

気体分子の運動に関するシミュレーション

4年A組 川本 稜生
指導教員 守本 寛治

1. 要約

私は非ニュートン流体の挙動をシミュレートすることを目標として研究を行っている。今回はその初期段階として、三次元空間での気体分子の運動を可視化するシミュレーターを作成した。また、開発環境として Processing を用いた。

キーワード 気体分子 シミュレーション 三次元空間 Processing

2. 研究の背景と目的

前述の通り、この研究は将来的に非ニュートン流体のシミュレーションを行うことを目標としている。そこで、今回の研究では比較的簡易でコンピューターへの負荷が少ない気体分子のシミュレーションを通して、より効率的で高速な演算を可能にするシミュレーション手法の獲得を目指した。

3. 研究内容

3.1 2Dでのシミュレーション

三次元空間でのシミュレーションに先駆けて、平面でのシミュレーションを行った。

二体の気体分子の衝突前の速度から衝突後の速度を求める方法を以下に示す。なお、力積を I 、気体分子の質量を m 、衝突前の速度を v 、衝突後の速度を v' 、反発係数を e と表し、1と2の添字でそれぞれの分子を表すものとする。

運動量の変化は力積に等しく、それぞれの分子には大きさが同じで逆方向の力積が作用するため、次のような式が立てられる。

$$I = m_1(v_1' - v_1) \cdots \textcircled{1}$$

$$-I = m_2(v_2' - v_2) \cdots \textcircled{2}$$

さらに、反発係数と衝突前後の速度の関係式は、

$$e = -\frac{v_1' - v_2'}{v_1 - v_2} \cdots \textcircled{3}$$

となる。

①、②、③から、以下の式が得られる。

$$I = -\frac{(v_1 - v_2)(e + 1)}{\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}}$$

$$v_1' = v_1 + \frac{I}{m_1}$$

$$v_2' = v_2 - \frac{I}{m_2}$$

各粒子の初期位置、初期速度は乱数で決定するものとし、上記の式に基づいてシミュレーションを行った。

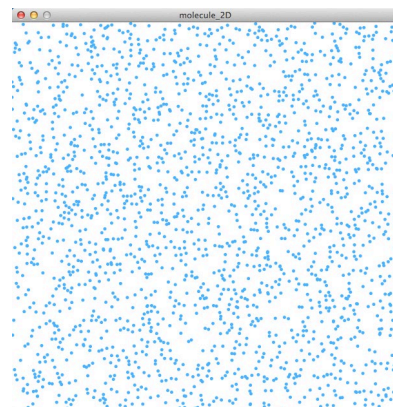


図1 2Dでのシミュレーションの様子 (分子数 2000)

また、反発係数の値を変化させて力学的エネルギー保存則が成り立つことを確認した。

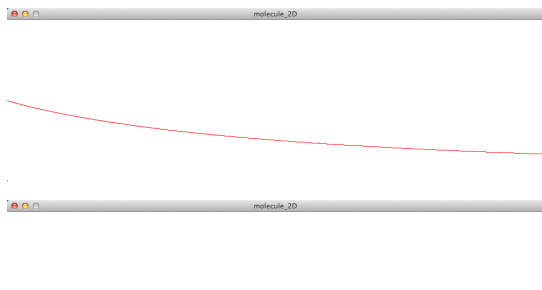


図2 総エネルギー量のグラフ
横軸が時間、縦軸が総エネルギー量を表す。
上が $e=0.99$ 、下が $e=1.00$ のもの。

3.2 3Dでのシミュレーション

平面でのシミュレーションを元にして、三次元空間上でシミュレーションを行った。

今回は平面から三次元空間への移行を円滑に進めるため、ベクトルの演算を行えるようなプログラムを組んだ。平面の場合と同一の演算で処理することが可能なので、より簡潔に記述することができる。

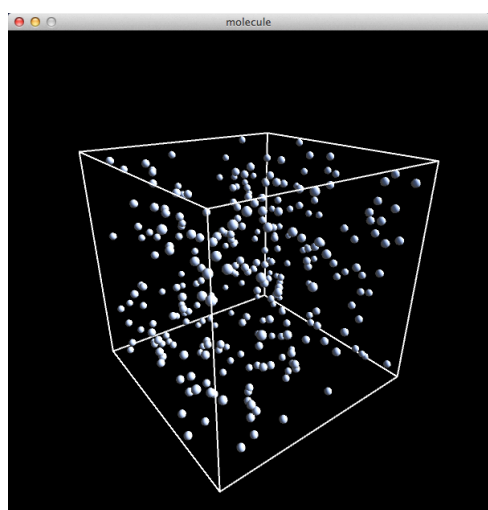


図3 3Dでのシミュレーションの様子
(分子数 300)

4. 今後の課題

今回作成したシミュレーターに温度や圧力等のパラメーターを追加して、より現実の挙動に近づけていきたいと考えている。

また、反発係数が極端に低いと図4のように分子同士が集まって隅に固まるという現象が見られたので、これが自然界でも実際に起こるのかどうかについて考えていきたい。

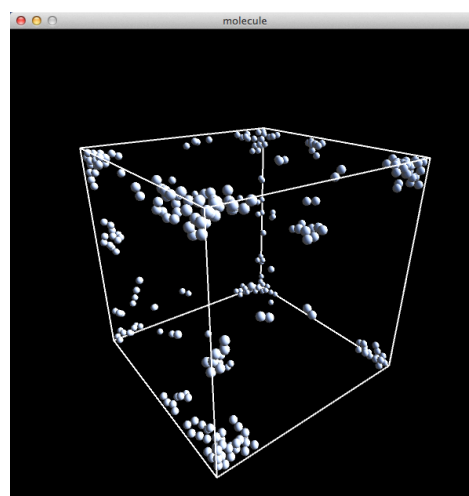


図4 反発係数が極端に低い場合

5. 参考文献

- [1]Processing リファレンス
<https://processing.org/reference/>
- [2]Processing による 3D プログラミング
<http://yoppa.org/proga10/1301.html>
- [3]「ゲーム開発のための物理シミュレーション入門」, オーム社

6. 謝辞

今回の研究を行うにあたり、顧問の守本先生にご指導いただきました。ありがとうございました。