

粉粒体の充てん構造とエントロピー

Packing Structure of Granular Materials and Entropy

金 谷 健 一*
Ken-ichi KANATANI

1. はじめに

粒子充てん層の物理的諸性質をまとめて充てん構造とよぶことがある。これを記述するものは種々の量の統計的分布である。たとえば粒径分布、空間率分布、接触点分布などがそうであり、これらの相違は粒子系の巨視的な物理的・化学的特性に重大な影響を与える（粉体中の接触点、接触力の分布と巨視的特性との関係の理論式に関しては金谷¹⁾参照）。ところが、これらの分布を記述するには数式あるいは図表により分布の関数形を与えなければならない。しかし、実際に重要なのは緻密な分布の関数形そのものではなく、それがどのような“複雑”な分布を表わしているかであることが多い。したがって、分布の関数形ではなく、何らかの単独の量によってその“複雑さ”の程度が表わせることが望ましい。このようなもののうち、“平均”と“分散”とが最もよく知られている。実際、もし分布が正規分布であれば、平均と分散とによって分布が完全に指定される。より一般の分布に対して、その“不規則性”あるいは“複雑さ”を表わす尺度として、エントロピーとよばれる量がある。

エントロピーは情報理論、統計力学、熱力学において、それぞれ異なった意味で用いられている。しかし、その数学的構造を抽象すれば、いずれも同じ意味で諸量の不規則性あるいは複雑さを表わしていることがわかる。結論を先にいえば、エントロピーとはある標準的な分布からのへだたりを表わす“距離”である。

ところで、従来、粒状体の充てん構造の最も確からしい構造として、エントロピーを最大にするものを求める研究がいくつかあった²⁻⁹⁾。さらにはこれを経済現象に応用しようとするものもある⁹⁾。これらはJaynesによる統計力学の定式化¹⁰⁻¹³⁾の変形とみることができるが、それらを注意深く検討すると、統計力学以外への適用にはどれも重大な誤まりを含んでいることがわかる。結論

としては、エントロピー最大化のみによって“最も確からしい”分布を定めることは原理的に不可能である。このことを示すために、まず粒子集合の粒径分布をとりあげる。そして、従来の理論を適用することによって、どこに不合理があるのかを明らかにする。その過程で情報理論のエントロピー、統計力学のエントロピー、および熱力学のエントロピーとの関係が明らかになる。

最後に、従来からよく取り上げられてきた空間率分布の問題を考えて、正しい扱い方を説明する。それによって、正しく用いればエントロピーが充てん構造のさまざまな不規則性、複雑さを数量的に表わすよい尺度となることを示す。

2. 粒径分布に関するエントロピー

簡単のため粒子はすべて球であるとし、その半径 a は区間 $[a_{\min}, a_{\max}]$ の範囲にあるとする。粒子の数 N は十分大きいとする。まず、半径の可能な値を n 個の引き続く小区間 $[a_{\min}, a']$, $[a', a'']$, ..., $[a''', a_{\max}]$ に分割して、それぞれの小区間の midpoint の値を a_1, a_2, \dots, a_n とする。そして、それぞれの小区間の値をすべてその midpoint の値でおきかえる離散化を行なう。半径が a_i とみなされる粒子の数を N_i とする。いいかえれば N_i は上述の小区間をもとに作ったヒストグラムの高さである。そして、

$$p_i = N_i / N \quad \dots\dots(1)$$

とおく。これは半径が a_i とみなされる粒子の割合である。そこで、“最も確からしい”分布 p_i を以下のようにして定めてみよう。

N 個の粒子が与えられたとき、各々の半径を指定するということは、各粒子を上述の小区間のどれかに分配することである。すなわち N 個の粒子を n 個の箱に分配することと同じである。このとき、それぞれの箱（すなわち小区間）に分配される粒子の数を N_1, N_2, \dots, N_n とすると、その合計は N であり、そのような分配の仕方

$$W = N! / N_1! N_2! \dots N_n! \quad \dots\dots(2)$$

昭和55年12月19日受付
*群馬大学工学部情報工学科
〒376 桐生市天神町1-5-1 TEL 0277-22-3181(内)834

となる。 N や各 N_i が十分大きいときは両辺の対数をと
り、スターリングの公式を用いれば

$$\log W \approx -N \sum_{i=1}^n \frac{N_i}{N} \log \frac{N_i}{N} \quad \dots\dots(3)$$

となる。各配分の仕方が等価であれば、最も確からしい
配分はこれを最大にするものである。したがって p_i は

$$H_n = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i \quad \dots\dots(4)$$

を最大にするようなものとして定まる。ただし、制約条件

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1 \quad \dots\dots(5)$$

が必要であり、また、たとえば平均半径が \bar{a} であるよう
なものに限定するなら、制約条件

$$\sum_{i=1}^n a_i p_i = \bar{a} \quad \dots\dots(6)$$

が必要である。(4)式は情報理論の Shannon のエント
ロピー¹³⁾にほかならない。以上よりわかったことは、
 H_n が分布の“不確定度”を表わす量であり、制約条件
(5), (6)以外には何の“情報”もないときは、最も不確定
な分布は制約条件(5)(6)のもとで H_n を最大にするよう
な分布である。これは情報理論の解釈とも一致している。
ここまでは何の問題もない。注意を要するのは次の段階
である。

3. 状態密度と正準分布

粒子の数が十分大きいとき、各小区間の長さを 0 に、
小区間の総数を無限大にするような極限をとってみよ
う。ただし両端の a_{\min} , a_{\max} は固定しておく。すなわ
ち(4)式で $n \rightarrow \infty$ とするのである。このとき、(4)式を

$$H = - \int p(a) \log p(a) da \quad \dots\dots(7)$$

でおきかえてはならない。ここが最も重要な点である。
なぜなら、(7)式はパラメーターの変換に対して不変な形
ではないからである。たとえば a の単調な関数 $b(a)$ を
考え、 b の確率密度分布を $p(b)$ とすると、確率密度分
布の変換則 $p(a)da = p(b)db$ より $p(a) = p(b)db/da$
であるから(7)式は

$$\begin{aligned} & - \int p(b) \frac{db}{da} \log \left(p(b) \frac{db}{da} \right) \frac{da}{db} db \\ & = - \int p(b) \log p(b) db - \int p(b) \log \frac{db}{da} db \quad \dots\dots(8) \end{aligned}$$

となる。これは $-\int p(b) \log p(b) db$ には等しくない。

一般にひとつの対象を表わすのに多くのパラメーターの
とり方がある。たとえば粒子の大きさを示すには球の場
合、半径 a , 直径 $2a$, 断面積 πa^2 , 体積 $4\pi a^3/3$, 等ど
れを用いても物理的には等価でなければならない。エン

トロピーが、考えている物理的状態の確率的性質を表わ
すのであれば、どのパラメーターを用いても同じ形であ
って、別のパラメーターに関する形はパラメーターの
変換操作によってのみから得られなければならない。

実際、 $n \rightarrow \infty$ のときの正しい極限操作を注意深く行な
えば次のようになる。まず、連続確率密度分布 $p(a)$
は、区間 $[a, a+da]$ の間にある粒子数の割合が $n \rightarrow \infty$
の極限において $p(a)da$ であるように定義される。次
に、“状態密度分布” $\Omega(a)$ を、区間 $[a, a+da]$ の間
にある前節で述べた中点の数の全体の小区間の総数に対
する割合が $n \rightarrow \infty$ のとき $\Omega(a)da$ であるように定義す
る。こうすると、 $n \rightarrow \infty$ のとき(7)式は

$$H_n \approx - \int p(a) \log(p(a)/\Omega(a)) da - \log n \quad \dots\dots(9)$$

となる。右辺第 2 項は発散するが $p(a)$ にはよらないの
で最大化のためには除いてもよい。そこで

$$H = - \int p(a) \log(p(a)/\Omega(a)) da \quad \dots\dots(10)$$

とおく。ただし積分は $a_{\min} < a < a_{\max}$ にわたって行な
うとする。明らかにこれはパラメーターの変換に不変な
形である。なぜなら、たとえば a のかわりに $b = b(a)$
を用いれば、 b に対する状態密度関数 $\Omega(b)$ はやはり
 $\Omega(b)db = \Omega(a)da$ で与えられ、したがって、 $\Omega(a) = \Omega(b)db/da$
である。一方、 $p(a) = p(b)db/da$ であるから

$$\begin{aligned} H &= - \int p(b) \frac{db}{da} \log(p(b)/\Omega(b)) da \\ &= - \int p(b) \log(p(b)/\Omega(b)) db \quad \dots\dots(11) \end{aligned}$$

となることが確かめられる。(7)式はちょうど $\Omega(a) = \text{const.}$
と仮定した場合のものになっている。すなわち、
小区間の中点 a_1, a_2, \dots, a_n を常に等間隔に保ったま
ま $n \rightarrow \infty$ とした場合に当たっている。しかし、そのよう
な必然性は何もなく、たとえば $a_1^2, a_2^2, \dots, a_n^2$ を等
間隔に保ってもよいし、 $1/a_n, 1/a_{n-1}, \dots, 1/a_1$ を等
間隔に保つような極限をとってもよい。重要なのは $n \rightarrow \infty$
のときのエントロピーの形がそのような極限の取り方
によって違ってくることである。先に導入した状態密度
分布 $\Omega(a)$ はその極限の取り方を指定する関数である。

さて、制約条件(5), (6)は $n \rightarrow \infty$ の極限でそれぞれ

$$\int p(a) da = 1 \quad \dots\dots(12)$$

$$\int a p(a) da = \bar{a} \quad \dots\dots(13)$$

となる。この制約条件のもとでエントロピー(10)を最大に
するような分布 $p(a)$ を求めてみよう。制約条件(12), (13)

に対するラグランジュの未定乗数をそれぞれ ν, θ とすれば、制約条件付き変分原理により

$$\delta \left(H + \nu \int p(a) da + \theta \int a p(a) da \right) = 0 \quad \dots\dots (14)$$

となる。変分 $p \rightarrow p + \delta p$ に対して (14) 式より

$$\delta H = - \int \delta p \log(p/\Omega) da - \int \delta p da \quad \dots\dots (15)$$

であるから (14) 式に代入して

$$\int [-\log(p/\Omega) - 1 + \nu + \theta a] \delta p da = 0 \quad \dots\dots (16)$$

となる。これが任意の変分 δp で成立する条件は [] の中が 0 となること、すなわち $p = (\text{定数}) \times e^{\theta a} \Omega$ である。この定数は制約条件 (12) が成立するように定まり、 θ は制約条件 (13) が成立するように定まる。前者の定数を $Z(\theta)^{-1}$ とおけば

$$p(a) = e^{\theta a} \Omega(a) / Z(\theta) \quad \dots\dots (17)$$

$$Z(\theta) \equiv \int e^{\theta a} \Omega(a) da \quad \dots\dots (18)$$

となる。ところで

$$\frac{d}{d\theta} \log Z(\theta) = \frac{Z'(\theta)}{Z(\theta)} = \int a p(a) da = \bar{a} \quad \dots\dots (19)$$

であるから、定数 θ は次式を解いて定めることができる。

$$\bar{a} = (d/d\theta) \log Z(\theta) \quad \dots\dots (20)$$

このようにして \bar{a} より定まる定数 $\theta(\bar{a})$ を“共役平均半径”， $Z(\theta)$ を“分配関数”，(17) 式の $p(a)$ を“正準分布”とよぶことにしよう。ところで

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\theta^2} \log Z(\theta) &= \frac{Z''(\theta)}{Z(\theta)} - \left(\frac{Z'(\theta)}{Z(\theta)} \right)^2 \\ &= \bar{a}^2 - (\bar{a})^2 = \overline{(a - \bar{a})^2} \quad \dots\dots (21) \end{aligned}$$

は粒子半径の分散 σ_a^2 である。ゆえに (20) 式に対応して

$$\sigma_a^2 = (d^2/d\theta^2) \log Z(\theta) \quad \dots\dots (22)$$

であることがわかる。一方、正準分布 (17) に対するエントロピー H の値は (10) 式より

$$H(\bar{a}) = -\bar{\theta} \bar{a} + \log Z(\theta) \quad \dots\dots (23)$$

となる。これは H が $\log Z$ の \bar{a} に関するルジャンドル変換であることを表わしている。したがって、両辺の変分をとってみると

$$dH = -\bar{a} d\theta - \theta d\bar{a} + (Z'/Z) d\theta = -\theta d\bar{a} \quad \dots\dots (24)$$

であり、次の関係を得る。

$$dH = -\theta d\bar{a} \quad \therefore \theta = -dH/d\bar{a} \quad \dots\dots (25)$$

4. エントロピーの意味

すでに明らかのように、以上の定式化は統計力学の場合とまったく同じである。統計力学と対応させるには粒子半径 a を系のエネルギー E とみなせばよい。温度 T は

$$\theta = -1/kT \quad \dots\dots (26)$$

によって定まる。ただし k はボルツマン定数である。熱力学的エントロピー S は

$$S = kH \quad \dots\dots (27)$$

で与えられる。(10) 式はギブスの正準分布であり、(20) 式、(22) 式も分配関数のよく知られた性質である。(23) 式はこの場合、(26) 式より

$$d\bar{E} = T dS \quad \therefore T^{-1} = dS/d\bar{E} \quad \dots\dots (28)$$

となる。系の平均エネルギーの増分 $d\bar{E}$ が内部エネルギーの増分 dU と外力のする仕事 $p dV$ とからなるとすれば $d\bar{E} = dU + p dV$ であるから、(28) 式より

$$dU = T dS - p dV \quad \dots\dots (29)$$

なる熱力学関係式が得られる。また、ラグランジュの未定乗数を用いた (14) 式は停留値を与える条件であるが、これが実際に最大値を与えること、および (20) 式の右辺が θ の単調増大関数であって、 \bar{a} に対して θ が一意的に定まることなども対数関数 $\log x$ のグラフが上に凸であることから証明できる¹⁴⁾。

以上より統計力学と完全に対応したが、これによって最も確からしい粒径分布を求める問題が完全に解決したといえるであろうか。答は否である。なぜなら、得られたものは正準分布 (17) 式であるが、まだ状態密度分布 $\Omega(a)$ が定まっていないからである。しかも、これを導く何の方法も与えられない。統計力学の場合、 $\Omega(E)$ を系のエネルギー準位が E と $E + dE$ の間にある量子力学的固有状態の数の割合が $\Omega(E) dE$ であるように定義している。これは“系の巨視的エネルギー \bar{E} を実現するような量子力学的固有状態の組み合わせはすべて等価である”と仮定することと同値である。これは“実験的等価原理”ともよばれ、統計力学における最も重要な仮説である¹⁴⁾。ところが、従来のエントロピー最大化の応用の研究ではこのことが十分理解されておらず、状態密度分布関数を導入していない。したがって、何の仮定もないのにエントロピーを用いさえすれば構造が判明するというような奇妙な結論が引き出されている。それらの理論をよく調べてみると、結局、何らかのパラメーターに関する一様等価性を暗黙のうちに仮定していることがわかる。たとえば最上²⁾⁻⁴⁾、Brown⁷⁾、Shahinpoor⁸⁾ は粒子集合の空間比 e に関する状態密度分布関数を一様分布としたことに相当している。ところがそれには何の根拠もない。空間比でなく空間率 $e/(1+e)$ をパラメーターにとって同じ議論を行えば異なった結論を得てしまう。このようなあいまいさは、結局 (4) 式の $n \rightarrow \infty$ での極限を (7) 式でおきかえてしまった誤りからきており、極限のとり方、したがって状態密度関数を指定していないため

である。Jowitt-Munro⁵⁾ は等径球の特定の 28種類 の規則的充てん状態がすべて等価であると仮定してエントロピーを計算している。また、宇野・福田⁶⁾ は二次元粒状体の粒子接触の作る多角形の辺の数はすべて等価であると仮定してエントロピーを用いた。これらも状態の重みを考慮していないため、どの量を等価と考えるかによって結論がまったく異なってしまう。以上のことから結論できるのは、状態密度関数をどう指定するか、あるいは同じことだが、どのパラメーターに関して等価性を仮定するかを定める方法がない以上、エントロピー最大化によって最も確からしい構造を定めることは原理的に不可能である。

それではエントロピーはまったく役に立たないのであろうか。確かに、従来の研究のような方法では無理である。しかし、見方を変えれば、エントロピーのもつ利点が明らかになってくる。④式のエントロピーは実は統計情報理論における Kullback¹⁵⁾ の情報量にほかならない。これは数理統計学において重要な役割を果たす量である。その特徴は常に負または零であって、 $p(a)$ が $Q(a)$ と一致するときのみ最大値 0 をとるということである。これをいいかえれば、 $-H$ が分布 $p(a)$ と分布 $Q(a)$ との“距離”を測っていることになる。この距離は非対称であり、方向性をもった量である。すなわち $p(a)$ と $Q(a)$ とを交換すれば別の値をとる。さて、この解釈によれば、正準分布④式は、制約条件③式のもとで $Q(a)$ に“最も近い”分布を求めていることになる。もちろん、何も制約がなければ $p(a)$ は $Q(a)$ に一致する。すなわち $Q(a)$ は何も制約がないときの“最もランダムな”分布と考えられる。したがって、エントロピー最大化とは、制約条件を満たす範囲内で最もランダムな分布 $Q(a)$ に最も近い分布を求めることにほかならない。この意味からも、エントロピー最大化のためには、最もランダムと考える分布 $Q(a)$ をあらかじめ指定しておかなければならないことは明白であろう。すなわち、何らかの基準状態を指定して、それからのへだたりを測るのでなければランダムさを定量的に測ることは不可能である。

例1. 区間 $0 < x < \infty$ で、平均値が m である制約のもとで一様分布に最も近い分布は

$$-\int_0^{\infty} p(x) \log p(x) dx \quad \dots\dots (30)$$

を制約条件

$$\int_0^{\infty} p(x) dx = 1, \quad \int_0^{\infty} x p(x) dx = m \quad \dots\dots (31)$$

のもとで最大化すれば求まる。その解は

$$p(x) = (1/m) e^{-x/m} \quad \dots\dots (32)$$

なる指数分布である。

例2. 区間 $-\infty < x < \infty$ で平均値が m 、分散が σ^2 である制約のもとで一様分布に最も近い分布は

$$-\int_{-\infty}^{\infty} p(x) \log p(x) dx \quad \dots\dots (33)$$

を制約条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx = m,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (x-m)^2 p(x) dx = \sigma^2 \quad \dots\dots (34)$$

のもとで最大化すれば求まる。その解は

$$p(x) = (1/\sqrt{2\pi}\sigma) e^{-(x-m)^2/2\sigma^2} \quad \dots\dots (35)$$

なる正規分布である。

上のふたつの例はいずれも一様分布からのへだたりを考えたが、 $Q(x)$ を一般の分布にとっても、もちろんよい。たとえば $Q(a)$ を粒子半径のある正規分布とし、 $p(a)$ を実測した実際の分布とすると④式のエントロピーは、実際の分布 $p(a)$ が正規分布 $Q(a)$ からどの程度へだたっているかを測る尺度となっている。これを応用すれば、ある基準の分布のもとでの巨視的な物理的・化学的性質を測定しておいて、次に、分布が基準の分布からどの程度へだたればどの程度の性質の変化が生じるのかを考えたりすることが可能になる。特に最もランダムと考える基準の分布を与えれば、ある分布がどの程度ランダムかをエントロピーによって測ることができる。またいくつかの制約条件のもとで最もランダムな分布をエントロピー最大化によって求めることができる。このように、エントロピーを“距離”と考えることにより、粒状体の充てん構造のさまざまな記述に利用することができる。このような考えの例として、金谷のモデル^{16,17)} を次節でとりあげる。

5. 二次元粒状体の充てんのエントロピー

等径の円柱からなる二次元粒状体の密な充てんを考える。V をサンプルの（粒子の軸方向の単位長さ当りの）体積とし、その中に含まれる粒子数を N とする。全体としてみれば粒子の配列はランダムであるとしても、局所的にみれば個々の規則的配列をもつ小領域から成るであろう (Fig. 1)。 (もし配列が十分ランダムで、各小領域にはひとつの粒子しかないとき、これをポロノイセル¹⁸⁾ とよぶこともある)。さて、このサンプル内に現れる最小の空間率と最大の空間率との間を n 個の小区間に分割して、 E_1, E_2, \dots, E_n をそれぞれの中点の値とする。そして、サンプル内の空間率をすべてこれらの中点の値に離散化し、空間率 E_i をもつ小領域の体積の合計

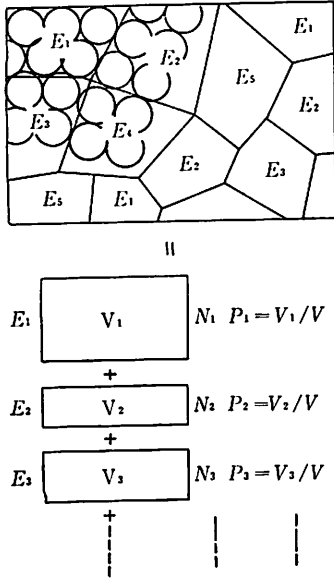


Fig. 1 粒子充てん系の微視的状態とその分布

を V_i とする。そこに含まれる粒子数を N_i とする。当然

$$\sum_{i=1}^n N_i = N, \quad \sum_{i=1}^n V_i = V \quad \dots\dots(36)$$

である。そこで

$$p_i = V_i/V \quad \dots\dots(37)$$

とおけば、これは空間率 E_i をもつ小領域がこのサンプル内に割合 p_i で分布していることを表わす（ポロノイセルを考えても同じことである）。このサンプルの平均空間率は $\bar{E} = (V - vN)/V$ で定義される。ただし v は一粒子の（単位長さ当りの）体積である。36式、37式より

$$\bar{E} = \sum_{i=1}^n \frac{V_i - vN_i}{V_i} \frac{V_i}{V} = \sum_{i=1}^n E_i p_i \quad \dots\dots(38)$$

を得る。すなわち \bar{E} は E_i の確率分布 p_i に関する期待値である（もし空間率 E のかわりに空間比 $e = E/(1-E)$ を用いるのなら、平均空間比は

$$\bar{e} = (V - vN)/vN \text{ であるから}$$

$$\bar{e} = \sum_{i=1}^n \frac{V_i - vN_i}{vN_i} \frac{N_i}{N} = \sum_{i=1}^n e_i \frac{N_i}{N} \quad \dots\dots(39)$$

となる。この場合は確率分布として37式の p_i ではなく、粒子数の比で測った N_i/N を確率と考えなければならない。

さて、局所的な充てんとして、比較的密な Fig. 2 のような規則配置を考えよう。隣接する粒子の中心を結べば基本単位となるひし形が得られる。二本の直交する対角線のうち、第一象限を通るものと x 軸とのなす傾き角を β とし、この対角線とこれをはさむ辺とのなす角を α

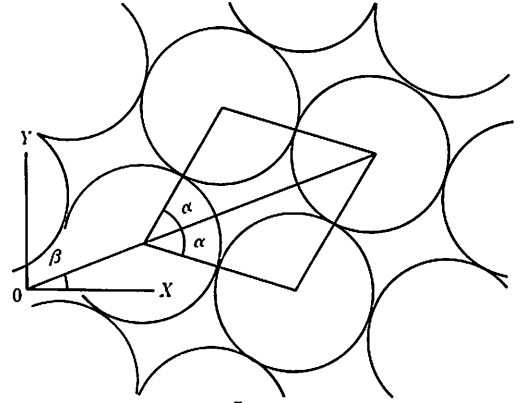


Fig. 2 規則的配列からなる局所充てん構造

とする (Fig. 2)。 α と β の組が与えられれば局所充てん構造は一意的に定まる。サンプルが十分大きいとし、 $n \rightarrow \infty$ の極限をとると、これらは

$$\pi/6 \leq \alpha \leq \pi/3, \quad 0 \leq \beta < \pi/2 \quad \dots\dots(40)$$

なる連続変数とみなすことができる。 $\alpha = \pi/6, \pi/3$ のときが最密充てん状態である。局所空間率は α のみによって定まり

$$E(\alpha) = 1 - \frac{\pi}{4 \sin 2\alpha} \quad \dots\dots(41)$$

となる。次に状態密度分布 $\Omega(\alpha, \beta)$ を与えなければならない。すなわち $n \rightarrow \infty$ の極限のとり方を定めなければならない。この $\Omega(\alpha, \beta)$ は“最もランダムな”充てん構造を指定するものであって、前節で述べたように何かから導かれるものではない。これは自由に定められる。まず自然な考えとして、 Ω は β によらないと考えてみよう。これは β が局所充てん構造の剛体回転を測る角度であるから、“最もランダムな”分布としては、あらゆる向きものが一様に含まれていると考えるのが自然だか

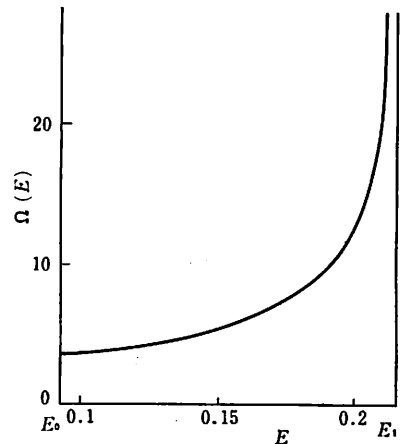


Fig. 3 何の制約がないときの最もランダムな空間率の分布を定義する状態密度関数 $\Omega(E)$

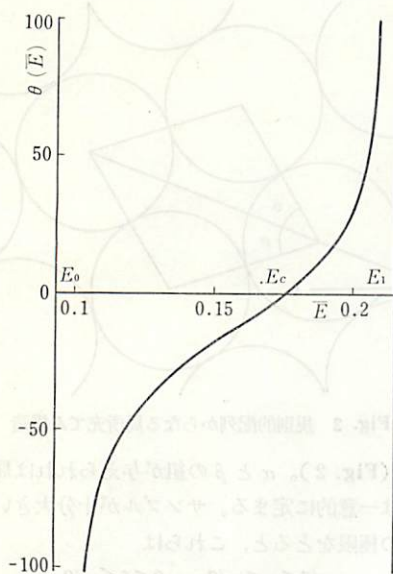


Fig. 4 平均空間率 \bar{E} と共役平均空間率 θ との関係

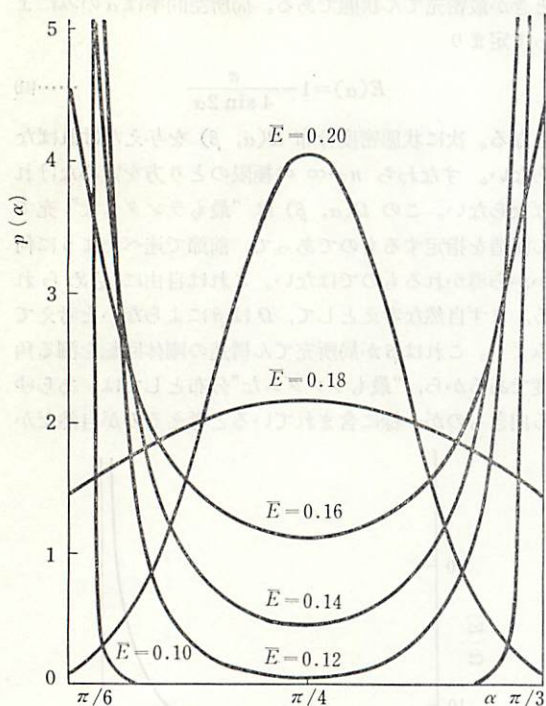


Fig. 5 粒子接触角 α の正準分布

らである。次に α に関して、ここでは $\pi/6 \leq \alpha \leq \pi/3$ の区間に一様に分布しているのが“最もランダムな”構造であるとみなしてみよう。すなわち

$$\Omega = 6/\pi \quad \dots\dots(42)$$

とする。いいかえれば、これによって“最もランダム”

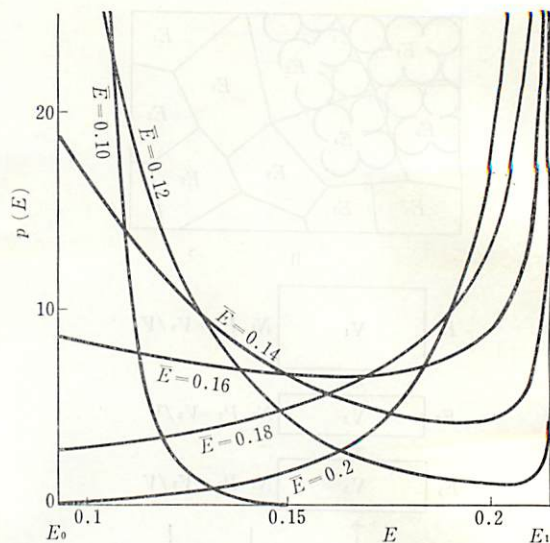


Fig. 6 空間率 E の正準分布

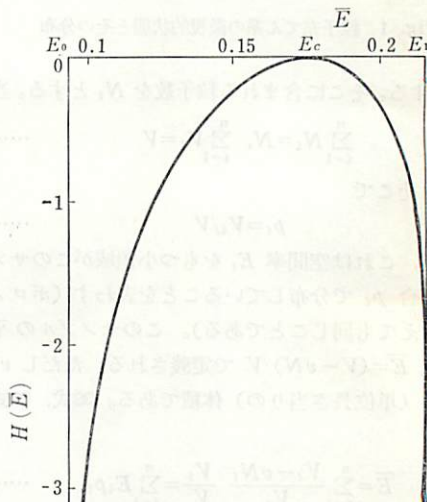


Fig. 7 平均空間率に対するエントロピー

な充てん構造を定義したのである。これを空間率 E の分布に直すには変換則 $\Omega(E)dE = \Omega d\alpha$ より(4)式から $\Omega(E) = \Omega/(dE/d\alpha)$ を計算すればよい。結果は

$$\Omega(E) = 6/(1-E)\sqrt{16E^2 - 32E + 16 - \pi^2} \quad \dots\dots(43)$$

となる。これが、われわれの定義した最もランダムな空間率の分布であり、Fig. 3 のようになる。ただし E のとりうる最小値 E_0 は $\alpha = \pi/6, \pi/3$ のときの値であり、最大値 E_1 は $\alpha = \pi/4$ のときの値であり、それぞれ次の値をとる。

$$E_0 = 1 - \sqrt{3}\pi/6 = 0.0931 \dots \dots(44)$$

$$E_1 = 1 - \pi/4 = 0.2146 \dots$$

次に、平均空間率が \bar{E} であるという制約条件のもと

で最もランダムな分布を考えてみよう。それはエントロピーを最大化した正準分布であるが、われわれはパラメータによらない不変な定式化を行なっているから、 E で考えても α で考えてもよい。 α で考えれば(47式、(48式と(42式とより

$$p(\alpha) = (6/\pi) e^{\theta E(\alpha)} / Z(\theta) \quad \dots\dots(45)$$

$$Z(\theta) = (6/\pi) \int_{\pi/6}^{\pi/3} e^{\theta E(\alpha)} d\alpha \quad \dots\dots(46)$$

となる。ただし“共役平均空間率” θ は \bar{E} より

$$\bar{E} = (d/d\theta) \log Z(\theta) \quad \dots\dots(47)$$

を解いて定まる定数である。これを示すのが Fig. 4 である。(45式の $p(\alpha)$ は Fig. 5 のようになる。両端 $\alpha = \pi/6$, $\pi/3$ が最密な状態であり、中央の $\alpha = \pi/4$ が最も粗な状態である。全体が粗で \bar{E} が E_1 に近いときは中央部分の占める割合が大きく、全体が密になって \bar{E}

が E_0 に近づくと両端の近くの割合がふえる。これを空間率 E に変換したものが Fig. 6 である。この正準分布に対するエントロピーは Fig. 7 のようになる。これによって $-H$ が“距離”を表わすことがよくわかる。すなわち、平均空間率 \bar{E} が E_0 または E_1 のときは、サンプル中のいたるところが最密あるいは最粗の充てんから成っており、ランダムな充てん構造から“遠く離れた”状態である。 H が最大値 0 をとるのは $\theta = 0$ の場合であり、このときの平均空間率は

$$E_c = 0.1760 \dots \dots\dots(48)$$

である。これに対する α の分布は一様分布であり、 E の分布は(43式の $\Omega(E)$ と一致する。すなわち、指定された最もランダムな分布となる。

引用文献

- 1) 金谷健一：粉体工学会誌, 17-9, 504 (1980)
- 2) Mogami, T.: *Soils and Foundations*, 5-2, 26 (1965)
- 3) 最上武雄(編)：“土質力学”, p. 998, 技報堂 (1969)
- 4) 最上武雄, “最上武雄博士論文選集” 東大工学部土木教室 (1973)
- 5) Jowitt, P. W. and Munro, J.: *Proc. Application of Statistics and Probability in Soil and Structural Engineering, Aachen*, p. 365 (1975)
- 6) 宇野尚雄, 福田光治：土木学会第30回年次学術講演会講演概要集, 第3部, p. 396 (1975)
- 7) Brown, C. B.: *Continuum Mechanical and Statistical Approaches in the Mechanics of Granular Materials (Proc. U.S.-Japan Seminar, Sendai, 1978*, ed. by S. C. Cowin and M. Satake), p. 98 (1978)
- 8) Shahinpoor, M.: *Powder Technol.*, 25, 163 (1980)
- 9) 国沢清典：“エントロピーモデル”, 日科技連 (1975)
- 10) Jaynes, E. T.: *Phys. Rev.*, 106, 620 (1951); 108 171 (1957)
- 11) Jaynes, E. T.: *Proc. 1st Symp. on Engineering Applications of Random Function Theory and Probability* (ed. by J. L. Bogdanoff and F. Kozin). Wiley, p. 163 (1963)
- 12) Jaynes, E. T.: “*Statistical Physics*” III (ed. by K. W. Ford) Benjamin, p. 182 (1963)
- 13) Shannon, C. E. and Weaver, W.: “*The Mathematical Theory of Communication*”, Univ. Ill. Press (1949)
- 14) Khinchin, A. I.: “*Mathematical Foundations of Statistical Mechanics*,” Dover (1949)
- 15) Kullback, S.: “*Information Theory and Statistics*,” Wiley (1959)
- 16) 金谷健一：土質工学会論文報告集, 20-4, 221 (1980)
- 17) Kanatani, K.: *Int. J. Engng Sci.*, 18, 989 (1980)
- 18) Finney, J. L.: *Proc. Roy. Soc.*, A319, 479, 495(1970)

Packing Structure of Granular Materials and Entropy

by

Ken-ichi KANATANI

(Department of Computer Science, Gunma University)

Entropy is proposed as a quantity measuring the randomness of the packing structure of granular materials. The entropy of the particle size distribution is considered, which makes clear the relationship between present entropy and those in information theory, statistical mechanics and thermodynamics. It is shown that there are problems in similar types of existing theories and it is concluded that the entropy represents a "distance" between an observed distribution and a reference distribution. The entropy of the void fraction distribution is considered as an illustrative example.

List of Figures

- Fig. 1** Microscopic states of random packing and their distribution.
- Fig. 2** Local packing structure consisting of regular arrays of particles.
- Fig. 3** The state density function, $\Omega(E)$, which defines the most random distribution of void fraction when no constraint exists.
- Fig. 4** The average void fraction E vs. the conjugate average void fraction θ .
- Fig. 5** Canonical distribution for the contact angle α .
- Fig. 6** Canonical distribution for the void fractions E .
- Fig. 7** The average void fraction E vs. entropy $H(E)$.