2次元界面のモンテカルロシミュレーション*

鯉 渕 弘 資*

Monte Carlo Simulations of Two-Dimensional Interfaces

Hiroshi KOIBUCHI

We numerically study two dimensional interfaces between two different fluids, by a Monte Carlo technique. The canonical ensemble averages of various observables on interfaces are obtained from a time series of configurations of interfaces produced by a canonical MC. We find that the specific heat C , which is a fluctuation of the internal energy, becomes large at the critical point b_c . The peak height of the specific heat $C(b_c)$ increases as the number N of constituent particles of the interface increases, so that the height $C(b_c)$ scales as $C(b_c) \sim N^\sigma$, where σ is called a critical exponent. It is observed that $\sigma < 1$, therefore we conclude that the phase transition between the ordered and disordered phases is of second order. Models of nonintersecting and area nonpreserving fluid membranes are also studied by canonical and grand canonical MCs, respectively. We show clear evidence that these models also have phase transitions.

Key Words: Interface, Fluid Membrane, Numerical Analysis, Monte Carlo, Phase Transition, Critical Exponent

1 序論

2つの異なった流体を隔てる境界を液体界面、簡単に界面と呼ぶ。著者らは流体の混合現象を理解するため、それを界面の運動、あるいは変形、によって引き起こされるものと見て、界面を数値的に研究している(1,2,3)。

界面の一番大きな特徴は表面張力を持つことであり、その表面張力は界面の面積をできるだけ小さくしようとする働きと、界面をできるだけ滑らかにしようとする働きを持つ。界面の持つ、その他の特徴としては、変形の途中でその面積が変化すること、自分自身とは交わらないという自己回避性を持つこと、である。

このような性質を持つモデルを作り、そのモデルを調べて何か普遍的な特徴を捕まえることができれば、それは「異種流体の混合」という現象のある側面を理解する一つのきっかけになるのではないかと考える訳である。

文献(1)ではMC法によって、1次元モデル界面には相転移が存在しないこと、文献(2)では他の数値的方法によって同じ結果が得られることを示した。文献(3)では、自己回避性を持ち、長さが変化する1次元界面モデルにも、文献(1,2)のモデルと同様に相転移が存在しないことを確かめた。

本論文では、文献(1-3)で研究した1次元界面の自然

な拡張である2次元界面⁽⁴⁾を対象とし、その相転移現象をMC法によって研究する。

流体混合現象の理解に向けて、相転移現象に興味を持つ理由は2つある。1つは、これが主な理由であり、純粋に学問的な興味のためという要素が強いようにも見えるが、相転移が存在するということは、見かけ上全く異なるいくつかの個々の現象の間に共通な何かの性質があることを意味する⁽⁵⁾から、異種流体の混合という自然現象の理解とか認識という点に関して、ある視点を持つことができる、と思えるからである。

もう1つの理由は、空想的な要素も入ってくるが、もし相転移が存在すれば、界面の隔てる2つの流体の混合が相転移温度(=臨界温度あるいは臨界点とも呼ぶ)を境に急激に進行する、あるいは流体の混合の状態から分離の状態に急激に移行する、というような現象があることを意味するから、そのような物質を見つけるとか作るというような、応用上の興味も生じてくる、と思えるからである。

2 界面のモデル

2.1 界面の連続的モデル

文献(1)で、1次元界面を区間 $I = [0, 1]$ から D 次元ユークリッド空間 R^D ($D = 1, 2, 3$) への写像と見なした。同様に、2次元界面をパラメータ空間 I^2 からユークリッド空間 R^3 への写像と見なすことにする。ここでは、 I^2 を R^2 内の部分集合 $[0, 1] \times [0, 1]$ を表す記号ではなく、一般の2次元曲面を表す記号とする。即ち、2次元界面

* 原稿受付 1995年2月28日。

*1 正員、茨城工業高等専門学校 (〒312 ひたちなか市中根866)。

では、一般の2次元曲面 I^2 の点 $x = (x_1, x_2)$ に対して、 R^3 の点 $X^\mu(x_1, x_2)$, ($\mu = 1, 2, 3$) (あるいは $\vec{X}(x_1, x_2)$) を対応させる。この写像の像 $X^\mu(I^2)$ を界面と呼び、簡単に X^μ と書くことにする。

なお、2次元曲面 I^2 にはリーマン計量 g が与えられているものとする。本論文では特に I^2 を閉曲面とする。その結果、界面 X^μ も閉曲面となる。更に、閉曲面は種数 (genus) によって分類されるが、本論文では特に種数1の曲面、即ち「球面」のトポロジーを持つ曲面を扱うこととする。

曲面 I^2 と写像 X^μ が与えられたとき、界面 X^μ の面積エネルギー S_1 を

$$S_1 = \int \sqrt{\det g} d^2x g^{ab} \frac{\partial X^\mu}{\partial x^a} \frac{\partial X^\mu}{\partial x^b} \quad (1)$$

と定義する。ここで、 (g_{ab}) は曲面 I^2 の第1基本量 (=リーマン計量、以後 g とかく)、 $\det g = \det(g_{ab})$, (g^{ab}) は行列 (g_{ab}) の逆行列を表す。(1)式の中で添え字 a, b は1から2まで、 μ は1から3まで動いて和をとるものとする。式(1)は、 g_{ab} として誘導計量

$$g_{ab} = \frac{\partial X^\mu}{\partial x^a} \frac{\partial X^\mu}{\partial x^b} \quad (2)$$

をとるならば、 $S_1 = \int \sqrt{\det g} d^2x$ となり、これは通常、曲面 I^2 の面積と呼ばれている量である。このことは、式(1)の S_1 が面積エネルギーとして自然なものであることを意味する。従って、序論で述べた「表面張力の持つ、面積を小さくさせようとする性質」は、面積エネルギーという形で定量化されてモデルに組み込まれた、と思って良い。

一方、曲げ (あるいは内部) エネルギー S_2 は

$$S_2 = \int \sqrt{\det g} d^2x K_a^b K_b^a \quad (3)$$

と定義する。ここで、 $K_a^b = g^{bc} K_{ac}$ であり、 K_{ab} は曲面 I^2 の第2基本量と呼ばれ、界面 X^μ の単位法線ベクトルを n^μ とすると、 $K_{ab} = -\frac{\partial n^\mu}{\partial x^a} \frac{\partial X^\mu}{\partial x^b}$ と定義される。 S_2 は g_{ab} が(2)式で与えられるとき

$$S_2 = \int \sqrt{\det g} d^2x g^{ab} \frac{\partial n^\mu}{\partial x^a} \frac{\partial n^\mu}{\partial x^b} \quad (4)$$

となって、これは界面 X^μ の折れ曲がり具合に応じて大小の値をとる量である。このことは、式(3)の S_2 が曲げエネルギーとして自然なものであることを意味する。従って、「表面張力の持つ、界面を滑らかにする性質」は、曲げエネルギーという形で定量化されてモデルに組み込まれた、と思って良い。

式(1),(3)は、 X^μ とは異なった写像 X'^μ を用いても同じ値になることがある (例えば平衡移動した場合) が、それらは全て X^μ で代表させる。 g についても同様である。このようとき、 S_1, S_2 は対称性あるいは不変性を持つ、というが以後これに関しては議論しない。

界面 X^μ の全作用は、曲げこわさと呼ばれる無次元

の定数 b (逆数 $1/b$ が温度に対応する⁽¹⁾) によって、 S_1 と S_2 の1次結合として

$$S(X, g) = S_1 + b S_2 \quad (5)$$

と表わす。 X と g は S_1 と S_2 が曲面 I^2 のリーマン計量 g とその埋め込み写像 X^μ に依存していることを示す。

2.2 界面の離散的モデル

曲面 I^2 が滑らかな3角形で分割されているとする。3角形の各辺は I^2 上の滑らかなパラメータ曲線とみなせるが、その長さによって I^2 に距離を定義できるから、 I^2 に滑らかな3角形分割を与えることは、 I^2 に1つの計量 g を与えることと同じである。 I^2 の上の滑らかな3角形分割は、写像 X^μ によって界面 $X^\mu(I^2)$ の上に、各頂点を直線で結んだ通常の3角形分割として写されるとする。これによって、 I^2 の上の計量 g が X^μ に持ち込まれる。逆に考えれば、界面 X^μ に1つの3角形分割を与えることは、 I^2 の上に計量 g と埋め込み X^μ を与えること、即ち曲面 I^2 を1つ決めること、と見なせる。

そこで、 X^μ を通常の3角形によって分割する。このとき、式(1)の S_1 を、3角形分割された界面 X^μ の上で

$$S_1(X, g) = \sum_{(i,j)} (X_i^\mu - X_j^\mu)^2 \quad (6)$$

と離散化する。ここで、 X_i^μ は3角形の頂点 i の位置を表し、 (i, j) は両側に頂点 i, j を持つボンドを表す。

S_2 の方は

$$S_2(X, g) = \sum_{(i,j)} (1 - \cos \theta_{ij}) \quad (7)$$

と離散化する。ここで、 θ_{ij} はボンド (i, j) を共有する2つの3角形の間の角度である。(7)式は g_{ab} を(2)式の誘導計量とした場合の、式(4)の標準的な離散化になっている。以下では、3角形の各頂点 i を界面分子あるいは界面構成粒子と呼び、頂点の数 N を分子数と呼ぶ。

さて、初めに分子数 N を固定した、カノニカル分配関数 $Z(N)$ を定義する。系の力学変数は各分子の位置 X_i^μ と3角形分割 g であるから、 $Z(N)$ は自然に

$$Z(N) = \sum_g \int \prod_{i=1}^{N-1} d\vec{X}_i \exp(-S(X, g)) \quad (8)$$

と定義できる。ここで、 $\sum_g$ は、可能な全ての3角形分割について和をとることを意味する。

任意の物理量 Q の期待値 $\langle Q \rangle$ は

$$\langle Q \rangle = \sum_g \int \prod_{i=1}^{N-1} d\vec{X}_i Q \exp(-S(X, g)) / Z(N) \quad (9)$$

で定義される。 S_1 の期待値 $\langle S_1 \rangle$ は

$$\langle S_1 \rangle = \frac{3}{2}(N-1) \quad (10)$$

で与えられることも注意しておく⁽¹⁾。

界面の面積を変化する量として扱うためには、文献

(3)と同様にグランドカノニカル分配関数

$$Z_{GC} = \sum_N \exp(\mu N) \int \prod_{i=1}^{N-1} d\vec{X}_i \delta(X) \exp(-S) \quad (11)$$

を用いる。ここで、 $\sum_N$ は可能な分子数 N についての和を表し、 μ は化学ポテンシャルである。 $\delta(X)$ は界面に自己回避性を与えるための重み関数で

$$\delta(X) = \begin{cases} 1 & \text{for nonintersecting configurations} \\ 0 & \text{for intersecting configurations} \end{cases} \quad (12)$$

と定義し、自己回避性を与えない場合は、どんな配位に対しても $\delta(X) = 1$ とする。 Z_{GC} による物理量の期待値も式(9)と同様に定義される。

2.3 連続的モデルと離散的モデルの関係

式(5)の S に於いて、計量 g を誘導計量(2)に固定したものを液体界面と呼ぶこともある⁽⁴⁾が、本論文では(5)式のように X と g の何れもが力学変数であるものを液体界面のモデルと呼ぶ。従って、古典力学的に見れば、問題は「(5)式の S を極小にする曲面 I^2 のリーマン計量 g と写像 $X^\mu: I^2 \rightarrow R^3$ を探すこと」になる。

これを数値的に行うために S を離散化すると、文献(1)の1次元界面の場合と同じく、 S を相互作用する多粒子系のもとと見なすことになる。その結果、統計力学的手法によってその離散化モデルを扱うことになる。このように、界面の離散的な統計力学モデルは、連続的モデルを数値実験の方法で研究するために作られた、便宜的なもの、という一面を持つ。

一方、本論文では文献(3)と同様に、実際の界面の「面積が変化する」という性質は、離散的なモデルに於いて「分子数を変数とする」ことによって、モデルの中に取り込むことができるもの、と考えている。即ち、面積が変化する性質を持つ界面の場合、離散的モデルをより基本的なものとして、それを出発点としているのである。このように、離散的モデルが実際の現象のモデルとして、より自然なものであると見なせる場合もある訳である。

しかしながら、自然現象のモデルは、それが客観的な意味を持つためには、数学の言葉で表現されていなければならない。この点に於いて、連続体幾何学は空間の無限小部分に於いては適用されないかも知れない、という指摘もあるが⁽⁶⁾、一般には、連続的モデルが離散的モデルに対して優位性を持つと言わねばならない。

以上のような考察から本論文では、どんな現象に対してもそれ(のある側面)を記述するような数学的形式を持った連続的モデルが存在し、かつ、連続的モデルと離散的モデルの間には、一方から他方が決まるというような特別の関係がある、と考える。

さて、一般に任意の連続的モデルに対して、その数値実験のための離散的モデルを対応させることが「意味を持つ」ためには、数値実験に於ける物理量の測定結果が、離散化の方法(式(6),(7)はそれぞれ式(1),(3)

の離散化の1つの方法である)に依存せずに、「同じ値」になることが必要である。ところで、2次の相転移を持つ実際の現象では、物理量の値あるいはそれらの間の関係が、その転移点の近くでは、現象の微視的な相互作用の詳細に依らずに定まる、という「普遍性」⁽⁵⁾を持つことが、経験的事実として知られている。このことは、離散的な統計力学モデルとその数値実験的測定に対しても、多くの場合、成り立つと考えられている。

従って、2.2節に示した界面の離散的モデルに、2次の相転移があれば、その界面の連続的モデルに対する本論文の離散的モデルとその数値実験は、ある1つの離散化法を選んでいるにもかかわらず、離散化の仕方に依存しない測定値、あるいはそれらの間の関係が得られることが保証され、「意味を持つ」ことになる。

逆に、2.2節の離散的モデルを出発点として考える時には、それがもし2次の相転移を持つならば、ある1つの数学的な連続的モデルによって記述されるような「普遍的な物理的現象」が存在する、と考えることもできる。それは、このような物理現象があつて「異種流体の混合現象」は、その物理現象の現れ方の1つになっている、というような考え方である。なお、このような物理現象が連続的モデルによる数学的表現を持たなければならない理由は、先にも述べたように、もしそうでなければ、一般にはその物理現象は客観性を持ってないからである。

なお、離散的モデルが2次の相転移を持つということは、離散化の方法に依存せずに物理量の値が定まる、ということよりも強い条件である。従って、ある離散的モデルが2次の相転移を持たないからといって、その離散的モデル、あるいはその数値実験が、必ずしも「意味のない」ものとはならないことも注意しておく。

3 実験方法

3.1 MC法

本論文では次の3つの場合について調べる。即ち、

$$\begin{cases} \text{Case-A} \cdots N = \text{一定, 自己回避性無し,} \\ \text{Case-B} \cdots N = \text{変化, 自己回避性無し,} \\ \text{Case-C} \cdots N = \text{一定, 自己回避性有り.} \end{cases}$$

Case-A, C では分子数は一定であるから式(11)で $\sum_N$ は無くなり、Case-C では式(8)の分配関数に $\delta(X)$ を取り込んだものを使う。Case-A, B では自己回避性無しであるから、 $\delta(X)$ は常に1とする。

本論文のMC法は図1に示す4つの基本的プロセスから成る。

Step-1 は式(8)の $\int dX_i$ に対応するMC過程であり、各分子を $X_i^\mu \rightarrow X_i^\mu + \delta X_i^\mu$ と変位させる。 δX_i^μ の作り方はいろいろ考えられるが、本論文では2つ方法を試みる。

図1 Basic MC process

1つは Disp-A と呼ぶことにしてそれは、 δX_i^μ は X_i^μ を中心とする半径 R の球面上のランダムな位置とし、その半径 R はその時のボンド長の平均値 l の ϵ 倍に大きさ 1 の一様乱数 x を掛けたもの

$$R = \epsilon l x \quad \cdots \text{Disp-A} \quad (13-1)$$

とする。2 番目の方法は Disp-B と呼び、 δX_i^μ は X_i^μ を中心とする半径 R の球体内のランダムな位置とし、その半径 R はその時のボンド長の平均値 l の ϵ 倍

$$R = \epsilon l \quad \cdots \text{Disp-B} \quad (13-2)$$

とする。 l は式 (10) から一定値になるから、いずれの方法に於いても、 ϵ の大きさを変えることによって、 δX_i^μ の大きさが変わり、その結果、Step-1 の受け入れ比率 (rate of acceptance) を調節できることになる。Step-1 を N 個の分子に順番に 1 回ずつ、あるいはランダムに N 回繰り返すことを 1 sweep と呼ぶ。

Step-2 は式 (8) の Σ_g に対応する MC 過程である。ボンドの結ばれ方の違いは 3 角形分割の違いに対応するから、図のような過程が Σ_g をシミュレートする自然なものと考えられる。ランダムにボンドを選んで Step-2 をその時の分子数 ($= N$) 回繰り返すことを $n_{\text{flip}} = 1$ とし、1 sweep 毎に

$$n_{\text{flip}} (\geq 1) \quad (14)$$

回行う。 n_{flip} の最適の値については実際に調べる。

Step-3,4 は式 (11) の Σ_N に対応する過程である。Step-

3 は蒸発過程に対応する。この過程は、 $(N-1)$ 個の分子の中からランダムに一つの分子を選び、更に、その分子と結ばれている分子を 1 つランダムに選んで、その 2 つを結んでいるボンドを図のように取り除く、という形で実行する。

Step-4 は分子の吸着過程に対応する。この過程は、1 つの 3 角形をランダムに選び、その 3 角形の重心に新しい分子を 1 つ置くことによって実行する。

Step-3 と Step-4 は

$$n_{\text{swp}} \quad \text{sweeps} \quad (15)$$

毎に 1 回、交互に行う。この事情は文献 (3) と同様であり、 n_{swp} の最適値についても実際に調べる。

これらの各過程に於いて、新しい配位を受け入れるかどうかは、Step-1,2 では文献 (3) の Step-1 と同じ方法、Step-3,4 では文献 (3) の Step-2,3 と同じ方法でそれぞれ決定する。

各ステップを実行するに当たっては、ボンド長がその時のボンド長の平均値の 0.1% 以下となるようなボンドの現れる変形は除く。誘導計量による面積が、数値的にほとんどゼロになってしまうような 3 角形の現れる変形も除く。Step-4 は面積がその時の 3 角形の面積の平均値の 1% 以上であるような 3 角形に対してのみ実行する。

界面に自己回避性を与える場合は、Step-1,2,3 で界面が自己交差しないような変形に対してのみ、MC 法のアルゴリズムを適用する。Step-4 では界面の初期配位が自己交差していなければ、どんな新しい配位も自己交差しないことになる。

なお、界面の初期形状はある半径の球面とし、その球面は文献 (7) のタイプ A の 3 角形格子で分割する。

3.2 測定する物理量

(9) 式の平均は MC 法の時系列平均 $\langle Q \rangle = \Sigma_i Q_i / \Sigma_i 1$ で近似する。ここで、 Q_i はある時刻 i でのサンプル配位 (X, g) から定まる Q の値である。以後、 $\langle Q \rangle$ を簡単に Q と書くこともある。また、数値実験によって測定できるものは何でも「物理量」と呼ぶ。

本論文で測定する物理量は次のものである。

- (a) 1 分子あたりの面積エネルギー S_1/N .
- (b) 1 分子あたりの曲げエネルギー S_2/N .
- (c) 平均 2 乗サイズ X^2 ,

$$X^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (X_i^\mu - \bar{X}^\mu)^2, \quad \bar{X}^\mu = \frac{1}{N} \sum_i X_i^\mu. \quad (16)$$

- (d) フラクタル次元 H ,

$$X^2 \sim N^{\frac{2}{H}} \quad \text{at} \quad N \rightarrow \infty \quad (17)$$

は界面の秩序相、乱雑相を特徴づける重要な量となる。 H は Case-A, あるいは Case-C での X^2 の測定値から最小 2 乗法⁽⁸⁾で求める。

(e) 分子数 N (但し, Case-B に対してのみ) .

(f) スカラー 2 乗曲率 R_{in} ,

$$R_{in} = \sum_{i=1}^N (k_i - k)^2. \quad (18)$$

ここで, k_i は分子 i とボンドで連結している分子の数を表し, k はその平均値である. k は曲面の種数にのみ依存し, 3 角形分割には依存しない.

(g) スカラー 2 乗曲率 R_{out} ,

$$R_{out} = \sum_{i=1}^N (d_i - 2\pi)^2. \quad (19)$$

ここで, d_i は分子 i を頂点に持つ 3 角形の頂点 i での内角の和を表す. $d_i - 2\pi$ は欠損角と呼ばれ, 平面上の 3 角形分割ならば, 全ての頂点で欠損角はゼロとなる.

(h) 比熱 C ,

$$C = \frac{1}{Nb^2} (\langle S_2^2 \rangle - \langle S_2 \rangle^2). \quad (20)$$

(i) 分子数のゆらぎ ΔN ,

$$\Delta N = \frac{1}{N} (\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2). \quad (21)$$

(j) スカラー 2 乗曲率 $R_{in,out}$ のゆらぎ $\Delta R_{in,out}^2$,

$$\Delta R_{in,out}^2 = \frac{1}{N} (\langle R_{in,out}^2 \rangle - \langle R_{in,out} \rangle^2). \quad (22)$$

(k) X^2 の自己相関係数 $A_c(X^2)^{(1,2)}$.

(l) 図 1 の各 Step の受け入れ比率 r_{disp} , r_{flip} , r_{evap} .

4 実験結果

4.1 Case-A の結果

初めに, r_{disp} と $A_c(X^2)$ 以外の物理量の値が式 (13-1) の ϵ に依存しないことを見ておく. ここでは Disp-A について調べるが, Disp-B についても同様である.

図 2 に $4\epsilon = 0.1 \sim 1.2$ でのいくつかの物理量と, $A_c(X^2)$ を示す. 分子数 $N = 70$, 曲げこわさ $b = 0.8, 1.55, 2.2$, 式 (14) の n_{flip} は $n_{flip} = 1$ とし,十分に平衡状態に達してから 50sweep 毎に各物理量を測定し平均した. $b = 1.55$ において X^2 の揺らぎが大きい, これは測定のための計算が十分に長くない (即ち, 統計性が低い) ことと, (相転移の有無をここで述べるのは適当ではないが) 臨界点の近くで起こる「臨界揺動」のため, と考えられる.

図 2 の $A_c(X^2)$ から $r_{disp} \simeq 0.5$ の時に収束が早いように見えるため, 今後は式 (13-1) の ϵ としては $b \simeq 1.55$ に於いて $r_{disp} \simeq 0.5$ となる $4\epsilon = 0.45 \sim 0.5$, 同じく (13-2) の Disp-B では $4\epsilon = 0.5 \sim 0.6$ 程度の値とする. なお, $b = 1.55$ では, 他の b の値の時よりも X^2 の収束が遅くなっていることが $A_c(X^2)$ のグラフから判る. これは臨界点近傍ではどんな物理量も時間空間的にゆっくりと変化するという, 良く知られた「臨界緩和」(critical slowing-down) という現象と見られる.

図 3 には Disp-A での $n_{flip} = 1 \sim 20$ の時の各物理量を示す. 図 3 から $n_{flip} = 1 \sim 20$ の範囲で $A_c(X^2)$ がほぼ同じ傾向であること, 各物理量の値が n_{flip} に依存し

図 2 ϵ dependence of observables in Case-A(Disp-A)

ていないこと, が判る. 一方, 著者らの経験では分子数 N が大きくなると, 特に式 (17)~(21) のゆらぎに当たる量の測定では, n_{flip} が大きい時に安定した結果が得られる傾向にあることが判っている. このため N に応じて n_{flip} を大きくとることとする.

図 3 n_{flip} dependence of observables in Case-A(Disp-A)

図 4 には Disp-A と Disp-B による S_2 と C , 及びスカラー 2 乗曲率とそのゆらぎを示す. それぞれの場合に, 式 (14) の n_{flip} は $N = 50, 100, 150, 300$ で $n_{flip} = 1, 3, 5, 10$ 程度, MC 反復回数は $N = 50, 100, 150, 300$ で, 各 b に於いて $8, 10, 20, 30, \times 10^5$ sweeps として, 十分に平衡状態に達してから $50 \sim 200$ sweeps 毎に物理量を測定した. 比熱にピークが見られるが, このピークは曲げエネルギー S_2 , 即ち界面の折れ曲がり具合, がピークの現れる b_c の位置で, 大きく変動していることを表している. スカラー 2 乗曲率のゆらぎ ΔR_{out}^2 にも比熱と同

様のピークが見られることから、 b_c に於いて3角形分割(=連続的モデルではリーマン計量 g に対応する)にも大きな変動が起こっている、と推測できる。

図4 (a) Disp-A, (b) Disp-B, in Case-A

図5 $C(b_c)$ vs. N , (a) Disp-A, (b) Disp-B in Case-A

比熱のピーク $C(b_c)$ は、その高さが分子数 N と共に大きくなっているが、もしそれが N と臨界指数 σ によって

$$C(b_c) \sim N^\sigma, \quad \sigma > 0 \quad (23)$$

と変化するならば、 $\sigma = 1$ ($\sigma < 1$) の時、1次(2次)の相転移になる⁽¹⁾。いずれにせよ、 $C(b_c)$ が(23)のように振る舞うならば、 $N \rightarrow \infty$ のとき、 C は b_c に於いて発散するということを意味する。

図5には、図4の(a),(b)から求めた $C(b_c)$ 対 N を、log-log スケールで示す。この $C(b_c)$ を用い、 $C(b_c)$ の統計誤差の逆数を重みとした最小2乗法により、式(23)の σ を求めると、図5の(a),(b)に対してそれぞれ

$$\sigma = 0.314(39), \quad \sigma = 0.273(44)$$

となる。これらの値は本来ならば一致しなければならないが、測定に用いた界面の N が小さいためと、測定の統計性が低いために、不一致が生じているものと考えられる。しかし、仮の結論ではあるが、相転移次数は2と考えると良さそうである。

比熱のピークが式(23)のような形で N と共に大きくなる傾向が、 N が更に大きくなっても同じように見られるかどうか、ということは不明であるが、図4の比熱のピークは相転移が起こっていることの状況証拠と見て良さそうである。臨界点 b_c の位置は、Disp-A と Disp-B とで全く同じには見えないが、正確には臨界点は $N \rightarrow \infty$ に於けるものであるから、このことを重大な問題点と考えなくて良い。

しかしながら、 $N = 150$ では $n_{\text{flip}} = 1$ では C のピークが良く現れないこと、また $N = 300$ では $n_{\text{flip}} = 5$ でも C のピークが現れないこと等、の著者らの経験から見て、 N が大きくなれば n_{flip} を更に大きくとらなければならない。これらのことから、本論文の液体界面の相転移現象を、シミュレーションによって定量的に明らかにしていくことは、計算時間の点からも容易ではないことが推測できる。

図6 X^2 in Case-A (Disp-B)

表1 Fractal dimensions H in Case-A

b	H	b	H
1.4	19.5(28)	1.6	5.19(60)
1.45	14.2(26)	1.65	3.28(15)
1.5	12.4(25)	1.7	2.86(15)
1.55	6.68(90)	1.75	2.60(10)

図6には X^2 を示す。log-log の図の傾きが式(17)のフラクタル次元 H を与える。 X^2 のゆらぎの逆数を重みとして、最小2乗法によって求めた H を、表1に示す。 b が大きい時には H は2に近づいているが、これは $b \rightarrow$ 大で、界面がスムーズになっていることを表している。 H は1次元界面では $b \rightarrow$ 小に於いて、界面が埋め込まれている平面の通常次元である2、を越えることはなかった^(1,2,3) が、2次元界面の場合には表から判るように、埋め込み次元である3を越えている。

図7には、臨界点付近で細かく計算した図4の計算の時に得られた X^2 を示す。 N が大きくなると、臨界点付近で X^2 が急激に変化していることが判る。これらのことから、 N が十分に大きくなると界面は b_c を境に

図7 X^2 in Case-A, (a)Disp-A, (b)Disp-B

$b > b_c$ で大きく膨らみ, $b < b_c$ ではくしゃくしゃになって小さく萎んでいる, と推測できる。

4.2 Case-B, Cの結果

Case-Bでは分子数の変化, 即ち分子の蒸発と吸着過程が伴うから, 図1のMC Step-3,4の頻度に対応する式(15)の n_{swp} の, 最適な値を知る必要がある。実際, いろいろな b と μ において, 各物理量の n_{swp} 依存性を求めてみると, $n_{\text{swp}} = 5$ 程度より大きな n_{swp} ならば, 各物理量は一定の値になることが確認された。

図8 n_{swp} dependence of $S_1/N, X^2$ in Case-B

図9 Disp-A in Case-B

図10 (a)Disp-A, (b)Disp-B, in Case-C

図8には, S_1/N と X^2 を示す。 b としては $b=1, 1.5, 2$, 式(14)の n_{flip} は $n_{\text{flip}}=1$, また, 図1のStep-1としては式(13-1)のDisp-Aとした。 N は $N=30 \sim 80$ 程度になっている。 N が大きくなると, N が小さいときに比べて n_{swp} は小さくても, 測定値は一定値に近づく傾向も見られるので, 以後はCase-Bでは $n_{\text{swp}}=5$ とする。

図9にはCase-BでのDisp-Aによる結果を示す。この場合も比熱にピークが見られ, 分子数が大きくなるにつれてそのピークは高くなることも判る。また, 分子数のゆらぎ ΔN にも, 比熱にピークが現れる b_c において, 不明瞭ながらピークが見える。このピークは, 界面が大きく膨らむとか萎むということではなく, 分子数, 即ち界面の面積自身が, 臨界点 b_c の近くで大きく

変動していることを表している。比熱のピークの存在及び b_c 近くでの X^2 の大きな変化と合わせれば、Case-Bの界面は、その見かけの大きさや形状が臨界点付近で大きく変動している、と見て良い。

図10の(a),(b)には自己回避性を取り入れたCase-CでのDisp-A,Disp-Bによる結果を示す。比熱にピークが見られ、それが N と共に大きくなる様子が見える。 S_2 はCase-Aと同じく、 $b \rightarrow$ 大(小)で $S_2 \rightarrow$ 小(大)となっているから、自己回避性を取り入れた場合でも、確かに乱雑相と秩序相が存在することが判る。

しかしながら、図から判るように X^2 が b によらずにほぼ一定、即ち、乱雑相に於いても X^2 が小さくならないということから、自己回避性を取り入れた界面は、Case-Aの界面とは異なった特徴付けを持つものと思われる。ところが、これらのことを数値実験によって明らかにすることは、自己回避性を持つ界面のシミュレーションは自己回避的でない界面の場合(=Case-A,Case-B)に比べて、極端に多くの計算時間を必要とするため、現在の計算機の能力では困難である。

また、分子数が変化するCase-Bの場合、スカラー2乗曲率のゆらぎは臨界点でピークを持つことから、3角形分割も臨界点で大きく変動していることが推測できる。自己回避性を持つCase-Cの場合、分子数が小さすぎてこれを明らかに出来ない。

5 要約と結論

本論文では異種流体混合現象の理解に向けて、2次元界面のあるモデルをMC法で研究した。そのモデルは実際の界面の持つ表面張力の性質、変形の途中で面積が変化し得るという性質、自己交差しないという性質、を取り入れたものである。

表面張力の性質のみ取り入れたモデルでは、比熱のピーク $C(b_c)$ が分子数 N と共に大きくなることが確認され、相転移が起こっていることが判った。 $C(b_c) \sim N^\sigma$ で定義される相転移の臨界指数 σ も求め、その結果、相転移次数は2次と予想できた。臨界点 b_c 前後のフラクタル次元 H も測定し、 $b \rightarrow$ 大で $H \rightarrow 2$ 、 $b \simeq b_c$ で $H = 3 \sim 5$ 、 $b \rightarrow$ 小で $H > 10$ 、になると予想できた。また、スカラー2乗曲率のゆらぎの測定から、3角形分割自身も臨界点で大きく変動する、と推測できた。

面積が変化する性質を持つモデルでも、比熱と分子数のゆらぎにピークが見られた。自己回避性を取り入れたモデルにも、本論文の数値実験はその規模が全く不十分ではあったが、比熱のピークが見られ、しかもそれは分子数と共に大きくなることを確認できた。これらのことは、相転移が起こっていることによるものと考えることができた。また、Case-Bのモデルに於い

てもCase-Aのモデルと同様に、臨界点でスカラー2乗曲率に大きな変動が起こることが判った。ついでながら、自己回避性を持つモデルの著者らの方法によるシミュレーションは、現在に於いては現実的に困難であることも判った。

以上の結論は数値実験に基づくものであるから、これらが正しいものかどうか確認し、明確な結論を出すためには、更に多くの数値実験が必要となる。数値実験上の細部のパラメータ、例えば3角形の面積のカットオフ値、あるいは図1の各ステップの方法、等々に測定結果が依存しないことも確認を要する。以上のようなことを明らかにした上で、分子数を更に大きくした大規模なシミュレーションが望まれる。

著者らは本論文で、異種流体の混合現象という個々の具体的な現象の背後にある、何か普遍的なものを捉えることによって異種流体の混合現象をある側面から理解する、という立場をとった。この見方からすれば、(自己回避的な界面のシミュレーションは困難であるから)自己回避的でない界面の相転移現象を定量的に明確に把握することが、当面の目標となる。

本論文では、力学変数が分子の位置 X と3角形分割 g であるものを液体界面のモデルと見なしたが、このモデルが3角形分割を1つに固定して分子の位置のみを力学変数と見るモデルと同じか否か、も興味深い問題となる。

また、臨界点の近くでの界面の様子をコンピュータグラフィックスでアニメーション化できれば、ミクロな世界に由来を持ちマクロな世界にその姿を現わす相転移現象を、視覚的に捉えられるという意味で、興味深い。

本論文の数値実験はIntel社の486DX2/66及びPentium90を使用したパソコンと、Rahey Computer Systems社のFortran77, Fortran90によってなされた。本論文の研究は平成6年度文部省科学研究費補助の対象として支持された研究(一般研究(C) 06650224, 2次分)である。

文 献

- (1) 鯉淵, 機論B, 58巻555号, (1992), 3401;
鯉淵, 第5回計算力学講演会論文集, (1992), 239.
- (2) 鯉淵, 機論B, 59巻566号, (1993), 2950.
- (3) 鯉淵, 機論B, 60巻576号, (1994), 2723;
鯉淵, 第7回計算力学講演会論文集, (1994), 13.
- (4) F.David, In *Statistical Mechanics of Membranes and Surfaces*, D.Nelson et.al.(ed.), (1989), 186, World Scientific.
- (5) 川崎, 数学セミナー, Vol.32, No.5(=380), (1993), 20.
- (6) リーマン, 幾何学の基礎をなす仮説について, 菅原訳, 1970, 清水弘文堂.
- (7) 鯉淵, 機論B, 57巻543号, (1991), 3653.
- (8) 小柳, 他, 最小2乗法標準プログラムSALS, 東京大学大型計算機センター.