卒業論文
二成分剛体円盤のランダムパッキング

九州大学理学部物理学科４年
大久保 毅
指導教官 小田垣 孝

平成15年3月23日

目 次

1 はじめに **1**

2 ランダムパッキング **1**

3 シミュレーションモデル **2**
3.1 Drop and roll 法 2
3.2 計算に関わる量の定義 4
3.3 シミュレーションのパラメタ 5
3.4 充填率と系のサイズ 5

4 シミュレーション結果 **6**
4.1 充填率 7
4.2 平均配位数 7
4.3 パッキングの状態 11

5 充填率の解析 **12**
5.1 一成分近傍での振る舞い 12
5.1.1 $n \sim 0$ 14
5.1.2 $n \sim 1$ 14
5.2 コンタクトネットワークによる解析 ([4] より引用) 15
5.2.1 コンタクトネットワークで表す充填率 16
5.2.2 充填率の見積もり 18
5.2.3 結果 19
5.3 radical tessellation による解析 19
5.3.1 radical tessellation と充填率 20
5.3.2 充填率の見積もり 21
5.3.3 シミュレーションとの比較 22

6 より進んだ解析に向けて **23**
6.1 平均 neighbor 数 24
6.2 平均ボンド長 25

7 まとめ **29**

8 謝辞 **30**

1　はじめに

二次元平面での円盤のパッキング問題は長い間研究されており、古くは１７世紀初頭、Keplar によって雪の結晶の形を説明するためにも用いられた。三次元球のパッキングは、粒子の堆積や多孔性物質、アモルファスといった様々な物理現象のモデルとして用いられており、二次元でのパッキングは三次元系を理解するための第一歩として研究される他、種々の表面に対する分子の吸着といった二次元的だとみなせる現象のモデルとしても用いられている。

種々のパッキング問題の内、本研究では、二種類の大きさを持つ円盤をパッキングした時の性質を、充填率に注目して調べた。同様の研究は、これまでにもいくつか行なわれているが [1]-[4]、充填率と円盤の半径比・濃度との関係を完全には明らかにできていない。そこで今回は、二成分系の半径比と濃度に応じて、充填率がどのように変わるのかを明らかにする事を目標に研究を行なった。

2　ランダムパッキング

物を箱などに詰め込む時には、きちんと並べて秩序正しく詰めるだけでなく、無秩序に詰めることもできる。みかんの箱を開いてみるとみかんが乱雑にぎっしりつまっているのが分かるだろう。このように、物を乱雑に充填する事を、ランダムパッキングと呼ぶ。以下では、二次元平面に円盤をランダムパッキングすることを考えるが、一般には、円盤や球などの等方的な形をした物だけでなく、様々な形状の物を混ぜ合わせたランダムパッキングも考える事ができる。

本研究では、 円盤が “ぎっちり” とランダムパッキングされた系を対象に、どの程度円盤が “ぎっちり” 詰まっているかを考える。ここで言う “ぎっちり” とは、注目してる物を動かそうとする時には、必ず他の物も動かす必要がある状態の事で、 *jammed packing* と呼ばれる事もある。また、どの程度 “ぎっちり” 詰まっているかを表す量として、

$$\phi \equiv \frac{\text{系に存在する全円盤の面積}}{\text{系の面積}} \tag{2.1}$$

で定義される、系の充填率 ϕ を用いる事にする。

二次元平面に等しい大きさの円盤を詰める時、最も充填率が大きくなるのは、円盤の直径を一辺とする三角格子状に円盤の中心を配置した場

合であることが知られている。この時の充填率は $\phi = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \simeq 0.907$ である。一方、今までの研究より、一成分でのランダムパッキングでは充填率 (の上限) が 0.82 程度であると報告されている [2]-[4]。しかし、この値はまだ不確定であり、ランダムパッキングを生成する方法に依存すると考えられている。計算機でのシミュレーションから、パッキングの秩序が少し増せば、充填率も少し増加できるとの報告もされており [5]、どうやら充填率はパッキングのランダムさに依存してしまうものらしい。

充填率が系のランダムさによって変わる事を考慮した上で、定義の曖昧さをなくした状態として *Maximally random jammed state* **(MRJ)** という概念が S.Torquato らによって提案されている [5]。MRJ は、jammed packing のうち、最も低い秩序を持つ状態として定義され、この秩序は適当なオーダーパラメタで測る。しかし、MRJ を決めるために用いるオーダーパラメタについては、まだ探索が続いており、系の秩序を統一的に測れるオーダーパラメタは見つかっていない [5]-[7]。

上で述べたように充填率は系のランダムさに依存してしまうため、本来は系の秩序をきちんと調べる必要がある。しかし、本研究では、シミュレーションを通してパッキングのランダムさはほとんど同じであると信じて、秩序を定量的に調べることはせずに二成分系の半径比・濃度のみに注目して充填率の変化を調べた。

3 シミュレーションモデル

今回の研究では２次元の系に２種類の大きさを持つ円盤をランダムパッキングして充填率を調べた。系の水平方向の長さは L であり周期境界条件を与えた。また系の鉛直方向の長さは L よりも大きく取った。このような系に対して、一般に drop and roll と呼ばれている方法で円盤を充填した。この方法は系に一方向の弱い重力が働いている事を想定しており、この重力に従って円盤は１つ１つ順番に積み重なっていくことになる。

3.1 Drop and roll 法

円盤を充填する系は鉛直下向きに重力の働く２次元系である。１ステップ毎に、与えられた成分比に従って確率的に選ばれた大きさの円盤１個

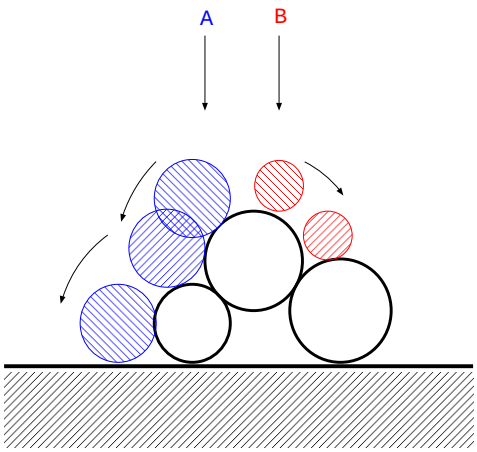

図 1: drop and roll 法による円盤落下の例

が、系最上部のランダムな位置[1]から重力に従って落下する (図 1)。

落下していく途中で既に系に存在している他の円盤に接触すると、降ってきた円盤は相手に接触したまま円周に沿って下方向に運動する。この運動は円盤がさらにもう一つの円盤と接触するか、または円盤の中心が接触している円盤の中心の高さと等しくなるまで続く。後者の場合、円盤は再び落下を開始することになる。一方、前者の場合は、降ってきた円盤の水平方向の座標とそれが接触している２つの円盤の水平方向の座標との位置関係により次の挙動が変わる。降ってきた円盤から見て、接触している２つの円盤が同じ側にあるときには、円盤は新しく接触した円盤に沿って再び回転運動をする。他方、２つの円盤が降ってきた円盤から見て左右両側に位置している時には、円盤はその位置で安定して固定される (図 1B)。

１つのステップは、円盤が系の最下部に到達するか (図 1A)、上のような安定の位置に固定されると終了する。一度固定された円盤は系の背景となり二度と動くことはない。以上のステップを繰り返し、積み重なった円盤が系の最上部に到達するとシミュレーションは終了する。

[1]水平方向の位置が $0 \sim L$ の範囲でランダムに選ばれる。

3.2 計算に関わる量の定義

半径 R_L の大きな円盤 (large disk) N_L 個と、半径 R_S の小さな円盤 (small disk) N_S 個を $L \times L$ の領域に充填した場合、系の充填率 ϕ は、

$$\phi = \frac{\pi(N_L R_L^2 + N_S R_S^2)}{L^2} \tag{3.1}$$

で与えられる。円盤の成分比と大きさの比に関して、面積分率 n と 半径比 r を

$$\begin{aligned} n &\equiv \frac{\text{全 small disk の面積}}{\text{全 disk の面積}} \\ &= \frac{N_S R_S^2}{N_L R_L^2 + N_S R_S^2} \end{aligned} \tag{3.2}$$

及び

$$\begin{aligned} r &\equiv \frac{\text{small disk の半径}}{\text{large disk の半径}} \\ &= \frac{R_S}{R_L} \end{aligned} \tag{3.3}$$

の様に定義する。ここで n は円盤の濃度

$$\begin{aligned} x &\equiv \frac{\text{small disk の個数}}{\text{全 disk の個数}} \\ &= \frac{N_S}{N_L + N_S} \end{aligned} \tag{3.4}$$

と

$$n = \frac{x r^2}{(1-x) + x r^2} \tag{3.5}$$

で表される関係にあり、逆に濃度 x は、 n と r を用いて

$$x = \frac{n}{r^2 + (1-r^2)n} \tag{3.6}$$

と書ける。

また、円盤に他の円盤が接触している事を**配位している**と表現し、平均配位数 z_m を

$$z_m \equiv \text{円盤に配位している円盤数の平均} \tag{3.7}$$

と定義する。同様にして、large disk の平均配位数 z_L と small disk の平均配位数 z_S をそれぞれ

$$z_L \equiv \text{large disk に配位している円盤数の平均}$$
$$z_S \equiv \text{small disk に配位している円盤数の平均}$$

で定義する。 z_L 、 z_S 及び z_m の間には、

$$z_m = (1-x)z_L + xz_S \tag{3.8}$$

の関係が成り立ち、一般に z_L と z_S は異なった値をとる。

3.3 シミュレーションのパラメタ

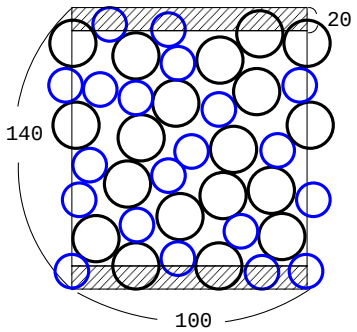

図 2: 系の模式図

シミュレーションは drop and doll 法により、large disk の直径 $2R_L$ を単位として 100×140 の大きさの領域に円盤を充填し、その中央部の 100×100 の領域について解析を行った (図 2)。

円盤の濃度は、$0 \leq n \leq 1$ の範囲で 0.02 毎に変化させ、半径比は $0.1 \leq r \leq 0.9$ の範囲を 0.1 刻みで調べた。濃度・半径比の各組についてシミュレーションは 20 回ずつ行い、平均配位数と系の充填率を 20 回の平均として求めた。

3.4 充填率と系のサイズ

過去の研究から、充填率と円盤を詰める領域の大きさには、領域が小さい場合に強い相関があることが知られている [3]。特に、同一半径の円

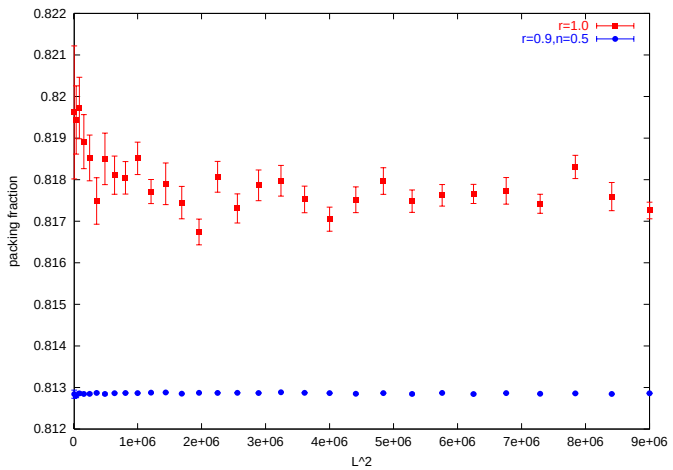

図 3: 充填率と系のサイズの関係。系の大きさの 2 乗を横軸に、充填率を縦軸にとってある。 赤い点は large disk のみを充填した場合、青い点は $r = 0.9$ 、$n = 0.5$ の場合。

盤をパッキングした場合は、二成分の場合に比べてより大きな系でないと、充填率が収束しないと言われている。

今回のシミュレーションモデルについて、このような、系の大きさと充填率の関係を調べたグラフが図 3 である。このグラフを見ると、確かに、一成分の場合には系が小さい領域で充填率が大きく、また、全体を通してその誤差が大きいことが分かる。一方、二成分の場合には、調べた領域では充填率がほぼ一定で、その誤差も小さい。

今回のシミュレーションでは系のサイズを 100×100 とした。large disk のみを詰めた場合、この領域にはおよそ 10^4 個の円盤が入る。系のサイズがこの大きさの場合は、図 3 の左端に対応しており、一成分に対しては系の大きさが十分だとは言えない。しかし、本研究では、二成分系の充填率が成分の半径比・濃度に応じてどのように変化するのかを調べたいので、一成分状態での充填率の誤差には目をつぶって、より短時間で計算できる系のサイズとして上記の値を選んだ。

4　シミュレーション結果

上記の条件でシミュレーションを行い、次の結果が得られた。

4.1 充填率

各半径比ごとに、充填率の面積分率に対する変化を表した物が図4、5である。これらのグラフから、半径比が小さい領域では充填率がsmall diskの増加に対して極大を持つ上に凸の振る舞いをし、逆に半径比が大きな領域では充填率は極小を持つ下に凸の振る舞いをすることが見てとれる。また、半径比が中間の値をとる時には、small diskが増えるにつれて、一度充填率減少してからある面積分率で増加に転じ、再びある点で減少し始めるという変化をしていることも分かる。全体的には、r が増加するにつれて極大の位置が n が大きい方にずれていき、それにつれて、n が小さい領域に極小が現れ始めるという傾向にあるといえる。

このような充填率の変化は、半径比が小さい領域では、large diskの構造のすき間にsmall diskが入り込むことでより密に詰まって充填率が増加し、逆に半径比が大きい領域では、large diskが作っている構造がわずかに大きさの違うsmall diskが混ざることで崩れてしまい、その分すき間が増えて充填率が減少する、と考えれば定性的に理解できる。

また、今回の結果では、$r = 0.1$、$n = 0.32$ で最大値 $\phi = 0.8534 \pm 0.0001$、$r = 0.5$、$n = 0.08$ で最小値 $\phi = 0.8094 \pm 0.0001$ を得た。

4.2 平均配位数

シミュレーションでは、充填率の他に平均配位数も調べた。図6は、円盤全体の平均配位数 z_m を表した物である。この図から分かるように、今回のシミュレーションで得られたランダムパッキングでは、z_m は半径比・濃度にほとんど依存せず、$z_m \simeq 4.0$ という値をとっている。

また、large disk及びsmall diskの平均配位数を調べたものが図7、8である。円盤の半径が大きいほど円周も長くなるので、一般に、small diskの割合が増えるほど z_L、z_S 共に増加する傾向がみられる。また半径比 r が小さいほど、二種の円盤で円周の差が大きくなるので、$r \sim 0$ ではsmall diskが増えるにつれて、z_L が非常に大きくなっている。

このような z_L、z_S の振る舞いは、G.C.Barkerらが用いた近似式でよく近似できる[3]。今回のシミュレーションモデルでは、円盤が安定な位置にある時、必ず円盤の下方向に二つ以上の円盤が配位していなければならない。この事を考慮した上で、large diskの平均配位数とsmall diskの平均配位数から、それぞれ最低限の値である2を引いたもの同士の比は、

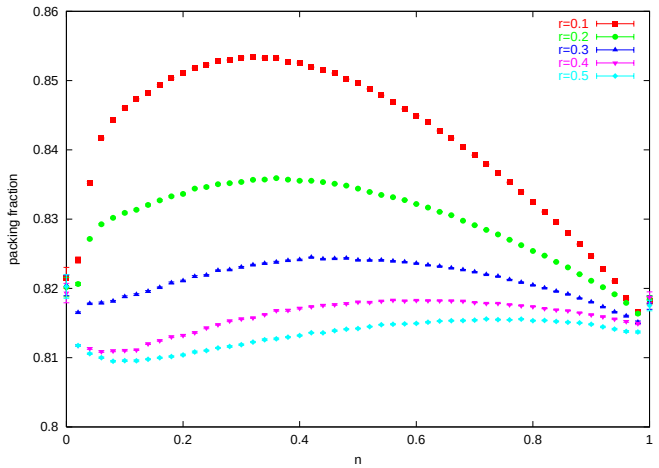

図 4: $r = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ の場合の充填率。横軸は面積分率 n 。

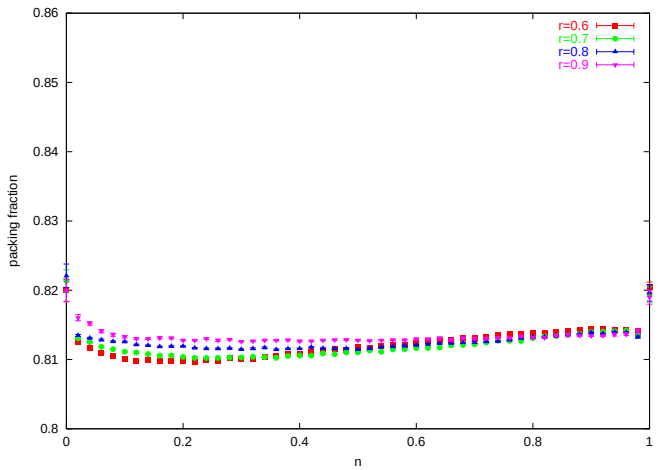

図 5: $r = 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$ の場合の充填率。横軸は面積分率 n 。

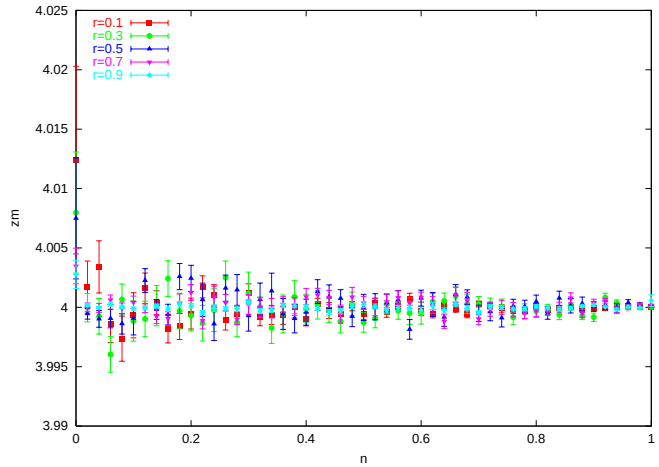

図 6: $r = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ の場合の平均配位数 z_m 。横軸は面積分率 n 。

円周の長さの比に等しいと仮定すると、

$$\frac{z_S - 2}{z_L - 2} = r \tag{4.1}$$

となる。また円盤全体の平均配位数 z_m は z_L、z_S を用いて、

$$z_m = (1 - x)z_L + xz_S \tag{4.2}$$

と書けるのでこれら二つの式から、

$$z_L = 2 + \frac{z_m - 2}{1 - x + xr} \tag{4.3}$$

$$z_S = 2 + \frac{(z_m - 2)r}{1 - x + xr} \tag{4.4}$$

を得る事ができる。

近似式 4.3、4.4 は、図 7、8 にシミュレーション結果と共に示してある。近似式は、ほぼシミュレーション結果とあっているが、$n \simeq 0$ での z_S 、$n \simeq 1$ での z_L でずれがやや大きくなっている。また、$r = 1$ の場合、シミュレーション結果と近似式の z_L が大きくずれているが、これは次に述べる、パッキングの不完全も影響していると考えられる。

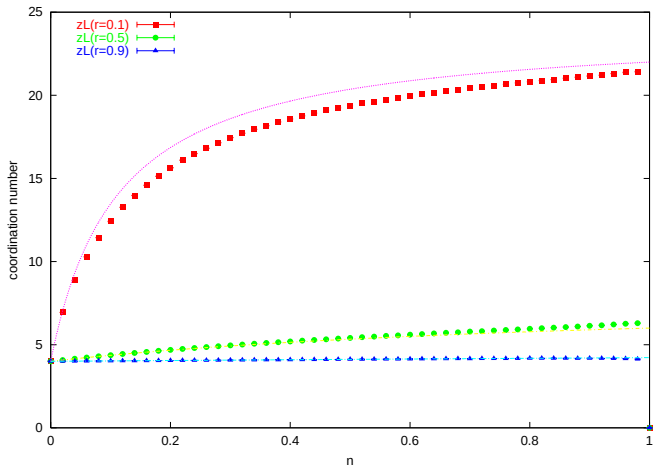

図 7: $r = 0.1, 0.5, 0.9$ に対する large disk の平均配位数 z_L。点線は近似式。

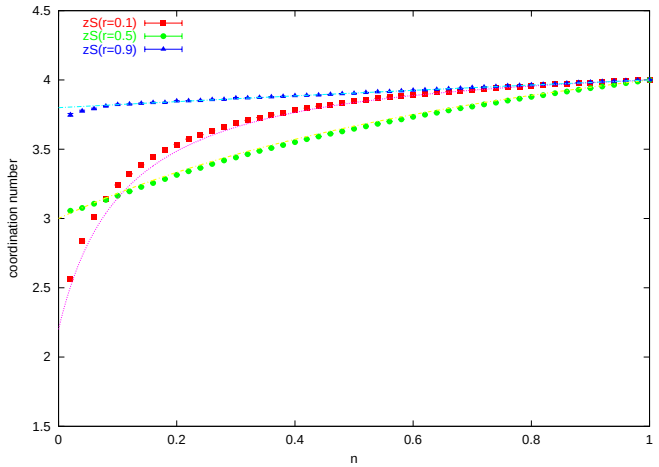

図 8: $r = 0.1, 0.5, 0.9$ に対する small disk の平均配位数 z_S。点線は近似式。

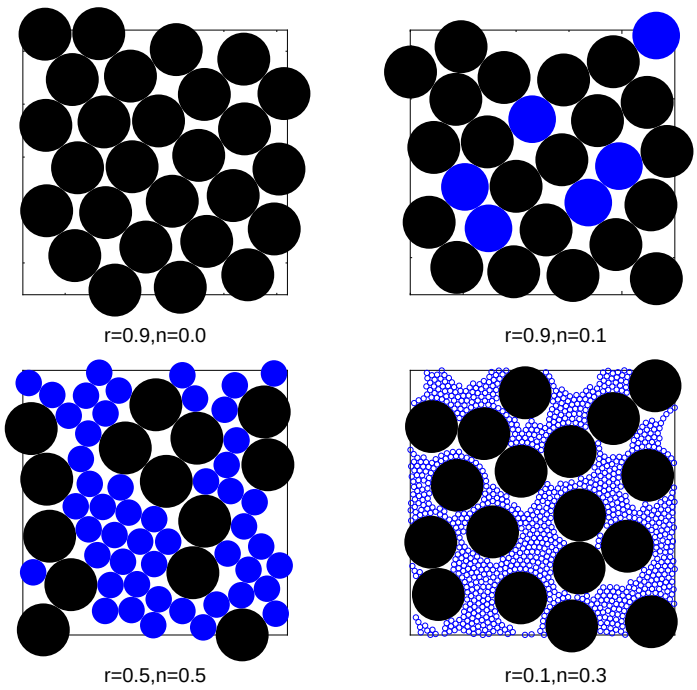

図 9: シミュレーションで得たランダムパッキングの一部。左上は一成分のもの、右上は $r = 0.9$、$n = 0.1$ のもの、左下は $r = 0.5$、$n = 0.5$ のもの、右したは $r = 0.1$、$n = 0.3$ のもの

4.3 パッキングの状態

今回のシミュレーションで得られたランダムパッキングの一部を図 9 に示す。

図をみると、一成分のパッキングでは円盤の配置があまりランダムになっておらず、かなり秩序を持った配置になっていることが分かる。これは、E.L.Hinrichen らが論文 [8] で触れているように、二次元円盤の局所的な最密構造と全体的な最密構造がどちらも三角格子であるために、上から円盤を降らせるシミュレーション方法では、三角格子に近い秩序を持った配置になり易くなってしまうからだと考えられる。これとは異なり、三次元では、局所的な最密構造は正四面体であるが、この構造は全空間をぴっちりと埋め尽くせないので、上から球を降らせるタイプのパッキング方法でも、ランダムな配置を得る事ができるといわれている。

また、 $r = 0.1$ の図を見ると、円盤が jammed packing されておらず、いたる所に small disk が動けるすき間ができている事が分かる。これは、円盤を上から降らせているために、一度 large disk が small disk が入れるすき間に蓋をしてしまうと、そのすき間には二度と small disk が入れなくなるからであると考えられる。この状況は、 $r = 0.5$ でもわずかに見る事ができる。始めに述べたように、今回の研究では jammed packing を対象にしたいので、以下の解析では、半径比 r が大きく、円盤が十分に充填されている領域を考える事にする。

5 充填率の解析

この節では、シミュレーションで得られた充填率の振る舞いを説明する方法を探索する。これまでで述べたように、 r が小さい領域では円盤の充填が不十分であるため、これ以降では、 $r \sim 1$ の領域を中心に考える。

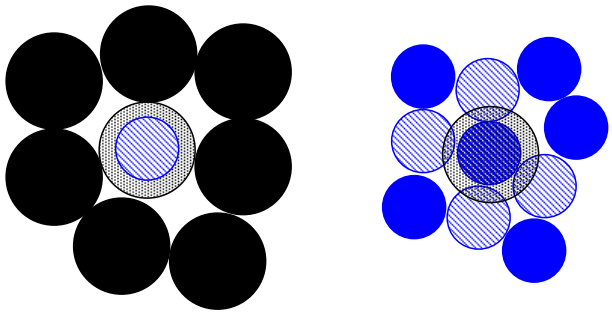

図 10: 円盤入れ換えの模式図。左は $n \sim 0$、右は $n \sim 1$ の場合の考え方。

5.1 一成分近傍での振る舞い

系に含まれる円盤の大部分が一方の円盤でもう一方の円盤は少数しか系に含まれない場合、二成分系は、充填率 η_0 で充填されている一成分系に異なる大きさの円盤を少数混ぜた系と考えることができる。これを基に、二成分系の充填率を次のようにして考える。

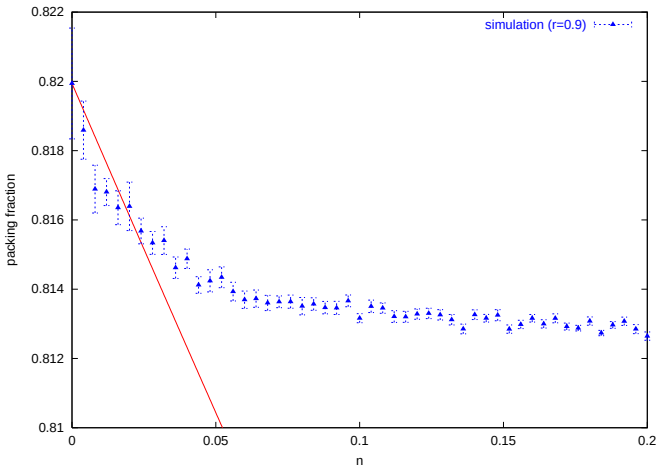

図 11: $n = 0$ 近傍での充填率。赤線は (5.3) 式

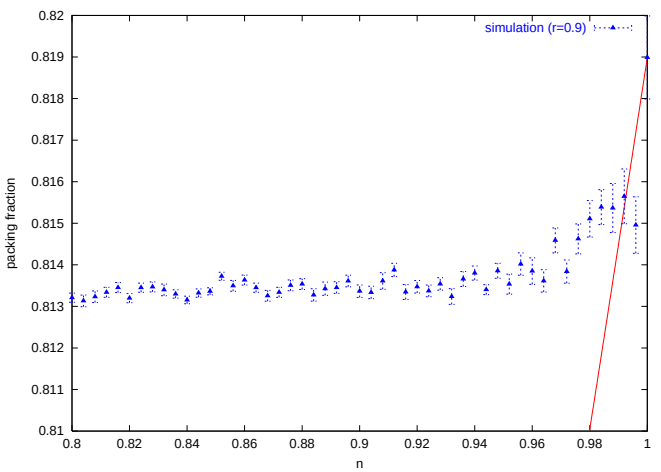

図 12: $n = 1$ 近傍での充填率。赤線は (5.8) 式

5.1.1 $n \sim 0$

始めに、$L \times L$ の領域が large disk のみ N 個によって、充填率 η_0 で充填されている状況を考える。

$$\frac{\pi N R_L^2}{L^2} = \eta_0 \tag{5.1}$$

今、large disk N 個の内 N_S 個を取り除き同じ位置に small disk を置き直すとする (図 10 左)。この時、系の数密度は一定に保たれるとすると、系の充填率 ϕ は

$$\phi = \frac{\pi\{(N - N_S)R_L^2 + N_S R_S^2\}}{L^2} \tag{5.2}$$

と表せる。これに式 (3.2)-(3.6) 及び (5.1) を用いれば、

$$\begin{aligned} \phi &= \eta_0\{(1-x) + xr^2\} \\ &= \eta_0 \frac{r^2}{(1-n)r^2 + n} \end{aligned} \tag{5.3}$$

となり、充填率が r と x または、 r と n の関数として書ける。

上の式 (5.3) をシミュレーションの結果と同時に示したものが図 11 である。このグラフから、式 (5.3) は small disk の数が増加するにつれて充填率が減少することはうまく表現できているが、細かく見ると シミュレーションの結果とあまり一致していないことが読みとれる。充填率の変化をより正確に表現するには、精巧な考え方による近似が必要であると考えられる。

5.1.2 $n \sim 1$

$n \sim 0$ とは逆に、 $L \times L$ の領域が small disk N 個で充填されている状況を考える。この時の充填率を η_0 とすると、式 (5.1) と同様に、

$$\frac{\pi N R_S^2}{L^2} = \eta_0 \tag{5.4}$$

が成り立つ。ここで $n \sim 0$ の時と同様に N_L 個の large disk を系に入れることを考える。ところが、$R_S \leq R_L$ なので、今回は small disk を N_L 個取り除いても、同じ場所に large disk をそのまま入れることができない。そこで、small disk N_L 個を取り除く時に、その円盤に配位している円盤も同時に取り除くことにする (図 10 右)。この時、small disk を取り

除いできた面積の内、large disk を入れるのに使った面積以外は今考えている濃度での充填率 ϕ で充填されるとする。シミュレーションの結果より small disk に配位している円盤の数を 4 とすると、large disk 一個につき small disk を五個を取り除く事になるので、充填率について、

$$\phi = \frac{\pi\{N_L R_L^2 + (N - 5N_L)R_S^2 + (5N_L R_S^2 - N_L R_L^2)\phi\}}{L^2} \tag{5.5}$$

という方程式が成り立つ。今の状況では、濃度 x について、

$$x = \frac{N - 5N_L}{N - 4N_L} \tag{5.6}$$

が成り立っている事に注意して式 (5.5) を書き換えると、

$$\phi = \eta_0\{1 + \frac{1-x}{5-4x}(5 - \frac{1}{r^2})(\phi - 1)\} \tag{5.7}$$

となる。これを ϕ について解くと、

$$\phi = \eta_0 \frac{1 - x'(5 - \frac{1}{r^2})}{1 - \eta_0 x'(5 - \frac{1}{r^2})} \tag{5.8}$$

を得る事ができる。ただし、

$$x' = \frac{1-x}{5-4x}$$

である。

式 (5.8) をシミュレーション結果と共に示したのが、図12である。$n \sim 0$ の場合と同様に、large disk が増加するにつれて充填率が減少する事は表現できているが、細かい変化は示せておらず改善が必要だと考えられる。

5.2 コンタクトネットワークによる解析 ([4] より引用)

上では一成分近傍での充填率を考えたが、一般の濃度における充填率も別の方法より考えることができる。充填率を見積もる方法の一つとしては D.Bideau らが用いた、接触している円盤のネットワーク (コンタクトネットワーク) を考える手法がある [4]。

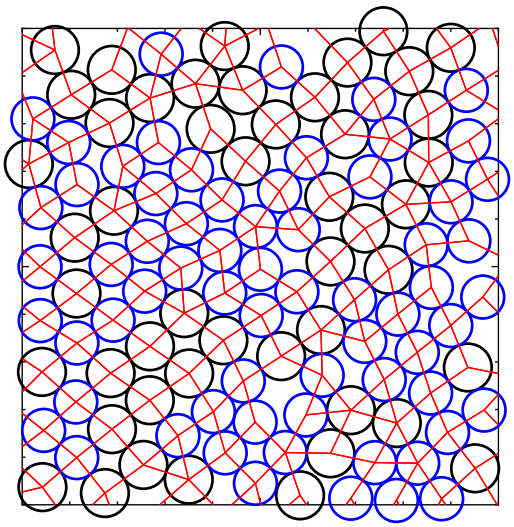

図 13: コンタクトネットワークの例。 $r = 0.9$ 、$n = 0.5$ の物。

5.2.1 コンタクトネットワークで表す充填率

この方法ではまず、系に含まれる円盤の内お互いに接触しているもの同士の中心を直線で結ぶ (図 13)。この時、系は多数の多角形によって分割されることになる。ここで、系に含まれる n 角形の平均面積を A_n 、含まれる個数を P_n とすると、系の充填率 ϕ は、

$$\phi = \frac{\pi(N_L R_L^2 + N_S R_S^2)}{\sum_{n\geq 3} P_n A_n} \tag{5.10}$$

と書ける。ここで、系に存在する多角形の辺の総数を E 、円盤の総数を N とすると、幾何学的な条件より

$$\sum_{n\geq 3} P_n - E + N = 1 \qquad \text{(Euler relation)} \tag{5.11}$$

$$\sum_{n\geq 3} nP_n = 2E \tag{5.12}$$

$$\sum_{n\geq 3} P_n A_n = \text{領域の面積} \tag{5.13}$$

が成り立つ。さらに、円盤の平均配位数 z_m は

$$z_m = \frac{2E}{N} \tag{5.14}$$

であり、系に n 角形が存在する確立 p_n は

$$p_n = \frac{P_n}{\sum_{n\geq 3} P_n} \tag{5.15}$$

と表せるので、式 (5.11)-(5.13) から E、N を消去して p_n 及び z_m で関係式を表現すると、

$$\sum_{n\geq 3} p_n = 1 \tag{5.16}$$

$$(2 - z_m)\sum_{n\geq 3} np_n + 2z_m \sum_{n\geq 3} p_n = \frac{2z_m}{\sum_{n\geq 3} P_n} \tag{5.17}$$

$$\sum_{n\geq 3} p_n A_n = A_0 \tag{5.18}$$

となる。ここで A_0 は

$$A_0 \equiv \frac{\text{領域の面積}}{\sum_{n\geq 3} P_n} \tag{5.19}$$

で定義される、多角形一つ当たりの平均面積である。

今、 $N \to \infty$ の極限を考えることにすると、(5.17) 式の右辺はゼロになるので、(5.16)-(5.18) から p_3、p_4 を消去すると A_0 は、

$$A_0 = A_3 + \frac{6 - z_m}{z_m - 2}(A_4 - A_3) + \sum_{n\geq 5} p_n \{A_n - (n-3)A_4 + (n-4)A_3\} \tag{5.20}$$

と書くことができる。一方、充填率 ϕ は同様の極限で A_0 及び z_m を用いて、

$$\phi = \frac{2}{z_m - 2}\frac{\pi R_L^2(1 - x + xr^2)}{A_0} \tag{5.21}$$

と表せるので、式 (5.20) と合わせると、充填率は $p_n(n \geq 5)$ と $A_n(n \geq 3)$ 及び z_m の形が分かれば、半径比と濃度の関数として表せることになる。

5.2.2 充填率の見積もり

上の結果より充填率 ϕ は、

$$\phi = \frac{\pi R_L^2(1 - x + xr^2)}{\{A_4 + (4 - z_m)(\frac{A_4 - 2A_3}{2}) + \frac{z-2}{2}\sum_{n\geq 5} p_n[A_n - (n-3)A_4 + (n-4)A_3]\}} \tag{5.22}$$

と表せるが、上式には p_n、A_n 及び z_m という未知の量が含まれているので、このままでは系の充填率を見積もるのは困難である。この内 z_m はシミュレーション結果より、 半径比、濃度によらず $z_m = 4$ と近似して良いと考えられる。さらに、図 13 から読みとれるように、$r \sim 1$ では多角形の大部分が四角形なので、 $p_n(n \geq 5)$ は十分に小さいとして式 (5.22) 分母の n に関する和の項を無視する。すると、充填率は

$$\phi \simeq \frac{\pi R_L^2(1 - x + xr^2)}{A_4} \tag{5.23}$$

と近似でき、 系に存在する四角形の平均面積 A_4 さえ分かれば充填率が見積もれることになる。

ここで、 系に存在する四角形を頂点にある円盤の種類によって六種類に分類し、各種の四角形が相関なくランダムに存在することを仮定すると[2]平均面積 A_4 は、

$$\begin{aligned} A_4 =& (1-x)^4(\frac{z_L}{z_m})^4 A_{LLLL} + 4(1-x)^3 x(\frac{z_L}{z_m})^3(\frac{z_S}{z_m})A_{LLLS} \\ &+ 2(1-x)^2x^2(\frac{z_L}{z_m})^2(\frac{z_S}{z_m})^2 A_{LSLS} + 4(1-x)^2x^2(\frac{z_L}{z_m})^2(\frac{z_S}{z_m})^2 A_{LSSL} \\ &+ 4(1-x)x^3(\frac{z_L}{z_m})(\frac{z_S}{z_m})^3 A_{LSSS} + x^4(\frac{z_S}{z_m})^4 A_{SSSS} \end{aligned} \tag{5.24}$$

[2]四角形の頂点に large disk が存在する確率は $(1-x)\frac{z_L}{z_m}$ 、small disk が存在する確率は $x\frac{z_S}{z_m}$ になる。([9] 等を参照)

と見積もれる。ここで A_{LLLL} 等は各種四角形の平均面積であり、四角形の角度がランダムに分布していると仮定する事で計算できる。[3]また、z_L、z_S については 4.2 節の近似式が使えるので、以上より系の充填率が半径比・濃度の関数として書ける。

5.2.3 結果

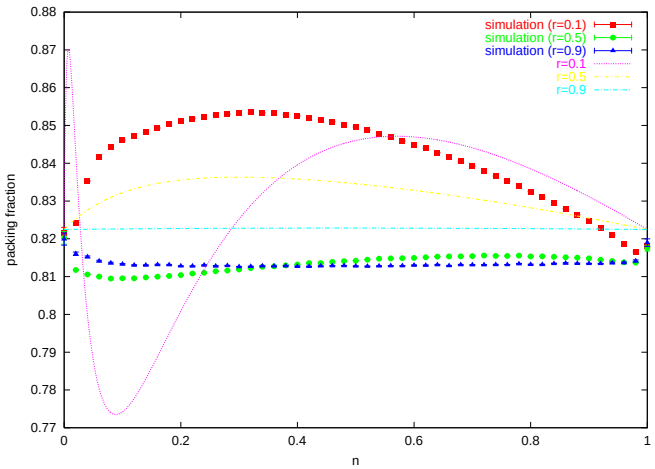

図 14: コンタクトネットワークによる解析。

上のようにして求めた充填率をシミュレーション結果と共に示したものが、図 14 である。図を見ると分かるように、この近似で求めた充填率はシミュレーションの結果と全く合っていない。これには、平均面積の近似や配位数の近似よりも、 $p_n(n \geq 5)$ を無視した近似が大きく影響していると考えられる。しかし、現実的な問題として、 $n \geq 5$ の p_n や A_n を見積もることは困難であり、コンタクトネットワークを用いるのではない別の方法を探した方が良いと考えられる。

5.3 radical tessellation による解析

上で述べたように、コンタクトネットワークにより系を多角形で分割して解析する方法では、多角形の存在確率と平均面積の見積もりが必要とな

[3]詳しくは、[4] を参照。

り実際に利用するのは困難である。従って、ここではradicall tessellationと呼ばれる手法を用いて系を三角形のみで分割し、充填率を解析する方法を考えてみる。

5.3.1 radical tessellationと充填率

radical tessellationは Gellatly と Finney[10] によって導入された方法で、Voronoï tessellationを拡張した形になっている。

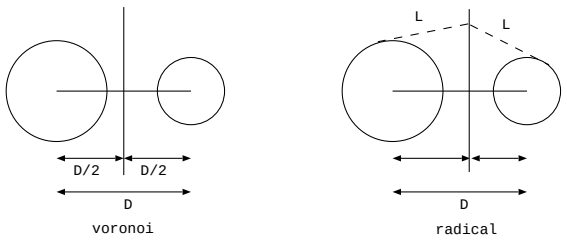

図 15: radical tessellationの模式図

Voronoï tessellationでは、二点を結ぶ直線の垂直二等分線を境界線とするが (図15左)、radical tessellationでは円盤を考えて、二つの円盤に引いた接線の長さが等しくなる点の集合として境界線を描く (図15右)。このように境界線を定義すると、境界線は二点を結ぶ直線に垂直な直線となるが、その交点はVoronoï tessellationのように二点間の中心に位置するのではなく、より小さい円盤の方に近い位置になる。この結果、大きさの異なる円盤が接している配置でも、境界線が円盤を分断することがなくなり、すっきりと系を分割することができる。

上のようにして系を分割した後、今度は境界線を共有する円盤を *neighbor* と定義して、neighbor同士を直線で結ぶ。この結果、系が再分割されることになるが、この時Voronoï tessellationに対するDelaunay tessellation([11]など参照) と同様に、系は三角形のみで分割されることが示されている (図16)。

さらに、幾何学的な条件から、系を上記の三角形で埋め尽くす時、系の大きさが無限大の極限では、一つの円盤当たりの平均neighbor数は厳密に 6 となる。従って、系に存在する三角形の平均面積を A_m とすると、

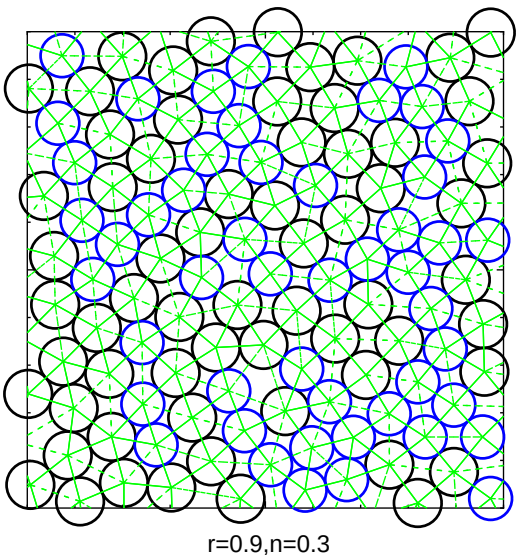

図 16: radical tessellation を利用して系を三角形で分割した例。実線は実際に接触している円盤同士のつながりを、破線は実際には接触していない円盤同士のつながりを表す。

充填率 ϕ は、

$$\begin{aligned} \phi &= \frac{\pi(N_L R_L^2 + N_S R_S^2)}{2NA_m} \\ &= \frac{\pi R_L^2(1 - x + xr^2)}{2A_m} \end{aligned} \tag{5.25}$$

となり、三角形の平均面積さえ分かれば充填率の半径比・濃度依存性が計算できることになる。

5.3.2 充填率の見積もり

三角形の平均面積 A_m を見積もるため、以下のような近似を考える。まず、系に存在する三角形を頂点にある円盤の種類によって、四つに分類する (図 17)。さらに各辺も、両端にある円盤によって LL-bond・LS-bond・SS-bond の三種に分類する。その上で、**各種三角形の平均面積**を**平均長さ**

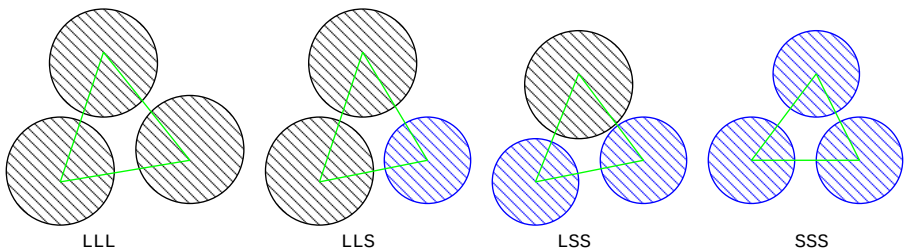

図 17: 三角形分類の模式図。

の辺から成る三角形の面積で近似する。こうすると、例えば三角形 LLS の平均面積 A_{LLS} は、各ボンドの平均長を $< b_{LL} >$ のように表す事にして、

$$A_{LLS} \simeq (< b_{LL} > \text{一本と} < b_{LS} > \text{二本から成る三角形の面積})$$

と近似される。

各三角形の平均面積をこのように近似した上で、各三角形は系の平均 neighbor 数・濃度に応じてランダムに存在していると仮定する。すると、各平均 neighbor 数を Zn_L、Zn_S、Zn_m [4] と表す事にして、全三角形の平均面積 A_m は

$$\begin{aligned} A_m =& (1-x)^3 (\frac{Zn_L}{Zn_m})^3 A_{LLL} + 3(1-x)^2 x (\frac{Zn_L}{Zn_m})^2 (\frac{Zn_S}{Zn_m}) A_{LLS} \\ &+ 3(1-x) x^2 (\frac{Zn_L}{Zn_m})(\frac{Zn_S}{Zn_m})^2 A_{LSS} + x^3 (\frac{Zn_S}{Zn_m}) A_{SSS} \end{aligned} \tag{5.27}$$

と表せる。よって、各平均 neighbor 数と各ボンドの平均長が分かれば三角形の平均面積が求まり、(5.25) 式から充填率が計算できるようになる。

5.3.3 シミュレーションとの比較

上で述べた近似で面積を計算するためには、各平均 neighbor 数と各ボンドの平均長の情報が必要であるが、それを見積もるのは簡単ではない。そこで、第一段階として、上で述べた近似がうまくいくかを確かめるために、シミュレーションで得られた平均 neighbor 数とボンドの平均長を用いて A_m を計算し充填率を求めてみた。その結果が図 18 である。

[4] Zn_m は今の場合 6 である。

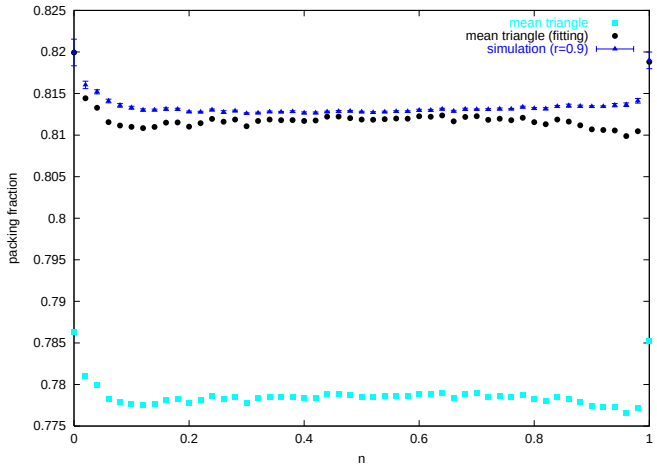

図 18: 式 (5.27) で求めた充填率と、シミュレーション結果との比較。黒点は $n = 0$ で一致するように近似結果を定数倍したもの。

図を見ると分かるように、近似結果はシミュレーション結果の充填率よりもかなり小さい値になっている。これは、三角形の平均面積を、平均長さの辺で作られる三角形の面積とした近似が良くないためだと考えられる。おそらく、シミュレーションで作られたパッキングでは、三角形の辺の長さに相関があり、三本の辺が独立に組み合わされてはいないのだろう。そのため、近似で得た面積は実際の面積よりも大きくなり、その結果、充填率を小さく見積もってしまったと考えられる。

近似で得た充填率は、定量的にはシミュレーション結果と一致していないが、図 18 の $n = 0$ で一致するように合わせたデータを見ると、濃度変化に対する充填率の変化はおおよそ表せている事が分かる。この点を重視して、次節では、平均 neighbor 数とボンドの平均長をシミュレーションから得るのではなく、直接見積もる方法を探索する。

6 より進んだ解析に向けて

前節の最後で考えた、radical tessellation による解析を進めるために、平均 neighbor 数とボンドの平均長を見積もる方法を以下で考える。

6.1 平均 neighbor 数

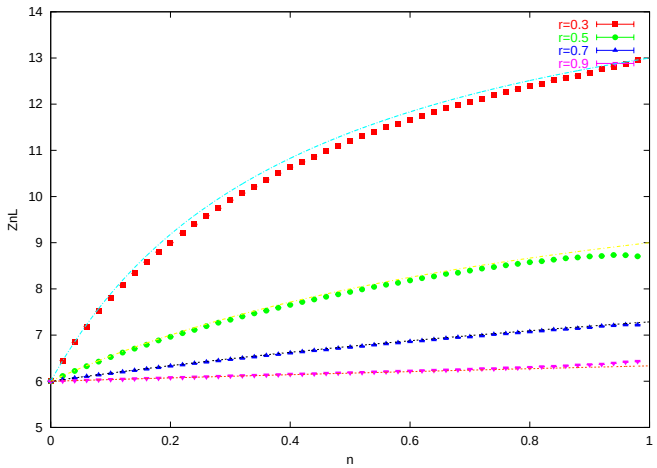

図 19: $r = 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ の場合の Zn_L 。曲線は近似式 (6.3)

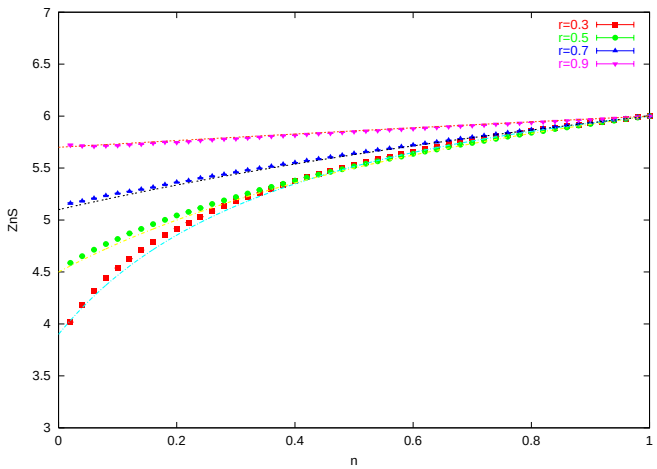

図 20: $r = 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ の場合の Zn_S 。曲線は近似式 (6.4)

radical tessellation による構築では、 Zn_m は系が無限に大きい極限で厳密に 6 になる。しかし、 Zn_L、Zn_S は、系の状態によって変化してしまう。図 19、20 は、この平均 neighbor 数の変化をグラフにしたものである。これらの定性的な振る舞いは、4.2 節で示した平均配位数の振る舞いと良く似ている。

このことを踏まえて、4.2 節と同様の近似を考える。系を三角形で埋め

尽くすには、最低限 neighbor が三つないといけない事を考慮して、前と同様に、

$$\frac{Zn_S - 3}{Zn_L - 3} = r \tag{6.1}$$

と仮定する。この式と、 Zn_m との関係式

$$Zn_m = (1-x)Zn_L + xZn_S \tag{6.2}$$

から、Zn_L、Zn_S の近似式

$$Zn_L = 3 + \frac{Zn_m - 3}{1 - x + xr} \tag{6.3}$$

$$Zn_S = 3 + \frac{(Zn_m - 3)r}{1 - x + xr} \tag{6.4}$$

を得る事ができる。

これらの近似式は、図 19、20 にシミュレーション結果と共に示してある。図より、 r が大きい領域では近似式が良くシミュレーションと合っている事が分かる。r が小さい領域で近似式がずれるのは、平均配位数の時と同様に、この領域でパッキングが不十分なためだと考えられる。

6.2 平均ボンド長

平均 neighbor 数の変化については、近似式を得る事ができたので、後は各ボンドの平均長さを見積もれれば充填率の定性的な変化が計算できる事になる。しかし、本研究では満足のいく平均ボンド長の見積もりを得る事ができなかった。従って、ここでは平均ボンド長を見積もる手がかりになると思われる情報を紹介する。

まず、シミュレーションから得た平均ボンド長の変化を図 21-23 に示す。$r = 0.9$ の $< b_{LL} >$ に注目すると、 $n = 0$ 近傍での充填率の急激な変化と対応するように、この領域での長さの変化が他の部分に比べて大きくなっている事が読みとれる。実は $r = 0.9$ の $< b_{SS} >$ も $n = 1$ 近傍で比較的大きく変化しており、r が大きな領域での充填率の変化は平均ボンド長の変化とうまく対応付けられそうである。

さらに、$r = 0.9$ のデータに注目して三種のボンドついてそれぞれ長さの分布を調べてみた。その結果が図 24-26 である。LL-bond 及び SS-bond の分布を見てみると、それぞれ、一成分の時と二成分の時とで分布の形が大きく異なっているのが分かる。どちらも二成分の場合には、ボンド

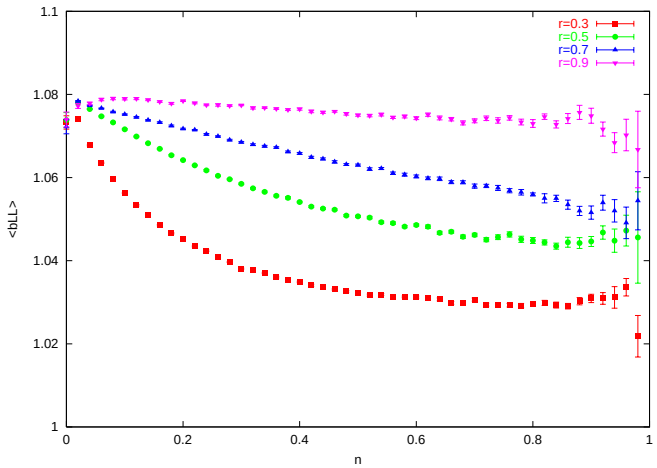

図 21: $r = 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ の場合の $< b_{LL} >$

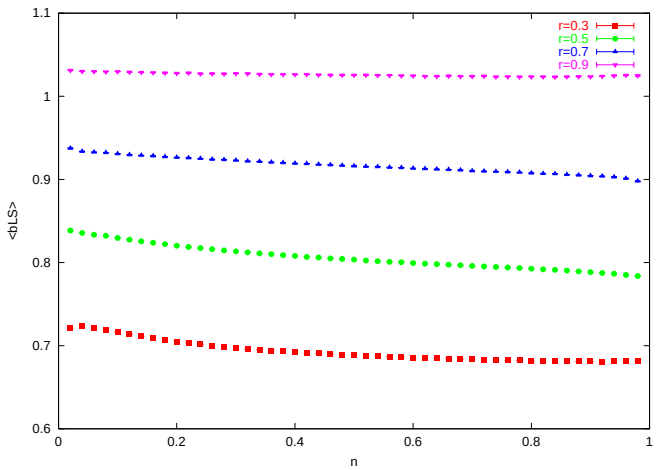

図 22: $r = 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ の場合の $< b_{LS} >$

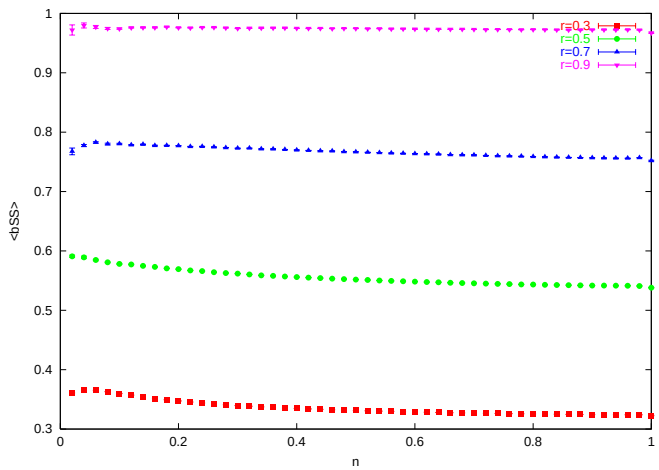

図 23: $r = 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ の場合の $< b_{SS} >$

が長くなるにつれて単調に頻度が増加していき、ある長さを境にして急減少、その後小さな頻度でゆっくりと減少する、という傾向が見られるが、一成分では、増加の途中で極大になるうえ、急減少した後には頻度がほとんどゼロになり、なだらかな減少が見られない。これは前に述べたように、一成分のパッキングがある程度の秩序を持った配置になっているためだと考えられる。

また、どの分布でもある長さを境に頻度が急激に減少しているが、この長さは、系の大きな部分を占めるコンタクトした四角形の配置を、radical tessellation に従って二つの三角形に分割する時に、制限されるボンドの長さ[5]と対応している事を計算で確かめる事ができた。一成分系でこの長さ以上のボンドがほとんど存在しない事は、一成分系がほとんどコンタクトした四角形の配置のみから構成されている事を示していると思われる。

平均ボンド長について、上のようなシミュレーションのデータを得たが、まだその振る舞いを表すよい近似式を見つけるには至っていない。この振る舞いを解明する事は残された課題である。

[5]ある長さ以上のボンドは四角形の配置からは作り出せないという事。

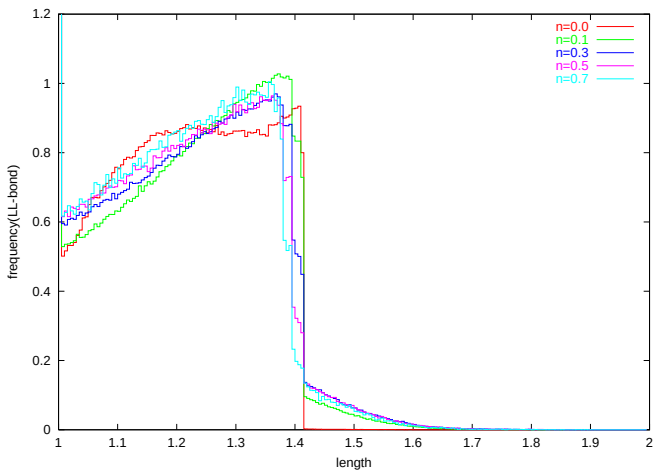

図 24: $r = 0.9$ の場合の LL-bond の長さ分布。データは $n = 0.0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$ のものを示した。

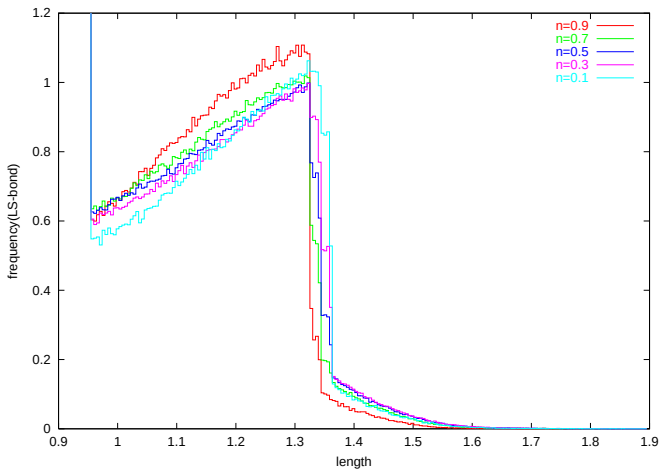

図 25: $r = 0.9$ の場合の LS-bond の長さ分布。データは $n = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ のものを示した。

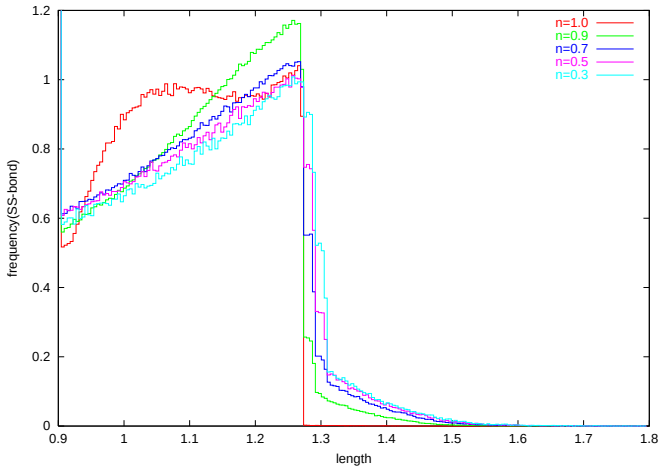

図 26: $r = 0.9$ の場合の SS-bond の長さ分布。データは $n = 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 1.0$ のものを示した。

7 まとめ

今回の研究では、二種類の大きさを持つ剛体円盤を二次元平面にランダムパッキングした場合について、系の充填率を解析した。その結果、二種類の大きさが非常に異なる場合には、充填率が小さな円盤の増加と共に一度上昇してその後減少するという上に凸の変化をし、逆に、二種類の大きさがあまり変わらない場合には、充填率は小さな円盤の増加と共に一度減少してからその後増加するという下に凸の変化をする事が、計算機シミュレーションより分かった。

また、radical tessellation による解析を導入し、このような充填率の振る舞いを説明する手がかりを見つけた。この方法では、系を分割するボンドの平均長と系の充填率を対応づけることができる。しかし、平均ボンド長の見積もりができておらず、この解析は未完成である。

今回は円盤のランダムパッキングについてその充填率を調べたが、二成分に大きさ以外にも異なる性質、例えば導電性など、を持たせて物理的な性質を調べる事も面白いかも知れない。また、円盤ではなく多角形のランダムパッキングも数学的には面白そうである。これらの問題はこれから先にとっておく事にする。

8 謝辞

この研究テーマを与えて頂いた小田垣先生にはとても感謝しています。忙しい合間にも議論して頂きありがとうございました。また、吉森先生にはお茶の時間などに数々のヒントを頂くなど、卒業研究を助けてもらいました。さらに、久保田さん、森さん、寺田さんには日々、私の質問・疑問に答えを頂き大変お世話になりました。松井さんや研究室の先輩方にも、困難な事が生じた時に親切に接して頂き、うまく研究を進める事ができました。みなさん、本当にありがとうございました。

参考文献

[1] T.Odagaki, A.Hoshiko, J.Phys.Soc.Japan **71**, 2350 (2002).

[2] W.M.Vissher, M.Bolsteli, Nature **239**, 504 (1972).

[3] G.C.Barker, M.J.Grimson, J.Phys.:Condens.Matter **1**, 2779 (1989).

[4] D.Bideau, A.Gervois, L.Oger, J.P.Troadec, J.Phys(Paris) **47**, 1697 (1986).

[5] S.Torquato, T.M.Truskett, P.G.Debenedetti, Phys.Rev.Lett. **84**, 2064 (2000).

[6] T.M.Truskett, S.Torquato, P.G.Debenedetti, Phys.Rev.E **62**, 993 (2000).

[7] A.R.Kansal, S.Torquato, F.H.Stillinger, Phys.Rev.E **66**, 041109 (2002).

[8] E.L.Hinrichsen, J.Feder, T.Jossang, Phys.Rev.A **41**, 4199 (1990).

[9] J.A.Dodds, Nature **256**, 187 (1975)

[10] B.J. Gellatly, J.L. Finney, J.Non-Cryst.solids **50**, 313 (1982).

[11] T.Aste, Denis Weaire, *The Pursuit of Perfect Packing* (IOP Publishing Ltd 2000).