

確率教材としてのパーコレーションについて

(元) 一関高専 梅野善雄

1 はじめに

パーコレーションは、多数の種類がある相転移の一つのクラスであり、いろいろなものの広がり方を表わす数学モデルである。感染症や森林火災の広がり方、神経ネットワークの発達の仕方、あるいは多孔性岩石への液体の浸透の仕方など、多数の実例がある。

数学的には、隣り合う格子点を一定の確率で結んでいくとき、原点が無限に繋がるのは確率 p がどのような場合であるかを考えることになる。 p が小さいときは無限に繋がることはないが、ある値を超えると突然無限に繋がるようになる。ある値を境に状況が一変するので、パーコレーション相転移と呼ばれる。

相転移は、水が氷になったり蒸気になったりするなど、一つの物質であるのに形や性質が大きく変わる現象をいう。磁石を熱してある温度を越えると突然磁性を失ったり、金属などの伝導性の物質が低温下では電気抵抗が0になるのも相転移である。相転移では、ある値を境に物質の形や性質が一変する。

ここでは、相転移とパーコレーションの関係を紹介すると同時に、学生にも提示可能な例について考察する。

2 相転移と臨界現象

2.1 相転移の種類

相転移には不連続相転移と連続相転移がある。水の相転移は不連続相転移である。それは、融解や蒸発のときに外部との熱のやりとりを行うので、エントロピーが不連続に変化することによる。

一方、磁性や伝導性に関する相転移は連続相転移である。この場合は、エントロピーは連続的に変化しても、比熱などの別な量が不連続であったり発散するなどの異常な変化をする。その変化は臨界現象と呼ばれる。

2.2 臨界現象

連続相転移の臨界点の近傍では、いろいろな物理量が臨界点との距離に関してべき乗則で変化し、

臨界点では発散するなどの異常な変化をする。

たとえば、磁性体の場合、臨界点の温度を T_c として $t = (T - T_c)/T_c$ とすると、用語だけの紹介になるが、磁化率 χ 、比熱 C 、自発磁化 m 、外部磁場 h 、そして相関距離 ξ は、それらの主要部分は $|t|$ のべき乗と次のような比例関係にある。

$$\begin{aligned} C &\propto |t|^{-\alpha} \quad (T > T_c), & C &\propto |t|^{-\alpha'} \quad (T < T_c) \\ m &\propto |t|^\beta \quad (T < T_c), & m &\propto |h|^{\frac{1}{\delta}} \quad (T = T_c) \\ \chi &\propto |t|^{-\gamma} \quad (T > T_c), & \chi &\propto |t|^{-\gamma'} \quad (T < T_c) \\ \xi &\propto |t|^{-\nu} \quad (T > T_c), & \xi &\propto |t|^{-\nu'} \quad (T < T_c) \end{aligned}$$

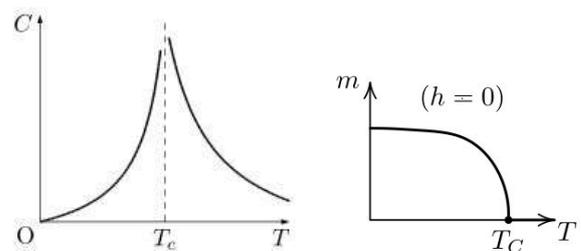


図 1：比熱 C と自発磁化 m の変化

臨界点の前後のべき指数は $'$ をつけて区別したが、実際には一致すると予想されている。連続相転移する他の物質でもこれらに対応する量を考えると、臨界点の近傍の変化はやはりべき乗則で変化する。ものの変化の仕方は多様なはずであるのに、連続相転移の臨界点の近傍の変化は、物質の種類を問わず、何故か、ことごとく臨界点との距離に関してべき乗則に従って変化している。そのべき指数は臨界指数と呼ばれギリシア文字で表わされる。 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta, \tau, \sigma$ などがある。

2.3 普遍性クラス

臨界指数の値は相転移する物質により異なるが、同じような値をとる幾つかのクラスに分類することができる。そのクラスは、普遍性クラスあるいはユニバーサルクラスと呼ばれており、同じクラスに属する物質の相転移は、同じ仕組みで起きると考えられている。代表的な普遍性クラスとして、次のようなものがある。

表 1：代表的な普遍性クラスと主な臨界指数

クラス名	α	β	γ	δ
平均場理論	0	$\frac{1}{2}$	1	3
3次元ハイゼンベルク	-0.12	0.365	1.386	4.80
3次元XY	-0.012	0.349	1.327	4.780
3次元イジング	0.110	0.326	1.237	4.789
2次元イジング	0	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	15
2次元パーコレーション	$-\frac{2}{3}$	$\frac{5}{36}$	$\frac{43}{18}$	$\frac{91}{5}$

(英文 Wikipedia より)

普遍性クラスは他にもあり、数十種類以上あるといわれている。イジングモデルは、磁性体の相転移をもとにした理論的なモデルであり、2次元の場合は厳密解が得られている [3].

2.4 スケーリング則

普遍性クラスが異なれば臨界指数も異なるが、驚くべきことに、臨界指数はどの普遍性クラスでも次のような一定の関係式を満たしている。

$$2 - \alpha = \beta(\delta + 1) = \gamma + 2\beta$$

このような臨界指数の間に成り立つ関係式はスケーリング則と呼ばれ、他にも幾つかの式が知られている。表 1 で示した値は、いずれもこの関係式をほぼ満たしている、

スケーリング則は、性質が劇的に変化する相転移の臨界点の近傍では、物質の違いを超えて共通の関係が成り立つことを示しており、ただ事ではない！普遍性クラスの違いを超えて成り立つので、臨界指数に関する特定のクラスでの考察結果は、他の普遍性クラスでも成り立つことが期待される。

3 パーコレーション

パーコレーションは相転移の普遍性クラスの一つであり、実験等をすることなく確率論の中で理論的に考察することができる。

簡単のため、平面上で座標が整数の格子点を考える。格子点を一定の確率 p で占有するときはサイトパーコレーション、隣り合う格子点を確率 p で辺で結ぶときはボンドパーコレーションという。

以下ではボンドパーコレーションを考える。隣り合う格子点を一定の確率 p で繋いでいくとき、原点が無限に繋がるようになる p の値を考えることになる。

図 2 は、 15×15 の正方格子で、 $p = 0.45, 0.55$

の場合のボンドパーコレーションである。

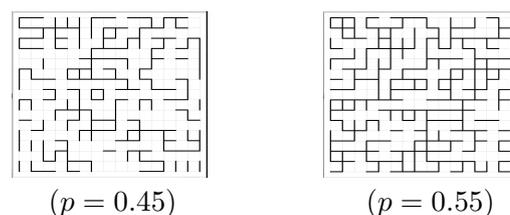


図 2：正方格子のボンドパーコレーション

図 2 において、 $p = 0.45$ のときは端から端まで繋がるクラスターはないが、 $p = 0.55$ のときは下から上や、左から右に繋がるクラスターがある。

(注) 格子の数が少ないので、何度も実行すると、 $p = 0.45$ でも端から端まで繋がる場合が出てくるが、ここでは概念的な場合として述べた。

平面の場合、 $p \leq \frac{1}{2}$ のときは無限に繋がることはなく、 $p > \frac{1}{2}$ のときは無限に繋がる確率が正になることが証明されている。つまり、原点と繋がる格子点の集合を C_0 とし、 C_0 に含まれる格子点の数を $|C_0|$ で表わして $\theta(p) = P_p(|C_0| = \infty)$ を考えると、 $p > \frac{1}{2}$ のとき $\theta(p) > 0$ である。

$\theta(p)$ のグラフは、図 3 のようになる。 $p_c = \frac{1}{2}$ を境に状況が一変するので、パーコレーション相転移といわれる。この確率を臨界確率という。

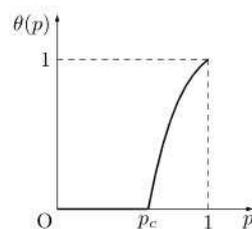


図 3： $\theta(p)$ のグラフ

臨界点 $p = p_c$ の近傍の様子を調べるため、次のような関数を考える [6].

(注) パーコレーション研究の最新情報は [8],[9] を参照。

$$\begin{aligned}\theta(p) &= P_p(|C_0| = \infty) \\ f(p) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} P_p(|C_0| = n) \\ \chi(p) &= E_p(|C_0|) \\ \tau_p(x) &= P_p(x \in C_0) \\ \xi(p) &= \sqrt{\frac{1}{\chi(p)} \sum_{x \in \mathbb{Z}^2} |x|^2 \tau_p(x)}\end{aligned}$$

これらの関数を臨界確率 p_c の近傍で考えると、相転移の場合と同様に、 p_c との距離に関してべき乗則で変化すると予想されている。

$$\begin{aligned}\langle \alpha \rangle & \frac{d^3}{dp^3} f(p) \propto (p_c - p)^{-1-\alpha} & (p \uparrow p_c) \\ \langle \beta \rangle & \theta(p) \propto (p - p_c)^\beta & (p \downarrow p_c) \\ \langle \gamma \rangle & \chi(p) \propto (p_c - p)^{-\gamma} & (p \uparrow p_c) \\ \langle \nu \rangle & \xi(p) \propto (p_c - p)^{-\nu} & (p \uparrow p_c) \\ \langle \delta \rangle & P_{p_c}(|C_0| = n) \propto n^{-1-\frac{1}{\delta}} & (n \rightarrow \infty) \\ \langle \eta \rangle & \tau_{p_c}(x) \propto |x|^{-\eta} & (|x| \rightarrow \infty)\end{aligned}$$

これらの臨界指数は、相転移の場合と同様に

$$2 - \alpha = \beta(\delta + 1) = \gamma + 2\beta$$

を満たすことも予想されている。パーコレーションは相転移の普遍性クラスの一つなので、相転移を数学の立場から考察していることになる。この問題の重要性から、2006年、2010年、そして2022年は、パーコレーションやイジングモデルの研究もフィールズ賞を受賞している。

4 パーコレーションの教材

相転移の仕組みの解明は物理学の重要課題である。パーコレーションは、相転移の数学の立場からの研究であることを学生にも伝えて、この問題への関心を高めさせたい。しかし、平面の場合であっても一般論は難しすぎる。学生でも考察可能な内容として、1次元の数直線がある。平面上の範囲を限定した三角格子などで考察させることは可能かもしれない。また、PCによるシミュレーションで実験的に調べさせることも考えられる。

4.1 1次元パーコレーション

数直線上で、座標が整数の点を次々に一定の確率 p で占有するとき、隣り合う点が占有されてい

る点の集合(クラスター)を考える。これは、サイトパーコレーションを考えることになる。下図は、占有点を黒丸で示した。



以下では、[5]をもとに1次元パーコレーションについて考える。

(1) 臨界確率：

明らかに、 $p = 0$ のときは占有される点は存在せず、 $p = 1$ のときは全ての点が占有される。 $p < 1$ のときに無限に繋がるクラスターは存在しないので、1次元の場合の臨界確率は $p_c = 1$ である。

(2) 点の数が s 個のクラスターが生じる確率 n_s ：

s 個の点が連続して占有される確率は p^s である。 s 個だけであるのは、その両側が占有されていない場合であるので、 $n_s = p^s(1-p)^2$ である。

仮に点の総数を L 個とすると、 s クラスターの数 $n_s L$ である。したがって、 n_s は1つの点あたりの s クラスター数として捉えることができる。

(3) 任意に選んだ点が s クラスター内の点である確率：

s クラスターができる確率 n_s は、1つの点が s クラスターの左端にある確率とみることもできる。それは s クラスター内のどの点でも同じなので、 s クラスター内の点である確率は sn_s とみれる。

(4) 任意に選んだ点があるクラスターに含まれる確率：

s クラスターに含まれる確率は sn_s であるので、求める確率はその総和である。それは、選んだ点が占有される確率と一致するはずであるから、

$$\sum_{n=1}^{\infty} sn_s = \sum_{n=1}^{\infty} sp^s(1-p)^2 = p$$

が成り立つ。左辺を実際に計算しても示せる。

$$\begin{aligned}\sum_{s=1}^{\infty} sn_s &= (1-p)^2 p \sum_{s=1}^{\infty} sp^{s-1} \\ &= (1-p)^2 p \frac{d}{dp} \left(\sum_{s=1}^{\infty} p^s \right) \\ &= (1-p)^2 p \frac{d}{dp} \left(\frac{p}{1-p} \right) = p\end{aligned}$$

(5) 全クラスターの中で s クラスターの占める割合 w_s ：

任意に選んだ点が s クラスタ内の点である確率は sn_s であるので、占有される点を任意に選んだとき、それが含まれるクラスタが s クラスタである確率は、次式で表わされる。

$$w_s = \frac{sn_s}{\sum_{s=1}^{\infty} sn_s} = \frac{1}{p} sn_s$$

上記を s クラスタの「大きさ」とすると、その平均 S は、

$$S = \sum_{s=1}^{\infty} sw_s = \frac{(1-p)^2}{p} \sum_{s=1}^{\infty} s^2 p^s$$

で表わされる。(4) の計算過程から

$$\sum_{s=1}^{\infty} sp^s = \frac{p}{(1-p)^2}$$

であることを利用して (4) と同様の変形を行うと

$$\begin{aligned} S &= \frac{(1-p)^2}{p} \sum_{s=1}^{\infty} s^2 p^s \\ &= (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{d}{dp} (sp^s) \\ &= (1-p)^2 \left\{ \frac{d}{dp} \left(\sum_{s=1}^{\infty} sp^s \right) \right\} \\ &= \frac{1+p}{1-p} \end{aligned}$$

となる。 $p_c = 1$ であるから

$$S = \frac{p_c + p}{p_c - p}$$

と表わされる。したがって、 $p \approx p_c$ のときは

$$S \approx \frac{2p_c}{p_c - p} \propto (p_c - p)^{-1}$$

とべき乗則で表わされ、 $p \uparrow p_c$ のとき S は発散する。 S は 3 節の $\chi(p)$ に対応するものであるから、臨界指数は $\gamma = 1$ である。

(6) 相関関数 $G(r)$:

ある占有点から距離 r だけ離れた点と同じクラスタに属する確率を $G(r)$ とすると、 $G(r)$ は次式で表わされる。この関数を相関関数という。

$$G(r) = p^r = e^{r \ln p}$$

(8) 相関距離 ξ :

$p \approx p_c$ のとき、 $\ln p$ を $p = p_c$ の回りで展開すると $\ln p \approx -(p_c - p)$ と近似できるので、

$$r \ln p = -\frac{r}{\frac{1}{\ln p}} \approx -\frac{r}{\frac{1}{p_c - p}}$$

となる。この分母を ξ とすると、

$$\xi = -\frac{1}{\ln p} \approx \frac{1}{p_c - p} = (p_c - p)^{-1}$$

である。 ξ は相関距離とよばれ、 $p \uparrow p_c$ のとき発散する。 ξ を用いると、相関関数 $G(r)$ は

$$G(r) = e^{-\frac{r}{\xi}}$$

と表わされ、距離 r だけ離れた点と同じクラスタに属する確率は、指数関数的に減少する。相関距離は 3 節の $\xi(p)$ に相当するものであり、臨界指数は $\nu = 1$ である。

このようにして、1次元の場合でも幾つかの臨界指数を求めることができる。関数の展開を学んだ高学年であれば、ある程度教授可能と思われる。

5 おわりに

パーコレーションは、実世界の相転移の数学モデルになっている。劇的な変化をする箇所の近傍では、物質の違いを超えて共通の関係式が成り立つというのは只事ではない。この問題への関心を高めるためにも、確率の問題として積極的に取り入れることが望まれる。

参考文献

- [1] スタンリー：相転移と臨界現象，東京図書，1974年
- [2] 西森秀稔：相転移・臨界現象の統計物理学，培風館，2005年
- [3] 田崎清明・原隆：相転移と臨界現象の数理，共立出版，2015年
- [4] 樋口保成：パーコレーション：ちょっと変わった確率論入門，森北出版，2021年（遊星社による2011年発行版のPOD出版）
- [5] スタウファー・アハロニー：パーコレーションの基本原理，吉岡書店，2001年
- [6] 樋口保成：Percolation の臨界現象，数学，Vo.40，1988
- [7] 田崎清明：Percolation の臨界現象と物理，数学，Vo.40，1988
- [8] 坂口哲：パーコレーションの数理2020，数学，Vo.74，2020
- [9] 坂口哲：Hugo Duminil-Copin 氏の業績，数学，Vo.76，2024