



基本三维几何体的最高填充率

李水乡, 赵健, 陆鹏, 谢玉

北京大学工学院力学与空天技术系, 湍流与复杂系统国家重点实验室, 北京 100871

E-mail: lsx@pku.edu.cn

2008-12-26 收稿, 2009-01-22 接受

国家自然科学基金资助项目(批准号: 10772005)

摘要 数值模拟结果表明, 基本三维几何体随机填充的填充率上限从高到底依次为: 立方体(0.78)、椭球(0.74)、圆柱(0.72)、球柱体(spherocylinder, 0.69)、四面体(0.68)、圆锥(0.67)、球体(0.64), 而规则填充的填充率上限依次为: 立方体(1.0)、圆柱和球柱体(0.9069)、圆锥(0.7854)、椭球(0.7707)、球体(0.7405)、正四面体(0.7175), 这两种填充率排序的顺序并不相同. 椭球、圆柱、球柱体、四面体和圆锥的随机填充率均与其形状有关, 它们达到最高填充率时的形状参数分别为: 椭球(三轴比为 0.8:1:1.25)、圆柱(高度/直径=0.9)、球柱体(圆柱段高度/直径=0.35)、四面体(正四面体)和圆锥(高度/底面直径=0.8).

关键词
填充
堆积
颗粒
非球体
圆柱
圆锥
球柱体
四面体

追求最密填充一直是人类的理想. 填充问题的研究最早可以追溯到著名的Kepler猜想(等径球的最密填充问题, 1661年)及Newton与Gregory之间的13球辩论(等径球的最高配位数问题, 1694年). 1900年, Hilbert将其进一步总结为著名的23个问题中的第18问题(等大实体的最密填充问题), 其中还特别提到球和正四面体的最密填充^[1]. 几个世纪以来填充问题一直引起人们的广泛兴趣, 一方面因为它是一个基本的数学和物理学问题, 另一方面也因为它在科学研究、工程实践乃至日常生活中都有大量的应用背景, 这些应用分布在从宏观宇宙星体运动到微观粒子排列的各个层次上. 在填充结构方面, 填充问题可分为规则填充(ordered packing)和不规则填充(disordered packing)两大类. 对于规则填充, 1998年Hales完成了Kepler猜想的证明^[2], 但由于研究的难度很大, 要完全回答并证明Hilbert第18问题还有很长的路要走. 不规则填充中的随机填充(random packing)由于与物质结构关系密切而被广泛研究, 系统的随机填充研究最早始于20世纪50年代Bernal等人对球体的随机填充研究^[3]. 目前随机填充的主要研究手段是数值模拟, 文献^[4]对现有的随机填充数值模拟方法进行了归纳和分类. 在填充

物形状方面, 球填充的研究最为广泛而深入, 其结论大都已取得学术界的共识, 工程实践中也常将非球体用等量球来简化. 但近年来的研究表明, 非球体在填充性质上与球体有很大的不同, 颗粒形状的微小变化会使填充效率发生显著的改变. 然而由于模型及计算的复杂性, 非球体填充研究目前还局限在少数几种颗粒的孤立研究中. 人们对非球体填充, 特别是形状对填充率的影响目前还知之甚少. 文献^[5]试图用球形度参数来预测非球体的填充率, 但研究表明该方法的预测结果并不正确^[6].

填充问题的研究具有深远的理论意义和实际意义^[7]. 基本三维几何体填充本身在自然界及人类生活中就大量存在(如M&M巧克力糖填充^[8]), 也是很多学科理论研究和工程实践中的基础问题(如大江截流时为什么用四面体混凝土块^[7,9]). 此外, 理论上基本三维几何体还可以组成任意形状的实际物体(如CAD中用基本三维几何体通过布尔运算构造复杂实体, 采用Delaunay三角化技术可以将任意实体离散为四面体组合). 最密填充对应于空间的最高利用率, 几个世纪以来一直是填充研究中最重要的问题之一. 本文总结和归纳了基本三维几何体填充的现有研究

成果,从中得出了基本三维几何体在随机填充和规则填充两种状态下的最高填充率排序,并给出了达到最高填充率时几何体的形状参数(长径比 aspect ratio). 当前主流的颗粒解析模型和填充数值算法在处理带边角的填充颗粒时存在一定困难. 因此,基本三维几何体中除表面光滑的球、椭球和球柱体的填充研究比较充分之外,其他三维几何体的填充研究十分匮乏. 本文采用组合球模型及松弛算法^[10]模拟了球、圆锥、圆柱、球柱体、四面体和立方体的随机填充,填补了该领域研究的一些空白,并为填充率的横向对比提供了依据. 本文研究的对象均为等体积的单一类型三维几何体在周期边界条件下的几何填充.

1 非球体的组合球模型和松弛算法

组合球模型用多个球体的外包络面来近似一个非球体的外形. 当球数足够多时,组合球模型可以在外形上逼近任意形状物体^[11]. 组合球模型的主要思想是用多个球体之间的接触代替非球体之间的接触. 与目前常见的非球体解析模型相比,组合球模型的优点是接触判断简便,对于带有棱角或形状复杂的非球体其优势更加明显. 组合球模型的表面积和体积计算较复杂,但借助于CAD软件可以方便地获得其表面积和体积. 本文中几种基本三维几何体的组合球模型如图1所示,上排从左至右分别是圆柱、球柱体和立方体,下排从左至右分别是四面体和圆锥.

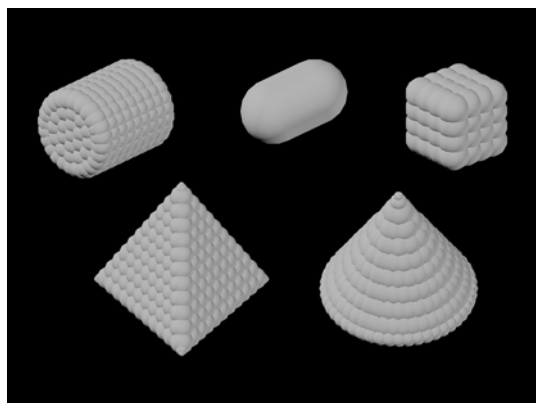


图1 基本三维几何体的组合球模型

松弛算法是集合重排(collective rearrangement)填充算法中的一种,被广泛应用于球填充的数值模拟. 文献^[10]引入非球体的转动项,将其推广到非球体填充模拟. 松弛算法的优点是原理简单,计算量小. 非球体填充松弛算法的过程为:先在一个相对较小

的立方体填充区域内随机生成各非球体的位置和方向,这样形成的初始状态中非球体之间存在大量的重叠,反复使用松弛算法迭代以逐步减少重叠量并逐渐扩大填充区域,通过非球体的平动和转动最终完全消除重叠并获得填充结果.

2 球体

球体的最密填充研究起源于1661年的Kepler猜想,Kepler认为等径球的最密填充结构是面心立方晶格(face-centered cubic lattice),此时的填充率为 $\pi/\sqrt{18} \approx 0.7405$. 然而要证明这个看似简单的问题却并不容易,直到1998年才被Hales借助计算机程序证明^[12]. 需要指出的是,球填充的最密填充结构并非只有面心立方晶格一种^[12]. 球填充的研究已较为成熟,理论分析、数值模拟和实验结果也符合得较好. 文献^[13]总结了球填充的几个重要的填充率:规则球填充的最高填充率约为0.74,球的随机密填充(random close packing)填充率约为0.64,而球的随机松填充(random loose packing)填充率约为0.56. 采用松弛算法模拟等径球的随机密填充,得到的填充率约为0.6404^[14].

3 圆锥

圆锥的填充研究非常少见. Trovato等人^[15]研究了圆锥和圆台的规则填充,并提出圆锥规则填充的最高填充率为 $\pi/4 \approx 0.7854$,且与圆锥的形状无关. Chen等人^[16]采用组合球模型及Monte Carlo方法研究了圆锥的自组织结构,但其模型并非标准圆锥(文献^[16]称其为冰激凌圆筒). 本文采用组合球模型及松弛算法对圆锥的随机填充进行了数值模拟,结果如图2所示. 数值模拟结果表明,圆锥的随机填充率峰值约为0.6664,出现在长径比 $w = 0.8$ 处. 圆锥的长径比 $w = H/D$,其中 H 为圆锥高度, D 为底面直径.

4 四面体

四面体的最密填充问题最早由Hilbert(1900年)提出,但时至今日该问题仍悬而未决. 一般认为球体的填充率是所有凸体中最低的(即Ulam猜想),但Conway等人^[17]指出,已知的正四面体规则填充的最高填充率仅为0.717455,远低于球体规则填充的最高填充率(0.7405). 据此,他们认为Ulam猜想并不成立,并且正四面体可能是所有凸体中填充率最低的一个. 对于随机填充,Chaikin等人^[18]的实验表明四面体的最高填充率可达0.75以上,而董麒等人^[9]的四面体填

充实验得到的填充率均不超过 0.5. Latham等人^[19]通过数值模拟给出了四面体松填充的填充率为 0.416. 文献^[20]采用组合球模型和松弛算法模拟了四面体的随机密填充, 结果如图 3 所示. 数值模拟结果表明, 四面体的随机填充率峰值为 0.6817, 高于随机球填充的填充率, 而此时四面体的形状为正四面体(高度为 10, 底面边长为 12.2474. 若定义四面体长径比 $w = H/D$, H 为四面体高度, D 为底面三角形外接圆直径, 则此时 $w \approx 0.7$).

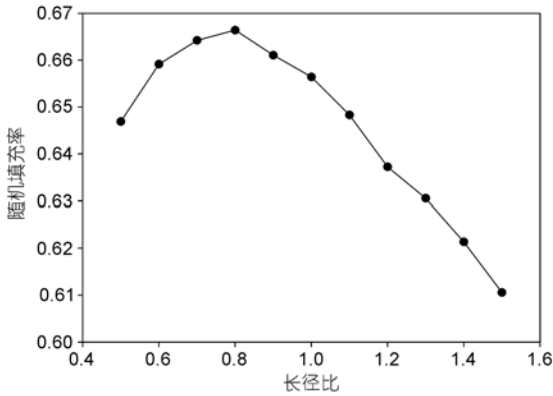


图 2 圆锥随机填充率随长径比的变化

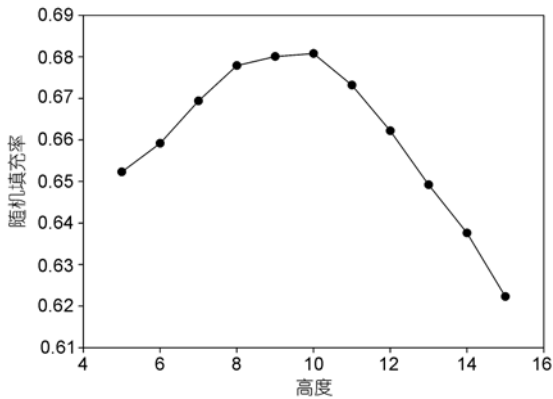


图 3 四面体随机填充率随高度的变化
四面体底面为等边三角形, 边长为 12.2474

5 球柱体(Spherocylinder)

球柱体是在圆柱两端各加一个半球所组成的胶囊状物体. 球柱体填充是非球体填充中研究得较多的一种. 球柱体的几何模型表面光滑、没有棱角过渡, 无论采用解析函数或组合球表示均较为简便. 在填充研究中也常用球柱体来近似代替圆柱. 球柱体的最密规则填充应与圆柱相同, 当其长径比足够大时,

可视为圆的最密二维排列, 其最高填充率约为 0.9069. 在随机填充方面, Williams等人^[6]模拟了球柱体长径比($w = H/D$, H 为球柱体中圆柱部分的高度, D 为横截面直径, $w = 0$ 时退化为球体)在 0~160 范围内的随机填充, 当 $w = 0.4$ 时达到其最高填充率 0.695. Charles等人^[21]模拟了球柱体长径比在 0~3.5 范围内的随机填充, 当 $w = 0.5$ 时达到其最高填充率 0.655. 但这些数值模拟由于长径比范围大, 在最高填充率附近的样本点较少, 因此对最佳长径比的分辨不够细致. 本文采用组合球模型和松弛算法模拟了球柱体的随机密填充, 其结果及与文献对比如图 4 所示. 本文得到的球柱体随机填充率最高为 0.6896, 此时 $w = 0.35$. 该峰值略低于文献^[6]的数值模拟结果, 但高于文献^[21]的数值模拟结果. 从图中可以看出, 除了峰值位置略有差异外, 3 种算法获得的填充率曲线的趋势是一致的.

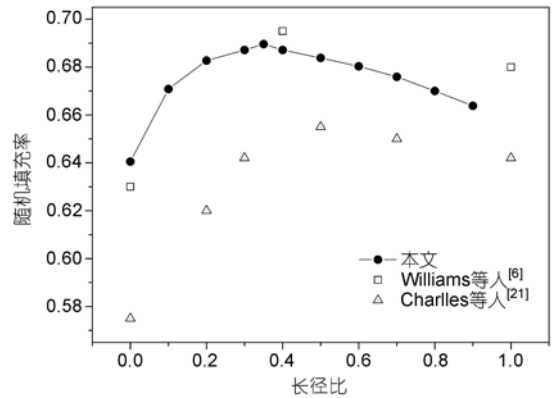


图 4 球柱体随机填充率随长径比的变化

6 圆柱

圆柱的最密规则填充可视为圆的最密二维排列, 其最高填充率为 $\pi\sqrt{3}/6 \approx 0.9069$, 且与圆柱的形状无关. 圆柱随机填充的系统研究起始于 20 世纪 70 年代, 研究手段主要是实验研究, 研究对象为长径比($w = H/D$, H 为圆柱的高度, D 为横截面直径)从 1 到 100 的圆柱. 比较一致的结论是填充率随长径比的增加而单调下降, Zou等人^[22]还给出了填充率的拟合函数. 文献中给出的圆柱随机填充率在 0.555~0.75 之间^[23]. 圆柱随机填充的数值模拟开展得较少, 且现有的绝大多数数值模拟仅能得到松填充的填充率. Zhang等人^[23]采用集合重排算法模拟了长径比从 1 到 100 的圆柱随机密填充, 其最高填充率出现在 $w = 1.2$ 处, 峰值为 0.66. 本文采用组合球模型和松弛算法模拟了圆柱的随机密填充, 结

果如图5所示. 数值模拟结果表明, 圆柱的随机填充率峰值为0.7185, 此时 $w = 0.9$. 当 $w > 1$ 时, 填充率随 w 的增加而减小, 这与实验研究的结论是一致的.

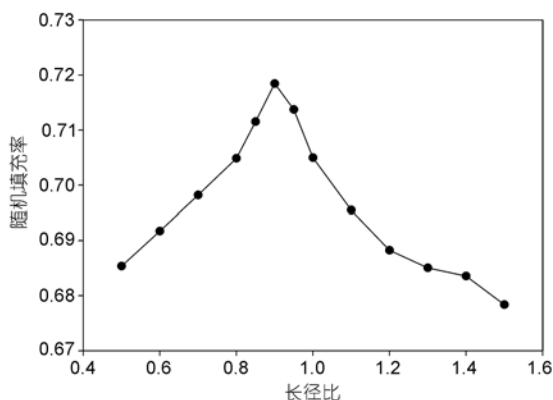


图5 圆柱随机填充率随长径比的变化

7 椭球

椭球的表面光滑、没有棱角, 其解析函数表示简便, 因此椭球面及其拼接也常被用于近似表示实际颗粒的表面. 椭球的填充研究开展得比较充分, 其中最具代表性的是美国普林斯顿大学以Torquato教授为首的研究小组对椭球的规则填充和随机填充开展的一系列理论分析^[24]、数值模拟^[8,25]和实验研究^[26], 这些研究不但揭示了椭球填充的规律性, 而且所得到的填充参数已成为椭球填充的事实标准. 对于椭球的规则填充, Donev等人^[24]指出, 当椭球三轴比为 $1:\sqrt{3}:1$ 或 $1:1/\sqrt{3}:1$ 时, 其规则填充率可达约0.7707. 对于椭球的随机填充, Donev等人^[8,25]的研究表明, 当椭球三轴比约为0.8:1:1.25时, 其随机填充率可达0.735. 椭球随机填充率随形状参数 w 的变化曲线如图6所示, 椭球三轴比为 $w^{-1}:1:w$.

8 立方体

立方体规则填充的最高填充率为1, 即立方体规则排列能够完全占据三维空间而没有空隙. 立方体随机填充的研究在文献中较少见, 其原因一方面是由于立方体是典型的带有棱角的凸体, 在数值模拟中方向性及棱角接触会给算法带来一些困难; 另一方面, 由于随机填充和规则填充的界限并不清晰, 衡量有序程度的指标还不够完善^[27], 而立方体填充很容易形成局部规则排列, 这也给随机填充研究带来一些困扰. 现有的立方体填充实验结果差别较大, 董

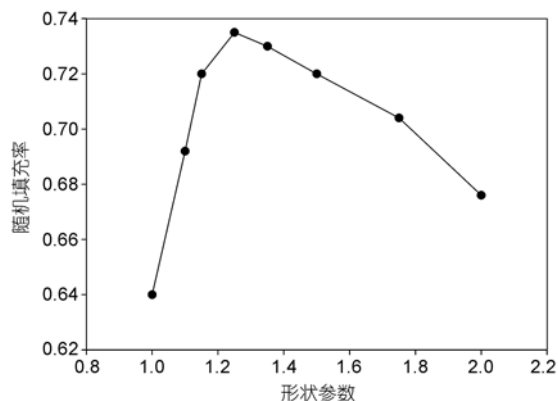


图6 椭球随机填充率随形状参数的变化^[8]

麒等人^[9]的实验给出的立方体密填充填充率为0.64~0.74, Yu等人^[28]给出的立方体填充率约为0.57, Fraige等人^[29]对有限容器中的立方体重力堆积进行了数值模拟和实验研究, 得到的填充率约为0.67. 文献^[14]采用组合球模型和松弛算法模拟了立方体的随机密填充, 其填充率可达0.7755.

9 结论

数值模拟结果表明, 基本三维几何体随机填充的填充率上限从高到底依次为: 立方体(0.78)、椭球(0.74, 三轴比0.8:1:1.25)、圆柱(0.72, $w=0.9$)、球柱体(0.69, $w=0.35$)、四面体(0.68, 正四面体)、圆锥(0.67, $w=0.8$)、球体(0.64), 而规则填充的填充率上限依次为: 立方体(1.0)、圆柱和球柱体(0.9069)、圆锥(0.7854)、椭球(0.7707)、球体(0.7405)、正四面体(0.7175). 从以上结果可以看出, 基本三维几何体的最高填充率排序在随机填充和规则填充两种状态下并不相同. 需要指出的是, 本文中的最高填充率结果仅是目前已知的最优值. 但除规则球填充外, 其他三维几何体的最高填充率并没有经过严格的数学证明, 因此今后随着研究的深入仍有修正的可能.

颗粒形状和填充效率之间的关系一直是填充研究的前沿, 但至今为止对其规律性的认识还十分有限. 球形度是描述非球体颗粒形状最常用的参数之一, 相关研究表明随机填充率并不总是随着球形度的增加而递增, 球形度-填充率曲线均存在极值点, 但不同形状颗粒的填充率极值点位置却有较大的差异. Zou等人^[30]试图用球形度-填充率拟合函数来描述非球体颗粒形状和随机填充率的关系, 但该函数并不具有普遍意义. 因此, 单一的球形度指标可能并不足以反映非球体颗粒形状对填充率影响的复杂性. Wouterse等人^[31]

认为非球体颗粒随机填充的最高填充率大约出现在颗粒长径比为 1.25 处, 但其研究的非球体种类较少, 从本文的数值模拟结果看, 该命题并不完全成立。基本

三维几何体填充的研究是颗粒形状-填充率关系研究的重要组成部分, 但该问题的最终解决还有待学术界在多个学科方向上的共同努力。

致谢 感谢北京大学陈璞教授对本文的热情帮助和支持, 感谢美国 Princeton University S. Torquato 教授、荷兰 Utrecht University A. Kyrlyuk 博士、英国 University of Leeds X. Jia 博士和澳大利亚 University of New South Wales 朱海平博士对本文的帮助和有益讨论。

参考文献

- 1 Aste T, Weaire D. The Pursuit of Perfect Packing. Bristol: Institute of Physics Publishing, 2000
- 2 Hales T C. A proof of the Kepler conjecture. *Ann Math*, 2005, 162: 1065—1185
- 3 Bernal J D. A geometrical approach to the structure of liquids. *Nature*, 1959, 183: 141—147[DOI]
- 4 赵亮, 李水乡, 刘曰武. 直径任意分布球填充的数值模拟. *计算物理*, 2007, 24(5): 625—630
- 5 Cumberland D J, Crawford R J. The Packing of Particles. Amsterdam: Elsevier, 1987
- 6 Williams S R, Philipse A P. Random packings of spheres and spherocylinders simulated by mechanical contraction. *Phys Rev E*, 2003, 67: 051301[DOI]
- 7 叶大年. 颗粒堆积问题. *地质科技情报*, 1988, 7(4): 15—17
- 8 Donev A, Cisse I, Sachs D, et al. Improving the density of jammed disordered packings using ellipsoids. *Science*, 2004, 303: 990—993[DOI]
- 9 董麒, 叶大年. 颗粒的比重、形态与其任意堆积. *科学通报*, 1993, 38(1): 54—57
- 10 李水乡, 赵健. 非球体填充的组合球模型及松弛算法. *计算物理*, 2009, 26(3): 167—173
- 11 Li S X, Zhao L, Liu Y W. Computer simulation of random sphere packing in an arbitrarily shaped container. *CMC-Comput Mater Cont*, 2008, 7(2): 109—118
- 12 Rosen D L, Georgiev G, Goldman T, et al. Random thoughts on densest packing. *Phys Today*, 2008, 61(4): 12—15[DOI]
- 13 Weitz D A. Packing in the spheres. *Science*, 2004, 303: 968—969[DOI]
- 14 Zhao J, Li S X. Numerical simulation of random close packings in particle deformation from spheres to cubes. *Chin Phys Lett*, 2008, 25(11): 4034—4037[DOI]
- 15 Trovato A, Hoang X T, Banavar J R, et al. Symmetry, shape, and order. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2007, 104(49): 19187—19192[DOI]
- 16 Chen T, Zhang Z L, Glotzer S C. A precise packing sequence for self-assembled convex structures. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2007, 104(3): 717—722[DOI]
- 17 Conway J H, Torquato S. Packing, tiling, and covering with tetrahedra. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2006, 103(28): 10612—10617[DOI]
- 18 Chaikin P, Wang S, Jaoshvili A. Packing of tetrahedral and other dice. In: Abstract of APS March Meeting, American Physical Society, 2007
- 19 Latham J P, Lu Y, Munjiza A. A random method for simulating loose packs of angular particles using tetrahedra. *Geotechnique*, 2001, 51(10): 871—879[DOI]
- 20 Li S X, Zhao J, Zhou X. Numerical simulation of random close packing with tetrahedra. *Chin Phys Lett*, 2008, 25(5): 1724—1726[DOI]
- 21 Charles R A, Frederico W T, Marcelo C. Influence of particle shape on the packing and on the segregation of spherocylinders via Monte Carlo simulations. *Powder Tech*, 2003, 134: 167—180[DOI]
- 22 Zou R P, Yu A B. Wall effect on the packing of cylindrical particles. *Chem Eng Sci*, 1996, 51(7): 1177—1180[DOI]
- 23 Zhang W L, Thompson K E, Reed A H, et al. Relationship between packing structure and porosity in fixed beds of equilateral cylindrical particles. *Chem Eng Sci*, 2006, 61: 8060—8074[DOI]
- 24 Donev A, Stillinger F H, Chaikin P M, et al. Unusually dense crystal packings of ellipsoids. *Phys Rev Lett*, 2004, 92: 255506[DOI]
- 25 Donev A, Connelly R, Stillinger F H, et al. Underconstrained jammed packings of nonspherical hard particles: Ellipse and ellipsoids. *Phys Rev E*, 2007, 75: 051304[DOI]
- 26 Man W N, Donev A, Stillinger F H, et al. Experiments on random packings of ellipsoids. *Phys Rev Lett*, 2005, 94: 198001[DOI]
- 27 Torquato S, Truskett T M, Debenedetti P G. Is random close packing of spheres well defined? *Phys Rev Lett*, 2000, 84(10): 2064—2067[DOI]
- 28 Yu A B, Standish N, Mclean A. Porosity calculation of binary mixture of nonspherical particles. *J Am Ceram Soc*, 1993, 76(11): 2813—2816[DOI]
- 29 Fraige F Y, Langston P A, Chen G Z. Distinct element modelling of cubic particle packing and flow. *Powder Tech*, 2008, 186: 224—240[DOI]
- 30 Zou R P, Yu A B. Evaluation of the packing characteristics of mono-sized non-spherical particles. *Powder Tech*, 1996, 88: 71—79[DOI]
- 31 Wouterse A, Williams S R, Philipse A P. Effect of particle shape on the density and microstructure of random packings. *J Phys: Condens Matter*, 2007, 19: 406215[DOI]