

音波伝播の分子シミュレーション Molecular Simulation of Sound in a Gas

阪大工 矢野 猛 (Takeru Yano)

Department of Mechanical Engineering, Osaka University

1. はじめに

気体の系において、流れの代表長さを L 、基準状態の気体分子の平均自由行程を ℓ_0 と表すと、それらの比として定義される Knudsen 数 Kn 、

$$Kn = \frac{\ell_0}{L} \quad (1)$$

が 1 に比べて十分に小さい場合、気体を局所平衡状態にあるとみなすことができ、Navier-Stokes 方程式系に基づく流体力学が適用可能となる。これに対して、 Kn が 1 に比べて十分に小さいとみなせない場合、そのような気体は希薄気体とよばれ、分子気体力学 (希薄気体力学) によって扱われなければならない。¹

非常に高い振動数の音の伝播過程では、希薄気体の流れ同様に、非平衡の効果が無視できない。これは、音波の波長を代表長さにとるとき、振動数が高くなるにともなって代表長さが小さくなるために、 Kn が大きくなるからである。

Table 1. High frequency sound of 1 GHz in gases

	P (MPa)	T (K)	λ (nm)	ℓ_0 (nm)	Kn (ℓ_0/λ)	Re ($c_0^2/\nu_0\omega$)
Air	0.101	273	331	59	0.178	1.34
H ₂ O	0.0035	300	428	1700	3.97	0.07
Ar	0.070	84	168	20.5	0.122	2.72

表 1 に示すように、常温常圧の空気中であっても、音の振動数が 1GHz 程度であれば、Knudsen 数は 0.1 より大きくなり、Navier-Stokes 方程式系に基づく流体力学から得られる知見とのずれが無視できなくなってくる。図 1 は、音の伝播速度と伝播にともなう吸収係数の Reynolds 数に対する変化を示している。² Hadjiconstantinou と Garcia は、Boltzmann 方程式に対する直接数値解法 (DSMC 法) を用いて音の伝

播を解析し、高い振動数の音の伝播が Navier-Stokes 方程式で記述されないことを定量的に検証した。なお、彼らは Kn でなく Re を指標とした解析を行ったが、 $Kn \ll 1$ であれば

$$l_0 \sim \frac{\nu_0}{c_0} \quad (2)$$

が成り立つので、両者は反比例の関係にある。しかしながら、Knudsen 数が 1 程度、もしくはそれ以上に大きい場合、式 (2) の関係は一般に成り立たないことを注意しておく。

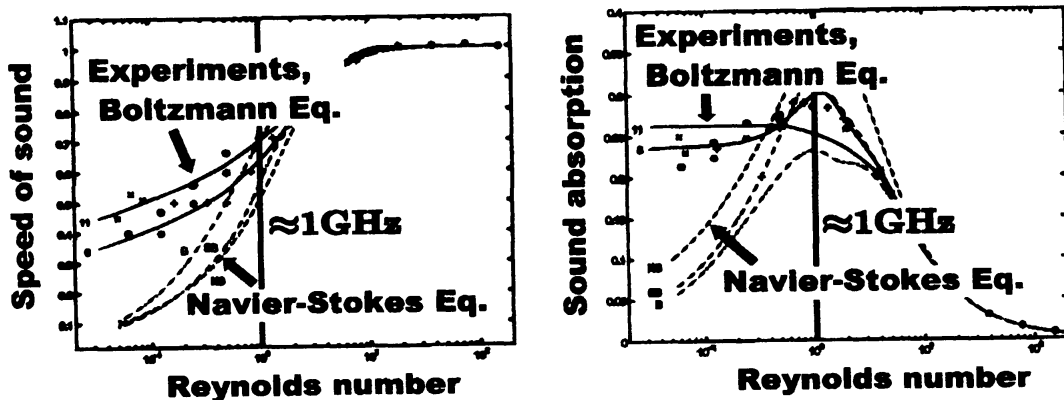


Fig. 1. Speed of sound and absorption coefficient as functions of Reynolds number.

分子気体力学は、Grad-Boltzmann 極限とよばれる

$$N \rightarrow \infty \text{ and } \sigma \rightarrow 0 \text{ with } N\sigma^2 \text{ fixed} \quad (3)$$

の極限を想定している。ただし、 N は分子数、 σ は分子直径である。実際、Boltzmann 方程式は式 (3) の極限において Liouville 方程式から導出される。¹ 式 (3) は、常温常圧の空気のような気体から、分子間衝突を無視できる自由分子気体までの幅広い範囲の気体を含んでおり、これが分子気体力学の適用範囲の広さを示している。しかしながら、流れの代表長さが小さくなると、気体中の着目点近傍の分子数が小さくなる (N が有限) と同時に、分子直径をゼロとみなすことによる誤差も大きくなるはずである (σ が有限)。本研究は、式 (3) の制約を受けずに音の伝播過程における非平衡効果を調べるために、分子気体力学ではなく分子動力学を用いた解析方法の確立を目指すものである。

2. 分子動力学法による音の伝播のシミュレーション

2.1 分子動力学

分子動力学は、個々の分子に作用する力を計算し、すべての分子について Newton の運動方程式を解いて分子運動を決定するものである。本研究では、分子間に作用す

る分子間力のポテンシャルとして, Lennard-Jones ポテンシャル

$$U_{mn} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{nm}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{nm}} \right)^6 \right], \quad r_{nm} = \sqrt{[x_i^{(n)} - x_i^{(m)}]^2} \quad (4)$$

を採用する. ここで, r_{nm} は番号 n の分子と番号 m の分子の中心間距離であり, ϵ は定数である. 式 (4) のポテンシャルを用いて, 番号 n の分子に対する Newton の運動方程式は

$$m \frac{d^2 x_i^{(n)}}{dt^2} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N U_{nm} \quad (i = 1, 2, 3; n = 1, 2, \dots, N), \quad (5)$$

と表される. ここで, 左辺の係数 m は分子 1 個の質量である.

すべての分子の位置と速度の情報が得られれば, それらの適切な平均値として, 気体の密度 ρ , 気体の温度 T , 気体の速度 v_i などを求めることができる. たとえば, 図 2 に示すような検査体積を考えれば, これらの平均値は次式で与えられる:

$$\rho(x_1, t) = \frac{m}{L^2 h} \sum_{n=1}^N \chi(x_1, x_1^{(n)}; h) \quad (6)$$

$$\chi(x_1, x_1^{(n)}; h) = \begin{cases} 1 & \text{for } |x_1 - x_1^{(n)}| \leq \frac{h}{2} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (7)$$

$$v_i(x_1, t) \rho(x_1, t) = m \sum_{n=1}^N \chi(x_1, x_1^{(n)}; h) \xi_i^{(n)} \quad (8)$$

$$\frac{3k_B}{m} \rho(x_1, t) T(x_1, t) = m \sum_{n=1}^N \chi(x_1, x_1^{(n)}; h) (\xi_i^{(n)})^2 - \rho v_i^2 \quad (9)$$

$$\xi_i^{(n)} = \frac{dx_i^{(n)}}{dt} : \text{molecular velocity, } m : \text{molecular weight} \quad (10)$$

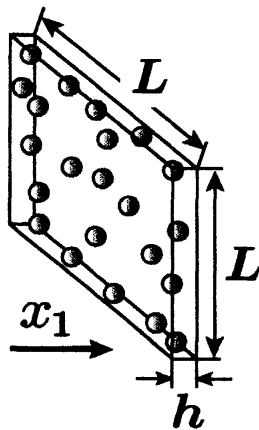


Fig. 2. Control volume for average.

2.2 音波の分子シミュレーション

図 3 に示すような計算箱の中に $N = 163840$ の分子を入れる．気体がアルゴンであれば， $\epsilon/k_B = 119.8$ K, $\sigma = 0.3405$ nm とすると，式 (4) の Lennard-Jones ポテンシャルによって，各温度における飽和蒸気圧などの熱力学的状態量が適切に再現されることが知られている．このとき， m をアルゴン分子 1 個の質量として， $\sqrt{\epsilon/m} = 158$ m/s である．

図 3 の括弧内に，参考のために，アルゴンの場合の有次元数を示している．これ以後，括弧内に示す数はすべてアルゴンの場合を表すものとする．

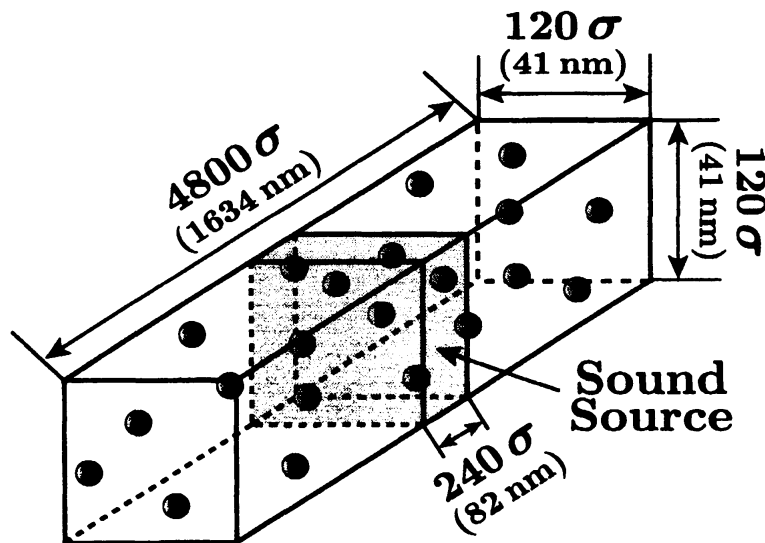


Fig. 3. Computational cell.

図 3 に示された計算箱の 6 つの面において周期境界条件を課して，時間ステップを $0.0005\sigma\sqrt{m/\epsilon}$ (1.08 fs)，分子間力のカットオフ距離を 5σ (1.7 nm) とし，Newton の運動方程式 (5) を蛙とび法で数値積分することによって，分子運動を決定する．

初期状態は，密度 $\rho = \rho_0 = 0.0024m/\sigma^3$ (4 kg/m³)，温度 $T = T_0 = 0.7\epsilon/k_B$ (84 K) の静止一様状態とする．

図 3 の中央部分が音源，すなわち，この部分が振動して両側に音を放射するとする．音源を出て気体中へ飛び出してゆく分子に拡散反射条件

$$f = \frac{\tilde{\rho}}{(2\pi RT_{BC})^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\xi_i - v_{iBC})^2}{2RT_{BC}}\right] \quad (\xi_1 > v_{iBC}) \quad (11)$$

を満たさせることを考える．ただし， v_{iBC} は音源の振動速度， T_{BC} は音源の温度， $\tilde{\rho}$ は音源に入射する分子の質量流束を $\sqrt{RT_{BC}/(2\pi)}$ で除したものである．本研究では， $T_{BC} = T_0$ ， $v_{1BC} = a\omega \sin \omega t$ とした．ここで， a は音源の振動の振幅， ω は音源の振動数である．

3. 計算結果

図4に計算結果として得られる速度波形を示す。通常の気体中の音波の伝播過程と異なり、負の速度部分が少ないこと、および、波の先端が音速より速く伝わる。

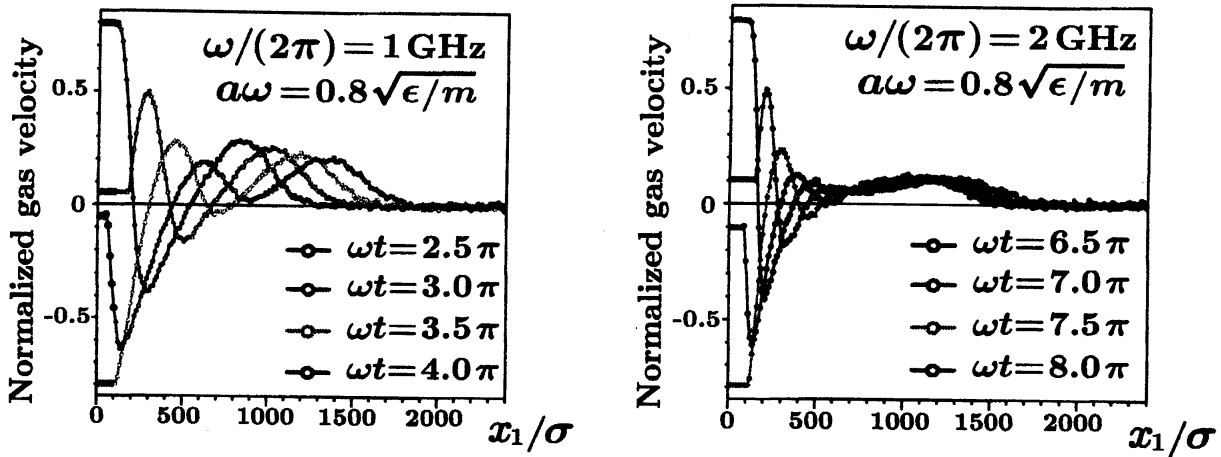


Fig. 4. Velocity profiles.

図5に温度の波形を示す。これらの結果は、Boltzmann方程式の数値計算結果と定性的に一致することが確かめられる。現在、詳細な検討を行っている。

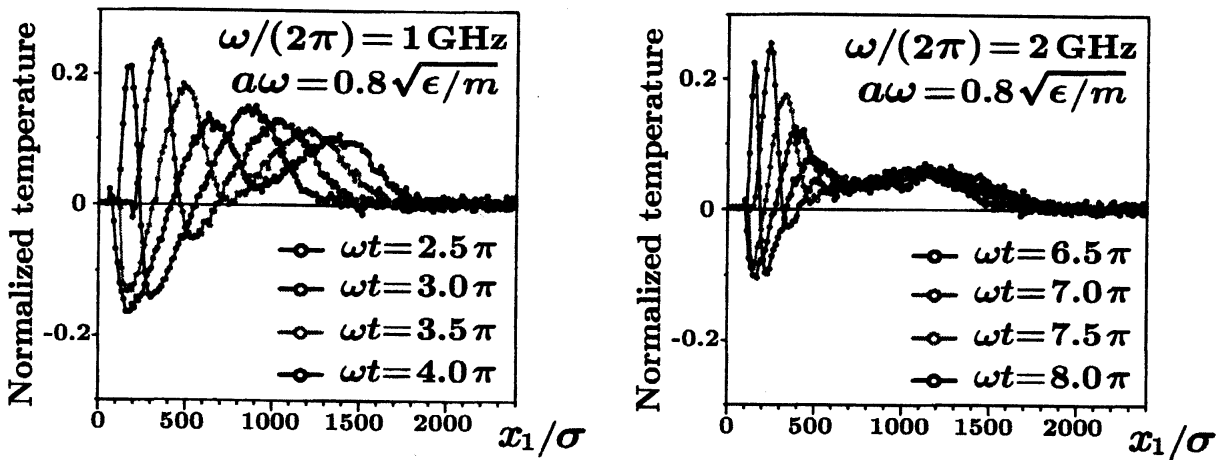


Fig. 5. Temperature profiles.

参考文献

1. Y. Sone, *Molecular Gas Dynamics*, Birkhauser, 2007.
2. N. G. Hadjiconstantinou and A. Garcia, *Molecular simulation of sound wave propagation in simple gases*, *Phys. Fluids* **13**, 1040–1046 (2001).