

正则系综条件下空化空泡形成的分子动力学模拟

邱超 张会臣

Molecular dynamics simulation on cavitation bubble formation in canonical ensemble

Qiu Chao Zhang Hui-Chen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 033401 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.033401

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.033401>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I3>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

黏弹性问题的改进的复变量无单元 Galerkin 方法

Improved complex variable element-free Galerkin method for viscoelasticity problems

物理学报.2014, 63(18): 180203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.180203>

压缩感知理论在矩量法中的应用

Application of compressed sensing theory in the method of moments

物理学报.2014, 63(12): 120202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.120202>

用于脉冲等离子体推力器烧蚀过程仿真的新型机电模型

A modified electromechanical model with one-dimensional ablation model for numerical analysis of the pulsed plasma thruster

物理学报.2013, 62(21): 210202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.210202>

时域磁场积分方程时间步进算法稳定性研究

Investigation of the stability of time-domain magnetic field integral equations based on marching on-in time algorithm

物理学报.2013, 62(9): 090206 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.090206>

稀有气体纯质热物理性质的预测

Prediction of thermophysical properties of pure noble gases

物理学报.2011, 60(3): 033401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.033401>

## 正则系综条件下空化空泡形成的分子动力学模拟\*

邱超 张会臣†

(大连海事大学, 交通运输装备与海洋工程学院, 大连 116026)

(2014年7月10日收到; 2014年9月15日收到修改稿)

液体中空化现象的研究对减少空蚀破坏, 提高空化空泡的有效利用具有重要意义. 本文采用分子动力学模拟的方法, 对正则系综条件下系统中空化的发生特性进行研究, 分析空化发生的机理, 讨论温度、数密度等因素对空化发生的影响, 并与格子 Boltzmann 方法进行了比较. 模拟结果表明: 温度和数密度的变化, 都对系统中的空化产生显著影响. 其中, 温度升高, 使系统中空化空泡的形成由稳定变得不稳定, 最终难以形成. 数密度降低, 则会促进空化空泡的形成. 随着数密度的减小, 温度对空化空泡形成的影响程度下降.

**关键词:** 空化, 分子动力学, 温度, 数密度

**PACS:** 34.10.+x, 34.20.Cf, 02.60.Cb, 12.39.Pn

**DOI:** 10.7498/aps.64.033401

## 1 引言

液体内部局部压力降低至该温度下液体的饱和蒸汽压时, 液体内部会发生相变, 产生空泡, 称为空化. 空化空泡溃灭后产生的射流冲击对周围物体的破坏, 称为空蚀. 空蚀既能对航行的船体, 坚固的水坝等大型物体造成破坏, 也能导致一些小型零部件不能正常运转甚至失效<sup>[1]</sup>. 空化还会产生噪声, 对水生生物造成巨大损害<sup>[2]</sup>. 然而, 空化空泡也有可利用的一方面, 如可作为动力源用于微流体系统, 并且在血栓消融<sup>[3]</sup>、血细胞溶解<sup>[4]</sup>、结石击碎<sup>[5]</sup>、加速微流混合<sup>[6]</sup>、强化化学反应<sup>[7]</sup>等生物医疗和化学工程领域具有广泛的应用. 此外, 超空化可大幅度提高水下物体的运动速度, 在水下潜器减阻方面具有广泛应用前景<sup>[8,9]</sup>. 因此, 空化现象的研究一直广受关注.

早期对空化的研究主要以实验为主. 由于空化现象十分复杂, 其发生过程中的细节有时很难观察, 因此, 近年来人们常采用计算流体动力学、格子 Boltzmann 以及分子动力学进行模拟研究, 作为实验研究的一种补充, 充分揭示一些实验研究中难以

观测的现象.

计算流体动力学主要是针对零部件中存在的空化现象进行数值模拟<sup>[10,11]</sup>. Salvador 等使用计算流体动力学中大涡模拟 (LES) 的方法, 对柴油机喷嘴中空化现象的研究发现, 液体流动过程中的湍流和涡流将严重影响喷嘴内空化的发生, 空化的发生又会强化湍流效果<sup>[12]</sup>. Wang 等的模拟研究表明, 油液进入喷嘴时的压力波动会对空化过程的稳定性造成影响<sup>[13]</sup>.

格子 Boltzmann 方法则是介于宏观流体动力学与微观分子动力学之间的一种介观理论, 目前广泛应用于低速流场中空泡的模拟<sup>[14]</sup>. 曾建邦、Sun 以及 Gong 等均曾用格子 Boltzmann 方法对周期性空泡成核以及脱离壁面的过程进行了模拟<sup>[15-17]</sup>, 获得了基本一致的研究结果, 即空泡的脱离半径、脱离频率均与重力加速度相关. 此外, 格子 Boltzmann 方法也被用于模拟流场中空泡与空泡、空泡与壁面的耦合作用<sup>[18,19]</sup>, 其结果与理论解符合较好, 即壁面的边界条件以及空泡与壁面的特征尺寸比均对空泡的运动及其结构变化有显著影响, 并且这种影响呈现非线性特征.

与计算流体动力学以及格子 Boltzmann 相比,

\* 国家自然科学基金 (批准号: 51275064, 50975036) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hc Zhang@dlnu.edu.cn

分子动力学能够模拟微纳米量级区域内所发生的空化, 尤其是单个纳米量级空化空泡的产生. Nagayama 等针对不同表面润湿性的纳米通道中空化空泡形成过程的模拟表明, 不同的表面润湿性使得空泡有不同的成核方式. 在亲水表面, 空泡是均质成核; 而在疏水表面, 空泡是非均质成核; 若表面为超疏水状态时, 无法形成空泡<sup>[20]</sup>. Sekinea 等研究了吉布斯系综 (NPT) 条件下, L-J 流体中空化空泡的产生, 通过模拟多种温度下系统中空泡的成核率及空泡核的体积, 发现空化成核不仅与温度有关, 还与一些受温度影响的物理性质, 如表面张力以及密度等相关<sup>[21]</sup>. 此外, 针对空化空泡应用的研究也可采用分子动力学模拟. 如龚博致等运用分子动力学方法, 对水中超空泡流形成机理及减阻效应进行了模拟研究<sup>[22]</sup>, 认为超空泡的形成和稳定性主要受物体运动速度的影响.

尽管通过实验研究和数值模拟, 目前对空化的发生过程有了一定程度的了解, 但对空化发生机理及其影响因素的研究仍不够完善. 本文采用分子动力学模拟的方法, 模拟正则系综 (NVT) 条件下空化的发生. 通过比较系统压力与饱和蒸汽压的关系, 以及系统中分子分布的变化, 分析空化发生的机理, 讨论温度和数密度对空化发生的影响, 并与格子 Boltzmann 方法进行了比较.

## 2 模拟参数的设置

模拟采用 729 个氩原子, 均匀排布于边长  $L^* = 8$  的立方体计算域内. 采用正则系综 (NVT), 即系统的分子数  $N$ , 计算域体积  $V$  和系统的温度  $T$  均保持恒定. 在模拟计算过程中, 采用周期性边界条件, 保证计算域中的分子数不变. 同时引入温度调节系数, 对分子速度进行校正, 保证系统温度基本恒定.

由于分子动力学涉及的参数数值较小, 因此通常对各模拟参数进行无量纲化处理, 以方便计算. 表 1 是各主要参数实际值与无量纲量间的转化关系.

分子间的相互作用通过 L-J 势能方程计算,

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right], \quad r < r_c,$$

$$U(r) = 0, \quad r \geq r_c. \quad (1)$$

(1) 式以及表 1 中,  $\epsilon$  和  $\sigma$  为 L-J 势能参数, 对于氩原子, 系统的势能参数分别为:  $\epsilon = 0.24 \text{ kcal/mol}$  ( $1 \text{ cal} = 4.19 \text{ J}$ ),  $\sigma = 3.405 \text{ \AA}$ .  $U$  为分子间势能,  $r_c$  为截止半径, 模拟中的  $r_c = 2.5\sigma$ . 模拟的时间步长  $t^* = 4.5 \times 10^{-5}$  (约为 1 fs).

表 1 模拟中采用的无量纲量及其转化关系

无量纲量	转化关系	无量纲量	转化关系
数密度 $\rho^*$	$\rho \times \sigma^3$	温度 $T^*$	$k_B T / \epsilon$
压力 $P^*$	$P \sigma^3 / \epsilon$	能量 $E^*$	$E / \epsilon$
时间 $t^*$	$(\epsilon / m \sigma^2)^{1/2} t$	长度 $L^*$	$L / \sigma$

通常情况下, 液氩在温度 65.53—83.96 K ( $T^*$ : 0.5428—0.6954) 时的饱和蒸汽压可以由 Antoine 方程获得

$$\lg P = -52.23B/T + C, \quad (2)$$

式中,  $B$ ,  $C$  为 Antoine 因子,  $B = 7.8145$ ,  $C = 7.5741$ .  $P$  为饱和蒸汽压, 单位为 mmHg ( $1 \text{ mmHg} = 1.33322 \times 10^2 \text{ Pa}$ ).

模拟是在 IMB system X3800 服务器上进行的, 模拟所使用的程序采用 Fortran 语言自行编写. 模拟初期, 系统需要经历一段时间才能达到平衡状态, 时间的长短与分子的初始排布相关. 进入平衡状态后, 系统中各参数的变化方能反映空化空泡形成的情况. 在 NVT 条件下, 温度是判断系统是否达到平衡状态的依据. 模拟中设定温度的振荡幅值低于 0.1 K 时, 系统达到平衡状态. 如图 1 所示,  $\rho^* = 0.8328$ ,  $T^* = 0.5428$  情况下, 系统温度的变化. 图中系统在 a 点处 (约 80000 个时间步长, 80 ps) 达到平衡状态, 因此, 需要关注 a 点以后的模拟数据, 这些数据主要包括系统温度、压力、动能以及氩原子的位移和速度等.

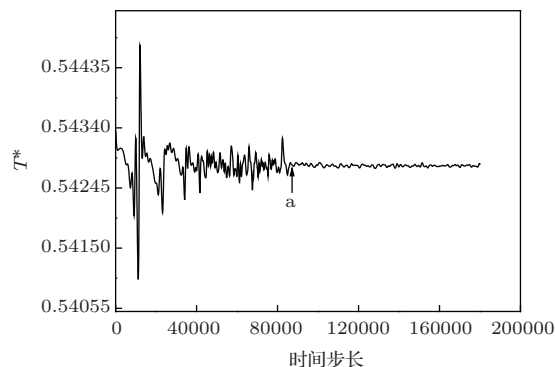


图 1  $\rho^* = 0.8328$ ,  $T^* = 0.5428$  下, 系统温度的变化

### 3 模拟结果与分析

#### 3.1 系统温度对空化空泡形成的影响

根据(2)式可以知道, 温度是影响饱和和蒸汽压的重要因素, 而系统压力低于饱和蒸汽压是空化空泡形成的必要条件, 因此温度对空化空泡的形成会产生较大影响. 图2是不同温度下, 液氩的饱和蒸汽压. 可以看到, 随着温度的降低, 液氩的饱和蒸汽压也随之减小.

图3是不同温度情况下, 数密度  $\rho^* = 0.8328$  的系统达到平衡状态后, 系统压力的变化与该温度下液氩饱和和蒸汽压的比较.

图3中, 点划线为各温度下液氩的饱和蒸汽压. 可以看出, 达到平衡之后, 系统的压力先逐渐减小, 之后达到相对稳定的状态. 通过比较压力与饱和蒸汽压的关系, 发现系统温度相对较高时 ( $T^*: 0.66-0.67$ ), 系统的压力始终高于该温度下液氩的饱和蒸汽压, 所以不能形成空化空泡. 温度相对较低时 ( $T^*: 0.5428-0.56$ ), 压力能够完全降低到饱

和蒸汽压之下, 因此能够形成空化空泡. 但对于温度介于0.56—0.66之间的情况, 系统压力始终在饱和和蒸汽压附近变化, 难以判断是否有空化空泡形成, 可进一步通过系统截面的形貌来分析.

分别比较图3中  $T^* = 0.67$ ,  $T^* = 0.5428$  以及  $T^* = 0.60$  情况下, 系统截面分子分布的变化, 如图4所示. 这三种情况分别代表了系统压力完全高于饱和蒸汽压, 系统压力完全低于饱和蒸汽压以及系统压力与饱和蒸汽压相当的状态.

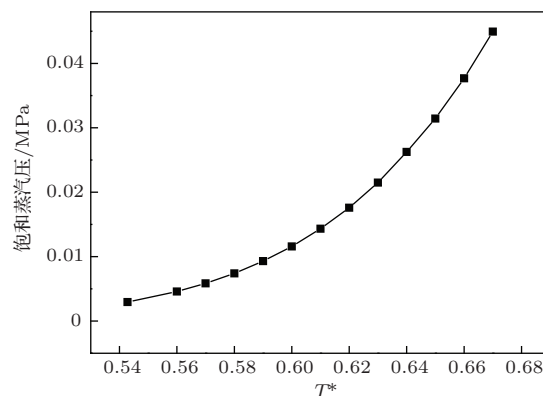


图2 液氩的饱和蒸汽压随温度的变化

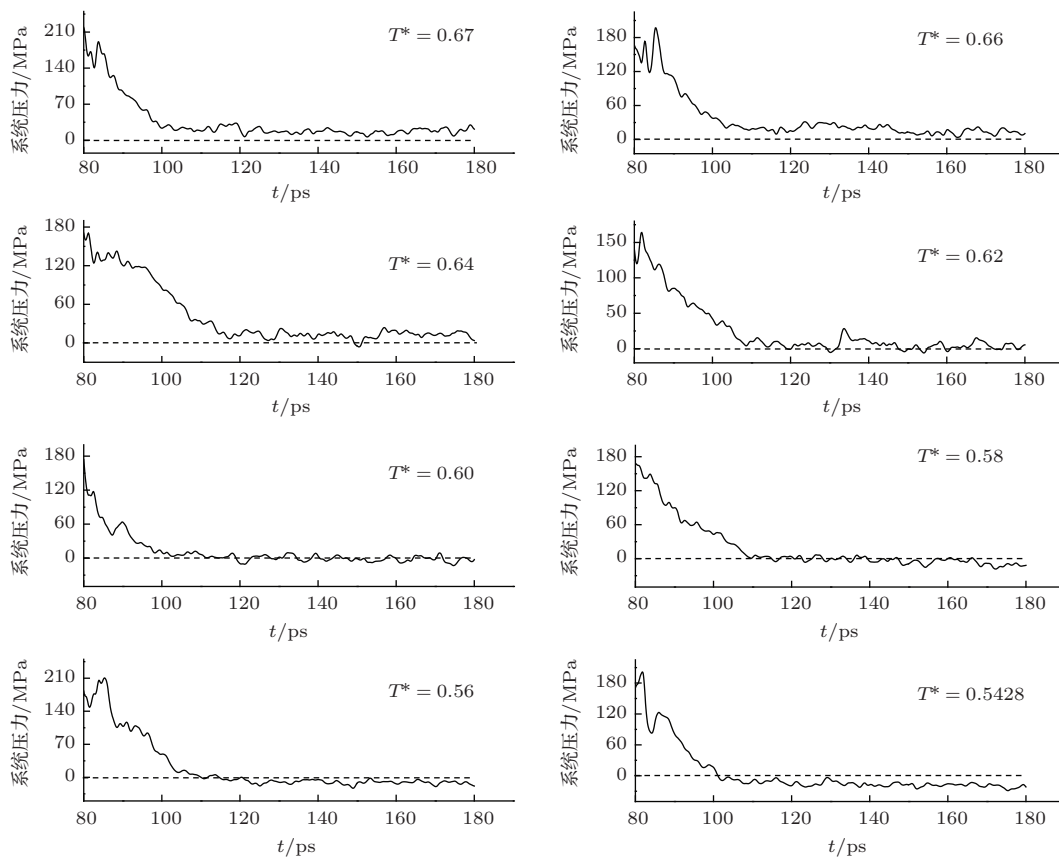


图3 不同温度下系统压力与饱和蒸汽压比较

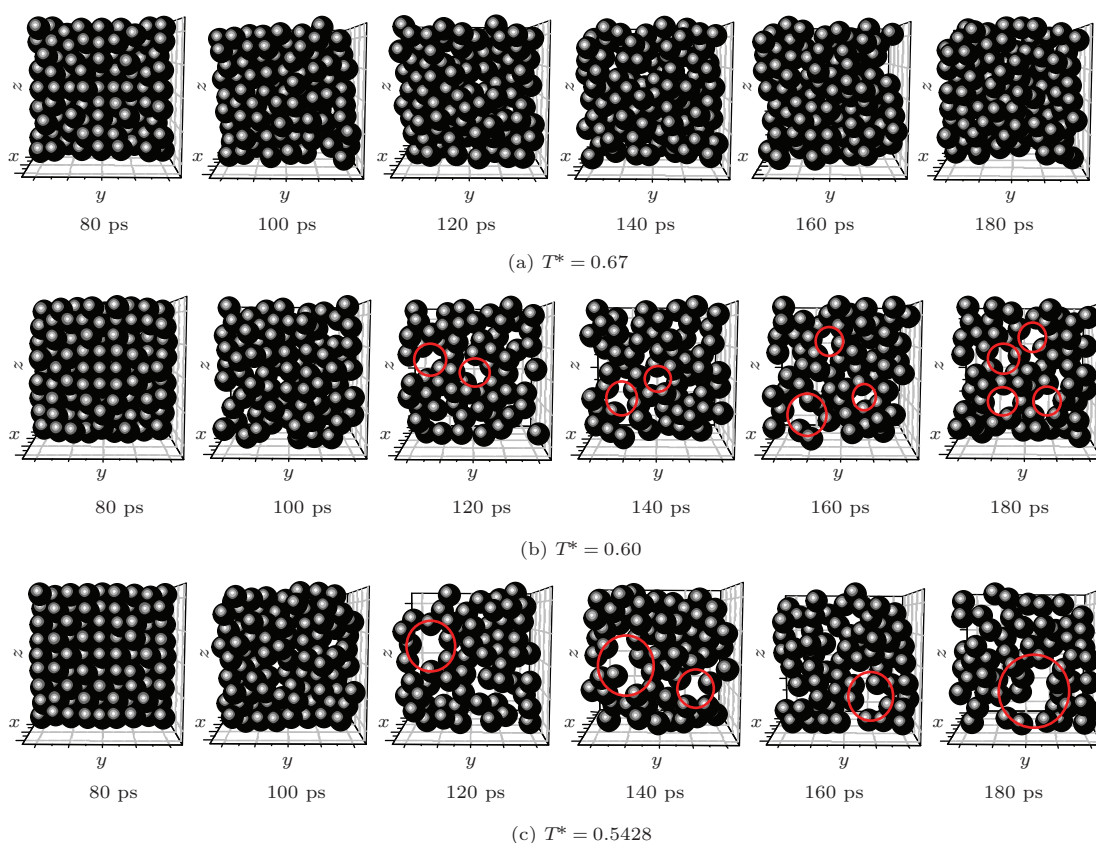


图4 系统截面的变化情况

由图4中可以看出,  $T^* = 0.67$ 时, 系统中没有空化空泡; 而在  $T^* = 0.5428$ 时, 系统中有较大的空化空泡出现. 这与图3中, 系统压力与饱和蒸汽压的比较关系结果相符. 此外,  $T^* = 0.60$ 的系统中, 同样存在空化空泡. 相比而言,  $T^* = 0.60$ 的系统中, 空化空泡的大小较  $T^* = 0.5428$ 系统中更小, 但数量却更多. 这是由于  $T^* = 0.5428$ 系统中, 压力完全小于饱和蒸汽压, 因此能够形成稳定的空化空泡, 随着小空泡的不断合并, 最终形成了较大的空泡. 而在  $T^* = 0.60$ 系统中, 压力与饱和蒸汽压相当. 系统压力低于饱和蒸汽压时, 空化空泡能够形成, 然而很快系统压力增大并高于饱和蒸汽压, 空化空泡缩小甚至溃灭. 之后, 系统压力再次降低至低于饱和蒸汽压, 新的空化空泡又会形成. 因此, 在这样反复循环的过程中, 虽然能够形成空化空泡, 但却难以形成体积较大的空泡. 图5和图6将此过程详细的展现了出来.

图5是  $T^* = 0.60$ 系统中, 系统压力与饱和蒸汽压的关系, 其中a、b、c、d、e是压力变化趋势上五个连续的峰值点. 图6则是这5个点的系统截面情况.

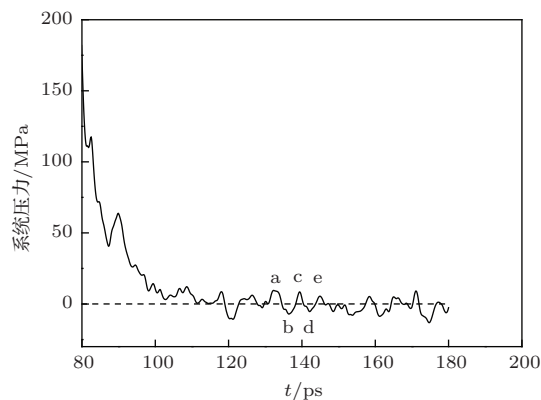


图5  $T^* = 0.60$ 系统中, 压力与饱和蒸汽压的关系

图6给出了系统中一个空化空泡的演变过程. 在a点, 系统中有空化空泡存在(圆圈内). 模拟进行到b点时, 由于系统压力降低到低于饱和蒸汽压, 该空泡体积略微增大. 但在c点, 由于系统压力高于饱和蒸汽压, 该空化空泡受到压缩而发生分裂, 形成两个体积较小的空化空泡. 之后, 随着压力的降低, 到达d点时, 两个小的空化空泡重新合并, 形成一较大空泡. 最终, 至e点时, 该空泡再次分裂, 形成两个体积更小的空化空泡. 通过图6的分析说

明了系统压力与饱和蒸汽压相当的情况下, 空化空泡能够形成, 但在这种产生, 缩小, 溃灭, 再产生过程的不断循环下, 难以形成稳定的体积较大的空化空泡.

通过不同温度下, 系统压力与该温度下液氩饱和蒸汽压的比较可以发现: 降低系统的温度, 有利于系统中稳定空化空泡的形成. 这是因为液体压力

是分子与分子间相互碰撞的结果, 分子的运动越缓慢, 动能越小, 系统的压力也会越小. 而影响系统动能以及分子运动速度的正是温度. 系统温度降低, 使得分子的运动减慢, 降低了分子间碰撞的概率, 因此系统的压力减小, 更容易低于液氩饱和蒸汽压, 从而形成空化空泡.

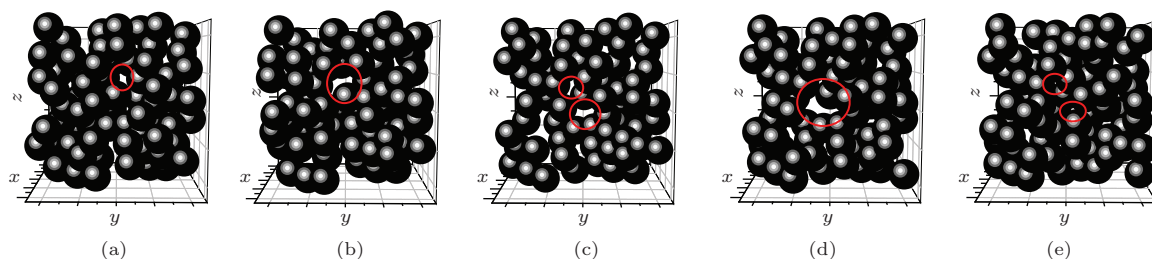


图6  $T^* = 0.60$  系统中, 系统经历五个连续峰值点时的截面情况

### 3.2 系统数密度对空化空泡的影响

在正则系综环境下, 系统的温度和数密度都是恒定的. 不同的温度会对空化空泡的形成产生影响, 同样, 不同的数密度也可能导致空化空泡的形成有不一样的效果. 根据温度影响空化空泡形成的结果, 分别讨论系统温度  $T^* = 0.67$  下, 系统数密度  $\rho^* = 0.8328$ ,  $\rho^* = 0.8$  以及  $\rho^* = 0.75$  时, 系统内空化空泡的产生情况. 图7是各系统温度以及压力的变化情况.

图7(a)是系统温度的变化情况, 它反映了系统趋于平衡的过程. 可以发现, 对于数密度不同的系统, 系统达到平衡所需要的时间随着数密度的减小而延长, 并且在接近平衡的过程中, 系统温度的振幅随数密度的减小而变小. 这是由于数密度的减小使得分子间距离增大, 因此相互作用减弱, 需要经历更长的时间获得平衡. 此外, 由于相互作用的减弱, 分子运动的剧烈程度也会降低, 因而系统动能变化幅度减小, 因此温度的变化幅度随之减小.

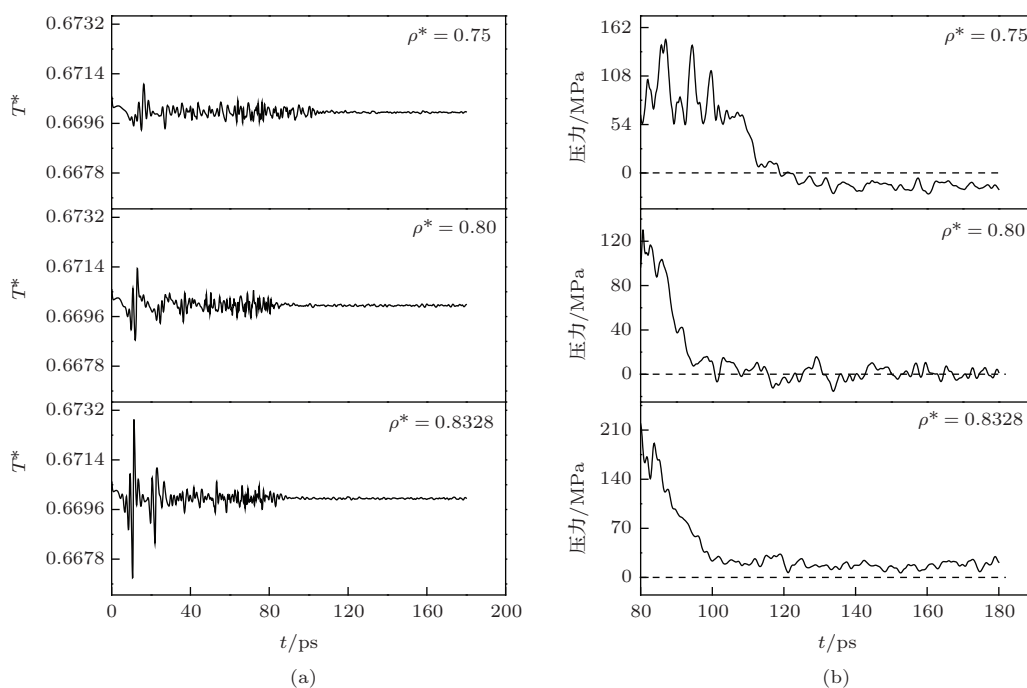


图7 系统温度与压力变化趋势

图7(b)是系统达到平衡状态以后压力与饱和蒸汽压的相互关系. 可以看到, 随着系统数密度的降低, 原本完全高于饱和蒸汽压的系统压力逐渐变成与饱和蒸汽压相当, 最终完全低于该温度下液氩的饱和蒸汽压. 因此, 根据之前的研究可以推

断, 不能形成空化空泡的系统, 随着系统数密度的逐渐降低, 将能够形成体积较小且不稳定的空化空泡, 最终形成体积较大且稳定的空化空泡. 通过系统截面的变化情况, 该推断可以得到验证, 如图8所示.

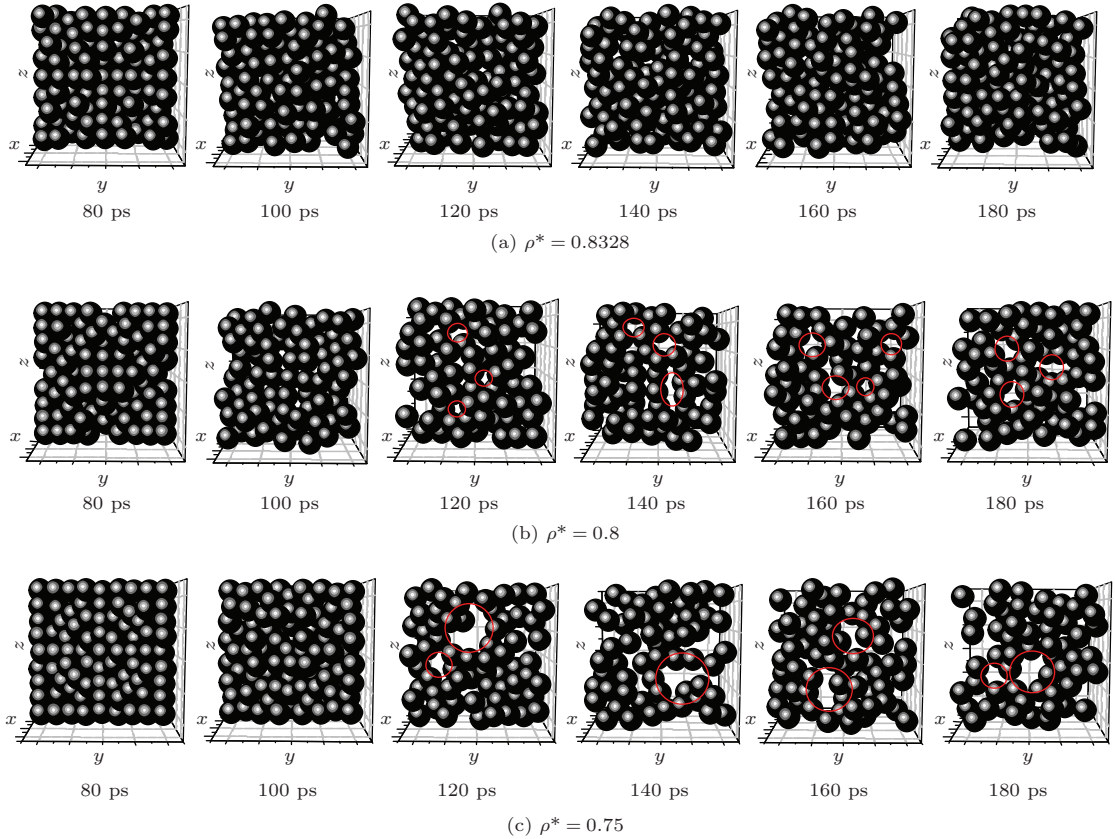


图8  $\rho^* = 0.8328$ ,  $\rho^* = 0.8$  以及  $\rho^* = 0.75$  系统截面变化情况

图8中能够明显看到, 数密度降至0.8时, 系统中有相对较小且不稳定的空化空泡形成. 当数密度下降至0.75时, 系统中形成的空化空泡体积更大. 系统截面分子分布的变化情况与图7(b)中, 系统压力与饱和蒸汽压相互比较的结果一致, 与之前的推断相符. 因此, 降低系统的数密度, 有利于空化空泡的形成. 这是因为数密度的降低, 液氩中有更多的气核存在. 当系统数密度  $\rho^* = 0.8328$  时, 液氩的实际密度正好是  $1.4 \text{ g/cm}^3$ , 此时的液氩是不可压缩的. 当系统数密度降至  $\rho^* = 0.8$  以及  $\rho^* = 0.75$  时, 液氩实际密度低于  $1.4 \text{ g/cm}^3$ , 在温度恒定的情况下, 密度减小意味着液氩中溶有一定量的气核, 且密度越小的液氩中溶解的气核数量越多. 由于气核的存在, 使得在相同温度下, 液氩中空化空泡的形成变得更加容易 [23].

0.5428, 0.60 和 0.67 情况下以及温度 0.67, 数密度分别为 0.8328, 0.80 和 0.75 情况下, 系统的压力变化趋势. 图9则是多种数密度以及多种温度下, 系统达到平衡后系统压力最终的情况.

通过比较可以看出, 数密度相同的情况下, 系统压力随温度降低变得更小; 而温度相同的情况下, 数密度的减小也会让系统压力变得更小. 因此, 数密度的减小和温度的降低都能够让系统压力更容易低于饱和蒸汽压, 形成空化空泡.

之前分别讨论了数密度 0.8328, 温度分别为

此外, 图9中还可以发现, 随着数密度的减小, 不同温度下, 系统压力值的差距越小. 即随着数密度的降低, 温度对系统压力的影响减小. 根据之前的分析, 系统压力是分子间碰撞的结果, 温度的改变会使得分子间碰撞的激烈程度改变, 因而影响系统的压力. 然而数密度的减小使分子间的距离增大, 减小了分子间发生碰撞的概率, 因此温度对系

统压力的影响程度下降, 对空化空泡形成的影响也随之下降.

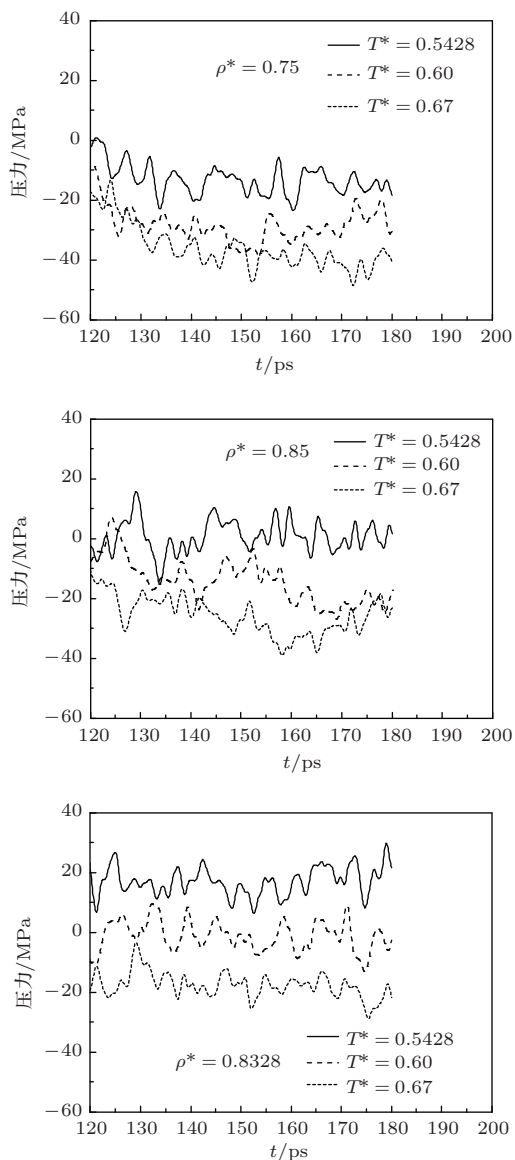


图9 不同数密度不同温度下, 系统压力的变化情况

### 3.3 MD模拟与格子Boltzmann方法的比较

格子 Boltzmann 方法作为一种介观尺度研究方法, 也常用于研究空化现象. 格子 Boltzmann 方法通过固定系统的负压, 计算系统的能量来研究空化空泡的成核条件. 空化空泡形成所需的能量由表面能和负压对空泡做功确定<sup>[24]</sup>,

$$E = 4\pi r^2 \zeta + \frac{4\pi}{3} r^3 P, \quad (3)$$

式中,  $r$  是空化空泡半径,  $\zeta$  是表面张力,  $P$  是施加的负压, 即系统压力. 根据

$$\frac{\partial(E)}{\partial(r)} = 0, \quad (4)$$

得到空化空泡形成的临界半径

$$r_0 = -\frac{2\zeta}{P}. \quad (5)$$

此时能障也达到最大,

$$E_0 = \frac{16\pi\zeta^3}{3P^2}. \quad (6)$$

若气核半径大于  $r_0$ , 则表面能和负压对空泡做功所构成的能量将突破最大能障  $E_0$ , 气核可以生长成为空化空泡. 若气核半径小于  $r_0$ , 相应的, 该能量无法达到空化空泡形成所需的最大能障, 因而不能够形成空化空泡.

分子动力学模拟的方法采用系统的压力是否低于该温度下的饱和蒸汽压来判断空化空泡是否形成. 通过固定系统的温度和数密度, 从系统压力的角度对空化空泡的形成进行分析. 系统压力一般表示为

$$P = \left(\frac{1}{3V}\right) \left[ \sum_{i=1}^N m v_i^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j>1}^N \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{f}_{ij} \right], \quad (7)$$

式中  $\mathbf{r}_{ij}$  和  $\mathbf{f}_{ij}$  分别是分子  $i$  和  $j$  之间的距离和相互作用力,  $N$  为分子数. 分子  $i$  的速度  $v_i$  与系统温度相关, 而  $N$  个分子质量总和与系统体积  $V$  的比值则与系统的数密度关联.

与格子 Boltzmann 方法不同的是, 系统的压力不再固定, 而是处于动态变化的过程中, 系统的能量也是处于动平衡状态. 根据式 (5) 计算得到的瞬时压力若低于该温度下的饱和蒸汽压, 则能够形成空化空泡; 若压力高于饱和蒸汽压, 则空化空泡无法形成.

分子动力学模拟与格子 Boltzmann 方法均是通过众多粒子的运动来描述空化空泡的形成过程. 一般而言, 格子 Boltzmann 的方法主要针对单个空化空泡进行描述, 而分子动力学既可以描述单个空化空泡, 也可以对计算域内的多个空化空泡进行描述. 此外, 在系统变化的细节分析方面, 分子动力学模拟更加有效. 例如当系统压力在饱和蒸汽压附近变化时, 如图 5 和图 6, 若运用格子 Boltzmann 方法, 由于系统压力并非一直高于或低于饱和蒸汽压, 因此临界半径也会随之不断变化, 从而难以比较气核半径与临界半径的大小, 无法获得空化空泡



具体的变化情况. 而采用分子动力学模拟, 通过比较瞬时压力与饱和蒸汽压的大小, 就能够清晰的判断空化空泡是否形成, 并且可分析空化空泡形成、溃灭、再形成这样的循环过程.

## 4 结 论

通过分子动力学模拟, 研究了正则系综条件下, 不同温度、数密度系统中空化空泡的形成, 得到以下结论:

1) 降低系统的温度, 有利于空化空泡的形成. 温度高于 0.66 时, 系统中没有空化空泡形成; 温度降低至 0.56 时, 系统中有体积相对较大且比较稳定的空化空泡形成; 而在 0.56—0.66 之间, 系统中能够形成体积相对较小且不稳定的空化空泡.

2) 降低系统的数密度, 有利于空化空泡的产生. 系统数密度的降低, 使原本不能产生空化空泡的系统中, 能够形成体积较小、不稳定的空泡. 随着数密度进一步降低, 系统中也能形成体积较大且稳定的空泡.

3) 温度越高的系统, 空化空泡形成的时间相对越长. 随着数密度的减小, 温度对空化空泡形成的影响程度降低.

## 参考文献

- [1] Li S J, Aung N Z, Zhang S Z 2013 *Computers & Fluids* **88** 590
- [2] Liu X B, Zhang J R, Li P 2012 *Chin. Phys. B* **21** 054301
- [3] Xie F, John L, Everbach C 2009 *JACC: Cardiovascular Imaging* **2** 511
- [4] Zhang C B, Liu Z, Guo X S 2011 *Chin. Phys. B* **20** 024301
- [5] Johnsen E, Colonius T 2008 *J. Acoust. Soc. Am.* **124** 2011
- [6] Wang B, Xu J L, Zhang W 2011 *Sensors and Actuators A: Physical* **13** 5
- [7] Servanta G, Caltagironea J P, Gérard A 2000 *Ultrasonics Sonochemistry* **7** 217
- [8] Yang W G, Yang Z C, Wen K G 2012 *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics* **44** 694 (in Chinese) [杨武刚, 杨振才, 温凯歌 2012 力学学报 **44** 694]
- [9] Shi H H, Zhou H L, Wu Y 2012 *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics* **44** 49 (in Chinese) [施红辉, 周浩磊, 吴岩 2012 力学学报 **44** 49]
- [10] Jia M, Xie M Z, Liu H 2011 *Fuel* **90** 2652
- [11] Molina S, Salvador F J, Carreres M 2014 *Energy Conversion and Management* **79** 114
- [12] Salvador F J, Martínez-López J, Romero J V 2013 *Mathematical and Computer Modelling* **57** 1656
- [13] Wang X, Su W H 2010 *Fuel* **89** 2252
- [14] Mishra S K, Deymier P A, Muralidharan K 2010 *Ultrasonics Sonochemistry* **17** 258
- [15] Zeng J B, Li L J, Liao Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 066401 (in Chinese) [曾建邦, 李隆键, 廖全 2011 物理学报 **60** 066401]
- [16] Sun T, Li W Z 2013 *Computers & Fluids* **88** 400
- [17] Gong S, Cheng P 2013 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **64** 122
- [18] Shi D Y, Wang Z K, Zhang A M 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 174701 (in Chinese) [史冬岩, 王志凯, 张阿漫 2014 物理学报 **63** 174701]
- [19] Shi D Y, Wang Z K, Zhang A M 2014 *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics* **46** 224 (in Chinese) [史冬岩, 王志凯, 张阿漫 2014 力学学报 **46** 224]
- [20] Nagayama G, Tsuruta T, Cheng P 2006 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **49** 4437
- [21] Sekinea M, Yasuoka K, Kinjo T 2008 *Fluid Dynamics Research* **40** 597
- [22] Gong B Z, Zhang B J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1504 (in Chinese) [龚博致, 张秉坚 2009 物理学报 **58** 1504]
- [23] Fan M M, Tao D, Honaker R 2010 *Mining Science and Technology* **20** 0001
- [24] Or D, Tuller M 2002 *Water Resource Res.* **38** 19

# Molecular dynamics simulation on cavitation bubble formation in canonical ensemble\*

Qiu Chao Zhang Hui-Chen<sup>†</sup>

(Transportation Equipments and Ocean Engineering College, Dalian Maritime University, Dalian 116026, China)

( Received 10 July 2014; revised manuscript received 15 September 2014 )

## Abstract

Research on cavitation is very significant for preventing cavitation erosion and for making use of bubbles effectively. Characteristics of cavitation in canonical ensemble are studied by molecular dynamics simulation. Effects of temperature and numerical density on cavitation are analyzed. Comparison with lattice Boltzmann method is also conducted. Simulation results indicate that the temperature and numerical density may affect cavitation remarkably. The formation of cavitation bubbles becomes unstable as the temperature increases, and even hard to occur. A lower numerical density makes cavitation bubble form easier. Moreover, as numerical density reduces, the temperature effect on cavitation becomes less.

**Keywords:** cavitation, molecular dynamics, temperature, numerical density

**PACS:** 34.10.+x, 34.20.Cf, 02.60.Cb, 12.39.Pn

**DOI:** [10.7498/aps.64.033401](https://doi.org/10.7498/aps.64.033401)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51275064, 50975036).

† Corresponding author. E-mail: [hc Zhang@dlmu.edu.cn](mailto:hc Zhang@dlmu.edu.cn)