

4次元超立方格子におけるパーコレーション問題の

シミュレーションと厳密解

—正方形を分布する場合—

Simulation for Percolation Problem in 4-dimensional Hypercubic and An Exact Solution

—Distribution of Parquettes—

宮島佐介

Sasuke Miyazima

キーワード：パーコレーション 臨界濃度 相転移 臨界現象 厳密解

アブストラクト

パーコレーション問題は統計物理学の諸問題の中でも最もシンプルな模型であるが、数学的に厳密な解は2次元模型の一部に限られているのが現状である。ここでは、初めてそれを超える模型として4次元超立方格子に正方形を分布するパーコレーション問題があり、臨界値が $p = 0.5$ と予想されているが、これをシミュレーションによって分析、確認する。4次元超立方格子に正方形を分布すると、正方形のある濃度(臨界濃度)で系全体に渡る4次元中の平面が構成される。我々はこの相転移に関する臨界現象を数値的に分析した。

1. はじめに

臨界現象は物理学においても最も重要な分野の一つであるとともに、他の分野にも大きな寄与をしている。臨界値を求めるだけに留まらず、臨界値の周囲の関数形についての知見を深めている。例えば、標準的な2次元イジング模型において、臨界値 $\exp(J/kT_c) = 1 + \sqrt{2}$ だけでなく(J は交換相互作用 k はボルツマン因子、 T_c は臨界温度である)、比熱が対数的な発散($\log|T - T_c|$)をすること、帯磁率が1.75の冪で発散($(T - T_c)^{-1.75}$)すること、磁化が0.125で0に近づくこと($(T - T_c)^{0.125}$)などが得られ、さらに、これら冪の数

値が格子の形状に依存しないで、相当の範囲で不変量であることが得られている。この冪の数値はイジング模型、格子気体の模型、合金の模型等と同じであり、模型の次元が変わるとか、磁性体の場合、スピンの大きさが変わるとかの大きな変化が生じなければ、変わらないという普遍性(ユニバーサリティ)があつて、大変重要な概念も提供している。このイジング模型(後述)は、模型の簡単さに拘わらず奥は深く、広範囲の問題に適用され、かつ実験とも乖離しない適宜な結論を導いている。特に2次元で磁場がない場合のイジング模型は、数学的に厳密な解もあり、実験・理論

にわたっての標準の役目を果たしている。中でも、前述の冪の数値に関しては、あらゆる近似解で得られる冪は誤りであることを指摘し、その重要性は高く評価されている。例えば、比熱の対数発散に関しては、それまでの理論（平均場近似はもちろん、それを超えるどんな近似）で推測できなかっただけでなく、実験でもこの対数発散を予見することは、対数発散が冪+0であることを考えると至難であると思われる。

このように、厳密解の存在は、大変重要であることは理解できるが、それには数学的な限界がある。現に、厳密に解ける模型の数は細かい目に勘定しても、10 指を必要としない。以下に、その幾つか（統計物理学、物性論関連では）を挙げてみる。

1. イジング模型（外部磁場なし、2 次元）[1]
2. 8-vertex 模型（誘電体の模型、2 次元）[2]
3. 1 次元 Heisenberg model 模型の基底状態（1 次元）[3]
4. ボーズ・アインシュタイン凝縮の理論（特に次元に依存しない）[4]
5. パーコレーション模型（浸透問題、2 次元）[5]
-

などが主なものである。ここに、これらの模型の概略を述べる。さらなる詳細については参考文献を参照せよ。

1：イジング模型は強磁性に関する模型で、正方格子の格子点に置かれた原子のもつ磁気モーメントを上向きと下向きのスピンのみで近似したもので、最近接の2つのスピンは平行であれば低いエネルギーを、2つのスピンが反平行であれば高いエネルギーの状態を取るとする。すると、ある定まった臨界温度を境にして、低温では強磁性状態に、高温では常磁性状態となる。このモデルは1925年、レントンとイジング[6],[7]によって提案され、2次元で外部磁場のない場合が1944年オンサ

ーガーによって数学的に厳密な解が与えられた[8]。

2：誘電体または氷の水素の秩序無秩序転移の模型であり、より簡単なケースとして 6-vertex model がある。Bethe 仮説の方法を用いて数学的に厳密に解くことができる。最近では、16 vertex model も議論されている[2]。

3：1 次元の磁性体のモデルであるが、イジング模型のように古典的ではなく、2つのスピン間には量子論的な相互作用を導入している。このモデルも Bethe 仮説の方法を用いて数学的に厳密に解かれている[3]。

4：ボーズ・アインシュタイン粒子（粒子は1つの量子状態にいくつでも入り得る）の統計の問題で、ボーズ・アインシュタイン粒子の分布関数が

$$f(\epsilon) = \frac{1}{\exp\{(\epsilon - \mu)/kT\} - 1}$$

で与えられることに起因している。ここで、 ϵ は粒子のエネルギー、 μ は化学ポテンシャル、 k はボルツマン因子、 T は温度である。3 次元の理想ボーズ粒子の場合

$$T_c = \frac{h^2}{2\pi m k} \left(\frac{N}{2.612 V} \right)^{2/3}$$

を堺にして急激に最低エネルギー状態を占める粒子数 $N_0(T)$ が増え

$$N_0(T) = N \left\{ 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right\}$$

と表される[4]。ここで、 N は全体の粒子数、 h はプランク定数、 m は粒子の質量、 V は全体積である。最低エネルギー状態を占める粒子は互いにコヒーレントな状態になり、超流動を示すようになる。

5：本論文の課題とするところであるが、元々、高分子の議論から発生し[9]、その後数学者にも興味を持たれた[10]。まず、2次元正方格子上でのサイト問題を考える[5]。隣接した格子点を粒子が占有したとき、2粒子は結合したものと見做しボン

ドで連結する。さらに、粒子を付け加えていき、この手順で隣接する粒子を結合させていくと、いずれかの粒子濃度で ($p = p_c$) 無限に大きなクラスターができる (図 1 参照)。

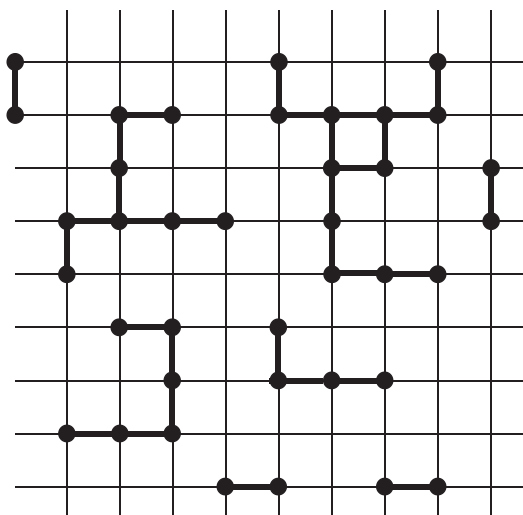


図 1 2次元ボンドパーコレーション問題

黒点は粒子（原子または分子）を表す。最隣接点にある粒子は結合する。ボンドは結合したことを表す。

一方、ボンド問題では、初めから結合ボンドを付け加えていく。前述のサイト問題と同様に、あるボンド濃度 ($p = p_c$) で無限に大きなクラスターが生じる。

さて、4 のボーズ・アインシュタイン凝縮の理論を除き（統計性が原因であり、元々粒子間には相互作用を必要としていない。この点から、この相転移は少し異質である）、すべて、厳密解が存在するモデルは2次元モデルに限定され、現実の物質が存在する空間である3次元モデルの解が要望される場所であるが、困難を極めている。5の問題は1の問題と共通する点も多々あり、かつ、1のように温度を導入する必要のないモデルで、一見簡単そうに見えるが、やはり、今まで、2次元モデルしか厳密解は得られていない[11]-[14]。

ここに、本著者はこのパーコレーション問題に

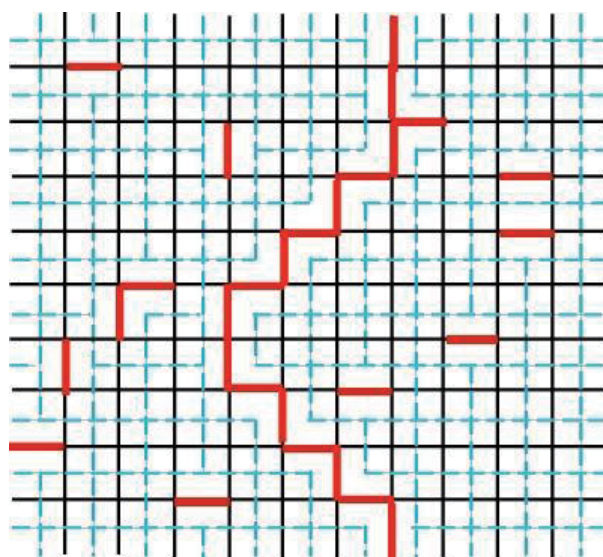


図 2 2次元ボンドパーコレーション問題

実線は正方格子を、破線はその裏格子を表し、再び正方格子であることが大切である。太い線で表されたボンドがもとの正方格子に埋め込められると、それに直交する裏格子のボンドは取り去るというプロセスを繰り返す。

において、3次元を超える4次元モデルにおいて厳密解を見出している。さらに、すべての偶数次元のモデルにおいても同様の手法で厳密解を得ることを示した。本研究は、その結論をサポートする、4次元の超立方格子で正方形を埋め込む問題をシミュレーションを用いて追試することを目的としている。

2. 2次元正方格子および4次元超立方格子におけるパーコレーション問題の臨界値

まず、パーコレーション問題には、サイト問題とボンド問題がある。ここでは、話を2次元に限る。サイト問題とは外部から粒子（原子あるいは分子）を格子点に1つずつ付着していく（図1）。格子点を粒子が占有するとき、最近接格子点の2つに粒子が存在すれば、その2つの粒子は結合し、クラスターを構成する。通常、結合を表す線を描く。このような手順で、粒子濃度を増やしていく

とき、クラスターが成長し、クラスター数が増え、サイズも大きくなっていく。実際のシミュレーションでは、有限の格子しか準備できないが、いくつかの大きさの異なる格子を用意して、無限に大きな格子の性質を推定する。大きく成長したクラスターが系の端から他の端に達するとき、パーコレートしたと言い、臨界点に達したことを意味する。粒子間の結合が電気伝導性をもたらすと考えると、臨界点を超えると、マクロなスケールで絶縁体から伝導体に相転移をすることと同じである。その相転移の前後での粒子濃度に対する、クラスターサイズ、有限クラスターの数などの量に興味を持たれている。

一方、ボンド問題のパーコレーションは、格子点に粒子を挿入するのではなく、はじめから結合を意味するボンドを挿入する(図2)。この2つの模型は同じようなものであるが、サイト問題では、初期のしばらくの間、結合を表すボンドはできない。ボンド問題では、初期から結合に有効なボンドが増えていく。これが影響して、サイト問題での臨界値は 0.5927… (厳密解はない) であるが、ボンド問題でのそれは 0.5 であり、かつ、厳密である。最終段階では、周囲の状況により、サイト問題では1つの粒子の挿入により、一挙に、3つ、4つのボンドが形成される場合もあるが、ボンド問題では、最後まで、1つの結合が形成されるのみである。この時期の成長の度合いについては、ほとんど興味は持たれていない。ここで、他の種々の格子に対する臨界値を掲げておこう。一般的に、一つの粒子に隣接する粒子の数が増加すれば臨界値は減少することがわかる。また、サイト問題の臨界値よりも、ボンド問題における臨界値の方が小さい。ここで、ボンド問題における正方格子とサイト問題における三角格子の臨界値は厳密な値である。

表1 種々の格子に対する臨界値

格子の種類	サイト問題	ボンド問題
蜂の巣格子	0.6962	0.6527
正方格子	0.5927	0.5
三角格子	0.5	0.3473
ダイヤモンド格子	0.428	0.388
単純立方格子	0.3117	0.2492
体心立方格子	0.245	0.1785
面心立方格子	0.198	0.119

さて、ここで、臨界指数についても少々議論を付け加えておこう。主な臨界指数は α 、 β 、 γ で、それぞれ、クラスターの数のシンギュラーな項 M 、1つの格子点が有限サイズのクラスターに属する確率 P 、平均のクラスターサイズ S の $(p - p_c)$ のべきであるが、これが、格子の詳細に依存せず、次元にのみ依存する事とか、指数の間には、例えば、一つだけ例を挙げると、

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

を満たされる (パーコレーション問題以外の広い模型でも) ことがわかっている。表2に示すと、

表2 臨界指数 (格子の種類には関係しない)

指数	$d = 2$	$d = 3$
α	-2/3	-0.6
β	5/36	0.4
γ	43/18	1.8

さて、4次元超立方格子状でのパーコレーションの場合にも、同様に、サイト問題およびボンド問題がある。しかし、ここでは、さらに、正方形なる単位を挿入していく問題や立方体も挿入単位と考えられる。定性的には、2次元正方格子と同じであるが、4次元立方格子に正方形の単位を挿入していく問題では、正確な臨界値を得られることになる。この点に関しては、2次元の厳密解の後で議論する。

さて、ここから、2次元正方格子にボンドを挿入していく問題を議論しよう。まず、裏格子を導入する。裏格子とは、元の正方格子（裏格子に対応して、表格子と呼ばれる）の中央に点を取り、それを結んでできる正方格子であり、表の正方格子と瓜二つのものである。従って、表格子があるボンドの濃度で相転移を生じるならば、裏格子もその濃度で相転移を生じることになる。

初めに、裏格子はすべてのボンドが占有されているとする。表格子の任意のボンド、例えば、ボンド $(i,j)-(i,j+1)$ が占有されたとしよう（ここ

では、 y 方向のボンドを考えたが、一般性は失わない）。図で見れば容易に分かるように、このボンドには直交する裏格子のボンド $(i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2})-(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2})$ が存在する。ここで、表格子に1つのボンドを挿入したとき、それに直交する裏格子のボンドを外すことにする。このとき、ボンドの総数（表格子、裏格子合わせて）は、常に $2N$ である。ただし、 N は表格子の格子点の数である。各格子のボンドの濃度を、それぞれ、 p 及び p' とすると、 $p+p'=1$ が常に成り立

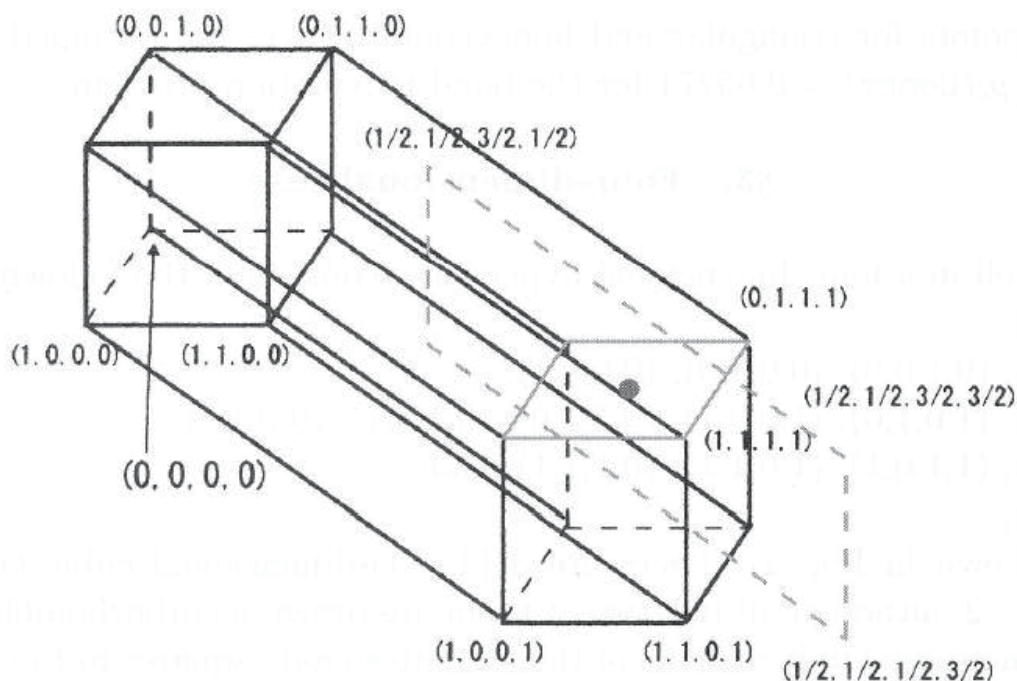


図3 4次元超立方格子の1つのセルの1表現 3次元のサイコロを4番目の軸の方向に引っ張ったもので、長方形に見えるものも本来正方形である。点の周りの正方形と破線で表された正方形(長方形に見えているが)は互いに裏格子の関係にある。

っている。

もし、表格子が $p = p_c$ で相転移を生じるとすると、表格子も裏格子も全く同じものであるから裏格子も $p' = p_c$ で相転移を起こすはずである。これを上式に代入すると、 $p_c = 1/2$ が得られる。こ

の証明は簡易版であるが、さらに、厳密な証明も可能である。

さて、これと同様のことを4次元超立方格子で行うことができるかどうか考えよう。ただし、4

次元超立方格子にはボンドではなく正方形を挿入していくことを考える。まず、初めに、裏の4次元超立方格子を定義する。表の4次元超立方格子の任意の格子点は (i, j, k, l) と4文字で指定される。このとき、正方形は

$$(i, j, k, l) - (i + 1, j, k, l) \\ - (i, j + 1, k, l) - (i + 1, j + 1, k, l)$$

と4つの格子点で指定される。ここで、正方形は xy 面にとった。これに直交する裏格子の正方形は

$$\left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}\right) \\ - \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}\right) \\ - \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k - \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}\right) \\ - \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}\right)$$

である。これらの中心（重心）は共に $(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k, l)$ にあり、前者の正方形は xy 方向に、後者の正方形は z, ξ 方向にとったので、互いに直交する正方形であり、かつ、一般性は失われない。4次元超立方格子の格子点の数を N とすると、4次元超立方格子の中には $6N$ 個の正方形が存在する。再び、2次元の場合と同じように、裏格子をはじめ全ての正方形の面は埋め尽くされているとする。まず、初めに、表格子の一つの面がランダムに選ばれ正方形で埋められるとき、上の方法で決められる裏格子の正方形が取り除かれるとする。1対1でこの操作を行うので、総正方形の数は一定である。表格子と裏格子の正方形の濃度を、それぞれ、 p 及び p' とすると、 $p + p' = 1$ が常に成り立つ。表格子と裏格子の4次元超立方格子は、全く同じ格子であり、一方が $p = p_c$ で相転移を生じるとすると、他方も $p' = p_c$ で相転

移を起こすはずである。再び、 $p_c = 0.5$ が得られる。

以上の2つのケースから、6次元超立方格子にサイコロ状の立方体を埋め込む問題でも、同じく、 $p_c = 0.5$ と推察される。さらに、 $2n$ 次元の超立方格子に n 次元の立方体を埋め込む問題でも同じ結論が得られる。

こうすると、4次元以上では分子場近似が厳密解となるということとの兼ね合いを考えなければならぬが、これからの問題である。取り敢えず、4次元超立方格子の臨界値が厳密に得られたが、これをシミュレーションで再確認することが本研究の目的である。

3. 4次元超立方格子において正方形を埋めるパーコレーション問題の臨界値のシミュレーションによる解法

4次元超立方格子の任意の位置に正方形を埋める際に、必要な情報は正方形の位置（正方形の代表点と呼ぶ）としては、常に、4格子点のそれぞれの成分で一番小さな数字を用いる。つまり、正方形の代表点を (i, j, k, l) とする（初めの3つは x 軸、 y 軸、 z 軸に、4つ目は第4次元で ξ 軸と記す）と、他の点は $(i + \alpha, j + \beta, k + \gamma, l + \delta)$ と表せる。ただし、 $\alpha \geq 0, \beta \geq 0, \gamma \geq 0, \delta \geq 0$ である。ただし、周期境界条件を課しているので、 $i + \alpha, j + \beta, k + \gamma, l + \delta$ が i, j, k, l より小さくなることはある。このようにすれば、重要なコーナーの位置と平面の方向を6種類 ($xy, xz, x\xi, yz, y\xi, z\xi$) の中から1つ選べば、正方形を特定することができる。

- ① 4次元超立方格子上に希望の濃度の正方形を分布させる。
- ② 各正方形のボンドをサイトとどの方向か (x, y, z, ξ のうちの一つの方向) へと変換する。

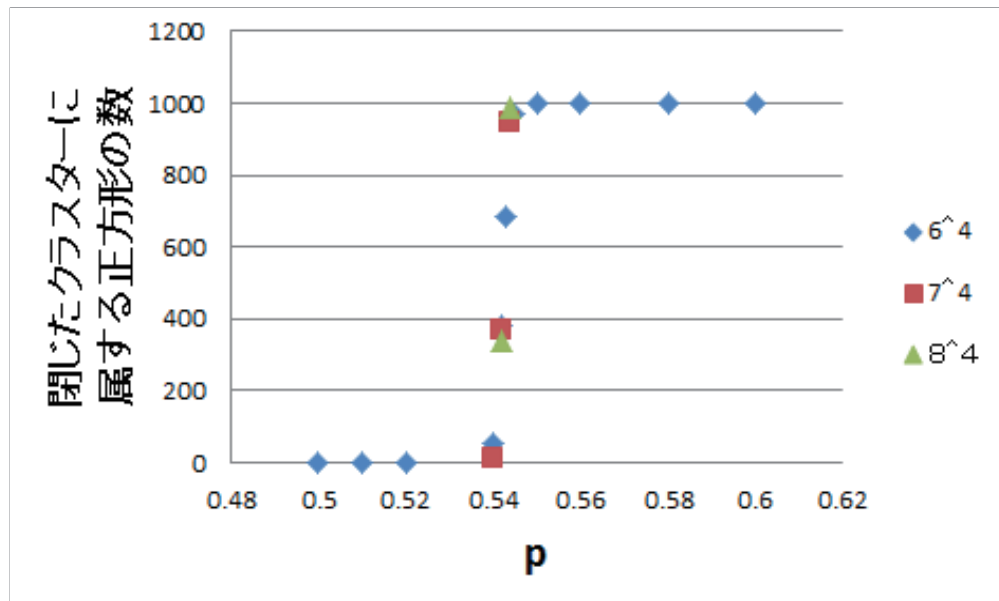


図4 閉じたクラスターに属する正方形の数

1000回の試行のうち、 6^4 , 7^4 , 8^4 の超立方格子それぞれに対して、閉じた構造体を作るのかにかかわる正方形の数が、3888, 7203, 12288枚を超える回数（正方形総数の50%とした）をカウントした。ここで、記号ダイヤ、正方形、三角は1辺が6、7および8の超立方格子の場合である。

- ③ ボンドの集合に1度しか現れないボンドを持つ正方形（この正方形はどれにも接続していない辺を持っている、つまり、マクロな面には穴が空いていることを意味する）は消去する。
- ④ 正方形のグループ分けをする。小さなグループを削除する。
- ⑤ 残ったグループが端から端まで到達しているかどうかをチェックする。

まず第一に、③までの処理で残った正方形の数を調べる。格子は 6^4 であるが、正方形は全部で $6^4 \times 6$ 枚となる。このうち、隣の正方形、つまり、端になっている正方形は取り除き、すべての辺で必ず隣り合っている正方形からのみなるクラ

スターに属する正方形の数を調べる。ここで、境界条件は周期境界としている。

1000回の計算のうち、閉じた構造体を作るのかにかかわる正方形の数は、 6^4 , 7^4 , 8^4 の超立方格子それぞれに対して、閉じた正方形の数が総数の50%である3888, 7203, 12288以上の場合の数を図4に示した。 $P=0.55$ の近傍にシャープな変化がある。これはこの近傍に相転移点が存在することの証拠であると思われる。

そもそも、臨界確率とは初めて有限確率で無限に大きな2次元膜が生じる点である。シミュレーションでは、有限サイズでかつ有限回数の計算しか行うことはできないので、図4の立ち上がりの点が重要なポイントである。図4では、50%という判定を行っているが、その根拠は薄いので、今後議論を要するところである。

4. 結論

本論文では、4次元超立方体に正方形を分布するというパーコレーション問題において、 $p = 0.5$ が厳密に推定されていることをシミュレーションにより確認することであったが、未だ最終確認には至っていない。完全に閉じた構造体（すべての正方形は必ず隣接する正方形を有し）が多数生成されており、中には有限の大きさの4次元球のように、4次元中の空間全体に広がった平面ではないものも含まれている可能性も、完全に除去できていない。しかし、大部分が、空間全体に広がる平面に付随するものと思われる。そのことは図4

に見られるように、相転移と思われる急激な変化が見られていることから推定される。

また、表1に見られるように、2次元→3次元→4次元に移るとき、臨界値は小さくなる。これは、次元数とともに結合の数が増加することから理解できる。正方形を挿入する際、2次元では平面を作るためには全正方形が埋め尽くされなければならないので、臨界値は1である。3次元の値は、3次元正方格子の問題はボンド問題の裏格子の問題であるから、 $1 - 0.249 = 0.751$ であることを用いた。この表の縦方向の傾向から、0.5は受け入れることができる。

表1 2～4次元格子の臨界値

	サイト問題	ボンド問題	正方形を挿入
正方格子	0.593	0.5	1
単純立方格子	0.312	0.249	0.751
4次元超立方格子	0.197	0.16	0.5(本論文の議論するところ)

格子サイズの変化に伴う有限サイズの繰り込みを行うことにより、種々の指数を推定できるのであるが、4次元格子であるため、格子点数が急激に多くなり、それに比例して計算時間が多くなる。現在のところ、1辺が6、7および8が計算できているに過ぎない。さらに、本来は閉じた図形でも小さな(有限サイズ)構造体は除かなければなら

ない。この点は将来の問題である（シミュレーションではもともと有限サイズの計算しかできないが、端から他の端まで及ぶ構造体は、サイズが無限になったときには無限に大きな構造体を形成するものであるので、有限サイズの計算においては無限になったものとみなすことがある）。

参考文献

- [1] 西森秀稔、相転移・臨界現象の統計力学 培風館 2005.
- [2] R. Baxter, Phys. Rev. Letters **20** (1971), 832.
- [3] L. Hulthen, Ark. Mat. Astron. Fys. A **86**, (1938), 1.
- [4] A. Einstein, Sitzungsber. KGL. Preuss. Akd. Wiss., **1925**, (1925), 3.
- [5] 樋口保成、パーコレーションーちょっと変わった確率論入門、遊星社 1990.
- [6] E. Ising, Z. Phys. **31** (1925), 253.
- [7] H. A. Krammers and G. H. Wannier, Phys. Rev. **60** (1941), 252; Phys. Rev. **60** (1941), 263.
- [8] L. Onsager, Phys. Rev. **65** (1944), 117.
- [9] P.J. Flory, J. Am. Chem. Soc. **63** (1941), 3083; J. Am. Chem. Soc. **63** (1941), 3091; J. Am. Chem. Soc. **63** (1941), 3096.
- [10] S. R. Broadbent and J. M. Hammersley, Proc. Camb. Phil. Soc. **53** (1957), 629.
- [11] T. E. Harris, Proc. of Camb. Philo. Soc. **56** (1960), 13.
- [12] L. A. Russo, Zeits. fur Wahrs und Verwand. Geb. **43** (1978), 39.
- [13] P. D. Seymour and D. J. A. Welsh, Ann. Disc. Math **3** (1978), 227.
- [14] H. Kesten, Percolation theory for Mathematicians (Boston, Birkhauser, 1982).
- [15] S. Miyazima, Prog. Theor. Phys. Suppl. No. **157** (2005), 152.



宮島佐介
工学部 共通教育科
統計物理学
イジング模型
パーコレーションの諸問題