

2次元セルオートマトンの相転移と結晶化

日本原子力研究所 エネルギーシステム研究部 鈴木 知明¹

概要

The cellular automata (CAs) which lead to uniform regular patterns, namely crystalline CAs are discussed. The two-dimensional and two-states-per-cell CAs with von Neumann neighborhood are particularly focused. First, various CA evolution patterns are analysed by the entropy functions, and it is suggested that there are three types of CAs, i.e. noncrystalline, crystalline and chaotic. Analyses using a newly-introduced rule parameter, called μ parameter, ensure that the crystalline CAs appear at the phase transition point between noncrystalline and chaotic CAs. The observed phenomena are probably considered as a generalised model of regular-and-static pattern's growth which can be seen in various complex systems.

1 はじめに

宇宙、天気、生命システム、経済システムのように、自然界では無数の要素が相互作用することにより、予想だにしない時空パターンが出現する。このようなパターンは系の外部からの拘束によって生じるわけではなく、系自身が獲得したパターンである。このような現象は自己組織化と呼ばれ、多くの科学者の興味の対象になってきた [1, 2, 3, 4]。特定の自己組織化の起きる条件、メカニズムはどのようなものであろうか。

このことを知るための一つの方法として、同じような自己組織化が起きる例を多数集め、それに共通する性質を探ることが考えられる。このような例を自然界に求める方法もあるが、計算機によるダイナミクスを用いれば、効率よく自己組織化の例を獲得できる。本稿ではこのダイナミクスとしてセルオートマトン (CA) を採用する。これまで CA を用いて自己組織化に関する様々な研究が行われてきた [5, 6, 7, 8, 9] が、本研究では **Figure 1** のようにランダムな空間パターンから規則的で時間的に静的なパターンが広がる CA を考える。我々はこの自己組織化を「結晶化」と呼ぶことにする。ただしここでの結晶化の意味は、物性物理学におけるそれだけでなく、様々な複雑系で生じる規則的かつ静的なパターンが広がる現象一般をさす。例えば生物学における組織の生成やある経済慣行の蔓延などがこれにあたる。すなわち、本研究では規則的パターンが固化されていく現象一般に共通する本質を CA を用いて考察する。

¹319-1195 茨城県那珂郡東海村 E-mail: suzudo@clsu3a0.tokai.jaeri.ne.jp

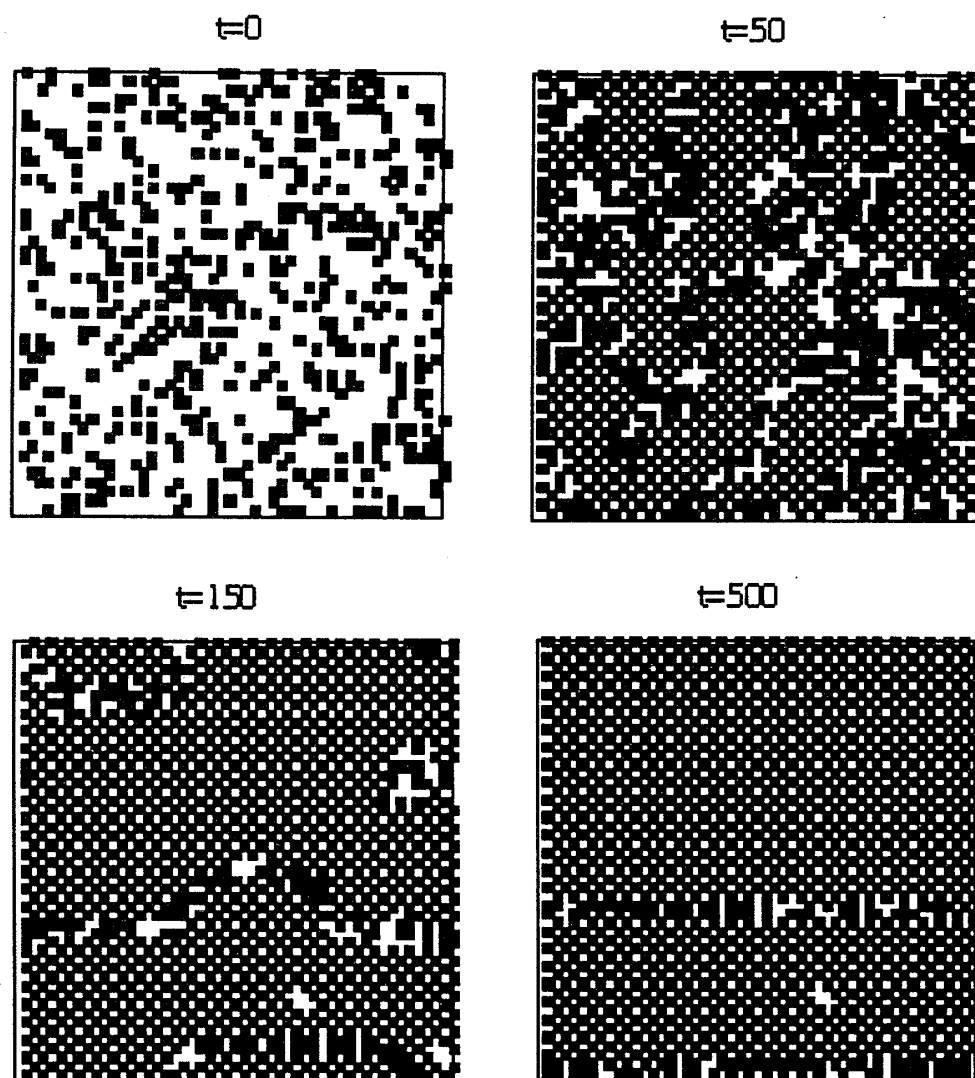


Figure 1: セルオートマトンにおける結晶化

2 解析に用いたセルオートマトン

まず、2次元離散空間 (i, j) を考える。ただし、 $i \in \{0, 1, \dots, N\}$ 、 $j \in \{0, 1, \dots, N\}$ である。離散化されたそれぞれの位置 (i, j) をサイト、そしてサイト上の離散化された微小空間をセルと呼ぶ。各セルには状態変数 $a_{i,j}$ が定義されて0（空状態）または1（占有状態）の状態をとるものとする。状態変数の値は離散時間 t （ただし $t \in \{0, 1, 2, \dots\}$ ）ごとに更新され、その値は現時点でのそのセルと前後左右の近傍の4サイトのセルの状態変数によって定義される写像

$$a_{i,j}(t) = f[a_{i-1,j}(t-1), a_{i+1,j}(t-1), a_{i,j-1}(t-1), a_{i,j+1}(t-1), a_{i,j}(t-1)], \quad (1)$$

によって決定される。従って、セルが作るダイナミクスすなわち CA は決定論的である。自分自身も含めた近傍のセルパターンは全部で 32 パターン存在するため、32 の写像を定

義しなくてはならない。これら一式の写像群をルールと呼ぶ。ただし、これらのうち1つの写像は以下のように常に0を出力するようにする。

$$f(0,0,0,0,0) = 0, \quad (2)$$

これは、空状態のみから占有状態が現れるのを禁止するためである。

さて、ルールは式 (1) のような形式でも定義できるが、

$$a_{i,j}(t) = g[a_{i,j}(t-1), a_{i-1,j}(t-1) + a_{i+1,j}(t-1) + a_{i,j-1}(t-1) + a_{i,j+1}(t-1)], \quad (3)$$

のように近傍の値の和によって次の時刻の状態を決定するルール形式もある。これらのルールは totalistic ルールまたはより厳密に outer-totalistic ルールと呼ばれる。式 (3) によって定義されるルールはすべて回転対称である。すなわち、ある近傍パターンとそれを 90 度、または 180 度回転した近傍パターンからは同じ更新結果が得られる。この回転対称性によって、セル空間は等方的な空間になる。本研究で用いられたルールは outer-totalistic ルールを特別の場合として含んだ回転対称のルールのみである。また、明らかに結晶化を引き起こさないルールが存在するのでこれらをあらかじめ取り除いておく。例えば、最終的にすべてのセルが同じ状態になってしまう CA がある。ウルフラムはセルオートマトンを 4 つのクラスに分類した [6] が、その中のクラス 1 がこれに相当する。また結晶化 CA ではセルどうしが相互作用しながら規則パターンを作っていく、よってセルの時間発展が局所化してしまう場合、すなわちウルフラムのクラス 2 の CA は **Figure 1** のような時間発展ができない。クラス 1 および 2 は、以下の条件を付加して取り除くことができる [10]。

$$g(0,1) = 1, \text{ and } \{g(1,3) = 0 \text{ or } g(1,4) = 0\} \quad (4)$$

解析に用いた CA は以上の条件を満たした約 800 種類のルールで、初期状態を **Figure 1** のようにランダムな状態にしてすべてのケースを実行した。次節ではそれらの解析についてのべる。

さて、また本研究で用いられている CA には長期にわたって局所化された複雑な構造が発展するクラス 4 は存在しない。これはゲーム・オブ・ライフのように占有状態を持つセル数が拡大するかどうか明確に予測できないような CA が 2 値状態数でフォンノイマン型近傍を持つタイプには存在しないことによる。さて、ウルフラムクラスのスキームでは 1 から 4 までのクラスのみが定義されており、ここで実行された CA はすべてクラス 3 のカオス的 CA になってしまい、結晶化する CA に対応するクラスがない。この点において、ウルフラムクラスは不完全であると言わざるを得ない。この修正に関しては解析結果とともに次節で述べることにする。

3 解析結果

3.1 セルオートマトンの統計的指標

CA の結晶化を評価するためには、その空間パターンの情報エントロピーを見るのが良い。情報エントロピーは以下の式で定義される。

$$H \equiv - \sum_k P^k \log(P^k), \quad (5)$$

ここで、 P^k は事象 k が起る確率であり、上式によって統計的変数の規則性、ランダム性を評価できる。ここで任意の 4 個の近接したセル (i, j) 、 $(i+1, j)$ 、 $(i, j+1)$ 及び $(i+1, j+1)$ を考える。この 4 個のセル状態の総パターン数は $2^4 = 16$ 個である。ここで $P_s^k(\tau)$ をこの 4 個のセルにおいて、ある空間パターン $k \in \{0, 1, 2, \dots, 15\}$ が起る確率とすれば、空間全体のエントロピーは以下になる。ただし τ は時間ステップを表す。

$$H_s(\tau) \equiv - \sum_k P_s^k(\tau) \log_{16}(P_s^k(\tau)), \quad (6)$$

ここに対数の底に 16 としているが、これはエントロピーが 0 と 1 の間の値をとるようにするためである。当然ながら、 H_s が大きい、すなわち 1 に近い場合にはセル空間はランダムで、 H_s が小さい、すなわち 0 に近い場合にはセル空間は規則的でありこの場合は結晶化していると見なすことができる。

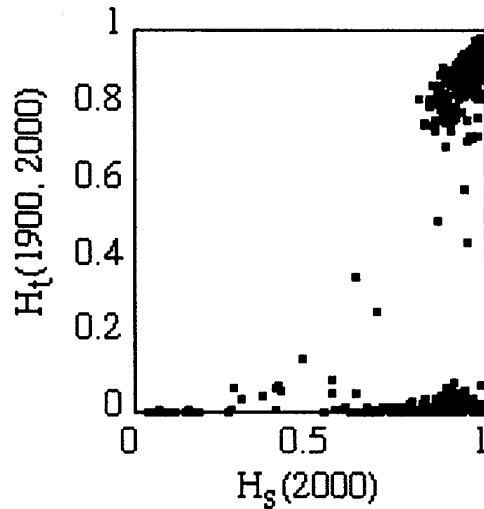


Figure 2: エントロピーの統計的分布

空間エントロピーと同様に、CA の時間変化パターンのエントロピーも同じように定義できる。まず、任意のセル (i, j) を考える。このセルの 1 時間ステップごとの変化のパターンは $0 \rightarrow 0$ 、 $0 \rightarrow 1$ 、 $1 \rightarrow 0$ 、及び $1 \rightarrow 1$ の 4 パターンである。これらのパターンを再度 $k \in \{0, 1, 2, 3\}$ で表し、それらの出現確率を $P_t^{k,(i,j)}$ と書けば、セル位置 (i, j) での時間変化のエントロピーは

$$H_t^{(i,j)} \equiv - \sum_k P_t^{k,(i,j)}(\tau_0, \tau_1) \log_4(P_t^{k,(i,j)}(\tau_0, \tau_1)), \quad (7)$$

で表すことができる。ここに τ_0, τ_1 は解析に用いるデータの始まりと終わりの時間ステップである。上式において対数の底を 4 としているのは、空間エントロピーの計算と同様に時間変化のエントロピーの値が 0 から 1 の間の値をとるようにするためである。セル空間全体の時間変化のエントロピー H_t は各セルの値 $H_t(i, j)$ を平均することにより求まり、それを 2 つめの CA の統計的指標とする。**Figure 2** はそれぞれの CA から得られた空間エントロピー及び時間エントロピーを $H_s - H_t$ 平面上の 1 点で表し、CA の規則性を統計的に表現したものである。ただし、空間エントロピーは実行から 2000 ステップ後の CA パターンから、また時間エントロピーは 1900 ステップから 2000 ステップまでの時間発展パターンから求めた。このようにして求められた空間および時間エントロピーはランダムな配置から開始される限り初期値に大きく依存しないことも確認された。この図を用いて CA を分類することができる。まず、図右上の高 H_s および高 H_t の場合には、空間的にも時間的にもランダムであることからカオス的 CA と分類できる。また図の下方に集まっているのは、低 H_t すなわち時間的变化が停止またはほぼ停止したものであり静的 CA と見なせる。静的 CA は低 H_s の結晶質 CA と、高 H_s の非晶質 CA に分類される。ただし、その境界ははっきりしていない。また図左上には CA が存在しない。このことは規則的な空間パターンを維持したまま、時間的にランダムな発展をし続ける CA は存在しないことを示している。

3.2 μ パラメータ

さて、ここでは **Figure 2** の結果をルール定義から考察するため、各ルールに一意的に決まるパラメータを導入する。一般に結晶質 CA は非晶質 CA に比べて静的な時間変化に達するまでの過渡期が長い。従って、上記 3 種類の CA は静的な時間変化に達するまでの過渡期が短いもの（非晶質 CA）、長いもの（結晶質 CA）および無限のもの（カオス的 CA）というように視点を変えても分類できる。最も短い過渡期を持つ CA は

$$g(0, i) = 0 \text{ and } g(1, i) = 1 (i = 0, \dots, 4), \quad (8)$$

によって定義された CA であり、どのような初期状態からでも全く変化せず過渡期の長さは 0 である。過渡期の長さが 1 以上になるためには、セル状態が変化する近傍パターンが少なくとも 1 つ必要である。ここでセル状態が変化する近傍パターン数が全近傍パターン数に占める割合いを

$$\mu = \frac{N - m}{N}, \quad (9)$$

で表すことにする。ここに N は総近傍パターン数で今問題にしている CA では $2^5 = 32$ である。また、 m は次の時間ステップに変化しない近傍パターン数であり、(8) 式の場合に

は統べてのエントリーで変化しないので $m = 32$ であり、従って $\mu = 0$ である。 μ が 0 から徐々に大きくなっていくとともに、過渡期の長さも長くなる。従って、 μ パラメータは過渡期の長さに関連したルール指標と考えられる。

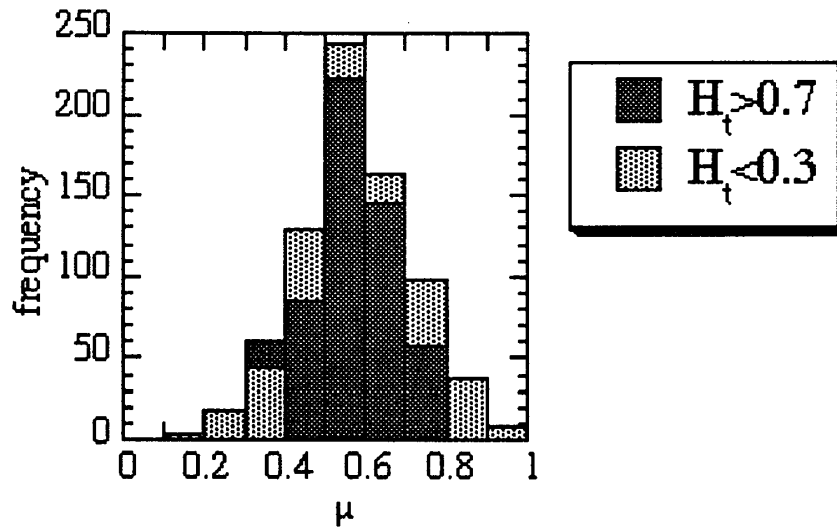


Figure 3: 静的 CA とカオスの CA における μ パラメータの分布

Figure 3 は Figure 2 の統計において静的 ($H_t < 0.3$) とカオスの ($H_t > 0.7$) に分類された CA の μ パラメータの度数分布を示したものである。静的 CA の比率は μ 値の両端で高く、一方カオスの CA では μ 値の中央で比率が高くなっている。従って、統計的に多くの場合、 μ が 0 から徐々に増していくに従って、最初過渡期の短い静的な CA がある μ で過渡期が無限のカオスの CA に変化するという描像が浮かび上がる。 $\mu > 0.5$ では逆に、ある μ で過渡期の短い CA に変化し、 $\mu = 1$ では各セル状態が近傍パターン関わらず常に反転するするためセル空間全体が周期 2 で振動する。このような周期的な CA も時間エントロピーは小さくなり、静的 CA とみなされる。

ここで議論を簡単にするため、 $\mu < 0.5$ の範囲で起る静的な CA からカオスの CA への変化のみに注目する。また、セル空間全体のパターンと 1 個のセル状態の中間的概念として「局所的パターン」を考える。局所的パターンを形成するセルの数は特に定めず、2 以上全セル数未満とする。さて $\mu > 0$ でも 0 に近い場合には多くの種類の局所パターンが定常になる。無論、それらの局所パターンの周辺の状態が変化すればそのパターンが将来変化する可能性もあるが、 $\mu \approx 0$ の場合にはいずれ定常な局所パターンはお互い結合しあいセル全体に広がってしまう。この場合多くの局所パターン種が定常であるため、セル空間全体が空間的にランダムなパターンなる。これが静的で非晶質な CA ができるメカニズムであり、このような μ パラメータを持った CA は、 $H_s - H_t$ 平面内で右下に分布することになる。それに対して、 μ が大きい場合には、変化する近傍パターンが多いため定常な局所パターンがあまり存在できず、仮に一時的に形成されても周辺から崩されてしまい、決して定常な局所パターンがセル空間全体に広がることはない。これがカオスの CA ができるメカニズムであり、 $H_s - H_t$ 平面内で右上に分布することになる。これら 2 つの CA 種の間段階では、定常となる局所パターン種が限れており、その境界においてパターン

が合致するものは定常パターンに組み込まれるが、そうでないものはパターンが合致するまで変化し続ける。このような過程を経ると、規則的パターンが徐々に成長し、最終的には静的状態になる。これが結晶質 CA が形成されるメカニズムであり、 $H_s - H_t$ 平面内で左下に分布することになる。上記のような相変化が起きる μ の値を臨界 μ 値 (μ_c) と呼ぶことにする。 μ_c は臨界 λ 値 [11] と同様に統計的な幅を持っていて一意的に決定できない。

さてラングトンはウルフラムの 4 つのクラスが λ パラメータに関連づけられることを主張した [11]。すなわち、 λ パラメータが 0 から大きくなっていくに従って、クラス 1 が 2 および 4 を経て 3 になるという主張である。さて我々はすでに、クラス 1、2 及び 4 を最初から除外している。よって残りが静的 CA とカオスの CA (すなわちクラス 3) に分けられる。また、静的 CA でカオスとの境界に結晶化する CA が存在する。これらは上記の議論のように μ パラメータに関連づけられる。Figure 4 に λ および μ による CA の分類を示した。このように、 μ パラメータはウルフラムクラスではクラス 3 と見なされていたルール空間を 3 つに分割する。

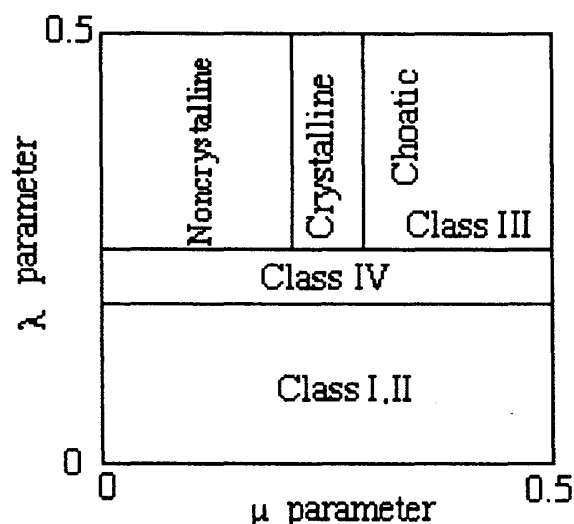


Figure 4: λ および μ パラメータによる CA の分類

最後に、自然界での結晶化とここで議論された CA の結晶化を比較する。静的 CA およびカオスの CA を、それぞれ物質の固相と液相と考え、 μ パラメータは温度、 μ_c は融点と対応させる。また初期状態はランダムで液相と考える。まず、 $\mu \ll \mu_c$ の場合には、液体が急激に冷やされる場合に相当する。このような場合自然界では非晶質ができるが、CA の場合もすでに見てきたように同様である。 $\mu \approx \mu_c$ の場合には、液体が徐々に冷やされる場合に相当する。このような場合、自然界では結晶化が起きるが、CA の場合も同様である。また、 $\mu \gg \mu_c$ の場合には、液体は固化せずに液体のままである。この場合も、自然界と CA は類似している。以上、巨視的な面の類似性を見てきたが、微視的にも比較してみる。自然界の結晶化は、「すでに出来上がっている結晶部分のパターンに液体中の分子が合致する場合に、それが結晶部分に組み込まれる」ことによって進行する。すでに述べたように、CA の結晶化のメカニズムもこれに酷似している。

4 結論

以上の議論をまとめると、CA の結晶化は静的 CA がカオス的 CA に変化する相転移点すなわちカオスの縁において出現し、このような変化は μ パラメータに関連付けられる。ランダムな状態から規則的なパターンが形成されることを複雑の一形態と考えれば、ここで得られた結果はラングトンの「カオスの縁において複雑性が増す」という主張を支持している。ただし、ラングトンの主張した λ パラメータの変化によるカオスの縁では計算能力が高くなるという複雑性であるが、それと μ パラメータの場合には自己組織化能力の一つである結晶化能力が高くなるという意味である。生命などの自然界で見られる高度な複雑系はこれら両方の能力を有している。

参考文献

- [1] Haken, H. "Synergetics -An Introduction", 1977 *Springer-Verlag, Berlin*.
- [2] Nicolis, G. and Prigogine, I. "Self-organization in Nonequilibrium systems", 1977 *Wiley, New York*.
- [3] Nicolis, G. and Prigogine, I. "Exploring complexity", 1989 *R. Piper GmbH and Co. KG Verlag, Munchen*.
- [4] edited by Nijhout, H. F., Nadel, L. and Stein, D. L. "Pattern formation in the physical and biological sciences", 1997 *Addison-Wesley Publishing Company*.
- [5] Wolfram, S. "Universality and complexity in cellular automata", 1983 *Rev. Mod. Phys.*, **55**, **3**, 601-644.
- [6] Wolfram, S. "Statistical mechanics of cellular automata", 1984 *Physica D*, **10**, 1-35.
- [7] Packard, N. and Wolfram, S. "Two-dimensional cellular automata", 1985 *J. Statistical Physics*, **38**, **5/6**, 901-946.
- [8] Dewdney, A. K. "Computer recreations", 1989 *Sci. Am.*, **261** August, 102-105.
- [9] Fisch, R., Gravner, J. and Griffeath, D. "Cyclic cellular automata in two dimensions", 1990 in: *T.E. Harris Festschrift (Birkhauser, Basel)*.
- [10] Suzudo, T. "Crystallisation of 2-dimensional cellular automata", 1999 *Complex International*, **Vol. 6**, (online journal at <http://www.csu.edu.au/ci/>).
- [11] Langton, C. G. "Computation at the edge of chaos: phase transitions and emergent computation", 1990 *Physica D*, **42**, 12-37.