

# 衝撃波のモンテカルロシミュレーション

## I. Lennard-Jonesポテンシャル

松本裕昭\* 古浦勝久\*\*

## Monte Carlo Simulation of Normal Shock Wave I. Lennard-Jones Potential

by

Hiroaki MATSUMOTO  
National Aerospace Laboratory  
Part-time Researcher  
Katsuhisa KOURA  
National Aerospace Laboratory

### ABSTRACT

The velocity distribution functions (VDFs) in an argon normal shock wave of upstream Mach number 7.8 and temperature 16 K are calculated using the null-collision direct simulation Monte Carlo method. The Lennard-Jones (LJ) potential is employed as a realistic intermolecular potential, where the deflection angle for molecular collisions is calculated by an accurate quadrature scheme. Some comparisons between the VDFs of the LJ potential, Maxwell molecule, and Maitland-Smith potential are made.

### 1. 緒言

希薄気体数値風洞の整備の一環として擬衝突直接シミュレーション・モンテカルロ (NC-DSMC) 法<sup>1)</sup>に分子間引力を考慮した現実的な分子間ポテンシャルを導入する研究を進めている。分子間引力を考慮することにより、特に低温の流れ解析を正確に行うことができる。本研究では、Lennard-Jones (LJ) ポテンシャルを用いて上流のマッハ数 7.18、温度 16K のアルゴン衝撃波内の速度分布関数のモンテカルロ・シミュレーションを行い、実験結果<sup>2)</sup>と比較した。また、Maxwell 分子、剛体球分子を用いた計算結果と比較し、ポテンシャルの違いが速度分布関数に及ぼす影響を調べた。結果は文献<sup>3)</sup>に詳述してあるので、ここでは、LJポ

テンシャルと Maxwell 分子に対する計算結果の比較、Maitland-Smith (MS) ポテンシャルを用いたモンテカルロ・シミュレーション結果<sup>4)</sup>との比較、および NC-DSMC 法と Yen のモンテカルロ法による計算結果<sup>2)</sup>との比較について報告する。

### 2. LJ ポテンシャルの散乱角の特性

LJ ポテンシャルのように分子間引力を持つ分子モデルでは小さな相対衝突エネルギー  $\epsilon$  に対して“orbiting”の生じる衝突径数  $b_0$  が存在する<sup>5)</sup>。衝突径数が  $b_0$  点では散乱角が無限大となり計算不能となるので実際の計算では  $b_0$  点は除外するが、実用上  $b_0$  近傍の散乱角の分布状況を調べておく必要がある。Fig.1 に相対衝突エネルギー  $\epsilon^*=0.8$  における衝突径数  $b^*$  に対する散乱角の分布を示す。計算に用いた  $b^*$  の刻み幅  $\Delta b^*$  は単精度で扱える最小桁数 ( $1 \times 10^{-6}$ ) としているので、本精度内で散乱角は良く計算されていることが分かる。ここに

\* 航空宇宙技術研究所(非常勤)

\*\* 航空宇宙技術研究所

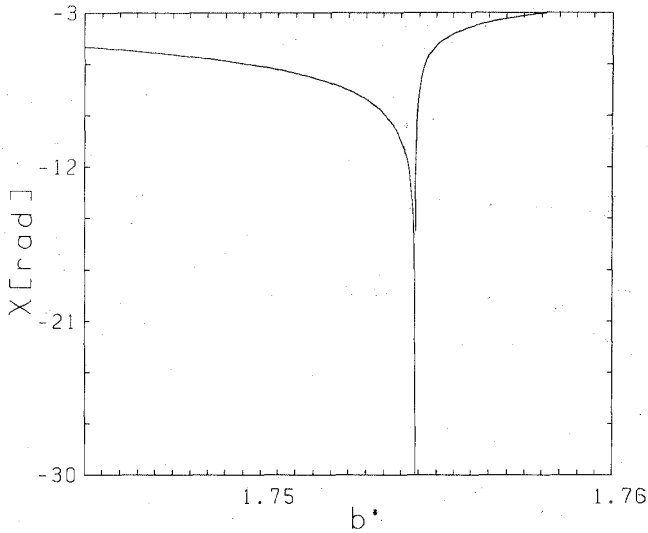


Fig.1 Deflection angle around the reduced “orbiting” impact parameter  $b_0^*$  at the reduced relative collision energy  $\epsilon^*=0.8$  for the Lennard-Jones potential.

$\epsilon^* = \epsilon / \epsilon_{LJ}$ ,  $b^* = b / d_{LJ}$  と定義し,  $\epsilon_{LJ}$ ,  $d_{LJ}$  はそれぞれ LJ ポテンシャルのポテンシャルの深さ, ポテンシャルエネルギーが 0 になる分子間距離である。

### 3. Maxwell 分子および MS ポテンシャルとの比較

Fig.2 (a) と (b) に衝撃波の中間部 ( $n_{MM}^* = 0.333$ ) における LJ ポテンシャルと Maxwell 分子の速度分布関数の比較を示す。  $C_1$  は上流の分子の最大確率熱速度であり,  $n^*$  は衝撃波内の正規化された数密度で, 上流, 下流の数密度をそれぞれ  $n_1$ ,  $n_2$  として,

$$n^* = (n - n_1) / (n_2 - n_1)$$

と定義される。また, 添え字 MM は Maxwell 分子を意味する。図 2(a) と図 2(b) に対する LJ ポテンシャルの数密度は, それぞれ  $n^* = 0.329$  および 0.340 であるので, Maxwell 分子の方が幾分分子速度の緩和が速いことが分かる。しかし, LJ ポテンシャルと Maxwell 分子の分布関数の形状は良く似ているので低い温度でのアルゴンは, Maxwell 分子でかなり良く近似できると考えられる。

Fig.3 に MS ポテンシャルに対する計算結果<sup>4)</sup> との比較を示す。いずれも数密度  $n^* = 0.240$  の場合であり, 分布関数の最大値で正規化して表示し

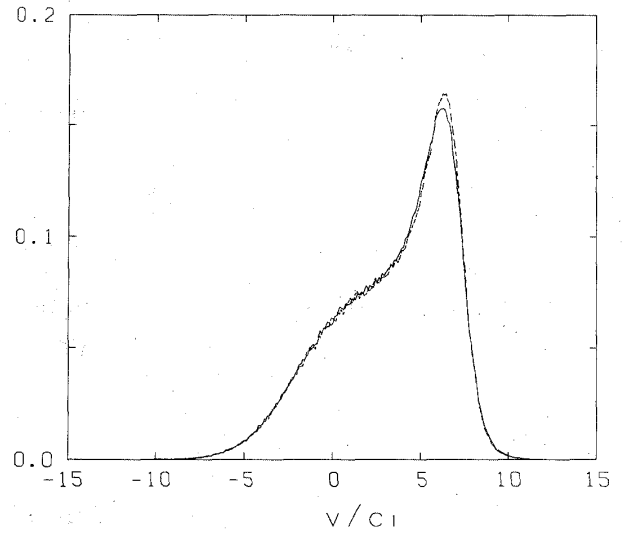


Fig.2(a) Comparison of velocity distribution function between the Lennard-Jones potential at  $n^*=0.329$  (---) and the Maxwell molecule at  $n^*=0.333$  (—).

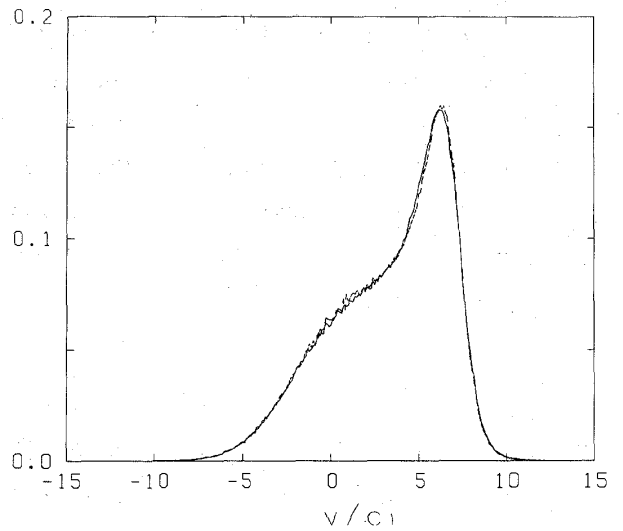


Fig.2(b) Comparison of velocity distribution function between the Lennard-Jones potential at  $n^*=0.340$  (---) and the Maxwell molecule at  $n^*=0.333$  (—).

である。MS ポテンシャルの方が緩和が速く進んでいるが, MS ポテンシャルの計算では散乱角を予めテーブル化して使用していること, 散乱角の cutoff が  $0.1 \text{ rad}$  ( $5.7^\circ$ ) と大きいことなどから解の精度に多少問題があるかもしれない。なお, 本研究で用いた散乱角の cutoff は LJ ポテンシャルおよび Maxwell 分子ともに  $0.1^\circ$  ( $1.74 \times 10^{-3} \text{ rad}$ ) である。

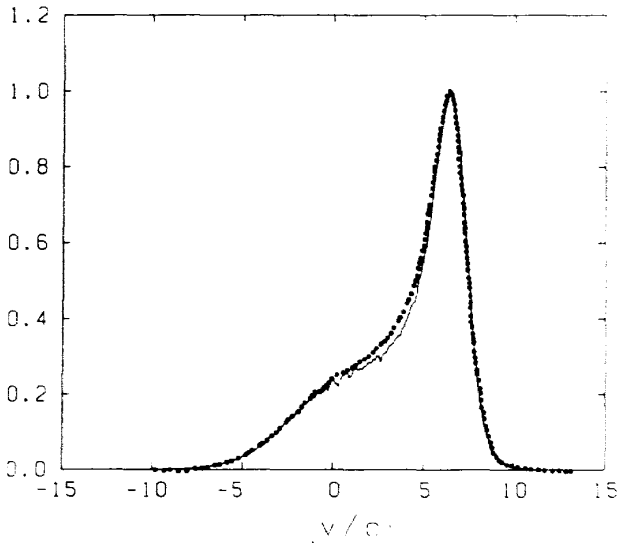


Fig.3 Comparison of velocity distribution function between the Lennard-Jones potential at  $n^*=0.240$  (—) and the Maitland-Smith potential at  $n^*=0.240$  (○).

#### 4. Yen のモンテカルロ法との比較

Yen のモンテカルロ法による計算結果<sup>2)</sup>と NC-DSMC 法の計算結果との比較を Fig.4 と 5 に示す。分子モデルは Maxwell 分子である。衝撃波の構造 (数密度分布) は Yen の結果と NC-DSMC 法の結果はほぼ一致する (Fig.4)。しかし、Yen の速度分布関数の形状は緩和が速く、しかも bimodal 的な分布を示し、NC-DSMC 法の形状と大きく異なっている (Fig.5)。この差異は今後の研究で明らかにする必要がある。

#### 参 考 文 献

- 1) K. Koura, Phys. Fluids 29, 3509 (1986).
- 2) T. Holtz and E.P. Muntz, Phys. Fluids 26, 2425 (1983); T. Holtz Ph. D. thesis, University of Southern California, 1976.
- 3) H. Matsumoto and K. Koura, Phys. Fluids A (to be published).

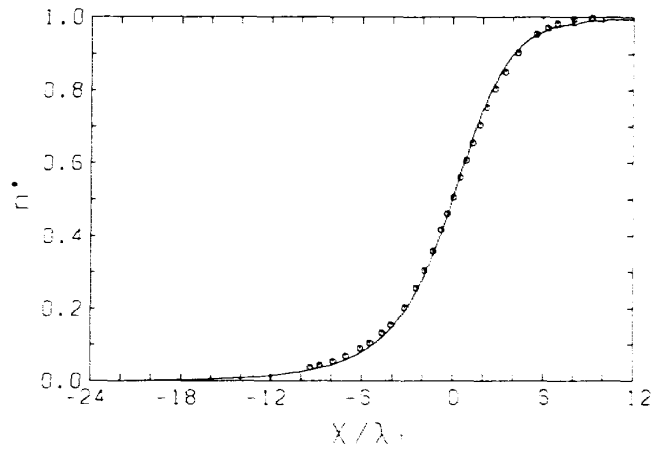


Fig.4 Comparison of number density profile for the Maxwell molecule between the NC-DSMC method (—) and Yen's Monte Carlo method (○).

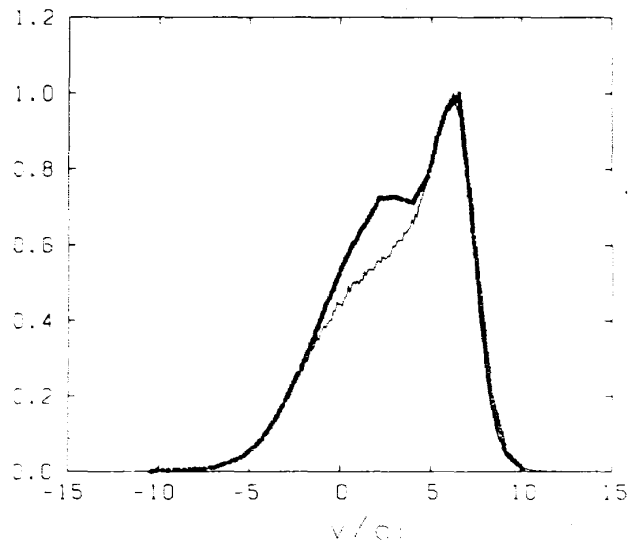


Fig.5 Comparison of velocity distribution function for the Maxwell molecule between the NC-DSMC method (—) and Yen's Monte Carlo method (○).

- 4) D.A. Erwin, G.C. Pham-Van-Diep, and E.P. Muntz, Phys. Fluids A 3, 697 (1991).
- 5) J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, and R.B. Bird, Molecular Theory of Gas and Liquids (Wiley, New York, 1964).

