

Xeon Phi を用いた大規模球形気泡群の数値解析

大分大・工 栗原 央流 (Eru Kurihara)

大分大・工 池田 英人 (Eito Ikeda)

大分大・工 濱川 洋充 (Hamakawa Hiromitsu)

Faculty of Engineering, Oita University

1 はじめに

液体中の圧力の急変により発生するキャビテーション気泡に関する問題は、流体機械の壊食や衝撃波・超音波の医療応用といった工学的に重要な技術に対する基礎となるため数多くの理論的および実験的な研究がなされている。しかし、キャビテーション気泡のふるまいは局所的な高温・高圧、衝撃波の発生、相変化といった諸現象が相互に関係する複雑な機構をもつことからいまだ十分な理解がなされているとはいいがたい [1, 2]。その一方で、近年の高速度カメラによる撮影技術の進歩により、周囲圧力の急激な変動にともなう微小な気泡群の力学的な挙動が実験的にあきらかにされつつある [3]。複数の気泡からなる系の力学挙動は単一気泡の場合とは異なり、気泡間の相互作用が気泡の並進運動や変形といった特徴的なふるまいに対して大きな影響をおよぼす。とくに気泡間距離が小さい場合や気泡が固体壁面などの境界近傍に存在するときは気泡間の相互作用が気泡の変形や崩壊時の挙動に対して支配的な役割を果たす。隣接する 2 気泡の変形にともなって対向噴流が形成されること、壁面近傍の気泡の崩壊の際に壁面へ向かって高速の噴流が形成されることは実験的によく知られており [4]、このような高速の噴流がキャビテーションによる壁面の壊食に一定の寄与を果たしていると考えられている [5]。

気泡の崩壊にともなう高速噴流の形成は、衝撃波による体内結石の破碎 (Shock wave lithotripsy) に代表される超音波 (衝撃波) の医療への応用において病変組織の破壊に寄与する一方で、周辺組織の損傷の原因ともなる。このため噴流の形成を含む非球形気泡の有限振幅の振動に関する理論的な研究がさかんに行われているが、そのほとんどが境界要素法に代表される数値的な研究であり [6, 7]、計算機資源の制約から大規模な気泡群のふるまいを予測することは困難である。著者らは気泡境界の多重極展開と解析力学の手法を用いて複数の気泡間の相互作用を考慮した非球形気泡の運動を記述する力学方程式を導出し、これにより気泡の体積振動、並進運動、形状変形といった基本的な力学挙動の解析を行った [8, 9]。

本研究では、数百から数千個程度の球形気泡からなる系について気泡間相互作用を考慮した解析を行い、気泡群を構成する個々の気泡のふるまいを解析すると同時に気泡群全体の力学的な性質をあきらかにすることを目的とする。また、このような大規模な気泡群に対する数値計算にコプロセッサを利用したベクトル化処理が有効であることを示す。

2 問題の定式化

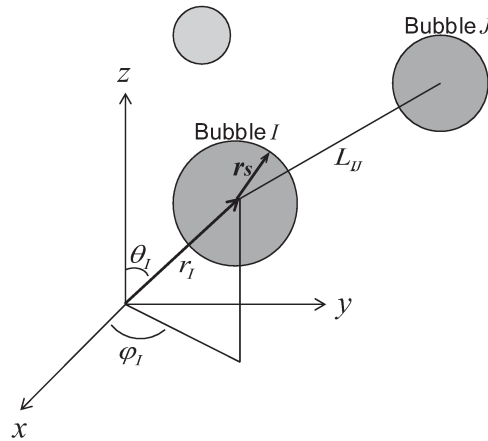


図 1: 気泡 I の座標系

図 1 に相互作用を考慮した気泡群中における気泡 I についての座標系を示す. それぞれの気泡の中心を原点とする座標を気泡ごとに定義し, 気泡 I と気泡 J の中心間距離 (分離距離) を L_{IJ} とする.

このとき気泡 I の境界面 r_{sI} は, 球面調和関数 $Y_{lm}(\theta_I, \varphi_I)$ を用いて

$$r_{si} = R_I + \sum_{l=2}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_{Inm}(t) Y_{nm}(\theta_I, \varphi_I) \quad (1)$$

と表される. ただし, $A_{Inm}(t)$ は球面調和関数 Y_{nm} に対応した振動モードの振幅であり, Y_{nm} はルジャンドル陪関数 $P_n^{|m|}$ を用いて

$$Y_{nm}(\theta_I, \varphi_I) = P_n^{|m|}(\cos \theta_I) e^{im\varphi_I} \quad (2)$$

で定義される. ここで, 以下の 2 つの無次元パラメータ ϵ と μ を導入する.

$$\frac{A_{Inm}}{R_I} = O(\epsilon), \quad \frac{R_I}{L_{IJ}} = O(\mu). \quad (3)$$

本研究では, $\epsilon \ll 1, \mu \ll 1$ であるとする. すなわち気泡の平均半径に対して形状変形の大きさは十分に小さいこと, 各気泡同士はその半径に対して十分に離れていることを仮定する.

いま, 気泡の周囲の液体は非圧縮かつ粘性を無視できるものとする. 初期に周囲の液体は静止一様状態にあったとすれば, 単一の気泡の周囲のながれは速度ポテンシャル ϕ によって次のように定義される.

$$\mathbf{v} = \text{grad} \phi = \text{grad} \sum_I \phi_I \quad (4)$$

$$\phi_I = \frac{a_{I00} R_I}{r_I} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \left[a_{Inm} \frac{R_I^{n+1}}{r_I^{n+1}} Y_{nm}(\theta_I, \varphi_I) \right] \quad (5)$$

ここで、 ϕ_I は速度ポテンシャル ϕ に対する気泡 I による寄与であり、 a_{Inm} は式 (5) における (n, m) モードの振動に対応する係数である。

運動学的境界条件は、気泡境界の移動速度 \dot{r}_{sI} と気泡表面での流速 $\mathbf{v}_I = \text{grad}\phi_I$ を用いて

$$\dot{r}_{sI} \cdot \mathbf{n}_I = \mathbf{v}|_{r=r_{sI}} \cdot \mathbf{n}_I = \text{grad}\phi_I|_{r_{sI}} \cdot \mathbf{n}_I \quad (6)$$

と表される。ここで \mathbf{n}_I は気泡 I の表面における外向き単位法線ベクトルであり

$$\mathbf{n}_I = \frac{\mathbf{N}_I}{|\mathbf{N}_I|} \quad (7)$$

$$\mathbf{N}_I = \frac{\partial \mathbf{r}_{sI}}{\partial \theta_I} \times \frac{\partial \mathbf{r}_I}{\partial \varphi_I} = r_{sI}^2 \sin \theta_I \mathbf{e}_{rI} - r_{sI} \sin \theta_I \frac{\partial r_{sI}}{\partial \theta_I} \mathbf{e}_{\theta I} \quad (8)$$

で与えられる。境界条件 (6) に式 (5) を代入することにより、単一の気泡に対する速度ポテンシャル ϕ_I の係数 a_{Inm} が決定される。

複数の気泡を含む液体の流れを記述する速度ポテンシャルは

$$\phi = \sum_{I=1}^{\infty} \left[\frac{a_{I00} R_I}{r_I} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n a_{Inm} \frac{R_I^{n+1}}{r_I^{n+1}} Y_{nm}(\theta_I, \varphi_I) \right] \quad (9)$$

によって与えられるが、これが式 (4),(6) を満足するように次の関係を用いて係数 a_{Inm} を修正する。

$$\frac{1}{r_J} = \frac{1}{L_{IJ}} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_I}{L_{IJ}} \right)^n \sum_{m=-l}^l \frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!} Y_{nm}(\theta_I, \varphi_I) Y_{nm}(\theta_{IJ}, -\varphi_{IJ}), \quad (10)$$

これにより相互作用する複数の気泡まわりの流れを記述する速度ポテンシャルの係数 a_{Inm} が定まる。

気泡の運動を記述する方程式は、各モードの振動の振幅を一般化座標とした Lagrange 方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \quad (11)$$

によって与えられる。Lagrangian \mathcal{L} は系の運動エネルギー \mathcal{K} とポテンシャルエネルギー \mathcal{V} により以下のように定義される。

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) = \mathcal{K}(q, \dot{q}) - \mathcal{V}(q) \quad (12)$$

ここで、 q は一般化座標であり、本研究では $R_I(t), A_{Inm}(t)$ に対応する。

気泡周囲の液体は非圧縮であるので、二つの気泡を含む系の全運動エネルギー \mathcal{K} は、気泡表面 S_I についての速度ポテンシャル (9) の積分により求められる。

$$\mathcal{K} = \frac{\rho}{2} \int_{V_{liq}} |\nabla \phi|^2 dV_{liq} \quad (13)$$

ここでグリーンの公式を用いると (13) は、以下のように気泡界面における表面積分によって表現される。

$$\begin{aligned}\mathcal{K} &= -\frac{\rho}{2} \sum_{I=1}^N \int_{S_I} \phi \frac{\partial \phi}{\partial n_I} dS_I \\ &= -\frac{\rho}{2} \sum_{I=1}^N \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \phi(r_{sI}, \theta_I, \varphi_i) \mathbf{v}_{sI} \cdot \mathbf{n}_I r_{sI}^2 \sin \theta_I d\theta_I d\varphi_I,\end{aligned}\quad (14)$$

ポテンシャルエネルギー \mathcal{V} は、気泡内部の気体の圧縮性による \mathcal{V}_{gI} と気泡表面の界面張力による $\mathcal{V}_{\sigma I}$ の和で与えられる。

$$\mathcal{V} = \sum_{I=1}^N (\mathcal{V}_{gI} + \mathcal{V}_{\sigma I}), \quad (15)$$

\mathcal{V}_{gI} は、

$$\mathcal{V}_{gI} = V_I \left(P_0 + \frac{P_I}{\kappa - 1} \right) = \frac{4}{3} \pi R_{eI} \left(P_0 + \frac{P_I}{\kappa - 1} \right) \quad (16)$$

と表される。ここに P_0 は無限遠方での圧力、 P_I は気泡 I の表面における圧力、 κ は気泡内部の気体のポリトロップ指数である。 V_I は気泡の体積であり、これを用いて非球形気泡の有効半径 R_{eI} が次のように定義される。

$$R_I = R_{eI} - \frac{1}{R_{eI}} \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{(n+|m|)!}{(2n+1)(n-|m|)!} A_{Inm} A_{In(-m)} \quad (17)$$

界面張力によるポテンシャルエネルギー $\mathcal{V}_{\sigma I}$ は以下で与えられる。ただし、 σ は界面張力係数である。

$$\mathcal{V}_{\sigma I} = \sigma S_I, \quad (18)$$

ここで、気泡表面積 S_I は、

$$\begin{aligned}S_I &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi r_{sI}^2 \sqrt{1 + \frac{1}{r_{sI}^2} \left(\frac{\partial r_{sI}}{\partial \theta_I} \right)^2 + \frac{1}{r_{sI}^2 \sin^2 \theta_I} \left(\frac{\partial r_{sI}}{\partial \varphi_I} \right)^2} \sin \theta_I d\theta_I d\varphi_I \\ &\approx 4\pi \left[R_I^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{n(n+1) - 2(n+|m|)!}{2n+1} \frac{1}{(n-|m|)!} A_{Inm} A_{In(-m)} \right] \\ &= 4\pi \left[R_{eI}^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{(n-1)(n+2)}{2n+1} \frac{(n+|m|)!}{(n-|m|)!} A_{Inm} A_{In(-m)} \right]\end{aligned}\quad (19)$$

である。

こうして得られた運動エネルギー (13) とポテンシャルエネルギー (16), (18) を用いて系の Lagrange 方程式 (11) を構成することで気泡の各モードごとの気泡の振幅が決定される。

こうして得られた力学方程式によって計算された 3 つの気泡の形状変形の様子を図 2 に示す。各気泡の初期半径 R_0 は $7[\mu\text{m}]$ 、初期位置 $(x_I/R_0, y_I/R_0, z_I/R_0)$ はそれぞれ $(0, 0, 0)$, $(8, 0, 0)$, $(0, 8, 0)$ とした。時刻 $t = 0$ に振幅 $R_I/R_0 = 1.4$ で体積振動を開始した。気泡間の相互作用によって初期に球形であった気泡が体積振動とともにその中心位置を変化させ、形状振動をともなった運動をする様子が確認できる。

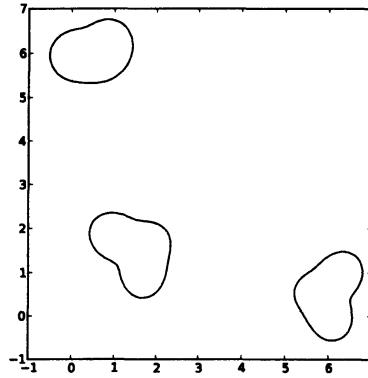


図 2: 相互作用する 3つの非球形気泡

3 球形気泡群の力学的性質

前節で導出された非球形気泡の運動を記述する力学方程式系は、気泡崩壊時に観察される高速噴流の表現に対応する最低次のモードである 3 次の変形モードまでを考慮した場合でも、気泡ひとつあたり 16 本の 2 階の常微分方程式を解く必要がある。気泡間相互作用を含めると、これらの方程式は数十から数百項からなる大規模なものとなる。

この節では、多くの気泡からなる系における個々の気泡のおおよそのふるまいを知るため変形を無視して、体積振動と気泡中心位置の移動のみを扱うこととする。このとき気泡の運動は、以下に示すように個々の気泡に対して以下に示す体積振動と x, y, z 方向の並進運動に対応する 4 本の常微分方程式によって表現される。

$$\begin{aligned}
 R_I \ddot{R}_I + \sum_{J \neq I} \frac{1}{L_{IJ}} R_J^2 \ddot{R}_J - \sum_{J \neq I} \frac{1}{L_{IJ}^2} R_J^3 \dot{U}_J \cdot \mathbf{e}_{IJ} \\
 = -\frac{2}{3} \dot{R}_I^2 + \frac{P_I}{\rho} + \frac{1}{4} \mathbf{U}_I \cdot \mathbf{U}_I \\
 - \sum_{J \neq I} \frac{2}{L_{IJ}^2} R_J \dot{R}_J^2 + \sum_{J \neq I} \frac{R_J^2}{2L_{IJ}^2} \dot{R}_J [(5\mathbf{U}_J + \mathbf{U}_I) \cdot \mathbf{e}_{IJ}]
 \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned}
 R_I \dot{\mathbf{U}}_I + \sum_{J \neq I} \frac{3}{L_{IJ}^2} R_I R_J^2 \dot{R}_J \mathbf{e}_{IJ} \\
 = -3\dot{R}_I \mathbf{U}_I - \sum_{J \neq I} \frac{1}{L_{IJ}^2} (9\dot{R}_I R_J^2 \dot{R}_J) \mathbf{e}_{IJ} - 18\nu \frac{\mathbf{U}_I}{R_I}
 \end{aligned} \quad (21)$$

ただし、 ν は液体の動粘性係数であり、気液界面における液体側の圧力 P_I は、

$$P_I = \left(P_0 + \frac{2\sigma}{R_0} \right) \left(\frac{R_0}{R_{eI}} \right)^{3\gamma} - \frac{2\sigma}{R_{eI}} - 4\nu \frac{\dot{R}_{eI}}{R_{eI}} - p(t) \quad (22)$$

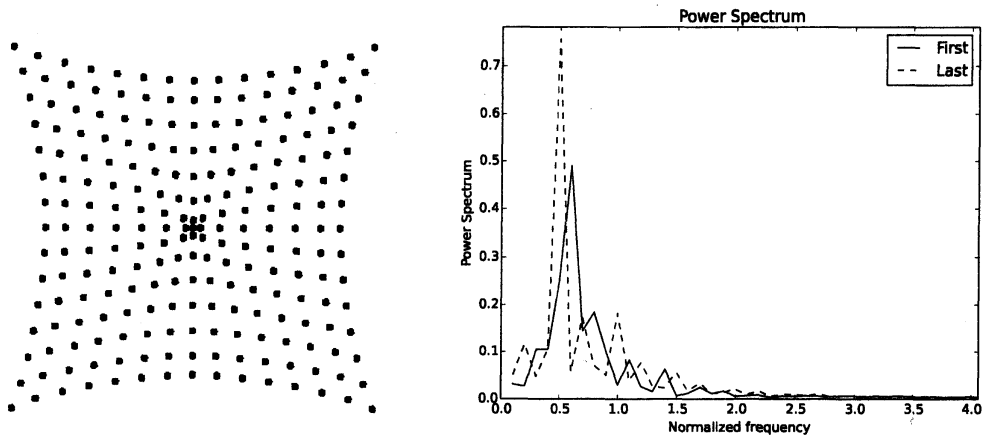


図 3: 球形気泡の並進運動と気泡群中心部における気泡の振動数

と定義される。以下では、この方程式系による球形気泡群における個々の気泡のふるまいについて数値解析による結果を示す。

3.1 球形気泡群の挙動

ここでは、常温の水中において平衡半径 $R_0 = 7\mu\text{m}$ の球形気泡を初期時刻 $t = 0$ に格子状に2次元もしくは3次元的に配置することを考える。初期半径を $R_I(0) = 1.3R_0$ として全ての気泡が $t = 0$ で同時に体積振動を開始するものとする。このとき気泡群は同位相で体積振動を開始するが、式 (21) から気泡間の相互作用により並進速度が誘起される。また、体積振動についても相互作用のために個々の気泡ごとにその振動数が異なることから徐々にその振動の位相にずれが生じることとなる。

図3に、相互作用によって移動した気泡の位置と気泡群中心における気泡の振動のスペクトルを示す。初期気泡間距離 $L = 20R_0$ 、気泡の個数は 15×15 で初期に2次元格子状に配置している。相互作用によって気泡同士が引き寄せ合う結果、中心付近に気泡密度の高い領域が観測される。気泡の数密度が高くなり気泡間距離が小さくなると相互作用がより強く働くため気泡の体積振動の振動数は単一気泡の固有振動数 (Minnaert 周波数) からずれることとなる。図3の実線は、初期の格子状に配置された気泡のスペクトルであり、破線は気泡群中心付近で気泡同士の衝突が起こる直前におけるスペクトルを示している。ただし、周波数は Minnaert 周波数によって正規化している。気泡群における個々の気泡の振動数は、気泡間相互作用により単一気泡の固有振動数よりも低くなっており、気泡間距離がより小さくなる衝突直前ではそれがより顕著になっていることがわかる。

次に、気泡群を構成する気泡の個数に対する気泡群のふるまいを調べるため、初期気泡間距離 $L = 15R_0$ として気泡を3次元格子状に 4^3 個から 14^3 個配置し、気泡群内で気泡同士の衝突が起こる時刻を調べた。図4(a)に結果を示す。気泡の個数が 7^3 個に達するまでは、気泡衝突の起こる時間は気泡群に含まれる気泡の個数の増加にともなって減少することがわか

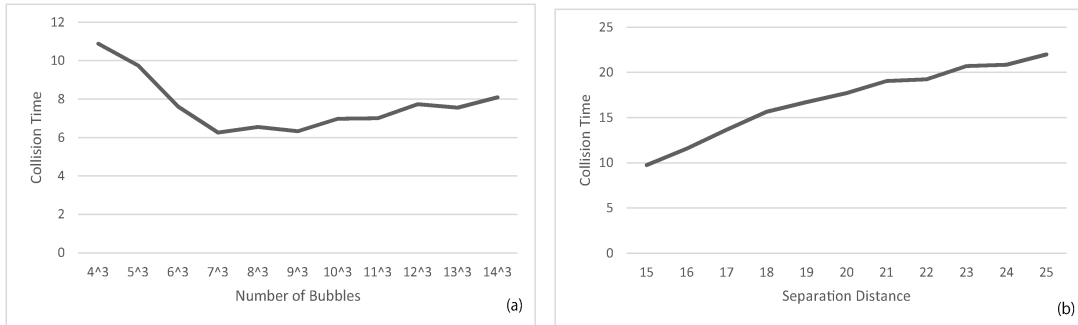


図 4: (a):気泡の個数および (b):初期気泡間距離に対する衝突時間の依存性

る。これは、気泡群中心部の気泡が最も相互作用を強く受けること、気泡の受ける力は他の気泡からの影響の総和となるため気泡の個数が増加すると相互作用の総和も大きくなることによる。結果として、気泡の移動速度は気泡群に含まれる気泡の個数にともなって増加するため衝突が起こる時刻が早くなると考えられる。しかし、気泡の個数が 8^3 個を超えると衝突の起こる時刻が遅くなることがわかる。これは、気泡群を構成する気泡の個数が増加することで気泡群が大きくなり遠方の気泡の作用が中心まで届かなくなることに起因する。このため気泡群内部で気泡同士の引力が拮抗し結果として気泡の移動が起こりづらくなるためと考えられる。本計算の場合、おおよそ平衡気泡半径 R_0 の100倍程度遠方にある気泡の影響はほとんど無視できると考えられる。図4(b)に初期気泡間距離に対する衝突時間の依存性を示す。初期に 5^3 個の気泡を3次元格子状に等間隔に配置している。この場合、気泡の衝突時刻は気泡間距離に対して単調に増加していることがわかる。これは、気泡間隔が広いために衝突するまでに移動する距離が長くなったこと、気泡間の分離距離が長くなったことでの相互作用が弱まったことから説明できる。

3.2 計算負荷

最後に本計算に要する計算コストについて概算する。本研究では、気泡の境界面を球面調和関数 (Legendre 陪関数) によって展開している。Legendre 陪関数 P_n^m の次数 $n(n = 0, 1, 2, \dots)$ に対して解くべき方程式 (モード) の数は $(n + 1)^2$ となる。最終的に N 個の気泡に対して解くべき1階の連立微分方程式の数は $2N(n + 1)^2$ となる。本計算の計算負荷は、上述の連立方程式の反復計算にかかるコストで見積もることができ、そのオーダーは $O([N(n + 1)^2]^3)$ となる。気泡の個数 N が数千程度の気泡からなる系に対する実用計算には相当の計算資源がひつようとなる。

本研究では、コプロセッサ (Intel Xeon Phi) を利用して比較的大規模な計算のパフォーマンスを評価した。コプロセッサによるデータのベクトル化が有効となる場合 ($N = 10^3$ 程度の気泡群) にはCPUのみの場合と比較して有意に高速化することが確認できた。17×17×17個の気泡群に対する100周期分の計算には実時間でおよそ24時間を要した。このことから、本研究で扱ったモデルは数千個程度の気泡から成る実用計算に対しても十分適用可能であると言える。

4 まとめ

本研究では、相互作用する非球形気泡の3次元的な運動を記述するために球面調和関数による気泡界面の多重極展開と Lagrange 力学による定式化を行った。得られた力学方程式により気泡の体積振動、並進運動、形状変形といった基本的な運動が表現可能であることが示された。また、数千個程度の球形気泡からなる比較的大規模な気泡群に対する計算を行い、気泡間相互作用による振動数の変化や気泡群における個々の気泡の並進運動、相互作用が有効に働く範囲について一定の知見が得られた。

謝辞

本研究は、科学研究費補助金(26420119)の助成によるものである。

参考文献

- [1] S. Fujikawa, T. Yano, and M. Watanabe. *Vapor-Liquid Interfaces, Bubbles and Droplets*. Springer, 2011.
- [2] T. G. Leighton. *The Acoustic Bubble*, pages pp. 305–306. Academic Press, San Diego, 1994.
- [3] Yu. A. Pishchalnikov, Oleg A. Sapozhnikov, Michael R. Bailey, James A. McAteer, James C. Williams, Jr., Andrew P. Evan, Robin O. Cleveland, and Lawrence A. Crum. Interactions of cavitation bubbles observed by high-speed imaging in shock wave lithotripsy. In A. A. Atchley, V. W. Sparrow, and R. M. Keolian, editors, *Innovations in Nonlinear Acoustics: 17th International Symposium on Nonlinear Acoustics*, pages 299–302, New York, 2006. American Institute of Physics.
- [4] Werner Lauterborn and Claus Dieter Ohl. The peculiar dynamics of cavitation bubbles. *Appl. Sci. Res.*, 58:63–76, 1998.
- [5] Y. Tomita and A. Shima. Mechanisms of impulsive pressure generation and damage pit formation by bubble collapse. *J. Fluid Mech.*, 169:535–564, 1986.
- [6] J. R. Blake, B. B. Taib, and G. Doherty. Transient cavities near boundaries part 1. rigid boundary. *J. Fluid Mech.*, 170:479–497, 1986.
- [7] J. R. Blake, B. B. Taib, and G. Doherty. Transient cavities near boundaries part 2. free surface. *J. Fluid Mech.*, 181:197–212, 1987.

- [8] E. Kurihara, T. A. Hay, Y. A. Ilinskii, E. A. Zabolotskaya, and M. F. Hamilton. Model for the dynamics of two interacting axisymmetric spherical bubbles undergoing small shape oscillation. *J. Acoust. Soc. Am.*, 130:3357–3369, 2011.
- [9] 栗原 央流. 相互作用を考慮した非球形気泡の非線形振動解析. 京都大学数理解析研究所講究録, 180:161–170, 2012.