

[研究ノート] セルオートマトンによるシェルピンスキー ガasket上のランダムウォーク

山崎信孝¹・本田数博²

¹ 大学院工学研究科応用化学専攻終了 (2001 年度)

² 応用化学科 (honda@chem.kanagawa-it.ac.jp)

Random Walk on Sierpinski's Gasket formed by Cellular Automaton method

Nobutaka YAMAZAKI¹⁾・Kazuhiro HONDA²⁾

Abstract

Arrival time and trajectory of a random walk particle on Sierpinski's Gasket formed by the cellular automaton were examined. Start point of the random walk was set at tip (pattern A) and the reverse-direction (pattern B) of Sierpinski's Gasket, respectively.

Under the two conditions, each number of steps and a trajectory of particle by random walk was analyzed. Trajectory of the particle was analyzed using the embedding theorem of Takens.

It was indicated that the random walk of the particle on the fractal showed a chaotic trajectory.

Keywords: Random Walk, Sierpinski's Gaske, Cellular Automaton, Fractal.

1. 緒言

マンデルブローにより導入された非整数次元を持つフラクタル図形¹⁾は雲、川、海岸線、稲妻、木の枝分かれなど自然界において数多く見出すことができる。フラクタル図形は特性的な長さを持たず、その周の長さは測量の単位の長さを小さくしていけば、幾らでも長くなり、図形の一部分を次々に拡大しても元と相似な構造 (自己相似性) を有する。自然科学におけるフラクタル図形の研究は幾何学的特性²⁾、形成機構³⁾およびフラクタル上で起こる緒現象の解明に関する研究に分類できる。

フラクタル構造に伴った特徴的な物性の研究とその応用は今後重要な研究課題の一つであり、例えば、フラクタル上でのランダムウォーク・粒子拡散・捕獲、固体表面のフラクタル構造とその上での化学反応速度論などの研究は電子デバイス設計や触媒設計などと関連して重要であると予想される。

近年、化学の領域においてデンドリマーに代表される枝分かれ分子構造を有する巨大分子化合物の合成・分離技術が確立され機能性分子デバイスなどへの応用が検討され始めている⁴⁾。デンドリマーはその枝分かれ構造から我々にフラクタル図形を連想させる。我々はデンドリマーの持つフラクタル的な幾何学的制約のもとでの粒子

(電子) の拡散の動力学に興味を持った。本報においてフラクタル図形の一つであり、枝分かれ構造を有する Sierpinski ガasket をモデル図形とし、フラクタル上を粒子がランダムウォークする時のフラクタル幾何学特性の影響を受けた非線形動的挙動について検討した。

2. 計算

2-1 Sierpinski ガasket の作成

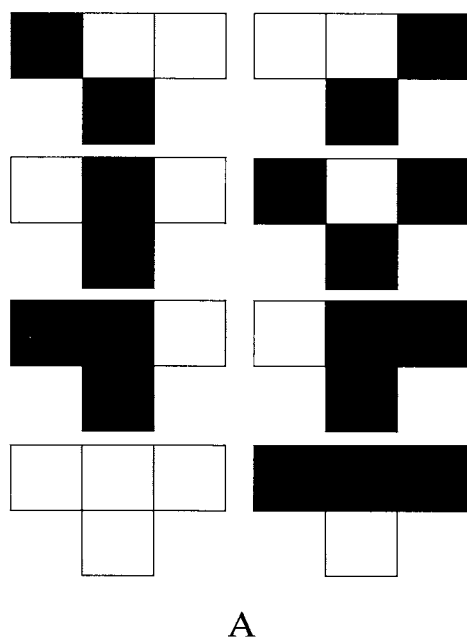
Sierpinski ガasket のフラクタル次元は 1.59 であり、次元が非整数であることからその形の一部分を次々に拡大しても滑らかにならない図形である⁵⁾。Sierpinski ガasket は 1 次元セルオートマトンモデルにより作成した。これは非常に単純なルールで描画できるばかりでなく、正方格子に作製できることから座標の扱いが容易な為である。

パターン作成は、まずセルを横に 100 個並べ左から 50 番目のセルは黒、その他のセルは白を設定する。次にその列の真下にセルを 100 個並べ、その上のセルの状態から予め決められたルールに従いそのセルの色 (白か黒) を決め、さらにその真下にセルを 100 個並べ同様の処理で色を決め、それが 100 列になるまで繰り返した。その予め決めたルールは色が決まっていないセルの真上

のセルの色とその横両隣のセルの色の計3セルの色の情報で決めた。1セルの色は白と黒の2通りであるので3セルの情報は8通りある。従って、色が未決定のセルに対する色の決定の条件は8通りの事象に対してそれぞれ白か黒を決めなければならない。その条件は Fig.1A に示した。ここでT字状に並べられている4つのセルは、上の3つのセルが色を決定するための情報で下のセルがその情報に対する色である。この条件で実行して得られた100列のパターンがFig.1Bである。

2-2 ランダムウォーク

作成されたパターン(Fig.1B)上に仮想粒子を1個用意しそのパターンに制約されたランダムウォークを実行した。ランダムウォークは上下左右の何れかの方向を1セル進ませるプロセスを繰り返すものとし、その1サイクルを1ステップとした。進む方向の確率は上:u, 下:d, 左:l, 右:r ($u+d+l+r=1(100\%)$)を与えた。そのとき行き先のセルが白または境界の場合は何もせず1ステップカウントするものとした。これらの条件でセルオートマトンの開始位置(Fig.1B 上の先端)に粒子を配置してから終了位置(Fig.1B の一番下)に到達するまでの運動と、その逆の終了位置に粒子を配置してから開始位置に到達するまでの運動に対するそれぞれのステップ数及び粒子の軌跡を記録した。



A

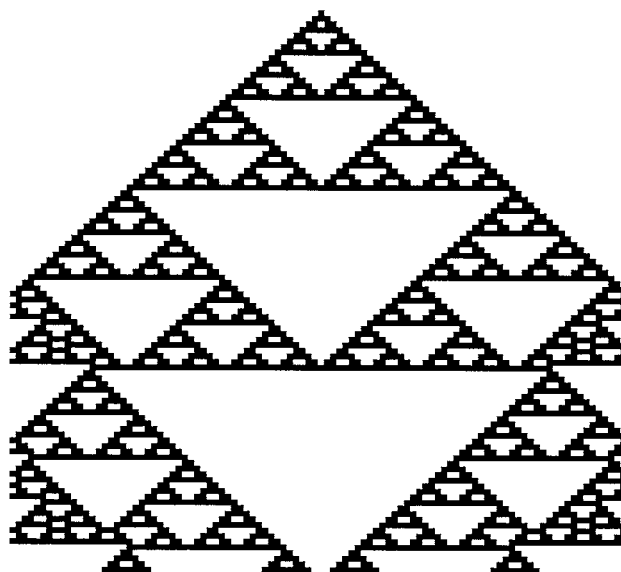
$y=0 \{(0,0)\}$, 右下が $x=99, y=99 \{(99,99)\}$ とした。最後に u, d はそれぞれ 25%に固定し、l を 25~50%まで1%刻みに変化させて計算した。但し、ランダムウォーク実行中 l, r は一定とした。

2-3 アルゴリズム

一連の計算を Fig. 2A に示す。

“preparation”は、ランダムウォークのスタート地点を配置した。そのときパターン A は(99, 50)、パターン B は(99, 51)とした。それは、パターンの右端で黒であるセルのうち一番中央の場所に位置する所としたためである。“Random number generation”は、乱数を 0~99 の整数値で発生させた。乱数発生はモンテカルロ法に用いられる M 系列乱数、漸化式により算出される擬似乱数列を用いた。“Direction decision”は、出てきた数値を Fig2.B のように 0~99 に対応する方向にした。

“Is the movement possible?”, “Particle movement”, “Count”は、進行方向にセルが存在すれば “Particle movement”で移動させた後 “Count”でステップ数をカウント及びそのときの座標を記録した。しかし、進行方向にセルが存在しない 100×100 のフィールドの外の場合、もしくは白いセルであれば “Count” 処理のみ行なった。“x=0”は、粒子がパターンの左端の座標に位置したときに終了させ $x \neq 0$ のとき “乱数発生”まで処理を飛ばした。



B

Fig.1 Cellular Automaton pattern (B) by 3 cells condition (A)

ここで、以上のことを実現するために便宜上3つの準備をした。ひとつ目は作成したパターン(Fig.1B)を右に90°回転させたものをパターンA、左に90°回転させたものをパターンBとした。これはランダムウォークのスタート地点を左端のセルに固定するためである。ふたつ目はパターンA及びBに対し個々のセルに座標を割り当てた。水平方向を x 垂直方向を y とし、左上が $x=0$,

2-4 データ解析

結果で得られたランダムウォークの運動を、Takens の埋め込み定理で解析を行なった。これは Fig.3 のように左にある時系列に対して $Pt\{y(t), y(t+\tau), y(t+2\tau)\}$ を右の位相空間に写像し、得られたアトラクタから平衡、周期、準周期、カオス、ランダムを判別するものである[6]。この計算に対しては $\tau=128$ ステップとした。

3. 計算結果

Fig.4 左上は、パターン A 上のランダムウォークで $l=25\%$ での軌跡を示している。黒い部分はランダムウォークした軌跡で灰色の部分は残りのパターンである。こ

つぎに、 l を 1%刻みに変化させた時のステップ数を Fig.4 右下に示した。全体的には l を上げればステップ数は減少した。ところが、単調減少ではなく $l=28\%$ のときを極大とし、また 40%付近で大きなばらつきがあった。

一方、パターン B 上で $l=25\%$ のときの結果は、Fig.5 左上に示すように軌跡は全体のパターンの約 3/4 を占めていて、ステップ数は 238509 でありパターン A と比較

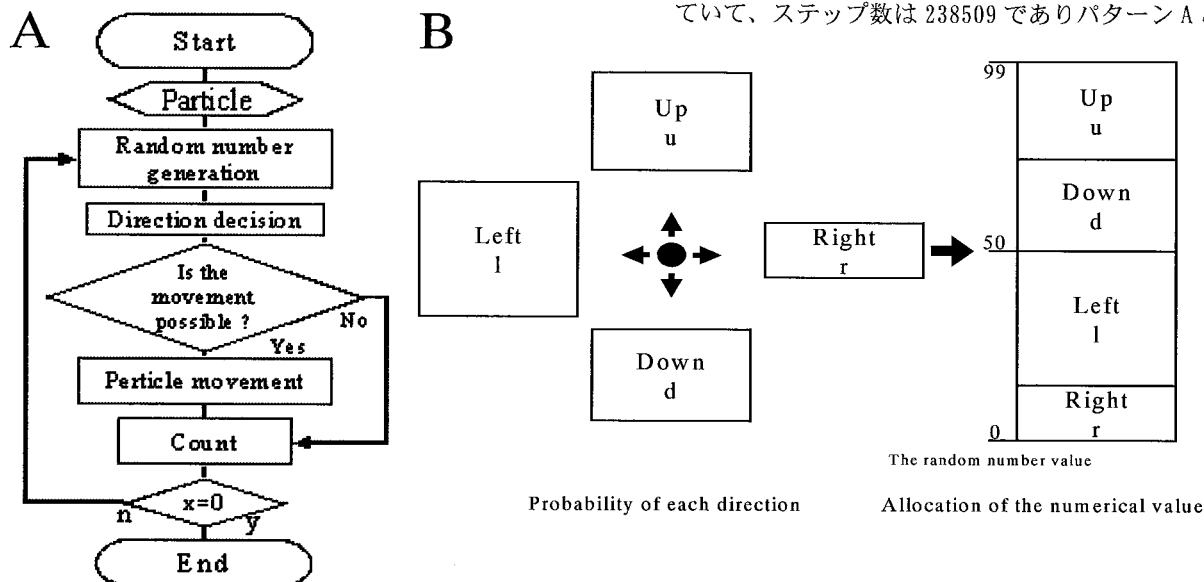


Fig.2 Flowchart of Random Walk (A) and Decision of direction of the particle (B)

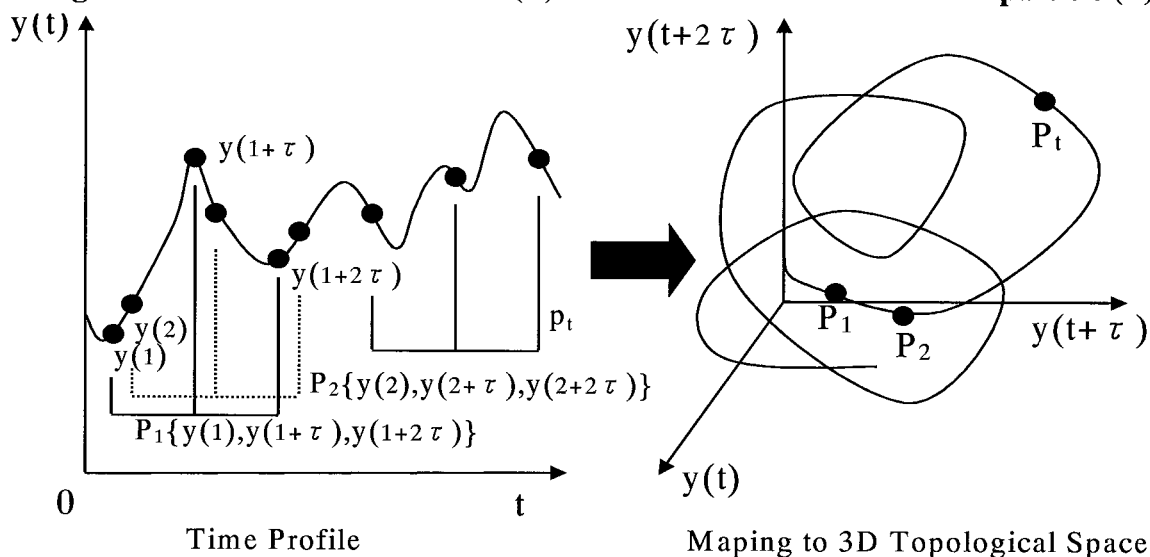


Fig.3 Takens Embedding Theorem

れは、パターン A のほぼ上半分を覆い尽くした軌跡であり計算終了までに 29690 ステップ要した。そして Fig.4 右上は、 $l=30\%$ である。 $l=25\%$ と比較して軌跡の分布がパターンの下部であり、軌跡の広がりが増えステップ数は 8280 に減少した。更に Fig.4 左下は $l=35\%$ であり $l=30\%$ と比較すると軌跡の広がりはいずれも変わらずステップ数は 6867 であった。しかし、詳細に調べると右から左に行くときに障害になる縦に平行な壁が幾つか存在しその部分に比較的上下に大きな軌跡の広がりが確認できた。

するとかなり多かった。これは、パターンの左側のセル数が右側のセル数より少ないので、方向の偏りのないランダムウォークは、セル数の数が多いほうが安定であるところから、ゴールである左端のセルにはなかなか到達できず、ステップ数が多くなったと思われる。次に $l=30\%$ の結果を Fig.5 右上に示す。この結果では、軌跡の広がりは一気に減少しステップ数は 6628 であった。この極端な減少はパターン A での場合では壁として存在していたが、反転することによって粒子は、壁として感じずあまり引っかかることがない。従って l を増加さ

せたことによって急激にステップ数の減少につながったと思われる。さらに Fig. 5 左下は、 $l=35\%$ のときの結果である。軌跡の広がりや $l=30\%$ と比較するとあまり変化はなくステップ数は 2590 であり更にステップ数の減少につながった。

同様に l を 1%刻みに変化させた時のステップ数を Fig. 5 右下に示した。この結果は、 l を増加させるとステップ数は急激に減少し、横軸に対して漸近的な減少でありほとんど単調減少であった。即ちパターン A で見られたばらつきがほとんど確認できなかった。同様に乱数の初期値を変えたときの結果は Fig. 6 に示してあり、パターン A では l の増加に対して減少の傾向があるもののばらつきがあったが、パターン B では先と同様な単調一方 $l=30\%$ の x 座標の変位は、パターン A では確認できた階段状に減少する傾向が確認できずパターンの壁に遮られた形跡は見られなかった。それに対し y 座標の変化は、50 以上で推移していた。パターン A でのランダムウォークの時系列を Takens の埋め込み定理を用いて 3 次元位相空間に写像した結果を Fig. 9 に示した。 $l=25\%$, x の時系列のアトラクタは、右上, 中, 右下に塊があった。 y の時系列のアトラクタは 1 つの大きな塊であった。この結果から x の時系列は、5 つの分類には当てはまら

なかった。 y の時系列のアトラクタはランダムな運動であることが示唆された。次に $l=30\%$ で x の時系列のアトラクタは、糸がいくつか球に成っているような軌道が確認できるがほぼ直線的に右下に到達していた。この軌道の玉の部分は、パターンの壁に相当する部分で準安定な状態があるものと考えられ、その部分ではランダムな運動であることが示唆された。 y の時系列のアトラクタは 3 つの輪を確認でき左側の 2 つの輪のうち左側の輪より中側の輪が支配的な軌道であるので、代表的には 2 つの輪を構成する軌道と見なすと Lorenz のカオスアトラクタに似た軌道でカオス的な運動であることが示唆された。次に、パターン B での結果を Fig. 10 に示す。 $l=25\%$, x の時系列のアトラクタは、長い楕円球状に軌道が満遍なく詰まった構造になっているためこの運動はランダムである可能性が高かった。 y は大きな塊が 2 つ存在していることから、これも Lorenz アトラクタに似たカオス的な運動であると確認できた。 $l=30\%$ で x の時系列のアトラクタは 2 ヶ所糸が球に成っているような軌道が確認できるが略直線的に右下に到達した。 y の時系列のアトラクタはパターン A ほどはっきりしていないがこれも Lorenz アトラクタに似たカオス的な運動であることが示唆された。

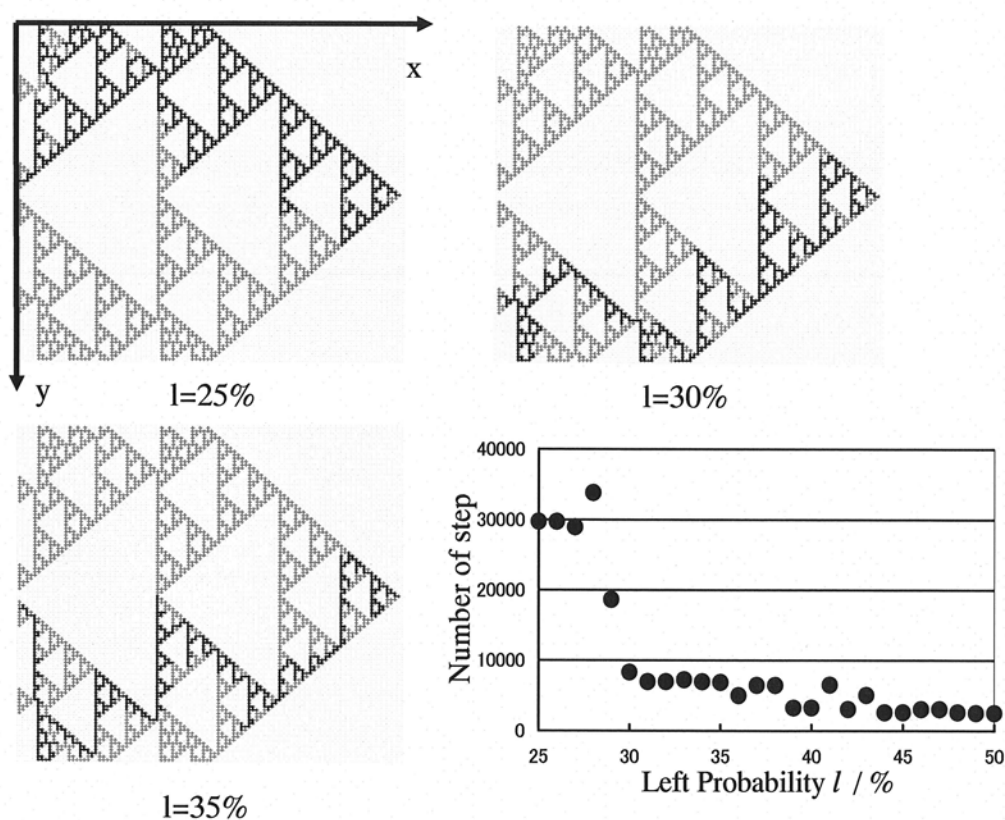


Fig.4 Locus and change in number of step to arrival for the result of a random walk on pattern A.

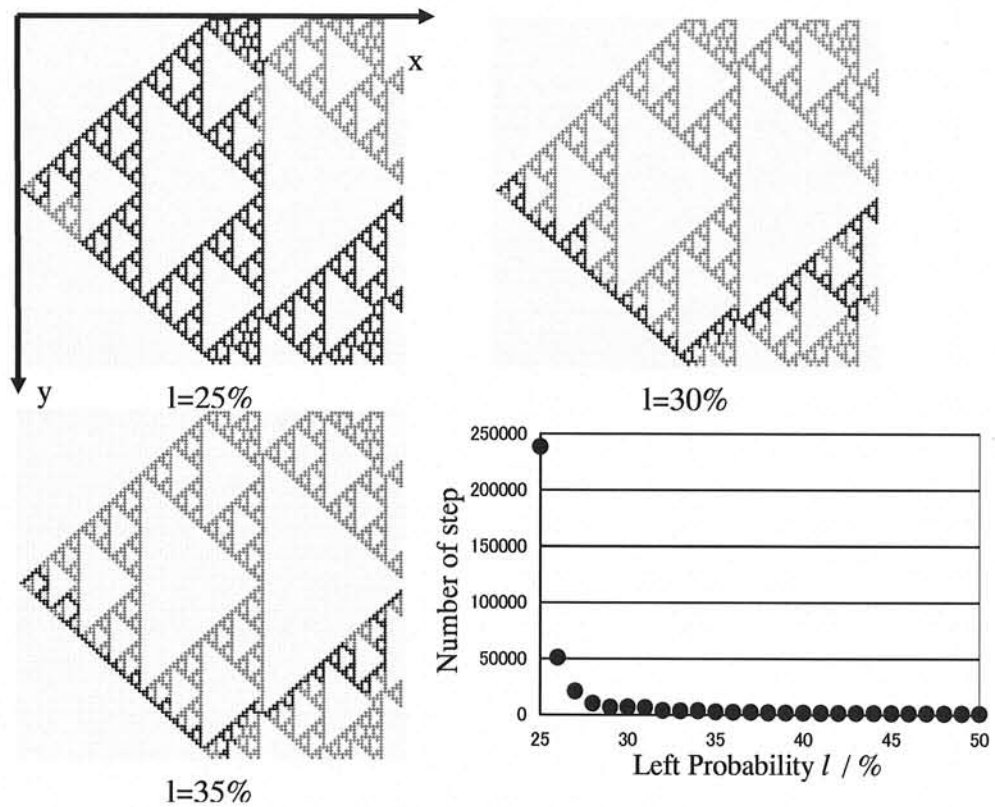


Fig.5 Locus and change in number of step to arrival for the result of a random walk on pattern B.

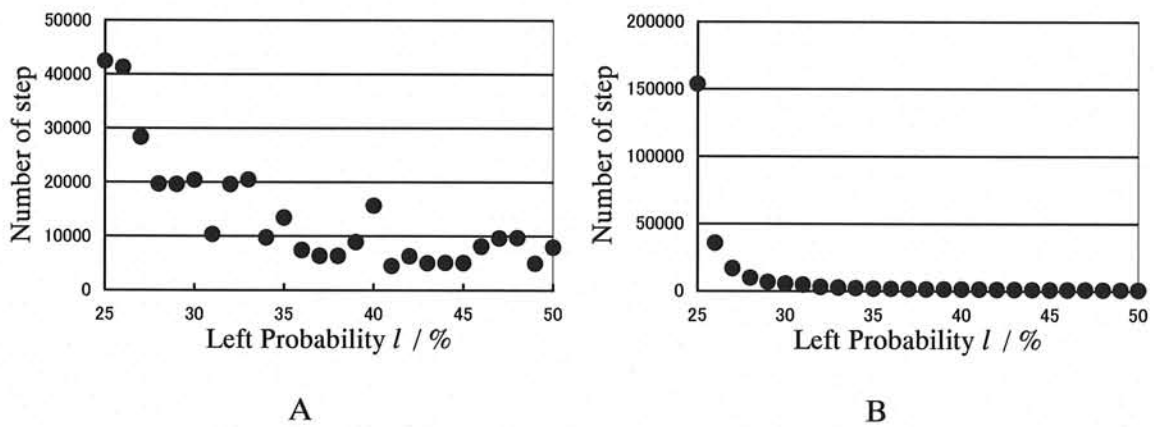


Fig.6 Change of number of step to arrival as the initial value of random number change

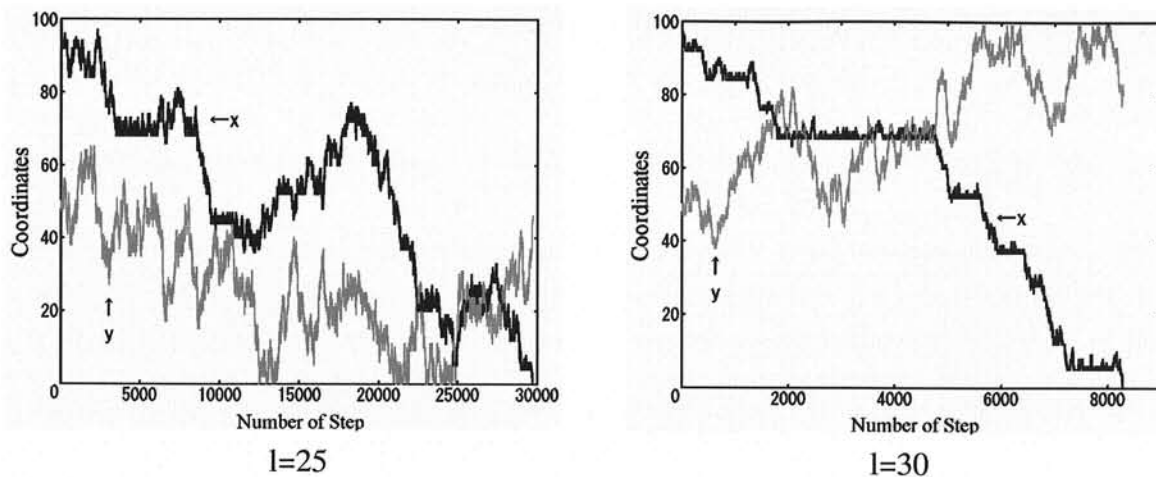


Fig.7 Coordinate change of the random walk particle on pattern A

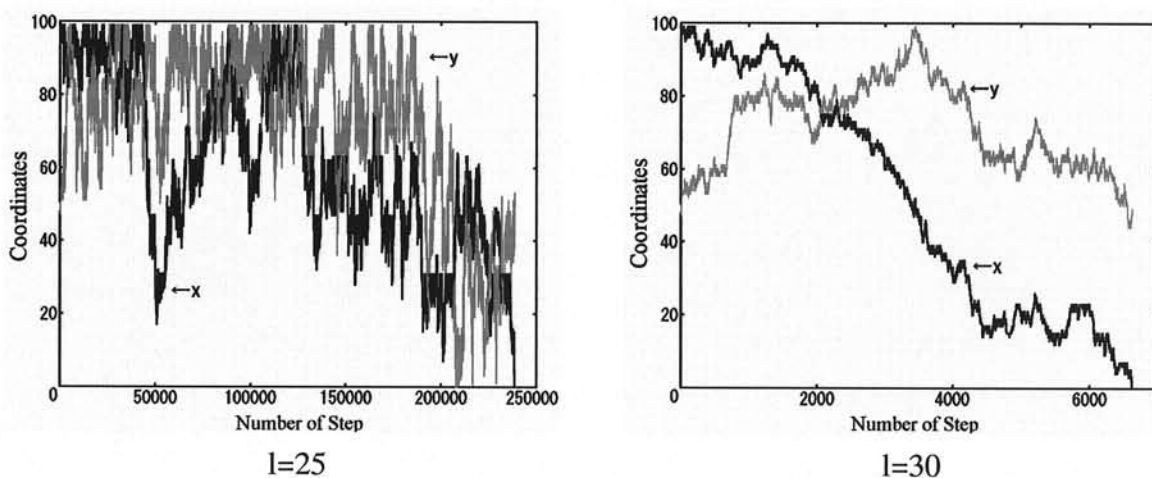


Fig.8 Coordinate change of the random walk particle on pattern B

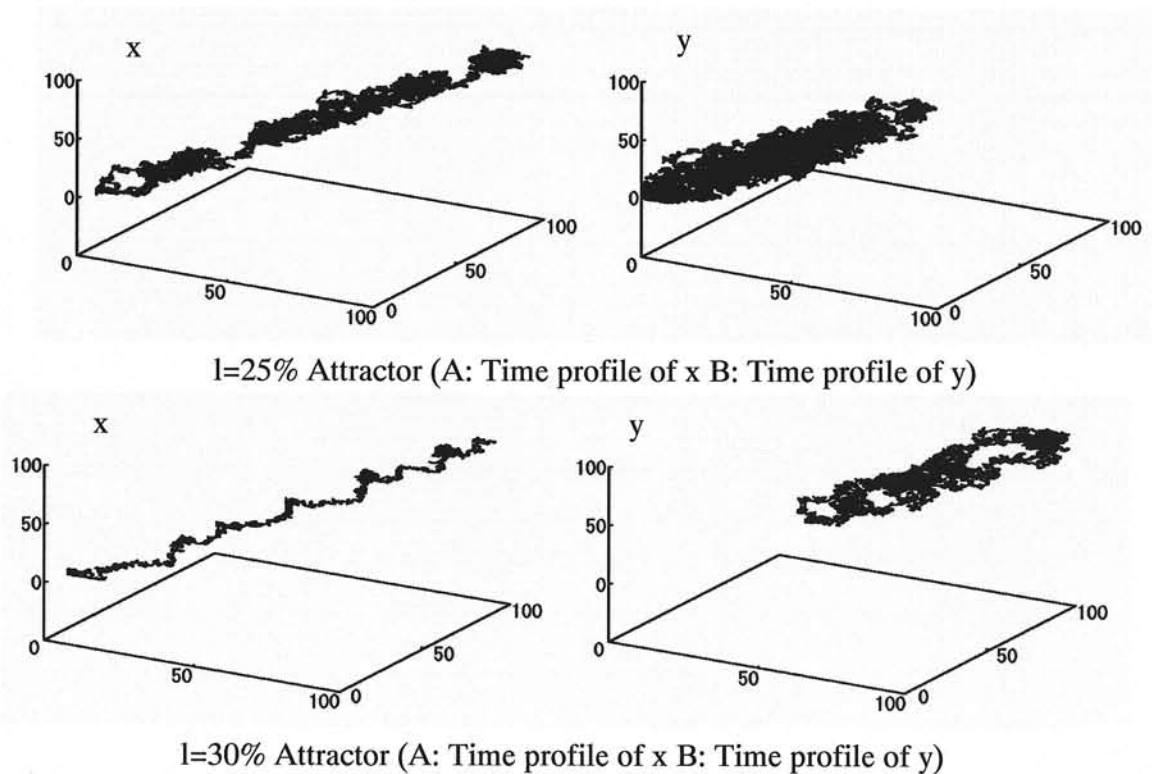


Fig.9 The attractor mapped onto the 3D topological space by using embedding theorem of Takens for the time profile of random walk on pattern A

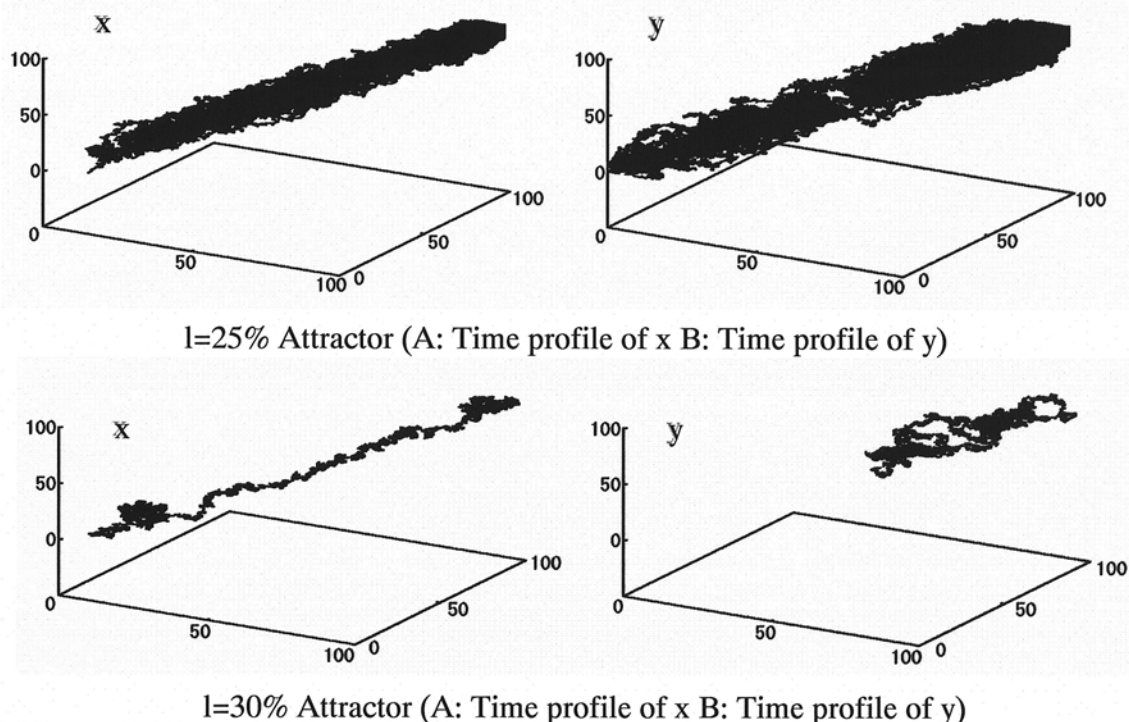


Fig.10 The attractor mapped onto the 3D topological space by using embedding theorem of Takens for the time profile of random walk on pattern B

4. 結言

ランダムウォークの軌跡は l を大きくすればするほど広がり減少した。また、計算終了までのステップ数は減少した。しかしパターン A 及び B の違いによりその傾向に差が現れた。1 つは、パターン A は l の増加に対してステップ数のばらつきがあったのに対してパターン B では殆ど単調減少であった。それは、パターン A では右から左に粒子が移動するとき、壁となるものが存在し y 座標によってはそこでステップ数が増えることがあるが、パターン B ではそれがなかったためであると考えられる。2 つめは、 $l=25\%$ のときのステップ数がパターン B のほうがパターン A より大きかった。これは、パターン A は左側のセル数が右側のセル数より多いので、方向の偏りのないランダムウォークは、セル数の数が多いほうが安定であることから、ゴールである左端のセルにすぐ到達できたが、パターン B では逆にゴールになかなか到達できずステップ数が多くなったと思われる。また粒子の運動は x 軸に関してはいくつかの準安定な座標で揺らいでいる事が確認できたが、それはパターン内の壁で粒子が揺らいでいることと考えられるが、Takens の埋め込み定理によるアトラクタ応答から理想的なランダムでもカオスでもない運動であると考えられた。

さらに l を増加させるとアトラクタの広がり狭くなるものの依然として準安定な軌道(軌道の塊)が存在した。 y 軸の時系列のアトラクタ応答からカオス的な運動である可能性が見出された。それは、パターンがフラクタル性を呈しておりその影響がカオス的な運動を生み出す結果となったと思われる。

5. 参考文献

- 1) B.B.Mandelbrot: The Fractal Geometry of Nature (Freeman, San Francisco, 1982).
- 2) 高安秀樹: フラクタル (朝倉書店, 1986).
- 3) T.Vicsek: Fractal Growth Phenomena (World Scientific, Singapore, 1989).
- 4) Sadamoto, R.; Tomioka, N.; Aida, T.; Photoinduced Electron transfer Reaction through Dendrimer Architecture.; J. Am. Chem. Soc., 118, 3978 (1996).
- 5) S. Wolfram, Cellular Automata and Complexity - Collected Papers, Addison-Wesley (1994).
- 6) 合原 一幸: カオス時系列解析の基礎と応用 (産業図書, 2000).