

# ランダム拡散律速凝集による雪結晶モデル

川出 晴多 (指導教員: 吉田裕亮)

## 1 はじめに

コッホ曲線やマンデルブロ集合などに代表されるフラクタルとは、図形の部分と全体が自己相似となっている幾何学の概念である。この概念は自然界が作り出す形にも多く見られる。具体的な例としては、雪の結晶、細かく枝分かれした木の枝や海岸線などがそうである。このフラクタルを統計的に形成するモデルの一つとして、DLA(拡散律速凝集:Diffusion-Limited Aggregation)モデルが存在する。

本研究では、自然界のフラクタルとして代表される雪の結晶の形状やその性質が、DLAモデルの凝集パラメータによってどのように変化するかを考察する。

## 2 DLA

DLAとは金属などの結晶成長のシミュレーションで用いられる最もシンプルなモデルの一つである。

### 2.1 DLAのアルゴリズム

ブラウン運動  $B_t$ , ドリフト関数  $\mu(x, t)$ , 拡散係数  $\sigma(x, t)$  を用いて与えられる確率微分方程式

$$dX_t = \mu(X_t, t)dt + \sigma(X_t, t)dB_t$$

で記述された拡散過程を格子上で離散化し、で拡散する粒子が以下の手順で凝集するモデルを考える。

1. 格子の原点に核となる粒子を置く。
2. 原点を中心とする十分大きな半径の円周上の任意の点から粒子を発生させる。
3. 発生させた粒子を拡散させる。
4. 原点の粒子と隣接したところで付着させる。
5. 上記の手順を繰り返し平面結晶を形成する。

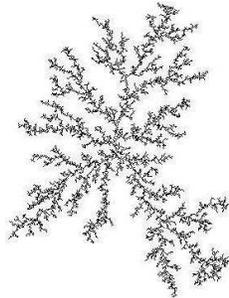


図 1: 上記アルゴリズムで生成した DLA 平面結晶

### 2.2 DLAの性質

図1のように、DLA平面結晶は大きく外側に伸びた幹が枝別れし、何重にも分岐のある枝別れ構造を持っている。細部を拡大してみると全体の枝と似たような形状をしており、統計的自己相似性を持つ。また、そのフラクタル次元は約 1.71 である。

その形状は、拡散する粒子が核に付着する確率によって大きく左右される。付着確率  $p$  が小さくなるにつれ

て、粒子が中心部に入り込みやすくなるため、図3、図4、のように全体的に枝が成長せず太った形になりやすいためである。



図 2:  $p = 1.0$

図 3:  $p = 0.5$

図 4:  $p = 0.3$

## 3 フラクタル次元

フラクタル図形の複雑さのレベルを定量化するフラクタル次元という量がある。

図形のフラクタル次元を測る手法は様々であるが、本研究ではその手法の一つである回転半径法を使用する。

### 3.1 回転半径法

与えられた平面結晶を構成する要素の数を  $N$ ,  $i$  番目の構成要素の位置ベクトルを  $\vec{r}_i (i = 1, 2, \dots, N)$ , 対象図形の重心の位置ベクトルを  $\vec{r}_c$  とする。この時、回転半径  $R_g$  には以下の式が成立する。

$$R_g = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\vec{r}_i - \vec{r}_c|^2}$$

$$R_g \approx N^{\frac{1}{D}}$$

この時、 $D$  がフラクタル次元を表す。

この手法により測定した図2、図3、図4のフラクタル次元を以下に示す。

付着確率 $p$	1.0(図 2)	0.5(図 3)	0.3(図 4)
フラクタル次元	1.70499	1.747947	1.771274

表 1: 回転半径法による DLA のフラクタル次元

太った形になるにつれてフラクタル次元が高くなることの予測は容易であるが、確かに次元が高くなっていることがわかる。

## 4 六角格子上ででのシミュレーション

雪の結晶は、水の結晶の表面張力が六方対象性を持つことにより六角形を基本とした形になることが原因だと考えられている。そこで、六角格子上で DLA シミュレーションを提案する。

### 4.1 六角格子

正方格子は一つの座標に隣接する座標が 4 つ存在し  $x$  軸,  $y$  軸が直交するのに対し、六角格子は一つの座標に隣接する座標が 6 つ存在し,  $x$  軸,  $y$  軸が 60 度で交わる。

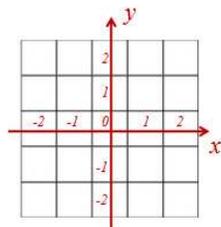


図 5: 正方格子

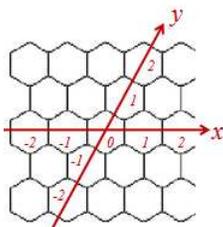


図 6: 六角格子

## 4.2 シミュレーションの手順

水の結晶の六方対称性を考慮し、六方向に付着しやすい重みを付けて DLA シミュレーションを行う。

1. 中心の粒子の六方向に対しては確率 1 で付着.
2. それ以外の粒子に対しては確率  $P$  で付着.
3. 確率  $P$  で付着した粒子と同一方向 (枝別れした方向) には確率  $P$  で付着.
4. 確率  $P$  で付着した粒子からさらに枝別れする場合確率  $P * P$  で粒子は付着.
5. 同様の規則に従って、枝別れ回数が  $n$  回の時付着確率は  $P^n$  となる.

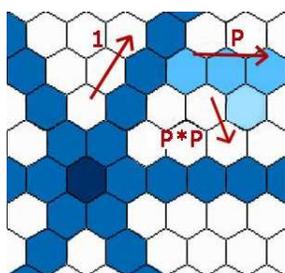


図 7: シミュレーションの手順

## 5 結果

枝別れの確率を上げるにつれ、フラクタル次元が増したが、下記のグラフで示されるように収束が見られた。

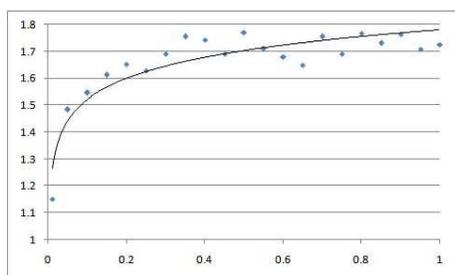


図 8: 横軸:枝別れ確率  $P$  縦軸:フラクタル次元

この結果と、画像の特徴量の一つとして扱われるモーメント特徴、慣性主軸を用いて、フラクタル次元 1.51~1.55 である実際の樹枝状結晶との比較を示す。モーメント特徴とは、画素の位置に重みつけをして合計した数値であり、デジタル画像の  $(p+q)$  次モーメントは

$$M_{pq} = \sum_x \sum_y i^p j^q f(i, j)$$

にて求められる。また、慣性主軸  $\theta$  とは図形が伸びている方向を示す特徴量であり、原点を通る傾き  $\theta$  の周りの 2 次モーメントが最小となる角度  $\theta$  で示される。

$$\tan^2 \theta + \frac{M_{20} - M_{02}}{M_{11}} \tan \theta - 1 = 0$$

フラクタル次元	$M_2$	$M_3$	$\theta$
1.51~1.55	72892899	-1018993	-0.392699

表 2: 実際の樹枝状結晶

P	フラクタル次元	$M_2$	$M_3$	$\theta$
0.05	1.482878	56424522	-3859317	0.392699
0.10	1.546189	71936633	-1985823	0.392699
0.30	1.689818	79840103	-4142437	0.553574
0.50	1.716967	88687256	-2237814	0.392699
0.70	1.755211	117936554	-2854027	0.392699
1.00	1.726122	311930763	-4090547	0.553574

表 3: DLA による結晶

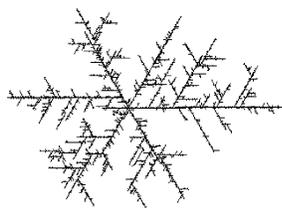


図 9:  $P = 0.1$

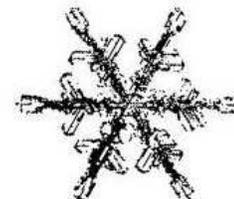


図 10: 実際の樹枝状結晶

表 2, 表 3 より  $P = 0.1$  前後の枝別れ確率のものがフラクタル次元、慣性主軸、モーメント特徴の比率、共に実際の樹枝状結晶と非常に似通った数値であることが分かる。

## 6 まとめと考察

今回は樹枝状結晶の考察のみに留まった。この他にも拡散係数、つまり結晶の成長速度のパラメータによって生成する結晶の密度が大きくなることを確認できた。樹枝状だけでなく広幅六角状や板状結晶など多岐にわたる結晶の形状について考察することが出来ると推測される。雪の結晶の形状の決定的なパラメータについては未だに明確になっておらず、今後のシミュレーションによる検証も重要になってくると考えられる。

## 7 参考文献

1. <http://www.sci.osaka-cu.ac.jp/phys/crys/ice/lect7.html>
2. CG-ARTS 協会:デジタル画像処理
3. 松下 貢:フラクタルの物理