

# 4

## 非球状粒子の3次元モンテカルロ・シミュレーションの実践



前著で取り扱った球状粒子系のモンテカルロ・シミュレーションは非常に単純で、初心者にはとても理解しやすい。本著ではさらに進んで、扁平粒子という非球状粒子を対象とする。このような非球状粒子系のモンテカルロ・シミュレーションを理解することは、DNA や高分子系またはカーボンナノチューブ系など、より複雑で実践的な系のシミュレーションを行う上で、非常に参考となる。球状粒子以外の系を対象とする分子シミュレーションを行う上で難関となるのは、粒子の重なり判定条件の数学的な解析と、それをどのように効率的にシミュレーション上で反映させるかである。従って、本章においては、単なる煩雑な数学的な議論は避け、シミュレーション・プログラムを作成することを念頭に置いた数学的な解析のポイントを要領よく議論する。対象となる粒子は、粒子の中心に磁気双極子を有する円形の扁平粒子で、凝集現象に及ぼす粒子間磁気力や磁場の影響を検討する。本章の実践例は現在研究中のテーマであり、かなり本格的なシミュレーション・プログラムとなっている。対象とする系は粒子数、温度、体積が一定の熱力学的平衡状態にあるとするので、正準モンテカルロ・アルゴリズムが用いられる。

### 4.1 対象とする物理現象

粒子中心に磁気モーメント  $m$  を有する直径  $d_1$  の円形の形状の扁平粒子  $N$  個が母液に懸濁され、温度  $T$  で熱力学的平衡状態にあるものとする。この系に磁場を印加した場合の粒子の凝集現象をモンテカルロ・シミュレーションにより検討する。

### 4.2 問題の定式化

問題の定式化における重要な点は、粒子モデルの構築と粒子間に作用する相互作用のエネルギー、ならびに、粒子と粒子の重なり判定条件の解析である。従って、以下においては、これらについて詳しく議論することにする。

### 4.2.1 粒子モデル

粒子モデルとして、図 4.1 に示すように、円柱まわりの側面部が半円状の断面形状を有する円形状の扁平粒子(円形ディスク状粒子)を採用する. この粒子モデルでは扁平方向(面方向)に磁気モーメント  $\mathbf{m}$  を粒子中心に有するものとする. 円柱部の直径を  $d$ , 断面が半円の端部を含めた直径を  $d_1$ , ディスク状粒子の厚さを  $b_1$  とする. このような軸対称粒子の状態を規定するには, 粒子中心の位置ベクトル  $\mathbf{r}_i$ , 面に垂直な粒子方向を表す単位ベクトル  $\mathbf{e}_i$ , 磁気モーメントの方向  $\mathbf{n}_i$  を規定すれば十分である. ここに, 粒子  $i$  を対象としているので, 下付き添字  $i$  が付してあることに注意されたい. 分子動力学法の場合には, 粒子の運動も扱うので並進速度と回転速度を考慮する必要があるが, モンテカルロ法では粒子の方向と位置のみを問題にするので, 以上の粒子の状態把握で十分である. 磁気モーメントは粒子に固定され粒子内で自由に方向を変えないとする. 従って, 粒子が回転することで, 磁気モーメントの方向が変わることになる.

粒子  $i$  の磁気モーメント  $\mathbf{m}_i$  と印加磁場  $\mathbf{H}$  との相互作用のエネルギー  $u_i$  は, 次のようになる.

$$u_i = -\mu_0 \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{H} \quad (4.1)$$

ここに,  $\mu_0$  は真空の透磁率である. この式から, 磁気モーメントが磁場方向を向いたときエネルギーが最小となることがわかる. すなわち, 粒子は磁場方向に磁気モーメントを一致させるように配向する傾向を有する.

粒子  $i, j$  間の磁気的な相互作用のエネルギー  $u_{ij}$  はよく知られた式で表され, 磁気工学より, 次のように書けることがわかる.

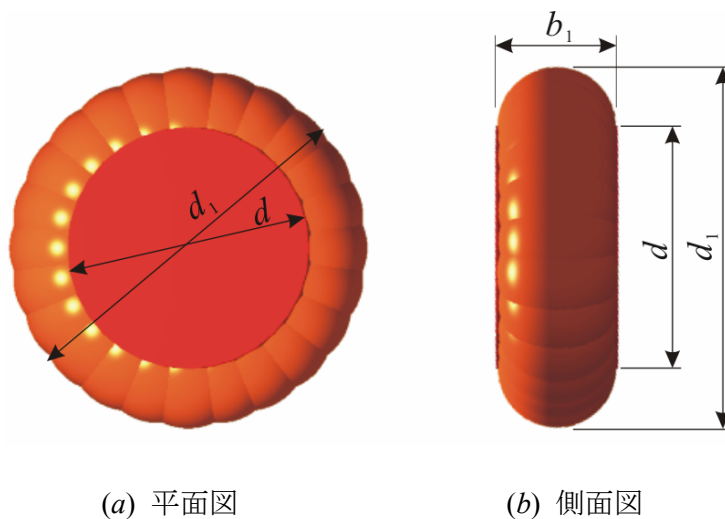


図 4.1 粒子モデル

$$u_{ij} = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left\{ \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij}) \right\} \quad (4.2)$$

ただし、 $\mathbf{r}_i$ は粒子  $i$  ( $i=1,2,\dots,N$ )の位置ベクトル、 $\mathbf{r}_{ij}=\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j$ 、 $r_{ij}=|\mathbf{r}_{ij}|$ である。式(4.2)の意味するところは直感的にわかりにくいだが、両方の粒子の磁気モーメントが2粒子間の相対位置ベクトルの方向に沿って同一方向に配向したとき、相互作用のエネルギーは最小となる。ただし、平衡状態での凝集現象は内部エネルギー減少とエントロピー増大の兼ね合いで決定されるので、エネルギーだけの議論では不十分である。このことが、現象解明の方法として分子シミュレーションに重要性を与えている。なお、粒子間に作用する相互作用としては、磁気力の他に、電気2重層や界面活性剤による斥力に基づく相互作用などが考えられるが、ここでは簡単化のために、これらの相互作用は無視することにする。

シミュレーションを行う場合、諸量を無次元化して取り扱くと、諸因子の影響を物理的に明確に論じることができるので、以上の式の無次元化した式を示すことにする。無次元化に際して、次のような代表値を用いる。距離をディスク状粒子の厚さ  $b_1$ 、エネルギーを熱エネルギー  $kT$ の代表値により無次元化すると、式(4.1)および(4.2)は次のように無次元表示で表せる。

$$u_i^* = u_i/kT = -\xi \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{h} \quad (4.3)$$

$$u_{ij}^* = u_{ij}/kT = \lambda \frac{1}{r_{ij}^{*3}} \left\{ \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j - 3(\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{t}_{ij})(\mathbf{n}_j \cdot \mathbf{t}_{ij}) \right\} \quad (4.4)$$

ただし、 $\mathbf{n}_i=\mathbf{m}_i/m$ 、 $m=|\mathbf{m}_i|$ 、 $\mathbf{h}=\mathbf{H}/H$ 、 $H=|\mathbf{H}|$ 、 $\mathbf{t}_{ij}=\mathbf{r}_{ij}/r_{ij}$ 、上付き添字\*を付した量が無次元化された量である。また、 $\xi$ と $\lambda$ は次のように定義される。

$$\xi = \mu_0 m H / kT, \quad \lambda = \mu_0 m^2 / 4\pi b_1^3 kT \quad (4.5)$$

なお、 $\mathbf{n}_i$ 、 $\mathbf{h}$ はそれぞれ磁気モーメントおよび磁場の方向を表す単位ベクトルである。このように基礎式を無次元化すると、必ず無次元数とか無次元パラメータとか言われる量が現れる。例えば、現象が磁気力と粘性力によって支配されるときに、その代表値の比という形の無次元パラメータとして基礎式に現れることになる。上式で言えば、 $\xi$ と $\lambda$ が無次元パラメータであり、それぞれ粒子と磁場および粒子と粒子の磁気的な相互作用の大きさが熱エネルギーに対してどの程度支配的かを大まかに表す量である。

#### 4.2.2 粒子の重なり判定条件

図4.1に示した円形ディスク状粒子の2粒子の重なり判断は、球状粒子同士のそれと比較して、非常に困難である。外縁部同士が重なるかもしれないし、外縁部と平板部が重なるかもしれない。あらゆる重なるの可能性をすべて考慮に入れ、漏れがないようにするためには、重なり判断の本質を見極め、それに基づいた系統的な議論が必要である。前章の球冠円柱粒子同士の場合には、それぞれの粒子を含む2平面が平行に見える方向から眺めることに

より、系統的に論ずることが可能になった。本章のディスク状粒子の場合、各粒子を含む2平面の交線に着目すると、系統的な議論が可能となる。従って、以下においては、ディスク状粒子が平行でない場合について論ずる。ディスク状粒子の厚さ方向の中心の断面である直径  $d_1$  の円に着目すると、交わりの本質は図 4.2 に示すとおりである。図 4.2(a)は交線が粒子を貫く場合、図 4.2(b),(c)は交線が一つの粒子のみを貫く場合で、図 4.2(b)は重なり部が平板部の外側にある場合、図 4.2(c)は重なり部が平板部にある場合であり、図 4.2(d)は交線が二つの粒子ともに平板部の外側にある場合である。ディスク状粒子は厚みを有するので、以上のような場合分けをし、最短距離を把握して、重なりの有無を論じれば、漏れなく判断できるはずである。以上が重なり判断の方針である。以下にこの方針に従って、詳しい重なり判定条件を考察する。

解析を進めるために、図 4.3 に示すような2粒子の配置について考える。粒子  $i$  の中心の位置ベクトルを  $\mathbf{r}_i$ 、ディスク状粒子の方向を示す単位ベクトルを  $\mathbf{e}_i$ 、粒子  $i$  を含む平面上で交線に下した点を  $S_i$  とし、その点の位置ベクトルを  $\mathbf{r}_i^s$ 、粒子  $i$  の中心から  $S_i$  方向に向かう単位ベクトルを  $\mathbf{e}_i^s$  とする。同様の記号を粒子  $j$  についても定義する。さらに、点  $S_j$  から点  $S_i$  に向かう単位ベクトルを  $\mathbf{t}_{ij}^s$  とする。粒子の状態を規定するこれらの諸量をまず求めて、それから、それらの量を用いて重なり判定条件を求める。

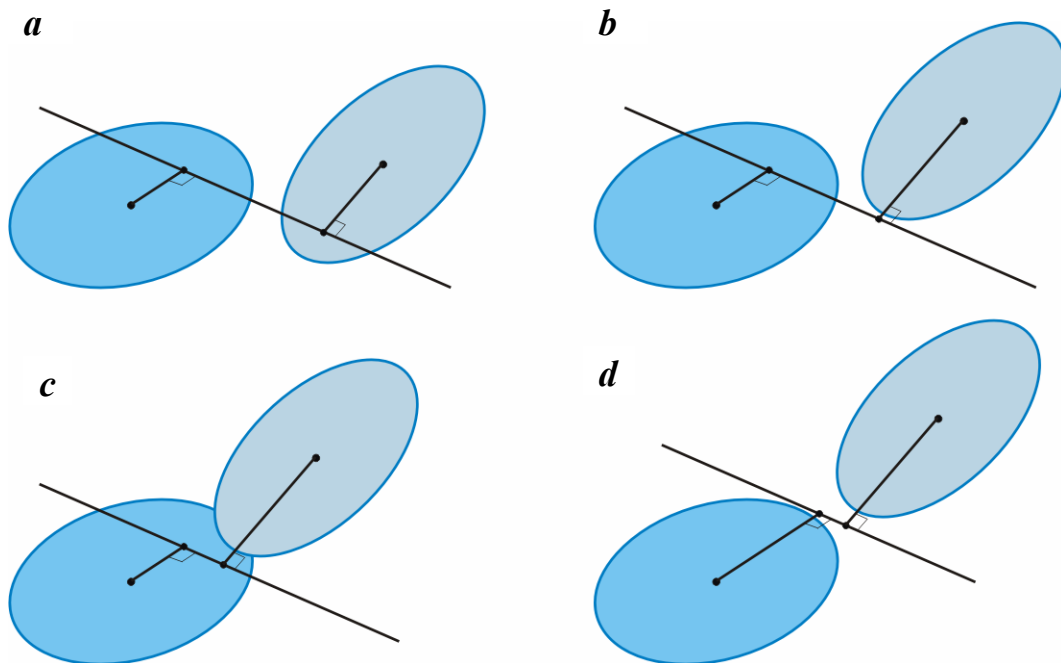


図 4.2 厚みがない円形ディスク状粒子の重なり

交線に沿った単位ベクトル  $\mathbf{t}_{ij}^s$  はベクトル  $\mathbf{e}_i$  とベクトル  $\mathbf{e}_j$  に垂直であることから、ベクトルの外積の概念を用いると次式のように求まる。

$$\mathbf{t}_{ij}^s = \mathbf{e}_j \times \mathbf{e}_i / |\mathbf{e}_j \times \mathbf{e}_i| \tag{4.6}$$

ただし、単位ベクトル  $\mathbf{t}_{ij}^s$  は点  $S_j$  から点  $S_i$  に向かう方向に取る。  $\mathbf{t}_{ij}^s$  を用いると、  $\mathbf{e}_i^s$  は  $\mathbf{e}_i$  と  $\mathbf{t}_{ij}^s$  に垂直で、  $\mathbf{e}_j^s$  は  $\mathbf{e}_j$  と  $\mathbf{t}_{ij}^s$  に垂直なので、次のように求まる。

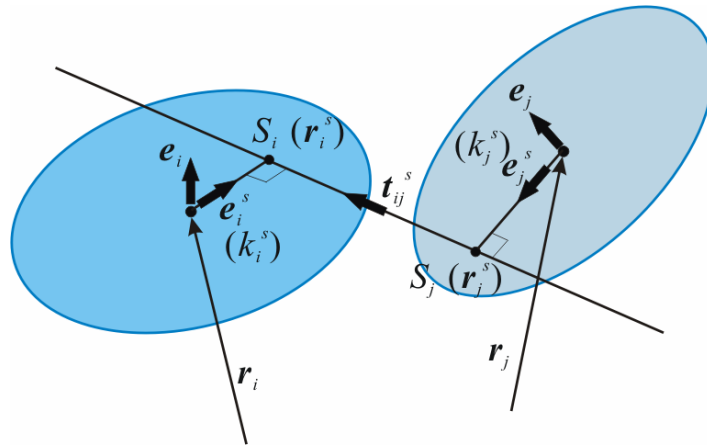


図 4.3 半径  $r_0 (=d/2)$  の円の重なり解析

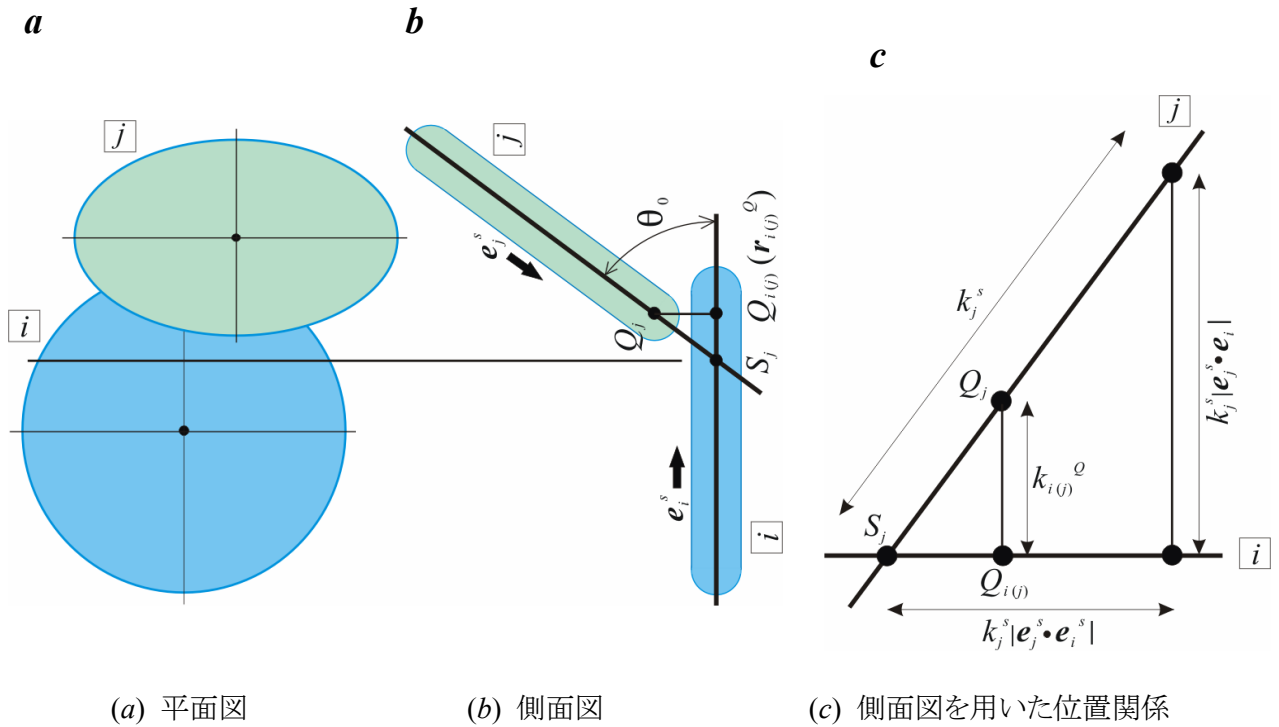


図 4.4 粒子  $i$  の平板部と粒子  $j$  の外周部との重なり解析

$$\mathbf{e}_i^s = -\mathbf{e}_i \times \mathbf{t}_{ij}^s, \quad \mathbf{e}_j^s = \mathbf{e}_j \times \mathbf{t}_{ij}^s \quad (4.7)$$

図 4.3 の状態の場合、式(4.7)で求めた  $\mathbf{e}_i^s$ 、 $\mathbf{e}_j^s$  は、各粒子の中心点から交線に向かうような方向となるが、2 粒子の位置関係によっては、そのようにならないので、符号を付け替える必要がある。ここでは、そのような処理法を論ずることはせず、次節で示すことにする。粒子  $i$  の中心と  $S_i$  間の距離を  $k_i^s$ 、粒子  $j$  に関する同様の距離を  $k_j^s$ 、点  $S_i$  と点  $S_j$  間の距離を  $k_{ij}^s$  とすれば、次式が成り立つ。

$$\mathbf{r}_i + k_i^s \mathbf{e}_i^s = \mathbf{r}_j + k_j^s \mathbf{e}_j^s + k_{ij}^s \mathbf{t}_{ij}^s \quad (4.8)$$

この式の左辺は、粒子  $i$  の中心から点  $S_i$  を記述した位置ベクトル、右辺は粒子  $j$  の中心からたどって点  $S_i$  を記述した位置ベクトルである。単位ベクトルの直交関係を考慮すると、式(4.8)から、求める量が次のように得られる。

$$k_i^s = -\frac{\mathbf{e}_j^s \cdot \mathbf{r}_{ij}}{\mathbf{e}_j^s \cdot \mathbf{e}_i^s}, \quad k_j^s = \frac{\mathbf{e}_i^s \cdot \mathbf{r}_{ij}}{\mathbf{e}_i^s \cdot \mathbf{e}_j^s}, \quad k_{ij}^s = \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{t}_{ij}^s \quad (4.9)$$

重なり判定条件を論じる前に、もう一つ準備的な議論が必要である。図 4.4 は、粒子  $j$  の外周部が粒子  $i$  の円板部と重なり得る位置関係を示したものである。2 粒子の属する平面のなす角を  $\theta_0$  とし、粒子  $j$  の円柱部の最近接点  $Q_j$  から粒子  $i$  の中心平面に下した点を  $Q_{i(j)}$  とすると、その垂線の足の長さ  $k_{i(j)}^0$  は、図 4.4(c)の幾何学的な関係から、簡単に次のように得られる。

$$k_{i(j)}^0 = (k_j^s - d/2) |\mathbf{e}_j^s \cdot \mathbf{e}_i| \quad (4.10)$$

従って、点  $Q_{i(j)}^0$  の位置ベクトル  $\mathbf{r}_{i(j)}^0$  は次式のように書ける。

$$\mathbf{r}_{i(j)}^0 = \mathbf{r}_j + (d/2) \mathbf{e}_j^s - k_{i(j)}^0 \mathbf{e}_i \quad (4.11)$$

式(4.10)と(4.11)は図 4.4 のような  $k_j^s \geq d/2$  の関係を満足する場合に成り立つ式であり、 $k_j^s < d/2$  の場合には、式(4.10)と(4.11)に代えて次の式を用いればよい。

$$k_{i(j)}^0 = (d/2 - k_j^s) |\mathbf{e}_j^s \cdot \mathbf{e}_i| \quad (4.12)$$

$$\mathbf{r}_{i(j)}^0 = \mathbf{r}_j + (d/2) \mathbf{e}_j^s + k_{i(j)}^0 \mathbf{e}_i \quad (4.13)$$

以上で、重なり判定条件を議論する準備ができた。なお、以下の議論においては  $k_i^s \leq k_j^s$  と仮定して議論を進める。

$\mathbf{e}_i$  と  $\mathbf{e}_j$  の方向に関して、次の三つの場合に分けて論ずることが合理的である。

#### I. $\mathbf{e}_i \neq \pm \mathbf{e}_j$ の場合 (一般的な交わりの場合)

$$\mathbf{a} = \mathbf{R}^{-1} \cdot \mathbf{a}^b \quad (4.28)$$

従って、任意の粒子の粒子方向  $\mathbf{e}$  と磁気モーメント  $\mathbf{n}$  については次のように得られる。

$$\mathbf{e} = \mathbf{R}^{-1} \cdot \mathbf{e}^b, \quad \mathbf{n} = \mathbf{R}^{-1} \cdot \mathbf{n}^b \quad (4.29)$$

粒子の方向は  $Z$  軸方向を向くように  $XYZ$  座標系を取っているので、必ず  $\mathbf{e}^b = (0, 0, 1)$  となる。従って、絶対座標系での粒子方向は  $\mathbf{e} = (e_x, e_y, e_z) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$  となる。もし、 $(e_x, e_y, e_z)$  が与えられていて、 $\theta$  と  $\phi$  の正弦・余弦関数を求めるには、 $\cos \theta = e_z$ 、 $\sin \theta = \sqrt{1 - e_z^2}$ 、 $\cos \phi = e_x / \sin \theta$ 、 $\sin \phi = e_y / \sin \theta$  より求まる。ここで、 $\theta$  は  $0 \leq \theta \leq \pi/2$  の領域で定義することに注意しなければならない。この  $\theta$  の定義域により生じる特別な取り扱いは後に示す。

次に、磁気モーメントの方向  $\mathbf{n}$  の表し方を述べる。図 4.6(b) に示すように、 $XYZ$  座標系において、磁気モーメントの方向は  $X$  軸からの反時計方向への角度  $\psi$  で表す。すなわち、方向を表す単位ベクトル  $\mathbf{n}^b$  は  $\mathbf{n}^b = (\cos \psi, \sin \psi, 0)$  で表される。 $\psi$  を与えると  $\mathbf{n}^b$  が得られ、 $xyz$  座標系での方向  $\mathbf{n}$  が、式(4.29)で表された関係式  $\mathbf{n} = \mathbf{R}^{-1} \cdot \mathbf{n}^b$  より求まることになる。

#### 4.3.4 粒子方向と磁気モーメントの方向に関する微小回転の試み

モンテカルロ・シミュレーションにおいては、一様乱数を用いて、粒子の位置や粒子の方向ならびに磁気モーメントの方向を微小量変化させる試みをすることになる。並進移動については、特に困難な点はないが、粒子の回転や磁気モーメントの方向の回転の試みはかなり複雑となるので、以下に後者の二つの回転の試みの処理法を示す。

まず、粒子の回転について述べる。先に示したように、任意の粒子の方向が  $(\theta, \phi)$  で与えられるとすると、その方向を微小量  $(\Delta\theta, \Delta\phi)$  変化させて  $(\theta + \Delta\theta, \phi + \Delta\phi)$  になったとする。ここで問題となる点は、角度  $\theta, \phi$  は  $0 \leq \theta \leq \pi/2$ 、 $0 \leq \phi < 2\pi$  で定義されているので、当然  $\theta + \Delta\theta, \phi + \Delta\phi$  も同様の定義域となる。従って、次のような処理が必要となる。

(1)  $\theta + \Delta\theta < 0$  の場合

$\theta' = -(\theta + \Delta\theta)$ 、 $\phi' = \phi + \Delta\phi + \pi$ 、 $\psi' = \psi + \pi$  とする。ただし、 $\phi'$ 、 $\psi'$  は  $0 \leq \phi', \psi' < 2\pi$  になるようにする。例えば  $\phi'$  が  $\phi' \geq 2\pi$  となった場合には  $(\phi' - 2\pi)$  を  $\phi'$  として採用する。

(2)  $\theta + \Delta\theta \geq \pi/2$  の場合

$\theta' = \pi - (\theta + \Delta\theta)$ 、 $\phi' = \phi + \Delta\phi + \pi$ 、 $\psi' = 2\pi - \psi$  とする。 $\phi'$ 、 $\psi'$  が  $0 \leq \phi', \psi' < 2\pi$  の領域外となったときには、上述と同様の処理をする。

(3)  $0 \leq \theta + \Delta\theta < \pi/2$  の場合

$\theta' = \theta + \Delta\theta$ 、 $\phi' = \phi + \Delta\phi$ 、 $\psi' = \psi$  とし、 $\phi'$  と  $\psi'$  については、 $0 \leq \phi', \psi' < 2\pi$  の領域外となったときには、同様の処理をする。

以上で求めた $(\theta', \phi')$ と $\psi'$ に対して, 粒子方向の回転の試みの採否をモンテカルロ法によって決定することになる.

次に磁気モーメントの方向を微小量変化させる試みについて述べる.  $\psi$ を微小量変化させて $\psi + \Delta\psi$ とすると, もし $\psi + \Delta\psi \geq 2\pi$ なら $\psi' = \psi + \Delta\psi - 2\pi$ とし,  $\psi + \Delta\psi < 0$ なら $\psi' = \psi + \Delta\psi + 2\pi$ , それ以外なら $\psi' = \psi + \Delta\psi$ として, 磁気モーメントの方向が $\mathbf{n}^b = (\cos\psi', \sin\psi', 0)$ になったとする. この場合の絶対座標系の磁気モーメントの方向 $\mathbf{n}'$ は $\mathbf{n}' = \mathbf{R}^{-1} \cdot \mathbf{n}^b$ で得られるので, この磁気モーメントの方向を用いて, 相互作用のエネルギーを計算し, モンテカルロ法によって, そのような新しい方向の採否を決めることができる.

## 4.4 シミュレーションのための諸設定

### 4.4.1 初期状態の設定

円形ディスク状粒子の初期状態の設定は基本的に第 2.1.1 項で示したとおりであるが, 粒子数を若干変更した状態を与える. 図 2.3 において,  $x$  方向に 4 個,  $y$  方向に 12 個並べて, 計 48 個の粒子を  $xy$  平面上に配置する. さらに, それらを  $z$  方向に 6 層積み重ねて, 計 288 個の粒子を配置する. この場合のシミュレーション領域の大きさは $(L_x, L_y, L_z) = (4r_p b_1, 12b_1, 6r_p b_1)$ となる. 粒子の間隔を各軸方向に  $\alpha$  倍して粒子間隔を広げて所望の体積分率 $\phi_V$ を与えるようにすると, 倍率  $\alpha$  は式(2.2)と同様にして得られ, 次のようになる.

$$\alpha = \left[ \frac{\pi}{24r_p^2 \phi_V} \left\{ 6(r_p - 1)^2 + 3\pi(r_p - 1) + 4 \right\} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (4.30)$$

このように各軸方向に  $\alpha$  倍して間隔を広げて配置した粒子は完全な対称性を有するので, 微小量ずらして対称性をなくすようにする. このような設定により, 初期状態から粒子が移動しやすくなる.

以上のように粒子の位置を設定した場合, 粒子の方向はすべて  $y$  軸方向を向くようになるので,  $\mathbf{e}_i = (0, 1, 0)$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ) と設定する.

磁気モーメントの方向は, 乱数を用いて任意の方向に設定する. すなわち, 乱数を用いて  $XY$  平面上の角度  $\psi$  を設定すると,  $\mathbf{n}^b = (n_x^b, n_y^b, 0) = (\cos\psi, \sin\psi, 0)$  が得られ, 式(4.29)より, 絶対座標系の方向  $\mathbf{n}$  が得られることになる.

### 4.4.2 シミュレーションのための諸量の設定

上述したように, 粒子数は  $N=288$ , 体積分率は $\phi_V=0.05 \sim 0.3$  ぐらいの範囲でシミュレーシ



シミュレーションを行う。磁場は  $z$  軸方向に印加するとして  $\mathbf{h}=(0, 0, 1)$  となる。相互作用のエネルギーを計算するに際しての計算の打ち切り距離であるカットオフ距離は、ここでは  $r_{\text{cutoff}}^* = 5d_1^*$  としているが、磁気的な相互作用は長距離オーダーの相互作用なので、研究用においては十分大きな値を設定する必要がある。粒子と磁場、ならびに、粒子と粒子の磁気的な相互作用の大きさを表す無次元パラメータである  $\xi$  と  $\lambda$  は、 $\xi=0, 1, 10, 30, \lambda=0, 1, 10, 30, 60$  のように取ってシミュレーションを行う。なお、 $\xi \gg 1$  ということは、印加磁場の影響が回転ブラウン運動に対して非常に支配的であるということの意味し、同様に、 $\lambda \gg 1$  は粒子間の磁気的な相互作用がブラウン運動に対して非常に支配的であることを意味している。シミュレーションにおける総モンテカルロ (MC) ・ステップ数 (1MC ステップは1時間ステップに相当)  $N_{\text{mcsmplemx}}$  は通常  $N_{\text{mcsmplemx}}=100,000 \sim 1,000,000$  ぐらいで十分であるが、今回は研究用ではないので  $N_{\text{mcsmplemx}}=100,000$  とする。

## 4.5 シミュレーションの結果

次節で示すシミュレーション・プログラムを用いて得られた凝集構造の結果を図 4.7～図 4.10 に示す。図 4.7 は  $\lambda=0$  で粒子間の磁気的な相互作用がない場合、図 4.8 は  $\xi=0$  で磁場を印加しない場合、図 4.9 は  $\xi=10$ 、図 4.10 は  $\xi=30$  の場合のスナップショットである。

図 4.7 の場合、磁気的な相互作用がないので、粒子同士が凝集して結合することはない。図 4.7(a) の場合、印加磁場もゼロなので、粒子の磁気モーメントは自由な方向を向いてお

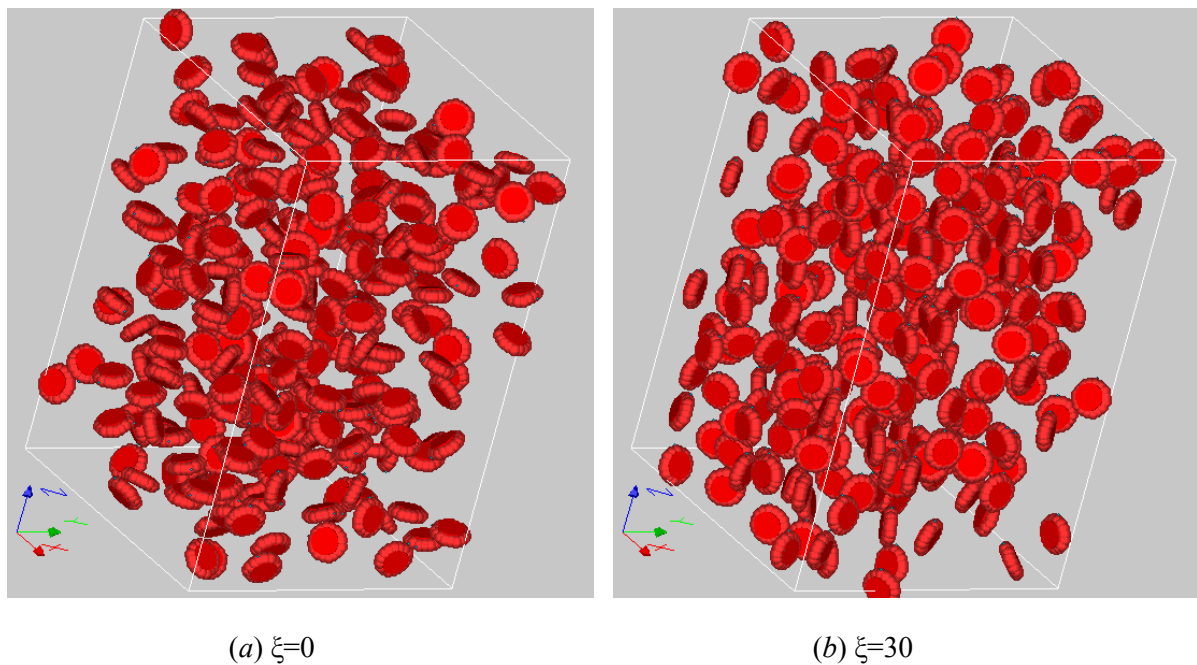


図 4.7  $\lambda=0$  の場合の凝集構造

本物理現象をシミュレートするためのシミュレーション・プログラムの一例を以下に示す。プログラムは FORTRAN 言語で書かれている。

プログラムを理解しやすくするために、本プログラムで用いられる変数の主なものを説明する。

RX(I), RY(I), RZ(I)	: 粒子 $i$ の位置ベクトル $\mathbf{r}_i^*$ の $x, y, z$ 成分
EX(I), EY(I), EZ(I)	: 粒子 $i$ の方向を表す単位ベクトル $\mathbf{e}_i$ の $x, y, z$ 成分
NX(I), NY(I), NZ(I)	: 粒子 $i$ の磁気モーメントの方向を表す単位ベクトル $\mathbf{n}_i$ の $x, y, z$ 成分
XL, YL, ZL	: シミュレーション領域の $x, y, z$ 方向の長さ
N	: 系の粒子数
D1	: 円形ディスク状粒子の直径 $d_1^*$
D	: 円形ディスク状粒子の円柱部の直径 $d^*$
RP	: 粒子のアスペクト比で $d_1^*(=d_1/b_1)$ に等しい
VP	: 粒子の1個の体積
VDENS	: 粒子の体積分率 $\phi_v$
HX, HY, HZ	: 印加磁場の方向を表す単位ベクトル $\mathbf{h}$ の $x, y, z$ 成分
RA	: 粒子間の磁気的な相互作用の大きさを表す無次元パラメータ $\lambda$
KU	: 粒子と磁場との相互作用の大きさを表す無次元パラメータ $\xi$
RCOFF	: 相互作用のエネルギーに関するカットオフ距離
DELR	: 乱数を用いて粒子を並進移動させる場合の最大移動距離
DELT	: 乱数を用いて粒子を回転移動させる場合の最大移動角度
RAN(J)	: 0~1 に分布する一様乱数列 ( $J=1 \sim \text{NRANMX}$ )
NRAN	: 使用済みの乱数の数
E(I)	: 粒子 $i$ と相互作用する粒子との相互作用のエネルギーを格納
MOMX(*), ..., MOMZ(*)	: 各 MC ステップでの磁気モーメントの方向の平均値
MEANENE(*)	: 各 MC ステップでの系のエネルギーの平均値

プログラムの理解を助けるために、重要な部分に解説のための記述を付加してある。なお、行番号は読者のために便宜上付加したものである。

準乱数については第3.6節ですでに説明したとおりであり、粒子の移動の試みで用いられる擬似乱数 RAN(\*)を節約するために用いられる乱数である。

```

0001 C*****
0002 C*
0003 C*          mcdisk3.f
0004 C*
0005 C*          OPEN(9, FILE='@aaa1.dat', STATUS='UNKNOWN')
0006 C*          OPEN(10, FILE='aaa11.dat', STATUS='UNKNOWN')
0007 C*          OPEN(13, FILE='aaa41.mgf', STATUS='UNKNOWN')
0008 C*          OPEN(21, FILE='aaa001.dat', STATUS='UNKNOWN')
0009 C*          OPEN(22, FILE='aaa011.dat', STATUS='UNKNOWN')
0010 C*          OPEN(23, FILE='aaa021.dat', STATUS='UNKNOWN')
0011 C*          OPEN(24, FILE='aaa031.dat', STATUS='UNKNOWN')
0012 C*          OPEN(25, FILE='aaa041.dat', STATUS='UNKNOWN')
0013 C*          OPEN(26, FILE='aaa051.dat', STATUS='UNKNOWN')
0014 C*          OPEN(27, FILE='aaa061.dat', STATUS='UNKNOWN')
0015 C*          OPEN(28, FILE='aaa071.dat', STATUS='UNKNOWN')
0016 C*          OPEN(29, FILE='aaa081.dat', STATUS='UNKNOWN')
0017 C*          OPEN(30, FILE='aaa091.dat', STATUS='UNKNOWN')
0018 C*
0019 C*          ----- MONTE CARLO SIMULATIONS -----
0020 C*          THREE-DIMENSIONAL MONTE CARLO SIMULATION OF
0021 C*          MAGNETIC COLLOIDAL DISPERSIONS COMPOSED OF
0022 C*          MAGNETIC DISK-LIKE PARTICLES
0023 C*
0024 C*          1. A PARTICLE IS MODELED AS A CIRCULAR DISK-LIKE PARTICLE.
0025 C*          2. THE CLUSTER-MOVING METHOD IS NOT USED.
0026 C*          3. A STERIC LAYER IS NOT TAKEN INTO ACCOUNT.
0027 C*
0028 C*
0029 C*****          VER.1 BY A.SATOH , '08 5/2 *****
0030 C          N          : NUMBER OF PARTICLES (N=INIPX*INIPY*INIPZ)
0031 C          D1         : DIAMETER OF OUTER CIRCLE OF A DISK-LIKE PARTICLE
0032 C          D          : DIAMETER OF THE PART OF CYLINDER
0033 C          B1        : THICKNESS OF PARTICLE (=1 FOR THIS CASE)
0034 C          RP        : ASPECT RATIO (=D1/B1) (=D1 FOR THIS CASE)
0035 C          VP        : VOLUME OF THE PARTICLE
0036 C          NDENS     : NUMBER DENSITY
0037 C          VDENS     : VOLUMETRIC FRACTION
0038 C          IPTCLMDL  : =1 FOR DIPOLE IN THE CENTER, =2 FOR TWO POINT CHARGES
0039 C          RA        : NONDIMENSIONAL PARAMETER OF PARTICLE-PARTICLE INTERACT
0040 C          RAO       : =RA/RP**3 FOR IPTCLMDL=1, =RA/RP FOR IPTCLMDL=2
0041 C          KU        : NONDIMENSIONAL PARAMETER OF PARTICLE-FIELD INTERACTION
0042 C          HX, HY, HZ : MAGNETIC FIELD DIRECTION (UNIT VECTOR)
0043 C          RCOFF    : CUTOFF RADIUS FOR CALCULATION OF INTERACTION ENERGIES
0044 C          XL, YL, ZL : DIMENSIONS OF SIMULATION REGION
0045 C                   (XL, YL, ZL)=(INIPX*RP, INIPY, INIPZ*RP) *ALPHA
0046 C          (1) RP=3
0047 C             INITREE=1 : (INIPX, INIPY, INIPZ)=( 3, 9, 12), N= 324
0048 C             INITREE=2 : (INIPX, INIPY, INIPZ)=( 4, 12, 6), N= 288
0049 C          (2) RP=4
0050 C             INITREE=3 : (INIPX, INIPY, INIPZ)=( ?, ?, ?), N= ?
0051 C             INITREE=4 : (INIPX, INIPY, INIPZ)=( ?, ?, ?), N= ?
0052 C          (3) RP=5
0053 C             INITREE=5 : (INIPX, INIPY, INIPZ)=( ?, ?, ?), N= ?
0054 C             INITREE=6 : (INIPX, INIPY, INIPZ)=( ?, ?, ?), N= ?
0055 C          RX(N), RY(N), RZ(N) : PARTICLE POSITION
0056 C          EX(N), EY(N), EZ(N) : DIRECTION OF RODLIKE PARTICLE
0057 C          NX(N), NY(N), NZ(N) : DIRECTION OF MAGNETIC MOMENT
0058 C          E(I) : INTERACTION ENERGY OF PARTICLE I WITH THE OTHERS
0059 C          MOMX(**), MOMY(**) : MAG. MOMENT OF SYSTEM AT EACH TIME STEP
0060 C          MOMZ(**)
0061 C          MEANENE(**) : MEAN ENERGY OF SYSTEM AT EACH MC STEP
0062 C          ETHETA(N), EPHI(N) : ANGLES DENOTING THE PARTICLE DIRECTION
0063 C          NPSI(N) : ANGLE DENOTING THE MAG.MOM. DIRECTION
0064 C          RMAT(3, 3, N) : ROTATIONAL MATRIX
0065 C          NXB(N), NYB(N) : DIREC. OF MAG. MOM. IN THE BODY-FIXED AXIS
0066 C                   SYSTEM
0067 C
0068 C          DELR : MAXIMUM MOVEMENT DISTANCE
0069 C          DELT : MAXIMUM MOVEMENT IN ORIENTATION
0070 C
0071 C          0 < RX < XL , 0 < RY < YL , 0 < RZ < ZL
0072 C-----
0073 C          IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z), INTEGER (I-N)
0074 C
0075 C          COMMON /BLOCK1/ RX , RY , RZ
0076 C          COMMON /BLOCK2/ NX , NY , NZ
0077 C          COMMON /BLOCK3/ N , NDENS , VDENS
0078 C          COMMON /BLOCK4/ D , D1 , RP , VP , IPTCLMDL
0079 C          COMMON /BLOCK5/ XL , YL , ZL , INIPX , INIPY , INIPZ , INITREE
0080 C          COMMON /BLOCK6/ RA , RAO , KU , HX , HY , HZ
0081 C          COMMON /BLOCK7/ E , ENEW , EOLD

```

```

0082 COMMON /BLOCK8/ RCOFF, DELR , DELT
0083 COMMON /BLOCK10/ MOMX , MOMY , MOMZ , MEANENE
0084 COMMON /BLOCK11/ EX , EY , EZ
0085 COMMON /BLOCK12/ NXB , NYB
0086 COMMON /BLOCK13/ ETHETA , EPHI , NPSI , RMAT
0087 COMMON /BLOCK30/ NRAN , RAN , IX
0088 C
0089 PARAMETER( NN=1360 , NNS=200000 )
0090 PARAMETER( NRANMX=1000000 , PI=3.141592653589793D0 )
0091 C
0092 REAL*8 KU , NDENS , VDENS
0093 REAL*8 RX(NN) , RY(NN) , RZ(NN)
0094 REAL*8 NX(NN) , NY(NN) , NZ(NN) , E(NN)
0095 REAL*8 EX(NN) , EY(NN) , EZ(NN)
0096 REAL*8 NXB(NN) , NYB(NN)
0097 REAL*8 ETHETA(NN) , EPHI(NN) , NPSI(NN) , RMAT(3,3,NN)
0098 REAL MOMX(NNS) , MOMY(NNS) , MOMZ(NNS) , MEANENE(NNS)
0099 C
0100 REAL RAN(NRANMX)
0101 INTEGER NRAN , IX , NRANCHK
0102 C
0103 REAL*8 RXCAN , RYCAN , RZCAN
0104 REAL*8 NXCAN , NYCAN , NZCAN
0105 REAL*8 EXCAN , EYCAN , EZCAN
0106 REAL*8 RXI , RYI , RZI , NXI , NYI , NZI
0107 REAL*8 EXI , EYI , EZI
0108 REAL*8 RXIJ , RYIJ , RZIJ , RIJ , RIJSQ , RCOFF2
0109 REAL*8 NXBI , NYBI , NXBC , NYBC , NXC , NYC , NZC
0110 REAL*8 ETHETA1 , EPHI1 , NPSI1 , ETHETA2 , EPHI2 , NPSI2
0111 REAL*8 RMATC(3,3)
0112 REAL*8 ECAN , C1 , C2 , C3 , C4
0113 REAL*8 CX , CY , CZ
0114 INTEGER MCSMPL , MCSMPLMX , MCSMPL1 , MCSMPL2 , NSMPL
0115 INTEGER NGRAPH , NOPT , DN , DNSMPL
0116 INTEGER ITHETA , IPHAI , IT , IP
0117 INTEGER NANIME , NANMCTR , NOPT1
0118 LOGICAL OVRLAP
0119 C
0120 OPEN(9,FILE='@baba1.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0121 OPEN(10,FILE='baba11.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0122 OPEN(13,FILE='baba41.mgf' , STATUS='UNKNOWN')
0123 OPEN(21,FILE='baba001.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0124 OPEN(22,FILE='baba011.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0125 OPEN(23,FILE='baba021.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0126 OPEN(24,FILE='baba031.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0127 OPEN(25,FILE='baba041.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0128 OPEN(26,FILE='baba051.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0129 OPEN(27,FILE='baba061.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0130 OPEN(28,FILE='baba071.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0131 OPEN(29,FILE='baba081.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0132 OPEN(30,FILE='baba091.dat' , STATUS='UNKNOWN')
0133 NP=9
0134 C
0135 C
0136 C
0137 C
0138 C
0139 IPTCLMDL= 1
0140 VDENS = 0.1D0
0141 KU = 10.0D0
0142 RA = 10.0D0
0143 INITREE = 2
0144 N = 288
0145 CCC INITREE = 1
0146 CCC N = 324
0147 C
0148 HX = 0.0D0
0149 HY = 0.0D0
0150 HZ = 1.0D0
0151 RP = 3.0D0
0152 D1 = RP
0153 D = D1 - 1.0D0
0154 RCOFF = 5.0D0*D1
0155 VP = (PI/24.0D0)*(6.0D0*(RP-1.0D0)**2+3.0D0*PI*(RP-1.0D0)+4.0D0)
0156 NDENS = VDENS/VP
0157 IF( IPTCLMDL .EQ. 1 ) RAO = RA/RP**3
0158 IF( IPTCLMDL .EQ. 2 ) RAO = RA/RP
0159 C
0160 DELR = 0.2D0
0161 DELT = (5.0D0/180.0D0)*PI
0162 C

```

•@baba1 と baba11 には設定値の値や磁気モーメントの方向のサンプリング値、baba41 には MicroAVS 用のデータ、baba001 から baba091 には時系列に沿った粒子の位置と方向などのデータが出力される。

NP=9

--- PARAMETER (1) ---

-----  
BE CAREFUL IN SETTING N, INIPX, ..., INITREE !!!  
-----

•粒子数  $N=288$ 、粒子の体積分率  $\phi_v=0.1$ 、 $\lambda=10$ 、 $\xi=10$ 、INITREE の値によってシミュレーション領域の大きさを変える。  
•アスペクト比  $r_p=3$ 、磁場の方向は  $\mathbf{h}=(0,0,1)$ 。

--- PARAMETER (2) ---

•カットオフ距離  $r_{\text{cutoff}}^* = 5r_p$ 、VP は粒子の体積、NDENS は粒子の数密度。

--- PARAMETER (3) ---

•モンテカルロ法による最大変位を  $\delta r_{\text{max}}^* = 0.2$ 、 $\delta \theta_{\text{max}} = (5/180)\pi$  とする。

```

0163 CCC MCSMPLMX= 100000
0164 CCC MCSMPLMX= 10000
0165 NGRAPH = MCSMPLMX/10
0166 NANIME = MCSMPLMX/200
0167 DN = 10
0168 DNSMPL = 10
0169 NOPT = 20
0170 RCOFF2 = RCOFF**2
0171 C
0172 IX = 0
0173 CALL RANCAL( NRANMX, IX, RAN )
0174 NRAN = 1
0175 NRANCHK = NRANMX - 12*N
0176 C
0177 C
0178 C -----
0179 C ----- INITIAL CONFIGURATION -----
0180 C
0181 C
0182 CCC OPEN(19,FILE='aaba091.dat',STATUS='OLD')
0183 CCC READ(19,472) N, XL, YL, ZL, D, D1, RP
0184 CCC READ(19,473) (RX(I), I=1,N), (RY(I), I=1,N), (RZ(I), I=1,N)
0185 CCC READ(19,474) (NX(I), I=1,N), (NY(I), I=1,N), (NZ(I), I=1,N),
0186 CCC & (EX(I), I=1,N), (EY(I), I=1,N), (EZ(I), I=1,N),
0187 CCC & (NXB(I), I=1,N), (NYB(I), I=1,N)
0188 CCC READ(19,473) (ETHETA(I), I=1,N), (EPHI(I), I=1,N), (NPSI(I), I=1,N)
0189 CCC READ(19,474) ( (RMAT(II, JJ, I), II=1,3), (JJ=1,3), I=1,N )
0190 CCC CLOSE(19,STATUS='KEEP')
0191 CCC GOTO 7
0192 C
0193 CALL INITIAL
0194 C
0195 7 IF( XL .LE. YL ) THEN
0196 IF( RCOFF .GE. XL/2.D0 ) THEN
0197 RCOFF = XL/2.D0 - 0.00001D0
0198 END IF
0199 ELSE
0200 IF( RCOFF .GE. YL/2.D0 ) THEN
0201 RCOFF = YL/2.D0 - 0.00001D0
0202 END IF
0203 END IF
0204 RCOFF2 = RCOFF**2
0205 CRAD = ( XL*YL*ZL/DBLE(N*N) ) / ( 4.D0*PI*DR )
0206 C
0207 C
0208 C ----- PRINT OUT (1) -----
0209 WRITE(NP,12) IPTCLMDL, N, VDENS, NDENS, RA, RAO, KU, RP,
0210 & D, D1, XL, YL, ZL, RCOFF, DELR, DELT
0211 WRITE(NP,14) MCSMPLMX, NGRAPH, DN, DNSMPL
0212 WRITE(NP,15) HX, HY, HZ
0213 C
0214 C
0215 NANMCTR = 0
0216 NSMPL = 0
0217 C
0218 C -----
0219 C ----- START OF MONTE CARLO PROGRAM -----
0220 C
0221 DO 1000 MCSMPL = 1, MCSMPLMX
0222 C
0223 DO 400 I=1,N
0224 C
0225 C ++++++ POSITION ++++++
0226 C --- OLD ENERGY ---
0226 RXI = RX(I)
0227 RYI = RY(I)
0228 RZI = RZ(I)
0229 NXI = NX(I)
0230 NYI = NY(I)
0231 NZI = NZ(I)
0232 EXI = EX(I)
0233 EYI = EY(I)
0234 EZI = EZ(I)
0235 ITREE = 0
0236 CALL ENECAL( I, RXI, RYI, RZI, EXI, EYI, EZI, NXI, NYI, NZI,
0237 & RCOFF2, EOLD, OVLAP, ITREE, J )
0238 C
0239 C ----- (1) CANDIDATE -----
0240 NRAN = NRAN + 1
0241 RXCAN = RX(I) + DELR*( 1.D0 - 2.D0*DBLE(RAN(NRAN)) )
0242 IF( RXCAN .GE. XL ) THEN
0243 RXCAN = RXCAN - XL

```

•MCSMPLMX が 10,000 になったらシミュレーションは終了する。サンプリングは DNSMPL ごとに行われる。  
 •NGRAPH ごとに粒子の位置などのデータが出力される。  
 •MicroAVS のアニメーションのデータが 200 組出力される。

•あらかじめ一様乱数列を作成しておき、必要なとき変数 RAN(\*)から乱数を取り出して用いる。

•データファイルに格納したデータを用いて、シミュレーションを継続実行するためのもの。

•粒子の初期位置と初期方向などを設定。

•RCOFF は必ず XL/2 より短く取る。

•以下、粒子 i に関する処理を行う。

•粒子 i と相互作用する粒子との相互作用のエネルギーを計算する。

•粒子 i の位置を乱数により微小量移動させる。