

線形システム結合系の非線形性に対する 微細構造の影響

八軒和輝

March 5, 2024

摘要

結晶性固体の合金系において、結晶構造・組成・原子配置のみに依存する相関関数 q_i とエネルギー相互作用パラメータ V_i を用いることで系のポテンシャルエネルギーを表すことが可能である。この相関関数と多体相互作用の対応は熱平衡状態における構造決定の温度依存性を一般化した情報をもち、我々が外部から操作可能なパラメータの変化に対する物性変化の非線形性の理解において中心となる役割を果たす。熱平衡状態の相関関数 Q_i は相互作用パラメータにカノニカル平均を用いることで求められ、この V_i から Q_i への写像としてカノニカル平均は一般に複雑な非線形を示す。先行研究では、構成可能な系におけるこの非線形性の解析を行うために、異なる LS を結合した線形システム結合系（CLS）という数理モデルが解析の対象として提案された。この CLS を用いた先行研究は、相関関数と状態関数が連続分布であるという前提のもとで行われてきた。しかし、実際には、原子の位置的な拘束の影響などにより値が離散的になる領域が存在し、厳密な連続分布とは言い難い。このような CLS における連続分布と現実系の分布のズレは、非線形性の解析において重要な影響をもたらすと示唆される。本研究では、CLS に微細構造を加えることでより現実系に近い分布を再現することで、配位数変化に対する非線形性の変化に及ぼす影響を解明することを目的とした。

目次

1 背景	5
1.1 写像とみなしたカノニカル平均	5
1.2 CLS の提案	6
1.3 CLS を用いた計算手法とその結果 (ASDF)	6
1.4 CLS を用いた計算手法とその結果 (DMD)	10
1.5 CLS における問題点	12
2 計算手法	13
2.1 微細構造の附加位置	13
2.2 微細構造の強度	13
3 結果・考察	14
3.1 基底状態付近への微細構造の附加	14
3.1.1 微細構造強度: 1.0×10^{-40} での非線形性の振る舞い	15
3.1.2 微細構造強度: 1.0×10^{-35} での非線形性の振る舞い	18
3.1.3 微細構造強度: 1.0×10^{-30} での非線形性の振る舞い	22
3.2 中間的規則状態付近への微細構造の附加	26
3.2.1 微細構造強度: 1.0×10^{-35} での非線形性の振る舞い	26
3.2.2 微細構造強度: 1.0×10^{-20} での非線形性の振る舞い	29
3.2.3 微細構造強度: 1.0×10^{-15} での非線形性の振る舞い	31
4 まとめ	35
4.1 基底状態付近への微細構造の附加	37
4.1.1 微細構造強度: 1.0×10^{-40}	37
4.1.2 微細構造強度: 1.0×10^{-35}	39
4.1.3 微細構造強度: 1.0×10^{-30}	40
4.2 中間的規則状態付近への微細構造の附加	42
4.2.1 微細構造強度: 1.0×10^{-35}	42
4.2.2 微細構造強度: 1.0×10^{-20}	44
4.2.3 微細構造強度: 1.0×10^{-15}	46

1 背景

1.1 写像とみなしたカノニカル平均

一般的の合金系において、クラスター i に対して相互作用の組 \mathbf{U} と相関関数の組 \mathbf{Q} を以下のように行列として設定する。

$$\mathbf{U} = (V_1, V_2, \dots, V_f) \quad (1)$$

$$\mathbf{Q} = (Q_1, Q_2, \dots, Q_f) \quad (2)$$

この \mathbf{U} - \mathbf{Q} の対応関係は、温度依存性の一般化において重要な働きをする。ある原子配置 d での系のポテンシャルエネルギー $E(d)$ が以下のようにクラスター展開できることから、式 (1) における V_i は、以下のように定義される。

$$E(d) = \sum_{i=1}^f V_i q_i(d) \quad (3)$$

$$V_i = \langle E(d) | q_i(d) \rangle \quad (4)$$

ただし、相関関数 $q_i(d)$ は、自由度 f の無次元量であり、クラスター i に対して -1 から 1 までの値をとる。また、 V_i は $q_i(d)$ に対して一つずつ定まる、エネルギーの次元を持つ物理量である。

また、式 (2) における熱平衡状態での相関関数 Q_r はカノニカル平均より以下のように定義される。

$$Q_r = Z^{-1} \sum_d q_r(d) \exp(-\beta \sum_{i=1}^f V_i q_i(d)) \quad (5)$$

ただし、 Z は分配関数、 β は逆温度であり、 \sum_d は全ての原子配置についての和をとる。

さて、式 (1)(2) について、カノニカル平均を \mathbf{U} から \mathbf{Q} への写像 $\phi(\beta)$ とみなすことができる。しかし、一般に、この写像としてのカノニカル平均 $\phi(\beta) : \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{Q}$ は、非線形であることがわかっている。

$$\mathbf{Q} = \phi(\beta) \mathbf{U} \quad (6)$$

$$\mathbf{Q}' = \phi(\beta)(c\mathbf{Q}) \neq c\mathbf{Q} = c(\phi(\beta)\mathbf{U}) \quad (7)$$

本研究では、線型写像と比較することで、このカノニカル平均 $\phi(\beta)$ の非線形性の性質を解明するという目的が背景に存在する。

1.2 CLS の提案

線形システムを結合した系について非線形性を解析するにあたり、先行研究で提案された CLS (Coupled Linear System) を用いる。[2] CLS は、多次元ガウス分布（線形システムの CDOS にあたる）を結合した確率分布を CDOS に持つシンプルな数理モデルである。このモデルを導入する理由は、現実系の CDOS は具体的に計算することができないためである。

先述の先行研究では、平均と共に分散が零値で等しく、かつ、分散だけが異なる 2 つのガウス分布を混合パラメータ c_1 を用いて以下のように線形結合した（m 結合）対称 CLS を用いて解析が行われた。[2][6]

$$g_M = c_1 * g_1 + (1 - c_1) * g_2 \quad (8)$$

現実の非線形性は、LS と対称 CLS の情報で bound される [3] という意味でこの対称 CLS は重要である。

ここでは、計算条件は以下のように設定する。[6]

$$g_1 = 0.003 \quad (9)$$

$$g_2 = 0.010 \quad (10)$$

$$c_1 = 0.0 \sim 0.9 \quad (11)$$

この場合に、 c_1 を増大させるに伴い、配位数が増加するという対応関係がある。

1.3 CLS を用いた計算手法とその結果 (ASDF)

カノニカル平均の非線形性の解析方法として、構造自由度の非調和性 (ASDF) を導入する。

カノニカル平均 $\phi(\beta) : \mathbf{U} - \mathbf{Q}$ の非線形性を解析するために、カノニカル平均を以下のように線形部分 $\Gamma(\beta)$ と非線形部分 $g(\beta)$ に分ける。

$$\phi(\beta) = \Gamma(\beta) + g(\beta) \quad (12)$$

ただし、線型写像 $\Gamma(\beta):\mathbf{U} - \mathbf{Q}$ は、CDOS がガウス分布と一致すると仮定した場合のカノニカル平均であり、 $\Gamma(\beta)$ は原子配置分布の共分散行列を用いて定式化されており、結晶格子・原子数・組成から求められる。

このように表せられるのは、カノニカル平均の非線形性が相関関数の分布関数(CDOS) の多次元ガウス分布からのズレに起因しているからである。[4]

ASDF では、まず、ある構造 \mathbf{Q} を決め、カノニカル平均が線形であった場合の熱平衡状態での相関関数の集合を \mathbf{Q}_{lin} 、一般の熱平衡状態での相関関数の集合を $\mathbf{Q}_{\text{nonlin}}$ とする。

ここで、相関関数の集合 \mathbf{Q}_{lin} と $\mathbf{Q}_{\text{nonlin}}$ の関係性は、 \mathbf{Q}_{lin} を線型変換で多体相互作用を得た後、その相互作用でカノニカル平均をとったものが $\mathbf{Q}_{\text{nonlin}}$ である。このことを用いて、非線形性ベクトル ASDF を以下のように導入する。

$$\mathbf{A}(Q_1, Q_2, \dots, Q_f) = \mathbf{Q}_{\text{nonlin}} - \mathbf{Q}_{\text{lin}} \quad (13)$$

$$= (\phi(\beta) - \Gamma(\beta)) \mathbf{U} \quad (14)$$

$$= g(\beta) \cdot \Gamma^{-1}(\beta) \mathbf{Q}_{\text{lin}} \quad (15)$$

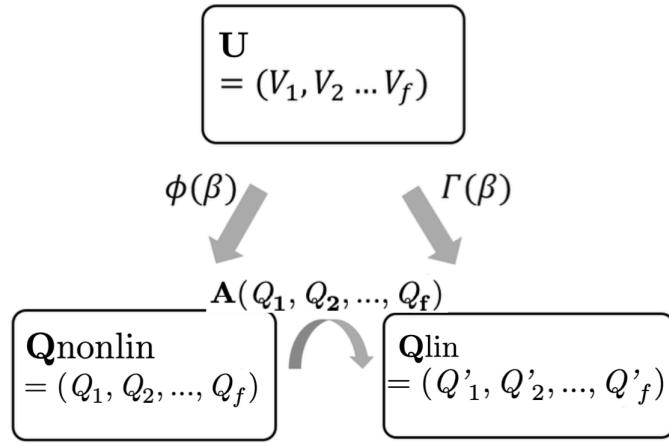


図 1: $\mathbf{U}, \mathbf{Q}_{\text{lin}}, \mathbf{Q}_{\text{nonlin}}$ の関係性

つまり、ASDF は、配位空間上のカノニカル分布の重心移動をベクトル場で示している。

また、非線形性ベクトル \mathbf{A} は CDOS の幾何学的構造と配置のみに依存し、温度や相互作用には依存しない。

そこで、 $g_1 = 0.003$, $g_2 = 0.010$ のもとで、 $c_1 = 0.0 \sim 0.9$ における ASDF の計算結果を配位空間上のベクトル場に図示すると以下のようになる。

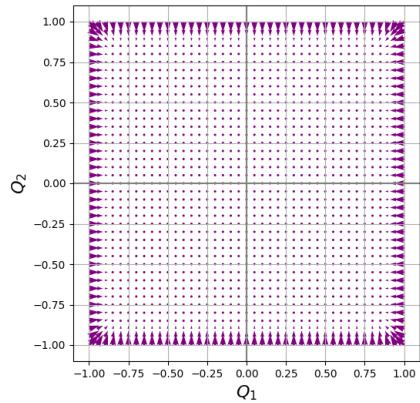


図 2: $c1=0.0$

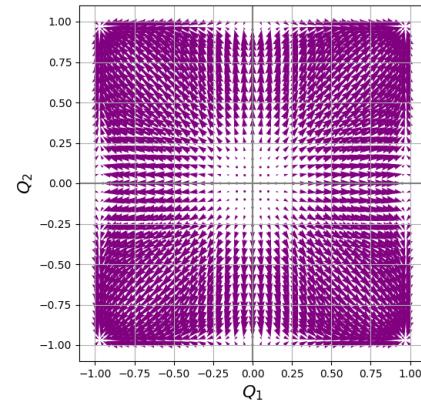


図 3: $c1=0.2$

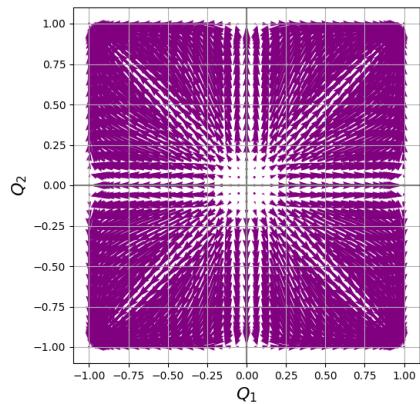


図 4: $c1=0.4$

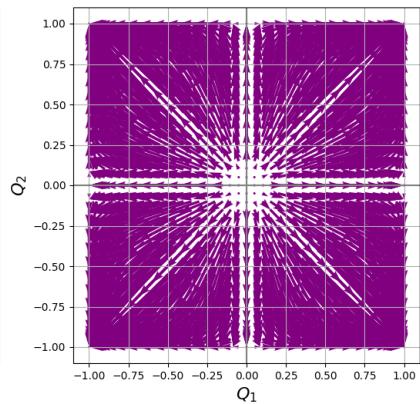


図 5: $c1=0.6$

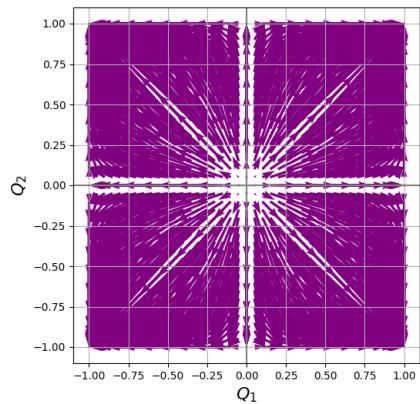


図 6: $c1=0.8$

ASDF のベクトル図において、ベクトルの絶対値が大きい箇所ほど非線形の特徴が強く、絶対値が小さい箇所ほど線形に近い特徴を持つ。

1.4 CLS を用いた計算手法とその結果 (DMD)

次に、動的モード分解 (DMD) を行うことで、CLS において混合パラメータの変化に対する ASDF の発展の変化の特徴を数学的に抽出する。[5]

まず、 $n+1$ 個のデータセット $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{x}_{n+1}$ について、ベクトル $\mathbf{X}, \mathbf{X}', \mathbf{A}$ を以下のように定める。

$$\mathbf{X} \equiv [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n] \quad (16)$$

$$\mathbf{X}' \equiv [\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_{n+1}] \quad (17)$$

$$\mathbf{A} \equiv \text{argmin} |\mathbf{X}' - \mathbf{AX}| \quad (18)$$

行列 \mathbf{A} は、 \mathbf{X}' と \mathbf{AX} の L^2 ノルム誤差が最小になるような \mathbf{A} が定められている。この \mathbf{A} の定義式より次の近似式、

$$\mathbf{X}' \approx \mathbf{AX} \quad (19)$$

が成立すると言えるならば、 $1 \leq k \leq n$ について $\mathbf{x}_{k+1} \simeq \mathbf{x}_k$ もいえるため、この \mathbf{A} が発展の特徴的構造を説明できる情報を有していると言える。

この \mathbf{A} について解析することが、動的モード分解 (DMD) の最大の目的としてある。 \mathbf{A} の性質に関する特徴的な値として、固有ベクトル: Φ_1, \dots, Φ_n / 固有値: $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ をそれぞれ DMD モード/DMD 固有値と呼び、これらに加え、 $\mathbf{b} = [\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_n]^\top = \Phi^\top \mathbf{x}_1$ を mode amplitude と呼ぶ。DMD モードは元データのベクトル場の再現のための同次元のベクトル場を、DMD 固有値は対応する DMD モードのパラメータ変化による発展性を、mode amplitude は対応する DMD モードの重みを、それぞれ表している。

具体的には、パラメータを増加させた場合に、DMD 固有値の絶対値が 1 より大きいモードは発展し、絶対値が 0 に近いモードは急速に減衰していく。

これらの 3 つのデータを用いて以下の式が得られる。

$$\mathbf{x}_k = \sum_{j=1}^n \phi_j(\lambda_j)^{k-1} \mathbf{b}_j \quad (20)$$

この式は、DMD 解析の元のデータを、解析によって得られた DMD モード・DMD 固有値・mode amplitude で再構成するための式であり、動的モード分解が成立しているかどうかを判断する上で重要な式である。

この式による元データの再現の精度が \mathbf{A} の定義式の最小二乗法、しいては DMD 解析それ自体の近似精度であるといえる。

1.3 の ASDF の結果をもとに、 $c_1 = 0.0 \sim 0.9$ において 0.1 刻みに発展させ、DMD を行なった計算結果は先行研究より以下のようになる。[6]

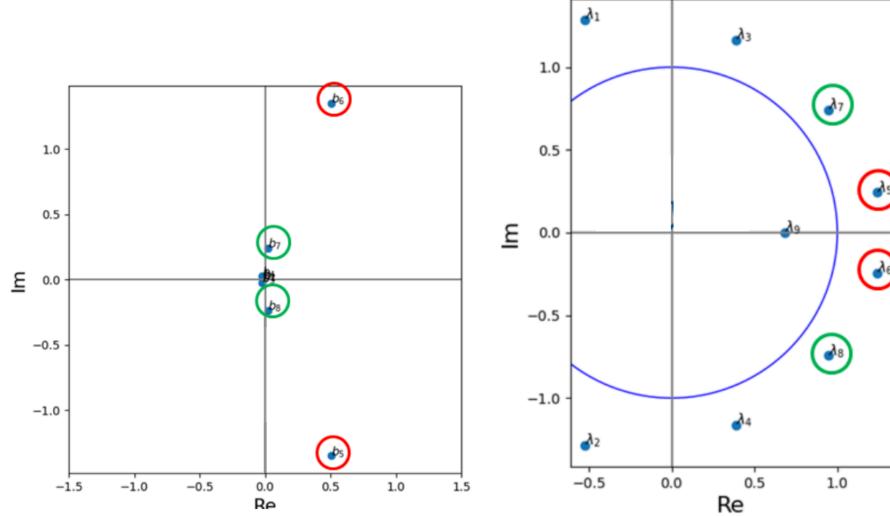


図 7: mode amplitude

図 8: DMD 固有値

モードは複素共役であるため、実数的には同じモードを示すことから、どちらか一方のみを考察対象とすれば良い。

また、mode amplitude より、各々のモードのオーダーがわかる。その結果、主要なモードは 2 種類あることが読みとれた。ただし、1 オーダー以上小さいものに

関しては、全体に及ぼす影響が小さいとみなし、主要モードとはみなしていない。図 8 からは、 c_1 を変化させた場合の、各々のモードの発展性を読み取ることができる。ここでは、どのモードも単位円付近に位置していることから、 c_1 を変化させた場合に急激に発展しないことが読み取れる。

2種類の主要モードの配位空間上でのベクトル図は以下のようになる。

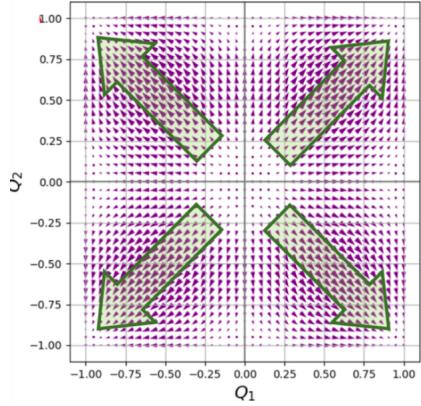


図 9: ϕ_5

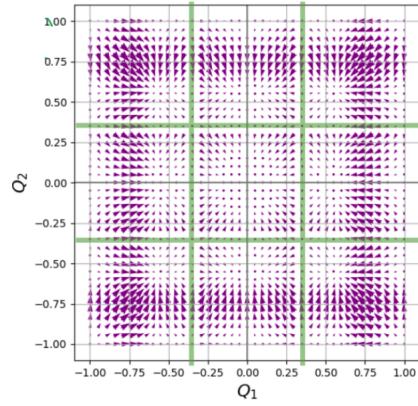


図 10: ϕ_7

図 9 より、主要モードひとつ目の ϕ_5 は、不規則状態から基底状態へ大域的発展を行うモードであることがわかる。

また、図 10 より、もうひとつの主要モード ϕ_7 は、配位空間上を不規則領域、基底領域、中間的規則領域に分かれた 9 領域で個別に発展しているモードであることがわかる。

1.5 CLS における問題点

ここまで CLS をモデルとして用いた先行研究は、状態密度関数と相関関数が一様な連続分布であるという前提のもとで行われている。だが実際は、厳密な連続分布ではなく、離散的な値を取る領域が存在する。特に基底状態付近では、原子の位置的な拘束の影響により、値が離散的であるために連続分布とは言い難い。

配位数変化に伴う非線形性の変化を調べる上で、これらが及ぼす影響は重要だと示唆される。そこで、本研究では、この離散状態を再現するために、基底状態

付近及び、中間的規則状態付近に微細構造を加えた CLS モデルを用いて、非線形性の変化を調べる。

2 計算手法

2.1 微細構造の附加位置

まず、条件「共分散が零値である」を保持するために、微細構造は原点対称に 4 点を配置することが必要である。

基底状態付近に微細構造を付加する場合は、第 1 象限から第 4 象限に一つずつ対称に付加し、また、中間的規則状態付近に微細構造を付加する場合は、軸上の正負の領域に一つずつ対称に付加する。

2.2 微細構造の強度

まず、微細構造の最近値を求めるために、配置 1 つ分に相当する CDOS の値を求める。

例として、先行研究より、分散 σ の CDOS の系において、原子数 N , 組成 x , 配位数 Z の間に、次のような関係が成り立つことがわかっている。[7]

$$\sigma \approx \frac{32x^2(1-x)^2}{N \cdot Z} (N \rightarrow \infty) \quad (21)$$

ここに、本研究の計算条件を代入することで、

$$N = \frac{32 \times 0.5^4}{0.003 \times 6} = 111 \quad (22)$$

これより、 $\sigma = 0.003$ の CDOS の系がおおよそ 100 原子ほどの系に相当することが分かる。

100 原子で $x = 0.5$ の系の配置数は、

$$N_c = {}_{100}C_{50} \approx 10^{29} \quad (23)$$

よって、CDOS の値が 1.0×10^{-29} のところが配置の数がおおよそ 1 に等しいということが分かる。

そこで、微細構造の最近値として、 1.0×10^{-30} 1.0×10^{-40} を目安に考え、配置1つ分に相当する CDOS の候補値として、

$$1.0 \times 10^{-40}, 1.0 \times 10^{-35}, 1.0 \times 10^{-30} \quad (24)$$

を設定した。

3 結果・考察

3.1 基底状態付近への微細構造の付加

まず、基底状態付近へ微細構造を付加する。配位空間上で以下の位置に、微細構造を付加する。

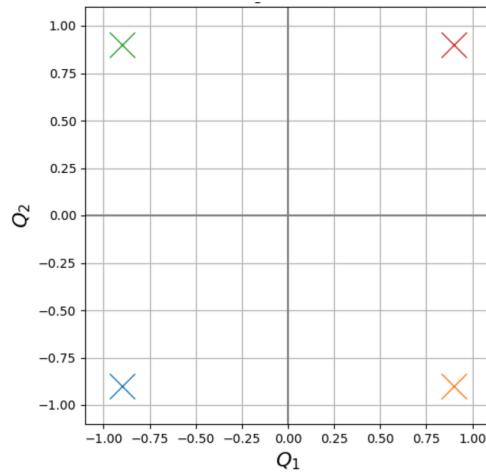


図 11: 微細構造の付加位置（基底状態付近）

微細構造を付加する位置における付加前の CDOS の値を調べると、オーダーは 10^{-37} 程度であった。このことから、先述の 3 つの候補値は、微細構造の強度として適当であると考えられ、付加する微細構造の強度として設定する。

3.1.1 微細構造強度: 1.0×10^{-40} での非線形性の振る舞い

ASDF の結果は以下の図のようになる。

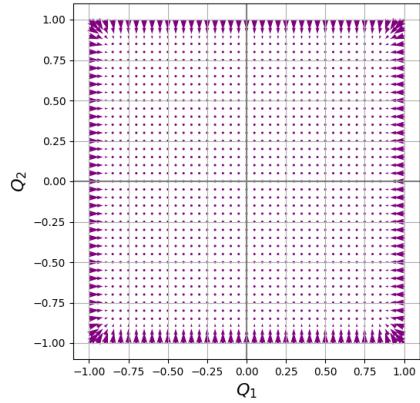


図 12: $c1=0.0$

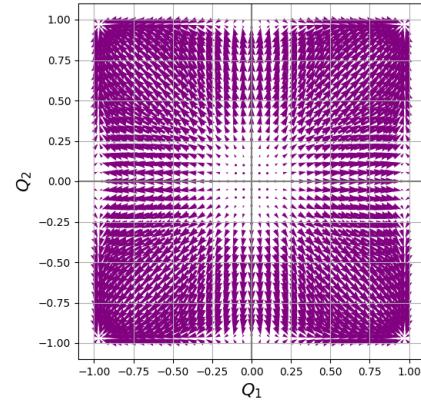


図 13: $c1=0.2$

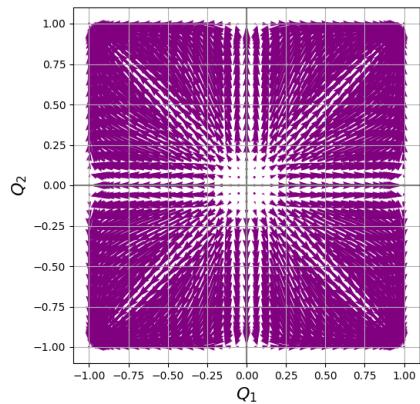


図 14: $c1=0.4$

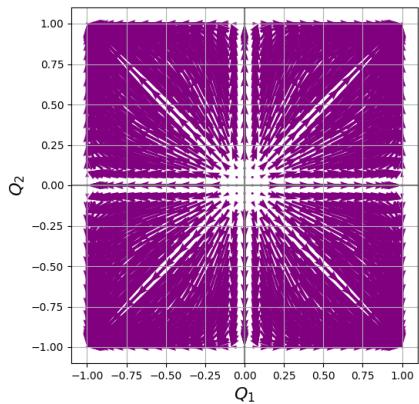


図 15: $c1=0.6$

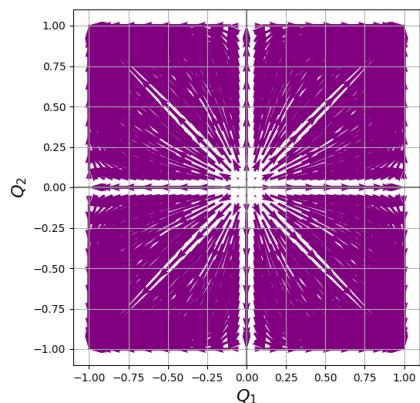


図 16: $c1=0.8$

この程度の強度の大きさでは、微細構造を加える前と比較して、ほとんど大きな変化が見られないことがわかった。

この結果をもとに、 $c_1 = 0.0 \sim 0.9$ を対象に DMD を行なった結果は、以下のようになる。

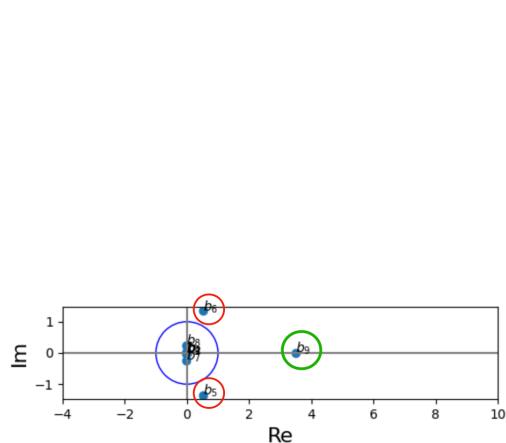


図 17: mode amplitude

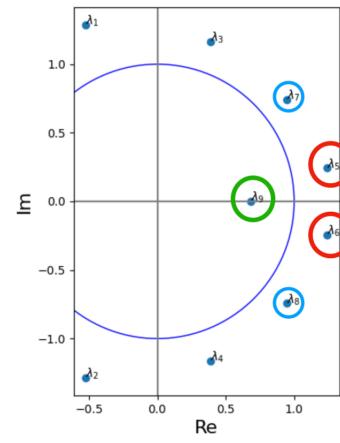


図 18: DMD 固有値

主要モードは 5 個と読み取れ（図の縮尺の都合上、図 17 でマークしているのは 3 個のみ）、それぞれのモードは以下のようになる。

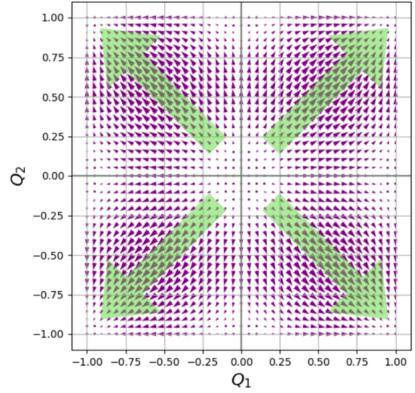


図 19: ϕ_6

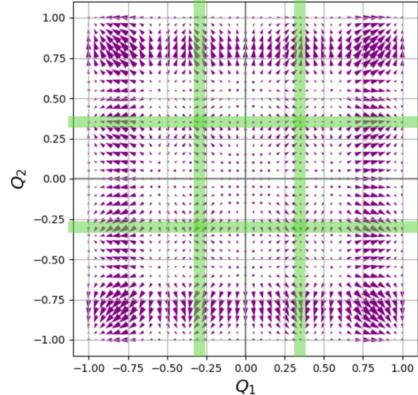


図 20: ϕ_8

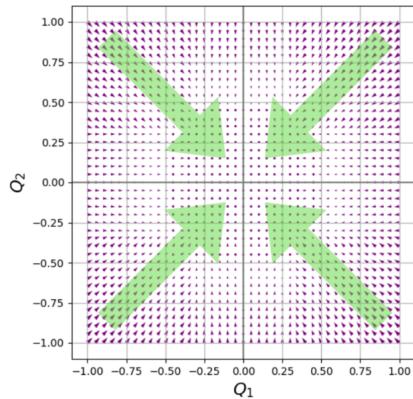


図 21: ϕ_9

主要モードは、不規則状態から基底状態に大域的に発展を行うモード、基底状態から不規則状態に大域的発展を行うモード、9つの領域に個別に発展するモードの3種類に特徴が分けられる。

3.1.2 微細構造強度: 1.0×10^{-35} での非線形性の振る舞い

ASDF の結果は以下の図のようになる。

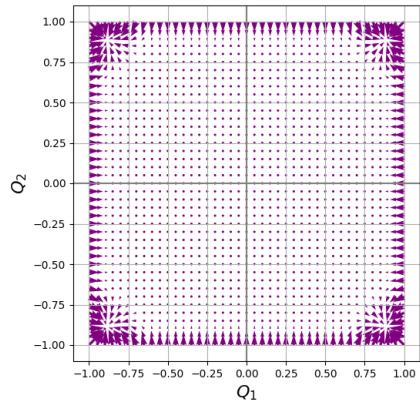


図 22: $c1=0.0$

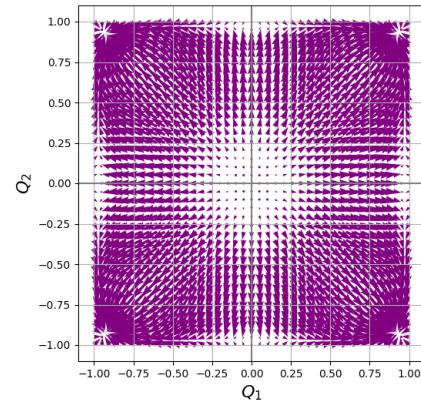


図 23: $c1=0.2$

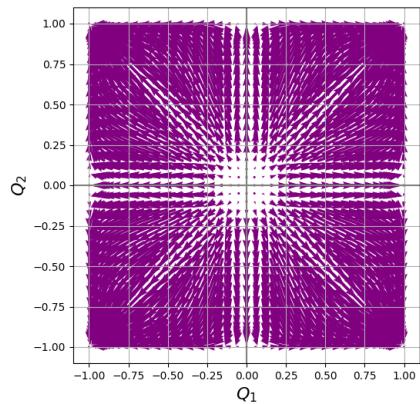


図 24: $c1=0.4$

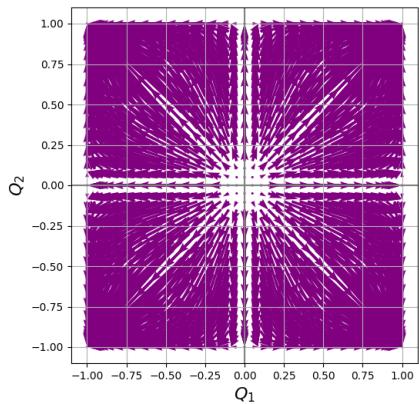


図 25: $c1=0.6$

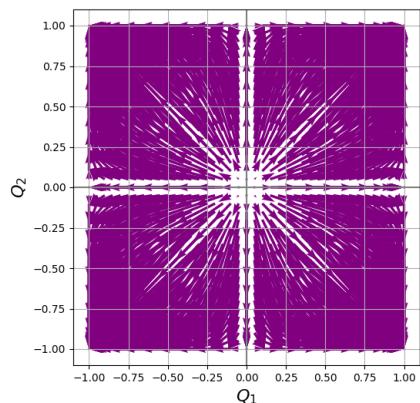


図 26: $c1=0.8$

ベクトル図は、微細構造を付加した位置のあたりに引っ張られた形となることがわかり、微細構造を加えた位置は吸収点のような働きをしていることがわかる。この結果をもとに、 $c_1 = 0.0 \sim 0.9$ を対象に DMD を行なった結果は、以下のようになる。

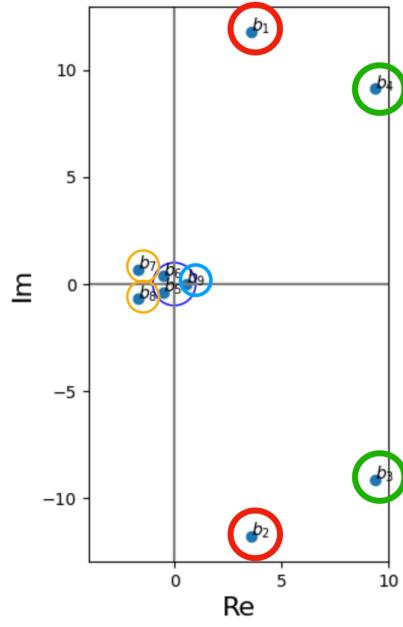


図 27: mode amplitude

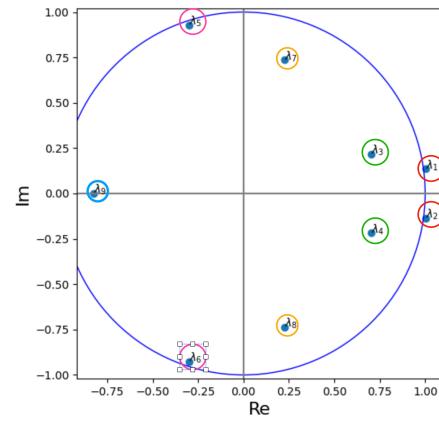


図 28: DMD 固有値

微細構造の強度を大きくしたことで、主要モードの数は増加し、主要モードは 9 個と読み取ることができた。それぞれのモードは以下のようになる。

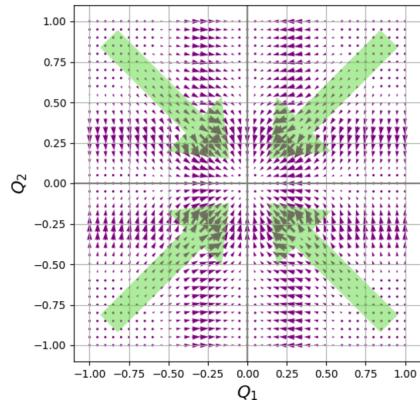


図 29: ϕ_1

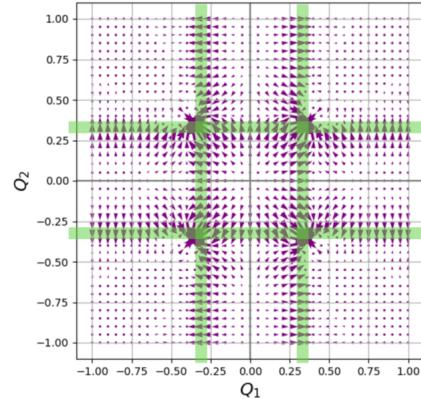


図 30: ϕ_4

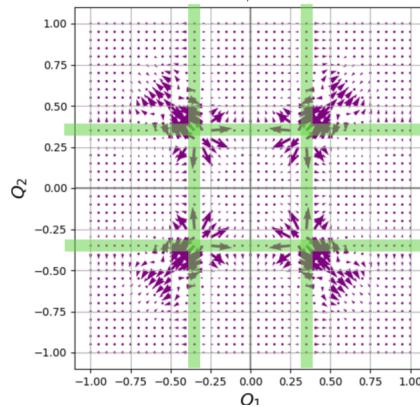


図 31: ϕ_6

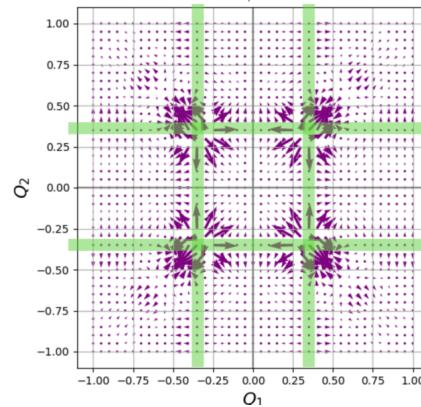


図 32: ϕ_7

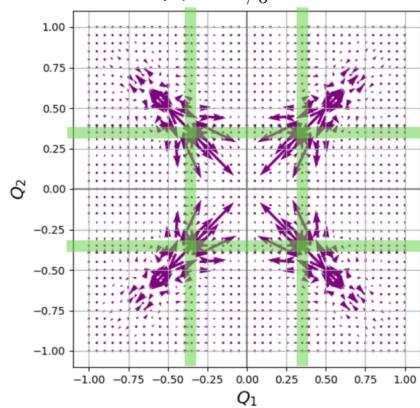


図 33: ϕ_9

ひとつは基底状態から不規則状態に大域的に発展を行うモード、他は9つの領域に個別に発展するモードというように特徴が分けられる。

3.1.3 微細構造強度: 1.0×10^{-30} での非線形性の振る舞い

ASDF の結果は以下の図のようになる。

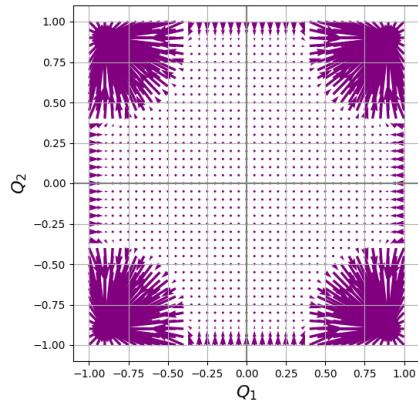


図 34: $c1=0.0$

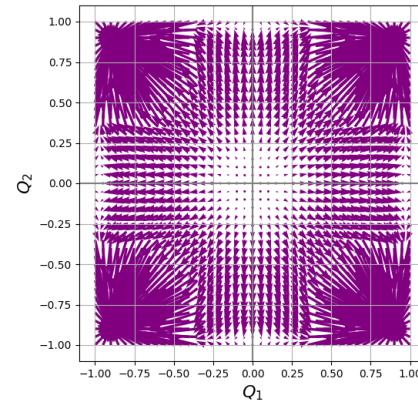


図 35: $c1=0.2$

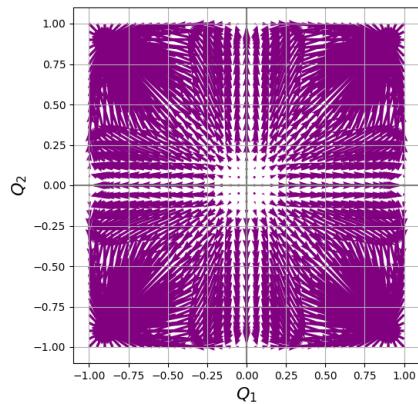


図 36: $c1=0.4$

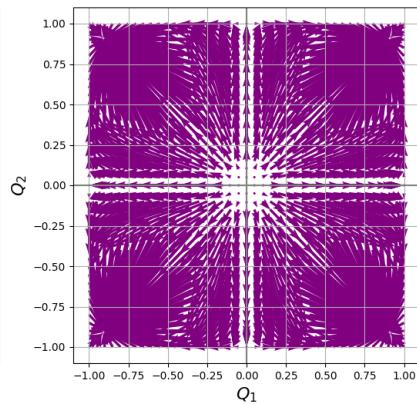


図 37: $c1=0.6$

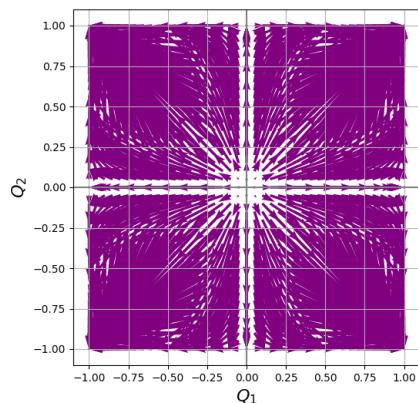


図 38: $c1=0.8$

強度を高くしたことにより、ベクトル図の引っ張られ方はさらに極端になることがわかる。また、ここでも、微細構造を加えた位置は吸収点のような働きをしていることがわかる。

この結果をもとに、 $c_1 = 0.0 \sim 0.9$ を対象に DMD を行なった結果は、以下のようにになる。

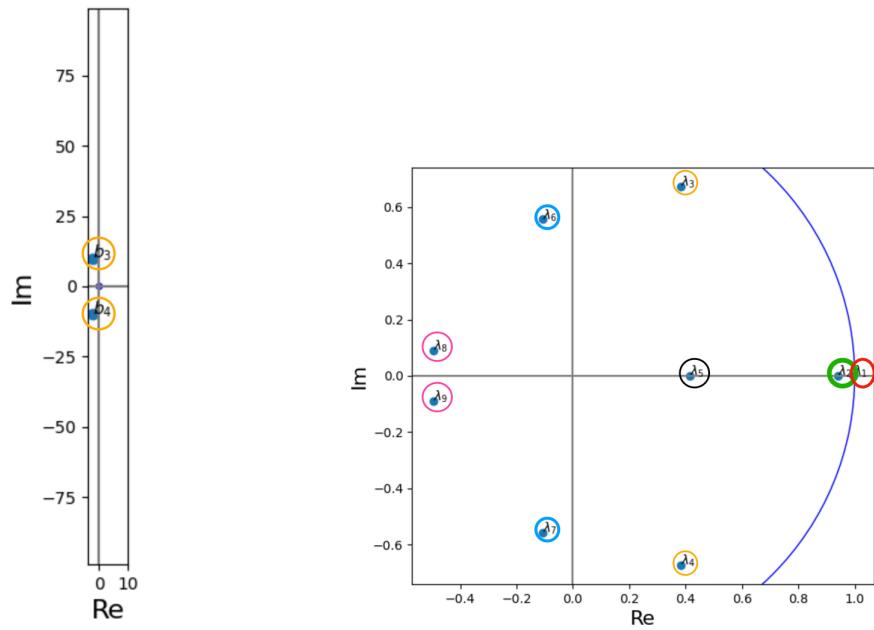


図 39: mode amplitude

図 40: DMD 固有値

主要モードは 9 個と読み取ることができた。それぞれのモードは以下のようになる。

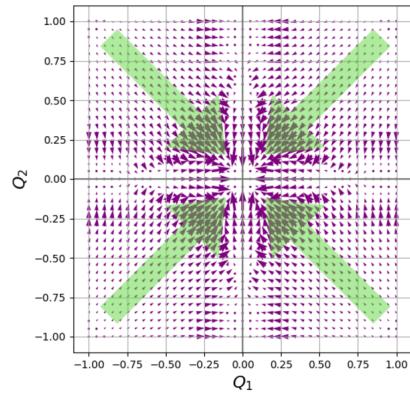


図 41: ϕ_1

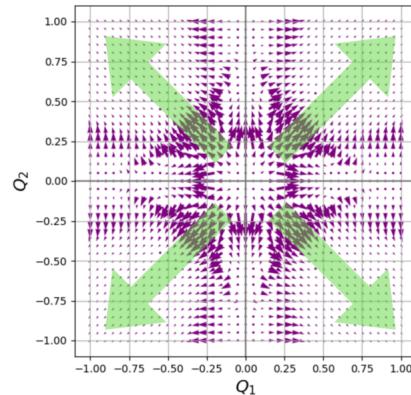


図 42: ϕ_2

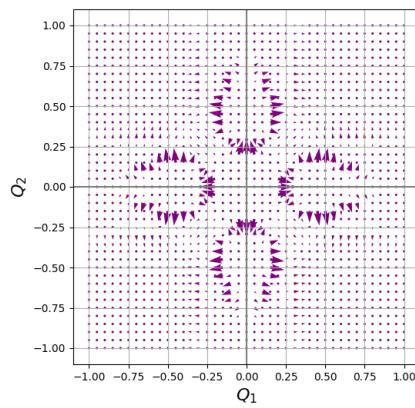


図 43: ϕ_3

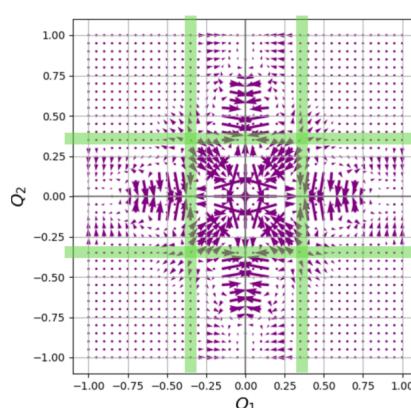


図 44: ϕ_5

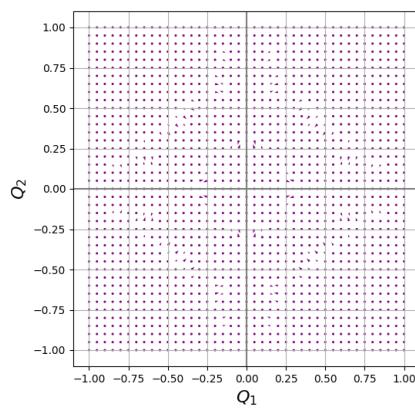


図 45: ϕ_7

25

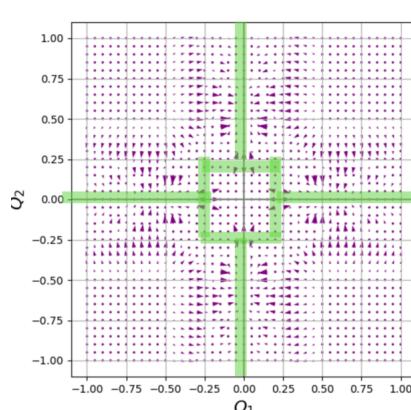


図 46: ϕ_9

不規則状態から基底状態に大域的に発展を行うモード、基底状態から不規則状態に大域的発展を行うモード、9つの領域で個別に発展するモード、5つの領域で個別に発展するモードが存在することが分かった。また、他は複雑に発展するモードであり、特徴付けすることが困難であった。

3.2 中間的規則状態付近への微細構造の付加

次に、中間的規則状態付近へ微細構造を付加する。配位空間上で以下の位置に微細構造を付加する。

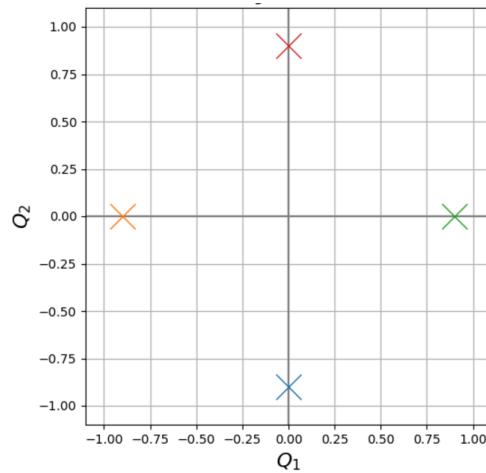


図 47: 微細構造の付加位置（中間規則状態付近）

基底状態付近に比べて、配置の数は多く存在することから、先の微細構造の最近値を目安に設定した強度では大きな変化が見られないと考えられる。そこで、ここでは微細構造の強度の候補値として、 $1.0 \times 10^{-35}, 1.0 \times 10^{-20}, 1.0 \times 10^{-15}$ を設定した。

3.2.1 微細構造強度: 1.0×10^{-35} での非線形性の振る舞い

ASDF の結果は以下の図のようになる。

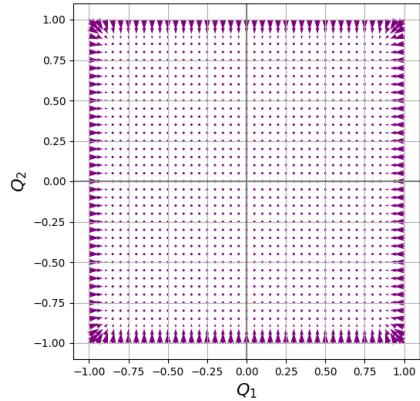


図 48: $c1=0.0$

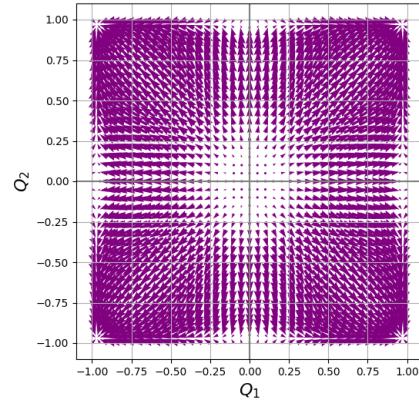


図 49: $c1=0.2$

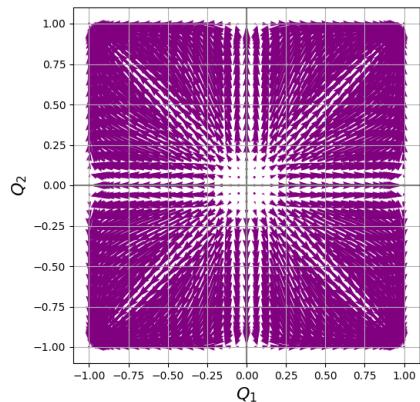


図 50: $c1=0.4$

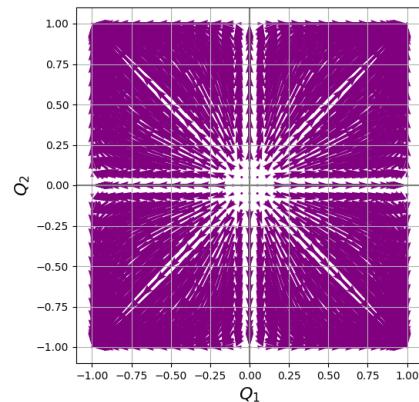


図 51: $c1=0.6$

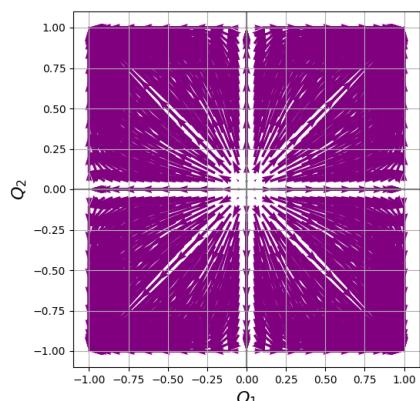


図 52: $c1=0.8$

この程度の強度の大きさでは、微細構造を加える前と比較して、ほとんど大きな変化が見られず、「3.1.1 微細構造強度: 1.0×10^{-40} での振る舞い」と同様の結果が得られた。

この結果をもとに、 $c_1 = 0.0 \sim 0.9$ を対象に DMD を行なった結果は、以下のようになる。

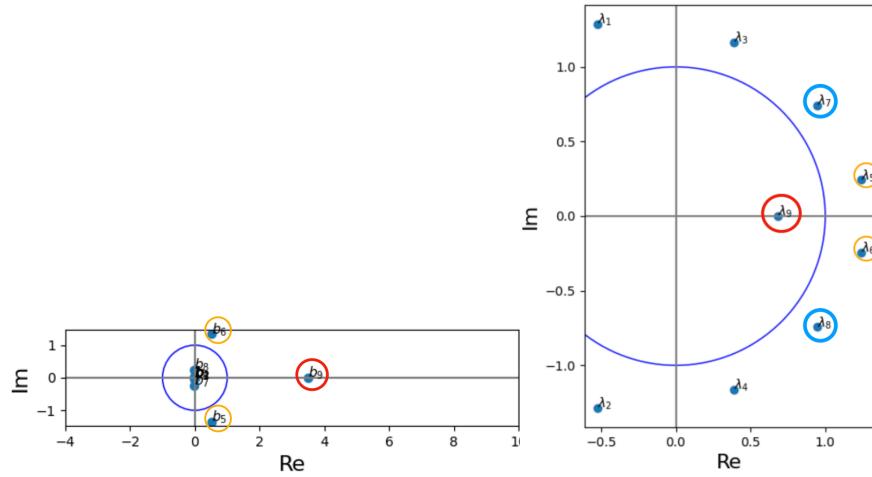


図 53: mode amplitude

図 54: DMD 固有値

主要モードは 5 個と読み取れ（図の縮尺の都合上、図 53 でマークしているのは 3 個のみ）、それぞれのモードは以下のようになる。

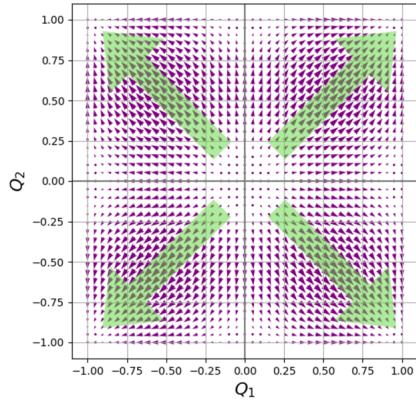


図 55: ϕ_6

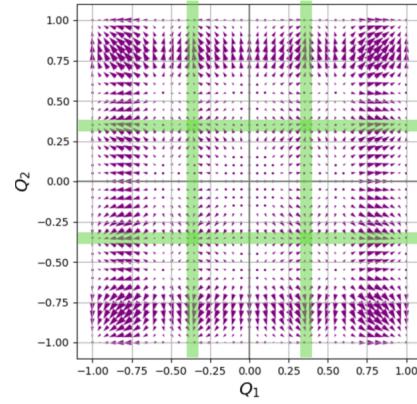


図 56: ϕ_7

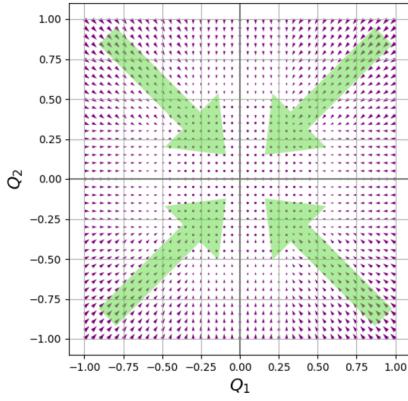


図 57: ϕ_9

主要モードは、不規則状態から基底状態に大域的に発展を行うモード、基底状態から不規則状態に大域的発展を行うモード、9つの領域に個別に発展するモードの3種類に特徴が分けられる。ここでも、「3.1.1 微細構造強度: 1.0×10^{-40} での振る舞い」と同様の結果が得られた。

3.2.2 微細構造強度: 1.0×10^{-20} での非線形性の振る舞い

ASDF の結果は以下の図のようになる。

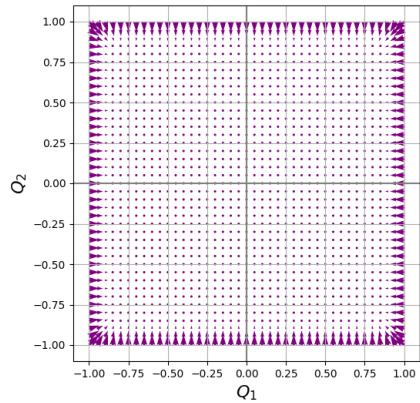


図 58: $c1=0.0$

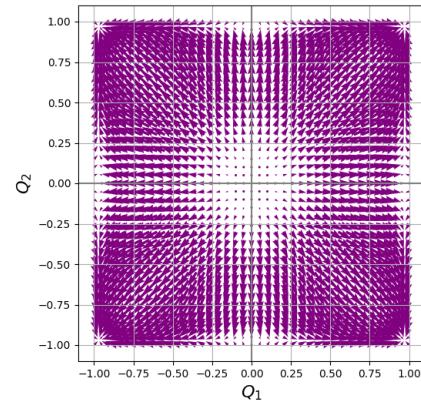


図 59: $c1=0.2$

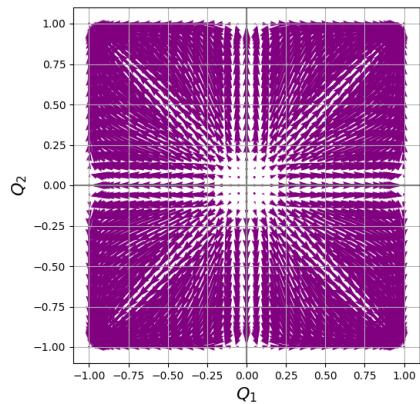


図 60: $c1=0.4$

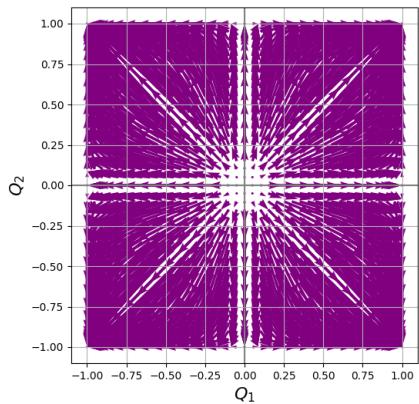


図 61: $c1=0.6$

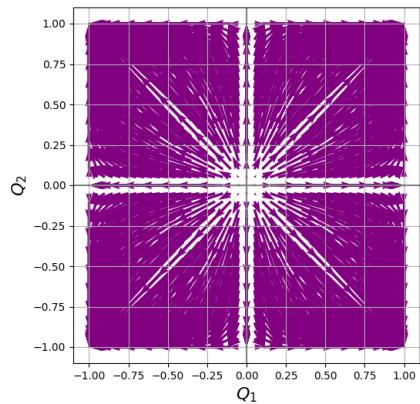


図 62: $c1=0.8$

ここでの結果は、先の「3.2.1 微細構造強度: 1.0×10^{-35} での振る舞い」における ASDF の結果と比べて、大きな変化は見られなかった。そのため、DMD を行なった場合でも同様のことが言えると考えられる。

3.2.3 微細構造強度: 1.0×10^{-15} での非線形性の振る舞い

ASDF の結果は以下の図のようになる。

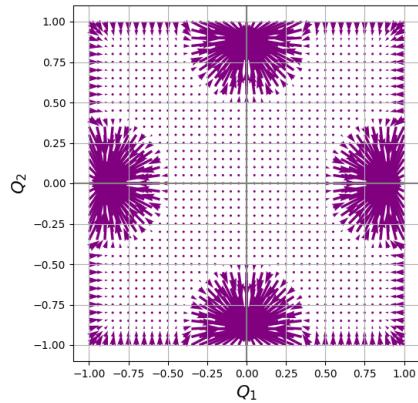


図 63: $c1=0.0$

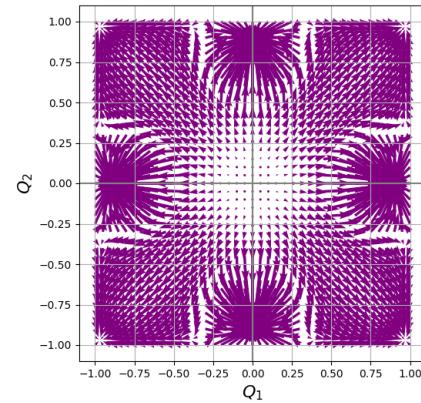


図 64: $c1=0.2$

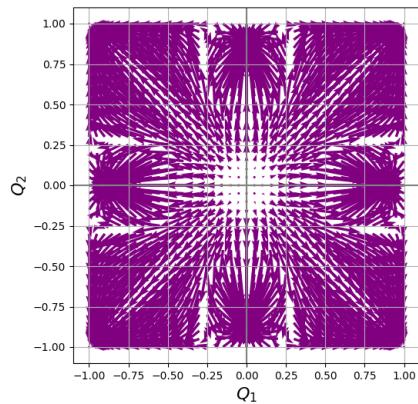


図 65: $c1=0.4$

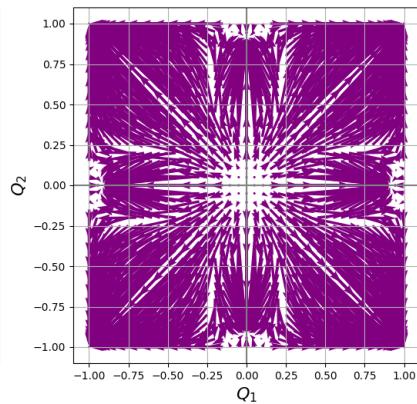


図 66: $c1=0.6$

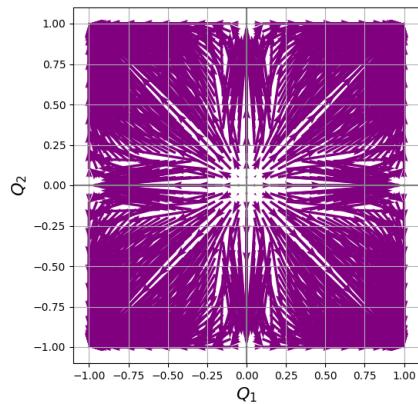


図 67: $c1=0.8$

ベクトル図は、微細構造を付加した位置のあたりに引っ張られた形となることがわかり、微細構造を加えた位置は吸収点のような働きをしていることがわかる。また、 c_1 が大きくなるにつれて、吸収点の働きは強くなっている傾向にあり、ベクトル場が引っ張られる範囲が大きくなっていることが分かる。この結果をもとに、 $c_1 = 0.0 \sim 0.9$ を対象に DMD を行なった結果は、以下のようになる。

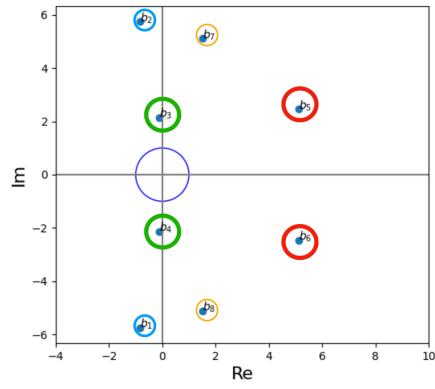


図 68: mode amplitude

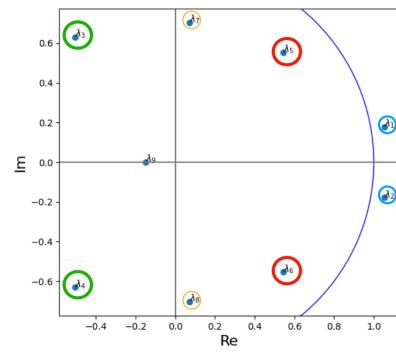


図 69: DMD 固有値

ここでも、微細構造付加前に比べて主要モードの数は増加し、主要モードは 8 個と読み取ることができた。それぞれのモードは以下のようになる。

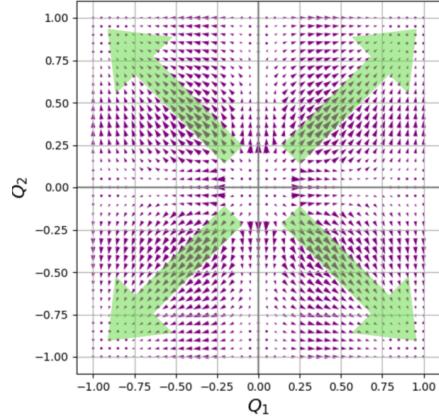


図 70: ϕ_2

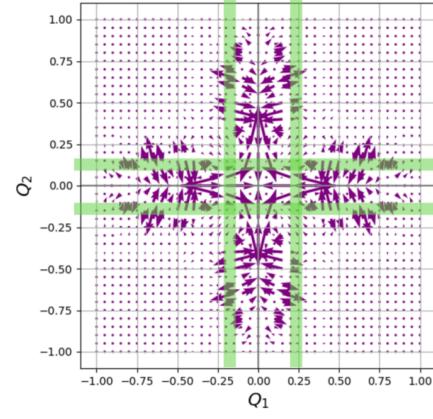


図 71: ϕ_3

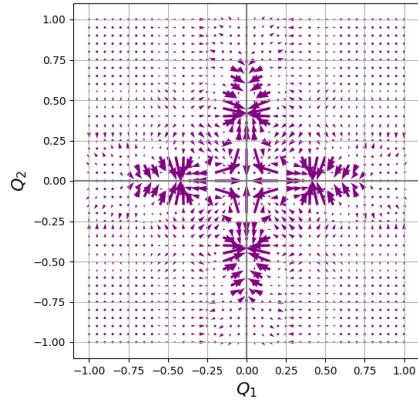


図 72: ϕ_5

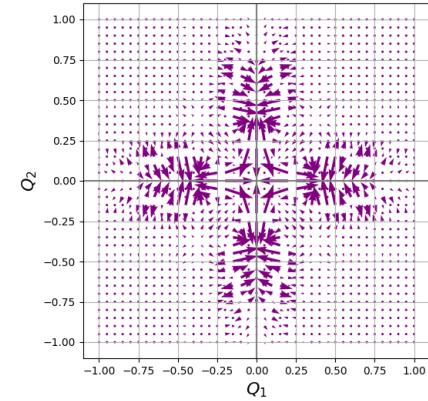


図 73: ϕ_7

不規則状態から基底状態に大域的に発展を行うモード、9つの領域で個別に発展するモードが存在することがわかった。また、他は複雑に発展するモードであり、特徴付けすることが困難であった。

4 まとめ

本研究では、配位数変化による非線形性の系統的な変化を調べるモデルとして CLS:Coupled Linear System（先行研究より提案）を採用した。その上で、従来のモデルでは考慮されていなかった、配位空間状態密度（なかでも特に、基底状態近傍と中間的規則状態）に対する微細構造が非線形性に与える影響について解析した。まず、微細構造を付加することで、ASDF の計算結果において、ベクトル場が強く引っ張られることがわかった。この時、微細構造を付加した位置は吸収点のような働きをしている。ここでの吸収点は、始点の異なる複数のベクトル場の共通した終点を意味している。先述の ASDF の概要（1.3 CLS を用いて計算手法とその結果（ASDF））より、この吸収点に位置する構造は、複数の多体相互作用が与える、共通した平衡状態の構造ということになる。つまり、吸収点に対応した平衡状態の構造を観測した場合に、その構造を与える多体相互作用を一意に決めることができない。この状態は、配置多面体の頂点構造において複数の多体相互作用が、その構造を平衡状態として与えているのと同じ状態である。このことから、ベクトル場が強く引っ張られるほどの強度の微細構造を付加することは、実質的に新しい配置多面体の頂点構造に近い振る舞いをする性質を付与することに対応すると解釈できる。

また、微細構造を付加することで、DMD から得る主要モードの個数が増加していることがわかった。このことから、元データを再現して情報を抽出するために必要なモードの数が増え、非線形性の発展が複雑化したと言える。

さらに、DMD によって得られる主要モードのうち、9つの領域で個別に発展するモードは、微細構造の付加前後で変わらず存在することがわかった。これによって、配位数変化による非線形性の発展を調べる上で、「基底状態」「不規則状態」「中間的規則状態」の3つの状態に分けて考えることが重要であると示唆される。

謝辞

本研究を進めるにあたり、ナノ構造学研究室の皆様、特に弓削先生と亀井さんは大変丁寧にご指導いただきました。温かいご助言をいただき心より感謝いたします。ありがとうございました。

参考文献

- [1] J.M. Sanchez et al., Physica A **128**, 334(1984).
- [2] K. Kamei and K. Yuge, arXiv: 2210.11609[cond-mat.stat-mech].
- [3] K. Yuge,arXiv: 2103.12414[cond-mat.stat-mech].
- [4] K. Yuge,*J.Phys.Soc.Jpn.* **91**, 014802(2022).
- [5] Peter J.Schmid, Journal of Fluid Mechanics 656,5-28(2010).
- [6] 亀井 奎吾, 修士論文”線形システム結合系に基づく正準集団の非線形性解析”,
京都大学院工学研究科材料工学専攻 (2023)
- [7] 西原 将之, 修士論文”情報幾何学に基づくカノニカルアンサンブルの非線形性”,
京都大学院工学研究科材料工学専攻 (2022).

5 追加考察データ

本編より、一定以上の強度の微細構造を付加すると配位空間上のベクトル場は、微細構造を付加した位置の近傍に引っ張られることがわかった。ここでは、このことに関して更に解析を進めるために、微細構造付加前後で相関関数の集合が配位空間上でどのように変化したのかを調べる。一般の熱平衡状態での相関関数の集合を $\mathbf{Q}_{\text{nonlin}}$ 、微細構造を付加した後の相関関数の集合を $\mathbf{Q}_{\text{noise}}$ とする。ベクトル場 \mathbf{A}_{diff} を以下のように導入する。

$$\mathbf{A}_{\text{diff}} = \mathbf{Q}_{\text{noise}} - \mathbf{Q}_{\text{nonlin}} \quad (25)$$

ASDF が配位空間上のカノニカル分布の重心移動をベクトル場で示していることをふまえれば、ここで \mathbf{A}_{diff} は微細構造付加前後のカノニカル分布の重心移動のベクトル場を示していると言える。ここでは、これまでの計算結果に基づき、 $g_1 = 0.003$, $g_2 = 0.010$, $c_1 = 0.0 \sim 0.9$ において各強度の微細構造を加えた際の \mathbf{A}_{diff} の計算結果を配位空間上のベクトル場に図示することとする。

5.1 基底状態付近への微細構造の付加

5.1.1 微細構造強度: 1.0×10^{-40}

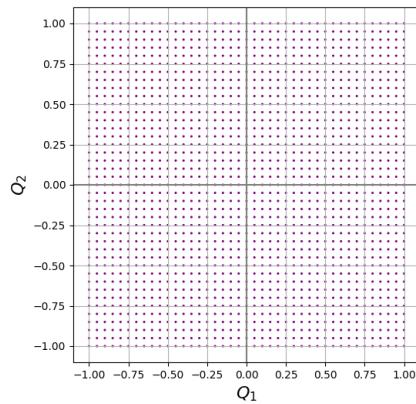


図 74: $c_1=0.0$

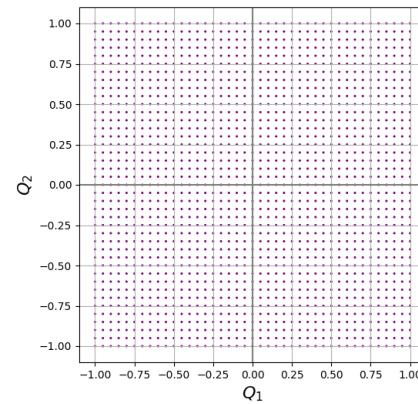


図 75: $c_1=0.2$

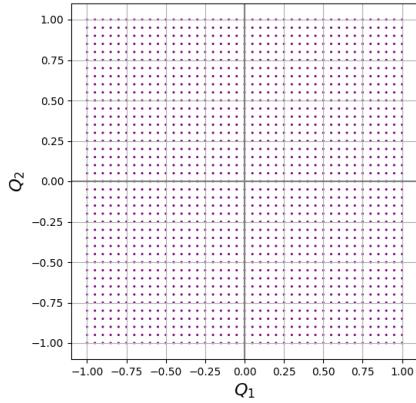


図 76: $c1=0.4$

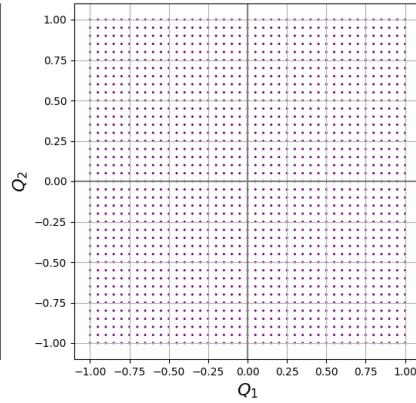


図 77: $c1=0.6$

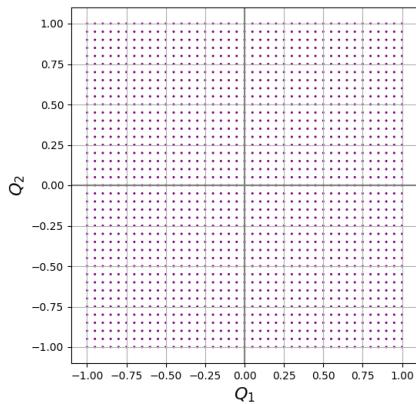


図 78: $c1=0.8$

この強度では、微細構造の付加前後で ASDF に大きな変化が見られなかったことから予想されたように、 \mathbf{A}_{diff} はどの領域でもノルムが極めて小さいことがわかった。

5.1.2 微細構造強度: 1.0×10^{-35}

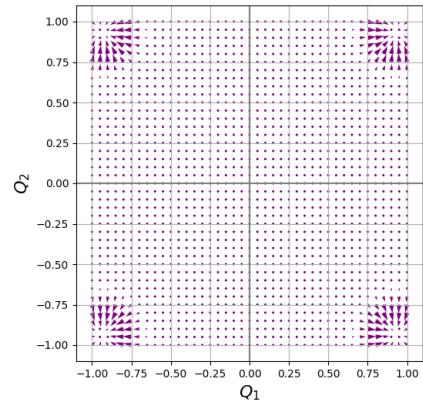


図 79: $c1=0.0$

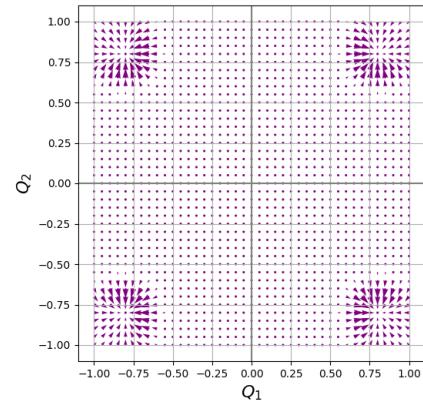


図 80: $c1=0.2$

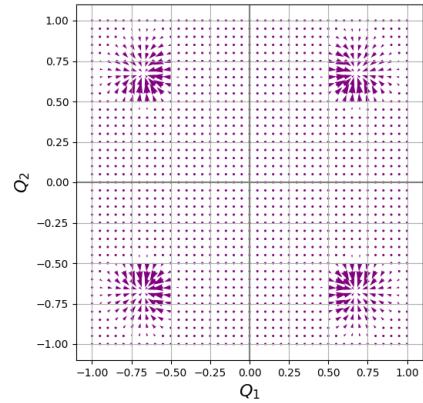


図 81: $c1=0.4$

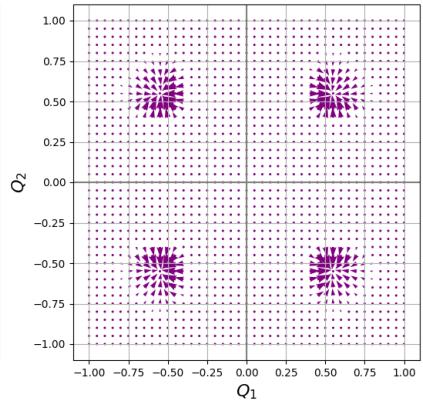


図 82: $c1=0.6$

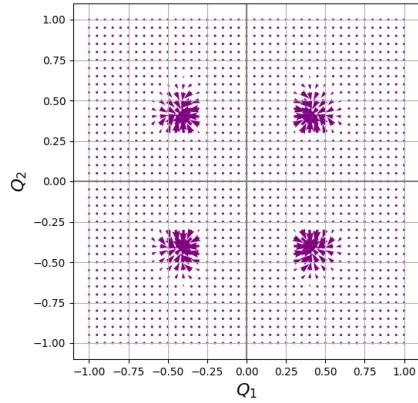


図 83: $c_1=0.8$

微細構造付加後の ASDF と同様に、ここでも吸収点のような働きをする点があることがわかった。さらに、パラメータ c_1 を増加させた場合に、微細構造付加前後の変化が大きい領域が不規則領域側へと移動していくことがわかった。

5.1.3 微細構造強度: 1.0×10^{-30}

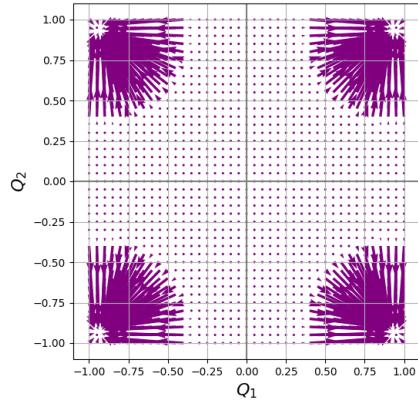


図 84: $c_1=0.0$

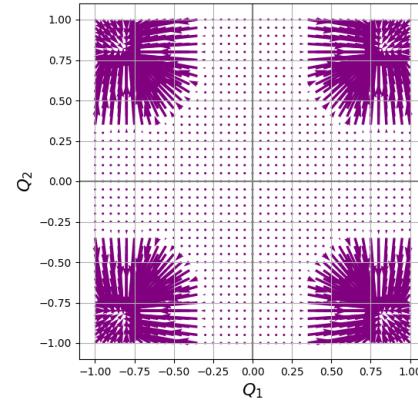


図 85: $c_1=0.2$

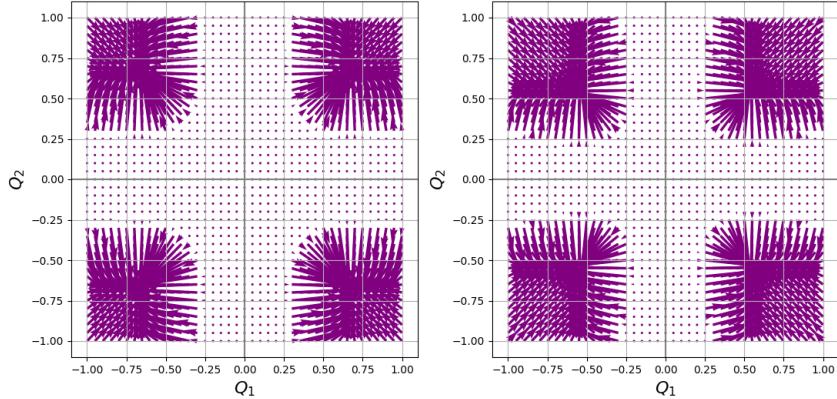


図 86: $c_1=0.4$

図 87: $c_1=0.6$

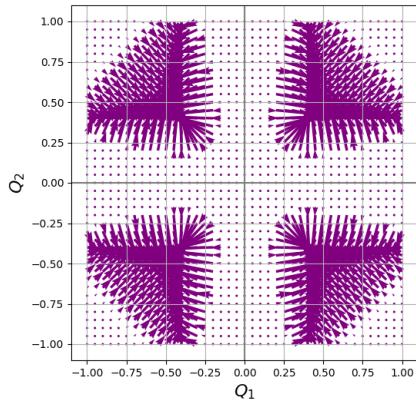


図 88: $c_1=0.8$

微細構造強度 1.0×10^{-35} の時と同様に、吸収点のような働きをする点が存在した。また、強度が大きくなつたことで、吸収点付近のベクトルのノルムは大きくなつたことが読み取れる。さらに、ここでもパラメータ c_1 を増加させた場合に、微細構造付加前後の変化が大きい領域が不規則領域側へと移動していくことがわかった。

5.2 中間的規則状態付近への微細構造の付加

5.2.1 微細構造強度: 1.0×10^{-35}

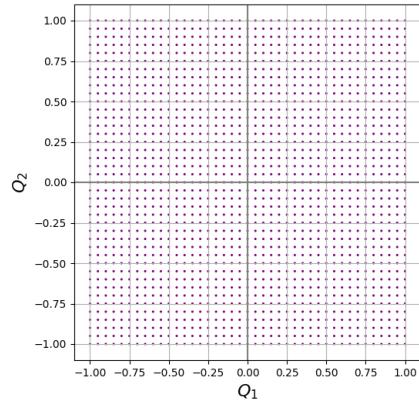


図 89: $c1=0.0$

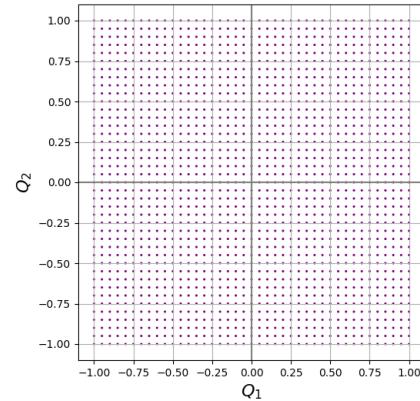


図 90: $c1=0.2$

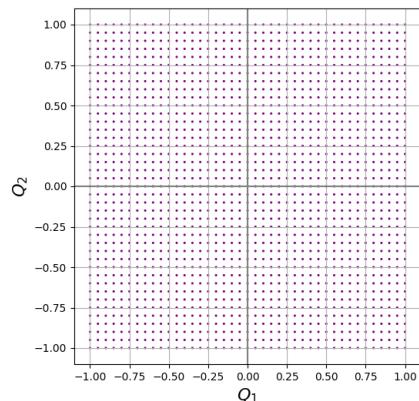


図 91: $c1=0.4$

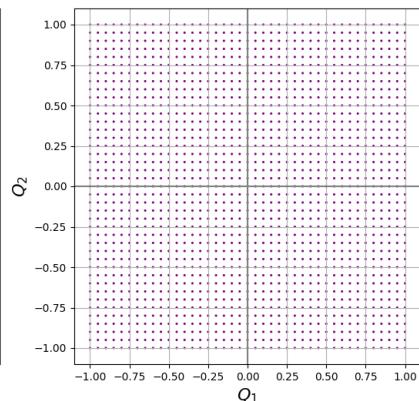


図 92: $c1=0.6$

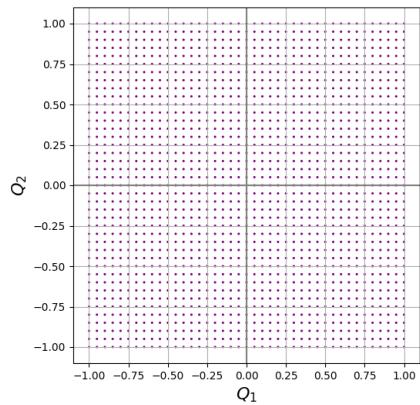


図 93: $c1=0.8$

この強度では、微細構造の付加前後で ASDF に大きな変化が見られなかったことから予想されたように、 \mathbf{A}_{diff} はどの領域でもノルムが極めて小さいことがわかった。

5.2.2 微細構造強度: 1.0×10^{-20}

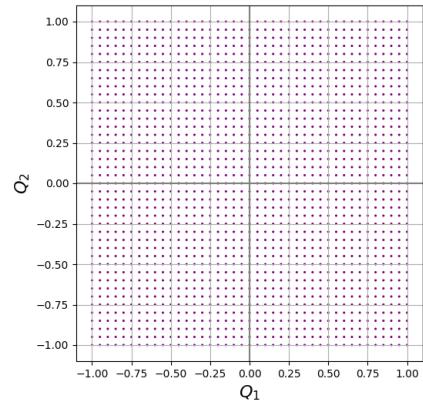


図 94: $c1=0.0$

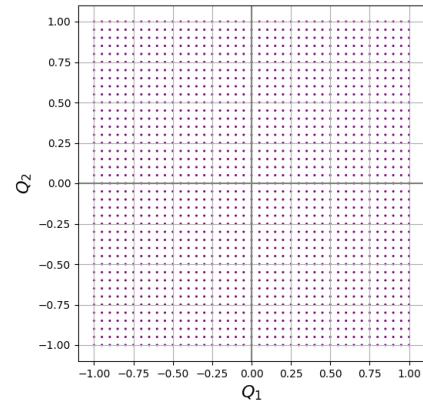


図 95: $c1=0.2$

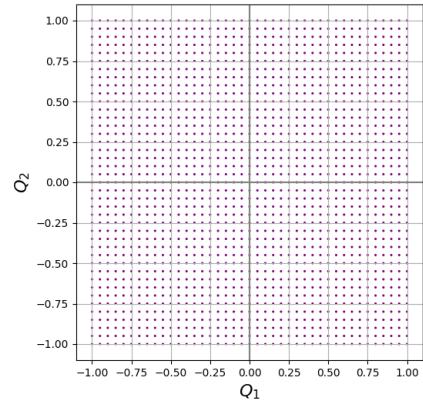


図 96: $c1=0.4$

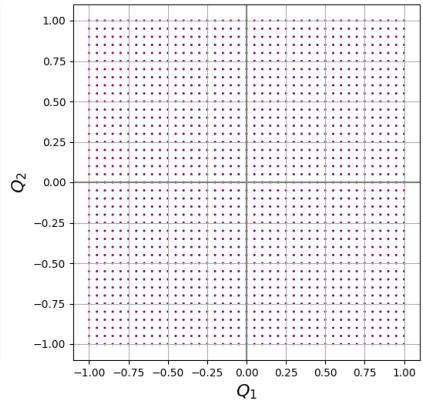


図 97: $c1=0.6$

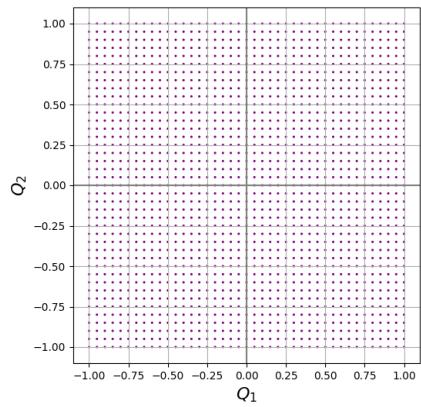


図 98: $c1=0.8$

この強度では、微細構造の付加前後で ASDF に大きな変化が見られなかったことから予想されたように、 \mathbf{A}_{diff} はどの領域でもノルムが極めて小さいことがわかった。

5.2.3 微細構造強度: 1.0×10^{-15}

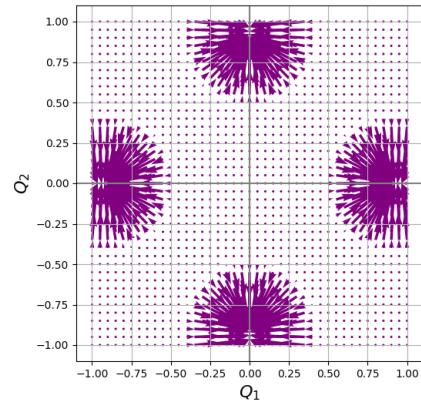


図 99: $c1=0.0$

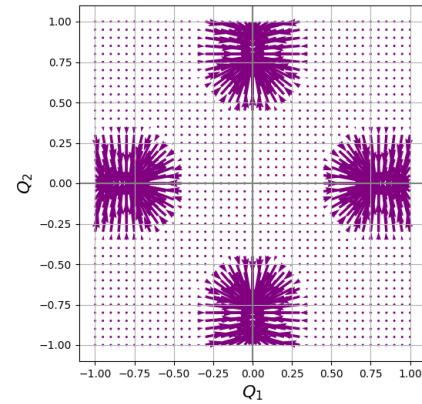


図 100: $c1=0.2$

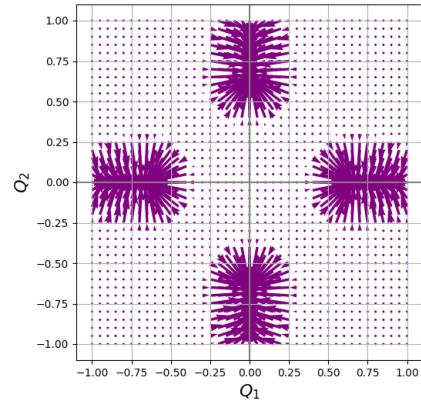


図 101: $c1=0.4$

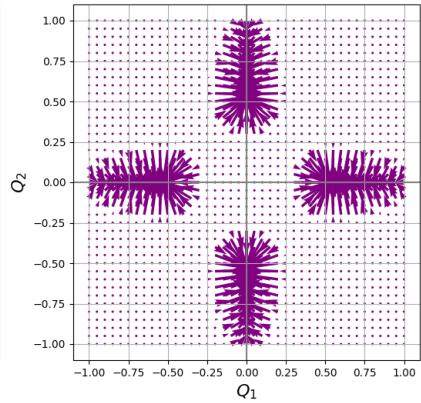


図 102: $c1=0.6$

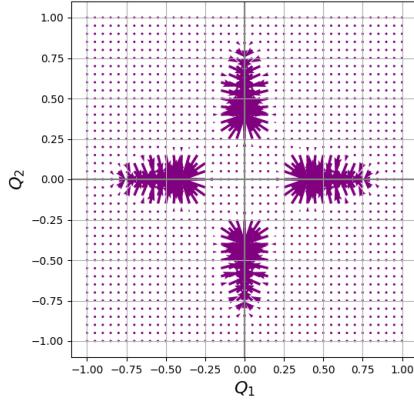


図 103: $c_1=0.8$

基底領域に微細構造を付加した際は吸収点のような点が存在したが、ここではベクトルの終点が集まる帯のような領域が存在することがわかった。また、パラメータ c_1 を増加させた場合に、微細構造付加前後の変化が大きい領域が不規則領域側へと移動していくという特徴はここでも見られた。

5.3 まとめ

まず、基底状態付近に微細構造を付加した場合には、ASDF の結果と同様に、 \mathbf{A}_{diff} の終点が集まる吸収点のような働きをする点が存在することがわかった。なお、中間的規則状態付近に微細構造を付加した場合には、帯のような領域に \mathbf{A}_{diff} が吸収していくことがわかった。このことから、微細構造付加によって、いくつかの構造が、吸収領域に位置する構造へと変化するとわかる。つまり、吸収領域周辺の構造の状態数が減少し、吸収領域に位置する構造の状態数が増加することを意味する。この事実は、微細構造を加えることが、現実系において状態密度関数と相関関数の間に存在する離散状態を再現することに値することを証明していると考えられる。

また、ある一定以上の強度の微細構造を加えた場合に、パラメータ c_1 を増加に伴って、 \mathbf{A}_{diff} のノルムが大きい領域、つまり、微細構造の付加によって及ぼされる変化が大きい領域が不規則領域側へと移動していくことがわかった。パラメー

タ c_1 を増加させることは、CLS の分散が小さくなることに相当し、この時、基底状態にあたる裾野の領域の増加し CLS は絞られた形に変化する。微細構造の付加によって及ぼされる変化が大きい領域のパラメータ c_1 の増加に伴う移動は、この裾野の領域の増加が影響していると考えた。基底状態にあたる裾野の領域が増加し CLS が絞られた形になることによって、配位空間上における不規則領域の位置と微細構造を加えた位置の相対的な位置関係は変化する。パラメータ c_1 を増加に伴って微細構造の付加によって及ぼされる変化が大きい領域が不規則領域側へと移動していくのは、CLS の形が変化してもこの相対的な位置関係が保たれるためであると考える。このことから、これまでの計算方法で定めてきた微細構造を加える位置は、微細構造を加える位置は座標を指定することで配位空間上の絶対的な位置として定められたものではなく、実際には、配位空間上における不規則領域との相対的な位置関係に基づいて定められていたのではないかと考えた。ただ、この見解が是非と判定するのは、現時点ではデータが不足しており困難だと思われる。今後、これらに関する研究に従事する者が、さらに考察を深め、原因を解明してくれることを願う。