

3次元セルパターンの動力学

九大	理	物理	川崎	恭治
九州共立大	工	物理	長井	達三
九州共立大	工	物理	太田	成俊

1. 界面の運動方程式

界面の運動は次の2つの量によって決定される。

①散逸関数(dissipation functional)

$$R = \frac{1}{2L} \iint d a v^2(a) \quad (1)$$

②自由エネルギー(free-energy functional)

$$H = \sigma \iint d a = \sigma A \quad (2)$$

この2つの量が与えられたとき、界面の運動方程式は、

$$\delta R / \delta v = -\delta H / \delta r \quad (3)$$

になる。ここで、 r 、 $d a$ 、 v はそれぞれ界面の位置ベクトル、その界面の面素(surface element) および界面の速度である。 A はそのときの界面の全面積を表す。 L 、 σ はオンサーガー係数、界面張力である。この式は界面に関する式であるが、このままではまだ自由度が多すぎて取扱えない。

2. vertex dynamics

そこで、つぎの様な近似を行なう。いま、3次元のセルパターンの1つのvertexに着目する。1つのvertexは4本のedgeを介して4つのvertexに隣接し、その4本のedgeの中の2本を含むfaceが1つのvertexの近傍に6面存在する。従って1つのvertexは4つのセルに挟まれている。(この場合、edgeおよびfaceは一般には曲っているであろう。)

まず、全てのvertexに番号を付ける。 i 番目のvertexに隣接した4つの中の2つのvertexの番号を j 、 k とする。ここでつぎの様に近似する。

近似① (i, j, k) が作る界面の一部を平面三角形で置換する。
 近似② edge (i, j)、(i, k) を直線で置換する。

この近似により界面の運動はvertexの運動として捉えることができ、界面の運動が点の運動で表せる。(界面を平面三角形で置き換えるのは一意的ではなく、4角形以上では数多くの置換の仕方がある。しかし以下の議論ではその不定性はあ

まり重要ではない。)

3. 散逸関数 R の計算

散逸関数 R を計算するために、次の近似を行なう。

近似③ 1つの vertex i のみを速度 v_1 で動かし、他の vertex は止まっているとする。

このことは vertex i のまわりの6つの面の i を頂点とする三角形の部分のみが R に寄与することを意味する。ここで vertex i のまわりの三角形 (i, j, k) についての散逸関数を計算しよう。 i を原点に置き、辺 ij を x 軸に一致するように置き j, k の座標をそれぞれ $(x_1, 0)$ 、 (x_2, y_2) と置く。 Δijk 上の点の界面の速度を表すためにつぎの変数変換を行なう。

$$\begin{aligned} x &= x_1 \xi + (x_2 - x_1) \eta \\ y &= y_2 \eta \end{aligned} \quad (4)$$

ここで $0 \leq \xi \leq 1$ 、 $0 \leq \eta \leq \xi$ である。 vertex i の速度を v_1 とし法線ベクトルを n_{ijk} とおくと点 i での面の速さは $v_1 \cdot n_{ijk}$ であり、また点 j, k は動かないので、直線 jk との距離に比例して面の速さは大きくなる。 ξ はその距離に比例する変数であり、 $\xi = 1$ は直線 jk を、 $\xi = 0$ は点 i を表す。従って、点 (x, y) での面の速さは、 $(1 - \xi) v_1 \cdot n_{ijk}$ で表される。よって、面 Δijk の散逸関数 R_{ijk} は、

$$\begin{aligned} R_{ijk} &= \frac{1}{2L} \iint da v^2(a) \\ &= \frac{1}{2L} \int_0^1 d\xi \int_0^\xi d\eta x_1 y_2 (1 - \xi)^2 (v_1 \cdot n_{ijk})^2 \\ &= \frac{1}{24L} x_1 y_2 (v_1 \cdot n_{ijk})^2 = \frac{1}{12L} A_{ijk} (v_1 \cdot n_{ijk})^2 \end{aligned} \quad (5)$$

ここで A_{ijk} は Δijk の面積であり、それは $x_1 y_2 / 2$ に等しい。また、法線ベクトル n_{ijk} は次式で定義される。

$$n_{ijk} \equiv \frac{r_{ji} \times r_{ki}}{|r_{ji} \times r_{ki}|} \quad (6)$$

$$r_{ji} \equiv r_j - r_i \quad (7)$$

ここで r_i は、vertex i の位置ベクトルである。よって、近似③の時の散逸関数 R は、

$$R \equiv \sum_{\langle jk \rangle}^{(i)} R_{ijk} = \frac{1}{12L} \sum_{\langle jk \rangle}^{(i)} A_{ijk} (v_i \cdot n_{ijk})^2 \quad (8)$$

で与えられる。ここで $\langle jk \rangle$ は、vertex i に隣接する4つの vertex が作る6つの面についての和を意味する。

4. 自由エネルギー H の計算

この場合も上と同様に1つの vertex i だけを δr_i だけ動かした時の自由エネルギー変化 δH を求める。自由エネルギーの変化に関係した量は面積変化であるので、ここでも vertex i のまわりの6つの面の i を頂点とする三角形の部分 Δijk の面積変化を計算する。まず、

$$\begin{aligned} A_{ijk} &= |r_{ji} \times r_{ki}| / 2 \\ &= |r_i \times r_j + r_j \times r_k + r_k \times r_i| / 2 \\ &= |r_i \times r_{jk} + r_j \times r_k| / 2 \end{aligned}$$

であるので、

$$\begin{aligned} \delta A_{ijk} &= (\delta r_i \times r_{jk}) \cdot n_{ijk} / 2 \\ &= -\delta r_i \cdot (n_{ijk} \times r_{jk}) / 2 \end{aligned} \quad (9)$$

を得る。よって、

$$\delta H = -\frac{\sigma}{2} \sum_{\langle jk \rangle}^{(i)} \delta r_i \cdot (n_{ijk} \times r_{jk}) \quad (10)$$

5. vertex model の運動方程式

以上により、vertex の運動方程式を得る事が出来る。

$$\delta R / \delta v_i = -\delta H / \delta r_i \quad (11)$$

この式に3、4での結果を代入すると、

$$\frac{1}{6L} \sum_{\langle jk \rangle}^{(i)} A_{ijk} n_{ijk} n_{ijk} \cdot v_i = \frac{\sigma}{2} \sum_{\langle jk \rangle}^{(i)} (n_{ijk} \times r_{jk}) \quad (12)$$

を得る。これを形式的に、

$$\vec{T}_i \cdot \mathbf{v}_i = F_i \quad (13)$$

と書くことにする。ここで、

$$\vec{T}_i \equiv \frac{1}{6L} \sum_{\langle jk \rangle}^{(i)} A_{ijk} n_{ijk} n_{ijk} \quad (14)$$

$$F_i \equiv \frac{\sigma}{2} \sum_{\langle jk \rangle}^{(i)} (n_{ijk} \times r_{jk}) \quad (15)$$

これを model O' (Original model) とよぶことにする。

これに対し、抵抗係数テンソルを様々に近似することにより、いろいろなモデルが考えられる。

$$n_{ijk} n_{ijk} = \frac{1}{3} \vec{1} \quad (16)$$

と近似すると、運動方程式は、簡単になり

$$\vec{T}_i \equiv \frac{1}{3L} \bar{A}_i \vec{1} \quad (17)$$

ここで、 \bar{A}_i は vertex i のまわりの6つの三角形の面積の平均である。

$$\bar{A}_i = \frac{1}{6} \sum_{\langle jk \rangle}^{(i)} A_{ijk} = \frac{1}{12} \sum_{\langle jk \rangle}^{(i)} |r_{ji} \times r_{ki}| \quad (18)$$

よって、

$$\mathbf{v}_i = \frac{3L}{A_i} F_i \quad (19)$$

これを model II とよぶことにする。model II はテンソルをスカラーに近似しているため力 F_i の方向に vertex i は動くことになる。

model II は力 F_i の係数に \bar{A}_i が含まれていることにより、局所的に小さな三角形がある場所ではそれだけ速く vertex が移動し coarsening が速くおこる。

さらに局所的平均値 \bar{A}_i を全系にわたる平均値 A_0 でおきかえたものを考えることができる。

$$\mathbf{v}_i = \frac{3L}{A_0} F_i$$

これについては時間 t を変数変換し

$$\overline{A}_0 d\tau = dt \quad (20)$$

を導入することにより、

$$\frac{d\mathbf{r}_1}{d\tau} = 3L\mathbf{F}_1 \quad (21)$$

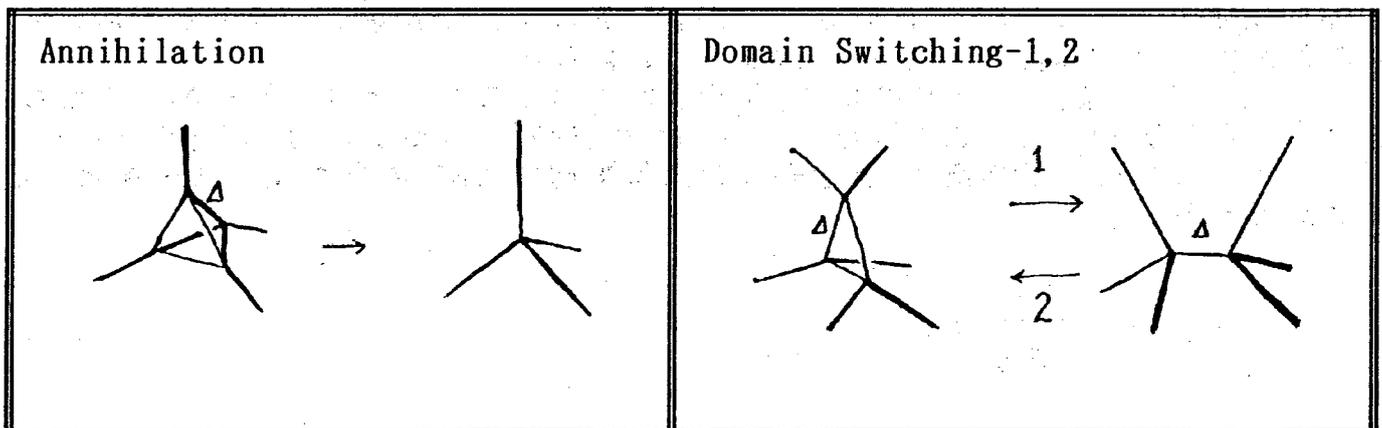
これを model I とよぶことにする。

6. 素過程

上で求めた運動方程式は、それ自身ではセルパターンの運動を記述するのには不完全であり、以下で示す3種の素過程が必要である。(図A参照)

<p>素過程① Annihilation 4面体からなる cell のうち、cell を形作る edge の1つの長さが Δ 以下のとき、その cell は消滅する。</p>
<p>素過程② Domain Switching-1 (①以外で) 3角形の face のうち、face を形作る edge の1つの長さが Δ 以下のとき、その face は消滅し、それを共有して接していた cell は分離する。</p>
<p>素過程③ Domain Switching-2 (①②以外で) edge の長さが Δ 以下のとき、その edge は消滅し、その edge の両端にあった2つの cell は新たにできた3角形の face を共有して接する。</p>

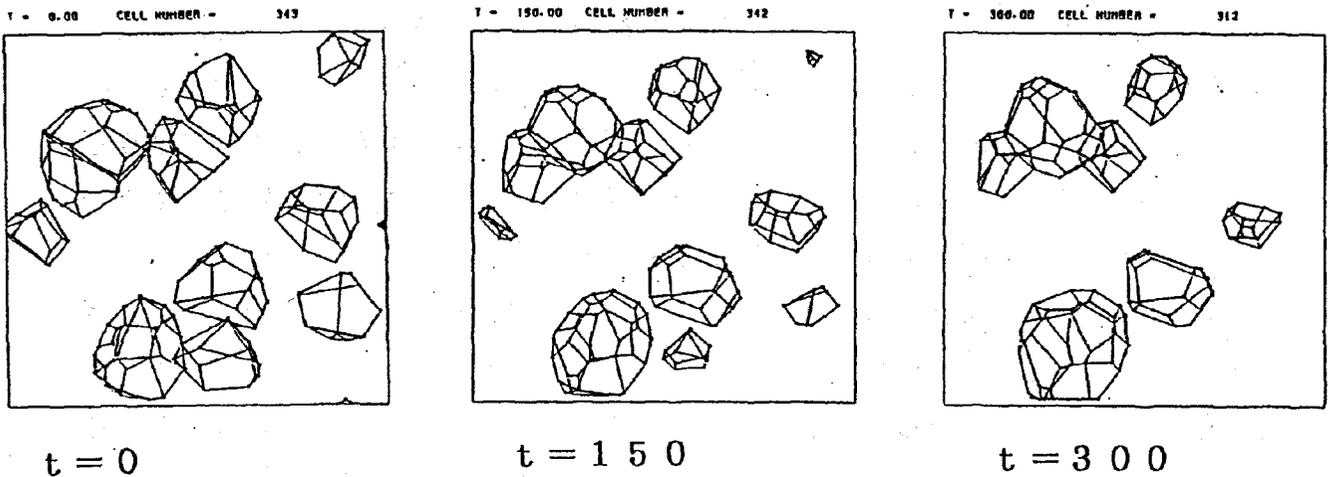
ここで、 Δ は系の大きさと比べて無視できる長さである。素過程②と③は互に逆過程であるが、2次元のときと異なり、非対称である。セルパターンの運動は、これらの素過程を vertex の運動方程式に動的に取込むことにより表現することができる。(図A)



7. Simulation

以下は、周期的境界条件をみたす3次元立方体の系において、vertexの運動方程式 (model II) の計算機実験の結果である。初期条件は343個の3次元ボロノイセルであり、図Bは、 $t=0$ 、150、300の時刻において、343個の中の11個のcellについてそのcellを構成するedgeをxy平面に射影したものである。 $t=150$ においては、初め小さかったcellはさらに小さくなっていることがわかる。さらに $t=300$ では、31個のcellが消滅し残った中の7個のcellが示されている。素過程としては、Domain Switching-1が多く起る。(このことは理論的にも示すことができるが、それについては別の機会に発表したい) 図Cは、 $t=0$ 、150、300の時刻においてのfaceの角数分布(左)およびcellの面数分布(右)である。両分布ともに、 $t=0$ 、150、300となるに従って、角数、面数の小さな方に移動しているのがわかる。(分布関数やスケージングの議論についても、現在解析中である。)

図B



図C

