

衝撃波管の分子動力学 シミュレーション

MD simulation of shock tube

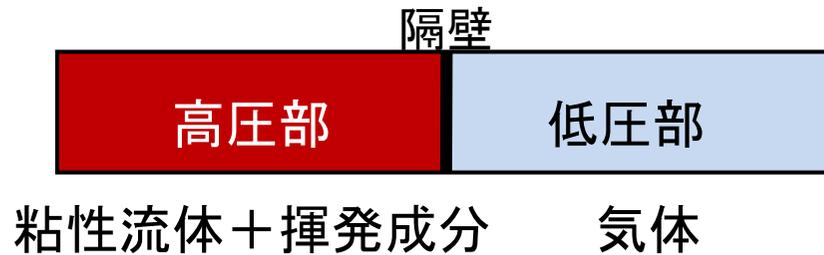
東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻^A

大阪大学大学院理学研究科 宇宙地球科学専攻^B

稲岡 創^A 湯川 諭^B 島田 尚^A 伊藤 伸泰^A

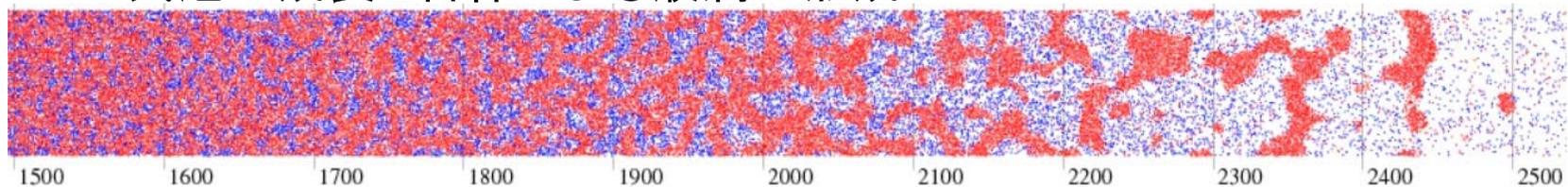
2種類の粒子からなるLennard-Jones粒子系のMDシミュレーション

衝撃波管 (Shock tube)



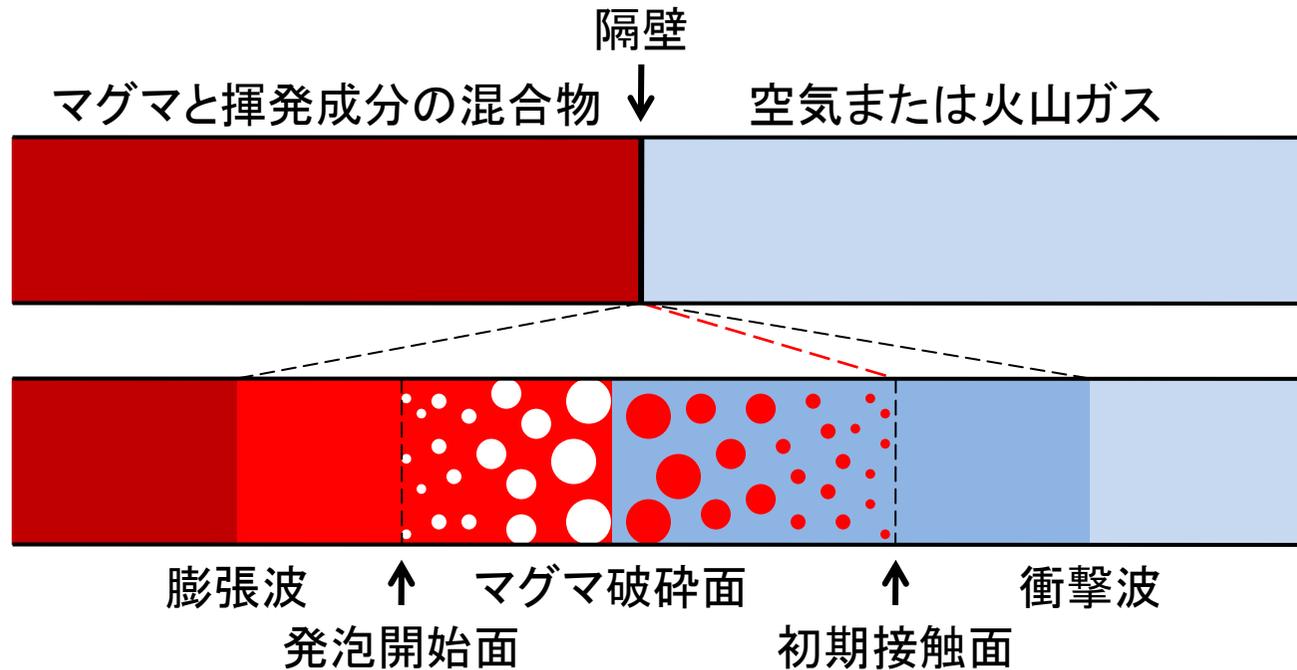
減圧による液相からの気相の分離 ⇒ 気泡の発生

気泡の成長と合体による液滴の形成



蒸気発生器などへの応用
ブルカノ式火山噴火の研究

ブルカノ式火山噴火のイメージ



隔壁の破壊と共に膨張波と衝撃波が両側に伝播
マグマの減圧による発泡と破碎による噴霧流への転移

マグマ破碎面付近では複雑な構造形成も起こる？
液相、気相ともに連続的なネットワーク状態
流速に差が出ることによる脱ガス

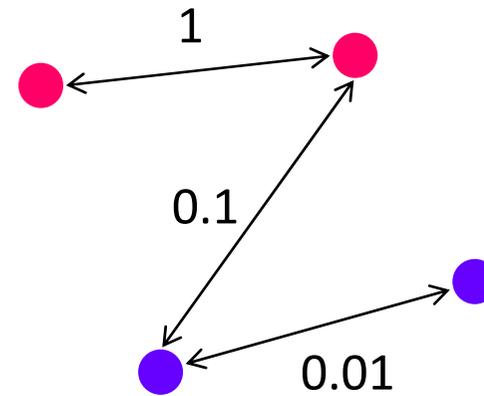
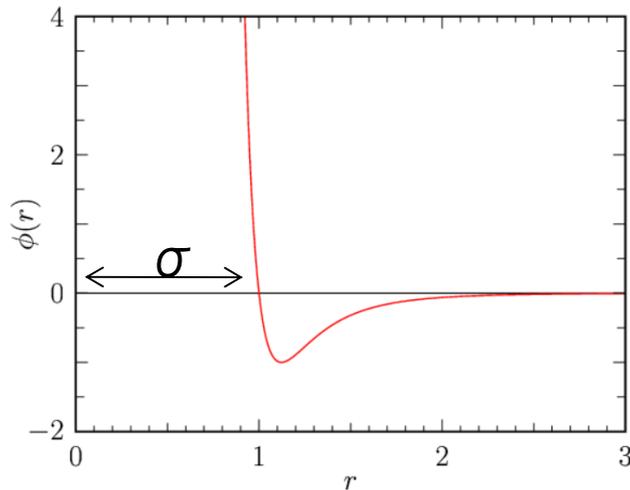
⇒ 理論的取扱いが困難



2成分Lennard-Jones粒子系のMDシミュレーション

Lennard-Jonesポテンシャルを介して相互作用する粒子の運動方程式を数値的に解く

$$H = \sum_i \frac{1}{2m_i} |\mathbf{p}_i|^2 + \sum_{i,j (i<j)} c_i c_j \phi(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)$$
$$\phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad \epsilon = 1 \quad \sigma = 1$$



マグマ粒子

$$m_{Magma} = 1 \quad c_{Magma} = 1$$

ガス粒子

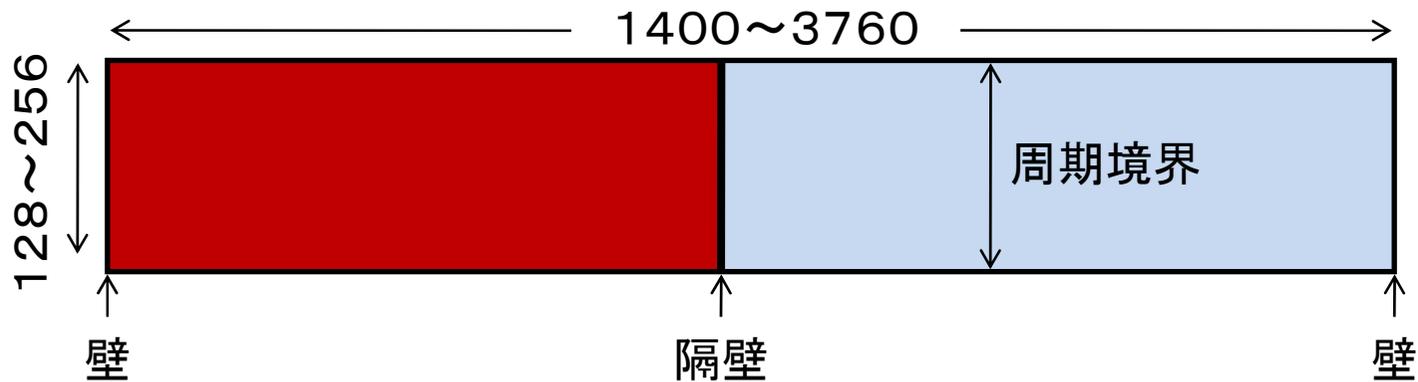
$$m_{Gas} = 0.05 \quad c_{Gas} = 0.1$$

系の形状と初期状態

x、y方向は周期境界 ⇒ 摩擦抵抗ゼロ

z方向、底と天井は壁

高压部と低压部の境界に隔壁



高压部

温度 2

粒子密度 1

マグマ ガス 混合

低压部

温度 0.5

粒子密度 0.02

ガス粒子のみ

粒子数 約1200万粒子~1億1000万粒子

Warm-up終了後、熱浴を切り離し隔壁を取り除く

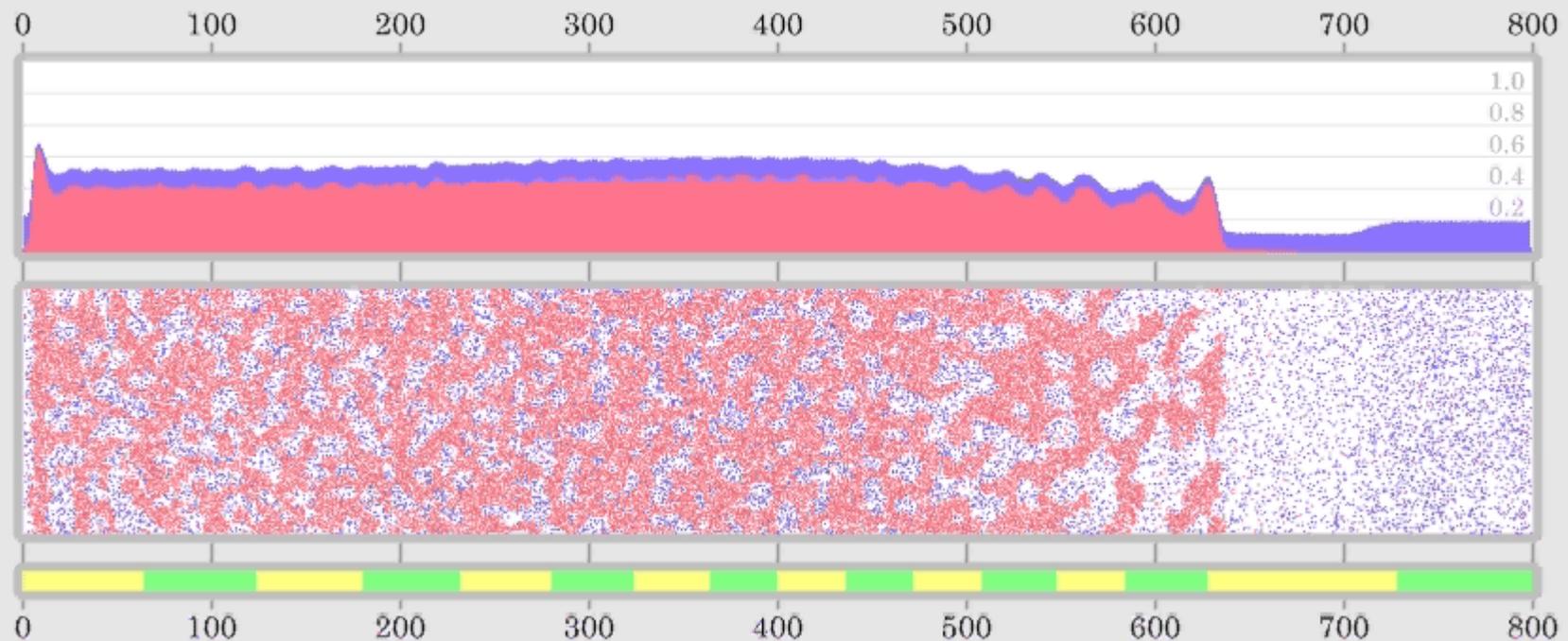
構造形成の様子

マグマ溜まりでの粒子密度

マグマ粒子 0.8 ガス粒子 0.2

約690万粒子

Time = 100

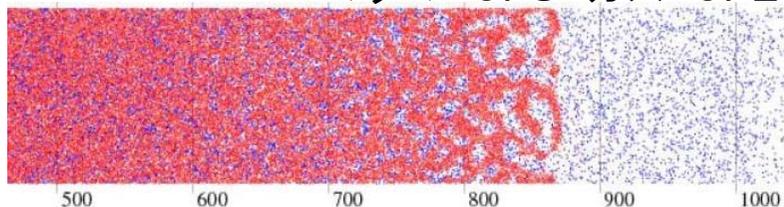


膨張波が左に伝播すると共に気泡が生成される
初期接触面付近ではマグマ粒子の液滴が形成される

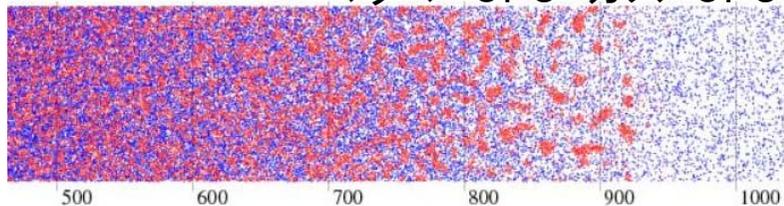
マグマ粒子がつくる構造 (マグマ粒子密度による変化 時刻50)

系のスライス

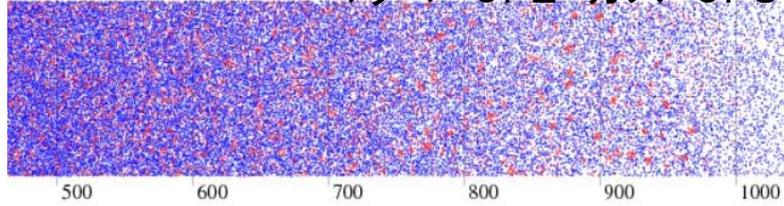
マグマ 0.8 ガス 0.2



マグマ 0.5 ガス 0.5

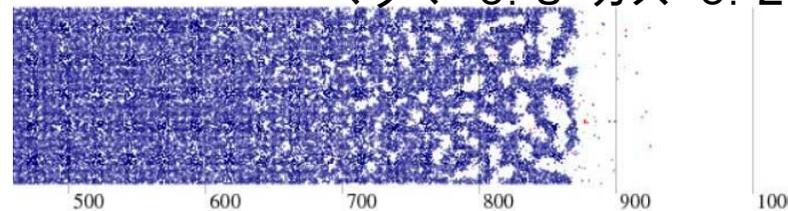


マグマ 0.2 ガス 0.8

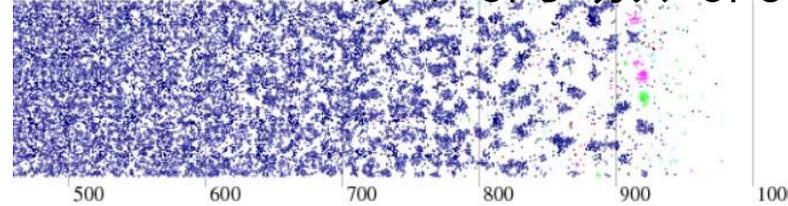


クラスター色分け

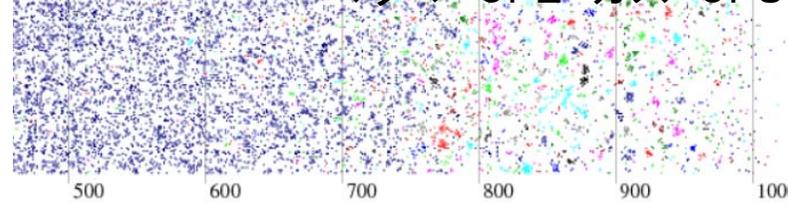
マグマ 0.8 ガス 0.2



マグマ 0.5 ガス 0.5

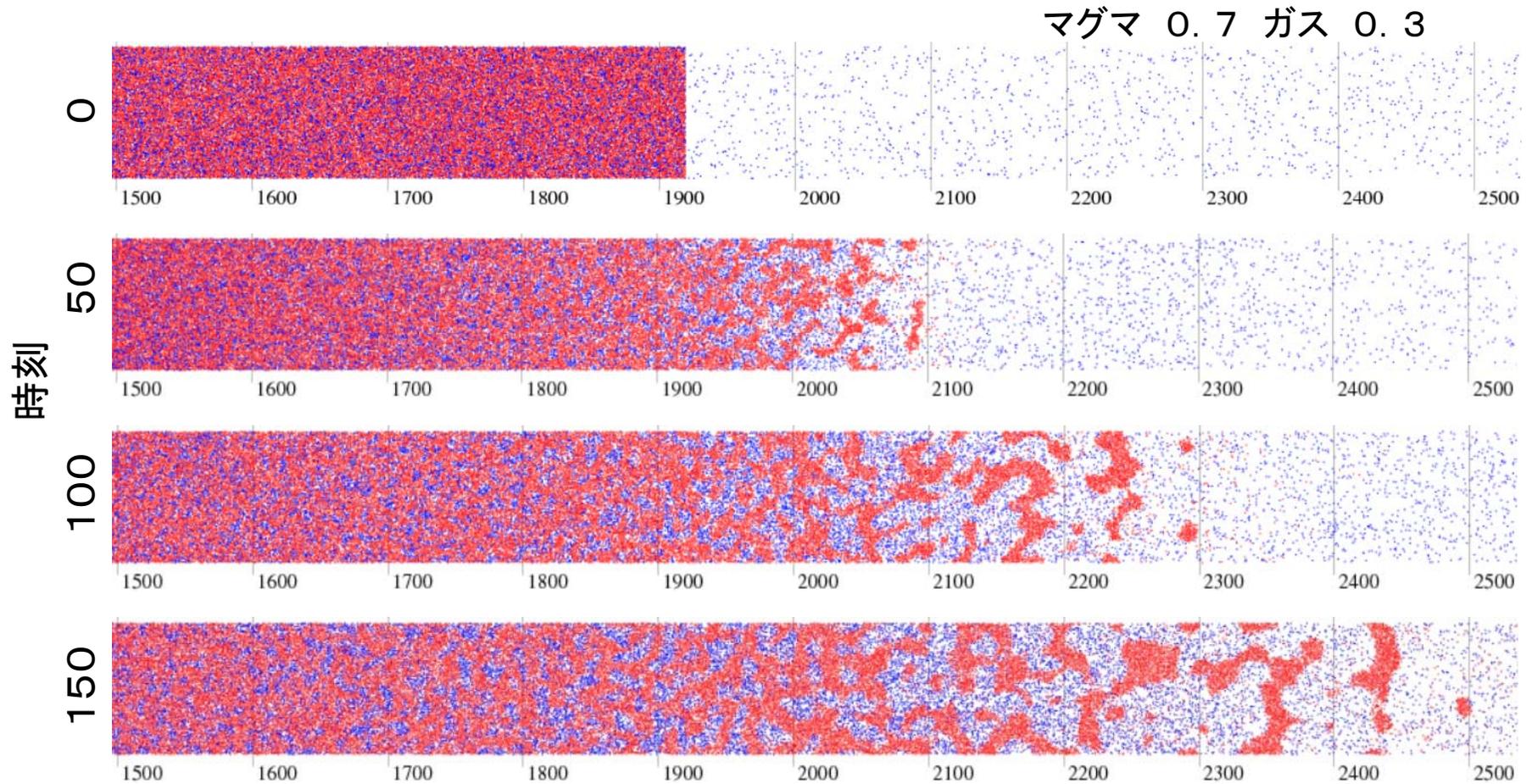


マグマ 0.2 ガス 0.8



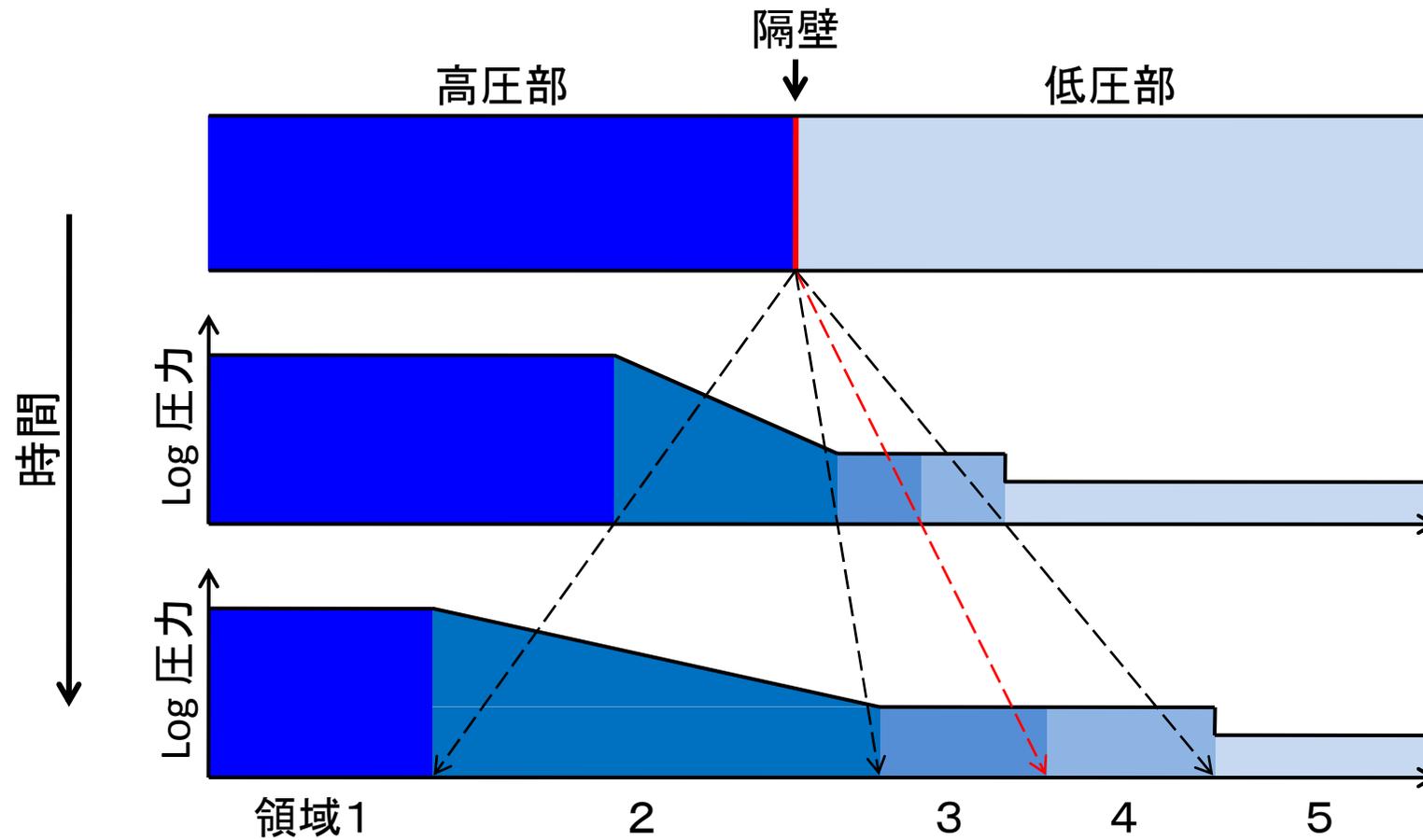
マグマ粒子密度0.5のものは噴霧流のように見えるが
クラスター解析では繋がっている ⇒ ネットワーク状態

マグマ粒子がつくる構造（時間発展）



時間経過に従い、右側に大きな液滴が生ずる
気泡がつながった部分はネットワーク状態に見える

衝撃波管問題

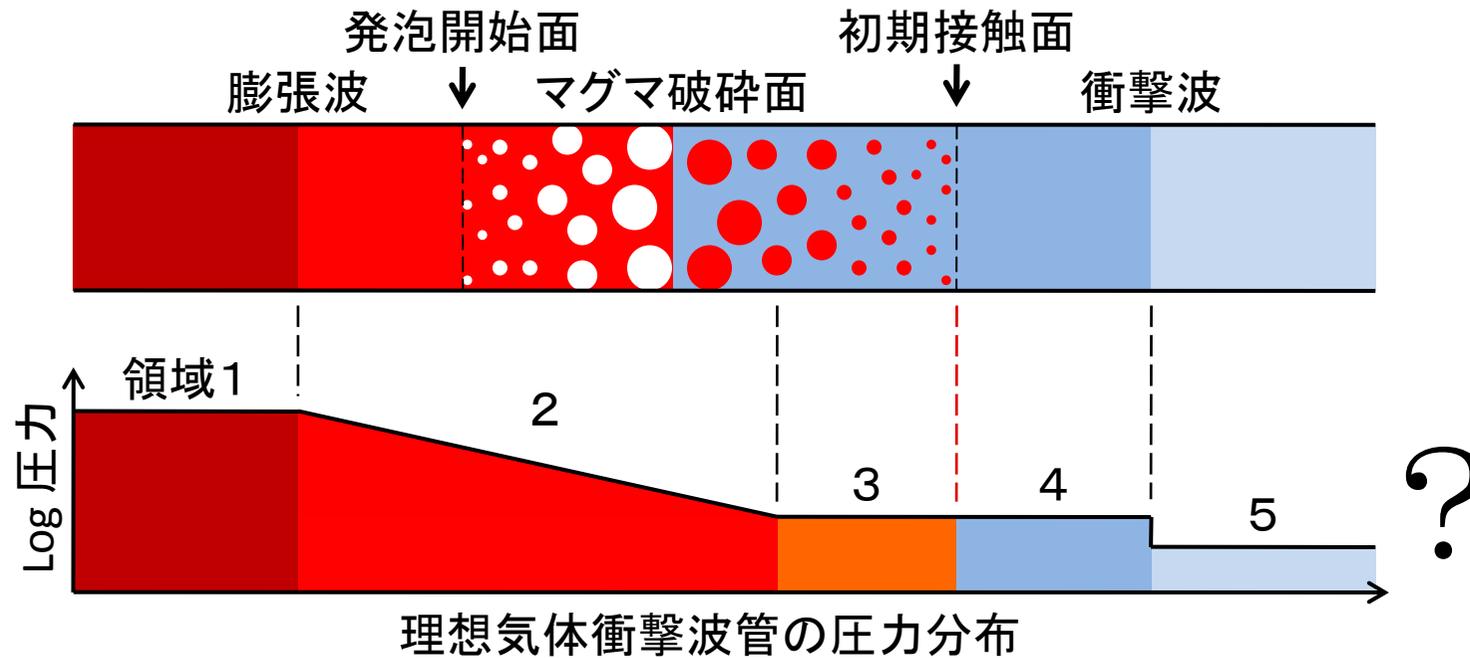


理想気体を用いた衝撃波伝播のモデル

- ・粘性、重力の効果は考慮されていない
- ・圧力分布は5つの領域に分かれる
- ・相似性を示す

ブルカノ式火山噴火の1次元モデル

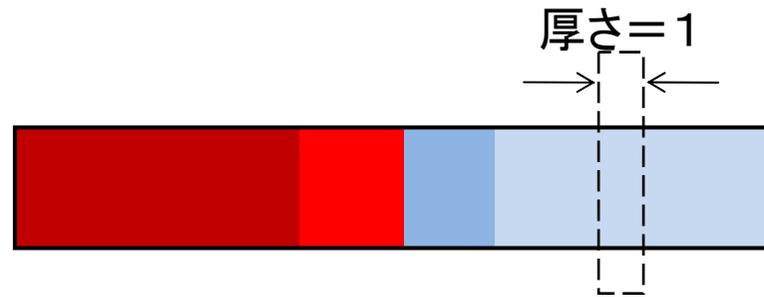
Turcotte他(1990) Woods他(1995)
Koyaguchi & Mitani(2005)



- ・液相を非圧縮性流体、気相を理想気体で近似
- ・液相と気相は同一の速度で流れる
- ・気泡、液滴などの構造は気相の体積分率で表現
 - ⇒ マグマ破碎は気相体積分率の閾値で導入
- ・噴霧流領域では分布は相似性を示す(摩擦抵抗 ~ 0)

物理量の空間分布 1次元モデルとの比較

z方向の厚さ1の部分を取り出し内部での
粒子数密度、速度、温度、圧力を計算



粒子数密度

$$\nu(z) = \frac{1}{L_x L_y} N(z)$$

速度

$$\mathbf{v}(z) = \frac{1}{N(z)} \sum_{i \in z} \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}$$

温度

$$T(z) = \frac{1}{3N(z)} \sum_{i \in z} m_i \left| \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} - \mathbf{v}(z) \right|^2$$

圧力

$$P(z) = \frac{1}{L_x L_y} \left(N(z) T(z) + \frac{1}{6} \sum_{i \in z \text{ or } j \in z} \mathbf{f}_{i,j} \cdot \mathbf{r}_{i,j} \right)$$

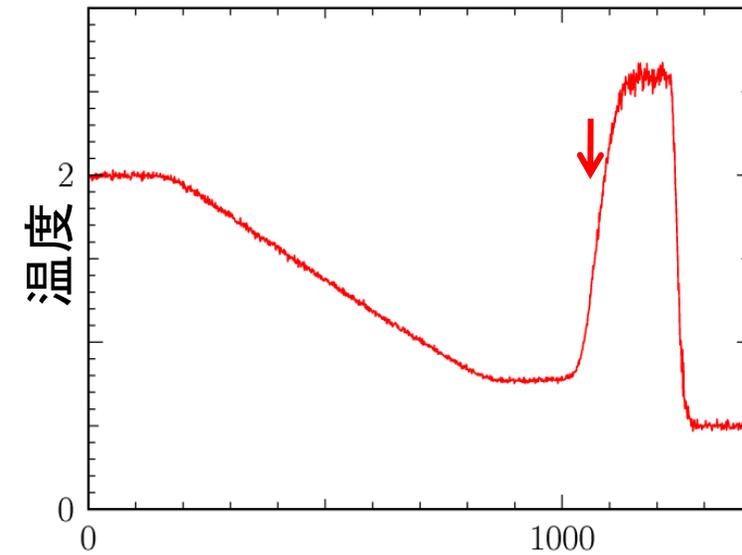
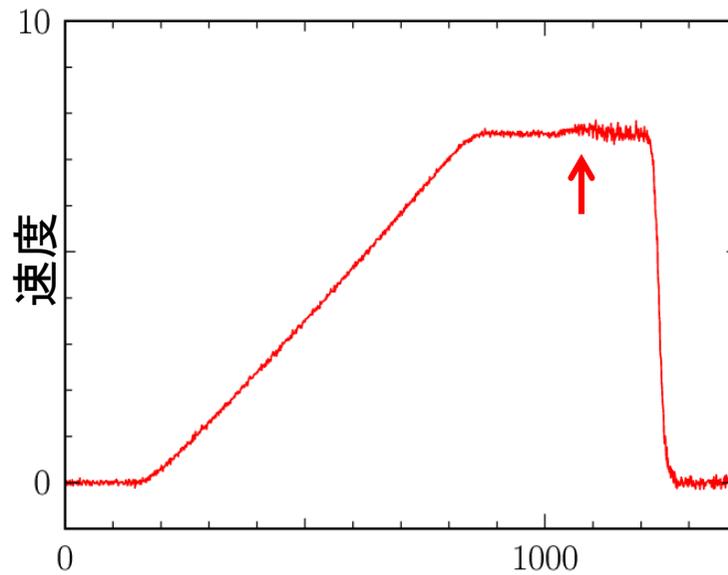
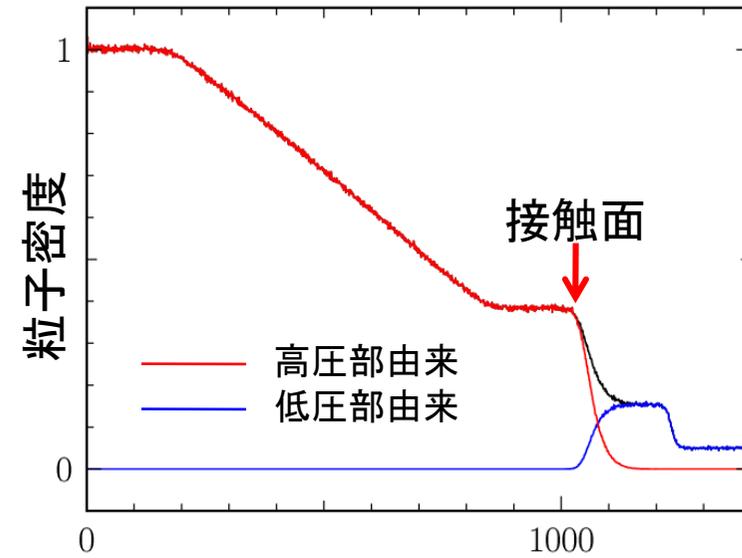
1種類の粒子のみからなる系

時刻=45

ガス粒子 $m=0.1$ $c=0.1$

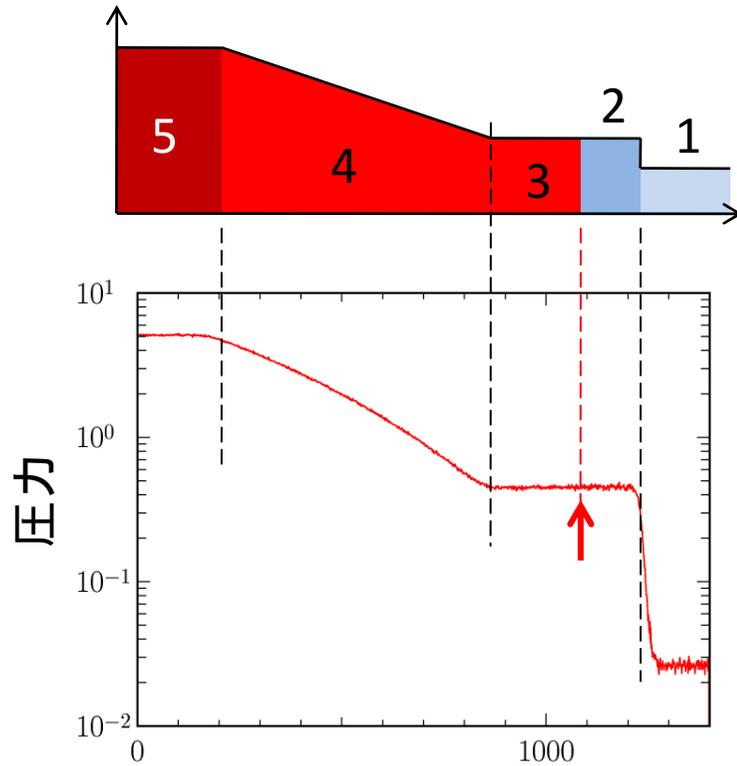


温度	2	温度	0.5
粒子密度	1	粒子密度	0.05



圧力分布

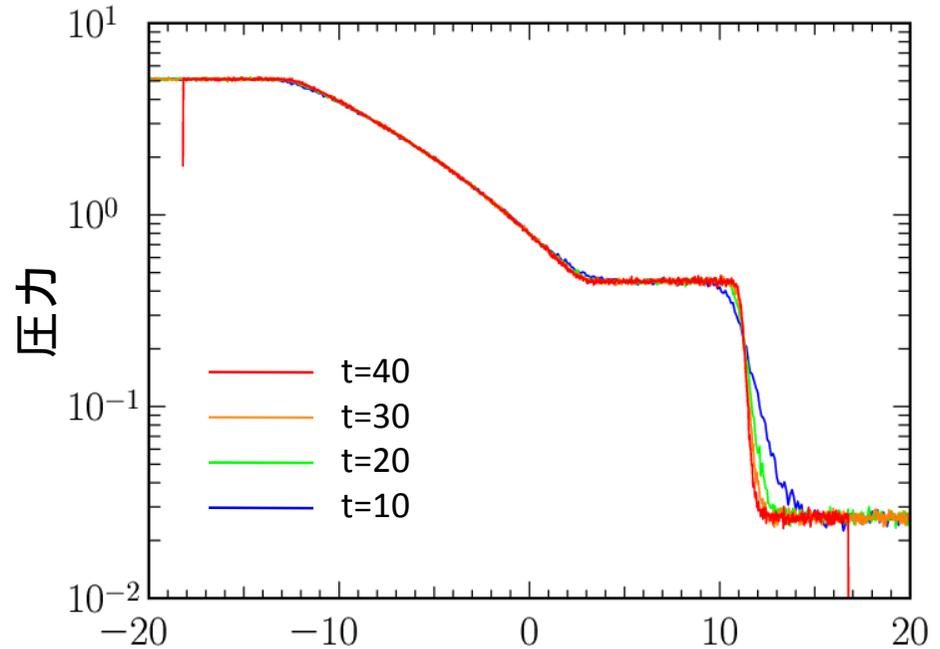
理想気体モデルとの比較



スケーリング

$$z \Rightarrow (z - z_0) / \text{時刻}$$

z_0 : 隔壁の位置



圧力分布は理想気体の1次元衝撃波管モデルと一致
相似性が成り立つ
衝撃波の部分のみ、粘性による相似性の破れが見える

2種類の粒子からなる系

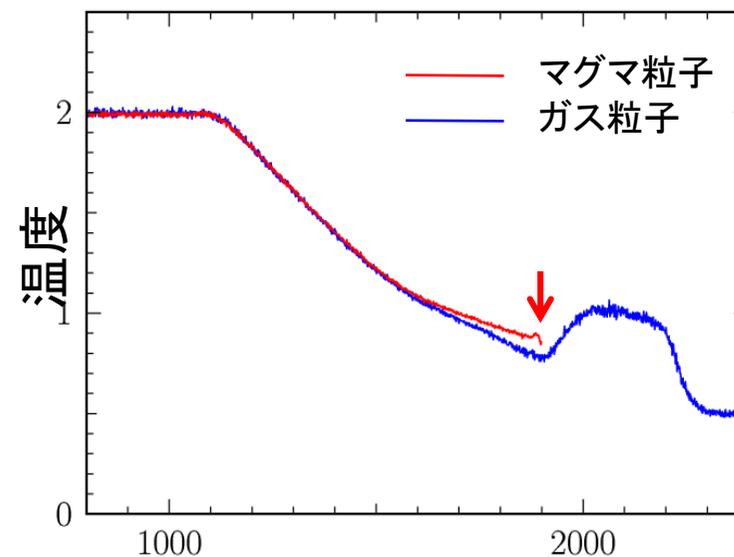
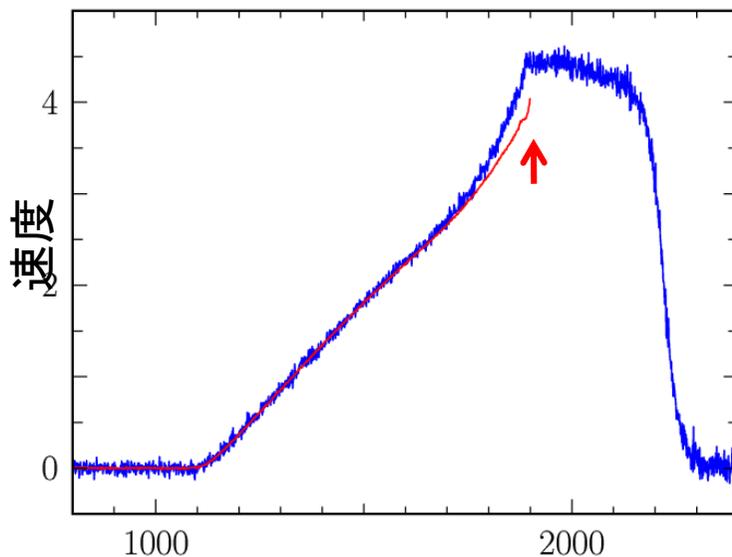
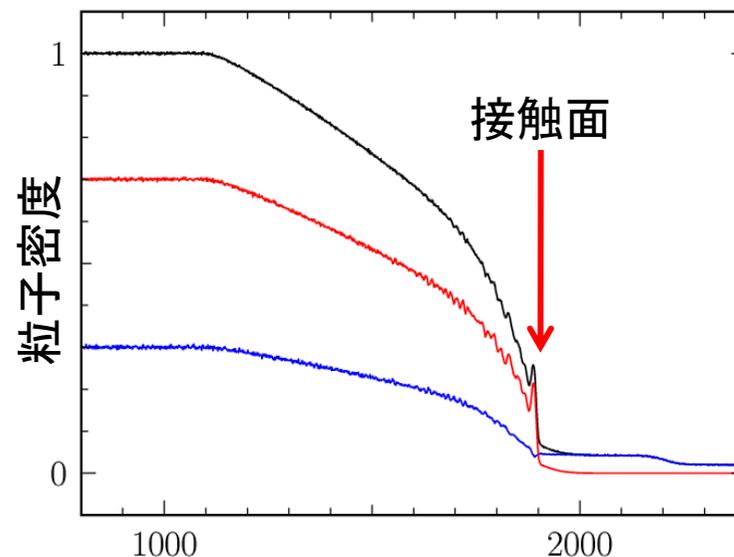
マグマ粒子 $m=1$ $c=1$
ガス粒子 $m=0.05$ $c=0.1$



温度 2 温度 0.5
粒子密度 1 粒子密度 0.02

マグマ:ガス=7:3

時刻=45

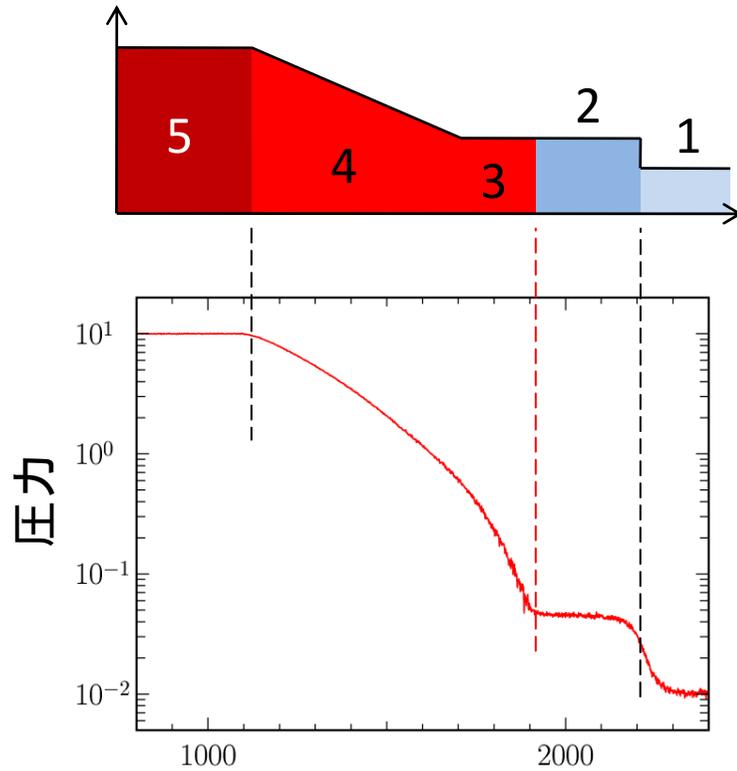


ガスの流速がマグマより12%程度速くなる

ガスが低温となる

圧力分布

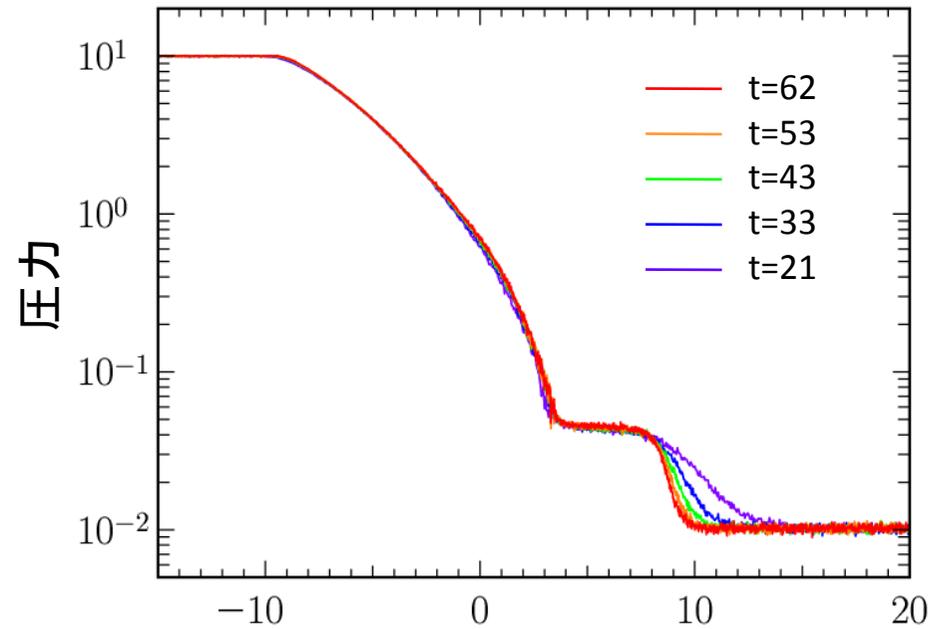
理想気体モデルとの比較



スケーリング

$$z \Rightarrow (z - z_0) / \text{時刻}$$

z_0 : 隔壁の位置

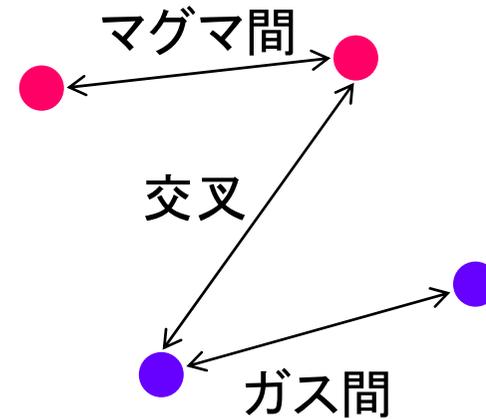
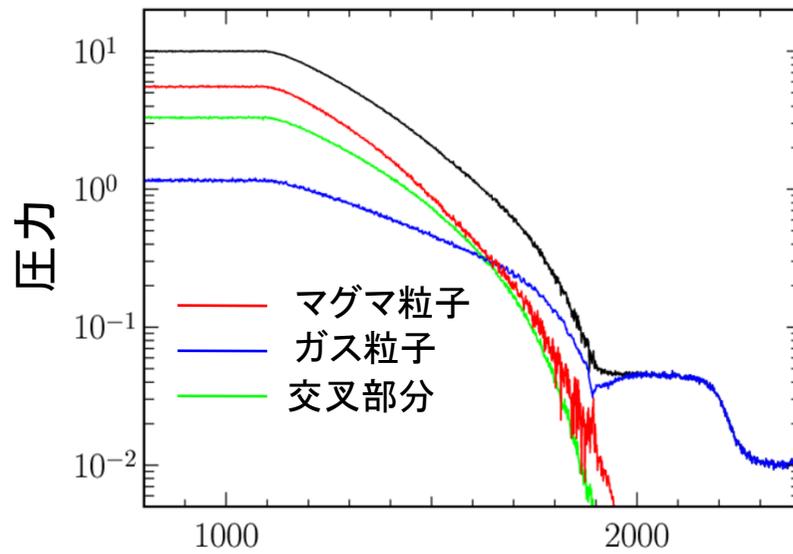


理想気体1次元モデルの領域3に相当する部分がない
相似性はよく成り立っているように見える
衝撃波部分の相似性の破れ

「領域3」部分の「分圧」

圧力をマグマ粒子、ガス粒子、交叉部分に分ける

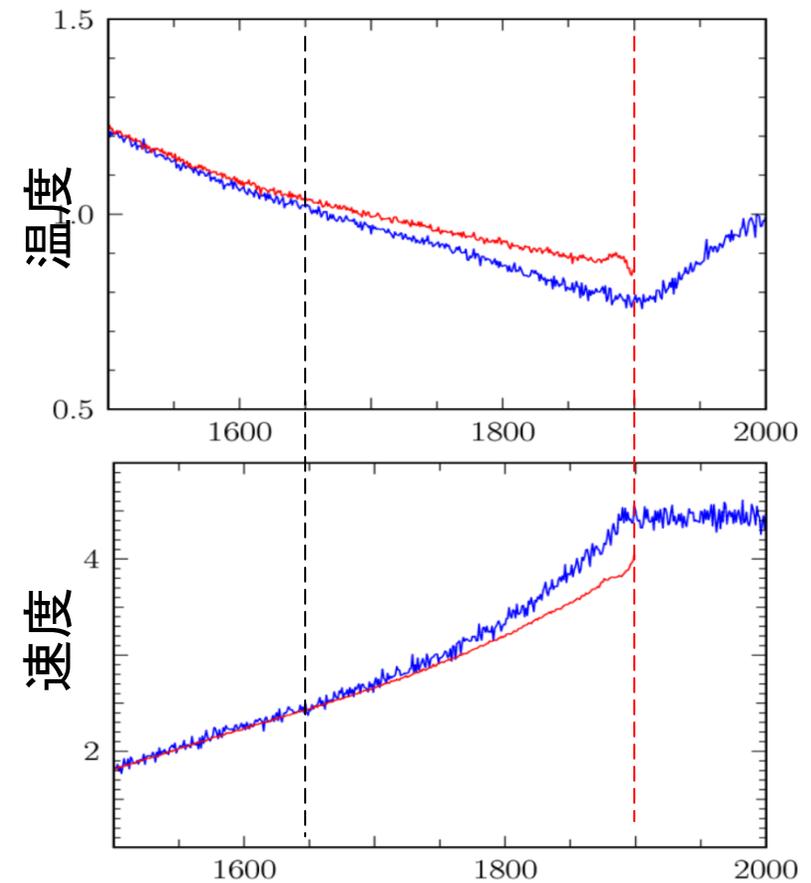
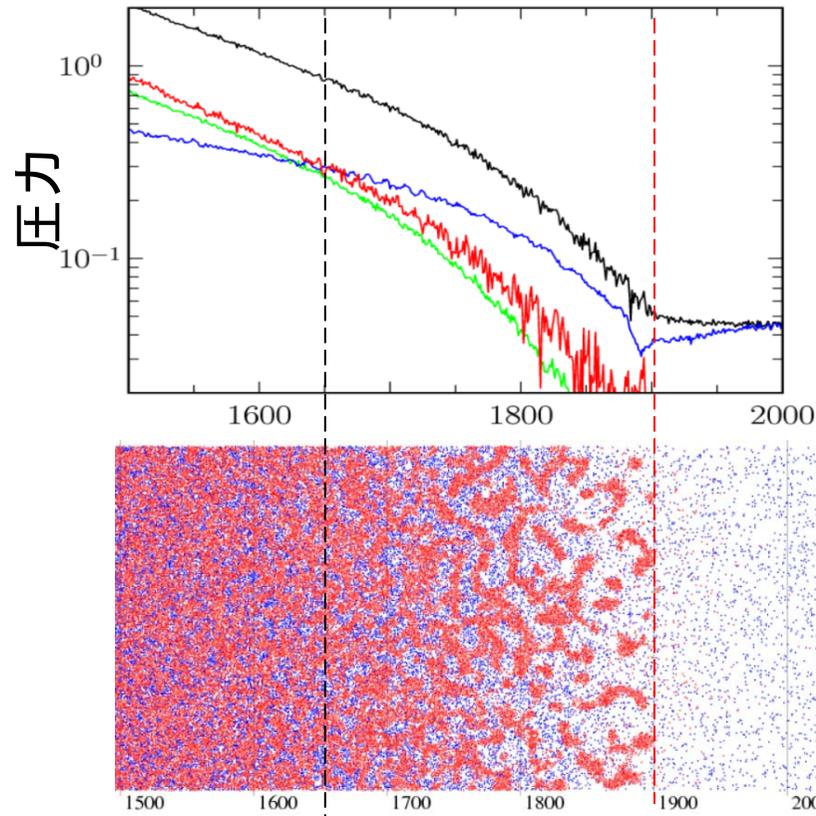
$$P(z) = \frac{1}{L_x L_y} \left(N(z)T(z) + \frac{1}{6} \sum_{i \in z \text{ or } j \in z} \mathbf{f}_{i,j} \cdot \mathbf{r}_{i,j} \right)$$



減圧に伴い、ガス粒子の圧力がマグマ粒子の圧力を上回る

「領域3」部分の拡大図

- ・気泡の繋がる部分(?)で
ガス粒子の圧力がマグマ粒子の圧力を上回る
- ・ガスの温度低下は早期に始まるが
速度差は遅れて生ずる



まとめ

- ・ 2成分Lennard-Jones粒子系のMDシミュレーション
- ・ 急減圧による相分離 気泡の生成と成長合体による構造形成
- ・ マグマ粒子のネットワーク状態 噴霧流の再現
- ・ 火山1次元モデルとの比較

構造形成がない 理想気体モデルと定性的に一致

ネットワーク構造 理想気体モデルからのずれ

ガス粒子がマグマ粒子より速く移動

双方とも相似性を示す

- ・ 実際のマグマ、ガスとの物性の違い

Lennard-Jones粒子系の1次元モデルとの比較を行うべき