三角格子モデルの統計的性質と折り畳み経路

宮永 貴裕

北里大学 理学部 物理学科 分子物理学講座 4 年

平成 10 年 3 月 30 日

Abstract

折り畳み三角格子モデルの統計的な性質を調べた。相空間を転送行列的なアイデアにより構成し、エントロピー、端点間距離を求め、慣性半径の指数を求めた。次に、折り畳み経路を数値的に構成した。

1　三角格子格子モデルとは

三角格子モデルとは、格子線にそって折り曲げていくとき、

$$M_n \sim An^{\alpha}. \tag{1}$$

の式で状態の数を得ることが出来る格子モデルとして本論文では扱う。式 (1) で、Aをある定数、nを三角格子に比例する数、αをエントロピーの指数、M_nをその時の状態の数とする。本論文では、面心立方格子中の三角格子の統計的な性質を数値的な手法により解析した。まず、セクション２では三角格子の折り畳みの場合の数の求めかた、また端点間距離の計算の考え方、三角格子全体の大きさと端点間距離との関係についてを記す。セクション３では同じく三角格子での折り畳みの回数と端点間距離の変化についてを記す。最後に、我々の開発したプログラムリストを載せて、本論文を終える。

2　三角格子：数値計算の方法

この節では、まず三角格子より出来た、六角形の折り畳みの場合の数を考えることから始める。六角形を畳んでいき、折り畳まれた状態での各三角格子の向きを、開いた状態で調べていく。この時、折り畳まれた状態で表が上にあるものに (＋)、裏が上にあるものを (−) としてスピンの向きの様にあたえ、六角形の中心の周りのスピンの和を取る。

＜ここに六角形の図を入れたい。＞

そうすると、折り畳むことの出来る六角形の中心の和は６,０,-６のいずれかになっていることがわかる。つまり六角形の場合では、計 11 個の折り畳まれる場合の数が存在することがわかる。
次に１辺に１個ないし２個の三角形を含む平行四辺形を見てみる。

＜ここに平行四辺形の図を入れたい。＞

１辺に１個の三角形を持つ四辺形の方は、片方の三角形を固定すれば場合の数は２通りであることがわかる。また、１辺に２個の三角形を持つ四辺形は、先ほど考えた六角形の両端にさらに三角格子をそれぞれ１個づつ加えたと考えると、２×１１×２＝４４ 通りであることがわかる。
次に、１辺の三角形の数がそれ以上の場合を考える。

＜平行四辺形の図＞

こういった場合１つの四辺形の中に、２つ以上の六角形が存在していることになる。このため求める状態の数は、それぞれの六角形の折り畳む事の出来る条件の論理積となる。つまり１辺に三角形が３個ある場合、六角形の三角格子のスピンの向きの和を、それぞれ $Sum1, Sum2, Sum3, Sum4$

とし、またそれぞれの和を６で割った余りをＡ1,Ａ2,Ａ3,Ａ4とすると、

$$(\mathrm{A}\ 1=0)\cap(\mathrm{A}\ 2=0)\cap(\mathrm{A}\ 3=0)\cap(\mathrm{A}\ 4=0) \tag{2}$$

の条件を満たした状態を数え上げていくことにになる。

具体的にすると、１番左のの底辺部分の三角格子の座標を(０,０)とし、それと斜辺を共有する三角格子を(０,１)と定義していき、１辺にｎ個の三角形を持つ四辺形の場合、(０,２$n-$１)まで定義して行く。１つ上の列に行き同じように定義していき、さらに１つ上の列を定義していくと($n-$１,２$n-$１)まで三角格子に座標を決めることが出来る。ここで、横１列の三角格子のスピンの向きを、２進数を使ったパラメータとしてあらわしていく。

＜三角格子と二進数の関係＞

ここで、三角格子の向きをあらわすスピンの値での-1を、２進数では０として扱う。

最下列(０列目)とそのすぐ上の列(１列目)から始まる列に注目してみる。最下列のパラメータが０の時に２列間の六角形がすべて、折り曲げることが出来る条件を満たしている１列目のパラメータを求める。さらにそのパラメータから、さらに上の列のパラメータを求めていくことで、状態の数を得ることが出来る。ここで効率化を考え、０列目と１列目の六角形の条件を満たしたパラメータ同士のつながりを覚えておき、それを１列目と２列目パラメータ同士のつながりに利用することにより、計算機の作業時間の大幅な削減が出来る。　さらに各状態の端点間距離から、各四辺形の平均の端点間距離を調べる。端点間距離を求めるには、(０,０)の三角格子の左下の頂点を原点とし、全体の四辺形の反対側との頂点との距離を求める事になる。

そこで、(０,０)から(０,２$n-$１)までの１番下の底辺部分を通り、さらにそこから(０,２$n-$１)から($n-$１,２$n-$１)までの右端の縦の列を、上に登って行く形で次々と出てくる三角格子の頂点を出して行く。ここで前の三角格子との表裏のスピンの向きが同じなら、三角格子の各頂点からベクトル成分の差を使い、次の三角格子の各頂点を計算させ、スピンの向きが異なっていたら、次の三角格子として現在の三角格子の頂点を入れ替えて与えていく。そして最終的に出てきた座標から距離を計算していく事にする。

＜端点間距離の求めかたの図＞

例えば、１辺に三角形が３個ある場合は、先ほどの条件(２)を満たした物に付いて端点間距離を求めていき、各端点間距離の総和と満たした物の数より端点間の平均の距離を得る事が出来る。

1辺に三角形が１～５個の場合の「三角格子と状態の数」、「三角格子と平均端点間距離」として、グラフとして載せた。

＜グラフを載せたい。＞

3　折り畳み三角格子モデル

この節では三角格子をランダムに折り畳んでいき、その過程における端点間距離について記す。

ここでは、三角格子の格子線に番号をつけ、選んだ番号の格子線を折っていき、折るたびに端点間の距離を求めていくことになる。

＜三角格子の格子線に番号が付けられている図＞

ランダムの数を得るために、ある数字を“種”として与えると、非常に長い周期で、ランダムに近い数値を返す関数を利用した。ここで、$tane$を“種”、Ranを乱数$(0 \leq Ran < d)$として、その関数の考え方を記す。

$$(tane \times Multi) \div Modulus \tag{3}$$

(３)の式によって出た余りをdで割り、その余りがRanとなる。

ここでは、Park and Millerによる「最低基準」生成法(“Minimal Stanbard”generator)に基づき、$multi = 16807 (= 7^5)$, $modulus = 217483647 (= 2^{31} - 1)$, 最初に与えた$tane = 4711$とした。この$Ran$によって、得られた値を四辺形の折り畳む三角格子の格子線として次々と折り畳んでいく。本論文では１辺に１００個の三角形を持つ四辺形に対し、乱数による折り畳みを１００回行い、その平均を取り「三角格子の折り畳みによる端点間距離の変化」に記す。

[?]。

参考文献

[1] Y.kantor and Jaric.

[2] NUMERICAL RECIPES in C.

[3] PROTEINS Structure,Function,and Genetics.

[4] 高分子化膜のスピン模型（守 真太郎）.