

論文の内容の要旨

論文題目 Simulation Study on Nonequilibrium Phenomena and Structures (非平衡現象とその構造の数値的研究)

渡辺宙志

平成 15 年 12 月 16 日

1 概要

数値計算により、さまざまな構造の非平衡現象について調べた。また、数値計算手法の開発も行った。

非平衡現象の研究として、二次元剛体円盤系の示す固体 - 液体相転移 (Alder 転移) を結晶構造を示すパラメータである隣接配向秩序変数の時間緩和を計算し、動的スケールリング仮説に基づいた解析を行った。さらに確率オートマトンを用いて、生態系の構造形成について研究を行った。また、Lennard-Jones 粒子を用いたミルククラウン現象の解析も行った。

手法の開発として、棄却無しモンテカルロ法の粒子系への応用、及び量子計算機シミュレーションの統合環境の作成を行った。

2 二次元剛体円盤系の融解現象について

二次元剛体円盤系について、その固体 - 液体相転移の研究を行った。剛体円盤系は、融解現象を起こすもっとも簡単な粒子モデルであるが、二次元系特有の強い有限サイズ効果を持つために、そのメカニズムは 40 年以上にわたって明らかにされてこなかった。

本研究では、系を分子動力学法により時間発展させ、その非平衡緩和過程から平衡状態を探るという手法を用いた。この手法は非平衡緩和法と呼ばれ、有限サイズ効果に強く、効率よく臨界現象を調べることができることが知られている。様々な密度における秩序変数の緩和過程を動的スケールリングにより解析し、相転移が Kosterlitz-Thouless 型であることを確認し、二つの相転移点及び臨界指数を求めた。

さらに、粒度分散が存在する系の相転移について考察し、粒度分散が大きくなると、三角格子は不安定化すること、さらに正方格子が安定となるような領域が存在することなどを予想し、数値計算で確認した。その結果、粒度分散が小さい領域では三角格子状の二次元固体が安定に存在し、隣接配向秩序変数 ϕ_6 の時間緩和曲線も、KT 型でスケールリングできることがわかった。さらに三角格子固体の相転移線と三角格子が不安定となる線が交わるところで、三角格子状の固体は安定に存在できなくなることでも分かった。粒度分散が大きいところでは、正方格子の隣接配向秩序変数 ϕ_4 の緩

和時間が密度に対して指数関数的に長くなることがわかり、準安定な状態として二次元正方格子固体が存在しうることが分かった。

3 粒子系における棄却無しモンテカルロ法

計算機の能力の向上に伴い、モンテカルロ法はさまざまな系に適用できる有力な手段となった。モンテカルロ法は二次元粒子系の相転移の研究にも応用され、主に基底状態の性質が調べられてきた。粒子系におけるモンテカルロ法のダイナミクスはブラウン運動によって理解することができるが、サンプリングを効率的に行おうとすると密度によって時間の定義が異なってしまい、逆に時間の定義を統一すると、低温のスピン系と同様に、ほとんどのモンテカルロ試行が棄却され、サンプリングが効率的に行えないという問題を抱えていた。本研究では高密度粒子系のダイナミクスを研究するため、棄却無しモンテカルロ法 (Rejection-free Monte Carlo method) を粒子系に応用し、新しい手法を開発した。実際に通常のモンテカルロ法と比較し、高密度領域で棄却無しモンテカルロ法の方が効率的となることを確かめた。この手法により、高密度の二次元固体や、高い粒度分散を持ったガラス様の物質などを効率的に研究できることが期待される。

4 ミルククラウン現象にみる界面張力の研究

剛体円盤系は斥力相互作用しか持たない系であり、固体 - 液体相転移を起こす最も単純なモデルであった。ここで、粒子近傍で引力相互作用も持つ Lennard-Jones 粒子を用いると、液体 - 気体相転移及び界面張力を表現することが可能となる。界面張力が重要な役割を果たす身近な現象として、ミルククラウン現象があげられる。水滴を水の表面に落とすと、その速度や温度によって形状がミルククラウン状からこけし状に変化する。この非平衡かつ非定常な現象を粒子系を用いたシミュレーションで解析した。その結果、連続近似と同様にウェーバー数という無次元量で現象を理解できるばかりでなく、一種の衝撃波も構造形成に重要な役割を果たしていることがわかった。

5 確率セルオートマトンによる非平衡秩序化現象

熱平衡状態から遠くはなれた非平衡現象は、従来の熱力学、統計力学でそのまま扱うことは難しい。そのような非平衡現象の例としてカオスやフラクタル、自己相似性や自己組織化などがあげられるが、これらには共通して系の強い非線形性の影響が見られる。自然、特に生態系においては、この非線形性が本質的に生命の維持にかかわっていると考えられ、様々な研究が行われてきた。本研究では、その中でも群知能による構造形成について研究を行った。蟻などの一部の社会性昆虫は、フェロモンにより協調し、巣を作ることが知られている。この行動を確率セルオートマトンでモデル化することで、エージェントが作る構造の非平衡定常状態について考察を行った。その結果、巣のような構造を安定な状態として作成するミニマルなモデルを提案し、そのモデルが従来研究されてきたえさ集め行動のアルゴリズムと類似していることを見出した。これはえさ集め行動と巣づくり行動が同様なアルゴリズムによって行われていることを示唆する。

6 量子計算機シミュレータの開発

量子計算機は DNA 計算機とともに次世代計算機として期待されているが、特に Shor が素因数分解の量子アルゴリズムを示してから、量子アルゴリズム研究は盛んになっている。手軽に扱える量子計算機の実機が未だ無いので、アルゴリズムの研究はシミュレーションにより行うことになる。そこで、量子計算機研究を補助するため、量子計算研究統合環境、QCAD を開発した。

QCAD はグラフィカル・インターフェースを持つ回路設計機能と、設計した回路をその場で実行できる計算エンジンを持っている。さらに、量子計算シミュレーションは、量子ビット数が増えると指数関数的に必要なメモリが増えるため、シミュレーションには並列化が必須となる。そこで、動的に通信を行う手法を提案し、並列通信ライブラリとして広く使われている MPI により実装を行った。それに伴い、QCAD 本体に自動並列化コンパイラも実装した。QCAD により、量子計算機がより容易に研究できるようになり、新しい量子アルゴリズムの開発の促進が期待できる。