

固体壁面近傍における気泡の非球形崩壊挙動に関する分子動力学解析

Molecular dynamics analysis of non-spherical collapsing behavior of a bubble near a solid wall

- 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, 九大院, 福岡市西区元岡 744, E-mail: tsudashin@mech.kyushu-u.ac.jp
- 渡邊聡, 九大院, 福岡市西区元岡 744, E-mail: fmnabe@mech.kyushu-u.ac.jp
- Hiroki TAKAKI, Grad. Kyushu Univ., 744 Motoooka, Nishi-ku, Fukuoka
- Shinichi TSUDA, Kyushu Univ., 744 Motoooka, Nishi-ku, Fukuoka
- Satoshi WATANABE, Kyushu Univ., 744 Motoooka, Nishi-ku, Fukuoka

Cavitation erosion caused by high pressure released from collapsing bubble is one of the problems in fluid machinery. In some previous studies, the dynamics of a collapsing bubble near a solid wall was found to be related to stand-off parameter γ . Influence of stand-off parameter has been studied, but the detailed mechanisms are not clear, especially for the small stand-off parameter, $\gamma < 1$. Particularly in such small γ , some influence at molecular scale such as behavior of contact line may not be ignored. Therefore, in the present study, we use molecular dynamics simulation to investigate the shock-induced collapsing behavior of a nanoscale bubble near a solid wall for the two stand-off parameters ($\gamma > 1$ and $\gamma < 1$). The result for the two stand-off parameters is discussed including the development of the micro jet and the pressure on the center of the solid wall, where different behavior is observed.

1. 緒言

ポンプや水車などの液体を作動流体として扱う流体機械では、しばしばキャビテーションが問題となる。キャビテーションは機械の性能低下、不安定振動などを引き起こす。また、キャビテーション気泡の崩壊時に生じる局所的な衝撃圧や水中ジェットにより誘発されるエロージョン⁽¹⁾は、流体機械の損傷ひいては寿命低下に繋がる。そのため工学的観点において固体壁近傍における気泡の崩壊挙動の詳細な理解が必要である。

これまで、固体壁近傍のキャビテーション気泡崩壊に関しては、高速度撮影が多数行われてきており^(2,3)、たとえば Philipp と Lauterborn⁽⁴⁾はキャビテーション気泡の崩壊によりもたらされる固体壁面への衝撃に、スタンドオフパラメータ γ ($\gamma = d/R_{\max}$, d は気泡中心と壁面表面との距離, R_{\max} は最大気泡半径) が及ぼす影響を実験的に調査してきている。また、CFD 等による固体壁近傍の気泡崩壊のシミュレーション^(5,6)も行われており、数値解析においてもスタンドオフパラメータの違いによる気泡の崩壊挙動の差異が議論されてきている。また、近年では、より微小な気泡の崩壊過程を対象とした、分子動力学 (Molecular Dynamics : MD) シミュレーションによる解析も複数行われてきている^(7,8)。しかしながら、実験および数値解析の双方において、スタンドオフパラメータが 1 未満の、固体壁面に付着した気泡の崩壊挙動に関する研究⁽⁹⁾は非常に少なく、十分な知見は得られていない。特に $\gamma < 1$ の場合、固気液三相界線の分子スケールの挙動が気泡崩壊に影響を及ぼす可能性もあり、この点も含めた詳細な検討が必要であると考えられる。

そこで本研究では、スタンドオフパラメータが 1 未満のときの微小気泡の崩壊挙動の解明を最終目的として、衝撃波による気泡崩壊挙動を MD シミュレーションにより模擬した。スタンドオフパラメータの影響を議論するため、壁面に気泡が付着していない場合と付着している場合 ($\gamma > 1$, $\gamma < 1$) の 2 条件で計算を行った。これにより、衝撃波による気泡の崩壊前後の密度場、速度場、圧力場を取得したうえで、気泡崩壊メカニズムに対するスタンドオフパラメータの影響を定性的に検討した。

2. 数値解析手法

2. 1 分子モデルと計算条件

Table 1 Potential parameter

σ_{Ar} [nm]	ϵ_{Ar} [J]	m_{Ar} [kg]
0.34	1.67×10^{-21}	6.64×10^{-26}
r_0 [nm]	k [N/m]	m_{Pt} [kg]
0.277	46.8	3.24×10^{-25}

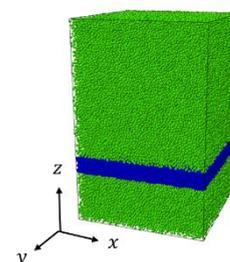


Fig. 1 Schematic diagram of the system. Argon atom is shown as green dot, and platinum atom is shown as blue dot, respectively.

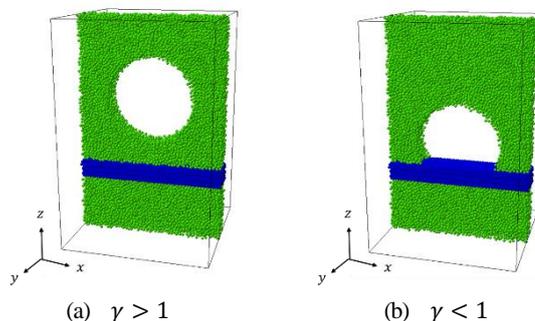


Fig. 2 Schematic diagram of the initial setup of the system.

本研究では、固体壁面近傍における液体中の気泡の崩壊現象を模擬した。液体分子間ポテンシャルに Lennard-Jones ポテンシャル (L-J ポテンシャル) を、固体壁面分子間ポテンシャルに Harmonic ポテンシャルを、液体-固体壁面分子間ポテンシャルに L-J ポテンシャルをそれぞれ採用した。ナノスケールにおける気泡崩壊メカニズムの理解を容易にするため、計算系は全て単原子分子によ

り構成することとし、液体はアルゴン分子で、固体壁面は白金で模擬した。本研究で用いたポテンシャルパラメータを Table 1 に示す。σ を分子径、ε をポテンシャルの井戸の深さ、m を分子質量、r₀ を最近接分子間距離、k をバネ定数とした。なお、本稿では、以降に示す物理量や計算結果の値は特に断りがない限り、アルゴンのパラメータを用いて無次元化したうえで表示する。液体—固体壁面分子間のポテンシャルパラメータ σ_{INT}、ε_{INT} は Maruyama ら⁽¹⁰⁾を参考に、σ_{INT} は 0.3085nm、ε_{INT} は 0.688 × 10⁻²¹J とした。L-J ポテンシャルを用いる全ての計算で、分子間相互作用のカットオフ距離は 3.5 とした。

計算系は Fig. 1 に示す通りであり、x, y, z 方向にそれぞれ 48.9 × 49.4 × 75.6 の直方体の領域内に、厚さ 5.99 のスラブ状の白金壁面が存在する。衝撃波衝突時における壁面の変形を抑制するために、固体壁面下方にもアルゴン分子を配置しているが、解析対象そのものは壁面上部とした。アルゴン分子は 116,577 個、壁面分子は 37,800 個から成り、x, y, z 方向に周期境界条件を課した。壁面分子は、最も面密度が高くなるように fcc<111> 面を 9 層 (1 層 4200 個) 並べて構成した。壁面の温度は、壁面分子の 5 層目を固定層とし、固定層の上下 (4 層目, 6 層目) の壁面分子には Langevin 熱浴法⁽¹¹⁾を適用することにより温度を 0.90 に制御した。なお、時間刻みは 1.0 × 10⁻³ (2.2fs) である。

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。平衡液体から初期気泡半径を R_{max} = 15.0 として、スタンドオフパラメータが γ > 1 と γ < 1 となるように液体分子を取り除くことで真空気泡を生成する。Fig. 2 がそれぞれの分子を取り除いた直後である。その後、Vedadi ら⁽⁹⁾の方法を用いて衝撃波を気泡に衝突させることで崩壊させた。衝撃波シミュレーションでは、計算領域の z 方向上端から 6.0 だけ上方の位置に、x-y 面に並行な反射壁を設け、水平方向のみに周期境界条件を課した。また、温度制御は外したうえで、初期時刻 t = 0 において、反射壁に向かって白金分子を含む全分子に +z 方向に粒子速度を与え、反射壁に達した分子の速度の z 成分を反転させることで、-z 方向に衝撃波を生じさせた。本計算では、全分子に与える粒子速度を +z 方向に 6.0 とした。このとき発生した衝撃波の速度は、密度の不連続位置の時間変化と与えた粒子速度から 17.0 となった。なお、これは Rankine-Hugoniot の式から算出される衝撃波の速度 17.3 と非常に近い値であり、連続体の保存則ともよく一致することを確認している。

2. 2 評価する物理量

流体中の密度場、速度場、圧力場については Δx × Δy × Δz = 1.0 × 1.0 × 1.0 のセルで計算領域を分割し、Δt = 100 の間の時間平均をとることで算出した。ただし、速度場に関しては、粒子速度を引いた数値 (固体壁から見た相対速度) で評価した。

流体に働く応力テンソルの αβ 成分 σ_{αβ} 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⁽¹²⁾。σ_{αβ} の添字の最初と最後は、対象とする面および応力の方向を表す。具体的に、応力テンソル σ_{αβ} は、式 (1) のように表すことができる。

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{A_{\alpha}\Delta t} \sum_{i,\Delta t} |m(\mathbf{v}_i - \bar{\mathbf{v}}) \cdot \mathbf{e}_{\beta}| + \frac{1}{A_{\alpha}} \left\langle \sum_{ij} F^{ij} \frac{|(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{e}_{\beta}|}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right\rangle_M \quad (1)$$

ここで、A_α は検査面の面積 (本研究では、A_α = 1.0 × 1.0)、e_β は β 方向の単位法線ベクトルを表し、m は分子の質量、v_i は検査面を

通過する分子 i の速度、v̄ は検査面を通過する分子の時間平均速度、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、r_i、r_j は分子 i、j の位置である。右辺第 1 項は時間 Δt 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、検査面を通過する運動量、分子間力は、ともに 1 ステップ (約 2fs) ごとに計算した。

一般に、粘性流体における法線応力は圧力のみではなく、σ_{xx}、σ_{yy}、σ_{zz} は互いに等しくない。そこで、流れの動力学的圧力 p とし、次に示す平均値を考える (ストークスの仮説)⁽¹³⁾。

$$p = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \quad (2)$$

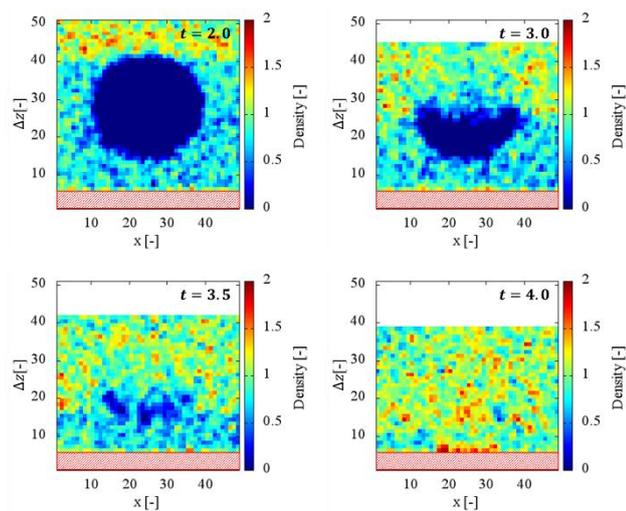
本研究では、式 (2) から算出される圧力 p を熱力学的圧力として圧力場を評価した。

3. 結果および考察

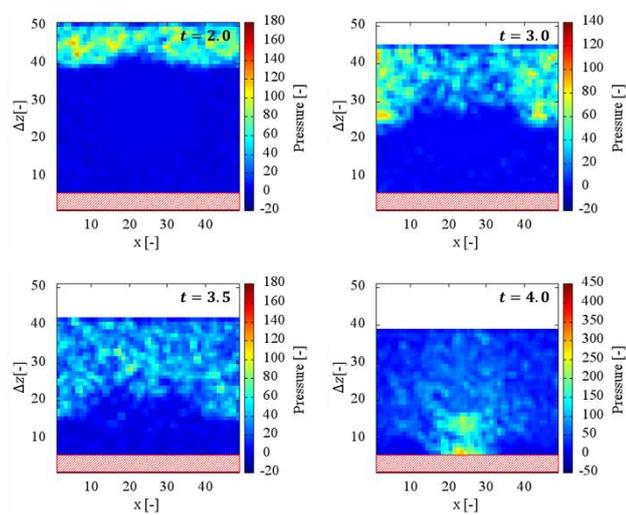
Fig. 3, Fig. 4 に γ > 1, γ < 1 のときの y 方向中心位置での x-z 二次元面の密度場、圧力場、速度場をそれぞれ 4 時刻分ずつ示す。本計算では、固体領域 (白金分子) にも粒子速度を与えることで、+z 方向に移流しているため、便宜上 z 座標に関しては、壁面下層からの相対距離 Δz で示している。そのため、反射壁が相対的に下方に移動している。なお、図中の下部、赤塗りの領域が固体である。

まず、Fig. 3 の壁面に気泡が付着していない場合 (γ > 1) について述べる。密度場からは、密度 0 (青) の領域が気泡内部を示していることがわかる。t = 2.0 のときは、気泡形状は球形であるが、時間が経つにつれ、気泡上端部から潰れていきパラシュート状になり、t = 4.0 のときには、気泡は完全に消滅した。圧力場からは、高い圧力波が固体壁面に向かって伝搬していくとともに、t = 4.0 のとき、壁面中心位置に非常に高い圧力 (最大圧 450, 18GPa) が作用していることがわかる。また、速度場からは、気泡上部の分子が気泡内部に向かって加速され、マイクロジェットが形成がみられている。噴流の最大流速は 30 (4.7km/s) であり、衝撃波の速度 17 よりも大きい値であった。ここで、本計算で求めた最大圧、最大流速は類似の先行研究⁽⁸⁾とも同オーダーであることを確認している。以上をまとめると、圧力波が気泡上部に衝突した後、気泡上部の分子が低密度の気泡中心に向かって加速されることで、ジェットが形成される。また、このジェットが壁面と衝突することで、壁面中心位置に非常に高い圧力が作用したと考えられる。

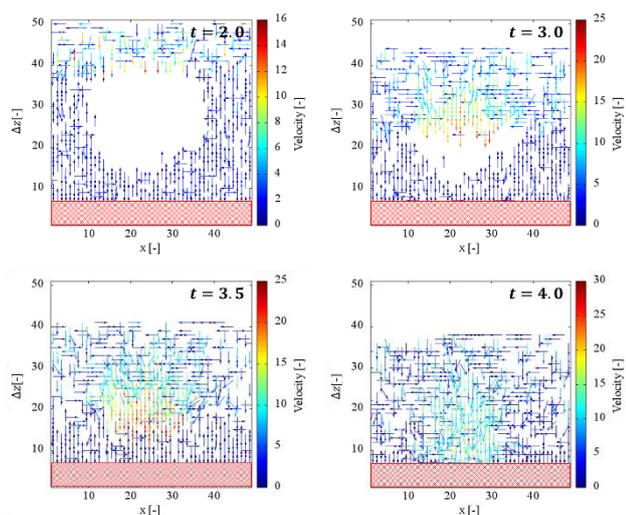
次に、Fig. 4 の壁面に気泡が付着している場合 (γ < 1) について述べる。まず密度場からは、気泡が徐々に潰れていき、t = 4.2 のときに消滅しているのがわかる。また崩壊直前 (t = 3.8) の気泡形状は扁平に近く、γ > 1 の場合とは異なっている。一方、圧力場からは、圧力波が鉛直下方に伝搬していき、t = 4.2 のとき、壁面中心位置に局所的ではあるものの高い圧力 (最大圧 350, 14GPa) が作用していることが確認できる。速度場からは、気泡上部の分子が壁面に向かって加速されているのがわかるが、噴流の最大流速は 25 (3.9km/s) であった。以上より、最大圧、最大流速ともに γ > 1 の場合に比べると小さいことがわかるが、これはマイクロジェットの発達に十分な距離がなかったためである。なお、本研究の計算結果は、数少ない CFD 解析によるスタンドオフパラメータ γ < 1 の計算結果⁽⁹⁾と、気泡の崩壊形態に差異はあるものの、スタンドオフパラメータによるマイクロジェットの形成の有無は定性的に一致している。



(a) Density field

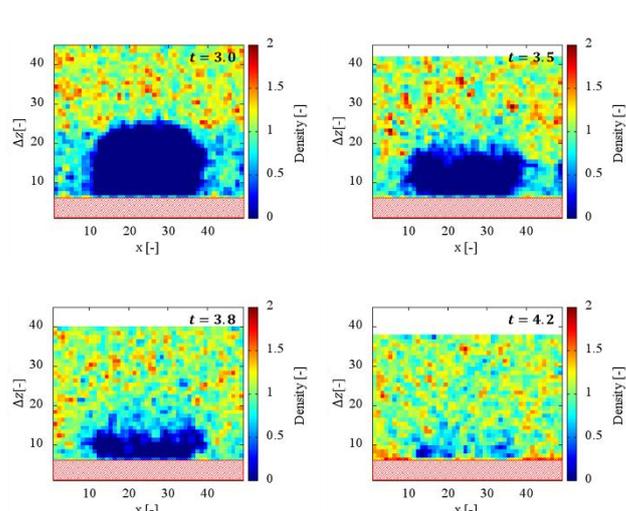


(b) Pressure field

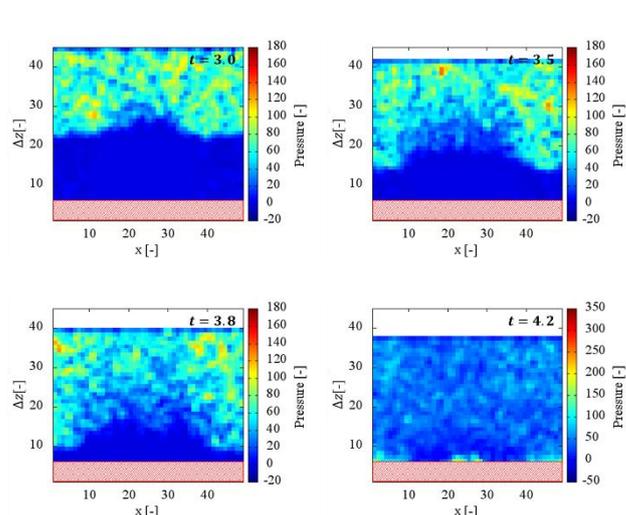


(c) Velocity field

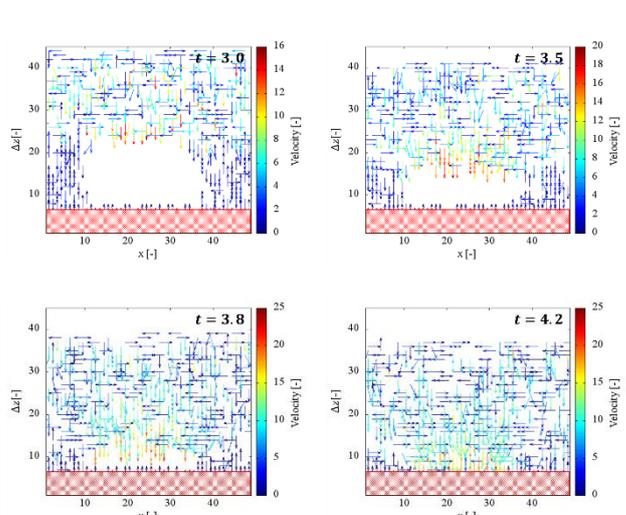
Fig.3 The contours of density, pressure and velocity field with $\gamma > 1$ at $t = 2.0, 3.0, 3.5,$ and $4.0,$ respectively.



(a) Density field



(b) Pressure field



(c) Velocity field

Fig.4 The contours of density, pressure and velocity field with $\gamma < 1$ at $t = 3.0, 3.5, 3.8,$ and $4.2,$ respectively.

4. 結言

本研究では、スタンドオフパラメータが気泡の崩壊挙動に与える影響を評価するために、MD シミュレーションを行った。中でも、研究例が非常に少ないスタンドオフパラメータ γ が1未満のときの崩壊メカニズム解明のため、 $\gamma > 1$ 、 $\gamma < 1$ の2条件で比較を行った。その結果、スタンドオフパラメータによりマイクロジェット形成の有無が見られ、気泡の崩壊形状に影響を与えた。また、気泡崩壊時の壁面中心位置での高圧領域は $\gamma > 1$ の場合の方が大きい、少なくとも本計算条件の場合、 $\gamma < 1$ の場合についても無視し得ない大きな衝撃圧は発生している。

今後は、特に $\gamma < 1$ の場合について、CFD 等による連続体解析との比較・解析を行い、ナノスケール特有のメカニズムの有無を詳細に検討する予定である。

謝辞

本研究の遂行にあたり、國嶋雄一博士（九州大学特任助教）から多くの助言を頂きました。ここに記して謝意を表します。

参考文献

- (1) Hattori, S., "Advanced Experimental and Numerical Techniques for Cavitation Erosion Prediction," Springer, (2014).
- (2) N. K. Boume and J.E. Field, J. Appl. Phys. 78, 4423(1995).
- (3) W. Lauterborn and W. Hentschel, Ultrasonics 23, 260(1985).
- (4) A. Philipp and W. Lauterborn, "Cavitation erosion by single laser-produced bubbles," J. Fluid Mech. 361, 75 (1998).
- (5) J. Blake, Y. Tomita, and R. Tong, The Art, Craft and Science of Modelling Jet Impact in a Collapsing Cavitation Bubble (Springer, 1998).
- (6) E. A. Brujan, G. S. Keen, A. Vogel, and J. R. Blake, "The final stage of the collapse of a cavitation bubble close to a rigid boundary", Phys. Fluids 14, 85 (2002).
- (7) M. Vedadi, A. Choubey, K. Nomura, R. K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta, and A. C. T. van Duin, Phys. Rev. Lett. 105, 014503 (2010).
- (8) Adarsh Shekhar, Ken-ichi Nomura, Rajiv K. Kalia, Aiichiro Nakano, and Priya Vashishta, "Nanobubble Collapse on a Silica Surface in Water: Billion-Atom Reactive Molecular Dynamics Simulations", Phys. Rev. Lett., 111, (2013).
- (9) L. T. Liu, X. L. Yao, A. M. Zhang, and Y. Y. Chen, "Numerical analysis of the jet stage of bubble near a solid wall using a front tracking method", Phys. Fluids 29, 012105(2017).
- (10) S. Maruyama, T. Kimura and M-C. Lu., "Molecular Scale Aspect of Liquid Contact on a Solid Surface", Thermal Science & Engineering, Vol. 10, 6(2002).
- (11) Blämer, J. and Beylich, A. E., Proc 20th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics, pp.392-397, (1997).
- (12) 矢口・他2名, 日本機械学会論文集B編, 75-752(2009), 658-667.
- (13) 古川明德, 瀬戸口俊明, 林秀千人, 流れの力学, 朝倉書店, (1999).