Maxwell速度分布則のシミュレーション

1　目的

気体分子の速度分布を計算機シミュレーションによって調べる。

2　理論

気体は液体や固体とは異なり，気体を構成している分子が 3 次元空間を自由に運動を行っている。それは，分子間に働く力を無視できるからである。気体分子が他の分子と衝突するとき運動の方向や速さを変えるが，その前後では全運動量および全エネルギーは保存される。このような気体のモデルがいわゆる「理想気体」である。2 分子 A，B の距離が D に近づいたとき衝突が起こるとする。衝突の瞬間での 2 分子 A，B の位置ベクトルをそれぞれ $\boldsymbol{r}_{\mathrm{A}}$，$\boldsymbol{r}_{\mathrm{B}}$ とし，直前での速度を $\boldsymbol{v}_{\mathrm{A}}$，$\boldsymbol{v}_{\mathrm{B}}$，衝突後の速度を $'$ を付けて表すと

$$\boldsymbol{v}'_{\mathrm{A}} = v_{\mathrm{B1}}\boldsymbol{e}_1 + v_{\mathrm{A2}}\boldsymbol{e}_2 + v_{\mathrm{A3}}\boldsymbol{e}_3, \qquad \boldsymbol{v}'_{\mathrm{B}} = v_{\mathrm{A1}}\boldsymbol{e}_1 + v_{\mathrm{B2}}\boldsymbol{e}_2 + v_{\mathrm{B3}}\boldsymbol{e}_3 \tag{1}$$

が成立する。ここに，$\boldsymbol{e}_1$ は衝突の瞬間において 2 分子の重心を結ぶ方向の単位ベ

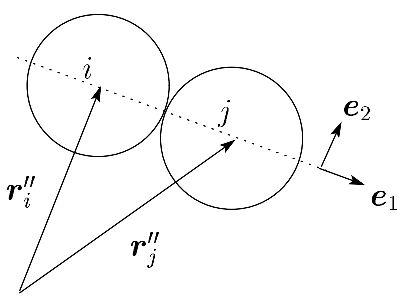

図 1: 衝突の瞬間

クトル，$\boldsymbol{e}_2$,$\boldsymbol{e}_3$ は $\boldsymbol{e}_1$ に垂直な平面内の互いに直交する単位ベクトル，$v_{\mathrm{A1}}, \ldots, v_{\mathrm{B3}}$ は $\boldsymbol{v}_{\mathrm{A}}$,$\boldsymbol{v}_{\mathrm{B}}$ の各成分である。式 (1) は，衝突の前後では $\boldsymbol{e}_1$ に垂直な速度成分は変化しないが，2 分子の速度の $\boldsymbol{e}_1$ 成分は互いに交換することを意味する（図を参照)。式 (1) における第 1 の式の右辺に $v_{\mathrm{A1}}\boldsymbol{e}_1$ を，第 2 の式の右辺に $v_{B1}\boldsymbol{e}_1$ を加えて差し引けば,

$$\boldsymbol{v}'_{\mathrm{A}} = v_{\mathrm{B1}}\boldsymbol{e}_1 + v_{A2}\boldsymbol{e}_2 + v_{A3}\boldsymbol{e}_3 + v_{A1}\boldsymbol{e}_1 - v_{A1}\boldsymbol{e}_1$$

$$\boldsymbol{v}'_{\mathrm{B}} = v_{\mathrm{A1}}\boldsymbol{e}_1 + v_{\mathrm{B2}}\boldsymbol{e}_2 + v_{\mathrm{B3}}\boldsymbol{e}_3 + v_{\mathrm{B1}}\boldsymbol{e}_1 - v_{\mathrm{B1}}\boldsymbol{e}_1$$

しかるに，$\boldsymbol{v}_{\mathrm{A}} = \sum_{k=1}^{3} v_{\mathrm{A}k}\boldsymbol{e}_k, \qquad \boldsymbol{v}_{\mathrm{B}} = \sum_{k=1}^{3} v_{\mathrm{B}k}\boldsymbol{e}_k$ であるから

$$\boldsymbol{v}'_{\mathrm{A}} = \boldsymbol{v}_{\mathrm{A}} + (v_{\mathrm{B1}} - v_{\mathrm{A1}})\boldsymbol{e}_1, \qquad \boldsymbol{v}'_{\mathrm{B}} = \boldsymbol{v}_{\mathrm{B}} - (v_{\mathrm{B1}} - v_{\mathrm{A1}})\boldsymbol{e}_1 \quad . \tag{2}$$

式 (2) には $\boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$ は含んでいないので便利である。$\boldsymbol{e}_1$ は次式で与えられる。

$$\boldsymbol{e}_1 = \frac{\boldsymbol{r}_{\mathrm{A}} - \boldsymbol{r}_{\mathrm{B}}}{D} \tag{3}$$

時刻 t における i 番目の分子 (以下分子 i) の位置ベクトルおよび速度をそれぞれ $\boldsymbol{r}_i$, $\boldsymbol{v}_i$ とする。今，分子 i と分子 j が時刻 t から $t + \Delta t$ の間で衝突したとする．衝突した時刻が $t + \Delta t - \delta t$ であったとすると，次の方程式を満たす。

$$|\boldsymbol{r}'_i - \boldsymbol{v}_i \delta t - \boldsymbol{r}'_j - \boldsymbol{v}_j \delta t| = D \tag{4}$$

ただし，$\boldsymbol{r}'_i = \boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{v}_i \Delta t$, $\boldsymbol{r}'_j = \boldsymbol{r}_j + \boldsymbol{v}_j \Delta t$ である．(4) 式の両辺を 2 乗して δt を求めると，

$$\delta t = \frac{c_{ji} + \sqrt{c_{ji}^2 + (D^2 - \boldsymbol{r}_{ji}^2)\boldsymbol{v}_{ji}^2}}{\boldsymbol{v}_{ji}^2} \quad . \tag{5}$$

ここで

$$\boldsymbol{r}_{ji} = \boldsymbol{r}'_j - \boldsymbol{r}'_i, \qquad \boldsymbol{v}_{ji} = \boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v}_i, \qquad c_{ji} = \boldsymbol{r}_{ji} \cdot \boldsymbol{v}_{ji}. \tag{6}$$

したがって，衝突の瞬間において定義される単位ベクトル $\boldsymbol{e}_1$ は次式で与えられる。

$$\boldsymbol{e}_1 = \frac{\boldsymbol{r}_{ji} - \boldsymbol{v}_{ji}\delta t}{D} \tag{7}$$

2 分子 i, j の衝突後の速度に $'$ を付けて表すと式 (2) より

$$\boldsymbol{v}'_i = \boldsymbol{v}_i + (\boldsymbol{v}_{ji} \cdot \boldsymbol{e}_1)\boldsymbol{e}_1, \qquad \boldsymbol{v}'_j = \boldsymbol{v}_j - (\boldsymbol{v}_{ji} \cdot \boldsymbol{e}_1)\boldsymbol{e}_1 \tag{8}$$

故に，衝突後の時刻 $t + \Delta t$ での 2 分子の位置 $\boldsymbol{r}'_i$, $\boldsymbol{r}'_j$ は次式で与えられる。

$$\boldsymbol{r}'_i = \boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{v}_i(\Delta t - \delta t) + \boldsymbol{v}'_i \delta t, \qquad \boldsymbol{r}'_j = \boldsymbol{r}_j + \boldsymbol{v}_j(\Delta t - \delta t) + \boldsymbol{v}'_j \delta t \tag{9}$$

式 (5)-(9) によって，衝突前の時刻 t における位置と速度から，衝突後の時刻 $t + \Delta t$ の位置と速度を得ることができる。

分子が箱の中に閉じこめられている場合には，分子が壁との衝突前後では，壁に平行な速度成分 $v_{||}$ は変化しないが，壁に垂直な速度成分 $v_{\perp}$ の符号が反転する。すなわち

$$v'_{||} = v_{||}, \qquad v'_{\perp} = -v_{\perp} \tag{10}$$

である。

3　フローチャート

分子数　N，箱の大きさ　L

衝突半径　D，ステップ間隔　Δt

初期座標 $\boldsymbol{r}_i$，初期速度 $\boldsymbol{v}_i$
$(\ i = 1, 2, \ldots, N \ )$

[*]　Δt 後の位置

$$T = T + 1$$
$$\boldsymbol{r}'_i = \boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{v}_i \Delta t$$
$(\ i = 1, 2, \ldots, N \ )$

$$|\boldsymbol{r}'_i - \boldsymbol{r}'_j| < D \quad ?$$
$(\ i = 1, \ldots, N \ ) \ (\ j = 1, \ldots, N \ )$
(条件が不成立ならば [**] へ飛ぶ)

衝突後の位置と速度 $\boldsymbol{r}'_i$，$\boldsymbol{r}'_j$，$\boldsymbol{v}'_i$，$\boldsymbol{v}'_j$ の計算

$$\boldsymbol{r}_{ji} = \boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i, \ \boldsymbol{v}_{ji} = \boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v}_i, \ c_{ji} = \boldsymbol{r}_{ji} \cdot \boldsymbol{v}_{ji}$$
δt の計算
$$\delta t = \left\{ c_{ji} + \sqrt{c_{ji}^2 + (D^2 - \boldsymbol{r}_{ji}^2)\boldsymbol{v}_{ji}^2} \right\} / \boldsymbol{v}_{ji}^2$$
$$\boldsymbol{e} = (\boldsymbol{r}_{ji} - \boldsymbol{v}_{ji}\delta t)/D$$

$$\boldsymbol{v}'_i = \boldsymbol{v}_i + (\boldsymbol{v}_{ji} \cdot \boldsymbol{e})\boldsymbol{e}, \ \boldsymbol{v}'_j = \boldsymbol{v}_j - (\boldsymbol{v}_{ji} \cdot \boldsymbol{e})\boldsymbol{e}$$
$$\boldsymbol{r}'_i = \boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{v}_i(\Delta t - \delta t) + \boldsymbol{v}'_i \delta t$$
$$\boldsymbol{r}'_j = \boldsymbol{r}_j + \boldsymbol{v}_j(\Delta t - \delta t) + \boldsymbol{v}'_j \delta t$$

箱の壁との衝突を考慮

[**]　分子位置の表示

$\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{r}'_i, \ \boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{v}'_i \ (\ i = 1, \ldots, N \ )$

全運動エネルギー $E_t = \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{2} \boldsymbol{v}_k^2$

50 ステップ毎に E_t を表示
([*] に戻る)

4　シミュレーション結果の検討

速度分布則より，分子の速さが v から $v+dv$ の間にある確率 $p(v)dv$ は次式で与えられる。

$$p(v)dv = 2\alpha v e^{-\alpha v^2} dv \tag{11}$$

上式は規格化条件 $\int_0^\infty p(v)dv = 1$ を満たしている。α は速度の 2 乗平均 $< v^2 >$ との間に次のような関係がある。

$$< v^2 > = \int_0^\infty v^2 p(v)dv = \frac{1}{\alpha} \tag{12}$$

N 個の分子の全運動エネルギーを E_t とすると，

$$\alpha = \frac{1}{< v^2 >} = \frac{N}{2E_t} \tag{13}$$

で与えられる。

前節のフローチャートにおいて，50step 毎に速度の大きさについての統計をとる計算を追加する。そのきざみ幅を Δv，統計計算の回数を M とすると，k 番目の統計結果 P_k は

$$P_k = NM \int_{k\Delta v}^{(k+1)\Delta v} p(v)dv \cong 2\alpha N M v_k e^{-\alpha v_k^2} \Delta v \tag{14}$$

ただし，

$$v_k = (k+0.5)\Delta v \qquad (k = 0, 1, \ldots)$$

である。統計計算の回数を多くすると，式 (14) の結果に近づくはずである。この事を，種々の初期乱数によってシミュレーションを試み考察せよ。

5　画像の編集の仕方

シミュレーションで得られた速度分布の画像を次の手順で編集しよう.

- [Print Screen] をクリック
- [ペイント][1]を実行
- [編集]→[貼り付け]
- 必要な部分を選んでファイル化する

[1] [スタート]→[プログラム]→[アクセサリ]の中にある