

# 液相の圧縮性を考慮した気泡崩壊時の局所圧力場に対する

## 微視的および巨視的解析

### Microscopic and macroscopic analysis on local pressure field at bubble collapse taking account of liquid compressibility

- 高木弘輝, 九大院, 福岡市西区元岡 744, E-mail:h.takaki.035@s.kyushu-u.ac.jp  
 津田伸一, 九大, 福岡市西区元岡 744, E-mail:tsudashin@mech.kyushu-u.ac.jp  
 渡邊聡, 九大, 福岡市西区元岡 744, E-mail:fmnabe@mech.kyushu-u.ac.jp  
 Hiroki TAKAKI, Grad. Kyushu Univ., 744 Motooka, Nishi-ku, Fukuoka  
 Shinichi TSUDA, Kyushu Univ., 744 Motooka, Nishi-ku, Fukuoka  
 Satoshi WATANABE, Kyushu Univ., 744 Motooka, Nishi-ku, Fukuoka

Numerical prediction of cavitation erosion caused by bubble collapse is sometimes required in nano-scale, so we have to understand the collapse behavior of nano-scale bubble exactly. We obtained local pressure distribution, which is based on a mechanical definition, around the collapsing bubble simulated by molecular dynamics (MD) and compared it with the fluid pressure expected by unsteady Bernoulli equation taking account of liquid compressibility in order to understand the difference between microscopic and macroscopic perspectives. As a result, both results fairly corresponded except the time just before/after collapse, which indicates that the liquid pressure field even around a nano-scale bubble can be mostly described by continuum mechanics.

#### 1. 緒言

キャビテーション気泡の崩壊により引き起こされる材料のエロージョン<sup>(1)</sup>は、流体機械の寿命低下を招くことから、古くより問題視されているとともに、近年ではエロージョン予測のための数値計算手法の開発も積極的に進められてきている。一般にキャビテーションによるエロージョンではマイクロスケールの気泡崩壊による影響が大きく、実際にエロージョンの数値計算手法も、ほぼ全てが連続体力学(流体力学や固体力学)に基づいたものである。しかし、たとえば液体水素や液体窒素に代表される極低温流体のように、不凝縮ガスや不純物の非常に少ない液体ではナノスケールの気泡崩壊の影響が現れる可能性もあり、上述の数値計算手法に対して連続体の仮定がどの程度成立するかどうかについて、検証しておく必要がある。

このような背景も踏まえ、ナノスケールの気泡挙動に対する連続体力学の適用妥当性を明らかにしようとする研究が複数行われてきている<sup>(2,3)</sup>。しかしながら、エロージョン予測においてより重要な気泡崩壊時における気泡周囲の圧力場の妥当性を検証する研究は行われていない。そこで、著者らの先行研究<sup>(4)</sup>では、分子動力学(Molecular Dynamics: MD)シミュレーションにより求めた非定常非平衡下の圧力場を連続体の仮定に立脚した非定常 Bernoulli の式から得られる圧力場と比較し、連続体力学の適用妥当性を検討した。その結果、気泡の崩壊速度が比較的速い場合、MD と連続体力学から求めた圧力場に差が生じた。この一因としては、前報<sup>(4)</sup>では連続体解析において液相の圧縮性を正しく考慮していなかった点が挙げられる。そこで、本研究では MD により気泡崩壊時の周囲圧力場を純粋に力学的に定義された圧力として求めた上で、液相の圧縮性を考慮した非定常ベルヌーイの式から得られる流体力学(Fluid Mechanics: FM)的圧力場との合致度を検討した。

#### 2. 計算手法

##### 2.1 MD シミュレーション法

本研究では、液体アルゴン中におけるナノスケール気泡の崩壊挙動を解析対象とし、アルゴンの分子間ポテンシャルには Lennard-Jones (12-6) ポテンシャルを適用した。分子数は 87,808 個とし、計算領域は周期境界条件を課した約 16nm の立方体として

いる。

気泡崩壊の具体的なシミュレーション方法は以下の通りである。まず、十分に減圧された負圧下の準安定液体を MD によりシミュレートし、計算系内に気泡を生成させる。これにより、気液平衡状態にあるアルゴン蒸気泡を模擬する。また、その際の気泡重心が計算領域のほぼ中心に来るように、周期境界条件下において全分子を平行移動させておく。その上で、計算領域の瞬時等方圧縮により計算領域内を昇圧し、気泡を崩壊させる。なお、本研究の解析では、瞬時圧縮後の気泡崩壊過程を対象とするが、この過程はすべて NVE (分子数  $N$ , 体積  $V$ , 内部エネルギー  $E$ ) 一定の MD シミュレーションにより模擬した。

##### 2.2 局所圧力の計算

局所の圧力は、検査面の方法として知られている、微小な検査面を通過する分子の運動量と分子間力から求められる<sup>(5)</sup>。具体的に、ある検査面に働く法線方向 ( $k$  方向) の圧力  $p_k$  は、式(1)のように表すことができる。

$$p_k = \frac{1}{A\Delta t} \sum_{i,t} |m(\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}}) \cdot \mathbf{n}_k| + \frac{1}{A} \left( \sum_{ij} F^{ij} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{n}_k}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right) \quad (1)$$

ここで、 $A$  は検査面の面積、 $\mathbf{n}_k$  はその単位法線ベクトルを表し、 $m$  は分子の質量、 $\mathbf{v}_i$  は検査面を通過する分子  $i$  の速度、 $\bar{\mathbf{v}}$  は検査面を通過する分子の時間平均速度(平均時間は  $\Delta t$ )、 $F^{ij}$  は検査面をはさんで相互作用する分子  $i$  と  $j$  の分子間力、 $\mathbf{r}_i$ ,  $\mathbf{r}_j$  は分子  $i$ ,  $j$  の位置である。右辺第 1 項は時間  $\Delta t$  の間に検査面を通過する分子の熱速度に起因する運動量の和を、第 2 項はある時刻に検査面を横切る分子間力  $F^{ij}$  の和を意味する。なお、本研究では検査面を通過する運動量、分子間力ともに 1 ステップ (約 5fs) ごとに計算し、 $\Delta t = 0.2\text{ps}$  とした。また、検査面は気泡中心を原点とした球面に設定し、その法線方向の圧力を評価した。検査面の間隔は分子径  $\sigma$  の半分と

し、式(1)で求まる圧力を後述の液相の圧縮性を考慮した FM の圧力と比較することで、FM の適用妥当性を検討した。

### 3. FM による計算手法

本節では、流体力学 (FM) 的に圧力場を予測する方法を述べる。まず、気泡中心を原点とする極座標系において、球対称性を仮定した上で、動径方向の座標を  $r$  とする。このとき、任意の位置  $r$  と計算領域境界近傍の位置  $r = R_0$  の 2 点間において、非定常性を考慮したベルヌーイの式は式(2)のように表される。ここで、気液界面の液相側境界座標を  $r = R$ 、 $r > R$  における動径方向の流速を  $u$  としている。

$$\int_{R_0}^r \frac{\partial u}{\partial t} dr + \frac{1}{2} \{u(r)^2 - u(R_0)^2\} = - \int_{R_0}^r \frac{dp}{\rho} \quad (2)$$

式(2)の左辺第 1 項は気泡運動に伴う非定常項である。ここで、本研究では  $NVE$  一定の MD シミュレーションを行っているため、パロトロピ性のもと、等エントロピ変化を仮定すると、式(2)から式(3)が得られる。

$$\int_{R_0}^r \frac{\partial u}{\partial t} dr + \frac{1}{2} \{u(r)^2 - u(R_0)^2\} = -c^2 \ln \frac{\rho(r)}{\rho(R_0)} \quad (3)$$

ここで、 $c$  は液相領域の音速であるが、積分区間での音速が概ね一様と仮定し、音速  $c$  を式(2)右辺の積分項の外に出すことで、式(3)を導出している。本稿での音速  $c$  は、 $NVEPG$  アンサンブルを用いた MD シミュレーション<sup>6)</sup> から算出した。気液界面領域の液相側境界  $r = R$  における流速を  $\dot{R}$ 、加速度を  $\ddot{R}$  と表すと、式(3)から式(4)が得られる。

$$\rho(r) = \rho(R_0) \cdot \exp \left[ \frac{1}{c(R_0)^2} \left\{ -\frac{1}{2} R^4 \dot{R}^2 \left( \frac{1}{r^4} \right) + \frac{1}{2} u(R_0)^2 + (2R\dot{R}^2 + R^2\ddot{R}) \frac{1}{r} - \frac{2R\dot{R}^2 + R^2\ddot{R}}{R_0} \right\} \right] \quad (4)$$

すなわち、距離  $r$  での密度  $\rho(r)$  は式(4)のように表される。なお、気液界面位置の定義には任意性があるが、本稿では MD より得られる気泡周囲の密度分布から明らかに液相とみなしてよい境界位置において半径  $R$  を定義し、 $R$  とその速度  $\dot{R}$ 、加速度  $\ddot{R}$  を式(4)に代入することで FM から予測される液相の密度分布を求めた。なお、本稿での  $\dot{R}$  は  $\dot{R}$  を 1ps の間で中心差分近似することで求めた。また、密度を圧力へ変換することで FM での圧力場とし、これを MD の結果と比較することとした。ここでは、密度から圧力へ変換する方法として簡便ではあるが、断熱圧縮の MD シミュレーションを別途行い、等エントロピ変化時の密度と圧力の関係を求めた<sup>7)</sup>。なお、 $R_0 = 8.0\text{nm}$  としている。

### 4. 結果および考察

まず MD シミュレーションの結果として得られた、収縮開始後の気泡半径の時間変化を Fig. 1 に示す。これより、気泡が次第に収縮していき、一度消滅しているが、その後、再膨張するリバウンドおよび再収縮が生じていることがわかる<sup>4)</sup>。また、Fig. 2 は気泡収縮時の 6.60ps、11.0ps と気泡膨張時の 15.4ps、19.8ps の 4 時刻

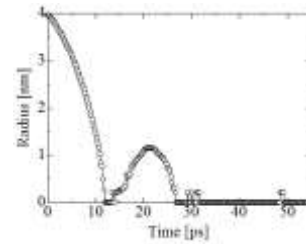


Fig. 1 Radius change of a bubble in MD simulation.

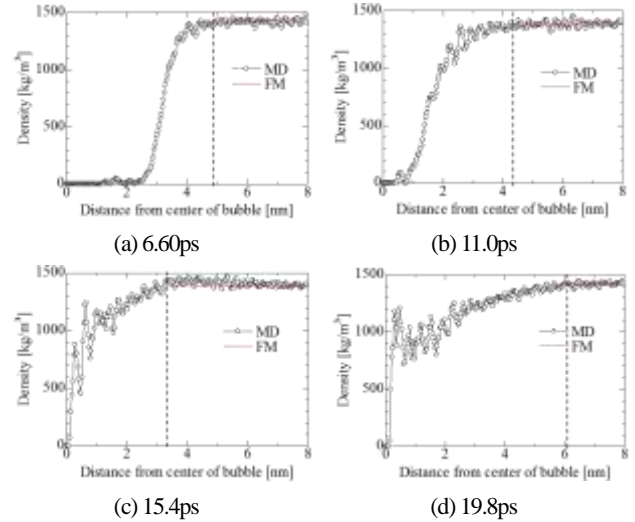


Fig.2 Comparison of density between MD and FM.

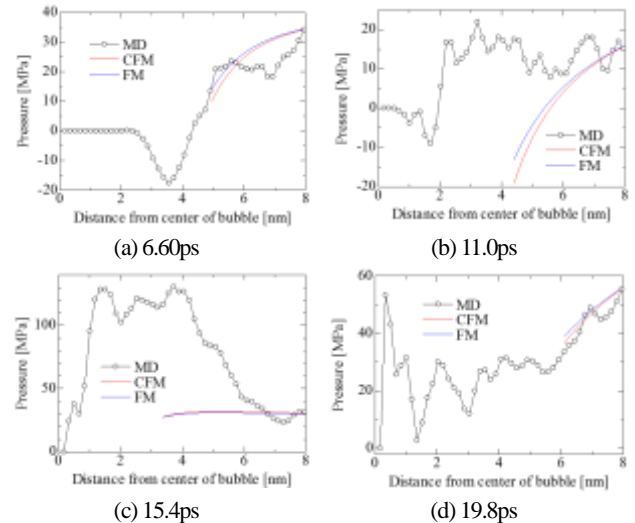


Fig.3 Comparison of pressure field between MD and FM.

分における気泡中心からの密度分布について、MD と式(4)から求めた FM の結果を示している。MD での密度分布から Fig. 2 の破線よりも右側の領域を液相とみなして、FM の密度分布を得た。すなわち、破線の位置において、式(4)の  $R$ 、 $\dot{R}$ 、 $\ddot{R}$  を MD の結果より与えている。また、この密度分布から FM の圧力を求めた。

以上を踏まえた上で、Fig. 3 に式(1)より求めた MD の圧力と、圧縮性を考慮した FM による液相圧力の比較結果を、Fig. 2 と同様に 4 時刻分について示す。ここで、圧縮性の影響を評価するため、既報<sup>4)</sup>の非圧縮性を仮定した非定常ベルヌーイの式により予測される液相圧力の結果も示している。両者を区別するために圧縮性を考慮した FM を CFM とする。Fig. 3 より 6.60ps と 19.8ps の二時刻については FM の圧力が MD の結果と一致する傾向にあるすなわち、気泡の崩壊直前直後を除けば、連続体の仮定に立脚した流体力学が気泡周囲の圧力場を定性的に予測可能であることが

示唆される。なお、CFM と FM の差はあまり見られなかったが、これはそもそも液相密度がほぼ一様の領域で圧力分布を比較しているため、圧縮性の影響が大きく表れなかったと考えられる。

一方、11.0ps と 15.4ps については大きなずれが確認できるが、これらはそれぞれ気泡崩壊直前とリバウンド開始直後に相当しており、崩壊前後における強い非平衡挙動が、連続体解析との不一致をもたらした可能性がある。ただし、MD で模擬した気泡が完全に球対称な運動をしていないことも別途確認しており、特に気泡半径が小さい時間領域でその影響が顕在化していることも、ずれの一因になっている。また、分子の熱運動の影響に起因して、FM の圧力場は MD の結果から与える  $\dot{R}$ ,  $\ddot{R}$  の評価精度にも大きく依存し得ることを確認している。以上のことから、連続体解析の適用妥当性の最終判断には、球対称性の仮定や MD から与える条件の妥当性など、連続体解析側における連続体近似以外の仮定や条件設定に対する詳細な見直しが必要である。

## 5. 結言

本研究では、気泡崩壊時の非平衡非定常の局所圧力場を MD で求めるとともに、気泡周囲の圧力場について、液相の圧縮性を考慮した流体力学 (FM) から予測される圧力場と比較した。その結果、気泡の崩壊直前およびリバウンド開始直後を除けば、FM はナノスケールの気泡挙動時に形成される気泡周囲の圧力場を定性的には予測可能であることが示唆された。ただし、連続体解析における連続体近似以外の影響が顕在化していることから、この点の詳細な検討が今後必要である。

## 参考文献

- (1) Hattori, S., "Advanced Experimental and Numerical Techniques for Cavitation Erosion Prediction," Springer, (2014).
- (2) Holyst, R., et al., Phys. Rev. E., 82 (2010), 066309.
- (3) Tsuda, S., et al., J. Phys. Conf. Ser., 656-1(2015), 012039.
- (4) 津田・他 2 名, 日本流体力学学会 2018 講演論文集, (2018).
- (5) 矢口・他 2 名, 日本機械学会論文集 B 編, 75-752(2009), 658-667.
- (6) Karsten, M. and Stephan, K., The Journal of Chemical Physics, 124(2006), 064104.
- (7) 兵頭弘真, 超微小気泡の崩壊過程の分子動力学的解析, 九州大学卒業論文, (2014).