

УДК 544.77+532.74

ДВУХМЕРНЫЕ МОДЕЛИ ДИСПЕРСНОЙ СРЕДЫ: СТАТИСТИЧЕСКАЯ ГЕОМЕТРИЯ АНСАМБЛЕЙ ПРАВИЛЬНЫХ ПОЛИГОНОВ

© 2026 г. А. Б. Шубин*

Институт металлургии имени академика Н.А. Ватолина Уральского отделения Российской академии наук, ул. Амундсена, 101, Екатеринбург, 620016 Россия

**e-mail: fortran@list.ru*

Поступила в редакцию 11.02.2026 г.

После доработки 26.02.2026 г.

Принята к публикации 03.03.2026 г.

В работе исследованы статистико-геометрические характеристики случайных упаковок одинаковых правильных многоугольников (с числом вершин от 3 до 7) на плоскости в квадратном боксе со стороной L . Начальный ансамбль генерировали методом случайной последовательной адсорбции. Финальный ансамбль получали путем поэтапного увеличения линейных размеров двухмерных частиц согласно алгоритму Любачевского–Стилинджера.

Получены данные о парных корреляционных функциях, проанализированы закономерности их эволюции в широком диапазоне плотностей упаковки ансамбля. Далее исследованы распределения расстояний от произвольно выбранной точки упаковки до ближайшей к ней стороны полигона. Зависимости этих распределений (при равной плотности упаковки) весьма похожи для всех изученных многоугольников и относительно близки к таковым для ансамбля жестких дисков.

Предложена и изучена статистико-геометрическая функция исключенной площади $\langle w \rangle$ для ансамбля частиц, которая хорошо описывается простым соотношением: $\langle w \rangle(\eta) = a + b \ln \eta$, где η – доля площади ансамбля, занятая частицами; a и b – коэффициенты. Точка пересечения графика этой функции с кривой, описывающей зависимость средней площади области Вороного от η , определяет наибольшую плотность (η_{\max}), при которой ансамбль двухмерных частиц может являться полностью неупорядоченным.

Для рассмотренных двухмерных ансамблей правильных полигонов величина η_{\max} сравнительно слабо зависит от формы частиц и лежит в пределах 0.682 (гептагоны)–0.694

(треугольники). При росте числа вершин η_{\max} закономерно стремится к таковой для случайного ансамбля жестких дисков (0.679).

Ключевые слова: двумерная упаковка, полигон, случайная последовательная адсорбция, уплотнение, статистико-геометрическое свойство

2D MODELS OF DISPERSED MEDIA: STATISTICAL GEOMETRY OF ENSEMBLES OF REGULAR POLYGONS

© 2026 г. A. B. Shubin*

Vatolin Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,

Ekaterinburg, 620016 Russia

**e-mail: fortran@list.ru*

The paper investigates the statistical-geometric characteristics of random packings of identical regular polygons (with vertex numbers from 3 to 7) on a plane within a square box of side L . The initial ensemble was generated by the random sequential adsorption method. The final ensemble was obtained by gradually increasing the linear dimensions of the 2D particles according to the Lubachevsky-Stillinger algorithm.

Data on pair correlation functions were obtained, and the patterns of their evolution over a wide range of ensemble packing densities were analyzed. Furthermore, the distributions of distances from an arbitrarily chosen point in the packing to the nearest polygon side were investigated. At equal packing density, these dependencies are very similar for all studied polygons and relatively close to those for an ensemble of hard disks.

A statistical-geometric function of the excluded area $\langle w \rangle$ for the particle ensemble is proposed and studied. It is well described by a simple relation: $\langle w \rangle(\eta) = a + b \ln \eta$, where η is the area fraction occupied by particles, and a and b are coefficients. The intersection point of the graph of this function with the curve describing the dependence of the average Voronoi cell area on η determines the highest possible density (η_{\max}) at which an ensemble of 2D particles can be completely disordered.

For the considered 2D ensembles of regular polygons, the value of η_{\max} depends relatively weakly on particle shape and lies in the range 0.682 (heptagons) to 0.694 (triangles). As the number of vertices increases, η_{\max} predictably tends to that for a random ensemble of hard disks (0.679).

Keywords: two-dimensional packing, polygon, random sequential adsorption, densification, statistical-geometric property

ВВЕДЕНИЕ

Случайные упаковки частиц являются интересным предметом исследования как сами по себе, так и в качестве удобной модели адсорбции [1, 2], электроосаждения кристаллов [3], жидкокристаллических, коллоидных [4, 5] и других дисперсных систем. Большой интерес представляет исследование фазовых переходов в двухмерных ансамблях частиц, в том числе с образованием промежуточных фаз [6]. Можно описать различные «сценарии» плавления–кристаллизации в подобных ансамблях. Эти процессы могут демонстрировать разные механизмы, которые зависят от формы частиц и использованных алгоритмов уплотнения. Кроме хорошо известной «hexatic phase» [7] в специальных случаях можно наблюдать образование и других интересных промежуточных фаз (в частности, «triatric» [8], «tetratic» [9] и «heptatic» [10]). Условный переход от жидкой к твердой фазе происходит, как правило, при плотности упаковки $\eta = Nu/S \approx 0.68-0.69$ [11, 12], где N – количество частиц ансамбля, u – площадь одной частицы, S – общая площадь системы. Для ансамблей правильных полигонов (пяти-, шести- и восьмиугольников) [6] при трех различных рассмотренных структурных «сценариях» плавления плотности упаковки в интервале фазового перехода составляют $\eta \approx 0.680-0.708$.

Целью данной работы было изучение эволюции статистико-геометрических свойств при уплотнении случайных 2D-ансамблей одинаковых правильных полигонов (с числом вершин от 3 до 7) с использованием алгоритма Любачевского–Стилинжера (Lubachevsky-Stillinger (LS) [13]). Были найдены общие статистико-геометрические свойства, в частности, парные корреляционные функции, а также распределения расстояний от произвольно выбранной точки до ближайшей стороны полигона и их зависимости от плотности упаковки. Последние позволяют определить, в частности, функции исключенной площади [14] и

сформулировать общий критерий существования «случайной» двумерной фазы, задающий верхнюю границу ее плотности.

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

«Стартовые» разреженные ансамбли одинаковых многоугольных частиц на плоскости генерировали методом случайной последовательной адсорбции. Полигоны с радиусом вписанной окружности r , радиусом описанной окружности R и линейным размером (диаметром описанной окружности) $D=2R$ размещали случайным образом в границах квадратной области со стороной L . Соотношение линейного размера частицы D и величины L составляло $D/L \approx 0.005$. Упаковки многоугольников, полученные таким способом, достаточно подробно исследованы, в частности, в работах [2, 15–17]. Было найдено, что статистико-геометрические характеристики и предельные плотности ансамблей при $D/L \leq 0.01$ практически не изменяются при дальнейшем уменьшении D/L (и росте количества частиц N свыше $\approx 10^4$) [18]. В данной работе упаковки содержали приблизительно от 25000 (гептагоны, плотность $\eta \approx 0.46$) до 45000 (треугольники, $\eta \approx 0.38$) частиц. Указанные «стартовые» плотности были несколько меньше предельных, достигаемых методом случайной последовательной адсорбции [16, 17].

Далее начальные ансамбли подвергали уплотнению путем пошагового увеличения линейного размера частиц при одновременном их случайном перемещении и повороте на случайно заданный угол. Такой способ уплотнения был предложен Любачевским и Стилинжером [13] и применялся многими авторами как для двумерных, так и для

трехмерных упаковок частиц. Его применение для упаковок многоугольников более подробно описано, в частности, в работе [19].

В результате компьютерного моделирования получали списки координат вершин всех многоугольников для 300–400 «промежуточных» плотностей от «стартовой» до предельной. Последняя (при данном алгоритме уплотнения) составляла, в среднем, 0.83–0.85 (при некоторых единичных «стартах» уплотнения для упаковок квадратов и гексагонов удавалось получить плотности η до 0.89). Статистико-геометрические свойства исследовали для 10^6 – 10^7 случайных точек в квадратной «внутренней» области, удаленной на расстояние $0.2L$ от границ бокса, чтобы избежать «граничных эффектов». Визуализация списков координат частиц и генерация последовательности «снимков» (кинематограмм) позволяет наблюдать уплотнение случайного ансамбля и его «кристаллизацию» в определенном интервале плотностей <https://disk.yandex.ru/d/CUYjFcbc4kqoSsw>, <https://disk.yandex.ru/d/KU2xzdPIPSJ0Ag>).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Радиальные функции распределения

Для каждой из генерированных упаковок находили парную корреляционную функцию (радиальную функцию распределения, РФР) $G(x/d)=\rho/\rho_0$, где x – расстояние между центрами соседних частиц; $d=2r$ – диаметр вписанной в полигон окружности; ρ – числовая плотность, равная количеству центров соседних частиц на единицу площади в слое $[x; x+\Delta x]$ вокруг заданной частицы; ρ_0 – средняя числовая плотность (число частиц на единицу площади). Интервал Δx для расчетов выбирали равным $0.01d$.

РФР для ансамблей одинаковых многоугольных частиц, полученные нами, хорошо согласуются с литературными данными [20]. На рис. 1 и 2 соответственно показаны трехмерные графики эволюции корреляционной функции с ростом плотности для случайных ансамблей треугольных и семиугольных частиц. Можно видеть, что график для гептагонов имеет более «сложное» строение, но все основные пики являются монотонно возрастающими (с ростом η). В то же время, на графике для треугольных частиц (рис. 1) максимум второго пика РФР до определенного значения плотности убывает по величине, а после достижения этой плотности – максимальное значение этого пика становится возрастающим. Такое явление может свидетельствовать об определенной структурной перестройке в случайном 2D-ансамбле жестких одинаковых треугольников (при $\eta \approx 0.68$).

Изменение структуры (с точки зрения вида корреляционных функций) с ростом η можно наблюдать также и в случайных упаковках полигонов с числом вершин $n \geq 4$ [14, 18, 19], а также жестких дисков [21]. Такое изменение включает некоторое смещение первого и второго пиков, а также появление «подпиков» или «плечей» на них. С увеличением плотности появляются также новые пики РФР (четвертый, пятый и последующие). Характерным примером такого усложнения является график РФР для ансамбля пентагональных частиц (рис. 3).

Рис. 1. Эволюция РФР с ростом плотности упаковки η для случайного ансамбля одинаковых треугольников.

Рис. 2. Эволюция РФР с ростом плотности упаковки η для случайного ансамбля одинаковых гептагонов.

Рис. 3. РФР случайного ансамбля пентагонов для плотностей упаковки $\eta = 0.445$ (а), 0.650 (б), 0.751 (в) и 0.839 (г).

Распределения расстояний от произвольной точки до стороны полигона

Далее нами были изучены распределения расстояний (y) от произвольно заданной точки A ансамбля до ближайшей к ней стороны многоугольника. Аналогично [22], условимся брать величину y со знаком минус, если точка A лежит внутри частицы, и со знаком плюс, если эта точка лежит вне ее. Нормируем значение y , принимая для любой плотности η радиус вписанной в полигон окружности r равным 1. Далее рассмотрим функции плотности вероятности $P(y)=p(y)dy$, где $p(y)$ – вероятность того, что произвольная точка находится на расстоянии в интервале $[y; y+dy]$ от ближайшей стороны полигона. Указанные функции для случайных упаковок треугольных частиц (точки) и, для сравнения, жестких дисков (линия) при $\eta=0.68$ приведены на рис. 3.

Рис. 4. Функции плотности вероятности $P(y)$ для случайных ансамблей одинаковых треугольников (красные точки) и одинаковых жестких дисков (черная кривая) при плотности упаковки $\eta=0.68$.

Видно, что при одинаковой плотности указанные графики (рис. 4) весьма близки между собой. Аналогичная ситуация наблюдается и для других правильных многоугольников, рассмотренных в работе с числом вершин от 4 до 7.

Можно показать аналитически, что при $-1 \leq y \leq 0$ для любого правильного многоугольника:

$$P(y) = 2\eta(1 + y). \quad (1)$$

Такая же линейная функция справедлива и для жестких дисков.

При $y > 0$ зависимости плотности вероятности $P(y)$ представляют собой убывающие функции, также близкие между собой (при одинаковой величине η). Они могут с достаточно высоким коэффициентом детерминации (около 0.9995) быть аппроксимированы уравнением, аналогичным описанному в работе [23]:

$$P(y) \approx (Ay + B) \cdot \exp(Cy^2 + Dy + E), \quad (2)$$

где A , B , C , D и E – коэффициенты аппроксимации. Графические результаты приближения кривых $P(y)$ с помощью соотношения (2) для различных плотностей упаковки (случайный ансамбль квадратов) показаны на рис. 5. Видно, что кривые хорошо описывают экспериментальные результаты практически во всем интервале дистанций y , за исключением небольшого участка вблизи нулевого значения y . Это слабо влияет на общий коэффициент детерминации, однако достаточно заметно на графиках для малых и средних плотностей упаковки. Разумеется, для этого случая можно было бы подобрать более сложную аппроксимирующую функцию. Однако, поскольку при дальнейших расчетах (см. следующий подраздел) имелась возможность просто применить имеющийся массив из всех величин y для всех (10^6 – 10^7) изученных случайных точек, подбор более точных и громоздких выражений для $P(y)$ посчитали излишним.

Средние значения $\langle y \rangle(\eta)$ для точек, лежащих вне полигонов (в свободной от частиц области ансамбля, при $y > 0$) могут быть с достаточно высоким коэффициентом детерминации

(R^2 , в среднем, ≈ 0.9995) почти во всей области плотностей упаковки η описаны простым полиномом вида:

$$\langle y \rangle (\eta) = A_1 \eta^2 + B_1 \eta + C_1, \quad (3)$$

где A_1, B_1, C_1 – параметры.

Зависимости $\langle y \rangle (\eta)$ для упаковок треугольных частиц и (для сравнения) жестких дисков представлены на рис. 6. Видно, что характер кривых очень близок между собой, но график для дисков ближе к линейной зависимости. Коэффициенты A_1, B_1 и C_1 соотношения (3) приведены для ансамблей всех изученных фигур в табл. 1.

Рис. 5. Аппроксимация функции плотности вероятности для различных значений η (случайный ансамбль квадратов) от «стартовой» до финальной. Точки – эксперимент, кривые – аппроксимированные значения (соотношение (2)).

Зависимости $\langle y \rangle (\eta)$ для многоугольных частиц описываются выражением (3) достаточно точно (кроме очень узких «стартового» и конечного участков). В то же время для жестких дисков (Рис. 6б) данные эксперимента и аппроксимации визуально практически совпадают. Небольшие отклонения в приближении данных, заметные глазу, сравнительно слабо влияют на коэффициенты детерминации (табл. 1) и (в рамках данной работы) нивелируются возможностью использования в расчетах непосредственно исходных массивов значений y .

Рис. 6. Зависимости среднего расстояния от произвольной точки (вне фигур, $y > 0$) от ближайшей стороны треугольников (а) (или окружности для жестких дисков (б)). Точки – эксперимент, кривые – аппроксимация по соотношению (3).

Таблица 1. Коэффициенты аппроксимирующей зависимости $\langle y \rangle(\eta)$ для случайных ансамблей полигонов (с числом вершин n) и жестких дисков

n	A_1	B_1	C_1	R^2
3	1.277 ± 0.003	-2.604 ± 0.012	1.456 ± 0.010	0.9998
4	1.084 ± 0.004	-2.033 ± 0.012	1.028 ± 0.009	0.9997
5	1.050 ± 0.005	-1.919 ± 0.016	0.925 ± 0.013	0.9996
6	1.091 ± 0.007	-2.101 ± 0.021	1.111 ± 0.016	0.9991
7	0.993 ± 0.007	-1.764 ± 0.022	0.816 ± 0.017	0.9995
Жесткие диски	0.776 ± 0.005	-1.085 ± 0.015	0.331 ± 0.011	0.9998

Функция исключенной площади

Рассмотрим пару отдельно взятых частиц (первую и вторую), идентичных полигонам упаковки (рис. 7). Пусть задана некоторая точка A , имеющая фиксированные координаты в системе отсчета, связанной с первой частицей. Если известна величина y (расстояние до ближайшей стороны первой частицы) для точки A , то, независимо от взаимного расположения пары частиц (первой и второй), существует двухмерный исключенный объем (площадь) – $w(y)$, связанный со второй частицей, в котором заданная точка A принципиально не может находиться (по условию взаимного неперекрывания полигонов). Исключенная область показана на рис. 7 (выделено серым цветом), для случаев, когда точка A лежит вне и внутри первой частицы. Если точка A лежит на одной из сторон, то исключенный объем совпадает со второй частицей. Если точка A лежит вне частицы I , и расстояние до ее ближайшей стороны превышает радиус вписанной окружности многоугольника, то исключенный объем обращается в ноль.

Подобная исключенная площадь для пары произвольных многоугольников подробно анализируется, например, в работах [24, 25]. При этом находится средняя исключенная площадь только для центральной (или референсной) точки частицы I , а усреднение ведется по всем возможным взаимным ориентациям первой и второй частиц. Аналогичный подход был применен в известной работе Онзагера [26] и развит, в частности, в исследовании [27].

Согласно нашему подходу, величина исключенной площади вычисляется не только для референсной точки (например, центра O_1) частицы I , а вообще для любой произвольной точки A , имеющей фиксированные координаты в системе отсчета, связанной с многоугольником I и принадлежащей его области Вороного. Далее, усреднение ведется по всем точкам области Вороного заданной частицы в структуре ансамбля.

Рис. 7. Исключенная область для точки, лежащей вне многоугольника (вверху) и внутри многоугольника (внизу), выделена серым цветом.

Если радиус вписанной окружности r для частицы задан равным 1 ($r=1$), а y – нормированное расстояние от точки A до ближайшей к ней стороны полигона I , то:

$$w(y) = u + nc(-y) + \pi y^2 \text{ при } -1 \leq y \leq 0, \quad (4)$$

$$w(y) = u(1 - y)^2 \text{ при } 0 < y \leq 1, \quad (5)$$

$$w(y) = 0 \text{ при } y > 1, \quad (6)$$

где c – длина стороны многоугольника, u – его площадь.

Форма исключенной области отвечает сферополлигону [28] или «rounded polygon» [29] при $y \leq 0$. При $0 < y \leq 1$ исключенная область соответствует масштабированной (с уменьшением) частице. При числе сторон $n \rightarrow \infty$ (жесткие диски) величина nc стремится к длине окружности

диска единичного радиуса (2π) и, при $y \leq 0$, имеем $w(y) = \pi + 2\pi(-y) + \pi y^2 = \pi(1-y)^2$. Очевидно, что для $0 < y \leq 1$ в этом случае также $w(y) = \pi(1-y)^2 = \pi(1-y)^2$. Таким образом, для жестких дисков:

$$w(y) = \pi(1-y)^2 \text{ при } -1 \leq y \leq 1, \quad (7)$$

$$w(y) = 0 \text{ при } y > 1. \quad (8)$$

Разобьем нашу случайную упаковку на области Вороного. Средний объем такой области очевидно равен u/η . Рассмотрим теперь некоторую точку A , принадлежащую нашему ансамблю полигонов. Можно найти величину $w(y)$, рассматривая ближайшую к точке A частицу в качестве первой, а любую другую частицу – в качестве второй.

Далее, определим среднюю величину $w(y)$ для всех точек упаковки (или их представительной выборки), и обозначим ее $\langle w \rangle(\eta)$, так как она является функцией плотности. Чтобы избежать путаницы понятий, назовем величину $\langle w \rangle(\eta)$ не средней исключенной площадью [24, 25, 29], а функцией исключенной площади.

Ранее [21, 22, 30] нами было сформулировано условие случайности ансамблей одинаковых жестких частиц:

Средняя площадь области Вороного в случайной двухмерной упаковке не может быть меньше, чем значение функции исключенной площади, то есть $u/\eta \geq \langle w \rangle(\eta)$.

Согласно этому условию, плотность случайной упаковки η не может превышать $u/\langle w \rangle$, а при $\eta \geq u/\langle w \rangle$ ансамбль не может быть полностью случайным.

Данные положения основаны [21, 22, 30] на отсутствии различий между статистико-геометрическими свойствами малой группы зафиксированных частиц и остальными частицами ансамбля до достижения определенной плотности упаковки.

Для нахождения функции исключенной площади достаточно знать распределение расстояний y от произвольной точки ансамбля до ближайшей стороны (как внутри фигур, так и вне их). Наибольшую возможную плотность (η_{\max}) случайной упаковки можно найти,

построив зависимости $\langle w \rangle(\eta)$ и площади области Вороного u/η . Плотность в точке пересечения этих зависимостей и будет определять значение η_{\max} .

Зависимости функции исключенной площади от плотности упаковки $\langle w \rangle(\eta)$ и соответствующие кривые для средней площади области Вороного (u/η) для ансамбля пятиугольных частиц (в качестве примера) показаны на рис. 8. Точка пересечения графиков, определяющая геометрический предел плотности случайной упаковки пентагонов, отвечает величине η_{\max} .

Рис. 8. Зависимости функции исключенной площади $\langle w \rangle(\eta)$ и средней площади области Вороного (u/η) от плотности упаковки для ансамбля пятиугольных частиц.

Интересно, что зависимости $\langle w \rangle(\eta)$ для всех изученных ансамблей правильных полигонов с очень высоким коэффициентом детерминации (0.9996–0.9999) описываются простой функциональной зависимостью: $\langle w \rangle(\eta) = a + b \ln \eta$ во всем исследованном интервале плотностей упаковки. Коэффициенты этой зависимости для многоугольников с числом вершин от 3 до 7 (а также для жестких дисков) приведены в табл. 2. Площади правильных многоугольников с единичным радиусом вписанной окружности, которые являются коэффициентами зависимости u/η , были рассчитаны по известной формуле $u = n \cdot r^2 \cdot \text{tg}(\pi/n)$ при $r=1$. Далее в табл. 2 показаны найденные значения η_{\max} .

Таблица 2. Коэффициенты функции $\langle w \rangle(\eta) = a + b \ln \eta$, величины площади многоугольников u , расчетные значения максимальной плотности

n	a	b	u	η_{\max}
3	9.191888	4.687999	5.196154	0.6944

4	7.212197	3.709134	4.000000	0.6872
5	6.608646	3.417285	3.632713	0.6840
6	6.302368	3.237564	3.464102	0.6833
7	6.168706	3.193678	3.371022	0.6817
Жесткие диски	5.802917	3.038039	3.141593	0.6793

На рис.9 показаны зависимости максимальной плотности η_{\max} от числа вершин многоугольников для числа вершин от 3 до 7 и далее до 21. Зависимость $\eta_{\max}(n)$ хорошо аппроксимируется простым соотношением $\eta_{\max}(n)=(0.6794\pm 0.0001)+(0.130\pm 0.003)/n^2$ (кривая и доверительные интервалы даны на рис. 9). Здесь же представлены результаты для системы жестких дисков (получены в рамках отдельных расчетов).

Рис. 9. Зависимость предела плотности случайной 2D-упаковки одинаковых правильных многоугольников от числа вершин. Точки – экспериментальные данные, кривая (красный) – аппроксимация. Полоса (розовый) – доверительный интервал. Прямая (черный) – η_{\max} для ансамбля жестких дисков.

Можно видеть, что величина η_{\max} закономерно уменьшается с ростом числа сторон многоугольников и приближается к таковой для упаковки жестких дисков.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены результаты исследования статистико-геометрических свойств случайных упаковок одинаковых правильных многоугольников (с числом вершин от 3 до 7, а для величин предельной плотности – до 21). В качестве стартовых использовали ансамбли, генерированные методом случайной последовательной адсорбции. Далее системы подвергались уплотнению с использованием модифицированного LS-алгоритма, реализованного с применением оптимизированных параметров. Изучены статистико-геометрические свойства указанных ансамблей.

Полученные данные позволяют проанализировать особенности изменения статистико-геометрических характеристик случайных двумерных ансамблей частиц при переходе от неупорядоченных систем к частично упорядоченным. При плотностях упаковки, превышающих 0.65–0.70 в парных корреляционных функциях возникают характерные особенности, указывающие на структурный переход, аналогичный стеклованию в системе жестких дисков. Дальнейшее уплотнение приводит к частичной «кристаллизации», которая (при плотностях выше 0.80) хорошо заметна как на визуализированных изображениях самого ансамбля, так и на графиках радиальных функций распределения.

Полученные нами в рамках LS-алгоритма результаты по корреляционным функциям хорошо согласуются с данными работы [20], в которой для уплотнения случайных ансамблей полигональных частиц применяли другой алгоритм (осаждение под действием гравитации). Это означает, что различные алгоритмы получения случайных 2D-ансамблей, как правило, приводят в итоге к близким результатам. По-видимому, общие структурные особенности случайных двумерных систем выпуклых частиц хорошо воспроизводятся как при компьютерном, так и при «натурном» моделировании [31]. Это подтверждает положения [32, 33] о «воспроизводимости» случайных плотных упаковок и стекол.

Различные методы симуляции двумерных упаковок дисков полигонов [6] и дисков [34] могут приводить к разным сценариям фазовых переходов в системе. Рыжов с соавторами [35] рассматривает три таких сценария (как переход первого рода, так и два отличных от него (с участием hexatic phase)). Случайное размещение малой группы зафиксированных частиц также может существенно влиять на сценарий плавления и фазовую диаграмму двумерной системы [36], в частности, при доле фиксированных частиц порядка 0.1%. Примерно такой порядок величины доли «зафиксированных частиц», приводящий, в том числе, к «остановке» геометрического уплотнения системы в рамках LS-алгоритма, наблюдался и автором.

Если доля «зафиксированных частиц» в ансамбле может быть задана сколь угодно малой [30], то можно предположить отсутствие различий в статистико-геометрических свойствах этой малой группы и остальных частиц при уплотнении вплоть до достижения определенной величины (η_{\max}). Такое предположение приводит к сформулированному выше чисто геометрическому условию «случайности» упаковки, которое обязательно нарушается при $\eta > \eta_{\max}$ [21, 22, 30].

Найденные плотности вероятности для распределения расстояний от произвольно выбранной точки ансамбля частиц до ближайшей стороны полигона точно описываются функцией $P(y) = 2\eta(1+y)$ для точек, лежащих внутри многоугольников. Если выбранные точки лежат вне частиц (в свободном пространстве упаковки), то убывающая функция $P(y)$ (при данном η) достаточно хорошо аппроксимируется выражением вида $P(y) \approx (Ay+B) \cdot \exp(Cy^2+Dy+E)$. Зависимости среднего расстояния от точки свободного пространства до ближайшей стороны фигуры могут быть приближенно описаны полиномом вида: $\langle y \rangle(\eta) = A_1\eta^2 + B_1\eta + C_1$.

Наиболее «простое» и эффективное аппроксимационное соотношение (коэффициент детерминации (0.9996–0.9999)) характерно для функции исключенной площади $\langle w \rangle(\eta)$, определенной в настоящей работе. Для ансамблей всех изученных полигонов эта функция может быть задана уравнением: $\langle w \rangle(\eta) = a + b \ln \eta$. Согласно сформулированному выше условию, плотность случайной упаковки η не может превышать $u/\langle w \rangle$, а при $\eta \geq u/\langle w \rangle$ ансамбль не может быть полностью случайным. Поэтому точка пересечения кривой $\langle w \rangle(\eta)$ с зависимостью средней площади области Вороного u/η определяет своего рода предел (η_{\max}) для плотности случайного ансамбля полигонов или жестких дисков. Выше этой плотности в двумерной упаковке (в том или ином виде) обязательно происходит структурная перестройка (например, стеклование, образование промежуточных «hexatic» фаз и другие возможные «сценарии» переходов, которые будут определяться формой частиц и использованными способами и алгоритмами моделирования).

Дальнейшее уплотнение двумерных ансамблей одинаковых полигонов приводит к явно заметному глазом появлению дальнего порядка и частичной «кристаллизации», которая (при плотностях выше 0.80) хорошо наблюдается как на визуализированных изображениях самого ансамбля (<https://disk.yandex.ru/d/KU2xzdPIPSJ0Ag>), так и на кинематограммах корреляционных функций (<https://disk.yandex.ru/d/CUYjFcbc4kqoSv>).

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках и за счет средств Государственного задания ИМЕТ УрО РАН (тема FUMR-2025-0006, номер государственной регистрации 125021202040-3). Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

СОБЛЮДЕНИЕ ЭТИЧЕСКИХ СТАНДАРТОВ

В данной работе отсутствуют исследования человека или животных.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Zhang G.* Precise algorithm to generate random sequential adsorption of hard polygons at saturation // *Phys. Rev. E.* 2018. V. 97. P. 043311.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.043311>
2. *Ciesla M., Kubala P., Moud A.A.* Random sequential adsorption of aligned regular polygons and rounded squares: Transition in the kinetics of packing growth // *Phys. Rev. E.* 2023. V. 107. P. 054904.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.107.054904>
3. *Yasnikov I.S., Vikarchuk A.A., Denisova D.A., et al.* Electrodeposition of nanostructure objects with pentagonal symmetry // *Tech. Phys.* 2007. V. 52. № 10. P. 1328–1331.
<https://doi.org/10.1134/S106378420710012X>
4. *Solodkov N.V., Shim J., Jones J.C.* Self-assembly of fractal liquid crystal colloids // *Nat. Commun.* 2019. V. 10. P. 198.
<https://doi.org/10.1038/s41467-018-08210-w>
5. *Зубарев А.Ю., Искакова Л.Ю.* К теории агрегирования полидисперсных коллоидов // *Коллоидный журнал.* 2004. Т. 66. № 3. С. 337–342.
6. *Anderson J.A., Antonaglia J., Millan J.A., et al.* Shape and symmetry determine two-dimensional melting transitions of hard regular polygons // *Phys. Rev. X.* 2017. V. 7. P. 021001.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevX.7.021001>
7. *Engel M., Anderson J.A., Glotzer S.C. et al.* Hard-disk equation of state: First-order liquid-hexatic transition in two dimensions with three simulation methods // *Phys. Rev. E.* 2013. V. 87. P. 042134.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.87.042134>

8. *Zong Y., Zhao K.* Manipulation of self-assembled structures by shape-designed polygonal colloids in 2D // *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* 2022. V. 26. № 6. P. 101022.
<https://doi.org/10.1016/j.cossms.2022.101022>
9. *Dertli D., Speck T.* In pursuit of the tetratic phase in hard rectangles // *Phys. Rev. Research.* 2025. V. 7. P. L012034.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.7.L012034>
10. *Yu T., Mason T.G.* Heptatic liquid quasi-crystals by colloidal lithographic pre-assembly // *J. Colloid Interface Sci.* 2024. V. 665. P. 535–544.
<https://doi.org/10.1016/j.jcis.2023.12.157>
11. *Truskett T.M., Torquato S., Sastry S., et al.* Structural precursor to freezing in the hard-disk and hard-sphere systems // *Phys. Rev. E.* 1998. V. 58. P. 3083.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.58.3083>
12. *Xu X., Rice S.A.* Maximally random jamming of one-component and binary hard-disk fluids in two dimensions // *Phys. Rev. E.* 2011. V. 83. P. 021120.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.83.021120>
13. *Lubachevsky B.D., Stillinger F.H.* Geometric properties of random disk packings // *J. Stat. Phys.* 1990. V. 60. P. 561–583.
<https://doi.org/10.1007/bf01025983>
14. *Шубин А.Б.* Геометрический предел плотности для случайных ансамблей правильных многоугольников // *Расплавы.* 2025. № 5. С. 492–506.
<https://doi.org/10.7868/S3034571525050076>
15. *Cieřla M., Barbasz J.* Random packing of regular polygons and star polygons on a flat two-dimensional surface // *Phys. Rev. E.* 2014. V. 90. P. 022402.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.022402>

16. *Cieřla M., Kubala P., Zhang G.* Saturated random packing built of arbitrary polygons under random sequential adsorption protocol // *Phys. Rev. E.* 2019. V. 100. P. 062901.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.062901>

17. *Zhang G.* Precise algorithm to generate random sequential adsorption of hard polygons at saturation // *Phys. Rev. E.* 2018. V. 97. P. 043311.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.043311>

18. *Шубин А.Б.* Случайные ансамбли частиц с пентагональной симметрией: уплотнение и свойства // *Расплавы.* 2025. № 1. P. 10–23.

<https://doi.org/10.7868/S3034571525010025>

19. *Шубин А.Б.* Случайные двумерные ансамбли многоугольных частиц: уплотнение и статистико-геометрические свойства // *Расплавы.* 2025. № 5. С. 430–443.

<https://doi.org/10.7868/S3034571525050027>

20. *Wang C., Dong K., Yu A.* Structural characterization of the packings of granular regular polygons // *Phys. Rev. E.* 2015. V. 92. P. 062203.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.062203>

21. *Shubin A.B.* Structural characteristics of a small group of fixed particles and the maximum density of a random packing of hard spheres // *Russ. Metall.* 2021. № 2. P. 181–186.

<https://doi.org/10.1134/S0036029521020245>

22. *Shubin A.B.* The geometric condition for density limits in idealized models of liquids // *Russian J. Phys. Chem. A.* 1996. V. 70. № 4. P. 711–712.

23. *Torquato S., Lu B., Rubinstein J.* Nearest-neighbor distribution functions in many-body systems // *Phys. Rev. A.* 1990. V. 41. P. 2059.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.41.2059>

24. *Geigenfeind T., de las Heras D.* Principal component analysis of the excluded area of two-dimensional hard particles // *J. Chem. Phys.* 2019. V. 150. P. 184906.

<https://doi.org/10.1063/1.5092865>

25. *Martínez-Ratón Y., Velasco E.* Orientational ordering in a fluid of hard kites: A density-functional-theory study // *Phys. Rev. E.* 2020. V. 102. P. 052128.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.102.052128>

26. *Onsager L.* The effects of shape on the interaction of colloidal particles // *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 1949. V. 51. № 4. P. 627–659.

<https://doi.org/10.1111/j.1749-6632.1949.tb27296.x>

27. *Browsers H.J.H.* Random packing fraction of binary similar particles: Onsager's excluded volume model revisited // *Phys. Usp.* 2024. V. 67. № 5. P. 510–529.

<https://doi.org/10.3367/UFNe.2023.11.039606>

28. *Galindo-Torres S.A., Muñoz J.D.* Minkowski-Voronoi diagrams as a method to generate random packings of spheropolygons for the simulation of soils // *Phys. Rev. E.* 2010. V. 82. P. 056713.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.82.056713>

29. *Cieřla M., Kubala P., Kozubek K.* Algorithms to generate saturated random sequential adsorption packings built of rounded polygons // *Phys. Rev. E.* 2021. V. 103. P. 063308.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.063308>

30. *Shubin A.B.* Concerning the geometric limit of the density of a loose medium modeled by identical spherical particles // *J. Eng. Phys. Thermophys.* 1995. V. 68. № 4. P. 460–463.

<https://doi.org/10.1007/BF00858659>

31. *Xu Y., Barés J., Zhao Y., et al.* Jamming transition: heptagons, pentagons, and discs // EPJ Web of Conferences. 2017. V. 140. P. 06010.

<https://doi.org/10.1051/epjconf/201714006010>

32. *Kamien R.D., Liu A.J.* Why is random close packing reproducible? // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 99. P. 155501.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.155501>

33. *Speedy R.J.* On the reproducibility of glasses // J. Chem. Phys. 1994. V. 100. P. 6684–6691.

<https://doi.org/10.1063/1.467028>

34. *Engel M., Anderson J.A., Glotzer S.C., et al.* Hard-disk equation of state: First-order liquid-hexatic transition in two dimensions with three simulation methods // Phys. Rev. E. 2013. V. 87. P. 042134.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.87.042134>

35. *Ryzhov V.N., Gaiduk E.A., Tareeva E.E., et al.* Melting scenarios of two-dimensional systems: possibilities of computer simulation // J. Exp. Theor. Phys. 2023. V. 137. № 1. P. 125–150.

<https://doi.org/10.1134/S1063776123070129>

36. *Ryzhov V.N., Tareyeva E.E., Fomin Yu.D., et al.* The effect of random disorder on two-dimensional melting scenarios // Phys. Part. Nuclei Lett. 2025. V. 22. № 3. P. 501–504.

<https://doi.org/10.1134/S1547477125700037>

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ

Рис. 1. Эволюция РФР с ростом плотности упаковки η для случайного ансамбля одинаковых треугольников.

Рис. 2. Эволюция РФР с ростом плотности упаковки η для случайного ансамбля одинаковых гептагонов.

Рис. 3. РФР случайного ансамбля пентагонов для плотностей упаковки $\eta = 0.445$ (а), 0.650 (б), 0.751 (в) и 0.839 (г).

Рис. 4. Функции плотности вероятности $P(y)$ для случайных ансамблей одинаковых треугольников (красные точки) и одинаковых жестких дисков (черная кривая) при плотности упаковки $\eta=0.68$.

Рис. 5. Аппроксимация функции плотности вероятности для различных значений η (случайный ансамбль квадратов) от «стартовой» до финальной. Точки – эксперимент, кривые – аппроксимированные значения (соотношение (2)).

Рис. 6. Зависимости среднего расстояния от произвольной точки (вне фигур, $y>0$) от ближайшей стороны треугольников (а) (или окружности для жестких дисков (б)). Точки – эксперимент, кривые – аппроксимация по соотношению (3).

Рис. 7. Исключенная область для точки, лежащей вне многоугольника (вверху) и внутри многоугольника (внизу), выделена серым цветом.

Рис. 8. Зависимости функции исключенной площади $\langle w \rangle(\eta)$ и средней площади области Вороного (u/η) от плотности упаковки для ансамбля пятиугольных частиц.

Рис. 9. Зависимость предела плотности случайной 2D-упаковки одинаковых правильных многоугольников от числа вершин. Точки – экспериментальные данные, кривая

(красный) – аппроксимация. Полоса (розовый) – доверительный интервал. Прямая (черный) –
ηтах для ансамбля жестких дисков.

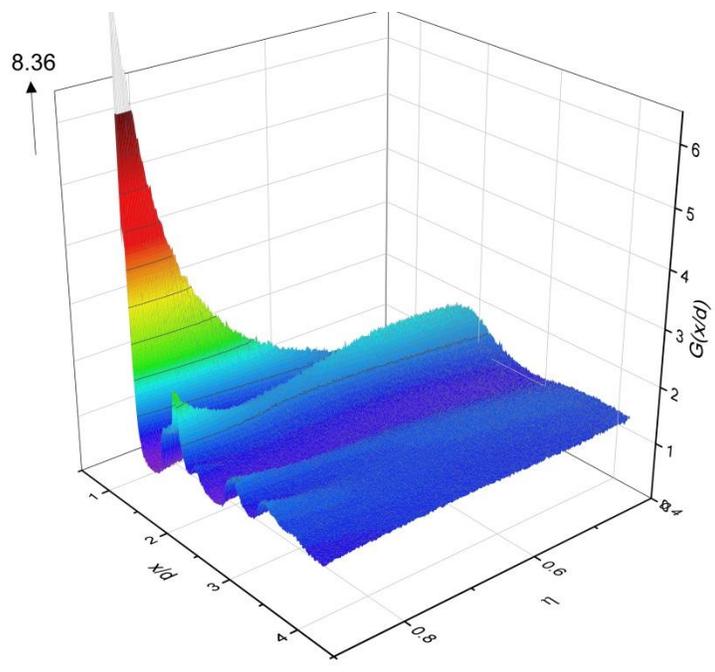


Рисунок 1. Шубин

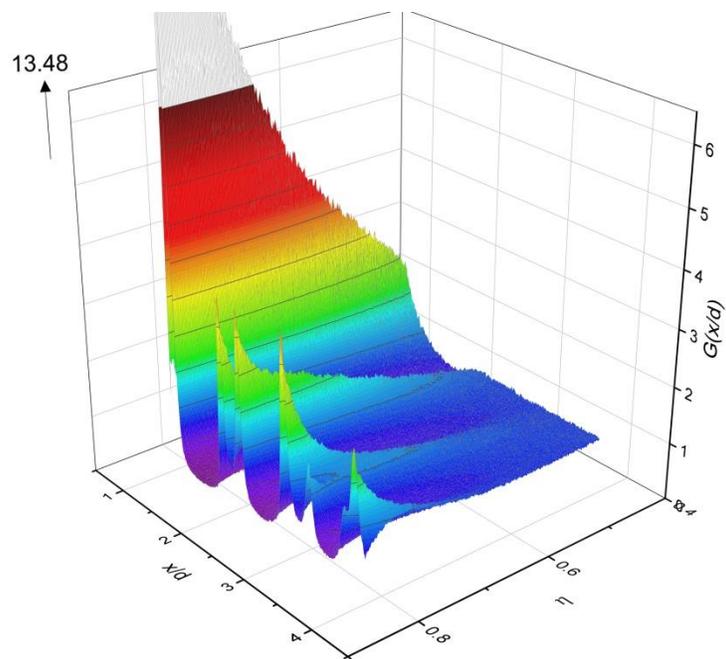


Рисунок 2. Шубин

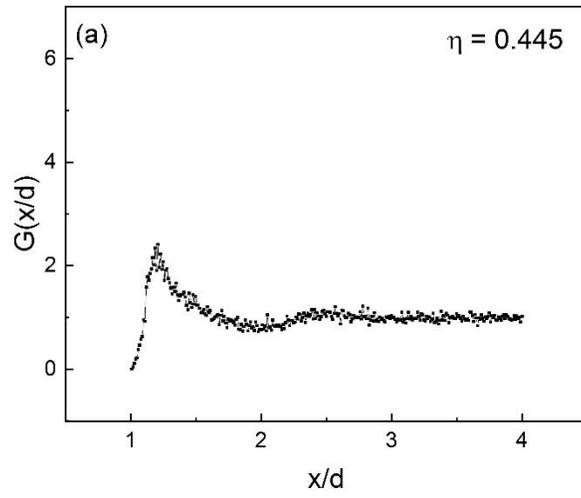


Рисунок 3а. Шубин

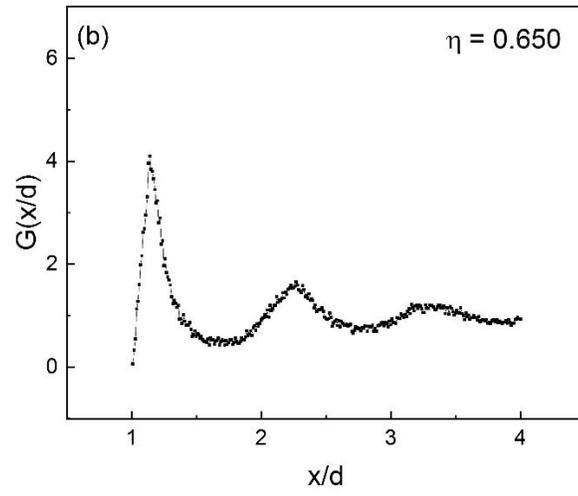


Рисунок 3б. Шубин

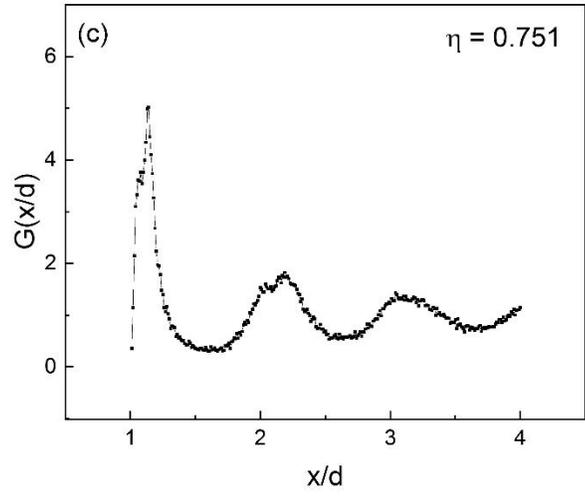


Рисунок 3в. Шубин

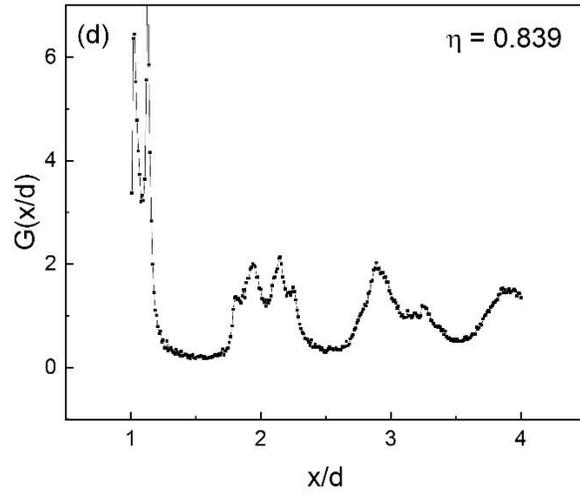


Рисунок 3г. Шубин

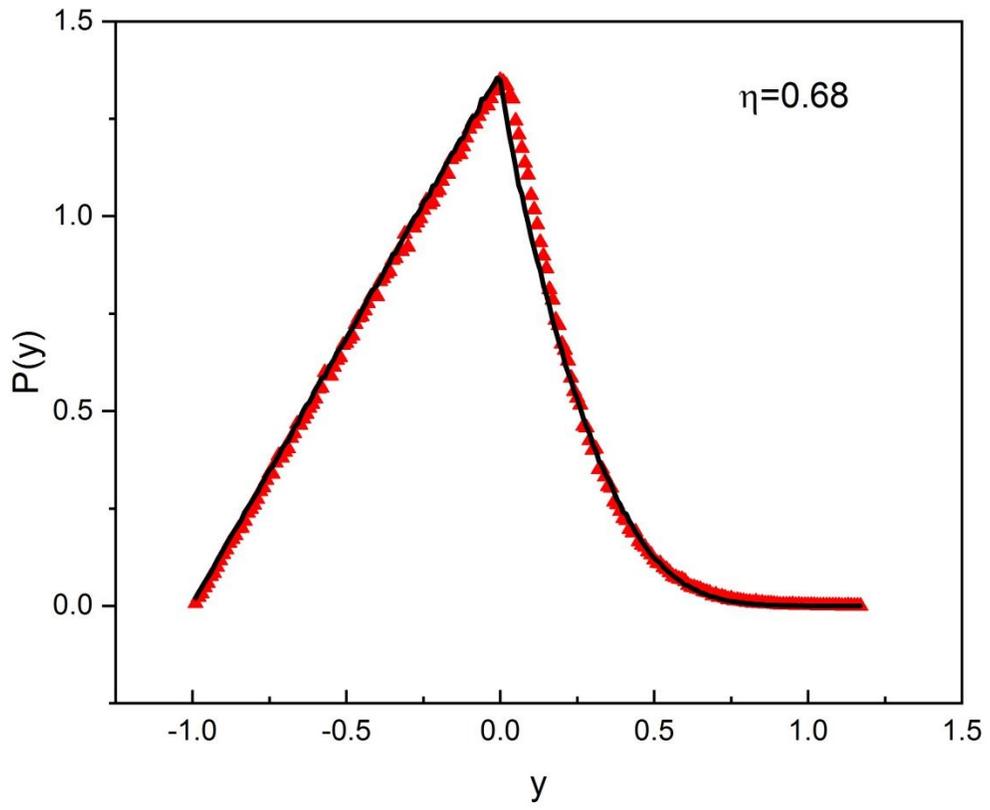


Рисунок 4. Шубин

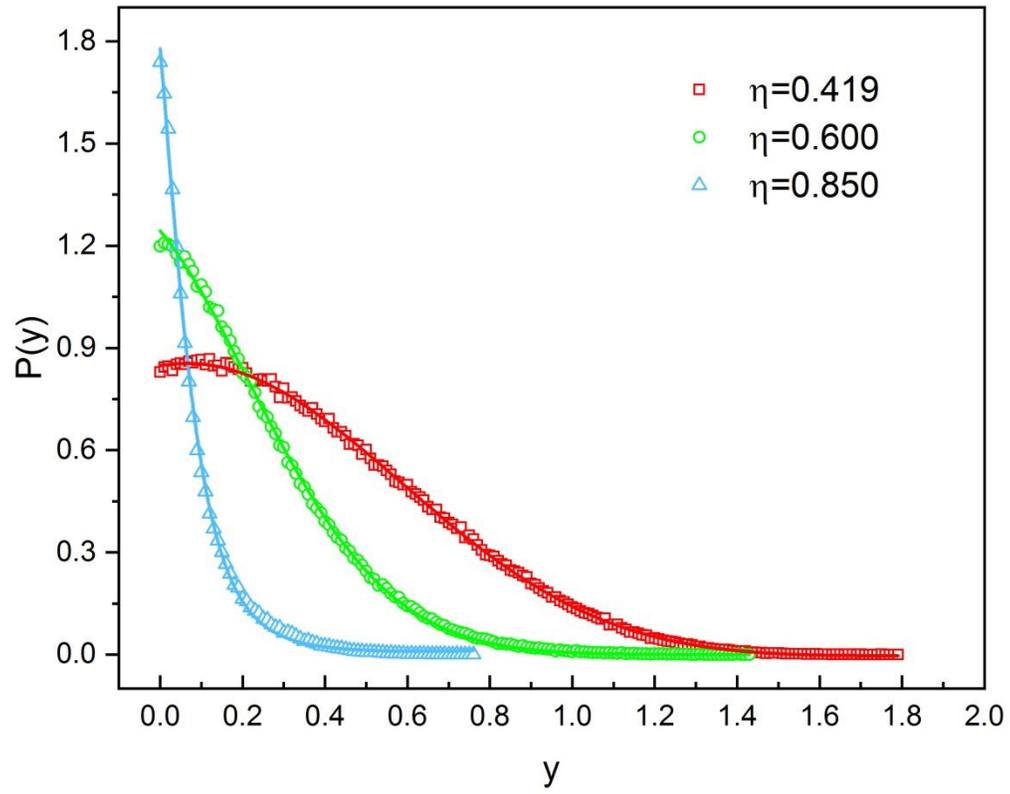


Рисунок 5. Шубин

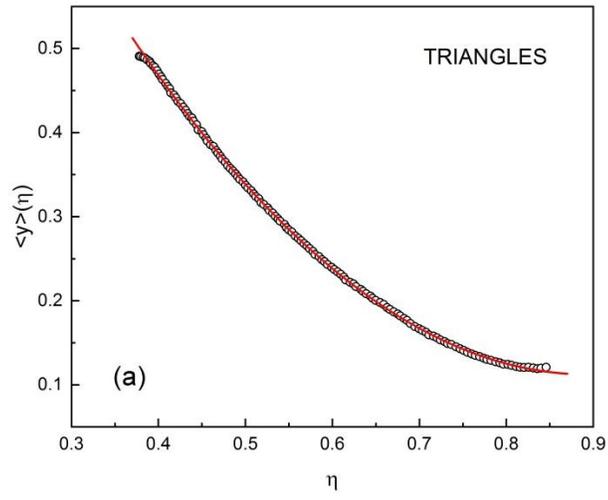


Рисунок ба. Шубин

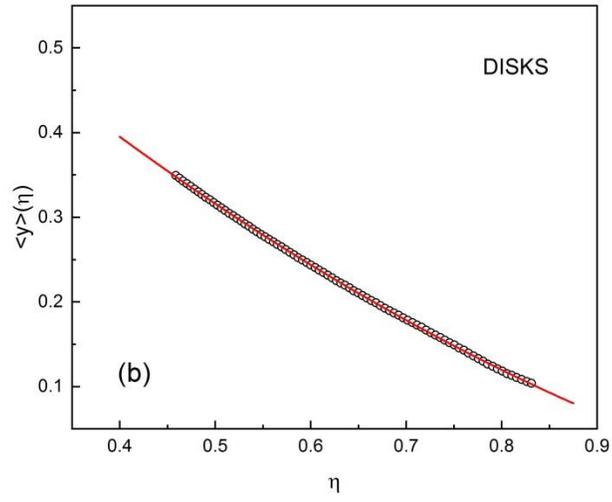


Рисунок бб. Шубин

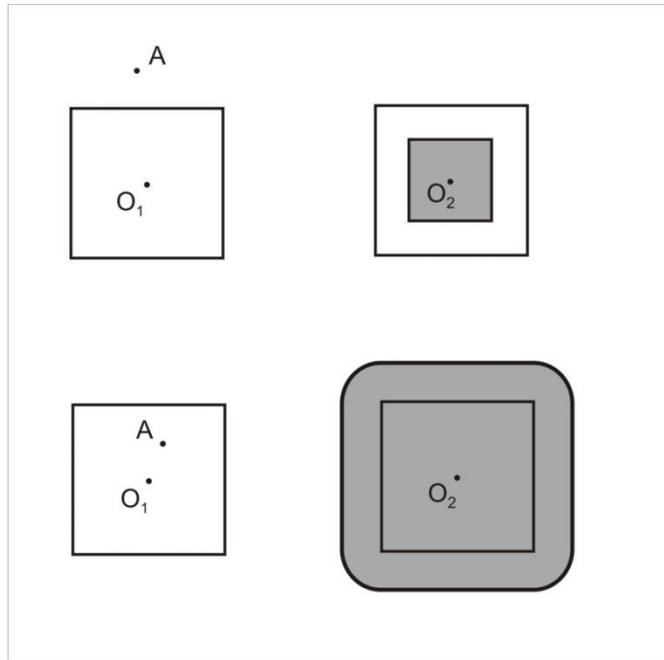


Рисунок 7. Шубин

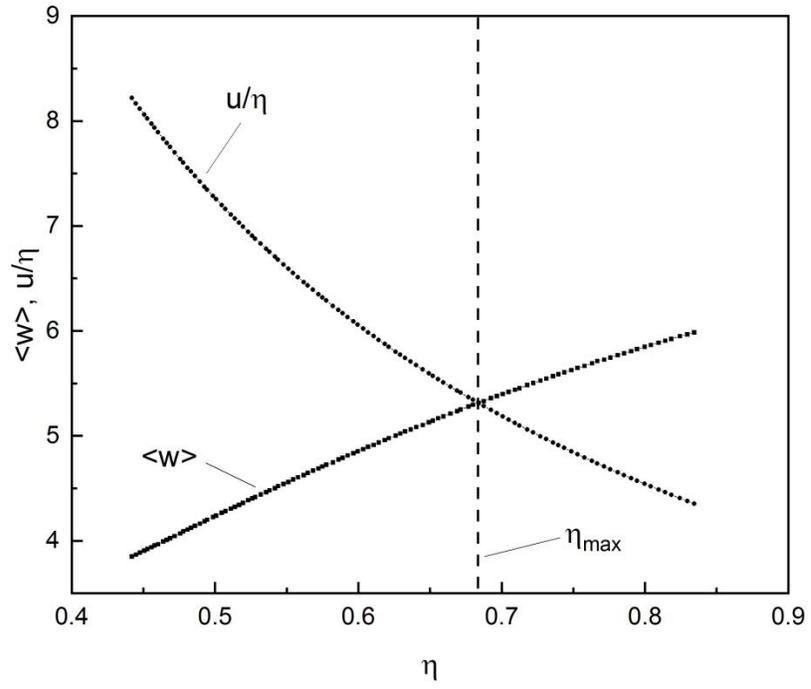


Рисунок 8. Шубин

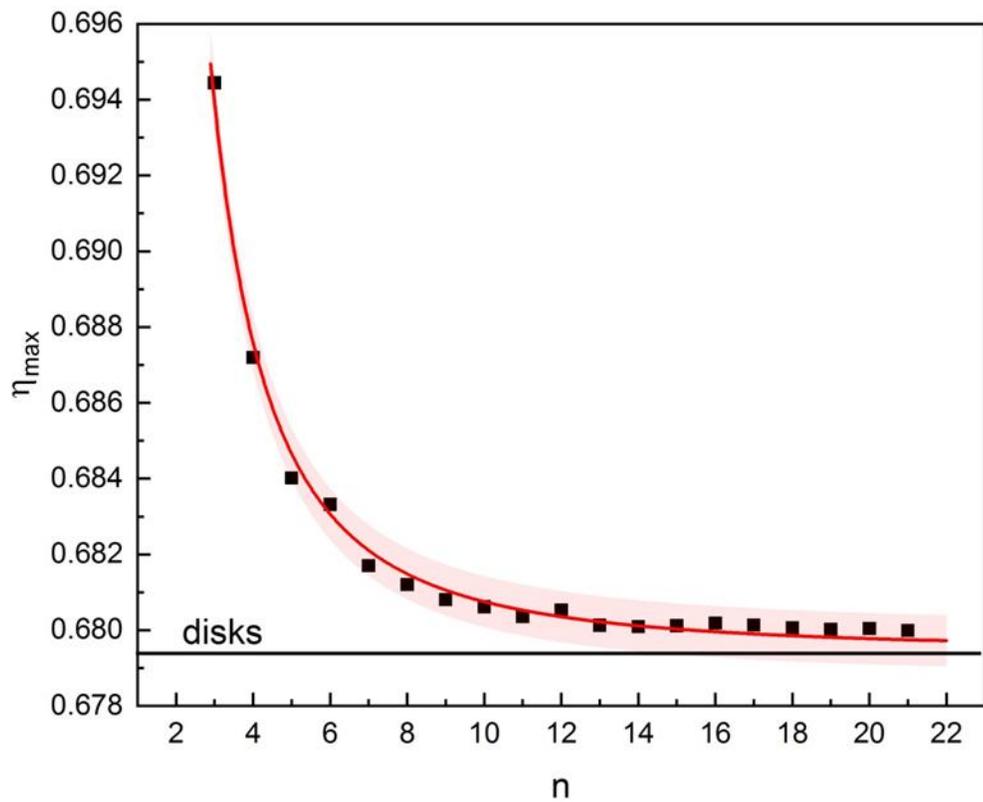


Рисунок 9. Шубин