

研究会報告

することは有用であろう。又、ルーロー (rouleaux) と呼ばれる哺乳動物の赤血球の会合体は、その離合集散によって血流の粘性を調節している。粘性率そのものが生体の維持という面で絶対的意味を持つ例である。パターンの幾何学的特徴の認識に基づいて、それを物性に応用する機が熟していると言える。

参考文献

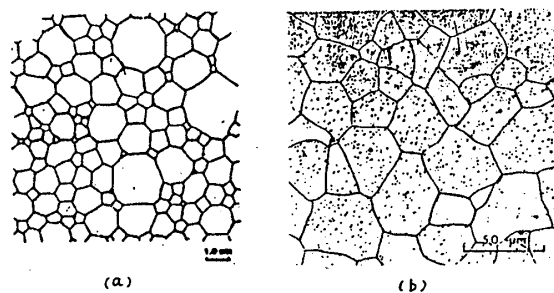
- 1) R. D. Lundberg and R. R. Phillips, J. Polym. Sci.: Polym. Phys. Ed., **20** (1982) 1143.
- 2) F. Tanaka and H. Ushiki, J. Chem. Phys. **84** (1986) 5925.
- 3) P. J. フローリ 『高分子化学』 岡, 金丸訳 (丸善)。

24. 二次元ドメイン成長のバーテックス・ダイナミックス

九州共立大, 九大・理^A, 福工大^B 長井達三, 川崎恭治^A, 中村勝弘^B

§ 1. はじめに

自然界には、いろいろなドメイン構造が見られる。泡のあつまり¹⁾、結晶粒のあつまり²⁾ (第1図), あるいは、急冷された磁性体において成長するドメイン系…等である。そこでは、多種多様な形のドメイン (細胞) が空間を埋め尽している。一つ一つのドメインは、それぞれ一つの秩序状態 (相) にある。ドメインとドメインの境が



第1図 ドメイン構造 (a)2次元の石けん泡¹⁾
(b)鉄の多結晶の断面²⁾

これらの系を特徴付ける“もの”である。この境界が形作る無秩序な構造の中にも、一定の統計力学的法則が存在することが、最近、示された³⁾

上に挙げた例は、非平衡状態にあることが多い。これらの系は、それぞれに特有な時間のスケールで変化し、平衡状態に向かう。平均的に見て、大きいドメインは膨張し、小さいドメインは収縮する。最終的には、すべてのドメインは消滅して、系は一つの相に落ち着く。このような発展を統計力学的見地から記述し、法則を見出すことが、この論文の目的である。

そのために, われわれは, これらのドメイン系の最も基本的な特徴を取り出した「散逸バーテックス・モデル」を提出し, それに対して計算機シミュレーションを行なった。ドメイン成長に対するシミュレーションは, 既にいくつか行なわれたが, それらはほとんど微視的モデルを採用し, モンテカルロ法を使用した²⁾。これらに対して, われわれのものは, ドメインのレベルでこの系の特徴を捕えたモデルであり, シミュレーションは決定論的である。ドメイン・サイズの成長法則とドメインの形の分布法則を与える。

§ 2. 散逸バーテックス・モデル

二次元ドメイン系を構成する最も基本的な要素として, バーテックス(ドメイン境界線の交点)に注目する。これらのバーテックスは, お互いに直線のドメイン境界でつながり, 網目構造をつくる。バーテックス間には, ドメイン境界を通じて相互作用が働くものと考えれば, この系は一種の相互作用をする多粒子系と見ることができる。この粒子は質量を持たず, 全粒子数は保存されない。このような考えに基づいて, われわれは次のような最も単純なモデルを提出する。

- (1) ドメイン境界は直線である。
- (2) 各バーテックスからは3本のドメイン境界線が出る。
- (3) ドメインは P 種に縮退している。従って, ドメインの状態を $1 \sim P$ の整数で表わす。
- (4) 位置 \mathbf{r}_i にある i 番目のバーテックスの運動は次式で与えられる。

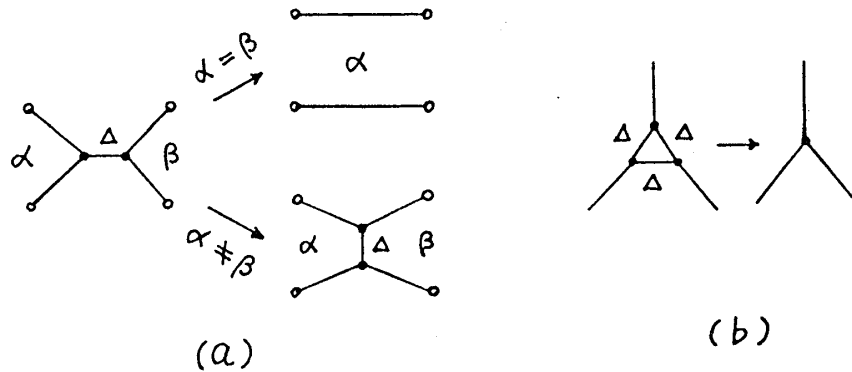
$$\begin{aligned} \eta \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= -\nabla_i V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad i = 1, \dots, N \\ &= -\sigma \sum_j' \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \end{aligned} \quad (2.1)$$

ここで, t は時間, η は摩擦の大きさを示す正定数, $V = \sigma \sum_{\langle ij \rangle} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, (σ は正定数), はドメイン境界の全長に比例し, 系の全エネルギーである。これは表面張力に起源をもつ。

(2.1) の第二式の和は, バーテックス i とドメイン境界でつながった三つのバーテックスについてとる。一方, V の中の和は, ドメイン境界でつながったバーテックス対 (i, j) のすべてについてとる。

- (5) 2個又は3個のバーテックスが, ある短い距離 l (以下, これをバーテックス・サイズと呼ぶ) 以内に近付くと, 第2図に示す三つの素過程が起こる。第2図(a)は, ドメイン状態 α と β が等しいならば, 二つのドメインの合体を, 違えば単につなぎ替えを行なう

ことを表わしている。第2図(b)は、三角形をつくる三つのバーテックスがすべて1以内に近付けば、一つのバーテックスになることを表わしている。



第2図 素過程 (a)組み替え (α, β はドメイン状態) (b)3バーテックスの凝集

第1図の石けん泡及び結晶粒の系では、上の仮定(1), (2)はよい近似になっていることがわかる。これらの場合は、ドメインとドメインの合体(仮定(5)(a)の $\alpha = \beta$ の場合)が起こらないので、 $P = \infty$ である。運動方程式(2.1)は、左辺の摩擦力と右辺のポテンシャル力が釣り合うという式である。これにより、バーテックスはポテンシャルの低い方へ、つまりドメイン境界の全長を短くする方向へ動く。われわれの系は、素過程(5)により、ドメインの平均サイズを変え、トポロジーを変える。任意の P に対して、バーテックス同士の衝突による、すべての変化は、これら三つの素過程に分解できる。 $P = 3$ のときは、「ドメインとドメインの合体」しかない。一方、 $P = \infty$ のときは、すべてのドメインが異なる状態にあると考えてよいので、その「合体」はなく、他の二つの素過程が起こる。 $4 \leq P < \infty$ のときは、三素過程が混り合う。この論文では、 $P = \infty$ について計算機シミュレーションを行なった。

§ 3. 計算機シミュレーションの方法と結果

バーテックスの運動方程式(2.1)を Runge-Kutta-Gill 法で数値的に解き、ドメイン系の成長法則及びトポロジカルな性質を調べる。われわれのモデルでは、バーテックスは連続空間を運動するので、格子定数に相当する微視的長さはない。従って、数値計算で無次元の長さを扱うために、初期分布の特徴を表わす適当な長さ a ($t = 0$ での平均ドメイン・サイズにほぼ等しい)を取り、これで長さをスケールする。時間は $a\eta/\sigma$ でスケールされる。以下、このように無次元化された量を使う。

われわれは、バーテックス系の熱力学的極限における統計的性質を知りたい。従って、バー

テックス密度を一定にし, バーテックス数 N を大きくする。又, 周期的境界条件を採用し, 大きな体系を模倣する。

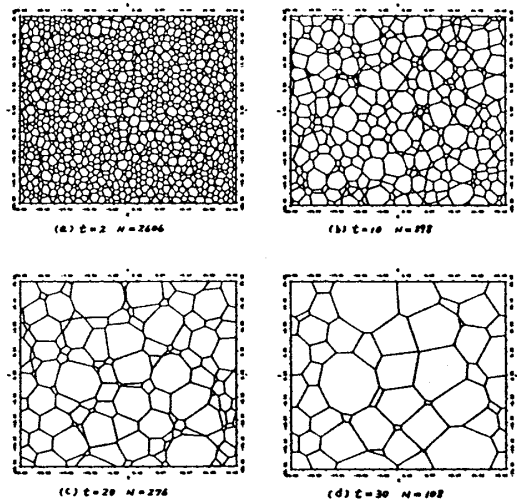
われわれは, $P = \infty$ の場合を調べた。この場合は, すべてドメインは違った状態にあるとしてよいので, ドメイン状態を表わす変数は要らない。従って, 一つのバーテックスに付属する量は, その位置座標 2 個と手をつなぐ相手の番号 3 個の計 5 個になる。これは, 空間の各点の状態を変数として扱う従来の微視的モデル²⁾ に比べ, われわれのモデルが如何に数値計算が簡単であることを示している。

第 3 図は, $t = 0$ でのバーテックス数が $N_0 = 4800$ である系に対するシミュレーションの結果である。ここで, 時間キザミを $\Delta t = 0.01$, バーテックス・サイズを $\Delta = 0.01$ とした。この Δ の値は, Δt に対応する微小変位のオーダーである。 $t = 2, 10, 20, 30$ とドメインが成長して行く様子が見られる。 $t = 2$ は, 未だ過渡的時間帯にあるが, $t = 10$ あたりから, 系は初期分布に依らない一定の性質を現わし始める。 $t = 20, 30$ の図は, あたかも $t = 10$ の図の一部を, だんだん拡大したようである。このことは, ドメイン系が自己相似的に発展していることを暗示する。更に, 第 3 図のドメイン構造は第 1 図(a), (b)の構造に極めて類似していることがわかる。これは, 石けん泡及び結晶粒系が, 少なくともドメイン構造に関しては, われわれのモデルの $P = \infty$ に相当していることを示唆する。

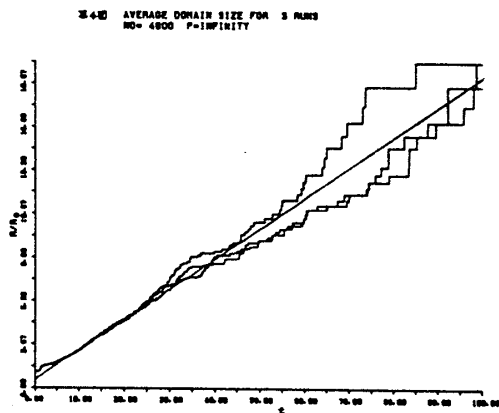
次に, 平均のドメイン・サイズ $R(t)$ の時間変化を計算する。 $R^2 N$ は系の全面積に, 近似的に等しいので, R は $N^{-1/2}$ に比例する。従って, $R(t)$ は次式で与えられる。

$$\frac{R(t)}{R_0} = \sqrt{\frac{N_0}{N(t)}}, \quad (3.1)$$

ただし, R_0 は $t = 0$ での平均ドメイン・サイズである。(3.1)式を使って計算した結果を第 4 図に示す。一つは第 3 図のシミ



第 3 図 $P = \infty$, $N_0 = 4800$ の系におけるドメイン構造の時間発展。 N は各時刻 t でのバーテックス数。



第 4 図 平均ドメイン・サイズの時間変化

研究会報告

シミュレーションの結果で、他の二つは初期分布を少し変えたシミュレーションの結果である。これらは次の直線によく表わされる（図中の直線）：

$$\frac{R}{R_0} = At + B, \quad t > 10, \quad (3.2)$$

ここで、 $A = 0.185 \pm 0.0003$, $B = 0.480 \pm 0.016$ 。直線(3.2)は、 $t = 10 \sim 100$ のデータに最小二乗法を適用して得られた。

$t = 0 \sim 10$ における直線からのずれは、過渡過程に起因し、 t が大きい領域でのバラツキは、 N の減少による統計的ゆらぎに起因する。

一方、系の全エネルギー $E = V$ も、ドメインの成長についての知識を与える。 $E \sim NR$ に(3.1)を適用すると $E \sim R^{-1}$ となる。従って、(3.2)と矛盾しないためには、 $E^{-1} \sim t$ ($t \gg 1$)でなければならない。第5図に、全エネルギーの逆数 E_0/E を示す。確かに、この結果は、次の直線で近似できる。

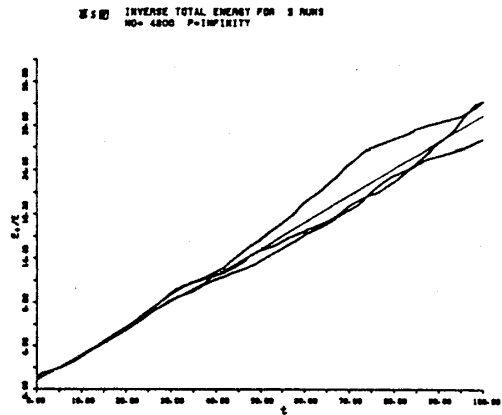
$$\frac{E_0}{E} = Ct + D, \quad t > 10 \quad (3.3)$$

ここで、 $C = 0.289 \pm 0.0003$, $D = 1.13 \pm 0.02$ 。

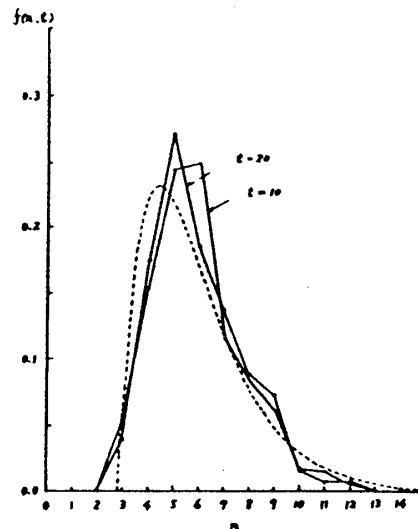
この系のトポロジカルな性質は、角形分布によって記述される。第6図に、第3図(b), (c)での角形分布 $f(n, t)$ を示す。ここで、 $f(n, t)$ は規格化されている。この結果は、ほぼ t に依らないので、定常分布 $f(n)$ が予想される。図中の点線は、平衡角形分布の理論式³⁾

$$f(n) = \Gamma(n - n_1) e^{-rn} \quad (3.4)$$

である。ここで $r = 0.63$, $\Gamma = 2.4$, $n_1 = 2.8$ 。三つのパラメタ r, Γ, n_1 の中で独立なものは1個である。理論式のピークの位置がシミュレーションのそれより、少し n の小さい方向にずれてはいるが、大体の形は一致している。これらの分布から平均の角形は、 $t = 10, 20$



第5図 系のエネルギーの逆数の時間変化



第6図 第2図(b) $t = 10$ (c) $t = 20$ での角形分布。点線は理論式(3.4)

共に $\bar{n} = 6.0$ となる。これは、一つのバーテックスから3本の境界が出ることと、Eulerの関係とから導かれる結論 $\bar{n} = 6$ と一致する。

上述の結果から、“系は長時間 ($t > 10$) 経つと、初期分布に依らない性質を示すようになり、平均ドメイン・サイズは $R \sim t$ で大きくなり、ドメインの角形分布は定常分布に近づく”と言えることができる。

§ 4. 議論とまとめ

われわれのシミュレーションは $R \sim t$ を与えた。これは、運動方程式 (2.1) に起因する。ランダムな初期状態から、十分長い時間が経った後に、系は唯一つの特徴的長さ $R(t)$ をもつものとする、すべての長さの時間発展は $R(t)$ で表わされる。従って、(2.1) で右辺は方向のみにより、 $R(t)$ を含まないので、 $\dot{R}(t) \sim \text{const.}$ これより $R(t) \sim t$ を得る。従って、次のような結論に達する。“ $P = \infty$ の場合、平均ドメイン・サイズの時間変化を与えるべき指数は、バーテックスの運動方程式により決定され、トポロジカルなふるまいには依らない。”この結論が、他の P の値についても成り立つかどうかは、興味ある将来の問題である²⁾

現実の多くの系では、バーテックス間のドメイン境界の長さに比例する摩擦が存在する。そのような場合でも、われわれの上に得た結果は適用することができる。(2.1) 式で $\eta = r R(t)$ 、(r は正定数)、と近似する。変数を、 $d\tau = r^{-1} R(t)^{-1} dt$ により、 t から τ に変えると、方程式は (2.1) で $\eta = 1$ としたものと同じになる。従って、われわれが行なったシミュレーションの結果は、 t を τ と読み替えれば、そのまま今の場合に適用できる。シミュレーションの結果より、 $R \sim \tau$ であるから、変数変換は $t \sim \tau^2$ となる。これより、 $R \sim t^{1/2}$ を得る。この結果も、運動方程式の次元解析から出てくるもので、系のトポロジカルなふるまいには依らない。

上の例のように、運動方程式が (2.1) と違った形をとる場合は、 $R(t)$ の t 依存性も異なる。しかし、少なくとも $P = \infty$ の場合、べき指数のような普遍的な量は、その運動方程式から完全に決まり、トポロジカルな性質には依らないと言えることができる。

更に、われわれの結果は次のことを暗示する。“一定の過渡過程の後に、ドメインの成長則と同時に、定常角形分布が現われる。この角形分布は、初期分布にも、運動方程式の型にも依らない「乱雑なドメイン構造」に特有な分布になる。”

この研究を完成した後で、われわれのものに類似した研究があることを知った⁴⁾

参考文献

- 1) D. A. Aboav: *Metallography* 13 (1980) 43; C. S. Smith: *Metal Interfaces*, edited by C. Herring

(American Society for Metals, Cleveland, 1952) p. 65.

- 2) P. S. Sahni, D. J. Srolovitz, G. S. Grest, M. P. Anderson and S. A. Safran: Phys. Rev. B28 (1983) 2705. 第1図(b)はこの文献の Fig. 4 から採った。
- 3) N. Rivier: Phil. Mag. B52 (1985) 795.
- 4) A. Soares, A. C. Ferro and M. A. Fortes: Scripta Metall. 19 (1985) 1491. この文献で行なわれたシミュレーションの体系は、われわれのものよりたいへん小さいので、長時間での成長則を議論することは困難である。

25. 重力相互作用をする系の不安定性と構造形成

山口大・教育 古川 浩

重力によって相互作用する無限に広がった気体は常に不安定である。この系の不安定性の研究は2つの理由で重要である。第一に、この系の不安定性は通常の相分離の動力学的拡張である。しかし基礎方程式が可逆であること、質量密度が変化すること、相互作用が長距離力であること等、通常の相分離に比べて重要な違いが存在する。第二に、実際的な重要性をもつ。すなわちこの系の不安定性は宇宙の構造と密接な関係があると考えられている。しかしこの不安定性及びそれに伴う構造形成について理論的にはほとんど理解されていない。ここではこの系における質量密度相関関数を計算する。議論は不十分な点が多いことをお断りしておく。

扱う系は重力によって相互作用する冷い気体である。この気体の運動は非散逸的、すなわち可逆的である。したがって全ての運動は乱流的であると考えてよい。しかも通常乱流と違ってこの乱流は非定常乱流である。これは重力相互作用のために time scale τ が $(\rho G)^{-\frac{1}{2}}$ のように変化することによる。ここで ρ は質量密度、 G は重力定数である。このことは簡単な次元解析(長さのスケール L をもった運動エネルギー $E_L \equiv \rho_L (L/\tau_L)^2$ と相互作用のエネルギー $U_L \equiv G \rho_L^2 L^2$ を等しいとおくこと)によって求めることが出来る。

通常乱流ではいわゆるエネルギー伝播速度はスケールによらず一定とおける。しかし重力によって引き起こされた乱流では重力相互作用のために中間スケールモードからもエネルギーの injection がある。しかし通常乱流を一つのモデル乱流とし、重力乱流でも中間スケールでの energy injection は無いものとする。そのかわりモードからモードへのエネルギーの伝播が非