

非線形 Schrödinger 方程式に従う乱流の 統計理論に向けて

Towards the statistical theory of turbulence obeying non-linear Schrödinger equation

吉田 恭 (筑波大学数理物質系)

Kyo Yoshida

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

概要

水や空気など Navier-Stokes 方程式でモデル化される通常流体の他に、低温の液体ヘリウムの超流動相の超流動成分や Bose-Einstein 凝縮体 (BEC) など非線形 Schrödinger 方程式でモデル化される量子流体も乱流的振舞いを示す。非線形 Schrödinger 方程式に従う乱流の数値シミュレーションによる研究と完結近似解析について考察する。

1 NS 方程式に従う乱流

水や空気などの通常の流体の運動は Navier-Stokes (NS) 方程式で記述される。簡単のため流体は非圧縮、つまり $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ は速度場として

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1)$$

とする。非圧縮性流体の NS 方程式は

$$\frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = -\nabla p(\mathbf{x}, t) + \nu \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t), \quad (2)$$

となる。ただし、 $p(\mathbf{x}, t)$ は圧力場、 ν は動粘性係数、 $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ は外力場である。任意関数 $g(\mathbf{x})$ について Fourier 変換 $g_{\mathbf{k}}$ を

$$g_{\mathbf{k}} = \int d^3 \mathbf{x} \, g(\mathbf{x}) e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}, \quad (3)$$

$$g(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \, g_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (4)$$

で導入すれば、波数空間（Fourier 空間）での Navier-Stokes 方程式は

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \nu k^2\right) u_{\mathbf{k}}^i(t) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{p} - \mathbf{q}) M_{\mathbf{k}}^{iab} u_{\mathbf{p}}^a(t) u_{\mathbf{q}}^b(t) + f_{\mathbf{k}}^i(t) \quad (5)$$

$$M_{\mathbf{k}}^{iab} = -\frac{i}{2} (k_a D_{\mathbf{k}}^{ib} + k_b D_{\mathbf{k}}^{ia}), \quad D_{\mathbf{k}}^{ab} = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}. \quad (6)$$

となる。これを象徴的に

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \nu L\right) u = M u u + f \quad (7)$$

と書くこともできる。

乱流の力学系としての特徴に (i) 大自由度である、(ii) 強い非線形系である、(iii) 非平衡系である、ことが挙げられる。(i) について乱流中には様々なスケールの渦が存在し、そのスケールは最大のもので流体の占める系の大きさから最小のもので粘性が支配的となる Kolmogorov 長にまでおよび、そのスケール比は Reynolds 数 $Re = UL/\nu$ (U は特徴的速度、 L は系の特徴的長さ) を用いて $Re^{3/4}$ のオーダーと見積られる。従って自由度数は $Re^{9/4}$ と見積られ、例えば大気乱流で $U = 10[\text{m/s}]$, $L = 10^3[\text{m}]$, $\nu = 10^5[\text{m}^2/\text{s}]$, とすれば $Re = 10^9$ で自由度数は約 10^{20} となる。(ii) はこれら異なるスケールの渦（波数空間の言葉に換言すれば、異なる波数のモード）が強く相互作用するということを意味する。強くとは非線形項が支配的でありそれを摂動項の様に扱えないということだ。(ii) 故に相互作用が強い系でも、(i) でかつ熱力学的に平衡状態にあれば、平衡系の統計力学を適用することができる。しかし乱流においては外力項と粘性項があるため、系に対してマクロにエネルギーの流入と流出があり著しく非平衡な状態にあり、平衡系の統計力学でも扱えない。乱流中では、主に大きなスケールで外力によりエネルギーが注入され、相互作用でそのエネルギーが小さいスケールにカスケードして、その小さいスケールにて粘性により散逸する。この大きいスケールから小さいスケールへのエネルギーの流れが本質的で、線形応答のように熱平衡状態近傍で微小な流れを摂動的に扱うわけにもいかない。

実際、乱流系の統計量をみると平衡系統計力学で表されるものとは大きく異っている。波数が $[k, k + dk]$ の範囲にあるモードのエネルギーの総和はエネルギースペクトル $E(k)$ を用いて $E(k)dk$ で表される。古典系の熱平衡状態においては平均として各自由度に等しいエネルギーが分配されるため、 $E(k)$ は波数が k となるモードの数に比例、即ち 3次元系ならば半径 k の球面の面積に比例して、 $E(k) \propto k^2$ となる。しかし乱流中ではエネルギースペクトルは Kolmogorov 則 $E(k) \propto k^{-5/3}$ にほぼ従うことが、実験、観測そして数値シミュレーションにおいて検証されている。また熱平衡状態では各モードの揺らぎは正規分布に従う。乱流では 2 点速度差 $\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ が大雑把に波数 $k \sim |\mathbf{r}|^{-1}$ のモードに対応するが、この 2 点速度差の確率密度分布の形は $|\mathbf{r}|$ に依存しており、一般に $|\mathbf{r}|$ が小さくなるほど正規分布からずれて裾をひくことが知られている。

熱平衡系については、マクロな現象論として熱力学があり、その熱力学とミクロな力学系としての性質つまりは Hamiltonian をつなぐ体系として平衡系統計力学が確立してい

る。一方で、乱流については現象論も力学系の方程式に基く理論も未確立である。つまり、熱力学における自由エネルギーのように系の状態を完全に特徴づける物理量は何なのか、またその量がNS方程式からどのように導かれるのか、はよく分かっていない。現象論として、Kolmogorovの理論[1]によりエネルギー散逸率 ϵ が重要なことは分かっているが、他にどのような物理量が必要かは不明である。また、次節で紹介するようにNS方程式から完結近似とよばれる方法でエネルギースペクトルなどの統計量を導かれてはいるが、近似の妥当性は明らかでない。

2 NS方程式に従う乱流の完結近似

NS方程式に基いて乱流の統計量を手法として完結近似がある。(7)の両辺のアンサンブル平均をとると

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \nu L\right) \langle u \rangle = \lambda M \langle uu \rangle + \langle f \rangle \quad (8)$$

を得る。ただし、 $\lambda = 1$ を非線形項についての展開の次数の整理のために導入した。この式は1次モーメント $\langle u \rangle$ を求めるのに2次モーメントが必要であることを意味する。2次モーメントを得るため(7)の両辺に u をかけてからアンサンブル平均をとると、

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \nu L\right) \langle uu \rangle = \lambda M \langle uuu \rangle + \langle fu \rangle \quad (9)$$

を得る、ただし各項にかかる係数は無視した。この式から2次モーメントを求めるために3次モーメントが必要であることが分かる。同様に n 次モーメントを求めるためには $n+1$ 次モーメントが必要で、有限個の式ではモーメントについて閉じた式が得られないことが分かる。完結近似とは高次モーメントをそれより低次のモーメントの関数として近似して、低次モーメントについて閉じた式を得ることである。具体的には、2次モーメントまでで閉じた式を得る。

完結近似にも何通りがあり、それはどのような統計量で式を閉じるかで決まる。例えば B という統計量を A という統計量の関数として表すと決めるとする。まず A と B を λ で形式的に

$$A = A^{(0)} + \lambda \mathcal{A}^{(1)}[A^{(0)}] + \lambda^2 \mathcal{A}^{(2)}[A^{(0)}] + O(\lambda^3), \quad (10)$$

$$B = \mathcal{B}^{(0)}[A^{(0)}] + \lambda \mathcal{B}^{(1)}[A^{(0)}] + \lambda^2 \mathcal{B}^{(2)}[A^{(0)}] + O(\lambda^3) \quad (11)$$

のように展開する。各展開項は $A^{(0)}$ の関数として表されている。ここで $A^{(0)}$ を A の関数として

$$A^{(0)} = A + \lambda \mathcal{A}^{[1]}[A] + \lambda^2 \mathcal{A}^{[2]}[A] + O(\lambda^3) \quad (12)$$

のようにひっくり返し展開して、(11) に (12) を代入すれば

$$B = \mathcal{B}^{[0]}[A] + \lambda \mathcal{B}^{[1]}[A] + \lambda^2 \mathcal{B}^{[2]}[A] + O(\lambda^3) \quad (13)$$

のように B を A で展開できる。これで展開を非自明な次数で展開を打ち切ればよい。

例えば、

$$\lambda M\langle uuu \rangle = \lambda^2 \mathcal{F}[Q(t, t)], \quad (14)$$

$$Q(t, s) := \langle u(t)u(s) \rangle, \quad (15)$$

のように同時刻 2 次モーメントで式を閉じると、準正規近似 (Quasi Normal Approximation, QNA) [2] を得る。

$$\lambda M\langle uuu \rangle = \lambda^2 \mathcal{F}[Q(t, s), G(t, s)], \quad (16)$$

$$G(t, s) := \langle \delta u(t) / \delta f(s) \rangle \quad (17)$$

のように 2 時刻 2 次モーメントと時刻 s に与えられた摂動 $f(s)$ に対する u の時刻 t での応答を表す応答関数 $G(t, s)$ で式を閉じると、直接相互作用近似 (Direct Interaction Approximation, DIA) [3] を得る。通常 Euler 的な速度場 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ に対して、Lagrange 速度 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, s|t)$ は時刻 s に $\mathbf{x}$ を通過した流体粒子の時刻 t における速度で定義される。Lagrange 速度に関する 2 点相関 $Q^L(t, s)$ および応答関数 $G^L(t, s)$ で

$$M\langle uuu \rangle = \mathcal{F}[Q^L(t, s), G^L(t, s)], \quad (18)$$

のように式を閉じると、Abridged Lagrangian history direct interaction approximation (ALHDIA) [4] や Lagrange 繰り込み近似 (LRA) [5] などを得る。Lagrange 速度は 2 つの時刻の引数を持つため、 $Q^L(t, s)$ と $G^L(t, s)$ の定義にはいくつかの選択肢があり、ALHDIA と LRA の違いはその選択肢の違いである。

完結近似はその方法により異なる結果が得られることが知られている。従って妥当な結果を得るためには、適切な方法、つまり式を閉じるための適切な変数を選ぶ必要がある。NS 乱流の完結近似では、ALHDIA や LRA では Kolmogorov のエネルギースペクトル $E(k) = K_o \epsilon^{2/3} k^{-5/3}$ (ϵ はエネルギー散逸率、 K_o は普遍定数) が得られるが、QNA や DIA では得られない。

3 なぜ非線形 Schrödinger 方程式の乱流か？

ここで、乱流の統計理論について更に理解を深めるためには、NS 方程式以外の乱流的なモデル系があると望ましい、と思ひ当たる。ここで乱流的なモデル系というのは、1 節

の (i)–(iii) を満す系で特にスケール間のエネルギーカスケードがある系が該当する、と考えられる。このような系には共通の性質があって、共通の理論体系で扱える可能性がある。平衡系の統計力学では、様々な Hamiltonian の系について、それぞれの Hamiltonian から所定の手続きで熱力学的に重要な量である自由エネルギーをそれぞれ求めることができる。同様に、妥当な乱流の統計理論であればその NS 方程式から統計量を求める手続きが、他の乱流的なモデル系についても適用できるべきであろう。このように乱流統計理論の試験場として、NS 方程式以外の方程式に従う乱流について調べるのは意味があると思われる。

そのようなモデル方程式の例の一つとして考えられるのが、非線形 Schrödinger (non-Linear Schrödinger, NLS) 方程式である。ただし、NLS 方程式自体は Hamilton 系であるので、(iii) の非平衡状態を実現するために外力項と散逸項を付け加える必要がある。方程式の具体系は次節で与える。この方程式でモデル化される物理系は光学系や量子流体系などに求められるが、特に後者について次節で触れる。

4 量子流体の基礎方程式

NLS 方程式は、低温の液体ヘリウムの超流動相や Bose-Einstein 凝縮体の力学の適切な近似の下でのモデルになっている。量子流体の文脈では Gross-Pitaevskii (GP) 方程式とも呼ばれる。NLS 方程式または GP 方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \left(\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + \mu \right) \psi + g|\psi|^2 \psi \quad (19)$$

で与えられる。ここで ψ は boson 場 $\hat{\psi}$ の量子論的期待値 $\psi := \langle \hat{\psi} \rangle$ 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、(19) は

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p_q \quad (21)$$

ただし、

$$\mathbf{v} := \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi, \quad (22)$$

$$p_q := -\frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} \quad (23)$$

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、(20) と (21) 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、NS 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、 $\varphi(\text{mod } 2\pi)$ の一価性から、循環は

$$\int_C d\mathbf{l} \cdot \mathbf{v} = n \frac{h}{m} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (24)$$

と量子化される。

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、(19) は

$$i \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{t}} = -\xi^2 \nabla^2 \tilde{\psi} - \tilde{\psi} + |\tilde{\psi}|^2 \tilde{\psi}, \quad (25)$$

となる。ただし

$$\xi := \frac{\hbar}{\sqrt{2mg\bar{n}}} \quad (26)$$

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、

$$\tilde{\rho} := \frac{\rho}{\bar{n}m}, \quad \tilde{\mathbf{v}} := \sqrt{\frac{m}{g\bar{n}}} \mathbf{v}, \quad (27)$$

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 (25) は、波数空間では

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\mathbf{k}}(t) = & -i\xi^2 k^2 \psi_{\mathbf{k}}(t) + i\psi_{\mathbf{k}}(t) \\ & - i \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d^3 \mathbf{r}}{(2\pi)^3} (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{k} + \mathbf{p} - \mathbf{q} - \mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}^*(t) \psi_{\mathbf{q}}(t) \psi_{\mathbf{r}}(t) \\ & + D_{\mathbf{k}}(t) + F_{\mathbf{k}}(t), \end{aligned} \quad (28)$$

と表される。ここで $F_{\mathbf{k}}$ は外力項で $D_{\mathbf{k}}$ は散逸項である。外力は通常の流体と同様に大きいスケールで注入されると考えられる。 ψ は揺らぎ $\hat{\psi}' = \hat{\psi} - \psi$ と相互作用があり、この揺らぎへとエネルギーが抜けるとして $D_{\mathbf{k}}$ はそれをモデル化していると考えられる。

5 NLS 方程式の乱流の数値シミュレーション

Mauer & Tabeling[6] の液体ヘリウムの乱流の実験において、常流動相で観測された Kolmogorov のエネルギースペクトルと整合するスペクトルのベキ則が、液体を低温にし

た超流動相でも観測されている。これは、超流動相の超流動成分（量子流体）の乱流も乱流的な性質を有している可能性を示唆している。超流動相には常流動成分もあるので、超流動成分のみで乱流的性質が現れるかは自明ではない。

NLS 方程式の乱流の状態の探求を考慮して方程式に外力項と散逸項を付け加えて行われた数値シミュレーションが、Kobayashi & Tsubota[7]、Yoshida & Arimitsu[8]、Proment, Nazarenko & Onorato[9] 等によって行われている。これらのシミュレーションではそれぞれ外力項 F_k と散逸項 D_k の形が異なっている。

NS 方程式の乱流の場合、一般的にエネルギーは外力により大スケール（低波数）で注入され、小スケール（高波数）で散逸される。エネルギー注入スケールと散逸スケールの中間スケール領域は慣性領域と呼ばれ、エネルギーはこの領域では殆ど注入および散逸無しで大スケールから小スケールへと流れる。Kolmogorov の理論における普遍性の仮説によれば、この慣性領域における統計量の性質は外力や散逸の詳細には依存せず、大スケールから小スケールへのエネルギー流束（定常乱流の場合はこれはエネルギー散逸率に等しい）にのみ依存する。NS 方程式の乱流では、この普遍性の仮説は少なくともエネルギースペクトルなど 2 次の統計量については、実験、数値シミュレーションにおいて概ね支持されている。

一方で NLS 方程式の乱流について、[7, 8, 9] の数値シミュレーションのスペクトルなどの結果はそれぞれ異なっている。例えば、 $\langle \cdot \rangle$ をアンサンブル平均として

$$\langle \psi_k \psi_{k'}^* \rangle = Q_k (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (29)$$

$$E^\psi(k) = \int \frac{d^3 \mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \delta(|\mathbf{k}'| - k) Q_{k'} \quad (30)$$

で表される相関スペクトル $E^\psi(k)$ について [8] においては $E^\psi(k) \propto k^{-2/3}$, [9] においては外力と散逸の状況次第で $E^\psi(k) \propto k^{-1}, k^{-2}$ の双方が観測されている。[7] では、 $E^\psi(k)$ は調べられておらず、 $\sqrt{\rho}v$ の非圧縮成分に関するスペクトル $E^v(k)$ が求められ、それが Kolmogorov 理論のベキ則 $E^v(k) \propto k^{-5/3}$ に近いことが示されている。

これらの結果の解釈として、NLS 方程式の乱流には普遍性がないという可能性もあるし、または、数値シミュレーションの自由度（格子点数 512^3 程度）が少なく、外力注入スケールと散逸スケールの分離が不十分で普遍性を示す慣性領域が殆ど存在していないという可能性もある。数値シミュレーションの立場から NLS 方程式の乱流に普遍性があるかどうかの調べるには、更に自由度数の大きいシミュレーションで複数の外力、散逸機構を試してみる必要があるだろう。

6 NLS 方程式に従う乱流の完結近似

NS 乱流の完結近似のところでみたように、完結近似の結果はどのような変数で式を閉じるかに依存する。よって NLS 方程式の乱流についても、どのような変数で式を閉じるのかを考える必要がある。 ψ の統計量について式を閉じるのか、または v と ρ についての統計量について式を閉じるのか。または、 v に乗って動く流体粒子を導入して何らかの Lagrange 変数の統計量について式を閉じるのか。

もっともナイーヴな方法は、 ψ の統計量について式を閉じることである。具体的には

$$\langle \psi_{\mathbf{k}}(t) \psi_{\mathbf{k}'}^*(t') \rangle := Q_{\mathbf{k}}(t, t') (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (31)$$

$$\left\langle \frac{\delta \psi_{\mathbf{k}}(t)}{\delta f_{\mathbf{k}'}(t')} \right\rangle := G_{\mathbf{k}}(t, t') \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (32)$$

で定義される相関関数 $Q_{\mathbf{k}}(t, t')$ と応答関数 $G_{\mathbf{k}}(t, t')$ について閉じた式を求める。予備的な計算では、この方法の完結近似では [9] の結果と整合する結果が得られそうである。

7 まとめ

乱流の統計理論を確立するために NS 方程式に従う乱流以外の乱流を調べる必要性を論じた。その例として量子流体の運動を記述する NLS 方程式をあげ、その数値シミュレーションによる研究と完結近似解析の研究を紹介した。今後、数値シミュレーションや完結近似解析による NLS 方程式の乱流の研究が進展してその統計的性質が明らかになれば、その結果を NS 方程式の結果と比較することで、非平衡統計力学の一つのクラスとしての乱流の知見が深まると期待される。

参考文献

- [1] A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 30:301–305, 1941. (reprinted in *Proc. R. Soc. Lond. A* 434:9-13).
- [2] I. Proudman and W.H. Reid. On the decay of a normally distributed and homogeneous turbulent velocity field. *Phil. Trans. A*, 245:163–189, 1954.
- [3] R. H. Kraichnan. The structure of isotropic turbulence at very high Reynolds numbers. *J. Fluid Mech.*, 5:497–543, 1959.

- [4] R. H. Kraichnan. Lagrangian-history closure approximation for turbulence. *Phys. Fluids*, 8:575–598, 1965.
- [5] Y. Kaneda. Renormalized expansions in the theory of turbulence with the use of the Lagrangian position function. *J. Fluid Mech.*, 107:131–145, 1981.
- [6] J. Maurer and P. Tabeling. Local investigation of superfluid turbulence. *Europhys. Lett.*, 43:29–34, 1998.
- [7] M. Kobayashi and M. Tsubota. Kolmogorov spectrum of quantum turbulence. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 74:3248 – 3258, 2005.
- [8] K. Yoshida and T. Arimitsu. Energy spectra in quantum fluid turbulence. *J. Low Temp. Phys.*, 145(1-4):219 – 230, 2006.
- [9] D. Proment, S. Nazarenko, and M. Onorato. Quantum turbulence cascades in the gross-pitaevskii model. *Phys. Rev. A*, 80:051603(R), 2009.