

## ランダム充填について

統計数理研 種村 正美

互いに入りこめない等大球のランダムで最密な集合の示す構造が、Bernal<sup>1)</sup>によって単純液体の構造模型として提案されて以来久しい。これは、いわゆる剛体球のランダム最密充填モデル(以下、RCPモデルと略称)であるが、このモデルが凝固点付近の液体の第一近似として妥当とされる理由の一つは、RCP密度と規則最密充填密度との差が液固相転移における両相の密度差に割合近いことである。また、RCPの動径分布関数も大ざっぱにいて液体のそれと近い形をしている。これらの点からRCPモデルは液体構造の参考系(reference system)として、また最近ではアモルファス構造の参考系としても多用されている。ところが、RCPの構造をいかに生成するかを数学的に定式化することになると問題は未解決のようである。<sup>2)</sup>ここでは、この点を充填密度に関して考えてみたい。

RCP密度を実験的に得る方法はほぼ次の通りである。<sup>3)</sup>内側が不規則な凹凸をもつ容器を用意し、多数の鋼球を入れて容器全体を振動させる。振動によって鋼球全体の占める体積はある値に落ちつくので、そのときの密度(以下、体積比として定義)を求める。鋼球数と容器の大きさをいろいろ変えて求めた密度を無限系に外挿することによって、RCP密度の平均として、

$$0.6366 \pm 0.0005$$

が得られている。<sup>3)</sup>この数値は独立に行われた他の実験結果<sup>4)</sup>と符合しているので、これが一般的に用いられているようである。

この実験を定式化しようとする、容器の壁の不規則な凹凸なるものをどのように評価するのか、容器の振動の効果をどのように取り入れるのかが、まず問題になる。後者は鋼球系の攪乱の効果であるが、攪乱の際、重力の影響が入るから問題は厄介である。このようにして、単に鋼球が互いにのめり込まないという制約条件だけで問題が片付かないことがわかる。

結局、ランダムという要素は実験における諸条件と複雑に結びついており、ランダムネスの素性がわかりにくいことが定式化を困難にしているのである。

これに対して、ランダム逐次充填の問題は定式化に困難なところはない。ある大きさの容器の中に剛体球を一様ランダムに置いていく。もし選んだ点に球を置いたとき、以前に置かれた

球と重なりを生じないなら、新しい球をその点に固定し、重なりを生じるなら球をそこに置かず、点を新しく選び直す。このプロセスを球が置けなくなるまで続けてできた結果がランダム逐次最密充填である。この問題は Bernal によって提案されたことが Rényi の論文<sup>5)</sup> のはじめの部分に出ている。Rényi はこれを一次元の場合に数学的に厳密に扱い、極限における最密充填密度の平均および分散を求めた。<sup>5)</sup> 二次元以上では密度を求めるのは計算機シミュレーションに頼らざるをえない。円板および球の最密充填密度については、最近、筆者も求めている。<sup>6)</sup> 球の場合には

$$0.3809 \pm 0.0007$$

であった。この種の数値はいくつかの独立な実験と比較すべきだが今のところ他に同様の実験がない。前記の RCP 密度と比べてかなり低くなるのは当然である。いずれにせよ、ランダム逐次充填の場合は、極限の最密充填密度の存在も証明されている。<sup>7)</sup> ランダム逐次充填に関しては他にいくつかの話題があり、文献 2), 6) に挙げられている。

## 文 献

- 1) Bernal, J. D. (1959). Nature **183**, 141; (1960) Nature **185**, 68; (1964) Proc. Roy. Soc. A**280**, 299. その他多数
- 2) 樋口伊佐夫 (1972). 応用物理 **41** No. 11 : (1973). 数理科学 No. 122, 6.
- 3) Scott, G. D. & Kilgour, D. M. (1969) J. Phys. D., **2**, 863.
- 4) Bernal, J. D. & Finney, J. L. (1967) Nature, **215**, 269.
- 5) Rényi, A. (1958). Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci., **3**, 109.
- 6) Tanemura, M. (1979). Ann. Inst. Stat. Math., **B31**, 351; (1981). Proc. Int. Roundtable Congr., 50th Anniv. Japan Stat. Soc., 216.
- 7) Palasti, I. (1960). Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci., **5**, 353.