計算科学クラスター演習 フォローアップ 2016/07/25

パーコレーションの基礎とフラクタル

山崎研究室　55号館N棟302
藤本將太郎 (fuji101ijuf@fuji.waseda.jp)

Outline

- 実習内容の復習 (+ 実行例，課題の解答)
  - パーコレーション
  - パーコレーション確率
  - フラクタル次元
    - 課題1: 視野拡大法によってフラクタル次元を求める
  - 粗視化による繰り込み
    - 課題2: 粗視化の繰り込み変換の式を求め，固定点を導出する

実施概要

- PCルームの端末でLinux(CentOS)を使用
- ブラウザから，使用するスクリプト(Python)を各自ダウンロード
  - https://github.com/ssh0/SCS_yamlab2016
- モデルの説明とコードの実行を並行して行う
  - パーコレーション
  - フラクタル

パーコレーション

- 系全体につながった構造があるか?
- 具体 (着目している系):
  - 物質中の隙間を液体が浸透するか
  - 果樹園で胴枯れ病が伝染するかどうか
  - 絶縁体と導体の混合物が導電性を持つか
- 抽象 (普遍的性質): 「つながり」
- 関連する概念
  - 相転移, 臨界現象, フラクタル, 繰り込み

サイトパーコレーション

- 占有確率 p:
  - 格子点を占有させるかどうかを決める確率
- pが大
  - 端から端までつながったクラスターが存在
    - =パーコレーションクラスター
    - 最大クラスターサイズ≒システムサイズL
- pが小
  - パーコレーションクラスターが存在しない
- ちょうどパーコレーションクラスターが存在するようになる中間の値が存在 (=パーコレーション閾値)

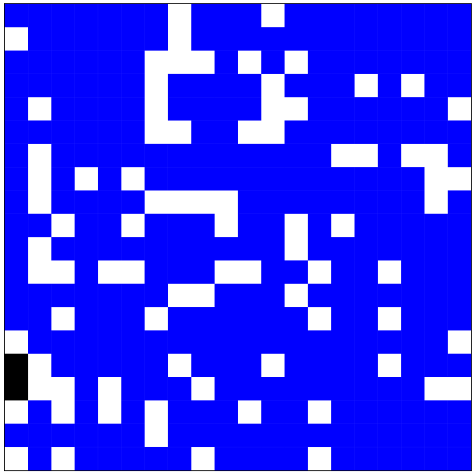


図1 (p=0.8, L=20)

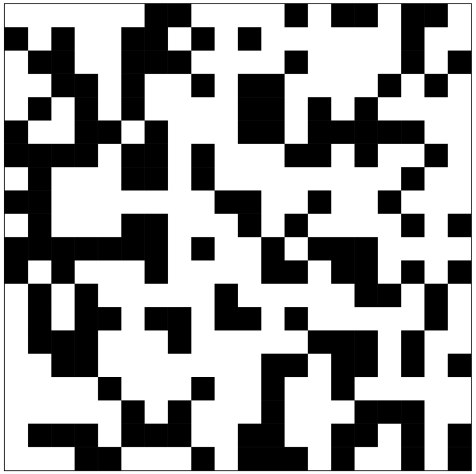


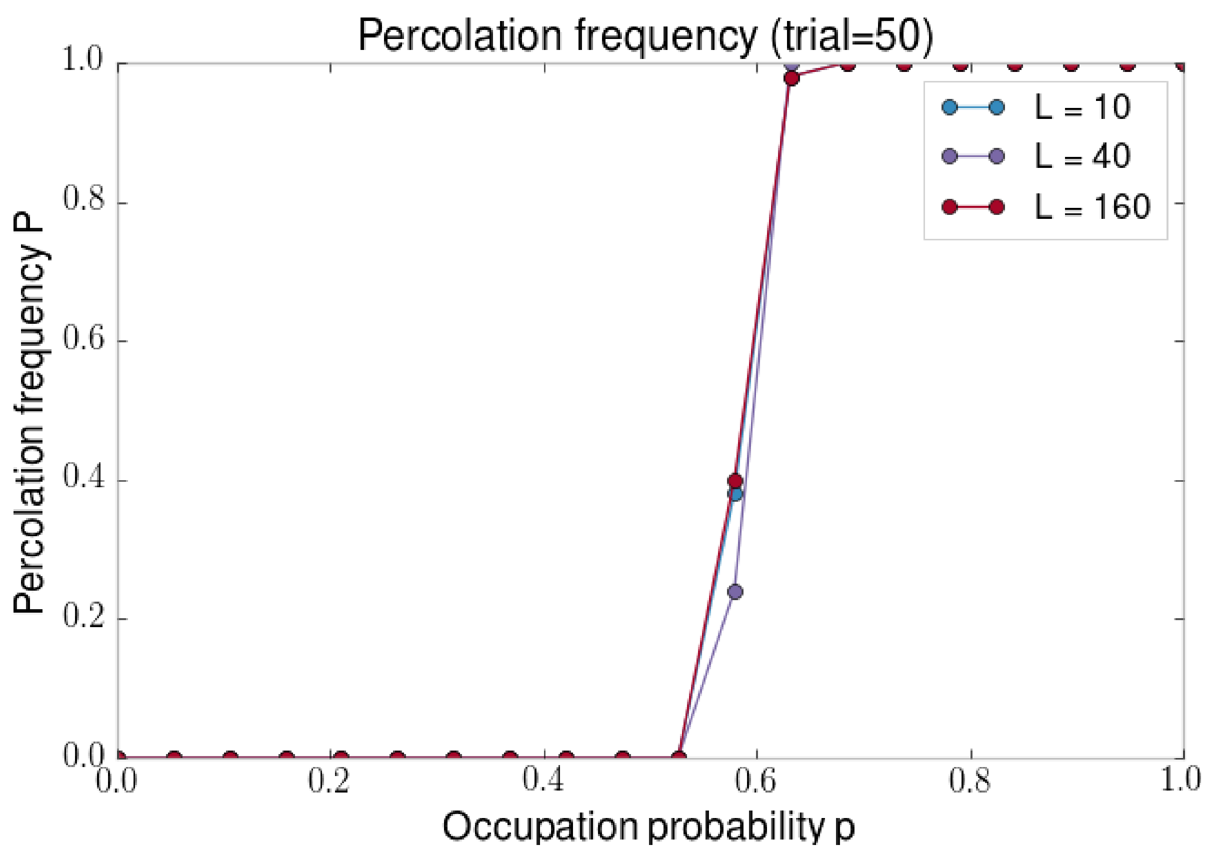
図2 (p=0.4, L=20)

サイトパーコレーション

- パーコレーション頻度P(p):

  = (パーコレートした回数)/(試行回数)

- `sim_percolation_frequency.py`



パーコレーション確率

- 最大クラスターサイズ$M(L)$:
  - L×L格子内で最大のクラスターに含まれる占有格子点の数
- 最大クラスターサイズ密度:
  - $P_N(p) = M(L)/L^2$
- パーコレーション確率$P_\infty(p)$:
  - $P_\infty(p) = \lim_{N\to\infty} P_N(p)$
  - Lの増大につれて曲線の立ち上がりがよりシャープに

パーコレーション閾値

- パーコレーション閾値 p_c:
  - P_∞=0となる最大の確率p
  - $p_c = \sup\{p \mid P_\infty(p) = 0\}$
- 連続的に変化するパラメータのある1点で定性的変化
  = 相転移

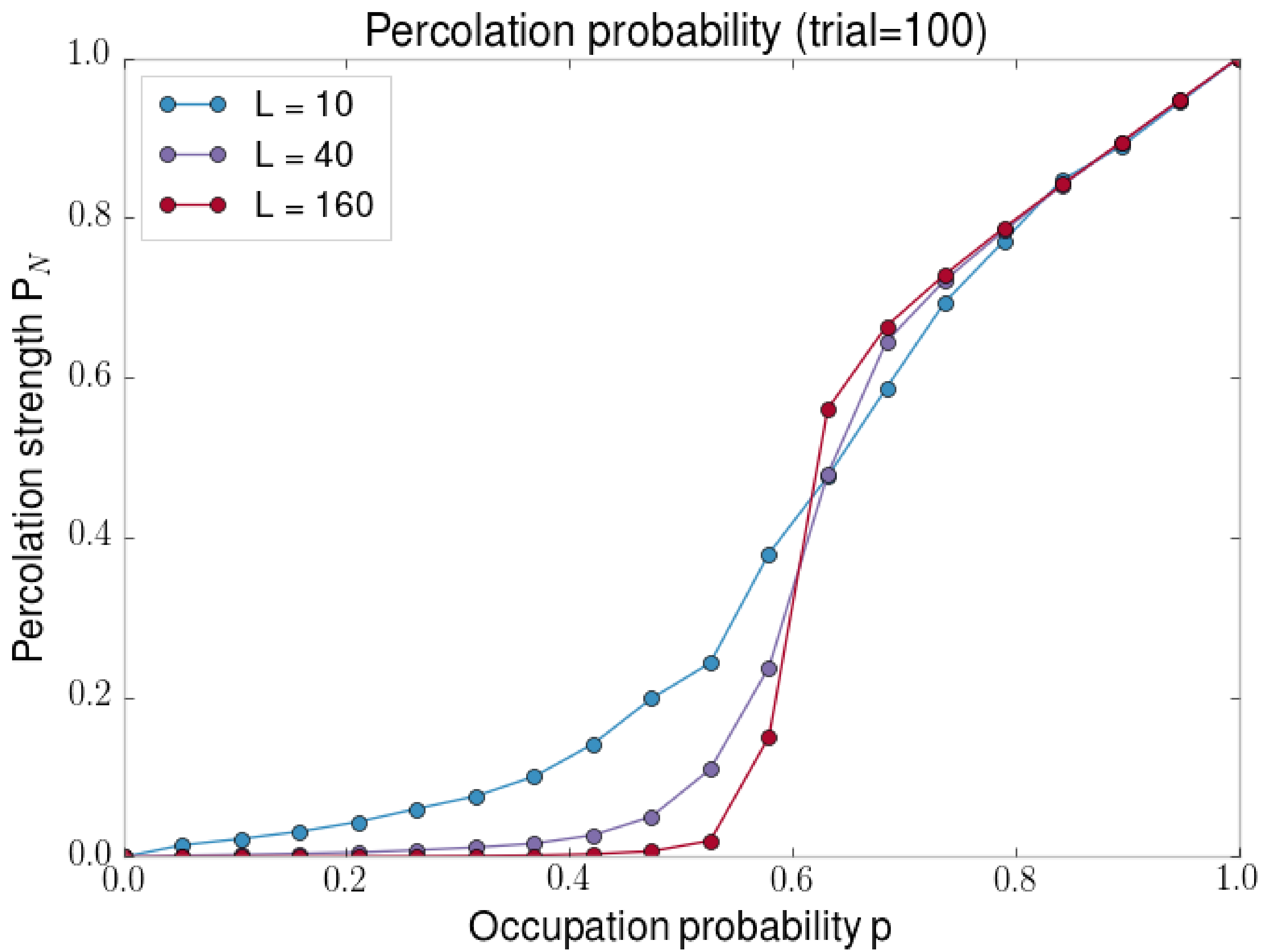
端から端まで連結したクラスターのない状態

↓

端から端まで連結したクラスターを持つ状態

パーコレーション確率

- sim_percolation_probability.py



フラクタルとフラクタル次元

- フラクタル (自己相似性)
  - 図形の全体と部分がスケール変換を通して相似
    - 数学: Cantor set, Koch curve, Sierpinski gasketなど
    - 自然界: 海岸線や雲の輪郭線，枝分かれした樹木の形，血管構造など
- フラクタル次元
  - その図形の構造を評価するための定量的な尺度
    - $M \propto R^D$ (質量次元)
    - 求め方にはいくつか方法がある
      - 視野拡大法, ボックスカウンティング法, 慣性半径法, 密度相関関数法

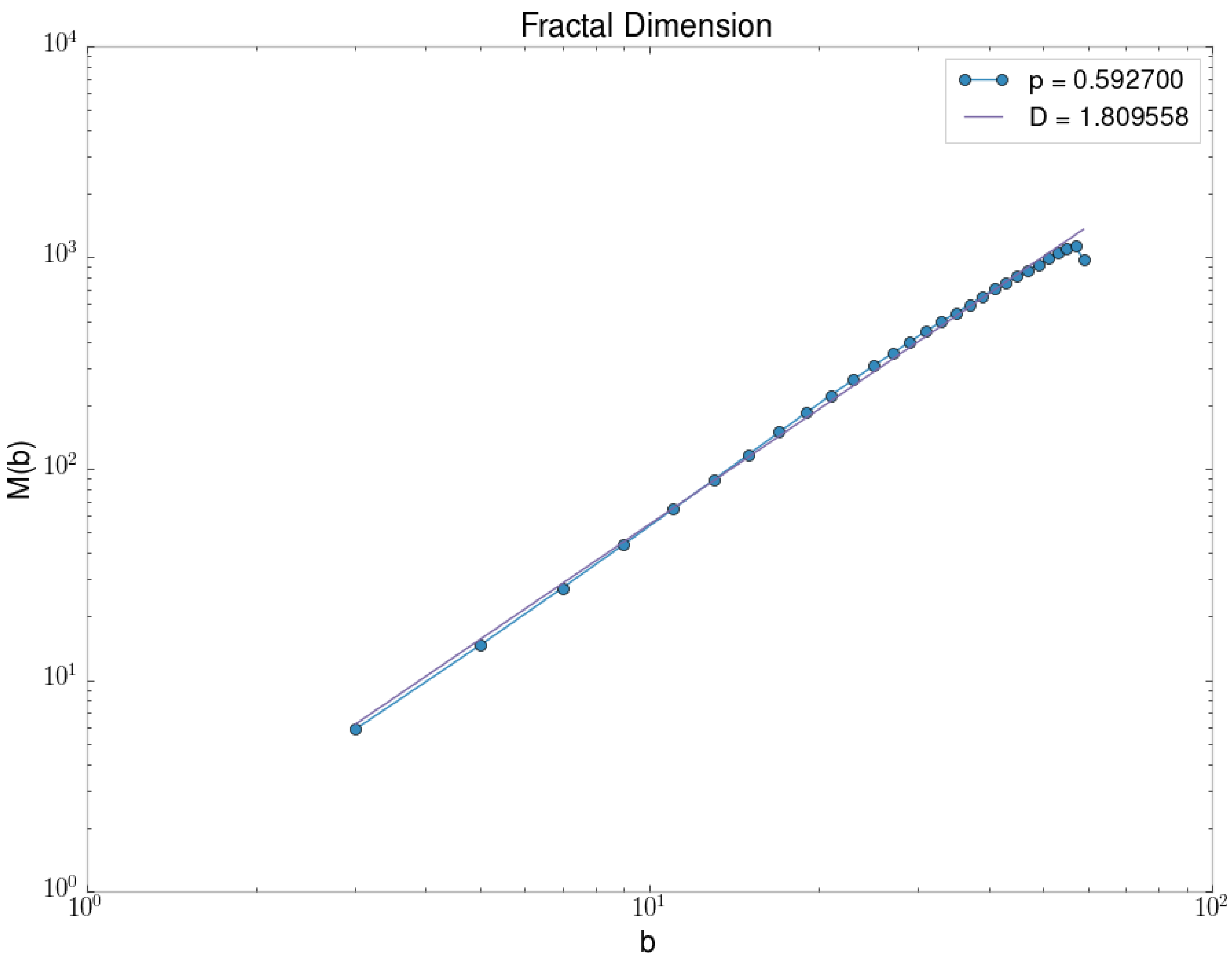
フラクタル次元の測定(視野拡大法)

- 最大クラスター内のある一点を中心とする一辺bの領域内に含まれる占有点数M(b)を数える

$$M(b) \propto b^D$$

- 横軸b，縦軸M(b)の両対数グラフを描く
- **(課題1)** 視野拡大法によって求められたデータを用いてフィッティングを行い，実際にフラクタル次元を求めてみよ。

フラクタル次元の測定(視野拡大法)



$$D \simeq 1.81$$

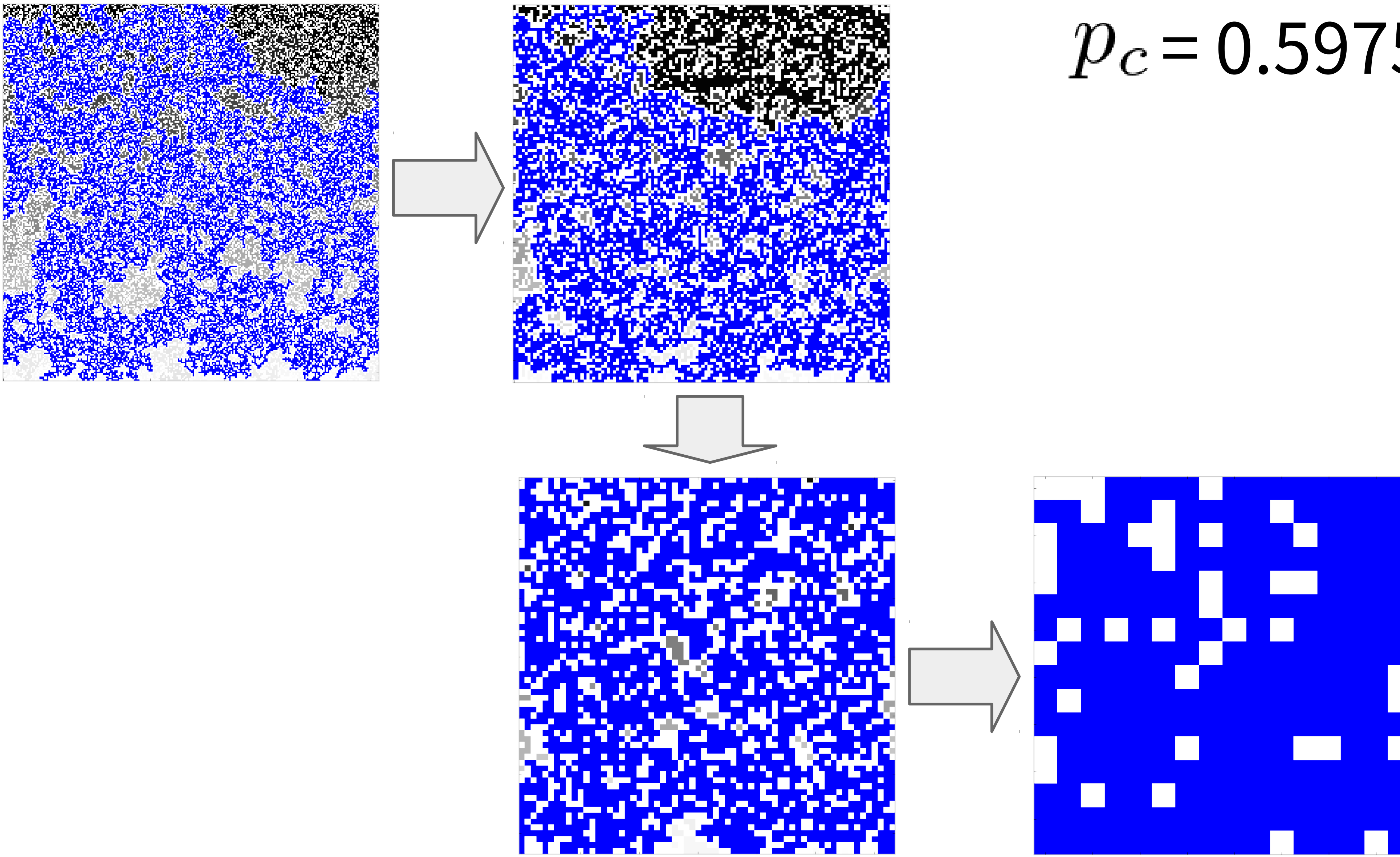
粗視化による繰り込み

- 粗視化
  - 粗く視る: 視るスケールによって見え方が異なる
- (今回の)ルール
  - 粗視化因子bの長さで区切られたブロックを一つの(繰り込まれた)格子点とみなす
  - 繰り込まれた格子点が占有されるかどうかは，ブロックの中でパーコレートしているかどうか

粗視化による繰り込み

- `sim_percolate_renormalize.py`

$$p_c = 0.5975$$



粗視化による繰り込み

- **(課題2)** 元の占有確率と粗視化後の占有確率の間の関係式は繰り込み変換の式(または漸化式)と呼ばれる。粗視化因子b=2のときのこの式を求めよ。

  またこの式から，繰り込み操作によって占有確率が変化しないような占有確率(固定点)を求めることができる。固定点のうち，非自明なものを求めよ。

粗視化による繰り込み【解答例】

$$p'(p) = p^4 + 4p^3(1-p) + 4p^2(1-p)^2$$
$$= p^2(p-2)^2$$

$$p_* = p'(p_*) = p_*^2(p_* - 2)^2$$
$$p_*(p_* - 1)(p_*^2 - 3p_* + 1) = 0$$
$$\therefore p_* = 0, 1, \frac{3 \pm \sqrt{5}}{2}$$

$$[\because p_* \in (0,1)]$$
$$p_* = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} \simeq 0.3820$$

Remark: p_c (= 0.5975) とは一致しない。

フラクタル次元の測定(繰り込み)

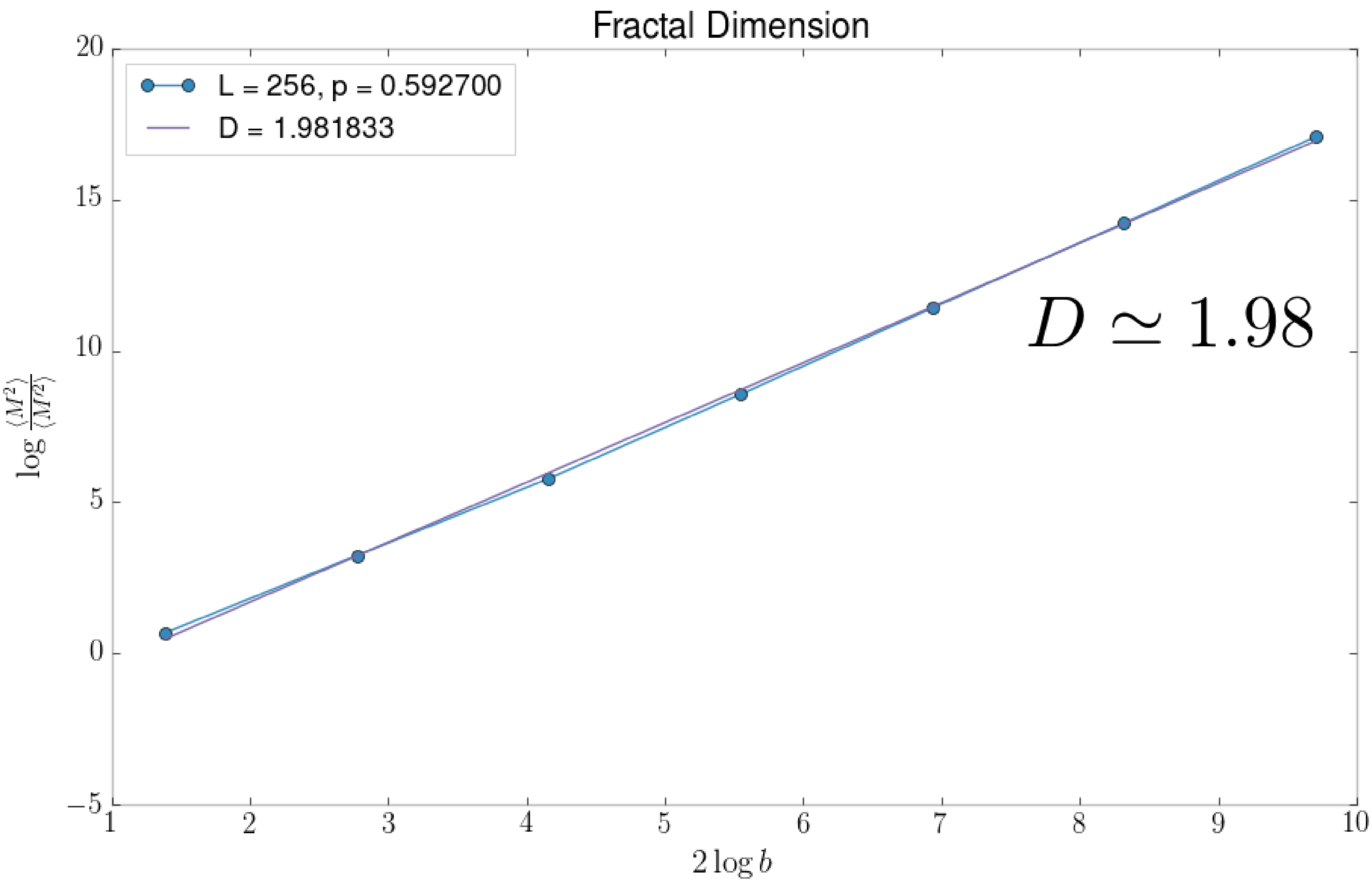
- もとの格子と，大きさ$L' = L/b$に繰り込まれた格子の両方で,$p = p_c$における端から端まで連結したクラスター内の占有された格子点の数Mの2乗を数えると，それぞれ

$$\langle M^2 \rangle \sim R^{2D} \qquad \langle M'^2 \rangle \sim \left(\frac{R}{b} \right)^{2D}$$

のような関係となる。よって

$$b^{2D} = \frac{\langle M^2 \rangle}{\langle M'^2 \rangle}$$

フラクタル次元の測定(繰り込み)



課題3(とその補足)

- **(課題3)** パーコレーション，もしくはフラクタルについて自分なりに調べてまとめよ。
  - 各自調査し，記述できていた。
  - (高野研) アロステリー(蛋白質のある部位Aの構造変化が空間的に離れた部位Bの構造変化を引き起こす現象)を理解するために，蛋白質内部の静電コンタクトネットワーク(ボンドパーコレーション)が(MDによって)調べられている。静電ネットワークが臨界点に近ければ，外力による応答のon-off調整を容易にできるため，蛋白質の機能調整に都合が良いと考えられる。[3]

参考文献

1. ハーベイ・ゴールド, ジャン・トボチニク 著, 鈴木増雄監訳, 計算物理学入門, ピアソン・エデュケーション, 第3版, 413-454, (2000).
2. Jens Feder, Fractals, Plenum Press, 104-117, (1988).
3. 大貫隼, 佐藤昂人, 高野光則, 蛋白質内部の静電ネットワークが繋ぐアロステリーと臨界パーコレーション, 日本物理学会講演概要集, **70**, 1, 3377, (2015).