Vol.2011-MPS-82 No.26
2011/3/8

# 多種球充填モデル

山田 修司　京都産業大学
菅野 仁子　ルイジアナ州立工科大学
宮内 美樹　NTT コミュニケーション科学基礎研究所

## 1 Introduction

乾燥コンクリートにあいた多数の穴を通り，鉄筋へ塩化物イオンが達することでコンクリートが劣化されることが知られている．その穴を塞ぐために，ナノ粒子を電気泳動的に詰め込む処置が行われている．その場合，ナノ粒子は大小２種類のものが同時に用いられる．小さい方は塩化物イオンをブロックすることが目的であり，大きい方はナノ粒子の流れを良くすることが目的とされている．しかし，大小の２種類のナノ粒子を用いることは，球体による空間充填密度を上げるという目的にもかなっている．なぜならば，よく知られているように１種類の球体による３次元空間充填の最高密度は面心立方格子充填のそれである $\frac{\pi}{\sqrt{18}} = 0.74048$ であるにもかかわらず，２種類の球体を用いて，その大小の球の半径比を無限大にすると，原理的には $1-(1-\frac{\pi}{\sqrt{18}})^2 = 0.93265$ まで充填密度を高めることができるからである．それは，大きな球体に比べて小さい球体を十分小さくすることで，大きな球体の隙間に小さな球体が入り込むことが理由である．

そこで，ある形状の容器に，大小のナノ粒子の混合物を充填したときの充填密度を，容器形状と，粒子の大きさと，混合比率とから導く公式が必要となる。

前回，当研究会にて発表したモデルは,「大球を先に充填して，その隙間に小球を後から充填する」というものであった。このモデルでは，大球と小球の大きさを決めると，それにより大球と小球の混合比率が定まる。したがって，大球と小球の混合比率を，それらの大きさとは独立に定めたいときには，このモデルは使えない。

さらに，実際に使用されているナノ粒子では，小さい方のナノ粒子が大きい方のナノ粒子を取り囲むような状態になったまま，コンクリート間隙に入っている様子が観察されている。そこで，このような状態を再現し，混合比率を自由なパラメタとするモデルを構築する必要がある。

## 2 ナノ粒子被覆充填モデル

大球の外側を小球が被覆している状況を想定し，大球を充填するときには大球の半径を実際の値よりも大きく設定しておいて，後から小球を充填するときには大球の半径を実際の値に戻す，という充填モデルである。半径を大きく設定するときには，実際の半径に被覆係数 $\delta(>1)$ を掛けることで行う。$\delta$ の値が，大小の球の混合比率を変化させるパラメタとなる。

前回の研究により，半径 $r$ の単一種球による充填の場合，容器表面から十分に離れた容器中心部分での充填密度 $D_c = 0.543\ (\pm 0.001)$ と，容器表面からの距離が $\epsilon r$ （表面排除効果係数 $\epsilon = 0.387\ (\pm 0.01)$）以下である範囲に及ぶ表面排除効果を考慮することで，容器全体の充填密度 $D$ に対する

$$D = \frac{(V-\epsilon r S)D_c}{V} = (1-\epsilon r S/V)\,D_c \qquad (1)$$

という式が得られている。ここで，$S$ は容器表面積，$V$ は容器体積である。

今回のモデルによると，まず半径 $\delta r_2$ の大球を先に充填する。その充填体積は (1) によると，

Vol.2011-MPS-82 No.26
2011/3/8

$(V - \epsilon\delta r_2 S)D_c$ であり，その充填球の半径を実際の $r_2$ に戻すと，実際の充填体積 $v_2$ は

$$v_2 = (V - \epsilon\delta r_2 S)D_c\delta^{-3}$$

となる。次に，半径 $r_1$ の小球をその間隙に充填するが，間隙の体積は $V - v_2$, 表面積は $S + 3r_2^{-1}v_2$ であるので，再び (1) を適用すると，その充填体積は

$$v_1 = (V - v_2 - \epsilon r_1(S + 3r_2^{-1}v_2))D_c$$

となる。したがって，大小の球を合わせた充填密度 $D_{12}$ は

$$\begin{aligned} D_{12} &= \frac{v_1 + v_2}{V} \qquad (2) \\ &= ((1 + (1 - D_c)\delta^{-3}) - 3\frac{r_1}{r_2}\epsilon\delta^{-3}D_c \\ &-((1 - 3D_c\epsilon\delta^{-2})r_1 + (1 - D_c)\delta^{-2}r_2)\epsilon S/V)D_c \end{aligned}$$

となる。

被覆係数 $\delta$ の値を変化させることで，大小球の混合比率 $v_1/v_2$ を所定の値にすることができる。また，容器中心部における大小の球の充填体積比率は，$S = 0$ としたときの $\frac{v_1}{v_2}$ 値であり，それは

$$(v_1/v_2)|_{S=0} = \delta^3 - D_c - 3\epsilon r_1/r_2 D_c \qquad (3)$$

で与えられる。近似的には，これが大小球の混合比率とみなせる。

## 3 計算実験

図 1 は，2×2×2 の立方体容器に，半径 $r_1 = 0.01$ の小球と半径 $r_2 = 0.13$ の大球とを，混合比率 $v_1 : v_2 = 1 : 1$ で充填している途中，充填球の個数が 1000 個および 100000 個の時点での様子である。先に，被覆係数を $\delta = 1.103$ として大球を充填し，その後，小球をその間隙に充填している。最終的には大球が 290 個と小球が 639426 個とが充填される。

図 2 は，小球の半径を $r_1 = 0.01$ に，混合比率を $v_1 : v_2 = 1 : 1$ に保ったまま，大球の半径 $r_2$ を変化させて，$2 \times 2 \times 2$ の立方体容器に充填するコンピュータ実験をしたときの充填密度と，充填密度の近似式 (2) が取る値とをグラフにしたものである。

充填アルゴリズムは，既に充填されている球あるいは容器表面の 3 カ所に接する位置（ピット）と，既に充填されている球あるいは容器表面に一様な分布密度で分布している設置点（擬似ピット）との中から，次の充填球の位置をランダムに選択する，というものである。

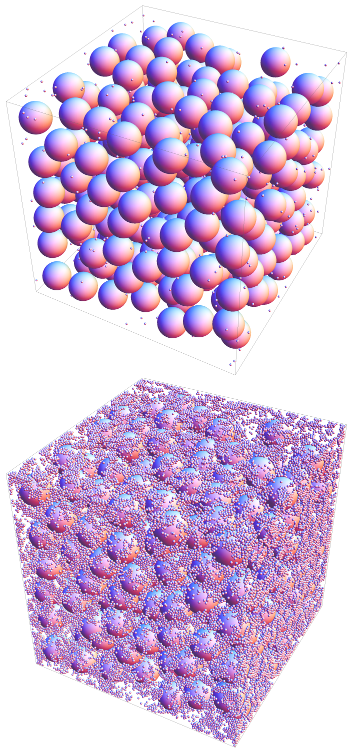

図 1: 充填過程（上図 1000 個，下図 100000 個）

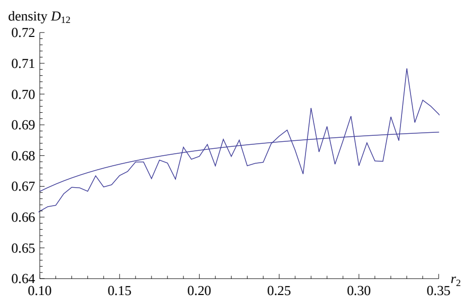


図 2: 充填密度（近似式と実験値）