

戸田格子型相互作用を持つブラウン運動モデルの数値シミュレーション

Monte Carlo simulations of Brownian motion models

with Toda-lattice interactions

物理学専攻 多田 紘樹

Department of Physics, Hiroki Tada

1 はじめに

多粒子ランダムウォークを考える際に重要なことはランダムウォーカー同士にどのような相互作用を設定するかということである。ランダムウォーカー同士が同時刻に同一の格子点に到達（衝突）すると両者とも消滅してしまうと言う強い斥力相互作用を導入すると、系は排除体積効果を持つことになる。これは vicious walker 模型と呼ばれている。vicious walker 模型は濡れや融解といった物質界面の構造変化を説明する数理モデルとして、あるいは高分子ネットワークなどの非平衡な物理現象を説明するモデルとして用いられている。

ランダムウォークの連続極限（拡散スケール極限）はブラウン運動である。ブラウン運動は不規則な運動を表すものであり、物理学、化学、計算機科学、経済学、社会科学など広い分野で使われている。

非対称単純排除過程 (ASEP: Asymmetric Simple Exclusion Process) も同様に、1次元格子点を多数の粒子が体積排除の相互作用の下で、非対称な hop をするランダムウォーカーが沢山いる模型である。界面成長や交通流のモデルであり、密度 ρ などのパラメータを変えると自由相から渋滞相への相転移が見られることが知られている。

本修士論文では排除体積効果のない、より一般的なランダムウォークを考える。具体的には戸田格子型相互作用を持つ粒子系で、粒子の交換が許されるブラウン運動模型について議論する。

2 戸田格子型モデル

本修士論文ではより一般的に粒子の交叉が許されるブラウン運動のモデルを考えたい。そこで私は非線形波動からヒントを得て、粒子間の相互作用に戸田格子ポテンシャルを導入した。

戸田格子 (Toda-lattice) とは、戸田盛和によって 1967 年に導入された。戸田格子ポテンシャルは

$$V = \sum_{j=1}^{N-1} e^{-(x_{j+1}-x_j)/a} \quad (a > 0) \quad (1)$$

と書かれ、指数関数型ポテンシャルで、ソリトン解を持つ非線形力学系として知られている。戸田格子は古典・量子可積分系に表れるものであり、一見すると確率統計には馴染みの薄いものであるが、このポテンシャルを導入することにより、粒子の交叉が許される系を考えることができる。式 (1) より交叉がなければ、指数の肩がマイナスのままであるが、交叉があると指数の肩がプラスになり、指数関数的にポテンシャルが高くなる。ボルツマン因子を

$$\exp\left(-\frac{V}{T}\right) = \exp\left(-\frac{1}{T} \sum_{j=1}^{N-1} e^{-(x_{j+1}-x_j)/a}\right) \quad (a > 0) \quad (2)$$

と書き、パラメータとして温度 T を導入した。温度が高ければ交叉の起こった状態を許しやすく、温度が低ければ交叉の起こった状態を許しにくくなることが予想される。

3 時空図

この戸田格子型ポテンシャルで相互作用するモデルの特徴付けを行うにあたりモンテカルロシミュレーションを用いた。シミュレーションにより粒子軌跡の時間発展を観察した結果を図示した。粒子数 $N = 20$, サイト数 $L = 200$ とした。

・初期配置 ~ 10000step

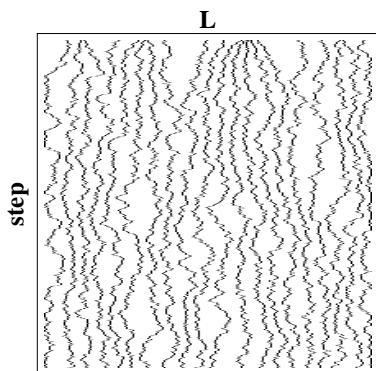


図 1: $T=0.01$ (低温)

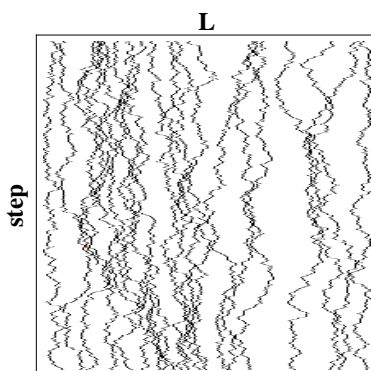


図 2: $T=1.0$

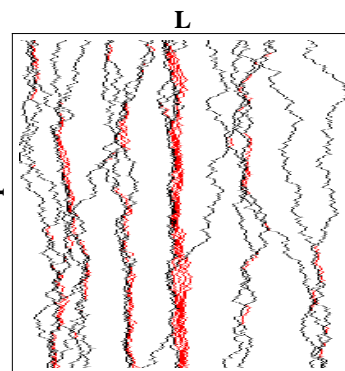


図 3: $T=100$ (高温)

・定常状態の 10000step

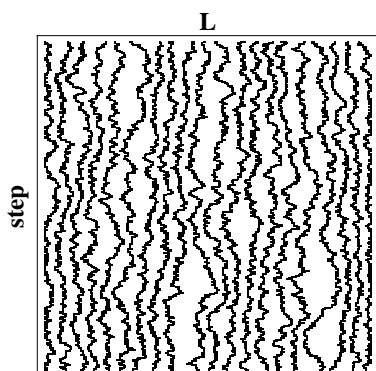


図 4: $T=0.01$ (低温)

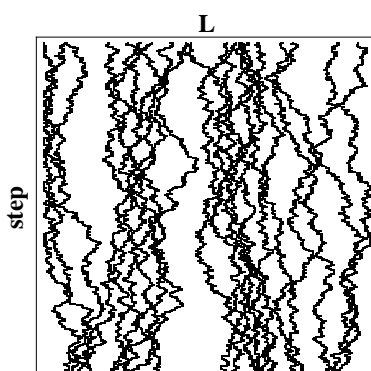


図 5: $T=1.0$

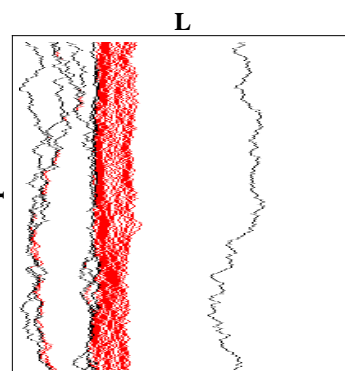


図 6: $T=100$ (高温)

横軸に空間，縦軸に時間をとった。粒子のいるサイトを黒，粒子のいないサイトを白，交叉が発生し順序の入れ替わりのおきた粒子を赤で示した。粒子は図の上から下へ時間発展している。上段は初期配置からの 10000step，下段は定常状態の 10000step を示した。温度の低いとき (図 1, 4) では，粒子同士の間隔が等間隔になるように拡散し，粒子は排他的に振る舞う。温度を上げると (図 2, 5)，粒子同士が接近し集まって，所々束になっている様子が見られ始めた。さらに温度を上げると (図 3, 6)，粒子は交叉を繰り返し，いくつかの束を形成する様子が見られる。定常状態では束を形成する様子がより顕著に見られる。この束をクラスターと呼ぶことにし，クラスターが形成される様子を調べた。

4 交叉・非交叉，クラスター・非クラスター相転移

温度の低い時では粒子の交叉はなく，温度を上げていくと粒子の交叉が起きる様子が見て取れたため，各密度，各温度に対して 1000step, 100 回試行を行い，単位時間あたりの交叉回数・単位時間あたりクラスター数をカウントした．単位時間あたりの交叉回数のグラフ (図 7) の立ち上がりから，交叉・非交叉の転移温度を求めた．また単位時間当たりのクラスター数のグラフ (図 8) の立ち上がりから，クラスター・非クラスターの転移温度を求めた．(図 7, 8 は $\rho = 0.3$ の場合である．)

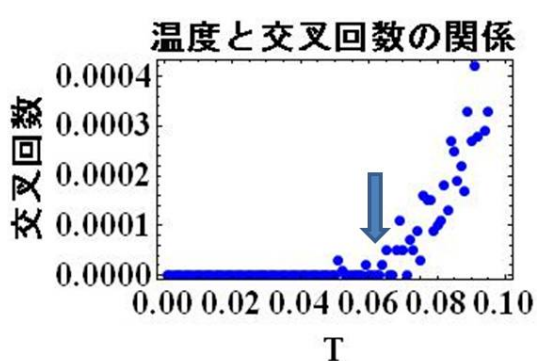


図 7: 単位時間あたりの交叉回数

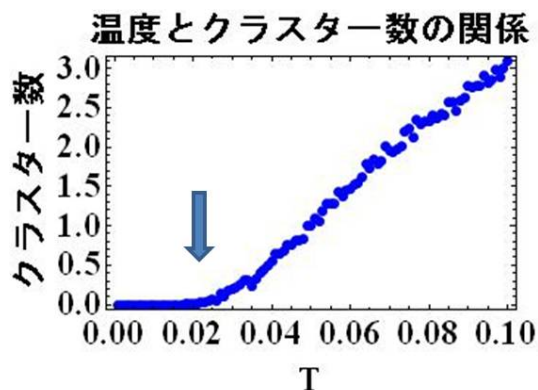


図 8: 単位時間あたりのクラスター数

各密度で同様の測定を行い，得られた値をプロットすると次の相図を得ることに成功した．

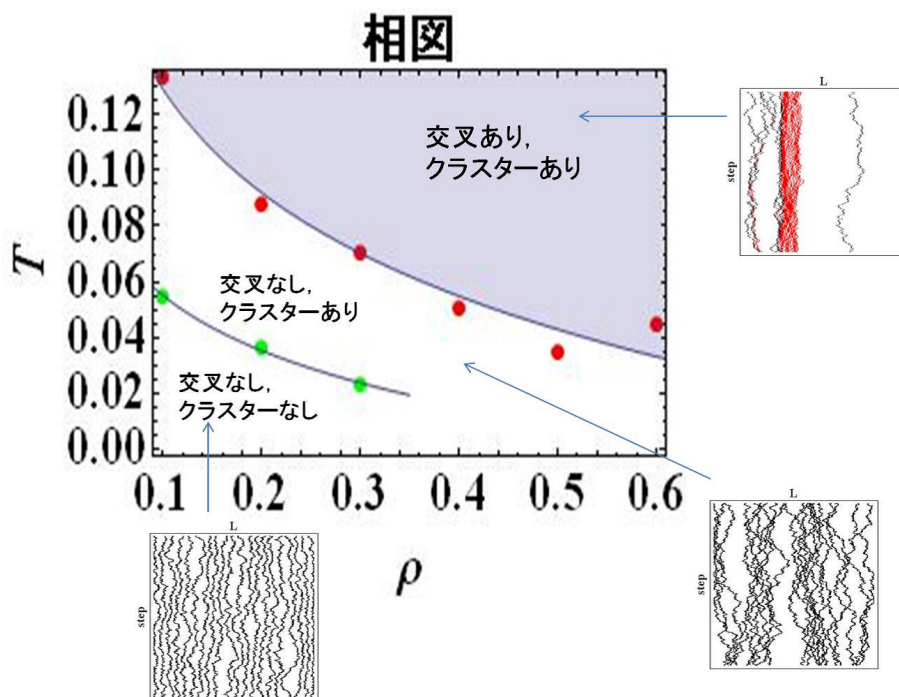


図 9: 相図

横軸に密度，縦軸に温度をとった．交叉・非交叉の転移温度を赤のプロットで，クラスター・非クラスターの転移温度を緑のプロットで示した．図の左下は粒子の交叉もなく，クラスターもない相．真ん中は交叉はないが，クラスターが形成される相．右上の青く塗られた部分は交叉もあり，クラスターも形成される相．このように 3 つの相に区別できることが得られた．

参考文献

- [1] S. Sandow and G. M. Schütz, *Europhys. Lett.* **26** (1994), 7-12.
- [2] B. Derrida, M. R. Evans, V. Hakim and V. Pasquier, *J. Phys. A* **26** (1993), 1493-1517.
- [3] 香取眞理, *応用数理* **13**(No.4) 16(296) (2003).
- [4] 西森秀稔, 「相転移・臨界現象の統計物理学」, 培風館, (2005).
- [5] 笹本智弘, 「1次元非対称単純排他過程の厳密解」, *物性研究* **79** (2003) 881-925.
- [6] 鈴木淳史, 「現代物理数学への招待」, *ランダムウォークから広がる多彩な物理と数理*, サイエンス社, (2006).
- [7] 西成活裕, 「渋滞学」, 新潮社, (2006).