Vol.2012-MPS-87 No.21
2012/3/2

球疎充填シミュレーションモデルとその充填密度近似公式

山田修司[†1]　菅野仁子[†2]　宮内美樹[†3]

重力ではなく分子間力のような粒子間引力が働いている環境における球充填をシミュレートするモデルを導入した。その充填実験の結果から，容器の壁面積-体積比と壁面平均曲率とだけを用いて種々の容器形状における充填密度を良好に近似する公式を与えた。

Sphere Loose Packing Simulation Model and Approximation Formula for Packing Density

Shuji Yamada,[†1] Jinko Kanno[†2] and Miki Miyauchi [†3]

A new simulation model for the sphere random loose packing is introduced. An approximation formula for the packing density involving only S/V ratio and average of mean curvature of wall surface of the container is given.

1. Introduction

3 次元空間内における球の充填についての研究は数多くある。もっとも古いものの一つは，Scott, Kilgour による [S] であり，20,000 個の鋼球（直径 $\frac{1}{8}$ インチ）を円筒形の容器内に充填し，重力の環境下で容器全体を揺さぶり，その充填密度 0.6366 を求めたものである。このような充填方法で得られる充填は，密充填 (Closed Packing) と呼ばれる。これに対して，小さく軽い粒子を緩やかに充填することで得られるものを，疎充填 (Loose Packing) と呼ぶ。これは，間隙へのナノ粒子の充填など，近年，応用が高まっている研究対象である [D], [K1],[K2]。

疎充填は，重力と粒子間の引力との大小関係に依存し，その充填の様相が異なる。重力が大きいと粒子は形状的に安定な位置に留まろうとするし，粒子間引力が大きいと形状的な安定とは無関係にランダムな位置に留まる。形状的に安定な位置とは，容器壁面や既充填球が形作る窪みのことであり，そこに次充填球が置かれる場合，それは壁面や既充填球と 3 点以上の接触点をもつ場所である。その場所は充填密度を上げるためには効果的な場所でもあり，その結果，重力が比較的大きいとその充填密度は大きくなり，反対に粒子間引力が大きいと，密度は小さくなる。

球の充填については，コンピュータシミュレーションを用いた先行研究も，数多く行われている。それらのシミュレーションモデルの多くは，充填球を容器上部のランダムな位置から落とし込み，既充填球にぶつかった場合，安定する位置まで転がす，というドロップアンドロール方式 (drop and roll method) と呼ばれている方法が用いられている [L], [V2], [Y]。しかし当研究では，球充填における諸現象を数理的に解析するために，さらに単純な充填原理をもつモデルを導入した。また，このモデルは粒子間引力が充填に及ぼす効果を表すパラメタを含んでおり，それにより，いろいろな環境下での疎球充填を再現することが可能となる。

さらに当研究では，そのシミュレーション結果を元に，境界面効果および充填前面曲率効果という充填密度を変化させる要因を発見し，それらを用いて，種々の形状の容器における球充填に対する充填密度の近似公式を与えた。この公式は，充填環境パラメタ μ の他には容器の表面積-体積比率 (S/V-ratio) のみを含む単純な式であるが，充填密度を非常に良く近似する。

2. 疎充填シミュレーションモデル

ここでは，球充填の計算実験で用いたモデルを解説する。

既に充填された球がいくつかあるとき，次に充填される半径 r の球の中心は，容器外部および既充填球からの距離が r である位置に置かれる。その位置選択の確率分布 p を次のように定める。それは引力による安定と形状的な安定との関係を表す充填環境パラメタ (environment parameter) $0 \leq \mu \leq 2$ を含んでおり，その値が小さいときは引力による安定が，大きいときは形状的安定が優位となる。

既充填球および容器壁面からの距離が r 以上である点の全体を R とする。∂R が，次充填球の中心が置かれる可能性のある点全体である。$A \subset \partial R$ に対して，A および R からの

†1 京都産業大学
†2 ルイジアナ州立工科大学
†3 NTT コミュニケーション科学基礎研究所

距離が両方とも μr である点の全体 $supp_\mu(A) = \partial N_{\mu r}(A) \cap \partial N_{\mu r}(R)$ を A の μ-支持集合 (support set) と呼ぶ。ここで，$N_{\mu r}$ は μr-近傍を表す。$supp_\mu(A)$ が可測集合であるとき，A の測度を $m_\mu(A) = area(supp_\mu(A))$ と定める。ここで，$area$ は $\partial N_{\mu r}(R)$ 上での面積測度である。そして，A 上に次充填球の中心が置かれる確率を

$$p(A) = \frac{m_\mu(A)}{m_\mu(\partial R)} \tag{1}$$

と定める。

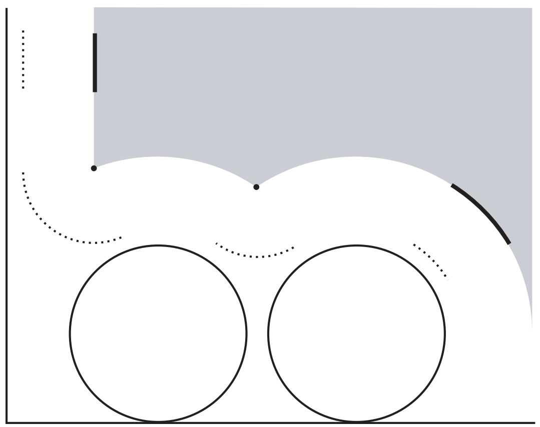

図 1　容器内に既に 2 個の球が充填されている状態の 2 次元模式図。グレー部分が R であり，太線部分を A とするとき $supp_\mu(A)$ が点線で表されている。ただし，$\mu = 0.8$ としている。

このシミュレーションモデルでは，充填球の発生源は考慮に入っていない。これまでの球充填のシミュレーションでは，容器上部のランダムな位置から球を容器内に落とし込む，というようなアルゴリズムが多くとられており，それは充填球発生場所から充填場所までの移動経路が考察に入っている。しかし，当モデルでは，上記の方法で選ばれた地点に充填球が無条件で現れるという考えをとっている。すなわち，発生源からその地点まで移動する経路については考察の対象になっていない。したがって，当モデルは，実際の球の充填という物理的現象をそのまま表したものではない。しかしながら，球の充填という現象を単純な数理モデルとして定式化し，その挙動を表す数式を与えるためには，必要な単純化であると考える。

3. 容器壁面排除効果（境界面効果）Container Wall Evacuation Effect (Boundary Effect)

容器内に球を充填するとき，容器の大きさおよび形状が，充填密度に多少の影響を与える。その，容器壁面排除効果と呼ぶ効果について解説する。

無限に広い平面を壁面とし無限の深さをもつ，$\mathbb{R}^2 \times [0, \infty)$ の形状をした容器に，球を充填することを想定する。この充填のシミュレーションのために，$2 \times 2 \times 4$ の直方体の x, y 座標を巡回的座標とし (すなわち，$(0, y, z) = (1, y, z)$, $(x, 0, z) = (x, 1, z)$ とみなす)，底面は壁面，上面は開放面とした容器に，半径 0.01 の球を充填する計算実験を，環境パラメタ μ の値を変化させつつ多数回行った。その結果を以下に記す。

容器壁面から十分に離れた場所での充填密度の平均値を標準密度 (standard density) と呼ぶ。この値は μ に依存するので，D_μ と表す。これは μ の増加にともない単調に増加する (図 2)。特に，$D_{0.0} = 0.396$，$D_{1.0} = 0.484$，$D_{2.0} = 0.561$ である。また，容器壁面から十分に遠い場所においても，充填密度には一定のゆらぎがあり，容積 $10^6 r^3$(r は充填球半径) の範囲での充填密度の標準偏差は，μ の値にほとんど依存せず約 0.004 である。つまり，$100r$-立方の範囲で充填密度を調べた場合，その値が $D_\mu \pm 0.004$ の間にある確率は約 0.68 である。

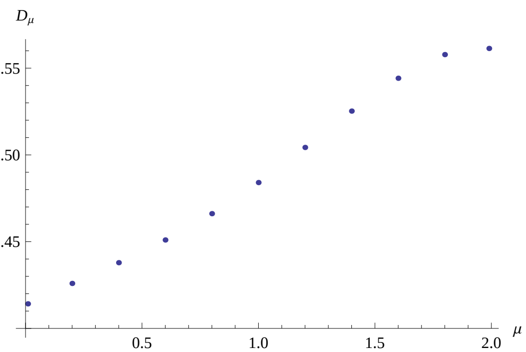

図 2　横軸は環境パラメタ μ，縦軸は標準密度 D_μ

容器壁面から遠い部分とは異なり，容器壁面の近傍では，壁面の r 近傍内には充填球の中心がなく，壁面の r 近傍の境界上には充填球中心が多数あるという状況から，その充填密度

は標準密度 D_μ とは異なるものとなる。図 3 は，環境パラメタ $\mu = 1.0$ での充填において，容器壁面からの距離を横軸として，充填球の中心の分布ヒストグラム (緑の線，数値は充填密度換算) と，充填密度が振動変化しながら標準密度 D_μ に収束する様子 (青い曲線) を表している。

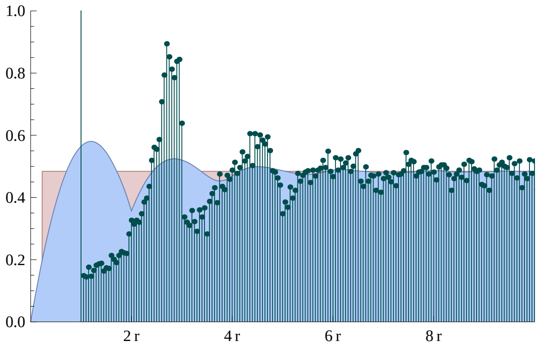

図 3 横軸は容器表面からの距離 (r は充填球半径)，縦軸は充填密度

壁面近傍における充填密度の平均値は標準密度と比較すると，若干小さくなる。これは，容器壁面が充填球を排除することから生じるので，容器壁面排除効果 (境界面効果) と呼ぶ。その不足の量を，容器壁面からある一定の距離の範囲を除いた部分を標準密度 D_μ で充填する，という考え方 (図 3 赤の水平線) でとらえた場合，その容器壁面からの距離は充填球半径 r に比例したものになる。この比例係数を容器壁面排除効果係数 (境界面効果係数) と呼び，充填環境パラメタ μ に依存するので，β_μ と表す。β_μ は μ の増加に従い単調に減少し (図 4)，特に $\beta_{1.0} = 0.228$ である。よって，次節で解説する充填前面曲率効果を考慮せず容器壁面排除効果のみを考慮した場合，体積 V，容器壁面積 S の容器内に半径 r の球を環境パラメタ μ で充填したときの充填量は $(V - \beta_\mu rS)D_\mu$ となり，その総充填密度 D は

$$D = D_\mu - D_\mu \beta_\mu rS/V \tag{2}$$

で与えられる。ここで，比 S/V は表面積-体積比 (surface-volume ratio) と呼ばれる数値で，物体の形状を表す基本量の一つである。これは，物体の形状が球体に近いほど，あるいは物体のサイズが大きいほど小さな値をとる。

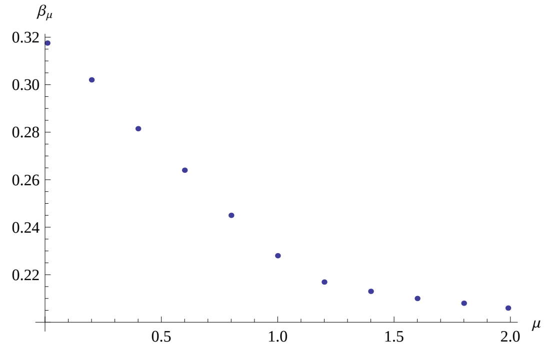

図 4 横軸は環境パラメタ μ，縦軸は境界面効果係数 β_μ

4. 充填前面曲率効果 Front Surface Curvature Effect

充填が進むと，充填の最前線である充填前面ができる。この面が曲率 (平均曲率) を持つ曲面である場合，その曲率に応じて，充填密度が標準密度から増減する現象が起こる。その，充填前面曲率効果と呼ぶ効果について解説する。

容器壁面および既充填球からの距離が，充填球の半径 r 以上である点の全体を R とする。R の r-近傍の境界 $\partial N_r(R)$ を充填前面 (packing front surface) と呼ぶ。容器壁面が微分可能であるならば，ほとんど至る所で 2 階微分可能な曲面となる。法線ベクトルを $N_r(R)$ の内側の方向へとった場合の $\partial N_r(R)$ の平均曲率を H とする。これは既充填領域から見た充填前面の凹凸を表し，H が正であるときは充填前面が凹であること，負であるときは凹であることを意味する。充填が進むと，充填前面の形が変化することで H の値も変化するが，その値に応じてその部分における充填密度が変化する現象が起こる。この現象を調べるために，充填環境パラメタを $\mu = 1.0$ として，次のような 3 種類の計算実験を行った。

実験 1.球状の容器（表面は容器壁面）内への充填

実験 2.中心に 1 個の充填球を置き，そこから空間内への充填

実験 3.円柱状の容器（側面は容器壁面，z 座標は巡回的座標とし上下底面は同一視する）への充填

実験 1, 実験 2 においては中心からの距離に応じて, 実験 3 においては中心軸からの距離に応じて各位置での局所的な充填密度を測定した。図 5, 6, 7 はその充填密度の変化を表したグラフである。なお，グラフの左には，充填途中 300,000 個ほどの球を充填した時点での

様子が表示されている。

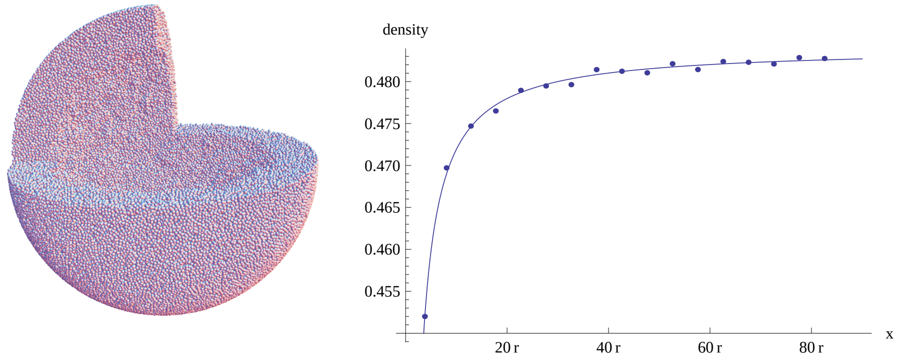

図 5 実験 1．x は中心からの距離 (r は充填球半径)，フィット関数は $0.484 - \frac{0.11r}{x}$

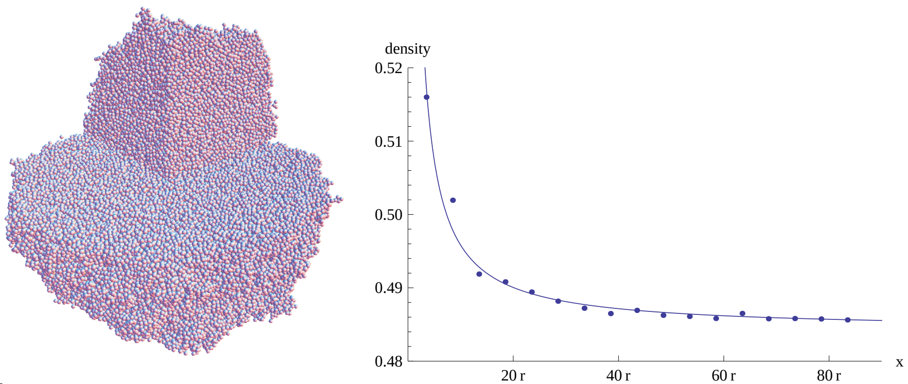

図 6 実験 2．x は中心からの距離 (r は充填球半径)，フィット関数は $0.484 + \frac{0.11r}{x}$

実験 1 の場合，中心から距離 x の地点での充填が行われるときには，その充填前面は，ほぼ半径 x の球面形（法線ベクトルは内向き）をしていると考えられる。その平均曲率は $H = \frac{1}{x}$

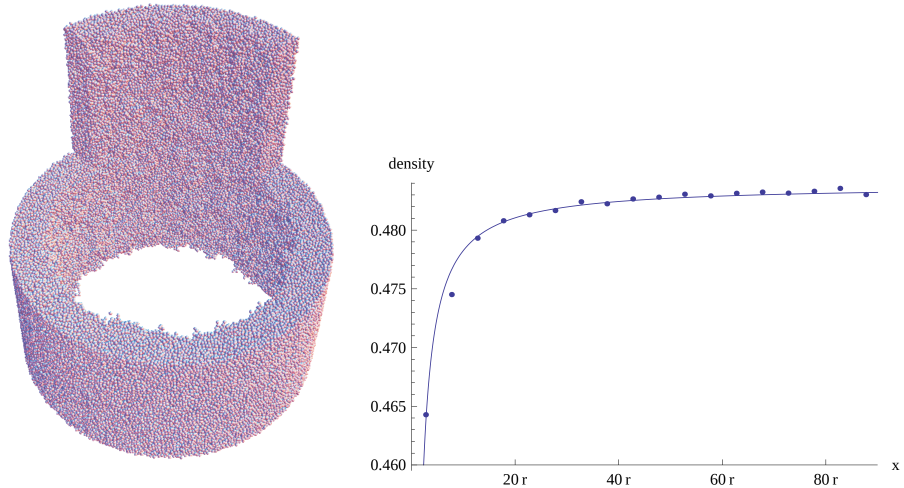

図 7 実験 3．x は円柱中心軸からの距離 (r は充填球半径)，フィット関数は $0.484 - \frac{0.056r}{x}$

であるので，これをデータのフィット関数に代入すると $0.484 - \frac{0.11r}{x} = 0.484 - 0.11rH$ という充填密度の近似式を得る。

同様に実験 2 の場合は，その充填前面は，ほぼ半径 x の球面形（法線ベクトルは外向き）をしていると考えられ，その平均曲率は $H = -\frac{1}{x}$ であるので，充填密度の近似式は $0.484 + \frac{0.11r}{x} = 0.484 - 0.11rH$ となる。

また，実験 3 の場合は，円柱軸から距離 x の地点での充填が行われるときには，その充填前面は，ほぼ半径 x の円柱（法線ベクトルは内向き）をしていると考えられる。その平均曲率は $H = \frac{1}{2x}$ であるので，充填密度の近似式は $0.484 - \frac{0.056r}{x} = 0.484 - 0.11rH$ となる。

以上の 3 実験いずれの場合も，充填密度は $0.484 - 0.11rH$ で近似される。これらはすべて環境パラメタ $\mu = 1.0$ における実験結果であるが，その他の μ の値においても，局所的充填密度 D_{local} を充填前面曲率で表した同様の近似式

$$D_{local} = D_{\mu} - \gamma_{\mu} r H \tag{3}$$

が得られる。ここで γ_{μ} は環境パラメタ μ によって定まる定数であり，これを充填前面曲率効果係数と呼ぶ。γ_{μ} は μ の増加に従い単調に増加し，$\mu = 1.0$ のときは $\gamma_{1.0} = 0.11$ で

ある（図 8）。

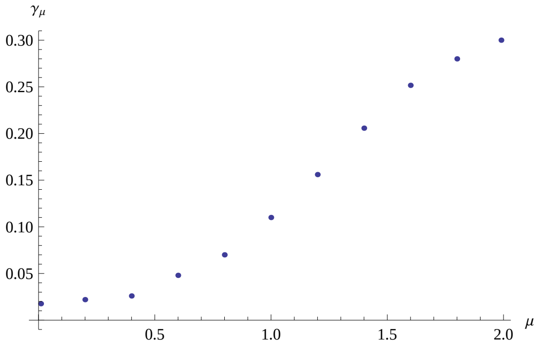

図 8　充填前面曲率効果係数 γ_μ

次に，局所的な影響である充填前面曲率効果が容器全体の充填密度にどのような影響を及ぼすかを考察する。ここでは，容器形状が凸形であるものを想定する。容器壁面の平均曲率の平均値が H である容器に，半径 r の球を充填する。考察の簡約化のため，ある程度充填が進んだ時点で容器内に残された空間は，最初の容器の空間と相似形を成しているとする。そのときの相似比を x とすると，その時点での充填前面曲率（充填前面全体での平均値）は $\frac{H}{x}$ である。したがって，充填前面曲率効果による充填密度近似式 (3) より，容器内での充填密度は

$$D = \int_0^1 (D_\mu - \gamma_\mu r \frac{H}{x}) \frac{d(x^3)}{dx} dx = \int_0^1 (D_\mu - \gamma_\mu r H) 3x^2 dx = D_x - \frac{3\gamma_\mu r H}{2} \qquad (4)$$

で近似される。

5. 球充填密度近似公式と実験結果

前々節および前節で解説した，容器境界効果および前面曲率効果を合わせると，様々な形状の容器に対する充填密度の非常に良い近似公式が得られる。

容積 V，容器壁面積 S，容器壁面平均曲率平均値 H の容器に，半径 r の球を充填環境パラメタ μ で充填する。容器境界効果および前面曲率効果による充填密度の減少を考慮すると，容器全体における充填密度 D は

$$D = D_\mu - D_\mu \beta_\mu r S/V - \frac{3}{2}\gamma_\mu r H$$

と近似される。この近似式を，実際のシミュレーション結果と比較し検証を行う。実験 1, 2 では，2 種類の容器に対し，充填する球の半径 r を変化させたときの充填密度の変化を調べた。その実験値と近似値とで比較したものが図 9 のグラフである。

5.1　実験 1：半径 1 の球形容器，環境パラメタ $\mu = 1$

容器壁面積 $S = 4\pi$，容器容積 $V = \frac{4}{3}\pi$ であるから S/V-比 $\frac{S}{V} = 3$，平均曲率平均値 $H = 1$ である。環境パラメタ $\mu = 1$ のときの充填密度近似式は

$$D = 0.484 - 0.496r$$

となる。

5.2　実験 2：サイズ $1 \times 2 \times 3$ の直方体容器，環境パラメタ $\mu = 1$

容器壁面積 $S = 22$，容器容積 $V = 6$ であるから S/V-比は $\frac{S}{V} = 3.67$ である。平均曲率平均値 H は，すべての稜辺が半径 ϵ の丸みをもつ直方体表面の平均曲率平均値の $\epsilon \to 0$ の極限値として求めると，$H = \frac{\pi}{2} \times 24 \times \frac{1}{22} = \frac{6}{11}\pi = 1.7136$ となる。環境パラメタ $\mu = 1$ のときの充填密度近似式は

$$D = 0.484 - 0.687r$$

となる。

6. ま と め

粒子間引力の環境下での充填をシミュレートするモデルを導入し，それを用いて計算実験を行い，その結果から，充填密度近似公式を導出した。この式は，ある程度良好に近似を行うが，それは，容器形状が球体に近い凸形である場合に限られる。それは，公式の導出にあたって仮定した,「ある程度充填が進んだ時点で容器内に残された空間は，最初の容器の空間と相似形を成している」という条件であると思われる。この条件を満たさないときにどのような充填密度となるか，という考察が課題としてある。

参 考 文 献

[D] K. J. Dong, R. Y. Yang, R. P. Zou, and A. B. Yu, “Role of Interparticle Forces in the Formation of Random Loose Packing,” PHYSICAL REVIEW LETTERS, 14 APRIL 2006.

[K1] Kanno, J., Richardson, N., Phillips, J., Kupwade-Patil, K., Mainardi, D.S. and Cardenas, H.E., ”Modeling and simulation of electromutagenic processes for multi-scale modification of concrete,” Journal of Systemics, Cybernetics and Informatics, 7(2): 69-74, (2009).

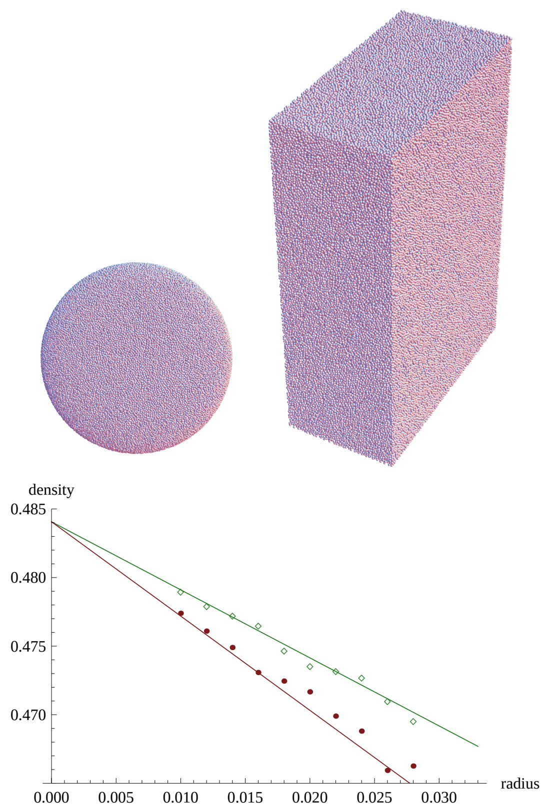

図 9 充填球半径に対する充填密度：半径 1 の球形容器 ◇，サイズ $1 \times 2 \times 3$ の直方体容器 ●

[K2] Kupwade-Patil, K., "Chloride and sulfate based corrosion mitigation in reinforced concrete via electrokinetic nanoparticle treatment," Dissertation (May 2010).

[L] Guangli Liu, Karsten E. Thompson, "Influence of computational domain boundaries on internal structure in low-porosity sphere packings," Powder Technology 113, 2000, 185-196.

[S] Scott, G. D., Kilgour, D. M., "The density of random close packing of spheres," J. Phys. D: Appl. Phys. 2 863. (1969).

[T] S. Torquato,T. M. Truskett, P. G. Debenedetti, "Is Random Close Packing of Spheres Well Defined?" PHYSICAL REVIEW LETTERS, VOLUME 84, NUMBER 10, 6 MARCH 2000.

[V1] Venkateshaiah, H., Kanno, J., Richardson, N., Phillips, J., Kupwade-Patil, K., Cardenas, H.E. and Mainardi, D.S, "Dynamics of solvated chloride inhibition by nanoparticle treated concrete," American Institute of Chemical Engineers (AIChE) Fall National Meeting, Philadelphia, PN, (November, 2008).

[V2] Visscher, W. M., Bolsterli, M., "Random packing of equal and unequal spheres in two and three dimensions," Nature 239, 504 - 507, (27 October 1972).

[Y] Shi, Y., Zhang, Y., "Simulation of random packing of spherical particles with different size distributions," Applied Physics A: Materials Science & Processing, Volume 92, Number 3, 621-626 (2008).