

hyväksymispäivä

arvosana

arvostelija

## **Akustisen kavitaation mallintaminen**

Niko Molin

Helsinki 11.2.2021

HELSINGIN YLIOPISTO

Fysiikan laitos

Tiedekunta — Fakultet — Faculty		Laitos — Institution — Department	
Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta		Fysiikan laitos	
Tekijä — Författare — Author			
Niko Molin			
Työn nimi — Arbetets titel — Title			
Akustisen kavitaation mallintaminen			
Oppiaine — Läroämne — Subject			
Fysikka			
Työn laji — Arbetets art — Level	Aika — Datum — Month and year	Sivumäärä — Sidoantal — Number of pages	
	11.2.2021	0 sivua + ?? liitesivua	
Tiivistelmä — Referat — Abstract			
<p>Kandi</p> <p>ACM Computing Classification System (CCS):</p> <p>A.1 [Introductory and Survey],</p> <p>I.7.m [Document and text processing]</p>			
Avainsanat — Nyckelord — Keywords			
ulkoasu, tiivistelmä, lähdeluettelo			
Säilytyspaikka — Förvaringsställe — Where deposited			
Muita tietoja — Övriga uppgifter — Additional information			

# Sisällys

# 1 Johdanto

Tässä työssä tutkittiin laskennallisin menetelmin veden homogeenista akustista kavitaatiota. Työn tarkoituksena oli selvittää kuinka makroskooppisesti havaitut akustisen kavitaation ominaisuudet esiintyvät nanoskaalassa.

## 2 Kavitaatio

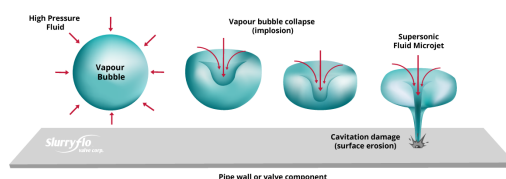
Kavitaatio on faasimuutos jossa vesi muuttuu kaasuksi paineen laskemisen seurauksena. Useimmat tieteellisesti kiinnostavat tapaukset liittyvät veteen mutta ilmiö havaitaan myös muilla nesteillä.

Kavitaatioon liittyy kuplien syntyminen, sanan kavitaatio määritelmä vaihtelee hieman riippuen siitä oletko insinööri vai fyysikko ja joskus kavitaatio määritellään puhtaasti kuplien syntymisen ja purkautumisen perusteella. Tässä työssä sanalla kuitenkin viitataan nimenomaan paineen laskusta johtuvaan faasimuunnokseen.

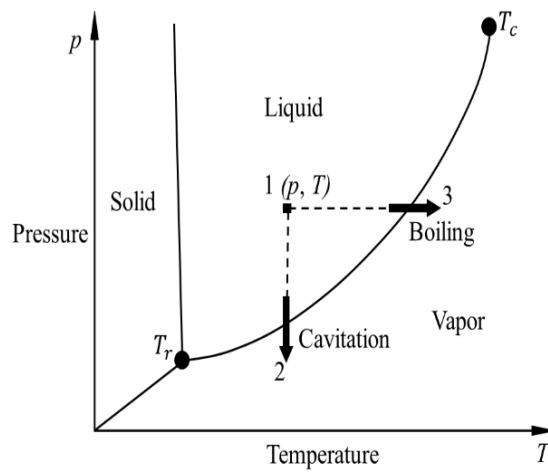
Kavitaatio on lajiteltavissa muutamalla eri tavalla, eräs lajittelutapa on lajitella sen perusteella mistä ilmiö saa energiansa [?]

- Hydrodynaaminen kavitaatio joka on virtaavan nesteen nopeuseroista syntyvää
- Akustinen kavitaatio joka johtuu nesteessä liikkuvista ultraääniaalloista
- Optinen kavitaatio joka syntyy korkeaintensiteettisestä laserista
- Hiukkaskavitaatio jossa kavitaation aiheuttaa jokin hiukkanen joka kulkee nesteen läpi esimerkiksi protoni. Havaittavissa esimerkiksi kuplakammioissa

### 2.1 Kavitaatio ilmiönä



Kuva 1: Kavitaatiojetti



Kuva 2: Faasidiagrammi,[?]

### Sonoluminesenssi

Sonoluminesenssi on kavitaatiokuplan yhteydessä esiintyvä ilmiö jossa kuplan romahtamisesta seuraa havaittava valoilmiö.



Kuva 3: Kuva ilmiön havaitsemiseksi tehdystä mittalaitteesta [?]

## 3 Teoria

### 3.1 Nukleoituminen

$$W_{CR} = \frac{16\pi S^3}{3(\Delta p_C)^2}$$

Josta saadaan Gibsin luku

$$G_b = \frac{W_{CR}}{kT}$$

$$J = J_0 e^{-G_b} \tag{1}$$

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

### 3.2 Rayleigh-Plessetin yhtälö

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

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

$$\Delta P(t) = P(t)_{\text{inf}} - P(t)_B \quad (3)$$

jossa

$R$  = Kuplan säde

$\nu_L$  = viskositeetti

$\gamma$  = pintajännitys

$P(t)_{\text{inf}}$  = Paine äärettömän kaukana

$P(t)_B$  = Paine kuplan sisällä

Yhtälö saadaan Navierin ja Stokesin yhtälöistä ja sen erikoistapaus jossa  $R(t)' = 0$  ja  $R(t)'' = 0$  tunnetaan nimellä Youngin ja Laplacen yhtälö. Se kuvaa staattisen kuplan kokoa paineron ja pinta-jännityksen funktiona.

Simulaatiossa toimin laskenta-ajan optimoimiseksi varsin suurilla paineilla minkä johdosta kuplien syntyessä niiden kasvuvauhti oli varsin nopeaa, näin ollen vesi ei mitenkään havaittavasti höyrystynyt kuplien sisällä. Näin ollen kuplien sisäinen paine kaikilta osin oli varsin mitätön verrattuna ulkoiseen paineeseen.



### 3.3 Minnaartin resonanssi

Minnaartin resonanssi on yhden kuplan resonanssitaajuus teoreettisesti äärettömässä vedessä, tämä taajuus ei ota pintäjännitystä tai viskositeettia huomioon. Tämän tutkielman kannalta olemme kiinnostuneita taajuuden suuruusluokasta.

$$f = \frac{1}{2\pi a} \left( \frac{3\gamma p_A}{\rho} \right)^{1/2} \quad (4)$$

jossa

$f$  = kuplan taajuus

$a$  = säde

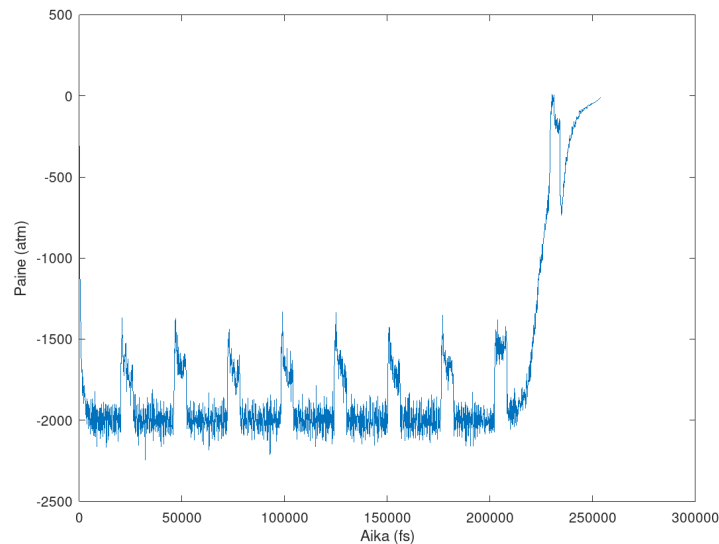
$\gamma$  = polytrooppinen kerroin

$p_A$  = ulkoinen paine

$\rho$  = veden paine

Tähän sijoittamalla nanoskaalan säteitä saamme GHz-luokan taajuuksia.

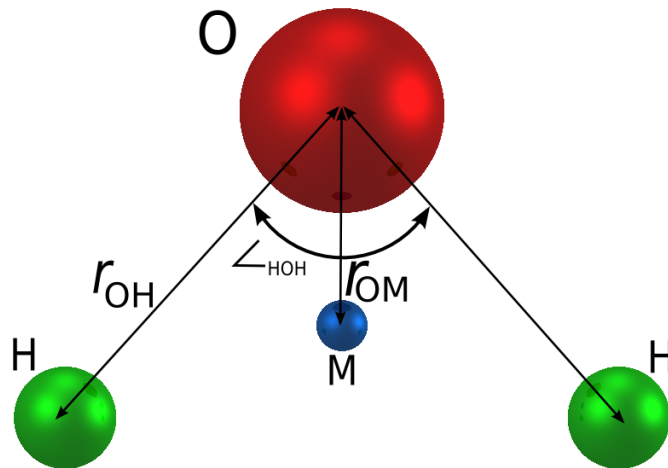
**Kuvassa 4** nähdään kuinka systeemin paine vaihtelee ulkoisen paineen vaikutuksesta, noin 0.23 nanosekunnin kohdalla havaittava paineen lähestyminen nollaa joka implikoi tilavuuden muutosta ja tätä kautta kavitaatiota



Kuva 4: systeemin Paine -200 MPa ulkoisella paineella

### 3.4 Vesi

Simulaatiossa käytetty vesi noudatti TIP4P-2005 mallia jossa veden 3 atomin lisäksi asetetaan malliin neljäs virtuaaliatomi jolla ei ole massa ja johon ei vaikuta Lennar-Jonesin potentiaali mutta sisältää negatiivisen varauksen, Happi-atomi sen sijaan on varaukseton.



Kuva 5: TIP4P-2005 Vesi molekyyli

$r_{OH}(\text{\AA})$	$\angle_{HOH}$	$\sigma(\text{\AA})$	$\frac{\epsilon}{k_b}(K)$	$Q(O)(e)$	$q(H)(e)$	$q(M)(e)$	$r_{OH}()$
0.9582	104.52	3.1589	93.2	0	0.5564	-1.1128	0.1546

jossa  $\epsilon$  ja  $\sigma$  ovat Lennart-Jones potentiaalin parametreja

## 4 Aiheesta aikaisemmin tutkittua

Nanoskaalan kavitaatiota on tutkittu molekyyliidynaamisesti monilla keinon, monet tutkimuksista keskittyvät jo syntyneen kuplan dynamiikan arvioimiseen. Muutamissa tutkimuksissa oli tarkasteltu homogeenista nukleaatia kuten tässäkin tutkielmassa ja siksi niistä onkin poimittu muutama tarkasteltavaksi Heterogeenistä nukleoosia on jäänyt molekyyliidynaamisesti vähemmälle tarkastelulle ja sikis se voisikin olla loistava jatko-aihe tälle tutkielmalle.

### 4.1 Cavitation of water by volume-controlled stretching

Wang et al Lähestyivät tutkimuksessaan ongelmaa hieman eri suunnalta kuin minä. He tuottivat ulkoisen negatiivisen paineen venyttämällä simulaatiolaatiokon kokoa vaiheittain kunnes simulaatioon syntyi kavitaatiota. He saivat kriittiseksi arvoksi -189MPa jonka paikkeilta aloitin oman haarukointini.

### 4.2 Molecular mechanism for cavitation in water under tension

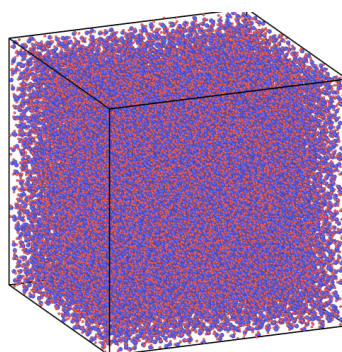
Menzl et al lähtevät tarkastelemaan ongelmaa enemmän klassisen nukleatio teorian näkökannasta. Tutkimuksessa nostettiin esille vetysidosten vapauttama vapaan energian merkitys kavitaatiokuplan muodostumisessa. Heidän tutkimuksessaan oli esillä hieman alempia negatiivisen paineen arvoja kuin Wang et al tutkielmassa. [?] kumpikin tutkielmista käytettiin samaa vesimolekyyli mallia kuin tässä tutkielmassa

## 5 Simulaatio

Simulaatiot tehtiin avoimen lähdekoodin LAMMPS-ohjelmistolla. Ohjelmisto on suuressa käytössä molekyyldynaamisten simulaatioiden tekemisessä. Simulaatiot toteutettiin Helsingin yliopiston Ukko2 laskentaklusterilla. Simulaatioissa hyödynnettiin Lammipsin kykyä hyödyntää useita prosessoriytimiä.

### 5.1 Simulaatioympäristö

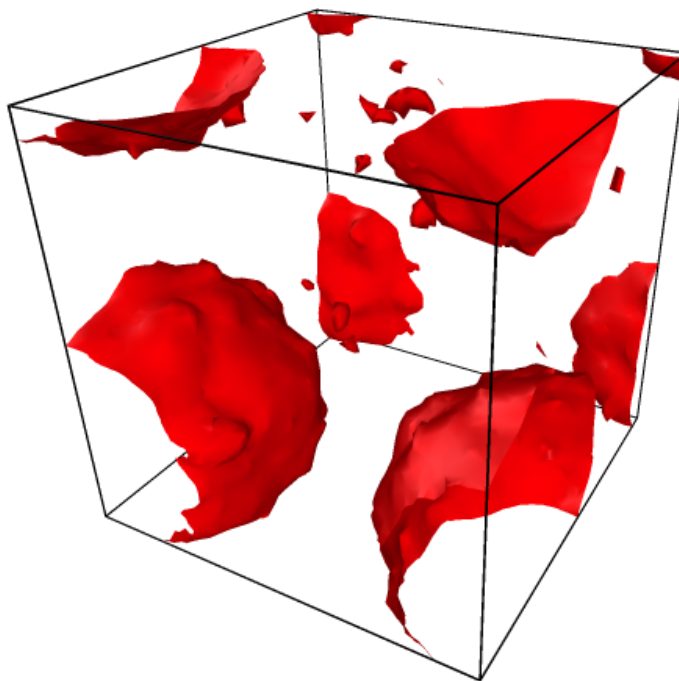
Aloitin simulaation luomalla 20000 vesimolekyysin kuutiohilan jonka tasapainotin 0.1ns 300 Kelviniin ja 1 atm paineeseen. Aika-askeleena oli koko simulaation ajan 1 fs. Paineenvaihtelut saatiin aikaseksi käyttäen Nose-Hoover barostaattilla. Paineenvaihtelut olivat porrastettuja kanttiaaltoja. Reunat olivat kaikissa ulottuvuuksissa periodiset. Nose-Hooverin termostaation ja barosaatin vaatimina vaimennusparametreina käytin LAMMPSIN dokumentaatioissa esitettyjä termostaatille 100 aika-askelta ja barostaatille 1000 aika-askelta.



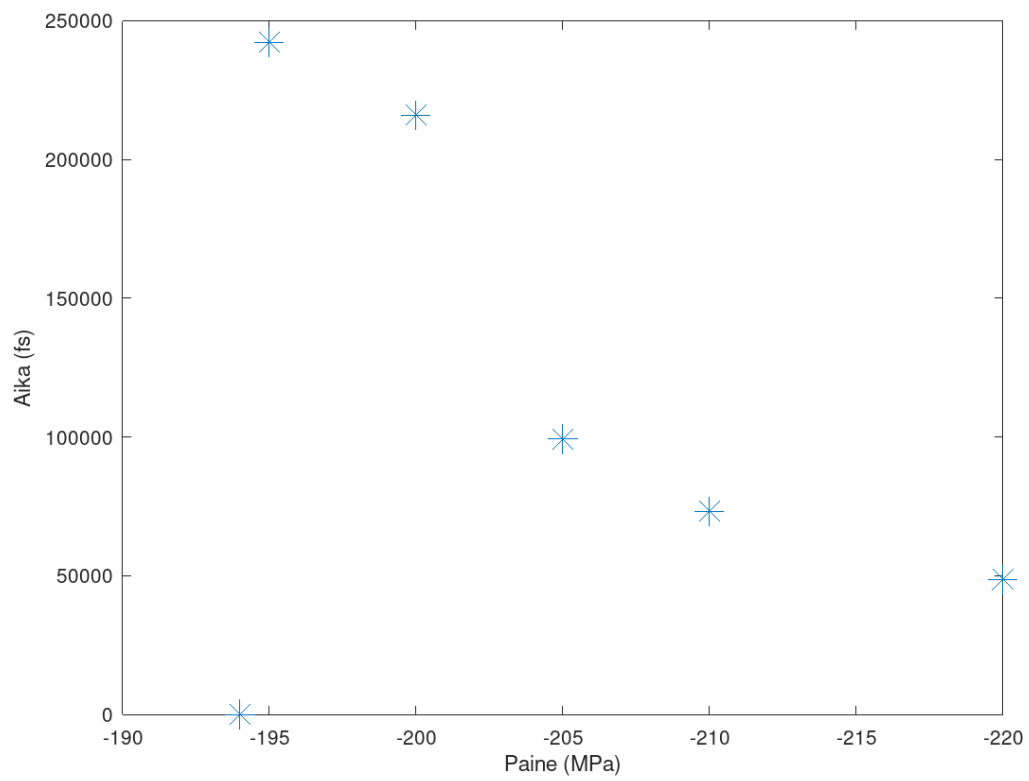
Kuva 6: Vettä

## 6 Tulokset

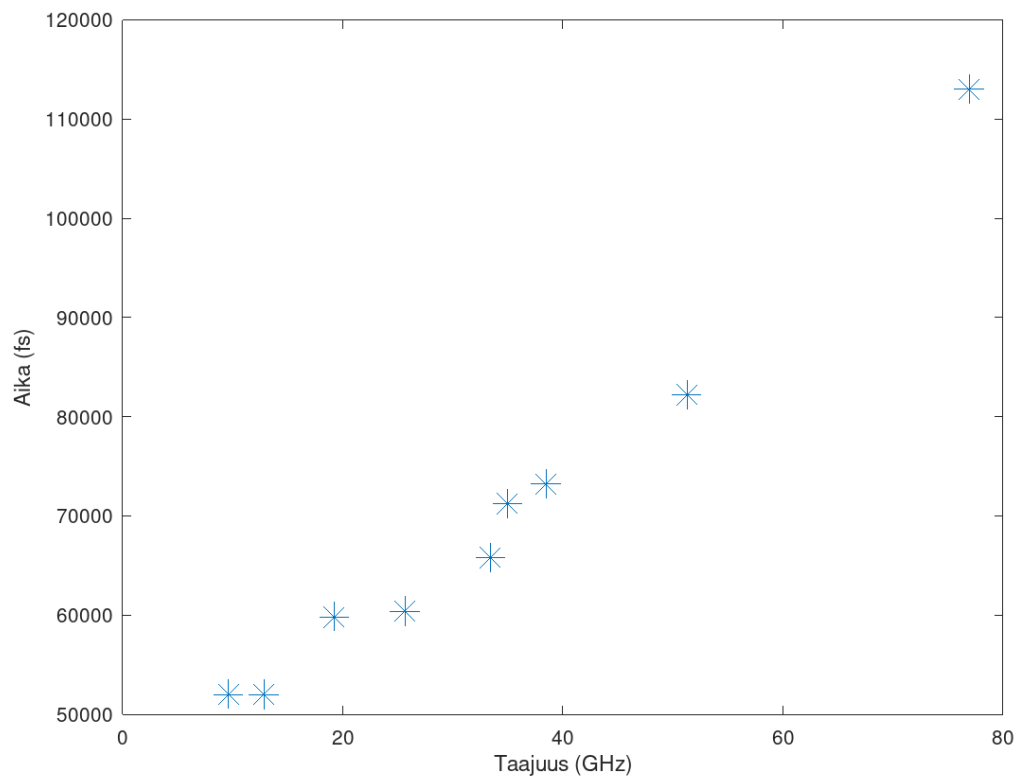
Analysoin tuloksia Octave ja Ovito Pro ohjelmistoilla. Kavitaatiokuplat kykeni havaitsemaan Oviton "Construct surface mesh"toiminnolla ja tulosten tulostuksessa hyödynnettiin liitteissä olevaa pyhton scriptiä(ei ole vielä siellä). Valitsin  $10^5$ ) kokoisen kuplan vertailukohdaksi ja katsoin miten erilaiset paineen ja taajuuden muutokset vaikuttavat aikaan joka menee tämän kokoisen kuplan muodostumiseen(**kuva 7**. Tuloksista voimme päätellä että suurempi ulkoinen paine vaikuttaa nopeuttavan kavitaation syntymiseen tarvittavaa aikaa. Taajuuden muutoksista taas havaitsin että taajuuden nostaminen hidastaa kavitaation alkamista.



Kuva 7: Simulaatio jossa 1 iso kupla ja muutama pienempi



(a) Kavitaation muodostuminen paineen funktiona

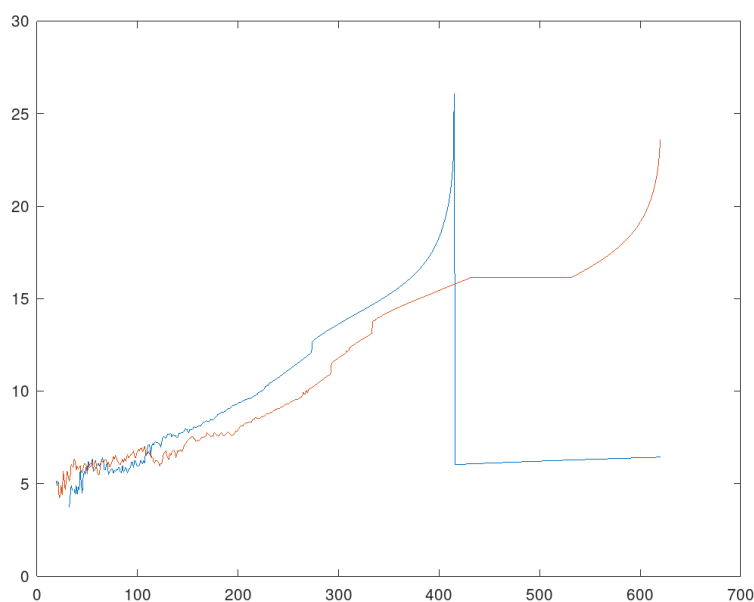


(b) taajuuden vaikutus kavitaationopeuteen -210MPa ulkoisessa paineessa

Selkeästi voidaan havaita että suuremmalla paineella kavitaatio tapahtuu nopeammin kuin alemmalla ja suurempi taajuus viivästyttää kavitaation alkamista. -195 oli alin paine jolla sain kavitaatiota aikaan tässä simulaatioympäristössä. Samoin huomattiin taajuuden kasvattamisen hidastavan kavitaation alkamista.

## Koon vaikutus

Mielenkiintona kolminkertaistin molekyylien määrän ja vertasin kuinka paljon koko vaikuttaa kavitaatioaikaan. Kuvaajan loppupäitä ei ole fysikaalisesti tarkka tilanne koska siinä kohtaa kupla on jo kasvanut periodisessa ympäristössä yli rajojen(tälle oli jokin sana). Selkeästikkin isompi koko viivyyttää kavitaation alkamista. Tämän uskon selittyvän pinta-alan ja tilavuuden välisen suhteen muuttumisella.



Kuva 9: Systeemin koon vaikutuksen tarkastelu. Huom kuva on logaritmisessa skaalassa y akselin suhteen

## 7 Johtopäätelmät

Toteuttamastamme simulaatiosta voimme päätellä, että vedessä tapahtuu nanoskaalassa ulkoisesta negatiivisesta paineesta johtuvaa kavitaatiota ja että kuplia syntyy. Kuplan syntyminen on huomattavasti aikaavievämpi prosessi kuin kasvaminen koska kaikissa simulaatioissa kuplan syntymisen jälkeen alkoi kupla kasvaa suurta vauhtia. Vaaditut paineet olivat selvästi suurempia kuin empiirisissä kokeissa mutta nämä selittynevät pinnoilla helpommin tapahtuvasta nukleaatiosta, suuremmalla aikaskaalalla, paikallisina tiheyseroina, ja saatavilla olevilla nukleaatioytimillä.

Mittaukset antoivat mielenkiintoa mahdollisesti jatkaa tutkimusta erilaisilla tiheyseroilla, erilaisilla pinnoilla ja erilaisilla koostumuksilla. Aiheen tutkimus on ainakin löytämäni materiaalien perusteella vielä hyvinkin kesken. Haaste jonka haluaisin saada toteutetuksi olisi saada aikaan MD simulaatio jossa homogeenisesta nukleaatiosta saisin simulaatioparametrien kokoluokan kuplan jonka saisin pidettyä sen kokoisena.



## Lähteet

- MGG<sup>+</sup>16 Menzl, G., Gonzalez, M. A., Geiger, P., Caupin, F., Abascal, J. L. F., Valeriani, C. ja Dellago, C., Molecular mechanism for cavitation in water under tension. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113,48(2016), sivut 13582–13587. URL <https://www.pnas.org/content/113/48/13582>.
- MLDN18 Man, V. H., Li, M. S., Derreumaux, P. ja Nguyen, P. H., 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(2018), sivu 094505. URL <https://doi.org/10.1063/1.5009910>.
- Roy15 Roy, S., *Modeling and analysis of material behavior during cavitation erosion*. Väitöskirja, 12 2015.
- SPM99 Shah, Y. T., Pandit, A. B. ja Moholkar, V. S. *Sources and Types of Cavitation*, sivut 1–14. Springer US, Boston, MA, 1999. URL [https://doi.org/10.1007/978-1-4615-4787-7\\_1](https://doi.org/10.1007/978-1-4615-4787-7_1).
- WC Weninger, K. ja Camara, C., [Chttps://acoustics-research.physics.ucla.edu/sonoluminescence/](https://acoustics-research.physics.ucla.edu/sonoluminescence/).
- WGW<sup>+</sup>16 Wang, P., Gao, W., Wilkerson, J., Liechti, K. M. ja Huang, R., Cavitation of water by volume-controlled stretching, 2016.

## Liite 1. Koodi

```
# Reference: M. Orsi, Comparative assessment of the ELBA coarse-grained
# model for water, Molecular Physics (2014), 112, 1566–1576
processors 3 2 2

units real
atom_style full

read_data data.singleTIP4P-2005
include forcefield.TIP4P-2005

replicate 28 28 28

variable Nrun equal 10000
variable Nf equal ${Nrun}/100
variable Ne equal 100
variable Nr equal ${Nf}/${Ne}
variable Ndump equal ${Nrun}
variable Nr_rdf equal 0.5*${Nrun}/${Ne}
variable watMoleMass equal 18.0153 # /(g/mol)
variable nAvog equal 6.0221415e23 # Avogadro's number
variable watMoleculeMass equal (${watMoleMass}/${nAvog}) # /(g/molecule)
variable A3_in_cm3 equal 1e-24 # Angstrom^3 in cm^3
variable nAtoms equal atoms
variable nMolecules equal v_nAtoms/3

variable Text equal 298.0
variable Pext equal 1.0

group hydrogen type 1
group oxygen type 2

timestep 1.0

neighbor 2.0 bin
```

neigh\_modify every 1 delay 0 check yes

velocity all create \${Text} 7865876

run 0

velocity all scale \${Text}

fix constrain all shake 1.0e-4 100 0 b 1 a 1

fix relaus all npt temp 298.0 298.0 100.0 iso 1.0 1.0 1000.0

thermo 1

dump therm all atom 10 dump.thermo

run 10000

write\_restart restart.thermalise

processors 3 2 2

read\_restart restart.thermalise

include forcefield.TIP4P-2005

variable Nrun equal 1000000

variable Nf equal 100

variable Ne equal 50

variable Nr equal \${Nf}/\${Ne}

variable Ndump equal \${Nrun}

variable Nr\_rdf equal 0.5\*\${Nrun}/\${Ne}

variable watMoleMass equal 18.0153 # /(g/mol)

variable nAvog equal 6.0221415e23 # Avogadro's number

variable watMoleculeMass equal (\${watMoleMass}/\${nAvog}) # /(g/molecule)

variable A3\_in\_cm3 equal 1e-24 # Angstrom^3 in cm^3

variable nAtoms equal atoms

variable nMolecules equal v\_nAtoms/3

neighbor 2.0 bin

neigh\_modify every 1 delay 0 check yes

fix constrain all shake 1.0e-4 100 0 b 1 a 1

```

compute T all temp
fix TempAve all ave/time ${Ne} ${Nr} ${Nf} c_T

variable P equal press

compute PE all pe pair kspace
variable PE_Mol equal c_PE/v_nMolecules
fix PEave_Mol all ave/time ${Ne} ${Nr} ${Nf} v_PE_Mol

compute peratom all stress/atom NULL
compute p all reduce sum c_peratom[1] c_peratom[2] c_peratom[3]
variable press equal -(c_p[1]+c_p[2]+c_p[3])/(3*vol)
#variable press equal -c_p[3]/vol
fix PressAve all ave/time ${Ne} ${Nr} ${Nf} v_P file wat.PressAve

variable Dens equal v_nMolecules*${watMoleculeMass}/(vol*${A3_in_cm3})
fix DensAve all ave/time ${Ne} ${Nr} ${Nf} v_Dens file wat.dens

compute      msd oxygen msd com yes
fix msd oxygen ave/time 1 1 500 c_msd[4] file wat.msd

compute rdf all rdf 1000 2 2 # oxygen-oxygen
#fix rdf all ave/time ${Ne} ${Nr_rdf} ${Nrun} c_rdf file wat.rdf mode

thermo_style custom step temp f_TempAve f_PressAve f_PEave_Mol f_Dens
thermo_modify flush yes
thermo ${Nf}

dump trj all atom 200 wat.simulation_test

timestep 1.0
neighbor 2.0 bin
neigh_modify every 1 delay 0 check yes

label ZLOOP
variable i loop 60

```

```
#variable b equal  $-1000+(\{i\}*(-20))$ 
variable b equal -1900
variable u equal  $0.71*\{b\}$ 
fix 1 all npt temp 300.0 300.0 100.0 iso  $\{b\}$   $\{b\}$  1000.0
  run 20000
unfix 1
  fix 3 all npt temp 300.0 300.0 100.0 iso  $\{u\}$   $\{u\}$  1000.0
  run 1000
  unfix 3
#fix 2 all npt temp 300.0 300.0 100.0 iso 1 1 1000
fix 2 all nvt temp 300.0 300.0 100.0
  run 5000
  unfix 2
  next i
jump SELF ZLOOP
```