物性研究 72−1 (1999−4)

研究紹介

数理の実験工房[1]
〜 自然界のパターンと動力学の解明 〜

（北海道大学 電子科学研究所 情報数理研究分野）

西浦廉政
小林 亮
柳田達雄
http://aurora.es.hokudai.ac.jp

（1998年11月2日受理）

自然を理解する方法は様々であるが、本分野は計算機の中に小自然を作り、それを解剖し、その数理的構造を明らかにすることにより、その本質を解明することを目指す、いわば数理の実験工房とでも言うべきものである。望遠鏡や顕微鏡が世界を大きく広げたように、計算機は我々により大きな想像力の翼を与えつつある。コンピュータの中で、お湯を沸かしたり、雪や雲を作ったりすることで、複雑な現象を生み出す本質的なメカニズムを知ることができる。あるいは様々な無限次元空間の探索によりダイナミクスを駆動している機構を明らかにできる。さらにそれらの数学的解析により、実体にとらわれない普遍的数理構造を抽出することが可能となる。２１世紀にかけてこれら計算機という翼と数理の無限の包括力を活用することにより、脳や生命現象を含む様々な複雑現象を総体として理解する方法の一つを確立することを目指している。以下では各テーマごとに簡単にその内容を紹介する。

1. 結晶成長と Grain Boundary

結晶成長は自然界におけるパターン形成の一つの典型例である。我々がふだん目にする固体はほとんどが結晶からなっているが、それらは分子の配行方向がマクロなスケールでそろった単結晶と、単結晶の集合体である多結晶に分類される。我々はこれらの結晶の巨視的なスケールでの形態形成を記述する数理モデルを研究している。

単結晶では、凝固による結晶成長のモデルとして Phase field model とよばれるモデルがあり、これを用いると図1(a)のように３次元の樹枝状結晶を再現することができる [1]。凝固では多くの場合界面が分子レベルでは荒れており、図のように界面は丸みを帯びた形状を持つ。それに対し溶液や気体の中で成長する結晶では、結晶面は平らなであることが多い。現在、雪の結晶（図1(b)）にみられるような気相内で成長する樹枝状結晶を再現できるモデルを模索中である（でも、これがなかなか難しい！）。

[1] 本稿は、各地編集委員の発案・推薦にもとづき編集部が依頼して書いていただいた記事である。

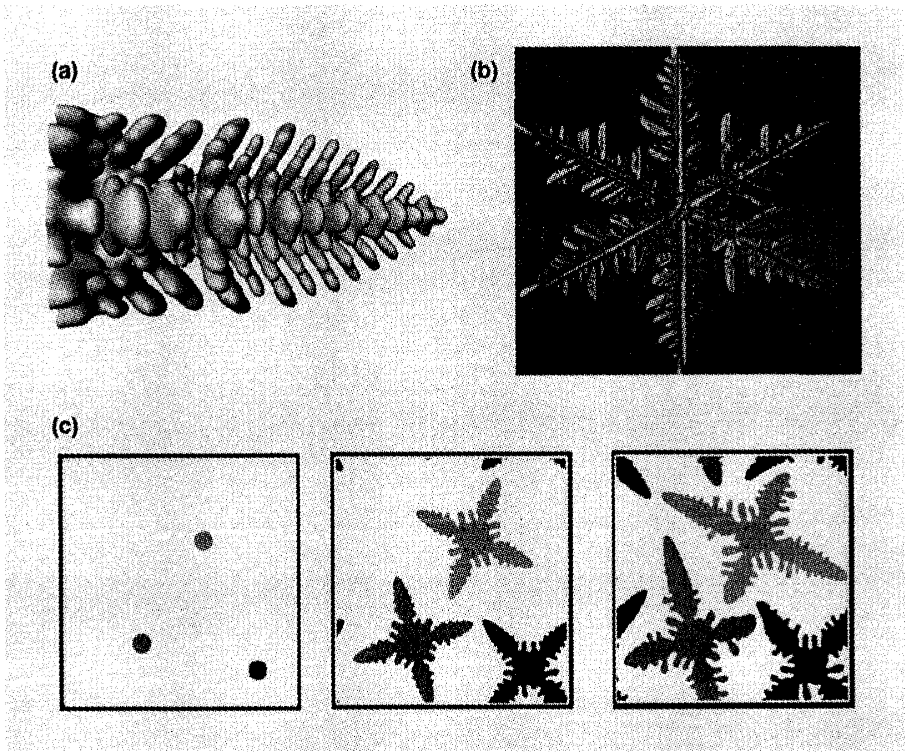

図 1:

(a) Phase field model による 3 次元デンドライトシミュレーション、(b) 雪のデンドライト状結晶、(c) Vector-valued phase field model による多結晶形成のシミュレーション

多結晶に関しては、ベクトル化した Phase field model を用いることによって同時に進行する結晶成長と、その結果できる grain boundary の形成までを記述することができる (図 1(c)) [2]。現在は、この grain boundary の運動や grain 内での回転を記述するモデルの研究中である [3]。このモデルは、数学的には無限大の拡散性を通して non-local な相互作用を微分方程式に導入するという特徴をもっており、facet を持つ結晶成長のモデルとともに、非線形半群理論と呼ばれる数学理論の non-trivial な実例となっている [4]。

2. 粉粒体の相分離

粉粒体は一般的にサイズ、質量、摩擦係数などの違いにより分離することが知られている。その典型的な例として、円筒中の 2 種の粉体が回転によって分離するという現象がある。その分離の過程は、まず径方向にコア状に分離 (radial segregation) して、その後、回転軸方向の分離（axial segregation）によってバンド状にパターンが形成される (図 2)。さらに回転を続けると、隣接するバンドの合体によりパターンの粗視化がおこる。この系の粉体分離のメカニズムとしては (1) 各粒子の安息角の違いより表層で分離が引き起こされている説 (2) 表層ではなく内部での粒子の移動によって起こっているという説があり、現在でも様々な議論が行われている。

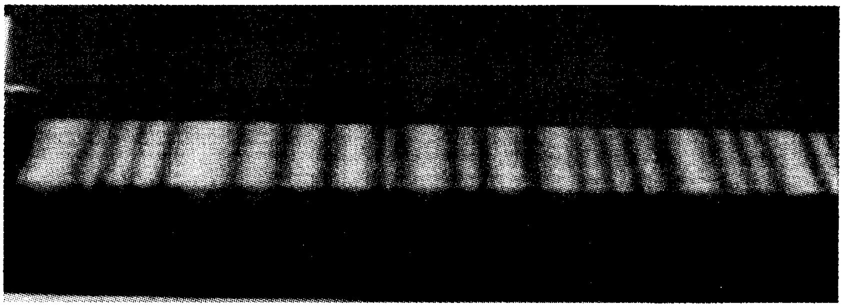

図 2:

回転円筒内での砂とガラスビーズの分離実験。回転数秒後に Radial segretation が起こった後に Axial segretaion によりバンド状のパターンが形成される。このバンドは時間とともに隣接するバンドと合体し粗視化する。

この現象を理解するための第一原理的アプローチとして、粒子シミュレーションが考えられるが粒子数が膨大であるため現実的に難しい。また、仮に実行可能となったとしても（数値）実験的側面が強く、分離の物理的要因を調べるには適さない。そこで、我々はセルラ・オートマトン（CA）を用いたモデル化を行なっている。このモデルは表層での配位変化のみを考慮しており粉体内部での粒子の移動はない。それにも関わらず分離の3過程を定性的に再現することに成功している [5]。ただ、この結果から、安息角の違いによって粉体分離が生じていると言う事は安易に結論できない。言える事は、少なくとも表層のみの配位変化だけで粉体分離が可能であると言う事である。現状では研究者各々が異なる状況において実験された結果（材質、充填率など）から分離のメカニズムを議論しているが、メカニズム（例えば、表層での配位変化が重要か、それとも内部での変移が重要かは）がパラメータによって変化する可能性もある。

このように、粉粒体のからむ現象のモデリングは一般に難しいが、その難しさは粒子が中間的なスケールを持つことに主に起因している。実際、あるときには流体のようにふるまったり、あるときには粒子性が顔を出したりするのである。そこで我々は上記のセルラオートマトンモデルだけでなく、偏微分方程式モデルや粒子モデル等使えるものは総動員して、この現象を理解しようと試みている。ここで粉粒体にナビエ・ストークス方程式のような決定版的モデルがないのは一見困ったことのようであるが、モデルを作る立場からすればむしろ幸せなことであるとも言える。実際、いろいろとモデルを自分で工夫する余地があって非常におもしろいのである。

この研究では、我々はモデリング・シミュレーションだけではなく、実際の実験も平行して行っている。やはり、現象を理解するためにモデルを作る場合、なんといっても本物を何百回と観察することが重要である。

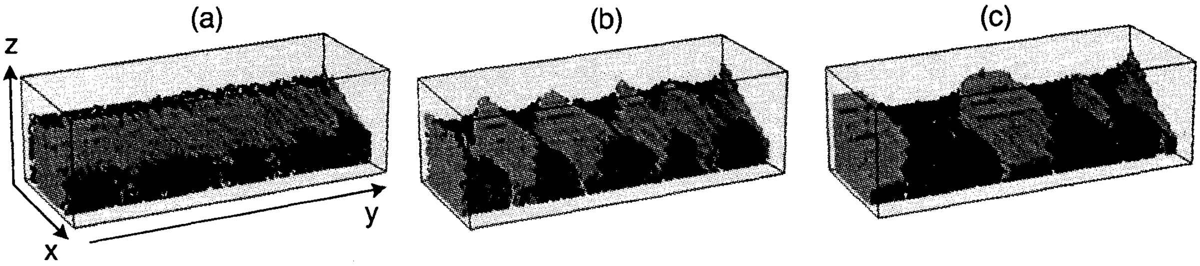

図 3:

回転円筒中における粉体相分離のCAモデルのシミュレーション結果。回転初期において径方向分離が起こり、その後、軸方向の分離が生じる。さらに回転を続けるとバンドパターンが粗視化する。このCAモデルは、これらの3過程を再現する3次元モデルである。

3. 雲のパターン形成と生成崩壊のダイナミクス

雲は非常に複雑な形態を持つが、その物理的な起源は明らかではない。この多様な形態を生成する雲の動力学をモデル化し、いかなる状況（パラメータ領域）でどのような雲が形成させるかを調べる。この様に広範囲な多次元パラメータ空間における形態の変化を調べる為には数値解析に優れたモデルでなくてはいらない。我々が用いる方法は雲動力学に必要な最低限の物理的要因を取り入れ、それを簡単なダイナミクスに置き換える構成論的モデル化である。

モデルは浮力・移流拡散・熱伝導・気液相転移・潜熱・断熱膨張圧縮・液滴の落下とそれに伴う大気の運動を考慮している。このモデルを用いた広範囲のパラメーター空間におけるシミュレーションの結果、地表温度と水蒸気量の変化に応じて積雲、積乱雲、層雲、層積雲と雲形態が変化することが分かっている [6]。構成論的モデル化の利点として物理プロセスを削除したり、新しく導入したりする事ができる。この特徴を生かして如何なる物理プロセスが雲形態に重要であるかを調べる事ができる。特に形態の変化と微視的物理過程との関連を明らかにできる。また、モデルを拡張することにより、赤道付近で観測されている雲のクラスター化などの地球規模的現象の解明が期待される。

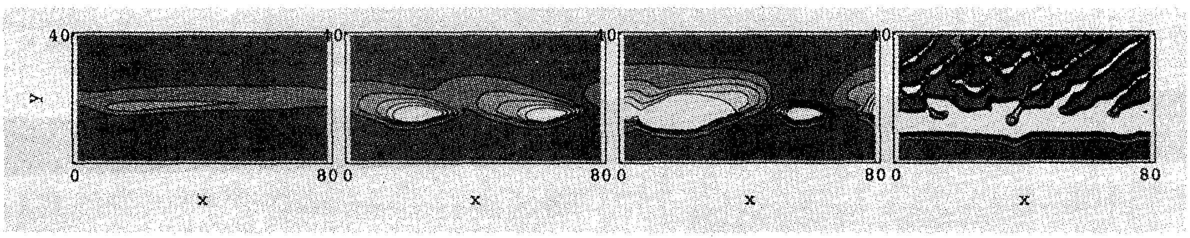

図 4:

雲動力学の主要因である物理過程のみを取り入れたモデルを構成し、シミュレーションによって得られた典型的な雲のパターン。地表温度と湿度変化により定性的に異なる四種（層雲・積雲・積乱雲・層積雲）形態が出現する。パラメータを大域的に調べる異によりこれらのパターンの相図が得られている。

4. 羽ばたき飛行のメカニズムの解明

昆虫は小さい体をしているため羽ばたき飛行が可能であると言われている。推進することで揚力を得る飛行機や鳥類などの滑空のメカニズムは解明されている。一方、蝶の飛翔は、揚力の発生機構、安定性、制御などの点で滑空飛行とは異質であり非常に興味深い。蝶の飛行に関しては主に飛行経路の環境や時間帯などの変化に伴う行動学的研究が多くなされているが、飛行そのもののメカニズムに関するものは少ないようである。我々は、

1. 蝶の飛行の高速度ビデオ撮影 (栗林自然科学写真研究所提供によるデータを含む) から飛行軌跡の解析。
2. 羽ばたき飛行の模型を作成し、その運動過程から揚力発生機構の把握。
3. 理論形成として 2 次元完全流体中での羽ばたきの数値モデルの構成。

などの多次元的アプローチ (図 5) を行なる事により羽ばたき飛行の物理的メカニズムの解明を目指している。

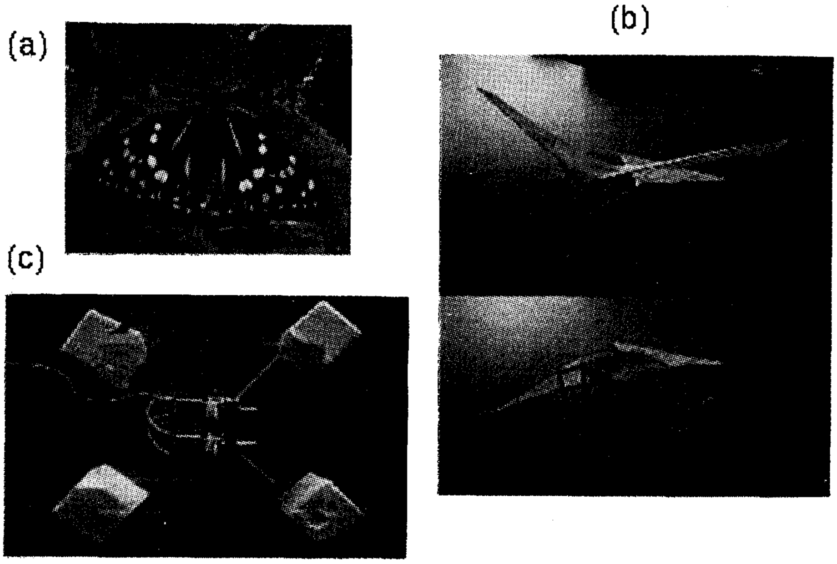

図 5:

我々の最終目標は蝶の羽ばたき飛行のメカニズムの解明である。現段階では羽ばたきによる揚力発生のみを考慮した数値モデルの解析を進めるている。(a) オオムラサキ。滑空を行なう蝶として知られており、羽ばたき飛行と滑空飛行のデータ解析を行なうのに最適な蝶と思われる。(b) 羽ばたき飛行の模型を作成することにより計算機実験では難しい 3 次元空間での飛行の解析を行なう。(c) 水中において羽ばたき推力のみで前進する模型。滑空することによって翼から得る揚力が完全に無い" 純粋羽ばたき推進力" を調べるための模型。

5. 沸騰における核膜遷移に関する研究

沸騰は気・液二相が混在する上にその境界は時間空間的に不規則である。沸騰状態には核沸騰と膜沸騰状態の2つの相があり、これらの相は発熱体に流入する熱量に伴い遷移する。このような系は流体の基礎方程式である Navier-Stokes 方程式での記述は困難である。そこで、Coupled Map Lattice(CML) 法による沸騰のモデル化を行い [7]、数値計算により遷移に伴う物理量の変化を調べることによりこの遷移過程を支配している物理的要因を解明を目指している。さらにモデルを拡張して、二相流における流動パターンの遷移問題についても CML 法の適用の可能性を探っている。

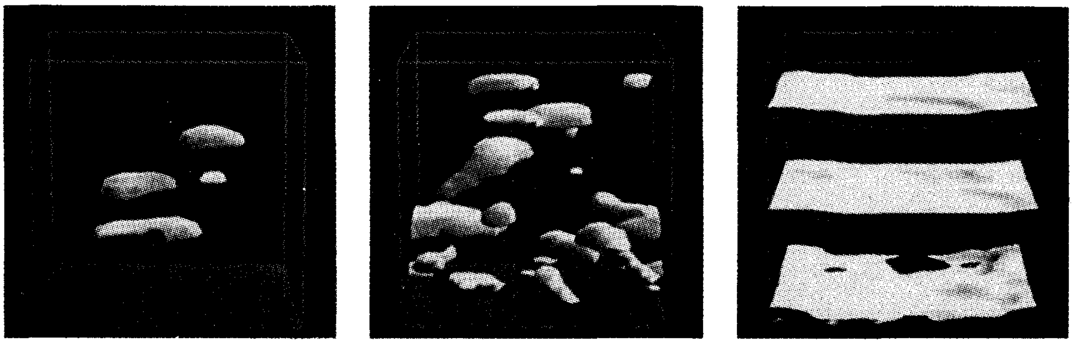

図 6:

底面の温度変化にともない気泡の数が増加し臨界温度を超えると気泡が合体し膜沸騰状態となる。この遷移に伴い底面から流体内への熱流が著しく低下し、これは沸騰特性曲線によって特徴づけられる。この CML モデルは沸騰特性曲線を定性的に再現する。

6. うつろひゆくもののダイナミクス

最近、自己複製パターンという非常にダイナミックな挙動が多くの注目を集めている。それは局在化したパターンがあたかも細胞分裂のように次々と分裂し、自分と同じものを再生してゆくプロセスである。これは実際の化学反応において最初発見され、同時に数理モデルの数値実験においても確認された (図 7)。しかし、それがどのような数理的構造を背景として生まれてきているのかは全く自明ではない。それは自己複製パターンは遷移過程で現れるダイナミクスであり、ある力学系のアトラクターや不変多様体として表現できない。従って、これまでの解析手法では直接取り扱えないからである。最近の研究によって Edge of Folding Points という大域的な分岐構造がそれを生み出していることがわかってきた。これは有限次元の場合で言えば、間欠性を生み出す構造が階層的に連なり、軌道は次々とこれら間欠のダイナミクスを経めぐることに対応する。一つの間欠ダイナミクスから次のダイナミクスへ移るときが分裂過程に対応する。このとき相空間にはこの軌道の近くにはその動きをガイドする不変多様体の枠組はなんら存在せず、軌道は通常点のみからなる相空間を何かにあやつられているかのような動きを見せる。しかしある種の拡張さ

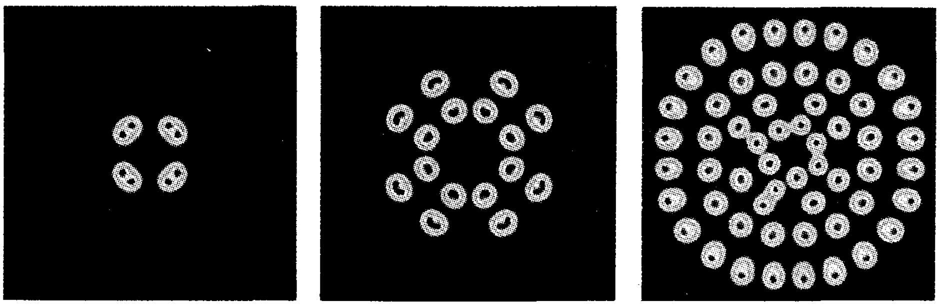

図 7:

Gray-Scott モデルのシミュレーション。１つのスポットが２つのスポットに分裂する。各スポットは自身の周辺に空きがある限り分裂を続け、最終的にはある特徴的な距離をおいて平面を埋め尽くす。

れた相空間で見れば、なにがそのような挙動をさせているかが明瞭に説明できる。それが Edge of Folding Points という構造である。このような大域構造を生み出すもとは個々の非線形性に特質によらず、Bogdanov- Takens 特異点と漸近安定な平衡点をもつシステムに普遍的な構造であることがわかってきている ([8], [11])。

7. 高分子共重合系における形態問題

高分子共重合系においてはその機能と形態が密接に関連している。形態変化を定性的に記述する数理モデルは Cahn-Hilliard 方程式に非局所項が加わった形をとる。この非局所項が meso-scale の安定パターン生み出すもととなる。Global minimizer に対するスケール則並びに界面の厚さが零となる極限における特異極限方程式を導出した。さらに非局所項の存在は Global minimizer のみならず、非常に多くの local minimizer を作り出す。実際、その個数がある特異極限の下で無限大に発散することが厳密に示せる（Rugged Landscape の存在）([9], [10]).

8. 北海道をいかにエンジョイするかについての研究

雪　研究室から３０分でゲレンデへ。雪質抜群、リフトの待ち時間もほとんどなし！
釣　秋には 80cm クラスのサケが釣れる。引きが強い！
食　ともかく素材がいい、素材が！
呑　自然だけではない。ススキノだってあるのだ！

来たれ、若人よ。北の大地へ。

参考文献

[1] R.Kobayashi, A numerical approach to three-dimensional dendritic solidification, Experimental Mathematics **3** (1994) 59-81.

[2] R.Kobayashi, J.A.Warren and W.C.Carter, Vector-valued phase field model for crystallization and grain boundary formation, Physica D **119** (1998) 415-423.

[3] R.Kobayashi, J.A.Warren and W.C.Carter, Modeling grain boundaries using a phase field technique, preprint

[4] R.Kobayashi and Y.Giga, Equations with singular diffusivity, submitted to J.Stat.Phys.

[5] K.Ueda, R.Kobayashi, T.Yanagita. Segregation of granular materials in a rotating tube. In *Statistical Physics: Experiments , Theories and Computer Simulations*, page 141. World Scientific Pub., 1998.

[6] T.Yanagita, K.Kaneko. Modeling and characterization of cloud dynamics. *Phys.Rev.Lett.*, 78(22):4297–4300, 1997.

[7] T.Yanagita. Phenomenology for boiling: A coupled map lattice model. *Chaos*, 3-2:343, 1992.

[8] 西浦 廉政, 非線形問題 I (パターン形成の数理), 現代数学の展開 **7**, 岩波書店 (1999).

[9] Nishiura,Y. and Ohnishi,I., *Some mathematical aspects of the micro- phase separation in diblock copolymers*, Physica D **84**(1995) 31-39.

[10] Nishiura,Y. and Ohnishi,I., *Rugged landscape with fine structure, preprint.*

[11] Nishiura,Y. and Ueyama,D., *A skeleton structure of self-replicating dynamics*, to appear in Physica D.