

DLA 関連講演に寄せて

服部哲弥 (宇都宮大学)

この研究会の企画段階で、「DLA はまだ勉強したことがないけど面白そうなので話を聞きたい」という意見があったので、DLA 関連の survey 的な講演を本田勝也氏 (信州大) と深井康成氏 (東工大) にお願いしました。本田氏には主に物理の視点から基礎的な survey を、深井氏には Kesten の仕事などの主に数学的結果を話して頂けると思います。異なる視点からの講演で session として一層厚みができれば幸いです。

本田先生に講演をお願いする過程で、何人かの方々にお世話になりました。特に香取真理 (中央大)、田崎晴明 (学習院大)、原隆 (東工大) の 3 氏には講演者の推薦だけでなく文献などの情報も頂きました。お世話になった 3 氏への感謝をかねて頂いた情報の紹介をしようと思いましたが、文献リストでは無味乾燥なので、各氏とのやりとりの過程や文献を読んでいて興味を持った中から読み物にしました。DLA について考えて頂くきっかけの一つにでもなれば幸いです。なお、DLA の定義等は、講演、あるいは本田氏の著書「フラクタル科学」(高安, 本田, 佐野, 田崎, 村山, 伊東著, 朝倉書店) 2 章「結晶成長とフラクタル」(以下, [1] と略します) を参照できると仮定して、ここでは省略します。

化学反応において時間を要する素過程を律速段階と呼びます。結晶成長の議論では、溶液中を拡散する分子が結晶に近づくまで (拡散の効果) と結晶表面近くにいる分子が固定して結晶の一部になるまで (表面張力の影響など) のどちらが律速段階になっているかで、それぞれ拡散律速と界面律速と呼び分けるようです。界面律速の場合、分子は結晶表面付近をうろうろするので、結晶表面に一樣にくっつく期待できます。食塩の立方体型の結晶のような、平たい結晶面が出来るのは界面律速の結晶成長の場合です。拡散律速の場合、結晶表面近くに来た分子はすぐくっつくので、結晶の塊 (cluster) の先端にくっつき易く、cluster は樹木の枝状に成長します。DLA では拡散粒子が cluster の近くに来ると直ちに固定する定義なので、拡散律速のモデルになっています。私はこの記事を書くまでずっと「拡散している粒子が凝集するのになぜ DLA (diffusion limited aggregation) なのだろう、diffusion driven aggregation ではないのか？」と不思議に思っていました。'driven' ではなく 'limited' なのは拡散律速の「律」、つまり界面の効果は無視したが拡散の時間経過は重視していることを表している、といまは理解しています。

DLA は直接的には金属葉などの、美しい樹木の枝状の形をした結晶 (dendrite) のモデルです。稲妻の枝分かれの様子もある程度類似の振る舞いをすると考えられます。もっと広い意味では物理ではパターン形成と呼ばれる分野の一つの話題と見ることができると思います。つまり、ランダムな外界の中で「複雑だが美しい」形が作られる仕組みの解明です。パターン形成と言うとき、物理の研究者はたぶん金属葉などの例のずっとはるかかなたに発生の問題、つまり、大自然という敵意に満ちた環境の中で小さな卵や種から複雑な多細胞生物が発生するという奇跡的な秩序正しい変化、を理解したいという夢があると思います。それ故にパターン形成の分野はいつそう魅力的な分野だと思われれます。

このような関心からは、小さな単位（例えば cluster を構成する分子）が多数個相互作用しながらランダムに運動する系を考えると、その系の時間（個数）無限大極限にともなう漸近的振る舞いという問題を知りたいこととなります。一般には自由度が大きな系は研究が困難になりますが、極限定理のような「ならされた」性質ならば解析できるかも知れないという期待です。パターン形成の原理の中に個々の例（モデル）によらない普遍的な原理がもしあれば、数学的な対象として取り扱える可能性があります。逆にこのような関心を持って単純化されたモデルを研究するときは、モデルの定義を少々変更しても漸近的振る舞いは変わらないという普遍性 (universality) を期待して、それを重要な根拠として単純化されたモデルをまず調べるといふ姿勢だといえます。

文献 [1] に一箇所「...これには、後日談があるが...」([1] § 2.3b) という記述があり、注意を引いたので、この話題を紹介したいと思います。

DLA においても先ほどの一般論同様、普遍性が成立することが研究推進上重要な鍵です。1983 頃までに発表された計算機によるシミュレーション（数値実験）の結果によると、期待通り「微視的な差にはよらない普遍性」([1] § 2.3d) があるように見えました。また、そのときの漸近的振る舞いを記述する指数（DLA のフラクタル次元）の数値実験結果と理論的予想（この記事の終わり付近参照）もよく合いました。ところが、これには後日談がありました。計算規模をもっと大きくした大規模数値実験（10 万個から 100 万個の粒子からなる cluster）では普遍性が破れたという報告です。P. Meakin, J. Phys. A18 (85) L661, Phys. Rev. A33 (86) 3371; R. C. Ball and R. M. Brady, J. Phys. A18 (85) L809. 「DLA クラスターの最たる特徴はその普遍性にある」([1] § 2.6e) のですが、それは漸近的性質ではなく、小さな cluster でのみ見えていた現象だったということです。

もう少し具体的には次のような現象が観測されました．2次元正方格子上のDLA巨大clusterは，正方格子の軸方向にそってclusterが成長しやすく，菱形あるいは十文字状のclusterになる，つまり，格子構造を反映した異方性（丸くならないこと）が観測されたのに対して，三角格子上のDLA巨大clusterは等方的（丸いこと）でした．言いかえると，正方格子上のDLA clusterは漸近的に異方性が現れ，三角格子上のDLA clusterは漸近的に（scaling limitで）回転対称性が成り立つことが分かったそうです．

DLAモデルに異方性（格子の形）をどう入れるかで漸近的振る舞いが異なるのですから，モデルの微視的な定義に漸近的振る舞いが依存する，つまり，DLA clusterの漸近的性質がuniversalityを欠いています．DLAの定義において拡散粒子は格子上のrandom walkですが，DLAの話から離れて格子上の一つのrandom walkに限るとその漸近的性質（scaling limit）は2次元平面上のブラウン運動に正確に一致します．このとき格子は正方格子でも三角格子でも構いません．これが格子構造に対するuniversalityのプロトタイプです．

DLAは格子構造に対するuniversalityを持つrandom walkを用いた定義の単純なモデルですが，これが格子構造に対するuniversalityの破れを引き起こすのは驚くべきことで大変興味深い現象です．と同時に困難な問題にもなったと思います．物理的に言えば，困難は次のようになります．「DLAはパターン形成のモデルであるが，自然界のパターン形成は複雑な微視的力学の結果である．DLAのような単純化したモデルで本質が分かるためには，微視的力学（モデル）を変えても系の巨視的性質（漸近的性質）が大きく変わらないことが必要である．結果が格子構造に依存するようでは，本当の自然（一般的には分子は規則格子に沿って運動しているわけではない）の姿をDLAから推測するのは難しいのではないか？」あるいは，数学的に言えば次のようになるでしょう！「多自由度系の無限自由度極限に関する漸近的性質を数学的に解析し得る期待の根拠はuniversality，即ちモデルの定義の詳細に漸近的性質が依存しないことによる．漸近的性質がモデルに依存しないということは少数有限個の本質的条件だけで漸近的性質が定まるということで，それを引き出す解析があり得る．DLAの漸近性質が格子構造に依存するというのは逆の状況であり，解析の手がかりに困るのではないか？」

話はそれですが，回転不変性の（漸近的）回復は，構成論的場の量子論でも重要かつ難しい問題です．格子上的スピン系の平衡系統計力学系を考えてその連続極限として場の量子論を構成するアプローチは（それまでの

極めて難解な方法に比べて) そのわかりやすさと, 統計力学と場の量子論の関連という両方の点から, 注目を集めました. このとき Osterwalder-Schrader の公理のうち回転不変性だけは証明できませんでした. 後に渡辺浩氏 (日本医科大学) がこのアプローチの枠内で回転不変性を証明しましたが, くりこみ群を用いた (他の部分に比べれば) 難しい証明を要しました. 格子上の多自由度系を考えたときその無限自由度極限の漸近的性質において回転不変性が成り立つかどうかは難しい問題のようです.

Fractal 上の拡散ではよく知られている M. T. Barlow も review 記事を最近書いたと思いますが, 数学者の間での DLA の人気は持続しているようです. この前の夏に Cambridge の Newton institute で行われた会議 (大学院生対象の夏の学校に近いものだったらしいですが) では H. Kesten と G. Lawler が DLA の講義をしたそうです. Lawler の講演は 4 つの section, random walk and harmonic measure, intersections of random walks, DLA, loop-erased or Laplacian random walk, に分かれていて DLA はその一つですが, 全体として harmonic measure, つまり random walk の hitting probability に関連する数理物理学的問題というテーマを追っています (講演録は Kluwer Academic Publishers より NATO Advanced Study Institute proceedings として出版予定.)

DLA で成長する cluster の形はいわゆるフラクタル (自己相似構造) になることが数値実験 (あまり巨大でない cluster について) で見られます. この図形のフラクタル次元 D がいくらになるかという問題については d 次元立方格子空間 ($d \geq 2$) の場合に Kesten の bound

$$D \geq \frac{d+1}{2}$$

が証明されています. H. Kesten, Physica A 168 (1990) 529(-535); Stoch. Proc. Appl. 25 (1987) 165; J. Phys. A 20 (1987) L29. D が小さいほど cluster は広がるスピードが速いので, cluster の成長率に対する upper bound です. Kesten の bound から特に $D > 1$ となるので, $d = 2$ 正方向格子空間上の DLA の巨大 cluster が格子軸方向に成長しやすいと言っても, 棒状 ($D = 1$) に成長するのではないことは分かります (Kesten の bound は cluster の大きさに関する制限はありません).

Lawler は $d = 3$ のとき, 'log' order を改良しています. G. Lawler, 'Intersection of Random Walks', Birkhäuser (1991). 今のところ D の値に関しては以上を越える厳密な結果はないそうです. Kesten の元々の結

果はフラクタル次元の存在に関係ない形で書かれています．上記はそれを cluster を構成する粒子個数 n と cluster の直径 r を用いて $n \approx r^D$ で翻訳したものです． D は cluster 毎に異なりうる確率変数ですが，正確な statement を含めた DLA の数学に関しては深井氏の講演に期待します．

DLA cluster のフラクタル次元に関しては本田氏の理論物理学的結果（数学的には予想というべきか）

$$D = \frac{d^2 + 1}{d + 1}$$

があります．Kesten の bound と consistent です．K. Honda, H. Toyoki and M. Matusita, J. Phys. Soc. Jpn. 55 (1986) 707. 教科書では例えば T. Vicsek, 'Fractal Growth Phenomena', World Scientific (1989) p.151 あたり．本田氏は拡散粒子が random walk でない場合に拡張して，拡散粒子の軌跡 (trajectory) の次元を d_w とするとき $D = (d^2 + d_w - 1)/(d + d_w - 1)$ という形を与えています．簡明な美しい式なので，本田氏の講演に期待します．

以上の文献は本と Kesten の論文を除いて [1] の文献表に載っていますが，直接教えて頂いたのでここに選びました．従って，この記事は文献紹介を含めて断片的です．興味を持たれた方は講演を聞いて頂ければ幸いです．