

絶対温度 < 0 にある 2 次元点渦系の特性の 力学的理解

八柳祐一*
静大教育

YUICHI YATSUYANAGI
FACULTY OF EDUCATION, SHIZUOKA UNIVERSITY

佐野光貞
京大人環

MITSUSADA M. SANO
GRADUATE SCHOOL OF HUMAN AND ENVIRONMENTAL STUDIES, KYOTO UNIVERSITY

戎崎俊一
理研

TOSHIKAZU EBISUZAKI
RIKEN

1 イントロダクション

Onsager は、台風や木星の大赤斑などに見られる巨大渦構造形成に興味を持ち、2 次元点渦系について、

- 有限領域に閉じ込められた 2 次元点渦系では、統計力学的に定義された絶対温度 T が負となる状態が現れ得ること
- $T > 0$ では異符号の点渦同士が接近したがるのに対して、 $T < 0$ では同符号の点渦同士が接近し、より大きな渦塊を形成する傾向があること

*eyyatsu@ipc.shizuoka.ac.jp

を提唱した [1]。温度 T が負となるのは、系の総相空間体積 (状態数) が有限であることに由来する。Onsager が予想した負温度状態について、その後、様々な方面から研究が進められ、例えば、軸対称平衡解 [2] や、より一般的な平衡分布を記述する sinh-Poisson 方程式 [3] が解析的に求められた。また数値的にも、状態数の直接計算 [4] や平衡分布の探索 [5] などが行われてきた。

点渦系の計算では、速度場を決定するために Biot-Savart 積分を計算する必要がある。Biot-Savart 積分は、点渦数の 2 乗に比例する時間計算量を有するため、いわゆる「重たい」計算となる。よって、多点渦系のシミュレーションを行うためには、速い計算機を用いたり、速い計算アルゴリズムを用いるなどの工夫が必要となる。我々は、速い計算機を用いる方向で解決を図るべく、専用計算機を投入した結果、Vortex In Cell 法での粗視化などの近似を排除した手法を採用しつつ、既存の結果と比較して真に大規模な計算を可能とした [6]。

以下では、研究対象とした点渦系の説明、および Onsager が提唱した概念「負温度」の紹介 (第 2 章) を行うとともに、専用計算機を用いた点渦シミュレーションの概要 (第 3 章)、そして、シミュレーションから得られた負温度点渦系の運動や、 k -スペクトルに関する特徴 (第 4 章) について解説する。

2 負温度点渦系

N 個の正の点渦と、 N 個の負の点渦が、半径 R の円形境界内に閉じ込められている 2 次元系を考える。各点渦の循環は、 Γ_0 および $-\Gamma_0$ で与えられる定数である。 i 番目の点渦の位置ベクトルを $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ で表すと、各点渦の運動方程式は、

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = -\frac{1}{2\pi} \sum_{j \neq i}^N \Gamma_j \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \times \hat{\mathbf{z}}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} + \frac{1}{2\pi} \sum_j^N \Gamma_j \frac{(\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}}_j) \times \hat{\mathbf{z}}}{|\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}}_j|^2}. \quad (1)$$

で与えられる。ただし、 $\hat{\mathbf{z}}$ は、 z 方向の単位ベクトルである。境界からの寄与は、 $\bar{\mathbf{r}}_i = R^2 \mathbf{r}_i / |\mathbf{r}_i|^2$ に置かれた鏡像渦により表現される。系の保存量は、エネルギー H と慣性モーメント I である。

$$H = -\frac{1}{4\pi} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \Gamma_i \Gamma_j \ln |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| + \frac{1}{4\pi} \sum_i^N \sum_j^N \Gamma_i \Gamma_j \ln |\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}}_j| - \frac{1}{4\pi} \sum_i^N \sum_j^N \Gamma_i \Gamma_j \ln \frac{R}{|\mathbf{r}_j|}, \quad (2)$$

$$I = \sum_i^N \Gamma_i |\mathbf{r}_i|^2 \quad (3)$$

なお、(2) 式の右辺第 3 項は、境界での流れ関数の値をゼロにするために導入した。

次に負温度について。系の逆温度 β は、統計力学的に

$$\beta = \frac{dS}{dE} = \frac{d \log W(E, I)}{dE} \quad (4)$$

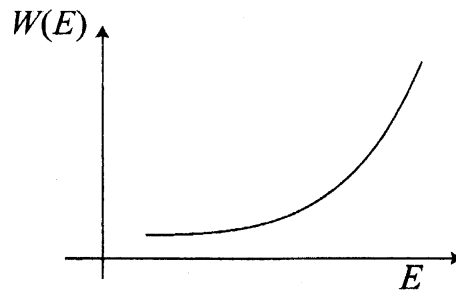


図 1: 状態密度とエネルギーの関係

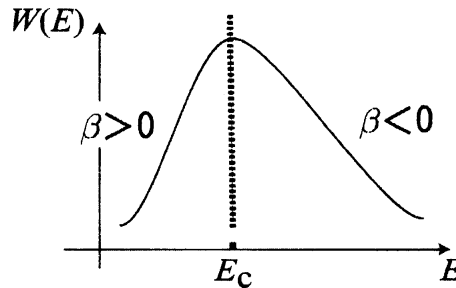


図 2: 負温度状態がある場合の状態密度とエネルギーの関係

と定義される。ここで、 $W(E, I)$ は状態密度、 E はエネルギーである。通常、状態密度はエネルギーの上昇とともに単調増加するため β が負となることはない (図 1)。ここで、全相空間体積が有限という条件を与える。すると、 $E \rightarrow \infty$ の極限で $W \rightarrow 0$ とならなければならない。すなわち、状態密度は、ある E_0 でピークとなり、 $E > E_0$ で $d \ln W / dE < 0$ となる (図 2)。ただし、状態密度が最大となるエネルギーは 1 つと仮定した。このような系では、 $E > E_0$ において、系の温度は負となる。エネルギーが上がるほど状態数が少なくなるような系、例えば、エネルギーが最大となる唯一無二の状態が存在するような系には、負温度状態が現れる。

上記で説明した負温度状態が、有限領域に閉じ込められた点渦系に現れうることを初めて指摘したのは Onsager である [1]。点渦系の運動方程式を、点渦系のハミルトニアンを用いて表すと、

$$\Gamma_i \frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial y_i}, \quad (5)$$

$$\Gamma_i \frac{dy_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \quad (6)$$

となる。ここで、点渦系が閉じ込められている領域が面積 A の領域に限定されたとする。いわゆるハミルトン方程式との類推から、点渦系の相空間は配位空間と一致する。すな

わち,

$$d\Omega = dx_1 dy_1 \cdots dx_{2N} dy_{2N} \quad (7)$$

より, 相空間体積は,

$$\int d\Omega = \left(\int dx dy \right)^{2N} = A^{2N} \quad (8)$$

となり, 確かに有限である。すると, ある有限領域に閉じ込められた点渦系は, 相空間体積が有限, つまり全状態数は有限となり, 前段落で述べた負温度が現れうることがわかる。

3 専用計算機を用いた高速化

前章で述べた負温度という概念は, 統計力学で定義される温度が負となる状態であり, (熱) 力学的に運動エネルギーから定義される温度が負となる訳ではない。我々は, 統計力学的温度が負となる状態が点渦系で実現された場合, その負温度性が (熱) 力学的にどのように特徴づけられるか, という点に興味を持ち負温度点渦系のシミュレーション研究を始めるに至った。

点渦系の計算では, 速度場を決定するために Biot-Savart 積分 (1) 式を計算する必要がある。(1) 式を見るとわかるように, ある 1 点渦の速度を決定するために N 個の加算が必要となるため, 全体としては点渦数 N の 2 乗に比例する時間計算量が必要となる。これを, できるだけ速く計算するためには,

- Vortex-In-Cell(VIC) 法などの近似手法を導入する
- PC クラスタを作る / 買う
- スーパーコンピュータを使う

などの方法が考えられるが, 2次元点渦系について VIC 法を援用したシミュレーションは既に何例もあった (例えば, [7] など) ので面白みに欠けるという点と他人のジョブを気にすることなく, できるかぎり on hand な環境でシミュレーションを行いたかったというわがままな理由により, 我々は上記の 3 手法とは別の「分子動力学専用計算機 MDGRAPE-2 を使う」手法を選んだ。

分子動力学専用計算機 MDGRAPE-2 は, もともと分子動力学シミュレーションを高速化するために開発された計算機であり, 2 粒子間の距離の関数として与えられるあらゆる力, たとえばクーロン力やファンデルワールス力などを計算することができる [8]。距離の関数の定義は, ユーザが自由に行うことができるので, 別の見方をすれば, グリーン関数を自由に選べるポアソン方程式のソルバーである。シミュレーションコードからは, 例えばクーロン多体系であれば, 粒子群の電荷と座標を引数として渡すと, 各粒子位置での電場を計算してくれるサブルーチンのように見える。我々のシミュレーションでは, 運動方程式 (1) の右辺の計算に, MDGRAPE-2 を使用した。

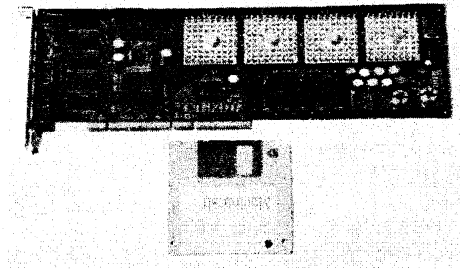


図 3: MDGRAPE-2

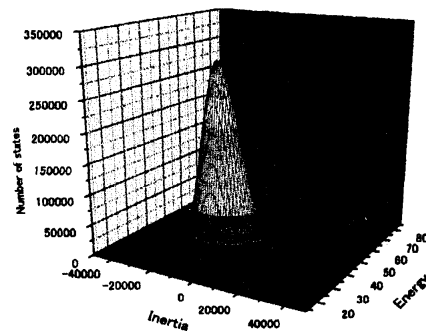


図 4: E , I をパラメタとした状態密度のプロット

4 温度をパラメタとした点渦系の特徴付け

4.1 状態密度

対象とする点渦系に負温度状態があり得るか否かを調べるために、系の保存量であるエネルギー E と慣性モーメント I をパラメタとして、ミクロカノニカル統計に従ったランダムサンプリングを行った。すなわち、 N 個の正点渦、および N 個の負点渦をランダムに円形境界内に配置し、その E , I を求め、度数分布を作成した。ここでの点渦数は、鏡像点渦を含めて $6724 \times 2 = 13448$ 個 ($N = 3362$) である。結果を、図 4, 5 に示す。

図 4 では、正の点渦と負の点渦の個数が等しいので、 $I = 0$ に関して対称的となる。また、ピークとなるエネルギーを求めると、 $E_0 = 29.1$ となった。つまり、この系は、 $E > 29.1$ で温度が負となることがわかった。この値は、粒子数などに依存して変化し、粒子数を増やすと $E = 0$ に近づきつつ、ピークが鋭くなる傾向があることもわかった [6]。

4.2 時間漸近的平衡分布

次に、系の温度をパラメタとした平衡分布の分類を行った。点渦系の初期配置を決めるとエネルギー、すなわち温度が決まる。今、考えている点渦系は、エネルギー保存系なの

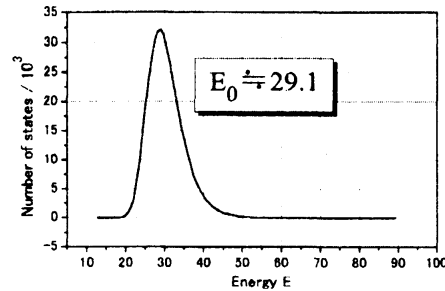


図 5: $I = 0$ の面を切り取った状態密度のプロット

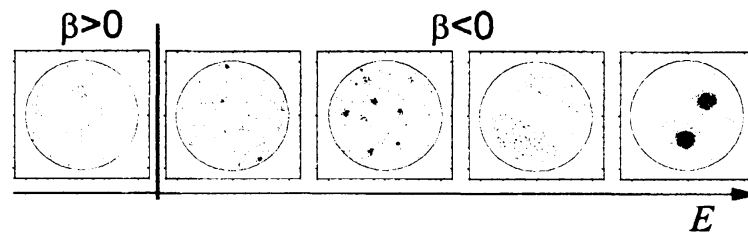


図 6: 時間漸近的に得た平衡状態分布をエネルギー別にプロットしたもの。左から右に行くに従ってエネルギーが上がる。エネルギーが大きい側の分布に見られる二つの渦塊は、右上が正、左下が負の点渦で構成されている。

で、様々な温度領域の初期配置を用意し、それぞれ長時間に渡り時間発展を行うことにより、様々な温度での平衡分布を時間漸近的に得ることができる。結果を、図 6 に示す。

縦線が記入してある位置が、 $E = E_0$ に対応する。これよりも左は低エネルギー側 ($T > 0$)、右は高エネルギー側 ($T < 0$) である。この図より、温度が正の状態では、正負点渦は円形境界内に一様に分布するのに対して、負の状態では同符号点渦で小さい渦塊を形成し始め、よりエネルギーが高い状態では正負それぞれ一つずつの大きな渦塊を形成することがわかる。さらにエネルギーが高くなると、渦塊はより凝集する。この状態を突き詰めると、ある 1 点に正の全点渦、別のある 1 点に負の全点渦が凝集した状態となり、これがこの系での唯一無二の「最高エネルギー状態」となる。これは、系が負温度状態を有することの根拠でもある。

4.3 2体相関

ここでの 2 体相関とは、配位空間上での点渦間距離の分布のことで、ある点渦を基準とした他の点渦の存在確率を、点渦間の距離をパラメタとしてプロットしたものである。結果を、図 7 に示す。グラフの中には 3 本の線が記入されており、それぞれ、全点渦対全点渦、正の点渦対正の点渦、正の点渦対負の点渦に関する確率分布を表す。負温度の場合、

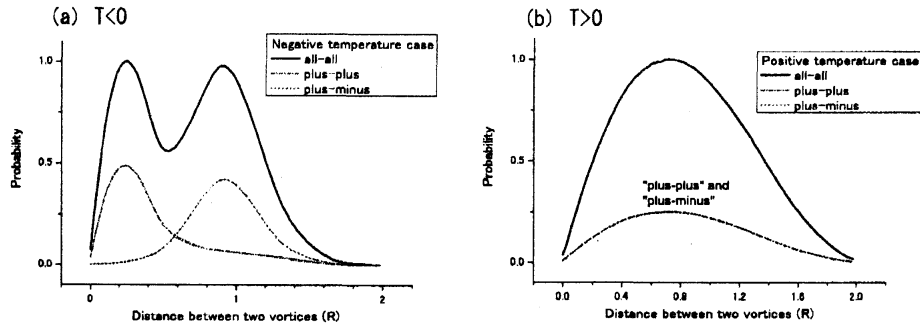


図 7: (a) 負温度の場合と (b) 正温度の場合の 2 体相関。

左側のピークは同符号の渦塊，右側のピークは反対符号の渦塊に対応する。一方，正温度の場合，正の点渦対正の点渦，正の点渦対負の点渦のグラフが重なって 1 本になっており，どちらの符号の点渦から見ても分布は同じ，すなわち一様であることを表している。

4.4 k スペクトル

次に，波数をパラメタにしたエネルギースペクトル (k スペクトル) について述べる。円形境界を有する点渦系のエネルギースペクトルは，解析的に求められている [9, 10]。

$$\begin{aligned}
 E(k) = & \frac{1}{4\pi k} \sum_i^N \Gamma_i^2 + \frac{1}{4\pi k} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \Gamma_i \Gamma_j J_0(k|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \\
 & - \frac{1}{2\pi k} \sum_i^N \sum_j^N \Gamma_i \Gamma_j \sum_{\ell=0}^{\infty} \epsilon_{\ell} \left(\frac{|\mathbf{r}_j|}{R} \right)^{\ell} J_{\ell}(kR) J_{\ell}(k|\mathbf{r}_i|) \cos(\ell(\phi_i - \phi_j)) \\
 & + \frac{1}{2\pi k} \sum_i^N \sum_j^N \Gamma_i \Gamma_j \sum_{\ell=0}^{\infty} \epsilon_{\ell} \left(\frac{|\mathbf{r}_j|}{R} \right)^{\ell} J_{\ell}^2(kR) \cos(\ell(\phi_i - \phi_j)). \quad (9)
 \end{aligned}$$

この式は，第 1, 2 項が Novikov によって求められた境界無しの場合の表式で，それに吉田らが求めた第 3, 4 項が境界の効果として加わった形になっている。この式を様々なエネルギーの平衡分布に適用し，エネルギースペクトルを求めた。結果を，図 8 に示す。この図から，エネルギースペクトルの中波数領域に，温度依存性が表れることが読み取れる。温度をパラメタにして，中波数領域の傾きをプロットしたものを図 9 に示す。低エネルギー側では比較的綺麗な温度依存性が見えているが，高エネルギー側には，温度依存性が見えずユニバーサルに見える部分がある。ただし，高エネルギー側で時間発展シミュレーションの精度が足りていない可能性もあり，現在，この部分について，検証を進めている。

(9) 式において，正の点渦と負の点渦が一様に分布していると仮定すると，第 1 項の寄与のみが残り，ベキは -1 となる。図 8 の下側の 2 本の線は，正温度に対応したものであり，点渦群は一様に分布しているはずなので，ベキは -1 になると予想される。しかし，傾き

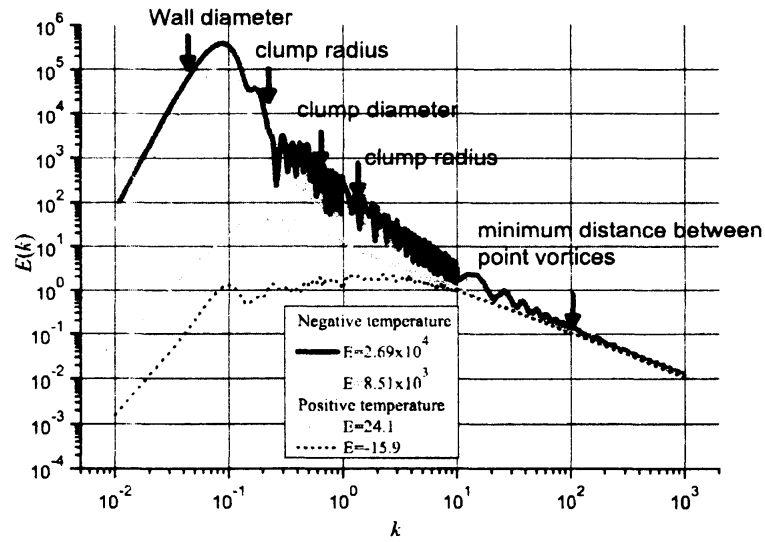


図 8: エネルギー (温度) をパラメタとしたスペクトルの分類。中波数領域の傾きに温度依存性が表れる。

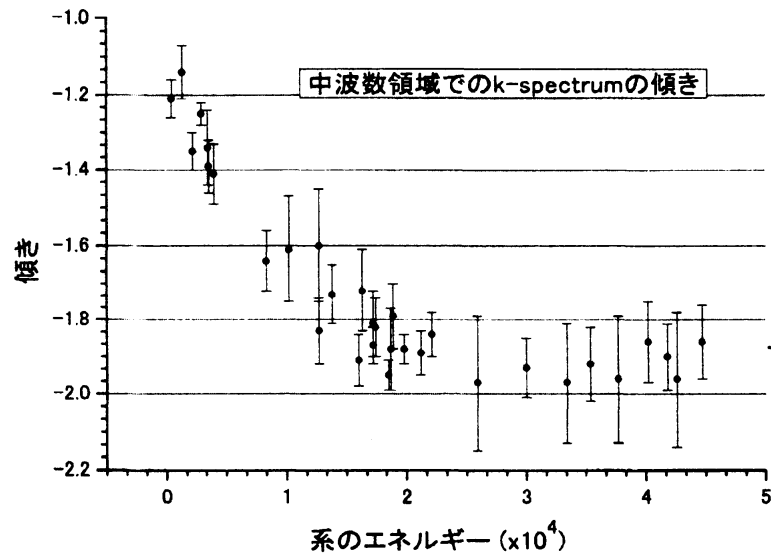


図 9: 中波数領域の傾きをエネルギーをパラメタとしてプロット。温度依存性が見られる領域と見られない領域が見られる？

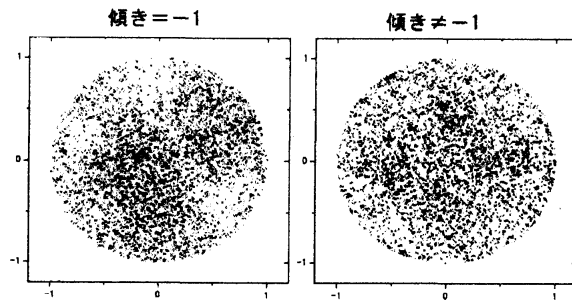


図 10: 正温度側の二つの平衡分布。

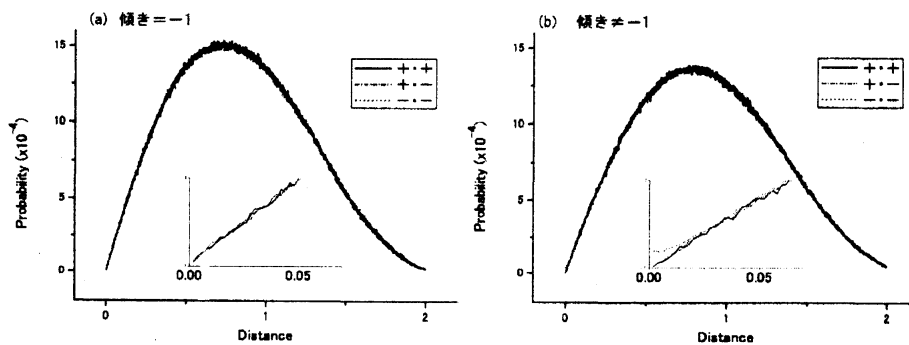


図 11: 正温度側の二つの平衡分布に対応した、2種類の2体相関。

が -1 になっていないものが、図には含まれている。正温度の二つの平衡分布をプロットすると、図 10 のようになり、見た目の違いはほとんど無い。そこで、正温度側にも、一様分布以外の平衡分布が存在するものと予想し、2体相関を改めて調べてみたところ、図 11 のようになった。二つの分布の2体相関の違いは、距離ゼロの近辺に現れる。ベキが -1 になるケースでは、正の点渦の周りの正の点渦の分布、および正の点渦の周りの負の点渦の分布ともに、距離ゼロ付近でゼロになる。一方、ベキが -1 にならないケースでは、正の点渦の周りの正の点渦の分布は距離ゼロでゼロとなるが、正の点渦の周りの負の点渦の分布は距離ゼロでゼロとならずに有限のまま留まる。このことから、正温度側には、図 12 に示したような少なくとも二つの平衡分布が存在することがわかる。

5 まとめ

我々は、絶対温度 < 0 にある2次元点渦系の特性を力学的に理解するための研究を行ってきており、特にエネルギースペクトルの中波数領域に現れる温度依存性は、興味深いと考えている。また、正温度側の二つの平衡状態の温度を比べると、ベキが -1 となる方がならない方に比べて温度が高い。すなわち、正の点渦と負の点渦がペアを作って凝集して

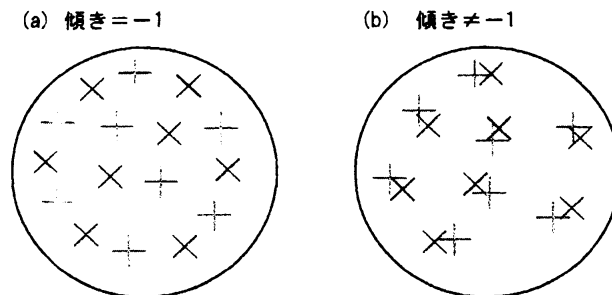


図 12: 正温度側の二つの平衡分布の概念図。2体相関の形から、このような分布であることが予想される。

いる状態は、絶対温度がゼロ度に近い状態であり、直感的にもリーズナブルであろう。

今回、負温度状態の平衡分布として示したものは、二重極のものだけであるが、他に四重極、八重極なども考えられ、数値シミュレーションでも四重極のものは比較的安定に存在できることが確認されている。この数がさらに増えた状態は渦結晶状態につながるはずで、現在、負温度性と渦結晶の関連について考察を進めている。

謝辞

本研究では、京都大学大学院人間・環境学研究科 際本泰士教授、富田博之教授、慶応義塾大学理工学部 成見哲氏、理化学研究所 泰地真弘人氏にお世話になりました。感謝いたします。

- [1] L. Onsager. *Nuovo Cimento Suppl.*, Vol. 6, p. 279, 1949.
- [2] S. Kida. *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 39, p. 1395, 1975.
- [3] D. Montgomery and G. Joyce. *Phys. Fluids*, Vol. 17, p. 1139, 1974.
- [4] D. J. Johnson. *Phys. Fluids*, Vol. 31, p. 1856, 1988.
- [5] G. Joyce and D. Montgomery. *J. Plasma Phys.*, Vol. 10, p. 107, 1973.
- [6] Y. Yatsuyanagi, Y. Kiwamoto, H. Tomita, M. M. Sano, T. Yoshida, and T. Ebisuzaki. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 94, p. 054502, 2005.
- [7] D. A. Schecter, D. H. E. Dubin, K. S. Fine, and C. F. Driscoll. *Phys. Fluids*, Vol. 11, p. 905, 1999.
- [8] <http://www.peta.co.jp>.

- [9] T. Yoshida and M. M. Sano. *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 74, p. 2005, 2005.
- [10] E. A. Novikov. *Sov. Phys. JETP*, Vol. 41, p. 937, 1975.