第 24 回グラフ電卓研究会 (福井高専)

べき乗則・相転移・浸透現象

梅野　善雄

(元) 一関工業高等専門学校

2024 年 6 月 15 日

目　次

べき乗則とべき分布

- 2 つの変量 x, y が，$y = kx^a$ のようなべき乗の関係にあるとき，x, y の間には「べき乗則が成り立つ」あるいは「べき乗則を満たす」などという．
- いろいろな反比例の関係，重力のような逆 2 乗の関係は，べき乗則の関係にある．
- 確率密度関数がべき関数で

$$f(x) = \frac{ab^a}{x^{a+1}} \quad (a > 0, x \geqq b)$$

  と表わされるような確率分布はべき分布 (パレート分布) と呼ばれる．この確率分布に従う現象は，ミクロからマクロまで多方面でみられる．
- いずれで，両対数グラフで表示すると直線になる．

$$\log y = \log k + a \log x$$

$$\log f(x) = \log C - (a+1) \log x \quad (C = ab^a)$$

スケール不変性

べき乗則に従うとき，大きな特徴として「スケール不変性」がある．

- x, y が $y = kx^a$ を満たすとき，x を c 倍すると
$$y = k(cx)^a = c^a \cdot kx^a \propto kx^a$$
となり，もとの式と比例関係にある．
- $y = kx^a$ のとき，$X = cx, Y = c^a y$ と変数変換すると，
$$y = kx^a \quad \Rightarrow \quad c^a y = c^a \cdot kx^a \quad \Rightarrow \quad Y = kX^a$$
となり，変換後も同じべき乗則を満たす．
- つまり，どの尺度でみても同じ関係を満たして違いが分からない！
この性質はスケールフリーともいわれる．
- このような関係を持つものは，べき関数に限ることが証明できる．
つまり，$f(cx) = g(c)f(x)$ が成り立てば，$f(x) = Cx^K$ の形に限ることが導ける．

べき乗則に従う現象

べき分布に従う現象例はすでに多数報告しているので，ここではべき乗則として両対数グラフでは右上がりになる場合を紹介する．

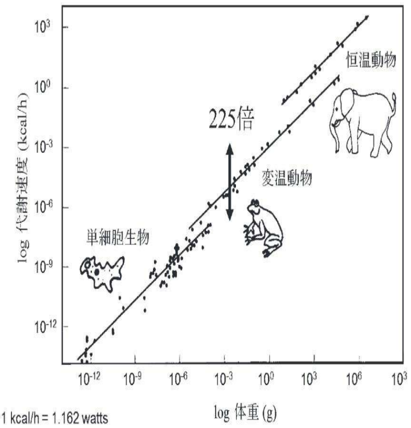
- 生物の生きるために必要な単位時間あたりのエネルギー量は代謝速度と呼ばれる．生物のサイズ (体重) M と代謝速度 B の関係をみると，

$$B = aM^{\frac{3}{4}} \quad (a > 0)$$

$$\Downarrow$$

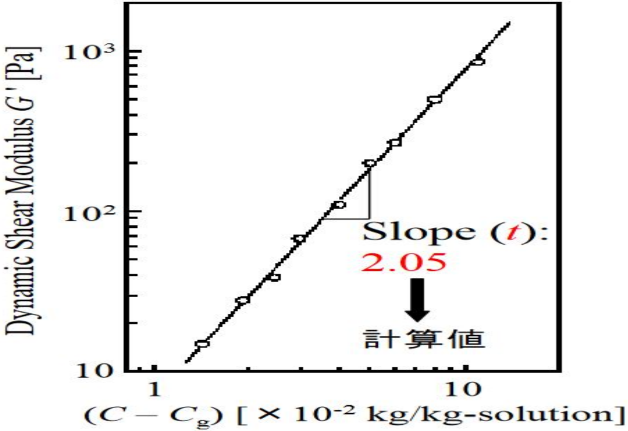
$$\log B = \log a + \frac{3}{4} \log M$$

この関係は「クレイバー則」と呼ばれ，単細胞生物から像のような巨大生物まで成り立つことが確認されている．



https://www.jstage.jst.go.jp/article/seitai/63/1/63_KJ00008637273/_pdf

- ゼラチンは，その内部では高分子が絡み合っている．濃度が低いと流動性のあるゾルの状態であるが，濃度が高まると弾性を有するゲルの状態になる．ゾル・ゲルの転移点の濃度を C_g とすると，ゼラチンの弾性率 G' は，$G' \propto |C - C_g|^t$ $(C > C_g)$ という関係にある．



https://www.jstage.jst.go.jp/article/nskkk/62/12/62_593/_pdf

相転移

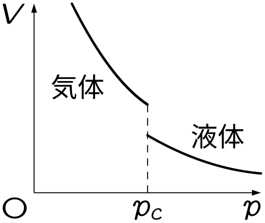
ここで，話題を「相転移」に変える．べき乗則と関係しないようにみえながら，相転移という現象の中にもべき乗則が潜んでいる．

- 同じ物質でありながら，突然に異なる状態に変化する現象は相転移と呼ばれる．
- 相転移がおきる臨界点では，体積，エントロピー，比熱などが不連続に変化したり発散するなどの特異な変化をする。
- 見た目が変化する場合もあれば，磁石を熱すると磁力を失うなど，物質の性質が変化する場合もある．
- 相転移を起こす物質は多岐に及ぶ．
  - 水：温度により固体 (氷) になったり気体 (水蒸気) になったりする．
  - 磁石：熱を加えていくと，ある温度以上で磁力を失う．
  - 水銀：温度を下げていくと，-269° で電気抵抗が 0 になる．
  - 液体ヘリウム：約 -271° で粘性を失い超流動状態になる．
  - 寒天：熱を加えると固形状だったものが流動性のある状態になる．
  - 液晶：よく分からないので説明できないが、これも相転移するらしい．

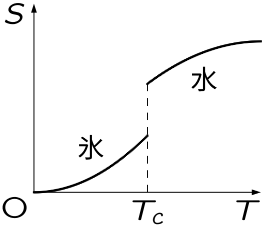
相転移の種類 (不連続相転移)

相転移には 2 種類あるといわれている．

- 不連続相転移 (1 次相転移)：



(a) 体積 V が不連続に変化

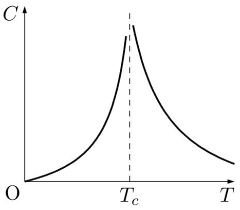


(b) エントロピー S が不連続に変化

- (a) は，気体に圧力 (p) を加えていくと，臨界圧力 (p_c) を超えると液体に変化して，体積は不連続に変化することを示している．
- (b) は，氷に熱 (T) を加えて融かしていくと，0°C を保ったまま，加えている以外の熱も外部から取り込んで水になっていく．加えた以外の熱を外部から取り込むので，エントロピーが不連続に変化する．

相転移の種類 (連続相転移)

- 連続相転移 (2 次相転移)：
  不連続相転移に対して，体積やエントロピーは連続的に変化しても，比熱や圧縮率などの別な物理量が発散する場合がある．そのような相転移は，連続相転移 (2 次相転移) と呼ばれている．
  　１次・２次の区別は，自由エネルギーの偏導関数の微分可能性と関連する．



臨界点での比熱の発散

- 熱力学の一般論によれば，温度 T と圧力 p の関数である自由エネルギーの第 1 次偏導関数が不連続であるのが不連続相転移，第 1 次偏導関数は連続でも，第 2 次偏導関数が不連続だったり発散してしまう場合を連続相転移という．
- 理論的には 3 次相転移もありえるが，実験精度の関係で，そこまでの区別は難しい．
- 以上の相転移とは別にトポロジカル相転移というものもあり，この発見には 2013 年にノーベル物理学賞が与えられている．

相転移の転移点近傍の状況

以下では，連続相転移 (2 次相転移) の場合を考える．
相転移する物質の転移点の近傍では，いろいろな物理量が，転移点との距離に関してべき乗則に従った特異な変化をする．臨界現象という．

- 磁石を熱すると磁力を失う相転移は，連続相転移である．臨界点の温度を T_c として $t = (T - T_c)/T_c$ とする．このとき，磁化率 χ，比熱 C，自発磁化 m，相関距離 ξ，外部磁場 H，そして相関関数を $G(r)$ とすると，次の関係が成り立つ．べき指数を，臨界指数という．

$$\chi \propto |t|^{-\gamma} \quad (T > T_c) \qquad \chi \propto |t|^{-\gamma'} \quad (T < T_c)$$

$$C \propto |t|^{-\alpha} \quad (T > T_c) \qquad C \propto |t|^{-\alpha'} \quad (T < T_c)$$

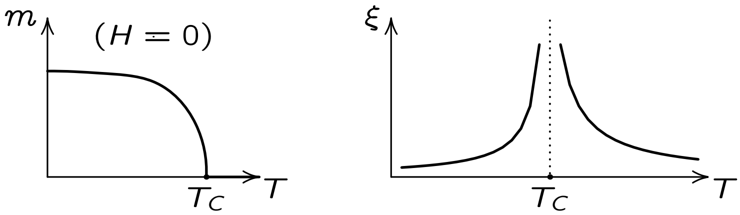
$$m \propto |t|^{\beta} \quad (T < T_c)$$

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \quad (T > T_c) \qquad \xi \propto |t|^{-\nu'} \quad (T < T_c)$$

$$G(r) \propto r^{-\tau} e^{-\frac{r}{\xi}} \quad (T \neq T_c) \qquad G(r) \propto r^{-d+2-\eta} \quad (T = T_c)$$

- 連続相転移する他の物質でも，上記に対応する物理量を考えると，べき指数は多少異なっても，いずれもべき乗則で変化している．

- 下図は，自発磁化 m と相関距離 ξ の変化の模式的なグラフである．



(a) 自発磁化 m の変化　(b) 相関距離 ξ の変化

- (a) は，外部磁場 (H) がないとき，自発磁化 (m) が臨界点 (T_c) で消失することを示す．
- (b) は，相関距離 (ξ) が臨界点では発散することを示す．
- べき乗則に従うと両対数グラフは臨界指数を傾きとする直線になるので，精密な実験をすれば臨界指数をある程度求めることができる．

スケーリング則

- 連続相転移する物質の臨界指数のパターンは限定的で，同じような値をとる幾つかのクラスに分類できるのではないかと予想されている．
- 同じクラスに属する物質の相転移は，同じような仕組みで生じると考えられる．臨界指数が同じような値をとるクラスは，普遍性 (ユニバーサル) クラスと呼ばれる．代表的なものに，下記がある．

臨界指数＼クラス	平均場	3 次元 XY	3 次元イジング	2 次元イジング
α	0	$-$	0.110	0
β	$\frac{1}{2}$	~ 0.345	~ 0.326	$\frac{1}{8}$
γ	1	~ 1.32	~ 1.237	$\frac{7}{4}$
δ	3	~ 4.81	~ 4.786	15

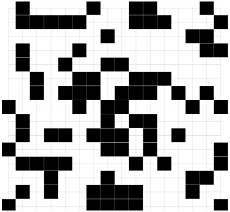
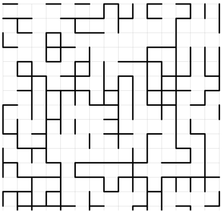
- これらの臨界指数は，どの普遍性クラスでも，スケーリング則と呼ばれる共通の関係式を満たすと予想されている．上記の値は，いずれもこれを満たしている．

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

浸透現象 (パーコレーション)

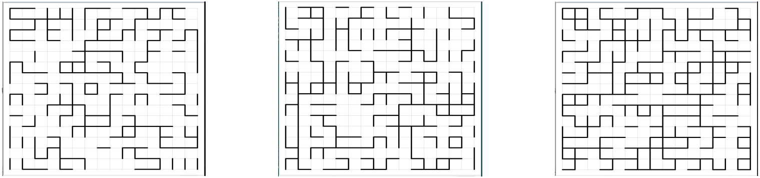
相転移現象の数学モデルが，パーコレーション (浸透現象) である．

- パーコレーションは，次々に何かが広がっていく (伝わっていく) 繋がり方に関する数学モデルである．
  感染症の拡大の仕方，森林火災，デマの拡散
  神経細胞の情報伝搬，多孔性物質の浸透の仕方，等々
- 数学的には，平面上の格子点を考えて，その格子点を一定の確率 p で占有する．隣り合う占有された格子点を繋いでいくとき，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．
- 占有された点を考えるときはサイトパーコレーション (左図)，隣り合う格子点を確率 p で辺で結んで無限に繋がる場合を考えるときはボンドパーコレーション (右図) という．

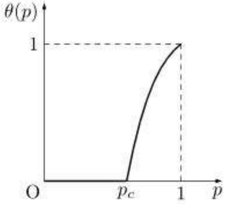
パーコレーション相転移

- 下図は，15 × 15 の正方格子における，$p = 0.45, 0.51, 0.55$ の場合のボンドパーコレーションである．（注）外枠は気にしない！



- $p = 0.45$ のときは，端から端まで繋がるクラスターはない．
  $p = 0.51$ のときは，左側に下から上まで繋がるクラスターがある．
  $p = 0.55$ のときは，下から上，左から右に繋がるクラスターがある．

- 平面の場合は，$p < \frac{1}{2}$ のときは無限に繋がることはなく，$p > \frac{1}{2}$ のときに突然無限に繋がる確率が正になる．相転移と同じ現象なのでパーコレーション相転移と呼ばれる．この場合の臨界確率は，$p_c = \frac{1}{2}$ である．



パーコレーションに現われる関数

- パーコレーションでは，原点と繋がる占有格子点の集合を C_0 として，その個数 $|C_0|$ を考える．そして，臨界点の近傍では何がどのような変化をするかが焦点となる．
- そこでは，次のような関数を考えることになる．

$$\theta(p) = \mathrm{P_p}(|\mathrm{C_0}| = \infty) \qquad f(p) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \mathrm{P_p}(|\mathrm{C_0}| = \mathrm{n})$$

$$\chi(p) = E_p(|C_0|) \qquad \tau_p(x) = \mathrm{P_p}(\mathrm{x} \in \mathrm{C_0})$$

$$\xi(p) = \sqrt{\frac{1}{\chi(p)} \sum_{x \in \mathbb{Z}^2} |x|^2 \tau_p(x)}$$

- これらの関数を利用すると，$|C_0| = \infty$ となるのは，$\theta(p) > 0$，$\chi(p) = \infty$ の場合である．

自由エネルギー

- $f(p)$ を拡張して，$h \geqq 0$ に対して $f(p,h)$ を次のように定める．

$$f(p,h) = h + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{-nh} \mathrm{P_p}(|\mathrm{C_0}| = \mathrm{n})$$

- $f(p,h)$ は，熱力学の自由エネルギーと同じような振る舞いをし，次のことが成り立つ．ただし，$p < p_c$ の場合とする．

$$\frac{\partial}{\partial h} f(p,0) = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{P_p}(|\mathrm{C_0}| = \mathrm{n}) = \theta(\mathrm{p})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial h^2} f(p,0) = \sum_{n=1}^{\infty} n \mathrm{P_p}(|\mathrm{C_0}| = \mathrm{n}) = \chi(\mathrm{p})$$

臨界指数とスケーリング則

- 臨界点 p_c の近傍では，相転移の場合と同様に，いろいろな量が転移点との距離に関してべき乗則に従って変化する．
  最後の式の d は，空間次元である．

$$
\begin{array}{lll}
<\alpha> & \dfrac{d^3}{dp^3}f(p) \propto (p_c - p)^{-1-\alpha} & (p \uparrow p_c) \\
<\beta> & \theta(p) \propto (p - p_c)^{\beta} & (p \downarrow p_c) \\
<\gamma> & \chi(p) \propto (p_c - p)^{-\gamma} & (p \uparrow p_c) \\
<\nu> & \xi(p) \propto (p_c - p)^{-\nu} & (p \uparrow p_c) \\
<\delta> & \mathrm{P}_{\mathrm{p_c}}(|\mathrm{C}_0| = \mathrm{n}) \propto \mathrm{n}^{-1-\frac{1}{\delta}} & (n \to \infty) \\
<\eta> & \tau_{p_c}(x) \propto |x|^{2-d-\eta} & (|x| \to \infty)
\end{array}
$$

- 臨界点 p_c では，クラスターのサイズはべき分布にしたがう．
- これらの臨界指数は，次の関係式を満たすと予想されている．

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

パーコレーションについて分かっていること

この件に関して，「数学」でも 2010 年 (神戸大・樋口氏)，2020 年・2023 年 (北大・坂井氏) に総合報告が掲載されている．

- $\sup\{p \in [0,1] | \theta(p) = 0\} = \sup\{p \in [0,1] | \chi(p) < \infty\}$
- 無限に繋がるクラスターは 1 つしかない．
- $0 < p < p_c$ のとき，$f(p), \theta(p), \chi(p), E_p(|C_0|)$ は解析的．
- $f(p)$ は，$p \in (0,1)$ について C^1 級である．
- $\chi(p)$ は $p = p_c$ で連続である．
- $\theta(p)$ は $p \neq p_c$ で連続である．($d = 2$ では $p = p_c$ で連続)．
- $d = 2, d > 6$ のときは，$\theta(p_c) = 0$ である．
- 臨界指数に関しては，次のことが一般論で証明されている．
  - $\gamma < \infty$ ならば，$\alpha \geqq 0, 2 + \alpha \leqq \gamma$
  - $\theta(p_c) = 0, 0 \leqq \delta < \infty$ ならば，$\alpha \leqq 0$
  - $\beta \leqq 1, \delta \geqq 2, \nu \geqq 2/d, \beta(\delta - 1) \geqq 1, \ldots$
  - $d \geqq 2$ で，η, ρ, ν, γ が存在すれば，
    $d - 2 + \eta \geqq 2\rho, (d - 2\rho)\nu \geqq \gamma$

さいごに

- 相転移・臨界現象は，物理学の重要課題として研究が進められている．
- 統計物理学・繰り込み群・平均場近似・イジングモデル・・・
- パーコレーションは，確率論の分野における相転移の数学モデル．
  この研究で，2006 年，2010 年，2022 年はフィールズ賞受賞．

【 参考文献】

- 西森秀稔：相転移・臨界現象の統計物理学，培風館，2005 年
- 田崎晴明・原隆：相転移と臨界現象の数理，共立出版，2015 年
- 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)
- 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
- 樋口保成：Percolation の臨界現象，数学，Vo.40，1988
- 田崎晴明：Percolation の臨界現象と物理，数学，Vo.40，1988
- 樋口保成：パーコレーション理論講義，臨時別冊・数理科学 107，サイエンス社，2014
- 坂口哲：パーコレーションの数理 2020，数学，Vo.74，2020

終わり

[参考] 数ナビの部屋　https://yunavi.lsv.jp/

グラフ電卓絡みで開設した Web サイトであるが，いろいろなページで構成される．

- グラフ電卓：活用事例 (数学・工学)・操作マニュアル等
- 数学関係：TeX，emath，MePoTeX，gnuplot，Maxima，R
- 高専関係：「高専教育」諸論考・学業意識の推移・高専リンク
- リンク集：数学学習・べき分布・学習総合・悩みごと等

下記は，「べき分布」に関するリンク集のメニューである．

■「ベキ分布」：関連リンク集　[Map]

はじめに(概説)	「ベキ分布」の解説	「ベキ分布」の具体例
「ベキ分布」と自然現象	「ベキ分布」と生物現象	「ベキ分布」と社会現象
「ベキ分布」と経済現象	「ベキ分布」とネットワーク	「ベキ分布」のメカニズム
相転移・臨界現象	パーコレーション(浸透現象)	複雑系・フラクタル
自己組織化臨界現象	シミュレーション	参考文献