



Kandidaatintutkielma
Fysikaalisten tieteiden kandidaattiohjelma
Opintosuunta Fysiikka

Akustisen kavitaation mallinnus

Niko Molin
014290770

April 24, 2024

Ohjaaja: yliopistonlehtori Antti Kuronen

Tarkastaja: yliopistonlehtori Antti Kuronen

MATEMAATTIS-LUONNONTIETEELLINEN TIEDEKUNTA

PL 64 (Gustaf Hällströmin katu 2a)
00014 Helsingin yliopisto

Tiedekunta — Fakultet — Faculty		Koulutusohjelma — Utbildningsprogram — Degree programme	
Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta		Fysikaalisten tieteiden kandidaattiohjelma Opintosuunta Fysiikka	
Tekijä — Författare — Author			
Niko Molin 014290770			
Työn nimi — Arbetets titel — Title			
Akustisen kavitaation mallinnus			
Työn laji — Arbetets art — Level		Aika — Datum — Month and year	
Kandidaatintutkielma		April 24, 2024	
		Sivumäärä — Sidantal — Number of pages	
		19	
Tiivistelmä — Referat — Abstract			
<p>Tässä työssä tutkittiin laskennallisin molekyylidynaamisin menetelmin veden homogeenista akustista kavitaatiota ja sitä, kuinka makroskooppisesti havaitut akustisen kavitaation ominaisuudet esiintyvät nanoskaalassa. Simulaatiot tehtiin LAMMPS-ohjelmistolla. Työ antoi viitteitä siitä, että Rayleigh-Plessetin yhtälö toimii hyvinkin pienillä säteillä ja että ultraäänisessä kavitaatiossa suurempi amplitudi nopeuttaa kavitaation syntyä. Samoin havaittiin, että suuremmat taajuuudet viivästyttävät kavitaation alkamista GHz-taajuudella. Klassisen nukleaatioteorian havaittiin olevan huono työkalu ennustamaan ilmiötä tässä mittakaavassa.</p>			
Avainsanat — Nyckelord — Keywords			
kavitaatio,LAMMPS,mallinnus,vesi,molekyylidynaamiset simulaatiot			
Säilytyspaikka — Förvaringsställe — Where deposited			
Muita tietoja — Övriga uppgifter — Additional information			

Contents

Symboliluettelo	iii
1 Johdanto	1
2 Kavitaatio	2
3 Teoria	4
3.1 Rayleigh-Plessetin yhtälö	4
3.2 Nukleoituminen	5
3.3 Minnaartin resonanssi	6
4 Simulaatiot	7
4.1 Simulaatioympäristö	7
4.2 Simulaatiossa käytetyt potentiaalit	8
4.2.1 Lennard-Jones-potentiaali	8
4.2.2 Coulumbin potentiaali	9
4.3 TIP4P-2005	10
4.3.1 Parametrit	10
4.4 Simulaation ajo	11
4.5 Akustinen kenttä	11
5 Tulokset	12
5.1 Kuvaajat	13
5.2 Kuplan romahdus	15
6 Johtopäätelmät	16
6.1 Tulosten tarkastelu	16
6.2 Pohdintaa	17
Appendix A Liitteet	18
Bibliography	19

Symboliluettelo

ϵ	dispersioenergia	yksikötön
ϵ_c	Dielektrinen vakio	yksikötön
γ	pintajännitys	$\frac{N}{m}$
ν	viskositeetti	Pa
ω	polytrooppinen kerroin	yksikötön
ρ	Tiheys	$\frac{kg}{m^3}$
f	Taajuus	$\frac{1}{s}$
k_B	Boltzmannin vakio	$1.380649 \times 10^{-23} \frac{J}{K}$
m	Massa	kg
N	Moolitiheys	$\frac{1}{m^3}$
$P(t)_B$	Paine kuplan sisällä	Pa
$P(t)_{inf}$	Paine äärettömän kaukana	Pa
q_i ja q_j	Varaus	C
R	Säde	m
T	Lämpötila	K
W	Työ	J

1. Johdanto

Nesteen ja kaasun välinen vuorovaikutus on kiinnostanut ihmiskuntaa niin kauan, kun on osattu tuottaa höyryä. Nesteen ja varsinkin veden muuttuminen kaasuksi on ehkä eräs eniten ihmiskuntaan vaikuttaneista fysikaalisista ilmiöistä, oli kyse sitten biologiasta, teollisesta vallankumouksesta tai opiskelijan pastan keittämisestä.

Vesi muuttui yleisimmin kaasuksi kiehumalla. Silloin faasimuunnoksen saa aikaan nesteen lämpötilan nousu, mutta faasidiagrammia katselemalla voimme nähdä toisenkin reitin, nimittäin paineen laskemisen. Tätä reittiä kaasuksi kutsutaan kavitaatioksi. Tähän ilmiöön liittyy oleellisena osana kavitaatiokuplat, jotka ovat tämän faasimuunnoksen ydintymisiä, eli nukleatioita ja näihin kupliin tämä tutkielma yrittää perehtyä hieman tarkemmin

Tässä työssä yritetään selvittää, kuinka nanoskaalassa olevaan veteen vaikuttavat korkeataajuiset akustiset aallot synnyttävät kavitaatiokuplia, ja kuinka aaltojen taajuus ja amplitudi vaikuttavat kuplien muodostumisaikaan. Lisäksi perehdytään kupladynamiikkaan ja ilmiön termodynaamiseen teoreettista pohjaan.

2. Kavitaatio

Kavitaatio on faasimuutos, jossa neste (**Kuva 2.1**) muuttuu kaasuksi paineen laskemisen seurauksena. Kaasu muodostuu pieniin kavitaatiokupliin, jotka sitten purkaantuvat aiheuttaen havaittavia ilmiöitä, esimerkiksi ääntä, eroosiota ja joskus jopa valoa.

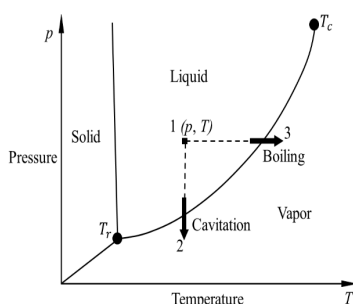


Figure 2.1: Faasidiagrammi [1]

Kavitaatio on lajiteltavissa muutamalla eri tavalla. Eräs lajittelukriteeri on energiaperusteinen lajittelu, eli mistä ilmiön käynnistymiseen tarvittava energia on peräisin [2].

- Hydrodynaaminen kavitaatio, joka on virtaavan nesteen nopeuseroista syntyy kavitaatiota, yleistä esimerkiksi pumpeissa.
- Akustinen kavitaatio, joka johtuu esimerkiksi nesteessä liikkuvista ultraääniaalloista.
- Optinen kavitaatio, joka syntyy korkeaintensiteettisen laservalon osuessa nesteeseen, esimerkiksi sonoluminenssia tutkiessa kavitaatio synnytetään laserilla.
- Hiukkaskavitaatio, jossa kavitaation aiheuttaa jokin sähköisesti varautunut hiukkanen, joka kulkee nesteen läpi, esimerkiksi protoni. Havaittavissa esimerkiksi kuplakammioissa.

Myös muita lajittelutapoja löytyy, esimerkiksi hydrodynaaminen kavitaatio on luokiteltavissa useammallakin tavalla alikategorioihin.

Kavitaatio on lukuisissa tilanteissa esiintyvä ilmiö, kuten esimerkiksi sukellusveneiden potkureissa, pistooliravun metsästyksessä ja puiden ksyleemeissä. Ilmiöön pohjaantuu myös muutama teknologinen sovellus, tunnetuimpina ultraäänipuhdistus ja munuais- ja virtsakivien murskaushoito. Joskus kavitaatiokuplien yhteydessä on havaittavissa pieni valoilmiö. Tätä valoilmiötä kutsutaan sonoluminesenssiksi. Siinä kuplan puhkeamisen yhteydessä syntyy jopa 10000 K lämpötiloja. Ilmiön tarkat syntymekanismit ovat vielä epäselviä.[3]

Useimmissa tapauksissa kavitaatiokuplat romahtavat ajan myötä tasaisesti kasaan, joskus taas kupla romahtaa muodostaen kavitaatiojetin (**Kuva 2.2**). Kuplien on helpompi muodostua pinnoille johtuen pienemmästä vaadittavasti muodostumisenergiasta. Tästä syystä kuplia muodostuu yleensä suuremmissa määrin pintojen lähelle. Pinnan läheisyys aiheuttaa kuplan romahtaessa ympäröivän paineen epätasaisuuden, jonka johdosta kupla purkautuu yhteen suuntaan muodostaen jetin. Jetti aiheuttaa läheisten pintojen eroosiota, joka ei yleensä ole haluttu ominaisuus. Toisaalta esimerkiksi ultraäänipuhdistuksessa tämän nimenomaan halutaan tapahtuvan, koska kuplia lähellä olevat pinnat koostuvat liasta.

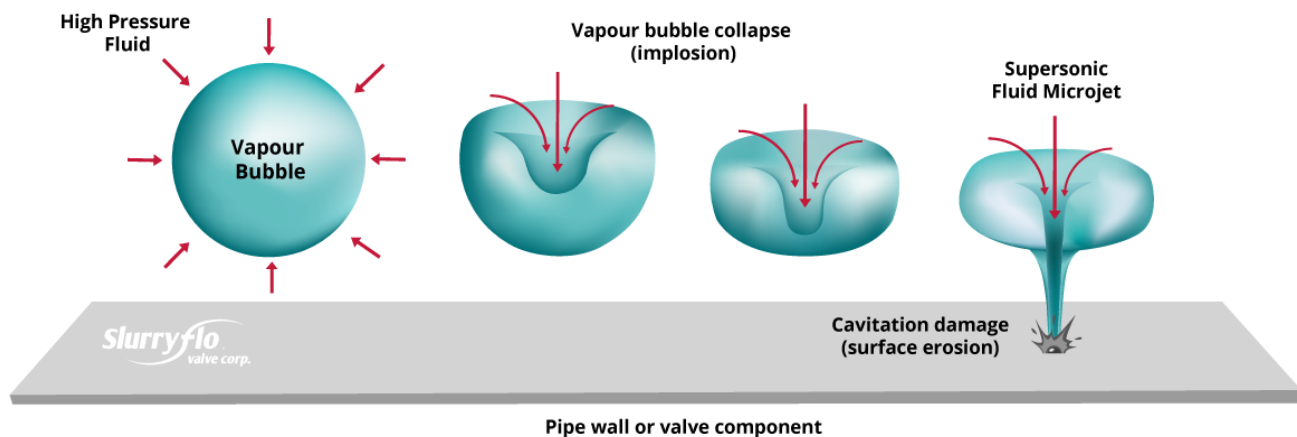


Figure 2.2: Kavitaatiojetti [4]

3. Teoria

Työn kannalta oleellista on kolme teoreettista aspektia. Kuplan dynamiikka, homogeeninen nukleoituminen ja veden ominaisuudet. Johtopäätelmät luvussa tarkastellaan tarkemmin, kuinka hyvin teoria vastasi simulaatiota.

3.1 Rayleigh-Plessetin yhtälö

Rayleigh-Plessetin differentiaaliyhtälö kuvaa pyöreän kuplan dynamiikkaa tilanteessa, jossa voidaan olettaa veden kokoonpuristomattomuus;

$$R \frac{d^2 R}{dt^2} + \frac{3}{2} \left(\frac{dR}{dt} \right)^2 + \frac{4\nu_L}{R} \frac{dR}{dt} + \frac{2\gamma}{\rho_L R} + \frac{\Delta P(t)}{\rho_L} = 0, \quad (3.1)$$

$$\Delta P(t) = P(t)_{\text{inf}} - P(t)_B, \quad (3.2)$$

missä

R on Kuplan säde,

ν_L on viskositeetti,

γ on pintajännitys,

$P(t)_{\text{inf}}$ on paine äärettömän kaukana

ja $P(t)_B$ on paine kuplan sisällä.

Yhtälö on johdettavissa Navierin ja Stokesin yhtälöistä, ja sen erikoistapaus, jossa $R(t)' = 0$ ja $R(t)'' = 0$, tunnetaan nimellä Youngin ja Laplacen yhtälö. Youngin ja Laplacen yhtälö kuvaa staattisen kuplan kokoa paine-eron ja pintajännityksen funktiona:

$$\Delta P = \frac{2\gamma}{R}, \quad (3.3)$$

missä ΔP on painegradientti, γ on pintajännitys ja R on kuplan säde.

3.2 Nukleoituminen

Nukleoituminen on faasimuunnoksen ensimmäinen vaihe. Kuten muissakin faasimuunnoksissa, on myös kavitaatiossa kuplan saavutettava kriittinen säde, jonka ylittämisen jälkeen voi kupla kasvaa itsestään, Sädettä pienemmät kuplat eivät ole stabiileja ja ne romahtavatkin ilman ulkoista painetta.

Energiamäärä, joka tarvitaan kriittisen kuplakoon syntymiseen voidaan laskea kaavalla [5]

$$W_R = \frac{16\pi\gamma^3}{3(\Delta P)^2},$$

jossa W_R on tehty työ, γ on pintajännitys ja ΔP on kaavassa 3.3 esiintyvä painegradientti.

Tästä lasketty energiamäärä voidaan muuttaa Gibbsin luvuksi kaavalla

$$G_b = \frac{W_{CR}}{k_B T},$$

missä k_B on Boltzmannin vakio ja T on lämpötila

Gibbsin luvun tietäminen mahdollistaa nukleaatioluvun laskemisen. Nukleaatioluku kuvaa, kuinka monta nukleaatiota tapahtuu aikayksikköä ja tilavuutta kohti, ja Gibbsin luku kuvaa energiavallia, jonka kuplan on ylitettävä ollakseen stabiili ja pystyäkseen kasvamaan

$$J = J_0 e^{-G_b}, \tag{3.4}$$

jossa pre-eksponentiaalinen tekijä on

$$J_0 = N \sqrt{\frac{2\gamma}{\pi m}},$$

jossa

J on nukleaatiluku,

J_0 on pre-eksponentiaalinen tekijä,

N on moolitiheys ja

m vesimolekyylin massa.

Voimme havaita, että vesimolekyylin ominaisuuksista massa ja pintajännitys esiintyvät näissä kaavoissa. Tästä syystä veden potentiaalimallin valinnassa kiinnitin huomiota siihen, kuinka hyvin se kuvaa näitä ominaisuuksia.

3.3 Minnaartin resonanssi

Minnaartin resonanssi on yhden kuplan resonanssitaajuus teoreettisesti äärettömässä vedessä. Tämä taajuus ei ota pintajännitystä tai viskositeettia huomioon. Tätä ilmiötä emme kuitenkaan lähde suuremmiten havaitsemaan työssä vaan koitamme saada jonkinlaisen ennusteen sille, millaiselta taajuusalueelta ilmiötä kannattaa lähteä tarkastelemaan.

Resonanssitaajuus lasketaan kaavalla;

$$f = \frac{1}{2\pi R} \left(\frac{3\omega P(t)_{\text{inf}}}{\rho} \right)^{1/2}, \quad (3.5)$$

jossa

f on kuplan resonanssitaajuus,

R on säde,

ω on polytrooppinen kerroin,

P_{inf} on ulkoinen paine äärettömän kaukana ja ρ on veden tiheys

ω on systeemin termodynaamista luonnetta kuvaava vakio, joka esimerkiksi ideaalikaasulla on 1. [6]

4. Simulaatiot

Simulaatiot tehtiin avoimen lähdekoodin LAMMPS-ohjelmistolla, joka on yleisessä käytössä molekyylidynaamisten simulaatioiden toteutuksessa. Molekyylidynaamiset simulaatiot ovat simulaatiotyyppi, jossa atomien ja molekyylien vuorovaikutusta tutkitaan asettamalla kappaleille vuorovaikutuspotentiaalit ja ratkaisemalla Newtonin liikeyhtälöitä pienellä aika-askeleella. Simulaatiot ajettiin Helsingin yliopiston Ukko2-laskentaklusterilla.

4.1 Simulaatioympäristö

Simulaatiot aloitettiin luomalla 20000 vesimolekyydin kuutiohila **kuvassa 4.1** näkyvällä tavalla, joka tasapainotettiin 0.1 ns ajan 300 Kelvinin lämpötilaan ja 101 kPa paineeseen. Aika-askeleena oli kaikkien simulaatioiden ajan 1 fs. Paineenvaihtelut tuotettiin LAMMPS-ohjelmiston NPT-aikaiteraattorin Nose-Hooverin barostaattilla. Paineenvaihtelut olivat porrastettuja aaltoja. Simulaation reunaehdot olivat kaikissa ulottuvuuksissa periodiset. Nose-Hooverin termostaatin ja barostaatin vaatimina vaimennusparametreina käytettiin LAMMPS-ohjelmiston dokumentaatiossa ehdotettuja termostaatille 100 aika-askelta ja barostaatille 1000 aika-askelta.

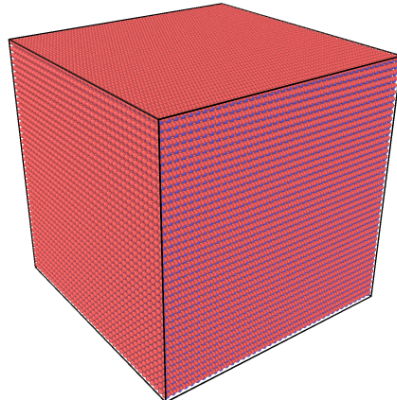


Figure 4.1: Kuva simulaation alusta

4.2 Simulaatiossa käytetyt potentiaalit

4.2.1 Lennard-Jones-potentiaali

Happiatomien välille laskettiin simulaatiossa Lennard-Jones-potentiaalit. Lennard-Jones-potentiaali on määritelty.

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (4.1)$$

missä

ϵ on dispersioenergia, σ on LJ-potentiaalin nollakohta. ja r on molekyylien välinen etäisyys.

Potentiaali kuvaa kahta vaikuttaa voimaa. $\frac{\sigma}{r^{12}}$ kuvaa Paulin kieltosäännöstä johtuvaa Paulin repulsiota, kun taas $\frac{\sigma}{r^6}$ kuvaa dispersiovoimia. Molemmat johtuvat atomien epätasaisesta elektronitiheydestä. Voima on varsin heikko, ja vaikuttaa lähinnä atomien ollessa hyvin lähellä toisiaan. Heikkoudesta huolimatta sillä on suuri merkitys aineiden ominaisuuksiin.

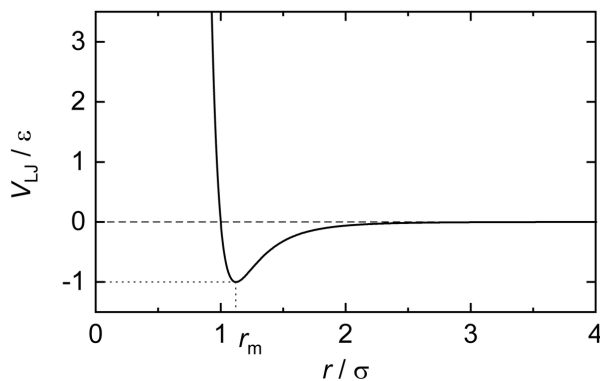


Figure 4.2: Lennard-Jones potentiaali [7]

4.2.2 Coulumbin potentiaali

Lennard-Jones potentiaalin lisäksi vesimolekyyleissä vaikuttavat sähköstaattinen potentiaali vety- ja virtuaaliatomien kesken. Lyhyellä etäisyyksillä sähkökenttä laskettiin yksinkertaisesti kaavan **4.2** avulla

$$E = \frac{Cq_iq_j}{\epsilon_c r} \quad (4.2)$$

jossa q_i ja q_j ovat varauksia, C on yksikköjärjestelmästä riippuva vakio ja ϵ_c on dielektrinen vakio.

Pidemmillä etäisyyksillä potentiaaleja laskiessa simulaatio siirtyi käyttämään PPPM-ratkojaa (particle-particle particle-mesh solver). [8]. Ratkojaa käytetään koska se mahdollistaa virtuaalisesti äärettömän pitkälle vaikuttavien interaktioiden ratkaisemisen asympotoottisessa suoritusajassa $O(N \log N)$. Pidempien etäisyyksien ratkonta on pääsääntöisesti merkityksellisintä sähkökentillä johtuen paljon pienemmästä vaimenemisesta esimerkiksi Lennard-Jones-potentiaaleihin verrattuna.

4.3 TIP4P-2005

Simulaatiossa käytettiin vetenä TIP4P-2005-mallista vettä, jossa veden 3 atomin lisäksi on neljäs virtuaaliatomi, jolla ei ole massaa ja johon ei vaikuta Lennard-Jonesin potentiaali, mutta se sisältää negatiivisen varauksen, joka on vuorovaikutuksessa sähköisesti muiden atomien kanssa. Sen sijaan happiatomi on varaukseton.[9].

Lennard-Jones-potentiaali lasketaan happiatomien välille, vetyatomeille sen sijaan laskettiin vain sähköinen Coulumbin vuorovaikutus toistensa ja virtuaaliatomin kanssa. R_{OH} ja \angle_{HOH} pidetään mallissa vakiosuuruuksina. (**Kuva 4.3**)

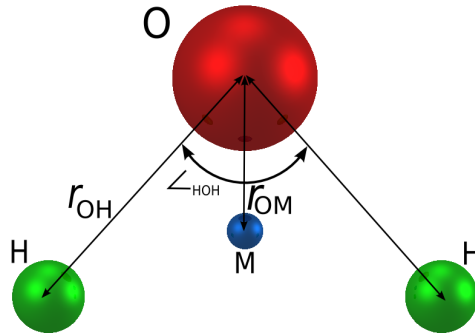


Figure 4.3: TIP4P-2005 Vesimolekyyli

4.3.1 Parametrit

Coulumbin ja Lennard-Jones potentiaalien laskemiseen tarvittavat parametrit

$r_{OH}(\text{\AA})$	$\angle_{HOH}(\text{astetta})$	$\sigma_{O-O}(\text{\AA})$	$\frac{\epsilon}{k}{}_{O-O}(K)$	$Q(O)(e)$	$q(H)(e)$	$q(M)(e)$	$r_{OH}(\text{\AA})$
0.9582	104.52	3.1589	0.1550	0	0.5564	-1.1128	0.1546

Koska Lennard-Jones-potentiaali lasketaan TIP4P-2005-mallissa vain happiatomien välille ovat muiden välien parametrit nollia

$\sigma_{O-H}, \sigma_{H-H}$	$\epsilon_{H-O}, \epsilon_{H-H}$
0.0	0.0

4.4 Simulaation ajo

Simulaatio toistettiin eri akustisen kentän taajuuksilla ja amplitudeilla. Simulaatiota ajettiin 0.5 ns ajan, jonka aikana joko simulaatiossa syntyi niin suuri kupla, että suorittamiseen varattu muisti loppui tai suoritusaika loppui.

4.5 Akustinen kenttä

Simulaatiossa veteen kohdistettiin kolmivaiheinen paineaalto. Ensin suurella negatiivisella paineella, jonka jälkeen välipaineella ja jonka jälkeen rentoutus ilman ulkoista painetta. Rentoutuksen ajaksi simulaatio vaihtui NPT:sta NVT:hen. Syy ensimäisen vaihtamiselle oli se, että alkuperäinen tarkoitus oli yrittää toistaa esimerkiksi tutkimuksessa "Cavitation of water by volume-controlled stretching" [10] työssä esitetty tapa tuottaa kavitaatiota.

Kaavan 3.5 avulla saatiin ratkaistuksi GHz-alueen vastaavan parhaiten käytettyä pituus ja paineskaalaa.

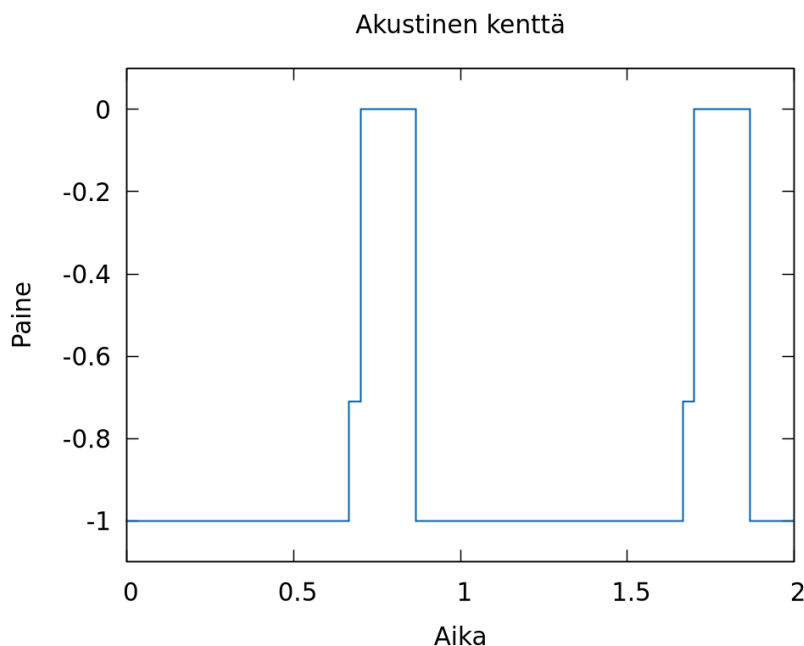


Figure 4.4: Kuva simulaation akustisesta kentästä (aika ja paine normalisoitu)

5. Tulokset

Simulaatioiden jälkeen tulokset analysoitiin Octave- ja Ovito Pro-ohjelmistoilla. Kavitaatiokuplat havaittiin Oviton "Construct surface mesh" -komennolla jonka avulla tarkasteltiin systeemin suurimman kuplan kokoa. Valittiin tilavuudeltaan $1.0 \times 10^{-25}m$ suuruinen kupla vertailuarvoksi ja tarkasteltiin, miten erilaiset paineen ja taajuuden muutokset vaikuttavat aikaan, joka menee tämän kokoisen kuplan muodostumiseen. (**kuva 5.1**) Valittu tilavuus perustui visuaaliseen arvioon hyvin kasvaneesta kuplasta. Näistä tuloksista alettiin analysoida systeemiä tunnetun teorian valossa.

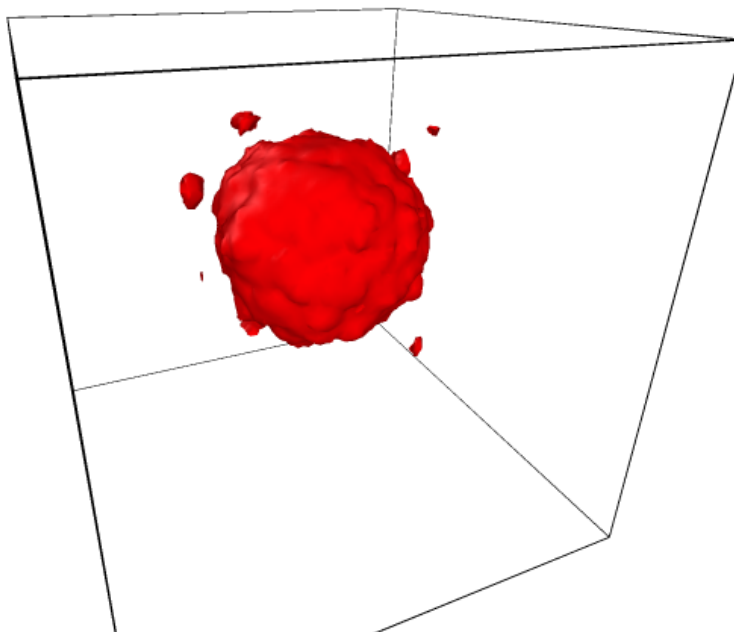


Figure 5.1: Simulaatiossa muodostunut kupla

5.1 Kuvaajat

Kavitaatiota tarkasteltiin eri akustisen kentän taajuuksilla ja amplitudeilla. **Kuvissa 5.3 ja 5.4** nähdään, kuinka nämä muutokset vaikuttivat aikaan joka kului kavitaation alkamiseen. **Kuvassa 5.3** paineen 1940 MPa kohdalla esiintyvä datapiste kuvaa itseisarvoltaan pienintä paineen arvoa, jolla kavitaatiota ei tapahtunut simulaation aikaskaalassa. Teoriaosuuden kaavan 3.3 avulla voimme laskea ennusteen kavitaatioluvulle. Sijoittamalla lukuarvot saadaan tulokseksi $0.7829 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \text{s}}$ (joktokuutiometrin kopissa $4.7 \times 10^{-10} \frac{1}{\text{ns}}$) Tämä on selkeässä ristiriidassa simulaatiotuloksen kanssa, koska se ennustaa monta kertaluokkaa pienemmän kavitaatioluvun, kuin simulaatioista havaitsemalla voimme päätellä.

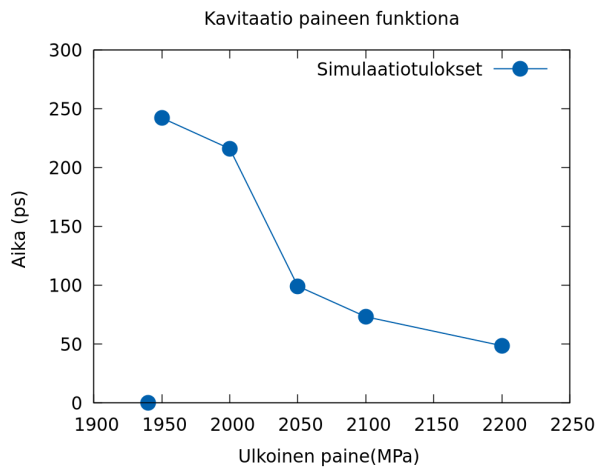


Figure 5.2: Kavitaation muodostuminen paineen funktiona.

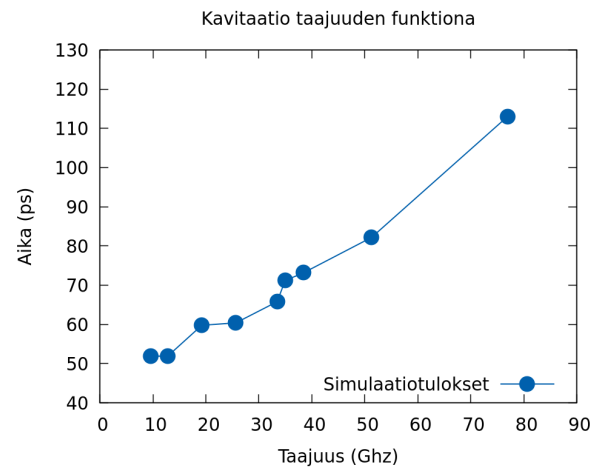


Figure 5.3: Taajuuden vaikutus kavitaationopeuteen -210 MPa ulkoisessa paineessa

Simulaation aikana systeemin paine muistutti alkuun ulkoista painetta. Kuplan syntyessä systeemiin alkoi kuitenkin kokonaispaine lähestyä nollaa, kun veden koheesio ei enään kykene pitämään systeemiä kasassa. **Kuvassa 5.4** on esimerkki eräästä simulaatiosta. Selkeästi systeemin paine on varsin yhtenevä akustisen kenttäfunktion kanssa, kunnes 380 pikosekunnin kohdalla alkaa systeemin laajeneminen

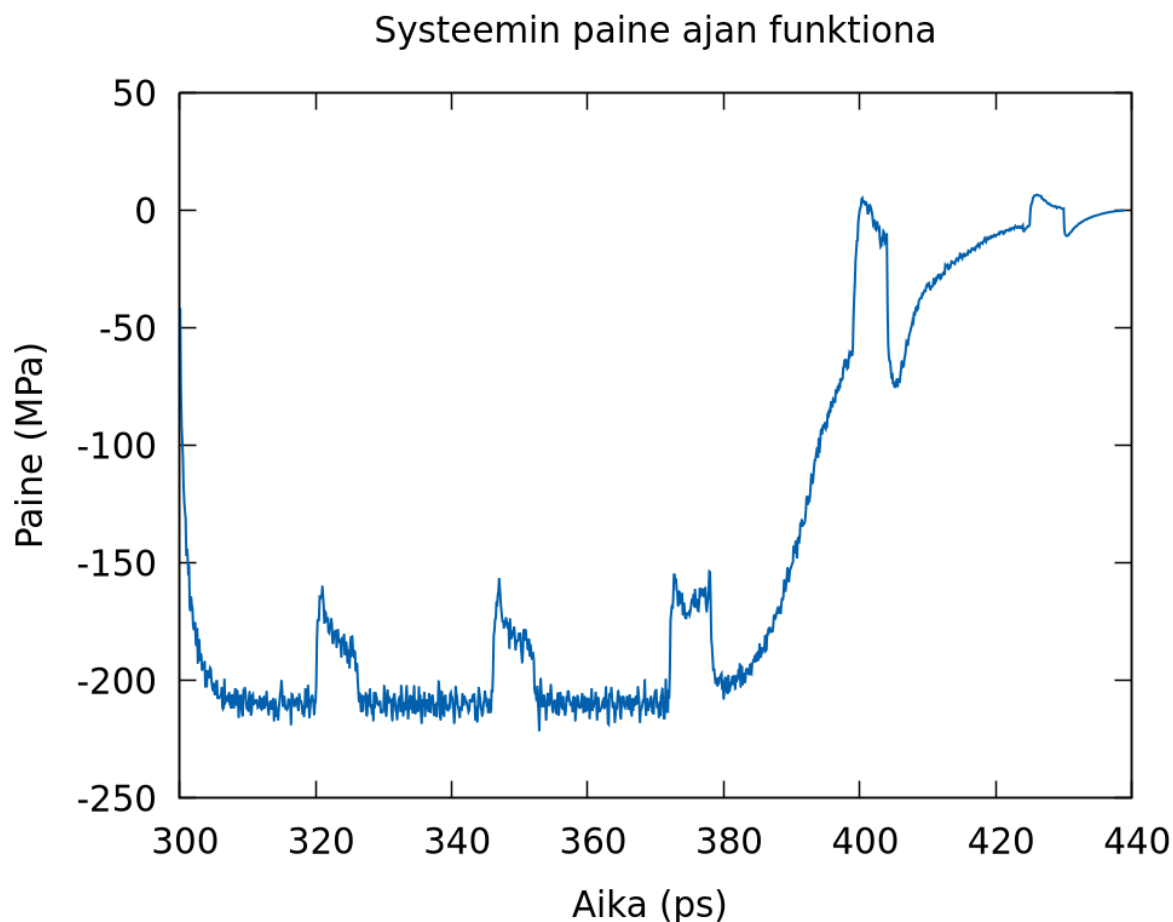


Figure 5.4: systeemin Paine -200 MPa-amplitudin ulkoisella paineella

5.2 Kuplan romahdus

Uudelleenajamalla -200MPa paineisen simulaation, mutta kuplan muodostumisen jälkeen poistamalla ulkoisen paineen ja antamalla kuplan romahtaa, voitiin selvittää, kuinka hyvin Rayleigh-Plessetin yhtälö kuvaa pienten kuplien käyttäytymistä. Teoreettisena ennusteena on numeerisesti ratkaistu Rayleigh-Plessetin yhtälö.

Simulaatiomittauksen ja ennusteen välillä voimme havaita, että ennuste on oikeaa suuntaa antava. Ennuste antaa noin 10 ps nopeamman romahduksen verrattuna simulaatiotuloksiin. Ero saattaa selittyä sillä, että simulaatiossa kupla ei ole täysin pyöreä, mikä on Rayleigh-Plessetin yhtälön yksi oletuksista. Kuitenkin kuplan romahtamisen alku vaikuttaa olevan varsin hyvin linjassa ennusteen kanssa. Rayleigh-Plessetin yhtälössä säteen lähestyessä nollaa viskositeetin ja pintajännityksen alkavat dominoimaan huomattavasti, jolloin ennuste ei osaa huomioida epätasaista pintajännitystä.

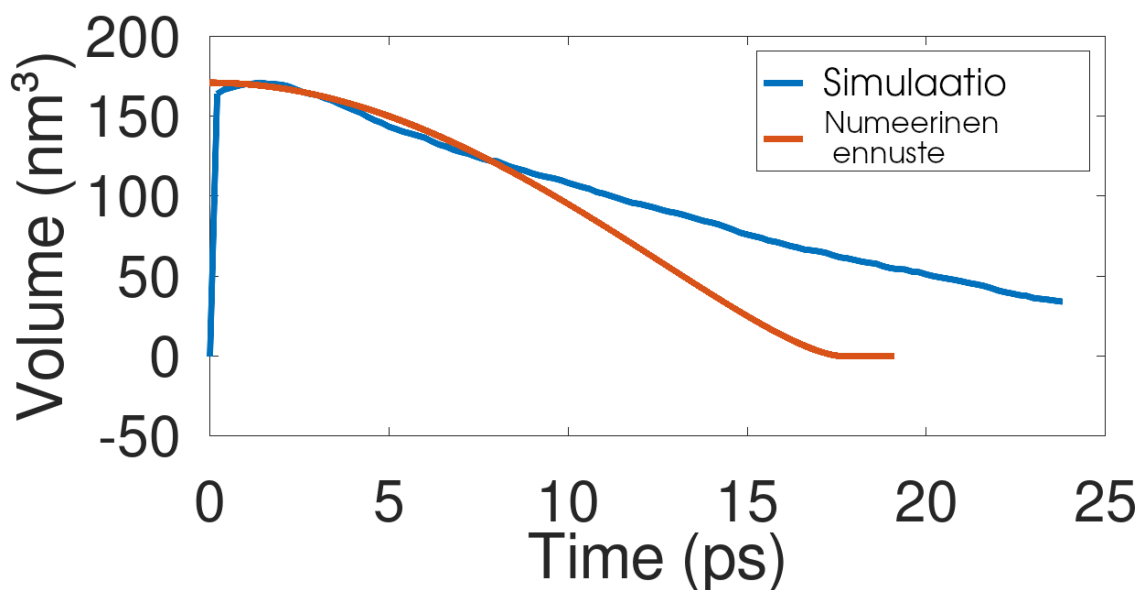


Figure 5.5: Kuplan romahtaminen ennuste ja simulaatiotulos

6. Johtopäätelmät

Työssä onnistuttiin mallintamaan akustista kavitaatiota eri taajuuksilla ja amplitudeilla. Tulokset olivat varsin odotettuja, mutta teoreettinen ennuste nukleatioluvulle ei täsmännyt simulaatiosta havaittuun. Simulaation kavitaatiolukua ei varsinaisesti laskettu, mutta sen suuruusluokka pystytään kyllä havaitsemaan **Kuvan 5.2** ja **Kuvan 5.3** perusteella.

6.1 Tulosten tarkastelu

Kuvasta 5.3 voidaan selkeästi havaita, että suuremmalla negatiivisella paineella kavitaatio tapahtuu nopeammin kuin alemmalla ja (**Kuvasta 5.4**) että suurempi taajuus viivästyttää kavitaation alkamista. -195 MPa oli pienin negatiivinen ulkoinen paine, jolla saatiin kavitaatiota aikaan työssä käytetyillä simulaatioajoilla, mutta tuloksista voidaan havaita tarvittavan ajan kasvavan nopeasti ulkoisen paineen itseisarvon laskiessa.

Simulaatioista voidaan havaita, että mikäli kuplan koko saavuttaa jonkin kynnysarvon, alkaa se sen saavutettuaan kasvamaan huomattavaa vauhtia. Tätä kokoa kuvaa kriittinen säde, joka voidaan saada **Kaavasta 3.3**

Kavitaatioluvun ennustaminen havaittiin haasteelliseksi. Klassinen nukleatioteoria, joka teoriaosuudessa esitellään, antaa useita kertaluokkia liian pienen tuloksen. Kirjallisuudesta selviää keinoja korjata tätä ennustetta, mutta niiden lisäämistä työhön ei nähty mielekkäänä, johtuen muunmuassa siitä, että työn simulaatiot eivät käsitelleet tasapainotilanteita. [11]

6.2 Pohdintaa

Tutkielman ajan selvisi että aiheessa on vielä paljon tutkittavaa. Esimerkiksi painefunktion muodon merkitys voisi olla hyvinkin kiinnostavaa tutkia. Nyt käyttämäni oli monella tapaa epäfysikaalinen, mutta se toimi, mikä oli työn laajuuteen nähden riittävä vaatimus. Työssä käytettiin varsin pientä määrää eri konfiguraatioita, toisaalta käytetty molekyylimäärä oli varsin suuri verrattuna muihin vastaavanoloihin tutkielmiin. Kavitaatiojetit herättivät mielenkiinnon ja niiden vaikutuksia eri materiaaleihin saattaisi olla mukava tutkia.

Kokemuksena työ opetti hyvin paljon tiedonhankinnasta, data-analyysistä, simulaatioista ja ennenkaikkea vedestä.

Appendix A. Liitteet

Työssä käytetyt ohjelmistokoodit löytyvät osoitteesta

<https://github.com/Magemanne/Kandi>

Bibliography

- [1] Samir Roy. *Modeling and analysis of material behavior during cavitation erosion*. PhD thesis, 12 2015.
- [2] Y. T. Shah, A. B. Pandit, and V. S. Moholkar. *Sources and Types of Cavitation*, pages 1–14. Springer US, Boston, MA, 1999.
- [3] S. Hilgenfeldt M. P. Brenner and D. Lohse. Single bubble sonoluminescence. *Rev.Mod. Phys* 74,425-484, 2002.
- [4] Slurryflo. <https://www.slurryflo.com/cavitation>.
- [5] Christopher Earls Brennen. *Cavitation and bubble dynamics*. Oxford University Press 1995, 1995.
- [6] G.P. Horedt. *Polytropes: Applications in Astrophysics and Related Fields*. Astrophysics and Space Science Library : a series of books on the recent developments of space science and of general geophysics and astrophysics. Springer Netherlands, 2004.
- [7] TimeStep89. Lennard-jones potential.
- [8] Sandia Corporation. LAMMPS documentation.
- [9] Viet Hoang Man, Mai Suan Li, Philippe Derreumaux, and Phuong H. Nguyen. Rayleigh-plesset equation of the bubble stable cavitation in water: A nonequilibrium all-atom molecular dynamics simulation study. *The Journal of Chemical Physics*, 148(9):094505, 2018.
- [10] Peng Wang, Wei Gao, Justin Wilkerson, Kenneth M. Liechti, and Rui Huang. *Cavitation of water by volume-controlled stretching*, 2016.
- [11] Øivind Wilhelmsen, Dick Bedeaux, and David Reguera. Communication: Tolman length and rigidity constants of water and their role in nucleation. *The Journal of Chemical Physics*, 142(17):171103, 2015.