

セル・オートマトンに基づくパターン形成シミュレーション

(熊本大院自然科学) 杉本 学・松尾 昭昌

【緒言】 数多くの原子・分子からなる系における秩序構造の形成は、凝縮系物質の構造・物性の理解・設計とともに、生命現象にも関連する興味深い研究課題である。一般に、多くの構成要素からなる系は“複雑系”と呼ばれ、化学のみならず物理、数学、社会学的にも興味もたれるが、その本質的な問題は、複雑系においてどのような時空間パターンが形成され、それが内在する数多くの相互作用とどのように関連づけられるか、また相互作用がどのように伝搬するか、であり、分子集団の構造と機能に関する問題と軌を一にするものと考えられる。本研究では、磁性材料研究におけるイジングモデルとの類似性と相違から、2次元セル・オートマトンの一種であるコンウェイのライフゲーム・アルゴリズム(Game-of-Life Algorithm: GLA)に注目する。このアルゴリズムは局所構造に基づくエネルギー的な最適化条件に従って、状態の時間発展を調べるものと見なせる。本発表では、コンウェイのGLA およびそれを一般化したアルゴリズムに基づいたシミュレーションを行い、時空間パターンにどのような類似性と相違がみられるかを検討したので報告する。

【計算アルゴリズム】 “ライフゲーム”とは、一辺が L 個のセルからなる 2 次元空間の各セルが 2 つの状態（ここでは ON 状態、OFF 状態と呼ぶ）をとるとし、時間とともにセルの状態が変化する様子をシミュレートするものである。“ライフゲーム”の名称は、例えば ON 状態を“生命体”の存在に対応させ、パターンの変化を生命体の集合の形態変化とみなしたことに由来する。これはセルにある 1 つの粒子が 2 状態をとるモデルに相当し、イジングモデルにおける up-spin、down-spin の 2 状態間の変化に対応づけることができる。イジングモデルに基づく磁性状態のモンテカルロ・シミュレーションでは、隣接するスピンの間の相互作用のみを考慮し、カノニカルアンサンブルにおける出現確率に従って系の平衡状態を求める。一方、GLA では隣接セルとの相互作用を考慮する点はイジングモデルと同一であり、平衡状態へ至るステップ（ここでは時間ステップとみなす）では隣接するセルの状態がある条件を満たす時に状態変化を許す点でもイジングモデルと類似している。しかし、GLA はセルの状態（すなわち ON 状態にあるか OFF 状態にあるか）によって状態変化を許す条件が異なるという特徴を有する。具体的には、コンウェイの GLA では、注目するセルが OFF 状態の時、隣接する 8 個のセルのうち 3 つが ON 状態であれば OFF 状態から ON 状態に変化させる。これを B

(Birth) 条件と呼ぶ。注目するセルが ON 状態の時、8 個のセルのうち 2 ないし 3 個が ON 状態であれば状態を維持し (S (Survival) 条件)、それ以外であれば ON 状態から OFF 状態に変化させる (D (Death) 条件)。隣接するセルの状態の数を相互作用数（相互作用エネルギーに相当）に対応づけて考えると、コンウェイの GLA はエネルギー

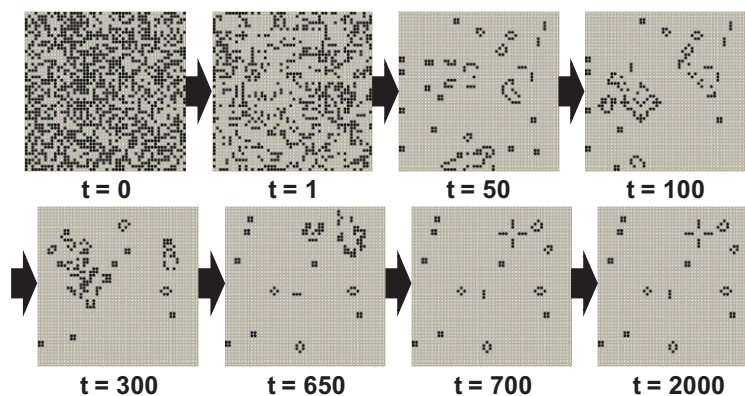


図1. コンウェイのGLA (R3条件)に基づくシミュレーション結果 ($\rho_0=0.50$).

一を安定化するような条件を考えるのではなく、2ないし3という“最適”な数を設定したいわば“適者生存条件”を採用する点も GLA の特徴である。

本研究ではコンウェイの GLA に加えて、B、S 条件として様々な条件を採用したシミュレーションを行った。なお、計算は 50×50 の 2 次元空間について行い、ON 状態のセルの数が平衡に到達したのちの 300 配置の平均をとって解析した。

【結果と考察】 適当に初期占有率(ρ_0)を定めて ON 状態のセルをランダムに配置し、コンウェイの GLA に従ってシミュレーションを行った。 ρ_0 が 0.50 の場合のスナップショットを図 1 に示す。ステップ数と共に様々なパターンが形成されることが分かる。図 1 で形成されるパターンは、ステップ数が 500 付近から周期的に変動する平衡状態に到達した。 ρ_0 の値を変えてシミュレートした場合でも同様に平衡状態に到達した。平衡状態 (T_{eq})に至った後の ON 状態の平均の数(S)と ρ_0 の関係を図 2 に示す。この結果から ρ_0 が 0、または 1 に近いほど S が小さくなることがわかる。これは初期状態が過疎、過密な状態では、ON 状態の数を維持できないことを意味するものと思われる。一方、 ρ_0 が 0.2-0.6 付近になると S の値は初期状態の違いにも関わらずほぼ一定となった。状態を識別する別の指標として 1 つの ON セルあたりの ON-ON 対の数に注目したところ、 ρ_0 が 0.1-0.8 の領域でほぼ一定 (1.1) であった。相互作用対の数を相互作用エネルギーとみなすと、これは ON セル 1 つあたりのエネルギーが等しい“最適条件”に到達しており、また ON 状態のセルが集団化することを意味する。

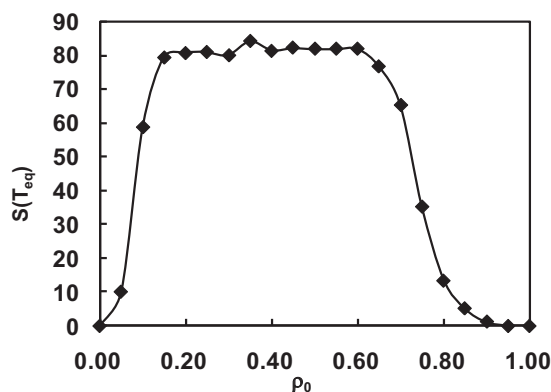


図 2. 初期占有率 (ρ_0) と平衡状態での占有数($S(T_{eq})$)の関係 (コンウェイの GLA による)

次に、B 条件について、OFF 状態から ON 状態に変化する際の隣接 ON セルの数 N を様々な値に変えたシミュレーションを行った。このルールを RN

($N=1-8$) と表記する。 ρ_0 を 0.50 として計算したところ、R1、R2 では時間とともに ON 状態セルの数が一度減少し、その後増加に転じた。それ以外のルールでは個体数は単調に減少した。平

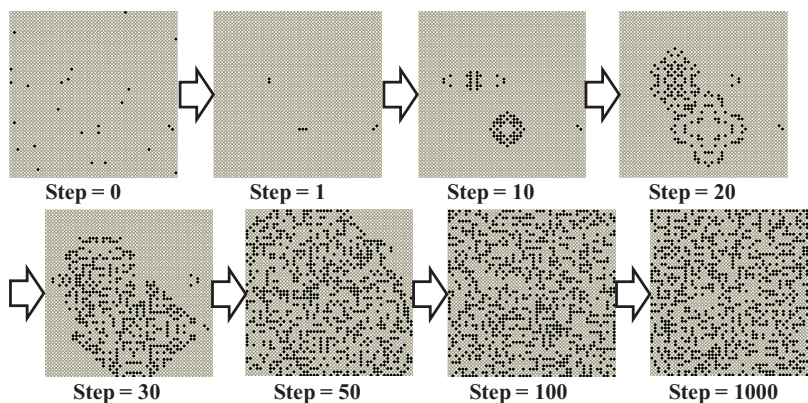


図 3. R2 条件でのシミュレーション結果 ($\rho_0=0.01$)

衡状態に到達した後での ON セルの数を比較すると、R1、R2 ではそれ以外の場合に比べて ON セルの数が多く、2つの場合で大きな隔たりがある (二極分化している) 結果となった。すなわち、ON 状態を生成するための相互作用強度を強める (N を大きくすると、全体としては ON 状態があまり増加しない状況に陥ると解釈できる。興味深いことに、 ρ_0 を 0.01 としてルール R2 にてシミュレーションを行ったところ、ステップ数と共に ON 状態の数が初期状態よりも大幅に増加するパターンが得られた (図 3)。この変化は数の減少を伴わない唯一の例であった。

発表では GLA の物理的な意味と様々な条件でのシミュレーション結果の解釈について議論する。