

二次元格子模型とモンテカルロ法を用いた粒子の会 合とネットワーク構造の形成

小熊, 卓也
九州大学理学部化学科

<https://doi.org/10.15017/1470159>

出版情報：九州大学情報基盤研究開発センター全国共同利用システム広報. 2 (1), pp.6-16, 2008-08.
九州大学情報統括本部広報委員会
バージョン：
権利関係：



二次元格子模型とモンテカルロ法を用いた 粒子の会合とネットワーク構造の形成ⁱ

小熊卓也^{*}

概要

ランダムに粒子を配置した二次元格子模型において、モンテカルロ法を用いた粒子単位の移動および、溶媒の粘性を想定したクラスター単位の移動と会合から、粒子のネットワーク構造形成の様子をシミュレートしました。様々な条件下においてネットワーク構造の形成は、格子中の粒子数50%付近から、顕著に見られるようになることがわかりました。また、系の温度 T と隣接粒子間のポテンシャル ε の比である ε/T の値が増加するとともに、ネットワーク形成が促進されるという結論を得ました。

1 はじめに

例えば、牛乳にレモン汁を入れてかき混ぜるとチーズができるように、溶液中のコロイド粒子が物理的、もしくは化学的に結合し合うことで形成される網目構造をゲルといいます。近年、ネットワーク、つながりという観点からゲルに対する研究が行われています。例えば、格子模型のネットワーク形成では各々の格子に確率 p で粒子を配置したときに、臨界確率($p \doteq 0.59$)において急激にそのシステム内で粒子が端から端までつながる、すなわち正方格子のパークレーションが起きることが、シミュレーションや繰り込み理論により研究されて報告されています[1,2]。着目する分子が結合してゆくプロセスを計算し、パークレーションが起きているかどうかを判定すれば、大きな系でのネットワーク形成について予想し、ゲル化過程について議論できる可能性があると考えました。このレポートでは、モンテカルロ法[3]を用いて格子模型上の粒子のつながりをシミュレートし、その結果を解析しました。

2 モデルと理論ⁱⁱ

二次元格子状におかれた粒子に対して、2種類の移動を考えます。粒子単位での移動および、会合した粒子(クラスター)単位での移動です。まず、これらの粒子の移動原理について言及した後、想定されるネットワーク構造の形成パターンについて述べます。

周囲に障害物の無い粒子は、図1のように4方向への移動が可能です。どの方向へ動くかは乱数によって決定されます。また、ある粒子が他の粒子と隣接しているときのみ、相互作用によって ε の安定化エネルギーを得

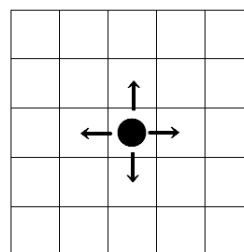


図1 二次元格子模型における粒子の移動可能な方向.各々の方向への移動は乱数によって等確率で行われます。

^{*} 九州大学理学部化学科、(ただし、コメントは秋山による。)本記事は前の記事(秋山良, 小熊卓也「学生向けスーパーコンピュータ無料プランの授業における利用例」で紹介されたレポートである.)

るとします(図 2).粒子の解離は, エネルギー的に不安定になりますが, 系の温度に応じた熱的な解離も可能であるとします(図 3).

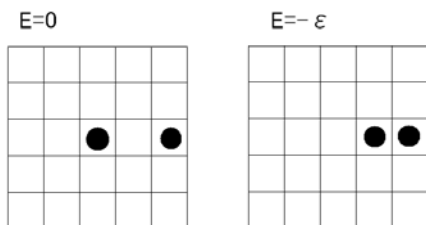


図 2 粒子単位の移動による会合体形成の様子.粒子が隣接すると,粒子間の相互作用によって系は ε の安定化を受けます.

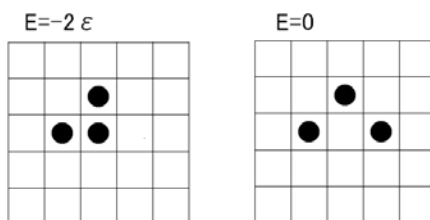


図 3 粒子単位の移動による会合体の解離の様子.

この解離の有無を, ボルツマン因子を用いたモンテカルロ法によって判定しました. すなわち, 0 から 1 までの乱数 $r_{0,1}$ に対して,

$$r_{0,1} < \exp\left(-\frac{\varepsilon l}{kT}\right) \quad l: \text{隣接粒子数} (\leq 4) \quad (1)$$

が成立するときのみ解離が可能です.

系の粒子が会合体を形成し, ネットワーク構造を形成する過程では粒子単位の移動だけでなくクラスター単位による移動が重要な影響を及ぼすと考えて, クラスター単位での移動を考えました. クラスターとは図 4 のように 4 方向のどれかで隣接する会合体のことを指します.

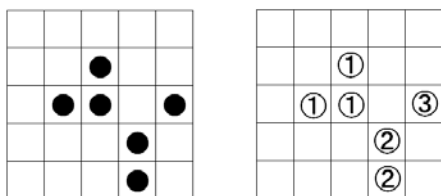


図 4 クラスターの判定.二次元格子模型において四方向に隣接する粒子は同じクラスターに帰属されます.この例ではそれぞれ会合数 3,2,1 のクラスター①,②,③が存在します.

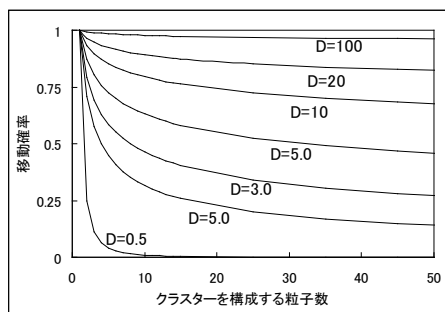


図 5 (4)式に従った,クラスターを構成する粒子数と移動確率の相関.

これらのクラスターは, そのサイズによって移動に差異が生じると考えられます. 例えば, 半径 a の粒子は流体中の移動において, 粘度 η の溶媒から次のストークス則[4]

$$f = 6\pi a \eta \quad (2)$$

に従った摩擦係数 f をもち, その半径に応じた抵抗を受けるため, 移動度が変化します. クラスターの大きさ a を, 粒子数 N および半径パラメーター D を用い,

$$a(N, D) \propto N^{-D} \quad (3)$$

と表せば、ストークス則に相当する摩擦を考慮した粒子の移動を考えることが可能です。これを模擬するために粒子数 N のクラスターに対して、乱数 $r_{0,1}$ を考え、

$$r_{0,1} < N^{-D} \quad (4)$$

が成立する場合、そのクラスター単位の移動を行うことにします。クラスターの大きさに影響を与える半径パラメーター D は、粒子の存在する溶媒の種類に相関があり、 D 値を変化させることが溶媒の変化に対応するのではないかと考えました。図 5 は半径パラメーターを変化させたときのクラスターの大きさと(4)式に従った移動確率を表したものです。

この格子模型では有限な格子数しか指定できませんが、格子数、粒子数、温度が一定の同じカノニカル集団を二次元的に接続させることで、境界の効果を考えなくてすむので、大きな系を考えることができます(図 6)ⁱⁱⁱ。

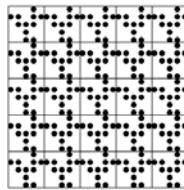
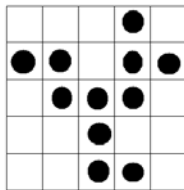


図 6 カノニカル集団の二次元的な接続。左から a, b, c. a のように同じ粒子数 N , 格子数 V , および温度 T をもつカノニカル集団の接続を, b の粒子配列をもつ一つのカノニカル系に適応しました. このとき視覚的に c のような拡張された系が表現できます。

本シミュレーションではその中の一つのカノニカル集団に注目し、粒子の移動を行います。^{iv}ここで、二次元的な接続を可能にするために、格子の周囲にある粒子が格子枠外に移動する場合、その格子の反対の座標に粒子を出現させるという境界条件を定めました(図 7)。

結果に影響を与え得る変数について言及します。本シミュレーションでは、 X, Y 平面で指定した格子数 (X, Y) 、粒子の格子数に対する数密度 **Density**、クラスター移動確率に関与する半径パラメーター D 、隣接粒子間の相互作用 ε およびカノニカル系の温度 T 、各試行における粒子の総移動回数 **Steps** そして、クラスター単位および粒子単位での移動の割合(移動比): **move_ratio** を指定可能としました。温度 T および隣接粒子間の相互作用 ε はボルツマン因子を用いたモンテカルロ法を制御する変数であり、その比 ε/T が議論されることになります。**move_ratio** は、例えば、総移動回数および移動比が **Steps=10, move_ratio=2:3** ならば「2 回のクラスター単位の移動後、3 回の粒子単位で移動を行う」というサイクルを計 10 回行うことを意味します。

本プログラムのアルゴリズムについて説明します。本シミュレーションでは、注目する一つの二次元格子模型を指定された (X, Y) 座標数に従って作成し、パラメーター **Density** に対応する粒子を配置します。このとき、粒子は (X, Y) 座標に対応した 1 から X 、および 1 から Y までの自然数の乱数 $r_{n1,X}$ および $r_{n1,Y}$ に従って、配置座標をランダムに決定されます。乱数によって指定された座標に、すでに別の粒子が存在する場合は、再度乱数が呼び出され、新たな座標を得ます。この作業を繰り返し、すべての粒子を二次元格子に振り分けます。

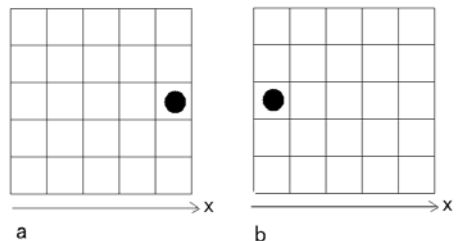


図 7 二次元格子模型に対する境界条件。a における粒子が x 方向へ +1 移動すると b の位置に移動します。

配置された粒子はすでに隣接粒子とクラスターを形成している可能性があるので、各々のクラスターに対する識別番号、クラスターを構成する粒子数などを判定します(クラスター判定).クラスター単位での移動を1度だけ行った後、粒子単位での移動を任意の回数行います.系にある粒子は、これらの移動により会合や分裂をし、移動前とは異なる様態のクラスターを形成し得ます.したがって、クラスター単位での移動を行う前には再度、クラスター判定を行いました.ここで、クラスター単位での移動および粒子単位での移動順序は、先に例を挙げて述べたように変数 Steps および move_ratio に従って制御されます.

粒子が十分な運動を行った後の系に、先のカノニカル集団の二次元的な接続と拡張

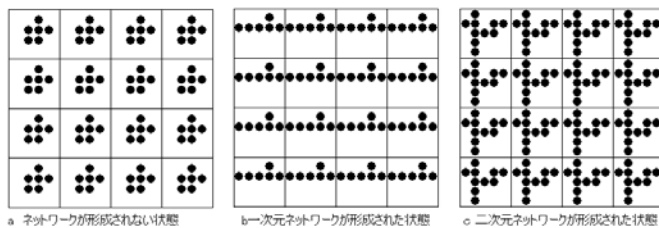


図 8 カノニカル集団の二次元的接続による系の定常状態. a では粒子がアグリゲーションをおこしネットワークが形成されていません. b は水平方向にのみネットワークが形成された一次元ネットワークです.垂直方向のみネットワークも一次元ネットワークに帰属されます. c は水平,垂直方向にネットワークが形成された二次元ネットワークの例です.

を考えると、次の三つの定常状態を考えることができます. すなわち、粒子はある程度会合しているもののネットワークは形成されない状態(アグリゲーションと呼ぶ. 図 8a), 一次元的なネットワークを形成している状態(図 8b), そして二次元的なネットワークを形成している状態(図 8c)です. 本シミュレーションでは、この三パターンの定常状態を区別することによって、各々の変数に対するネットワークの形成の様子を扱うことができます.

3 結果および考察

上記のようなプログラムから得られた結果を示します. シミュレーションは三段階で行いました. まず、粒子単位の移動のみを行った系について ε/T , Steps および Density を変数に、モンテカルロ法による粒子単位の移動がどのように行われているか検証しました. ここでは粒子のネットワーク形成については言及せず、二次元格子模型のモンテカルロ法の確認や緩和ステップ数のサイズ変化に関する考察を目的としています. 次に、粒子によるネットワークの形成を観測するため、クラスター単位の移動のみを行い、半径パラメーター D を変化させた系についてシミュレートしまし

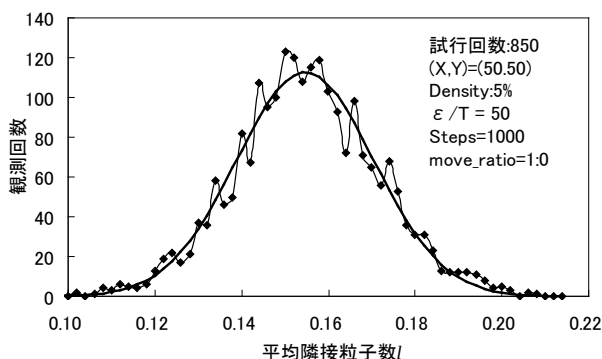


図 9 各試行における平均隣接粒子数のばらつき.ガウス関数に近似できると考えられます.

た. そして最後に, 粒子単位, およびクラスター単位の移動を組み合わせた系について move_ratio , ϵ/T , Steps および, Density を変数としてネットワークの形成がどのように行われているかシミュレートしました.

まず, ネットワーク形成を考える前に, ボルツマン因子を用いたモンテカルロ法について粒子単位の移動のみを行い検証しました vi. 図 9 は, 観測回数を 1 粒子あたりの平均隣接粒子数 l でプロットしたものです.

この試行結果がガウス関数に近似できると考え, 以降では 1 粒子の隣接粒子数として, その平均値を用います. まず, 数密度および Steps 数の変化が, 平均隣接粒子数にどのように影響するかシミュレートしました(図 10).

ϵ/T が大きくなると 1 粒子あたりの会合数はある値に漸近するようです. これは, ボルツマン因子が ϵ/T の増加と共に 0 に漸近することに他なりません. すなわち, 高 ϵ/T 領域では一度会合した粒子が同程度に, そして極めて解離しにくいということを表します. 実際の粒子では, 隣接粒子のみと相互作用を及ぼす訳ではありませんが, このモデルで議論する限りは, ϵ/T に上限があるようです. また, ステップ数が少ないと定常状態に達しませんが, この傾向は ϵ/T が大きくなるにつれ顕著となっています. ϵ/T が小さく, 粒子の会合が有利でない領域, 特に $\epsilon/T < 5$ 付近においては粒子の数密度が同じである場合に $\text{Steps}=100$ においてすでに緩和している. 一方, ϵ/T の大きな領域では緩和に多くの Steps を要することがわかります.

系が, 定常状態へ達するための十分な時間すなわち Steps は, 系の格子数を変化させた場合にどうなるでしょうか. 低 Steps においてすでに緩和されていることが図 10 から既知である $\epsilon/T=5.0$ の条件で, 格子数を変化させた場合の $l - \text{Steps}$ (図 11)および $l - \text{Steps}/\text{粒子数}$ (図 12)の相関を探りました.

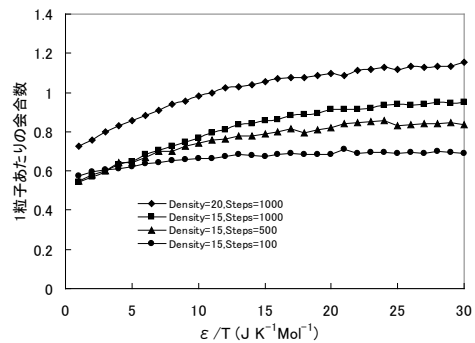


図 10 平均隣接粒子数の ϵ/T 依存性.

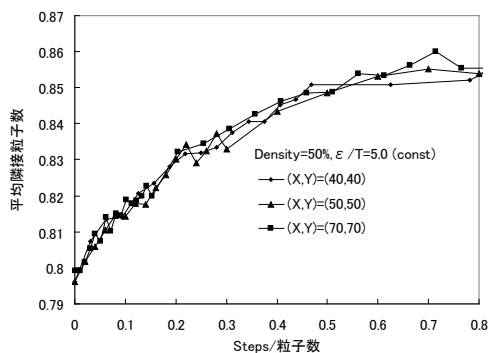


図 11 大きさの異なる二次元格子模型中の平均隣接粒子数と Steps の関係.

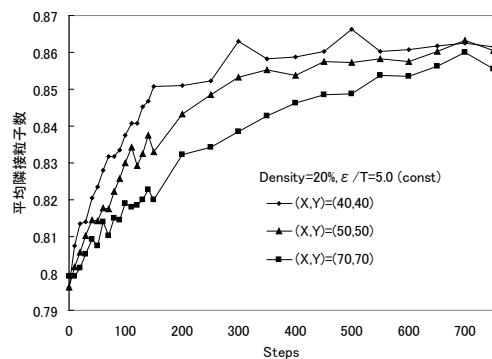


図 12 Steps を粒子数で割ったときの平均隣接粒子数との関係.

格子数の大きな系では十分なステップが必要ですが、1粒子あたりのステップ数が等しければ、 l に対して同じような結果を与えるようです。単純なことです。が、系の縮小、拡張に対してステップ数を対応させることで平衡への緩和ステップ数をスケールすることができる事が示唆されます vii.

次に、クラスター単位の移動のみを行ったシミュレート結果について報告します。(X,Y)=(20,20)の系において、粒子の数密度($40 \leq \text{Density} \leq 70$)および半径パラメーターを変化させ、ネットワーク形成の様子を探りました。本稿の理論においては、クラスター単位の移動を行う際には粒子の会合のみが観測されます。したがって、本シミュレートでは解離に伴うモンテカルロ法は適応されず、クラスター単位の移動は ε/T に依存しません。図 13,14,15 は粒子の数密度に対する、ネットワーク形成の状態の標本数をプロットしたものです。

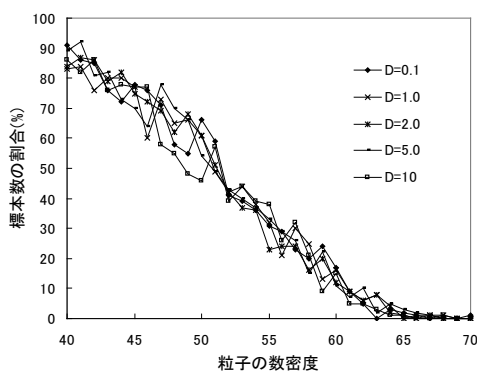


図 13 ネットワークが形成されない標本の割合.

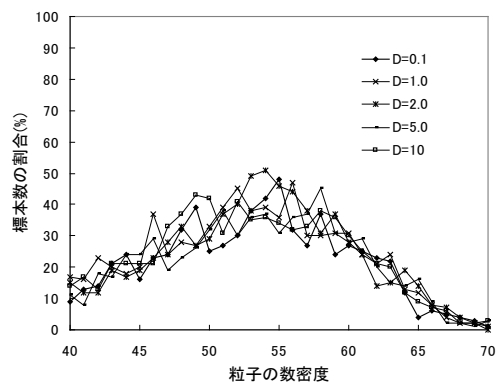


図 14 一次元ネットワークが形成された標本の割合.

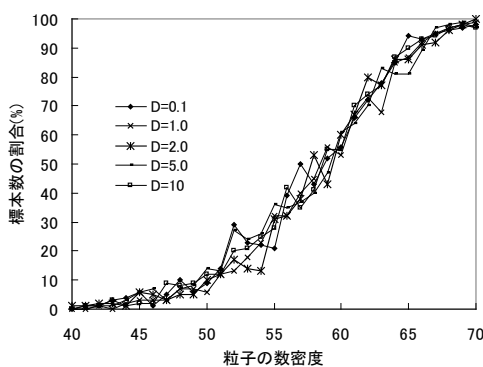
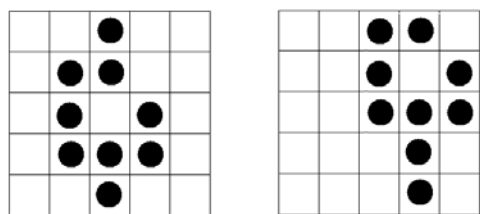


図 15 二次元ネットワークが形成された標本の割合.



a.移動前の一次元ネットワーク b.移動後の一次元ネットワーク

図 16 一次元ネットワークのクラスター単位による移動例。系が一つのクラスターで構成されているとき、a の粒子が水平右方向に+1,垂直上方向に+1 移動すると b の状態になります。しかしこの移動による二次元ネットワークは決して形成されません。

このシミュレーションに関して言及すべき点が2つあります。第一に、今回調べた範囲内ではネットワークの形成パターンとクラスターの半径パラメーターに相関がみられないということ。第二に、数密度 50%を中心とした領域に一次元ネットワークの形成が多く観測されるということです。これは、定常状態へ向かう過程において系

中の全粒子が会合し、なおかつ一次元ネットワークが形成されていた場合、解離反応を伴わないクラスター単位の移動では二次元ネットワークへの変化が見込めないからです(図 16).

また、冒頭に述べた研究[1]では臨界確率が 59%であるのに対し、本シミュレーションでは粒子の数密度 59%において、半径パラメーターに依存せず、おおよそ 9 割の標本が一次元もしくは二次元ネットワークを形成していることがわかりました. しかしながら、上記の理論では、59%以上で急にネットワーク形成の確率が高くなるのに対して、粒子の移動を伴う本シミュレーションでは、ネットワークの形成が粒子の数密度の変化に対してゆるやかに応答するようです. ただし、先の研究においてもシミュレートする系が小さい場合、緩やかな曲線で臨界確率に達することが報告されており、本シミュレーションにおいても系を拡張することでパーコレーションの臨界確率に変化が生じるかもしれません viii.

最後に、粒子およびクラスター単位での移動を組み合わせたシミュレーション結果を報告します. 一次元ネットワークが頻繁に観測されることは、先に述べたように、クラスター単位での移動を行うという、本シミュレーションのアルゴリズムに特有の現象が反映されたものです. 従って、実在の系に対しては不適切であると考えました. これに対して粒子単位およびクラスター単位の移動を組み合わせることによって改善を試みました. 図 17,18,19 は、それぞれ Steps100 において

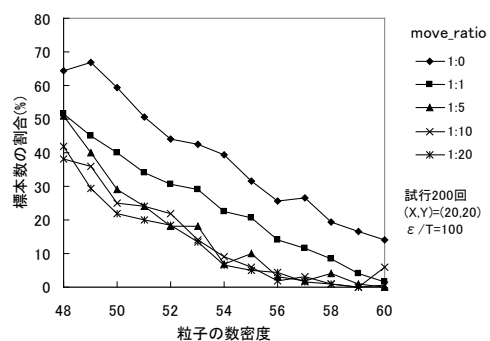


図 17 粒子単位の移動を加えた場合のネットワークが形成されない標本割合の変化.

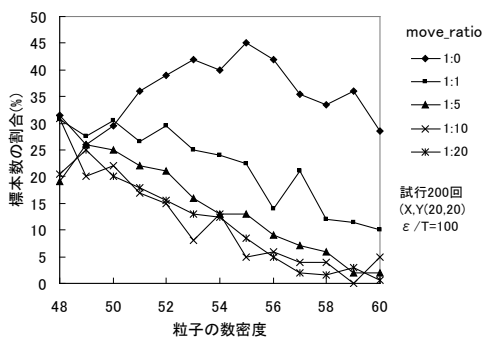


図 18 粒子単位の移動を加えた場合の一次元ネットワーク形成割合の変化.

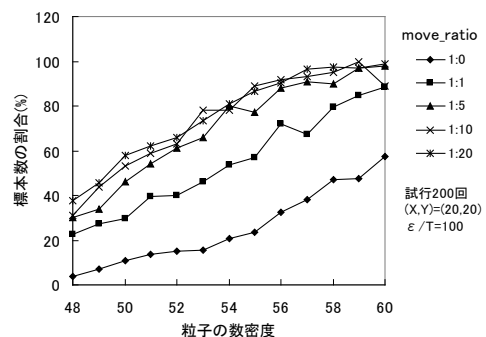


図 19 粒子単位の移動を加えた場合の二次元ネットワーク形成割合の変化.

move_ratio を 1:0, 1:1, 1:5, 1:10, 1:20 と変化させたときのネットワーク形成の様子を表したものです. ϵ/T が大きな系では、Steps=100 の上限で粒子単位の移動を行った際に緩和が十分でないことが示唆されています. しかし、以降のシミュレーションではクラスター単位の移動を基調とした二次元ネットワークの形成に対して、新たに定常状態を定めました. すなわち二次元ネットワークが形成されたステップ数が、変数

として設定された総ステップ数 **Steps** に対して十分小さいことを定常状態と判定する条件にしました¹.

本シミュレート結果で興味深いことは、粒子単位での移動を少し加えることが、クラスター単位のための移動を行った結果と比較して、ネットワークの形成結果に大きな変化をもたらすということです^{ix}. 図 17,18,19 において **move_ratio** が 0 のシミュレート結果が、先のクラスター単位の移動のみを行ったものに相当します. 粒子単位の移動が加わると、ネットワーク形成の観測されない事象は減少しています(図 17). この減少傾向は、**move_ratio** が 0 と 1 を比較した場合、粒子の数密度が 48%から 60%のほぼ全域で同程度に観測されます. 一方、**move_ratio** を 1 から 20 まで変化させた場合を比較すると、この減少傾向は 55%付近を中心に顕著にあらわれます. また、**move_ratio** が 0 であるクラスター単位のための移動と比較して、1:1 の割合で粒子単位の移動を加えた場合、一次元ネットワークの形成は大幅に減少しています(図 18). 特に注目すべき点は、**move_ratio** が 0 のときに一次元ネットワークが粒子の数密度 55%付近において多く観測されている

一方、粒子単位の移動を 1:1 の割合で加えるだけで一次元ネットワークの形成の割合が粒子の数密度の増加に対して、一様に減少するようになるということです. 一方、粒子単位の移動を加えると、二次元ネットワーク形成の割合はアグリゲーションをおこす系(図 17)とほぼ逆の傾向で増加しています. すなわち、**move_ratio** が 0 と 1 の場合を比較すると粒子の数密度 48 から 60%の範囲で一様に標本数は増加し、粒子単位の移動をさらに加えると、粒子の数密度が 55%付近を中心に増加しています(図 19). この 55%周辺はクラスター単位の移動と粒子単位の移動比、**move_ratio** に敏感に応答する領域です.

どの定常状態においても、粒子単位の移動回数が加わるほど標本数は変化するようですが、この変化の傾向がある移動比以降において、粒子単位の移動を増加させた場合にほとんどがみられないことがわかります. そこで、クラスター単位のための移動と比較した場合に、移動比 **move_ratio** に対する応答が興味深い粒子数 55%の系において、

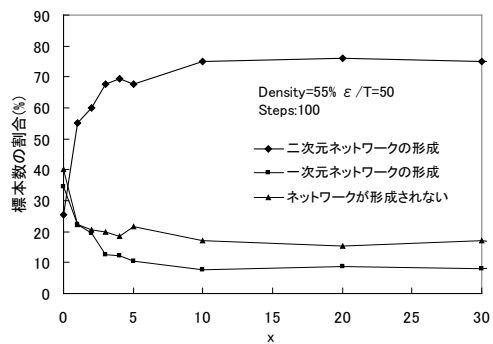


図 20 粒子の数密度 55%における x と定常状態の変化の相関.ここで x はクラスター単位の移動と粒子単位の移動の比 **move_ratio**(1: x)の x を意味する.

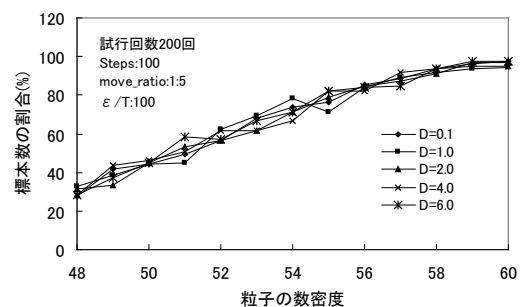


図 21 粒子単位およびクラスター単位の移動を行った場合の半径パラメーターに対する二次元ネットワーク形成割合の変化.

¹各々の試行で二次元ネットワークが形成されたステップ数が正規分布に従うと仮定します.その平均 $\overline{steps}$ と標準偏差 $\sigma(steps)$ が、指定した総ステップ数 **steps** に対して、 $\overline{steps} + 2\sigma < steps$ もしくは $\overline{steps} + 3\sigma < steps$ であれば、総ステップ数内に、それぞれ 95.4%以上、99.7%以上の標本が観測されると考えます.

ネットワーク形成の割合と粒子単位の移動割合の相関を探りました(図 20).

図 20 から, 一次元ネットワークの標本の割合は粒子単位の移動を加えると減少しますが, 粒子単位の移動がクラスター単位の移動に対して 5 倍以上の場合にほとんど一定値に漸近する傾向にあることがわかります. 以降のシミュレーションはこの結果を考慮し, 粒子単位の移動をクラスター単位の移動に対して 5 倍以上とした条件下で行いました.

次に, クラスター単位の移動においては相関のみられなかった, 粒子の半径パラメーターを変化させた系についてネットワークの形成の様子をシミュレートしました. 図 21 は, 粒子の数密度と半径パラメーターを変化させたときの, 二次元ネットワークが形成される割合を示したものです. このシミュレートに関しても半径パラメーターとネットワーク形成の相関はみられません.

さらに, Steps, ϵ/T および, 粒子の数密度を変化させ, 二次元ネットワークの形成と半径パラメーターの関係を探りました. 次図 22 は D を 0.5, 2.0, 3.0, 5.0, 10, 20, 100 と変化させたときの二次元ネットワーク形成が形成される標本の割合です. 移動確率は, D 値およびクラスターの大きさによって, 図 5 に示したように与えられます. 粒子の数密度, ϵ/T および Steps をさまざまに変えてシミュレートしました. しかしながら, 半径パラメーターがネットワーク形成に対して影響する結果は, これらの変数に依らず, 得られませんでした(図 22)^x.

一方, 温度(ϵ/T)に対してもネットワーク形成との相関についても同様に探りました(図 23). 粒子間の相互作用が強くなるほどネットワークの形成が行われるようです. この傾向は粒子の数密度が 50% 付近において顕著にみられます. これは, クラスターのみの移動において一次元ネットワークの形成が頻繁に観測された

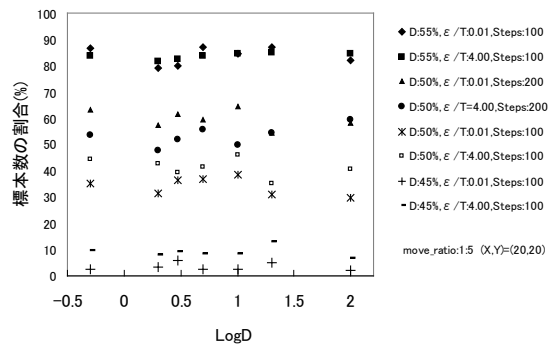


図 22 いくつかの粒子の数密度, ϵ/T , および Steps が異なる条件下における, 半径パラメーター D と二次元ネットワーク形成の割合の相関.

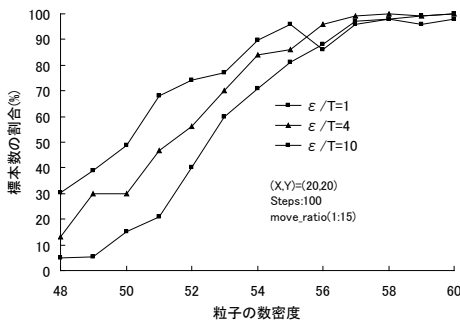


図 23 $\epsilon/T=1, 4, 10$ と変化させたときの二次元ネットワークが形成される割合と粒子の数密度の関係.

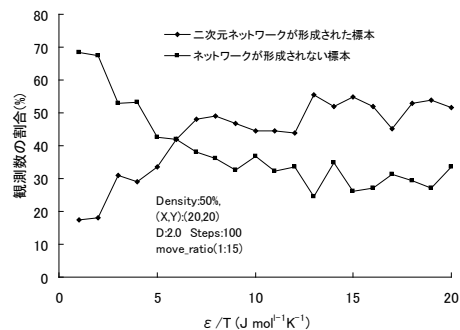


図 24 粒子の数密度 50% における ϵ/T とネットワークの様子の相関.

領域と対応しており、一次元ネットワークから二次元ネットワークへの転移が、 ε/T に応じて敏感に応答していることを示唆します。図 24 はこの傾向が大きい、粒子の数密度 50%におけるネットワーク形成の様子を ε/T に対してプロットしたものです。本シミュレーションの範囲においては、 ε/T 値に依存して二次元ネットワークの形成が 17.5%から 45.1%まで変化しました。温度が高い系ではアグリゲーションをおこした粒子や一次元ネットワークを形成している粒子の解離が頻繁に行われる一方、粒子間の相互作用が強ければ粒子の拡散が抑制され、二次元ネットワークの構築につながると考えられます。

4. 結論と問題点

粒子のネットワークの形が粒子の数密度、会合エネルギー、温度などの要因によって変化するという本シミュレーションによって再現することができました。 ε/T の値が大きければ、モンテカルロ法による粒子会合がクラスター単位の移動を補助し、ネットワークが形成されやすくなります。物理ゲルの形成に対しても、アグリゲーションを起こした粒子の解離のために、ある程度の温度が必要なのではないかと考えられます。一方で、溶媒の粘度変化を想定した半径パラメーター D によるネットワーク形成の変化に関しては、本シミュレーションの範囲において観測されませんでした。(2)式が本来は三次元の流体に対するものなので、格子模型を三次元に拡張することや粘度 η の温度依存性についても考慮に入れる必要があります。これは粒子単位の移動にのみ作用する ε/T が、粘度の温度依存性を考えることによってクラスター単位での移動に関しても制限することになるからです。これにより、異なる結果が得られるものと考えます。また、粒子を格子模型に確率 p で配置したときのネットワーク形成に対しては明白な臨界確率 p_c が存在します。[1]しかし、本シミュレーションではネットワーク形成の様子が粒子の数密度に対してゆるやかに変化するという結果になりました。これに対しては、シミュレートしたシステムが十分に大きかったのかという点に疑問が残ります。今後は、格子を疎視化した場合にネットワーク構造の基本的な性質がどのように変化するか、いろいろなサイズのシステムを用いて調べる必要があります。また、そのためにも本シミュレーションによって形成されたネットワークのフラクタル構造を解析する研究も必要であると考えられます。

謝辞

当研究を行うにあたり理論およびシミュレートのためのモデルや報告書の作成において丁寧にご指導、アドバイスを下さった秋山良先生に深謝いたします。

参考文献

- [1]酒井 寿徳,パーコレーションの繰り込み群シミュレーション,青山学院大学理工学部物理学科卒業研究,2001 :ただし、この研究ではパーコレーションの定義が異なります。最大のクラスターが格子の水平もしくは垂直方向の両端まで伸びていればパーコレーションしたと考えています。すなわち、本研究の様に格子を二次元的に接続したネットワークが形成する必要はありません。
- [2]小田垣孝,パーコレーションの科学,裳華房,1993

[3]David Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics, Oxford University Press Inc, USA, 1987

[4]米沢 富美子, ブラウン運動, 共立出版, 1986

以下は秋山による註である。

i この報告は、授業のレポートとして書かれた。授業のレポート関連部分に関しては秋山と小熊の解説を参照。なお秋山は、わかり難い部分を指摘し、議論したが基本的に小熊自身による報告である。基本的に秋山のコメントは註に書くようにした。

ii ここでのシミュレーションに疑問が無いわけではない。例えば、ボルツマン分布を再現するモンテカルロ・シミュレーションで、平衡系の構造はともかくとして、その保障も無いゲルの何を適切に再現できるかは自明ではあるまい。しかし Metropolis 法と (1) 式を用いたトライアルは行われ、発表されており、挑戦する価値があると思う。ここで詳しくは述べないが、例えば M. Nosaka, M. Takasu, K. Katoh, Characterization of gels by Monte Carlo method using a model of radical polymerizaion with cross linkers, J. Chem. Phys. 115 (2001) 11333 などを参照。

iii いわゆる周期境界条件。サイズが有限である効果を軽減できると考えられている。

iv いわゆる基本セルについてシミュレーションを行うということ。

v ネットワークを作らないアグリゲーションが出来る場合沈殿物が出来てもゲル状にはならないと考えて区別したと思われる。

vi この図9、図10に関する計算は、今回のシミュレーションが適切に行われているかどうかについての検証。こうした検証の重要性に気がついている事は重要であろう。また、評価量について自ら作成し、考察しながら前進していった姿勢はすばらしいと思う。

vii 後で考えてみれば当たり前の事であっただろうが、基本セルサイズとステップ数の間にある関係を発見している事は意義深い。今回は時間切れであったが、今後の課題のひとつである「より巨大な系に対する計算」を行う場合に役に立ったであろう。

viii この推測は正しいように思われる。十分に時間があれば試してみると面白かったであろう。

ix この移動方法依存性は、結果に関する著者による一つめの発見である。

x 著者による二つめの発見。一見ネガティブな結論だが、現実系を考える場合に意義がある結論だと思われる。