

## МАКСИМАЛЬНАЯ СЛУЧАЙНАЯ УПАКОВКА БЛОКОВ НА КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

К.А. Эберт<sup>1</sup>, М.М. Бузмакова<sup>1</sup>, С.В. Русаков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Пермский государственный национальный исследовательский университет, г. Пермь, Российская Федерация

В работе предложена и исследована математическая модель максимальной случайной упаковки блоков на кубической решетке. Джемминг – явление, которое возникает в процессе случайной упаковки объектов, когда система становится максимально заполненной объектами, но при этом еще присутствует свободное место. Порог джемминга – концентрация объектов в максимально заполненной системе. Блок ( $k^3$ -мер) с длиной стороны  $k$  представляет собой на дискретной решетке  $k \times k \times k$  занятых узлов. Координаты начала блоков – случайно сгенерированные равномерно распределённые целые числа. Блоки не пересекаются между собой. При моделировании используются периодические граничные условия. Для реализации математической модели разработан алгоритм максимальной упаковки блоков и написана компьютерная программа. Предложен метод оценивания значений максимального заполнения решетки  $k^3$ -мерами. Проведен ряд вычислительных экспериментов, в результате которых определены значения порогов джемминга для многих  $k$  из диапазона от 2 до 80. Получены оценки значения порога джемминга при  $k \rightarrow \infty$ . Результаты работы позволяют заключить, что порог джемминга в рассматриваемой модели не зависит от линейного размера решетки.

*Ключевые слова:* максимальная случайная упаковка; блок;  $k^3$ -мер; кубическая решетка; случайная последовательная адсорбция; теория перколяции.

### Введение

При моделировании задач, в которых дискретные или непрерывные системы заполняются случайным образом объектами, может возникнуть ситуация, когда свободное место в системе есть, но его недостаточно для размещения очередного объекта. Такое явление называется джеммингом (англ. jamming – «заклинивание»), а максимальная концентрация объектов в системе – порогом джемминга.

Впервые двумерная дискретная модель джемминга, в рамках которой в качестве осаждаемых объектов использовались квадраты ( $k^2$ -меры), была изучена М. Накамуры в 1986 году [1]. Им были найдены критические значения по максимальному заполнению при  $k = 1, 2, \dots, 6, 8, 10, 15, 20$  и  $30$  ( $k$  – длина стороны упаковываемых квадратов). Порог джемминга демонстрировал убывание при увеличении  $k$ . На основе значений при тех  $k$ , что удовлетворяли неравенству  $1/k \leq 0,1$  (то есть  $k = 10, 15, 20$  и  $30$ ), путем линейной экстраполяции была получена оценка порога джемминга при  $k \rightarrow \infty$ :  $p_{jam, k=\infty} = 0,564$ . Позже значения при малых  $k$  также использовались для объяснения того факта, что в случае бесконечных решеток при  $k \geq 4$  в двумерных системах из квадратов образуются кластеры (группы связанных между собой объектов) только конечного размера [2].

В 1991 году авторами работы [3] в рамках серии экспериментов, в которой поддерживалось соотношение  $L/k = 200$  ( $L$  – линейный размер решетки), были найдены значения порогов джемминга при  $k = 2, 3, 4, 5, 10, 20, 50$  и  $100$ . На основе значений была получена более точная оценка при  $k \rightarrow \infty$ , чем у Накамуры:  $p_{jam, k=\infty} = 0,5620 \pm 0,0002$ .

В исследовании 2019 года [4] было изучено более подробно взаимодействие между перколяцией и джеммингом  $k^2$ -меров на квадратной решетке. Перколяция означает

протекание по некоторому непрерывному пути, состоящему из рядом расположенных объектов. Под порогом перколяции понимается концентрация объектов на решетке, при которой с вероятностью 0,5 из объектов возникает непрерывный путь, пронизывающий всю систему. Авторы провели вычислительные эксперименты с большим соотношением  $L/k$ , определили значения порогов перколяции при  $k = 2$  и  $3$ , порогов джемминга для многих  $k$  из диапазона от 2 до 100 и резюмировали, что их заключения полностью согласуются с выводами предшествующих работ других исследователей.

Трехмерные дискретные модели перколяции и джемминга блоков ( $k^3$ -меров) были исследованы в [5]. Авторы работы получили оценки порогов перколяции при  $k = 2, 3, \dots, 16$  и оценки порогов джемминга при  $k = 2, 3, \dots, 20, 25, 30$  и  $40$ . Было установлено, что в бесконечных системах при  $k \geq 17$  перколяция не наблюдается, так как необходимая для этого концентрация объектов на решетке больше, чем максимально возможная. Дополнительно авторы сделали выводы касательно джемминга различных объектов в зависимости от их формы на кубической решетке. Для сравнения были взяты линейные  $k$ -меры (объекты типа  $k \times 1 \times 1$ ),  $k^2$ -меры и  $k^3$ -меры. Оказалось, что в рассматриваемом диапазоне ( $2 \leq k \leq 40$ ) блоки наименее компактно заполняют решетку, однако при  $k \rightarrow \infty$  оценки порогов джемминга получились следующие:  $p_{jam, k=\infty} = 0,4045 \pm 0,0019$  для  $k$ -меров [6],  $p_{jam, k=\infty} = 0,4285 \pm 0,0006$  для  $k^2$ -меров [7] и  $p_{jam, k=\infty} = 0,4204 \pm 0,0009$  для  $k^3$ -меров [5].

Особый интерес представляют результаты из статьи 2016 года [8], так как в ней были исследованы различные трехмерные континуальные модели джемминга  $k^2$ -меров и  $k^3$ -меров. Авторы получили следующие оценки максимального заполнения трехмерной системы:  $p_{jam, k=\infty} = 0,422429 \pm 0,000054$  для ориентированных блоков (выравненных вдоль выбранного направления),  $p_{jam, k=\infty} = 0,3686 \pm 0,0015$  для блоков со случайной ориентацией и  $p_{jam, k=\infty} = 0,3652 \pm 0,0010$  для квадратов со случайной ориентацией. Распределение ориентированных блоков в континуальной получается аналогичное тому, которое можно наблюдать в модели дискретной. Значения порогов джемминга для дискретной [5] и континуальной [8] модели очень близки.

Перколяционные задачи, а также задачи максимальной упаковки интересны исследователям в силу большого спектра их практического применения. С помощью моделей перколяции и джемминга различных объектов можно исследовать структуру и свойства композитов [11–15], изучать фильтрационные свойства пористых сред [16] и др.

В данной работе предложена и исследована математическая модель максимальной случайной упаковки блоков на кубической дискретной решетке. В отличие от вышеописанных работ, для предложенной авторами модели был проведен ряд вычислительных экспериментов для более широкого диапазона значений  $k$  с большим количеством испытаний; представлен метод оценки значения порога джемминга, отличающийся от стандартного. Подходы разработанного авторами эффективного алгоритма максимальной упаковки блоков на кубической решетке могут быть использованы для изучения других задач случайной максимальной упаковки. Модель может быть использована для оценки пористости монодисперсных сред, в частности кварцевого песка. Предполагается, что пористость песка будет соответствовать объему незаполненных  $k^3$ -мерами пустот.

## 1. Методика моделирования

Кубическая решетка состоит из свободных и занятых узлов (ячеек). Размер ячейки является условной единицей измерения. Блок ( $k^3$ -мер) с длиной стороны  $k$  представляет собой на решетке  $k \times k \times k$  занятых ячеек – рис. 1. Координаты начала блоков – случайно сгенерированные равномерно распределённые целые числа. Нача-

лом блока является узел с первой вершиной (на рис. 1, к примеру, у блока следующие координаты начала:  $(1, 1, 1)$ ). Блоки случайным образом равномерно распределены на всей решетке при условии, что не могут пересекаться между собой. Используются периодические граничные условия, то есть каждый блок размещается в системе с периодом, равным  $L$  (по всем трем направлениям).

Математически модель можно представить в виде:

$$M = \langle L, W_n, k, N \rangle,$$

где  $L$  – линейный размер кубической решетки,  $W_n = \{x_i, y_i, z_i\}, i = \overline{1, n}$  – множество троек координат начала блоков ( $n$  – количество блоков в системе),  $k$  – длина стороны блоков,  $N$  – количество независимых испытаний.

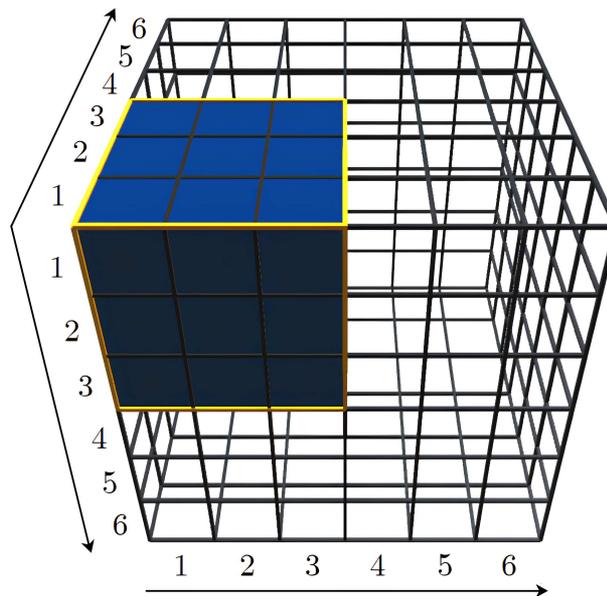


Рис. 1. Размещение  $3^3$ -мера на кубической решетке,  $L = 6$

Для максимальной упаковки блоков разработан эффективный алгоритм, который является улучшенной версией из статей [9, 10]. Он состоит из трех главных частей (пункты 2-4 ниже): насыщения решетки блоками произвольным образом до определенного момента, формирования множества из свободного пространства в системе, которое еще можно заполнить блоками, и финальной упаковки до максимальной концентрации на основе произвольного перебора всех позиций для размещения из ранее сформированного множества свободных мест. Более детальное описание алгоритма:

1. Все узлы решетки свободны, их количество равно  $L \times L \times L$ . Задается первоначальное количество попыток упаковки *NumOfAttempts*, которое некоторым образом зависит от входных параметров исследуемой модели:  $L$  и  $k$ . Количество упакованных блоков (*NumOfPackedBlocks*) равно нулю.
2. Для каждого  $i = 1, 2, \dots, \text{NumOfAttempts}$  производится попытка упаковать блок со случайно сгенерированными координатами первой вершины  $x, y$  и  $z$ , где  $1 \leq x, y, z \leq L$ . Для этого, если текущий узел решетки  $[x][y][z]$  не занят, рассматриваются узлы  $[x+k][y][z]$ ,  $[x][y+k][z]$ ,  $[x][y][z+k]$ ,  $[x+k][y+k][z]$ ,  $[x+k][y][z+k]$ ,  $[x][y+k][z+k]$  и  $[x+k][y+k][z+k]$ . Причем если  $x+k > L$ , то

вместо узла  $[x + k][\dots][\dots]$  рассматривается узел  $[x + k - L][\dots][\dots]$  и аналогично в случае  $y + k > L$  и  $z + k > L$  – описанным образом происходит учет периодических граничных условий. Если при проверке узлы в остальных вершинах блока оказываются также свободными, то все  $k \times k \times k$  узлов, образующих блок, помечаются как занятые, блок считается упакованным,  $NumOfPackedBlocks$  увеличивается на единицу.

3. Создается список для хранения координат –  $CrdForPack$ , элементами которого являются структуры, содержащие 3 поля:  $x$ ,  $y$  и  $z$ . В цикле каждый узел решетки проверяется, является ли он свободным. Если текущий узел свободен (потенциально первая вершина блока), то производится дополнительная проверка еще 7-ми узлов – остальных вершин (как в пункте 2). Если получается так, что остальные вершины также оказываются свободными, то координаты текущего узла помещаются в список  $CrdForPack$ .
4.  $CrdForPack.Count$  – количество элементов в списке  $CrdForPack$ . Для каждого  $i = 1, 2, \dots, CrdForPack.Count$  произвольным образом из списка  $CrdForPack$  извлекается элемент от  $CrdForPack[0]$  до  $CrdForPack[CrdForPack.Count - i]$  включительно под номером  $NumOfCrd$ . Далее производится попытка упаковать блок с первой вершиной в узле с координатами  $CrdForPack[NumOfCrd]$  по тому же принципу, что и в пункте 2. Элемент списка  $CrdForPack$  под номером  $NumOfCrd$  меняется местами с элементом под номером  $CrdForPack.Count - i$ .
5. Итоговая концентрация блоков равна  $p = NumOfPackedBlocks \times k^3 / L^3$ .

Пример кубической решетки, которая максимально заполнена блоками, представлен на рис. 2.

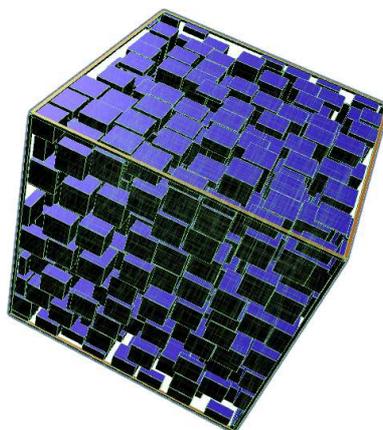


Рис. 2. Джемминг  $100^3$ -меров на кубической решетке,  $L = 1000$

Следует подчеркнуть, что для размещения одного блока на кубической решетке достаточно проверить всего 8 узлов, которые являются его вершинами, и удостовериться, что они свободны. В связи с этим упаковка блоков получается гораздо проще и вычислительно быстрее в сравнении с упаковкой других объектов, например,  $k$ -меров (при  $k \geq 9$ ), так как для размещения  $k$ -мера требуется проверить  $k$  узлов (если речь идет о неупорядоченной упаковке).

При проведении длительных вычислительных экспериментов (например, когда моделируются системы с большим линейным размером) важным является нахождение оптимального значения параметра *NumOfAttempts*. Это способствует минимизации как времени проведения поставленных экспериментов, так и расхода дополнительной оперативной памяти, требуемой в процессе упаковки списку *CrdForPack*. Рекомендуемое значение параметра *NumOfAttempts* равно  $L^3/k^3$  (количество блоков, теоретически уместяющихся при неслучайной упаковке на решетке).

Для реализации предложенной модели была написана компьютерная программа на языке С#. Входные данные:  $L, k$  и  $N$ . Алгоритм работы заключается в том, что проводится  $N$  независимых испытаний, в каждом из которых формируется трехмерная система, максимально заполненная блоками. Результатом работы программы является текстовый файл с данными по полученной концентрации блоков для заданного набора параметров модели:  $p_1, p_2, \dots, p_N$ . Плотность вероятности результирующих данных имеет вид нормального распределения, поэтому в этой статье предлагается оценивать значение порога джемминга (подробное описание стандартного метода оценки можно найти, например, в [6]) по формуле:

$$p_{jam} = \bar{p} \pm t_\gamma \frac{S}{\sqrt{N}}, \quad (1)$$

где  $\bar{p} = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N p_i$  – среднее значение данных,  $t_\gamma$  – коэффициент Стьюдента ( $t_\gamma = 2,58$

при надежности  $\gamma = 0,99$ ),  $S = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (p_i - \bar{p})^2}$  – исправленное среднеквадратическое отклонение,  $N$  – объем данных (количество проведенных независимых испытаний в поставленном эксперименте).

При моделировании значения  $N$  были выбраны таким образом, чтобы один эксперимент проводился на стационарном компьютере с процессором Intel Core i7-8700 (6x2, 3,20 ГГц) и 16 ГБ оперативной памяти DDR4 за удовлетворительное время (от нескольких часов до нескольких дней).

## 2. Результаты моделирования

В ходе компьютерного моделирования определены значения порогов джемминга при  $k = 2$  для различных длин решеток (табл. 1). Значения совпали с точностью до 5 знаков. Это говорит о том, что порог джемминга в рассматриваемой модели не зависит от длины решетки.

Наиболее точная оценка порога джемминга при  $k = 2$  содержится в последней строке табл. 1. Отметим, что в пределах погрешности это значение совпадает с оценкой из [5], которая равна  $p_{jam, k=2} = 0,645 \pm 0,004$ . В ходе моделирования также найдены значения порогов джемминга при различных значениях  $k$ . В табл. 2 приведены результаты экспериментов при  $k = 3, 4, \dots, 20$ , в которых поддерживалось отношение линейного размера решетки к длине стороны блоков, равное 80. Такое соотношение  $L$  и  $k$  в рамках серии экспериментов означает, что эксперимент при  $k = 3$  был проведен на решетке размера  $L = 240$ , а при  $k = 20$  на решетке размера  $L = 1600$  соответственно. Каждый эксперимент состоял из 1000 независимых испытаний.

Поддержание фиксированного соотношения  $L/k$  при проведении вычислительных экспериментов позволяет получать итоговые значения с приблизительно одинаковой точностью. В ином случае, если проводить эксперименты при различных  $k$  для конкретного линейного размера решетки, то точность значений будет уменьшаться (с увеличением  $k$ ). Таким недостатком обладают результаты из [9, 10].

Таблица 1

Значения порогов джемминга при  $k = 2$  для различных  $L$

$L$	$p_{jam}$	$N$
100	$0,6453440 \pm 0,0000018$	1 000 000
200	$0,6453462 \pm 0,0000029$	50 000
300	$0,6453438 \pm 0,0000035$	10 000
400	$0,6453452 \pm 0,0000023$	10 000
500	$0,6453455 \pm 0,0000028$	5 000
600	$0,6453454 \pm 0,0000026$	5 000
700	$0,6453463 \pm 0,0000025$	5 000
800	$0,6453459 \pm 0,0000018$	2 000
900	$0,6453457 \pm 0,0000022$	1 000
1000	$0,6453448 \pm 0,0000019$	1 000
1500	$0,6453461 \pm 0,0000010$	1 000

Таблица 2

Значения порогов джемминга при  $k = 3, 4, \dots, 20$

$k$	$p_{jam}$
3	$0,559221 \pm 0,000029$
4	$0,520908 \pm 0,000026$
5	$0,499287 \pm 0,000027$
6	$0,485402 \pm 0,000026$
7	$0,475755 \pm 0,000027$
8	$0,468653 \pm 0,000026$
9	$0,463209 \pm 0,000026$
10	$0,458914 \pm 0,000025$
11	$0,455413 \pm 0,000025$
12	$0,452519 \pm 0,000026$
13	$0,450096 \pm 0,000025$
14	$0,448052 \pm 0,000025$
15	$0,446255 \pm 0,000026$
16	$0,444694 \pm 0,000025$
17	$0,443325 \pm 0,000026$
18	$0,442112 \pm 0,000026$
19	$0,441033 \pm 0,000025$
20	$0,440066 \pm 0,000026$

В табл. 3 приведены результаты экспериментов при  $k = 21, 22, \dots, 40$ . В этой серии экспериментов точность значений получилась ниже, чем в предыдущей, потому что здесь поддерживалось соотношение  $L/k = 40$ . Каждый эксперимент состоял также из 1000 независимых испытаний.

Значения порогов джемминга при  $k = 3, 4, \dots, 20, 25, 30$  и  $40$  также совпадают в пределах погрешности со значениями из [5] (авторами не найдены промежуточные значения при  $k = 21, 22, 23, 24, 26, 27, 28, 29, 31, \dots, 39$ ). В той статье авторы обнаружили, что порог джемминга почти линейно зависит от  $1/k$  при  $k \geq 5$ . Они

произвели линейную экстраполяцию значений при  $5 \leq k \leq 40$  и получили оценку  $p_{jam, k=\infty} = 0,4204 \pm 0,0009$ . В табл. 4 приведены результаты экспериментов при  $41 \leq k \leq 80$ . Параметры этой серии экспериментов следующие:  $L/k = 20$ ,  $N = 1000$ .

**Таблица 3**

Значения порогов джемминга при  $k = 21, 22, \dots, 40$

$k$	$p_{jam}$
21	$0,439139 \pm 0,000071$
22	$0,438426 \pm 0,000074$
23	$0,437703 \pm 0,000072$
24	$0,437052 \pm 0,000073$
25	$0,436421 \pm 0,000070$
26	$0,435766 \pm 0,000071$
27	$0,435319 \pm 0,000070$
28	$0,434805 \pm 0,000071$
29	$0,434467 \pm 0,000070$
30	$0,433962 \pm 0,000071$
31	$0,433610 \pm 0,000073$
32	$0,433288 \pm 0,000069$
33	$0,432892 \pm 0,000071$
34	$0,432604 \pm 0,000068$
35	$0,432322 \pm 0,000072$
36	$0,432025 \pm 0,000072$
37	$0,431678 \pm 0,000070$
38	$0,431451 \pm 0,000069$
39	$0,431238 \pm 0,000071$
40	$0,431005 \pm 0,000071$

**Таблица 4**

Значения порогов джемминга при  $41 \leq k \leq 80$

$k$	$p_{jam}$
41	$0,43079 \pm 0,00021$
42	$0,43065 \pm 0,00020$
43	$0,43035 \pm 0,00021$
44	$0,43015 \pm 0,00020$
45	$0,42993 \pm 0,00019$
46	$0,42978 \pm 0,00020$
47	$0,42961 \pm 0,00020$
48	$0,42956 \pm 0,00019$
49	$0,42943 \pm 0,00020$
50	$0,42910 \pm 0,00019$
60	$0,42809 \pm 0,00020$
70	$0,42724 \pm 0,00020$
80	$0,42663 \pm 0,00020$

Зависимость порога джемминга от  $k$  изображена на рис. 3. На нем представлены все полученные значения при  $2 \leq k \leq 80$  и их аппроксимация. Как можно заметить, порог джемминга монотонно убывает при увеличении  $k$ .

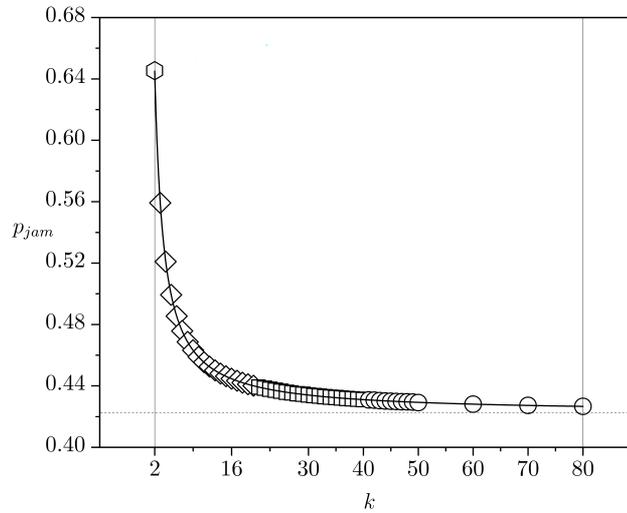


Рис. 3. Аппроксимация порогов джемминга при  $2 \leq k \leq 80$  функцией (2)

Аппроксимируются значения достаточно хорошо функцией следующего вида:

$$p_{jam}(k) = A + B/k + C/k^2, \quad (2)$$

где  $A = 0,4225 \pm 0,0001$ ,  $B = 0,343 \pm 0,001$ ,  $C = 0,206 \pm 0,001$ .

Из (2) может быть получена оценка значения порога джемминга при  $k \rightarrow \infty$ :  $p_{jam, k=\infty} = A = 0,4225 \pm 0,0001$  (пунктирная линия на рис. 3). Примечательно, что если экстраполировать значения порогов джемминга при  $10 \leq k \leq 80$  от  $k^{-1/0,95}$ , то получится та же оценка – рис. 4.

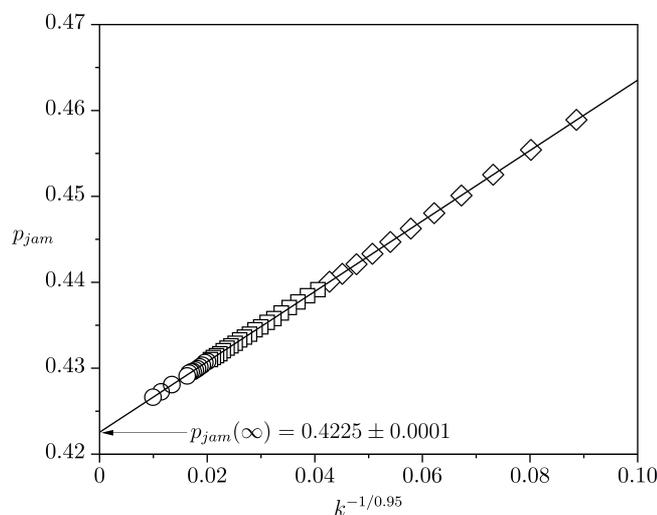


Рис. 4. Экстраполяция порогов джемминга при  $10 \leq k \leq 80$

## Заключение

В работе рассмотрена дискретная модель джемминга блоков на кубической решетке, основные результаты заключаются в следующем:

1. Установлено, что порог джемминга в рассматриваемой модели не зависит от линейного размера решетки.
2. Определены значения по максимальной концентрации блоков при различных  $k$  в диапазоне от 2 до 80.
3. Получены оценки значения порога джемминга при  $k \rightarrow \infty$ .

В дальнейшем авторами планируется построение и изучение трехмерной модели перколяции блоков. Помимо классических расчетов по определению критической концентрации, при которой объекты в системе образуют перколяционный кластер, дополнительно предполагается проанализировать, как меняется характер проводимости свободного пространства от концентрации объектов. На данный момент неизвестно, при каких обстоятельствах (параметрах модели) проводящим в системе, которая частично или максимально заполнена блоками, является пространство, состоящее из незанятых участков.

## Литература

1. Nakamura, M. Random Sequential Packing in Square Cellular Structures / M. Nakamura // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 1986. – V. 19, № 3. – P. 2345–2351.
2. Nakamura, M. Percolational and Fractal Property of Random Sequential Packing Patterns in Square Cellular Structures / M. Nakamura // Physical Review A. – 1987. – V. 36, № 5. – P. 2384–2388.
3. Privman, V. Continuum limit in Random Sequential Adsorption / V. Privman, Jian-Sheng Wang, P. Nielaba // Physical Review B. – 1991. – V. 43, № 4. – P. 3366–3372.
4. Ramirez-Pastor, A.J. Jamming and Percolation for Deposition of  $k^2$ -mers on Square Lattices: A Monte Carlo Simulation Study / A.J. Ramirez-Pastor, P.M. Centres, E.E. Vogel, J.F. Valdes // Physical Review E. – 2019. – V. 99, № 4. – 11 p.
5. Buchini Labayen, A.C. Jamming and Percolation of  $k^3$ -mers on Simple Cubic Lattices / A.C. Buchini Labayen, P.M. Centres, P.M. Pasinetti, A.J. Ramirez-Pastor // Physical Review E. – 2019. – V. 100, № 2. – 9 p.
6. Garcia, G.D. Random Sequential Adsorption of Straight Rigid Rods on a Simple Cubic Lattice / G.D. Garcia, F.O. Sanchez-Varretti, P.M. Centres, A.J. Ramirez-Pastor // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2015. – V. 436. – P. 558–564.
7. Pasinetti, P.M. Jamming and Percolation of  $k^2$ -mers on Simple Cubic Lattices / P.M. Pasinetti, P.M. Centres, A.J. Ramirez-Pastor // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. – 2019. – V. 2019, № 10. – 16 p.
8. Ciesla, M., Kubala P. Random sequential Adsorption of Cubes / M.Ciesla, P. Kubala // Journal of Chemical Physics. – 2018. – V. 148, № 2. – 5 p.
9. Боков, К.А. Компьютерное моделирование джемминга для перколяционной задачи Накамуры / К.А. Боков, М.М. Бузмакова // Математические методы и информационно-технические средства: материалы XV Всероссийской научно-практической конференции. – Пермь, 2019. – С. 27–31.
10. Боков К.А., Бузмакова М.М. Джемминг  $k$ -меров разной формы на квадратной решетке / К.А. Боков, М.М. Бузмакова // Математика и междисциплинарные исследования – 2019: материалы Всероссийской научно-практической конференции молодых ученых с международным участием. – Пермь, 2019. – С. 50–54.

11. Bokov, K.A. The Modeling of the Polymer's Thin Film, Modified by Carbon Nanotubes, this Using of the Percolation Theory's Methods / K.A. Bokov, M.M. Buzmakova // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – V. 1189, № 1. – Article ID: 012012. – 5 p.
12. Bokov, K.A. The Percolation Model of the Structure of the Polymer Nanocomposite, Containing the Carbon Canotubes, with the Orient Factor Availability / K.A. Bokov, M.M. Buzmakova // Journal of Physics: Conference Series. – 2020. – V. 1439. – 5 p.
13. Likhomanova, P.A. Modeling of Particle Diffusion in Heterogeneous Structure Near to the Percolation Threshold / P.A. Likhomanova, I.V. Tronin, A.M. Grekhov, Yu.S. Eremin // Physics Procedia. – 2015. – V. 72. – P. 42–46.
14. Likhomanova, P.A. Simulation of the Electrical Conductivity in Systems of Carbon Nanotubes / P.A. Likhomanova, K.Yu. Khromov // Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2020. – V. 14, № 5. – P. 1057–1060.
15. Larin, S.V. Multiscale Modeling of Electrical Conductivity of R-BAPB Polyimide Plus Carbon Nanotubes Nanocomposites / S.V. Larin, S.V. Lyulin, P.A. Likhomanova, K.Yu. Khromov, A.A. Knizhnik, B.V. Potapkin // Physical Review Materials. – 2021. – V. 5, № 6. – 15 p.
16. Pulido-Reyes, G. Nanoplastics Removal During Drinking Water Treatment: Laboratory- and Pilot-Scale Experiments and Modeling / G. Pulido-Reyes, L. Magherini, C. Bianco, R. Sethi, U. Gunten, R. Kaegi, D.M. Mitrano // Journal of Hazardous Materials. – 2022. – V. 436. – 13 p.

Кирилл Александрович Эберт, аспирант, кафедра прикладной математики и информатики, Пермский государственный национальный исследовательский университет (г. Пермь, Российская Федерация), [sirieeel@rambler.ru](mailto:sirieeel@rambler.ru).

Мария Михайловна Бузмакова, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра прикладной математики и информатики, Пермский государственный национальный исследовательский университет (г. Пермь, Российская Федерация), [mariya\\_nazarova@mail.ru](mailto:mariya_nazarova@mail.ru).

Сергей Владимирович Русаков, доктор физико-математических наук, профессор, кафедра прикладной математики и информатики, Пермский государственный национальный исследовательский университет (г. Пермь, Российская Федерация), [rusakov@psu.ru](mailto:rusakov@psu.ru).

*Поступила в редакцию 7 мая 2024 г.*

---

MSC 65C05, 65C20, 82B41, 82B43

DOI: 10.14529/mmp240407

## JAMMING COVERAGE OF BLOCKS ON A CUBIC LATTICE

*K.A. Ebert<sup>1</sup>, M.M. Buzmakova<sup>1</sup>, S.V. Rusakov<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Perm State University, Perm, Russian Federation

E-mail: [sirieeel@rambler.ru](mailto:sirieeel@rambler.ru), [mariya\\_nazarova@mail.ru](mailto:mariya_nazarova@mail.ru), [rusakov@psu.ru](mailto:rusakov@psu.ru)

In this paper the discrete block jamming model on a cubic lattice is investigated by means of mathematical and computer simulation. A block ( $k^3$ -mer) with side length  $k$  represents  $k \times k \times k$  occupied nodes on the lattice. The start coordinates of the blocks are randomly generated uniformly distributed integers. The blocks do not overlap with each other. Periodic boundary conditions are used in the modelling. A blocks maximum packing algorithm is developed and a computer program is written to implement the mathematical model. A method for estimating of critical values by maximum lattice fill is proposed. The values of the jamming thresholds for many  $k$  in the range from 2 to 80 were determined. Several estimates of the jamming threshold at  $k \rightarrow \infty$  are obtained. The results of the paper suggest that the jamming threshold does not depend on the linear size of the lattice.

*Keywords: jamming coverage; block;  $k^3$ -mer; cubic lattice; random sequential adsorption; percolation theory.*

## References

1. Nakamura M. Random Sequential Packing in Square Cellular Structures. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 1986, vol. 19, no. 3, pp. 2345–2351. DOI: 10.1088/0305-4470/19/12/020
2. Nakamura M. Percolational and Fractal Property of Random Sequential Packing Patterns in Square Cellular Structures. *Physical Review A*, 1987, vol. 36, no. 5, pp. 2384–2388. DOI: 10.1103/PhysRevA.36.2384
3. Privman V., Wang Jian-Sheng, Nielaba P. Continuum Limit in Random Sequential Adsorption. *Physical Review B*, 1991, vol. 43, no. 4, pp. 3366–3372. DOI: 10.1103/PhysRevB.43.3366
4. Ramirez-Pastor A.J., Centres P.M., Vogel E.E., Valdes J.F. Jamming and Percolation for Deposition of  $k^2$ -mers on Square Lattices: A Monte Carlo Simulation Study. *Physical Review E*, 2019, vol. 99, no. 4, 11 p. DOI: 10.1103/PhysRevE.99.042131
5. Buchini Labayen A.C., Centres P.M., Pasinetti P.M., Ramirez-Pastor A.J. Jamming and Percolation of  $k^3$ -mers on Simple Cubic Lattices. *Physical Review E*, 2019, vol. 100, no. 2, 9 p. DOI: 10.1103/PhysRevE.100.022136
6. Garcia G.D., Sanchez-Varretti F.O., Centres P.M., Ramirez-Pastor A.J. Random Sequential Adsorption of Straight Rigid Rods on a Simple Cubic Lattice. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2015, vol. 436, pp. 558–564. DOI: 10.1016/j.physa.2015.05.073
7. Pasinetti P.M., Centres P.M., Ramirez-Pastor A.J. Jamming and Percolation of  $k^2$ -mers on Simple Cubic Lattices. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2019, vol. 2019, no. 10, 16 p. DOI: 10.1088/1742-5468/ab409c
8. Ciesla M., Kubala P. Random Sequential Adsorption of Cubes. *Journal of Chemical Physics*, 2018, vol. 148, no. 2, 5 p. DOI: 10.1063/1.5007319
9. Bokov K.A., Buzmakova M.M. [Computer Simulation of Jamming for the Nakamura Percolation Problem]. *Matematicheskie metody i informacionno-texnicheskie sredstva: materialy XV Vserossijskoj nauchno-prakticheskoy konferencii*, Permian, 2019, pp. 27–31. (in Russian)
10. Bokov K.A., Buzmakova M.M. The Jamming of the  $k$ -Meres of Different Form on the Square Lattice. *Matematika i mezhdisciplinarnye issledovaniya – 2019: materialy Vserossijskoj nauchno-prakticheskoy konferencii molodyx uchenyx s mezhdunarodnym uchastiem*, Permian, 2019, pp. 50–54. (in Russian)
11. Bokov K.A., Buzmakova M.M. The Modeling of the Polymer’s Thin Film, Modified by Carbon Nanotubes, this Using of the Percolation Theory’s Methods. *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, vol. 1189, 5 p. DOI: 10.1088/1742-6596/1189/1/012012
12. Bokov K.A., Buzmakova M.M. The Percolation Model of the Structure of the Polymer Nanocomposite, Containing the Carbon Canotubes, with the Orient Factor Availability. *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1439, 5 p. DOI: 10.1088/1742-6596/1439/1/012027
13. Likhomanova P.A., Tronin I.V., Grekhov A.M., Eremin Yu.S. Modeling of Particle Diffusion in Heterogeneous Structure Near to the Percolation Threshold. *Physics Procedia*, 2015, vol. 72, pp. 42–46. DOI: 10.1016/j.phpro.2015.09.010
14. Likhomanova P.A., Khromov K.Yu. Simulation of the Electrical Conductivity in Systems of Carbon Nanotubes. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2020, vol. 14, no. 5, pp. 1057–1060. DOI: 10.1134/S102745102005033X
15. Larin S.V., Lyulin S.V., Likhomanova P.A., Khromov K.Yu., Knizhnik A.A., Potapkin B.V. Multiscale Modeling of Electrical Conductivity of R-BAPB Polyimide Plus Carbon Nanotubes Nanocomposites. *Physical Review Materials*, 2021, vol. 5, no. 6, 15 p. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.066002

16. Pulido-Reyes G., Magherini L., Bianco C., Sethi R., Gunten U., Kaegi R., Mitrano D.M. Nanoplastics Removal During Drinking Water Treatment: Laboratory- and Pilot-Scale Experiments and Modeling. *Journal of Hazardous Materials*, 2022, vol. 436, 13 p. DOI: 10.1103/10.1016/j.jhazmat.2022.129011

*Received May 7, 2024*