Newtonian Event-Chain モンテカルロ法を用いた 2 次元剛体多角粒子系の相転移

白井知樹, 麦田大悟, 礒部雅晴

名古屋工業大学 大学院工学研究科

概要

本研究では、剛体多面体系を解析する高速な方法論として (i) 並進平衡緩和に Newtonian Event-Chain モンテカルロ法、(ii) 接触判定に XenoSweep 法を導入し、高密度 2 次元剛体多角粒子系の相図作成を目的とした。特に、排除体積と回転対称を持つ剛体多角粒子で剛体円板と対極の剛体正三角形に着目し、拡散特性に加え、粒子の異方性を考慮した配向秩序変数を新しく提案し、密度の変化に対する相転移ならびに各相の特徴づけを行った。

Phase transition in dense hard polygon systems by Newtonian Event-Chain Monte Carlo

Tomoki Shirai, Daigo Mugita , Masaharu Isobe

Graduate School of Engineering, Nagoya Institute of Technology

Abstract

In this study, we investigate the phase transition of the hard polygon systems by increasing the packing fraction (density) by applying two novel algorithms: (i) Newtonian Event-Chain Monte Carlo, known as efficient translational diffusion in a hard sphere system, and (ii) XenoSweep for efficient contact detection between rigid objects. These algorithms enable the equilibration of the hard triangle particle system, which has the most different shape from a hard disk. To characterize the phase transition, we focus on diffusional characteristics and novel orientational order parameters for the hard triangle particle system proposed by our present study.

1 はじめに

高密度剛体球系では、結晶 - 流動相転移（いわゆる Alder 転移）が生じる [1]。近年、高速な Event-Chain モンテカルロ法 [2] が開発され大規模計算が可能となり、半世紀来の難問「2 次元 Alder 転移問題」の解明に大きく貢献した。Event-Chain モンテカルロ法に粒子速度と衝突則を導入した Newtonian Event-Chain (NEC) モンテカルロ法 [3] は、平衡緩和（並進拡散）の効率がよいことが知られる。一方、剛体球（円板）系でなく剛体多面体（多角形）系では複雑な形状同士の衝突判定が必要となり、計算コストが増大する。しかし最近、「凸多面体同士のミンコフスキー差が原点を含む」＝「接触している」を利用した Gilbert-Johnson-Keerthi(GJK) 法 (1988) を発展させ、多面体衝突と移動 (Sweep) 距離の高速計算ができる XenoSweep 法 [4] が開発された。CG、ロボット工学、複雑な形状を持つ粉体系の動力学など、広範な分野での今後の応用が期待される。本研究では、2 次元多角剛体粒子（ポリゴン）系において、形状が剛体円板と対極の排除体積と回転対称性を持つ剛体三角形からなる多体粒子系において、並進の平衡緩和に NEC 法、接触判定に XenoSweep 法、の 2 つの高速アルゴリズムを導入した。特に、(I) NEC

法の効率性と最適パラメーター探索、（II）剛体三角形粒子系形状の異方性を考慮した新しい配向秩序変数を導入し、粒子占有率の増大に対する拡散特性と配向秩序変数の変化から高密度剛体多角粒子系の相転移と各相の特徴づけを目的とし、研究を遂行した。

2　シミュレーション手法

高密度 2 次元剛体多角粒子系 (粒子数 $N = 512$、粒子占有率 $\nu = 0.65$〜0.8、粒子の頂点数 $n = 3$）において、粒子間接触判定に Xenosweep、並進緩和に NEC、回転緩和にマルコフ鎖モンテカルロ法を用いシミュレーションを実行した。なお、NEC では並進パラメータ $\tau = t_{\mathrm{trans}}/t_{\mathrm{mf}}$ を定義した。ここで、t_{trans} は NEC の Event-Chain(持続) 時間、t_{mf} は平均自由時間である。また、緩和効率として 2 次元拡散係数 D に着目した。

$$D = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{4t}\langle|\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)|^2\rangle \tag{1}$$

ここで、$\mathbf{r}_i$ は粒子 i の中心座標である。本研究では、t を CPU 時間 (t_{cpu}) とした。

稠密剛体三角形系では剛体円板系と異なり、三角形の頂点は頂点を共有する最近接粒子の中心方向ベクトルが 6 回対称性を持つ（図 1）。この性質に着目し、剛体三角形系において、6 回対称配向秩序変数を新たに導入した。

$$\phi_6^k = \frac{1}{N_k}\sum_{\{j\}} e^{6\mathbf{i}\alpha^k_{\{j\}}} \tag{2}$$

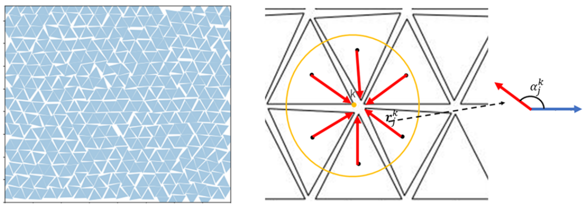

図 1: （左）粒子占有率 $\nu = 0.80$ における高密剛体三角形系の平衡状態。（右）近接粒子（黄色円）内の位置ベクトル（赤矢印）から配向秩序変数を計算した。

ここで、k は剛体三角形 i の 3 つの頂点、$\{j\}$ は k の位置から半径 r_c 内の最近接剛体三角形 (i を含む)、$\alpha^k_{\{j\}}$ は、任意の基準ベクトル（たとえば x 軸）に対する i ならびに近接粒子 j の中心から頂点へ向かう位置ベクトル $\mathbf{r}^k_{\{j\}}$ の相対角度である。また、N_k は頂点 k に対する最近接粒子数、$\mathbf{i}$ は虚数単位である。なお、最近接粒子の判定に用いた r_c は、頂点を基準とした動径分布関数から決定した。

3　結果

図 2 は、$\tau = 1$ の D^*_{cpu} を基準とした拡散係数 D_{cpu} の τ 依存性である。$\tau > 10$ で最大値をとり変化しないことがわかる。

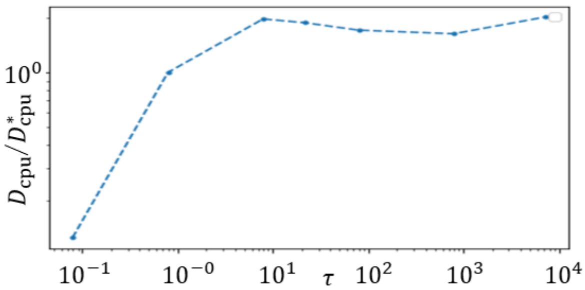

図 2: 拡散係数の並進パラメーター τ 依存性 ($\nu = 0.65$)

図 3 は、$\nu = 0.65, 0.80$ での新しい配向秩序変数 $|\phi_6^k|$ の空間分布である。ν の増加により配向（結晶）秩序が増大することが確認できる。

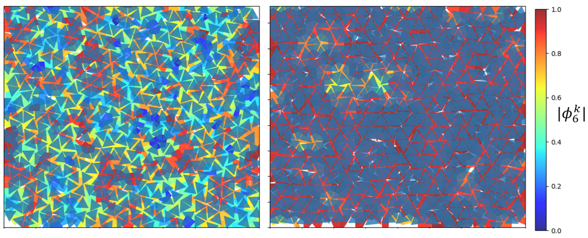

図 3: 配向秩序変数の空間分布（左）$\nu = 0.65$、（右）$\nu = 0.80$。剛体三角形の頂点でボロノイ分割し、各頂点の $|\phi_6^k|$ で可視化した。

講演では、これらの秩序変数の変化を相図にまとめ、詳細を報告する。

参考文献

[1] B. J. Alder and T. E. Wainwright, Phys. Rev., **127** 359 (1962).

[2] W. Krauth, Front. Phys., **9** 229 (2021).

[3] M. Klement and M. Engel, J. Chem. Phys., **150** 174108 (2019).

[4] M. Klement, S. Lee, A. Anderson, and M. Engel, J. Am. Chem. Soc., **143** 16163 (2021).