

## 二成分レナードジョーンズ粒子を用いた分子動力学法による衝撃波管シミュレーション

### Molecular dynamics simulations of a shock-tube experiment with a two-component Lennard-Jones particle system

# 湯川 諭 [1]; 伊藤 伸泰 [2]

# Satoshi Yukawa[1]; Nobuyasu Ito[2]

[1] 阪大・理・宇宙地球; [2] 東大・工・物工

[1] Dept. Earth Space Sci, Osaka Univ.; [2] Applied Physics, Tokyo Univ.

ブルカノ式噴火に見られるようなマグマ-ガス系の速い相分離ダイナミクスを調べるため、分子動力学シミュレーションを行った。[1] シミュレーションではブルカノ式噴火を模擬していると思われる衝撃波管の状況をコンピューター上に再現し、マグマ、ガスを、Lennard-Jones 相互作用する粒子を二種類用意することで表現した。分子の種類を第一原理的にモデル化しないことで大規模な計算が可能になり、速い相分離ダイナミクスの物理的本質をとらえることができる。Lennard-Jones 相互作用は、短距離斥力および中距離引力を持ち、遠距離では相互作用をしないというモデルである。この相互作用を用いることで、外的な温度や密度などの条件により、粒子系は気相のように振る舞ったり、液相、固相およびそれらの共存状態のように振る舞う。このようなマイクロなモデル化により、噴火ダイナミクスを非平衡物理の観点から調べることができる。

衝撃波管の状況をシミュレーションした結果、Woods[2] が一次元の一成分圧縮性流体で示したような流体的な挙動が再現できた。さらに本シミュレーションでは、マグマとガスが完全に混ざり合っている状態からのガスの気泡核生成、およびその成長と合体、最終的には、ガス気泡流からマグマ噴霧流への転移まで再現することができた。このようなマイクロなモデル化を行いシミュレーションすることでは、すべての粒子の状況を把握していることにより、どのような場の物理量も計算することができる。たとえば、爆発最中の温度場を計算することで、マグマの液滴とガスの気泡の間で温度が違ふことがわかった。これは、相分離ダイナミクスが極端な非平衡条件下で起きていることを意味しており、このような状況を記述する理論モデルに対して制限を与える。

[1] S. Yukawa and N. Ito, physics/0510147.

[2] A. W. Woods: Nucl. Eng. Design, 155 (1995) 345.