

フェーズフィールドシミュレーション

岩石は鉱物は原子からなります。岩石や鉱物のつくる「形」は、その原子の相互作用により作られます。では、すべての原子の速度・位置を(量子)力学的にシミュレーションすれば鉱物や岩石の「形」を再現できるでしょうか？少し考えれば、不可能であることがわかります。たった数 μm の範囲としても原子の個数はあまりにも膨大であり、原子の位置や運動量をPC上で記録することも演算することもできません。

物理学ではそのような膨大な原子の集まった系の性質を、原子がつくる(量子)力学的な相互作用の統計的な性質から推量します。統計的な系の性質は、「自由エネルギー汎関数」という関数をきめることにより定義できます。

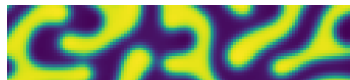
原子スケールの
相互作用

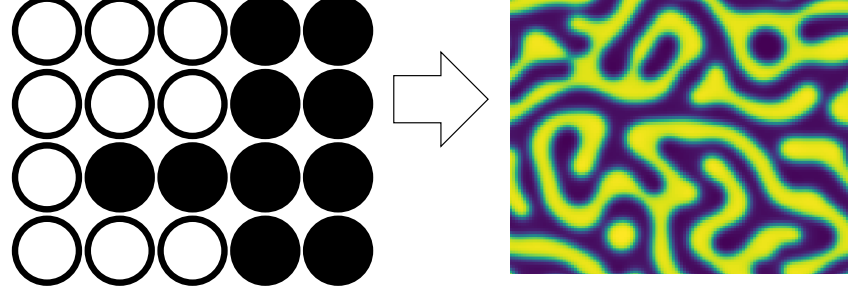
$$-J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$



岩石・鉱物スケールの
自由エネルギー汎関数

$$\int_{\Omega} \phi^2 (1 - \phi)^2 + \frac{1}{2} \epsilon^2 |\nabla \phi|^2 d\mathbf{r}$$





フェーズフィールドシミュレーションでは、「物質は自由エネルギー汎関数を最小化するようにうごく」というたった一つの原則で、実に多様な岩石・鉱物の「形」を表現できます。

