

浸透問題におけるスケーリングと写像

渡辺宙志

名古屋大学大学院情報科学研究科複雑系科学専攻多自由度システム情報論講座

概要

本稿では浸透問題 (Percolation) における有限サイズスケーリングを、写像として考えてみる。どんな系の間においても、浸透確率同士を滑らかに写す写像が存在するが、その写像を実際に見てみることで何かわかることは無いだろうか。まずは通常の有限サイズスケーリングを考え、さらにアスペクト比の異なる系を「スケール」する写像を考察する。

目次

1	はじめに	2
2	有限サイズスケーリングとアスペクト比	2
3	写像	3
3.1	スケーリングと写像	3
3.2	有限サイズスケーリングにおける写像	5
4	アスペクト比が異なる場合	6
4.1	写像の形	6
4.2	次元クロスオーバー	6
4.3	非線形スケーリング	7
5	まとめ	8

1 はじめに

浸透問題 (percolation) は、相転移をおこす最も単純なモデルの一つである [1]。単純なモデルながら応用例が多く、現在でも活発に研究が行われている。近年、長方形領域 (したがって二次元) における浸透問題が話題となっている。横の長さが縦の長さよりも長い系について考える。系の上下に達するクラスター (浸透クラスター) が存在する時、この系は浸透していると定義すると、正方形の場合と同様に浸透確率などを定義することができる。この時、長方形領域と正方形領域で大きく異なるのは、浸透クラスターの数である (図 1 参照)。

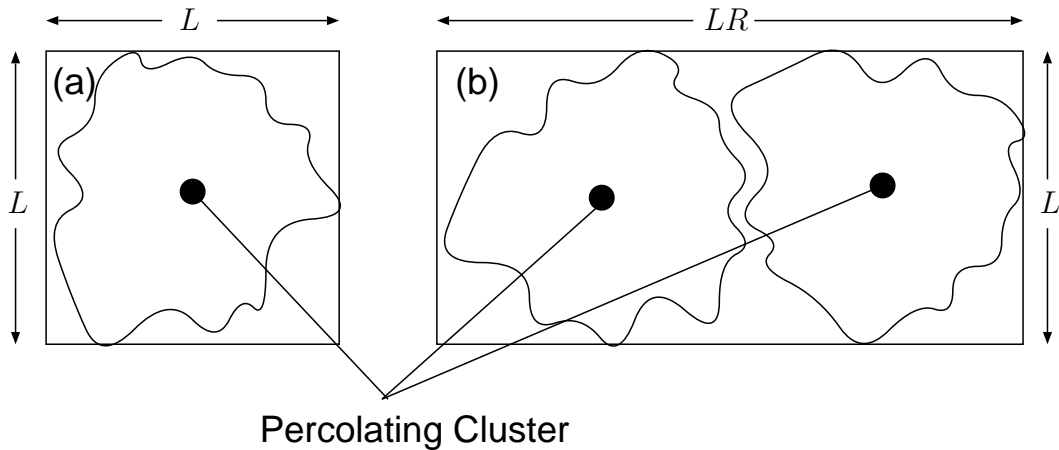


図 1: 長方形領域における浸透問題。正方形領域 (a) では、浸透クラスターはほぼ 1 つであるのに対し、長方形領域 (b) では同時に多数存在することがある。

正方形の系では、同時に系の上下に達するクラスターが二つ以上存在する確率は非常に小さい。なぜなら、密度を上げていくにしたがってクラスターは等方的に (大雑把に言ってほぼ円形に) 成長するのに対し、系に二つ以上の浸透クラスターが存在するためにはクラスターが非常に細長い形にならなくてはならない。このような確率は系のサイズを大きくするにつれ急速に減少し、通常は無視できる。

しかし、長方形の場合では浸透クラスターが自然に多数存在できる。この違いが物理的にどのような違いを生むのかが研究の中心課題である。たとえば、系に同時に n 個のクラスターが存在する確率 W_n を定義し、それぞれの n について有限サイズスケーリングが成り立つことを確かめた研究などがある [2]。

本稿は、そのような長方形領域における有限サイズスケーリングについて、写像という形で理解することを目的として書かれている。

2 有限サイズスケーリングとアスペクト比

二次元の浸透問題を考えよう。ボンド過程、サイト過程などの詳細はなんでもよい。格子も等方的であれば三角格子でも正方格子でも良い。

系の密度 ρ にのみ依存する物理量 $Q(\rho)$ を考える。一般に、臨界点 ρ_c の近傍において、その物理量が $Q \sim \varepsilon^x$ (ただし $\varepsilon = |\rho - \rho_c|/\rho_c$) と振舞う時、その有限サイズスケーリングは

$$F(\varepsilon, L) \sim L^{-x/\nu} \bar{F}(\varepsilon L^{1/\nu}) \quad (1)$$

と記述することができる。ただし x, ν は臨界指数である。関数 \bar{F} は有限サイズスケーリング関数と呼ばれる。臨界指数は次元にのみ依存し、系の形状、境界条件、格子のタイプなどには依存しないという普遍性を示すが、臨界指数だけではなく、有限サイズスケーリング関数形自身もある種の普遍性を示すため、

この関数は普遍有限サイズスケール関数 (universal finite-size scaling function)、略して UFSSF と呼ばれている [4]。UFSSF は、サイト過程やボンド過程などの過程や格子のタイプには依存しない。これは、格子の違いなどは引数の定数倍、すなわち、

$$F(\varepsilon, L) \sim L^{-x/\nu} \bar{F}(m\varepsilon L^{1/\nu}) \quad (2)$$

として吸収できることを意味する。この格子などに依存するパラメータ m を非普遍計量定数 (nonuniversal metric factor) と呼ぶ。しかし、UFSSF は臨界指数と同じ普遍性を示すわけではない。たとえば、臨界指数は系の境界条件などには依存しないが、UFSSF は依存する。その意味で、UFSSF の示す普遍性は臨界指数よりは狭いと言えるだろう。

さて、縦 L 、横幅 LR の長方形領域における浸透問題を考える。 R はアスペクト比であり、1 より大きいものとする (したがって横長の系を考える)。物理量 Q は ε 、 L 、 R の変数であり、臨界点付近で

$$Q(\varepsilon, L, R) \sim L^{-x/\nu} \bar{F}_R(m\varepsilon L^{1/\nu}) \quad (3)$$

となるであろう。ただし、 \bar{F}_R は関数形がアスペクト比に依存する一変数関数である。すなわち、アスペクト比 R が同じであれば、正方形領域の場合と同様に有限サイズスケールができるであろうと期待される。しかし、 R が異なればスケール関数は異なる。

そもそもスケールできる、できない、ということはどういうことだろうか。分かりやすく言えば、あるシステムサイズ (たとえば $L = 256$) のデータから、他のサイズ ($L = 64$ や $L = 1024$ など) の (臨界点近傍での) 振る舞いも予想できるということだ。しかし、正方形 ($R = 1$) のデータが得られたとしても \bar{F}_R の R 依存性が分からない限り $R = 2$ や $R = 3$ のデータを予想はできないことになる。

以上の事情を実際のデータで見てみよう。例として長方形領域におけるボンド過程の浸透問題 (bond-percolation model) を考える。物理量として、クラスターが系の上端から下端に達する確率 (crossing probability) E を考える¹。このデータを、システムサイズを $L = 64, 128, 256$ の三種類、アスペクト比 $R = 1, 2, 4, 8, 16$ の 5 種類、計 15 種類の系について Monte Carlo 法で計算した結果を図 2(a) に示す。このデータをスケールしてみよう。無限系では E は階段関数になるので、有限サイズスケールは式 (3) において $x = 0$ を代入した形、

$$E(\varepsilon, L, R) = \bar{F}_R(\varepsilon L^{1/\nu}) \quad (4)$$

とあらわすことができる。したがって、得られたデータを $\varepsilon L^{1/\nu}$ に対してプロットすれば、同じ関数形 \bar{F} になることがわかる。このようにしてプロットされたデータが図 2(b) である。図を見てわかるように、システムサイズの違うデータは簡単な操作で同じ曲線にまとめることができる。

では、アスペクト比の違うデータはスケールできないのであろうか。図 2(b) に描かれた 5 本の曲線の間には簡単な関係は無いのであろうか？

3 写像

3.1 スケール関数と写像

まずスケール関数の物理的な意味を忘れ、やっている操作だけに着目する。すると、二つの図形 (曲線) があり、ある操作により同じ形に変形しているのであるから、この操作は一種の写像だと考えることができる。その写像として、 x 軸の縮尺を変化させる写像 $x' = f(x)$ を考える (以下、 ρ を x と記述する)。この写像は値域、定義域共に $[0, 1]$ である (すなわち $0 \leq x, x' \leq 1$)。

¹ここでは浸透クラスターの存在確率という意味で Existence Probability の頭文字 E を取ったが、数学では crossing probability と呼ばれ、 π であらわすことが多い。以下の文でも crossing probability と呼ぶ。

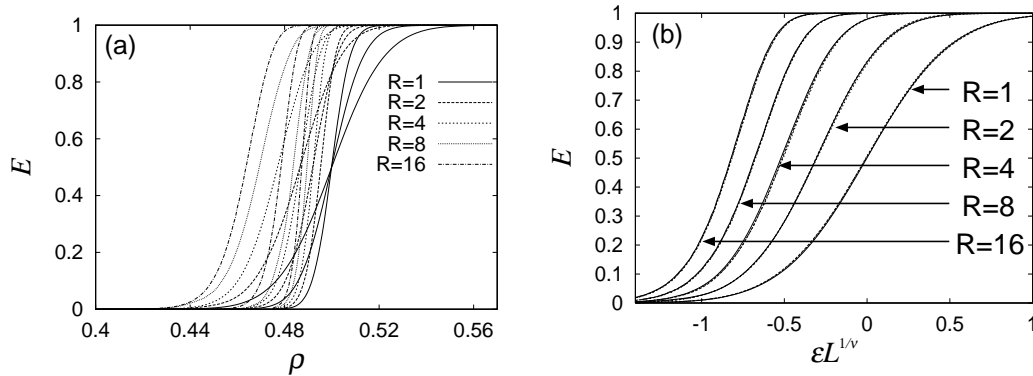


図2: (a) crossing probability E と (b) そのスケールデータ。 (a) には、 $L = 64, 128, 256$ のサイズで、それぞれ $R = 1, 2, 4, 8, 16$ の場合、計 15 本の線が描かれている。これをスケール変数 $\varepsilon L^{1/\nu}$ に対してプロットすれば、各アスペクト比ごとに同じ曲線になる。ただし、 $\nu = 4/3$ 、さらに正方格子のボンド過程なので $\rho_c = 1/2$ を用いた。

さて、条件の異なる二つの系 A, B を考え、それぞれにおける crossing probability を E_A, E_B としよう。 E_B を E_A に重ねる写像 $f_{B \rightarrow A}$ を考える。すると、この二つが重なるためには $\forall x \in [0, 1]$ について

$$x' = f(x) \tag{5}$$

$$E_B(x') = E_A(x) \tag{6}$$

が成り立てばよい。どちらの系においても E は単調増加関数、定義域、値域は $[0, 1]$ と同じ、さらに $E_A(0) = E_B(0) = 0$ かつ $E_A(1) = E_B(1) = 1$ であるため、この条件を満たす写像 $f(x); \forall x \in [0, 1]$ は必ず存在し、しかも一意に決まる。ただし、ここではなめらかな写像 (微分同相写像) を考えている。

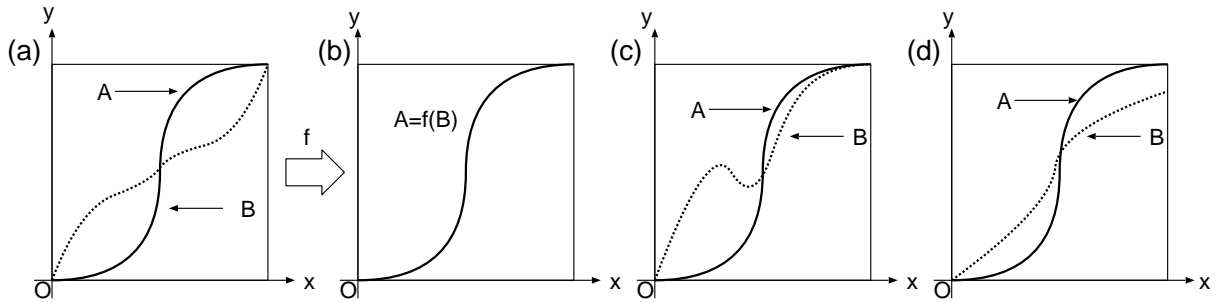


図3: 定義域、値域を共有する二つの関数 $y = A(x)$ と $y = B(x)$ を重ねる写像。(a) では、 A, B とともに単調増加であり、なおかつ定義域の終端で値が一致しているため、(b) のように B を x 軸の伸縮だけで系 A に重ねることができる。この時、伸縮率は x に依存する関数であり、その関数 $f(x)$ が B を A に重ねる写像である。図で $A = f(B)$ とあるのは、正しく書けば $A(x) = B(f(x))$ のことである。(c) と (d) に x 軸の伸縮だけでは重ねることができない例を示す。(c) は A が単調増加であるにもかかわらず B はそうではないため、重ねることができるが、場所により B が多価になる所があらわれてしまう (写像が微分同相ではない)。(d) は系の終端で値が異なるため、 x 軸の変換だけでは重ねることができない (写像が存在しない)。二つの曲線 $A(x), B(x)$ を x 軸の伸縮のみで重ねる写像 $f(x)$ がある十分条件は、 A, B とともに単調増加関数で、定義域の終端で値が一致することである。必要十分条件は二つの曲線のある種のトポロジーが同じであることだが、定義が面倒である上に考えている物理量が全て単調増加なのでここでは深入りしない。

条件の異なる二つの系を重ねる写像と書いたが、これはどのような条件が異なっても良い。ボンド過程とサイト過程の違いはもちろん、二次元と三次元であろうが、境界条件が異なるうが、とにかく原理

的にはどの二種の系についても E を重ねる微分同相写像 f は存在する。浸透クラスターの体積分率 (浸透確率) P も同様である。

3.2 有限サイズスケーリングにおける写像

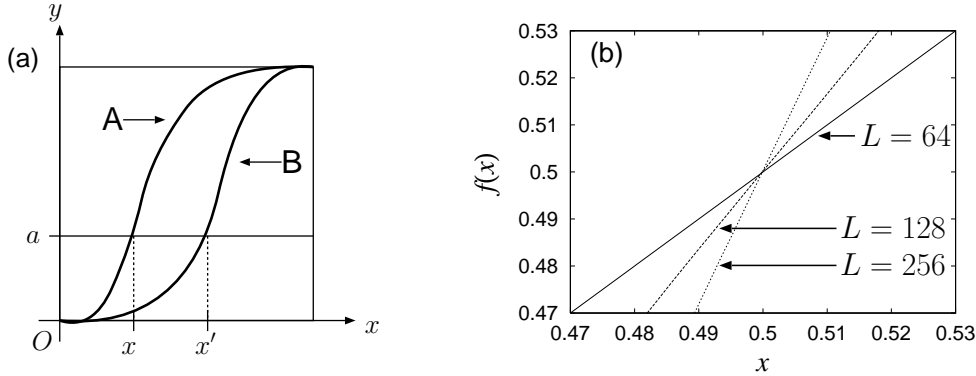


図 4: (a) データから写像 f を求める方法。 y 軸に平行な線を引き、データ $A(x)$ 及び $B(x)$ と交わる点をそれぞれ x, x' とすれば、 $f(x) = x'$ が曲線 B を A に重ねる写像である。(b) 得られた写像。正方形 $R = 1$ の系で、三つのシステムサイズ $L = 64, 128, 256$ について、参照系 $L = 64$ へデータを重ねる写像 $f(x)$ をプロットした。明らかに $L = 64$ を自分自身へ写す写像 $f(x)$ は、恒等写像 $f(x) = x$ となる。さらに、臨界点 $x = 0.5$ 近傍で $L = 128$ 及び $L = 256$ のデータが直線となっている。

前節で、どの二つの系の間にも、データを重ねる写像が存在することを述べた。ただし、その形が解析的に求まるかどうかは別問題である。では、その写像 f の形を実際に見てみよう。二つのデータ $E_A(x)$ 、 $E_B(x)$ が得られている時、式 (5) 及び (6) を満たす写像 f を数値的に得るのは簡単である。図 4 (a) のように、まず x 軸に平行な線 $y = a$ を引く。その線と E_A, E_B が交わる場所を x, x' とすれば、写像 f は $x' = f(x)$ を満たしているはずである。したがって、値域全てにわたってこのような組 (x, x') を求めてプロットすれば、それが $f(x)$ に他ならない。

簡単のため、正方形 ($R = 1$) の系で、三つのシステムサイズ $L = 64, 128, 256$ を考えよう。ここで、 $L = 64$ を参照系として、他の二つのデータを参照系に合わせる写像を考える。図 4 (a) の方法で数値的に得られた写像 $f(x)$ のデータを図 4 (b) に示す。

参照系と比較系が同じ場合、関数 $f(x)$ は明らかに直線 $y = x$ となる。すなわち、この写像が意味するところは参照系を直線に移す写像により、比較系がどのような形に写されるかを見ていることに他ならない。同じアスペクト比を持つ系は臨界点近傍では全て直線に移される。これは、同じアスペクト比を持つ系が同じ関数形を持っていることを視覚的に確認していることになる。

写像 $f(x)$ が臨界点近傍で直線となることは、有限サイズスケーリング理論からも分かる。システムサイズ L_A, L_B を持つ系 A 及び B について、スケーリング変数 $s_A = (\rho - \rho_c)/\rho_c(L_A)^{1/\nu}$ 及び $s_B = (\rho - \rho_c)/\rho_c(L_B)^{1/\nu}$ を用いれば、臨界点近傍で

$$E_B(s_B) = E_A(s_A) \quad (7)$$

となるのであった。

式 (5) 及び (6) において、 s_A を x 、 s_B を x' だと思えば、 x' と x の間には

$$(x' - \rho_c)(L_A)^{1/\nu} = (x - \rho_c)(L_B)^{1/\nu}, \quad (8)$$

という関係がある。この式を x' についてまとめると、

$$x' = \left(\frac{L_A}{L_B}\right)^{1/\nu} x + \rho_c \left(1 + \left(\frac{L_A}{L_B}\right)^{1/\nu}\right) \quad (9)$$

となる。ここでシステムサイズ L_A 、 L_B 及び臨界指数 ν 、臨界点 $\rho_c = 1/2$ は定数であるから、 x と x' の間には、

$$x' = c_1 x + c_0 \quad (10)$$

という線形の関係にあることがわかる。ただし、 $c_1 = (L_A/L_B)^{1/\nu}$ 及び $c_0 = \rho_c(1 + (L_A/L_B)^{1/\nu})$ である。このことから、臨界点近傍において、システムサイズが異なる (その他の条件は全て共有している) 二つの系 A 、 B のデータを重ねる写像 $f(x)$ は

$$f(x) = c_1 x + c_0 \quad (11)$$

という形であることがわかる。

4 アスペクト比が異なる場合

4.1 写像の形

有限サイズスケーリングの場合と同様に写像 $f(x)$ の関数形を見してみる。システムサイズ $L = 256$ で、アスペクト比 $R = 1, 2, 4, 8, 16$ の5つの系の crossing probability E を図 5(a) に示す。このデータから、正方形 ($R = 1$) の系を参照系として写像を計算した結果が図 5(b) である。直線には近いが、システムサイズのみ異なる場合の写像 (図 4(b)) ほどきれいな直線にはならないことがわかる。

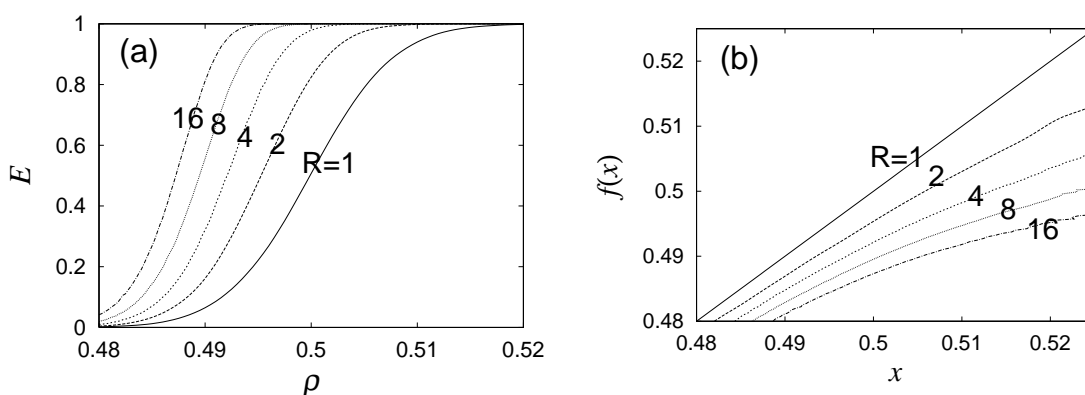


図 5: 異なるアスペクト比を持つ系での写像。(a) システムサイズ $L = 256$ 、アスペクト比 $R = 1, 2, 4, 8, 16$ の5つの系の crossing probability E の値。(b) 正方形 $R = 1$ の系を参照系とした時の写像 $f(x)$ 。有限サイズスケーリングの場合のように、きれいな直線にはならない。

4.2 次元クロスオーバー

前節で、二つの系を合わせる写像 f として、 x 軸を合わせる $f(x)$ を考えた。同様にして、 y 軸を合わせる写像を考えることもできる。 x 軸の場合と同様に、まず y 軸に平行な線 $x = a$ を引き、その線と E_A, E_B が交わる場所を y 及び y' とする。この操作を全ての定義域 $[0, 1]$ に対して行い、全ての点 (y, y') をプロットした関数が $y' = f(y)$ である。 x 軸をあわせる写像を x 軸マッピング、 y 軸の場合を y 軸マッピングと呼ぼう。どちらの場合も、参照系をそれ自身に移す写像は直線 $y = x$ であるが、データの変換の方向が異なる (図 6 参照)。

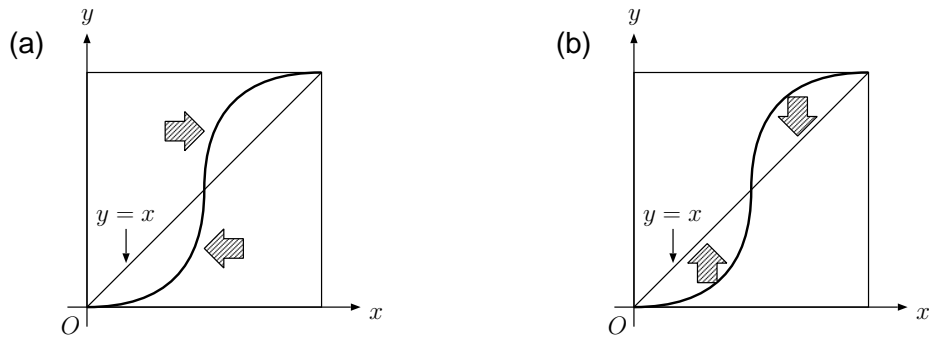


図 6: (a) x 軸マッピングと (b) y 軸マッピング。それぞれ参照系のデータを直線 $y = x$ へ写すが、 x 軸マッピングは横方向につぶすのに対し、 y 軸マッピングは縦方向につぶす操作を行っている。

この y 軸マッピングを行った結果を図 7 に示す。アスペクト比が大きくなるにつれ、写像がある固定点に引き込まれていることがわかる。これは、 R 無限大の極限で系が一次元になり、 E がステップ関数 $\Theta(x-1)$ になることに対応している。ステップ関数 $\Theta(x-1)$ はどんな y 軸マッピングに大しても不変であり、「 R を大きくする」という操作に対して固定点となっている。したがって、諸物理量のアスペクト比依存性を調べることは、次元クロスオーバーの様子を見ている、という意味もあることがわかる。

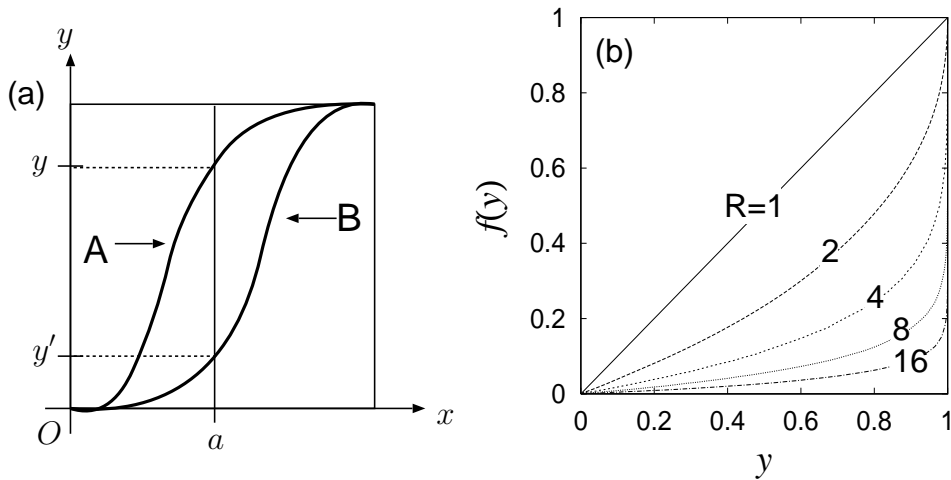


図 7: (a) y 軸マッピングの方法及び (b) 結果。アスペクト比が大きくなるにつれ、固定点 (1 次元) に向かう次元クロスオーバーが見える。

4.3 非線形スケーリング

写像の考え方の応用として、非線形のスケーリングを考えることもできる。異なるアスペクト比を持つ系を重ねる写像は、図 5(b) を見ればわかるように直線にはならない。逆に、図 5(b) の $f(x)$ をよく近似する関数を用いれば、よいスケーリングを得ることができる。Legendre 展開すると、これらの $f(x)$ が二次関数で非常によく近似できることが分かるため、 $f(x) = c_2x^2 + c_1x + c_0$ という形でスケーリングを行った結果を図 8 に示す。すると、(当然のことだが) 非常に良くスケールできる²。これらの写像の係数 c_2, c_1, c_0

²これは、単に自由度を増やしたからスケーリングできる、という事ではなく (それもあるが)、写像 $f(x)$ が二次式でよく近似できることが本質である。

の比は、アスペクト比にのみ依存する。したがって、この係数を R について外挿すれば、より大きなアスペクト比を持つ系の振る舞いも予想できるし、係数の R 依存性から新たな知見も得られるであろう。

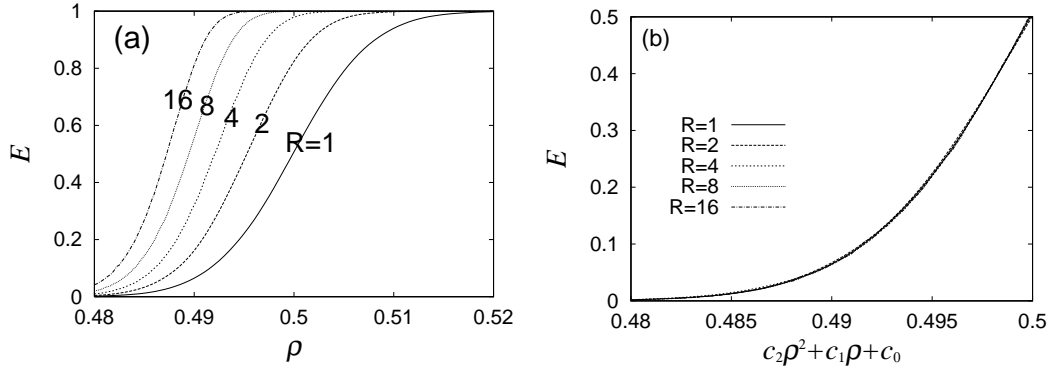


図 8: (a) $L = 256$ の時のデータ。(b) 写像 $f(\rho) = c_2\rho^2 + c_1\rho + c_0$ でスケールしたデータ。良く一致している。図 5(b) の曲線を Legendre 展開することにより、係数 c_2, c_1 及び c_0 をそれぞれ決めている。したがって、係数はアスペクト比に依存する。

5 まとめ

以上、二次元浸透問題におけるスケーリングを、写像という考え方で考察してきた。有限サイズスケーリングは、線形写像 $f(x) = c_1x + c_0$ であらわされること、アスペクト比 R が大きい極限は一次元系であることから、次元クロスオーバー現象を見ていることなどがわかる。また、非線形スケーリング³を考えることで、アスペクト比依存性が調べやすくなったかもしれない。

余談となるが、アスペクト比の異なる系での UFSSF を考える際、良く知られた Cardy の厳密解 [5] は役に立たない。なぜなら、Cardy は臨界点直上 (図 2(b) における $\varepsilon = 0$ の場所) での浸透確率の値を预言しているが、図 2(b) を見ればわかるように、知りたいのはもっと左側の振る舞いである。Cardy の値を計算してみると、 $R = 1$ で 0.5、 $R = 2$ で 0.82、 $R = 4$ で 0.98 ... と急速に 1 に近づき、 $R = 8$ や $R = 16$ の区別をつけるのは難しい。たとえば、 $E_p(\rho) = 0.5$ となる、 ρ のアスペクト比依存性などはわからない。アスペクト比を論じるには、もう少し別のアプローチが必要だと思われる。

参考文献

- [1] M. Sahimi: *Applications of Percolation Theory* (Taylor and Francis, London, 1994); D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, Revised 2nd. ed. (Taylor and Francis, London, 1994).
- [2] C.-K. Hu and C.-Y. Lin, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 8 (1996)
- [3] H. Watanabe, S. Yukawa, N. Ito and C.-K. Hu, to appear in *Phys. Rev. Lett.*
- [4] V. Privman and M. E. Fisher, *Phys. Rev. B* **30**, 322 (1984).
- [5] J. L. Cardy, *J. Phys. A* **25**, L201 (1992).

³これをスケーリングと呼んでよいかは、もちろん別問題だ。