

量子流体乱流の数値シミュレーション

Numerical simulation of quantum fluid turbulence

吉田恭、有光敏彦（筑波大学大学院数理物質研究科）

Kyo Yoshida and Toshihico Arimitsu

(Department of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba)

概要

低温の液体ヘリウムの超流動層や Bose-Einstein 凝縮体 (BEC) の力学を記述する Gross-Pitaevskii 方程式に散逸項と外力項を加えた量子乱流の数値シミュレーションを行った。エネルギースペクトル等、その予備的結果を報告する。

1 背景

低温の液体ヘリウムの超流動層や Bose-Einstein 凝縮体 (BEC) の力学は、適切な近似の下、Gross-Pitaevskii (GP) 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \left(\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + \mu \right) \psi + g|\psi|^2 \psi \quad (1)$$

によって記述される。ここで ψ は boson 場 $\hat{\psi}$ の期待値 $\psi := \langle \hat{\psi} \rangle$ で定義される秩序変数、 μ は化学ポテンシャル、 g は結合定数である。凝縮体の数密度 $n := |\psi|^2$ を用いて μ は $\mu = g\bar{n}$ と表される、ただし $\bar{\cdot}$ は空間平均を表す。ここで Madelung 変換 $\psi = \sqrt{\rho/m} \exp(i\varphi)$ を用いると、(1) は

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p_q \quad (3)$$

ただし、

$$\mathbf{v} := \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi, \quad p_q := -\frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}$$

となり、 ρ と \mathbf{v} をそれぞれ流体の密度場、速度場と解釈すれば、(2) と (3) はそれぞれ連続の式、流体の運動方程式になっている。以降この流体を量子流体と呼ぶ。

量子流体には、Navier-Stokes 方程式に従う古典流体とは異なるいくつかの性質がある。まず、 $\rho \neq 0$ となり \mathbf{v} が定義される箇所では渦無し $\boldsymbol{\omega} := \nabla \times \mathbf{v} = 0$ である。したがって循環 $\int_C d\mathbf{l} \cdot \mathbf{v} = \int_S d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\omega}$ ($C = \partial S$) は C が $\rho = 0$ となる線の周りを回るものでなければ 0 である。さらに、 C が $\rho = 0$ となる線の周りを回る場合、 $\varphi \pmod{2\pi}$ の一価性から、循環は

$$\int_C d\mathbf{l} \cdot \mathbf{v} = n \frac{h}{m} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (4)$$

と量子化される。

このような量子流体と古典流体の違いにも拘らず、近年の実験 [1] や数値シミュレーション [2] では、量子流体乱流でもエネルギースペクトルが古典流体乱流と同じ Kolmogorov 則 $E(k) \propto k^{-5/3}$ に従う可能性が示唆されている。古典流体と量子流体の乱流統計の共通点と相違点を調べることは、支配方程式の構造がどのように乱流統計に影響を与えるのが探る意味で興味深い。

このような背景のもと、我々は外力と散逸を付加した GP 方程式の数値シミュレーションを行った。本稿では、その予備的結果について報告する。

2 量子流体乱流の統計量

今、 $\tilde{t} = g\bar{n}t/\hbar$, $\tilde{\psi} = \psi/\bar{n}$ となる規格化を導入すると、(1) は

$$i \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{t}} = -\xi^2 \nabla^2 \tilde{\psi} - \tilde{\psi} + |\tilde{\psi}|^2 \tilde{\psi}, \quad (5)$$

となる。ただし

$$\xi := \frac{\hbar}{\sqrt{2mg\bar{n}}} \quad (6)$$

は回復長と呼ばれる長さスケールである。この規格化により、

$$\tilde{\rho} := \frac{\rho}{\bar{n}m}, \quad \tilde{\mathbf{v}} := \sqrt{\frac{m}{g\bar{n}}} \mathbf{v}, \quad (7)$$

となる。以降はこの規格化された変数、方程式のみで議論を行うので、 $\tilde{\cdot}$ は省略する。

式 (5) は、Fourier 空間では

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\mathbf{k}} &= -i\xi^2 k^2 \psi_{\mathbf{k}} + i\psi_{\mathbf{k}} - i \int dpdqdr \delta(\mathbf{k} + \mathbf{p} - \mathbf{q} - \mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}^* \psi_{\mathbf{q}} \psi_{\mathbf{r}} \\ &\quad + D_{\mathbf{k}} + F_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (8)$$

と表される。ただし $f(\mathbf{x})$ を任意の実空間の変数として、 $f_{\mathbf{k}}$ はその Fourier 変換で、

$$f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{x} f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}, \quad f(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{k} f_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (9)$$

を満たす。また、 $D_{\mathbf{k}}$ と $F_{\mathbf{k}}$ はそれぞれ元の式に新たに加えられた散逸項と外力項である。

ここで、量子流体におけるいくつかのエネルギーとそれに付随するエネルギースペクトルを定義しておく。単位質量あたりの運動エネルギー密度 E^{kin} および相互作用エネルギー密度 E^{int} は

$$E^{\text{kin}} := \frac{1}{V} \int d\mathbf{x} \xi^2 |\nabla \psi|^2, \quad E^{\text{int}} := \frac{1}{2V} \int d\mathbf{x} (\rho')^2 \quad (10)$$

で与えられる、ただし、 $\rho' := \rho - \bar{\rho}$ は密度揺らぎで、 V は流体の占める領域の体積である。今ベクトル場

$$\mathbf{w} := \frac{\sqrt{\rho}}{\sqrt{2\xi}} \mathbf{v} \quad (11)$$

を導入すると、 E^{kin} を

$$E^{\text{kin}} = E^{\text{wi}} + E^{\text{wc}} + E^{\text{q}}, \quad (12)$$

$$E^{\text{wi}} := \frac{1}{2V} \int d\mathbf{x} |\mathbf{w}^{\text{i}}|^2, \quad E^{\text{wc}} := \frac{1}{2V} \int d\mathbf{x} |\mathbf{w}^{\text{c}}|^2, \quad E^{\text{q}} := \frac{1}{V} \int d\mathbf{x} \xi^2 |\nabla \sqrt{\rho}|^2, \quad (13)$$

と3つの部分に分けることが出来る。ただし、 \mathbf{w}^{i} と \mathbf{w}^{c} は、

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}^{\text{i}} + \mathbf{w}^{\text{c}}, \quad \nabla \cdot \mathbf{w}^{\text{i}} = 0, \quad \nabla \times \mathbf{w}^{\text{c}} = 0 \quad (14)$$

を満たす \mathbf{w} の非圧縮成分と圧縮成分である。それぞれのエネルギー $E^{\text{kin}}, E^{\text{int}}, E^{\text{wi}}, E^{\text{wc}}, E^{\text{q}}$ について、それに付随するエネルギースペクトルが

$$E^{\text{kin}}(k) := \int d\mathbf{k}' \delta(k' - k) \xi^2 k'^2 |\psi_{\mathbf{k}'}|^2, \quad E^{\text{int}}(k) := \int d\mathbf{k}' \delta(k' - k) |\rho'_{\mathbf{k}'}|^2, \quad (15)$$

$$E^{\text{wi}}(k) := \frac{1}{2} \int d\mathbf{k}' \delta(k' - k) |\mathbf{w}_{\mathbf{k}'}^{\text{i}}|^2, \quad E^{\text{wc}}(k) := \frac{1}{2} \int d\mathbf{k}' \delta(k' - k) |\mathbf{w}_{\mathbf{k}'}^{\text{c}}|^2, \quad (16)$$

$$E^{\text{q}}(k) := \int d\mathbf{k}' \delta(k' - k) \xi^2 k'^2 |(\sqrt{\rho})_{\mathbf{k}'}|^2, \quad (17)$$

で与えられる。今 $E^\circ = \int_0^\infty dk E^\circ(k)$ ($\circ = \text{kin}, \text{int}, \text{wi}, \text{wc}, \text{q}$) が成り立っている。

3 シミュレーションの設定

シミュレーションは、 $(2\pi)^3$ の立方体領域で周期境界条件を課して行った。空間方向の計算にはエリアスを除去したスペクトル法を用い、時間発展は4次の Runge-Kutta 法で行った。

表 1: 数値シミュレーションのパラメタ

	N	k_{\max}	ξ	$\nu(\times 10^{-3})$	k_f	Δt	$\bar{\rho}$
RUN128	128	60	0.05	2.5	2.5	0.01	0.998
RUN256	256	120	0.025	0.625	2.5	0.01	0.999
RUN512	512	241	0.0125	0.15625	2.5	0.01	0.998

散逸項は ψ と GP 方程式では無視されている揺らぎ $\hat{\psi}' := \hat{\psi} - \psi$ との相互作用に起因し、主に高波数領域で作用すると考えられる。本研究では散逸機構の詳細には立ち入らず、簡単のため通常の粘性と同様に Laplacian による

$$D_{\mathbf{k}} = -\nu k^2 \psi_{\mathbf{k}}, \quad (18)$$

を採用した。外力は

$$F_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \alpha \psi_{\mathbf{k}} & (k < k_f) \\ 0 & (k \geq k_f) \end{cases}, \quad (19)$$

としてある波数 k_f より低波数側にのみ作用させた。ここで $\alpha (> 0)$ は各時間ステップ毎に $\bar{\rho}$ をほぼ一定に保つように決めた。

座標軸に沿った格子点数 N が 128, 256, 512 のシミュレーションを行った。以降それぞれを RUN128, RUN256, RUN512 と呼ぶ。それぞれのシミュレーションにおける基本的パラメタは表 1 に挙げられている。ここで、 k_{\max} は最大解像波数、 Δt は時間ステップである。回復長 ξ は量子流体乱流の最小スケールの目安と考えられるので、本シミュレーションでは $k_{\max} \xi \sim 3$ となるように ξ を選んだ。散逸のパラメタ ν は以下のように決定した。まず、式 (5) に $\psi = 1 + \delta\psi$ を代入して、 $\delta\psi$ についての線形解析を行うと、 $\delta\psi \propto \exp[i(\mathbf{kx} - \omega t)]$ の波の分散関係 $\omega = \pm \sqrt{(\xi^2 k^2 + 1)^2 - 1}$ が得られ、波の特徴的時間スケールは $(\xi k)^{-1}$ であることが分かる。ここで、 $k \gg \xi^{-1}$ の波数領域で散逸が支配的になる、つまり散逸の時間スケール $\nu^{-1} k^{-2}$ が波の時間スケール $(\xi k)^{-1}$ と比べて短くなる、とすると、 $\nu \sim \xi^2$ となる。本研究のシミュレーションでは、 $\nu = \xi^2$ と設定した。

4 シミュレーション結果

以下、RUN128, RUN256, RUN512 のうち、最も自由度数の大きい RUN512 についていくつかの結果を示す。

図 1 には、全エネルギー $E = E^{\text{kin}} + E^{\text{int}}$ と $E^{\text{kin}}, E^{\text{int}}, E^{\text{wi}}, E^{\text{wc}}, E^{\text{q}}$ の時間発展が示されている。 $t = 16$ では各エネルギーに変化があまりなく、統計的定常状態になっていることが期待される。全エネルギー E の約 85% が E^{int} であり、残りの約 15% の E^{kin} が

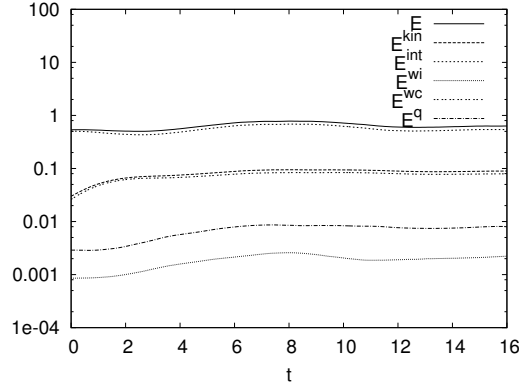


図 1: 各エネルギーの時間発展 (RUN512)

E^{wi} 、 E^{wc} 、 E^q に分けられ、それぞれが全体の 0.3%、13%、1.3% を占めている。 E^{wi} が E^{wc} の約 1/40 しかなく、この結果は E^{wi} の方が E^{wc} の約 4–5 倍ある Kobayashi and Tsubota [2] (以下 KT) による GP 方程式の数値シミュレーションの結果と著しく異なっている。

図 2 には、時刻 $t = 16$ における各エネルギースペクトル $E^{kin}(k)$ 、 $E^{int}(k)$ 、 $E^{wi}(k)$ 、 $E^{wc}(k)$ 、 $E^q(k)$ が示されている。KT では $E^{wi}(k)$ が古典流体乱流の Kolmogorov 則と同じスケールリング $\propto k^{-5/3}$ を示すと報告されているが、本シミュレーションにおいて、 $E^{wi}(k)$ のスケールリングははっきりせず、少なくともスペクトルの傾きは $k^{-5/3}$ より浅い。

一方で、本シミュレーションにおいては、 $E^{int}(k) \propto k^{-3/2}$ のスケールリングが $k \sim 7$ で観測された (図 2 左)。比較のために $\propto k^{-5/3}$ の線も図に示してあるが、スペクトルの傾きは明らかに $\propto k^{-3/2}$ の方に近い。スケールリング領域は狭いが、 $k_f = 2.5$ からも散逸の特徴的波数 $1/\xi \sim 80$ からもある程度離れており、 $E^{int}(k) \propto k^{-3/2}$ が慣性小領域のスケールリングであることが示唆される。 $E^{kin}(k)$ については $\propto k^{-4/3}$ のスケールリングに近いようである。

5 考察

本シミュレーションで E^{wi}/E^{wc} が、KT の結果に比べてかなり小さい理由の一つとして、双方のシミュレーションの外力 F_k の違いが考えられる。KT では本シミュレーションと異なり ψ とは無相関でランダムな F_k を使っている。本シミュレーションでの注入方法 (19) では、 w^i に効率的にエネルギーが与えられていない可能性がある。そのため、 w^i の成分は十分発達せず、 $E^{wi}(k)$ のスケールリングが観測されなかった可能性がある。

一方で、 $E^{int}(k) \propto k^{-3/2}$ については、 $|\rho'| \ll \bar{\rho}$ を基にした弱乱流理論の結果と整合している [3]。しかし、本シミュレーションにおいて $\bar{\rho}$ と ρ' はほぼ同じオーダーの量である。

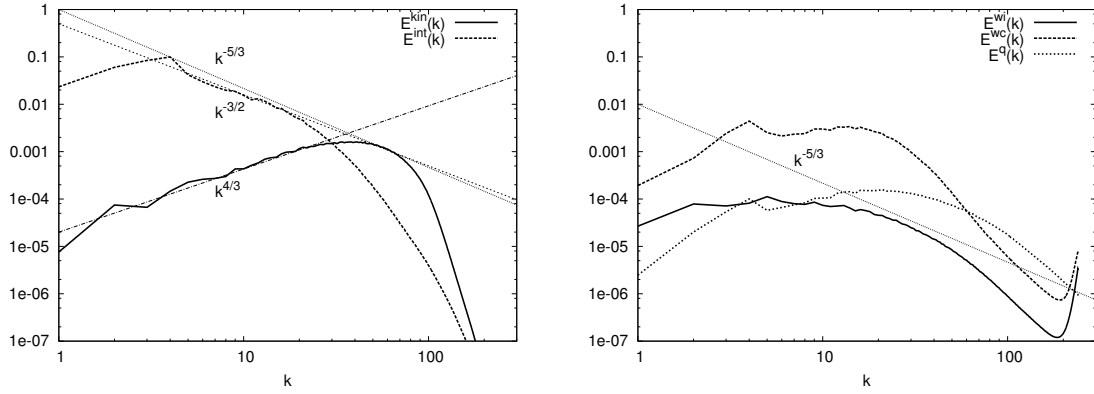


図 2: RUN512、 $t=16$ での各エネルギースペクトル。(左) $E^{\text{kin}}(k)$ 、 $E^{\text{int}}(k)$ 。(右) $E^{\text{wi}}(k)$ 、 $E^{\text{wc}}(k)$ 、 $E^{\text{q}}(k)$ 。

本シミュレーションの GP 方程式の乱流が、弱乱流理論の適用範囲であるかどうかは、注意深く調べる必要がある。 $E^{\text{kin}}(k) \propto k^{4/3}$ については、今のところこれを説明する方法は分からない。

より詳しい解析と考察は、今後の課題である。

参考文献

- [1] J. Maurer and P. Tabeling, *Local investigation of superfluid turbulence*, Europhys. Lett. **43**, 29 – 34, (1989).
- [2] M. Kobayashi and M. Tsubota, *Kolmogorov spectrum of quantum turbulence*, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 3248 – 3258, (2005).
- [3] S. Dyachenko, A.C. Newell, A. Pushkarev, and V.E. Zakharov, *Optical turbulence: weak turbulence, condensates and collapsing filaments in the nonlinear Schrödinger equation*, Physica D **74**, 96 – 160, (1992).