材料科学への数学的アプローチ

——自己相似性について——

北 田 韶 彦*

1. はじめに

近年、ソリトンやカオスなどの新しい数学的概念が諸科学に導入されて、それぞれ意義ある成果を生んでいる模様である。ここでは、新たに再発見された、ワイヤストラウス以来の概念であるところの「自己相似性」をとりあげて、その数学的背景を確認したい。全体の構造が、その部分の構造と相似であるような、いわゆる、自己相似構造はデンドライトの形成、固体表面層の形成などの議論に見られるように、材料科学においても、極めて重要な概念のひとつとなりつつある。実際、その物質科学への応用に関するものだけでも、その研究成果は膨大な数にのぼっている。しかしフラクタルの名を通して普及して来たこの概念も、ややもするとその定義そのものが不明瞭なまま利用されていることも、また、その適用範囲に対する数学的に十分な反省がないまま利用されていることも少なくないようである。そこで、ここでは「自己相似性(self-similarity)」の数学上の定義を確認し、この構造が得られるためのひとつの十分条件を提示したい。なお、ここでは通常用いられている縮小写像の定義を新たにより一般化して提示するので、補助定理、中心的命題ともに、完全な証明をつけることとした。なお、自己相似性の数学に関する文献としては、ハッチンソン⁽¹⁾が基本的であろう。初等的な教科書としては、文献の(2)が適当と思われる。多くの具体的な図が掲載されており、視覚的理解の助けとなるものと思われる。なお、内容をできるだけ self-contained なものとするために、本文の後に注を付して、数学上の用語の若干の説明を行った。

2. 自己相似性の定義とその存在のための十分条件

(X, d) を集合 X に距離 d を定めて得られるところの距離空間とする。以下の性質(1)をもつところの、距離空間 (X, d) からそれ自身への写像 $f: (X, d) \rightarrow (X, d)$ を縮小写像とよぶ。

$$d(f(x), f(y)) \leq \alpha(t) d(x, y), \quad d(x, y) < t \quad (1)$$

ここで、 $\alpha(t), t > 0$ は、 $0 \leq \alpha(t) < 1$ なる実数値関数である。

$\alpha(t) \equiv C, 0 \leq C < 1$ とおいた場合が最も一般的な縮小写像である。

縮小写像に関して以下の補助定理が成り立つ。

〔補助定理〕 完備距離空間 (X, d) ^{注1)} 上で、評価(1)をみたす写像 f はただひとつの不動点をもつ。すなわち、 $f(\bar{x}) = \bar{x}$ となる点 $\bar{x}$ が (X, d) 内にただひとつ存在する。

(証明) 点 x_0 を (X, d) 内に任意に定める。 $f(x_n) = x_{n+1}, n = 0, 1, 2, \dots$ にしたがって (X, d) 内に点列 $\{x_n\}$ を作る。任意の $n \geq 2$ に対して、

$$\begin{aligned} d(x_n, x_{n+1}) &= d(f(x_{n-1}), f(x_n)) \leq \alpha_{n-1, n} d(x_{n-1}, x_n) \\ &= \alpha_{n-1, n} d(f(x_{n-2}), f(x_{n-1})) \\ &\leq \alpha_{n-1, n} \alpha_{n-2, n-1} d(x_{n-2}, x_{n-1}) \\ &= \dots \leq \alpha_{n-1, n} \dots \alpha_{0, 1} d(x_0, x_1) < d(x_0, x_1) \end{aligned}$$

(ここで $\alpha_{i-1, i}$ は $\alpha(t_i)$ の略記であって、 t_i は $d(x_{i-1}, x_i) < t_i$ なる任意の正数である。)となるから、

$$d(f(x_n), f(x_{n+1})) \leq \alpha(d(x_0, x_1)) d(x_n, x_{n+1})$$

を得る。ここで $\alpha(d(x_0, x_1)) = \beta$ とおけば

$$\begin{aligned} d(x_n, x_{n+1}) &\leq \beta d(x_{n-1}, x_n) \\ d(x_{n-1}, x_n) &\leq \beta d(x_{n-2}, x_{n-1}) \\ &\vdots \end{aligned}$$

に注意すれば、

* 早稲田大学助教授；理工学部材料工学科(〒169 東京都新宿区大久保3-4-1 59号館324)

A Mathematical Approach to the Materials Science—On a Self-Similarity—; Akihiko Kitada (School of Science and Engineering, Waseda University, Tokyo)

Keywords: self-similarity, set dynamical system, nonlinear analysis, dendrite, polycrystalline matter, crystal lattice

1993年8月23日受理

$$d(x_n, x_{n+1}) \leq \beta^n d(x_0, x_1)$$

を得るから、点列 $\{x_n\}$ はコーシー列¹⁾となる。 (X, d) は完備であったから、このコーシー列はある点 $\bar{x}$ に収束する。 $f(x)$ は連続関数だから

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n) = f(\lim_{n \rightarrow \infty} x_n) = f(\bar{x})$$

であるが、 $f(x_n) = x_{n+1}$ であったから、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n) = \bar{x}$$

となって、 $f(\bar{x}) = \bar{x}$ を得る。

次に不動点の一意性について検討する。いま、 $\bar{x}, \bar{x}'$ をそれぞれ写像 f の不動点とする。この2点間の距離に関して、

$$d(\bar{x}, \bar{x}') = d(f(\bar{x}), f(\bar{x}')) \leq \alpha(t) d(\bar{x}, \bar{x}'), \quad d(\bar{x}, \bar{x}') < t$$

となるが、この関係が成り立つためには、 $d(\bar{x}, \bar{x}') = 0$ でなければならない。すなわち、 $\bar{x} = \bar{x}'$ となる。 $\square$

いま、 $m (2 \leq m < \infty)$ 個の、係数 $\alpha_j(t), j=1, 2, \dots, m$ をもつ、縮小写像 $f_1, f_2, \dots, f_m$ が存在して、 X の部分集合 S に関して

$$\bigcup_{j=1}^m f_j(S) = S \quad (2)$$

が成り立つとき、部分集合 S は自己相似性をもつという。与えられた $f_j, j=1, 2, \dots, m$ に対する方程式(2)を解くために、以下のような集合力学系 T を考える。

$$\begin{aligned} T: (C(X), d_H) &\longrightarrow (C(X), d_H) \\ A &\longmapsto \bigcup_{j=1}^m f_j(A) \end{aligned}$$

ここで $C(X)$ は、距離空間 (X, d) 内の空でないコンパクト集合全部の集まりであり、 d_H はいわゆるハウスドルフ距離³⁾である。すなわち、 $A, B \in C(X)$ に対して、

$$d_H(A, B) = \max \{ \inf (\eta > 0, N_\eta(A) \supset B), \inf (\eta > 0, N_\eta(B) \supset A) \}^{\text{注2)}$$

で定義される。ただし

$$N_\eta(A) = \{x \in (X, d); \exists a \in A \text{ s.t. } d(x, a) < \eta\}$$

である。ここで、縮小写像の種類 m が有限であることは

$$T(A) = \bigcup_{j=1}^m f_j(A) \in C(X)$$

となるために厳格である。 $(C(X), d_H)$ は、 (X, d) が完備距離空間のとき、それ自身完備となることが知られている⁴⁾。

したがって、集合力学系 T がもしふたたび(1)の意味での縮小写像となることが示せれば、補助定理からただひとつの不動点 S が $C(X)$ 内に存在することがわかる。すなわち、もとの空間 (X, d) が完備であることが、(2)の意味での自己相似性をもつコンパクト集合が存在するための十分条件である。そこで、 T が(1)の意味での縮小写像になることを以下の命題で示そう。

[命題] $f_j: (X, d) \longrightarrow (X, d), j=1, 2, \dots, m (2 \leq m < \infty)$ を縮小写像とする。すなわち、

$$\begin{aligned} d(f_j(x)f_j(y)) &\leq \alpha_j(t) d(x, y), \quad d(x, y) < t, \\ 0 &\leq \alpha_j(t) < 1. \end{aligned}$$

このとき、空でないコンパクト集合 $A, B \subset X$ に対して、

$$d_H(T(A), T(B)) \leq \alpha(t) d_H(A, B), \quad d_H(A, B) < t.$$

が成り立つ。ただし、

$$T(A) = \bigcup_{j=1}^m f_j(A), \quad \alpha(t) = \max_j \{\alpha_j(t)\}.$$

である。

[証明] $\alpha(t)$ が $0 \leq \alpha(t) < 1$ を満足することは明らかである。 $d_H(A, B) = \mu < t$ とおけば、その定義から、 ε を $\varepsilon < t - \mu$ なる任意の正数として

$$B \subset N_{\mu+\varepsilon}(A).$$

すなわち、任意の点 $p \in B$ に対して、 $a_p \in A$ が存在して

$$d(p, a_p) < \mu + \varepsilon < t$$

となっている。したがって、任意の j に対して、

$$\begin{aligned} d(f_j(p), f_j(a_p)) &\leq \alpha_j(t) d(p, a_p) \\ &< \alpha_j(t) (\mu + \varepsilon) \\ &\leq \alpha(t) (\mu + \varepsilon). \end{aligned}$$

故に、 $f_j(p) \in N_{\alpha(t)(\mu+\varepsilon)}(f_j(A))$ となるから、

$$f_j(B) \subset N_{\alpha(t)(\mu+\varepsilon)}(f_j(A))$$

を得る。したがって、

$$\begin{aligned} T(B) &= \bigcup_{j=1}^m f_j(B) \subset \bigcup_{j=1}^m N_{\alpha(t)(\mu+\varepsilon)}(f_j(A)) \\ &= N_{\alpha(t)(\mu+\varepsilon)} \left(\bigcup_{j=1}^m f_j(A) \right) \\ &= N_{\alpha(t)(\mu+\varepsilon)}(T(A)). \end{aligned}$$

同様に、

$$T(A) \subset N_{\alpha(t)(\mu+\varepsilon)}(T(B))$$

を得ることができるから、結局、

$$d_H(T(A), T(B)) \leq \alpha(t) (\mu + \varepsilon).$$

ここで、 $\varepsilon > 0$ は任意であったから、

$$d_H(T(A), T(B)) \leq \alpha(t) \mu, \quad \mu < t$$

を得る。 $\square$

以上の議論から、「任意に与えられた有限個の縮小写像に基づく自己相似性をもつコンパクト部分集合が存在するためには、もとの空間が完備であること」が十分であることが理解された。

3. 応 用

議論の場が完備距離空間となるような、材料科学に特有な応用例をひとつあげることとする。まず材料科学の、あるいは金属材料学の固有の視点のひとつとして、構造の有する欠陥、転位、特定元素の偏析あるいはこれらに基づく結晶粒界の特徴付けなど、材料の不均一性に対する積極的評価が考えられる。材料は元来不均一なものであり、その組織のくわしい検討と調整こそが新材料開発の基本であるとする考えである。ア・プリオリにあらゆる意味で完全であるような結晶の存在が期待できない以上、金属組織学に立脚したこの観点は今後とも重要であろうと思われる。したがって材料科学への

数学的アプローチも、主としてこの考えにそってなされることになるだろう。そこで、まず不均一性に対する基本的立場から、議論の対象として単結晶ではなく多結晶をとりあげることになる。材料の構成単位を原子以下にみるのではなく、結晶粒とみて、各結晶粒の集まり方の数学的性質を議論することが金属材料学の現実に則した数学的検討の第1歩であると考ええる。そこで、ここでは、単結晶の集まり方の幾何学的性質としての自己相似性を検討する。実在の結晶は3次元以下であろうが、近年の準結晶に関する議論等も考慮に入れて、すべての議論を一般的に k 次元ベクトル空間 V^k において行うことにする。まず以下の l を「順序付けられた基による格子」と名付ける。

$$l = \left\{ \sum_{i=1}^k u_i x_i; u_i \in Z \right\},$$

ここで Z は整数全部の集合を表す。 $\{x_1, x_2, \dots, x_k\}$ は V^k の順序付けられた基である。すなわち、基を構成する各ベクトルに番号(ラベル)を付けるわけである。この番号付けが異なれば、格子も異なるものと考ええる。すなわち V^k 中の部分集合としては同じものであったとしても、格子としては異なるものとする。いま、 V^k には内積 $(\cdot, \cdot)$ が定まっているものとする。ベクトルのノルム $\|\cdot\|$ はこの内積によって標準的に導入される。いま、基は、条件 (C_1) , (C_2) によって特徴付けられているものとする。

$$\theta_{ij} = \alpha_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots, k \quad (C_1)$$

$$0 < \delta \leq \|x_i\| \leq \eta, \quad i = 1, 2, \dots, k. \quad (C_2)$$

ここで θ_{ij} は基を構成するベクトル x_i と x_j との間の角であって

$$\cos \theta_{ij} = (x_i, x_j) / \|x_i\| \|x_j\|, \quad (0 \leq \theta_{ij} \leq \pi).$$

で定められる。この角 θ_{ij} が、あらかじめ与えられた角 α_{ij} に等しいことが要求されるわけである。 δ, η はあらかじめ与えられた正数であって、原子間距離のような格子構成要素間の間隔における許容範囲を定めるものである。条件 (C_1) , (C_2) をみたす格子 l の全体 $\{l\} = L$ に以下の d によって距離を導入する。

$$d(l, l') = \max \{ \|x_1 - x'_1\|, \|x_2 - x'_2\|, \dots, \|x_k - x'_k\| \}.$$

いま、 $\{l^n\}$ を距離空間 (L, d) 内の任意のコーシー列とする。有限次元ベクトル空間は任意のノルム $\|\cdot\|$ に関して完備である⁽⁵⁾から、角 α_{ij} を保ちながら、 l^n の基 $\{x_1^n, x_2^n, \dots, x_k^n\}$ の各要素 x_i^n は、それぞれ $\bar{x}_i$ なるベクトルに収束する。この極限 $\{\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_k\}$ が条件 (C_2) を満足していることは見やすい。また、角 $\bar{\theta}_{ij}$ に関しても (C_1) をみたしていることが以下のようにして確められる。すなわち、ノルム $\|\cdot\|$ に関して $\lim_{n \rightarrow \infty} x_i^n = \bar{x}_i$ であり、かつ $\|x_i^n\|$ はすべて有界であるから、任意の $\varepsilon > 0$ に対して番号 N が在って、 $N \leq n$ ならば、
 $|\cos \bar{\theta}_{ij} - \cos \alpha_{ij}| = |(\bar{x}_i, \bar{x}_j) / \|\bar{x}_i\| \|\bar{x}_j\| - (x_i^n, x_j^n) / \|x_i^n\| \|x_j^n\|| < \varepsilon$
 となる。 $\varepsilon > 0$ は任意であったから、これは $\bar{\theta}_{ij} = \alpha_{ij}$ を意味する。したがって (L, d) は完備距離空間となる。 α_{ij} が1次独立なベクトルの間の角である以上、それは一定の条件をみた

していなければならない。以下にその条件を検討する。この条件としては、次の $(*)$ が成り立つことが十分である。

$$\begin{vmatrix} 1 & \cos \alpha_{12} & \cdots & \cos \alpha_{1k} \\ \cos \alpha_{12} & 1 & \cdots & \cos \alpha_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cos \alpha_{1k} & \cos \alpha_{2k} & \cdots & 1 \end{vmatrix} \neq 0. \quad (*)$$

いま、 $\sum_{i=1}^k \lambda_i \bar{x}_i = 0$ (ゼロベクトル) とする。この式の両辺に $\bar{x}_i$

を内積としてかければ、変数 λ_i に関する連立方程式

$$\|\bar{x}_1\| \cos \alpha_{11} \lambda_1 + \cdots + \|\bar{x}_i\| \lambda_i + \cdots + \|\bar{x}_k\| \cos \alpha_{ik} \lambda_k = 0,$$

$$i = 1, 2, \dots, k.$$

を得る。この連立方程式の係数行列の行列式の値がゼロでなければ、この方程式は非自明解を持ってない。すなわち、 $\lambda_i = 0, i = 1, 2, \dots, k$ を得る。これはベクトルの集合 $\{\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_k\}$ が1次独立であることを示している。したがって、角に関する条件 $(*)$ が成り立つとき、 (L, d) は完備距離空間となるから、2. における結果から、この条件のもとで、 (L, d) 内に自己相似構造をもつコンパクト部分を常に見い出すことができることになる。

4. ま と め

本報では、まず自己相似性の数学的定義を確認し、次に集合力学系の不動点定理を用いることによって、この性質をもつ構造が現れるための十分条件を求めた。その結果を用いて、 k 次元単結晶の格子がどのような条件をみたせばその多結晶中に自己相似性をもつコンパクト部分を見い出すことができるかについて検討した。

注1) $\{x_n\}$ を距離空間 (X, d) における点列とする。任意の正数 ε に対して、

$$N \leq n, m \Rightarrow d(x_n, x_m) < \varepsilon$$

が成り立つように、自然数 N を決定できるとき、 $\{x_n\}$ をコーシー列とよぶ。1点 x を固定し、 $x_n \equiv x$ とおいてできる点列 $\{x_n\}$ はコーシー列であるから、任意の距離空間において、コーシー列を考えることができる。また、収束点列はすべてコーシー列となる。 (X, d) の任意のコーシー列が (X, d) 内で収束するとき、 (X, d) を完備距離空間とよぶ。

注2) $\max \{a, b, \dots, f\}$ は a から f までの数のうち最大のものを表す。

文 献

- (1) J. E. Hutchinson: Indiana Univ. Math. J., **30**(1981), 713.
- (2) 石村貞夫, 石村園子: フラクタル数学, 東京図書, (1990).
- (3) J. Dieudonné: *Foundations of modern analysis*, Academic Press, (1960).
- (4) V. I. Istratescu: *Fixed point theory, an introduction*, D. Reidel Publishing Company, (1981).
- (5) L. Schwartz: *Cours d'analyse*, Tome 1, Hermann, (1967).