

解説

凝集・分解過程における部分凝集

大月俊也, 關山信

(横浜市立大学生命ナノシステム科学研究科)

山本洋

(北里大学一般教育部)

1 はじめに

様々な微粒子が寄り集まってより大きな集合体を形成する凝集現象は、物質科学のみならず社会・経済科学においても幅広く観測される。代表例としてはコロイド系におけるクラスターの凝集やエージェント（会社）の合体などが挙げられる。凝集のみが生じている場合、最終的に全ての粒子が集合した巨大クラスターが出現する。社会・経済現象の文脈では、1つのエージェント（会社）が全ての資産を独占する独り勝ち状態となる。一方、凝集と同時に分解も起こっている場合は凝集と分解が釣り合った定常状態が存在し、そこではクラスターサイズは一定の分布に従うと考えられる。どのような条件のもとでどのような分布が出現するか明らかにすることは、凝集・分解過程を理論的に研究する際の中心的な課題となる。凝集過程は長期間精力的な研究が行われ、理論的にも多くの成果が得られている [1,2]。それに比べて凝集と分解が共存している系については解析が進んでおらず、定常分布についてもあまり知られていない。近年、我々のグループでは分解過程に各種の条件が付いている場合の凝集・分解過程の理論的・数値的解析を行い、一定の条件下で「部分凝集」と名付けられた現象が起こることを明らかにした [3-6]。部分凝集している場合、定常状態で巨大クラスターがベキ分布に従うクラスターと共存するという、極めて特徴的な挙動を示す。このような状態については、今までほとんど知られていなかった。この報告では、部分凝集現象を中心に、凝集・分解過程の動的挙動について解説する。

次節では、サイズ1のクラスター（モノマー）のみが欠けるチップングが凝集と共に起こる凝集・チップング過程について調べる。ここで重要なことは、基礎方程

式が解析的に解けるため、部分凝集の基本的な性質について厳密な議論ができることにある。3節では、チップングを拡張し、サイズが有限のクラスターが欠ける拡張された凝集・チップング過程について研究する。4節では、分解して生成されるクラスターのサイズには有限の上限はないが、ベキの重みが付いている凝集・重み付き分解過程について調べる。このような過程は自然界に幅広く存在すると考えられ、ここでの結果は応用上重要であると期待される。最後に5節で得られた結果をまとめ、議論する。

2 凝集・チップング過程

本節では次のようなプロセスを考える [3]。系は N 個のクラスターと M 個のモノマーから構成される。初期状態で各クラスターはある初期分布に従う数のモノマーを含む。クラスターサイズの時間発展は2つの基本過程で引き起こされる。(1) 凝集過程：ランダムに選ばれたサイズ X と Y の2つのクラスターが合体し、サイズ $X+Y$ の1つのクラスターを形成する、 $A_X + A_Y \rightarrow A_{X+Y}$ 。(2) チップング過程：ランダムに選ばれたサイズ $Z (\geq 2)$ のクラスターが欠け、サイズ $Z-1$ と1の2つのクラスターに分解される、 $A_Z \rightarrow A_{Z-1} + A_1$ 。凝集過程とチップング過程は常に1対のセットとして発生する。そのため系の全クラスター数 N は M と共に保存される。本研究ではモノマーは大きさを持たない質点とみなす。クラスターの空間構造は考慮せず、クラスターサイズ（各クラスターに含まれるモノマー数）のみに着目する。このような場合、定常状態でのクラスターサイズの分布関数 $P(X)$ を決める基礎方程式は、次のような Smoluchowski 方程式で与えられる。

$$(1 - P(1))(1 - P(1)) + \frac{P(2)}{1 - P(1)} = (P(1))^2 \quad (X = 1), \quad (2-1)$$

$$\sum_{i+j=X} P(i)P(j) + \frac{P(X+1)}{1 - P(1)} = 2P(X) + \frac{P(X)}{1 - P(1)} \quad (X \geq 2). \quad (2-2)$$

ここで式 (2-1), (2-2) の左辺はクラスターの生成、右辺は消滅を示し、Smoluchowski 方程式は生成と消滅が釣り合って定常状態になることを表す。この方程式を z 変換の手法を用いて解析する。分布関数 $P(X)$ の z 変換 $\phi(z)$ は

$$\phi(z) = \sum_{X=0}^{\infty} P(X)z^{-X} \quad (2-3)$$

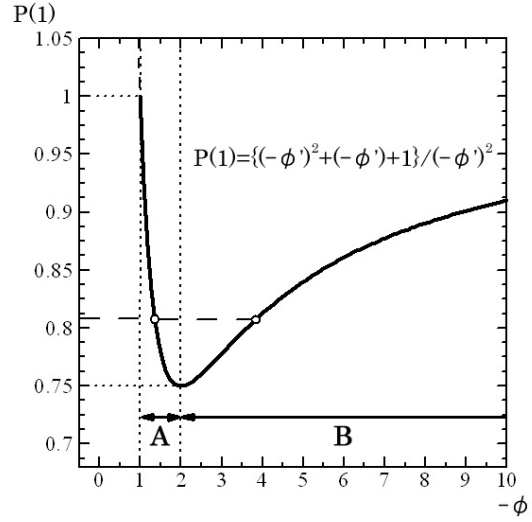


図 2-1: $P(1)$ の $-\phi'(1)$ 依存性 [3].

で定義される. ただし, $P(0) = 0$ とする. 式 (2-3) を用いて式 (2-1), (2-2) を書き換えると,

$$\{1 - P(1)\}\phi^2(z) + \{z - 3 + 2P(1)\}\phi(z) - P(1) + \frac{1}{z} = 0 \quad (2-4)$$

となる. 式 (2-4) を z で微分する. 1 回微分して $z = 1$ を代入すると, 規格化の条件 $\phi(1) = 1$ より恒等式が得られる. もう 1 回微分して $z = 1$ を代入すると, 次式が得られる.

$$\{1 - P(1)\}\phi'(1)^2 + \phi'(1) + 1 = 0. \quad (2-5)$$

ここで $-\phi'(1) = \sum XP(X) = \langle X \rangle = M/N$ は平均クラスターサイズとなり, 前に述べたようにモノマー数 M , クラスター数 N 共に保存されるため, $-\phi'(1)$ も保存量となる. そこでここでは平均クラスターサイズは, 系の特徴を記述するコントロールパラメーターとなる. $-\phi'(1)$ が与えられると, 式 (2-5) より $P(1)$ が決まる. 図 2-1 に $P(1)$ を $-\phi'(1)$ の関数として示す. ただし, 平均クラスターサイズは必ず 1 より大きくなるため, $-\phi'(1)$ の定義域は $-\phi'(1) > 1$ で与えられる.

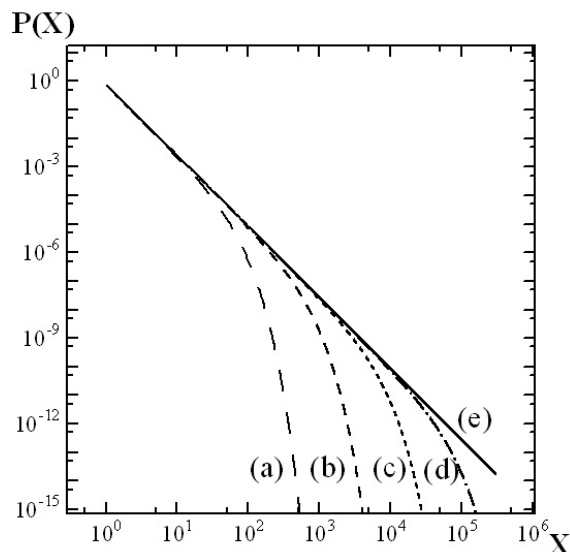


図 2-2: 分布関数 $P(X)$ の $P(1)$ 依存性. (a) $P(1) = 0.76$, (b) $P(1) = 0.751$, (c) $P(1) = 0.7501$, (d) $P(1) = 0.75001$, (e) $P(1) = 0.75$ [3].

最初に $-\phi' = 2$ で式 (2-5) が重根 $P(1) = 3/4$ を持つ場合について考える. $P(1) = 3/4$ を式 (2-4) に代入すると

$$\phi(z) = 3 - 2z \pm 2z\left(1 - \frac{1}{z}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (2-6)$$

が得られ, $z \sim 1$ 近傍の特異性は

$$\phi(z)|_{z \sim 1} \sim 1 \pm 2\left(1 - \frac{1}{z}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (2-7)$$

で与えられる. これより分布関数の $X \rightarrow \infty$ での漸近挙動は傾き $-5/2$ のべき分布

$$P(X) \sim \frac{3}{4} \frac{1}{X^\alpha}, \quad \alpha = \frac{5}{2} \quad (2-8)$$

となることが導かれる.

次に, $2 > -\phi'(1) > 1$ (図 2-1 の領域 A) で解を求める. このとき $P(1)$ は $1 > P(1) > 3/4$ となる. $P(1)$ が決まると $P(X)$, ($X \geq 2$) は漸化式 (2-2) より, 逐次, 与えられる. このようにして数値的に求めた分布関数を図 2-2 に示す. 図よりこの領域での $P(X)$ の挙動は, $\phi' = 2$, $P(1) = 3/4$ を臨界点とする臨界挙動に非常によく似ていることがわかる. このことを解析的に議論するため, $P(1) = \frac{3}{4} + \epsilon$ と置き, 逆 z 変換

$$\begin{aligned} P(X) &= \frac{1}{2\pi i} \oint z^{X-1} \phi(z) dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint z^{X-1} (z-1) \sqrt{1 - \frac{1-4\epsilon}{z}} \end{aligned} \quad (2-9)$$

の極限 $\epsilon \rightarrow 0$ での挙動を調べる. 式 (2-9) の最も特異な項は次式で評価できる.

$$\begin{aligned} P(X) &\sim \frac{1}{2\pi i} \oint e^{X\{(z-1) - \frac{(z-1)^2}{2} + \dots\}} (z-1) \sqrt{z-1+4\epsilon} dz \\ &\sim \frac{1}{2\pi i} \oint e^{X\epsilon\eta} \epsilon\eta \sqrt{\epsilon\eta+4\epsilon} \cdot \epsilon d\eta \sim X^{-\frac{5}{2}} \Psi(\epsilon X). \end{aligned} \quad (2-10)$$

ここでスケーリング関数 $\Psi(Y)$ は

$$\Psi(Y) = \frac{(Y)^{\frac{5}{2}}}{2\pi i} \oint e^{\eta Y} \eta \sqrt{\eta+4} d\eta \quad (2-11)$$

で与えられる. これより通常のスケーリング関係式が成立することが明らかになった.

最後に領域 $\langle X \rangle = -\phi'(1) > 2$ での分布について調べる. 図 2-3 に $N = 100000$, $\langle X \rangle = -\phi' = 202$ での分布関数のシミュレーション結果を示す. 図より傾き $-5/2$ のベキ分布と巨大クラスターが共存していることがわかる. ベキ分布の平均クラスターサイズ $\langle X \rangle$ は 2 であるため, ベキ分布には $2N$ 個のモノマーが含まれる. 従って, 巨大クラスターのサイズは $(\langle X \rangle - 2)N = 200N$ となる. 我々はこのようなマクロなオーダー $\mathcal{O}(N)$ のクラスターがベキ分布と共存している状態を, 「部分凝集」と名付ける. さらに $\langle X \rangle = -\phi'(1)$ を 3 から 10002 まで変化させてシミュレーションを行い, 全てにおいて図 2-3 と同様に部分凝集状態が実現していることを確認した.

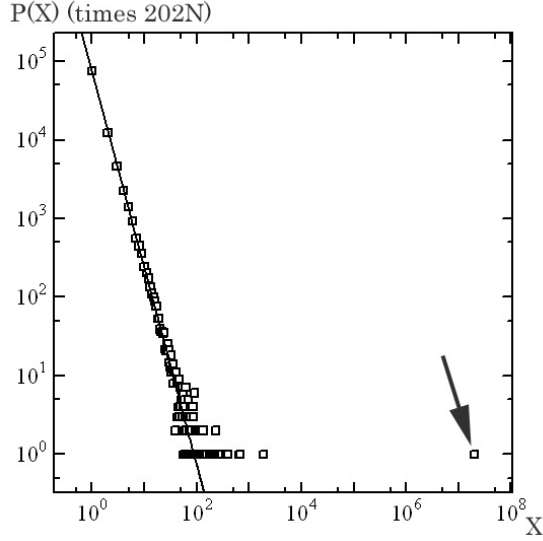


図 2-3: $N = 100000$, $\langle X \rangle = -\phi' = 202$ での分布関数 [3].

3 凝集・拡張チップング過程

前節ではサイズ 1 のクラスターのみが欠けて生成される 1-チップング過程を取り扱ったが, 本節ではそれを拡張し, サイズ L 以下のクラスターのみが生成される場合 $A_Z \rightarrow A_{Z-n} + A_n$ ($L \geq n \geq 1$) を考える [5]. まず最初に $L = 2$ の 2-チップング過程を解析する. ここではクラスターの生成・消滅を表す Smoluchowski 方程式は次式で与えられる.

$$\left(\frac{1}{2} + \frac{P(2)}{2(1-P(1))} \right) + \frac{P(2)}{1-P(1)} + \frac{P(3)}{2(1-P(1))} = 2P(1)(1-P(1)) + 2P(1)^2 \quad (X=1), \quad (3-1)$$

$$\left(\frac{1}{2} - \frac{P(2)}{2(1-P(1))} \right) + P(1)^2 + \frac{P(3)}{2(1-P(1))} + \frac{P(4)}{2(1-P(1))} = 2P(2)(1-P(2)) + 2P(2)^2 + \frac{P(2)}{1-P(1)} \quad (X=2), \quad (3-2)$$

$$\sum_{i+j=X} P(i)P(j) + \frac{P(X+1)}{2(1-P(1))} + \frac{P(X+2)}{2(1-P(1))} = P(X)\left(2 + \frac{1}{1-P(1)}\right) \quad (X \geq 3). \quad (3-3)$$

前と同様に上式に z 変換を適用すると、次式が得られる。

$$\begin{aligned} & \phi(z)^2 + \phi(z) \left\{ \frac{1}{2(1-P(1))} (z^2 + z) - \left(2 + \frac{1}{1-P(1)} \right) \right\} \\ & \quad - \frac{z}{2(1-P(1))} P(1) - \frac{1}{2(1-P(1))} (P(1) + P(2)) \\ & + \frac{1}{2z} \left(1 + \frac{2P(1)}{1-P(1)} + \frac{2P(2)}{1-P(1)} \right) + \frac{1}{2z^2} \left(1 - \frac{P(2)}{1-P(1)} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3-4)$$

ここではサイズ 2 のクラスターが生成されることを反映して、 $z^{\pm 2}$ の項が現れる。式 (3-4) を 2 回微分して $z = 1$ を代入すると

$$2(1-P(1))\phi'(1)^2 + 3\phi'(1) + 5 - 2P(1) - 2P(2) = 0 \quad (3-5)$$

となる。前と同様、クラスター分布がベキ分布となる臨界状態では、式 (3-5) は重根を持つと考えられる。この条件より $P(2)$ および平均クラスターサイズの臨界値が求まる。

$$P(2) = \frac{1}{8(1-P(1))} (31 + 16P(1)^2 - 56P(1)), \quad (3-6)$$

$$-\phi'_c = \langle X \rangle_c = \frac{3}{4(1-P(1))}. \quad (3-7)$$

ただし、1-チップング過程の場合と異なり、 $P(1)$ の臨界値は解析的には決まらない。そこで、漸化式 (3-1)-(3-3) の数値解より計算し、 $P(1) = 0.6769$ を得た。 $P(1)$ が決まると、 $-\phi'_c$ や $P(X)$, ($X \geq 2$) は逐次的に次のように求まる。 $-\phi'_c = 2.32126$, $P(2) = 0.1643$, $P(3) = 0.0588$, \dots 。これらの値はシミュレーションの結果 $P(1) = 0.67732$, $P(2) = 0.16378$, $P(3) = 0.05883$ と良く一致する。また臨界状態では、式 (3-4) は次のような解を持つ。

$$\phi(z) = \phi_{\text{regular}}(z) \pm \frac{1}{4(1-P(1))} \sqrt{g(z) \left(1 - \frac{1}{z}\right)^3}, \quad (3-8)$$

$$g(z) = z^4 + 5z^3 + (8P(1) + 1)z^2 - (8P(1)^2 - 40P(1) + 23)z. \quad (3-9)$$

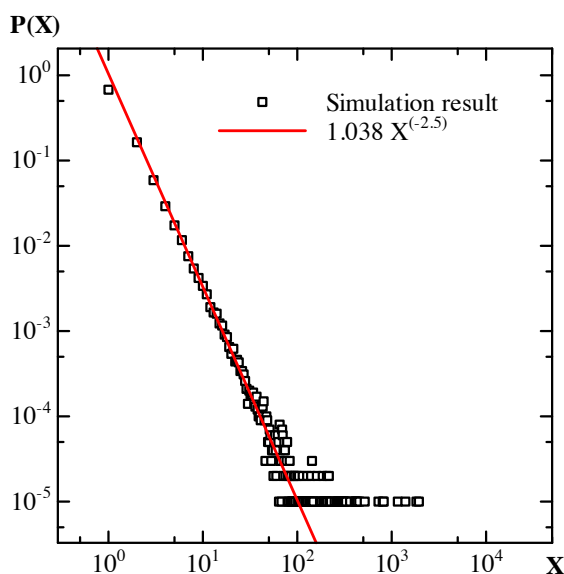


図 3-1: 臨界点での 2-チップング過程の分布関数. ($N = 1000000$, $\langle X \rangle = 2.33$) [5]

$z = 1$ 近傍での式 (3-8) の特異性は

$$\phi(z)|_{z \sim 1} \sim \phi_{regular}(1) \pm \frac{1}{4(1-P(1))} \sqrt{-8P(1)^2 + 48P(1) - 16} \left(1 - \frac{1}{z}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (3-10)$$

で表わされる. $P(1) = 0.6769$ を代入すると

$$\phi(z)|_{z \sim 1} \sim \phi_{regular}(1) \pm 2.771039 \left(1 - \frac{1}{z}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (3-11)$$

となる. これを 1-チップング過程の結果, 式 (2-7) および (2-8), と比べると, 2-チップング過程の臨界状態 $-\phi'_c = 2.32126$ ではクラスターサイズ分布は漸近的にベキ分布

$$P(X) \sim \frac{1.038}{X^\alpha}, \quad \alpha = \frac{5}{2} \quad (3-12)$$

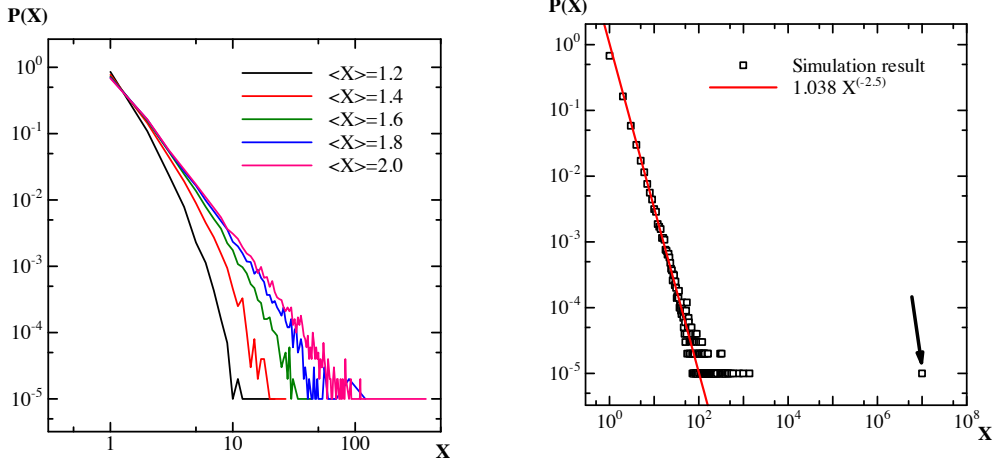


図 3-2: 臨界点より下（左）および上（ $\langle X \rangle = 102$, 右）での 2-チップング過程の分布関数 [5].

に従うことが導かれる。図 3-1 に臨界状態での 2-チップング過程のシミュレーション結果を示す。べき分布 $1.038X^{-2.5}$ によく乗っていることが確認される。臨界点より下 $\langle X \rangle < 2.33$ および上 $\langle X \rangle > 2.33$ での計算結果を図 3-2 に示す。1-チップング過程と同様、臨界点より下ではスケーリング挙動が、上では部分凝集が観測される。 $L > 2$ の拡張チップング過程も 2-チップング過程と同じ振る舞いを見せる。図 3-3 に 10-チップングおよび 100-チップング過程の臨界点での分布関数のシミュレーション結果を示す。 $X > L$ の範囲では漸近的に傾き $-5/2$ のべき分布に従うことが分かる。臨界点 $\langle X \rangle_c$ の L 依存性の計算結果を図 3-4 に載せる。 $\langle X \rangle_c$ はほぼ L に比例して増加する。10-チップングおよび 100-チップング過程の臨界点より上での分布関数のシミュレーション結果を図 3-5 に示す。拡張されたチップング過程でも部分凝集が起こることが確認できる。

次にチップング過程が普遍的に臨界状態でべき分布に従うことを、解析的に導出する。一般に凝集・チップング過程を表す基礎 (Smoluchowski) 方程式は z 変換すると

$$\phi(z)^2 + a(z)\phi(z) + b(z) = 0, \quad (3-13)$$

の形で表される。式 (3-4) に示すように、2-チップング過程では $a(z), b(z)$ には z^k ($2 \geq k \geq -2$) の項が現れる。また、拡張された L -チップング過程では z の $\pm L$ 次の項から構成される。ここで重要なことは、 L が有限でチップングで生成されるクラスターのサイズに上限がある場合、 $a(z), b(z)$ は有限次数の多項式になることである。

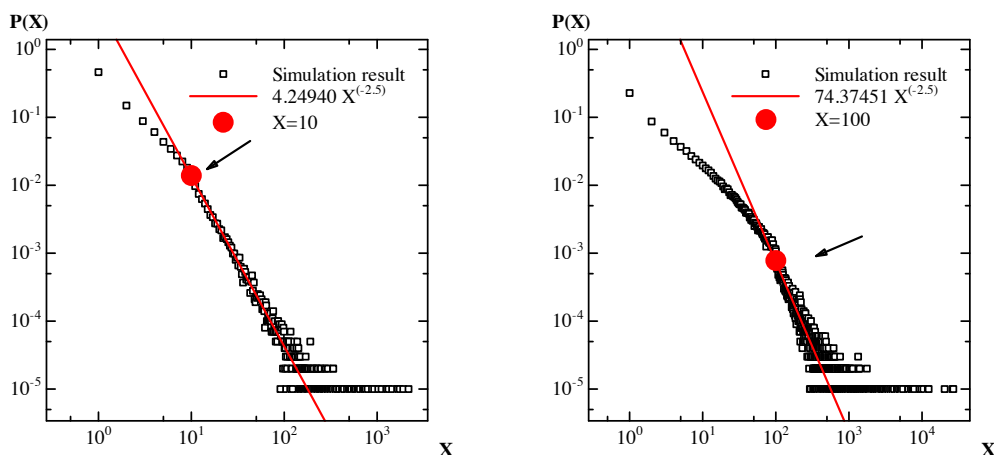


図 3-3: 10-チップング ($\langle X \rangle = 5.1$, 左) および 100-チップング ($\langle X \rangle = 32.0$, 右) 過程の臨界点での分布関数 [5].

その結果, $a(z), b(z)$ は $z \sim 1$ 近傍では特異性は持たない. 一方, 式 (3-13) の解は

$$\phi(z) = \frac{1}{2} \left\{ -a(z) \pm \sqrt{D(z)} \right\}, \quad (3-14)$$

$$D(z) = a(z)^2 - 4b(z) \quad (3-15)$$

で与えられる. 規格化条件 $\phi(1) = 1$ より $z = 1$ で式 (3-14) は重根となる. 従って, $D(1) = 0$ となり, $D(z)$ は次式で表される.

$$D(z) = (z - 1)^m g(z), \quad g(1) \neq 0. \quad (3-16)$$

ここで, m は自然数となる. さらに議論を進めるために, 保存則について考える. 前にも述べたように, 本研究で取り扱う系では全モノマー数と全クラスター数が保存するため, 平均クラスターサイズも保存する. そのため 1 次のモーメント $\sum X P(X) = -\phi'(1)$ は収束して一定の値を持つが, 2 次のモーメント $\sum X^2 P(X) = \phi''(1) + \phi'(1)$ は発散する. ここではこれらを一般化して, $\phi^{(n-1)}(1)$ は収束するが, $\phi^{(n)}(1)$ は発散する場合を調べる. 式 (3-14) を k 回微分すると

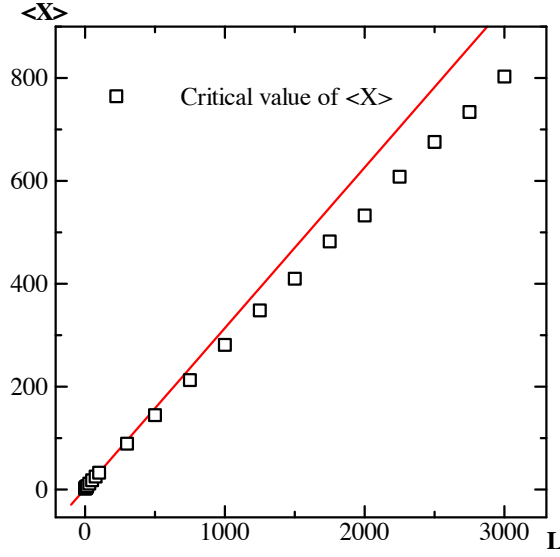


図 3-4: 臨界クラスターサイズ $\langle X \rangle_c$ の L 依存性 [5].

$$\phi^{(k)}(z) = \frac{1}{2} \left\{ -a^{(k)}(z) \pm \frac{d^k}{dz^k} \sqrt{D(z)} \right\} \quad (3-17)$$

が得られる. $a(z)$ は $z \sim 1$ 近傍では特異性は持たないため, $\phi^{(k)}(z)$ の特異性は $\sqrt{D(z)}$ の項のみから生じ,

$$g(z) \cdot \frac{d^k}{dz^k} (z-1)^{\frac{m}{2}} \Big|_{z \sim 1} \simeq B \cdot (z-1)^{\frac{m}{2}-k} \quad (3-18)$$

で与えられる. 式 (3-18) が $k = n-1$ で収束するすると

$$\frac{m}{2} - (n-1) \geq 0, \quad m \geq 2n-2 \quad (3-19)$$

が成立する. $\phi^{(n-1)}(1)$ が重根となる条件 $\frac{m}{2} - (n-1) \neq 0$ と合わせて

$$m > 2n-2 \quad (3-20)$$

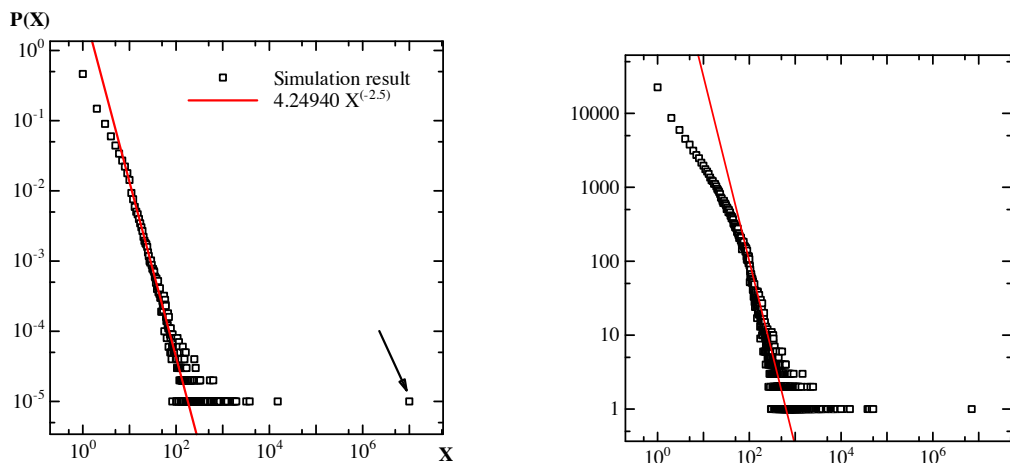


図 3-5: 10-チップング ($\langle X \rangle = 105$, 左) および 100-チップング ($\langle X \rangle = 103$, 右) 過程の臨界点より上での分布関数 [5].

となる. 一方, $\phi^{(n)}(1)$ の発散条件より

$$\frac{m}{2} - n < 0, \quad m < 2n \quad (3-21)$$

が得られる. 式 (3-20) および (3-21) より

$$m = 2n - 1 \quad (3-22)$$

が導かれる. これより $\phi(z)$ は

$$\phi(z) = \frac{1}{2} \left\{ -a(z) \pm \sqrt{g(z) \cdot (z-1)^{2n-1}} \right\} \quad (3-23)$$

で与えられ, クラスターサイズ分布の漸近挙動は傾き α のべき分布

$$P(X) \sim \frac{1}{X^\alpha}, \quad \alpha = \frac{2n+1}{2} \quad (3-24)$$

となる. ここで取り扱っているような $-\phi'(1)$ が保存するようなプロセスでは $n = 2$ となり, 傾きは $-5/2$ で与えられる. 一方, $-\phi'(1)$ が発散するような系では $n = 1$ で, 傾きは $-3/2$ となる [7].

4 凝集・重み付き分解過程

前節までは分解 $A_Z \rightarrow A_{Z-n} + A_n$ によって生成されるクラスター A_n のサイズ n に上限があるチップング過程について調べてきた．本節では上限は撤廃し，代わりに n の選択がベキの重み関数

$$W(n, Z) = w_Z \cdot \frac{1}{n^\sigma}, \quad (4-1)$$

$$w_Z = \left(\sum_{n=1}^{Z-1} \frac{1}{n^\sigma} \right)^{-1} \quad (4-2)$$

に従って行われる場合を取り扱う [6]．ここで σ は重み指数, w_Z は規格化因子を表す．重み指数が 0 の極限 $\sigma \rightarrow 0$ では, $W(n, Z) = 1/(Z-1)$ となり, n の選択は自由に行われる．この場合, クラスターサイズ分布は指数関数で与えられることが知られている [8]．一方, 無限大の極限 $\sigma \rightarrow \infty$ では $n=1$ のみが選択され, 2 節で考えた 1-チップング過程に帰着する．

凝集・重み付き分解過程を記述する Smoluchowski 方程式は

$$\begin{aligned} & \sum_{n=2}^{\infty} \frac{P(n)}{1-P(1)} \cdot w_n \left\{ \frac{1}{(n-1)^\sigma} + 1 \right\} \\ &= 2P(1)^2 + 2P(1)(1-P(1)) \quad (X=1), \end{aligned} \quad (4-3)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{i+j=X} P(i)P(j) + \sum_{n=X+1}^{\infty} \frac{P(n)}{1-P(1)} \cdot w_n \left\{ \frac{1}{(n-X)^\sigma} + \frac{1}{X^\sigma} \right\} \\ &= \left(2 + \frac{1}{1-P(1)} \right) P(X) \quad (X \geq 2), \end{aligned} \quad (4-4)$$

$$w_n = \left(\sum_{s=1}^{n-1} \frac{1}{s^\sigma} \right)^{-1} \quad (4-5)$$

で与えられる．これらを z 変換 $\phi(z) = \sum_{X=0}^{\infty} P(X)z^{-X}$ すると, 次式が得られる．

$$\begin{aligned} & \{1-P(1)\}\phi(z)^2 + \sum_{X=1}^{\infty} \sum_{n=X+1}^{\infty} \frac{P(n)}{z^X} w_n \left\{ \frac{1}{(n-X)^\sigma} + \frac{1}{X^\sigma} \right\} \\ & - \{3-2P(1)\}\phi(z) + \frac{P(1)}{z} = 0. \end{aligned} \quad (4-6)$$

ここでは n の選択に上限はないため, 式 (4-6) には z の無限次数の項も含まれる. そのため 3 節で述べた一般論は成立せず, 別のアプローチを用いる. 式 (4-6) を 2 回微分し, $z = 1$ を代入すると

$$\begin{aligned} \{1 - P(1)\}\phi'(1)^2 + \sum_{X=1}^{\infty} \sum_{n=X+1}^{\infty} P(n)w_n \frac{X(X-n)}{X^\sigma} \\ = \{1 - P(1)\}\phi'(1)^2 + S = 0, \end{aligned} \quad (4-7)$$

$$S = \sum_{n=2}^{\infty} P(n)w_n \sum_{X=1}^{n-1} \frac{X(X-n)}{X^\sigma} \quad (4-8)$$

となる.

最初に, クラスターサイズ分布関数 $P(n)$ が漸近的にベキ分布

$$P(n) \sim \frac{1}{n^\alpha} \quad (4-9)$$

に従うと仮定し, 式 (4-7) の各項の特異性 (発散の度合い) を議論する. n が充分大きいとき,

$$\begin{aligned} \sum_{X=1}^n X^\sigma &\sim \frac{1}{\sigma+1} n^{1+\sigma}, \quad (\sigma > -1) \\ &\sim C_1 + \frac{1}{\sigma+1} n^{1+\sigma}, \quad (\sigma < -1) \end{aligned} \quad (4-10)$$

(C_1 は定数) が成立する. 式 (4-9), (4-10) を式 (4-8) に代入すると, S は次のように評価できる.

$$\begin{aligned} (0 < \sigma \leq 1) \quad S &\longrightarrow \infty \text{ when } \alpha \leq 3, \\ (1 < \sigma \leq 2) \quad S &\longrightarrow \infty \text{ when } \alpha \leq 4 - \sigma, \\ (2 < \sigma) \quad S &\longrightarrow \infty \text{ when } \alpha \leq 2. \end{aligned} \quad (4-11)$$

一方, 式 (4-9) より

$$\phi' \longrightarrow \infty \text{ when } \alpha \leq 2 \quad (4-12)$$

が成立する. 式 (4-11), (4-12) より,

$$\begin{aligned} (0 < \sigma \leq 1) \quad & \alpha > 3 \text{ or } \alpha \leq 2, \\ (1 < \sigma \leq 2) \quad & \alpha > 4 - \sigma \text{ or } \alpha \leq 2 \end{aligned} \quad (4-13)$$

となることがわかる. 実空間での分布関数 $P(X)$ の漸近挙動は, z 空間での $\phi(z)$ の $z \rightarrow 1$ での特異性によって決まる. そこでさらに解析を進めるため, 式 (4-6) の各項の特異性を調べる. 式 (4-6) の左辺第 2 項は次のように書き換えられる.

$$S_p = \sum_{X=1}^{\infty} \sum_{n=X+1}^{\infty} w_n P(n) \left(\frac{1}{X^\sigma} \frac{1}{z^X} + \frac{1}{X^\sigma} \frac{1}{z^{(n-X)}} \right) = S_{p1} + S_{p2}, \quad (4-14)$$

$$S_{p1} = \sum_{X=1}^{\infty} \frac{1}{X^\sigma} \frac{1}{z^X} \sum_{n=X+1}^{\infty} w_n P(n), \quad (4-15)$$

$$S_{p2} = \sum_{X=1}^{\infty} \frac{1}{X^\sigma} z^X \sum_{n=X+1}^{\infty} \frac{w_n P(n)}{z^n}. \quad (4-16)$$

式 (4-9) を仮定し, $\sigma > 1$ とすると

$$w_n = \left(\sum_{s=1}^{n-1} \frac{1}{s^\sigma} \right)^{-1} \sim C_2 + O(n^{\sigma-1}) \quad (4-17)$$

(C_2 は定数) が得られる. これより次式が導かれる.

$$\sum_{n=X+1}^{\infty} w_n P(n) \sim \sum_{n=X+1}^{\infty} \frac{C_2 + O(n^{1-\sigma})}{n^\alpha} \sim X^{1-\alpha} + O(X^{2-\sigma-\alpha}). \quad (\alpha \neq 1) \quad (4-18)$$

式 (4-9) に対応する $\phi(z)$ の特異性は $\phi_s(z) \sim (1 - 1/z)^{\alpha-1}$ となるため, S_{p1} の最大の特異性は

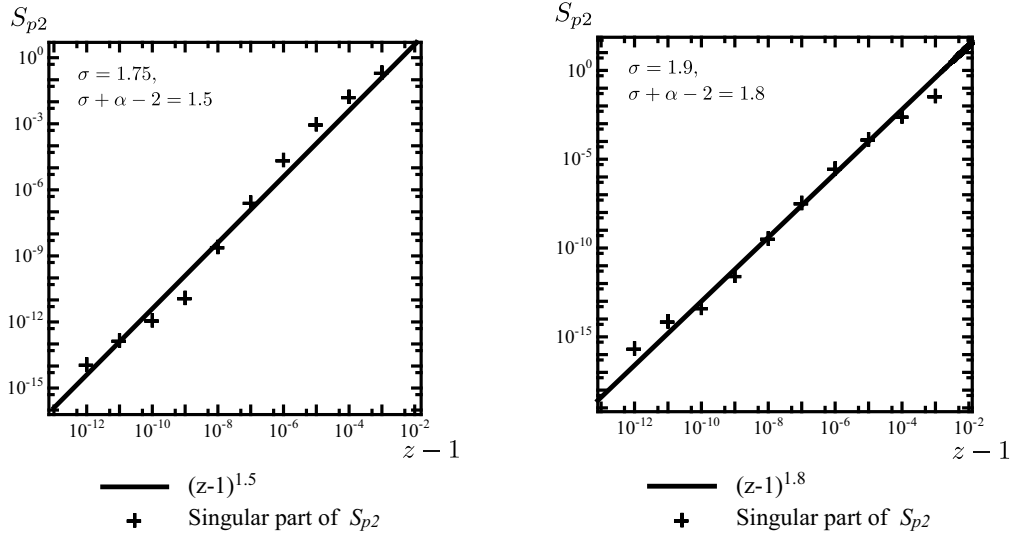


図 4-1: S_{p2} の特異項の漸近挙動 ($\alpha = \sigma = 1.75$, 左, および $\alpha = \sigma = 1.9$, 右) [6].

$$(S_{p1})_{\text{singular}}|_{z \rightarrow 1} \sim \left(1 - \frac{1}{z}\right)^{\sigma + \alpha - 1 - 1} = \left(1 - \frac{1}{z}\right)^{\sigma + \alpha - 2} \quad (4-19)$$

で与えられる. 次に, S_{p2} の特異性を評価する. そのため和 $\sum_{X+1} \infty \alpha_n P(n)/z^n$ への主要な寄与は, X の充分大きな領域から来ると仮定する. $\alpha \leq 2$ で, 平均クラスターサイズ $\langle X \rangle$ が発散するときは, 自然な仮定であると考えられる. この仮定が成立する場合, 和 $\sum_{X+1}^{\infty} w_n P(n)/z^n$ の最も特異な部分は $C_2 \sum_1^{\infty} P(n)/z^n \sim (1 - 1/z)^{\alpha-1}$ となる. これより S_{p2} の特異性は次式で評価される.

$$(S_{p2})_{\text{singular}}|_{z \rightarrow 1} \sim (1 - z)^{\sigma-1} \left(1 - \frac{1}{z}\right)^{\alpha-1} = \left(1 - \frac{1}{z}\right)^{\sigma + \alpha - 2}. \quad (4-20)$$

式 (4-19), (4-20) で与えられる特異性は, 式 (4-6) の他の項の特異性と釣り合わなければならない. 式 (4-9) に対応する最大の特異項は式 (4-6) 左辺第 1 項より得られ,

$$\phi(z)^2 \sim \left\{ \left(1 - \frac{1}{z}\right)^{\alpha-1} \right\}^2 = \left(1 - \frac{1}{z}\right)^{2\alpha-2} \quad (4-21)$$

となる. 式 (4-19)-(4-21) の比較より

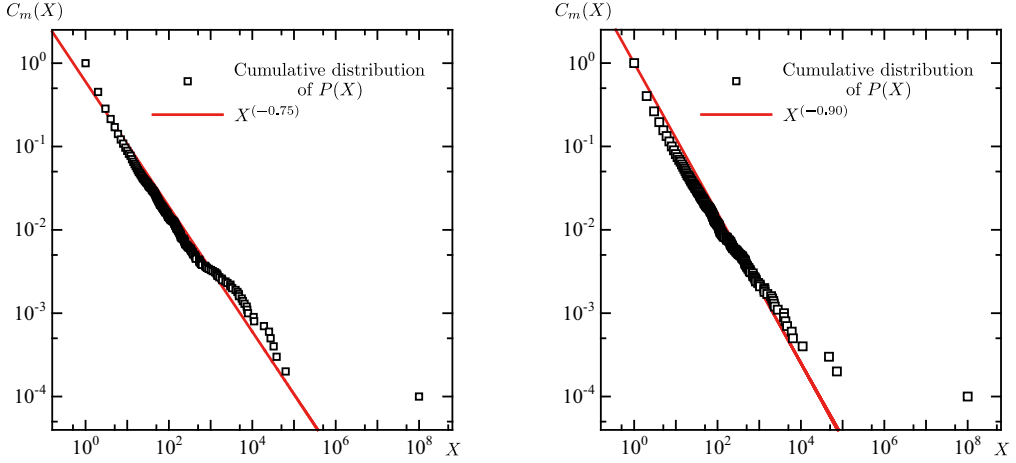


図 4-2: 累積分布関数 $C_m(X)$ のシミュレーション結果 ($N = 10000, \langle X \rangle = 10000, \sigma = 1.75$, 左, および $\sigma = 1.9$, 右) [6].

$$\alpha = \sigma \quad (4-22)$$

が導かれる.

次に, ここでの議論を数値的に検証する. まず重み指数が $1 < \sigma \leq 2$ の場合について, S_{p2} に関する仮設, 式 (4-20). が成立しているか確かめる. $\alpha = \sigma = 1.75$ および $\alpha = \sigma = 1.9$ における S_{p2} の特異項の漸近挙動を図 4-1 に示す. ここでは S_{p2} は

$$S_{p2}|_{z \sim 1} \simeq (S_{p2})_{\text{singular}} + C_s \left(1 - \frac{1}{z}\right) \quad (4-23)$$

(C_s は定数) で与えられると考え, 数値的に計算した S_{p2} から $(1 - 1/z)$ に比例する部分を引いた残りを特異項 $(S_{p2})_{\text{singular}}$ とみなして求めた. 計算結果は式 (4-20) と良く一致し, S_{p2} に関する仮設は成立していることが分かる. 図 4-2 にクラスターサイズの累積分布関数 $C_m(X) = \sum_{Y \geq X} P(Y)$ のシミュレーション結果を示す. 累積分布のべき指数は $-(\alpha - 1) = -(\sigma - 1)$ で与えられ, 式 (4-22) の成立が確認される. 図 4-2 では $X \sim 10^8$ 付近に巨大クラスターが存在し, 部分凝集しているように見える. しかし, $\alpha < 2$ においては平均クラスターサイズが発散し $\langle X \rangle \rightarrow \infty$, 熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ では部分凝集は発生しない. そのため, シミュレーションにおける巨大クラスターの生成は, システムサイズの有限サイズ効果であると考えられる. 一方, $\sigma > 2$ の場合, S_{p2} に関する仮設や式 (4-22) は成立しないと考えられる. その理由としては, $\sigma > 2$ では式 (4-22) が成立すると平均クラスターサイズ $\langle X \rangle$ は収束し, S_{p2} の特異性を評価する際に用いた仮設と矛盾することが挙げられる. 図

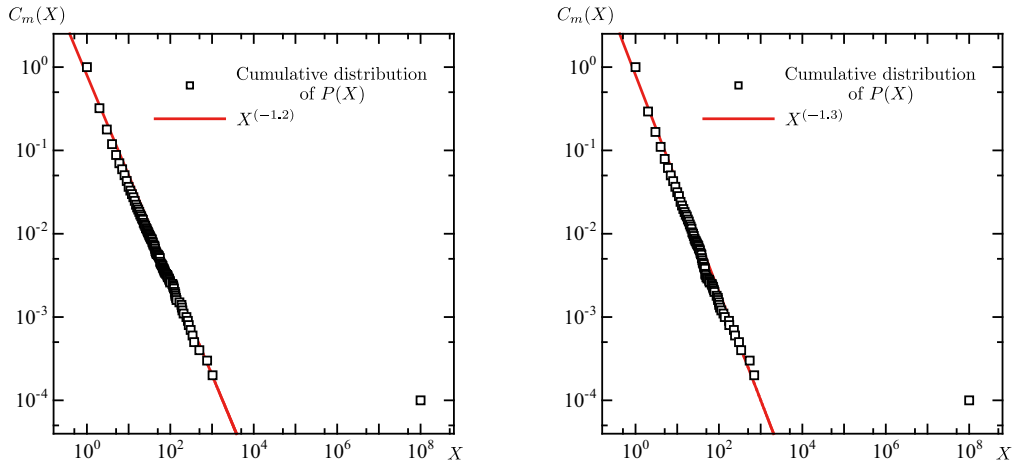


図 4-3: 累積分布関数 $C_m(X)$ のシミュレーション結果 ($N = 10000, \langle X \rangle = 10000, \sigma = 2.5$, 左, および $\sigma = 2.75$, 右) [6].

4-3に $\sigma = 2.5$ および 2.75 での累積分布のシミュレーション結果を示す. ベキ指数は $\alpha < \sigma$ となり, 式 (4-22) は成立しない. $\sigma \rightarrow \infty$ の極限は 1-チップング過程に帰着し, $\alpha = 2.5$ となることより, $\sigma > 2$ の場合, ベキ指数は一般に $2.5 > \alpha > 2$ で与えられると考えられる. 今述べたように, $\sigma > 2$ では $\langle X \rangle$ は収束し, 熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ でも部分凝集する. これより重み付き分解過程においては重み指数 σ に閾値 σ_c が存在し, 部分凝集は

$$\sigma > \sigma_c = 2 \quad (4-24)$$

で発生することが導かれる.

5 おわりに

本解説では, 凝集と分解が同時に起こっているようなプロセスの動的挙動に関して, 近年我々のグループが行ってきた理論的・数値的研究について紹介した. 分解でサイズ 1 のクラスターのみが生成する凝集・チップング過程では, 平均クラスターサイズ $\langle X \rangle$ に臨界点 (閾値) $\langle X \rangle_c = 2.0$ が存在し, 臨界点以上 $\langle X \rangle > 2.0$ では巨大クラスターが傾き $-5/2$ のベキ分布に従うクラスターと共存する部分凝集が出現する. 分解で生成するクラスターサイズの制限を緩め, 一般に $L (> 1)$ 以下とする凝集・拡張チップング過程もほぼ同じ振る舞いを見せる. さらに, この場合は漸近的に傾き $-5/2$ のベキ分布が普遍的に観測されることが, 解析的に導かれる. しかし, 分解で生成するクラスターサイズに上限 L があり, L より大きなクラスターは全く発生しないという制約はかなり強く, 現実のプロセスでこの条件を満たす例は

それほど多くはないと考えられる。そこで、クラスターサイズの上限は外し、代わりにベキの重みを付けた凝集・重み付き分解過程について調べた。その結果、重み指数 σ が閾値 $\sigma_c = 2$ 以上で充分大きな重みが加わり、大きなクラスターの発生が抑えられる場合、部分凝集が起こることが明らかになった。現実の凝集・分解過程では、ベキ以外の複雑な重みが掛かっていることも多いと思われるが、そのような場合でも充分な重みが加わり大きなクラスターが生成されにくければ、部分凝集すると期待される。

社会・経済現象では独占企業の出現などが巨大クラスターの生成に対応すると考えられる。この場合、独占とは言っても市場が完全に 1 社だけで占められる完全凝集状態になることは（資本主義社会では）ほとんど無く、小さな企業と共存する部分凝集状態が大部分であると考えられる。また、多くの銀河系において、巨大ブラックホールの存在や恒星の質量分布がベキ分布に従うこと、が報告されているが、そのメカニズムは未だ解明されていない [9]。今後、これらの現象と本解説で説明した凝集・分解過程の部分凝集現象との関連についての議論の進展が期待される。

参考文献

- [1] J. Schmelzer, G. Röpke and R. Mahnke, *Aggregation Phenomena in Complex Systems*. Wiley-Vch (1999).
- [2] F. Leyvraz, Phys. Rep. **383**, 95 (2003).
- [3] H. Yamamoto, T. Ohtsuki, A. Fujihara, S. Tanimoto, K. Yamamoto and S. Miyazima, Japan J. Indust. Appl. Math. **24**, 211-218 (2007).
- [4] H. Yamamoto, T. Ohtsuki and A. Fujihara, Phys. Rev. E **77**, 061122 (2008).
- [5] H. Yamamoto and T. Ohtsuki, Phys. Rev. E **81**, 061116 (2010).
- [6] H. Yamamoto, M. Sekiyama and T. Ohtsuki, J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 054003 (2015)
- [7] H. Takayasu, Phys. Rev. Lett. **63**, 2563-2565 (1989).
- [8] M. Sekiyama, T. Ohtsuki and H. Yamamoto, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 104003 (2017)
- [9] P. Kroupa, Science **295**, 82 (2002).