研究会報告

DLAおよびBJ クラスターのf-αスペクトラム

東北大・通研　　早 川 美 徳

成長するランダムパターンの研究が，最近精力的に行なわれており，拡散に支配された凝集(Diffusion-Limited Aggregation; DLA)とそれに関連した現象は，中でも関心の持たれる分野の一つである。DLAは拡散律速型の界面の不安定をモデル化したもので，表面張力のように表面をならす効果は一切考慮されていないために，得られるパターンは非常に複雑な樹枝状構造を呈する。計算機シミュレーション等から，クラスターが自己相似的であることが知られており，そのフラクタル次元d_fはDLAパターンをよく特徴づけている。格子の異方性等が問題にならない場合，dを空間の次元とすると $d_f=(d^2+1)/(d+1)$ が良く成り立ち，d_fは実験的に得られたパターンがDLAで理解できるかどうかの重要な手がかりである。しかしパターンのフラクタル性自体はDLAに固有のものではないし，DLAのような成長モデルが一つの指数d_fによって完全に記述できるとは考えられない。例えば後述するようにBotet-Jullienモデル[1)]と呼ばれる平衡モデルのシミュレーションで得られるクラスターと，DLAを拡張したあるモデルは同じフラクタル次元を持つが，パターン形成のメカニズムは全く異なる。(図1参照)ここではDLAの成長界面の統計的性質を調べ，非平衡系でのパターン形成をどのように特徴づけるかを考える。

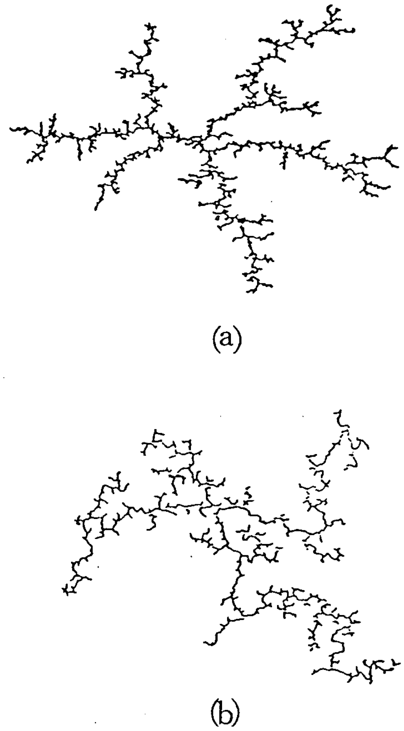


図1　(a)　2次元ηモデルで$\eta=2$とした場合に得られるクラスター。(b) Botet-Jullienモデルによるクラスター。

DLAの計算アルゴリズムは，ブラウン運動粒子を用いたモンテカルロ法によっている。クラスターの十分遠方から酔歩して来た粒子がクラスターの最近接点に到来した場合に粒子はそこで酔歩を止めクラスターの一部となる。このような不可逆的過程を繰り返すことによって複雑な樹枝状クラスターが得られる。このとき，クラスター表面に粒子の到来する確率は次のように書ける。ラプラス方程式$\nabla^2\phi=0$を満足するような場ϕを考え，クラスター表面でϕは一定，他方外部の境界は十分遠方にあってクラスターとの間にポテンシャル差が与えられているとしよう。その時DLAクラスターの表面のある点Aに粒子が付着する確率，すなわちクラスターの成長確率P_g(A)はϕを使って

$P_g(A) \sim |\nabla\phi(A)|$と表わすことができる。これは界面の成長速度がその場所への流れに比例していることに他ならない。あるいは，これをさらに一般化して　$P_g(A) \sim |\nabla\phi(A)|^{\eta}$で成長するような規制も考えられ，誘電破壊のモデルとして提案されている（NPWモデル。ηモデル）。一回の成長ステップに複数個のランダムウォーカーを用いることによって，DLAと同様にηモデルのモンテカルロ・シミュレーションを行なうことができる。

DLAにおいて枝どおしは反発的であり，開いた構造のクラスターを形成するため，クラスターの中心近くでも成長確率は完全に零とはならない。その意味で成長確率はクラスターの全表面に分布しているが，主に成長に寄与するのはクラスターの外側の部分であり，とりわけ主な枝の先端部に成長確率が集中している。図2は3万個の粒子から成るDLAクラスターのうち最後に付着した3000個のみを描いたものであるが，クラスターの外側が選択的に成長しているのがわかる。このように非一様な確率分布を定量化する試みとして，Halseyらが力学系の議論に導入した一般次元D_qおよび$f-\alpha$スペクトラムを用いる方法がある[2)]。確率が空間的に分布している場合，空間をサイズεの箱に分割し，i番目の箱の内部に確率$P_i(\varepsilon)$があるとする。このとき一般化次元D_qは

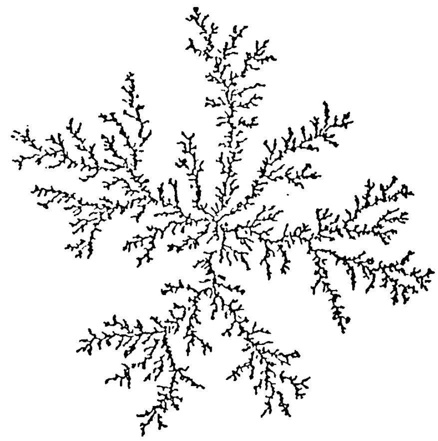
$$D_q = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{q-1} \frac{\log \sum_i P_i^{\,q}(\varepsilon)}{\log \varepsilon}$$

で定義される。D_0は分布のハウスドルフ次元を表わすが，DLAのようにクラスターの全表面に確率が分布する場合のD_0はクラスター表面のハウスドルフ次元に一致すべきである。DLAにおけるクラスター表面の次元とは，クラスター自身のフラクタル次元に他ならない。D_1は情報次元と呼ばれる量で

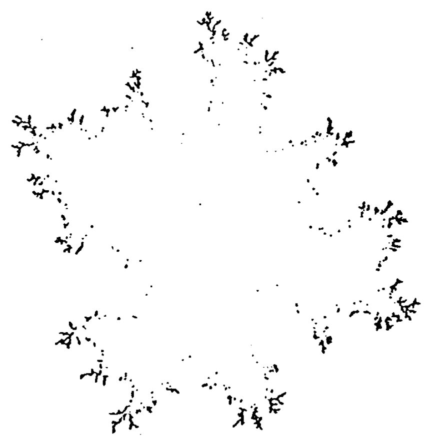
$$D_1 = \lim_{q \to 1} D_q = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\sum_i P_i(\varepsilon) \log P_i(\varepsilon)}{\log \varepsilon}$$

で定議される。成長パターンの場合，物理的にD_1はactive surfaceの次元と考えられ，2次元DLAで$D_1 = 1$が数学的に証明されており[3)] 3次元空間では$D_1 = 2$であろうとの予想がある[4)]。

D_qを正しく計算するためには確率分布をある程度正確に求めなければならない。その点でモンテカルロ法は不利



(a)



(b)

図2　(a)　3万個の粒子から成るDLAクラスター。(b) (a)のうち最後に付着した3000粒子のみをプロットしたもの。

であり，とくに成長確率の非常に小さい領域で正しい評価がむずかしい。そこでoff-latticeモンテカルロシミュレーションで得た2次元DLAおよびηモデルのパターンを境界条件にしてラプラス方程式を解き，成長確率を求めた。数値計算で求めたD_qを図3に示す。D_0 はクラスターのフラクタル次元にほぼ等しいことが図からわかる。D_1はDLA($\eta=1$)モデルの場合$D_1(\eta=1)=1.04\pm0.02$でほぼ予想された値である。さらに$D_1(\eta=2)=0.77\pm0.01$, $D_1(\eta=3)=0.58\pm0.02$が数値的に得られた。これらはηモデルにおいてηが大きくなる程成長部分(active surface)が局在化することに相当している。qが大きい値の場合D_qは確率の大きい部分，すなわちクラスターの先端部分の分布を反映しており，他方qが負の領域でD_qはクラスターの入り江の部分(スクリーンされた部分)の確率分布によっている。DLAやηモデルではD_qが確率分布の非一様性を反映して一定ではないが，これと対比する意味で次にBotet-Jullienモデルと呼ばれる平衡モデルにふれる。

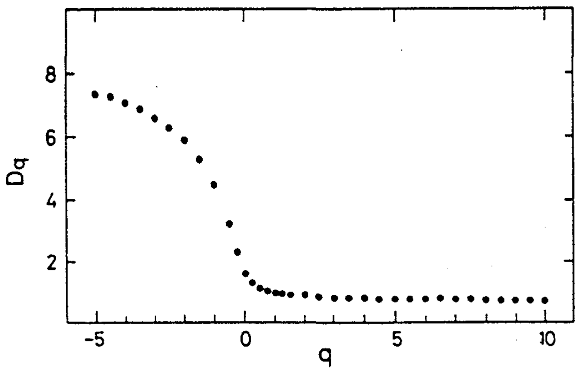


図3　DLAの付着確率について計算した一般化次元D_q。

Botet とJullienはDLAの成長プロセスに粒子が再び離脱するプロセスを合わせ，全体の粒子数と単連結性を保ちながらクラスターが粒子の再配置を行なうモデルを考えた(BJモデル)。表面からの離脱と再付着を繰り返すとクラスターは初期の形には依存せず定常的フラクタル構造に落ちつくことがシミュレーションによって知られており，例えば2次元BJクラスターのフラクタル次元は1.5であることが理論[5]やシミュレーションから得られている。これはηモデルで空間が2次元，$\eta=2$とした場合に知られているフラクタル次元と等しい。ところが図1に示したように，空間の埋まり方は両者とも似ているがクラスターの形状は異なっている。BJモデルでパターンが定常になった後，粒子が再付着した場所を記憶し得られた点の集合からD_qを計算することができる。するとD_qの値はqによらず一定で$D_q\simeq1.5$が得られた。このことはフラクタル次元が1.5であるクラスター表面に解率が一様に分布していることを表わしており，平衡モデルとしてのBJモデルを特徴づける事実である。

さて，ある点xのまわりの大きさεの箱の中に確率が$P_x(\varepsilon)$だけ存在し$P_x(\varepsilon)\sim\varepsilon^{\alpha}$と書けるとき$\alpha$を点$x$でのSingularityと呼ぶ。DLAのクラスター表面上の点のまわりの確率分布を調べると，各点が異なるαを持っており，αが分布していることが確かめられる。このような複雑な分布を特徴付けるためにSingularity αを持つ点がフラクタル次元fで分布している

と仮定する。そうした時にfとαは先に述べたD_qのルジャンドル変換によって得られることが知られている。

$$\alpha(q)=\frac{\partial}{\partial q}(q-1)D(q)$$

$$f(q)=\alpha(q)q-(q-1)D(q)$$

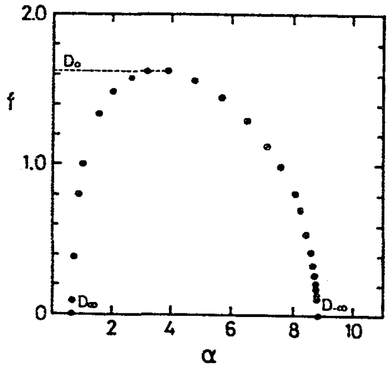


図4　図3のデータから求めたDLAのf-αスペクトラム。

図3に対応するf-αを図4に示す。同図から異なるαを持つ点が分布していることが判る。BJモデルのようにD_qが一定の場合$f=\alpha=D_q$であるし，パターンの周囲が単純な面（線分）で構成されている場合にラプラス場の勾配で確率を定義してもf-αは点になる。f-αスペクトルが連続になるのは，フラクタル的なDLAクラスターの構造と，成長確率の与えられ方の双方に依っている。

$\alpha(\infty)$（$=D_\infty$）はメインブランチの先端部のSingularityに相当している。DLAの外形が多角形で近似できるとし，クラスターの大きさはその頂点のSingularityによって規定されるという仮定（large wedge model）の下に，先端部のSingularity $\alpha_{\mathrm{TIP}}=d_{\mathrm{f}}-1$ が導かれている[6]。ここでd_{f}はDLAクラスターのフラクタル次元である。$\alpha(\infty)$はα_{TIP}と見なせるので数値計算で得た値（$\alpha(\infty)=0.64\sim0.70$）は上式でよく説明できる。また成長の「突端部分」は非常に局在しているので$f(\infty)=0$も妥当な結果であろう。逆に$\alpha(-\infty)$はDLAパターンの深い入り江におけるスクリーニングを反映していると思われ，いくつかのDLAクラスターについて$\alpha(-\infty)\sim9$程度の値が得られた。しかしこの$\alpha(-\infty)$を裏づけるような理論はまだない。

ここでは，DLAモデルが平衡BJモデル等とは異なり，Singularityが分布するような複雑な確率分布を持つことを数値的に示した。情報次元はactive surfaceの次元という意味を持ち，DLAにおいては理論があるものの，一般のD_qやf-αに対してここに示した計算結果を説明するような議論はまだない。またαの分布密度が単純なスケーリングで説明できないという報告もある[7]。DLAの成長確率分布について不明なことが多いが，DLAを特徴づけるのにフラクタル次元のみでは不十分であって，将来DLAの完全な理論を展開する際にD_qやf-αは重要な材料になると思われる。

参考文献

1)　R. Botet and R. Jullien, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 1943.

2) T. C. Halsey et al., Phys. Rev. A**33** (1986) 1141.
3) N. G. Makorov, Proc. London Math. Soc. **51** (1985) 369.
4) P. Grassberger (unpublished).
5) K. Honda et al. (to be published).
6) T. C. Halsey et al., Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 854.
7) P. Meakin et al., Phys. Rev. A**34** (1986) 3325.

ランダム媒質中におけるクラックの成長モデルとサイズ分布

東北大・工　原　啓明
一橋大・経　岡山誠司

図形に見られる自己相似性は直接パターンとして観察される。しかし地殻の亀裂，材質（金属，コンクリート等）に発生したクラックは，そのパターンを直接見ることは出来ず，非破壊検査によって各要素（亀裂，クラック）のサイズ分布を知るだけである。

実験によれば，サイズ分布は，状況（環境）によって，フラクタル次元に相当するlog-logプロットの直線上（べき分布）には乗らない[1),2)]。同様な事実はランダムカッティングのサイズ分布[3)]や，情報科学[4)]における（相対）度数－順位を表わすいろいろのグラにも見られる。

これはある意味では，フラクタルの概念を拡張する必要性があることを示唆している。

ここではlog-log プロットの直線からのずれを示す，ランダム媒質中におけるクラックのサイズ分布を，１つのモデルプロセスによって論じる。

ランダム媒質の構成要素として，大きさや応力（σ）に対する応答の仕方で類別されたセグメント（Seg.）を考える。Seg.の種類をE（$= A, B, \cdots$）で表わす。各Seg. は，t（時間）－依存性のある特性長$L(E, t)$によって$G(L(E,t))$個の等質なサブセグメント（S. Seg）に分割されるものとする。ただし，$t < 0$では各Seg.の個数は，共通にG_0個とする（図１）。$L(E, t)$のt－依存性を求めるため，σのもとでS. Seg. に検出不可能な，微小なマイクロクラック（m. c.）の成長する

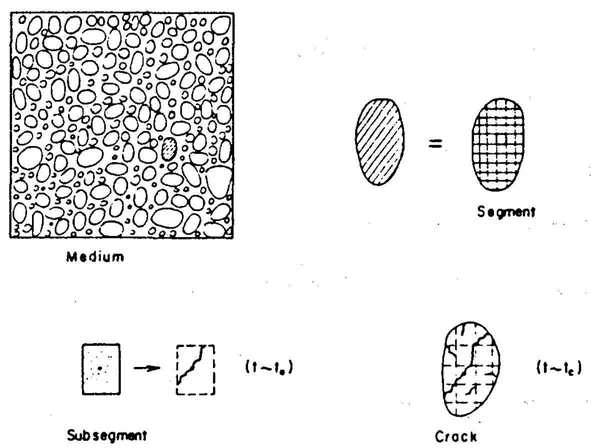


図　1