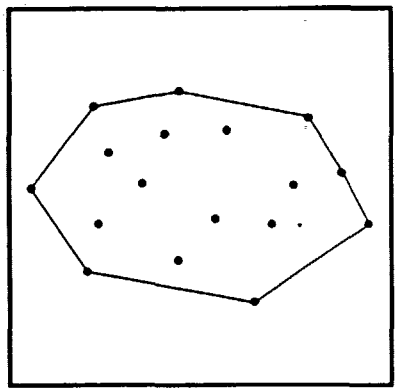
Det vil sige, at Voronoï-cellen til et punkt udgøres af mængden af punkter, der er tættere på $P_i$ end på nogle af de andre punkter, eller som befinder sig præcist mellem to eller flere punkter, hvoraf det ene punkt er $P_i$ [23].

**Definition**

*Det konvekse hylster af punkterne $P_0,\ldots, P_k$, $conv\{P_0,\ldots, P_k\}$ er mængden af alle konvekse kombinationer af punkterne $P_0,\ldots,P_k$, dvs. summen*

$$\sum_{i=1}^{k} \lambda_i P_i, \quad \lambda_i \geq 0 \text{ og hvor } \sum_{i=1}^{k} \lambda_i = 1 \tag{1.11}$$

Det konvekse hylster $conv\{P_0,\ldots,P_k\}$ er altså den mindste konvekse mængde, der indeholder punkterne $P_0,\ldots, P_k$ (se figur 1.6) [6].



*Figur 1.6* Det konvekse hylster til en punktmængde.

Der gælder følgende sætninger om Voronoï-celler [23]:

V1 *$V_i$ er en konveks polytop[1] indeholdende $P_i$ i sit indre.*

V2 *Polytopen $V_i$ er ubegrænset, hvis og kun hvis $P_i$ tilhører randen af det konvekse hylster til $P_j$'erne.*

V3 *Hvis $P_s$ er et af de punkter, der er tættest på $P_i$ (for $s \neq i$), vil en af $V_i$'s sider støde op til den hyperplan, der bisekterer linien mellem $P_i$ og $P_s$.*

V4 *Voronoï-cellerne udfylder hele $\mathbf{R}^n$, dvs.*

$$\bigcup_{i=1}^{k} V_i = \mathbf{R}^n \tag{1.12}$$

*og det indre af polytoperne $V_i$ overlapper ikke hinanden.*

Hvis man har med punkter i tilfældige positioner at gøre, gælder endvidere:

V5 *Ethvert hjørnepunkt i $V_i$ er fælles for præcist $n+1$ polytoper $V_j$ og præcist $n+1$ kanter af dimension $n-1$.*

Beviser for sætningerne kan findes i appendix A.

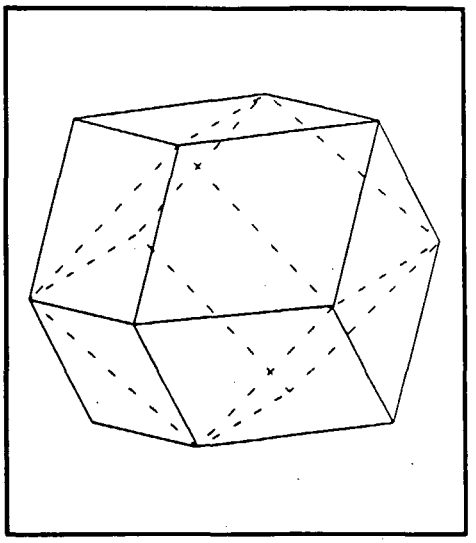
**Eksempler**

Det ses at man, hvis man i to dimensioner laver den såkaldte hexagonale pakning (se figur 1.1), får Voronoï-celler af form som hexagoner, deraf navnet "den hexagonale pakning".

Hvis man har en fladecentreret kubisk pakning i tre dimensioner (se figur 1.4), bliver de tilsvarende Voronoï-celler rhombiske dodekaedere (se figur 1.7).

1: Med konveks polytop menes fællesmængden af et endeligt antal lukkede halvrum.

Hvis man har med uregelmæssige pakninger at gøre, bliver de tilhørende Voronoï-celler tilsvarende uregelmæssige, men de vil så til gengæld opfylde V5.



*Figur 1.7* Et rhombisk dodekaeder.

## Dualen til Voronoï-celler: Delaunay-celler

De h hjørnepunkter $H_i$ i Voronoï-diagrammet for punkterne $P_0,...,P_k$ i $\mathbf{R}^n$ kan opfattes som et udtryk for porerne, dvs. hullerne mellem kuglerne, i den kuglepakning, der er tilknyttet diagrammet. Der kan tilknyttes en såkaldt Delaunay-celle[1] til ethvert hjørnepunkt i Voronoï-diagrammet, sådan at hjørnerne i Delaunay-cellen alle er punkter $P_i \in \{P_0,...,P_k\}$. Delaunay-cellen er defineret som følger:

**Definition**

***Delaunay-cellen*** *$D_i$ til et hjørnepunkt $H_i$ er det n-dimensionale konvekse hylster af de m punkter $P_i$, der ligger tættere på $H_i$ end på noget andet punkt.*

**Bemærkninger**

Da det konvekse hylster skal være n-dimensionalt, skal der eksistere præcist n+1 affint uafhængige punkter blandt de m punkter $P_i$.

Hvilke m punkter $P_i$, der ligger tættest på $H_i$, er entydigt bestemt ud fra Voronoï-diagrammet, idet det drejer sig om de punkter, hvis Voronoï-celler har et hjørne i $H_i$.

**Definition**

*Mængden af $D_i$'erne, hvor $0 \le i \le h$, kaldes* ***Delaunay-diagrammet*** *tilknyttet hjørnepunkterne $H_i$ fra Voronoï-diagrammet.*

Da Voronoï-diagrammet til punkterne $P_1,...,P_k$ er entydigt, vil Delaunay-diagrammet også blive entydigt.

Der gælder følgende sætninger om Delaunay-celler

D1 *$D_i$ er en konveks polytop af dimension n.*

D2 *Hver Delaunay-celle $D_i$ er tilknyttet netop ét hjørnepunkt $H_i$, og der er tilknyttet netop et hjørnepunkt til hver Delaunay-celle*

1: At konstruere Delaunay-celler blev første gang foreslået af Boris Nikolaevich Delone. Da han publicerede arbejdet med dem, stavede han sit navn Delaunay, og den stavemåde er altså blevet hængende [8].

D3 *Delaunay-cellerne udfylder hele det konvekse hylster af punkterne $P_0,\ldots,P_k$, dvs.*

$$\bigcup_i D_i = conv\{P_0,\ldots,P_k\} \tag{1.13}$$

*og derfor ikke hele $\mathbf{R}^n$.*

D4 *Hvis $P_s$ er et af de punkter, der ligger tættest på $P_i$, og $i \neq s$, vil $P_i$ og $P_s$ være to hjørner i samme Delaunay-celle.*

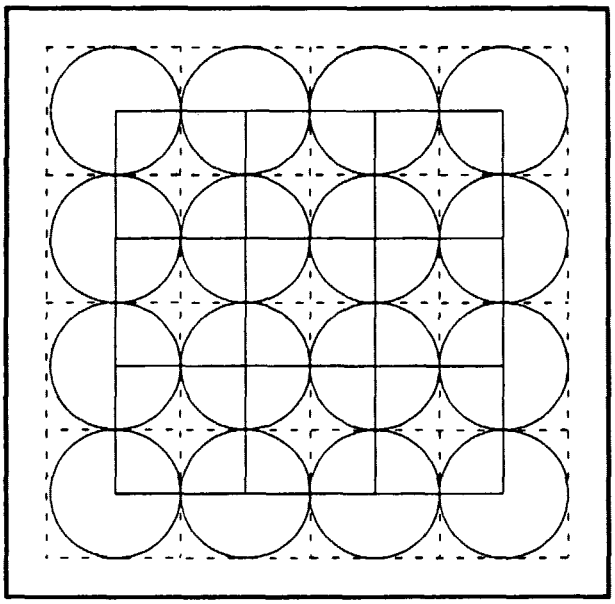
Hvis punkterne $P_i$ befinder sig i tilfældige positioner, vil endvidere gælde

D5 *$D_i$ er et simpleks med hjørner i $n+1$ punkter $P_i$.*

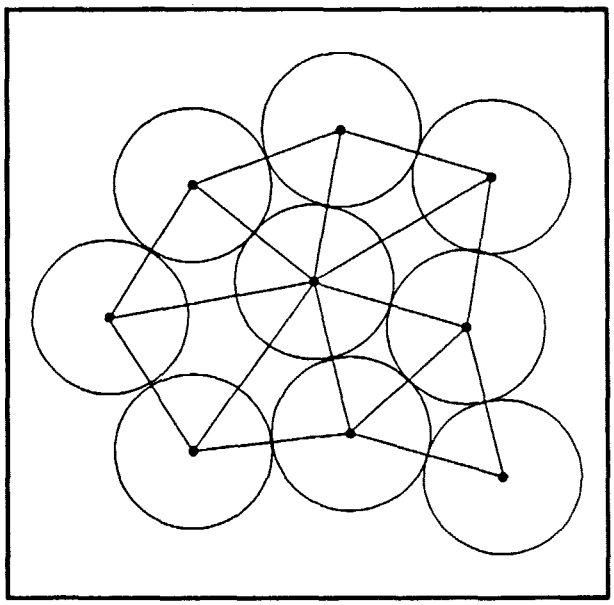
Beviser for D1–D5 findes i appendix A.

**Eksempler**

I den todimensionale kubiske pakning fås, som det ses på figur 1.8, kvadratiske Delaunay-celler. I tilfældige todimensionale pakninger fås derimod, jævnfør D5, altid trekantede Delaunay-celler (se figur 1.9).



*Figur 1.8* Delaunay- og Voronoï-celler til det kubiske gitter. Voronoï-cellerne er markeret med stiplede linier og Delaunay-cellerne med fuldt optrukne linier.



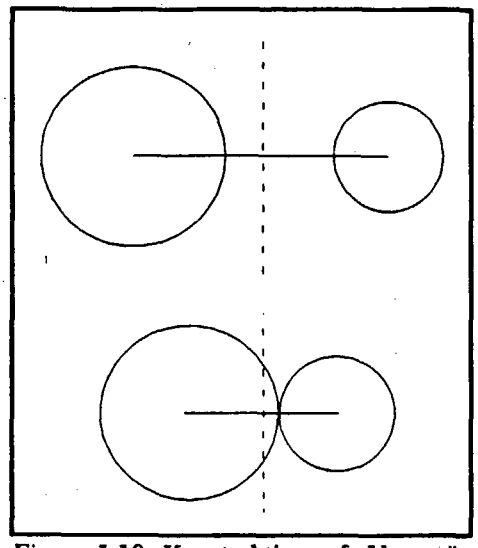
*Figur 1.9* Delaunay-celler i en tilfældig monodispers kuglepakning. Det ses, at de alle er trekantede.

## Radikalplans-celler

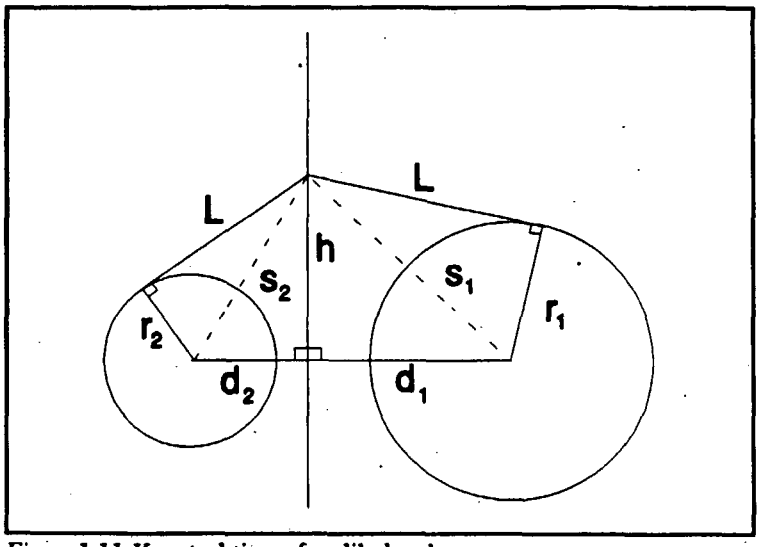
Hvis man har med pakninger af to størrelser kugler at gøre, ses det, at man, når man konstruerer Voronoï-cellerne, kan få cellekanter, der ikke længere ligger mellem kuglerne, men i stedet ligger inde i de store af kuglerne (se figur 1.10).

For at undgå dette er metoden til konstruktion af Voronoï-celler blevet videreudviklet af J.L. Finney i 1982 [12]. I stedet for at anbringe bisekterende planer mellem to kuglecentre, anbringes såkaldte radikale planer (se figur 1.11).

Tangenterne til de to kugler skal vælges sådan, at afstanden fra skæringen mellem tangenterne til de punkter, hvor tangenterne snitter kuglerne, er ens. Denne afstand kaldes L. Den radikale plan består af den punktmængde, der fås, når ovenstående konstruktion laves med varierende længder af L.



*Figur 1.10* Konstruktion af Voronoï-celler i polydisperse pakninger.




*Figur 1.11* Konstruktion af radikale planer.

Ifølge Pythagoras' sætning haves

$$i)\quad s_1^2 = r_1^2 + L^2 = d_1^2 + h^2 \tag{1.14}$$

og

$$ii)\quad s_2^2 = r_2^2 + L^2 = d_2^2 + h^2 \tag{1.15}$$

i) og ii) kan sammenskrives til

$$L^2 = d_1^2 + h^2 - r_1^2 = d_2^2 + h^2 - r_2^2 \tag{1.16}$$

Idet

$$d = d_1 + d_2 \tag{1.17}$$

fås endvidere

$$d_1^2 - r_1^2 = (d - d_1)^2 - r_2^2 \tag{1.18}$$

som endeligt kan omskrives til

$$d_1 = \frac{d^2 + r_1^2 - r_2^2}{2d} \tag{1.19}$$

Tilsvarende fås

$$d_2 = \frac{d^2 + r_2^2 - r_1^2}{2d} \tag{1.20}$$

Der haves således et udtryk for afstanden mellem centrum af en kugle og den radikale plan. Det ses, at udtrykket kun afhænger af kugleradierne og afstanden mellem kuglecentrene, hvoraf det følger, at man vil få samme udtryk for alle valg af L.

Cellekanterne i en ikke-overlappende polydispers kuglepakning vil altid ligge mellem to kugler eller være tangenter til begge kugler (se figur 1.12), hvilket ses ved, at såfremt kuglerne ikke overlapper hinanden, gælder uligheden

$$d \geq r_1 + r_2 \tag{1.21}$$

som indsat i (1.18) resulterer i uligheden

$$d_1^2 - r_1^2 \geq (r_1 + r_2 - d_1)^2 - r_2^2 \tag{1.22}$$

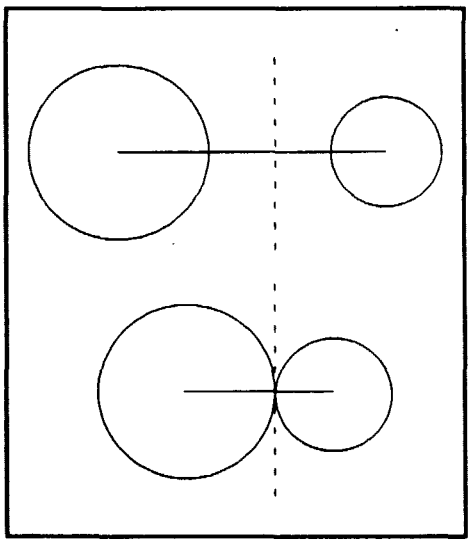
Denne kan efter nogle mellemregninger omskrives til

$$\begin{aligned} 2d_1(r_1 + r_2) &\geq 2r_1(r_1 + r_2) \quad \leftrightarrow \\ d_1 &\geq r_1 \end{aligned} \tag{1.23}$$

hvor lighedstegnet fås for $d=r_1+r_2$. På tilsvarende måde kan det vises, at

$$d_2 \geq r_2 \tag{1.24}$$

hvoraf det ses, at den radikale plan må ligge mellem kuglerne eller på randen af disse, såfremt kuglerne ikke overlapper hinanden. Hvis kuglerne overlapper, viser det sig endvidere, at den radikale plan kommer til at gå igennem skæringerne mellem de to kuglers rande [12].



*Figur 1.12* Konstruktion af Radikalplanscelle. Det ses, at den Radikale plan, når kuglerne støder op til hinanden, er tangent til begge kugler på en gang.

Konstruktionen af Radikalplans-diagrammet i polydisperse kuglepakninger ligner konstruktionen af Voronoï-diagrammet, med den ene undtagelse, at hyperplanen, der deler rummet mellem to kuglecentre $C_i$ og $C_j$, er en radikal plan og ikke en bisektionsplan på forbindelseslinien mellem $C_i$ og $C_j$. Radikalplans-cellerne har dog i polydisperse kuglepakninger den fordel, at størrelserne af dem vil afspejle størrelserne af de kugler, de omgiver, hvilket Voronoï-cellerne ikke gør.

Det ses, at hvis kuglerne i pakningen er lige store, sådan at $r_1=r_2$ fås

$$d_1 = d_2 = \frac{d}{2} \tag{1.25}$$

Det betyder, at for monodisperse kuglepakninger bliver de radikale planer bisektionsplaner, sådan at Radikalplans-diagrammet bliver identisk med Voronoï-diagrammet.

Det skal også bemærkes, at hvor det gav mening at konstruere Voronoï-diagrammer for punkter i $\boldsymbol{R}^n$, skal man, for at kunne konstruere Radikale planer, have med kugler at gøre, idet kuglernes radius er med til at bestemme, hvor de radikale planer skal ligge. Man skal altså have flere oplysninger om kuglepakningen for at konstruere Radikalplans-celler, end for at konstruere Voronoï-celler.

Lad altså $(C_i)$, $0 \le i \le k$, være en familie af k kuglecentre i $\mathbf{R}^n$, hvor $n \ge 2$.

Lad $H(C_i,C_j)$ være det lukkede halvrum af $\mathbf{R}^n$, der indeholder $C_i$ men ikke $C_j$, og hvor hyperplanen, der deler rummet mellem $C_i$ og $C_j$, er den radikale plan for kuglerne med centre $C_i$ og $C_j$.

Radikalplans-cellen til et punkt er den celle, der fremkommer, hvis man laver sådanne halvrum mellem alle par af det valgte punkt og andre punkter og derefter tager fællesmængden af disse halvrum.

**Radikalplans-cellen** $R_i$ til punktet $C_i$ er altså defineret som følger

**Definition**

$$R_i = R(C_i) = \bigcap_{j \neq i} H(C_i,C_j) \tag{1.26}$$

**Definition**

*Mængden af $R_i$'erne, hvor $0 \le i \le k$, kaldes **Radikalplans-diagrammet** tilknyttet kuglecentrene $C_i$.*

**Følgesætning**

$R_i$ er mængden af punkter

$$\{x \in \mathbf{R} \mid d(x,C_i) \le \frac{d_{ij}^2 - r_j^2 + r_i^2}{2d_{ij}}, \ \forall j\} \tag{1.27}$$

hvor $d_{ij} = d(C_i, C_j)$.

Der gælder følgende sætninger om Radikalplans-celler:

R1 *$R_i$ er en konveks polytop indeholdende $C_i$ i sit indre.*

R2 *Polytopen $R_i$ er ubegrænset, hvis og kun hvis $C_i$ tilhører randen af det konvekse hylster til $R_i$'erne.*

R3 *Hvis $C_s$ er et af de punkter, der er tættest på $C_i$ (for $s \neq i$), vil en af $R_i$'s sider støde op til den radikale plan, som er bestemt af kuglerne med centre $C_i$ og $C_s$.*

R4 *Radikalplans-cellerne udfylder hele $\mathbf{R}^n$, dvs.*

$$\bigcup_{i=1}^{k} R_i = \mathbf{R}^n \tag{1.28}$$

*og det indre af polytoperne $R_i$ overlapper ikke hinanden.*

Hvis man har med punkter i tilfældige positioner at gøre, må endvidere gælde:

R5 *Ethvert hjørnepunkt i $R_i$ er fælles for præcist n+1 polytoper $R_j$ og præcist n+1 kanter af dimension n-1.*

Se beviser i appendix A.

## Dualen til Radikalplans-celler

Ud fra Radikalplans-diagrammet er der defineret en anden slags naboskabsforhold mellem sæt af punkter end den, der blev givet ud fra Voronoï-diagrammet, idet punkter, som delte et hjørne i Voronoï-diagrammet, ikke nødvendigvis behøver at dele et hjørne i Radikalplans-diagrammet. Dette giver naturligvis anledning til at opdele $\mathbf{R}^n$ i de celler, der er dualen til Radikalplans-cellerne. Vi har i mangel af et bedre navn valgt at kalde cellerne Krarfu-celler[1] $K_i$. De m hjørner i hver celle er kuglecentre $C_j$, hvis Radikalplans-celler alle støder op til samme hjørne $H_i$ i Radikalplans-diagrammet. En Krarfu-celle er defineret som følger

### Definition

***Krarfu-cellen** til et hjørnepunkt $H_i$ i et Radikalplans-diagram er det n-dimensionale konvekse hylster af de m kuglecentre $C_p$ der ligger tættest på $H_i$.*

### Bemærkninger

Ligesom for Delaunay-cellerne gælder, at da det konvekse hylster skal være n-dimensionalt, skal der eksistere n+1 affint uafhængige punkter blandt de m punkter $C_i$.

Hvilke m kuglecentre, der ligger tættest på $H_i$, er entydigt bestemt ud fra Radikalplans-diagrammet. Det er nemlig de centre, hvis Radikalplans-celler har et hjørne i $H_i$.

Et Krarfu-diagram bliver så, analogt til Delaunay-diagrammet:

### Definition

*Mængden af cellerne $K_i$, hvor $0 \le i \le h$, kaldes **Krarfu-diagrammet** tilknyttet de h hjørnepunkter $H_i$ i Radikalplans-diagrammet.*

Da Radikalplans-diagrammet er entydigt, vil også Krarfu-diagrammet blive entydigt.

1: Krarfu er en sammenskrivning af Kruse, Arleth og Fundal.

Der gælder stort set de samme sætninger for Krarfu-celler, som der gør for Delaunay-celler, nemlig:

K1 *$K_i$ er en konveks polytop af dimension n.*

K2 *Hver Krarfu-celle er tilknyttet netop et hjørne punkt $H_j$, og der er tilknyttet netop et hjørnepunkt til hver Krarfu-celle.*

K3 *Randen af det konvekse hylster til punkterne $C_0,...,C_n$ udgøres af sideflader til Krarfu-cellerne $K_i$.*

K4 *Hvis $P_s$ er et af de punkter, hvis Radikalplans-celle støder op til Radikalplans-cellen for $C_i$ (for $i \neq s$), vil $C_i$ og $C_s$ være to hjørner i samme Krarfu-celle.*

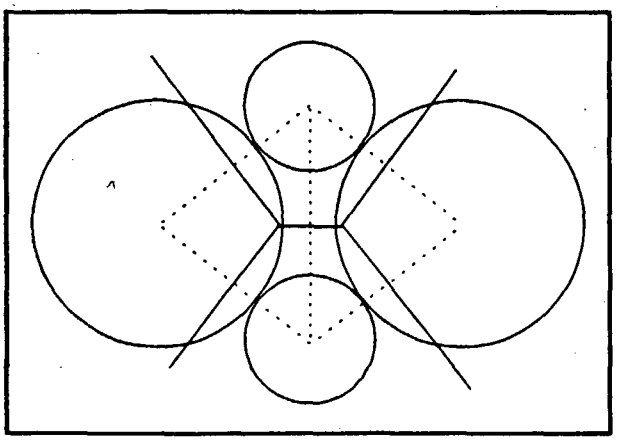
Hvis kuglepakningen er tilfældig, sådan at kuglecentrene $C_i$ befinder sig i tilfældige positioner, gælder endvidere, svarende til D5:

K5 *$K_i$ er et simpleks med hjørner i n+1 kuglecentre $C_i$.*

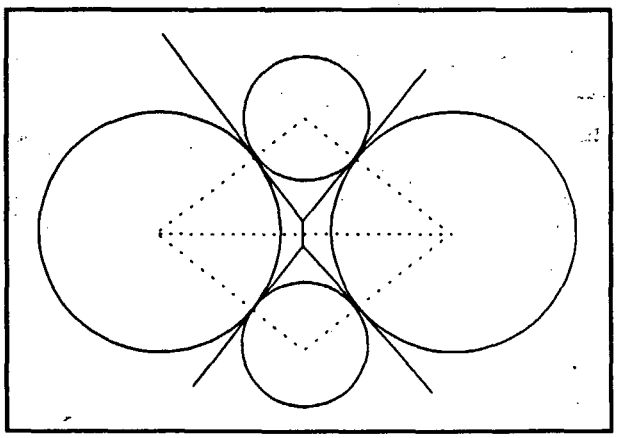
Beviser for K1-K5 findes i appendix A.

## Voronoï-celler vs. Radikalplans-celler

Et eksempel på forskellene mellem Voronoï-celler og Delaunay-celler på den ene side og Radikalplans-celler og Krarfu-celler på den anden side ses afbildet på figur 1.13 og 1.14.



*Figur 1.13* Skitse af Voronoï-celler (fuldt optrukne linier) og Delaunay-celler (stiplede linier) for kugler med forskellige størrelser. Det ses at sidefladerne i Voronoï-cellerne ligger inde i de store af kuglerne.



*Figur 1.14* Radikalplans-celler (fuldt optrukne linier) og Krarfu-celler (stiplede linier) for kugler med forskellige størrelser. Det ses at Krarfu-cellerne ikke bliver de samme som Delaunay-cellerne på den anden figur.

## Porestørrelsesfordeling

Bernal foreslog omkring 1960, at man i stedet for at kigge på arrangementet af kuglecentrene valgte at kigge på fordelingen af størrelserne af porerne mellem kuglerne.

Radius af en pore mellem kuglerne i en kuglepakning blev sat til at være radius af den største kugle, der kunne lægges ind i poren. Bernal interesserede sig altså i dette tilfælde ikke for de

sammenhængende kanaler, der fremkommer mellem kuglerne i en n-dimensional pakning, hvor $n \geq 3$, men kun for størrelserne af porerne mellem kuglerne.

Det er klart, at hvis man har med en regelmæssig kuglepakning at gøre, bliver porestørrelsesfordelingen diskret.

For en tilfældig pakning bliver det mere interessant at se på porestørrelsesfordelingen, idet der så fås flere forskellige porestørrelser. Set fra et fysisk synspunkt vil porestørrelsesfordelingen for en tilfældig kuglepakning strengt taget altid blive diskret, da man kun kan betragte et endeligt antal kugler.

For at kunne kortlægge Voronoï-cellerne, Delaunay-cellerne eller porestørrelsesfordelingen i en kuglepakning er man nødt til at kende centrumkoordinater og radius for hver enkelt kugle i pakningen. Dette er ikke noget problem, hvis man har med en regelmæssig kuglepakning eller en computersimuleret pakning at gøre. Hvis man derimod har med en virkelig tilfældig kuglepakning at gøre, volder dette punkt problemer, da det er et kolossalt arbejde at måle og beregne centrumkoordinaterne for samtlige kugler.

## Radialfordelingsfunktion

En radialfordelingsfunktion for punkter i et rum beskriver fordelingen af punkter i forskellige afstande fra et tilfældigt valgt centralt punkt.

Radialfordelingsfunktionen giver færre oplysninger om pakningens struktur, end for eksempel Radikalplans-diagrammet til pakningen gør. En kuglepakning kan for eksempel ikke fastlægges entydigt ud fra dens radialfordelingsfunktion, som den kan ud fra dens Radikalplans-diagram, da der hører adskillige kuglepakninger til hver radialfordelingsfunktion. Radialfordelingsfunktionen har til gengæld den fordel, at den forholdsvis let kan bestemmes ad eksperimentel vej, da det ikke er nødvendigt at kende positionerne af alle kuglecentrene for at finde funktionen.

Vi vil ikke her komme ind på, hvordan radialfordelingsfunktionen bliver bestemt eksperimentelt, men blot nævne, at den via en Fourier-transformation kan udledes fra resultaterne af diffraktionsmålinger på det betragtede stof [30].

Det er kun muligt at opstille analytiske udtryk for radialfordelingsfunktioner i enkelte tilfælde. Vi vil kort omtale to af disse tilfælde. I det ene betragtes punkter, der er tilfældigt spredt i rummet, mens det andet drejer sig om punkter, der befinder sig i en gitterstruktur.

### Radialfordelingsfunktion for punkter tilfældigt spredt i rummet

Der betragtes en familie af k punkter $P_i$, som er tilfældigt spredt i rummet og har koordinatvektorerne $R_i$. Det antages, at tætheden per volumen-enhed er $\bar{n}$. Det forventede antal punkter i en kugleskal med tykkelsen dr, lagt omkring et tilfældigt valgt punkt, bliver så:

$$f_{tilfældig}(r)dr = 4\pi\bar{n}r^2dr \tag{1.29}$$

hvoraf det sluttes, at det forventede antal punkter i radius r fra det valgte centrale punkt bliver

$$f_{tilfeldig}(r) = 4\pi\bar{n}r^2 \tag{1.30}$$

hvilket netop er udtrykket for radialfordelingsfunktionen for punkter tilfældigt spredt i rummet [30]. Strengt taget er funktionen en sandsynlighedstæthedsfunktion, men det kaldes den sjældent blandt fysikere.

**Radialfordelingsfunktionen for punkter i en gitterstruktur**

Hvis der betragtes punkter i en gitterstruktur, vil radialfordelingsfunktionen[1] være nul alle vegne undtaget i de bestemte afstande $r_i$, hvor der er punkter. Disse bestemte afstande kaldes skaller.

I en given radius $r_i$ kan der enten være $Z_i$ punkter eller ingen punkter, hvilket kan udtrykkes på følgende vis:

$$f_{gitter}(r) = \sum_i Z_i(r)\delta(r,R_i) \tag{1.31}$$

hvor funktionen $\delta(r,R_i)$ er en gaffelfunktion, der er defineret som følger

$$\delta(r,R_i) = \begin{cases} 1 \; for \; r=R_i \\ 0 \; for \; r \neq R_i \end{cases} \tag{1.32}$$

hvor $Z_i$ er antallet af punkter i den givne skal [30].

**Radialfordelingsfunktioner for kuglepakninger**

For kuglepakninger ses på kuglernes centre i stedet for de punkter, der betragtedes i ovenstående. Radialfordelingsfunktionen for kugler i gitterpakninger kan naturligvis bestemmes teoretisk, mens radialfordelingsfunktionerne for tilfældige kuglepakninger må bestemmes eksperimentelt. Hvis kuglerne er hårde, må der i tilfældige kuglepakninger komme en lidt højere grad af orden, end der er for punkter i helt tilfældige positioner, da afstanden mellem to kuglecentre minimalt må være summen af deres radier. Dette afspejler sig i radialfordelingsfunktionen. Hvis man betragter radialfordelingsfunktionen for en tilfældig monodispers kuglepakning, vil man for eksempel se, at for små r ser det ud til, at pakningen har skal-struktur (radialfordelingsfunktionen ligner altså $f_{gitter}(r)$), mens radialfordelingsfunktionen for større r konvergerer mod radialfordelingsfunktionen for punkter i tilfældige positioner ($f_{tilfeldig}(r)$).

# 1.5 Opsamling

Hensigten med kapitlet har været at forklare, hvad en kuglepakning er og at præsentere noget af den teori, der eksisterer, og nogle metoder til at beskrive og karakterisere kuglepakninger. Vi synes, at dette hører med blandt de vigtigste forudsætninger for at beskæftige sig med

1: Burde retteligt kaldes radialtætheden.

kuglepakning på et teoretisk plan. Teorien og metoderne kan, set ud fra et teoretisk synspunkt, benyttes til alle slags kuglepakninger, regelmæssige som tilfældige, monodisperse som polydisperse. Det forekommer dog klart, at flere af metoderne bygger på, at man allerede har et vist kendskab til kuglepakningerne. Det kan, hvis man for eksempel har med en tredimensional tilfældig kuglepakning at gøre, godt være et stort arbejde bare at få indsamlet tilstrækkeligt med oplysninger til, at de beskrevne metoder overhovedet kan benyttes. Hvis man derimod har med regelmæssige kuglepakninger at gøre, er det straks meget lettere at give en fyldestgørende beskrivelse af en given pakning.

# Kapitel 2

# Regelmæssige kuglepakninger

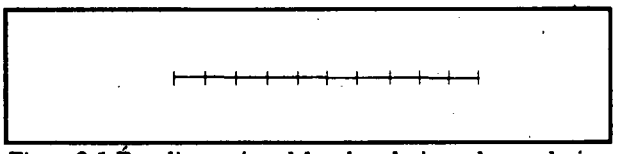
Matematisk set er det de regelmæssige kuglepakninger, som er lettest at behandle, da de – som betegnelsen siger – er regelmæssige. Regelmæssige kuglepakninger kan være monodisperse såvel som polydisperse, men vi vil i dette kapitel hovedsageligt beskæftige os med de monodisperse.

## 2.1 Hvad er en regelmæssig kuglepakning?

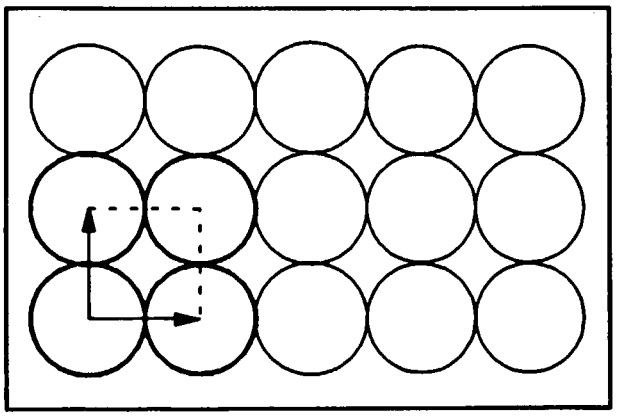
En regelmæssig kuglepakning blev på side 12 defineret som en pakning, hvor man, langs en hvilken som helst linie trukket gennem pakningen, vil se et mønster, der gentager sig selv, forudsat at pakningen er tilstrækkelig stor.

### Gitterpakninger

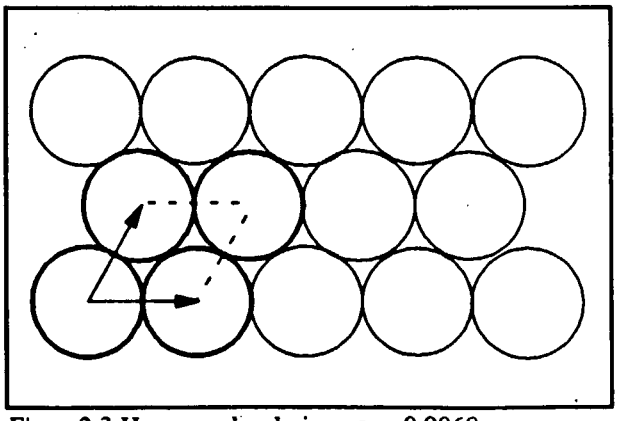
Der findes en særlig kategori af regelmæssige kuglepakninger, der kaldes gitterpakninger. I gitterpakninger skal der ligge et kuglecentrum i origo, hvilket altid kan opnås ved at flytte koordinatsystemet, og der skal eksistere en enhedscelle. Enhedscellen kaldes i nogle tilfælde for den fundamentale parallelotop.



*Figur 2.1* Én-dimensional kuglepakning, dvs. pakning af liniestykker, $\rho = 1$.



*Figur 2.2* Kubisk pakning, $\rho \approx 0{,}7854$.



*Figur 2.3* Hexagonal pakning, $\rho \approx 0{,}9068$.

**Definition:**

*En enhedscelle i en n-dimensional kuglepakning er en celle, der udspændes af et sæt af n lineært uafhængige basisvektorer ($v_1$, $v_2$... $v_n$) gående mellem par af kuglecentre, ved hjælp af hvilke man kan angive centrum af enhver kugle som* $u = k_1v_1+k_2v_2+...+k_nv_n$ *hvor* $k_i \in \mathbb{Z}$.

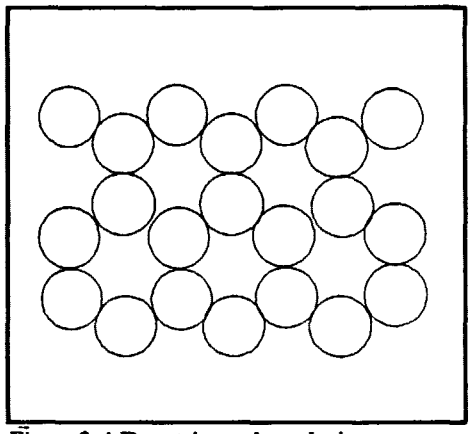
Enhedscellen indeholder kugledele som sammenlagt svarer til præcis én kugle og kan siges at være en art byggesten, idet man kun behøver at beskrive enhedscellen for en given gitterpakning for at repræsentere hele pakningen [8].

At enhedscellen sammenlagt indeholder præcist én kugle ses let i to dimensioner, hvor enhedscellen indeholder fire kugleudsnit på tilsammen 360°, da summen af vinkler i et rektangel er 360°. Man kan på samme måde argumentere for, at enhedsceller i højere dimensioner også indeholder netop én kugle.

Pakninger i én dimension består som nævnt tidligere af liniestykker. Den éndimensionale enhedscelle er således bestemt ved længden af den udspændende vektor. Den tætteste pakning opnås med en vektor, der har længden *2r*, dvs. kuglerne er skubbet helt tæt sammen og giver en tæthed på *1* (se figur 2.1).

På figur 2.2 og 2.3 ses to almindelige gitterpakninger i to dimensioner, hvor enhedscellen og basisvektorerne er indtegnet. Figur 2.2 viser den kubiske pakning og figur 2.3 den hexagonale pakning, som vi senere skal se er den tætteste i to dimensioner. Navnene henviser enten til de pågældende pakningers Voronoï-celler eller deres kontakttal.

En gitterpakning er altid regelmæssig, men ikke alle regelmæssige pakninger har en enhedscelle. Et eksempel er den trigonale pakning, som ses på figur 2.4. Den er tydeligvis regelmæssig, men det er hverken muligt at finde en ikke-overlappende enhedscelle eller et sæt basisvektorer. Voronoï-cellerne er her ligesidede trekanter.



*Figur 2.4* Den trigonale pakning, $\rho \approx 0{,}6045$.

Tætheden af en gitterpakning er let at udregne selv i højere dimensioner, da enhedscellen som før nævnt sammenlagt indeholder præcis én kugle. Tætheden i en gitterpakning er generelt givet ved

$$\rho = \frac{\textit{volumenet af en kugle}}{\textit{volumenet af enhedscellen}} \tag{2.1}$$

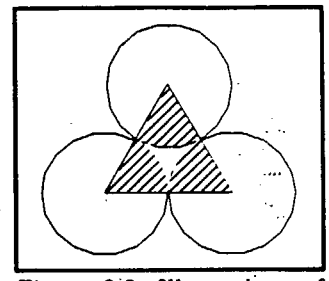
hvor volumenet af enhedscellen kan beregnes som determinanten af de basisvektorer, der udspænder den.

# 2.2 Rogers' øvre grænse

Et af de interessante aspekter ved regelmæssige kuglepakninger er at finde den tætteste kuglepakning i en given dimension, men det er faktisk kun i én, to og tre dimensioner at man ved, hvilken regelmæssig pakning, som er den tætteste. Derimod ved man i alle dimensioner noget om, hvor stor tætheden maksimalt kan være. Dette beror på, at C.A. Rogers i 1958 viste, at der findes en øvre grænse for, hvor tætte kuglepakninger kan være, som er ganske enkel at forstå i to og tre dimensioner. Rogers' argument gik på, at tager man tre todimensionale kugler, kan de ikke bringes tættere på hinanden end vist på figur 2.5, uden at de overlapper hinanden, så den maksimale tæthed i to dimensioner kan udregnes til

$$\rho = \frac{3(\frac{1}{6}\ \textit{kugle volumen})}{\textit{areal af trekant}} = \frac{\frac{\pi \cdot 1^2}{2}}{\frac{1}{2}\sqrt{3}\cdot 2} \approx 0{,}9068 \tag{2.2}$$

hvor kuglens radius er sat til 1, hvilket medfører, at sidelængden i trekanten bliver 2 og højden dermed $\sqrt{3}$. Denne tæthed er den maksimale tæthed i to dimensioner. Det ses, at den hexagonale pakning på figur 2.3 netop er opbygget på denne måde. Den hexagonale pakning har altså tætheden $\rho \approx 0{,}9068$.



*Figur 2.5* Illustration af Rogers' grænse.

På tilsvarende vis kan den maksimale tæthed i tre dimensioner findes. Vi tager fire kugler. De tre placeres i nederste lag som vist på figur 2.5, mens den fjerde lægges ovenpå i det hul, som de tre danner. Tilsammen udgør kuglecentrene et tetraeder, og igen kan man på ingen måde få kuglerne tættere sammen. Den maksimale tæthed i tre dimensioner kan udregnes til ca. 0,7796.

Vi vil ikke udlede Rogers' formel generelt men blot referere til T.M. Thompson [29], som bemærker, at den kan skrives

$$\rho_{max} = \frac{(n+1)^{1/2}(n!)^2\pi^{\frac{n}{2}}}{2^{\frac{3n}{2}}\Gamma(\frac{n}{2}+1)} f_n(n) \tag{2.3}$$

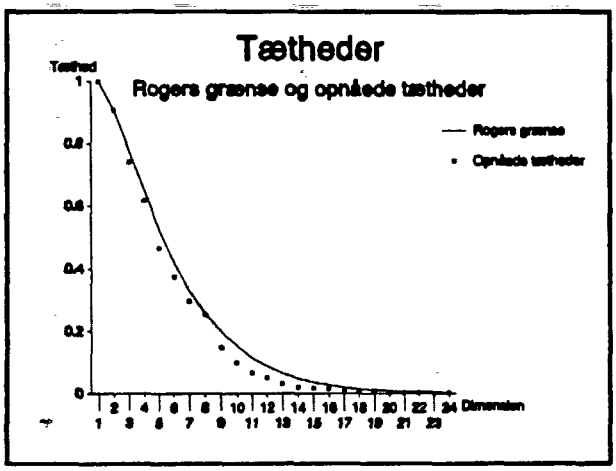
For at $f_n(n)$ kan bestemmes, må $F_n(\alpha)$ først defineres rekursivt:

$$F_{n+1}(\alpha) = \frac{2}{\pi}\int_{\frac{\arcsec(n)}{2}}^{\alpha} F_{n-1}(\beta)\, d\theta \tag{2.4}$$

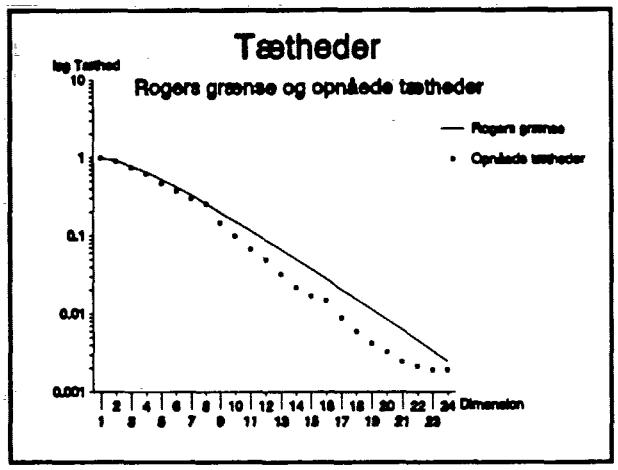
($\sec 2\beta = \sec(2\theta)-2$ og $F_1(\alpha)=F_0(\alpha)=1$). Så er $f_n(\sec 2\alpha) = F_n(\alpha)$ [29, p.67].

Selvom Rogers' grænse angiver den maksimale tæthed i en given dimension, er det ikke sikkert, at den kan nås. For eksempel har J.H. Lindsey II i 1986 ændret grænsen i tre dimensioner til ca. 0,7784, hvilket er en nedskrivning på ca. 0,15% [21].

På figur 2.6 og figur 2.7 illustreres, hvorledes Rogers' grænse for tætheden falder som funktion af antallet af dimensioner. Derudover er også indtegnet de tætteste kendte pakninger for de givne dimensioner. Det ses, at de to kurver ikke følges. Dette beror dels på, at der ikke er forsket lige meget i alle dimensioner, og dels på at Rogers' grænse i mange tilfælde ikke er mulig at nå.




*Figur 2.6* Diagram over tætheden som funktion af dimensionen (lineære akser).




*Figur 2.7* Diagram over Rogers' øvre grænse som funktion af dimensionen (logaritmisk 2.akse).

## 2.3 Tætteste regelmæssige pakninger i to og tre dimensioner

I dette afsnit vil det blive vist, at den hexagonale pakning er den tætteste to-dimensionale pakning, og at den fladecentrerede kubiske pakning er den tætteste tre-dimensionale pakning.

I to dimensioner er problemet simpelt. Den hexagonale pakning er opbygget af to-dimensionale simplekser som dem, der blev beskrevet i afsnittet om Rogers' øvre grænse. Den hexagonale pakning må altså være den tætteste todimensionale pakning, idet dens tæthed er den samme som Rogers' øvre grænse i to dimensioner.

I tre dimensioner er problemet lidt mere kompliceret, for da det ikke er muligt at pakke et rum helt tæt med tetraedere, er det ikke muligt at nå Rogers' øvre grænse.

Umiddelbart ser den fladecentrerede kubiske pakning måske ud til at være pakket af tetraedere og dermed være lige så tæt, som Rogers' grænse foreskriver, men hvis man starter med at pakke det nederste lag som i den hexagonale pakning, vil man opdage, at når næste lag skal lægges, vil der kun være plads til en kugle i hver anden række af huller (se figur 2.3 og figur 2.8). Dette er et udtryk for, at man ikke med denne pakning når Rogers' øvre grænse.

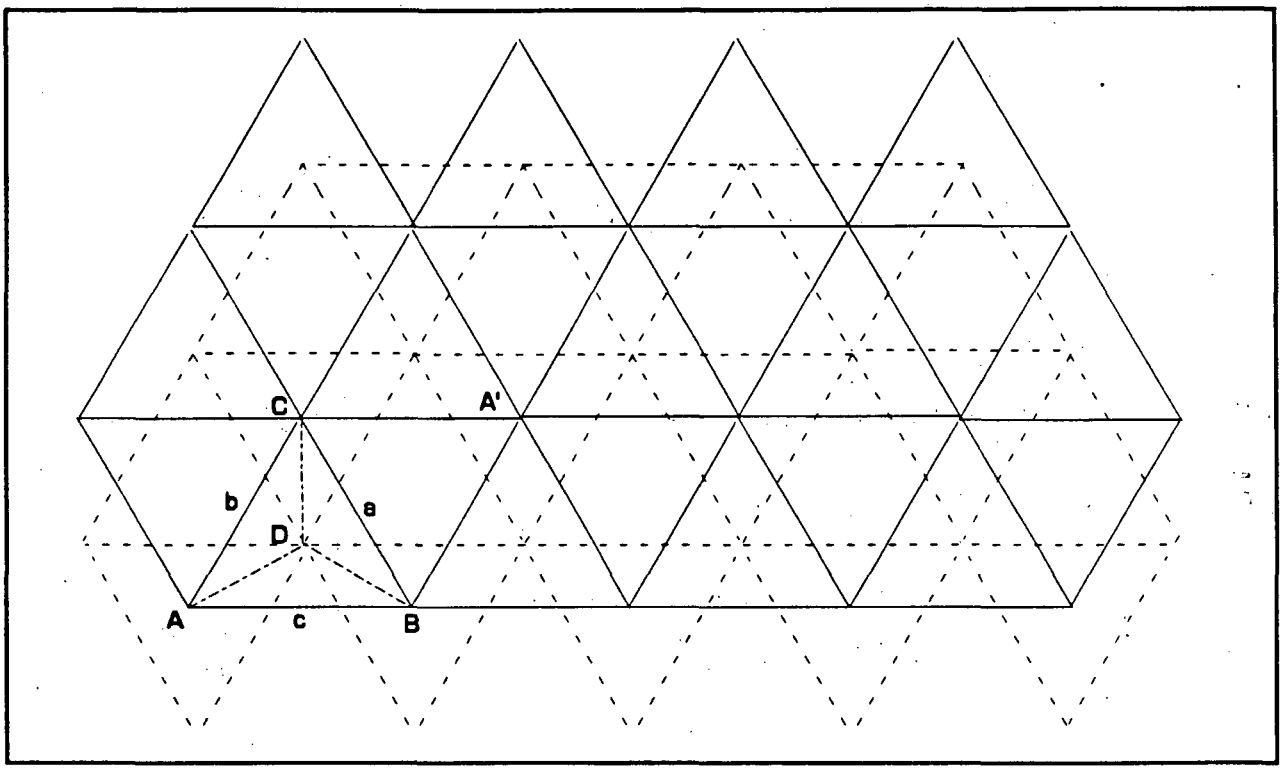
I det følgende vil det blive bevist, at den fladecentrerede kubiske pakning er den tætteste regelmæssige tredimensionale pakning. Det er ikke så ligetil at vise, at man ikke kan lave en

semiregelmæssig eller uregelmæssig pakning, der er tættere end den fladecentrerede kubiske pakning.

Ideen i beviset er taget fra H.S.M. Coxeter [9].

## Bevis

I stedet for at betragte selve kuglepakningen betragtes det tredimensionale gitter, der er fastlagt ud fra kuglernes centre (se figur 2.8).




*Figur 2.8* Tegning af to lag i gitteret i den fladecentrerede kubiske pakning, hvor hjørnerne i det fuldt optrukne gitter markerer kuglecentre i et lag og hjørnerne i det stiplede gitter angiver kuglecentre i det næste lag.

En enhedscelle i et sådant gitter er defineret som den mindste celle, der kan udspændes af tre lineært uafhængige vektorer mellem par af gitterpunkter. Volumenet af enhedscellen, kaldet J, kan beregnes som determinanten af de tre lineært uafhængige vektorer, f.eks. AB, AC og AD. Det gitter, der har den mindste enhedscelle, kaldes det kritiske gitter, og det er dette gitter, der giver centrumkoordinaterne til den tætteste kuglepakning. Dette skyldes, at jo mindre enhedscellen er, des tættere er kuglepakningen, jvf. (2.1).

Gitteret vil have en vis minimumsafstand c mellem et par af gitterpunkter.

Betragt punktet A på ovenstående figur. Hvis B er det punkt, der ligger tættest på A, er længden $|AB| = c$. C er et af de gitterpunkter udenfor linien gennem AB, som ligger tættest på A, længden $|AC|$ kaldes b, hvor $b \geq c$, og desuden kaldes $|BC|$ for a. Disse tre punkter kan altid vælges, så vinklen A og siderne opfylder følgende relationer

$A \leq \pi/2$, $a \geq b \geq c$ og $a^2 \leq b^2 + c^2$.

Lad $\Delta$ være arealet af trekanten ABC, og lad R være radius i trekantens omskrevne cirkel.

$\Delta$ har størrelsen [27]

$$\Delta = \frac{1}{4}\sqrt{2a^2b^2 + 2a^2c^2 + 2b^2c^2 - a^4 - b^4 - c^4} \tag{2.5}$$

Mens R har størrelsen [27]

$$R = \frac{abc}{4\Delta} \tag{2.6}$$

Parallelt med planen, hvor ABC ligger, er der en anden plan, i hvilken punktet D ligger, hvis vinkelrette projektion $D_1$ ind på ABC-planen befinder sig inde i trekanten ABC. (Hvis det ikke skulle ligge der, kan man altid vælge et A' i stedet for A og skifte ABC ud med A'BC, hvor $D_1$ så i stedet må ligge). Længden $|DD_1|$ kaldes d. Idet

$$V_{tetraeder} = \frac{1}{3}\Delta d \tag{2.7}$$

fås

$$J = 6 \cdot \frac{1}{3}\Delta d = 2\Delta d \tag{2.8}$$

hvor J var volumenet af enhedscellen.

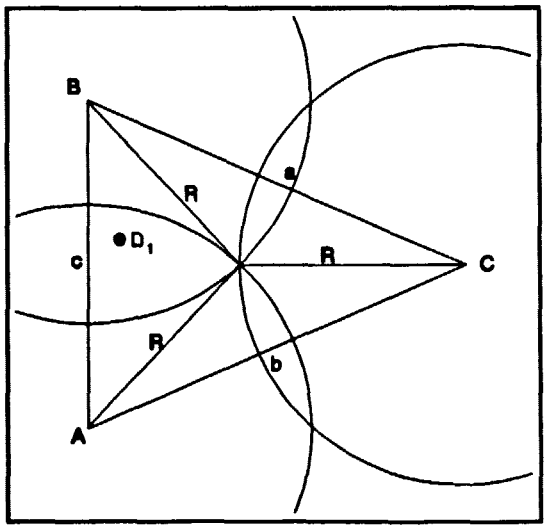
Da b var valgt som den næstkorteste afstand mellem A og et andet punkt, (den korteste afstand var c), må det gælde, at $|AD|$, $|BD|$ og $|CD|$ alle er større end eller lig med b.

Der kan vælges et hjørne i trekanten ABC, sådan at afstanden mellem $D_1$ og hjørnet er R, hvis $D_1$ ligger i trekantens centrum og ellers mindre end R (se figur 2.9).

Dette betyder, at det for mindst én af kanterne AD, BD eller CD, længden af kanten kaldes h, vil gælde at

$$R^2 + d^2 \geq h^2 \geq b^2 \quad \leftrightarrow \quad R^2 + d^2 \geq b^2 \tag{2.9}$$

hvor lighedstegnet kun gælder, når $D_1$ ligger i trekantens centrum, og h=b.




*Figur 2.9* Da hele trekanten er dækket af cirklerne med radius R, ses det at, lige meget hvor i trekanten $D_1$ befinder sig, vil afstanden til mindst et af hjørnerne være mindre end eller lig R.

Sammenholdes (2.8) og (2.9) fås

$$\begin{aligned} J^2 &= (2\Delta d)^2 \geq 4\Delta^2(b^2-R^2) = 4\Delta^2 b^2 - 4\Delta^2 R^2 \\ &= \frac{1}{4}b^2(2a^2b^2 + 2a^2c^2 + 2b^2c^2 - a^4 - b^4 - c^4) - \frac{1}{4}a^2b^2c^2 \\ &= \frac{1}{4}b^2(2a^2b^2 + a^2c^2 + 2b^2c^2 - a^4 - b^4 - c^4) \end{aligned} \tag{2.10}$$

hvilket kan omskrives til

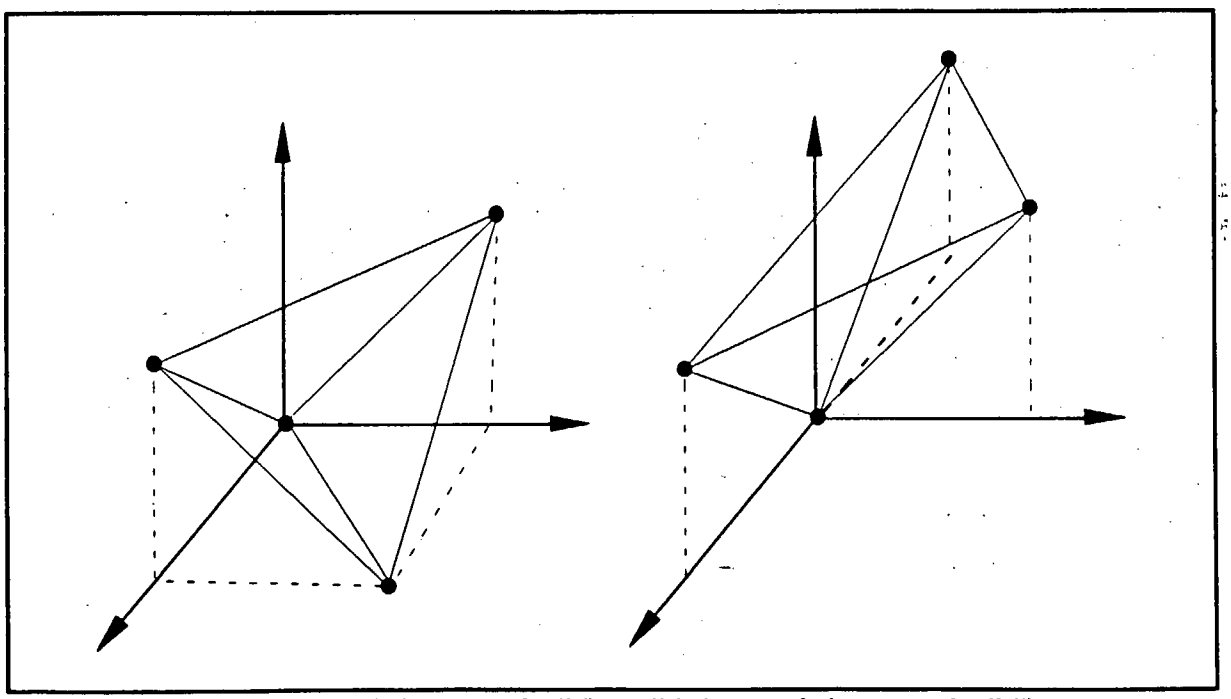
$$J^2 = 4\Delta^2 d^2 \geq \frac{1}{2}c^6 + \frac{1}{4}c^2(b^2 - c^2)(3b^2 + 2c^2) + \frac{1}{4}b^2(a^2 - b^2)(b^2 + c^2 - a^2) \geq \frac{1}{2}c^6 \tag{2.11}$$

da $b \geq c$, $a \geq b$ og $b^2 + c^2 \geq a^2$.

Det gjaldt om at minimere volumenet af enhedscellen J. Det ses således, at J er minimal for $J^2 = 1/2 \cdot c^6$. Ulighedstegnene i ovenstående uligheder kan altså erstattes med lighedstegn når $b = c$ og $b^2 = R^2 + d^2$ og når enten

i) $a = b$, dvs. når vinklen A er $\pi/3$, og trekanten ABC er ligesidet eller

ii) $a^2 = b^2 + c^2$, dvs. når vinklen A er $\pi/2$.



*Figur 2.10* Til venstre ses en pakning svarende til i) og til højre en pakning svarende til ii).

Der er altså tilsyneladende to kritiske gitre, som hver især fastlægger den mindste enhedscelle.

Hjørnerne i trekanten i) kan beskrives ved hjælp af de kartesiske koordinater

A = (0,0,0), B = (0,1,1), C = (1,0,1) og D = (1,1,0)

Gitteret udspændes altså af vektorerne

$r_B = (0,1,1)$, $r_C = (1,0,1)$ og $r_D = (1,1,0)$

Det ses, at mængden af gitterpunkter er lig mængden af punkter, hvor hver koordinat er et heltal og hvor summen af koordinaterne er lige.

Hjørnerne i trekanten ii) kan beskrives vha. følgende kartesiske koordinater

$A = (0,0,0)$, $B = (0,1,1)$, $C = (0,1,-1)$ og $D = (1,1,0)$

B og D kan vælges som før. C vil ligge i samme plan, y-z-planen, som B men stå vinkelret på B, altså fås ovenstående.

Det ses, at mængden af gitterpunkter i gitter ii) ligesom i gitter i) er mængden af punkter, hvor hver koordinat er et heltal, og hvor summen af koordinaterne er lige. De to gitre må altså være identiske. I ovenstående figurer vil de blot være set fra to forskellige sider.

Konklusionen er altså, at det gitter, som kaldes "det fladecentrerede kubiske gitter", er det eneste kritiske gitter i tre dimensioner.

Da afstanden mellem gitterpunkterne i ovenstående gitter er $\sqrt{2}$, vil man, hvis man lægger kugler med radius $\frac{\sqrt{2}}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ i hvert gitterpunkt, få den tætteste regelmæssige tredimensionale kuglepakning. Kuglepakningen svarende til ovenstående gitter viser sig at være den fladecentrerede kubiske pakning.

Da vi nu har fundet basisvektorerne for enhedscellen til den fladecentrerede kubiske pakning, er det let at beregne denne paknings tæthed.

Volumenet af enhedscellen kan beregnes som determinanten til basisvektorerne, og volumenet af en kugle med radius $\frac{1}{\sqrt{2}}$ beregnes på sædvanlig vis, så der fås

$$\rho = \frac{\frac{4}{3}\pi\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^3}{\begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix}} = \frac{\frac{4}{3}\pi\frac{1}{2\sqrt{2}}}{2} \approx 0{,}7405 \tag{2.12}$$

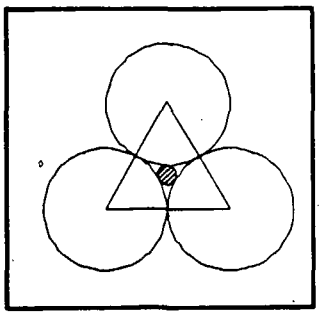
## 2.4 Polydisperse pakninger

For at få kuglepakningsmodeller til at passe bedre til det, der modelleres, er det ofte nødvendigt at operere med flere forskellige størrelser kugler, da idealiseringen ellers bliver for "grov". I dette afsnit vil vi se på, hvilke tætheder der kan opnås ved at benytte flere kuglestørrelser.

I det to-dimensionale tilfælde vil vi se på den hexagonale pakning (se figur 2.3). For at de små kugler passer ind mellem de store, skal de have radius

$$\tfrac{2}{3}\sqrt{3} - 1 \approx 0{,}1547 \qquad (2.13)$$

hvor $\tfrac{2}{3}\sqrt{3}$ er afstanden fra et hjørne af trekanten til dens centrum (se figur 2.11). Ud fra figur 2.3 ses det, at der kan ligge to kugler med denne radius i porerne i enhedscellen. For hver stor kugle i den hexagonale pakning er der altså plads til to små. Tætheden af en hexagonal pakning, hvor der ligger en lille kugle i hver af porerne mellem de store kugler kan beregnes som summen af volumenet af de små kugler og volumenet af den store kugle, divideret med volumenet af enhedscellen. Tætheden bliver



*Figur 2.11* Polydispers pakning.

$$\rho = \frac{\pi \cdot 1^2 + 2\pi(\tfrac{2}{3}\sqrt{3} - 1)^2}{2\sqrt{3}} \approx 0{,}9503 \qquad (2.14)$$

Hvis denne proces med at lægge små kugler, der passer præcist i porerne i pakningen, gentages med ni forskellige størrelser kugler opnås en densitet på 0,9898 [15].

En anden metode til at gøre pakningen tættere er at udfylde pladsen mellem kuglerne med nogle meget små kugler, der i porerne kan pakke sig med en lige så stor tæthed som den oprindelige pakning. Dette vil give en pakningstæthed på $\rho' = 1-(1-\rho)^n$, hvor $1-\rho$ er porøsiteten af den oprindelige pakning og n angiver hvor mange gange processen gentages. Gøres det med bare to størrelser kugler, bliver tætheden $\rho' \approx 0{,}9913$.

I det tredimensionale tilfælde i en fladecentreret kubisk pakning er der to typer porer. I den mindste af disse er der plads til en kugle med radius 0,2247 gange de store kuglers radius. Ved at lægge en lille kugle i hvert hul i pakningen opnås en tæthed på 0,77, hvor den almindelige fladecentrerede kubiske pakning har en tæthed på 0,74. Beregningerne ses i appendiks B.

## 2.5 Anvendelser

Der findes mange anvendelsesområder for regelmæssige kuglepakninger. I det følgende skal blot omtales to.

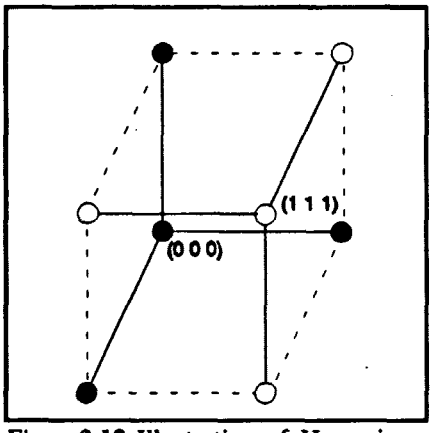
### N-dimensionale pakningers anvendelse i kodningsteori

I dette afsnit vil vi kort forklare lidt om kodningsteori, da gode koder er ækvivalente med tætte regelmæssige kuglepakninger, og mange af de kendte pakninger i højere dimensioner er fundet ved søgning efter gode koder.

Kodningsteori har sit udspring i radiokommunikation, hvor der kan opstå fejl ved datatransmission. Når digitale signaler, bestående af 0'er og 1'er, sendes gennem diverse ledninger og elektroniske komponenter, er der ofte "støj", som bevirker, at nogle af 1'erne bliver ændret til 0'er og omvendt. Derfor vil man gerne sende informationen i en sådan form, at det er muligt at

se, om der opstår fejl. Der findes flere simple metoder til at opdage en enkelt fejl, for eksempel ved paritets-check, hvor der tilføjes et 0, hvis summen af de binære tal i koden er lige, og 1, hvis summen er ulige. Tager vi en kode på fire tal, som kan beskrive $2^4=16$ mulige symboler, bliver 1010 kodet som 10100 og 1110 som 11101. På denne måde kan man opdage, hvis der sker en enkelt fejl såsom 11100, der ikke er en kode, da 1+1+1+0+0=1 (mod 2). En anden metode er gentagelses-koden, hvor den sendte information gentages et antal gange. Tager vi en firetupel og gentager den én gang, bliver 1010 sendt som 10101010 og 1110 som 11101110. Denne metode er dog ikke særligt stabil, da to fejl nogle gange kan resultere i en anden tilladt kode.

Disse metoder kan kun opdage en enkelt fejl, og det er ikke muligt at rette denne fejl. For at finde frem til, hvor mange fejl en bestemt kode kan opdage eller rette indføres et mål for afstanden mellem forskellige koder, som et mål for hvor mange bitforskelle, der adskiller to tilladte koder. Denne afstand kaldes Hamming-afstanden, D, og er defineret som antallet af pladser, hvorpå to koder er forskellige, D(1110,1100)=1 og D(1110,0001)=4. Laver vi nu koder med tretupler, men tillader kun koderne (000) og (111) får vi altså en Hamming-afstand på tre. Afbilder vi dette i et koordinatsystem, som på figur 2.12, får vi, at de mulige koder er hjørner i en enhedskube, og de to tilladte koder er i diametralt modsatte hjørner. Opstår der én fejl, kan det ses som en flytning af et hjørne til et af de tre nærmeste hjørner, hvor det altså kun er den ene koordinat, som adskiller sig fra det oprindelige. Nu har vi faktisk fundet en fejlrettende kode, så længe der kun sker én fejl, for afstanden til den anden tilladte kode er to, og det er derfor ikke muligt, at det er den anden kode, der er sendt. Vil vi gerne kunne tillade to fejl, må vi for eksempel benytte femtuplerne 00000 og 11111 med Hamming afstand fem. Skulle der alligevel opstå tre fejl er vi lige vidt, da det lige så vel kan være det ene som det andet.



*Figur 2.12* Illustration af Hamming-afstanden mellem tilladte koder.

Normalt bruges ikke gentagelses-kode men mere avancerede beregninger (som regel udvidelser af paritetsmetoden).

Som det fremgår kommer man hurtigt op i høje dimensioner, hvis man vil lave nogle lidt avancerede koder, men hvad har det med kuglepakning at gøre? Jo, hvis vi forventer "støjen" til $\varepsilon$ (den maksimale teoretiske grænse for $\varepsilon$ er 0,5, dvs. at der er under 50% sandsynlighed for at hvert enkelt tal i koden ændres, normalt er $\varepsilon$ meget mindre) kan vi lægge en kugle med radius $\varepsilon$ omkring hver tilladt kode. Det vi så ønsker er at pakke disse kugler så tæt som muligt, da det betyder, at vi bruger flest mulig tal til reel information og dermed færrest mulig til kontrol. Dette er ønskværdigt, da vi gerne vil sende mest mulig information på kortest mulig tid [29, pp.1-14].

### Regelmæssige kuglepakningers anvendelse i krystallografi

De regelmæssige kuglepakninger benyttes, som vi lige har set, i kodningsteori, men de finder også anvendelse indenfor krystallografi. Krystaller består af regelmæssige pakninger af atomer eller molekyler uden dog nødvendigvis at være gitterpakninger. Når krystaller dannes, søger de ikke at blive så tætte som muligt, i den forstand at afstanden mellem atomerne er så kort som mulig, men således at energien bliver lavest mulig, og energi kan betragtes som et afstandsmål.

## 2.6 Opsamling

I dette kapitel har vi præsenteret nogle af de resultater, der haves fra arbejdet med regelmæssige kuglepakninger. Vi har langt fra beskrevet alle resultater. Der er masser at tage af, men en del af dem forekom irrelevante i forhold til vores projektarbejde. Regelmæssige kuglepakninger er, set fra et matematisk synspunkt, et interessant område. For det første har det vist sig at være et slags knudepunkt for flere forskellige områder indenfor matematikken, et knudepunkt hvor blandt andet gruppeteori og geometri mødes [19]. For det andet har der vist sig at være mange overraskende anvendelser af teorien for regelmæssige kuglepakninger. Blandt andet af denne grund er området efterhånden temmelig velundersøgt. I det teoretiske arbejde med tilfældige kuglepakninger er der i høj grad blevet taget udgangspunkt i den teori, der har været for regelmæssige kuglepakninger. Således er flere af de metoder, man tidligere med stor succes har kunnet bruge til at karakterisere regelmæssige kuglepakninger (Voronoï-diagrammer, kendskab til enhedsceller osv.), i de seneste år blevet forsøgt oversat til tilfældige kuglepakninger, men arbejdet med dette er langt fra færdigt. Vi vil forsøge at præsentere nogle af de opnåede resultater i det følgende kapitel.

# Kapitel 3
# Tilfældige pakninger

De tidligere afsnit har hovedsageligt behandlet regelmæssige kuglepakninger, dvs. pakninger, som opbygges ved gentagelse af et mønster. Dette kapitel vil behandle tilfældige – eller uregelmæssige – kuglepakninger.

Som navnet siger, dannes disse kuglepakninger ved en eller anden form for tilfældig proces, således at strukturen er uden gentagelse i enhver retning. De pakninger, der bliver behandlet i dette afsnit, vil desuden være sammenhængende.

Tilfældige pakninger er rent matematisk et sværere angribeligt område end regelmæssige pakninger, fordi tilfældighed er et uhåndterligt begreb. Af denne grund forsøges pakningerne oftere behandlet eksperimentelt eller ved simulation end teoretisk, og derfor er der i dette kapitel tale om beskrivelser af virkelige pakninger, der er fundet ved eksperimenter eller computer-simulerede pakninger, og de formler og øvrige resultater, der nævnes, er næsten alle empirisk bestemte.

I dette kapitel vil vi forsøge at beskrive nogle af problemerne med tilfældige kuglepakninger, og princippet i nogle af de eksisterende metoder til behandling af disse vil blive gennemgået. Kapitlet bygger i vid udstrækning på Randall M. Germans bog *Particle Packing Characteristics* [15].

## 3.1 Monodisperse tilfældige pakninger

Tilfældige pakninger kan ofte karakteriseres ved nogle af de samme egenskaber, som bliver anvendt til at karakterisere regelmæssige pakninger. Det giver for eksempel god mening at tale om en tilfældig kuglepaknings pakningstæthed og porøsitet. Men mens man for en regelmæssig kuglepakning kunne beregne disse størrelser teoretisk, må de ofte bestemmes empirisk, når man har med tilfældige kuglepakninger at gøre. Tilsvarende kan man, for en regelmæssig kuglepakning, beregne kontakttallene, mens man, når man har med tilfældige pakninger at gøre, må tælle hvor mange kontakter, hver enkelt kugle har, og derefter lave en fordeling af kontakttal, hvor det for hvert kontakttal angives, hvor mange kugler i pakningen, der har netop dette antal naboer.

For at man til en kuglepakning kan konstruere Voronoï-celler, Delaunay-celler, Radikalplans-celler og Krarfu-celler kræver det endvidere, at man kender eller kan beregne centrumkoordina-

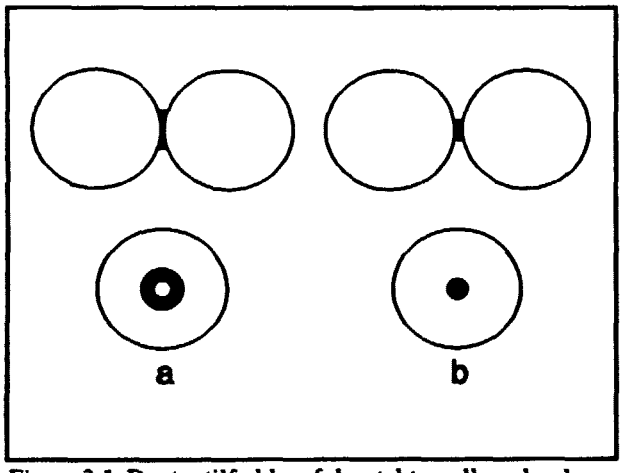
terne for enhver kugle i pakningen. Dette er også langt mere overkommeligt for regelmæssige end for tilfældige pakninger.

## Bernals berømte pakninger

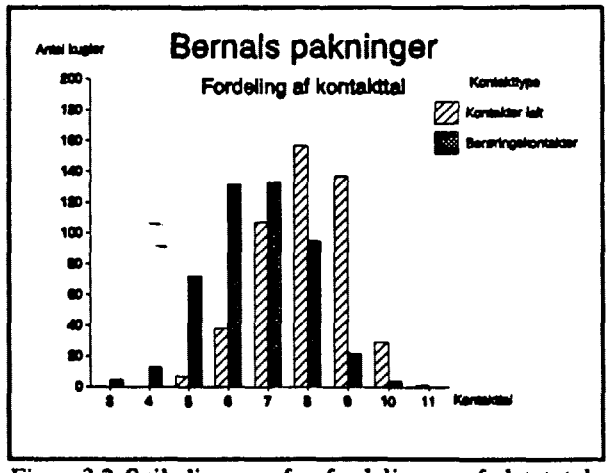
En af de mest kendte udforskninger af tilfældige kuglepakninger blev foretaget af fysikeren J.D. Bernal i 1960 [4]. Bernal gik til kuglepakningsproblemerne på en meget direkte måde: Han tog et par tusind metalkugler med radius på 1/4 tomme og pakkede dem i en beholder. Han sikrede sig, at pakningen blev tilfældig, ved simpelthen at hælde kuglerne ned i beholderen og ryste dem sammen. Pakningen fik så en tæthed på 0,62, hvilket måltes ved vægtforøgelse ved vandopfyldning.

For at kunne tælle kuglernes kontakttal hældte han sort blæk ned i beholderen, som efter nogen tid blev tømt for blæk igen. På grund af blækkets overfladespænding blev rester af det tilbage ved kontaktpunkterne mellem kuglerne. Efter nogen tids tørring kunne kuglerne pilles fra hinanden og kontaktpunkterne tælles. Bernal skelnede mellem berøringskontakter (ægte kontakter) og nære kontakter. For ægte kontakter ville blækket have lejret sig i en ring omkring kontaktpunktet. Ved de nære kontakter (mindre end 5% af kuglediameteren) var blækket i en plet, hvis størrelse afhang af afstanden (se figur 3.1). I figur 3.2 ses fordelingen af antallet af berøringskontakter og nære kontakter. De nære kontakter kan fortolkes som potentielle kontakter, som ville blive til berøringskontakter, hvis kuglerne ikke var hårde og blev presset yderligere sammen.

Bernals pakninger er nærmest blevet en de facto standard for, hvordan en tilfældig pakning bør være. Hvis man laver computersimuleringer af tilfældige pakninger, sammenlignes tætheden, fordelingen af kontakttal, radialdistributionen osv. altid med Bernals resultater, før man foretager yderligere undersøgelser. Det undersøges således om pakningen er tilfældig på samme måde som Bernals pakning.




*Figur 3.1* De to tilfælde af kontakt mellem kuglerne som leder til blækmærker: a. Berøringskontakt. b. Nær kontakt [4].




*Figur 3.2* Søjlediagram for fordelingen af det totale kontakttal og antallet berøringskontakter. Det gennemsnitlige kontakttal er 8,5 totalt og 6,4 for berøringskontakter [4].

## Løse og tætte tilfældige pakninger

En af de ting, som Bernal og andre forskere på dette område var enige om, var, at man skal skelne mellem to former for tilfældige monodisperse pakninger. Disse er defineret ved den måde, de bliver fremstillet:

De **løse** pakninger fremkommer ved at hælde kugler sammen i en eller anden beholder uden at udsætte dem for pres eller bevægelse. De løseste pakninger opnås ved, at kuglerne én for én triller ned over de andre kugler og lægger sig til rette. Pakninger med en tæthed lavere end 0,6 kaldes løse pakninger. Store løse pakninger vil ofte være tættere i bunden pga. gravitation. Stabile løse pakninger forekommer helt ned til tætheder på 0,15 [15].

De **tætte** pakninger fremkommer fra de løse ved, at man ryster dem eller udsætter dem for tryk, dog uden at kuglerne deformeres. Tætte pakninger opnår tætheder på omkring 0,61–0,64.

Det menes, at den tætteste tilfældige pakning har en densitet på 0,637, hvilket pudsigt nok svarer til ca. $\frac{2}{\pi}$ [15].

Bernals pakninger var af den tætte type, men han beskæftigede sig også med løse pakninger. Blandt andet undersøgte han en løs pakning med tæthed 0,6 fremstillet af Dr. Scott [4]. Fordelingen af kontakttal for denne pakning ses i figur 3.3.

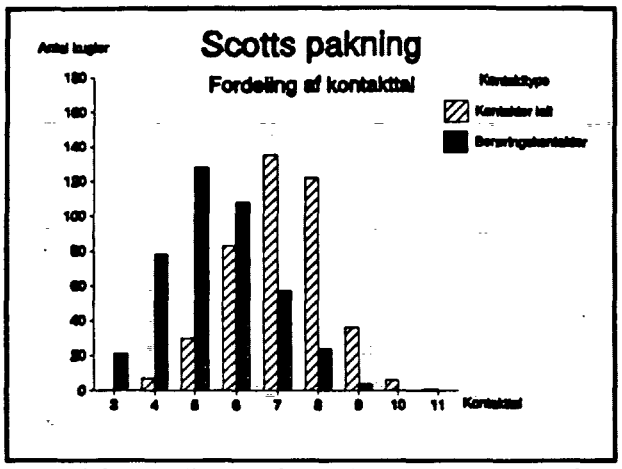
Som det ses, er det gennemsnitlige kontakttal for de løse pakninger lavere end for de tætte. Ligesom for regelmæssige pakninger gælder dette bortset fra nogle enkelte undtagelser.

Bernal udviklede ved en anden lejlighed en teknik til opmåling af kuglecentrene i en tredimensional kuglepakning. En tilfældig pakning af metalkugler blev lavet på samme måde som i ovennævnte forsøg. Derefter blev pakningen indstøbt i paraffin, sådan at siden af beholderen kunne fjernes. Kuglerne blev én for én afdækket, og deres centre målt ved hjælp af noget dertil udviklet optisk udstyr [25].

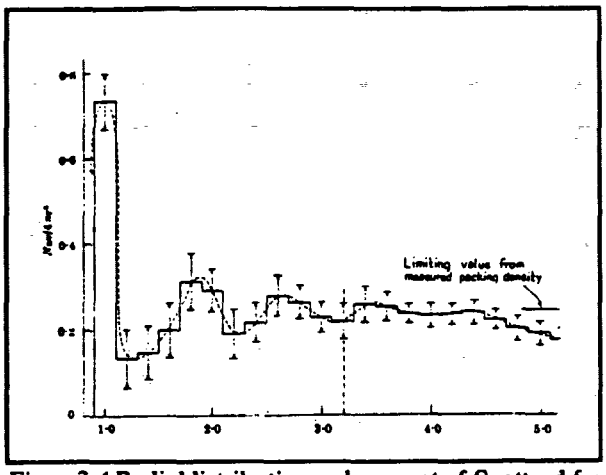
Scott udførte i 1962 en sådan opmåling på et par tusinde kugler i en tæt tilfældig pakning. Ud fra de indsamlede data kunne en række egenskaber ved pakningen beregnes.

Blandt andet beregnedes radialdistributionsfunktionen, som ses i figur 3.4. Kurven viser $\bar{n}$ plottet mod r, hvor $\bar{n}$ er antallet af kuglecentre per volumenenhed som funktion af r. Ved at dividere med $4\pi r^2$ nærmer funktionen sig en konstant værdi for store værdier af r. Distributionen er et gennemsnit af beregninger fra 25 forskellige kuglecentre, hvorfor værdierne er angivet med intervaller svarende til standardafvigelsen[1].

1: Funktionen er forskellig fra definitionen på side 26, idet der er divideret med $4\pi r^2$. Herved fås en egentlig tæthedsfunktion for kuglecentrene i rummet.




*Figur 3.3* Fordelingen af berørings- og nære kontakter for Scotts løse pakning. Det gennemsnitlige kontakttal er 7,1 totalt og 5,5 for berøringskontakter [4].



*Figur 3.4* Radialdistributionen beregnet af Scott ud fra en opmåling af 1000 kugler [25].

## 3.2 Metoder til beskrivelse af tilfældige pakninger

Hvis man kender centrumkoordinaterne for alle kuglerne i en monodispers pakning, kan man bestemme det til pakningen hørende Voronoï-diagram. Ud fra Voronoï-diagrammet kan det tilhørende Delaunay-diagram så bestemmes.

Om man finder det mest givtigt at betragte Voronoï-diagrammet eller Delaunay-diagrammet til en kuglepakning afhænger af, hvilke af pakningens egenskaber man er interesseret i at undersøge.

Voronoï-cellen giver oplysninger om en kugles lokale omgivelser. De oplysninger man fra Voronoï-cellen får om en kugles naboer, kan for eksempel være med til at give et fingerpeg om, hvad der vil ske, hvis pakningen trykkes yderligere sammen [11].

Er man derimod interesseret i at undersøge porestørrelsesfordelingen i en kuglepakning, er det oplagt at undersøge de til pakningen hørende Delaunay-celler, da disse netop udtrykker porestørrelserne. J.L. Finney påpeger, at der også er den fordel ved Delaunay-celler at man, da cellerne i en given dimension topologisk set vil være ens[1], idet de alle er simplekser af dimension n, kan nøjes med at se på sidelængdefordelingen af cellerne, når man vil karakterisere en given pakning [11]. Det ses desuden direkte ud fra sidelængderne i Delaunay-cellerne, hvilke kugler der rører hinanden, og hvilke der ikke gør (når der er tale om monodisperse pakninger). Hvis man vil lave en helt simpel sammenligning af sidelængderne, kan man nøjes med at opdele dem i to klasser; korte og lange, angivet ud fra en grænse-længde. Sidelængdefordelingen kan endvidere bruges som et mål for, hvor uregelmæssig en pakning er, idet regelmæssige pakninger har en karakteristisk sidelængdefordeling [11].

1: Dette gælder dog kun, hvis pakningen er tilfældig, hvilket er en følge af sætning D5 på side 20.

I skemaet nedenfor ses en optælling af sidelængder i en virkelig pakning (reference modellen[1]) og i en computersimuleret pakning. 0LK6 betyder, at der ikke er nogen lange sider og seks korte sider, og tilsvarende betyder 3LK3, at cellen har tre lange- og tre korte sider. Ud fra skemaet kan man se, at modellen ikke giver den samme tilfældighed som den virkelige pakning, og en nærmere analyse har vist, at cellerne fra den virkelige pakning har et mindre volumen [11].

Dette er altså et eksempel på, at celleopdelingen for en kuglepakning giver noget viden om en af pakningens egenskaber, nemlig dens grad af tilfældighed. Dette er også et eksempel på, at teoretisk kuglepakningsteori kan benyttes på simulerede pakninger. Ligeledes kan Voronoï-, Delaunay-, Radikalplans- og Krarfu-diagrammerne give information om de enkelte kuglepakninger. Indtil videre er disse hovedsageligt til beskrivelse af faste stoffer, men det vil måske med tiden vise sig, at de også kan bruges i andre sammenhænge, som endnu ikke er fundet på grund af den relativt korte tid, man har arbejdet med dem.

| Delaunay-celle klasser | Antal i simuleret pakning | Antal i reference model |
|---|---|---|
| 0LK6 | 246 | 56 |
| 1LK5 | 1383 | 785 |
| 2LK4 | 3466 | 3496 |
| 3LK3 | 4612 | 6107 |
| 4LK2 | 3484 | 3653 |
| 5LK1 | 1445 | 719 |
| 6LK0 | 234 | 54 |

## Eksperimentel behandling af tilfældige pakninger

At undersøge virkelige tilfældige kuglepakninger eksperimentelt har nok været en af de mest givende tilgangsvinkler til tilfældige pakninger, da man, som tidligere omtalt, har problemer med at repræsentere tilfældighed på en matematisk tilfredsstillende måde. Men man kan næsten forestille sig, hvor kolossalt et stykke arbejde det har været at kortlægge en kuglepakning som den, Bernal og hans folk har beskæftiget sig med, og der er da, - så vidt vi er orienteret - heller ikke nogen, der har forsøgt at gøre forsøget efter[2].

## Computersimuleringer

Der er derimod flere, der har forsøgt at lave computersimuleringer af tilfældige kuglepakninger [15]. Det er klart, at der ville være mange fordele forbundet med at have en virkelighedstro simuleringsmetode for tilfældige kuglepakninger, idet man så helt kunne slippe for selve

1: Reference modellen, som formentlig er Bernals pakning, er undersøgt i en engelsk Ph.D. afhandling fra 1989.

2: Bernal og Scott kortlagde da også "kun" én hver.

kortlægningen af kuglepakningen. Man må selvfølgelig først have nogle data fra eksperimenter for at kunne kontrollere om en simuleringsmodel stemmer overens med virkeligheden, men når dette først er gjort, er det let at lave de efterfølgende simuleringer.

I en computersimuleret pakning ville man hurtigt kunne foretage ændringer af parametre, sådan at man kunne opnå nye pakninger. Det ville altså blive meget mere overkommeligt at foretage en undersøgelse af pakningerne, end det er at gøre det eksperimentelt.

### Metoder til computersimulering

Når man vil lave en computersimulering af tilfældige pakninger, findes der to principper, som ofte benyttes til placering af kuglerne.

Ifølge det første princip placeres centrene tilfældigt i rummet (det angivne volumen), indtil der ikke er plads til flere. Hvis en kugle bliver placeret, således at den overlapper andre kugler, fjernes den igen. Når kuglerne er placeret, kan man begynde at forskyde dem, således at pakningen bliver tættere eller man kan blot bruge pakningen, som den er.

Det andet princip lader kuglerne falde i et tyngdefelt, der enten kan være almindeligt eller centralt, hvor kuglerne falder ind mod centrum af pakningen. Man lader hver kugle falde i feltet, indtil den opfylder stabilitetskravet, som i tre dimensioner er tre kontakter.

Metoderne kan bruges i alle dimensioner, men giver dog forskellige resultater. For eksempel giver gravitation 100% tætte pakninger i én dimension, mens dette aldrig kan opnås i tre dimensioner.

Det er imidlertid ikke helt enkelt at designe simuleringer, så de svarer til virkelige pakninger. Der er gjort flere forsøg på det, men indtil nu har man ikke kunnet lave en computersimulering, som giver en pakning, der er tilfældig på samme måde som Bernals pakning [15].

## 3.3 Polydisperse pakninger

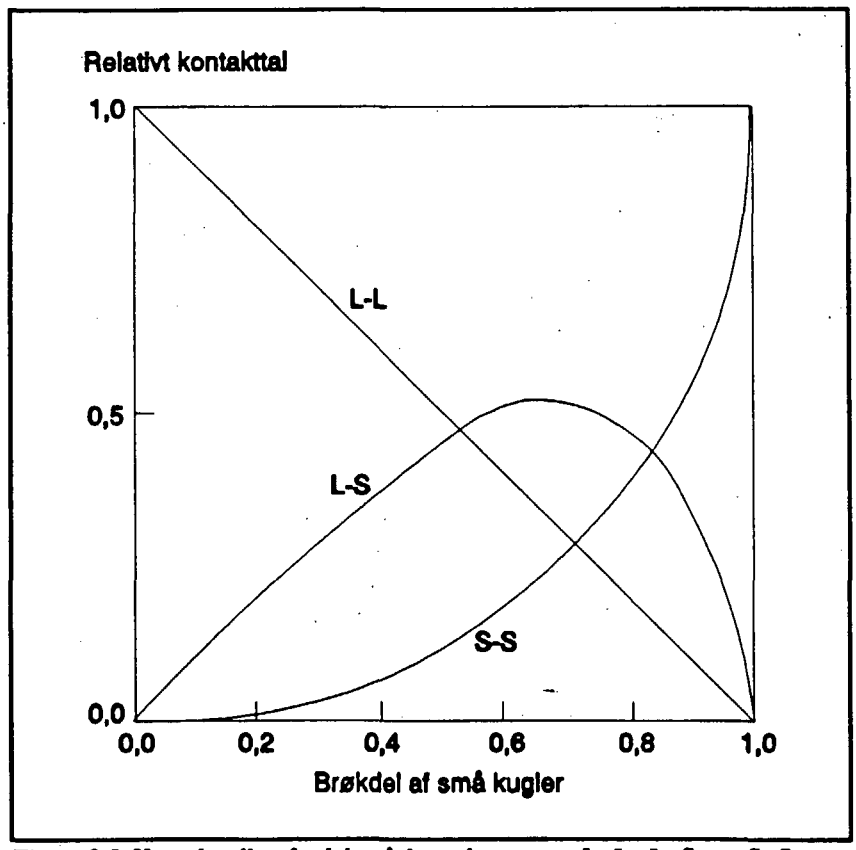
Indtil nu har der været fokuseret på monodisperse pakninger, dvs. pakninger, hvor kuglerne er omtrent lige store (matematisk set behandles de som værende lige store). Hensigten med dette afsnit er at beskrive opførslen af pakninger med kugler i forskellige størrelsesklasser, hvor kuglerne inden for hver størrelsesklasse er omtrent lige store.

Der er, så vidt vi er orienteret, endnu ingen, der har forsøgt at lave et forsøg svarende til Bernals, blot med polydisperse kugler. Og den matematiske behandling af emnet er om muligt endnu mere mangelfuld, end den matematiske behandling af monodisperse tilfældige pakninger. Da det endvidere endnu ikke har været muligt at lave tilfredsstillende computersimuleringer af monodisperse tilfældige pakninger, kan man næsten forestille sig, at arbejdet med computersimuleringer af tilfældige polydisperse pakninger, har været endnu mindre resultatgivende.

Derimod er der masser af andre slags resultater at tage af, da man mange forskellige steder støder på noget, som man kan karakterisere som polydisperse tilfældige pakninger. For eksempel skal asfalt, for at den er anvendelig som vejbelægning, indeholde en bestemt kornstørrelsesfordeling, som her i landet er fastsat af Vejdirektoratet, og der findes tilsvarende regler/normer indenfor betonbranchen [2]. For beton er normerne fastsat således, at de tilladte kornstørrelsesfordelinger giver størst mulig tæthed og stabilitet, mens der indenfor asfalt-området også er krav til porøsiteten, da regnvand skal kunne løbe igennem asfaltlaget i stedet for at løbe hen over, sådan at regnglatte veje kan undgås. Moderne støjdæmpende asfaltbelægning er meget porøs, da den derved kan absorbere dækstøj, men man har problemer med, at porerne efter et par år stopper til med dækrester og mister sin støjdæmpende effekt.

## Bimodale pakninger

For pakninger, der indeholder to størrelser kugler, gælder det, at større størrelsesforhold medfører større pakningstæthed. Dette er let at indse, da det betyder, at de små kugler kan pakke sig bedre mellem de store kugler, jo mindre de er.




*Figur 3.5* Kontakttallet fordelt på kontakttyperne L-L, L-S og S-S som funktion af andelen af små partikler i blandingen, hvor størrelsesforholdet mellem store og små kugler er 1:5 [15].

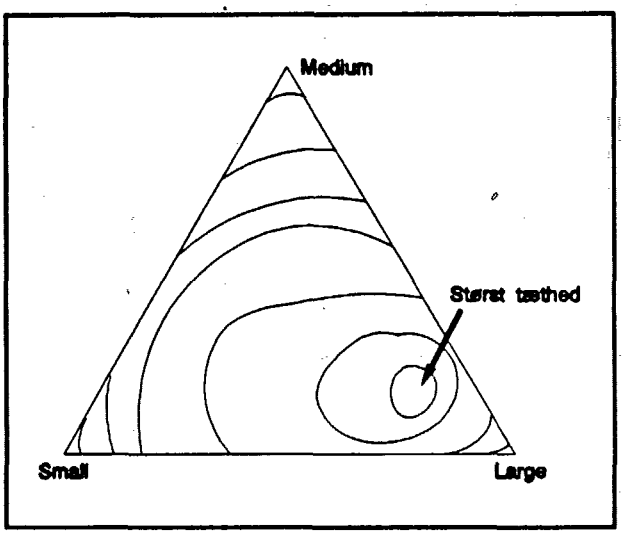
En analyse af kontakttallet for store og små partikler i computersimulerede bimodale pakninger viser, at de store partikler har større kontakttal. Indtegnes analysen af fordelingen af kontakttallet på de tre kontakttyper L-L, L-S, S-S (L = large, S = small) i et koordinatsystem fås en kurve svarende til den, der ses på figur 3.5 [15].

For at opnå en god pakning af bimodale blandinger bør størrelsesforholdet vælges større end 1:20. Så vil en blanding af 73% store og 27% små partikler give en densitet på 0,86 (under antagelse af at de to partikeltyper hver for sig giver en pakning på 0,637) [15].

## Trimodale pakninger

En metode til at afbilde trimodale pakninger på er at indtegne et densitetskort i et trekantsdiagram. I en ligesidet trekant tegnes iso-linier for tætheden som funktion af den forholdsmæssige sammensætning af de tre bestanddele (se figur 3.6).

Den maksimale tæthed for blandinger af tre størrelser har vist sig – ligesom for to størrelser – at være med størst volumendel (eller vægtdel) af store partikler. Forholdet afhænger af forholdet mellem partikelstørrelserne. Der kan også forekomme tilfælde, hvor den optimale sammensætning kun involverer to af partikelstørrelserne.




*Figur 3.6* Densitetskort for blandinger af tre partikelstørrelser.

Der er lavet en interessant undersøgelse over densiteten af blandinger med to, tre og fire partikelstørrelser, som funktion af forholdet mellem den største og den mindste partikeltype. Af den fremgår det, at tætheden af trimodale blandinger overgår de bimodale, når størst/mindstforholdet kommer over $1:10^2$. Tætheden af de trimodale bliver til gengæld overgået af de quadromodale, når forholdet overstiger $1:10^4$ [15].

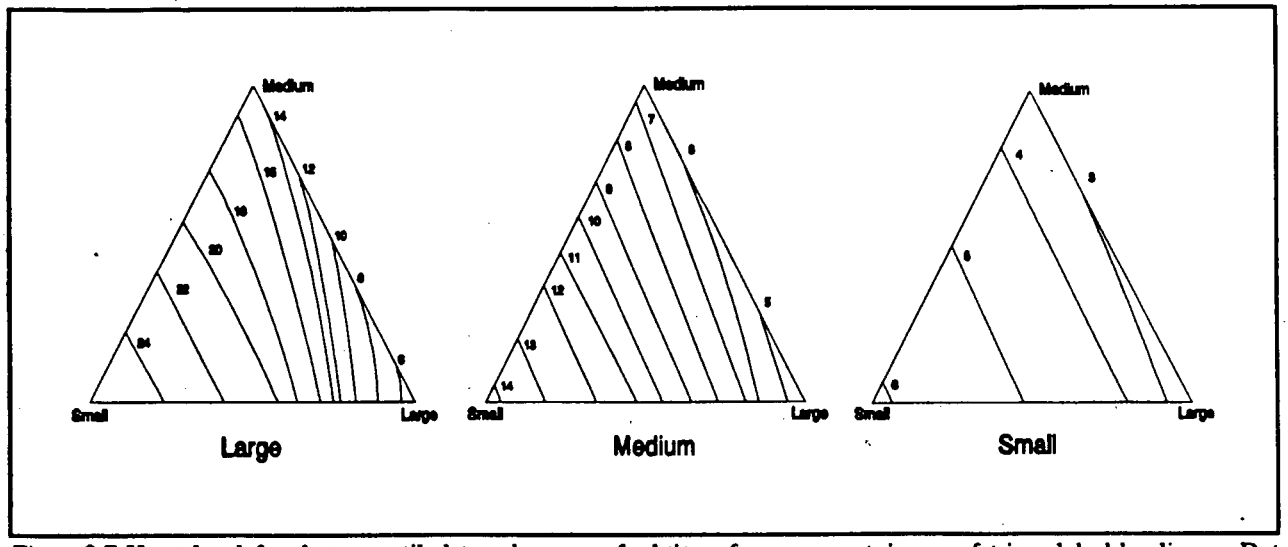
Der er lavet enkelte analytiske undersøgelser af den optimale sammensætning af trimodale blandinger. Hvis f.eks. forholdet mellem partikelstørrelserne er 25:5:1 er den eksperimentelt påviste optimale blanding ca. 69% store, ca. 9% mellem og ca. 22% små (i volumen/vægt). Det giver en tæthed på 0,85. Hvis man betragter grænsetilfældet, hvor størrelsesforholdet går mod uendelig, har man approksimeret, at en blanding med 67,1% store, 24,2% mellem og 8,7% små skulle give en optimal densitet på 0,926. Den øvre tæthedsgrænse for uendelige størrelsesforhold kan, hvis man antager at alle tre kuglestørrelser pakker sig optimalt ($\rho \approx 2/\pi$), beregnes som

$$1 - \left(1 - \frac{2}{\pi}\right)^3 \approx 0{,}95 \qquad (3.1)$$

Formlen fremkommer ved at antage porøsiteten på $1-2/\pi$, der fremkommer ved en pakningstæthed på $2/\pi$. Denne porøsitet mindskes tre gange i alt, og endelig trækkes den fra 1 for at få tætheden.

Der er også lavet undersøgelser af kontakttallets afhængighed af sammensætningen. Dette kan også tegnes på iso-kurve-form, men der skal nu ét diagram til for hver partikelstørrelse, idet de har vidt forskellige kontakttal.

De store partikler har naturligvis større kontakttal end de mellemste, og de mellemste har igen større kontakttal end de små (se figur 3.7).




*Figur 3.7* Kontakttal for de tre partikelstørrelser som funktion af sammensætningen af trimodale blandinger. Det gennemsnitlige kontakttal for alle sammensætninger er cirka seks.

Jo flere størrelser, der er involveret, med et fast forhold fra størrelse til størrelse, jo tættere pakninger kan opnås. Således er der fundet pakninger med fem komponenter med tætheder på op mod 0,99 [15].

## Kontinuerte størrelsesfordelinger

Ud fra ovenstående kan man næsten gætte pointen i kontinuerte fordelinger: Jo mere spredt partikelstørrelsesfordelingen er, jo større bliver pakningstætheden.

Der har været foreslået forskellige måder at beskrive fordelingerne på. En, som måske forekommer naturlig, er normalfordelingen, men denne indeholder jo en vis sandsynlighed for kugler med negativ radius. Derfor bruger man som regel log-normal fordelingen:

$$P(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}\right) \tag{3.2}$$

hvor P(x) er sandsynligheden for at finde en partikel med størrelsen x=ln(D), hvor D er partikelstørrelsen. Middelværdien for størrelsen er

$$\bar{x} = \ln(\bar{D}) \tag{3.3}$$

Spredningen $\sigma$ er bestemt ved

$$\sigma = \ln\left(\frac{D_{84}}{D_{50}}\right) \tag{3.4}$$

hvor $D_w$ er partikelstørrelsen ved w procent i den kumulative størrelsesfordeling.

Mange virkeligt forekommende partikelstørrelsesfordelinger har vist sig at kunne approksimeres med log-normal fordelingen.

## 3.4 Anvendelsesområder for tilfældige pakninger

Kuglepakninger, tilfældige som regelmæssige, kan med succes bruges som beskrivelsesmodel for faste stoffer, blandinger af pulvere osv. [11].

For eksempel kan nævnes, at argon, når det er på krystallinsk form, har atomerne arrangeret i en fladecentreret kubisk pakning. Forøgelsen af argons volumen, når det går fra krystallinsk form til væskeform, er ca. 16%, hvilket ses at svare til forøgelsen af tætheden fra en tæt tilfældig pakning (0,64) til den fladecentrerede kubiske pakning (0,74).

En af de ting, som Scott fandt ud af gennem sit kortlægningsarbejde, var, at radialfordelingen af kuglecentre i ædelgasserne helium, neon og argon er den samme (indenfor måleusikkerheden) som for en tilfældig tæt kuglepakning [24].

Kuglepakningsteori benyttes også ved søjlechromatografi i biologi. Hvis man vil separere proteiner fra små molekyler kan dette gøres ved hjælp af søjlechromatografi (gel-filtrerings-chromatografi). Prøven tilsættes i toppen af søjlen, der består af porøse perler i form af uopløselige men hydrerede polymerer. På grund af perlernes porøsitet vil de små molekyler dels befinde sig i selve opløsningen og dels inden i perlerne, mens de store molekyler kun vil være mellem perlerne. De store molekyler vil synke hurtigere gennem søjlen, og man opnår derved en udskillelse efter størrelse [28 & 14].

## 3.5 Opsamling

De tilfældige pakninger er et område, som er præget af eksperimenter og computersimuleringer, da det er matematisk svært tilgængeligt. Dette indebærer, at den viden, der er om emnet, er temmelig spredt, da den afhænger af hvilke eksperimenter, der er udført, og hvilke simuleringer der er foretaget. Computersimuleringerne har desuden ofte den fejl, at de har svært ved at efterligne virkelige tilfældige pakninger. Det er endnu ikke lykkedes at lave en simulering, hvor både radialdistributionen og tætheden svarer til Bernals, som er blevet standarden indenfor tilfældige pakninger. Opdelingen i celler er vigtig for karakterisering af pakninger, og kan formentlig benyttes indenfor mange områder. Således mener Finney, at det vil være interessant at udforske sammenhængen mellem celleopdelingen og termodynamikken [14].

# Kapitel 4
# Beskrivelse af bremseklodsproblemet

Da resten af projektet i vid udstrækning omhandler løsning af Teknologisk's problem mht. forbedring af pulverstøbte bremseklodser, vil vi i dette kapitel gøre nærmere rede for, hvem der står bag projektet, hvilke processer, der indgår i produktionen, og hvilke krav der stilles. Hvor intet andet er nævnt, stammer oplysningerne fra samtaler med Niels Bramsø og Knud Strande fra Teknologisk.

## 4.1 Bremseklodser

Der er tale om et produktudviklings-projekt, hvor Roulunds Fabriker og Teknologisk samarbejder om udvikling af en ny type bremseklodser til biler og lastbiler. Teknologisk er hyret af Roulunds Fabriker, da de på afdelingen for industriel metallurgi er i besiddelse af ekspertise og værktøj til fremstilling af produkter i sintret metal.

Før man i 1988 forbød asbest i bremseklodser, benyttede man asbestfibre som hovedingrediens i bremseklodser, da de har egenskaber, som gør dem yderst velegnede til formålet. Under bremsning omdannes bilens kinetiske energi til varme via friktion mellem bremseskiver og bremseklodser (hhv. bremsetromler og bremsebakker). Bremserne har ved "normal" kørsel en temperatur på 300-400°C og kan under bremsning komme op på omkring 1000°C. Asbest er velegnet, da det kan tåle meget høje temperaturer, det er varmeisolerende, det har en stabil friktionskoefficient, og det er blødere end jern. Varmeisoleringsevnen er vigtig, da man under f.eks. bjergkørsel ellers risikerer, at bremsevæsken bliver kogende, hvilket kan medfører bremsesvigt, og at det er blødere end jern er også vigtigt, da man gerne vil undgå for stort slid på bremseskiven [3]. Bremseklodser er en blanding af op imod 20 forskellige materialer sammenholdt af et termohærdende plastmateriale. Tidligere udgjorde asbest ca. halvdelen af det samlede materiale. Kobber indgik formentlig også som en hovedbestanddel og måske noget friktionsgivende kvartspulver, men de konkrete blandinger er selvfølgelig fabrikshemmeligheder [1 & 3]. De bremseklodser, man benytter i dag, er en blanding af alverdens ting, men de vigtigste erstatningsmidler for asbestfibre er ståluld (semimetalliske belægninger), glasfibre, keramiske fibre (metaloxider), mineralfibre (f.eks. Rockwool) og plastfibre (f.eks. Kevlar) [3].

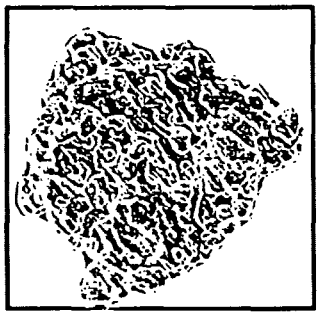
Det nye i det, som Teknologisk laver, er, at de har forsøgt at blande jernpulver, jernfibre og noget andet, da jern har en stor friktionskoefficient. For at undgå for stort slid på bremseskiven er man dog nødt til at blande en pasta i, der har den egenskab, at den nedsætter sliddet uden at nedsætte friktionen væsentligt. Desværre har pastaen vist sig umulig at blande i fra starten, da den brænder væk under sintringen, så Teknologisk har uden held forsøgt at presse pastaen ind i den færdigbehandlede klods sammen med et bindemiddel. Grunden, til at det ikke kan lade sig gøre, er antagelig, at porerne er for små til, at pastaen, der har en partikelstørrelse på 1-10 µm, kan passere - det er vel at mærke ikke fordi klodsen ikke er porøs nok, da den kun har en tæthed på ca. 50-70%. Teknologisk er interesseret i, om vi kan udregne porestørrelsesfordelingen i deres pulverblandinger, således at de i første omgang kan få et overblik over, hvilke pulvere det vil være muligt at presse pastaen igennem. Det er selvfølgelig ikke muligt at udtale sig entydigt, om det vil være muligt at presse pastaen igennem en given pakning ud fra porestørrelsesfordelingen, da vi ikke ved hvilken indflydelse en lille andel af for små huller vil have for den samlede gennemtrængelighed. Når modellen for porestørrelsesfordelingen først er lavet, vil det også være muligt at sige, hvad ændringer i partikelstørrelsesfordelingen vil medføre.

## 4.2 Produktion

Det materiale, som Teknologisk i første omgang vil bruge til de nye forsøg, er et - for dem - helt ukendt pulver, og de har derfor ikke nogen forsøgsresultater, vi kan benytte. I de forsøg, som de udførte tidligere, bestod materialet af blandinger af fibre, kugleformede partikler og andre former for partikler, så derfor er det også svært umiddelbart at overføre data fra de forsøg, de allerede har lavet, til den opgave, som vi er blevet bedt om at løse. Alligevel må vi bruge nogle af disse data for overhovedet at have noget at arbejde med.

Det metalpulver, som Teknologisk helst vil anvende, er et ferrit-pulver (over 99,7% Fe), kaldet Höganäs ABC 100.30, bestående af tilnærmelsesvis runde partikler (se figur 4.1). Partiklerne er dog ikke lige store, men har følgende størrelsesfordeling (størrelserne angiver partiklernes diameter):

| | |
|---|---|
| >212 µm | 0,0% |
| 180-212 µm | 1,0% |
| 150-180 µm | 9,7% |
| 106-150 µm | 23,8% |
| 75-106 µm | 22,1% |
| 45-75 µm | 27,4% |
| <45 µm | 16,0% |



*Figur 4.1* Forstørrelse af en ABC 100.30 partikel.

Størrelsesfordelingen er angivet i vægtprocent. Höganäs ABC 100.30 er blot ét pulver blandt mange, så vi har valgt også at se på kugle- og porestørrelsesfordelingen i et pulver kaldet M 20/80-19. Höganäs ABC 100.30 har den fordel med hensyn til modellering, at det er et af de pulvere, hvor partiklerne er mest kugleformede. De data, der nævnes i det følgende, vil dels gælde specifikt for Höganäs ABC 100.30, dels være data, som vi har fået oplyst af Teknologisk.

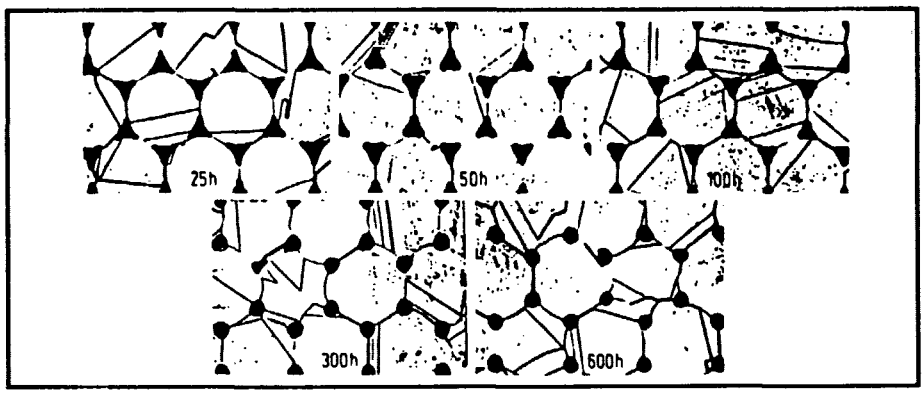
Pulvermetallurgi er en teknik, der især benyttes til fremstilling af værktøj som et alternativ til støbning. Ved støbning tager man noget metal, smelter det og hælder det i en støbeform. Ved sintring indgår der flere processer. Udgangspunktet er forskellige slags metalpulvere. De er specielt fremstillet til formålet og består som regel hovedsageligt af ét grundstof og er tilsat en blanding af andre grundstoffer, de fleste dog kun i meget små mængder, dvs. under 1%. Pulveret består af små partikler i forskellige størrelser og former i en sammensætning, som gør, at man kan opnå meget høje tætheder. Første skridt er at blande pulveret, så man har en homogen blanding. Dette gøres på Teknologisk i en special-konstrueret blandemaskine, og det fastslås ved skøn, hvornår blandingen er homogen. Hvis der f.eks. er fibre i blandingen, skal man være yderst forsigtig, når man tømmer blanderen, idet man let risikerer, at de fine partikler drysser ud først, og fibrene bliver tilbage i maskinen, og man har så ikke længere en homogen blanding. Dernæst hældes blandingen i en form, der er smurt for at nedsætte friktionen mellem pulver og form. Man kan også tilsætte forskellige midler til selve blandingen for at mindske friktionen mellem partiklerne. Det løse pulver har typisk en tæthed på 40%, mens det efter presning kan nå en tæthed på helt op til 96%. For at opnå så store tætheder skal trykket dog være ca. 800 MPa, hvilket svarer til ca. 8 t/cm$^2$. Presningen sker ved tryk både oppefra og nedefra for at sikre en ensartet sammenpresning. I vores tilfælde ved vi endnu ikke hvor stort et tryk, der skal anvendes, men normalt opererer Teknologisk med tryk mellem 100 MPa og 500 MPa. Teknologisk vil også lave nogle forsøg, hvor pulveret slet ikke presses, men blot sintres for at undersøge, hvad der skal til for at opnå et passende kontakttal.

Sintring er en metode til at få partiklerne i de pressede emner til at hænge sammen. Processen foregår i en ovn, hvor emnet "bages" ved forskellige temperaturer. Eksempelvis er de data, der er nævnt ovenfor opnået ved sintring i 30 minutter ved 1120°C, men det er også almindeligt, at sintringen foregår i intervaller af varierende længde og temperatur. Da de nævnte data er for et jernpulver, skal temperaturen på 1120°C ses i forhold til jerns smeltepunkt på 1540°C, så der er ikke tale om en egentlig sammensmeltning, men derimod om sammenføjning ved rekrystallisation og diffusion. Ved diffusion vil nogle af atomerne, især dem på overfladen af partiklerne, begynde at bevæge sig rundt og derved skabe kontakt partiklerne imellem. Der er tre faktorer, der er afgørende for, hvad der sker, og hvilke egenskaber man opnår. Den temperatur, som man varmer op til, kaldes holdetemperaturen (jvf. de før nævnte 1120°C) og er bestemmende for hvilke typer af krystaller, der dannes. Holdetiden er den tid, emnet udsættes for holdetemperaturen (jvf. de 30 min.) og er afgørende for hvor store krystaller, der dannes ved rekrystallisation. Der sker det, at krystallerne har en vis overfladespænding, som de hele tide søger at mindske, således at forholdet mellem krystaloverflade og krystalvolumen bliver så lille som muligt, og diffusionen gør, at de kan opnå dette ved at "vokse sammen". Dette betyder, at kontakttallet har stor indflydelse på, hvor meget pakningen krymper under sintringen, da det

netop er kontakterne, som gør, at partiklerne kan "vokse sammen" [15]. Kølehastigheden, som er et udtryk for, hvor hurtigt emnet afkøles til stuetemperatur, er bestemmende for, om krystallerne dannes på den rette måde, eller om de overmættes, hvilket skyldes for hurtig afkøling [1 & 17].

For at undgå, at partiklerne når at oxidere, inden emnet er færdigbehandlet, tilsætter man en beskyttelsesgas under sintringen i form af nitrogen eller en syntetisk gas. Brint bruges også som beskyttelsesgas, men nitrogen er at foretrække, da den er billigere.

Under sintringen kan emnet krympe op til 25%, men på Teknologisk bliver emnets volumen normalt kun 1-2% mindre. Hvad der sker på mikroskopisk plan under sintringen, kan ses på figur 4.2, der er et snit gennem en kuglepakning på forskellige stadier under sintringen. Udover at partiklerne danner større kontaktflader og derved ændrer form, sker der selvfølgelig også en ændring af porernes form, og da partiklerne "flyder lidt ud" ved kontaktfladerne, bliver porerne runde i stedet for den stjerneformede facon, de havde tidligere. De uregelmæssigheder, som kan ses på figur 4.1, vil formentlig forsvinde under sintringen på grund af partiklernes overfladespænding, og derved give dem en mere regulær form.




*Figur 4.2* Fra venstre mod højre ses, hvorledes porerne ændre facon under sintringen [16].

Efter presningen hænger emnet så meget sammen, at det kan tages ud af formen og transporteres uden at gå i stykker, men det er stadig ikke særlig stærkt og tåler kun træk på ca. 10-40 N/mm$^2$ (100-400 kg/cm$^2$). Efter sintring bliver trækstyrken op til cirka ti gange så stor, dvs. ca. 300 N/mm$^2$ (3 t/cm$^2$).

## Ændring af kuglestørrelsesfordeling

Hvis det viser sig, at Höganäs ABC 100.30 ikke giver den rigtige porestørrelsesfordeling med den før nævnte kuglestørrelsesfordeling er Teknologisk i besiddelse af sigter, således at de kan sortere følgende kornstørrelser fra:

20–63 μm

63–90 μm

90–125 μm

125–180 μm

180–250 μm

250–355 μm

355–710 μm

Disse sigtestørrelser er et udtryk for, hvad Teknologisk allerede har. Det er selvfølgelig muligt at købe andre størrelser eller sågar at få pulveret leveret fra Höganäs med den ønskede størrelsesfordeling. Inden man går så vidt, vil det nok være rart at have set resultater, der bekræfter formodningen om, at det kan betale sig at investere i nye sigter.

Pastaen, der skal presses ind i pakningen, er en blanding af partikler, der nedsætter sliddet, og et bindemiddel, der skal holde partiklerne fast. Den indeholder partikler i størrelsesordenen 1–10 μm og det skal derfor, i den endelige pakning, gerne være sådan, at de mindste porer, eller i hvert fald kun en lille del af det samlede antal porer, er ca. 1,5 til 2 gange så stor, dvs. ca. 15–20 μm eller mere.

## 4.3 Opsamling

Teknologisk's problem er at sikre, at deres pulverblandinger indeholder tilstrækkelig mange store porer, så den friktionsnedsættende pasta kan presses igennem. Der er flere muligheder for at opnå, at porerne i pakningen bliver store nok, og den mest simple vil være blot at benytte et pulver med en tilstrækkelig stor partikelstørrelse. Hvis alle partikler er store, får pakningen dog ikke den ønskede egenskab, nemlig at kunne indeholde en jævn fordelt pasta, idet den vil ligge i nogle store, men få, porer. Et andet krav er, at der skal være et tilstrækkeligt stort gennemsnitligt kontakttal, og dette sikres bedst med en vis spredning i pulverets partikelstørrelse. De små partikler vil lægge sig mellem de store og sikre et højt gennemsnitligt kontakttal, og jo mindre de mindste partikler er, desto større bliver kontakttallet. Derfor er det altså ønskeligt, at pakningen indeholder små partikler, uden at de dog bliver for små.

Dette leder os frem til at lave en model for hvilken porestørrelsesfordeling, man kan forvente ud fra en given partikelstørrelsesfordeling. Dette vil vi gøre ved at antage, at partiklerne i pulveret er kugleformede og benytte os af de egenskaber vi kender fra kuglepakningsteorien. Modellen vil blive gennemgået i næste kapitel.

# Kapitel 5
# Modeludvikling

I dette kapitel analyseres det foreliggende problem, og der foretages en række nødvendige antagelser og simplificeringer. Derefter opbygges en model for udregning af porestørrelsesfordelinger på grundlag af kuglestørrelsesfordelinger, og modellen evalueres – både med hensyn til teoretisk validitet og praktisk anvendelighed.

## 5.1 Systemafgrænsning og grundlæggende antagelser

### Formål

Som beskrevet i forrige kapitel var det oprindelige ønske fra Teknologisk's side en model, som kunne fortælle, hvordan partikelstørrelsesfordelingen skal være, hvis man vil opnå en bestemt porestørrelsesfordeling og stabilitet. Der er dog flere grunde til at ændre på denne målsætning. For det første er det ikke relevant at fremstille en ganske bestemt porestørrelsesfordeling. Det er den minimale porestørrelse, der er problemet. Desuden kan en given porestørrelsesfordeling opnås på flere måder, idet forskellige konstellationer af kugler kan give samme størrelse porer. Dermed ville afbildningen ikke blive enentydig. Og endelig er vi ikke i stand til at sige noget særligt om stabiliteten, da det mest drejer sig om materialeegenskaber. Stabiliteten hænger dog til dels sammen med kontakttallet.

Derfor er modellens formål det omvendte, nemlig at fortælle, hvordan porestørrelsesfordelingen afhænger af partikelstørrelsesfordelingen. På den måde kan modellen for en given kuglestørrelsesfordeling udtale sig om pakningens anvendelighed.

Målet er en sandsynlighedsmodel for fordelingen af porestørrelser i en tilfældig polydispers kuglepakning ud fra fordelingen af kuglestørrelser i pakningen.

### Analyse og forsimpling

Det er ikke størrelsen af porerne i gængs forstand, der skal findes, men derimod størrelsen af de kanaler, som forbinder porerne. De vil fremover blive kaldt porekanaler. Disse kan repræsenteres ved Krarfu-cellernes sideflader. Det er dog ikke denne tilgangsvinkel, vi vil benytte her. I stedet betragtes størrelsen af de huller, der forekommer mellem de forskellige konstellationer af tre kugler, som omkranser en porekanal. Herved overser vi selvfølgelig det faktum, at der forekommer porekanaler omkranset af fire eller flere kugler, men da disse kanaler

vil være større end de tilsvarende for en vilkårlig kombination af tre af de omkransende kugler, vil dette være en tilnærmelse i den sikre retning.

Den første væsentlige forsimpling er, at partiklerne betragtes idealiseret som kugler. Modellen tager ikke højde for partiklernes afvigelse fra kugleform. Desuden antager vi, at materialet ikke presses og sintres mere, end at partiklerne stadig kan betragtes som kugler.

Derudover antages det, at kugleblandingen er homogen, således at der ikke er forskel i størrelsesfordelingen i forskellige dele af pakningen, og at pakningen har samme tæthed overalt.

Dernæst antages det, at kuglestørrelsesfordelingen angives som relative hyppigheder i intervaller, og at partiklerne indenfor de enkelte intervaller er fordelt symmetrisk, således at gennemsnitsradius af kuglerne i et interval er lig intervalmidtpunktet.

### Matematificering

Størrelsen af hver partikel er entydigt bestemt ud fra dens radius. Partiklerne er inddelt i n størrelsesintervaller, nummereret fra 1 til n. Gennemsnitsradius for en størrelsesklasse i sættes til $R_i$. Gennemsnitsradius for hele pakningen er $\bar{r}$. Hyppigheden af en størrelsesklasse sættes til $p(R_i)$. Der gælder selvfølgelig, at

$$\sum_{i=1}^{n} p(R_i) = 1 \tag{5.1}$$

Størrelsen af en porekanal er defineret som radius af den største kugle, som kan passere, dvs. radius af den indskrevne cirkel i det todimensionale snit gennem de omkransende kuglers centre.

## 5.2 Modellen

Ideen i vores model er at beregne den relative hyppighed af forskellige konstellationer af tre kugler og dermed af de tilhørende porekanalstørrelser. Hyppigheden af en porekanal er det samme som hyppigheden af konstellationen af de tre kuglestørrelser, som omgiver porekanalen.

Hyppigheden af en sådan konstellation afhænger dels af hyppigheden af de tre kugletyper, og dels af disse kugletypers kontakttal. Store kugler har som beskrevet i kapitel 3 større kontakttal end små i polydisperse pakninger. En kugle med stort kontakttal vil således indgå i flere konstellationer end en lille med få kontakter. Derfor foretager vi en vægtning af kuglernes hyppigheder, således at vi får hyppigheden af en kontakt, hvor en kugle med radius $R_i$ indgår. Denne hyppighed $p'(R_i)$ beregnes som hyppigheden af kuglen gange kuglens kontakttal divideret med summen af de enkelte kuglers hyppigheder ganget med deres kontakttal.

$$p'(R_i) = \frac{p(R_i)N(R_i)}{\sum_{j=1}^{n} p(R_j)N(R_j)} \tag{5.2}$$

At tre kugler af givne størrelser er naboer, anskues nu som tre indbyrdes uafhængige simultane hændelser. Hyppigheden af en konstellation af tre kugler er da blot produktet af de tre kuglestørrelsers vægtede hyppigheder p'.

$$\Psi(R_i,R_j,R_k) = p'(R_i)\ p'(R_j)\ p'(R_k) = \frac{p(R_i)p(R_j)p(R_k)N(R_i)N(R_j)N(R_k)}{\left(\sum_{m=1}^{n} p(R_m)N(R_m)\right)^3} \tag{5.3}$$

Rækkefølgen af de tre argumenter er, som det ses, underordnet. For at få den reelle hyppighed af en bestemt konstellation af tre kuglestørrelser skal man derfor summere resultatet ved alle ordningsmuligheder af de tre størrelser. Hvis der er tale om tre forskellige størrelser, skal resultatet således ganges med 6. Hvis de tre størrelser er ens, skal der kun ganges med 1.

For at dette er en ægte sandsynlighedsfunktion, skal det gælde at

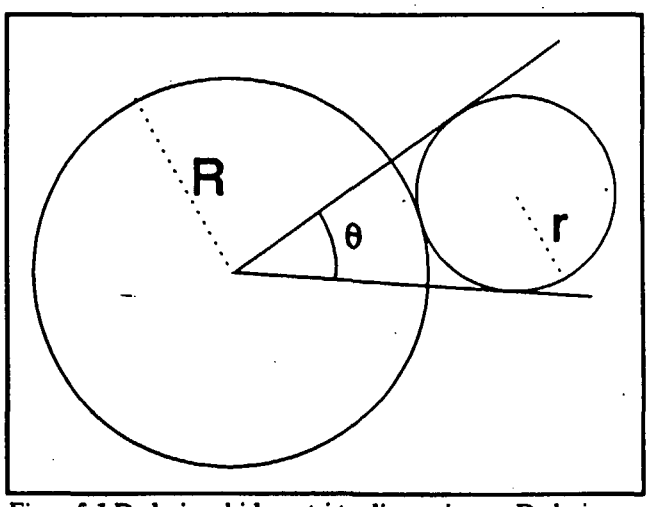
$$\Psi(R_i,R_j,R_k) \geq 0 \quad og \quad \sum_{1 \leq i,j,k \leq n} \Psi(R_i,R_j,R_k) = 1 \tag{5.4}$$

Det ses, at dette er tilfældet, ved at sætte på fælles brøkstreg og gange nævneren ud. Hvert led i den derved fremkomne sum svarer til et led i tælleren, hvorved summen bliver 1.

Vi mangler nu at bestemme kontakttallet $N(R_i)$ og en formel for porekanalens størrelse som funktion af de tre kuglers radius.

## Dækningsgrad

I forbindelse med beregning af kontakttallet har vi brug for en ny kuglepakningsegenskab, som vi vil kalde dækningsgraden af en kugle. Dækningsgraden af en kugle er den brøkdel af kuglens overflade, som er "skygget" af de rørende nabokugler. Bidraget til dækningsgraden fra hver nabokugle i to dimensioner bestemmes af vinklen θ mellem to linier gennem kuglens centrum, således at disse linier er tangenter til nabokuglen (se figur 5.1). Dækningsbidraget fra hver nabokugle beregnes, og summen af disse divideres med kuglens totale overflade. Herved fås et tal mellem 0 og 1.




*Figur 5.1* Dækningsbidraget i to dimensioner. Dækningsbidraget $\theta$ udregnes for hver kugle, og summen divideres med hele overfladen, dvs. $2\pi$.

Det antages nu, at dækningsgraden er den samme for alle kuglerne i en given pakning, også selvom pakningen er polydispers. Dette kan med rimelighed antages, da store kugler har mange

kontakter (til store og små) og stor overflade, mens små kugler har få kontakter (til store og små) og lille overflade.

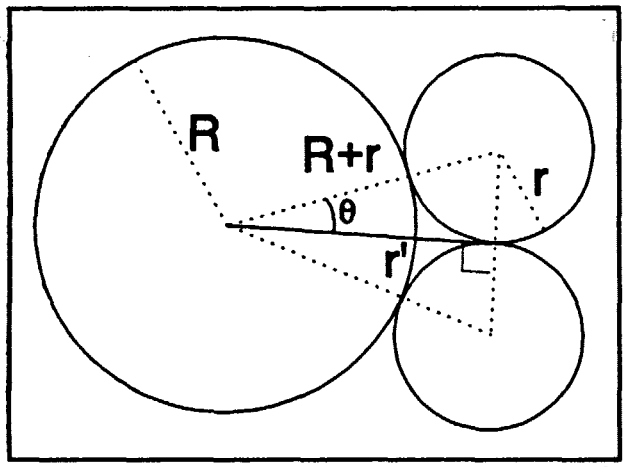
Dækningsgraden for en kugle med radius R er lig kontakttallet N(R) gange dækningsbidraget fra hver af nabokuglerne, som alle antages at have radius r

$$\gamma = N(R)\gamma_r \quad \rightarrow \quad N(R) = \frac{\gamma}{\gamma_r} \tag{5.5}$$

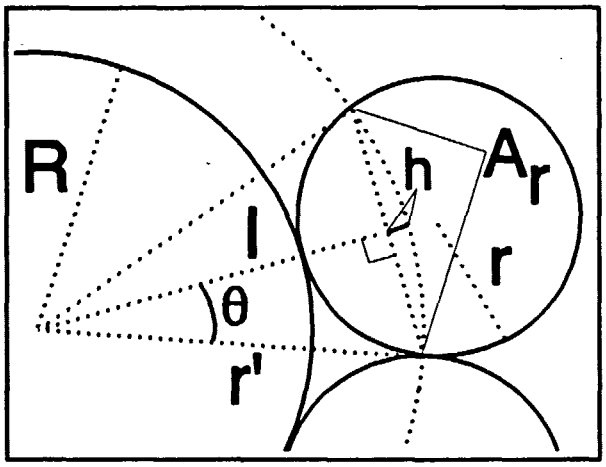
Der skal nu beregnes et udtryk for $\gamma_r$, således at der fås et udtryk for N(R).

## Dækningsbidrag

Dækningsbidraget fra en enkelt nabokugle er som sagt den brøkdel af kuglens overflade, som er "skygget" af denne nabokugle. I stedet for at beregne brøkdelen af kuglens egen overflade, betragtes en kugleskal gennem naboernes indbyrdes kontaktpunkter, og det udregnes hvor stor en del af denne kugleskals overflade, der ligger inde i nabokuglen. Dette er tydeligvis den samme brøkdel men er nemmere at beregne. Figur 5.2 og 5.3 viser todimensionale snit af situationen.




*Figur 5.2* Beregning af radius af kugleskallen, som går gennem kontaktpunkterne mellem nabokuglerne og vinklen θ mellem to kontaktpunkter. Figuren viser et todimensionalt snit gennem de tre kuglecentre.




*Figur 5.3* Beregning af dækningsbidraget fra en enkelt nabokugle. Dette er bestemt ud fra *h* og *r'*.

Radius r' af kugleskallen gennem nabokuglernes kontaktpunkter fås ved

$$r' = \sqrt{(R+r)^2 - r^2} = \sqrt{R^2 + 2Rr} \tag{5.6}$$

Nu beregnes arealet af det stykke af kuglen med radius r', som ligger inden i kuglen med radius r. Dette er overfladen af en kalot på kuglens overflade med radius r' og højde h.

Først beregnes vinklen θ:

$$\theta = \arcsin \frac{r}{R+r} \tag{5.7}$$

Dernæst beregnes længden l af liniestykket fra centrum af kuglen med radius r' til midtpunktet af kalottens "bund".

$$l = r' \cos\theta \tag{5.8}$$

Højden h af kalotten er da forskellen mellem r' og l.

$$\begin{aligned} h &= r' - l = r' - r' \cos\theta = (1 - \cos\theta)\, r' \\ &= r' \left(1 - \cos \arcsin \frac{r}{R+r}\right) = r' \left(1 - \sqrt{1 - \left(\frac{r}{R+r}\right)^2}\right) \end{aligned} \tag{5.9}$$

Arealet $A_r$ af kalotten er

$$A_r = 2\pi r' h = 2\pi r'^2 \left(1 - \sqrt{1 - \left(\frac{r}{R+r}\right)^2}\right) \tag{5.10}$$

Da arealet A af hele kugleskallen er

$$A = 4\pi r'^2 \tag{5.11}$$

er dækningsbidraget $\gamma_r$ givet ved

$$\gamma_r = \frac{A_r}{A} = \frac{2\pi\, r'^2 \left(1 - \sqrt{1 - \left(\frac{r}{R+r}\right)^2}\right)}{4\pi r'^2} = \frac{1}{2}\left(1 - \sqrt{1 - \left(\frac{r}{R+r}\right)^2}\right) \tag{5.12}$$

## Kontakttallet

Ved at indsætte (5.12) i (5.5) fås

$$N(R) = \frac{2\,\gamma}{1 - \sqrt{1 - \left(\frac{r}{R+r}\right)^2}} \tag{5.13}$$

Vi har således en sammenhæng mellem kuglestørrelsen og kontakttallet. Dækningsgraden (konstanten $\gamma$) er ikke kendt, men da udtrykket skal bruges til en relativ vægtning, betyder denne konstant ingenting.

For at benytte udtrykket for N(R), som jo forudsætter, at alle nabokugler har samme størrelse, antager vi, at (5.13) også gælder for en tilfældig polydispers pakning, hvor radius har middelværdi $\bar{r}$, dvs. for en kugle med radius $R_i$ med naboer, der har gennemsnitlig størrelse $\bar{r}$.

<Herved fås

$$N(R_i) = \frac{2\gamma}{1-\sqrt{1-\left(\frac{\bar{r}}{R_i+\bar{r}}\right)^2}} \tag{5.14}$$

## Porekanalernes størrelser

Efter at have fundet sandsynlighederne for de forskellige konstellationer skal disse omregnes til de tilsvarende porestørrelser.

Størrelsen $Q(R_i,R_j,R_k)$ af en pore omkranset af kugler med radius $R_i$, $R_j$ og $R_k$ kan udregnes ved følgende formel (se appendiks C):

$$Q(R_i,R_j,R_k) = \frac{1}{\frac{1}{R_i}+\frac{1}{R_j}+\frac{1}{R_k}+2\sqrt{\frac{R_i+R_j+R_k}{R_iR_jR_k}}} \tag{5.15}$$

## Omregning fra vægt til antalsprocent

Datamaterialet for jernpartiklerne angiver partiklernes fordeling i vægtprocent. Da vi i den foreliggende model arbejder med kugleantal, har vi brug for en omregningsformel fra vægtprocent til antalsprocent. Dette kan gøres ved simpelthen at vægte de enkelte hyppigheder i forhold til kuglernes rumfang.

$$p_{i_{antal}} = \frac{p_{i_{vægt}} R_i^3}{\sum_{j=1}^{n} p_{j_{vægt}} R_j^3} \tag{5.16}$$

## Resumé af model

Modellens hoveddele er altså følgende:

1. Omregning fra vægtprocent til antalsprocent.
2. Udregning af kontakttallet som funktion af kuglestørrelsen
3. En formel for hyppigheden af en given konstellation af tre kugler.
4. En formel for porestørrelsen for en given konstellation af tre kugler.

Ved hjælp af disse fire dele kan der beregnes porestørrelsesfordelinger ud fra forskellige kuglestørrelsesfordelinger. Derved kan man beregne, hvor stor en del af porerne, der er mindre end en given størrelse og dermed, om pakningen er tilstrækkelig gennemtrængelig.

## Beregningsmetode

Vi vil kort beskrive fremgangsmåden i det computerprogram vi har lavet til at udføre modellens beregninger.

Først indlæses partiklernes data fra en tekstfil. Denne indeholder diameteren af de forskellige størrelsesklasser samt deres vægtmæssige andel af partiklerne. Disse omregnes til antalsfordeling ved hjælp af formel (5.16).

Dernæst beregnes kontakttallene for de forskellige størrelsesklasser (5.13). Summen af hyppighederne vægtes med deres kontakttal og bruges til beregning af de vægtede hyppigheder (5.2).

Nu dannes en liste over alle konstellationer (ikke-ordnede kombinationer) af tre størrelsesklasser, og hyppigheden af hver af disse konstellationer beregnes vha. formel (5.3).

Endelig beregnes porestørrelsen af hver af konstellationerne med formel (5.15).

Programmets output består dels af en liste med radius af de enkelte porekanaler samt disses hyppighed, dels af en liste med den antalsmæssige fordeling og kontakttal for de enkelte partikelstørrelser.

## 5.3 Matematisk modelleringsarbejde

I det følgende vil nogle begreber og sammenhænge angående matematiske modeller blive forklaret i relation til vores eget modelarbejde.

### Hvad er en matematisk model?

En **model** er en forsimpling af en del af virkeligheden, som repræsenterer de for formålet vigtigste egenskaber ved virkelighedsområdet. Forsimplingerne har det formål at skabe overblik og frasortere unødvendig information.

> *"En model er en repræsentation (ved hjælp af en eller anden form for midler) af et kompliceret område af virkeligheden, med henblik på at få indfanget træk ved virkeligheden, som ellers er for vanskeligt tilgængelige eller uhåndterlige."* [18,p.7]

Man inddeler ofte modeller efter de midler, der benyttes i repræsentationen. Således tales om henholdsvis **fysiske** og **symbolske** modeller (hertil hører de matematiske). I en **matematisk model** er virkelighedsområdets egenskaber repræsenteret i matematiske strukturer som ligningssystemer og lignende.

### Matematiske modelkategorier[1]

Matematiske modeller hører til den **anvendte** matematik, da ethvert virkelighedsområde må regnes som befindende sig udenfor matematikken. Der er dog stor forskel på modellernes formål, idet der kan være tale om erkendelsesmodeller (kaldet **deskriptive** modeller), for

1: I litteraturen findes mange forskellige inddelinger af modeller. Den her beskrevne inddeling stammer fra et tidligere RUC-projekt [20] og er baseret på tre bøger om matematiske modeller.

eksempel fysiske stoffers struktur, løsning af konkrete problemer (kaldet **præskriptive** modeller), for eksempel planlægning af produktionsprocesser, eller om forudsigelser af konsekvenserne af en given handling (kaldet **prædiktive** modeller), for eksempel økonomiske eller økologiske prognoser. Ofte er en model en blanding af disse kategorier. For eksempel kan en deskriptiv model ofte benyttes til prædiktive formål.

Vores egen model er et eksempel på en blandet model. Selve modellen kan siges at være en prædiktiv model, idet den forudsiger, hvilken porestørrelsesfordeling man opnår, hvis man benytter en bestemt kuglestørrelsesfordeling. Men formålet er i høj grad præskriptivt, idet modellens mål er at kunne finde frem til en anvendelig kuglestørrelsesfordeling. Det deskriptive indhold af modellen er på et meget groft plan, idet modellen ikke indeholder en matematisk beskrivelse af de processer, der indgår i kuglepakningen, men kun en sandsynligheds-behandling af udfaldet.

Man skelner også ofte mellem **teoretiske** modeller og **ad hoc** modeller. Teoretiske modeller bygger på et teoretisk fundament og har et stort erfaringsgrundlag angående samspillet mellem empiri og teori, som er med til at slå deres styrke fast. Ad hoc modeller er derimod skræddersyet til den aktuelle problemstilling, og den nødvendige empiri hentes fra de øjeblikkelige forhold. I værste fald bygger ad hoc modeller på antagelser, som ikke er fuldstændigt verificerede.

Vores model er en ad hoc model, idet den ikke bygger på et velunderbygget teoretisk fundament, men nærmere på en række mere eller mindre løse antagelser. Konsekvenserne af nogle af disse antagelser vil vi se nærmere på senere i kapitlet.

Endelig tales om **deterministiske** og **stokastiske** modeller. Stokastiske modeller benyttes, når visse data eller processer i virkelighedsområdet er resultatet af en række tilfældige hændelser, og således er udsat for tilfældige variationer af en vis størrelsesorden. Hvis dette ikke er tilfældet, kaldes modellen deterministisk. Ofte bygges deterministiske modeller over stokastiske fænomener, idet der ses bort fra variationerne, eller de medtages som usikkerhedsfaktorer.

Det er klart, at der indgår mange stokastiske processer ved blanding, presning og sintring af partikler. Men det er umuligt at foretage en fuldstændig undersøgelse og beskrivelse af alle disse, endsige bygge dem sammen i en overskuelig model. Vi har valgt at betragte problemet på et makroskopisk plan, idet vi antager, at partiklernes konstellationer forekommer fuldstændigt tilfældigt, og at denne tilfældighed blandt andet medfører, at dækningsgraden er konstant for alle kuglestørrelser. Men dette udelukker ikke den kendsgerning, at modellen bygger på en stokastisk antagelse, og blot betragter udfaldet af de stokastiske processer på et kombinatorisk plan.

## Modelleringsprocessen for en matematisk model

Det er klart, at der ikke findes en komplet opskrift for, hvordan en matematisk model konstrueres. Men der kan udstikkes en række retningslinjer for hvilke ting, der bør indgå i modelarbejdet. I dette afsnit beskrives én af de strategier, som modelarbejdet kan udføres efter.

Modelarbejdet kan overordnet inddeles i tre faser : formuleringsfasen, behandlingsfasen og evalueringsfasen [22].

I **formuleringsfasen** startes der med en præcis formulering af modellens formål, herunder modellens ønskede præcision og generalitet.

Herefter udføres en systemafgrænsning, hvor det udsnit af virkelighedsområdet, som modellen skal omhandle, udvælges. Hertil hører også valg af synsvinkel (fysisk, geometrisk, økonomisk el.lign.). Allerede på dette trin bortskæres store mængder information, som anses for mindre væsentlig, forvirrende eller direkte overflødig.

Nu foretages en analyse af det valgte system, dvs. de objekter og sammenhænge, som indgår i modellen, identificeres og repræsenteres ved matematiske strukturer. For at gøre modellen overskuelig og mulig at behandle foretages en række væsentlige forsimplinger. Disse skal man huske at medtage i den senere evaluering af modellen.

I **behandlingsfasen** benyttes den opstillede model til at forsøge at finde en løsning på det oprindelige problem. Dette kan enten ske ved at fremstille en algoritme til beregning af resultater ud fra modellen (især i præskriptive og prædiktive modeller) eller der kan benyttes analytiske metoder til uddragning af ny viden fra de opstillede strukturer (især i deskriptive modeller). Endelig kan der foretages egentlige simuleringer, hvor strukturerne beregnes numerisk som en direkte parallel til virkeligheden.

Ofte kan det være nødvendigt at foretage yderligere forsimplinger i behandlingsfasen, når der opstår problemer.

I **evalueringsfasen** vurderes modellen, dels ud fra rent teoretiske kriterier og dels i forhold til resultater fra det oprindelige virkelighedsområde. I vurderingen må der tages skyldigt hensyn til de grundantagelser, som blev gjort i formuleringsfasen.

Selvfølgelig foregår modelleringen ikke som en strømlinet proces gennem de tre faser. Det er ofte nødvendigt at vende tilbage til en tidligere fase og foretage ændringer og justeringer eller fjerne nogle af de foretagne antagelser og begrænsninger. Især fra behandlingsfasen må man ofte vende tilbage til formuleringsfasen.

## 5.4 Teoretisk evaluering af modellens validitet

I dette afsnit vil vi forsøge at argumentere for, at modellen er matematisk konsistent, hvilket vil sige, at de tre formler, der indgår i modellen, alle opfører sig pænt i de definitionsmængder, vi betragter.

Først vil vi se på udtrykket for kontakttallet som funktion af størrelsen af en given kugle.

Udtrykket lyder

$$N(R_i) = \frac{2\gamma}{1-\sqrt{1-\left(\frac{\bar{r}}{\bar{r}+R_i}\right)^2}} \tag{5.17}$$

Det ses, at da det for dækningsgraden $\gamma$ altid gælder, at $0 \leq \gamma \leq 1$, og da udtrykket under kvadratrodstegnet altid er et tal mellem 0 og 1, vil udtrykket for $N(R_i)$ altid blive positivt.

Det ses endvidere, at hvis radius af $R_i$ går mod uendelig, vil kontakttallet ligeledes gå mod uendelig, og at hvis $R_i$ går mod 0, vil kontakttallet gå mod $2\gamma$. Begge dele forekommer meget rimelige. Derudover ses det, at $N(R_i)$ er en jævnt voksende funktion for voksende $R_i$, idet dens afledede med hensyn til $R_i$ altid er positiv.

Differentialkvotienten bliver

$$\frac{dN(R_i)}{dR_i} = \frac{2\gamma\bar{r}^2}{\left(1-\sqrt{1-\left(\frac{\bar{r}}{R_i+\bar{r}}\right)^2}\right)^2\sqrt{1-\left(\frac{\bar{r}}{R_i+\bar{r}}\right)^2}\,(R_i+\bar{r})^3} \tag{5.18}$$

At formlen til beregning af hyppigheden af en given konstellation af kugler også opfører sig pænt følger af, at den kun kan producere sandsynligheder, der ligger mellem 0 og 1,

Hyppigheden af en given konstellation af tre kugler beregnes ud fra udtrykket

$$\Psi(R_i,R_j,R_k) = \frac{p(R_i)p(R_j)p(R_k)N(R_i)N(R_j)N(R_k)}{\left(\sum_{m=1}^{n} p(R_m)N(R_m)\right)^3} \tag{5.19}$$

Da alle faktorerne er positive, vil produktet af dem også altid blive positivt. Da summen over sandsynlighederne for alle tænkelige konstellationer er 1, jævnfør

$$\sum_{1\leq i,j,k\leq n} \Psi(R_i,R_j,R_k) = 1 \tag{5.20}$$

ses det, at funktionen er en sandsynlighedsfunktion på udfaldsrummet $\{1, \ldots, n\}^3$.

Ud fra (5.19) ses det endvidere, at der kun kan forekomme konstellationer af kugler, som er til stede i fordelingen.

Hvis man havde med en kontinuert kuglestørrelsesfordeling at gøre, ville udtrykket (5.19) i stedet blive

$$\Psi(R_1,R_2,R_3) = \frac{p(R_1)p(R_2)p(R_3)N(R_1)N(R_2)N(R_3)}{\left(\int_0^{\infty} p(R)N(R)dR\right)^3} \tag{5.21}$$

hvilket der ikke er problemer forbundet med, idet både p(R) og N(R) er kontinuerte, integrable funktioner for $0 \leq R_i$.

At dette er en sandsynlighedstæthedsfunktion ses ud fra, at

$$\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty \Psi(R_1,R_2,R_3)\,dR_1\,dR_2\,dR_3$$

$$= \frac{\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty p(R_1)p(R_2)p(R_3)N(R_1)N(R_2)N(R_3)\,dR_1\,dR_2\,dR_3}{\left(\int_0^\infty p(R)N(R)\,dR\right)^3} \tag{5.22}$$

som, da det tredobbelte integral separerer i hhv. $R_1$, $R_2$ og $R_3$, kan skrives

$$\frac{\int_0^\infty p(R_1)N(R_1)\,dR_1\int_0^\infty p(R_2)N(R_2)\,dR_2\int_0^\infty p(R_3)N(R_3)\,dR_3}{\left(\int_0^\infty p(R)N(R)\,dR\right)^3} = 1 \tag{5.23}$$

Formlen til beregning af størrelsen $Q(R_i,R_j,R_k)$ af en pore omkranset af kugler med radius $R_i$, $R_j$ og $R_k$ ønsker vi ikke at undersøge nærmere, da den er fremkommet ved rent geometriske betragtninger uafhængige af den øvrige model.

I modellen er de ovenfor beskrevne funktioner sammensat på følgende måde: Først beregnes en kontakttalsfordeling ud fra kuglestørrelsesfordelingen. Ud fra kontakttalsfordelingen beregnes sandsynlighedsfordelingen for konstellationer af tre kugler. Til sidst beregnes porestørrelses-fordelingen ud fra denne sandsynlighedstæthedsfunktion.

Modellen ser ud til at være sammensat af funktioner, der alle har de egenskaber, vi ønsker af dem i de relevante definitionsmængder. Modellen ser endvidere ud til at være sammensat af disse funktioner på en måde, som heller ikke vil volde problemer. Så alt i alt er det ikke i vores generelle analyse lykkedes os at finde inkonsistenser i modellen.

# 5.5 Praktisk vurdering af model

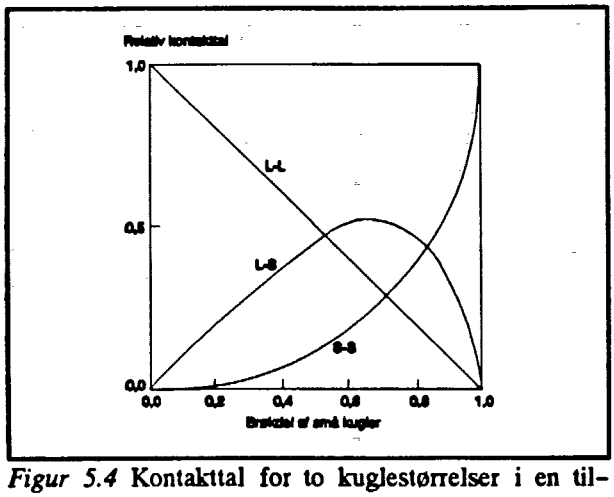
## Sammenligning med computermodel

Som en del af undersøgelsen af vores model vil vi sammenligne med en model fra litteraturen [15]. Vi har anvendt modellen på en teoretisk kugleblanding af kun to størrelsesklasser med størrelsesforholdet 1:5 og udregnet kontakttallene mellem store kugler, mellem små kugler og mellem store og små kugler for forskellige blandingsforhold (5% intervaller). Dermed kan vi fremstille en kurve af samme type som én, der er fremstillet med en anden model. Hvis de to resultater stemmer rimeligt overens, kan det ses som en delvis verificering af vores model. Dog er den anden model ikke nødvendigvis helt overensstemmende med virkeligheden.

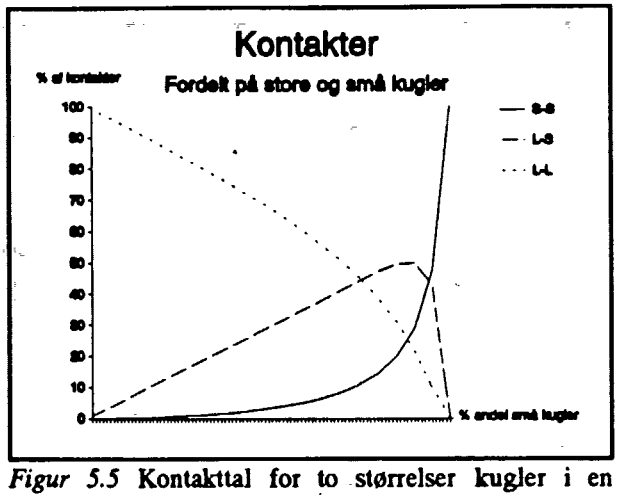
I figur 5.4 og 5.5 ses kontakttallenes fordeling på store og små kugler fra hhv. Germans *Particle Packing Characteristics* og fra vores model.

Som det ses, er de to kurver ikke helt ens, men der er en stor kvalitativ lighed i forløbene. Det ser dog ud til, at vores model i forhold til den anden undervurderer de små kuglers indbyrdes

kontakter. Men overordnet stemmer modellerne godt overens. Dette er jo ikke nogen verifikation af vores model, eftersom sammenligningsmodellen ikke er verificeret tilstrækkeligt.




*Figur 5.4* Kontakttal for to kuglestørrelser i en tilfældig pakning [15] (L = store, S = Små). Kuglernes størrelsesforhold er 1:5.




*Figur 5.5* Kontakttal for to størrelser kugler i en tilfældig pakning udregnet med vores egen model for kugler i størrelsesforholdet 1:5.

## Praktiske modelovervejelser

I dette afsnit vil vi diskutere, hvordan modellens resultater skal fortolkes, og hvilke forbehold man skal tage ved anvendelse af modellen.

### For små porer

Selvom der er en vis brøkdel af porerne, som er mindre end den kritiske grænse, er pakningen ikke nødvendigvis ubrugelig. Pastaen kan godt trænge igennem pakningen, selvom enkelte porer er tilstoppet. Spørgsmålet er bare, hvor stor en brøkdel af porerne, der må være tilstoppet.

Dette problem minder om problemerne indenfor den såkaldte perkolationsteori. Perkolationsteorien beskæftiger sig med konnektiviteten af tilfældigt udtyndede net. Hvis man for eksempel har et kvadratisk netværk, hvor man klipper tilfældigt udvalgte forbindelser over, vil netværket blive usammenhængende, når netop 50% af forbindelserne er fjernet [30]. Denne grænse kaldes perkolationsgrænsen. Den varierer med netværkets dimension og antallet af forbindelser mellem de enkelte knuder fra starten.

I vores tilfælde udgøres netværket af porekanalerne, og knuderne er således de enkelte porer, som pastaen skal kunne løbe rundt til. For at pastaen kan komme rundt i alle porer, skal porestrukturen være sammenhængende. Men ikke nok med det. Da pastaen presses ind fra én side ved hjælp af tryk, kan partiklerne i pastaen ikke bevæge sig baglæns. Dette stiller større krav til porestrukturen og er derfor et specialtilfælde, som ikke er behandlet af den traditionelle perkolationsteori. Det ligger derfor uden for dette projekts grænser at undersøge denne grænse, men vi gætter på, at hvis maksimalt 10% af porekanalerne er for små, vil pakningen være tilstrækkelig permeabel.

**Stabilitet**

Modellen siger ikke noget direkte om stabiliteten af materialet, hvilket heller ikke var medtaget som en del af formålet. Men hvis dækningsgraden $\gamma$ er kendt, kan modellen give en kontakttalsfordeling, som kan bruges som et tilnærmet mål for stabiliteten, idet højt kontakttal øger stabiliteten.

Dækningsgraden kunne bestemmes ud fra simuleringer eller ved eksperimentelt arbejde, hvorved antagelsen om konstant dækningsgrad for alle kugler i en given pakning ligeledes kunne kontrolleres.

**Partiklernes form**

Vi antog fra starten, at partiklerne var kugleformede. Da dette kun er en tilnærmelse, er det værd at overveje, hvordan partiklernes afvigelser fra kugleform påvirker porestørrelsesfordelingen. Ovale partikler giver anledning til både større og mindre porer, så det er svært at sige, hvad resultatet bliver.

Noget andet er partiklernes meget ujævne overflade. Den gør, at de små partikler i pastaen skal have noget ekstra plads for at kunne komme igennem en porekanal uden at hænge fast. Diameteren af partiklerne i pastaen skønnes af Teknologisk at være maksimalt 10 µm. For at have en vis sikkerhed for permeabiliteten sætter vi den kritiske grænse for porediameteren til 20 µm.

**Komprimering**

Den kritiske grænse nævnt ovenfor forudsætter, at partiklerne ikke er komprimeret væsentligt. Pulveret starter som en løs tilfældig pakning (ca. 40% tæthed). Ved en let komprimering (til cirka 70% af oprindeligt volumen) bliver pakningen gjort til en tæt tilfældig pakning (ca. 70%). Yderligere komprimering deformerer partiklerne, hvorved porerne ændrer sig.

Hvis man forestillede sig en lineær deformation af hele strukturen, ville det være let at regne ud, hvor meget mindre porerne ville blive. Men selve partiklerne bliver ikke tættere, og derfor er der ikke tale om en lineær deformation.

Man kunne alternativt forestille sig en lineær deformation af porerne, hvilket vil sige, at komprimeringsgraden blev skaleret relativt til porøsiteten, og porestørrelserne modificeret ud fra dette. Herved undlader man så at tænke på selve deformationen af partiklerne, som jo ændrer **formen** af porerne.

I alle tilfælde vil en kraftig deformation medføre, at modellen bliver meget upræcis.

**Sintring**

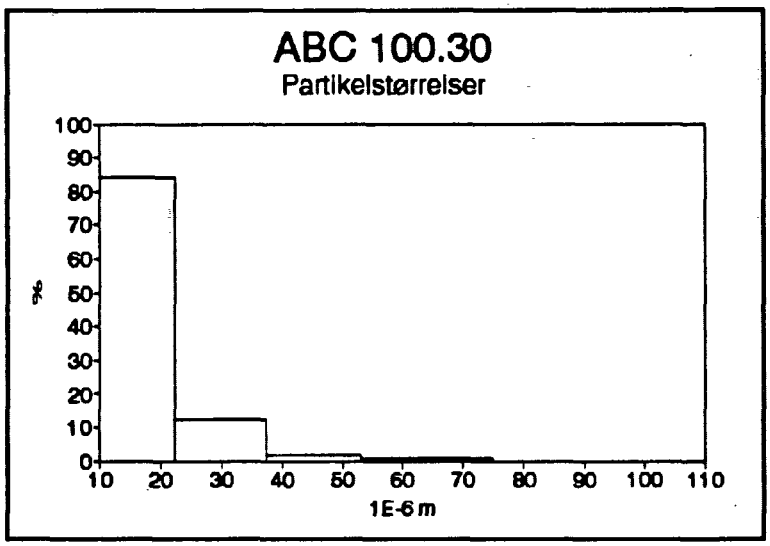
Under sintring kan man risikere, at porerne skifter form i en sådan grad, at der ikke længere kan tales om en kuglepakning, så modellen bliver ubrugelig. Heldigvis har det vist sig (jvf. kapitel 4), at radius af porerne ikke bliver væsentligt mindre under en sintring, forudsat at pakningen er en tæt pakning fra starten, hvilket jo opnås ved komprimeringen [16].

# 5.6 Modelresultater

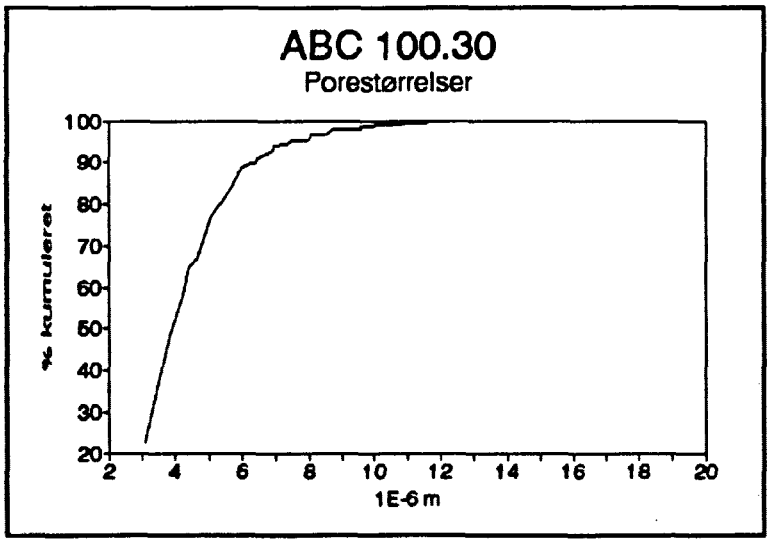
I dette afsnit beskrives de beregninger, vi har foretaget med modellen på de to pulvertyper ABC 100.30 og M20/80-19.

## ABC 100.30

Størrelsesfordelingen for ABC 100.30 ses i figur 5.6. Den beregnede porestørrelsesfordeling i figur 5.7 viser, at denne pakning ikke kan bruges, da over 95% af porekanalerne er under 10μm i radius, dvs. de er for små til, at pastapartiklerne kan passere. Selv hvis partiklernes overflader var helt regelmæssige ville ca. 80% af porekanalerne være for små (mindre end 5μm).

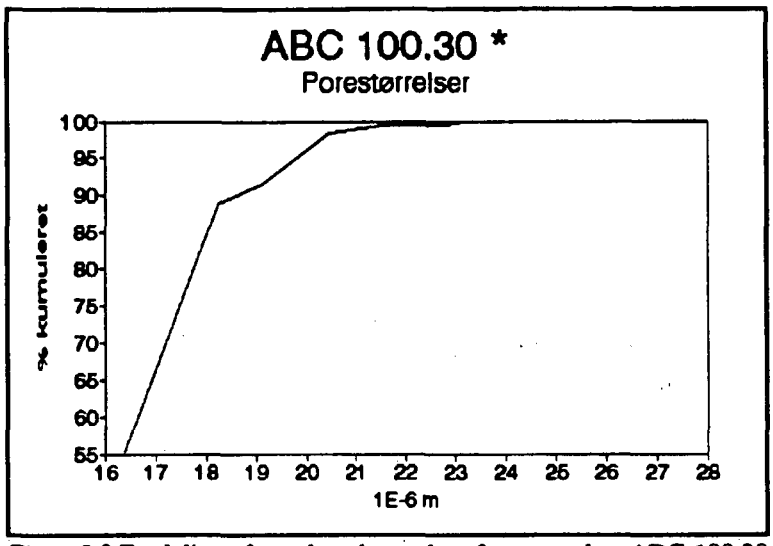



*Figur 5.6* Partikelstørrelsesfordelingen for pulveret ABC 100.30. Andenaksen angiver den antalsmæssige fordeling.




*Figur 5.7* Fordeling af porekanalstørrelser for en pakning af ABC 100.30.

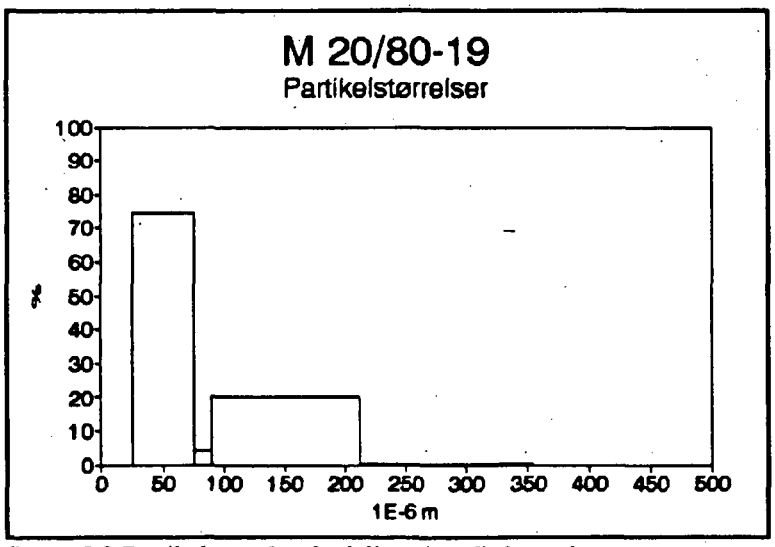
I figur 5.8 ses porestørrelsesfordelingen for en ændret ABC 100.30-pakning, hvor alle partikler med radius mindre end 53 µm er sorteret fra. Som det ses, er der nu ingen porekanaler, der er mindre end 10 µm, men til gengæld er det også ca. 98% af partiklerne (antal), der er sorteret fra!



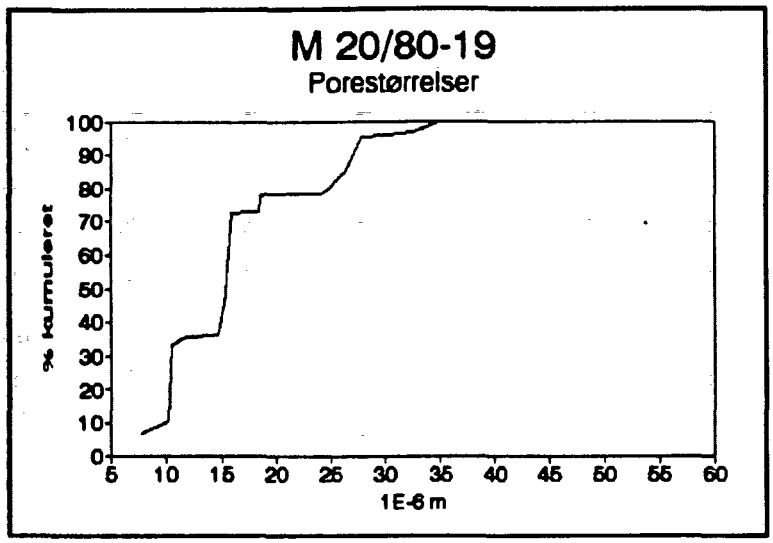

*Figur 5.8* Fordeling af porekanalstørrelser for en ændret ABC 100.30 pakning, hvor alle partikler under 53 µm radius er sorteret fra.

## M20/80-19

Tilsvarende resultater for pulveret M20/80-19 (partikelstørrelsesfordelingen ses i figur 5.9) kan ses i figur 5.10. Det ses, at kun omkring 8% af porekanalerne er for små, og der skulle derfor være en god chance for, at en pakning med denne type pulver kan anvendes. Til gengæld er partiklerne i M20/80-19 ikke nær så kugleformede som i ABC 100.30, og modellen er dermed mindre sikker for dette pulver. Desuden egner M20/80-19 sig ikke så godt til bremseklodser, da det har et højt kulstofindhold og derfor er meget blødere end rent ferrit-pulver.




*Figur 5.9* Partikelstørrelsesfordeling (antal) for pulveret M 20/80-19.




*Figur 5.10* Fordeling af porekanalstørrelser for pulveret M 20/80-19.

# 5.7 Opsamling

Som det måske anes, er undersøgelsen af vores model ikke fuldstændig, hverken hvad angår dens validitet og dens anvendelighed til løsning af bremseklodsproblemer. Det sidste skyldes mest de manglende resultater fra laboratoriet på Teknologisk.

At vi ikke på forhånd kan konkludere noget angående modellens validitet skyldes først og fremmest den manglende teori på området. Vi kan ikke foretage en teoretisk sammenligning med den eksisterende viden om tilfældige kuglepakninger, da den eksisterende viden for størstedelens vedkommende har eksperimentel karakter.

Men vores forsøg på teoretisk falsificering er i det mindste ikke lykkedes, idet der ikke blev fundet nogen inkonsistenser i modellens opbygning.

Med en model af den forhåndenværende slags, hvor det teoretiske valideringsgrundlag er yderst begrænset, kan modellens gyldighed udelukkende afgøres ved sammenligninger mellem modellens resultater og erfaringer eller målinger fra virkelighedsområdet.

En yderligere validering må derfor bero på grundige sammenligninger med eksperimentelle data eller med pålidelige simuleringer. En mulighed for eksperimentel sammenligning er at lave en principmodel med kugler i en håndterlig størrelse og for en tilfældig pakning af disse tælle op, hvordan fordelingen af konstellationer er. På denne måde ville man få en idé om rimeligheden af én af de mest centrale (og usikre) dele af modellen, nemlig antagelsen om fuldstændig uafhængighed mellem de forskellige kugleplaceringer.

# Kapitel 6
# Diskussion

## Kuglepakningsteori

I det følgende vil vi forsøge at karakterisere kuglepakningsteoriens status, dens placering i matematikken og de faggrupper, som beskæftiger sig med den. Disse ting kan bruges til at forklare nogle af de problemer, vi er stødt ind i med vores modelarbejde.

For det første kan man sige, at kuglepakningsteorien er en relativt ny gren af matematikken og fysikken, idet den - udover de få teoretiske spekulationer på Newtons tid - først er blevet udviklet fra midten af dette århundrede. De regelmæssige pakninger kom der skub i med udbredelsen af datatransmission, som medførte behov for fejlrettende koder, mens den eksperimentelle behandling blev aktiveret i 60'erne med Bernals pakninger. Der er således ikke nogen lang tradition indenfor dette felt.

Matematisk set har det altid været de regelmæssige kuglepakninger, der har været de mest interessante. Matematikerne har beskæftiget sig med regelmæssige kuglepakninger dels på grund af deres skønhed og dels på grund af deres evne til at reproducere teoretiske resultater fra andre dele af den "rene" matematik (f.eks. gruppeteori). Regelmæssige kuglepakninger er et knudepunkt, hvor mange forskellige grene af matematikken løber sammen (f.eks. gruppeteori og geometri) [19].

Derimod har fysikere og ingeniører altid interesseret sig mere for de tilfældige kuglepakninger på grund af deres lighed med ikke-krystallinske stoffer. Deres tilgang til problemerne er oftest eksperimentel, og den viden, der findes indenfor tilfældige kuglepakninger, bygger ikke på noget solidt teoretisk fundament. Den matematik, som anvendes her, kommer - ligesom for de regelmæssige pakninger - fra mange forskellige grene af matematikken. Teori og praksis går endnu ikke op i en højere enhed på samme måde som for regelmæssige pakninger. Tværtimod vil forskellige modeller for tilfældige kuglepakninger ofte give forskellige typer informationer, som ikke altid stemmer fuldstændigt overens.

De eksperimentelt arbejdende har hos matematikerne efterlyst teori til støtte af deres arbejde, mens matematikerne har forsøgt at "oversætte" noget af teorien for regelmæssige kuglepakninger til virkelige situationer. Men da faggrupperne, fysikerne og ingeniørerne på den ene side og matematikerne på den anden side, har haft vidt forskellige udgangspunkter, har der været en kløft mellem teori og praksis.

To områder, som adskiller sig fra denne tendens, skal nævnes.

Det ene er krystallografien, hvor fysikere i nogen udstrækning har kunnet anvende de regelmæssige kuglepakningers teori til at behandle og forstå forskellige krystalstrukturer.

Det andet er kodningsteorien, hvor computeringeniører og dataloger har kunnet samarbejde med kuglepakningsteoretikere om pakninger i højere dimensioner.

I begge eksempler drejer det sig om områder, som i forvejen har været tættere forbundet, end den praktiske ingeniørvidenskab og matematikken er det, og begge områder har anvendt teori for regelmæssige kuglepakninger. Krystaller har i længere tid været behandlet med matematiske metoder, og dataloger har altid brugt matematik i vid udstrækning.

Kløften mellem teori og empiri – mellem teoretikerne og praktikerne – indenfor kuglepakningsteori (for tilfældige kuglepakninger) har gjort det svært for os at finde et egnet problem at lave en model over. I projektets indledende fase, hvor vi ledte efter et problem, stødte vi på mange påstået kuglepakningsrelaterede problemer, som vi fandt ret spekulative. Men også det teoretiske arbejde i kapitel 1, 2 og 3 har voldt problemer, idet kilderne til viden om regelmæssige hhv. uregelmæssige pakninger er af så forskellig karakter, at det ofte var en svær opgave, at få det til at give mening sammen. I en del tilfælde er materialet om tilfældige kuglepakninger heller ikke fyldestgørende, så vi har måttet foretage vores egen vurdering af mange af forfatternes udsagn. De vurderinger vi har gjort, er foretaget ud fra vores egen teoretiske viden om emnet.

Man kan, efter at have læst vores modelafsnit, indvende, at vi ikke har anvendt særlig meget af den teori, der blev præsenteret i de to første kapitler. Vi mener dog ikke, at vi kunne have undværet den teoretiske del, for selvom vi ikke direkte anvender den i modelafsnittet, er det den teoretiske baggrundsviden, der har gjort os i stand til at lave en model.

Men kløften genfindes altså i dette projekt, idet der er et skel mellem de to første kapitler og de resterende fire, da det ikke er meget af teorien fra kapitel 1 og 2, der anvendes direkte, hverken i kapitel 3 eller til vores modelbygning.

## Kuglepakningsmodel

Den model, som vi har lavet, er en ad hoc model, idet den i højere grad bygger på antagelser end på et teoretisk fundament. Det var vores ønske fra starten at lave modellen så teoribaseret som muligt, og dermed også så generel som muligt, men vi mente ikke, at vi umiddelbart kunne bruge den kendte teori. Derfor er modellen hovedsageligt bygget ud fra antagelser, som vi fandt rimelige i forhold til den kendte teori. Nogle af antagelserne er mere løst funderet end andre, hvilket er meget normalt, når empiri og teori ikke understøtter hinanden. Modelarbejde er afhængigt af det genstandsområde, det forsøger at modellere. Det ses ofte, at jo bedre området er undersøgt empirisk og teoretisk, des mindre er kløften mellem teori og empiri.

Et af udgangspunkterne for dette projekt var, som vi skrev i indledningen, at vi ville anvende kuglepakningsteori på et praktisk problem, og derved ville en af sidegevinsterne være at skabe en forbindelse mellem de to områder. Men da afstanden viste sig at være for stor, endte vi med en ad hoc model, og vi har derfor ikke formået at give et synligt bidrag til mindskelse af gabet mellem områderne.

Man kan umiddelbart undre sig over, hvad gevinsten ved modellen er, da den viden, der kan fås ud fra den, groft sagt er, at Teknologisk skal sigte de mindste kuglestørrelser fra i deres pulverblandinger, hvilket vi sådan set allerede vidste fra starten, da den mindste porestørrelse afhænger af de mindste kugler. En af fordelene ved at lave modellen var imidlertid, at vi blev i stand til at give et mere nuanceret billede af, hvor følsom porestørrelsesfordelingen er overfor størrelsen og mængden af de mindste partikler. Derudover har vi også fået sat en størrelsesorden på kontakttallet, og dette er også vigtigt i forhold til de eksperimenter, som Teknologisk skal i gang med. For at pakningerne egner sig som bremseklodser er det vigtigt, at de er stabile, og stabiliteten afhænger i høj grad af et højt gennemsnitligt kontakttal.

## Eksperimenter

En af metoderne til at verificere en model er ved at prøve, om dens forudsigelser stemmer overens med virkeligheden. Det kan vi desværre ikke gøre, da vi endnu ikke ved nok om virkelighedsområdet. Det er ikke muligt for os at afgøre, om for eksempel dækningsgraden i en tilfældig pakning er konstant for alle kuglestørrelser, som vi antager.

Det eneste konkrete, som vi har at bedømme modellen ud fra, er, om der er overensstemmelse mellem, hvornår vi, ud fra modellen, anser det for muligt at presse pasta gennem pakningen, og hvornår det i virkeligheden er muligt. Vi havde håbet, at Teknologisk kunne nå at foretage en sådan undersøgelse, inden vi skulle afslutte projektarbejdet, men det viste sig desværre ikke muligt. Derimod lavede Teknologisk to prøver; en af ABC 100.30 og en af M 20/80-19. Prøverne blev hverken presset eller sintret, men partiklerne blev bundet sammen ved hjælp af vandglas. De skar prøverne igennem og fotograferede snitfladerne. Det er ikke muligt umiddelbart at tolke så meget ud fra et snit i en polydispers pakning, da man ikke kan vide, hvor snittet går gennem de enkelte partikler. Man kan f.eks. ikke vide om en lille partikel på billedet i virkeligheden er en lille partikel med et snit gennem centrum, eller om det er en stor partikel med et snit nær kanten. En metode til at tolke billederne vil være at benytte sig af stereologi. Stereologi er en gren af matematikken, ved hjælp af hvilken man – ud fra forskellige snit i et stof og ved hjælp af forskellige transformationer – kan udregne den indre struktur i stoffet.

Vi har desværre ikke nået at analysere billederne, da de ikke nåede at blive fremkaldt inden rapportens trykning.

## Fremtidige arbejder

Hvis man vælger at arbejde videre med netop dette emne, er der flere aspekter, det kunne være interessant at tage fat på. Det vil formentligt være overkommeligt at lave en computersimulering til at efterprøve to ting: Om det er rimeligt at antage, at dækningsgraden er konstant, og om den overordnede model passer. Vi har tidligere skrevet, at det er svært at lave computersimuleringer, der stemmer fuldstændig overens med virkeligheden, men præcis overensstemmelse med virkeligheden er måske knap så nødvendig i dette tilfælde, hvis man blot kunne opnå at pakningen havde en tæthed, der svarede til de virkelige, og at man havde nogenlunde kontrol med kuglestørrelsesfordelingen. Var disse to kriterier opfyldt, ville man kunne få udregnet samtlige porestørrelser i pakningen og dækningsgraden for hver enkelt kugle, og selvom

radialfordelingsfunktionen ikke ville være den helt rigtige, ville det i det mindste kunne give et fingerpeg om modellens gyldighed.

Ved at benytte stereologi på billederne fra Teknologisk ville det være muligt at kunne få noget information, dels generelt om polydisperse pakninger, dels om hvor vidt vores model med rimelighed kunne forudsige porestørrelsesfordelingen ud fra partikelstørrelsesfordelingen. Det ville være en naturlig følge at forsøge denne tilgangsvinkel, hvis der skulle arbejdes videre med problemet.

Da vi i den indledende projektfase søgte et relevant praktisk problem, havde vi kontakt med firmaet Leca, der blandt andet laver rislefiltre af Lecasten. De består af en beholder, der er fyldt med Lecasten. Spildevandet ledes ind i toppen af beholderen, partiklerne skilles fra ned gennem filteret og det rensede vand forlader beholderen i bunden. Leca har problemer med at filtrene stopper til i toppen, og man udnytter derved ikke hele filtrets kapacitet. Da rislefiltre kan anskues som kuglepakninger, var Leca interesseret i, at vi arbejdede med dette problem, hvilket vi altså valgte ikke at gøre. Umiddelbart virker det problem, vi har arbejdet med for Teknologisk, beslægtet med Lecas problem, og man vil måske med held kunne anvende den samme model.

## Opsamling

Vi nåede næsten så langt med modellen, som vi havde sat os som mål. Der er løse ender med hensyn til valideringen af modellen, som vi ikke har kunnet nå at få undersøgt, men overordnet har vi lavet en model, der ud fra en partikelstørrelsesfordeling kan beregne porestørrelsesfordelingen. I forhold til det, som Teknologisk ønskede, er modellen ikke færdigudviklet, da der mangler et par vigtige ting; bl.a. at undersøge hvad der sker med kuglepakningen under presning og sintring. Hvis Teknologisk vil anvende modellen, som den er, kræver det, at de manuelt forsøger at fitte sig frem til, hvilken indflydelse presning og sintring har, og om hvor mange procent af porerne, der må være under 20 μm (og i øvrigt også om 20 μm er den rigtige grænse).

Vi har fundet det interessant, at området matematisk set er så alsidigt, da det som studerende er sjældent at opleve så mange matematiske discipliner komme i spil samtidigt. Den matematik, som vi har stødt på gennem arbejdet med projektet, har både været geometri, statistik/sandsynlighedsregning, konveksitetsteori, lineær algebra (regelmæssige kuglepakninger kan repræsenteres på matrixform) og almindelig matematisk analyse.

Projektet er atypisk, i forhold til hvad vi ellers har lavet af projekter, af den grund, at vi tidligere har lagt os tættere op af mere velundersøgte og mere teoretiske områder og derved fået en mere naturlig sammenhæng mellem de forskellige dele af projektarbejdet. Derimod er projektet nok typisk, for hvordan der arbejdes med matematiske modeller udenfor studiemæssige sammenhænge. I mange situationer er der ikke nogen specialiseret teori for lige netop det område, der arbejdes med, og man må derfor "låne" teori fra andre - mere velundersøgte - områder som man kan støtte sig til, når man skal lave en model.

# Appendix A
# Beviser for sætninger
# i kapitel 1

## A.1 Beviser for sætningerne V1–V5, side 18

Beviserne stammer fra [23].

**V1** *$V_i$ er en konveks polytop[1] indeholdende $P_i$ i sit indre.*

**Bevis:** Da V1 er fællesmængden af et endeligt antal, nemlig k−1, lukkede halvrum $H(P_i,P_j)$, alle indeholdende $P_i$ i deres indre, må $V_i$ dels være en konveks polytop og dels indeholde $P_i$ i sit indre. □

**V2** *Polytopen $V_i$ er ubegrænset, hvis og kun hvis $P_i$ tilhører randen af det konvekse hylster til $P_j$'erne.*

**Bevis:** Man skal altså vise, at følgende to sætninger er ækvivalente:

**a)** $V_i$ er begrænset

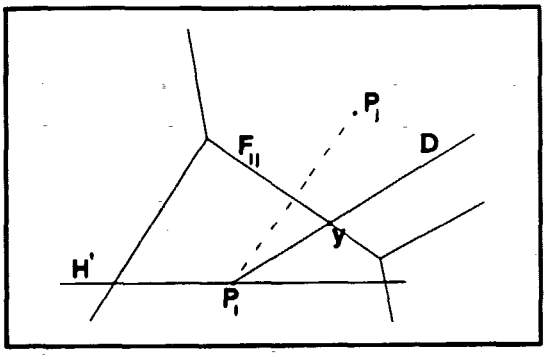
**b)** $P_i$ tilhører ikke randen $\partial C$ af det konvekse hylster C af $P_j$'erne.

Først kan det bemærkes, at et punkt $P_i \in \partial C$, hvis og kun hvis der eksisterer en støttehyperplan H gennem $P_i$, sådan at alle $P_j$'erne ligger på samme side af H [7].

**a) ⇒ b)** Det antages, at $V_i$ er begrænset. Lad H' være en vilkårlig hyperplan gennem $P_i$, og lad D være en vilkårlig halvlinie gennem $P_i$, hvor $D \not\subset H'$. Da $V_i$ er begrænset, må D nødvendigvis skære en af $V_i$'s sider $F_{ij}$ i et punkt $y \in V_i \cap V_j$. y tilhører altså den bisekterende hyperplan mellem $P_i$ og $P_j$, hvilket er ensbetydende med, at der ligger et punkt $P_j$ på samme side af H' som D. På tilsvarende vis kan der, under forudsætning af at $V_i$ er begrænset, argumenteres for, at der også må ligge et punkt $P_j$ på den anden side af H'. Når der ligger punkter på begge sider af H',

1: Med polytop menes her en – ikke nødvendigvis begrænset – lukket konveks mængde, som er fællesmængden af et endeligt antal lukkede halvrum. I andre sammenhænge bruges polytop som et strengere begreb nemlig et konvekst hylster af et endeligt antal punkter, hvorved mængden nødvendigvis er begrænset.

kan H' ikke være en støttehyperplan H. Hvilket medfører at $P_i \notin \partial C$.




**b) ⇒ a)** Det antages, at $P_i \notin \partial C$, hvilket er ensbetydende med, at der ikke kan findes en støttehyperplan H gennem $P_i$. Lad D, som før, være en vilkårlig halvlinie gennem $P_i$, der ikke er indeholdt i hyperplanen H' gennem $P_i$. Det drejer sig så om at vise, at $V_i$ er begrænset, hvilket også kan formuleres som, at det er en umulighed, at $D \subset V_i$.

Da H' per hypotese ikke er en støttehyperplan, må der eksistere et punkt $P_j$ på samme side af H' som D. Det medfører, at der eksisterer et punkt y, hvor $y \in D \cap V_j$, hvilket igen medfører, at $D \not\subset V_i$ [23]. □

**V3** *Hvis $P_s$ er et af de punkter, der er tættest på $P_i$ (for $s \neq i$), vil en af $V_i$'s sider støde op til den hyperplan, der bisekterer linien mellem $P_i$ og $P_s$.*

**Bevis:** Lad y være midtpunktet mellem $P_i$ og $P_s$. Man har så, at

$d(y,P_i) = d(y,P_s) \leq d(y,P_r)$, for alle r[1],

og altså at

$y \in V_i \cap V_s$,

hvilket er ensbetydende med, at en af $V_i$'s sider støder op til den hyperplan, der bisekterer linien mellem $P_i$ og $P_s$. □

**V4** *Voronoï-cellerne udfylder hele $\mathbf{R}^n$, dvs.*

$$\bigcup_{i=1}^{k} V_i = \mathbf{R}^n \tag{A.1}$$

*og det indre af polytoperne $V_i$ overlapper ikke hinanden.*

**Bevis:** Idet

$$V_i = \{x \in \mathbf{R}^n \mid d(x,P_i) \leq d(x,P_j),\ \forall j\} \tag{A.2}$$

kan man vælge et $P_i$, således at

$$d(x,P_i) \leq \min_j \{ d(x,P_j) \} \tag{A.3}$$

1: $P_r$ betegner altså de punkter, der ikke er nabopunkter til $P_i$.

og derfor

$$\forall x,\ \exists P_i : x \in V_i \tag{A.4}$$

Voronoï-diagrammet udfylder derfor hele $\mathbf{R}^n$, og ud fra følgende udtryk for det indre af Voronoï-cellerne

$$\mathring{V}_i = \{ x \in \mathbf{R}^n \mid d(x,P_i) < d(x,P_j),\ \forall j \neq i \} \tag{A.5}$$

ses det, at Voronoï-cellerne ikke kan overlappe hinanden. □

Hvis man havde med punkter i tilfældige positioner at gøre, gjaldt endvidere:

**V5** *Ethvert hjørnepunkt i $V_i$ er fælles for præcist n+1 polytoper $V_j$ og præcist n+1 kanter af dimension n-1.*

**Bevis:** Det kan uden tab af generalitet antages, at de m Voronoï-celler omkring et hjørnepunkt er nummereret således, at fladerne bliver $F_{1,2}$, $F_{2,3}$,... $F_{m-1,m}$, $F_{m,1}$, hvor $F_{ij}$ er bisektionsplanen for linien mellem $P_i$ og $P_j$. Skæringen mellem m hyperplaner arrangeret på ovennævnte måde vil højest have kodimensionen m-1, hvilket let kan vises vha. lineær algebra.

Da et hjørnepunkt i Voronoï-diagrammet har kodimensionen n, må det altså mindst skulle gælde, at $n \leq m-1$ hvilket er ensbetydende med at

i) $m \geq n+1$.

Der skal altså, for at hjørnepunktet er et hjørnepunkt, støde mindst n+1 Voronoï-celler op til punktet.

På den anden side gælder også, jævnfør definitionen på tilfældige punkter på side 12, at der ikke må kunne findes kugleoverflader indeholdende mere end n+1 af punkterne $P_i$. Da afstanden fra et hjørnepunkt i Voronoï-diagrammet til hvert af de punkter $P_i$, hvis Voronoï-celler støder op til det pågældende hjørnepunkt, er den samme, vil den kugle, hvis centrum ligger i hjørnepunktet, og som går igennem et af de tættest beliggende punkter $P_i$, også gå igennem de øvrige $P_i$'er, hvis Voronoï-celler støder op til pakningen. Da antallet af punkter i kugleoverfladen skal være mindre end eller lig n+1, fås

ii) $m \leq n+1$

hvilket sammenholdt med i) giver, at antallet af polytoper $V_j$, der støder op til et givent hjørnepunkt, er n+1.

Det ses, at da kanterne omkring et givent hjørnepunkt kan nummereres $F_{1,2}$, $F_{2,3}$,... $F_{m-1,m}$, $F_{m,1}$, og hvis m=n+1, så vil antallet af kanter også blive n+1. □

## A.2 Beviser for sætningerne D1-D5, side 19

Beviserne har vi selv konstrueret.

**D1** *$D_i$ er en konveks polytop af dimension n.*

**Bevis:** Da $D_i$ er det konvekse hylster til et endeligt antal, nemlig m punkter $P_i$, hvoraf der findes præcist n+1, der er affint uafhængige, er det klart, at $D_i$ må være en konveks polytop med dimensionen n. □

**D2** *Hver Delaunay-celle $D_i$ er tilknyttet netop ét hjørnepunkt $H_i$, og der er tilknyttet netop et hjørnepunkt til hver Delaunay-celle*

**Bevis:** Det gælder altså om at bevise følgende to påstande:

i) Der hører netop ét hjørnepunkt $H_i$ til hver Delaunay-celle $D_i$.

Hvis en Delaunay-celle skulle høre til to forskellige hjørnepunkter $H_i$ og $H_j$ på én gang, ville det få den konsekvens, at de punkter $P_i$, som Delaunay-cellen var det konvekse hylster af, alle skulle ligge på den bisekterende hyperplan mellem punkterne $H_i$ og $H_j$. Det bisekterende hyperplan har imidlertid kun dimension n-1, og da Delaunay-cellen skal have dimension n, kan dette ikke lade sig gøre.

ii) Der hører netop én Delaunay-celle $D_i$ til hvert hjørnepunkt $H_i$.

Dette ses umiddelbart ud fra definitionen af Delaunay-cellen. □

**D3** *Delaunaycellerne udfylder hele det konvekse hylster af punkterne $P_0,...,P_k$, dvs.*

$$\bigcup_i D_i = conv\{P_0,...,P_k\} \tag{A.6}$$

*og derfor ikke hele $\mathbf{R}^n$.*

**Bevis:** Da de m punkter, som $D_i$ er det konvekse hylster af, er en delmængde af alle de til Voronoï-diagrammet knyttede punkter, altså $\{P_1,...., P_m\}\subseteq\{P_0, ..., P_k\}$ ses det, at også $conv\{P_0,...., P_i\}\subseteq conv\{P_0, ..., P_k\}$.

Idet Delaunay-cellerne er de konvekse hylstre af de punkter $P_i$, der ligger tættest på et givent hjørne, må endvidere Delaunay-cellerne udfylde hele $conv\{P_0, ..., P_k\}$. Da $conv\{P_0, ..., P_k\}$ ikke udfylder hele $\mathbf{R}^n$, kan Delaunay-cellerne heller ikke udfylde hele $\mathbf{R}^n$. □

**D4** *Hvis $P_s$ er et af de punkter, der ligger tættest på $P_i$ og $i\neq s$, vil $P_i$ og $P_s$ være to hjørner i samme Delaunay-celle.*

**Bevis:** Det indre af enhver af Delaunaycellerne $D_i$ tilhører det indre af det konvekse hylster til punkterne $P_0,...,P_i$. Randen af det konvekse hylster til punkterne $P_0,...,P_k$ udgøres af sideflader til Delaunaycellerne $D_i$. Hvis $P_s$ er et af de punkter, der ligger tættest på $P_i$, vil den bisekterende hyperplan på linien mellem $P_i$ og $P_s$, udgøre en af sidefladerne i Voronoï-diagrammet. Det betyder, at samme bisekterende hyperplan vil gå igennem et af hjørnerne $H_i$ i Voronoï-

diagrammet og dermed, at Voronoï-cellerne hørende til $P_i$ og $P_s$ støder op til samme hjørnepunkt. Ud fra definitionen af Delaunay-cellen ses det, at $P_i$ og $P_s$ så må være hjørner i samme Delaunay-celle. □

Hvis punkterne $P_i$ befinder sig i tilfældige positioner, vil endvidere gælde

**D5** *$D_i$ er et simpleks med hjørner i n+1 punkter $P_i$.*

**Bevis:** Ifølge V5 støder der præcist n+1 Voronoï-celler op til hvert hjørnepunkt i Voronoï-diagrammet, når punkterne $P_i$ befinder sig i tilfældige positioner. Derfor må den tilhørende Delaunay-celle også være det konvekse hylster af n+1 punkter $P_i$, og dermed er Delaunay-cellen et simpleks. □

## A.3 Beviser for sætningerne R1-R5, side 23

Disse beviser har vi selv konstrueret.

**R1** *$R_i$ er en konveks polytop indeholdende $C_i$ i sit indre.*

**R2** *Polytopen $R_i$ er uafgrænset, hvis og kun hvis $C_i$ tilhører randen af det konvekse hylster til $R_i$'erne.*

**Beviser:** Der kan benyttes fuldstændig det samme bevis, som blev brugt til at vise hhv. V1 og V2.

**R3** *Hvis $C_s$ er et af de punkter, der er tættest på $C_i$ (for $s \neq i$), vil en af $R_i$'s sider støde op til den radikale plan hørende til kuglerne med centrene $C_i$ og $C_s$.*

**Bevis:** Beviset for denne sætning kan også gennemføres på næsten samme måde som beviset for V3.

Lad y være skæringen mellem den radikale plan til kuglerne med centrene $C_i$ og $C_s$ og forbindelseslinien mellem $C_i$ og $C_s$. Det gælder så, at

$$d(y,C_i) = \frac{d_{is}^2 + r_i^2 - r_s^2}{2d_{is}} \quad og \quad d(y,C_s) = \frac{d_{si}^2 + r_s^2 - r_i^2}{2d_{si}} \tag{A.7}$$

og da $d(C_i,C_s) = d(C_i,y)+d(y,C_s) \leq d(y,C_r)$ for ethvert andet $C_r$, må $y \in R_i \cap R_s$, hvilket er det samme som at sige, at en af $R_i$'s sider støder op til den radikale plan hørende til kuglerne med centre i henholdsvis $C_i$ og $C_s$. □

**R4** *Radikalplans-cellerne udfylder hele $\mathbf{R}^n$, dvs.*

$$\bigcup_{i=1}^{k} R_i = \mathbf{R}^n \tag{A.8}$$

*og det indre af polytoperne $R_i$ overlapper ikke hinanden.*

**Bevis:** Idet

$$R_i = \left\{ x \in \mathbf{R} \mid d(x,C_i) \le d(y,C_i) = \frac{d_{ij}^2 - r_j^2 - r_i^2}{2d_{ij}}, \ \forall j \right\} \tag{A.9}$$

kan det sluttes, at Radikalplans-diagrammet udfylder hele $\mathbf{R}^n$.

Da det endvidere gælder, at

$$d(C_i,C_j) = d(C_i,y) + d(y,C_j) \tag{A.10}$$

fremgår det, at Radikalplans-cellerne ikke kan overlappe hinanden. □

Hvis man havde med punkter i tilfældige positioner at gøre, ville endvidere gælde:

**R5** *Ethvert hjørnepunkt i $R_i$ er fælles for præcist $n+1$ polytoper $R_j$ og præcist $n+1$ kanter af dimension $n-1$.*

**Bevis:** Beviset for R5 forløber fuldstændig parallelt med beviset for V5.

## A.4 Beviser for sætningerne K1–K5, side 25

**K1** *$K_i$ er en konveks polytop af dimension $n$.*

**K2** *Hver Krarfu-celler er tilknyttet netop et hjørnepunkt $H_i$ i Radikalplans-diagrammet, og der er tilknyttet netop et hjørnepunkt til hver Krarfu-celle.*

**K3** *Randen af det konvekse hylster til punkterne $C_0,\ldots,C_n$ udgøres af sideflader til Krarfu-cellerne $K_i$.*

**K4** *Hvis $P_s$ er et af de punkter, hvis Radikalplans-celle støder op til Radikalplans-cellen for $C_i$ (for $i \neq s$), vil $C_i$ og $C_s$ være to hjørner i samme Krarfu-celle.*

Hvis kuglepakningen er tilfældig, sådan at kuglecentrene $C_i$ befinder sig i tilfældige positioner, gælder endvidere:

**K5** *$K_i$ er et simpleks med hjørner i $n+1$ kuglecentre $C_i$.*

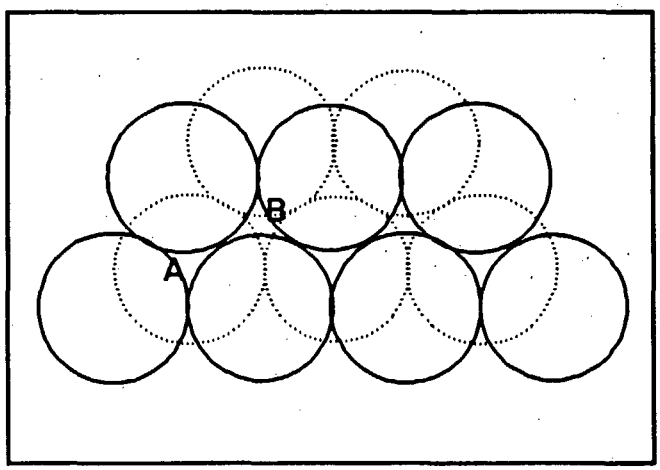
**Beviser** for disse sætninger forløber fuldstændig parallelt med beviserne for sætningerne D1-D5. Den eneste ændring er, at de bisekterende hyperplaner fra Voronoï-diagrammet her skal erstattes med Radikale planer, og at hjørnepunkterne i Voronoï-diagrammet skal udskiftes med hjørnepunkterne i Radikalplans-diagrammet.

# Appendix B

# Porerne i den fladecentrerede kubiske kuglepakning

I det følgende vil vi beregne størrelsen og antallet af porerne i den fladecentrerede kubiske pakning og derudfra beregne den tæthedsforøgelse, som kan opnås ved at placere små kugler i samtlige porer.

Som det ses ud fra figur B.1, er der to typer porer i den fladecentrerede kubiske pakning. Vi kalder dem pore A og pore B.




*Figur B.1* A og B angiver placeringen af de to forskellige typer af porer.

## Om pore A

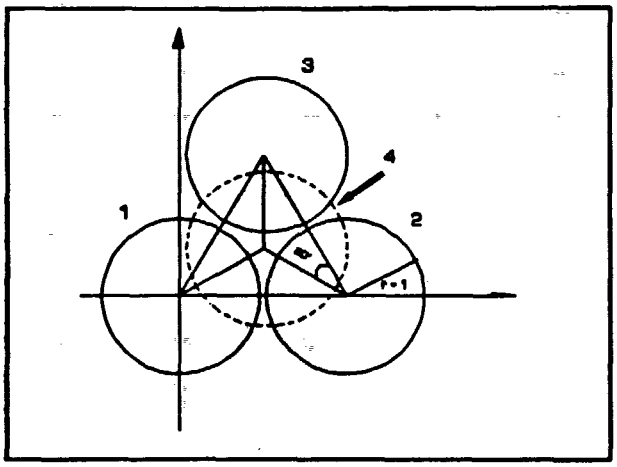
Pore A fås de steder i pakningen, hvor fire kugler sættes sammen som et tetraeder.

Kuglerne antages at have radius 1.

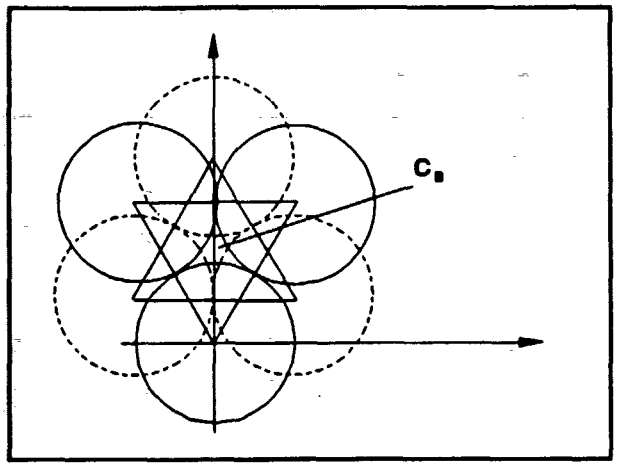
Kugle 1 har centrum i $c_1 = (0,0,0)$

Kugle 2 har centrum i $c_2 = (2,0,0)$

Kugle 3 har centrum i $c_3 = \left(1, 2\cos\left(\frac{\pi}{6}\right), 0\right) = \left(1, \sqrt{3}, 0\right)$




*Figur B.2* De nærmeste kugler omkring pore A.




*Figur B.3* De nærmeste kugler omkring pore B.

Kugle 4 har centrum i

$$c_4 = \left( 1, \frac{2}{3}\cos(\frac{\pi}{6}), \sqrt{\frac{8}{3}} \right) = \left( 1, \frac{1}{\sqrt{3}}, \sqrt{\frac{8}{3}} \right)$$

Centrum af dette tetraeder vil ligge i

$$c_A = \frac{c_1 + c_2 + c_3 + c_4}{4} = \left( 1, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right)$$

Afstanden mellem origo og $c_A$ bliver så $\sqrt{(3/2)}$. Hvis der skal lægges en lille kugle ind i centrum af tetraederet, kan den altså højst have radius

$$r_A = \sqrt{\frac{3}{2}} - 1 \approx 0{,}2247 \qquad \text{(B.1)}$$

## Om pore B

Centrene for det nederste lag kugler er placeret i x-y-planet, sådan at kuglen C har centrum i O. Det ses ud fra tegningen, at centrum af pore B, $c_B$, vil have x-koordinaten 0, y-koordinat svarende til centrum for trekanten ABC, og z-koordinat midt mellem det øverste og det nederste lag kugler.

$$c_B = \left( 0, \frac{2}{3}\sqrt{3}, \sqrt{\frac{2}{3}} \right)$$

Afstanden mellem O og $c_B$ bliver så $\sqrt{2}$, hvilket betyder, at den lille kugle maksimalt kan have radius

$$r_B = \sqrt{2} - 1 \approx 0{,}4142 \qquad \text{(B.2)}$$

## Antallet af porer i kuglepakningen

Voronoï-cellen i denne pakning er et rhombisk dodekaeder. Det har 14 hjørner svarende til, at der er 14 porer rundt om hver kugle.

Otte af disse hjørner udgøres af samlingen af de stumpe vinkler af hver tre rhomber (se figur 1.7 på side 19). Til hvert hjørne af denne type, vil der i kuglepakningen støde tre andre hjørner af samme type. Dette svarer til en pore af type A.

De resterende seks hjørner udgøres af små pyramidetoppe. Op til hvert af de seks hjørner, der har form som pyramidetoppe, må der støde fem andre tilsvarende pyramidetoppe. I en kuglepakning svarer dette til en pore af type B.

For hver kugle i kuglepakningen er der altså 8/4 = 2 porer af type A og 6/6 = 1 pore af type B.

Da pore A er den mindste af de to typer, skal man, hvis man vil lave en tæt regelmæssig kuglepakning med to størrelser kugler, tage tre små kugler af en størrelse, så de passer ind i pore A, for hver stor kugle man tager.

Forholdet mellem radius af den store kugle og radius af den lille kugle er ca. 0,2247, dvs. at forholdet mellem volumenet af den lille kugle og volumenet af den store kugle bliver $(0{,}2247)^3 \approx 0{,}0114$.

Da der kun er brug for 3 små kugler for hver stor kugle, skal man til hver volumendel store kugler bruge 0,0341 volumendel små kugler.

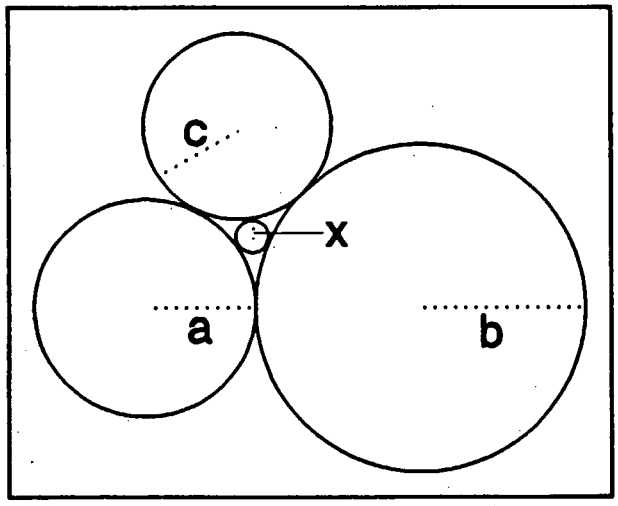
Tætheden af den fladecentrerede kubiske pakning med en størrelse kugler var ca. 0,7405. Tætheden af den samme pakning, hvor der er lagt en lille kugle ind i hver af porerne, vil blive cirka $0{,}7405 \cdot 1{,}0341 = 0{,}7657$, hvilket altså giver en forøgelse af tætheden på ca 3,4%.

# Appendix C

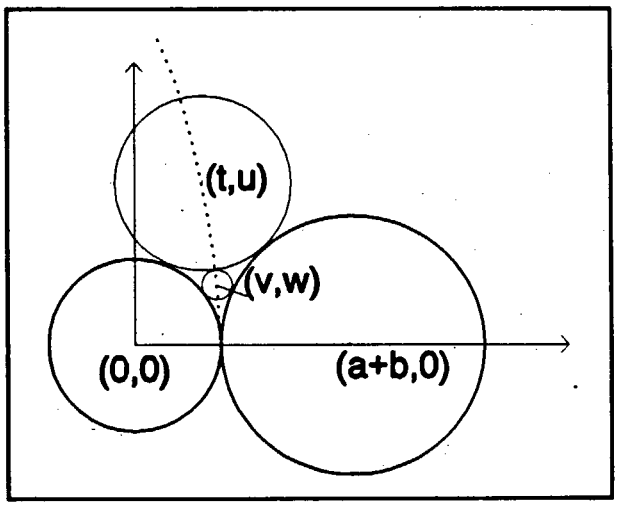
# Størrelsen af en porekanal

Her følger beregningen af formlen for radius af en porekanal omkranset af tre kugler, som anvendes i modellen i kapitel 5. Situationen ses på figur C.1. Beviset er skrevet ud fra nogle noter fra vores vejleder, Mogens Niss.

De tre kugler har kendte radier *a*, *b* og *c*. Opgaven er at finde radius *x* af den indre røringscirkel.




*Figur C.1* Tre cirkler med radius *a*, *b* og *c* og den indre røringscirkel med radius *x*.




*Figur C.2* To nabokugler med radius *a* og *b* placeret i et koordinatsystem. Enhver kugle, som rører ved de to kugler vil have centrum på den stiplede kurve (som er en hyperbelgren).

Givet de to kugler med radius *a* og *b* placeres disse i et koordinatsystem, som vist på figur C.2.

De to kugler har altså centrumkoordinaterne $(p,q)=(0,0)$ og $(r,s)=(a+b,0)$.

Nu vil det gælde for enhver kugle med radius *y*, som berører disse to, at afstanden til denne kugles centrum fra de to andre kuglers centre er hhv. $a+y$ og $b+y$. Det vil sige, at centrumkoordinaterne $(v,w)$ for kuglen med radius *y* opfylder

$$(v-0)^2 + (w-0)^2 = (a+y)^2 \tag{C.1}$$

$$(v-(a+b))^2 + (w-0)^2 = (b+y)^2 \tag{C.2}$$

Den sidste kan omskrives til

$$-2v(a+b) + v^2 + w^2 + (a+b)^2 = (b+y)^2 \tag{C.3}$$

Ved indsættelse af (C.1) fås

$$\begin{aligned} 2v(a+b) &= (a+b)^2 + (a+y)^2 - (b+y)^2 \\ &= a^2 + b^2 + 2ab + a^2 + y^2 + 2ay - y^2 - b^2 - 2yb \\ &= 2a(a+b) + 2y(a-b) \\ &\Updownarrow \\ v &= y\frac{a-b}{a+b} + a \end{aligned} \tag{C.4}$$

Dette indsættes nu i (C.1):

$$\begin{aligned} a^2 + y^2 + 2ay &= \left(y\frac{a-b}{a+b} + a\right)^2 + w^2 \\ &= y^2\frac{(a-b)^2}{(a+b)^2} + a^2 + 2ay\frac{a-b}{a+b} + w^2 \end{aligned} \tag{C.5}$$

Heri isoleres $w^2$

$$\begin{aligned} w^2 &= y^2\left(1 - \frac{(a-b)^2}{(a+b)^2}\right) + 2ay\left(1 - \frac{a-b}{a+b}\right) \\ &= y^2\frac{4ab}{(a+b)^2} + y\frac{4ab}{a+b} \\ &= \frac{4aby}{(a+b)^2}(a+b+y) \end{aligned} \tag{C.6}$$

og hermed haves

$$w = \pm\frac{2}{a+b}\sqrt{aby(a+b+y)} \tag{C.7}$$

Nu har vi således centrumkoordinaterne $(v,w)$ for en cirkel med radius $y$, som rører de to eksisterende cirkler. Den tredje af cirklerne, den med radius $c$, opfylder som tidligere nævnt dette og har derfor koordinaterne

$$(t,u) = \left( c\frac{a-b}{a+b} + a \,,\, \frac{2}{a+b}\sqrt{abc(a+b+c)} \right) \tag{C.8}$$

Også den lille cirkel med radius $x$, som rører de tre andre cirkler, skal opfylde dette, og derfor har den koordinaterne:

$$(v,w) = \left( x\frac{a-b}{a+b} + a \, , \, \frac{2}{a+b}\sqrt{abx(a+b+x)} \right) \tag{C.9}$$

Samtidig skal det gælde, at afstanden fra den lille cirkels centrum til centrum af cirklen med radius $c$ skal være $c+x$, dvs.

$$\left((c-x)\frac{a-b}{a+b}\right)^2 + \left(\frac{2}{a+b}\right)^2\left(\sqrt{abc(a+b+c)} - \sqrt{abx(a+b+x)}\right)^2 = (c+x)^2 \tag{C.10}$$

hvilket ved en lang og omstændelig omregning leder frem til andengradsligningen

$$\begin{aligned} &\left[4a^2b^2c(a+b+c) - \left(ab(a+b)-c(a^2+b^2)\right)^2\right] x^2 \\ &+ \left[2abc(a+b)\left(2ab(a+b+c) - \left(ab(a+b) - c(a^2+b^2)\right)\right)\right] x \\ &- a^2b^2c^2(a+b)^2 = 0 \end{aligned} \tag{C.11}$$

Denne viser sig at have diskriminanten

$$D = 16a^3b^3c^3(a+b)^4\,(a+b+c) \tag{C.12}$$

Hermed har vi andengradsligningens løsninger

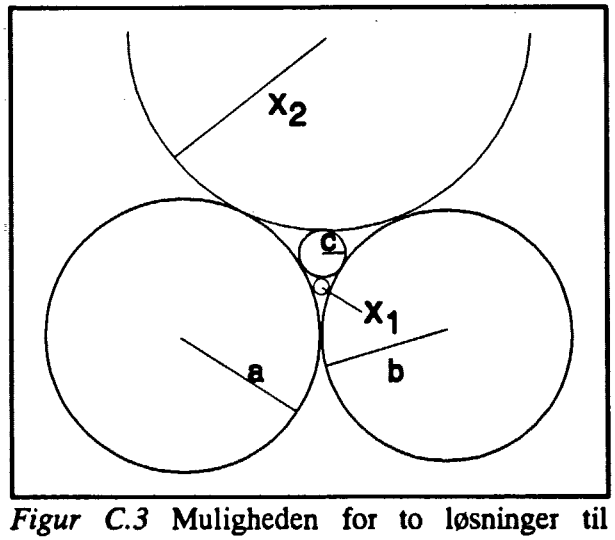
$$\begin{aligned} x &= \frac{-2abc(a+b)\left[2ab(a+b+c) - \left(ab(a+b)-c(a^2+b^2)\right)\right] \pm \sqrt{D}}{2\left(4a^2b^2c(a+b+c) - \left(ab(a+b)-c(a^2+b^2)\right)^2\right)} \\ &= \frac{-abc(a+b)^2(ab+ac+bc)) \pm 2abc(a+b)^2\sqrt{abc(a+b+c)}}{(a+b)^2\left[2\sqrt{abc(a+b+c)}-(ab+ac+bc)\right]\left[2\sqrt{abc(a+b+c)}+(ab+ac+bc)\right]} \\ &= \frac{abc\left[ab+ac+bc \pm 2\sqrt{abc(a+b+c)}\right]}{\left[ab+ac+bc+2\sqrt{abc(a+b+c)}\right]\left[ab+ac+bc-2\sqrt{abc(a+b+c)}\right]} \\ &= \frac{abc}{ab+ac+bc \pm 2\sqrt{abc(a+b+c)}} \\ &= \frac{1}{\frac{1}{a}+\frac{1}{b}+\frac{1}{c} \pm 2\sqrt{\frac{a+b+c}{abc}}} \end{aligned} \tag{C.13}$$

De to løsninger for andengradsligningen er da

$$x_1 = \frac{1}{\frac{1}{a}+\frac{1}{b}+\frac{1}{c}+2\sqrt{\frac{a+b+c}{abc}}} \tag{C.14}$$

$$x_2 = \frac{1}{\frac{1}{a}+\frac{1}{b}+\frac{1}{c}-2\sqrt{\frac{a+b+c}{abc}}} \tag{C.15}$$

Løsning $x_2$ er selvfølgelig kun gyldig, når den er positiv (der er ikke mening i at tale om negativ radius). At der kan være to løsninger til problemet illustreres i figur C.3, hvor det også ses, at det er den mindste af de to løsninger, der er den søgte, dvs. $x_1$.




*Figur C.3* Muligheden for to løsninger til problemet.

Den endelige løsning er da:

$$x = \frac{1}{\frac{1}{a}+\frac{1}{b}+\frac{1}{c}+2\sqrt{\frac{a+b+c}{abc}}} \tag{C.16}$$

# Litteraturliste


[1] Andersen, K. Offer
Metallurgi for ingeniører
Akademisk Forlag, København, 1967

[2] Andersen, Per Just
Control and monitoring of concrete production: A study of particle packing and rheology
DTH, Lyngby, 1990

[3] Bedre bremser uden asbest
Ingeniøren, 11. årgang nr. 21 p.9, 1985

[4] Bernal J.D. & Mason, J.
Co-ordination of randomly packed spheres
Nature, 1960, vol. 188 pp.910-911

[5] Bernal, J.D.; King, S.V. & Finney, J.L.
Random Close-Packed Hard-Sphere Model
Discussions of the Faraday Society, 1967, vol.43, pp.60-69

[6] Brøndsted, Arne
An introduction to convex polytopes
Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 1982

[7] Brøndsted, Arne
Konveksitet - Noter til Matematik 2 OK
Københavns Universitet, 1990

[8] Conway, J.H. & Sloane, N.J.A.
Sphere Packings, Lattices and Groups[1]
Springer-Verlag, Berlin, 1988

[9] Coxeter, H.M.S.
Introduction to Geometry, 2nd edition
John Wiley, New York, 1969


[1]: Indeholder en meget omfattende litteraturliste.

[10] Eilertzen, Lis; Habekost, Kirsten; Røn, Lill & Stender, Susanne
Opstilling og analyse af matematiske modeller, belyst ved modeller over køers foderoptagelse og -omsætning
IMFUFA tekst nr. 102, RUC, 1985

[11] Finney, John L.
Local Structure of Disordered Hard Sphere Packings[1]
Commissariat a l'énergie atomique, 1992-93

[12] Finney, J.L. & Gellatly, B.J.
Characterisation of Models of Multicomponent Amorphous Metals: The Radical Alternative to the Voronoï Polyhedron
Journal of Non-Crystalline Solids 50 (1982) pp.313-329

[13] Finney, J.L. & Wallace J.
Interstice Correlation Functions; A New, Sensitive Characterisation of Non-Crystalline Packed Structures
Journal of Non-Crystalline Solids 43 (1981) pp.165-187

[14] Finney, John L.
Brev fra Finney til forfatterne. 1993

[15] German, Randall M.
Particle Packing Characteristics
Metal Powder Industries Federation, Princeton, New Jersey, 1989

[16] Haasen, Peter
Physikalische Metallkunde
Springer-Verlag, Berlin, 1974

[17] Hagemann, Ebbe & Nielsen, Anders
Metallære for bygningsingeniører
Polyteknisk Forlag, København, 1976

[18] Hermann, Kirsten & Niss, Mogens
Beskæftigelsesmodellen i SMEC II - en autentisk matematisk model
Nyt Nordisk Forlag Arnold Busck A/S, København, 1982

[19] Kirfel, Christoph
Golay-koden, kulepakkinger og nye simple grupper
Normat, nr. 4/1990, pp.160-178

1: Kapitel 2 fra bogen *Disorder and Granular Media*, som endnu ikke er skrevet færdig.

[20] Kyndlev, L.;Fundal, K.; Tulinius, K. & Zeck, I.P.
Brovedligeholdelse - bevar mig vel
IMFUFA-tekst nr. 242, RUC, 1993

[21] Lindsey II, J.H.
Sphere Packing in $\mathbf{R}^3$
Mathematika, 33 (1986), pp.137-147

[22] Meyer, Walter J.
Concepts of mathematical modelling
McGraw-Hill, New York, 1987

[23] Risler, J.J.
Méthodes Mathématiques pour la CAO, afsnit 5.1
Masson, Paris, 1991

[24] Scott, G.David
Packing of Equal Spheres
Nature, 1960, vol.188, pp.908-909

[25] Scott, G.David
Radial distribution of the random close packing of equal spheres
Nature, 1962, vol 194, pp.956-957

[26] Sloane, N.J.A.
The packing of spheres
Scientific American **250** (no 1, 1984)

[27] Spiegel, Murray R.
Mathematical Handbook of Formulas and Tables
Schaum's Outline Series, McGraw-Hill Book Company, New York, 1968

[28] Stryer, Lubert
Biochemistry, third edition
W.H. Freeman and Compagny, New York, 1988

[29] Thompson, T.M.
From Error-Correcting Codes through Sphere Packings to Simple Groups
Math. Assoc. Am., Washington DC, 1983

[30] Zallen, Richard
The physics of amorphous solids
John Wiley & Sons, New York, 1983

**Anden litteratur om emnet**

Ammi, M.; Bideau, D. & Troadec, J.P.
Geometrical structure of disordered packings of regular polygons; comparison with disc packing structures
J. Phys. D: Appl. Phys, Vol.20, pp.424-428, 1987

Gervois, Annie and Bideau, Daniel
Some Geometrical Properties of Hard Discs Packings[1]
Commissariat a l'énergie atomique, 1992-93

Guyon, Etienne; Roux, Stéphane; Hansen, Alex; Bideau, Daniel; Troadec, Jean-Paul and Crapo, Henry
Non-local and non-linear problems in the mechanics of disordered systems: application to granular media and rigidity problems
Rep. Prog. Phys., Vol.53, pp.373-419, 1990

Cumberland, D.J. and Crawford, R.J
The Packing of Particles - Handbook of Powder Technology, volume 6[2]
Elsevier, Amsterdam, 1987

1: Kapitel 1 fra bogen *Disorder and Granular Media*, som endnu ikke er skrevet færdig.

2: Bogen der især behandler ingeniørmæssige aspekter af kuglepakning indeholder en litteraturliste på 396 bøger om emnet.

# Stikordsregister


**A**

Amorfe stoffer . . . . . 5
Antalsfordeling . . . . . 62
Appelsinpakningen . . . . . 14
Asbestbremser . . . . . 51, 93
Asfaltbelægning . . . . . 47

**B**

Behandlingsfasen . . . . . 62–65
Beregningsmetode . . . . . 62
Bernal, J.D. . . . . 25, 42–43, 46, 93
Bernals pakning . . . . . 25, 42–43, 46, 93
Beskrivelsesmodel . . . . . 49
Beskyttelsesgas . . . . . 54
Bimodale pakninger . . . . . 47–49
Bisektionsplan . . . . . 22
Bremser
  asbest . . . . . 51, 93
  bremsebakker . . . . . 51
  bremseklodser . . . . . 6, 51, 71, 75
  bremseskive . . . . . 6, 51
  bremsetromler . . . . . 51

**C**

Celleopdeling . . . . . 45, 50
  bisektionsplan . . . . . 22
  Delaunay-celle . . . . . 19, 20, 45, 80–81
  konvekst hylster . . . . . 19, 24, 80
  Krarfu-celler . . . . . 24–25, 82
  parallelotop . . . . . 29
  polytop . . . . . 18–19, 23–25, 77, 39–82
  Radikalplans-celler . . . . . 22, 25, 82
  rhombisk dodekaeder . . . . . 19, 86
  sidelængdefordeling . . . . . 45
  simpleks . . . . . 20, 25, 81–82
  tetraedere . . . . . 32
Computersimulering . . . . . 46, 75

**D**

Datamateriale . . . . . 62
Delaunay-celle . . . . . 19–20, 45, 80–81
Densitet . . . . . 37, 43, 47, 49
Densitetskort . . . . . 48
Diktatorproblemet . . . . . 15
Dækningsbidrag . . . . . 60
Dækningsgrad . . . . . 59, 69
Dækningsproblemet . . . . . 14

**E**

Éndimensionale pakninger . . . . . 9
Enhedscelle . . . . . 29–30, 33, 35
  basisvektorer . . . . . 30
Erkendelsesmodeller . . . . . 63
Evalueringsfasen . . . . . 64–65

**F**

Fejlrettende koder . . . . . 38, 73
Formuleringsfasen . . . . . 64–65
Forståelsesmodeller . . . . . 5

**G**

Gennemsnitsradius . . . . . 58
Gitterpakning
  basisvektorer . . . . . 30
  enhedscelle . . . . . 29–30, 33, 35
Gitterpakninger . . . . . 13, 26–27, 30
Grafteori . . . . . 11
  delgraf . . . . . 11
  kuglepakningsgraf . . . . . 11–12
Grundantagelser . . . . . 65
Gruppeteori . . . . . 13, 39, 73

**H**

Hexagonal pakning . . . . . 29, 36
Höganäs . . . . . 52–55

## J

Jernfibre . . . . . 52
Jernpartikler . . . . . 6
Jernpulver . . . . . 52-53

## K

Kodningsteori . . . . . 13, 37, 38
fejlrettende koder . . . . . 38, 73
paritetsmetoden . . . . . 38
Kontakttal . . . . . 16, 30, 41-44, 47, 49
53-55, 58, 62-63, 68-69, 75
Kontakttalsfordeling . . . . . 67, 69
Kontakttalsproblemet . . . . . 14
Konvekst hylster . . . . . 19, 24, 80
Krarfu-celler . . . . . 24-25, 82
Krystallografi . . . . . 38
Kugleform . . . . . 58, 69
Kugleoverflade . . . . . 15
Kuglepakning
Anvendelser . . . 13, 37-39, 47, 50, 73, 76
appelsinpakningen . . . . . 14
bernals . . . . . 25, 42-43, 46, 93
éndimensional . . . . . 9
gitterpakning . . . . . 13, 26-27, 30
hexagonal . . . . . 29, 36
løs . . . . . 43
monodispers . . . . . 16, 20, 27, 44
polydispers . . . . . 6, 22, 36, 57, 59, 61, 75
quadromodal . . . . . 49
regelmæssig . . . 30, 32, 38, 41, 43, 45, 73
semiregelmæssig . . . . . 12, 32
tilfældig . . . . . 12, 41-47, 50, 51
todimensional . . . . . 9, 12, 16
tredimensional . . . . . 9-10, 28, 43
trimodal . . . . . 48-49
tæt . . . . . 43, 46
uregelmæssig . . . . . 12-13, 32, 45
Kuglepakninger
bimodale . . . . . 47, 49
Kuglepakningsegenskaber . . . . . 5, 15
antalsfordeling . . . . . 62
densitet . . . . . 37, 43, 47, 49
densitetskort . . . . . 48
gennemsnitsradius . . . . . 58
kontakttal . . . . . 16, 41-44, 47-49
53-55, 58, 62-63, 68-69
kontakttalsfordeling . . . . . 67, 69
kuglestørrelsesfordeling . 15, 54, 57, 63, 66
pakningstæthed . . . . . 15, 37, 41, 47, 49
partikelstørrelsesfordeling . 16, 55, 71, 76
permeabilitet . . . . . 69
porer . . . . . 57-58, 69, 75, 89
porestørrelsesfordeling . 25, 54-55, 63, 70
porøsitet . . . . . 15, 41, 49-50
radialdistributionen . . . . 26, 42, 44, 49-50
stabilitet . . . . . 16
tæthed . . . . . 30-32, 36-37, 42-43
47-49, 52-53, 58, 69, 75
Kuglepakningsgraf . . . . . 11-12
Kuglepakningsmodel . . . . . 5, 74
Kuglepakningsproblemer
diktatorproblemet . . . . . 15
dækningsproblemet . . . . . 14
kuglepakningsproblem . . . . . 14
Kuglepakningsteori . . . . . 45, 50, 73-74
Kuglestørrelsesfordeling . . . . . 15, 54, 57, 63

## L

Leca . . . . . 5, 76
rislefiltre . . . . . 76
Løse pakninger . . . . . 43

## M

Matematificering . . . . . 7, 58
Metallurgi . . . . . 5, 51, 93
beskyttelsesgas . . . . . 54
Höganäs . . . . . 52-55
jernfibre . . . . . 52
jernpartikler . . . . . 6
jernpulver . . . . . 52-53
metalpulver . . . . . 52
presning . . . . . 53, 64, 76
produktionsprocesser . . . . . 63
pulverblandinger . . . . . 52, 55, 75

pulvermetallurgi . . . . . 53
sintring . . . . . 6, 53–54, 64, 69, 76
trykstyrke . . . . . 6
trækstyrke . . . . . 54
Metalpulver . . . . . 52
Model
behandlingsfasen . . . . . 64–65
beregningsmetode . . . . . 62
beskrivelsesmodel . . . . . 50
bygning . . . . . 63, 73–74
computermodel . . . . . 67
datamateriale . . . . . 62
dækningsbidrag . . . . . 60
dækningsgrad . . . . . 59, 69
erkendelsesmodeller . . . . . 63
evalueringsfasen . . . . . 64–65
formuleringsfasen . . . . . 64–65
forståelsesmodeller . . . . . 5
grundantagelser . . . . . 65
kategorier . . . . . 63
matematificering . . . . . 7, 58
overvejelser . . . . . 68
proces . . . . . 64
prædiktiv . . . . . 63
resultater . . . . . 70
simplificering . . . . . 7
stokastisk . . . . . 64
systemafgrænsning . . . . . 57, 64
usikkerhedsfaktorer . . . . . 64
validering . . . . . 57, 65, 72
verificering . . . . . 67
Modelbygning . . . . . 63, 73–74
Modelkategorier . . . . . 63
Modelleringsproces . . . . . 64
Modelovervejelser . . . . . 68
Modelresultater . . . . . 70
Monodispers pakning . . . . . 16, 20, 27, 44


## N


Newton, David Gregory . . . . . 14
Newton, Isaac . . . . . 14


## P


Pakning
anvendelser . . . . . 13, 37–39, 47, 50, 73
appelsinpakningen . . . . . 14
bernals . . . . . 25, 42–43, 46, 93
bimodale . . . . . 47–49
éndimensional . . . . . 9
gitterpakning . . . . . 13, 26–27, 30
hexagonal . . . . . 29, 36
løs . . . . . 43
monodispers . . . . . 16, 20, 27, 44
polydispers . . . . . 6, 22, 36, 57, 59, 61, 75
quadromodal . . . . . 49
regelmæssig . . . 30, 32, 38, 41, 43, 45, 73
semiregelmæssig . . . . . 12, 32
tilfældig . . . . . 12, 41–47, 49–50
todimensional . . . . . 9, 12, 16
tredimensional . . . . . 9–10, 28, 43
trimodal . . . . . 48–49
tæt . . . . . 43, 46
uregelmæssig . . . . . 12–13, 32, 45
Pakningstæthed . . . . . 15, 37, 41, 47, 49
Parallelotop . . . . . 29
Paritetsmetoden . . . . . 38
Partikelstørrelser . . . . . 48–49, 63
Partikelstørrelsesfordeling . . . . 16, 55, 71, 76
Pastapartiklerne . . . . . 70
Perkolationsteori . . . . . 68
perkolationsgrænsen . . . . . 68
Permeabilitet . . . . . 69
Polydispers pakning . . . . 6, 22, 36, 57–61, 75
Polydisperse pakninger . . . . . 67
Polytop . . . . . 18–19, 23, 25, 77–82
Porekanal . . . . . 57–58, 69, 89
Porer
diameter . . . . . 67
størrelse . . . . . 57, 73
størrelsesfordeling . . 25, 54–55, 57, 63, 70
Porestørrelsesfordeling . 25, 54–55, 59, 63, 70
Porøsitet . . . . . 15, 41, 49–50
Presning . . . . . 53, 64, 76

Problemformulering . . . . . 6
Produktionsprocesser . . . . . 63
Prædiktive modeller . . . . . 63
Pulverblandinger . . . . . 52, 55, 75
Pulvermetallurgi . . . . . 53

Q

Quadromodale pakninger . . . . . 49

R

Radialdistributionen . . . . . 26, 42, 44, 49-501
Radikalplans-celler . . . . . 22, 25, 82
Regelmæssige pakninger . . . . . 30-32, 38, 41
43, 45, 73
Anvendelser . . . . . 13, 37-38
Rhombisk dodekaeder . . . . . 19, 86
Rislefiltre . . . . . 76
Rogers, C.A. . . . . 31
Rogers' grænse . . . . . 31-32
Roulunds Fabriker . . . . . 6, 51

S

Scott, G.D. . . . . 43-44, 46, 50, 95
Semiregelmæssige pakninger . . . . . 12, 32
Simpleks . . . . . 20, 25, 81-82
Simplificering . . . . . 7
Simulering . . . . . 46, 51, 75
Simuleringsmodeller
simuleringsmodel . . . . . 46
Sintring . . . . . 6, 53-54, 64, 69, 76
Stabilitet . . . . . 16
Stereologi . . . . . 75-76
Stoffer
amorfe . . . . . 5
krystallinske . . . . . 38
Stokastiske modeller . . . . . 64
Systemafgrænsning . . . . . 57, 64
Søjlechromatografi . . . . . 50

T

Teknologisk . . 5-7, 51-56, 57, 69, 72, 75-76
Tetraedere . . . . . 32
Tilfældige pakninger . . . . . 12, 41-47, 49-50
Todimensionale pakninger . . . . . 9, 12, 16
Tredimensionale pakninger . . . . 9, 10, 28, 43
Trimodale pakninger . . . . . 48-49
Trykstyrke . . . . . 6
Tæthed . . . . . 30-32, 36-37, 42-43, 47-49
52-53, 58, 69, 75
Tætte pakninger . . . . . 43, 46

U

Uregelmæssige pakninger . . . . 12-13, 32, 45
Usikkerhedsfaktorer . . . . . 64

V

Validering . . . . . 58, 65, 72
Verificering . . . . . 67

*Liste over tidligere udkomne tekster tilsendes gerne. Henvendelse herom kan ske til IMFUFA's sekretariat tlf. 46 75 77 11 lokal 2263*

---

217/92 "Two papers on APPLICATIONS AND MODELLING IN THE MATHEMATICS CURRICULUM"
by: Mogens Niss

218/92 "A Three-Square Theorem"
by: Lars Kadison

219/92 "RUPNOK - stationær strømning i elastiske rør"
af: Anja Boisen, Karen Birkelund, Mette Olufsen
Vejleder: Jesper Larsen

220/92 "Automatisk diagnosticering i digitale kredsløb"
af: Bjørn Christensen, Ole Møller Nielsen
Vejleder: Stig Andur Pedersen

221/92 "A BUNDLE VALUED RADON TRANSFORM, WITH APPLICATIONS TO INVARIANT WAVE EQUATIONS"
by: Thomas P. Branson, Gestur Olafsson and Henrik Schlichtkrull

222/92 On the Representations of some Infinite Dimensional Groups and Algebras Related to Quantum Physics
by: Johnny T. Ottesen

*223/92 THE FUNCTIONAL DETERMINANT*
*by: Thomas P. Branson*

*224/92 UNIVERSAL AC CONDUCTIVITY OF NON-METALLIC SOLIDS AT LOW TEMPERATURES*
*by: Jeppe C. Dyre*

*225/92 "HATMODELLEN" Impedansspektroskopi i ultrarent en-krystallinsk silicium*
*af: Anja Boisen, Anders Gorm Larsen, Jesper Varmer, Johannes K. Nielsen, Kit R. Hansen, Peter Bøggild og Thomas Hougaard*
*Vejleder: Petr Viscor*

*226/92 "METHODS AND MODELS FOR ESTIMATING THE GLOBAL CIRCULATION OF SELECTED EMISSIONS FROM ENERGY CONVERSION"*
*by: Bent Sørensen*

227/92 "Computersimulering og fysik"
af: Per M.Hansen, Steffen Holm, Peter Maibom, Mads K. Dall Petersen, Pernille Postgaard, Thomas B.Schrøder, Ivar P. Zeck
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen

228/92 "Teknologi og historie"
Fire artikler af:
Mogens Niss, Jens Høyrup, Ib Thiersen, Hans Hedal

229/92 "Masser af information uden betydning"
En diskussion af informationsteorien i Tor Nørretranders' "Mærk Verden" og en skitse til et alternativ basseret på andenordens kybernetik og semiotik.
af: Søren Brier

230/92 "Vinklens tredeling - et klassisk problem"
et matematisk projekt af
Karen Birkelund, Bjørn Christensen
Vejleder: Johnny Ottesen

231A/92 "Elektrondiffusion i silicium - en matematisk model"
af: Jesper Voetmann, Karen Birkelund, Mette Olufsen, Ole Møller Nielsen
Vejledere: Johnny Ottesen, H.B.Hansen

231B/92 "Elektrondiffusion i silicium - en matematisk model" Kildetekster
af: Jesper Voetmann, Karen Birkelund, Mette Olufsen, Ole Møller Nielsen
Vejledere: Johnny Ottesen, H.B.Hansen

232/92 "Undersøgelse om den simultane opdagelse af energiens bevarelse og især deles om de af Mayer, Colding, Joule og Helmholtz udførte arbejder"
af: L.Arleth, G.I.Dybkjær, M.T.Østergård
Vejleder: Dorthe Posselt

233/92 "The effect of age-dependent host mortality on the dynamics of an endemic disease and Instability in an SIR-model with age-dependent susceptibility
by: Viggo Andreasen

234/92 "THE FUNCTIONAL DETERMINANT OF A FOUR-DIMENSIONAL BOUNDARY VALUE PROBLEM"
by: Thomas P. Branson and Peter B. Gilkey

235/92 OVERFLADESTRUKTUR OG POREUDVIKLING AF KOKS
- Modul 3 fysik projekt -
af: Thomas Jessen

---

236a/93 INTRODUKTION TIL KVANTE HALL EFFEKTEN

af: Anja Boisen, Peter Bøggild

Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
Erland Brun Hansen

236b/93 STRØMSSAMMENBRUD AF KVANTE HALL EFFEKTEN

af: Anja Boisen, Peter Bøggild

Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
Erland Brun Hansen

237/93 The Wedderburn principal theorem and Shukla cohomology

af: Lars Kadison

238/93 SEMIOTIK OG SYSTEMEGENSKABER (2)

Vektorbånd og tensorer

af: Peder Voetmann Christiansen

239/93 Valgsystemer - Modelbygning og analyse

Matematik 2. modul

af: Charlotte Gjerrild, Jane Hansen, Maria Hermannsson, Allan Jørgensen, Ragna Clauson-Kaas, Poul Lützen

Vejleder: Mogens Niss

240/93 Patologiske eksempler.
Om sære matematiske fisks betydning for den matematiske udvikling

af: Claus Dræby, Jørn Skov Hansen, Runa Ulsøe Johansen, Peter Meibom, Johannes Kristoffer Nielsen

Vejleder: Mogens Niss

241/93 FOTOVOLTAISK STATUSNOTAT 1

af: Bent Sørensen

242/93 Brovedligeholdelse - bevar mig vel

Analyse af Vejdirektoratets model for optimering af broreparationer

af: Linda Kyndlev, Kare Fundal, Kamma Tulinius, Ivar Zeck

Vejleder: Jesper Larsen

243/93 TANKEEKSPERIMENTER I FYSIKKEN

Et 1.modul fysikprojekt

af: Karen Birkelund, Stine Sofia Korremann

Vejleder: Dorthe Posselt

244/93 RADONTRANSFORMATIONEN og dens anvendelse i CT-scanning

Projektrapport

af: Trine Andreasen, Tine Guldager Christiansen, Nina Skov Hansen og Christine Iversen

Vejledere: Gestur Olafsson og Jesper Larsen

245a+b /93 Time-Of-Flight målinger på krystallinske halvledere
Specialerapport

af: Linda Szkotak Jensen og Lise Odgaard Gade

Vejledere: Petr Viscor og Niels Boye Olsen

246/93 HVERDAGSVIDEN OG MATEMATIK
- LÆREPROCESSER I SKOLEN

af: Lena Lindenskov, Statens Humanistiske Forskningsråd, RUC, IMFUFA

247/93 UNIVERSAL LOW TEMPERATURE AC CONDUCTIVITY OF MACROSCOPICALLY DISORDERED NON-METALS

by: Jeppe C. Dyre

248/93 DIRAC OPERATORS AND MANIFOLDS WITH BOUNDARY

by: B. Booss-Bavnbek, K.P.Wojciechowski

249/93 Perspectives on Teichmüller and the Jahresbericht Addendum to Schappacher, Scholz, et al.

by: B. Booss-Bavnbek

With comments by W.Abikoff, L.Ahlfors, J.Cerf, P.J.Davis, W.Fuchs, F.P.Gardiner J.Jost, J.-P.Kahane, R.Lohan, L.Lorch, J.Radkau and T.Söderqvist

*250/93 EULER OG BOLZANO - MATEMATISK ANALYSE SET I ET VIDENSKABSTEORETISK PERSPEKTIV*

*Projektrapport af: Anja Juul, Lone Michelsen, Tomas Højgård Jensen*

*Vejleder: Stig Andur Pedersen*

***251/93 Genotypic Proportions in Hybrid Zones***

***by: Freddy Bugge Christiansen, Viggo Andreasen and Ebbe Thue Poulsen***

***252/93 MODELLERING AF TILFÆLDIGE FÆNOMENER***

***Projektrapport af: Birthe Friis, Lisbeth Helmgaa Kristina Charlotte Jakobsen, Marina Mosbæk Johannessen, Lotte Ludvigsen, Mette Bass Nielse***