スケーリング理論とはなにか?

–尺度を変えて見えること–

福島孝治

URL: http://maildbs.c.u-tokyo.ac.jp/~fukushima

mailto:hukusima@phys.c.u-tokyo.ac.jp

東京大学 大学院総合文化研究科 広域科学専攻 相関基礎科学系

DEX-SMI
特定領域研究「情報統計力学の深化と展開」
チュートリアル講演会@大手町サンケイプラザ
2006 年 12 月 17 日

DEX-SMI

Outline

- 尺度を変えること
- 力学編

スケーリング理論

- 最も基本的な考え方は,
  「スケール変換したときの観測量の変化に対する理論」.

$$r \to \alpha r \quad \Longrightarrow \quad S(r) \to S(\alpha r) = ?$$

- ある種の次元解析：
  - 円の面積の例：半径 r の円の面積 $S(r)$

$$S(r) = \pi r^2$$

  - スケール変換 $r \to \alpha r$：「半径を α 倍にしたら，面積は何倍ですか?」

$$S(\alpha r) = \pi(\alpha r)^2 = \alpha^2 S(r)$$

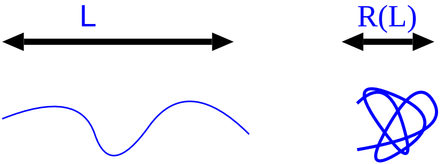
  - 指数 2 はスケール次元．重要な量.
  - 蛇足かな：

$$2 = \frac{d}{dr} \log S(r)\Big|_{r=1}$$

DEX-SMI

物理でのスケーリング理論

- $S(r)$ と r の間に成り立つ物理法則を導く.
  - 例えば，ドジャンの高分子に対するスケーリング理論
  - 長さ L の高分子がある溶媒の元で，$R(L)$ の大きさくらいに丸まった．$R(L)$ は?



  - 物理法則：$R(L) = R_0 L^{\phi}$
    - ϕ: スケール次元．これは高分子の種類に依存しない普遍的な量!
    - R_0：高分子の種類に依存するパラメータ.

ニュートン力学の例

- 質量 m の多粒子系の位置ベクトル $\boldsymbol{r} = \{r_1, r_2, \cdots, r_N\}$ 運動方程式：

$$m \frac{d^2}{dt^2} \boldsymbol{r}_i = -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_i} U(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N) \tag{1}$$

- ポテンシャル U は k 次の同次関数の性質を持つ.

$$U(a\boldsymbol{r}_1, a\boldsymbol{r}_2, \cdots, a\boldsymbol{r}_N) = a^k U(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N) \tag{2}$$

- スケール変換：

$$\boldsymbol{r}_i \to \boldsymbol{r}'_i = \alpha \boldsymbol{r}_i, \quad t \to t' = \beta t. \tag{3}$$

- スケール変換した運動方程式：

$$\frac{\beta^2}{\alpha} m \frac{d^2}{dt'^2} \boldsymbol{r}'_i = -\frac{1}{\alpha^{k-1}} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}'_i} U(\boldsymbol{r}'_1, \boldsymbol{r}'_2, \cdots, \boldsymbol{r}'_N) \tag{4}$$

スケール変換不変性が導くこと：

- 物理法則はスケール変換に対して，**不変である**とする．
- 例えば，一様重力のとき：$U(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N) = mg(z_1 + \cdots z_N)$
  - $k = 1 \Longrightarrow \beta^2/\alpha = 1$
  - $\alpha = 10$ とすると，$\beta = \sqrt{10}$ である???
  - 1M から物を落としたときの時間 T は，10M から落としたときには，$\sqrt{10}$ 倍になっている．
  - 逆に...

本当は *1M* から落としているのに，*10M* から落としたように見せたいときには

… **時間を $\sqrt{10}$ 倍ゆっくり動かせばよい!**

DEX-SMI

戦隊ヒーロー物のロボットはなぜ変に見えるのか?

- 日曜 7:30 より朝日テレビで放映中
- おおよそ 7：50 あたりで，**スケール変換**が起きる．
- 子供達には大絶賛!!
- どうみても**着ぐるみ**.
- 複数のポテンシャルに関係する運動が絡まってくると，

  仕方がないことだ

  とわかる．

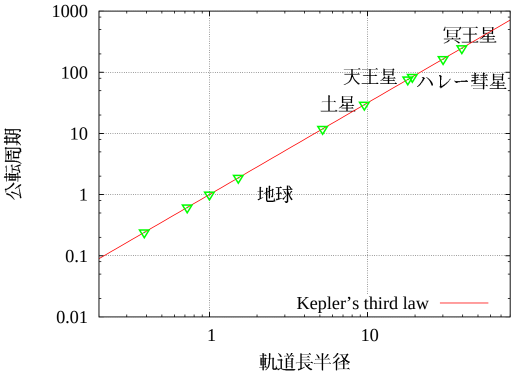
第三十代戦隊ヒーロー：ボーケンジャー

ケプラーの第三法則

周期と長径の 3/2 乗則

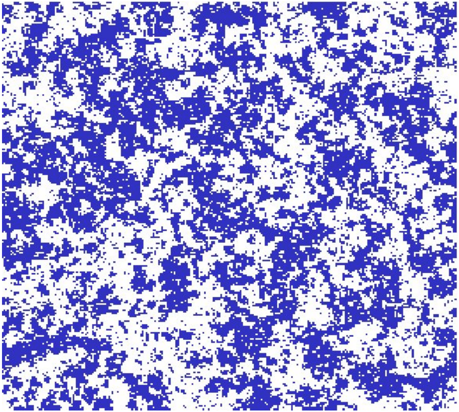
- 軌道長径を地球の r 倍にしたときに公転周期は何倍になる?
- $k = -1, \Longrightarrow \beta^2 = \alpha^3$

$$\frac{T'}{T} = \left(\frac{R'}{R}\right)^{3/2}$$

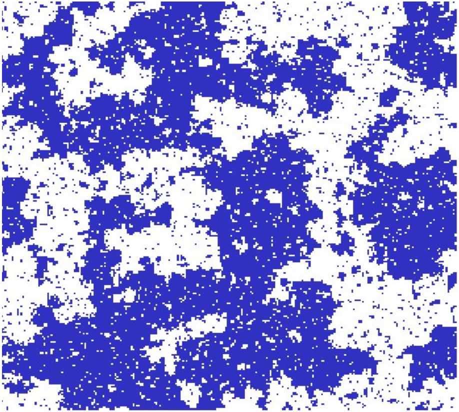


どのくらい大きくすればよいのか?–イジング模型の例–

スピン配位

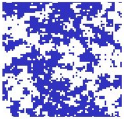


今度は?

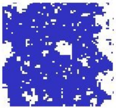


どのくらい大きくすればよいのか?(2)

小さい箱でも良かった例



小さい箱では悪かった例



調べるスケールとその問題にある空間スケール

- 後向きの理由：

  「ちょっと大きくして，結果が変わらなければよい.」

- 前向きな目標：

  「どこまで行けばいいのかを見付けたい.」

- 物理現象がある特徴的な長さのスケール ξ で決まっているならば，シミュレーションのスケール $L_{\rm sim}$ が

$$\xi \ll L_{\rm sim}$$

ならば大丈夫であろう.

絶対に越えられないスケール

- スケールフリーな問題
  - e.g. 力学の問題，乱流の問題...
  - そもそも特徴的なスケール (大きさ）が存在しない.
  - 大きなスケールの極限が知りたいというよりも，スケール則そのものが重要!
- 二次相転移の臨界点
  - 空間スケールを決める相関長が発散している．: $\xi_\infty(T_c) = \infty$.
  - 絶対に，$L_{\mathrm{sim}} > \xi_\infty(T_c)$ はありえない.
  - だけど，もちろん，そこが知りたいのである!
    あるいは，そこにどのように近付くかが知りたい.

ここでは二次相転移近傍の様子に注目して，議論することにする.

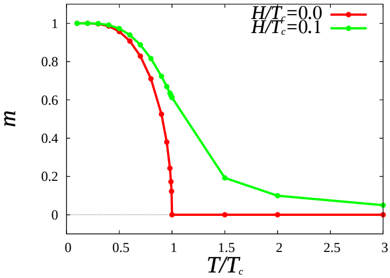
DEX-SMI

二次相転移のおさらい

- $T < T_c$ で秩序変数が有限.

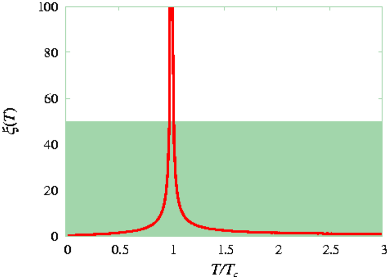
$$M \sim \left| \frac{T_c - T}{T_c} \right|^{\beta}$$

- 自発的対称性の破れ
  - 陽に対称性が破れていると相転移はない.



- ゆらぎのスケール，帯磁率が発散する.

$$\xi \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\nu}, \quad \chi \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\gamma}$$



DEX-SMI

測れる量と測れない量

- シミュレーションの最大の弱点は**有限系でしか行えないこと.**
- 有限系では相転移 (対称性の自発的な破れ) は**絶対に起こらない.**
  - ex. イジング模型：$H(\boldsymbol{S}) = -J\sum_{ij} S_i S_j = H(-\boldsymbol{S})$

$$
\begin{aligned}
M &\equiv \frac{1}{N}\left\langle \sum_i S_i \right\rangle = \sum_{\{S_i=\pm 1\}} \frac{1}{N}\left(\sum_i S_i\right)\frac{\exp(-\beta H(\boldsymbol{S}))}{Z} \\
-M &= \sum_{\{S_i=\pm 1\}} \frac{1}{N}\left(\sum_i S_i\right)\frac{\exp(-\beta H(-\boldsymbol{S}))}{Z}
\end{aligned}
$$

$\Longrightarrow$ いつでも $\langle \frac{1}{N}\sum_i S_i\rangle = 0$, サイト磁化 $\langle S_i\rangle$ はもっと難しい.

- 相転移現象を議論したければ,
  - 何か別の量で
  - 系のサイズが大きい**極限**を考えなければならない.

DEX-SMI

ここからの目的: 有限系から無限大の世界へ

- 与えられた有限サイズ L とパラメータ T での観測量 $A(L,T)$ から,
  1. $L \to \infty$ の量 $A(\infty, T)$ を求めたい!
  2. 特異性を特徴づける量 (臨界温度, 臨界指数) を求めたい!
  3. 逆に, $L \to \infty$ を知っていて, 有限サイズ補正を知りたい. (平均場近似で $L \to \infty$ がわかったけど, 本当は有限の L での性質が知りたい).

INPUT：有限系の世界

$A(L,T)$ for $1, 10, 10^2,$

解析的，相転移無し．

階層のカベ $\Longrightarrow$

OUTPUT：無限大の世界

$A(\infty, T)$ and/or $T_c, \nu, ..$

特異性，相転移

- 素朴な外挿ではダメなのか? e.g.

$$A(L,T) = A(\infty, T) + \frac{a_1}{L^{b_1}} + \frac{a_2}{L^{b_2}} + \cdots$$

  - 外挿公式は一般にはわからない.
  - 無限大の系はどのくらい遠いのか?

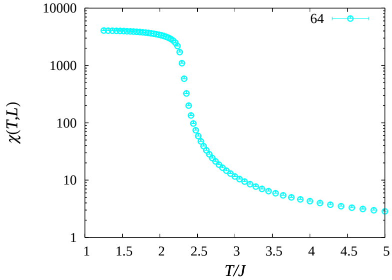
DEX-SMI

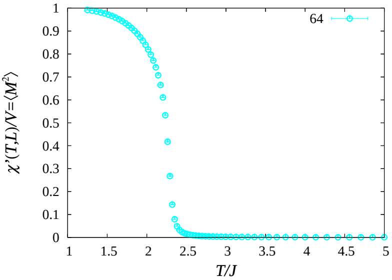
例:有限サイズの世界 — 二次元イジングモデル—

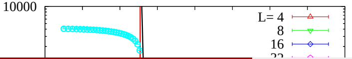
秩序変数そのものではなくて，ゆらぎを見る．

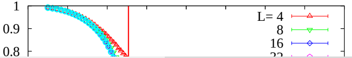
$$\chi(L,T) = \frac{1}{N}\sum_{ij}\left(\langle S_i S_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle\right) = \sum_r \langle S_0 S_r\rangle, \quad m^{(2)}(L,T) = \frac{\chi(L,T)}{N}$$

帯磁率 χ と二乗磁化 $M^{(2)}$: $L = 64 \Longrightarrow N = 4096$ $L = 4, 8, 16, 32, 64$









有限サイズスケーリング理論の参考文献

- 「自分はやったことないけど，そのうちにできるんだよねー」
  by my 師匠
- M. N. Baber, in *Phase transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz, vol. **8** (Academic Press), 1983.
- D.J.Amit, V.Martín-Mayor, *Field Theory; The Renormalization Group and Critical Phenomena*. 3rd Edition
- 後は原論文にあたるかな...
- 日本語の解説書で良いものはほとんどない.

有限サイズスケーリング仮説

- 無限系への距離を決めているのは，系の相関スケール $\xi_\infty(T)$：
  $\boxed{L/\xi_\infty(T)\ \text{が大事な量になっている．}}$
  - $L/\xi_\infty(T) \gg 1$: 熱力学極限に近い
  - $L/\xi_\infty(T) \ll 1$: 本質的に有限系．箱の大きさ L で物事が決まっている．
- **有限サイズスケーリング仮説**：
  L/ξ が同じならば，後はスケール因子でだけで物事はわかる．

$$A(L,T) \simeq L^{\phi_A} \tilde{A}\left(\frac{L}{\xi_\infty(T)}\right)$$

.

  - $\xi_\infty(T)$ と ϕ_A が分れば，有限サイズの $A(L,T)$ は普遍関数で表される．

$$\frac{A(L,T)}{L^{\phi_A}} \simeq \tilde{A}\left(\frac{L}{\xi_\infty(T)}\right)$$

  - パラメータ T を固定した元での外挿**フィッティング**と**スケーリング**の違い．

DEX-SMI

有限サイズスケーリング：使える形へ

- 「臨界温度や臨界指数が分れば良い」とする． **「目的その 2 前面派」**
- 第一の方法：期待される熱力学極限の性質を仮定する．
  - 相関長： $\xi_\infty(T) \sim \left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-\nu}$ for $T \sim T_c$ 　　特異性の導入

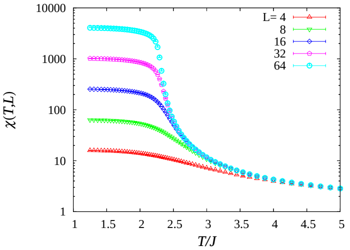
$$
\begin{aligned}
A(L,T) &\sim L^{\phi_A}\tilde{A}\left(L/\left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-\nu}\right) \\
&= \left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-\phi_A\nu}\left(L/\left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-\nu}\right)^{\phi_A}\tilde{A}\left(L/\left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-\nu}\right)
\end{aligned}
$$

- For $A=\chi$(susceptibility), $\chi_\infty(T) \sim \left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-\gamma}$ for $T \sim T_c$
- $\boxed{\phi_A = \gamma/\nu}$. $\Longrightarrow$ **3 つの未知変数 $T_c, \nu, \gamma/\nu$ を決めればよい．**
- スケーリング関数：$\tilde{A}_\chi(x) \sim x^{-\phi_A}$ for large x.

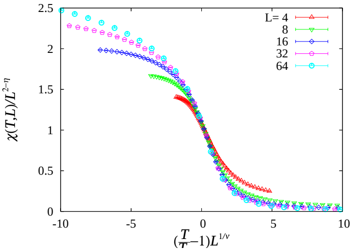
DEX-SMI

Finite-Size Scaling ： Example for 2D Ising model

Raw data: befor scaling



FSS plot: $\frac{\chi}{L^{2-\eta}}$ vs $(T - T_c)L^{1/\nu}$



- disconnected susceptibility : $\chi(L, T) = \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle S_i S_j \rangle$
- When correlation length reaches size L, this susceptibility gets a constant.

- choose T_c, γ/ν and ν so as to get a universal function.
- A deviation from the universal function is attributed to the correction to scaling ...

DEX-SMI

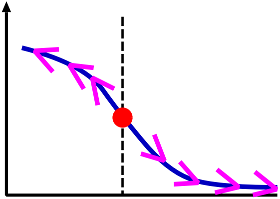
もう少し詳しくみると...

- 解析関数から特異性を出すには...
  1. $T = T_c$:

$$\chi(L, T_c) = L^{\gamma/\nu}\tilde{\chi}(0) \to \infty \text{ for } L \to \infty$$

  2. $T > T_c$:

$$\frac{\chi(L,T)}{L^{\gamma/\nu}} \simeq \tilde{\chi}\left(L/\left|\frac{T-T_c}{T_c}\right|^{-\nu}\right) \to \tilde{\chi}(\infty) = 0$$



さらに,

$$\tilde{\chi}(x) \simeq x^{-\gamma/\nu} \text{ for } x \gg 1 (L \to \infty),$$

$$\Longrightarrow \chi(L,T) \simeq L^{\gamma/\nu}\left(L/\frac{|T-T_c}{T_c}\right)^{-\gamma/\nu}\tilde{\tilde{\chi}}(\infty)$$

DEX-SMI

スケーリング補正

- ずれているところはどうするか?
  - 理由は，スケーリング仮説からの補正項の存在.
  - $\xi_\infty(T)$ がベキ関数で表せるのは，$T \sim T_c$ だけ.

$$\xi_\infty(T) \simeq C_\chi \left(\frac{T-T_c}{T_c}\right)^{-\nu} \left(1 + C_1 \left(\frac{T-T_c}{T_c}\right)^{\omega} + \cdots\right)$$

- どう考えるのか?
  - 対応は難しい．気にしない???補正項なのだから，L を大きくすれば見えないはず.

$$\frac{\chi(L,T)}{L^{\gamma/\nu}} \simeq F_0\left(\frac{L}{((T-T_c)/T_c)^{-\nu}}\right) + L^{-\omega} F_1\left(\frac{L}{((T-T_c)/T_c)^{-\nu}}\right) + \cdots$$

  - 補正項がないと思い込んで，頑張ると失敗することはある.
  - できるだけ補正が小さくなるように考える... 後で少しだけ.

DEX-SMI

有限サイズスケーリング： Binder parameter

- 未知パラメータは 2 つに減らせる．
- Binder parameter: (Phys. Rev. Lett. **47** (1981) 693.)

$$U(L,T) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} = \tilde{U}\left(L / \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\nu} \right)$$

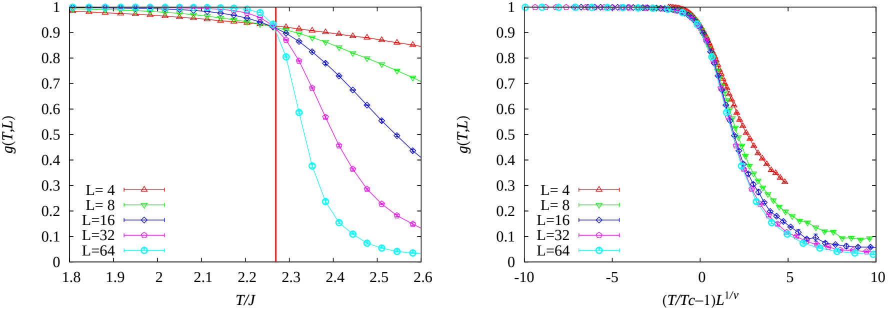
これを使えば，サイズ依存性がない温度を転移温度の評価ができる．

- この性質を持つポイントは次元がないこと：$\phi_A = 0$ なる A を探す．
  - 他にも次元が無い量はある．
    - 有限サイズ相関長：ξ_L / L
    - 自由エネルギー差：$\Delta F(L,T)/T$
    - いろいろ

DEX-SMI

Binder parameter の例

2D Ising model: $U(L,T) vs \left|\frac{T-T_c}{T_c}\right| L^{1/\nu}$



- 転移温度もほぼ分るので，未知パラメータは ν だけ.
- 大げさに言えば，無限系の性質を見ることが出来ている.

DEX-SMI

有限サイズの相関長 $\xi(L, T)$

- 「$\xi_\infty(T)$ は事前にはわからない!」
- 有限系の相関長 $\xi(L, T)$ で置き換えられるか? $A = \xi$ **としてみる.**

$$
\begin{aligned}
\xi(L, T) &\simeq L^{\phi_\xi} F\left(\frac{L}{\xi_\infty(T)}\right) = \xi_\infty^{\phi_\xi}\left(\frac{L}{\xi_\infty}\right)^{\phi_\xi} F\left(\frac{L}{\xi_\infty(T)}\right) \\
&= \xi_\infty^{\phi_\xi}\tilde{F}\left(\frac{L}{\xi_\infty(T)}\right) = |T - T_c|^{-\phi_\xi \nu}\tilde{F}\left(\frac{L}{\xi_\infty(T)}\right)
\end{aligned}
$$

- $L \to \infty$ で自分自身に戻る条件から, $\phi_\xi = 1$ かつ $\tilde{F}(\infty) =$ 定数. さらに,

$$
\frac{\xi(L, T)}{L} \simeq \tilde{F}\left(\frac{L}{\xi_\infty(T)}\right) \Longrightarrow \frac{\xi_\infty(T)}{L} \simeq \tilde{\tilde{F}}\left(\frac{L}{\xi(L, T)}\right)
$$

- だから, 無限系の ξ_∞/L は有限系の $\xi(L, T)/L$ で置き換えても良い
- $\xi(L, T)$ は観測量である!

DEX-SMI

有限サイズスケーリング・プロット 2

- もうちょっと FSS 仮説に近付くことはできる.

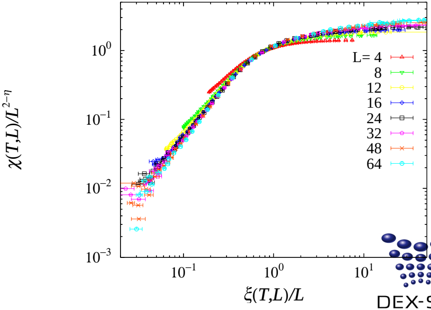
$$A(L,T) \simeq L^{\phi_A} \tilde{A}\left(\frac{\xi(L,T)}{L}\right)$$

結果として，未知パラメータ T_c と ν は消えた.

- 帯磁率の例 $\Longrightarrow$

$$\frac{\chi(L,T)}{L^{\gamma/\nu}} \simeq \tilde{A}\left(\frac{\xi(L,T)}{L}\right)$$

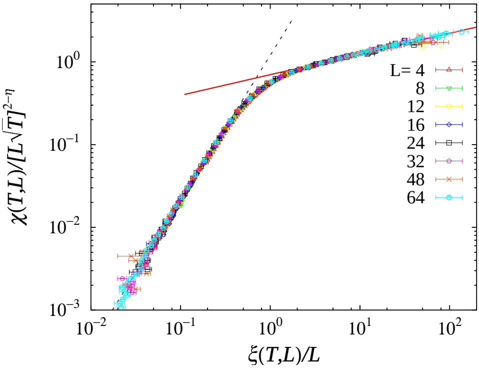
- INPUT: $\chi(L,T), \xi(L,T)$
- OUTPUT: $\gamma \Longleftarrow$ 特異性の指数



補足：ごく最近の話

- Campbell-Hukushima-Takayama: Phys.Rev.Lett.**97**, 117202 (2006).
  - 補正項の中でも，よく考えると取り除くことができる部分がある．
  - 高温での性質を決めている自明な温度依存は繰り込んでおくべし．

$$\xi \simeq \frac{\sqrt{\beta}}{(1-T_c/T)^{-\nu}} \quad \Longrightarrow \quad \chi(L,T) \sim \frac{L}{\sqrt{\beta}}^{\gamma/\nu} F_\chi\left(\frac{\xi(L,T)}{L}\right)$$



有限サイズスケーリングから外挿する方法

- $A(L,T)$ から $A(\infty,T)$ は外挿できるか?
  - 正論：シミュレーションの大きさと同程度やそれ以上の相関長が評価できるはずがない. **見えないものはわからない!**
  - 邪道?：しかし，スケーリング則を信じるならば，その範囲でどこまでいけるか?
- 有限サイズ・スケーリングによる外挿 (?) ：
  J-K.Kim(1994), S.Caracciolo et al(1995).
  - 一般の物理量 $A(L,T)$ のスケーリング則：

$$A(L,T) = A(\infty,T) f_A\left(\frac{L}{\xi(L,T)}\right)$$

  - 相関長 $\xi(L,T)$ のスケーリング則：

$$\xi(L,T) = \xi_\infty(T) f_\xi\left(\frac{L}{\xi(L,T)}\right)$$

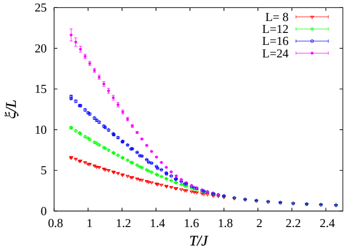
DEX-SMI

相関長を外挿する (1) by Kim の方法

- 具体的な手続き：

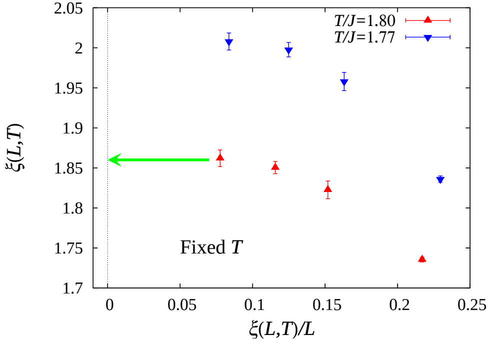
$$\frac{\xi(L,T)}{\xi_\infty(T)} = f_\xi\left(\frac{\xi(L,T)}{L}\right)$$

Step0: 生データ



スピングラスの例

Step1: $\xi(L,T)$ vs $\xi(L,T)/L$

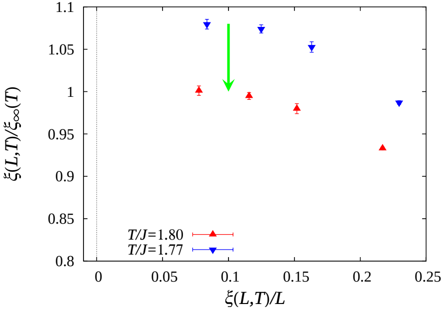


$\xi(L,T)$ vs $\xi(L,T)/L$ プロット.
ある高温の相関長データを L 無限大へ外挿.

これは簡単!

相関長を外挿する (2)

Step2: $\frac{\xi(L,T)}{\xi(\infty,T)}$ vs $\xi(L,T)/L$



Step1 の外挿値で y 軸をスケールし，他の温度も y 軸を平行移動して先のデータにそろえる (スケーリング)

- 後はそれぞれの温度 T に対して $\xi_\infty(T)$ を決めて，このスケーリング関数にドンドンのせていく．

すべての温度・サイズの $A(L,T)$

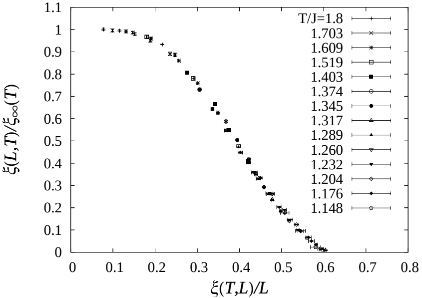
$\Downarrow$

OUTPUT:$A(\infty,T)$

- これは外挿か?内挿か?

相関長を外挿する (3):結果

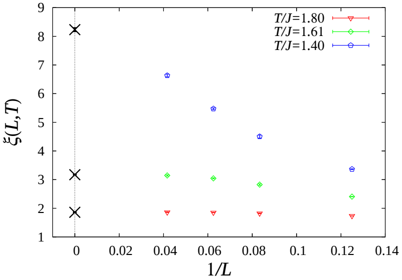
全ての温度の Scaling Plot



- $L/\xi \gg 1$: 十分熱力学極限
- $L/\xi \sim O(1)$: そうでない.

これを徐々に繋いでいる!

いくつかの温度のデータの外挿プロット

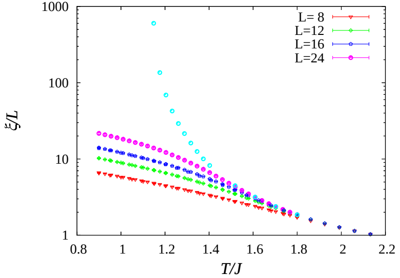


$1/L$ の外挿公式を使ったわけではないのに，外挿できているような気がする.

DEX-SMI

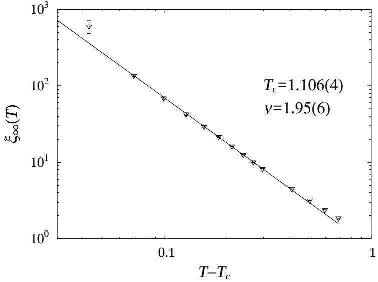
相関長を外挿する (4):結果

生データと外挿した $\xi_\infty(T)$ を温度の関数としてプロット



これは信じることができるか?

臨界現象の解析



- $\xi_\infty \sim (T - T_c)^{-\nu}$
  - $T_c \simeq 1.1$
  - $\nu \simeq 1.95$

- 同様な解析は他の物理量でもできる

DEX-SMI

もう一つの FSS：Carraciolo et al, PRL(1995)

- 一気に無限大の世界を見ようと言うのは虫が良すぎる?
- 謙虚に徐々に行こうよ.

$$\xi(L,T) = \xi_\infty(T) f_\xi\left(\frac{L}{\xi(L,T)}\right), \qquad \xi(2L,T) = \xi_\infty(T) f_\xi\left(\frac{2L}{\xi(2L,T)}\right),$$

$$\downarrow$$

$$\frac{\xi(L,T)}{\xi(2L,T)} = \frac{f_\xi\left(\frac{L}{\xi(L,T)}\right)}{f_\xi\left(\frac{2L}{\xi(2L,T)}\right)} = \tilde{f}_\xi\left(\frac{L}{\xi(L,T)}\right)$$

同様に，他の物理量も，

$$\frac{A(L,T)}{A(2L,T)} = \tilde{A}\left(\frac{L}{\xi(L,T)}\right)$$

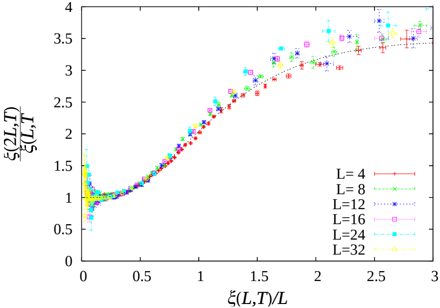
- これを使う.

パラメータフリー!!

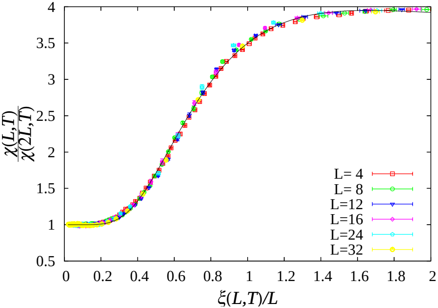
DEX-SMI

徐々に外挿する方法：

相関長 $\xi(L,T)$



帯磁率 $\chi(L,T)$



- $(L \Rightarrow 2L)$ **のルール**は全てこのスケール関数に書かれている．

$$\begin{matrix}\xi(L,T)\\ \chi(L,T)\end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix}\xi(2L,T)\\ \chi(2L,T)\end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix}\xi(4L,T)\\ \chi(4L,T)\end{matrix} \Rightarrow \cdots \begin{matrix}\xi(\infty,T)\\ \chi(\infty,T)\end{matrix}$$

- OUTPUT:$\xi_\infty(T), \chi(\infty,T)$.

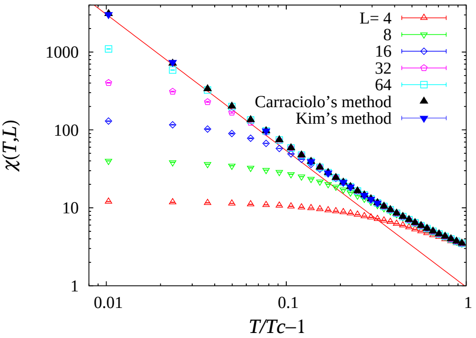
DEX-SMI

外挿した結果

- 「**目的その１前面派**」：
  知りたいのは $\xi(\infty, T)$
  - Kim's method と Carraciolo's method はほぼ一致.
- 臨界パラメータはその後で. T_c や γ はフィティング.

二次元イジング模型の帯磁率

$\chi(T)$ vs $T/T_c - 1$



まとめ

- スケーリング理論を概観した．
  - スケールを二倍にしたときに，物事はどのように見えるのか?
- 統計力学での熱力学極限への接近法としての，有限サイズスケーリング法
  - 下の階層 (有限系) から一つ上の階層 (無限系) を目指そう．
  - 第一の方法： 特異性を表すパラメータだけを求めたい．
  - 第二の方法： 熱力学極限が求めたい．
  - 第三の方法： 徐々に大きくして，熱力学極限を求める．
- 議論すべき問題
  - correction-to-scaling： ずれるのはよいのか?
  - scaling variables ： **何を**スケール変換するか?
- 大事なメッセージ
  - 特徴的な (空間) スケールは何か?

DEX-SMI