

散逸粒子動力学法による音波伝搬解析

Simulation of Acoustic Propagation Employing Dissipative Particle Dynamics Method

岐阜高専電制¹ ○(B)棚橋 秀斗¹, 黒山 喬允¹

NIT, Gifu college¹, °Shuto Tanabashi¹, Takanobu Kuroyama²

E-mail: kuroyama@gifu-nct.ac.jp

1. はじめに

音波伝搬解析には一般に波動方程式の数値解法が用いられるが、この手法では熱の授受等を伴う境界条件を扱うことは困難である。このため分子動力学法を用いる手法が提案されている¹⁾。しかし、この手法では μm オーダを超える空間、 ns オーダを超える時間の解析は難しい。本報告では、分子動力学法に比べて広い空間と時間を扱える散逸粒子動力学(DPD)法の音波伝搬解析への適用可能性を検証する。

2. DPD 法

DPD 法では N_m 個の分子を束ねた粗視化粒子に対し、タイムステップ Δt ごとに粒子間の相互作用を逐次計算する。 i 番目の粗視化粒子の位置 \mathbf{r}_i 、速度 \mathbf{v}_i は次式で与えられる。

$$d\mathbf{r}_i/dt = \mathbf{v}_i, \quad (1)$$

$$m d\mathbf{v}_i/dt = \sum_{i \neq j} (\mathbf{F}_{ij}^C + \mathbf{F}_{ij}^D + \mathbf{F}_{ij}^R) \quad (2)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^C = a_{ij} w(\mathbf{r}_{ij}), \quad (3)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -\eta w^2(r_{ij})(\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \mathbf{r}_{ij} / |\mathbf{r}_{ij}|^2, \quad (4)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^R = \sigma w(r_{ij}) \zeta_{ij} \Delta t^{-1/2} \mathbf{r}_{ij} / |\mathbf{r}_{ij}|, \quad (5)$$

$$w(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} 1 - |\mathbf{r}_{ij}|/r_c & (|\mathbf{r}_{ij}| < r_c) \\ 0 & (|\mathbf{r}_{ij}| \geq r_c) \end{cases}, \quad (6)$$

m は粗視化粒子の質量、 ζ_{ij} は白色雑音、 r_c はカットオフ距離、 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ である。粗視化粒子の数密度 $\rho = 3$ に対し、斥力パラメータ $a_{ij} = 25$ となる²⁾。 σ は揺らぎの大きさ、 η は摩擦係数でありボルツマン係数 k_B と絶対温度 T を用いて、 $\sigma^2 = \eta k_B T$ の関係がある。計算は $k_B T = 1$ 、 $r_c = 1$ 、 $m = 1$ と規格化して行う。分子の体積 V_m より、 r_c は $(\rho N_m V_m)^{1/3}$ に相当する。単位時間 τ は、熱運動速度が実世界の値 V と対応するよう $\tau = r_c / V$ と定める。音速を c とすれば、DPD 系において波長 Λ と周波数 f の関係は次式で与えられる。

$$\Lambda = c / (fV). \quad (7)$$

3. シミュレーション結果

DPD 法による音場伝搬解析の妥当性を検証するためシミュレーションを行った。シミュレーション空間は $0 \leq x \leq 2400r_c$ 、 $0 \leq y \leq 30r_c$ 、 $0 \leq z \leq r_c$ の直方体とし、 y, z 方向端は周期境界、 x 方向の上端は完全反射境界、下端は位置 $x_1 =$

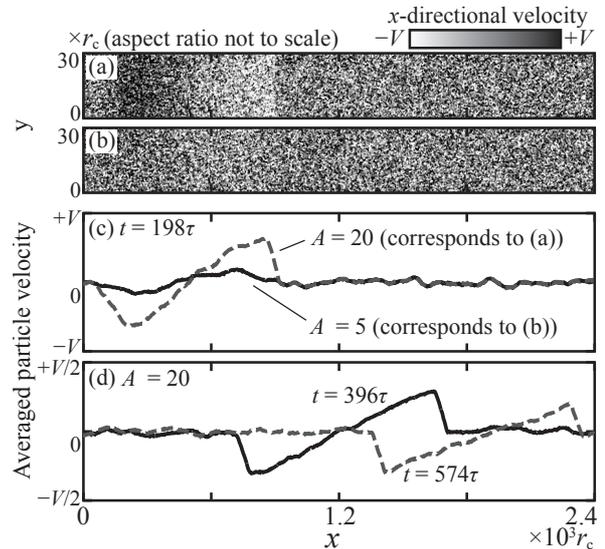


Fig. 1 Simulation result. (a) and (b): Particle velocities with $A = 5r_c$, $20r_c$, respectively. (c) and (d): Particle velocities averaged along y -direction.

$x_1(t)$ が次式で表される完全反射境界とした。

$$x_1(t) = \begin{cases} A \cos(2\pi ft) & (t < 1/f) \\ A & \text{other} \end{cases}. \quad (8)$$

Figure 1 に周波数 $f = 1/(198\tau)$ において、 $A = 5r_c$ 、 $20r_c$ としたときのシミュレーション結果を示す。 x 方向下端より生じた音波が上端に向かって伝搬していることがわかる。下端の最大振動速度が大きくなる $A = 20r_c$ の条件では、波形が歪み衝撃波面が形成されている。水の温度が 298 K のとき $V = 370 \text{ m/s}$ 、 $c = 1497.28 \text{ m/s}$ であり、Eq. 7 から波長 $\Lambda = 800r_c$ となる。これは Fig. 1(c) から求めた音波の波長とよく一致する。

4. まとめ

水中を伝搬する音波を DPD 法によって解析した。その結果、伝搬する音波の波長は理論値とよく一致し、解析の妥当性が示された。

謝辞

本解析は岐阜高専専攻科航空宇宙研究グループの計算機を用いて行った。

参考文献

- 1) 小坂 勇人他: 2013 年秋季音響学会講演論文集, 1421.
- 2) R. D. Groot and P. B. Warren: J. Chem. Phys. **107** (1997) 4423.