

10. 粒子の軌跡が決定論的である場合のDLA

東工大 理 田口善弘

§ 1 動機

DLAの研究が盛んである。フラクタルを生じるものの中では、最もシンプルかつ内容豊富なモデルであるからであろう。そのような理由で流行している割には、それでもまだ難しすぎる感がある。そこで、「もっと、もっと、簡単なモデルで、”DLA”を作れないであろうか？」と考えた。これが本研究の動機といえは動機である。至って不真面目な物、という見方もできるかも知れない。

§ 2 簡単化の指針

DLAの取扱の難しさはどこにあるか。こんなことはこれを読んでおられる読者諸子には自明のこととて、それをわざわざ説明するのは釈迦に説法であるかも知れない。それでもあえて説明するならば、不可逆な動的プロセスである上に、プロセスの時間発展が過去の履歴に強く依存すること、しかも、確率過程であること、がDLAを扱う上での最大の困難であろう。そこで、DLAを取扱易くするにはこの点を改善すればよい。しかし、このような困難が、DLAの本質（つまり、出来上がったパターンがフラクタルになること）そのものである可能性がある。その辺の考察をせずに、不用意に簡単化をするとフラクタルが出来なくなってしまうかも知れない。それでは元も子もない。このところがなかなか難しいのである。

それでは、DLAの取扱上の困難のうちフラクタルなパターンが生じるという本質に関係無いのはどの部分であろうか。ここで、注目すべきなのが、次元解析^{1), 2)}の理論である。次元解析の理論では、クラスターの成長確率がラプラス方程式の解の勾配で与えられるというDLAの重要な特徴がまったく使われていない。かといって、本当になんにも使わなかったのでは、DLAになるわけが無い。次元解析の理論では、ラプラス方程式を直接扱う代わりに凝集する粒子の軌跡のフラクタル次元 d_w が、2であるということだけを用いている。一見、これは無謀な近似のように思われるが、少なくとも、結果はシミュレーションで得られたフラクタル次元 $d_f=1.7$ （2次元の場合）と非常によく一致するフラクタル次元を与えてくれる（具体的には $d_f=5/3$ ）。元々、DLAはWitten and Sanderによって、ランダム・ウォークする粒子の凝集のシミュレーション³⁾として提案されたことを考えると、これは、むしろ当然かも知れない。

さて、前置きが長くなったが、この次元解析の理論をヒントにして、DLAをいかに単純化するか。ここでかなり大胆なことをする。つまり、

「拡散粒子でなくても、運動の軌跡のフラクタル次元が2であるような粒子の凝集ならなんでもフラクタルなパターンを形成する。」と仮定してしまうのである。この仮定により、DLAの成長確率がラプラス方程式の解の勾配できまるという重大な特徴が失われることになるが、逆にいうと、もしこの仮定が正しいとすると、ラプラス方程式は何等DLAと関係ないことになり、モデルの大幅な単純化が果たされる。更に、「なぜフラクタルになるのか」という理由を考える際に、ラプラス場、という特定の条件に縛られることなく、より高次の条件での、DLAがフラクタルになる理由、を一般的に論ずることが出来るようになる。

さて、この仮定によって、どのような単純化が可能となるであろうか。DLAのシミュレーションにおいては、拡散粒子が凝集するために、粒子の運動の軌跡自体が確率過程となり、粒子が、いったい何時凝集するのかの予測がまったく出来ない。この事実が、一般にシミュレーションの手間を大幅に増やしている。キリング・サークルの導入や、クラスターから遠くはなれた地点ではランダム・ウォークの1ステップの大きさを大きくする、などのDLAのシミュレーションの高速化の努力は、ほとんどこの点の解決に費やされてきたといっても過言ではないであろう。しかし、上記の仮定に従えば、粒子の軌跡自体に確率過程の要素を導入しなければならないという必然性は、全く無い。フラクタル次元が2でありさえすれば、どのような軌跡でもよいのだから、ペアノ曲線のように、形が最初から解っている図形を運動の軌跡として使ってもよいことになる。つまり、ペアノ曲線に沿って、運動する粒子の凝集をシミュレーションするのである。上記の仮定が正しければ、このような凝集パターンはやはりフラクタルとなり、しかも、粒子の運動自体は、確率過程ではないので、シミュレーションの手間は大幅に節約されることになる。

§ 3. モデルの定義

さて、いよいよ、本研究で扱われたモデルの説明に入ろう。だが、その前に、「軌跡のフラクタル次元」の定義について、考察しておく必要がある。

§ 3. 1 d_w の意味

d_w の意味を把握するには、次元解析の理論に登場する「ボイド」の概念²⁾にたち帰らねばならない。ボイドの概念では、すでにある大きさのDLAのクラスターが存在し、更に新たな粒子が凝集するという場合に次のような条件をおく。即ち、

「クラスターの外辺から距離 r だけ奥に粒子が凝集するためには、大きさ $S(r)=r^{d_w}$ の大きさの穴が空いていなくてはならない。(図1参照)」

この穴のことをポイドと呼ぶ。従って、拡散粒子の代わりに使われる粒子の運動の軌跡は、この $S(r)=r^{d_w}$ によって定義されるフラクタル次元 d_w を持たなくてはならない。つまり、距離 r 進む間に r^{d_w} 個の格子点を訪れる様な軌跡を持っていることが必要になる。このような条件を満たす軌跡であれば、 $S(r)=r^{d_w}$ の大きさのポイドがあって初めて、クラスターの奥に深さ r だけ侵入できることになり、次元解析の考え方からすれば、拡散粒子と等価な運動粒子となるであろう。DLA の場合には $d_w=2$ であるので、平面を埋め尽くすような軌跡ならなんでもよいことになる。本研究で採用した軌跡の形は3つである。第一が、図2に示されるようなイニシエーターとジェネレーターで定義される一種のペアノ曲線である。2番目と3番目が、平面を渦巻状に順にたどっていく軌跡であり、それぞれ正方渦巻、菱形渦巻と名付けることにした(図3参照)。

§ 3. 2 シミュレーションの実際

シミュレーションの実際の手続きはDLAのそれとほとんどおなじである。つまり、クラスターを囲む適当な大きさの閉曲線を描き、その閉曲線上の1点をランダムに選択して粒子の運動の起点とする。DLAであれば、そこから粒子を飛ばし、クラスターに接触するまでランダム・ウォークさせるのだが、本研究のモデルの場合は、その代わりに§ 3. 1で定義された3種類の軌跡のどれかに沿って「決定論的に」運動し凝集することになるのである。そこで、このモデルを、*deterministic diffusion limited aggregation*、略してDDLAと呼ぶことにする。更に、どの軌跡によるシミュレーションなのかを区別するために、ペアノ曲線によるものを *Peano curve limited aggregation* (略してPCLA)、正方渦巻によるものを *square vortex limited aggregation* (略してSVLA)、菱形渦巻によるものを *diamond vortex limited aggregation* (略してDVLA)と呼ぶことにしよう。(注: DDLAの場合、シミュレーションが正方格子で行われたので、「閉曲線」は、クラスターの最大半径 r_{max} より5格子定数だけ大きい一辺の長さを持つ、原点を中心として45°だけ回転した正方形を採用している。詳しくは参考文献4)、5)を参照。)

DDLAのシミュレーションは、この単純化のおかげで、DLAのシミュレーションに比べて、かなり手軽なものになる。まず、軌跡が無限未来まで解っているのでキリング・サークルが要らない。また、詳細は省略するが、ある点から出発した粒子がクラスターのどこに凝集するかを調べるアルゴリズムが並列化可能なのでスーパー・コンピューターが使える。これらのおかげで、東大のS820を用いると1万個のクラスターをわずか15秒で作り出すことが出来る。

図4は出来上がったDDLAのパターンである。PCLAなどはDLAにかなり似ているといって

もよいであろう。実際、回転半径によって求めたDDL Aのフラクタル次元 d_f はそれぞれ、PCL Aが 1.709 ± 0.001 、SVLAが 1.572 ± 0.002 、DVLAが 1.614 ± 0.001 、であった。DL Aでは $d_f=1.7$ といわれているから残念ながら $d_w=2$ ならなんでもよい、というわけには行かなかったが少なくともフラクタルにはなったわけである。かなり、大胆な仮定をおいた割にはまあまあの結果ではないであろうか。更に、もう一つ注目すべき事は、クラスターの外形が菱形となっていることである。これは、格子の異方性の反映として、DL Aでもしばらく前に話題となった現象である。この点でもDDL AはDL Aの特徴を再現しているといえよう。

以上の結果は、DL A「的」なパターン形成でフラクタルが生じることの本質はラプラス場にはないということを暗示している。それでは、なにが本質なのか。この点を解明し、また、DL AとDDL Aとの相違を考察するためにDDL Aの成長確率の分布のマルチフラクタル性を研究することにしよう。このようにいうと「DL Aはラプラス場によって出来るのが定義であり、ラプラス場によらないシミュレーションによってフラクタル次元がDL Aと同じであるパターンが得られたからといって、それが、DL Aとおなじものであると見なすのは早計ではないのか？」といわれそうである。この点については、全くその通りである。しかし、この研究の途上で気付いたことであるが、「どういう性質を備えていれば、DL Aのクラスターといえるのか」という基準が、どうも、一般的に言って、コンセンサスが得られていないように思われる。DL Aの成長確率のマルチフラクタル性はこの、フラクタル次元では定義できない部分を記述するべく導入されたものであったが、次節でみるように、成長確率のマルチフラクタル性を持ってしても、どうも、DL Aの本質は捕らえきれないように思われるのである。

§ 4. DDL Aの成長確率分布のマルチフラクタル性

本節では、DDL Aの成長確率分布のマルチフラクタル性を調べることにする。前節で導入された、3つのDDL Aのうち、フラクタル次元がDL Aのそれ1.7に最も近く、見た目も、最もよく似ていると思われるPCL Aをとりあげよう。成長確率分布のマルチフラクタル性を調べるに当たっては、Amitranoらの方法を採用した⁶⁾。クラスターの表面を Γ と記述する。 Γ 上の格子点を i とし、その点の成長確率を p_i としよう。この時、成長確率分布の集合 $\{p_i\}$ の一般化次元 D_q は、

$$\sum_{i \in \Gamma} p_i^q \sim L^{-(q-1)D_q}$$

で定義される。但し、 L はクラスターの特徴的な長さ、具体的には、回転半径などである。詳細は、参考文献4)、5)を見て頂くとして、結果だけ述べれば、図5のような、一般化次元

$D_q (-5 \leq q \leq 3)$ が得られた (◎)。DLA の場合⁷⁾ (○) と比較すると、マルチフラクタル性がほとんど無いといってよいほど失われていることが解ると思う。最も特徴的なのは、 $D_0 = d_f/2$ となっていることで、これは、 $D_0 \sim d_f$ である DLA とはほとんど定性的に異なっていると思われる。まがりなりにも、DLA を模倣したダイナミクスを採用し、出来たパターンも DLA とよく似ている上に、フラクタル次元も 1.709 ± 0.001 と DLA に近いにしてはこの違いはあまりにも極端である。この結果を信じるとすれば、DLA 「的」な凝集パターンの本質は、成長確率分布がマルチフラクタル性を示すということにはないと結論せざるおえない。それでは、いったい、何が「本質」なのであろうか。

§ 5. 遮蔽効果

まず、なぜ DDLA と DLA の D_q が、こんなにもひどくかけ離れてしまうのか、について考えよう。冷静に考えれば、これはひどく当たり前なことである。DLA の D_q の強い q 依存性は、よく知られているように、DLA クラスター表面の成長確率の集合 $\{p_i\}$ が、広い分布を持っていること、言い換えると、 p_i が大きな値から、小さな値まで、幅広く取りうるということである。このような p_i の分布のために、 q が正で大きいときには、 p_i の大きな値の部分が、 q が負に大きいときには、 p_i の小さな値の部分が効いて来ることになり、 D_q に強い q 依存性がでるのである。DDLA にこれが無いと言うことは、 p_i の値がほとんどバラついていないということを示す。実際、成長確率分布 $P(p_i)$ を計算してみると、図 6 の様に、非常に大きなピークのある分布となっており、 p_i の値が、広く分布してはいないことが解る。具体的に積分確率分布を計算してみると、 $P(p_i \leq 0.01) = 0.87$ となる。つまり、成長確率 p_i がゼロでない格子点の実に 9 割近くまでが、ほぼ同じ値を取るようになっていのである。DLA の場合の $P(p_i)$ の計算例が見つからなかったので、定量的な比較は出来なかったが、DDLA の場合は、このような、 p_i の値の分布の局在性のために、 D_q の q 依存性が、失われているものと思われる。

このような分布の起源は簡単なことで、DDLA の場合、次元解析のボイドの概念が正確に反映されるようにモデルを設定したため、 $S(r) = r^{d_w}$ の大きさのボイドが空いていない限り、凝集粒子は、クラスターの内部に距離 r 以上侵入することが出来ない。このため、DLA ならば非常に小さい成長確率を持つような格子点が、DDLA では、厳密に 0 の成長確率を持つようになってしまい、 p_i の広い分布が抑えられてしまったのである。

実際、DDLA の場合、 $D_0 = d_f/2$ というのは、まさにこの反映で、 Γ 上の成長確率がゼロでない格子点が、クラスターの総格子点数 N のオーダーではなく、 $N^{1/2}$ のオーダーしか無いと言うことを示しているのである。にもかかわらず、これほど DLA に近いパターンが得られるということは、非

常に興味深いものがあるのではないだろうか。

こうなると、DLAとDDLAの共通点は遮蔽効果のみである。次元解析の理論では、クラ

スターへの粒子の侵入深さ l の L 依存性が重要であり、指数 ξ を $l \sim L^\xi$ で定義する。詳細は省略するが、クラスターの外側から、深さ l までの格子点がすべて同じ成長確率を持つ、という大胆な近似をすると、DDLAでは、成長確率がゼロでない格子点の総数が $N^{1/2}$ のオーダーであることより、 $\xi = (2 - d_f)/2$ となり、徳山-川崎¹⁾の理論と一致する値を得る。これは、単なる偶然かも知れないが次元解析の理論を忠実に再現するDDLAのモデルで、次元解析の理論が予言する侵入深さと同じものが得られたという点は、注目に値するであろう。

§ 6. まとめ

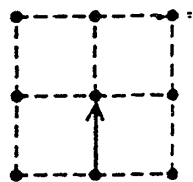
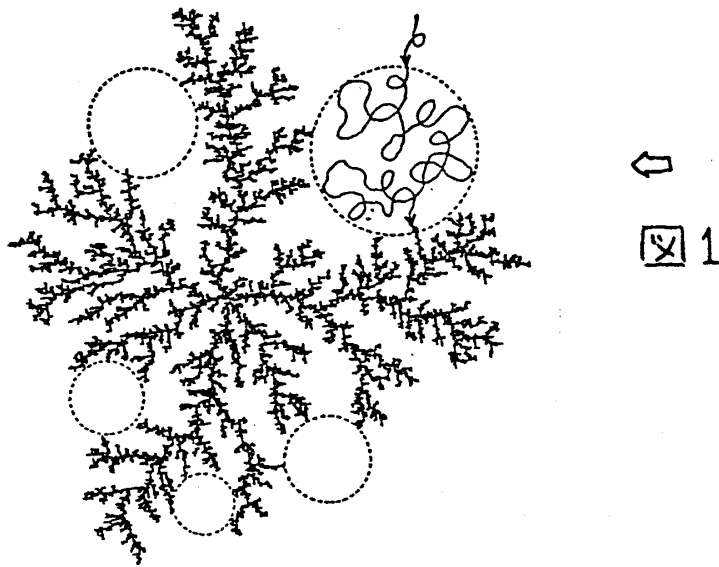
本研究では、DLAより簡単なアルゴリズムを用いてDLA（もどき）をつくるということを目指し、これに成功した。この結果は、ラプラス場の解によって決まる成長確率も、成長確率分布のマルチフラクタル性もDLA「的」な凝集パターンの本質ではないということを示唆するものである。両者の共通点は、遮蔽効果にしかないということから、この本質は遮蔽効果そのものにあると思われる。即ち、ラプラス場やマルチフラクタル性がなくてもDLA「的」なパターン形成は生じるのである。この点は果してそもそも、DLAの定義というものがなんであるのかということが（少なくとも僕には）はっきりしない以上確定的な事は言えない。DDLAとDLAは、全く違うメカニズムで出来るのに同じものが出来ているように見えるだけかも知れない。まあ、DDLAの産みの親としては、そうでないことを祈っているのだが・・・。

長谷隆先生には成長確率分布のマルチフラクタル性の研究をすることを勧めて頂き感謝しております。また、松下貢先生には、浅学をも省みずに暴言をはいていたにも関わらず、懇切丁寧な討論をして頂き、感謝しております。

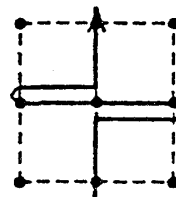
参考文献

- 1) M. Tokuyama and K. Kawasaki *Phys. Lett.* 100A (1984) 337
- 2) K. Honda, H. Toyoki and M. Matsushita *J. Phys. Soc. Jpn.* 55 (1986) 707 ; M. Matsushita, K. Honda, H. Toyoki, Y. Hayakawa and H. Kondo *J. Phys. Soc. Jpn.* 55 (1986) 2618

- 3) T. A. Witten, Jr and L. M. Sander
Phys. Rev. Lett. 47 (1981) 1400
- 4) Y-h. Taguchi *J. Phys. A* (1988) submitted
- 5) Y-h. Taguchi *J. Phys. A* (1988) submitted
- 6) C. Amitrano, A. Coniglio and F. di Libert
o *Phys. Rev. Lett.* 57 (1986) 1016
- 7) Y. Hayakawa, S. Sato and M. Matsushita
Phys. Rev. A36 (1987) 1963



イニシエター



ジェネレーター

図 2

図4

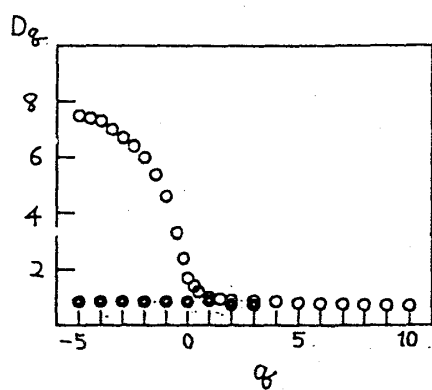
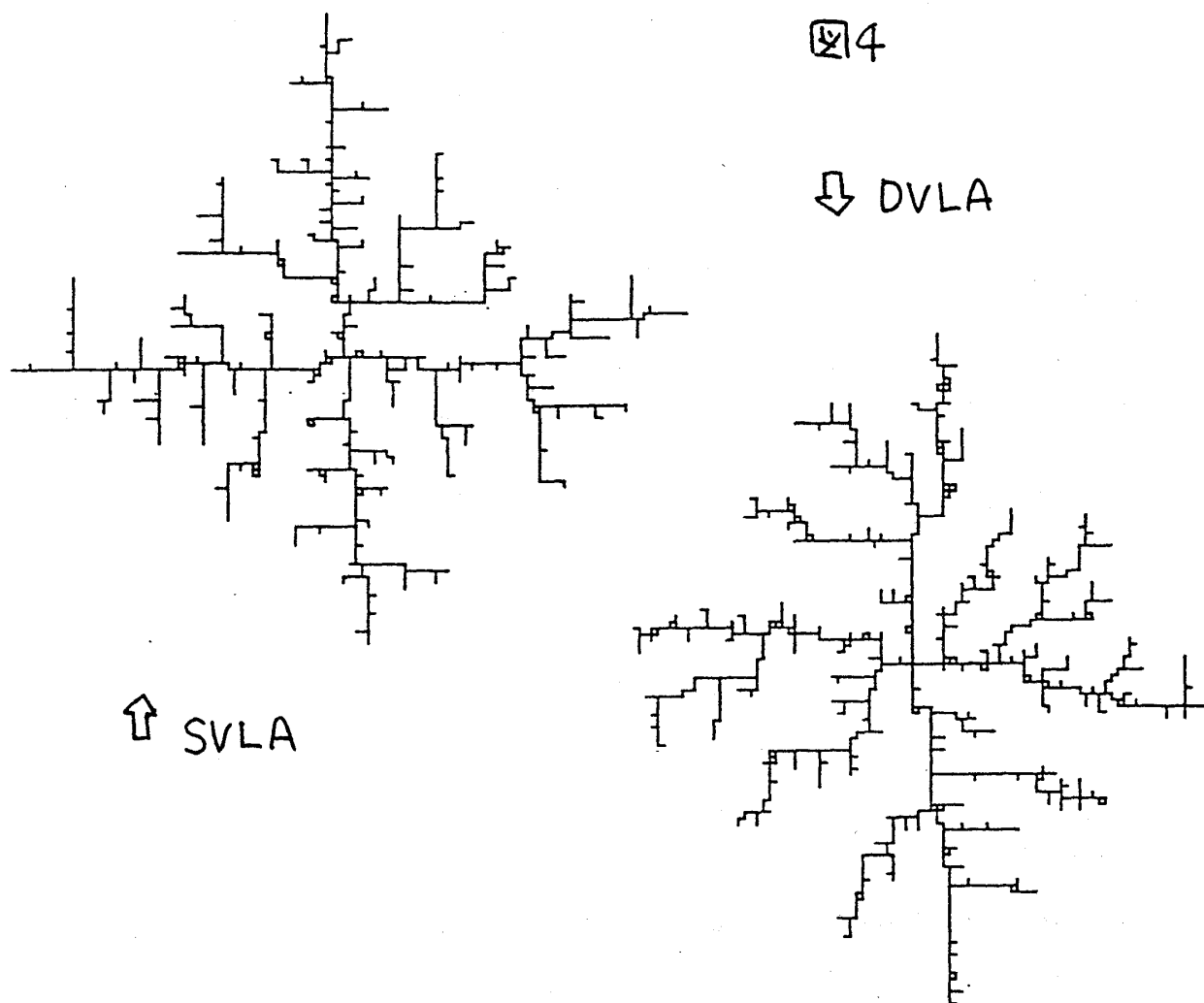


図5

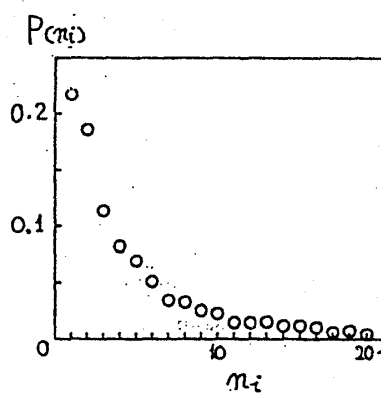


図6