

2次元セルパターン成長のスケール性

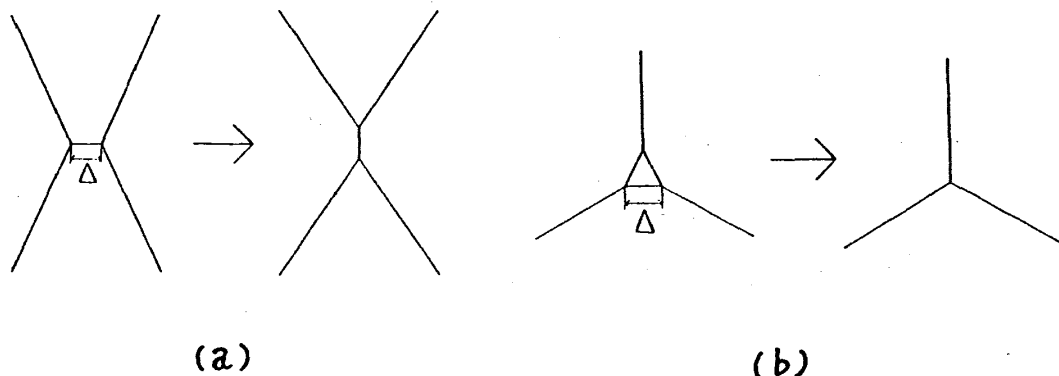
九州共立大 九大理^o 長井達三 中島勝也^o 川崎恭治^o

§ 1. はじめに

セルパターンは自然界に遍在する。泡の集まり、多結晶の結晶粒、玄武岩の柱状節理、生物の細胞組織等、時空のスケールは広範囲に及ぶがそれらは共にセル構造を作り、一見、相似形である。これらのセル構造はその出来上がる過程の力学によるだろう。このような系の発展過程を統一的に捕らえる概念は自己相似性（スケール性）である。この観点からセルパターン成長の統計力学を考えるのがこの研究の目的である。

今まで、セルパターンの理論的研究は計算機シミュレーションが主であった。この様な系のスケール性を調べるためには、充分多くのセルの発展を充分長時間追わねばならない。これは計算機の能力と時間の制限から困難であった。これを克服するために、我々は粗視的モデル（パーテックス・モデル）を考える。¹⁾ このモデルは2次元の石鹸泡系や2次元の結晶粒系のモデルである。即ち、現実の曲がった界面を有限の厚みを持つ直線の有効界面で近似し、有効界面の交点であるパーテックスの運動により、セルパターンの成長を記述する。パーテックスの運動は表面張力により駆動され、界面を引きずるための摩擦が伴う（§ 2 参照）。更に、2個のパーテックスが衝突するとき、組替え過程（図1. a）か三角形消滅過程（図1. b）が起こる。我々は、これまでに、計算機シミュレーションを行い、このモデルがセルパターン成長を記述する有効なモデルになり得ることを示した。¹⁻²⁾

図1. 素過程 (a) 組替え (b) 三角形消滅



今回は系のサイズおよびランの数を前回の10倍にして、このモデルの示すセルパターンは自己相似的成長をすること(スケール性)を確認し、その特徴を表す種々の物理量を求めた。³⁻⁴⁾ これは§2で述べる。 §3で解析的取扱いについて述べる。

§2. 計算機シミュレーション

我々は、セル境界の運動は完全に散逸的とするとき、 i 番目のバーテックスの速度 \underline{v}_i ($i = 1, 2, \dots, N$)は次の式で与えられることを示した。³⁾

$$\sum_j^{(i)} D_{ij} \left(\underline{v}_i + \frac{1}{2} \underline{v}_j \right) = - \sum_j^{(i)} \frac{\underline{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (2 \cdot 1)$$

ここで、 \underline{r}_i はバーテックスの位置ベクトルで $\underline{r}_{ij} \equiv \underline{r}_i - \underline{r}_j$ そして D_{ij} はテンソルの摩擦係数で(\underline{n}_{ij} は直線のセル境界要素 $\langle i, j \rangle$ の単位法線ベクトル)

$$D_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{1}{3L} r_{ij} n_{ij}^{\alpha} n_{ij}^{\beta} \quad ; \alpha, \beta = x, y \quad (2 \cdot 2)$$

(2・1)式の左辺は散逸項で右辺は線張力である。(2・1)式は $\{\underline{v}_i\}$ についての $2N$ 元連立方程式で取扱易くない。もし左辺第二項 $1/2 \underline{v}_j$ を落とすことが出来れば連立方程式ではなくなる。従って、この項(相関項と呼ぶことにする)の効果も併せて調べる。(2・1)式に従うものを“モデル0”、相関項を落としたものを“モデル0'”と呼ぶことにする。

更に、もっと単純化した形を考える。(2・1)式の左辺を \underline{n}_{ij} と \underline{v}_i の相対的な角度について平均して得られるものを“モデルII”、更に長さ r_{ij} についても平均したものを“モデルI”とする。即ち、

$$\eta_i^k \underline{v}_i = - \sum_j^{(i)} \frac{\underline{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad ; k = I, II \quad (2 \cdot 3)$$

ここで、セル境界要素 r_{ij} の全系についての平均値を $r_B(t)$ とすると

$$\eta_i^I = \frac{r_B(t)}{2L} \quad (2 \cdot 4)$$

$$\eta_i^{II} = \frac{1}{6L} \sum_j^{(i)} r_{ij} \quad (2 \cdot 5)$$

以上、主として三つの運動方程式の形、O, I, II についてシミュレーションを行い、その結果を比較する。初期状態は24000個のVoronoiセル ($N = 48000$) を取った。セルパターンは $l \sim 2$ (上の運動方程式で $L = 1$ とした) から自己相似性を示し始める。前シミュレーションでは正六角形セルの集まりの中に別の多角形を挿入して作った初期状態を採用したが、 $l \sim 10$ から自己相似性を示し始めた。この時間は採用した初期状態による。しかし、その後の系の発展は同じと考えられる。図2は $l = 20$ でのセルパターンである。これはモデルIIの結果であるが、パターンの図からはモデルの違いを判別できない。

平均セル面積 $\bar{A}(t)$ の時間変化を図3に示す。縦軸は $\bar{A}(0)$ を単位にした。すべてのモデルで $\bar{A}(t) = \alpha t$ (α は定数) である。即ち、セルの平均半径は時間の $1/2$ 乗で大きくなる。これは前シミュレーションの結果と一致する。¹⁻²⁾ この指数はパーテックスの運動方程式の次元解析から予想できる。摩擦係数を三段階に近似した上の三つのモデル方程式は次元解析的に同じなので、シミュレーションの結果はこのことと一致する。モデル方程式の違いは、係数 α に現れた。この成長則は α の違いを含め §3 で議論する。

図2. スケール域でのセルパターン

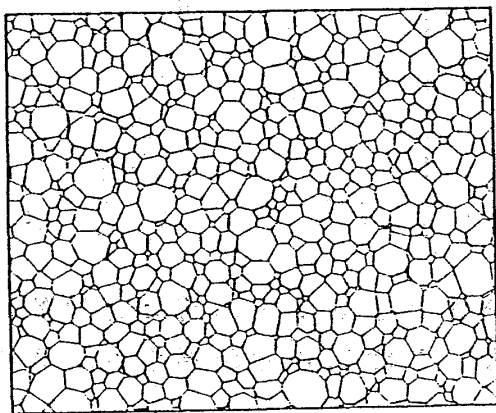
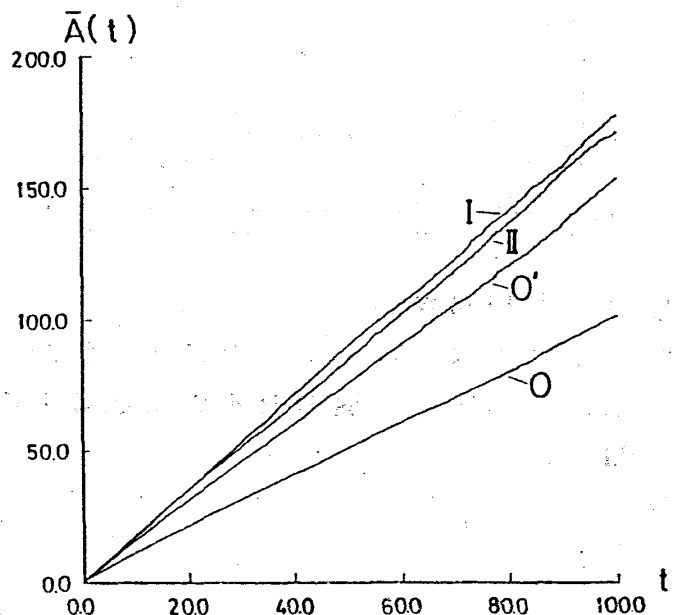


図3. 平均セル面積の時間変化



セルパターンの自己相似的発展を確かめるには、成長則と共に角数分布やサイズ分布のスケール性を調べなければならない。共にスケール性を示すことを確かめた。図4にモデルIIの角数分布 $f(n, t)$ の時間変化を示す。これは各時刻で20回のランについて平均した結果である。折れ線上短い縦線は標準偏差を示す。各 n について、 $t \sim 2$ 以降で一定値の周りに 'ゆらい' でいる。この 'ゆらぎ' は系が有限であることからくる統計的 'ゆらぎ' である。従って、 $f(n, t)$ はスケール域で定常分布 $f^*(n)$ になる。この事情はモデル方程式には依らない。

各 $f^*(n)$ を図5に示す。実線をつないだ●印がモデルO、一点鎖線をつないだ×印がモデルI、点線をつないだ○印がモデルIIである。この形はモデル方程式に依っている。その導出の過程で、モデルO → II → Iの順に、一つのバーテックスの周りの局所的な情報が、次第に失われている。その結果は五、六角形に集中したより対称的な分布が、五角形以下の小角の方に移りより非対称な分布になった。勿論、平均角数はすべて6である。これらの分布はRivierの式に合わせる事が出来ない。⁵⁾ 図5の◎は2次元石鹸泡に対する実験の結果である。⁶⁾ この実験はスケール域にあることを確かめている。これはモデルOの分布に著しく良く一致している。

図4. 角数分布の時間変化

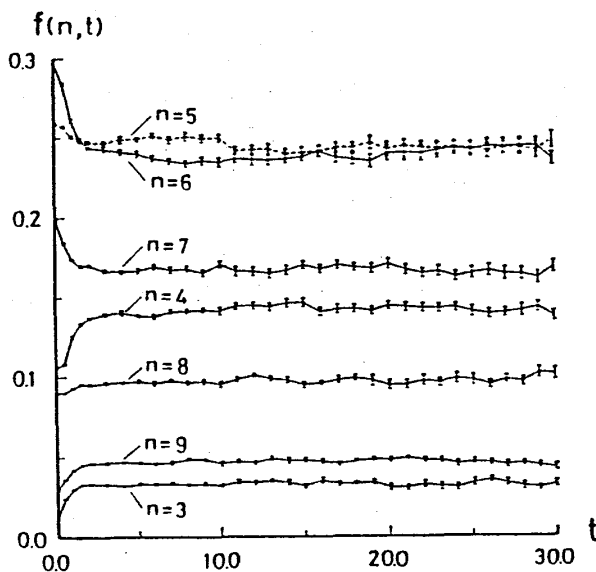
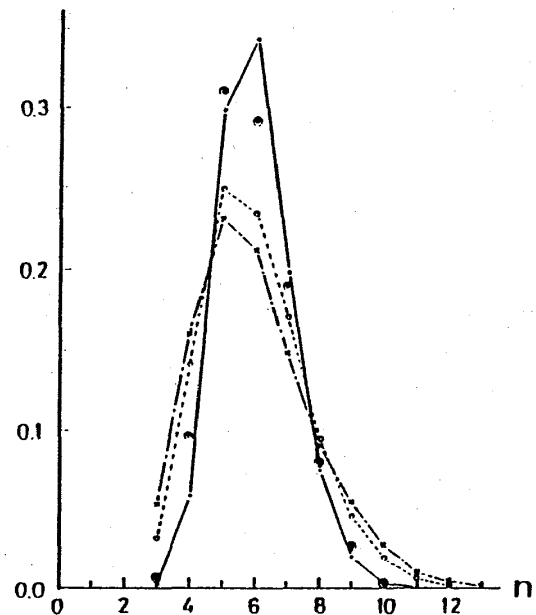


図5. スケール域での角数分布



§ 3. 平均場理論

ここでは、バーテックス・モデルで記述されるセル系の統計力学的理論を考える。いま、一個のセルの状態はその角数 n と面積 A で記述され、 A の時間変化は

$$\frac{dA}{dt} = \alpha_n, \quad n = 3, 4, \dots \quad (3 \cdot 1)$$

によって与えられるものと仮定する。 α_n は n のみの関数で

$$\alpha_n = \frac{3}{2+c} \cdot L \cdot \frac{n(1-2\sin(\pi/n))}{\cos(\pi/n)} \quad (3 \cdot 2)$$

ここで、 L は Onsager の運動学的係数、 c はバーテックスの運動方程式 (2・1) 式で左辺の相関項 $1/2 \underline{v}_i$ の有 ($c=1$)、無 ($c=0$) を考慮する。この (3・2) 式は、対称的な放射状の外線を持つ正 n 角形セルに (2・1) 式を適用して得られる。この特殊な配置にもかかわらず、(3・2) 式はシミュレーションから得られた、スケール域での n 角形セルの平均面積 A_n の時間変化 dA_n/dt と良く一致する。⁴⁾ 従って、(3・1) 式はスケール域でのセルの運動を記述する平均場近似の式と見ることが出来る。

角数 n 、面積 A のセル数 $H(n, A; t)$ に対するマスター方程式は次のように書くことが出来る：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} H(n, A; t) = & - \frac{\partial}{\partial A} \alpha_n H(n, A; t) + w_-(n+1, A; t) \times \\ & \times H(n+1, A; t) + w_+(n-1, A; t) H(n-1, A; t) - \\ & - w_-(n, A; t) H(n, A; t) - w_+(n, A; t) H(n, A; t) \quad (3 \cdot 3) \end{aligned}$$

ただし、 $n \geq 3$ で $w_+(2, A; t) \equiv 0$, $H(2, A; t) \equiv 0$ と定義し、 $w_-(n, A; t)$ と $w_+(n, A; t)$ は、それぞれ、遷移 $n \rightarrow (n-1)$ と $n \rightarrow (n+1)$ に対する単位時間当りの遷移確率である。

(3・3) 式の右辺で、第一項はドリフト項、第二項と第三項は遷移 $(n+1) \rightarrow n$ と $(n-1) \rightarrow n$ による増加、第四項と第五項は遷移 $n \rightarrow (n-1)$ と $n \rightarrow (n+1)$ による減少をあらわす。全セル数は

$$N_c(t) = \sum_{n=3}^{\infty} \int_0^{\infty} dA H(n, A; t) \quad (3 \cdot 4)$$

で与えられる。 $N_c(t)$ の時間変化は (3・3) を使って

$$\frac{d N_c(t)}{d t} = - \int_0^{\infty} d \Lambda w_{-}(3, \Lambda ; t) H(3, \Lambda ; t) \quad (3 \cdot 5)$$

これは、全セル数の減少は三角形セルの消滅によって起こることを示している。

系が自己相似的に発展するならば、 w_{+} 、 w_{-} および H に対して、長時間の極限で次のようなスケール性を要請するのが自然である。

$$w_{\pm}(n, \Lambda ; t) = \frac{1}{N_c} \left| \frac{d N_c}{d t} \right| w_{\pm}^{*}(n, x) \quad (3 \cdot 6)$$

$$H(n, \Lambda ; t) = \frac{N_c}{\bar{\Lambda}} h^{*}(n, x)$$

ただし、 $x \equiv \Lambda / \bar{\Lambda}$ として $\bar{\Lambda} = \Lambda_0 / N_c$ (Λ_0 は系の全面積) は平均セル面積。無次元の分布関数 h^{*} は (3・4) 式により 1 に規格化されている。

系の成長則を求めるために、次のような面積の次元をもった量を考える。⁷⁾

$$S \equiv \frac{1}{\Lambda_0} \sum_{n=3}^{\infty} \int_0^{\infty} d \Lambda \Lambda^2 H(n, \Lambda ; t) \quad (3 \cdot 7)$$

(3・3) 式を使って S の時間微分を計算すると次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{d S}{d t} &= 2 \sum_{n=3}^{\infty} \alpha_n \phi_n(t) - \\ &- \frac{1}{\Lambda_0} \int_0^{\infty} d \Lambda \Lambda^2 w_{-}(3, \Lambda ; t) H(3, \Lambda ; t) \end{aligned} \quad (3 \cdot 8)$$

ここで、 $\phi_n(t)$ は全 n 角形セルが占める総面積の、系の面積に対する比率で

$$\phi_n(t) \equiv \frac{1}{\Lambda_0} \int_0^\infty d\Lambda \Lambda H(n, \Lambda; t) \quad (3 \cdot 9)$$

と定義される。(3・6)式を使うと、(3・8)式は長時間の極限で次のようになる:

$$\langle x^2 \rangle \frac{d\bar{\Lambda}}{dt} = 2 \sum_{n=3}^{\infty} \alpha_n \phi_n^* - \langle x^2 \rangle_{\text{ann}} \frac{d\bar{\Lambda}}{dt} \quad (3 \cdot 10)$$

ここで、

$$\langle x^2 \rangle \equiv \sum_{n=3}^{\infty} \int_0^\infty dx x^2 h^*(n, x)$$

$$\langle x^2 \rangle_{\text{ann}} \equiv \int_0^\infty dx x^2 w_-(3, x) h^*(3, x) \quad (3 \cdot 11)$$

$$\phi_n^* \equiv \int_0^\infty dx x h^*(n, x)$$

$\langle x^2 \rangle$ は $(\Lambda/\bar{\Lambda})^2$ の平均、 $\langle x^2 \rangle_{\text{ann}}$ は消滅する三角形の $(\Lambda/\bar{\Lambda})^2$

の平均で、 ϕ_n^* は $\phi_n(t)$ の長時間極限である。(3・10)式を解いて、セルの平均面積は

$$\bar{\Lambda}(t) = \alpha t, \quad t \rightarrow \infty \quad (3 \cdot 12)$$

ただし、

$$\alpha \equiv 2 \sum_{n=3}^{\infty} \alpha_n \phi_n^* / (\langle x^2 \rangle + \langle x^2 \rangle_{\text{ann}}) \quad (3 \cdot 13)$$

(3・12)式はセルの平均面積が時間の一乗で大きくなることを示し、シミュレーションの結果と一致する。更に、(3・13)式はその係数が、運動方程式(3・1)の α_n とスケール域での統計量で表されることを示している。パーティクルの運動方程式(2・1)の相関項の効果は(3・13)式で、 α_n に含まれている。(3・2)式から分かるように、その効果は α を2/3倍に小さく

する。一方、シミュレーションの結果は、図3から、相関項を含まない場合（ O' ）の傾きに対する、含む場合（ O ）の傾きの比は0.66となる。これは上に得られた理論値と良く一致している。このことから、相関項は単に時間のスケールを変えるだけで、他の性質に影響を与えないものと考えられる。

(3.6)式を使うと、(3.3)式は次のようになる：

$$\begin{aligned} (x - \alpha_n^*) \frac{\partial}{\partial x} h^*(n, x) + 2 h^*(n, x) = -w_-(n+1, x) \times \\ \times h^*(n+1, x) - w_+(n-1, x) h^*(n-1, x) + [w_-(n, x) + \\ + w_+(n, x)] h^*(n, x) \end{aligned} \quad (3.14)$$

ここで、 $\alpha_n^* = \alpha_n / \alpha$ である。いま、 n から $(n+1)$ に遷移するセルの正味の割合 $j^*(n, n+1)$ を次のように導入する。

$$\begin{aligned} j^*(n, n+1) \equiv \int_0^\infty dx [w_+(n, x) h^*(n, x) - \\ - w_-(n+1, x) h^*(n+1, x)] \end{aligned} \quad (3.15)$$

(3.14)式を x について積分して、(3.15)式を使うと $j^*(n, n+1)$ についての漸化式を得る。それを解くと

$$j^*(n, n+1) = - \sum_{m=n+1}^\infty f^*(m) \quad (3.16)$$

を得る。ここで、 $f^*(n)$ は角数分布で

$$f^*(n) = \int_0^\infty dx h^*(n, x) \quad (3.17)$$

(3・16)式から次のことが分かる。角数分布の流れは、大きい角数から小さい角数の方向へ起こり、その流量は小さい角数の方へ行く程大きくなる。この流れの涌き出しは各 n であり、吸い込みは $n=3$ である。

(3・14)式から、 $h^*(n, x)$ を解くためには、遷移確率 $w_+^*(n, x)$ の形を与えなければならない。これは現在進行中である。

文献

- 1) T. Nagai, K. Kawasaki, and K. Nakamura, J. Phys. Soc. Japan 57(1988)2221.
- 2) Y. Enomoto, K. Kawasaki, and T. Nagai, J. Mod. Phys. B3(1989)163.
- 3) K. Kawasaki, T. Nagai, and K. Nakashima, Phil. Mag. B(in press).
- 4) K. Nakashima, T. Nagai, and K. Kawasaki, J. Stat. Phys. (in press).
- 5) N. Rivier, Phil. Mag. B52(1985)795.
- 6) J. A. Glazier, S. P. Gross, and J. Stavans, Phys. Rev. A36(1987)306;
J. Stavans and J. A. Glazier, Phys. Rev. Lett. (1989)
- 7) W. W. Mullins, Scripta Metall. 22(1988)1441.