

並列処理させた複数の動的パーコレーションモデル によって生じる非線形振動子の結合

神奈川工科大学 山崎 信孝(Nobutaka Yamazaki)・本田 数博(Kazuhiro Honda)

Course of Applied Chemistry
Kanagawa Institute of Technology

最近、水素結合性分子である水溶媒がメゾスコピック領域において複雑な動的クラスター形成挙動を示すことを超短 (fs~ps) パルスレーザー分光から断片的であるが明らかになりつつある。メゾスコピック領域は非線形・非平衡・開放系場であることから理論は未だ成功していない。近年注目されることの生体関連物質(蛋白など)はメゾスコピックな空間サイズである。活性構造(タンパク質のホールディング等)は周りに形成する水の動的挙動により決定されまたそれらが関与する電子移動反応も水の動的挙動と深い関係性があると考えられる。加えてクラスター間の相互作用に対する階層性の問題は理論・コンピュータシミュレーション・実験のいずれにおいても未だ検討されていない。

我々はこれまで確率論を基礎とした動的パーコレーションモデルによる非平衡系下におけるクラスター成長について検討してきた。これまでの知見としてクラスター形成の動的挙動は非線形な揺らぎを有することを認めることが出来た。また非線形振動する2つのクラスター成長を結合させるとそれらの成長は顕著な非線形引き込み現象が発現することを見出した。今回、結合数を3つに増やすことによりそれらのクラスターの動的挙動に対し複雑性の増大が確認できるかを検討した。特に確率論的なプロセスから生み出される決定論的なプロセス生成に対し詳細釣り合いの原理の破れに着目して検討した。

本稿は、計算モデルの説明・シミュレーション結果・決定論的なモデルの説明・シミュレーションとの対応・決定論では対応が難しい条件の検討へと進む

I 計算モデルの説明

動的パーコレーションモデル

【サイトパーコレーション】

本モデルの基本モデルはサイトパーコレーションモデルである。サイトパーコレーションはあるフィールドを格子で区切りその格子に粒子をランダムに複数配置したときに構築されるパターンを解析するものである。

具体的には、図 1.1 のようなフィールド (A) 内に設けた格子に粒子 (十字) を配置する (B)。フィールド内のすべての格子に対し実際に配置した粒子数の比を被覆率とし、被覆率を変化させることでフィールド内のパターンは変化する。また、クラスター

一の定義は粒子同士が隣接している全体の塊であり、図の例では粒子が他の粒子と上下左右いずれかと隣接していれば結合していると判断し、その結合によって形成された塊がクラスターである。本稿は 100×100 の正方格子を扱う。

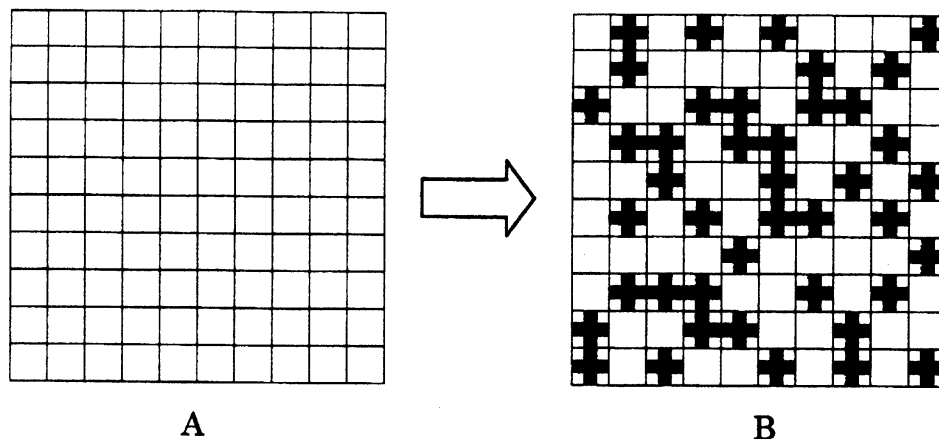


図 1.1 サイトパーコレーション模式図

【粒子の出し入れ】

上記で説明したモデルは、粒子の時間変化がないので言わば静的パーコレーションである。これを動的パーコレーションとするのに粒子の出し入れを行った。時間は粒子の消去の後に挿入をするというのを1ステップとし、そのステップ数を時間の経過とした。したがって、動的パーコレーションは、サイトパーコレーションの実行後、粒子の出し入れのステップを繰り返すことで実現される。そのステップ処理において、粒子の結合によるフィードバックがあるかないか（以下“結合あり”，“結合なし”）によって比較検討した。

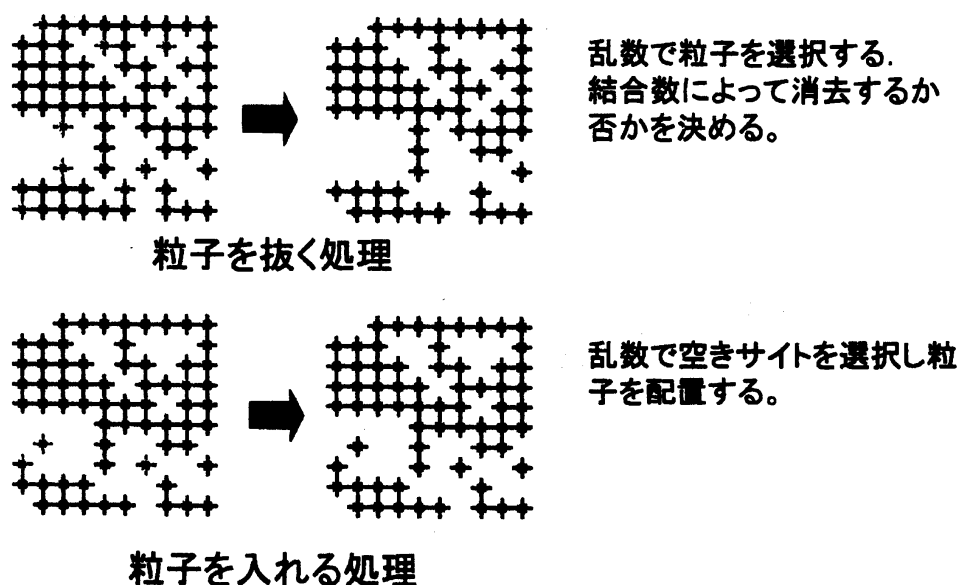


図 1.2 粒子の出し入れの模式図

1ステップの処理のモードは図 1.2 に示す。粒子消去の処理（図 1.2 上段）は、その候補をランダムに n 個選択する。次に選択された粒子の結合数を計算する。そして、結合数によって粒子の消去を行う。粒子挿入の処理（図 1.2 下段）は先ほど抜いた粒子数分をランダムに空いているサイトに挿入する。

粒子消去の結合数による判定は、図 1.3 で示すように“結合あり”では結合数 3 以上は消去されないが“結合なし”では結合数に関係なく選択されたものは無条件に消去される。

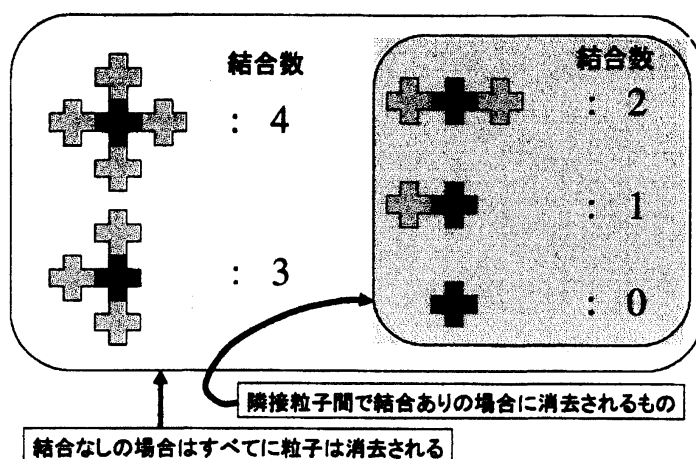


図 1.3 粒子消去の判定

複数の動的パーコレーションモデル

【粒子の出し入れ及び交換】

さらに、その動的パーコレーションモデルを 3 つ関係させたときのクラスター成長に影響する粒子数等の動的変動について調べた。

粒子の消去は図 1.4 に示す。単一処理で述べた方法で粒子消去判定を行うが、消去候補の粒子数は 3 つとも n で一致している。しかし“結合あり”によっては実際に消去される粒子数は一般に一致しない。また、消去された全体の粒子数はいったんバッファに保存される。

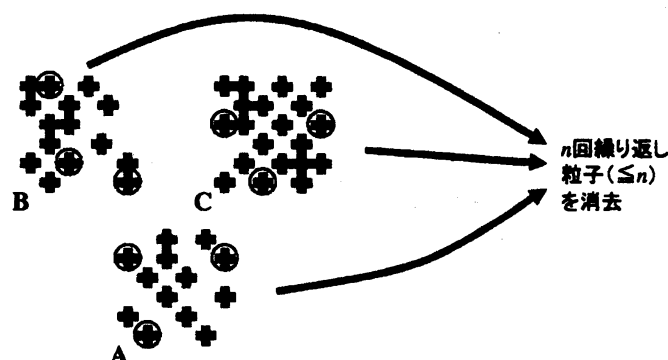


図 1.4 3 フィールド同時粒子消去の判定

粒子の挿入は図 1.5 に示す。粒子消去時に記憶させておいた粒子数分を挿入する際の配分はそれぞれのフィールドに比例した配分をした。

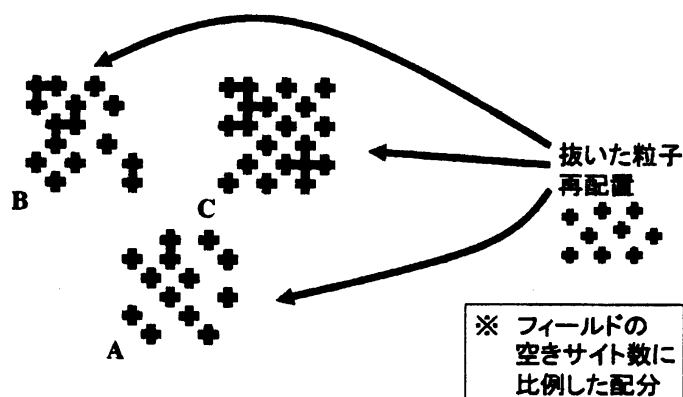


図 1.5 3 フィールド同時粒子挿入の判定

以上のルールによって3つの動的パーコレーションの“結合なし”、“結合あり”におけるステップ数に対する粒子数の変化について検討した。ただし計算結果はすべて $n=10$ とした。

II シミュレーション結果及び考察

“結合なし”による動的パーコレーションの計算によって算出された各フィールド（パーコレーション A, B, C）の粒子数の変化を図 2-1 に示す。この図は横軸がステップ数（時間）縦軸は粒子数を示しており初期粒子数はそれぞれ $(P_{A0}, P_{B0}, P_{C0}) = (2000, 6000, 7000)$ である。この結果は1700ステップ以降それぞれの粒子数は $(2000 + 6000 + 7000) / 3 = 5000$ 付近をわずかに揺らぎながらも平衡状態であった。一方、“結合あり”にした結果は図 2-2 に示すようにごく初期においては平衡値に近づこうとするが、その後粒子数の偏りが生じた。これは、結合によるフィードバックが大きくなり粒子数の変化が反発するようになった。次に“結合なし”で初期値 $(P_{A0}, P_{B0}, P_{C0}) = (1000, 2000, 3000)$ としたときの結果は図 2-3 に示す。これも図 2-1 と同様に平衡値 2000 で落ち着いた。そして図 2-4 は“結合あり”にしたものであるが、これは図 2-2 のときとは異なり緩やかに平衡値に向かった。これにより結合による粒子消去を阻止するフィードバックが初期値の粒子数に依存していることがシミュレーションによって示された。

ここで実際のパーコレーションパターンはステップ数に対してどう変化しているかを図 2-5 で示した。図 2-5 は例として $(P_{A0}, P_{B0}, P_{C0}) = (2000, 6000, 7000)$ の条件で計算開始から 100 ステップと 3000 ステップのパターンについて検討した。ここで結合数が3以上の粒子を強調した。それは“結合あり”に関してはそのような粒子は消去できないためパターン変化に重要な役割があるためである。その粒子数の表記はフィールドに対してそれぞれ P_A^*, P_B^*, P_C^* とした。

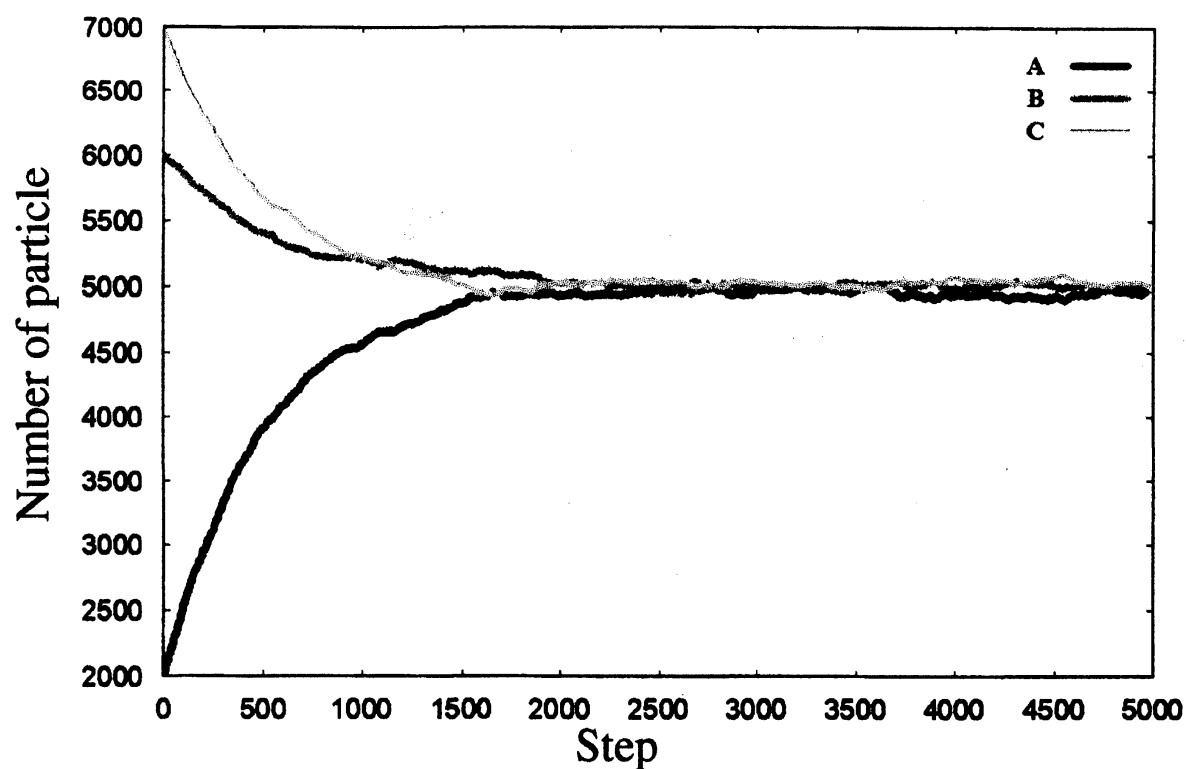


図 2-1 “結合なし” (P_{A0}, P_{B0}, P_{C0}) = (2000, 6000, 7000) における粒子数の変化

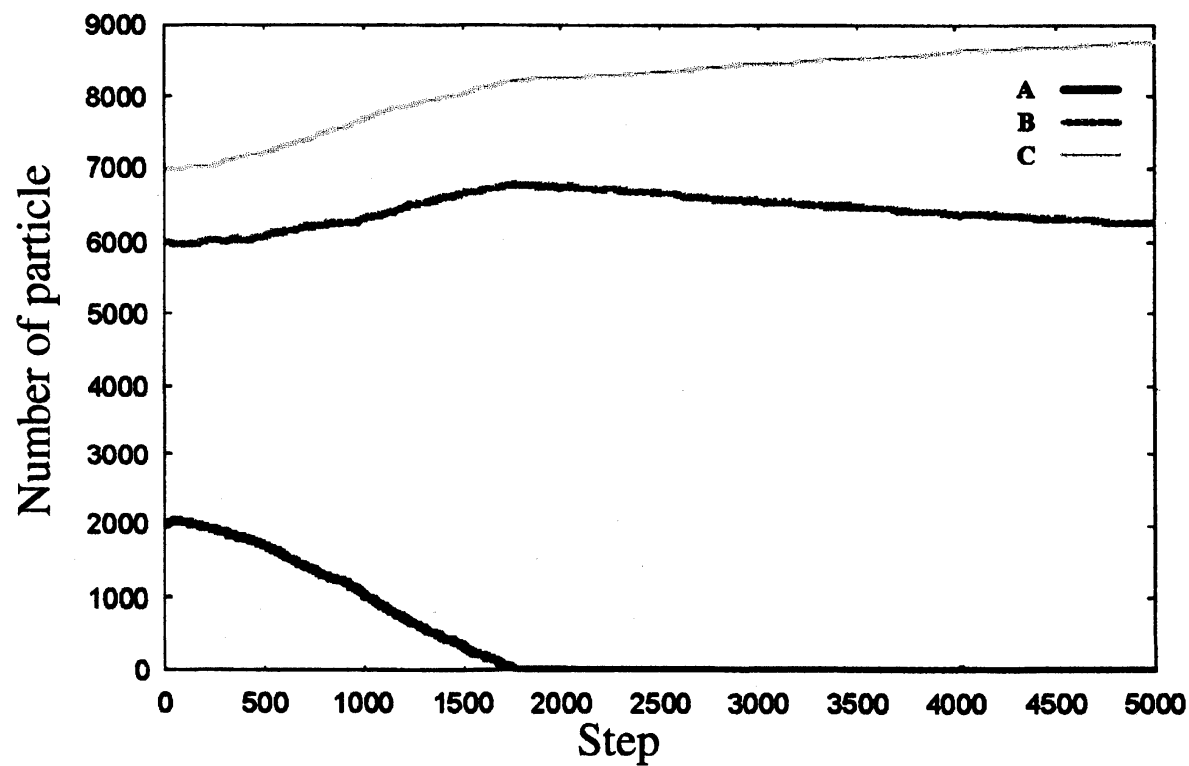


図 2-2 “結合あり” (P_{A0}, P_{B0}, P_{C0}) = (2000, 6000, 7000) における粒子数の変化

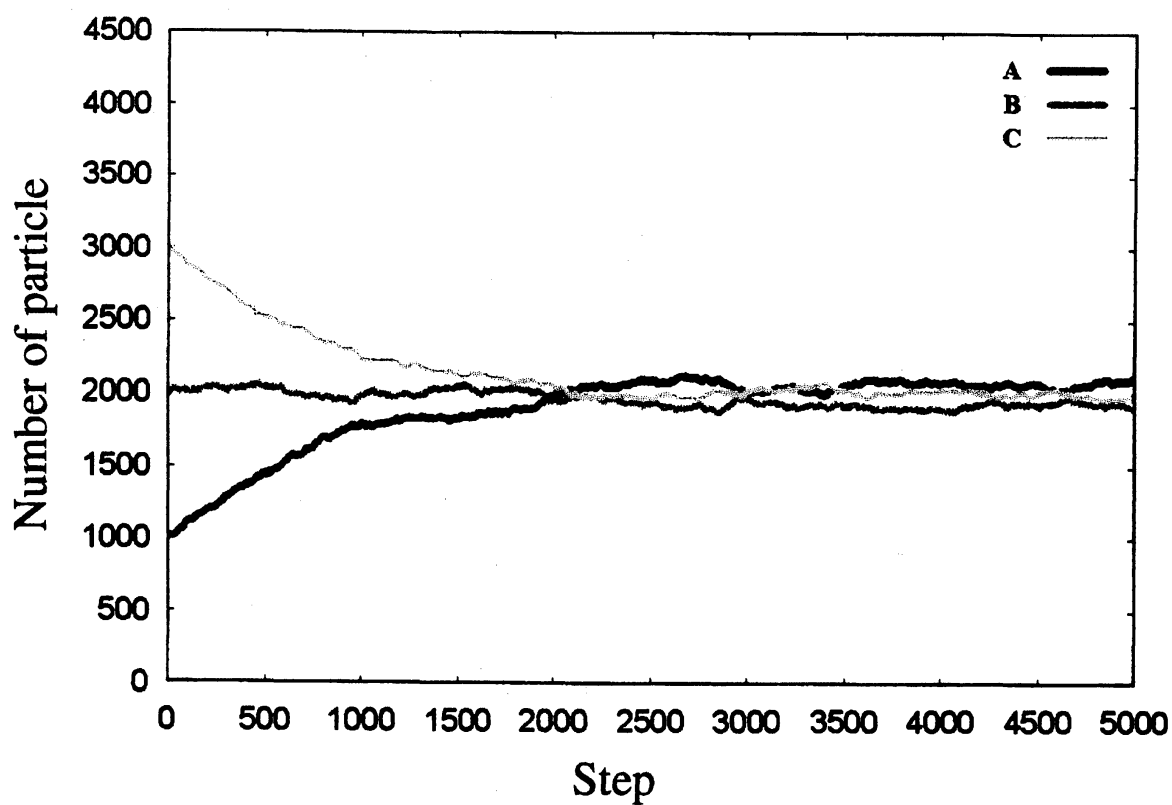


図 2-3 “結合なし” (P_{A0}, P_{B0}, P_{C0}) = (1000, 2000, 3000) における粒子数の変化

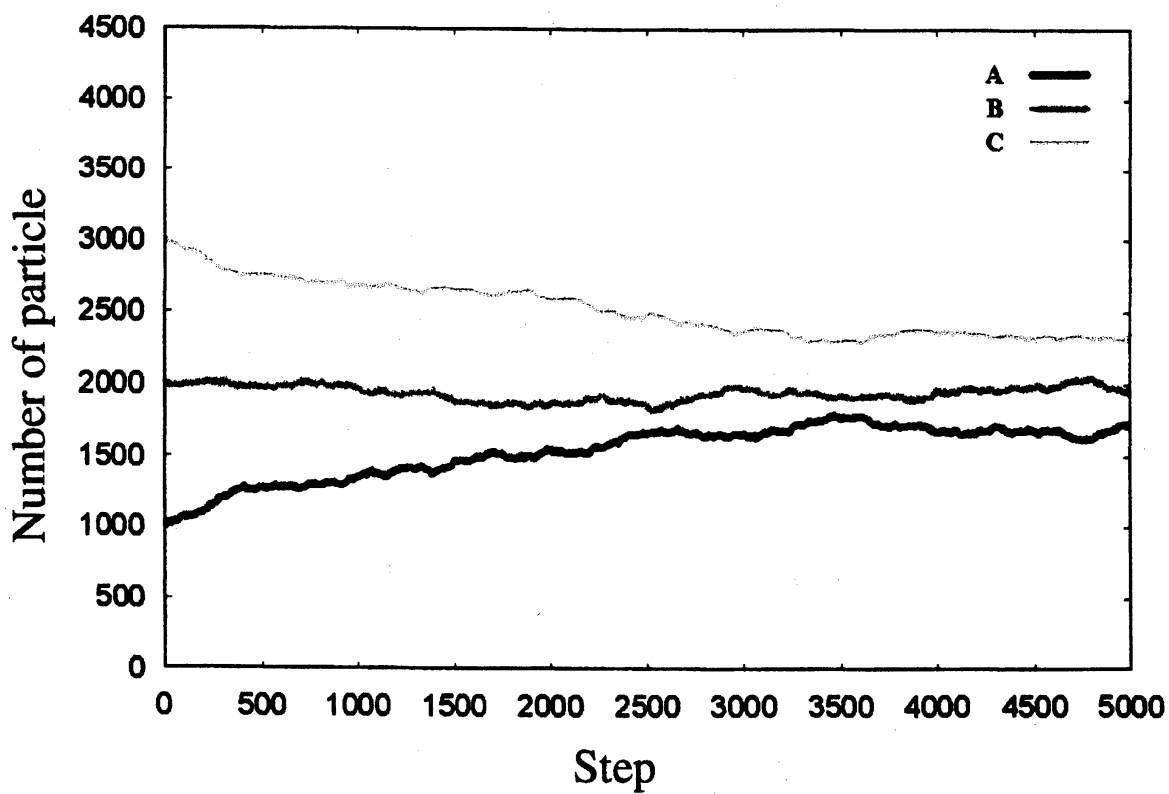


図 2-4 “結合あり” (P_{A0}, P_{B0}, P_{C0}) = (1000, 2000, 3000) における粒子数の変化

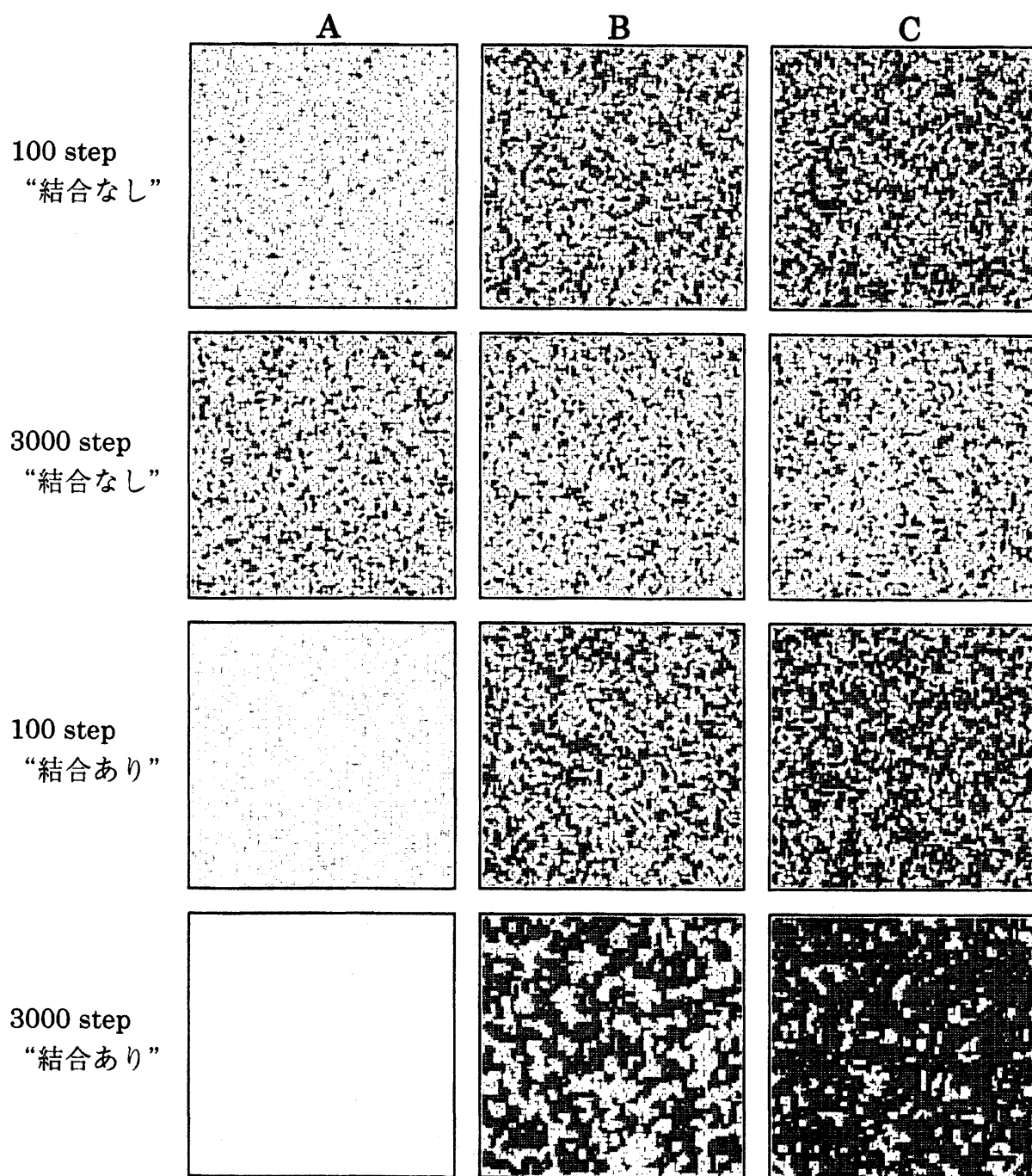


図 2-5 $(P_{A0}, P_{B0}, P_{C0}) = (2000, 6000, 7000)$ での 100 及び 3000 ステップ後におけるそれぞれのフィールド内のパターン。結合数 2 以下はグレー, 3 以上は黒で表示している。“結合なし” 100 ステップは $(P_A, P_A^*) = (2541, 138)$, $(P_B, P_B^*) = (5853, 2605)$, $(P_C, P_C^*) = (6604, 3768)$, 3000 ステップは $(P_A, P_A^*) = (4987, 1495)$, $(P_B, P_B^*) = (4964, 1389)$, $(P_C, P_C^*) = (5048, 1591)$, “結合あり” 100 ステップは $(P_A, P_A^*) = (2038, 66)$, $(P_B, P_B^*) = (5953, 3120)$, $(P_C, P_C^*) = (7007, 4789)$, 3000 ステップは $(P_A, P_A^*) = (7, 0)$, $(P_B, P_B^*) = (6548, 5232)$, $(P_C, P_C^*) = (8443, 7823)$ である。

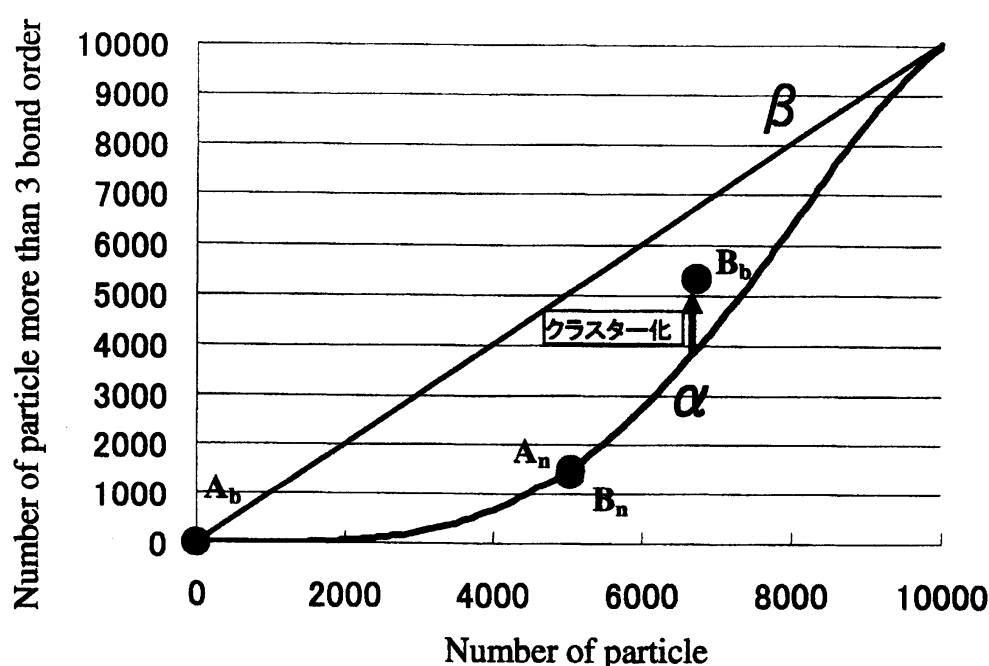


図 2-6 クラスター化曲線と計算機実験結果との対比

“結合なし”におけるフィールド A のクラスターの様子は 100 ステップ時には $P_A = 2541$, $P_A^* = 138$ であり P_{A0} と比較すると急激に増加し 3000 ステップでは $P_A = 4987$, $P_A^* = 1495$ と増大したがクラスター成長は認められなかった。それに対し“結合あり”では 100 ステップ時には $P_A = 2038$, $P_A^* = 66$ であり 3000 ステップ後になると $P_A = 7$, $P_A^* = 0$ とほとんど粒子が存在しなかった。そのため粒子消去時の障害は皆無であり他のフィールドから粒子を取られる一方であった。

次に“結合なし”におけるフィールド B のクラスターの様子は 100 ステップ時には $P_B = 5853$, $P_B^* = 2605$ であり 3000 ステップでは $P_B = 4964$, $P_B^* = 1389$ と減少した。これもパターンそのものは時々刻々と変化しているがクラスターの成長は確認できなかった。一方、“結合あり”には 100 ステップでは $P_B = 5953$, $P_B^* = 3120$ であり“結合なし”とあまり変化がないが 3000 ステップでは $P_B = 6548$, $P_B^* = 5232$ でありクラスターが大きく成長していた。これは粒子消去時に結合数が 3 以上の粒子はその場に留まる。そして粒子挿入時にもし粒子同士が上下左右何れかの方向に隣り合えば両方の粒子の結合数は 1 増加する。即ちステップが増加することによって、パーコレーションフィールド内の空きサイトの数が少なくなったとしても粒子数が増えれば増えるほど抜けなくなりクラスターが成長する。そしてクラスターは、粒子数が同じでも細かく空きサイトが入り組んだパターンより丸く固まった密なクラスターのほうがフィールド内の結合数が大きくなり安定である。

このようなパターン成長が粒子を固定し、挿入された粒子を取り込む現象がクラスター化として現れている。このクラスター化を図示するため、図 2-6 にまとめた。こ

の相図は横軸をフィールド内の粒子数、縦軸を結合数 3 以上の粒子数である。曲線 α は静的パーコレーションを実行したときの結合数 3 以上の粒子数を示している。そして β は、粒子数に対して最大の結合数 3 以上の粒子数を示している。フィールド A “結合なし” 3000 ステップ後の結果 (A_n) は $P_A = 4987$, $P_A^* = 1495$ であり相図との対応は曲線 α によく一致している。そして “結合あり” 3000 ステップ後の結果 (A_b) は $P_A = 7$, $P_A^* = 0$ であり相図の原点付近であった。フィールド B “結合なし” 3000 ステップは $P_B = 4964$, $P_B^* = 1389$ であり相図との対応は曲線 α によく一致している。ところが “結合あり” 3000 ステップ後の結果 (B_b) は $P_B = 6548$, $P_B^* = 5232$ であり相図との対応は曲線 α から上に 1600 ほどズレがあり、そのズレがクラスター化と考えられる。

Ⅲ 近似式への適応

以上の結果を踏まえ、粒子の変化を微分方程式としてはどのような対応であるか検討した。

【線形モデル “結合なし”】

3 つのパーコレーションに対してそれぞれ存在している粒子数を a, b, c とし空きサイト数は N_a, N_b, N_c とすると $T(100 \times 100 = 10000)$ は

$$T = a + N_a = b + N_b = c + N_c \quad 3-1$$

となる。また全体の粒子数は保存されているので保存量を T_p とすると

$$T_p = a + b + c \quad 3-2$$

となる。抜く粒子と挿入する粒子は等しく n であり、挿入時の分配は $N_a : N_b : N_c$ であるので、式 3-1～3-2 を用いることによって粒子数変化は次式のように近似できる。

$$\begin{cases} \frac{da}{dt} \cong \frac{\Delta a}{\Delta t} = 3n \frac{N_a}{N_a + N_b + N_c} - n = n \left(\frac{3T - 3a}{3T - T_p} - 1 \right) = \frac{n}{3T - T_p} (-2a + b + c) \propto -2a + b + c \\ \frac{db}{dt} \cong \frac{\Delta b}{\Delta t} = 3n \frac{N_b}{N_a + N_b + N_c} - n = n \left(\frac{3T - 3b}{3T - T_p} - 1 \right) = \frac{n}{3T - T_p} (a - 2b + c) \propto a - 2b + c \\ \frac{dc}{dt} \cong \frac{\Delta c}{\Delta t} = 3n \frac{N_c}{N_a + N_b + N_c} - n = n \left(\frac{3T - 3c}{3T - T_p} - 1 \right) = \frac{n}{3T - T_p} (a + b - 2c) \propto a + b - 2c \end{cases} \quad 3-3$$

比例定数は平衡に達するスピードに対応しているのでそれを 1 にすると

$$\begin{cases} \frac{da}{dt} = -2a + b + c \\ \frac{db}{dt} = a - 2b + c \\ \frac{dc}{dt} = a + b - 2c \end{cases} \quad 3-4$$

となり、この式をステラのモデルの基本とした。

【非線形モデル “結合あり”】

ところが“結合あり”の時には($n \geq$ 実際に消去した粒子数)であり、以上のような式の整合性を取るのが困難または不能であることが考えられる。またクラスター化によって3つのフィールドの不均一（詳細釣り合いの破れ）になる現象が現れた。そのとき図 3-11 の相図にある曲線 α はほぼ放物線状であったことから、粒子数の変化を示すのに1次の項の符号を反転させた2次の項を加えた。それは式 3-2 が依然として成立するため

$$\frac{da}{dt} + \frac{db}{dt} + \frac{dc}{dt} = 0 \quad 3-5$$

でなければならず次式は

$$\begin{cases} \frac{da}{dt} = -2a + b + c + 2a^2 - b^2 - c^2 \\ \frac{db}{dt} = a - 2b + c - a^2 + 2b^2 - c^2 \\ \frac{dc}{dt} = a + b - 2c - a^2 - b^2 + 2c^2 \end{cases} \quad 3-6$$

とした。

IV 近似式の解曲線及び考察

図 4-1 は式 3-4 及び 3-6 で計算した解曲線である i は式 3-4 で $(a_0, b_0, c_0) = (0.2, 0.6, 0.7)$ でありシミュレーション結果の図 2-1 に対応している。ii は式 3-6 で $(a_0, b_0, c_0) = (0.2, 0.6, 0.7)$ であり図 2-2 に、iii は式 3-4 で $(a_0, b_0, c_0) = (0.1, 0.2, 0.3)$ であり図 2-3 に、そして iv は式 3-6 で $(a_0, b_0, c_0) = (0.1, 0.2, 0.3)$ であり図 2-4 にそれぞれ対応している。この結果において、図 3-1, 3-3, 3-4 はパーコレーションの結果と挙動がかなり似ており特に“結合なし”においては定量的なフィッティングが可能と思われる。

ところが図 3-3 の結果は c が増加の一途であり a が 0 に収束するという傾向は似ているが b の挙動は一致していなかった。

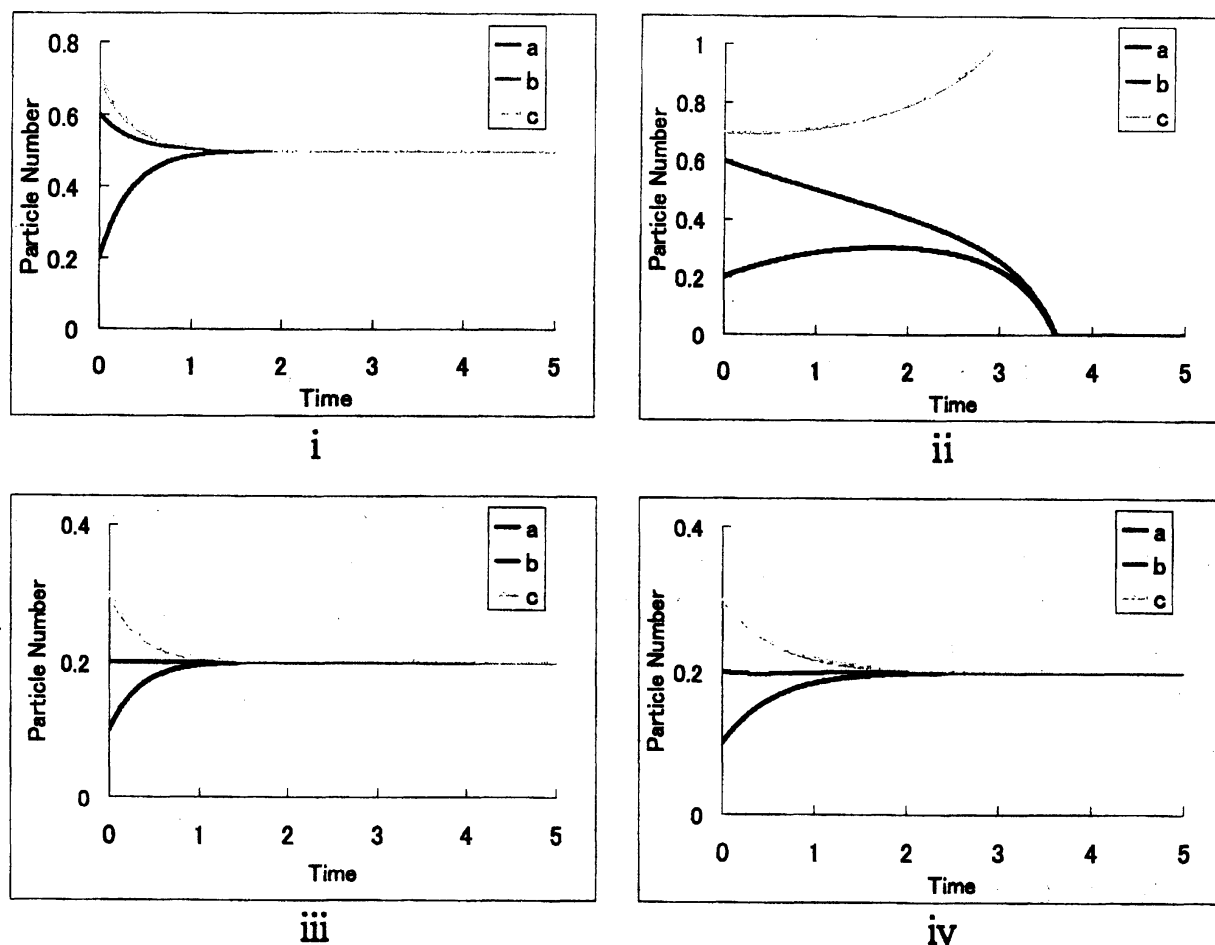


図 4-1 近似式の解曲線

V 揺らぎの影響が顕著に出る条件

パーコレーション計算によって得られた粒子数の変化は微分方程式で対応させてきた。そのとき”結合なし”においては線形微分方程式として対応できた。また”結合あり”においてはクラスター化臨界曲線を頼りに2次の項を追加した非線形微分方程式として対応させた。特に”結合あり”に対しては初期粒子数の大きさによって粒子数が平衡状態に落ち着く(クラスター化が起きない)場合と粒子数の釣り合いが破れた状態(何れかのフィールド内でクラスター化が起こりそのフィールド内の粒子数が増加する状態)とある。従って、その境界の粒子数においてどの状態に落ち着くか、もしくは安定な状態に落ち着くことがない状態が考えられ、その境界付近で起こる粒子数の変化が興味深い。

このような条件において決定論的なアプローチでは解曲線は平衡値にはなかなか落ち着かない準安定解である。または、明らかに発散する条件(パーコレーションでは粒子数を多くしてクラスター化が起こる初期値に対応)であったとしても3変数の初期値がまったく同じであればその解はまったく変化しない。以上から微分方程式の

立場から考えると不安定条件であっても特異解が存在する。しかし現実では不自然な解である。

一方、パーコレーションモデルの計算は確率を基本としている。従って計算の中核は乱数を用いている。よってその計算結果は必ず揺らぎが存在する。また、上記で示した近似式との対応においては、ある程度の揺らぎを誤差として解釈できるため対応できた。ところが今問題にしている条件では極わずかな揺らぎが存在していればその後の時系列は大きく影響が出ると思われる。

以下の結果は平衡状態の条件における”結合なし”、”結合あり”での揺らぎの様子、及び3フィールドの初期粒子数を同じにしたときの粒子数の変化である。

【結果】

図5-1, は、初期条件 $(P_{a0}, P_{b0}, P_{c0}) = (1500, 2000, 2500)$, 50000 ステップ計算における”結合なし”(i) 及び ”結合あり”(ii) での粒子数が釣り合っているときの揺らぎの様子である。i では3000 ステップ付近から釣り合っている状態になっている。その3000 ステップから50000 ステップまでの揺らぎは粒子数2000を中心とする約1850から2150の範囲に収まっていた。それに対してiiでは釣り合っている状態になるステップ数が明確ではないがあえて言うなら15000 ステップ付近からである。そして15000~50000 ステップまでの揺らぎの様子は結合なしと比較すると粒子数2000を中心としているが揺らぎ幅が約1650~2300の範囲であり、さらに揺らぎの周期が伸びていることが確認できた。

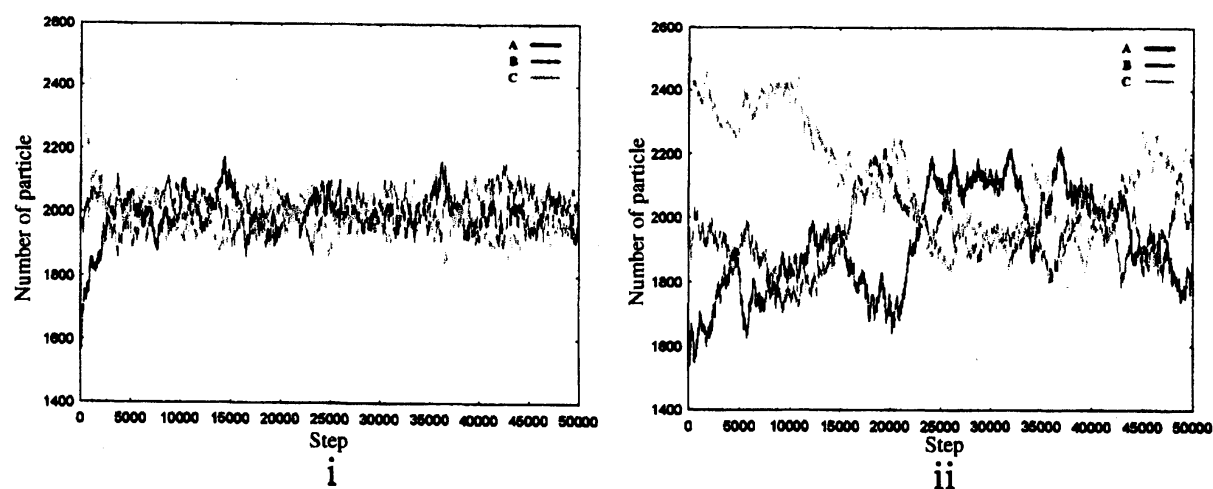


図5-1 “結合なし”, “結合あり”における平衡時の揺らぎの比較

図5-2は i ii ではそれぞれ3フィールドの初期粒子数を同じ $(P_{a0}, P_{b0}, P_{c0}) = (2000, 2000, 2000)$ にしたものであり i は”結合なし”で ii は”結合あり”である。iii は $(P_{a0}, P_{b0}, P_{c0}) = (4000, 4000, 4000)$ で”結合あり”である。iv は結合あり”であり全粒子数では i ii と同じであるがフィールド間で不均一 $(P_{a0}, P_{b0}, P_{c0}) = (4000, 1000, 1000)$ にした。i は図5-1 i の平衡時における粒子数の変化と同じ揺らぎであった。

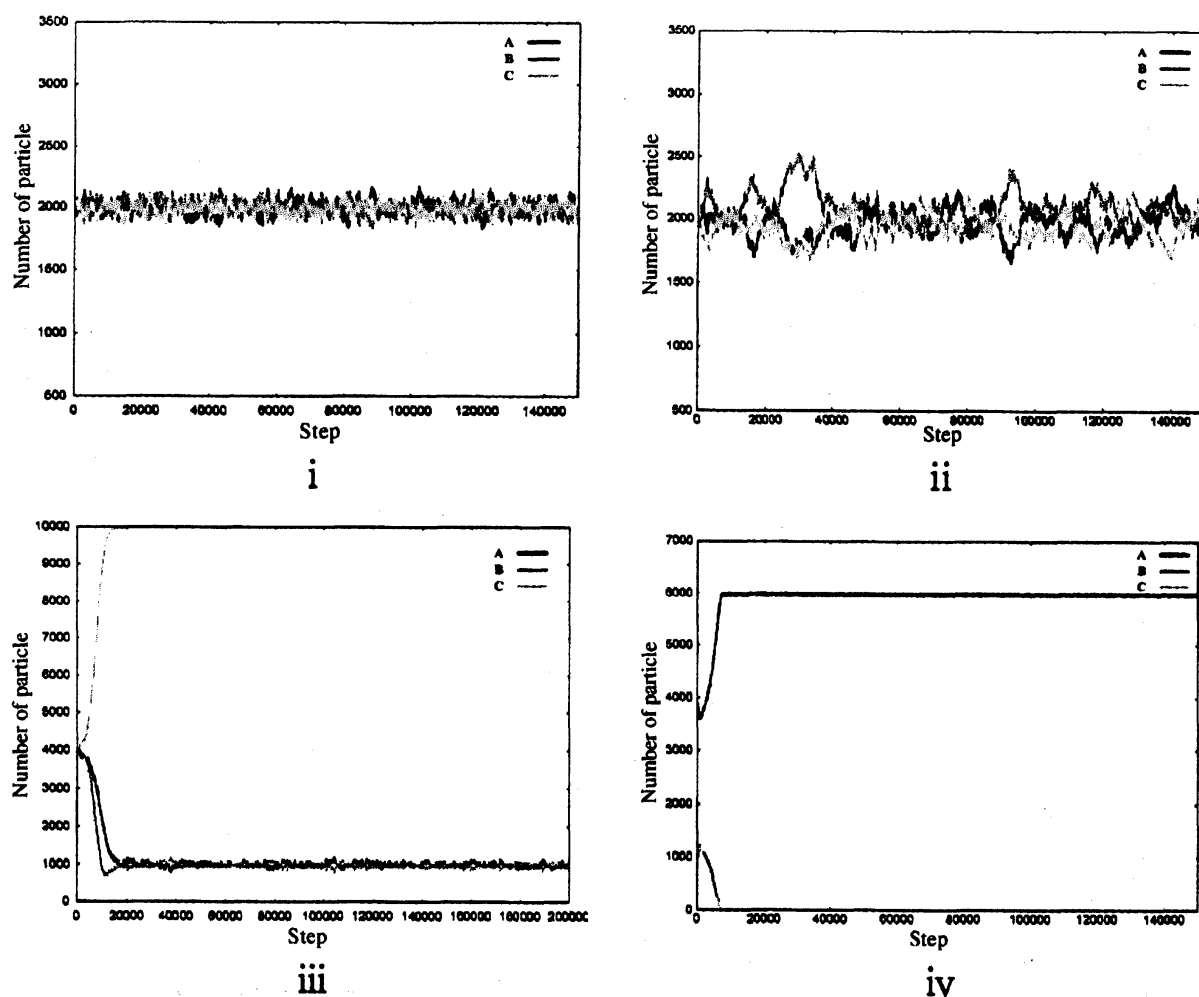


図 5-2 初期粒子数における不安定性の検討

ii は平衡値の付近を揺らいでいる状態であったが、揺らぎの幅が広がっておりさらに揺らぎの周期が伸びていた。さらに 0~40000 ステップの間に 3ヶ所と 95000 ステップ付近に平衡値から大きくズレた時系列を確認した。これは結合なしの時の揺らぎは揺らぎ幅に対して一様に分布しているが、“結合あり”に対してはそのような規則は確認できなかった。そして iii は初期のわずかな揺らぎが影響してフィールド C の粒子数が正の方向に発散した。また各フィールドの最大粒子数は 10000 であるので C の粒子数の時系列はその後 10000 で落ち着いた。そして残りの 2000 ($4000 \times 3 - 10000$) は A と B で釣り合う状態であり各々 1000 付近を揺らいでいた。また揺らぎ幅は約 800~1200 であった。iv では ii の結果とは異なり粒子数の時系列は釣り合わず A の粒子数のみが正の方向に発散した。そして全粒子数は 6000 であるので 6000 で落ち着いた。この時系列の初期は 2000 に近づくが即座に発散した。これはフィールド A の初期粒子数が多いため、クラスター化が起こりやすい条件であり、粒子の出し入れの際にクラスター化が起こり、その後粒子が抜けづらいパターンになり結果として粒子数が増加した。

従ってクラスター化臨界被覆率は3フィールドそれぞれの粒子数を軸とした3次元空間上で曲面で与えることができる境界であることが予想できる。その境界付近での粒子数の変化がどのように発散していくか、または安定しているかが興味深い。

図5-3はクラスター臨界被覆率付近での粒子数の変化である。iは“結合なし”(P_{a0}, P_{b0}, P_{c0}) = (2100, 2100, 2100), 150000ステップの結果である。この場合は先に示した約±150の粒子数の揺らぎであった。iiは“結合あり”(P_{a0}, P_{b0}, P_{c0}) = (2100, 2100, 2100), 150000ステップの結果である。これは計算開始時では粒子数の揺らぎは振幅及び波長は小さいものの時間がたつに従って増大し約100000ステップ後には発散した。このような振動は乱数によって計算された揺らぎが“結合あり”という非線形性によって揺らぎが増幅され、発散すると考えられるが、単純に計算開始時のわずかな差が増幅されてそのまま発散するわけではなく振幅及び波長が増大して発散することから、乱数からの揺らぎが非線形システムによって規則性が出ている可能性がある。

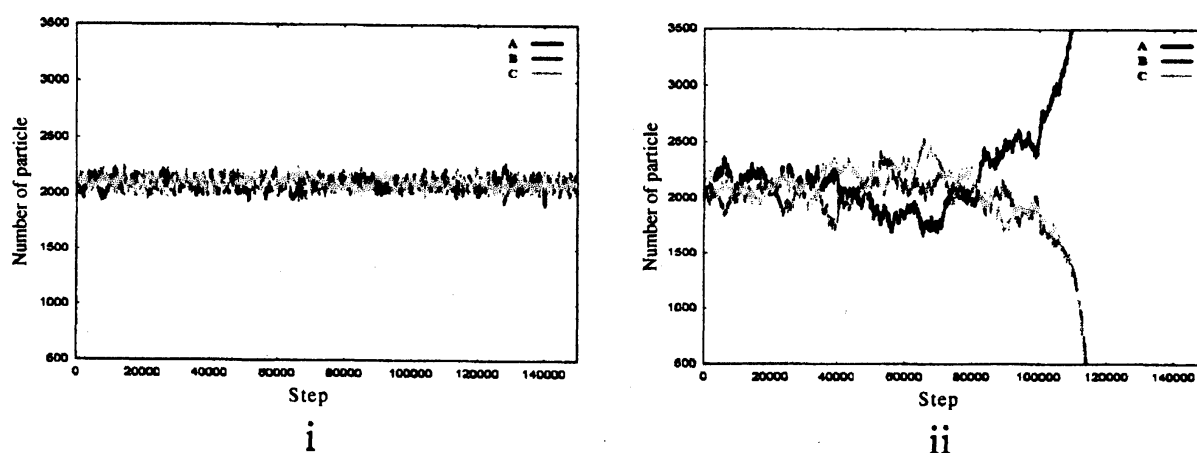


図 5-3 クラスター化臨海付近における粒子数の発散過程

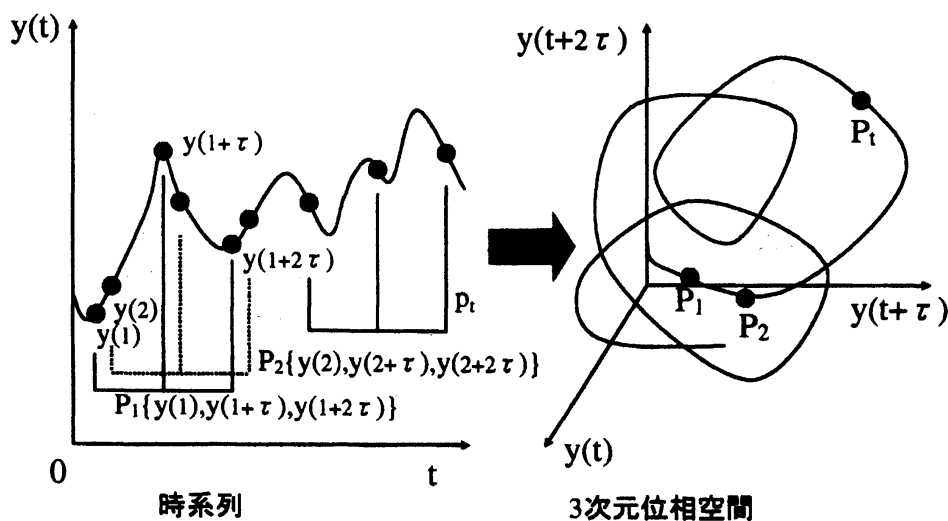


図 5-4 タケンスの埋め込み定理 (3次元)

そこで図 5-4 のように、時系列の時間遅れのデータを 3 点取得し 3 次元位相空間に写像するタケンスの埋め込み定理を用いてその時系列の規則性について考察した。

図 5-5 は $(P_{a0}, P_{b0}, P_{c0}) = (2100, 2100, 2100)$, 150000 ステップの時系列をフィールド A について、タケンスの埋め込み定理によって得られたアトラクターである。i は“結合なし”であり、このアトラクターは、 $(2100, 2100, 2100)$ 付近を約 ± 150 の幅をもった塊まった軌道が得られた。このことからその範囲でランダムに揺らいでいることが示めされ、その範囲を誤差と見るならば平衡状態と解釈できる。一方 ii は“結合あり”におけるアトラクターである。この結果は $(2100, 2100, 2100)$ 付近を揺らいだ後、左下 $(1800, 1800, 1800)$ 付近を揺らぎ、そして $(2100, 2100, 2100)$ 付近の揺らぎの外を半周し、右上へ発散した。このアトラクターは部分的に見ればランダムと判定できるところがあるが、全体を見ればランダムであるとは必ずしも言えず内側から外側に渦状に広がっていることが示唆され、発散する過程においてアトラクターから規則的な時系列が非線形システムに於いて見出される可能性が示唆された。

図 5-6 はフィールド B についてのそれぞれのアトラクターであり、i が“結合なし” ii が“結合あり”である。i は図 5-5 i で示したように $(2100, 2100, 2100)$ 付近を ± 150 の広がり の塊まった軌道が得られた。従ってこの時系列もランダムであることが強く示唆された。ii は $(2100, 2100, 2100)$ を中心とした塊と左下と右上に飛び出た軌道があり左下へ発散する形態であった。そのうち左下と右上に飛び出た軌道は、ステップ数 40000 と 60000 付近での比較的大きな時系列の変化があるもののいったん $(2100, 2100, 2100)$ 付近の塊に入りその後発散した。この結果は時系列のときに時間と共に振幅と波長が大きくなるといった傾向は顕著には表れていなかった。

図 5-7 は フィールド C についてのそれぞれのアトラクターであり、i が“結合なし” ii が“結合あり”である。これも図 5-5 i で示したように $(2100, 2100, 2100)$ 付近を ± 150 の広がり の塊まった軌道が得られた。同様にこの時系列もランダムであることが強く示唆された。ii は $(2100, 2100, 2100)$ を中心とした塊から右上に飛びその後左下へ発散する軌道を描いていた。

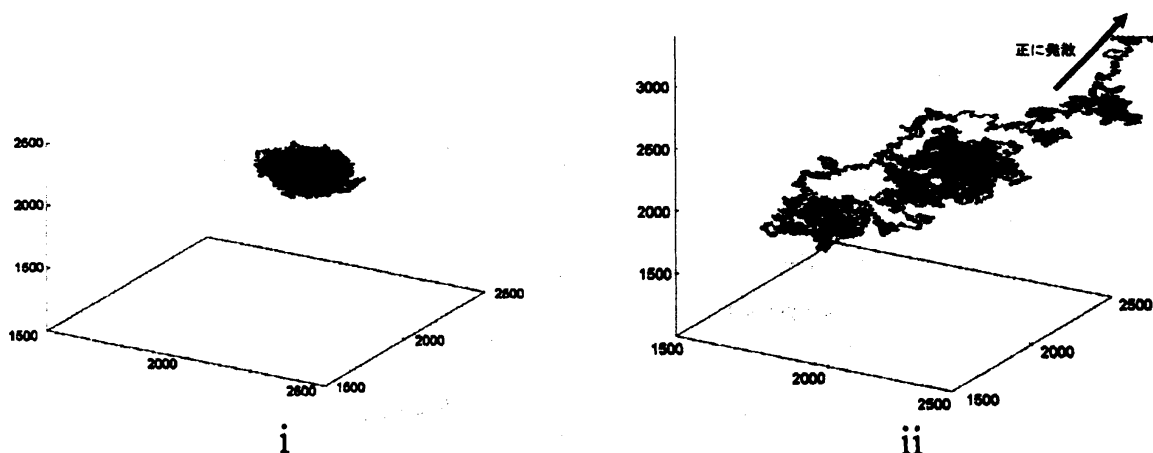


図 5-5 タケンスの埋め込み定理によって得られた A のアトラクター

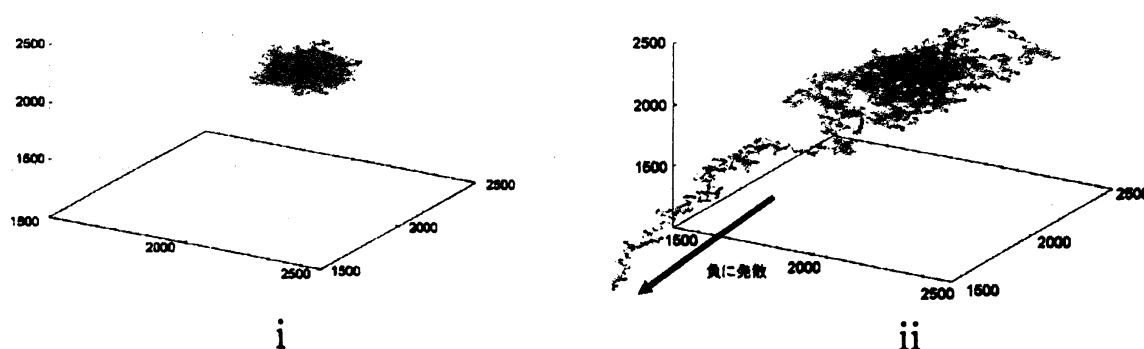


図 5-6 タケンスの埋め込み定理によって得られた B のアトラクター

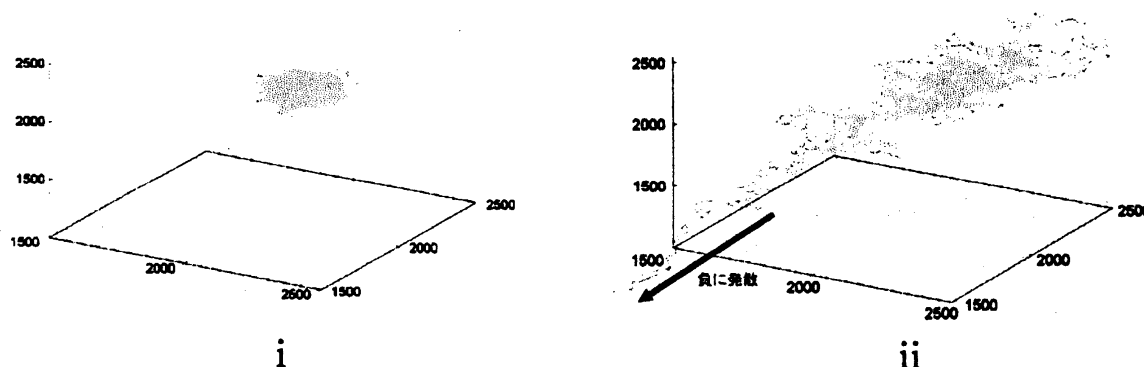


図 5-7 タケンスの埋め込み定理によって得られた C のアトラクター

VI まとめ

動的パーコレーションモデルにおける“結合なし”，“結合あり”により粒子数の変動に非線形性が疑わしい結果が得られた。近似式による対応から、その非線形性は2次式で記述できることを示した。それはクラスター化を示す相図(図 2-6)の曲線 α に対応していることを示唆していた。しかし、粒子消去の阻害によりクラスター化が進み曲線 α とのズレが大きくなる関係でその非線形性は時間発展している可能性がある。従ってクラスターの成長とステップ数がカップリングするダイナミクスが今後の課題である。またこの研究結果は3つのユニット（パーコレーションフィールド）を可逆循環結合（円形）であるが、直線結合では粒子のフィールド間の移動がどのように対応しているかも今後の課題である。

クラスター化臨界被覆率において、初期粒子数が3フィールドとも同じという条件にした場合、“結合なし”ではどの初期粒子数であっても約±150の揺らぎの範囲で落ち着いていた。“結合あり”の場合において、初期粒子数2000のときは揺らぎの幅

が大きくなるものの発散はしなかった。しかしながら初期粒子数 4000 では即座に時系列は発散した。また 3 フィールドとも初期粒子数 2000 (即ち計 6000) に対してフィールド A の初期粒子数を 4000, 他を 1000 (計 6000) にした場合においては A の粒子数はいったん減少するものの正に発散した。これはフィールド A 内部でクラスター化が起こっているためであると考えられる。従ってクラスター化臨界被覆率は 3 フィールドそれぞれの粒子数を軸とした 3 次元空間上を曲面で与えることができる境界であることが示唆された。

揺らぎが影響する粒子数の発散が起きる過程は、クラスター化臨界被覆率付近の $(P_{a0}, P_{b0}, P_{c0}) = (2100, 2100, 2100)$, 150000 ステップ, "結合あり" の条件において時間が経過するに従って粒子数の変化は振幅及び波長が増加する傾向を示し最終的には発散した。また、このような時系列に対して、規則性を検討するためにタケンスの埋め込み定理を用いた。"結合なし" においては約 ± 150 の範囲でランダムな揺らぎであることが強く示唆されたが、"結合あり" においてはあるフィールドにおいては渦的なアトラクターが得られたことから揺らいでいる時系列から規則性を示唆する結果が得られた。

Reference

- 1) パーコレーションの科学 小田垣 孝著 裳華房, 1993
- 2) HITACHI Parallelware リファレンスガイドーCー, 1996
- 3) 増補版 C++Builder 入門 青山 学 ソフトバンク, 1998
- 4) カオス時系列解析の基礎と応用 合原 一幸 産業図書 p.14 ~ 16. 22. 23 (2000/11/10)
- 5) 思考開発ソフト stalla 使用説明書