

Akusztikusan gerjesztett buborékok többfázisú numerikus szimulációja korszerű véges térfogat módszerrel

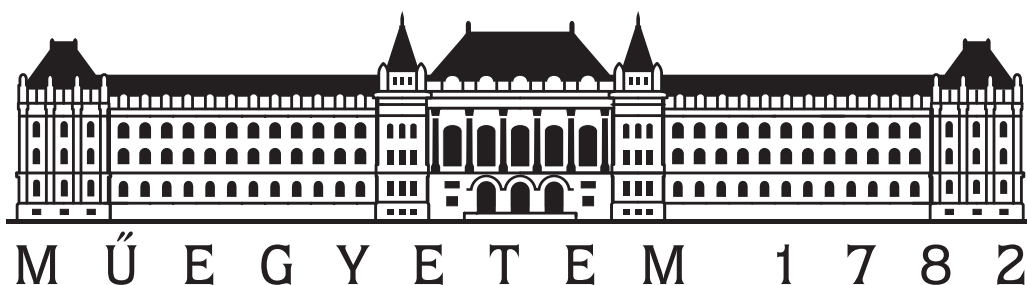
Szerző: Nagy Dániel

Konzulens: Dr. Hegedűs Ferenc (BME-HDS)

Külső konzulens: Dr.-Ing. Stefan Adami (Technical University München)

2022. június 23.

36. OTDK Konferencia



Hidrodinamikai
Rendszerek
Tanszék



Új Nemzeti
Kiválóság Program

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	4
1.1. Szonokémia	4
1.2. Jelölések és elnevezések	7
1.3. Buborékszimuláció	7
1.4. Állóhullámok	7
2. ALPACA mint korszerű áramlásmegoldó	9
2.1. Elvárások	9
2.2. Megmaradási formulizmus	10
2.3. Level-set módszer	11
2.4. Multiresolution	12
2.5. Munkafolyamat	14
3. Kétdimenziós szimulációk	16
3.1. Állóhullámok	16
3.1.1. Peremfeltételek és kezdeti feltételek	17
3.1.2. Paraméterek és anyagjellemzők	17
3.1.3. Eredmények	18
3.2. Buborékszimuláció	21
3.2.1. Peremfeltételek és kezdeti feltételek	21
3.2.2. Szimmetria felhasználása	22
3.2.3. Paraméterek és anyagjellemzők	22
3.2.4. Posztprocesszálas	22
3.2.5. Konvergencia vizsgálat	24
3.2.6. Buborék hatása az állóhullámra	29
3.2.7. Nyomásamplitudó változtatása	30
3.2.8. Frekvencia változtatása	35
3.3. Skálázhatóság	37
3.3.1. Szonokémiai szimulációk párhuzamossága	38
3.3.2. Felbontás növelése	39
4. Háromdimenziós szimulációk	40
4.1. Skálázhatóság	41
4.2. Kezdeti szimuláció	43
5. Összefoglalás	44
5.1. Kétdimenziós eredmények	44
5.2. Háromdimenziós próbaszimuláció	45
6. Appendix	50
6.1. Változó felbontású analízis waveletekkel	50
6.2. Keller-Miksis egyenlet	50
6.3. Beállítások és paraméterek	50
6.4. Mellékletek	53

Absztrakt

A szonokémia lényege a kémia folyamatok kihozatalának a növelése nagy intenzitású ultrahanggal. A módszer a kavitáció egyik speciális esetére, az akusztikus kavitációra alapul. Ennek lényege, hogy az ultrahangos besugárzás során buborékok és buborékfelhők keletkeznek, amik a gerjesztés hatására radiális pulzálásba kezdenek. A pulzálás során a kontrakció olyan nagy lehet, hogy a hőmérséklet elérheti a több ezer Kelvint, ezzel kémiai reakciókat indukálva. Szonokémia reaktorok szimulációjához elengedhetetlen az akusztikusan gerjesztett buborékok dinamikájának a leírása.

Ebben a dolgozatban egyetlen ultrahanggal gerjesztett buborék viselkedését vizsgálom véges térfogat módszerrel (*finite-volume method*, FVM). Egy ilyen típusú FVM szimuláció megfelelő megoldószoftvert igényel. Egy buborékszimulációban az áramlási térben egyszerre két fázis (itt víz és levegő) van jelen, a két anyag együttes jelenlétét kezelni szükséges. Továbbá a vizsgált ultrahang tartományban (20-100 kHz) a hullámhossz (néhány 10 mm) 3 nagyságrenddel nagyobb mint a buborékátmérő (néhány μm) ami az időben is változik. Ezért a háló nagyméretű időbeli és térbeli adaptációja szükséges. Ilyen típusú feladatokhoz olyan megoldót kell választani, amely képes összenyomható, többfázisú áramlások szimulációjára, folyamatos hálóadaptációval. A megoldó szoftver kiválasztásához további fontos kritérium a párhuzamosíthatóság és a superszámítógépekre való skálázhatóság, hiszen a probléma már 2 dimenzióban is rendkívül számításigényes. A választott megoldó a nyílt forráskódú ALPACA, amiben a két fázis szeparációja *level-set* módszerrel történik és a diszkretizáció adaptív változó felbontású (*multiresolution*, MR) hálóval valósul meg. Az ALPACA-t korábban már sikeresen használták hasonló típusú problémára [1, 2].

A dolgozatban bemutatom a használt numerikus módszerek alapjait, mint a *level-set* eljárást, az MR algoritmust és indoklom a szoftverválasztást. Bemutatom állóhullámok létrehozásának a lehetőségét az ALPACA megoldóban és az eredményeket összehasonlítom az analitikus megoldással. Majd két dimenzióban levegőbuborékot helyezek az állóhullám duzzadópontjába. Vizsgálom a probléma hálófüggetlenségét és skálázhatóságát, továbbá kitérek a 3 dimenziós szimulációs lehetőségekre is. Egy három dimenziós szimuláció összehasonlítható mérési adatokkal és használható új, a buborékok felületi instabilitását leíró egyszerűsített matematikai modellek verifikálására.

1. Bevezetés

Buborékok a hétköznapi életben számtalan helyen megjelennek, mindenki találkozott már széndioxid buborékokkal szénsavas üdítőitalokban, szappanbuborékokkal a fürdővíz felszínén vagy buborékokkal a forrásban lévő vízben. Buborékok akár károkat is okozhatnak gépészeti berendezésekben, amire egy jó példa a hajócsavarok környékén kialakuló és azt károsító kavitáció. Ennek a lényege, hogy alacsony nyomáson egy buborék jön létre a vízben és ezt a buborékot az áramlás aztán magasabb nyomású helyre transzportálja. Azonban a magasabb nyomáson fázisalakulás mehet végbe a buborékon belül, ami a buborék hirtelen összeomlását okozza. Az összeomlott buborék helyére a közeg nagy sebességgel beáramlik, ami nagy nyomással jár és nem kívánt rezgéseket kelthet, ez végső soron károsítja a hajócsavar lapátjait.

Az összes felsorolt buboréktípus esetén közös tulajdonság két különböző fázis, a folyadék és a gáz megléte. A két különböző fázis állhat ugyanazon anyag két halmazállapotából, mint például a forrásban levő víz esetén, ahol a buborék vízgőzt tartalmaz. Ezzel szemben például, szénsavas üdítőkben szén-dioxid buborékokkal találkozunk. Buborékok jelen lehetnek egy folyadék fázison belül, két fázis határán (például szappanbuborék a víz felszínén, a víz és a levegő között), illetve a folyadék és az edény fala között. A korábban leírt jelenségek másik közös vonása, hogy a buborékok mindenhol nagy darabszámban jelentkeznek, ez általánosan igaz a buborékokkal kapcsolatos jelenségekre.

Egy kevésbé ismert terület ahol buborékok és buborékfelhők megjelennek a szonokémia. Ebben a dolgozatban olyan buborékokkal foglalkozok, amelyek a szonokémia szempontjából jelentősek, ezeket a következő alfejezetben mutatom be.

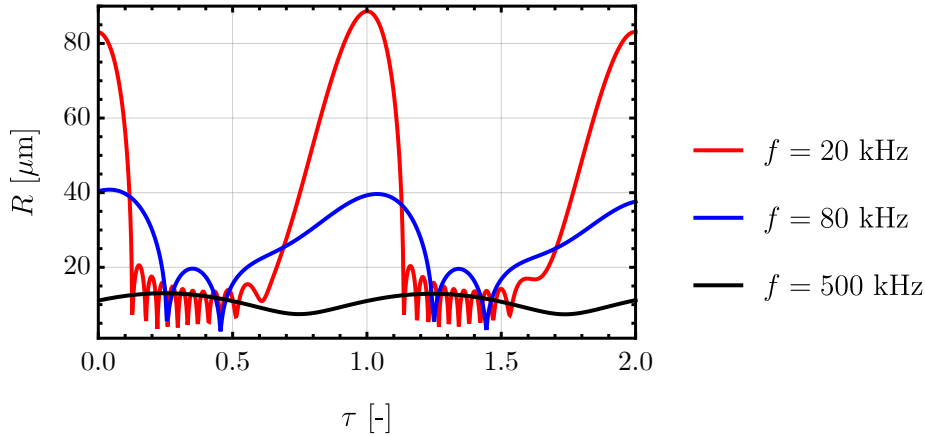
1.1. Szonokémia

A szonokémia egy napjainkban aktív kutatási terület [3, 4, 5, 6]. A szonokémia lényege, kémiai folyamatok kihozatalának a növelése ultrahangos gerjesztéssel. A gerjesztéshez használt ultrahang frekvenciája a néhány tíz kHz-től egészen a MHz-es tartományig terjed. Alkalmazástól függően egyszerre több különböző frekvenciájú ultrahangforrás is használható, amely a folyamatok kihozatalát még tovább növelheti [7]. Szonokémiai reaktorok egy áramlási térből (jellemzően víz) és egy vagy több ultrahangos távadóból állnak, amit a reaktor peremén helyeznek el. A szonokémiai reaktorban jelen lévő buborékok az akusztikus gerjesztés hatására radiális pulzálásba kezdenek. A pulzálás során a buborékok kontrakciója rendkívül nagy lehet, a buborékok mérete és ezáltal térfogata nagyságrendeket változhat, aminek a hatására a buborék és környezetének a hőmérséklete elérheti a több ezer Kelvint. Ezt a jelenséget nevezzük akusztikus kavitációnak, ennek során a magas hőmérséklet a folyadékokban kémiai reakciókat indíthat be.

A szonokémia reaktorokban jelen lévő szubmikron méretű buborék a nagy nyomásamplitúdó (akár több bar) miatt növekedni kezdenek, ami hatására a folyadékokban néhány mikron sugarú buborékok keletkezhetnek [8, 9]. Jelenleg a szubmikron méretű buborékok létrejöttére nincsen egyértelmű magyarázat, ez a szonokémia egy nyílt kérdése. A már meglévő buborékok, a gömbi stabilitás elvesztésével felbomolhatnak több kisebb buboréokra. Az is előfordulhat hogy két buborék a kitágulási szakaszban összeolvad [10].

A buborékok mérete általában mikrométer nagyságrendű és minden buborék alapvetően nem lineáris oszcillátorként viselkedik. Bizonyos gerjesztési frekvenciák esetén, a buborékok stabil, periodikus oszcillációt végeznek, azonban a frekvencia változtatásával előfordulhatnak perióduskettőző bifurkációk. Ilyen perióduskettőző bifurkációkon keresztül eljuthatunk egészen a kaotikus viselkedésig is. Ilyen nem lineáris dinamikával rendelkezik, az egyetlen buborékok

oszcillációját nagy nyomásamplitúdókon leíró Keller-Miksis egyenlet [11] és a Gilmore-egyenlet [12]. Ezt a nem-lineáris viselkedést mutatja az 1.1. ábra. Az ábrán a buboréksugar van ábrázolva a dimenziótlan idő függvényében több különböző frekvencián. Látható, hogy a gerjesztési frekvencia lényegesen befolyásolja a buborék viselkedését, magasabb frekvencián (fekete görbe) a buborék kis amplitúdóval oszcillál, az oszcilláció periódusideje megegyezik a gerjesztési frekvencia periódusidejével. Alacsonyabb frekvencián (kék görbe) már megfigyelhető a buborékok lényegesebb összeomlása, ekkor a gerjesztés egy periódusa alatt, a buborék két oszcillációt végez. Végül még alacsonyabb frekvencián (piros görbe) azt látjuk, hogy a buborékösszeomlást ($\tau \approx 0.1$ és $\tau \approx 1.1$) követően a buborék kis amplitúdójú oszcillációba kezd.



1.1. ábra. A Keller-Miksis egyenlet megoldása különböző gerjesztési frekvenciákon egy $R_E = 10 \mu\text{m}$ egyensúlyi sugarú buborékra [13]. Az R a buboréksugar, $\tau = t \cdot f$ a dimenziótlan idő és f a gerjesztési frekvencia. Az ábrán két periódus van ábrázolva.

A legfontosabb paraméterek a szonokémiában az akusztikus gerjesztési frekvencia, a gerjesztés nyomásamplitúdója és a buborékok nyugalmi sugara. Ezen paraméterek tipikus tartományait az 1.1. táblázat foglalja össze [14]. Ezenkívül fontosok a használt folyadék tulajdonságai, mint a felület feszültség és a viszkozitás.

Számos potenciális ipari alkalmazás elképzelhető. Ultrahangos gerjesztés segítségével hatékonyabban lehet nano-fémrészecskéket előállítani [3, 15]. A gyógyszeriparban a szonokémia használható például vitaminok gyártásához szükséges molekulák előállításához [16] vagy akár a gyógyszerek szervezeten belüli specifikus adagolására is [17]. Fontos alkalmazási terület lehet az ultrahangos víztisztítás [18, 19] és a szonokémia fontos szerepet kaphat új, zöldebb és kevesebb szennyezéssel járó vegyipari technológiák kidolgozása során is [20]. Továbbá mind a mai napig jelennek meg cikkek a szonokémia potenciális új alkalmazási lehetőségeiről, például a nanotechnológia területén [5, 6].

Bár laboratóriumi körülmények között a szonokémia működőképes, a gyakorlati alkalmazások legfőbb akadálya az ipari méretekre való skálázhatóság. A szonokémiai reaktorok skálázhatóságához a megfelelő paraméterkombinációk megtalálása szükséges – például a besugárzási frekvencia és amplitúdó – amellyel az adott esetben a legnagyobb hatásfok érhető el. Ehhez elengedhetetlen a szonokémiai reaktorok szimulációja, azonban egy szonokémia reaktort nem lehet az áramlástanban bevett numerikus módszerekkel szimulálni, hiszen abban több tízmillió buborék is lehet [21], így a reaktor diszkrétizációja és megfelelő minőségű behálózása hatalmas felbontást igényelne. Egy ilyen típusú szimuláció így kivitelezhetetlen. A megoldás, a buborékok modellezése közönséges differenciálegyenlettel – például a Keller-Miksis egyenlettel – amely leírja a buborék nemlineáris viselkedését, ezenfelül a buborékok mozgását az akusztikus térben

1.1. táblázat. Paramétertartományok a szonokémiában

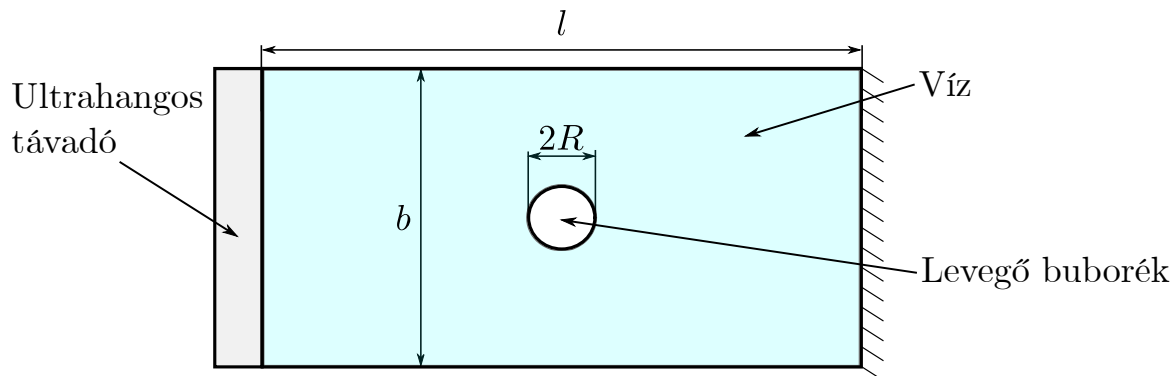
Név	Jelölés	Tartomány
Akusztikus gerjesztési frekvencia	f	20 kHz - 2 MHz
Akusztikus gerjesztési amplitúdó	p_A	1 bar - 4 bar
Buborékok egyensúlyi sugara	R_E	1 μm - 20 μm

nyomon kell követni [22]. A Keller-Miksis egyenlet a 6.2. fejezetben röviden bemutatásra kerül. Adott esetben ez a modell kiegészíthető a buborékok akusztikus térre való hatásának a figyelembe vételével [23]. Ezen egyszerűsített modellek feltételezik a buborékok gömbszimmetriáját (például a Keller-Miksis egyenlet), így az egyik legnagyobb probléma ilyen típusú szimulációkkal az, hogy nem létezik megbízható modell a buborékok szétesésének a leírására, hiszen a buborékok széteséséhez a gömbszimmetria felbomlása szükséges.

A buborékok szétesése alapvetően 3 dimenziós jelenség, így ennek a modellezése rendkívül komplex feladat, azonban egy szonokémia reaktorban a buborék keletkezésének egyik lényeges folyamata a nagyobb buborékok szétesése. Léteznek a buborékok felületi instabilitását leíró nemlineáris modellek, amellyel a buborék felületi rezgéseinek a módusait lehet meghatározni a paraméterek függvényében, ami akár használható lenne a buborék felbomlásának a leírására is. Ez már felhasználható egy szonokémiai reaktor szimulációjához, azonban ezen modellek működése a szonokémia szempontjából lényeges paramétertartományban még nyílt kérdés. Ahhoz, hogy ellenőrizzük, hogy egy numerikus szimuláció tényleg jól működik-e, elengedhetetlen a kísérleti eredményekkel való összevetés és ezáltal a szimulációs kód verifikációja az adott feladatra. Miután ez megtörtént, a paraméterek már jóval szabadabban állíthatók mint a kísérletek során, illetve a szimulációk készítése lényegesen költséghatékonyabb is.

A dolgozatban a megközelítem egyetlen buborék és környezetének a közvetlen numerikus szimulációja véges térfogat módszerrel, először 2 dimenzióban. A szimulációk során egy végtelesen hosszú hengeres buborékot feltételezek és ezt a buborékot elmetsem egy 2 dimenziós síkkal. Ez a megközelítés bár valós alkalmazási potenciállal nem rendelkezik, de segít feltérképezni az ilyen jellegű szimulációk nehézségeit és ezen keresztül felmérhető, hogy a megközelítés egyáltalán lehetséges-e. Ha a megközelítés lehetséges, akkor szükséges felmérni, hogy ily módon lefedhető-e a szonokémia szempontjából lényeges paramétertartomány. A szimulációk során problémát okozhat például a magas nyomásamplitúdó, ami miatt előfordulhat, hogy a vízben negatív nyomás jön létre, amit néhány CFD szoftver nem tud megfelelően kezelni a fázishatáron. Továbbá problémás lehet a magas gerjesztési frekvencia ami az időbeni lépésközt teheti túlságosan kicsivé. A dolgozatban meghatározom a buborék minimálisan szükséges felbontását a paraméterek függvényében, amiből majd előjelezhető a futási idő 3 dimenzióban. *A cél a probléma teljes körűjárása 2 dimenzióban és kitekintés a 3 dimenziós lehetőségekre.* Hosszútávú cél megbízható 3 dimenziós szimulációk készítése, amiket már össze lehet vetni valódi kísérletekkel és ezáltal a használt szoftver verifikálható szonokémiai alkalmazásokra. Verifikáció után a szoftver már használható matematikai modellekkel való összevetésre vagy akár a buborékok szétesésének a leírására. Távlati cél kvantitatív modell létrehozása a buborékok szétesésére, amihez nagy mennyiségű adat szükséges 3 dimenziós buborékszimulációkból.

A szimulációkhoz az ALPACA többfázisú áramlásszimulációs szoftvert használom, amit a *Technical University of München Nanoshock* kutatócsoportja fejlesztett ki. A dolgozat alapját képezi egy nemzetközi együttműködésnek a *Technical University of München, Chair of Aerodynamics and Fluid Mechanics* és a BME-HDS tanszék között, az ALPACA fejlesztői technikai segítséget és szuperszámítógépes hozzáférést is biztosítanak számomra. Az együttműködés célja 3 dimenziós buborékok felületi instabilitásának a jobb megértése.



1.2. ábra. Elrendezés egyetlen buborék szimulációjához.

1.2. Jelölések és elnevezések

A dolgozatban végig egységes jelöléseket és elnevezéseket használok. Töreksem a magyar szak kifejezések használatára, a magyar szakirodalomban nem létező kifejezésekre az angol kifejezést használom, ezeket a dolgozatban dőlt betűvel jelölöm. A CFD-ben bevett módon, az irányokat az égtájaknak megfelelően nevezem el, így például a keleti oldal az áramlási tér jobb oldala és a nyugati oldal a bal oldala. A szonokémiában bevett jelöléseket használom, tehát a gömbszimmetrikus buborék sugarát R -el, a buboréknyomást p -vel, a buboréksűrűséget ρ -val jelölöm és ezen kifejezések alatt a buborékra vonatkoztatott egy időpillanatban vett **átlagos** értékeket értem. A nulla alsó indexxel jelölt mennyiségek a kezdeti állapotra vonatkoznak, így tehát R_0 a kezdeti buboréksugár. A buboréktömeg jelölése m . Az állóhullám paraméterei a p_A nyomásmplitúdó, az f frekvencia és a λ hullámhossz. Csomópontnak nevezem az állóhullám azon pontjait, ahol a nyomás állandó és duzzadóhelynek nevezem azon pontokat ahol a nyomásmplitúdó maximális. Az áramlási tér diszkretizációjánál az összes felhasznált cella száma N_Σ és ebből a buborékban lévő cellák száma N_b , a minimális méretű cella oldalhossza pedig mindig $a_{\min}$.

1.3. Buborékszimuláció

Egyetlen buborék szimulációjához szükséges elrendezést az 1.2. ábra mutatja. Az ábrán a nyugati oldalt egy ultrahangos távadó (*transducer*) helyezkedik el, amivel az áramlási térben nagyfrekvenciás állóhullám hozható létre. Az állóhullám keletkezéséhez szükséges, hogy a távadóval szemben egy fal helyezkedjen el, ahonnan az akusztikus hullám visszaverődik. A visszavert és az eredeti hullám így egymásra szuperponálódik, akusztikus állóhullámot hozva létre. Az állóhullám amplitúdópontjában helyezkedik el egy buborék R sugárral. Az áramlási tartomány l hossza úgy lett megválasztva, hogy egy teljes hullámhossznyi állóhullám jöjjön létre, illetve a b szélesség elég nagyra választandó, hogy a buborék minél kevésbé befolyásolja az akusztikus teret. A gerjesztés szokásos paraméterei az 1.1. táblázatban láthatók. A buborékszimulációk során a nyomásváltozás hatására a buborék pulzálni kezd.

1.4. Állóhullámok

Az állóhullám duzzadóhelyén a nyomásváltozás maximális és az elmozdulás sebessége mindig nulla, ezért praktikus szimulációban a buborékot ide helyezni. Ebben az alfejezetben azt fogom megmutatni, hogy azokban a pontokban ahol a nyomásváltozás maximális, azaz a duzzadóhelyeken, a sebesség végig nulla, ehhez levezetem általánosan az állóhullámban kialakuló

nyomásfüggvényből annak a sebesség- és sűrűségfüggvényét. Az áramlási tér hosszát (l) pont egy hullámhosszra választom, azaz

$$l = \lambda.$$

Ekkor a nyomás $p(t, x)$ a következő módon írható fel, feltéve, hogy az áramlási térben nincsen disszipáció

$$p(t, x) = p_0 + p_A \sin\left(2\pi ft\right) \cos\left(2\pi \frac{f}{c}x\right) \quad (1.1)$$

ahol p_A a nyomásamplitúdó, p_0 a légköri nyomás, f a frekvencia és c a hangsebesség vízben. A nyomásamplitúdó és a frekvencia a távadó megfelelő állításával változtatható. Ahhoz, hogy analitikus úton belássuk, hogy ahol a nyomásamplitúdó maximális, ott a sebesség konstans nulla, a következőket kell feltenni

1. a folyadék viszkozitása elhanyagolható,
2. a sűrűségváltozás elhanyagolható a sebesség és a nyomásváltozáshoz képest és
3. a sebesség az állóhullámban lényegesen kisebb mint a hangsebesség.

Ezen feltévesek az állóhullám numerikus szimulációja esetén ellenőrizve lesznek. Az összenyomható kontinuitás és Navier-Stokes egyenletet 1 dimenzióban

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \quad \text{és} \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial(u\rho)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} = k_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (1.3)$$

Az 1.3. egyenletben felhasználjuk, hogy a viszkozitás elhanyagolható ($\mu = 0$) és térfogati erők nem hatnak ($k_x = 0$)

$$\frac{\partial(u\rho)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} = -\frac{\partial p}{\partial x}. \quad (1.4)$$

Továbbá felhasználva, hogy a sűrűségváltozás elhanyagolható a sebesség és a nyomásváltozáshoz képest, megkapjuk a következő alakot

$$\rho_0 \frac{\partial u}{\partial t} + 2\rho_0 u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial p}{\partial x} \quad (1.5)$$

ahol ρ_0 a sűrűség p_0 nyomáson. Hasonlítsuk össze a bal oldal két tagját és használjuk fel azt, hogy az állóhullám miatt, $u(t, x)$ térbeni és időbeni körfrekvenciája ugyanaz mint $p(t, x)$ esetén az 1.1. egyenletben,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &\gg 2u \frac{\partial u}{\partial x} \\ u_A 2\pi f &\gg u_A 4u\pi \frac{f}{c} \\ c &\gg 2u \end{aligned}$$

ami a 3. feltevésünk miatt igaz, azaz, hogy a sebességek kisebbek mint a hangsebesség. Az 1.5 egyenletet így még tovább egyszerűsíthetjük azaz,

$$\rho_0 \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x}. \quad (1.6)$$

Innentől p behelyettesíthető az 1.1. egyenletből, majd az x szerinti deriválás és a t szerinti integrálás után megkapjuk, hogy

$$u(t, x) = \underbrace{-\frac{p_A}{c\rho_0}}_{u_A} \cos(2\pi ft) \sin\left(2\pi \frac{f}{c}x\right). \quad (1.7)$$

A kontinuitás egyenletben felhasználva, hogy ρ változása elhanyagolható u változásához képest, megkapjuk, hogy

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (1.8)$$

Ahova már u -t behelyettesíthetjük és x szerinti deriválás és t szerinti integrálás után megkapjuk, hogy

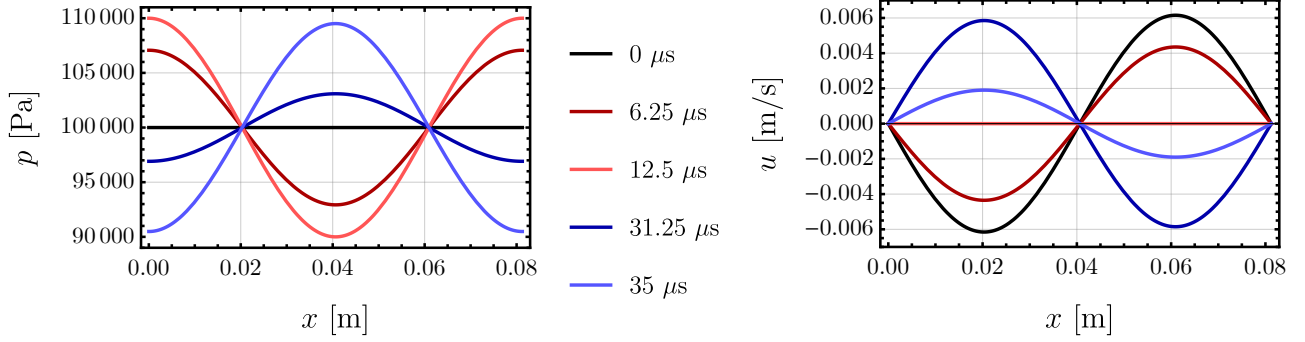
$$\rho(t, x) = \rho_0 + \underbrace{\frac{p_A}{c^2}}_{\rho_A} \sin(2\pi ft) \cos\left(2\pi \frac{f}{c}x\right). \quad (1.9)$$

Tehát az 1.1., az 1.7. és az 1.9. egyenletekkel leírható az állóhullám nyomás-, sebesség- és sűrűségfüggvénye, ezek később össze lesznek vetve a szimulációk eredményeivel. Az 1.3 ábrán a vízben kialakuló állóhullámok vannak szemléltetve $f = 20$ kHz és $p_A = 10$ kPa mellett, az állóhullám amplitúdópontja $x = 0.0406$ m-nél, a csomópontjai $x = 0.0203$ m és $x = 0.0609$ m-nél találhatók. Látható, hogy az 1.3a ábrán az amplitúdópontban ($x = 0.406$ m) a legnagyobb a nyomásamplitúdó, ott $p_A = 10$ kPa. Az 1.3b ábrán az látható, hogy az amplitúdópontban a sebesség minden időpillanatban nulla, itt egy gömbszimmetrikus buborékot elhelyezve a buborék az amplitúdópontban marad, egészen addig, amíg azt más külső hatás nem éri. Az 1.3c ábrán a sűrűség van ábrázolva, különböző időpillanatokra, látható, hogy a sűrűség rendkívül kicsi mértékben változik csak. A relatív sűrűségváltozás kevesebb mint 0.001%.

2. ALPACA mint korszerű áramlásmegoldó

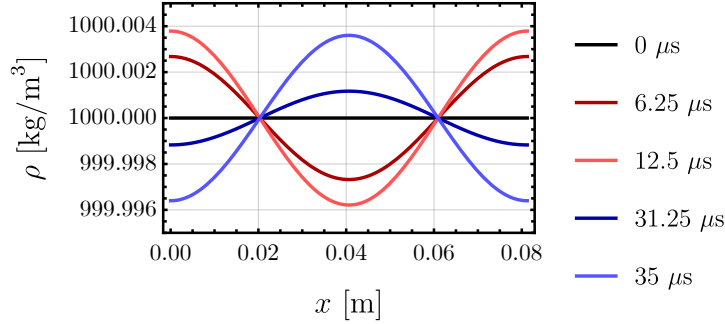
2.1. Elvárások

A cél egyetlen buborék közvetlen numerikus szimulációja korszerű véges térfogat módszerrel. Egyetlen buborék szimulációja is rendkívül nehéz feladat, hiszen ehhez a két fázis együttes szimulálására van szükség. Az akusztikus gerjesztés miatt a buborékméret változik, így a fázishatár is folyamatosan módosul. Ennek a numerikus kezeléséhez a fázishatár folyamatos nyomonkövetése szükséges. A fázishatáron keresztül a változás nem folytonos, így a nyomás és a sűrűség is ugrik. További problémát jelenthet, hogy a nagy nyomásamplitúdó miatt negatív nyomások is előfordulhatnak a folyadékban, amelyet nem minden CFD szoftver képes kezelni. A megoldáshoz választott programcsomag az ALPACA (**A**daptive **L**evel-set **P**arallel **C**ode **A**lpaca) ami már alkalmasnak bizonyult hasonló problémák megoldására szuperszámítógépeken [2]. Az ALPACA alapvetően véges térfogat módszerre épül, ahol a fluxusszámítás lokális Riemann-problémák megoldásával történik. Az ALPACA felhasználja az elmúlt években kifejlesztett legkorszerűbb módszereket is, mint a WENO (*weighted essentially non-oscillatory*) sémát [24] amellyel magas rendű konvergenciát lehet elérni nem folytonos esetben is. A térbeni diszkrétizáció teljesen adaptív *multiresolution* sémával történik [25], amit az ALPACA lokális időlépéssel is kiegészít, így lehetővé teszi a kritikus tartományok nagyobb idő- és térbeni felbontását [26]. A következőkben csak a buborékszimulációkhoz szükséges részleteket ismertetem, a leíró egyenletek megmaradási formulizmusát, a két fázis kezelésére használt *level-set* módszert és a *multiresolution* módszert.



(a) Nyomás az 1.1. egyenlet alapján

(b) Sebesség az 1.7. egyenlet alapján



(c) Sűrűség az 1.9. egyenlet alapján

1.3. ábra. Vízben kialakuló állóhullám nyomása, sebessége és sűrűsége amikor a gerjesztés paraméterei $f = 20$ kHz és $p_A = 10$ kPa. A hullám terjedési sebessége $c = 1625$ m/s.

Alapvetően az ALPACA egy C++-ban készült alacsony szintű párhuzamosított szoftver, amely az MPI szabványt használja a párhuzamosan futó folyamatok közötti kommunikációra. Grafikus felülettel a program nem rendelkezik, azonban a csomag alapvetően szuperszámítógépes használatra készült. Így a probléma implementálásának az ideje még mindig elhanyagolható a futási időhöz képest. Ezen dolgozat elkészítéséhez háromszázezer CPU-óra gépidőt használtak, a SUPERMUC-NG szuperszámítógépen. *Egy CPU-óra az a számítási mennyiség amit egy CPU mag egy óra alatt végez el*, így a háromszázezer CPU-óra, egyetlen CPU magon futtatva 34 évig tartana. Ebből is látható, hogy mennyire fontos a használt szoftver megfelelő párhuzamosíthatósága.

2.2. Megmaradási formulizmus

A véges térfogat módszerekhez a kontinuitás, a Navier-Stokes és az energiaegyenlet megmaradási formája szükséges. A megmaradási törvény általános alakja [27]

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \mathbf{F}(\mathbf{U}) = S(\mathbf{U}, t) \quad (2.1)$$

ahol $\mathbf{U}$ a megmaradó mennyiségek vektora, $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ a fluxus és $S(\mathbf{U}, t)$ a forrás. Jelen esetben a megmaradó mennyiségek vektora

$$\mathbf{U} = [\rho \quad \rho u \quad \rho v \quad \rho w \quad E]^T$$

ahol ρ a sűrűség, u, v, w az x, y és z irányú sebességek és E a térfogategységre jutó energia, ρ, u, v, w, E mind x, y, z -től függő skalármezők. A fluxus kiszámítása lokális Riemann-problémák

megoldásával történik [28], így nem folytonos átmenetek is jól kezelhetők. Az $S(\mathbf{U}, t)$ forrástag tartalmazza, az advekció, a gravitáció, a viszkozitás, a hővezetés és a felületi feszültséget leíró tagokat. Ezek az ALPACA-ban fordítási időben megadott konstansokkal, ki-be kapcsolhatók. Továbbá szükséges az állapotegyenlet megadása, ami a $p(\rho)$ függvényt jelenti. Az állapotegyenlet lehet az ideális gáztörvény [29], a folyadékokra alkalmazható Tait egyenlet [30, 31], a merev gáz egyenlet vagy a Noble-Abel gázegyenlet [32].

A 2.1. egyenlet időben megoldható, ha a fluxusok és a források ismertek. Az ALPACA másod- és harmadrendű Runge-Kutta módszert is biztosít a közönséges differenciálegyenletekből álló rendszer időbeni integrálásához. Az ALPACA-ban használt megoldók, mint a fluxusszámításhoz használt Riemann-megoldó és az időbeni megoldáshoz használt Runge-Kutta módszer a forráskódban állítható. A forráskódban való állítás nagy előnye, hogy a program a megadott beállításokra fordítási időben a fordító által optimalizálható. Nyilvánvaló hátrány, hogy minden állításhoz a programcsomag újrafordítása szükséges, azonban a fordítási idő (néhány perc) elhanyagolható a futási időhöz képest.

2.3. Level-set módszer

A *level-set* biztosítja a két fázis elkülönítését. Ehhez egy *level-set* függvény $\phi(x, y, z)$ megadása szükséges. A ϕ függvény 2 dimenzióban mindössze x és y függvénye. A fázishatárt a

$$\phi(x, y, z) = 0 \quad (2.2)$$

implicit egyenlet jelöli ki. A fázishatár időbeni változását a következő parciális differenciálegyenlet írja le [33, 34]

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u}_\phi \cdot \nabla \phi = 0, \quad (2.3)$$

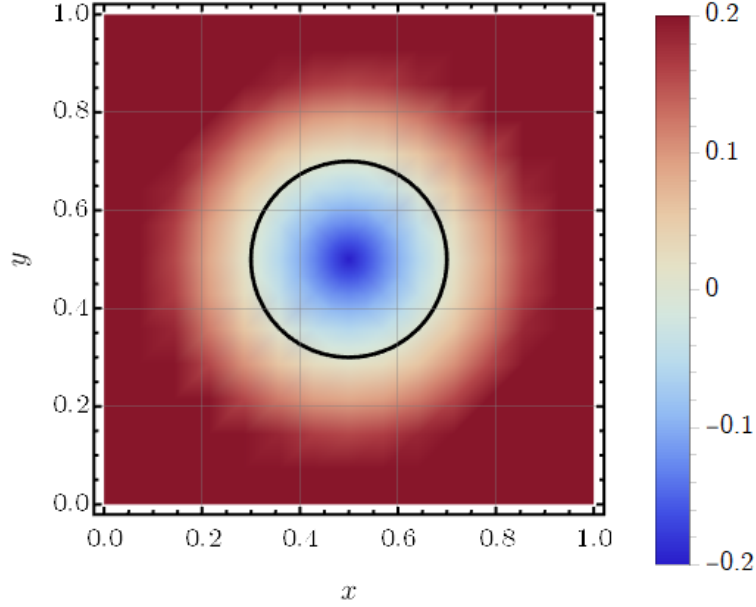
ahol $\mathbf{u}_\phi$ a *level-set* fázishatár mozgási sebessége. Az $\mathbf{u}_\phi$ szintén Riemann-problémák megoldásával kapható meg, erre több határfelületi Riemann megoldó is választható az ALPACA-ban. A határfelület közelében előfordulhatnak rendkívül nagy sebességek, amik nagyon nagy gradienseket vagy szakadásokat hozhatnak létre a *level-set* függvényben, így nehezebbé téve a 2.3. parciális differenciálegyenlet numerikus megoldását. Ezért minden időlépés után a *level-set* újrainicializációja szükséges, ami biztosítja a *level-set* folytonosságát a fázishatár közelében is [34]. Ezzel a módszerrel követhető a buborékok méretének a gyors változása is, amely alkalmassá teszi a szoftvert szonokémiai szimulációkhoz.

A *level-set* függvény viselkedését az áramlási tér peremén a *level-set* peremfeltétellel lehet megadni. A dolgozatban a zéró-gradiens peremfeltételt és a szimmetria peremfeltételt fogom használni. A zéró-gradiens peremfeltétel azt feltételezi, hogy a peremen a *level-set* függvény normálirányú változása zérus.

Felhasználói szinten a *level-set* kezdeti állapotát kell mindig megadni, úgy hogy a fázishatáron teljesüljön a 2.2. egyenlet. Innentől kezdve a megoldó automatikusan nyomköveti a fázishatárt a 2.3. parciális differenciálegyenlet folyamatos megoldásával és újrainicializációjával. Például egy R_0 kiindulási sugarú buborékot (x_0, y_0) középponttal a következőképp adhatunk meg 2 dimenzióban

$$\phi(x, y) = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} - R_0, \quad (2.4)$$

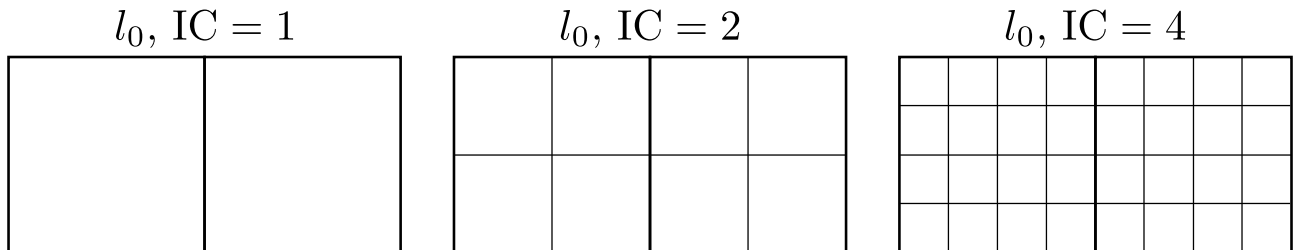
így a gázfázisban a *level-set* negatív értéket, a folyadék fázisban pedig pozitív értéket vesz fel. Ez látható a 2.1. ábrán, a fekete kontúr a $\phi(x, y) = 0$ görbét jelöli.



2.1. ábra. Egy köralakú fázishatár leírása *level-set* módszerrel a 2.4. egyenlet alapján, ahol $(x_0, y_0) = (0.5, 0.5)$ és $R_0 = 0.2$. A különböző színek a különböző *level-set* értékeket jelölik a jobb oldali színskála szerint. A fekete kör, pedig a $\phi(x, y) = 0$ görbe.

2.4. Multiresolution

Alapvetően az ALPACA legfőbb erőssége a *multiresolution* (MR) algoritmus, amivel a térbeni felbontást automatikusan kerül beállításra. A csomagban csak téglalap vagy téglatest alakú terek diszkrétizálhatók és kizárólag csak négyzetekkel vagy kockákkal. Az MR algoritmusához szükséges definíció a felbontás mélysége, vagyis a különböző felbontású szintek maximális száma. Az m . szint jelölése l_m , a maximális felbontás mélysége $l_{\max}$ és a szintenkénti küszöbérték ε_{l_m} . A blokkok száma az l_0 szinten definiálható és szintén megadható, hogy egy blokk, hány cellát tartalmazzon. A blokkok egy dimenzió menti cellaszámát IC-vel (*internal cells*) jelöljük, ha például $IC = 4$, akkor 2 dimenzióban egy blokk $4 \times 4 = 16$ cellára, 3 dimenzióban pedig egy blokk $4 \times 4 \times 4 = 64$ cellára lesz bontva. Megadható például, hogy az l_0 szinten 2×1 blokkot szeretnénk használni, ez látható a 2.2. ábrán. Bal oldalt $IC = 1$, középen $IC = 2$ és jobb oldalt pedig $IC = 4$, látható, hogy ezzel a legalacsonyabb l_0 szinten 2×1 -es, 4×2 -es végül pedig 8×4 -es cellafelbontást kapunk.

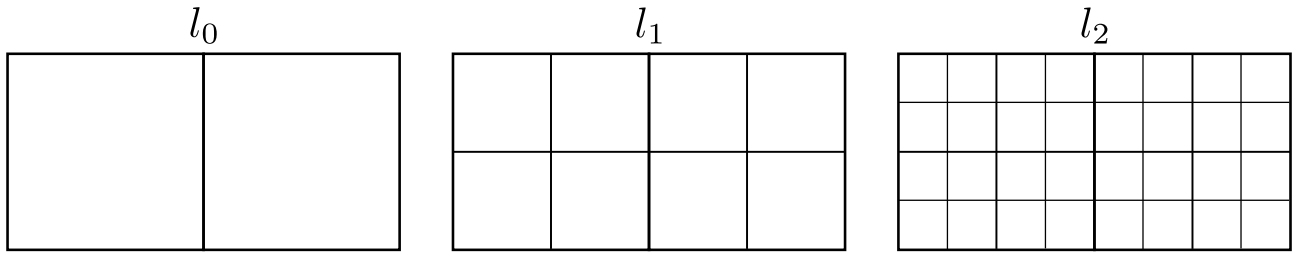


2.2. ábra. A cellafelbontás l_0 szinten, különböző IC értékek mellett. A blokkfelbontás mindenhol 2×1 .

Az IC paraméter és a blokkok számának állításával határozhatjuk meg a hálófelbontást az l_0 szinten. Az MR algoritmus ezt az l_0 felbontást fogja tovább finomítani. Az MR algoritmus 2

dimenzióban az l_m szint minden négyzetét 4 fele akkora oldalhosszú kis négyzetre bontja fel az l_{m+1} szinten, tehát ha az l_m szinten egy négyzetünk volt, akkor abból az l_{m+1} szinten 4 négyzet lesz. Erre látható egy példa a 2.3. ábrán, az egyszerűség kedvéért az ábrán most $IC = 1$, azaz a hálófinomítást csak az MR algoritmus végzi. Az $l_{\max}$ paraméter jelentése tehát az, hogy a kiindulási négyzetet maximum hányszor lehet továbbosztani. A valóságban ezek a különböző felbontási szintek változathatják egymást, ezzel változó felbontású hálót hozva létre.

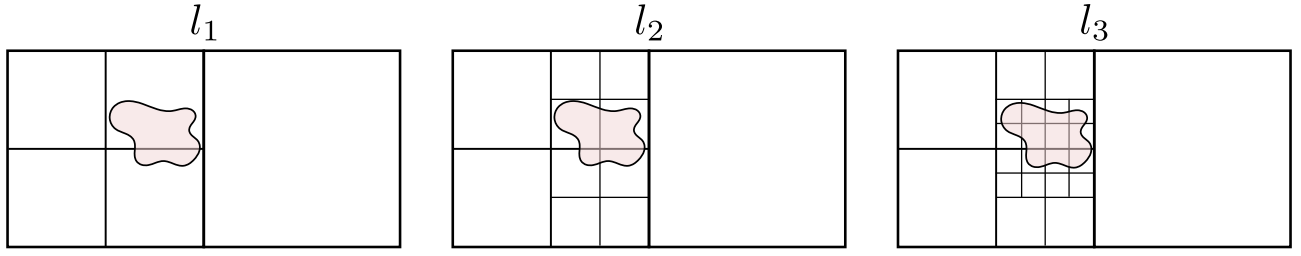
A továbbosztás mindig csak azon négyzetekben történik ahol az szükséges, mert például az állapotjelzők vagy a fázishatárt meghatározó *level-set* gyorsan változik. Azon részeken, ahol a változás mértéke kicsi, ott nem szükséges a további felbontás. Ennek az eldöntése a szintenkénti küszöbértékkel ε_{l_m} való összehasonlítással lehetséges. Leegyszerűsítve, az ε_{l_m} szintenkénti küszöbérték gyakorlatilag azt adja meg, hogy az adott szinten mi számít elhanyagolható részletnek. Ha egy megmaradó mennyiség értéke l_m szinten u_{l_m} és l_{m+1} szinten $u_{l_{m+1}}$ és a kettő közötti különbség $u_{l_{m+1}} - u_{l_m}$ kisebb mint a küszöbérték, akkor az elhanyagolható. Ennek a matematikai alapjait a változó felbontású analízis (*multiresolution analysis*) adja meg [28, 35] (lásd Appendix 6.1). A 2.4. ábrán egy fázishatár diszkretizáció van szemléltetve az MR módszerrel. Az ábrán látható, hogy az MR módszer kihasználása olyan hálókat készít, ami a fontosabb részleteket jobb felbontással diszkretizálja, a kevésbé fontos részleteket pedig alacsonyabb felbontással, ezzel értékes számítási időt takarítva meg.



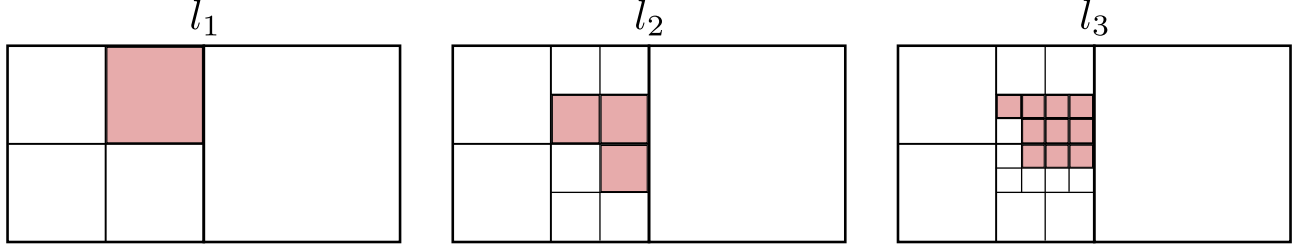
2.3. ábra. Maximális hálófelbontás 3 különböző szinten, $IC = 1$ mellett. A l_0 szinten a háló 2×1 cellából áll.

Az MR algoritmus nagy előnye, hogy a háló így minden időlépésben lokálisan adaptálható, anélkül, hogy a számítási terhelést újra kelljen osztani. Lehetséges tehát egy l_m szinten lévő cella felosztása négy l_{m+1} szintű cellára, azaz a felbontásnövelés, ekkor minden új cella értéke a körülvevő cellákból és a helyén lévő korábbi nagyobb cellából lesz meghatározva. A másik lehetőség négy l_{m+1} szintű cella összeolvasztása egy l_m szintűre, ekkor az új cella értéke a négy korábbi cella átlaga lesz.

További fontos tulajdonsága az ALPACA-nak, hogy a különböző szinteken, különböző időlépést használ, a szint növelésével a lépésköz feleződik, tehát ha l_1 szinten az időlépés Δt_{l_1} akkor l_2 szinten az $\Delta t_{l_2} = 2^{-1} \Delta t_{l_1}$. Ennek a módszernek a neve az adaptív helyi időlépés azaz ALTS (*adaptive local time stepping*), a lényege, hogy először a legmagasabb szinten lévő cellák lépnek a legkisebb $\Delta t_{l_{\max}}$ időlépéssel kettőt, majd az alatta lévő szinten a cellák nagyobb időlépéssel lépnek egyet. És így tovább az alacsonyabb szintekre egészen l_0 -ig.



(a) A színezett rész körüli fázishatár és a körülötte lévő cellafelbontás különböző szinteken.



(b) A két fázis reprezentációja a négyzetes cellákból álló hálón. A piros cellák tartoznak a 2.4a ábra azon részeihez, ahol a színezett fázis van jelen.

2.4. ábra. MR felbontása egy fázishatárnak

Az ALPACA-ban három MR paraméter állítható, az $l_{\max}$, ami a szintek maximális száma, az ε_{ref} ami a referencia küszöbérték az $l_{\text{ref}} \leq l_{\max}$ szinten és a referencia szint l_{ref} . Minden ε_{l_m} az l_{ref} és az ε_{ref} -ből van kiszámolva úgy, hogy a módszer megfelelő rendben konvergens legyen.

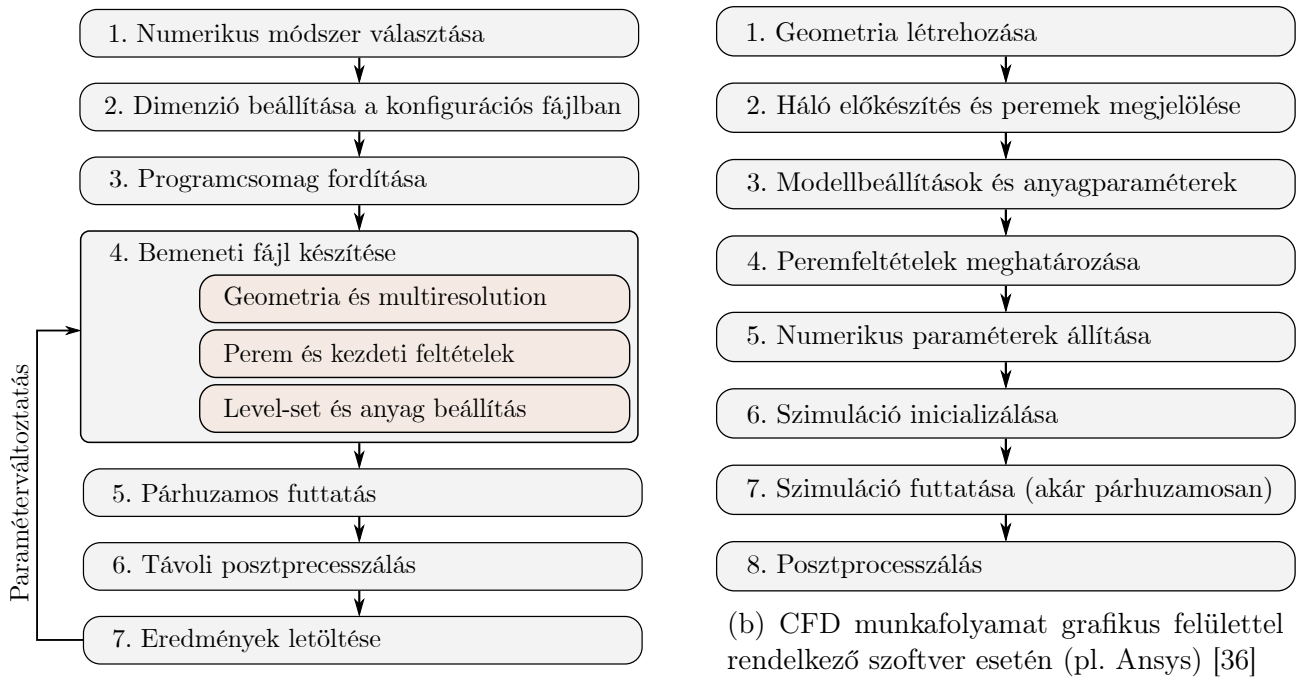
Tehát összességében két módszer áll rendelkezésre a háló módosításához. Az egyik az l_0 szinten lévő cellafelbontás megfelelő beállítása, a másik pedig az MR paraméterek állítása. Természetesen a két megközelítés együttes használatával lehet megfelelő felbontású hálót létrehozni, így lehet azt is elérni, hogy a számítások megfelelően szétoszthatók legyenek a CPU magok között.

Ezen módszer különösen szerencsés a buborékok megfelelő diszkretizálásához. Hiszen a buborékot így megfelelő számú cellára lehet bontani, anélkül, hogy a teljes teret túlságosan felbontanánk. A buboréknál, ahol a felbontás sokkal nagyobb, az időlépés is lényegesen kisebb, így mind térben és időben jobb felbontást érhetünk el, jelentős mennyiségű számítást megtakarítva.

2.5. Munkafolyamat

Az ALPACA használata lényegesen eltér egy általános CFD szoftver használatától. A dolgozat szimulációinak az elkészítéséhez, ahogy a 2.5a ábra is mutatja a következő munkafolyamatot követtem

1. A fontos konstansok (cellák száma a blokkokban, segédcellák száma a blokkok körül) és a megoldás módszerének és rendjének a beállítása a forráskód felhasználói paramétereinek között.
2. Konfigurációs fájl létrehozása a teljes csomag fordításához, a konfigurációs fájl létrehozásánál kell megadni a fordításhoz használt *flaget* (például vektorutasításkészlet használata vagy fordító optimalizáció mértéke) és a feladat dimenzióját (2D vagy 3D) továbbá itt állítható be a hibakeresés (*debug*) üzemmód is. A konfigurációhoz a *ccmake* programot használtam.
3. Konfigurációs fájl futtatása, ami lefordítja a teljes programcsomagot és elkészíti a futtatható állományt. A programcsomag újrafordítása csak akkor szükséges, ha az 1-2. pontban



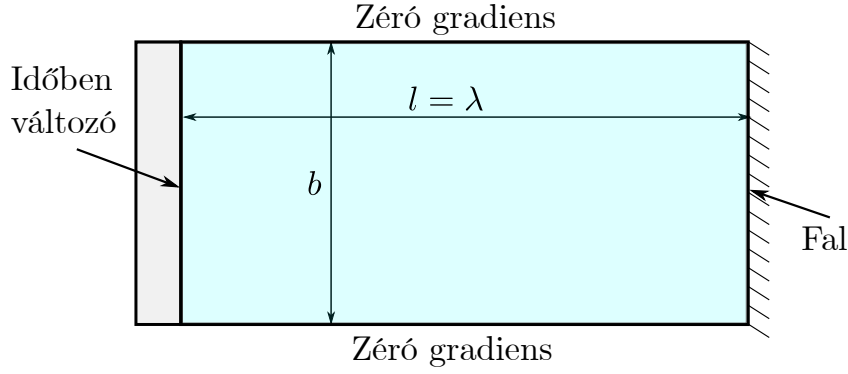
(a) CFD munkafolyamat ALPACA használatával

2.5. ábra. A megszokott CFD munkafolyamat összehasonlítása az ALPACA használatához szükséges munkafolyamattal

valami változtatásra kerül. Ha csak paraméterek vagy anyagjellemzők kerülnek változtatásra akkor a munkafolyamat 1-3. pontja kihagyható és a korábbi futtatható állomány újrahasznosítható.

4. Bemeneti fájl elkészítése, ahol megadásra kerül a blokkok száma és mérete (azaz a geometria), a peremfeltételek, a *level-set* peremfeltételek, a kezdeti feltételek, a *level-set* függvény, az anyagtulajdonságok és az állapotegyenletek, a térfogati erők, a megoldási időintervallum és a pillanatfelvételek kimentéséhez szükséges beállítások.
5. Az ALPACA futtatása munkaállomáson vagy szuperszámítógépen, a megfelelő MPI szabványt megvalósító környezetben (*openMPI* vagy *Mpich*). Itt kerül megadásra, hogy a probléma hány szálon fusson.
6. Távoli postprocesszáls *paraview*-vel. Az eredmények letöltése a munkaállomásról vagy szuperszámítógépről nem reális, hiszen egyetlen kétdimenziós szimuláció több 10 GB adatot hoz létre. A *paraview* lehetővé teszi a távoli posztprocesszáls, így az adatokat nem kell a gépek között mozgatni. A reprodukálható posztprocesszálsához teljes parancssoros program is készült (lásd 3.2.4. fejezet).
7. Postprocesszáls eredményeinek a letöltése a munkaállomásról vagy szuperszámítógépről (néhány 10 MB).

Az itt felvázolt és egy hagyományos CFD munkamenet közti különbségek a 2.5. ábrán láthatók. Alapvetően az ALPACA használata sokkal alacsonyabb szintű eljárásokat igényel, mint például a forráskód kézi szerkesztése és fordítása (lásd 1-3. pont). A másik lényeges különbség a háló előkészítésében van, ahogyan a 2.5b ábra is mutatja, a munkafolyamat egy fontos lépése a háló előkészítése. Erre ALPACA-ban nincsen szükség, hiszen a hálót az MR algoritmus (lásd



3.1. ábra. Elrendezés az állóhullám szimulációkhoz és az áramlási tér peremfeltételei.

2.4. fejezet) hozza létre automatikusan és adaptálja lépésről-lépésre, viszont a megfelelő MR paraméterek beállítása rendkívül fontos.

3. Kétdimenziós szimulációk

Elsőként kétdimenziós tesztproblémákra használok az ALPACA-t, így kipróbálható a szoftver működése és képességei, mint a folyadékban lévő negatív nyomások megfelelő kezelése. A kétdimenziós szimulációk során az akusztikus peremfeltétellel létrehozott állóhullámokat összehasonlíthatom az analitikusan levezetett függvényekkel. Ezután buborékot helyezek az állóhullám amplitúdópontjába, hogy annak a viselkedését vizsgáljam, ehhez már két fázis együttes szimulációja szükséges. A következő szimulációk során a megoldóban a dolgozat végén található 6.1. táblázatban leírt referencia beállításokat használok, amennyiben valahol a használt beállítások ettől eltérnek, úgy azt ott jelzem.

3.1. Állóhullámok

Állóhullámok szimulációját kétdimenzióban végeztem, ahol az áramlási térben csak víz van, tehát egyetlen fázis szimulációja elegendő. Az elrendezés a 3.1. ábrán látható. Nyugati oldalt helyezkedik el egy ultrahangos távadó, keleti oldalt egy fal. Az áramlási tartomány hossza l és szélessége b . Az állóhullámhoz tartozó függvényeket az 1.4. fejezetben analitikusan levezettem a nyomásfüggvényből kiindulva a $l = \lambda$ esetre. A nyomás-, sebesség- és sűrűségfüggvény a következő,

$$p(t, x) = p_0 + p_A \sin\left(2\pi f t\right) \cos\left(2\pi \frac{f}{c} x\right), \quad (3.1)$$

$$u(t, x) = -\frac{p_A}{c\rho_0} \cos\left(2\pi f t\right) \sin\left(2\pi \frac{f}{c} x\right), \quad (3.2)$$

$$\rho(t, x) = \rho_0 + \frac{p_A}{c^2} \sin\left(2\pi f t\right) \cos\left(2\pi \frac{f}{c} x\right). \quad (3.3)$$

Itt minden paraméter ismert, p_0 a légköri nyomás, p_A a nyomásamplitúdó ami arányos a távadó beállított teljesítményével, f a gerjesztés frekvenciája, c a hangsebesség vízben és ρ_0 a víz sűrűsége p_0 nyomáson.

3.1.1. Peremfeltételek és kezdeti feltételek

A megoldás során a nyugati oldalon időben változó peremfeltételt használok. Az időben változó peremfeltételnek a paramétere a $p_{A,p}$ nyomásamplitúdó és az f gerjesztési frekvencia. Így a peremen a következő függvényt lehet előírni

$$p_p(t) = p_{0,p} + p_{A,p} \sin(2\pi ft) \quad (3.4)$$

A peremen beállított nyomásamplitúdó nem egyenlő az állóhullám nyomásamplitúdójával. Az állóhullám amplitúdója $p_A = 2p_{A,p}$, hiszen a keleti falon, az akusztikus hullám visszaverődik, és az állóhullámot a távadó által kibocsátott és a visszaverődő hullám összege adja. A keleti oldalon fal van, ahol $u = 0$ van előírva. Alapvetően észak-déli irányban (y irány) a deriváltak végig nullák és várhatóan y irányú sebesség sem alakulhat ki, így az északi és déli oldalon is zéró-gradiens peremfeltételt használtam.

Kezdetben a víz nyugalomban van, azaz $u = 0$ és $v = 0$ mindenhol. A víz kezdeti sűrűsége $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$ és nyomása pedig $p_0 = 1 \cdot 10^5 \text{ Pa}$.

3.1.2. Paraméterek és anyagjellemzők

Az állapotegyenletnek használhatjuk a Tait állapotegyenletet vagy a merev gáz állapotegyenletet (*stiffened gas*). A Tait állapotegyenlet vízre [31]

$$p = B \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - B + A \quad (3.5)$$

és a paraméterek $\gamma = 7.15$, $A = 1 \cdot 10^5 \text{ Pa}$, $B = 3.31 \cdot 10^8 \text{ Pa}$ és $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$, sajnos ezen beállítások értelmezhetetlen eredményt adnak a szimulációk során, így a következőkben ezt az állapotegyenletet nem használom. A merev gáz állapotegyenlet

$$p = (\gamma - 1)\rho e - p_\infty \quad (3.6)$$

ahol γ a specifikus hőkapacitások aránya és p_∞ a háttérnyomás. A paraméterek vízre $\gamma = 4.4$ és $p_\infty = 6 \cdot 10^8 \text{ Pa}$, amik ALPACA-ban hasonló problémákra már korábban is működőképesnek bizonyultak [1, 2]. A hangsebesség ekkor a következő módon számolható

$$c = \sqrt{\gamma \frac{p_\infty + p_0}{\rho_0}} = 1624.943 \text{ m/s}. \quad (3.7)$$

Továbbá szükséges megadni a víz nyírási viszkozitását (μ) és térfogati viszkozitását (ζ)

$$\mu = 1 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s} \quad \zeta = 3 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}. \quad (3.8)$$

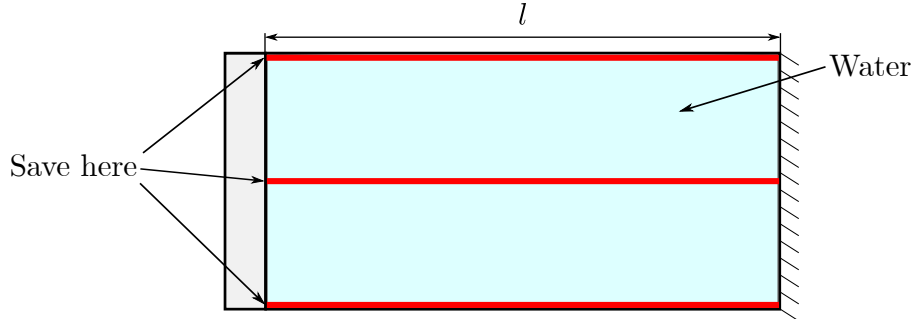
A használt gerjesztési frekvencia $f = 20 \text{ kHz}$, tehát a hullámhossz $\lambda = 81.25 \text{ mm}$ ezért az áramlási tartomány hosszát is $l = \lambda = 81.25 \text{ mm}$ választom meg. Az egy hullámhossznyi távolság elég arra, hogy egy teljes állóhullám kialakuljon és létrejöjjön egy faltól távoli amplitúdópont. Ez számítási szempontból is kedvező, hiszen így kevesebb cellára van szükség.

Az áramlási tér 2×1 blokkra lesz felosztva, ez 16 belső cellával 32×16 cellát jelent az MR felbontás 0. szintjén. Egy blokk mindig egy négyzet, az oldalhossz pedig $l/2 = 40.63 \text{ mm}$, így a teljes tartomány $81.25 \text{ mm} \times 40.63 \text{ mm}$. A MR algoritmusban maximálisan 4 további szintet használok, tehát $l_{\max} = 4$, így a legnagyobb elérhető felbontás, a 4. szinten 512×256 cella. Az MR algoritmus referencia toleranciája $\varepsilon_{\text{ref}} = 0.01$ az $l_{\text{ref}} = 4$ szinten. A beállítások a dolgozat végén található 6.2. táblázatban kerültek összefoglalásra.

A feladat időben a $t \in [0, 400] \mu\text{s}$ időintervallumon kerül megoldásra, ami összesen 8 periódust foglal magába, hiszen a 20 kHz -es frekvencián egy periódus időtartama $T = 50 \mu\text{s}$.

3.1.3. Eredmények

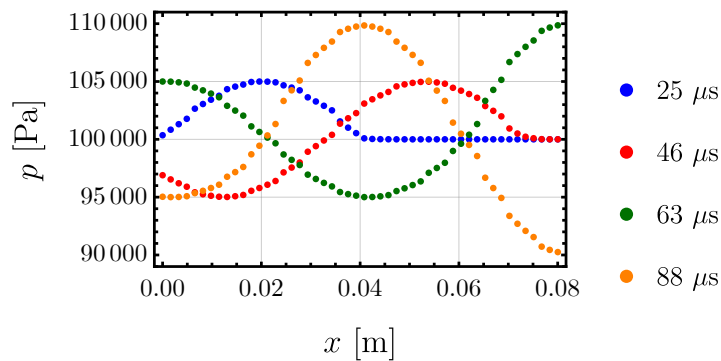
A szimuláció eredményeit a saját posztprocesszáló szkripttemmel automatikusan dolgoztam fel. Az állóhullámhoz kirajzoláshoz szükséges adatok (nyomás, sűrűség és sebesség) minden elmentett időpillanatban fel lettek véve 3 egyenes mentén, ezen egyenesek a 3.2. ábrán vannak feltüntetve.



3.2. ábra. Három egyenes (pirossal) ami mentén minden időpillanatban elmentésre került a nyomás, a sűrűség és a sebesség.

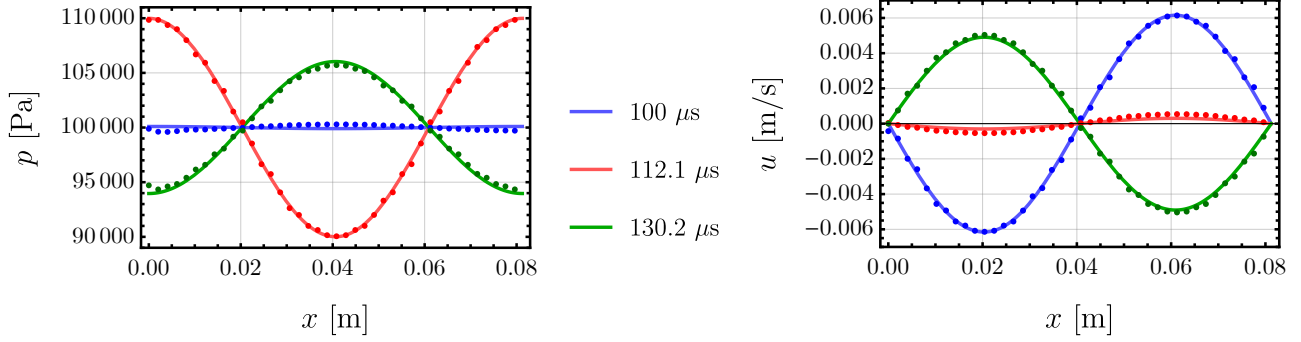
Állóhullám kialakulása

Az állóhullám kialakulása a 3.3. ábrán látható, négy különböző időpillanat van feltüntetve. Az első két feltüntetett időpontban (kék és piros) a hullám még nem éri el a falat, a visszaverődés még nem történt meg, csak a távado által kibocsátott hullám halad jobbra. A hullám a falat pont $T = 50 \mu\text{s}$ -nél éri el, hiszen az áramlási tér hossza pont egy hullámhosszny, tehát a hullámnak ehhez pont egy periódusnyi idő kell. A következő két feltüntetett pillanatban (zöld és narancssárga) a hullám a falról már visszaverődik, de a visszaverődő, balra haladó hullám még nem érte el a bal oldali falat, az állóhullám folyamatosan alakul ki. Például az ábrán már látható az $x \approx 0.06 \text{ m}$ -nél kialakuló csomópont. Az állóhullám kialakulását a melléklet 6.1. ábrája animálva is tartalmazza (lásd a 6.4. fejezet).



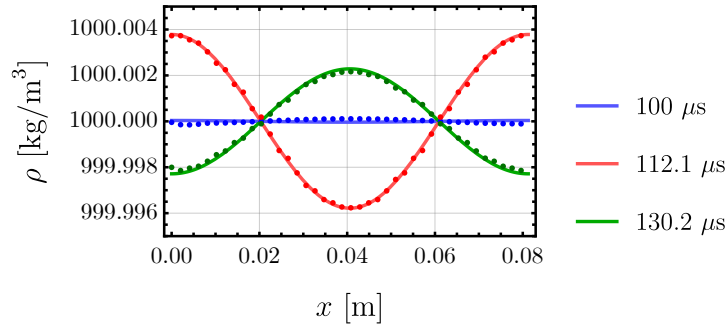
3.3. ábra. Az állóhullám kialakulása.

A már teljesen kialakult állóhullámot a 3.4. ábra mutatja. Az ábrán fel vannak rajzolva az állóhullámok az analitikus levezetés szerint is (lásd a 3.1-3.3. egyenletek). Az ábrán látható, hogy az elméleti levezetés eredménye jól egyezik a numerikusan számolt eredményekkel. Az itt bemutatott eredményeket a későbbiekben is alkalmazom, hiszen így módon a teljes állóhullám inicializálható, és nem kell a kialakulást szimulálni. Ehhez a kezdeti feltételeket a 3.1-3.3. egyen-



(a) A szimulált és az elméleti nyomás összehasonlítása, nyomás a 3.1. egyenlet alapján

(b) A szimulált és az elméleti sebesség összehasonlítása, sebesség a 3.2. egyenlet alapján



(c) A szimulált és az elméleti sűrűség összehasonlítása, sűrűség a 3.3. egyenlet alapján

3.4. ábra. A szimulált eredmények összehasonlítása az elméleti levezetőséből számolt eredménnyel. A gerjesztés paraméterei $f = 20$ kHz és $p_A = 10$ kPa.

letek szerint kell megadni, azaz

$$p(0, x) = p_0 = 1 \cdot 10^5 \text{ Pa}, \quad (3.9)$$

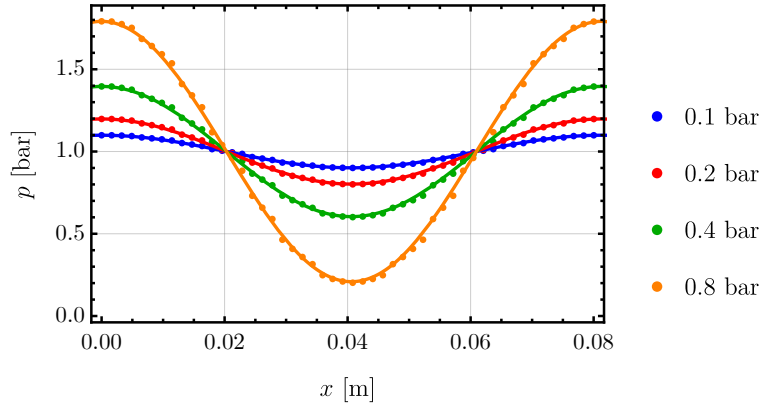
$$u(0, x) = -\frac{p_A}{c\rho_0} \sin\left(2\pi\frac{f}{c}x\right) = -6.154 \cdot 10^{-3} \sin(77.33t) \text{ [m/s]}, \quad (3.10)$$

$$\rho(0, x) = \rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3. \quad (3.11)$$

Nyilvánvalóan a 3.10. egyenletben az együtthatók a paraméterektől függnek. A 3.9-3.11. egyenletek pont megfelelnek a 3.4. ábrán $t = 100 \mu\text{s}$ -nál kék színnel kirajzolt állapotnak.

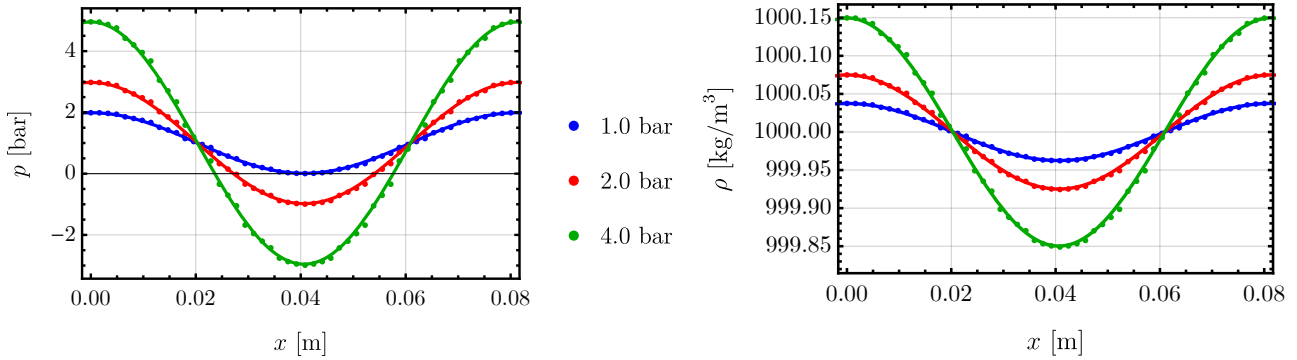
Nyomásamplitúdó változtatása

Azt már láttuk, hogy alacsony nyomásamplitúdókon állóhullámok jönnek létre és az állóhullámok paramétereit analitikus úton is sikerült levezetni. Azonban a szonokémiai alkalmazások szemszögéből sokkal lényegesebbek a magasabb nyomásamplitúdók, ebben a fejezetben ezt vizsgálom. A 3.5. ábrán láthatók a magasabb nyomáson létrejövő állóhullámok pillanatképei. Az ábrán $t = 161.3 \mu\text{s}$ -nél, azaz 3 periódus utáni első maximumnál vannak kirajzolva az állóhullámok különböző nyomásamplitúdók mellett, a folytonos vonal az analitikusan kiszámolt értéket jelöli, a pontok pedig a szimuláció eredményei. Látható, hogy magasabb nyomásamplitúdók mellett is a várt állóhullámok jönnek létre.



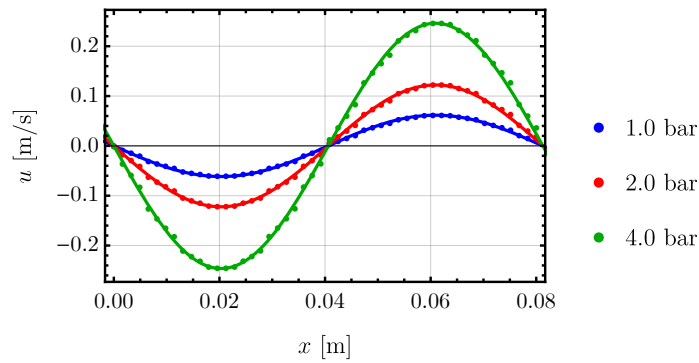
3.5. ábra. A szimulált és az analitikusan kiszámolt nyomás összehasonlítása 4 különböző nyomásamplitúdó mellett $t = 161.3 \mu\text{s}$ -nél.

A nyomásamplitúdó 1 bar fölé emelésével, negatív nyomások is létrejöhetnek a vízben. Ilyen esetek láthatók a 3.6a ábrán, ahol a nyomásamplitúdót egészen 4 bar-ig emeltem. A 3.6b és a 3.6c ábrákon pedig a sűrűség és a sebesség van kirajzolva. A sebesség mindenhol nulla, amikor a nyomás és a sűrűség a legnagyobb, így a sebesség egy másik időpillanatban, 4 periódus után $200 \mu\text{s}$ -nál lett megjelenítve, amikor az maximális.



(a) Nyomás összehasonlítás $t = 161.3 \mu\text{s}$ -nél.

(b) Sűrűség összehasonlítás $t = 161.3 \mu\text{s}$ -nél.



(c) Sebesség összehasonlítás $t = 200 \mu\text{s}$ -nél.

3.6. ábra. A szimulált (pontok) és az analitikusan kiszámolt (folytonos vonal) nyomás, sűrűség és sebesség összehasonlítása különböző nyomásamplitúdók mellett.

Értékelés

Ebben az alfejezetben láttuk, hogy állóhullámokat a periodikus peremfeltétellel létre lehet hozni, de a teljes kialakulást nem szükséges szimulálni, hiszen a sebességprofil megfelelő inicializálá-

sával rögtön létre lehet hozni az állóhullámokat (lásd 3.10. egyenlet). A kialakuló állóhullámok megfelelnek az analitikus levezetettnek, tehát a korábbi feltevések, minthogy a viszkozitás állóhullám kialakulásánál elhanyagolható, a sűrűségváltozás sokkal kisebb mint a nyomás és sebességváltozás és az állóhullámban létrejövő sebesség u kisebb mint a hangsebesség c igaznak bizonyultak. A 3.6c ábrán például látjuk, hogy nagy nyomásamplitúdók esetén is teljesül, hogy $c \gg u$. A 3.6. ábrákon pedig azt is látjuk, hogy a sűrűségváltozás nagy nyomásamplitúdókon is kevesebb mint 0.015%, miközben a nyomás és a sebességváltozás lényeges. A viszkozitás tényleg elhanyagolható, hiszen a kialakuló sebességek rendkívül kicsik, így a viszkozitás nem jár lényeges veszteséggel a folyadékon belül. Összességében láttuk, hogy az állóhullámokat a szonokémia szempontjából lényeges nyomásamplitúdó tartományban 1 bar – 2 bar között is létre lehet hozni.

3.2. Buborékszimuláció

Buborékok szimulációja már lényegesen komplexebb feladat, mint az állóhullámok szimulációja, hiszen ehhez két fázis együttes szimulálása szükséges. Az ehhez szükséges eszközöket, mint a *level-set* módszert és az MR algoritmust már korábban ismertettem (lásd 2.3. és 2.4. fejezet). A cél egy 2 dimenziós buborék szimulálása, fontos, hogy a buborék az akusztikus térre a lehető legkisebb hatással legyen, így majd 3 dimenzióban az eredményeket már össze lehet hasonlítani kísérletekkel és egy buborékot leíró matematikai modellekkel (lásd Keller-Miksis egyenlet [11]). Alapvetően a 2 dimenziós szimulációk egy végtelen hosszú hengeres buborékokot feltételeznek, így ezekből valós 3 dimenziós gömb alakú buborékokra kvantitatív eredményeket nem lehet levonni, viszont ezen egyszerűsítéssel belátható időn belül lefutnak a szimulációk. Ezen szimulációk arra alkalmasak, hogy az ALPACA programcsomag képességeit vizsgáljam a szonokémiai szempontjából lényeges paramétertartományokban és következtetéseket vonjak le a 3 dimenziós szimulációkra. Egy másik elképzelhető megoldás a gömbszimmetrikus buborék forgásszimmetriáját kihasználni és tengelyszimmetrikus buborékszimulációt készíteni. A szimulációkhoz továbbra is a 6.1. táblázatban összefoglalt beállításokat és algoritmusokat használok.

3.2.1. Peremfeltételek és kezdeti feltételek

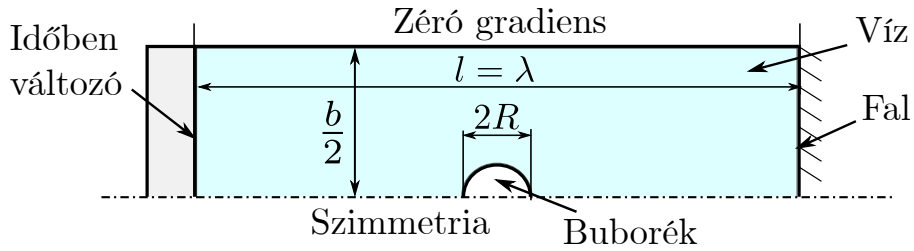
A szimuláció teljes elrendezését mutatja az 1.2. ábra. A peremfeltételek megegyeznek az állóhullámok kialakulásánál használt peremfeltétellel (lásd 3.1.1. fejezet), tehát a nyugati oldalon időben változó peremfeltétel van megadva f gerjesztési frekvenciával és $p_{A,p}$ nyomásamplitúdóval. A keleti oldalon egy fal található, amiről az ultrahang visszaverődik így állóhullám jön létre. A déli és északi oldalon pedig zéró gradiens peremfeltételt használok, hiszen észak-déli irányban (y irány) az akusztikus tér nem változik a buborék nélkül, a buborék természetesen az akusztikus teret befolyásolja, így y irányban egyenletlenségek keletkeznek, azonban ezek a buboréktól távol már egyre inkább elhanyagolhatók.

A *level-set* függvény úgy lett megadva, hogy a buborékon belül a függvényérték negatív azon kívül pozitív, illetve a buborék pont az áramlási tér közepén helyezkedik el. A *level-set* peremfeltételnek mindenhol zéró gradienst adtam meg, hiszen a buboréktól távol a *level-set* levágás miatt a függvényérték konstans.

A kezdeti feltételt a vízre és a buborékokra külön-külön kell megadni. Kezdetben a buborék nyugalomban van, tehát $u = 0$ és $v = 0$ mindenhol, a kezdeti nyomás $p_0 = 1 \cdot 10^5$ Pa a kezdeti sűrűség pedig $\rho_{0,l} = 1.002$ kg/m³. A vízben a kezdeti feltételeket a 3.9-3.11. egyenletek szerint adtam meg, azaz a már teljesen kialakult állóhullámmal inicializáltam az áramlási térben a vizet.

3.2.2. Szimmetria felhasználása

A szimmetriák kihasználásával számítási kapacitást lehet megtakarítani. Erre egy lehetséges mód az áramlási tér félbevágása az x irány mentén és csak a buborék egyik felének a szimulálása, ezt mutatja a 3.7. ábra. Ez megtehető, hiszen ideális esetben a buborék és a teljes áramlási tér szimmetrikus ezen síkra, amikor az állóhullám egyáltalán nem változik az y irány mentén ez a szimmetria nem tud megbomlani, a buborékoszcillációk szimmetrikusak maradnak, ezért ezen szimmetria felhasználásával semmilyen információ nem veszik el. Természetesen a kísérletekben ilyen ideális eset nem létezhet, sőt még a szimulációban sem feltétlenül, hiszen a numerikus módszer hibája és a kerekítési hiba miatt aszimmetriák megjelenhetnek. Ennek ellenére a szimmetriát érdemes kihasználni, hiszen feleannyi cellát eredményez, ezzel elméletileg a szükséges számítások száma is feleződik és a futási idő csökken. Ekkor a déli oldal mentén szimmetria peremfeltételt szükséges megadni és a *level-set* függvény középpontját át kell helyezni a szimulált tér aljára.



3.7. ábra. Áramlási tér félbevágása és a szimmetria kihasználása.

3.2.3. Paraméterek és anyagjellemzők

Mindkét fázisra meg kell adni az állapotegyenletet. A vízre továbbra is a merev gáz állapotegyenletet használok (lásd 3.6. egyenlet), ahol $\gamma_v = 4.4$ és $p_{\infty,v} = 6 \cdot 10^8$ Pa. A levegőre szintén a merev gáz állapotegyenletet használok $\gamma_l = 1.4$ és $p_{\infty,l} = 0$ Pa paraméterekkel. A víz viszkozitása a korábbiakhoz hasonlóan

$$\mu = 1 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s} \quad \zeta = 3 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}, \quad (3.12)$$

ahol μ a nyírási és ζ a térfogati viszkozitás. A szimulációk során több különböző gerjesztési frekvenciát és nyomásamplitúdót használok, a használt beállításokat mindig külön ismertetem.

3.2.4. Posztprocesszálas

A buborékszimulációk során a lényeges változó a buborék átlagos nyomása, a buboréksugár, a buborék átlagos sűrűsége és a buborék tömege. Ezen mennyiségeket a buborékon belüli cellák értékéből lehet meghatározni, minden cella tartalmazza a középpontjának a nyomását, sűrűségét, x és y irányú sebességét és a *level-set* függvény értékét. A buborék az áramlási térből egyszerűen kiválasztható, hiszen a buborékon belül a *level-set* függvény negatív. A buborék területe A_B megkapható mint

$$A_B = \sum_i A_i, \quad (3.13)$$

ahol i a buborékban lévő cellákon fut végig és A_i az i . cella területe. Az átlagnyomás a buborékban p_B a következő módon számolható

$$p_B = \frac{1}{A_B} \sum_i A_i \cdot p_i, \quad (3.14)$$

ahol i a buborékban lévő cellákon fut végig és p_i pedig az i . cella nyomása. Analóg módon származtatható a buborék átlagos sűrűsége ρ_B

$$\rho_B = \frac{1}{A_B} \sum_i A_i \cdot \rho_i, \quad (3.15)$$

ahol i szintén a buborékon belül cellákon fut végig és ρ_i az i . cella sűrűsége. A tömeg kétféle képen is számolható, az átlagos sűrűséget megszorozva a buborék térfogatával a buborék tömeget kapjuk, a másik lehetőség minden cella tömegét kiszámolni és ezeket összegezni. A probléma, hogy 2 dimenziós buborékknak nincsen vastagsága, azonban az egész szimuláció elképzelhető mint egy h hosszú henger alakú buborék szimulációja, amit egyetlen síkkal elmetsettünk. Így egy h hosszúságú buborék tömege már meghatározható

$$m = \rho_B \cdot A_B \cdot h \quad \text{vagy} \quad m = h \sum_i A_i \rho_i. \quad (3.16)$$

A buboréktömeg hasznos mennyiség, hiszen a buborék tömegének a megmaradása szükséges a valóság szimulálásához, így ezt ellenőrizni szükséges. A buboréktömeget mindig a kezdeti tömeggel leosztva ábrázolom, azaz így a későbbiekben m dimenziótlan, a jelentése pedig, hogy az eredeti tömeg mekkora hányada maradt meg. A buboréksugár R számítása két módon lehetséges. Első lehetőség annak a feltételezése, hogy a buborék egy kör, ekkor a sugár a területből visszaszámolható, azaz

$$R = \sqrt{\frac{A_B}{\pi}}. \quad (3.17)$$

Második lehetőség a buborék szélső pontjainak megkeresése, és ebből az átmérő, majd a sugár kiszámítása. *Paraview*-ban egyszerűen lekérdezhetők a szélső pontok, így megkereshető a buborék legészakibb pontja y_E , a buborék legdélibb pontja y_D , a buborék legnyugatibb pontja x_{Ny} és a buborék legkeletibb pontja x_K . Ebből a buboréksugár már kiszámolható

$$R_y = \frac{y_E - y_D}{2} \quad \text{vagy} \quad R_x = \frac{x_K - x_{Ny}}{2}, \quad (3.18)$$

a kettő átlagolásával egy még pontosabb becslést kaphatunk a sugárra. A sugárszámítás két módja egyező eredményeket ad, egészen addig, amíg a buborék köralakú marad.

Az eddig bemutatott módon minden buborékszimulációra ki lehet számolni a 3.13-3.18. egyenletekből az ismertett mennyiségeket *paraview*-ban, azonban ez nem lenne túl hatékony, hiszen egy szimuláció eredménye jellemzően több 10 gigabájtnyi adat, ezen adatok letöltése a munkaállomásról/szuperszámítógépről a feldolgozó számítógépre (saját laptop) hosszú időt venne igénybe. Egy megoldás a távoli postprocesszálas, amire a *paraview* lehetőséget biztosít, azonban a szimulációk nagy száma miatt a posztprocesszálas teljesen automatizáltam, így az a munkaállomáson/szuperszámítógépen történik *pypython* szkripttel. A *pypython* a *python3* nyelvre épül, azonban tartalmazza a *paraview* minden funkcióját. Ez a posztprocesszálas mód az eredményeket reprodukálhatóvá is teszi a kézi feldolgozással szemben, hiszen így minden szimuláció pontosan ugyanúgy kerül feldolgozásra. A szkriptnek parancssoros argumentumként adható

át a bemeneti mappa, azaz a szimuláció eredménye és a kimeneti mappa, ahova a posztprocesszáls eredménye kerül. Az eredmények fájl tartalmazza az időt, a buborék nyomását, a buborék sugarát (mindkét számítási móddal), a buborék sűrűségét és a buborék tömegét. A kimeneti fájl kiterjesztése `csv`, azaz vesszőkkel elválasztott szövegfájl, amit utána bármilyen programmal egyszerűen be lehet olvasni. További bemeneti argumentumként specifikálható az, hogy a pillanatfelvételek vagy az állóhullám állapotai el legyenek-e mentve. A posztprocesszáls eredménye így mindössze néhány 10 megabájt adat, amit már kényelmesen le lehet tölteni. A teljes szkript elérhető [37] alatt `postprocessor.py` néven.

3.2.5. Konvergencia vizsgálat

Ahhoz, hogy a probléma hálófüggetlenségét vizsgáljam, az MR maximum szintjét ($l_{\max}$) és a blokkok számát lehet változtatni. A cél megmutatni azt, hogy a buborék minél jobb diszkretizálásával egyre pontosabb eredményeket kapunk, illetve cél meghatározni a konvergenciarendet is. Fontos megtalálni azt a buborékfelbontást, ahol az eredmények már elfogadhatók. Ehhez egy tesztet választok, amihez a paraméterek a dolgozat végén a 6.3. táblázatban láthatók. Az áramlási teret több módon diszkretizálok, különböző blokk beállítások és különböző maximum MR szintek ($l_{\max}$) mellett.

3.1. táblázat. Block és multiresolution beállítások konvergencia vizsgálatához. A ???-es cellák nem kerültek lefuttatásra.

$l_{\max}$	Leírás	2×2	4×4	6×6
7	$a_{\min}$ N_b/N_{Σ}	19.84 μm 4 / 22528	9.92 μm 12 / 34816	6.61 μm 32 / 55296
8	$a_{\min}$ N_b/N_{Σ}	9.92 μm 12 / 25600	4.96 μm 52 / 37888	3.31 μm 120 / 58368
9	$a_{\min}$ N_b/N_{Σ}	4.96 μm 52 / 28672	2.48 μm 208 / 40960	1.65 μm 460 / 61440
10	$a_{\min}$ N_b/N_{Σ}	2.48 μm 208 / 31744	1.24 μm 812 / 50176	0.83 μm 1844 / 73728
11	$a_{\min}$ N_b/N_{Σ}	1.24 μm 812 / 40960	0.62 μm 3268 / 62462	0.41 μm 7360 / ???
12	$a_{\min}$ N_b/N_{Σ}	0.62 μm 3268 / 53248	0.31 μm 13076 / 87040	0.21 μm 29436 / ???
13	$a_{\min}$ N_b/N_{Σ}	0.31 μm 13080 / 77824	0.15 μm 33908 / 136192	0.10 μm 117738 / ???

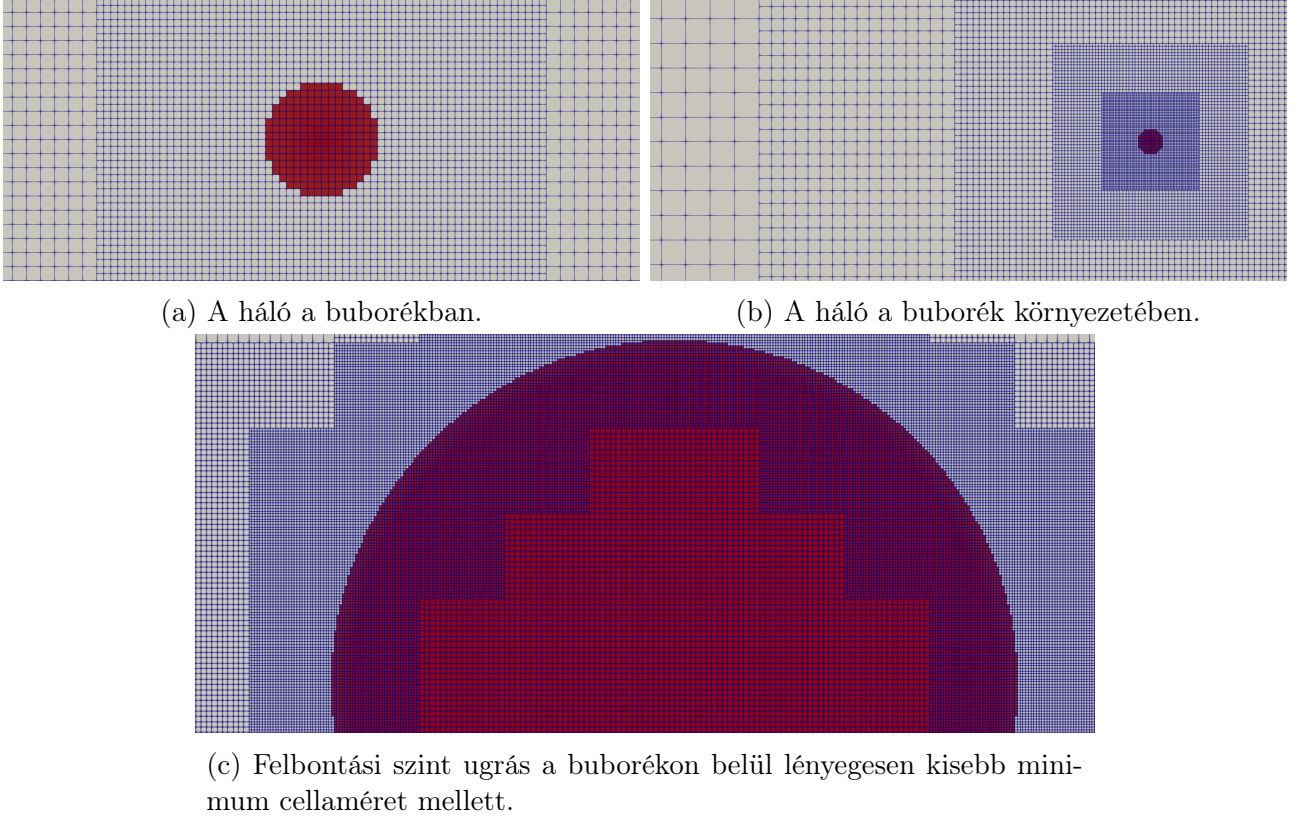
A buborék diszkretizációja

A diszkretizáció minősítésének szempontjából fontos a buborékban lévő cellák száma N_b , az összes cella száma N_{Σ} és a minimum méretű cellák oldalhossza $a_{\min}$. Az összes tesztelt beállítást a 3.1. táblázat mutatja. Látható, hogy ugyanolyan buborékfelbontást több különböző módon is el lehet érni. Például a buborékot 812 cellára fel lehet bontani úgy is, hogy 2×2 blokkot definiálunk és az $l_{\max}$ -ot 11-re állítjuk, a másik opció pedig, hogy feleakkora blokkokból hozunk létre 4×4 -et, ekkor az $l_{\max}$ -ot elég 10-re állítani, ugyanazon felbontáshoz. Az összes cella száma ennek ellenére különbözik, hiszen bár a minimum cellaméret megegyezik, de a maximum cellaméret, amit a durvább felbontású részeknél használ a szoftver ettől eltér. Ebből azt láthatjuk, hogy ha az MR felbontás növelésével finomítjuk a hálót, akkor összességében

kevesebb cella használata szükséges. A korlátot az jelenti, hogy az ALPACA-ban $l_{\max} = 13$ -nál nagyobb felbontást nem lehet használni. Azt, hogy a buborék maximum hány cellával lesz diszkrétizálva (N_b) egyszerűen megbecsülhetjük, hiszen

$$N_b = \frac{A_B}{A_{C,\min}} = \frac{R_0^2 \pi}{a_{\min}^2} \quad (3.19)$$

ahol A_B a buborék területe, $A_{C,\min}$ a minimális cellaterület, $a_{\min}$ a minimum cella oldalhossza (lásd 3.1. táblázat) és R_0 a kezdeti buboréksugár. A 3.19. egyenlet egészen addig igaz, amíg nincsen a buborékfelbontásban szintugrás.



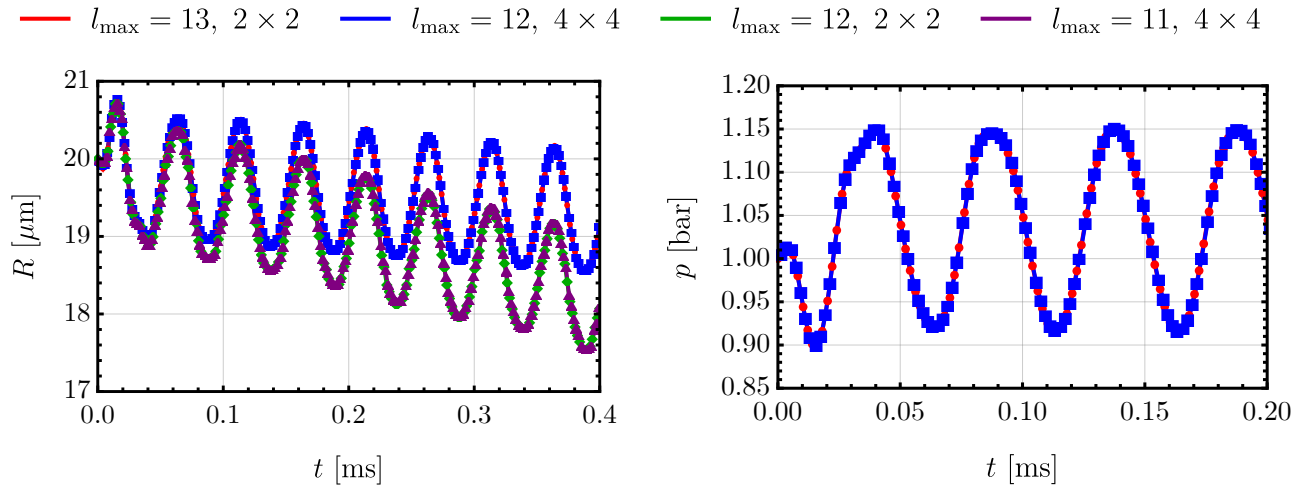
3.8. ábra. A háló a buborékban (piros) és annak környezetében (fehér). Az (a) és (b) ábra $a_{\min} = 2.48 \mu\text{m}$ minimum cellamérettel mellett készült a (c) ábra pedig $a_{\min} = 0.15 \mu\text{m}$ minimum cellamérettel készült.

A létrehozott MR hálót a buborékban és annak környezetében a 3.8. ábrák mutatják. A 3.8a ábrán látható, hogy a buborék a legkisebb cellamérettel kerül felbontásra, ami várható is, hiszen a legdinamikusabban változó rész a fázishatár és a buborék, tehát a legtöbb cellát tényleg itt szükséges használni. A 3.8b ábra távolabbról mutatja a buborék körüli hálót, megfigyelhető, hogy a buborékhoz közeledve a háló fokozatosan egyre finomabb lesz. Megszámolható, hogy minden szinten 16 cellát tartalmaz a háló, ami éppen a belső cellák száma (IC), ennél kevesebb azonos szintű cella nem kerülhet egymás mellé, mivel az ALPACA a számítandó részt mindig 16×16 -cellás csoportokban rendeli a számítási egységekhez, szinttől függetlenül. A 3.8c ábra egy másik esetre mutat példát, amikor a cellaméret a buborékon belül változik, azaz a buborékon belül szintugrás történik, ehhez azonban rendkívül nagy felbontású háló szükséges.

Kvalitatív összehasonlítás

Ugyanazon buborékfelbontás mellett ugyanolyan eredményeket kapunk, ez látható a 3.9. ábrákon. A buborék 13080 cellára osztása kezdetben ($a_{\min} = 0.31 \mu\text{m}$ minimális cellaméret) két módon is lehetséges, $l_{\max} = 13$ és 2×2 blokk használatával vagy $l_{\max} = 12$ és 4×4 blokk használatával. A buboréksugár-idő függvény két beállításpár mellett is ábrázolásra került a 3.9a ábrán. Ekkor az azonos buborékfelbontással készült szimulációk eredményei megegyeznek. A különböző felbontású szimulációk közötti különbségekről később lesz szó. Ugyanez látható a buboréknyomás-idő függvényre a 3.9b ábrán.

A futási idő az azonos eredmények és buborékfelbontás ellenére eltér, munkaállomáson futtatva az előbbi futási ideje 50.7 h míg az utóbbi 47.5 h, annak ellenére, hogy az utóbbi beállítás közel 10000-el több cellát igényel. Ez az adaptív MR algoritmus és az ALTS (*adaptive local time stepping*) ismeretében megmagyarázható, ez a 10000 extra cella mind alacsonyabb szinten található, hiszen a legmagasabb szinten a buborék van, és a buborék mindkét esetben ugyanannyi cellára lett bontva. Így az extra cellák mérete nagyobb, ennek megfelelően azok nagyobb időlépéssel haladhatnak. Ha az extra cellák a buborék celláihoz képest 10 szinttel lejjebb vannak, akkor azok $2^{10} = 1024$ -szer nagyobb időlépéssel haladnak az ALTS algoritmus szerint, ezért ezen cellák ritkán kerülnek léptetésre, tehát a futási időt nem növelik lényegesen. Ezzel szemben több szint használata lassítja a programot, hiszen ekkor az automatikus hálónomítás során az MR transzformáció több számítást igényel.



(a) A sugár változása $a_{\min} = 0.31 \mu\text{m}$ (piros és kék) és $a_{\min} = 0.62 \mu\text{m}$ (zöld és lila) felbontás mellett különböző konfigurációkban.

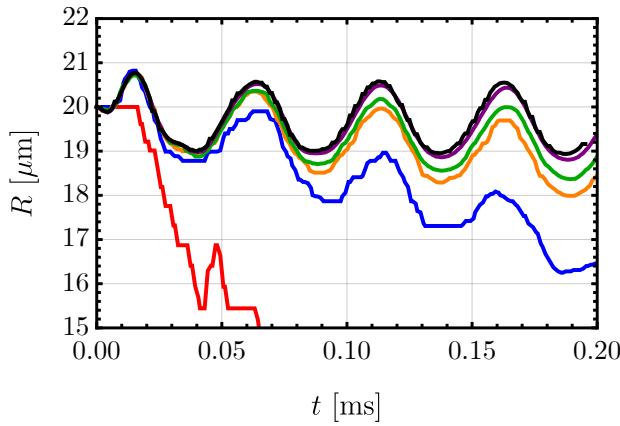
(b) A nyomás változása $a_{\min} = 0.31 \mu\text{m}$ (piros és kék) felbontás mellett különböző konfigurációkban.

3.9. ábra. Ugyanazon buborékfelbontás különböző $l_{\max}$ beállítások mellett, a blokkok számának a variálásával

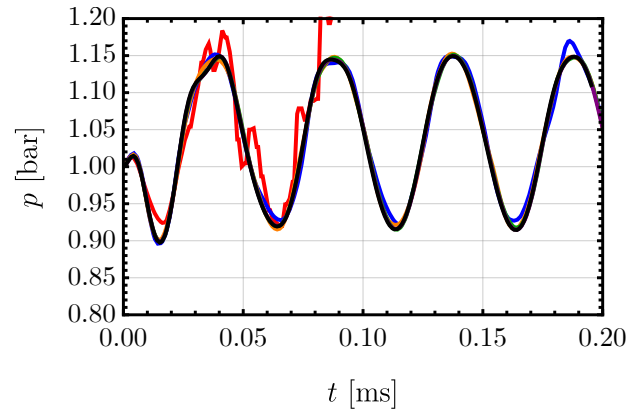
Mint láttuk ugyanazon minimális cellaméretet többféleképp is el lehet érni és ennek nincsen hatása az eredményekre, ezért elég a minimális cellaméret $a_{\min}$ vagy a buborékban lévő cellák száma N_B szerint vizsgálni a konvergenciát. A kettő megfeleltethető egymásnak a 3.19. egyenlet szerint amíg nincsen a buborékban belül szintugrás. A következőkben az $a_{\min}$ függvényében vizsgálom a konvergenciát, hiszen ez a blokkok számának és a maximum szintek számának megadásával pontosan állítható.

A 3.10. ábrán látható a buboréksugár, a buboréknyomás és a buboréktömeg időbeni változása különböző minimális cellaméreteket $a_{\min}$ mellett. A buboréksugár időbeni változása a 3.10a áb-

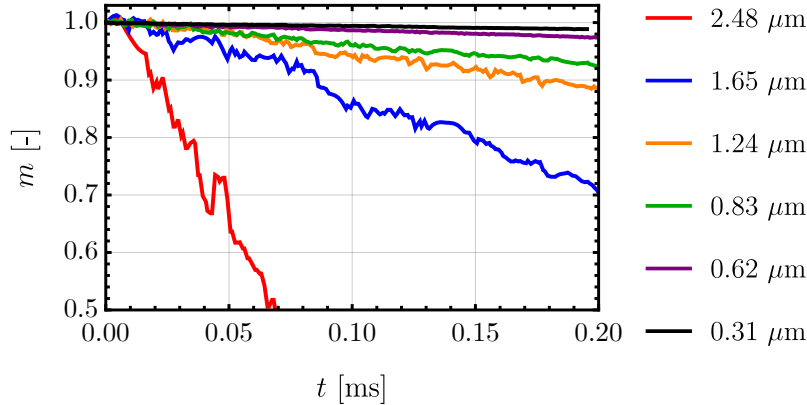
rán látható, megfelelő felbontás esetén a buboréksugár periodikusan változik, alacsony felbontás esetén (lásd kék és piros) azonban a buboréksugár időben gyorsan csökken. Ennek az oka, hogy a buborék tömege elveszik, ahogyan a 3.10c ábrán is látható. A buboréktömeg csökkenése nem fizikai jelenség ez alapvetően a fázishatár pontatlanságából adódik, amit a nem megfelelő felbontás okoz. Ahhoz, hogy a szimuláció értékelhető legyen, a teljesen szimuláció során nem tűnhet el több mint a buborék tömegének a 10%-a, ehhez az szükséges, hogy $a_{\min} < 1 \mu\text{m}$ teljesüljön, tehát a buborék átmérője mentén legalább 40 cellát szükséges használni. A 10% egy tetszőlegesen választott határ, amely a jelenlegi célnak megfelel, mert ez még jelentősen nem befolyásolja a buborék dinamikai viselkedését ezen paraméterek mellett. A 3.1. táblázatban azon beállításokat ahol a megoldás elfogadható zölddel színeztem, a pirossal színezett beállítások nem adnak használható eredményt és a maradék narancssárgára színezett beállítás a kettő közötti átmenet. A 3.10b ábrán a buboréknyomás időbeni változása látható, megfigyelhető, hogy a buboréknyomás nem érzékeny a tömegveszteségre, itt alacsonyabb felbontás esetén is közel ugyanazt a megoldást kapjuk.



(a) A sugár változása különböző minimális cellaméretetek mellett



(b) A nyomás változása különböző minimális cellaméretetek mellett



(c) A buboréktömeg változása

3.10. ábra. A buboréksugár, a buboréknyomás és a buboréktömeg időben változása különböző felbontások mellett.

Konvergenciarend meghatározása

Az $a_{\min} = 0.31 \mu\text{m}$ felbontás esetén a tömegveszteség mindössze 1%, így ezt a szimulációt fogom referenciának tekinteni és a többi szimuláció ettől való eltérését vizsgálom. Ehhez a sugár relatív

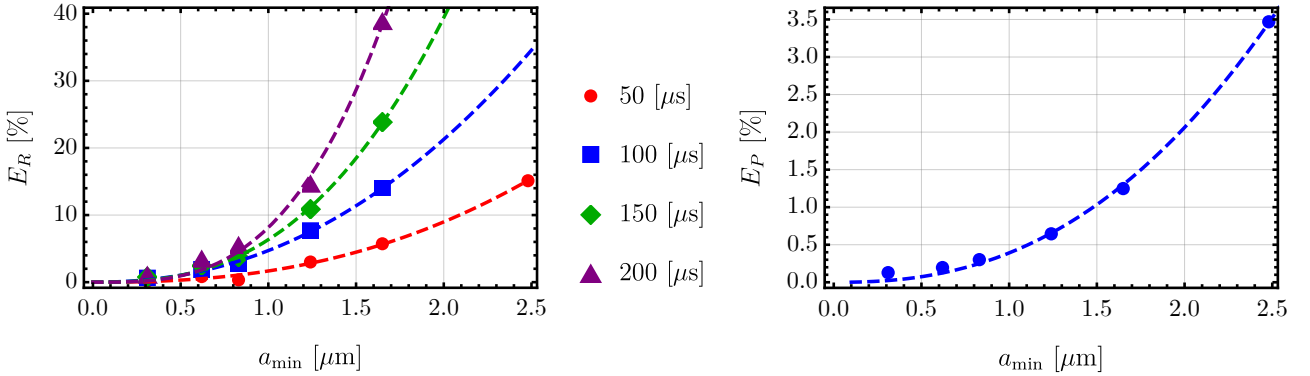
eltérése E_R a következőképp definiálható

$$E_R(t) = \left| \frac{R_{\text{ref}}(t) - R(t)}{R_{\text{ref}}(t)} \right| \cdot 100 \quad [\%], \quad (3.20)$$

ahol az E_R relatív eltérés időben változik. Hasonlóan definiálható a nyomás relatív eltérése E_P ,

$$E_P = 100 \cdot \frac{1}{T_{\text{max}}} \int_0^{T_{\text{max}}} \left| \frac{p_{\text{ref}}(t) - p(t)}{p_{\text{ref}}(t)} \right| \cdot dt \quad [\%], \quad (3.21)$$

azonban itt a nyomáseltérés időbeni átlagát érdemes használni, hiszen mint a 3.10b ábrán látható, vannak pontok ahol a referenciától való eltérés szinte 0 és vannak tartományok, mint a minimumok és maximumok, ahol az eltérés jelentősebb, így nehéz lenne egyetlen pontot kiválasztani, ahol a relatív eltérés a teljes szimulációra reprezentatív lenne. A sugár relatív eltérése a referenciától a 3.11a ábrán látható 4 időpillanatban. A pontokra $E_R = b \cdot a_{\text{min}}^r$ formában görbét illesztettem, ahol b és r konstansok. Megfigyelhető, hogy a relatív eltérés időben nő, amit az egyre jelentősebb tömegveszteség okoz, az is látható, hogy $a_{\text{min}} = 1 \mu\text{m}$ alatt a relatív eltérés végig 10% alatt marad. A 3.11b ábrán a nyomás átlagos relatív eltérése látható, az eltérés majdnem egy nagyságrenddel kisebb mint a sugár eltérése. Ennek az oka, hogy a buboréksugár, mivel az a térfogattól számolható vissza, gyakorlatilag a buborékon belüli cellák számával arányos, a buboréknyomás ezzel szemben a buborék cellaértékeinek az átlagából számolható. A tömeg csökkenésével a buborékon belüli cellák száma is csökken, éppen ezért lesz a buboréksugár lényegesen érzékenyebb a tömegveszteségre mint a buboréknyomás.



(a) A sugár relatív eltérése a referencia szimulációhoz képest a felbontás függvényében, 4 különböző időpillanatban.

(b) A nyomás relatív eltérése a referencia szimulációhoz képest az első 4 periódusra átlagolva.

3.11. ábra. A buboréksugár és a buboréknyomás relatív eltérése.

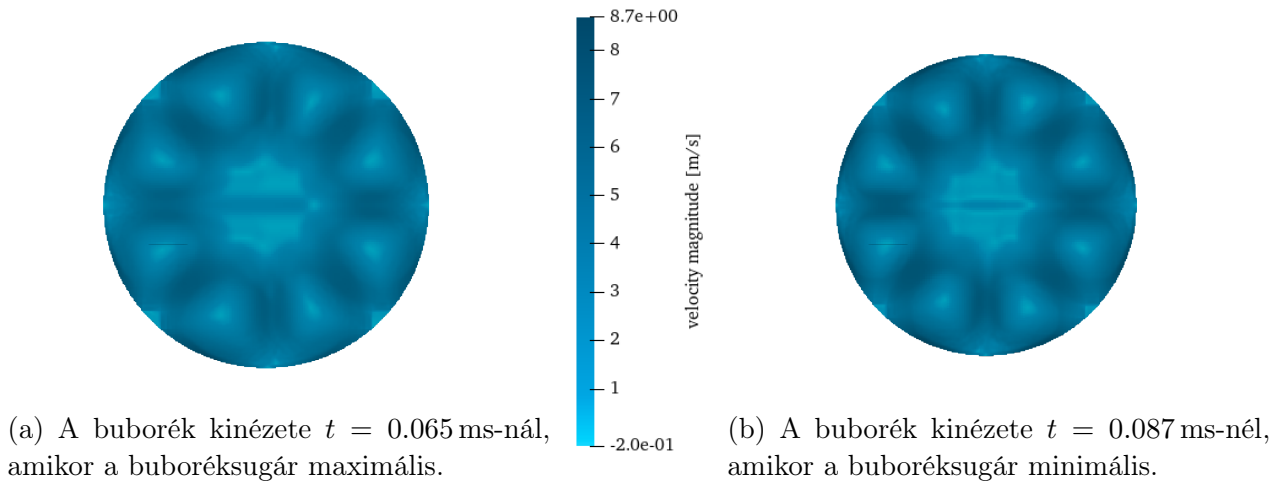
A konvergenciarend meghatározható a 3.11. ábra adataiból. Konvergenciarend az MR algoritmussal finomított háló esetén a következő módon definiálható

$$E \propto a_{\text{min}}^r$$

ahol r a konvergenciarend (ami az illesztett görbék kitevője) és E a relatív eltérés. Tehát a minimális cellaméret r -edik hatványával arányos a relatív hiba. Az r együttható meghatározható egyszerű görbeillesztéssel. A konvergenciarend a sugár relatív eltérése esetén minden időpillanatban értelmezhető, a 3.11a ábrán a 4 feltüntetett időpillanatban tapasztalt konvergenciarend időben előre haladva $r_{50 \mu\text{s}} = 2.43$, $r_{100 \mu\text{s}} = 2.18$, $r_{150 \mu\text{s}} = 2.64$ és $r_{200 \mu\text{s}} = 3.10$. A nyomás relatív eltérése esetén pedig $r_P = 2.40$ rendű konvergencia tapasztalható.

A cellaméret csökkentésével tehát minimum másodrendű, de maximum harmadrendű konvergencia érhető el. A konvergenciarend befolyásolására kevés lehetőség van, hiszen a háló automatikusan készül MR algoritmussal, az MR algoritmusban használt szintek számán kívül, csak egy referencia szint l_{ref} referencia toleranciája ε_{ref} állítható. Mivel időben harmadrendű módszerrel lett megoldva a probléma a mért konvergencia elfogadható, az MR módszer paramétereit nem szükséges átállítani. Továbbá a konvergencia tesztelés során azt is megfigyeltem, hogy a használt beállítások mellett, a buborékot legalább 40 cellára kell osztani az átmérője mentén, ahhoz, hogy a diszkretizációs hibából adódó tömegvesztesség ne legyen jelentős.

A buborék kinézete a 3.12. ábrákon látható maximális és minimális sugár esetén, ekkor a buborék gömbszimmetriája végig megmarad, azonban a buborékon belül nem szimmetrikus jelenségek is láthatók.



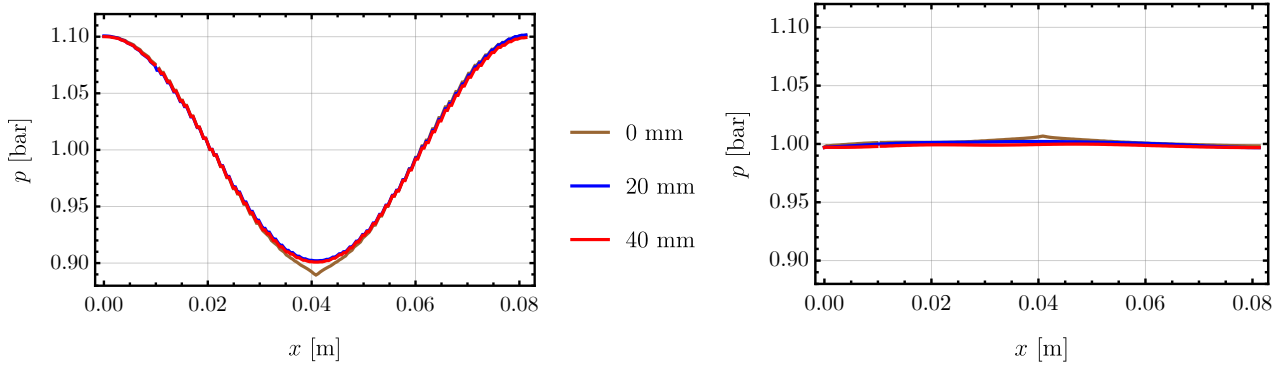
3.12. ábra. A buborék kinézete két időpillanatban

3.2.6. Buborék hatása az állóhullámra

A buborékoszcillációt leíró matematikai modellek mint a Keller-Miksis egyenlet és a buborék felületi stabilitását leíró egyenletek nem veszik figyelembe a buborék hatását az akusztikus térre. Amennyiben ezen modelleket 3 dimenzióban összevetéshez szeretnénk később használni, a buborék nem gyakorolhat túl nagy hatást a körülötte lévő akusztikus térre. Ezt már érdemes 2 dimenziós szimulációk esetén is vizsgálni, hiszen ez nagyságrendileg segít megbecsülni az ehhez szükséges áramlási tér méretét. A hatás vizsgálatához a korábbi szimulációk eredményeit használok, aminek a paraméterei a 6.3. táblázatban vannak összefoglalva.

A buborék állóhullámra gyakorolt hatásának a vizsgálatához 3 egyenest definiálok az áramlási tér hossza mentén (hasonlóan mint a 3.2. ábrán). Az első egyenes a buborékon keresztül megy, a második a buboréktól 20 mm-re megy, a harmadik pedig a buboréktól 40 mm-re. Ily módon megfigyelhető a módosult állóhullám a buboréktól távolodva. A 3.13. ábrákon két pillanatképfelvétel látható, amin az x koordináta függvényében van a nyomás ábrázolva. A 3.13a ábra a maximum kilengés időpillanatában, a 3.13b ábra pedig a minimális kilengés pillanatát ábrázolja. Az ábrákon látható, hogy a buborék közvetlen közelében (lásd barna görbék) az állóhullámot a buborék minimálisan befolyásolja, hiszen a buborék kitágulása és összehúzódása a környezetre is hatással van. Erre egyszerű kvalitatív magyarázatot is adhatunk, hiszen amikor a buboréksugár csökken, akkor a víznek egyre több helyet kell kitöltenie, ami a nyomás lokális csökkenésével jár. Hasonlóképpen a buboréksugár növekedés esetén, a víznek egyre kevesebb helye van, ami lokálisan a nyomást még tovább növeli. A buboréktól távol (lásd kék és piros

görbe) az állóhullámban jelentős eltérés nem tapasztalható.



(a) Az állóhullám $t = 112.5 \mu\text{s}$ -nál, a buboréksugár ekkor éppen csökken.

(b) Az állóhullám $t = 150 \mu\text{s}$ -nál, a buboréksugár ekkor éppen növekszik.

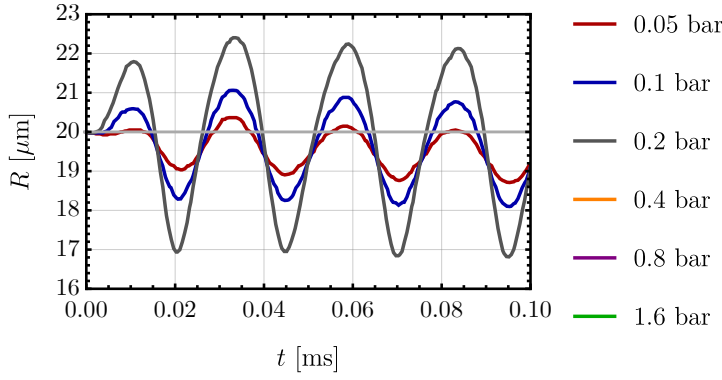
3.13. ábra. Az állóhullám két időpillanatban

3.2.7. Nyomásamplitúdó változtatása

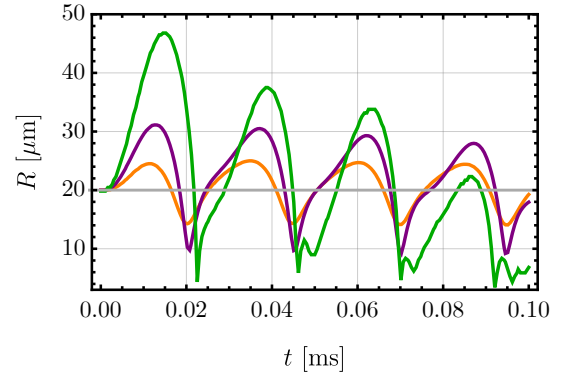
A következő tesztben azt vizsgálom, hogy a buboréksugár időfüggését hogyan befolyásolja a nyomásamplitúdó növelése, illetve, mennyire marad meg ekkor a buborék tömege a numerikus szimulációkban. Ehhez a 6.4. táblázatban feltüntetett paramétereket és beállításokat használok. A különbség a korábbiakhoz képest, hogy a gerjesztési frekvencia a tesztben $f = 40 \text{ kHz}$, ez egyrészt már lényegesebb a szonokémiai alkalmazások szempontjából, másrészt ehhez elég fele olyan hosszú áramlási teret szimulálni, hiszen a hullámhossz is feleződik, ez pedig így kevesebb cellát és számítást igényel.

A szimulációk során, az áramlási térnek csak a felét szimulálok, ezzel is gépidőt spórolva. A fél buborék $l_{\text{max}} = 11$ esetén 1634 cellára lesz bontva, ez a buborékátmérő mentén körülbelül 64 cellát jelent. Korábban láttuk, hogy alacsony nyomásamplitúdón minimum 40 cella szükséges a buborékátmérő mentén, ahhoz, hogy az eredmények elfogadhatók legyenek.

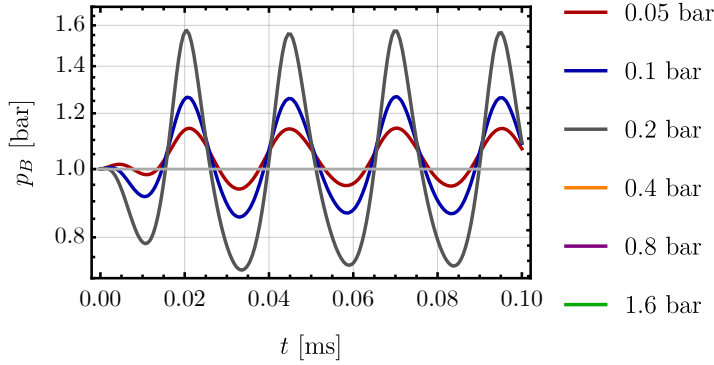
A nyomásamplitúdó változtatás eredményeit a 3.14. ábra mutatja. A buboréksugár időbeni változását alacsony nyomásamplitúdókon a 3.14a ábra mutatja, látható, hogy a nyomásamplitúdó növelése növeli a buboréksugár változást, a buboréksugár időben változása periodikus. Magasabb nyomásamplitúdókon ($\geq 0.4 \text{ bar}$) a buboréksugár-idő görbét a 3.14b ábra mutatja, a periodikus jelleg továbbra is megmarad. Azonban 0.8 bar és 1.6 bar nyomásamplitúdónál (lila és zöld görbe) már a maximumok jelentősen csökkennek időben, amit az okoz, hogy a buboréktömeg a buborékösszeomlaskor elvész. Ez a tömegvesztés nem fizikai eredmény, ennek az oka, hogy a buboréksugár akár ötszörösére is változhat. A tömeg időbeni változását a 3.14e ábra mutatja, látható, hogy az első buborékösszeomlásnál ($t \approx 0.02 \text{ ms}$) a buboréktömeg nagy nyomásamplitúdókon tényleg elillan. További érdekes jelenség, hogy 1.6 bar amplitúdó esetén, a buborékösszeomlást több kicsi és rövid periódusú oszcilláció követi, ez a valódi 3 dimenziós buborékok esetén is megjelenik, a Keller-Miksis egyenlet is képes ilyen jellegű viselkedést leírni (lásd 1.1. ábra). A nyomás időbeni változását a 3.14c és a 3.14d ábrák mutatják logaritmikus diagrammokon. A nyomásváltozás akár százszoros is lehet a buborékban, 1.6 bar amplitúdó esetén a nyomás-idő függvényben is megfigyelhetők a buborékösszeomlást követő kicsi oszcillációk.



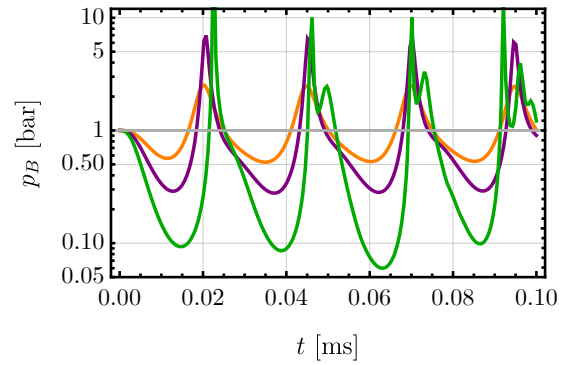
(a) A buboréksugár időbeni változása alacsonyabb amplitúdókon.



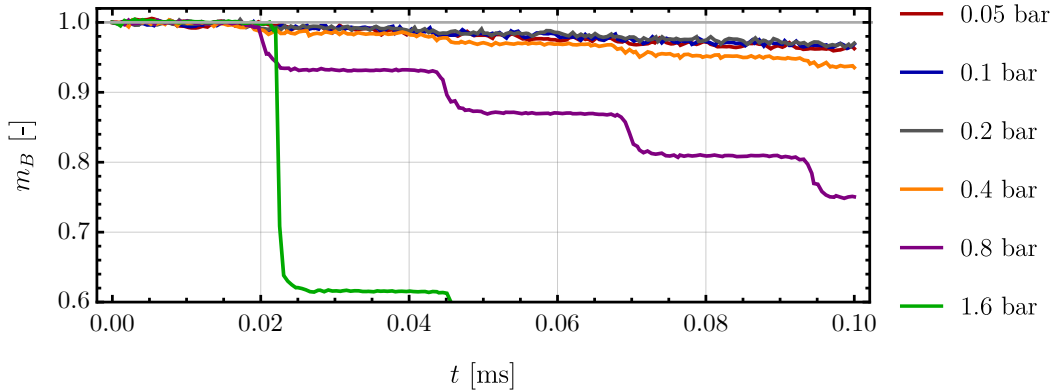
(b) A buboréksugár időbeni változása magasabb amplitúdókon.



(c) A buboréknyomás időbeni változása alacsonyabb amplitúdókon.



(d) A buboréknyomás időbeni változása magasabb amplitúdókon.



(e) A buborék tömegének időbeni változása magasabb amplitúdókon.

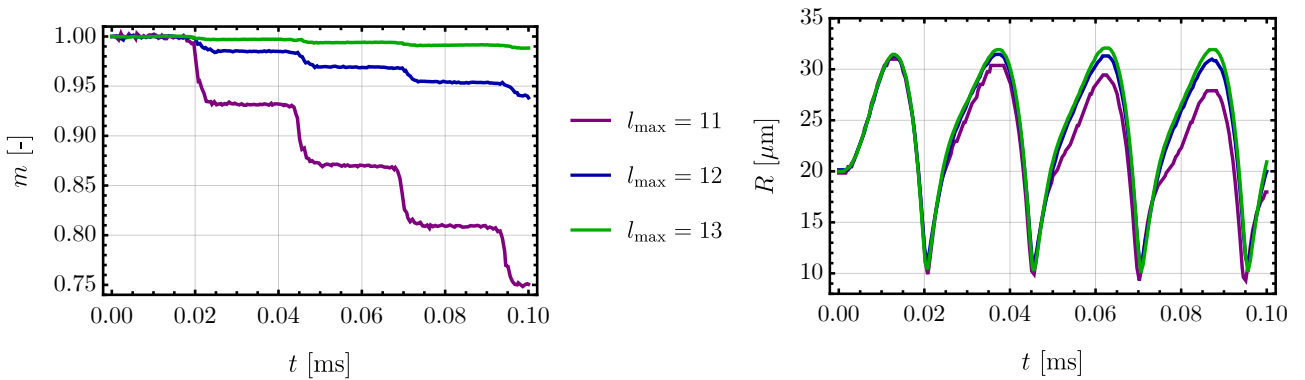
3.14. ábra. A nyomásamplitúdó változtatásának eredményei

A 3.14e ábrán megfigyelhető, hogy alacsonyabb nyomásamplitúdók esetén (< 0.4 bar) a tömegvesztés 10% alatt marad a 4 szimulált periódus során. Ezek az eredmények így elfogadhatók, azonban magasabb nyomásamplitúdók vagy hosszabb szimulációk esetén a felbontás további növelése elengedhetetlen.

A buborék hirtelen tömegvesztését a buboréksugár nagy csökkenése okozza. Bár kezdetben a fél buborék 1634 cellával lett felbontva, a buborék összeomlásakor ez a cellaszám lényegesen lecsökken. Így hiába elegendő az $a_{\min} = 0.62 \mu\text{m} < 1 \mu\text{m}$ felbontás a kezdeti buborékméretre, az összeomlott buborék esetén a buboréksugár akár $10 \mu\text{m}$ -re is csökkenhet, mint

ahogy azt a 3.14b ábrán a 0.8 bar-os nyomásamplitúdó esetén látjuk (lila görbe) például 0.02 ms környékén, ekkor a buborék tömegének több mint az 5%-a elveszik. Ekkor a buborék mindössze 390 cellára van felbontva, ami mint korábban láttuk nem elegendő ahhoz, hogy buboréktömeg megmaradjon. Természetesen a felbontás növelése itt is megoldást jelent, eggyel magasabb felbontási szinten amikor $l_{\max} = 12$ ($a_{\min} = 0.31 \mu\text{m}$), az összeomlott buborék is már 2834 cellát tartalmaz, bár az összeomlott buborékban lévő rendkívül nagy nyomás miatt (6.4 bar) ez is még jelentős hibát okoz. A felbontás további növelésével ($l_{\max} = 13$ és $a_{\min} = 0.15 \mu\text{m}$) a buborék összeomlott állapotban is már 6982 cellát tartalmaz és ez elég ahhoz, hogy a buborék tömege ne csökkenjen túlságosan a szimulációban.

A felbontás növelés hatását $p_A = 0.8$ bar nyomásamplitúdón a 3.15. ábrák mutatják. A buboréktömeg tényleg kevésbé disszipálódik a felbontás növelésével, ezt erősíti meg a 3.15a ábra és ezáltal a buboréksugár változásnak az amplitúdója is egyre inkább állandó marad időben, amit a 3.15b ábra mutat.



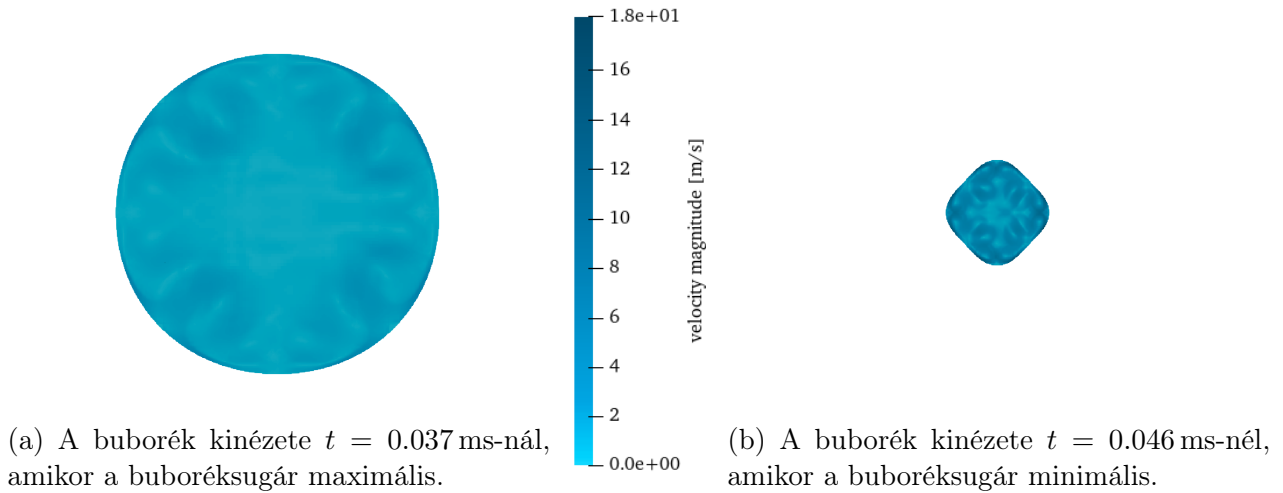
(a) A buboréktömeg időbeni változása.

(b) A buboréksugár időbeni változása.

3.15. ábra. A felbontás növelésének a hatása az eredményekre, $p_A = 0.8$ bar esetén

Az alfejezetben bemutatott szimulációk eredményeiből azt a következtetést lehet levonni, hogy magasabb nyomásamplitúdókat is lehet szimulálni ALPACA-ban, azonban ehhez a felbontás jelentős növelése szükséges. Azonban nem elég a felbontást a minimális buboréksugárral arányosan módosítani. Tehát az az alapelv, hogy a buborékátmérő mentén legalább 40 cellát használjunk csak alacsony nyomásamplitúdó esetén $p_A \leq 0.4$ bar igaz. Magasabb nyomásamplitúdókon azonban több mint 100 cella szükséges ehhez akkor amikor a buborék minimális méretű, a 3.15. ábrán az $l_{\max} = 13$ beállításhoz tartozó görbe esetén minden időpillanatban a buborék legalább 134 cellával van felbontva az átmérő mentén. A 3.15a ábra adataiból meghatározható, hogy a konvergenciarend a tömegcsökkenés esetén $r_m \approx 2.5$, tehát magasabb nyomásamplitúdók esetén is teljesül, hogy a konvergencia legalább másodrendű. Ez felhasználható a későbbiekben, hiszen, ha a konvergenciarend ismert, akkor egy kezdeti szimuláció hibájából előre lehet jelezni a szükséges felbontást.

A buborék kinézete a 3.16. ábrákon látható maximális és minimális sugár esetén $p_A = 0.8$ bar-os nyomásamplitúdó mellett, megfigyelhető, hogy a buborék gömbszimmetriája már nem marad meg. A buborék a sebességvektor nagyságával arányosan lett színezve és a szimulált félbuborék az x -tengelyre tükrözve lett a kirajzoláshoz. A 3.16b ábrán egyértelműen megfigyelhető a sebességmezőn, hogy az az y -tengelyre nem szimmetrikus. Egy periódus felvétele megtekinthető a melléklet 6.2. ábráján animálva is (lásd a 6.4. fejezet).

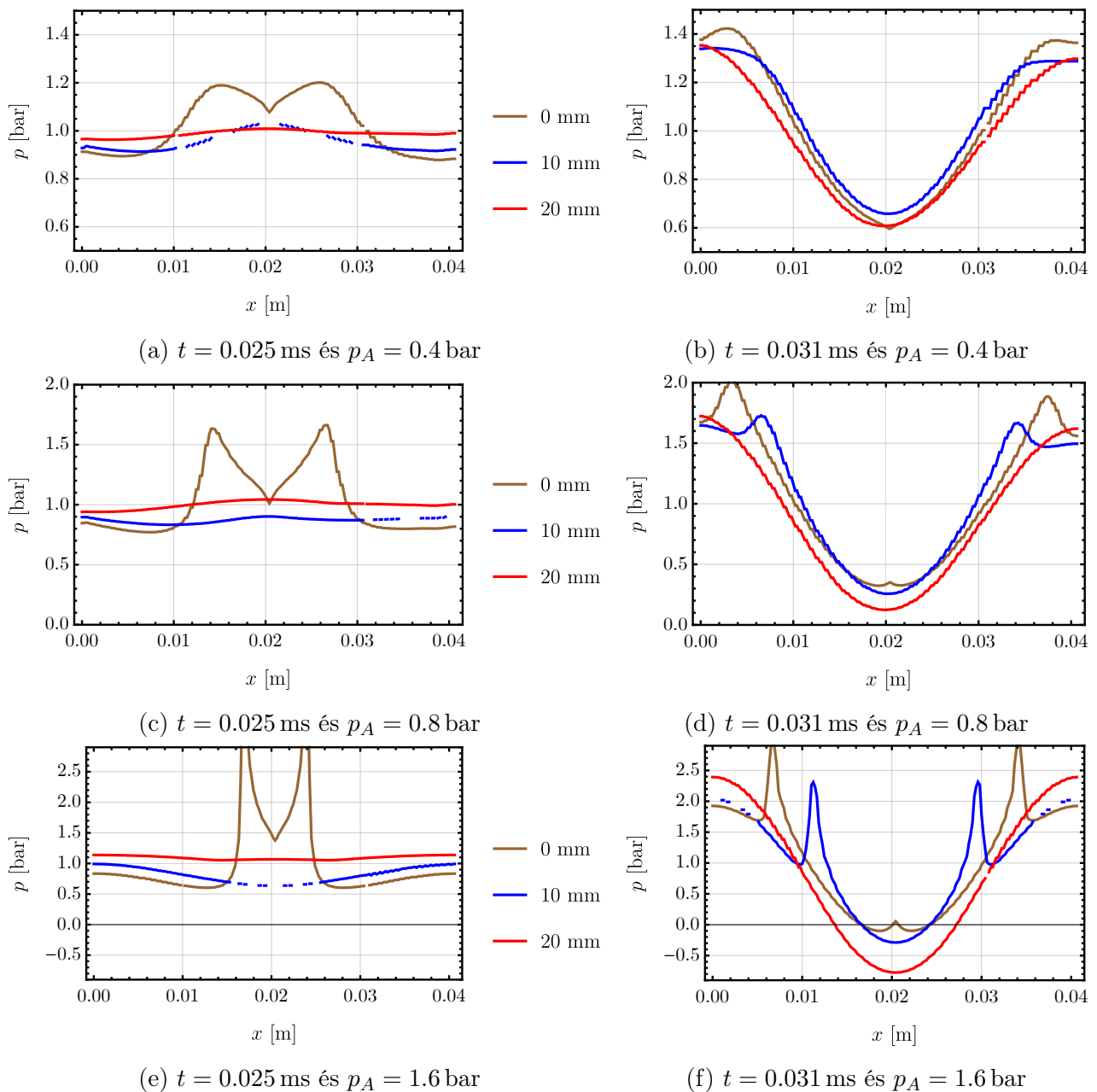


3.16. ábra. A buborék kinézete két időpillanatban

Végül még érdemes megvizsgálni a buborék hatását az állóhullámra. Ahogyan a korábbiakban láttuk alacsonyabb nyomásamplitúdó esetén ($p_A = 0.1$ bar) a buborék az állóhullámra minimális hatást gyakorolt, alacsony nyomásamplitúdókon a magasabb frekvencia miatt sincsen a buborék nagyobb hatással az állóhullámra. Az állóhullámot továbbra is három egyenes mentén ábrázolom, az első egyenes a buborékon keresztül megy, a második a buboréktól 10 mm-re és a harmadik pedig a buboréktól 20 mm-re megy.

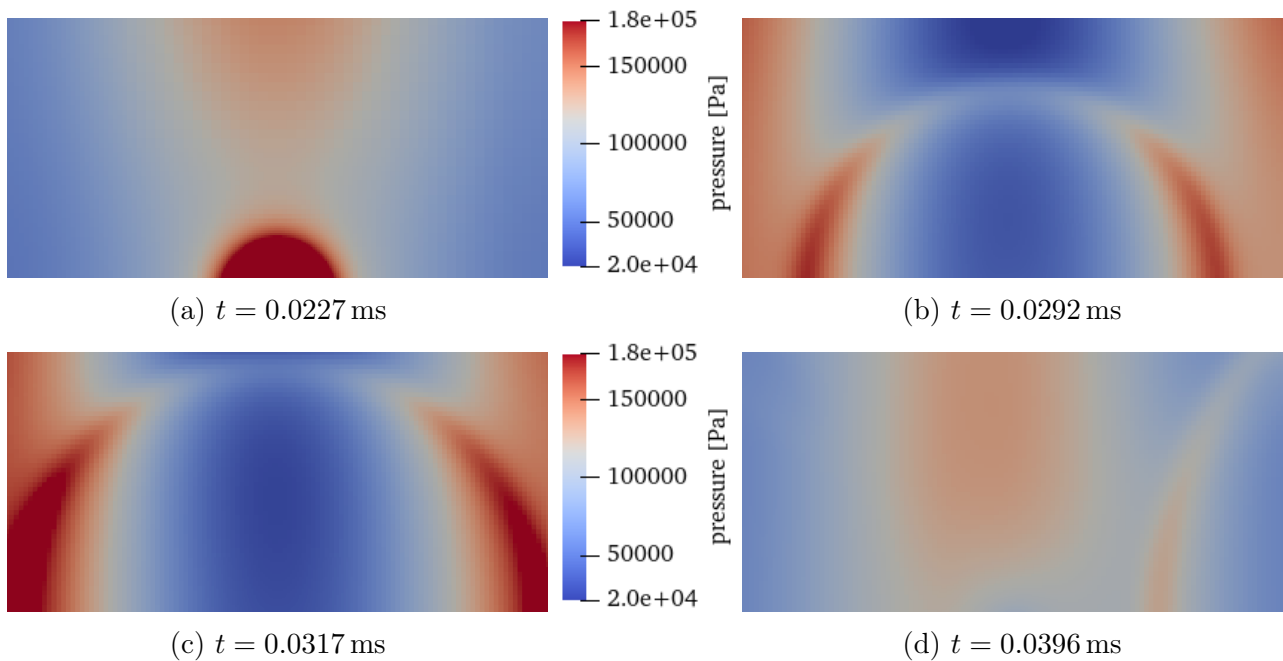
A 3.17. ábra mutatja az állóhullám állapotát három különböző nyomásamplitúdó mellett. Minden nyomásamplitúdó esetén két időpillanat lett kirajzolva, az első időpillanat $t = 0.025$ ms, amikor az állóhullám nyomása elméletileg éppen konstans a másik pedig $t = 0.031$ ms amikor az állóhullám nyomáskilengése éppen maximális. Az ábrákon megfigyelhető, hogy a buborék lényegesen befolyásolja az állóhullámot és ez a hatás az állóhullám amplitúdójának a növelésével egyre csak nő. A bal oldali ábrák pont az első buborékösszeomlás után készültek, itt gyakorlatilag az akusztikus kavitáció hatását látjuk. Azaz a buborékösszeomlás után a buborék korábbi helyére nagy sebességgel víz áramlik ezzel lényegesen megnövelve a nyomást lokálisan. Azonban a nyomás olyan jelentősen megemelkedik, hogy a teljes áramlási téren egy nyomáshullám terjed végig ami a buborék közeléből indul ki, a bal oldali ábrákon ez a nyomáshullám épp a kialakulása után látható. A nyomáshullám amplitúdója annál nagyobb minél jelentősebb a buborékösszeomlás. A jobb oldali ábrák negyed periódussal később készültek, látható például a 3.17f ábrán, hogy a nyomáshullám $l/4 = \lambda/4$ távolságot tesz meg (barna görbe), tehát az hangsebességgel terjed az áramlási térben. Ez a nyomáshullám az állóhullámra szuperponálódik illetve, a jobb oldali falon vissza is verődik, tehát ez a buborékot később újra befolyásolja.

Az buborékösszeomlás után kialakult nyomáshullámot az áramlási térben a 3.18. ábra szemlélteti 4 időpillanatban, az ábrákon csak az áramlási tér fele lett ábrázolva. A 3.18a ábra a buborékösszeomlás után közvetlen készült, ezen a nyomáshullám kiindulása látható. A 3.18b és a 3.18c ábrákon látható, hogy a nyomáshullám végighalad az áramlási téren egészen addig amíg ez el nem éri az áramlási tér szélét. A 3.18d ábrán látható, hogy a nyomáshullám visszaverődik a falról a keleti oldalon. A nyugati oldalon nincsen visszaverődés, hiszen ott az előírt nyomásnak kell teljesülnie, így visszaverődés nem lehetséges. Az északi oldalon, a zéró gradiens peremfeltétel miatt nincsen visszaverődés.



3.17. ábra. Az állóhullám kinézete két időpillanatban több nyomásamplitúdó mellett.

A későbbiekben, ha ezen szimulációkat új matematikai modellek verifikálására szeretném használni ez a visszaverődés problémát okozhat, hiszen a buborék akusztikus térre való hatásával jelenleg egyetlen modell sem számol. Szerencsére a visszaverődés hatása az áramlási tér x irányú méretének a növelésével csökkenthető, illetve elég hosszú áramlási tér használatával el lehet azt is érni, hogy a szimuláció időtartamában a buborékból kiinduló majd a falnál visszavert nyomáshullámok ne ériék el újból a buborékot. A felvétel megtekinthető a melléklet 6.3. ábráján animálva is (lásd a 6.4. fejezet).



3.18. ábra. Pillanatfelvételek az áramlási térről $p_A = 0.8$ bar nyomásamplitúdó esetén.

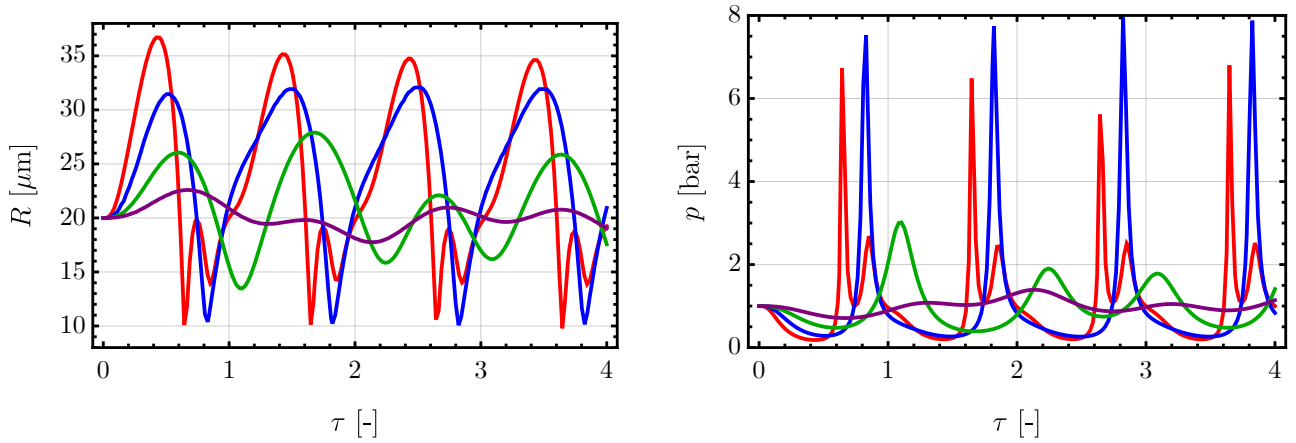
3.2.8. Frekvencia változtatása

Az utolsó elvégzett kísérlet a frekvencia változtatása. A cél annak a vizsgálata, hogy a szonokémia szempontjából jelentős frekvenciatartományban alkalmazható-e az ALPACA. Az áramlási tér mérete mindig egy hullámhossznyi, ahol a buborék továbbra is középen az amplitúdópontban helyezkedik el. A tesztekben a kiinduló buboréksugár végig $R_0 = 20 \mu\text{m}$ és a minimális cellaméret pedig $a_{\min} = 0.31 \mu\text{m}$, tehát a buborék az átmérője mentén kezdetben mindig legalább 129 cellára lesz osztva, hasonló felbontás a korábbiakban megfelelő volt. Az összes beállítást a 6.5. táblázat tartalmazza.

Mindegyik szimulációt 4 perióduson keresztül futtatom. A könnyebb összehasonlítás érdekében a szimuláció eredményei a dimenziótlan idő τ függvényében lettek ábrázolva. A dimenziótlan idő a következő módon értendő

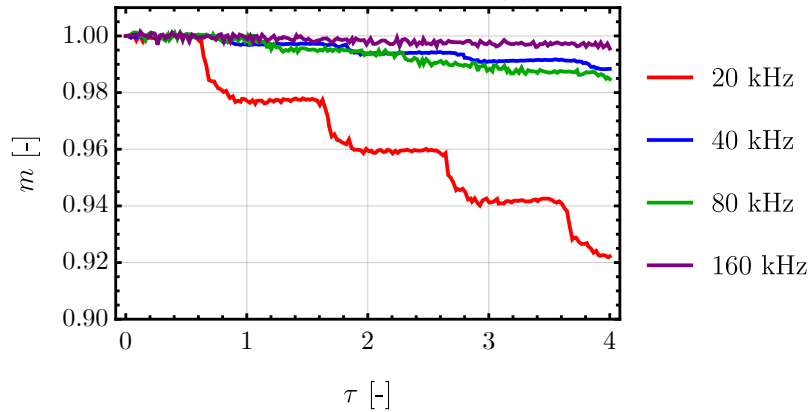
$$\tau = \frac{t}{T},$$

ahol T a gerjesztés periódusideje. Minden szimuláció eredménye $\tau = 0$ -tól $\tau = 4$ -ig van ábrázolva a 3.19. ábrán, mindegyik görbe így pontosan 4 periódus eredményét reprezentálja. A buboréksugár és buboréknyomás időbeni változása $f = 20 \text{ kHz}$ és $f = 40 \text{ kHz}$ frekvencián (piros és kék görbe) periodikus jelleget mutat, az előbbi esetben a buborékösszeomlást követi a buboréksugár kisméretű oszcillációja, amit korábban nagyobb nyomásamplitúdó esetén láttunk. Magasabb frekvencia esetén $f = 80 \text{ kHz}$ -nél és $f = 160 \text{ kHz}$ -nél ez a periodikus jelleg elvész. Előfordulhat, hogy a buborékoszcillációk egy hosszabb tranziens után válnak periodikussá, illetve lehetséges az is, hogy a buborékoszcillációk periódusideje nem egyezik meg a gerjesztési frekvencia periódusidejével. Ezen dolgozatnak nem célja a buborékoszcillációk dinamikai vizsgálata.



(a) A buboréksugár időbeni változása.

(b) A buboréknyomás időbeni változása.

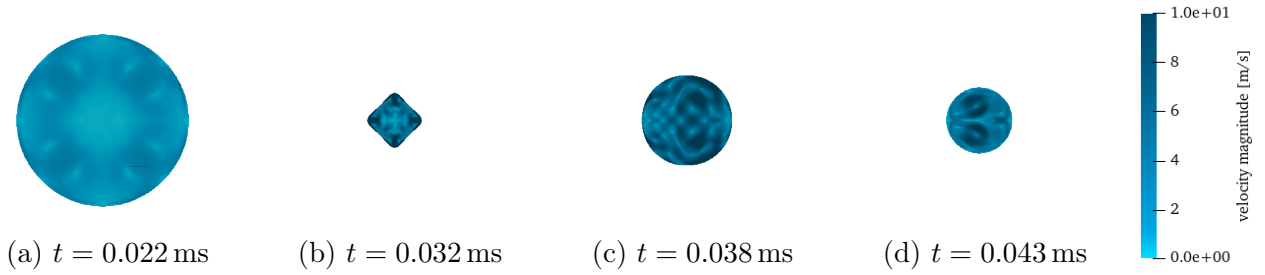


(c) A buboréktömeg időbeni változása.

3.19. ábra. A buboréksugár, a buboréknyomás és a buboréktömeg időben változása különböző frekvenciákon $p_A = 0.8$ bar-os nyomásamplitúdón.

A buboréktömeg mindegyik szimuláció esetén elég jól megmarad, és megfigyelhető az ábrákon, hogy a buboréksugár nagyméretű csökkenése esetén a tömeg egy kis része disszipálódik, ez különösen jól látható a piros görbén a 3.19c ábrán. A buboréktömegnek nagyjából a 2%-a disszipálódik egy-egy összeomlás során $f = 20$ kHz-es gerjesztés esetén. Ez a tömegcsökkenés elég kicsi, így például a buboréksugár maximumai időben nem csökkenek jelentősen.

Végül érdemes megfigyelni a buborék kinézetét a 3.20. ábrán $f = 20$ kHz-en, különböző időpillanatokban. A 3.20a ábra azt az állapotot mutatja amikor a buboréksugár maximális, itt megfigyelhető a buborék alakjának a gömbszimmetriája és a sebességmező x és y tengelyszimmetriája. Az x tengelyszimmetria a buborékra rákényszerített szimmetria, hiszen a buborék csak az egyik fele lett szimulálva és a buborék szimmetria peremfeltétellel lett átszelve. A 3.20b ábra abban az időpillanatban készült amikor a buboréksugár minimális, látható, hogy ekkor a gömbszimmetria már nem marad meg. A 3.20c és a 3.20d ábrák az összeomlást követő kicsi oszcilláció maximumát és minimumát ábrázolják, ekkor a gömbszimmetria bár helyre áll, de az y -tengelyszimmetria a sebességmezőben már elvész. Egy periódus megtekinthető a melléklet 6.4. ábráján animálva is (lásd a 6.4. fejezet).



3.20. ábra. A buborék kinézete négy időpillanatban

Összességében magasabb frekvenciákat is probléma nélkül lehet használni a szimulációk során, tehát a szonokémia szempontjából lényeges frekvenciatartományt az ALPACA teljesen jól lefedi. A frekvenciaváltoztatás során is arra kell figyelemmel lenni, hogy a minimális méretű buborék is elegendő cellával legyen felbontva.

3.3. Skálázhatóság

Egy program skálázhatósága alatt a futási idő és a párhuzamosítás közötti kapcsolatot értjük. Legegyszerűbben az erős skálázhatóság vizsgálható, amit Amdahl törvénye ír le [38]. Amdahl törvénye értelmezhető arra az esetre, ha egy munkaállomáson vagy szuperszámítógépen több CPU magon szeretnénk futtatni egy programot. E szerint egy feladat elméleti gyorsulása S a használt CPU magok számától n -től függ és ezt befolyásolja, hogy a program mekkora része párhuzamos. A program párhuzamos hányadát p jelöli, $p = 1$ esetén a program teljesen párhuzamos és $p = 0$ esetén a program teljesen soros. Az Amdahl törvény tehát

$$S(n) = \frac{1}{(1-p) + \frac{p}{n}}. \quad (3.22)$$

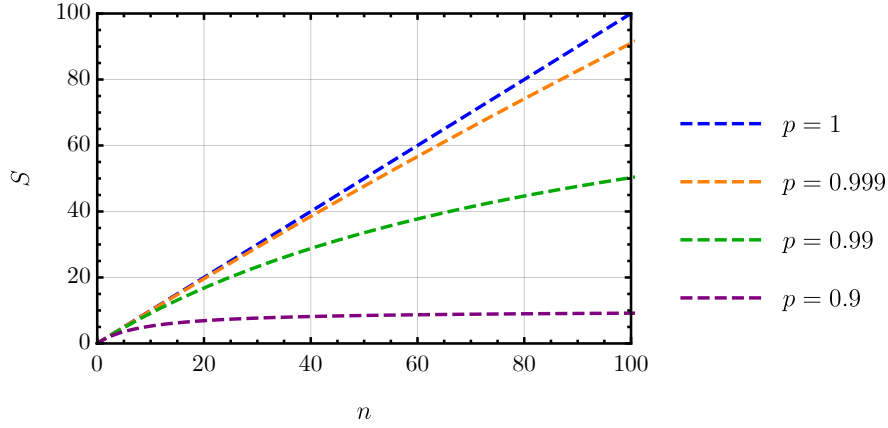
Ideális esetben, amikor egy kód teljesen párhuzamos, azaz $p = 1$ az Amdahl törvény leegyszerűsödik,

$$S(n) = n$$

tehát ekkor a CPU magok számával egyenes arányosan változik a program gyorsulása. Ez azt jelenti, hogy egy teljesen párhuzamos program esetén, ha kétszer annyi CPU magot használunk a futási idő feleződik. Amdahl törvénye alapján meghatározható egy feladat maximális gyorsulása $S_{\max}$ is, tegyük fel, hogy végtelen sok CPU mag érhető el, tehát $n \rightarrow \infty$, ekkor határérték számítás után

$$S_{\max} = S(n \rightarrow \infty) = \frac{1}{1-p}. \quad (3.23)$$

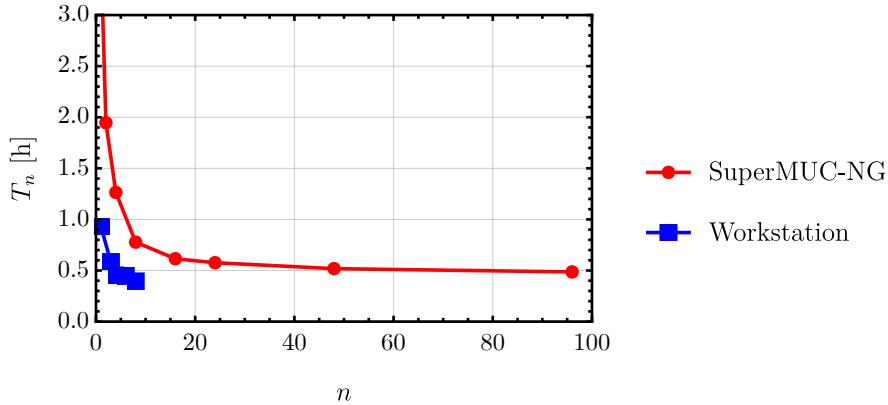
Ez arra a tényre világít rá, hogy $p \neq 1$ esetén nem lehetséges egy programot minden határon túl gyorsítani azáltal, hogy egyre több erőforrást használunk. Például, ha $p = 0.9$, tehát a program 90%-a párhuzamos és 10%-a soros, teljesen mindegy, hogy hány CPU magot használunk nem fogunk $S_{\max} = 10$ -nél nagyobb gyorsulást elérni, tehát a futási időt mindössze tizedelni tudjuk.



3.21. ábra. Az Amdahl törvény által előrejelzett gyorsulás (S) 4 különböző p mellett.

A 3.21. ábra azt mutatja, hogy mekkora gyorsulás érhető el különböző p és n mellett. Megfigyelhető, hogy p minimális eltérése is jelentős különbséget okoz a program gyorsulásában, például 100 CPU magon futtatva egy programot, ha $p = 0.99$ csak ötvenszeres gyorsulást érhetünk el, az ideális százszoros helyett. Éppen ezért rendkívül fontos, hogy p amennyire csak lehet megközelítse az egyet. Az ALPACA fejlesztői bizonyos problémákon $p > 0.998$ -at is sikeresen elértek. Ez azt jelenti, hogy a 3.23. egyenlet szerint egy ALPACA-s szimulációt elég sok CPU mag használatával akár ötszázszorosítása is fel lehet gyorsítani.

3.3.1. Szonokémiai szimulációk párhuzamossága



3.22. ábra. A szimuláció futási ideje a SUPERMUC-NG szuperszámítógépen és az otthoni munkaállomáson.

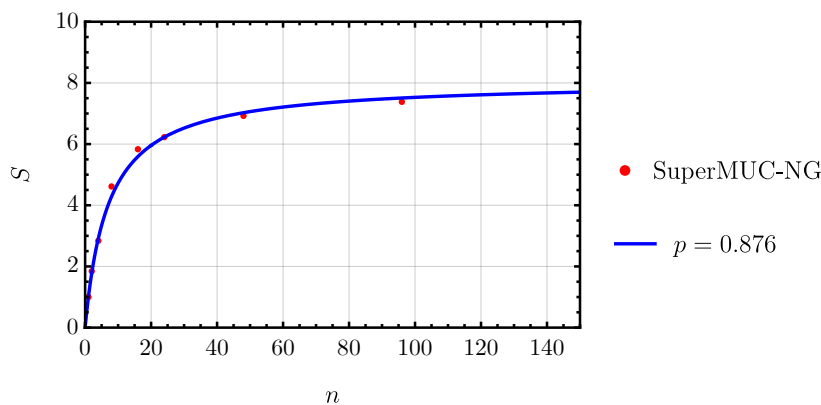
Szonokémiai szimulációk skálázhatóságát a 3.2.7. fejezetben bemutatott problémán vizsgáltam $p_A = 0.8$ bar mellett, minden további paramétert a 6.4. táblázat tartalmaz. A skálázhatóság vizsgálatához ugyanazt a szimulációt futtattam le többször, mindössze a párhuzamosan elindított folyamatok számát (azaz a *MPI rankok* számát) változtattam, az ALPACA használata esetén minden folyamat egy CPU magra kerül, így a folyamatok száma megegyezik a használt CPU magok számával. Az áramlási tér inicializálásának az idejét nem, csak a szimuláció futásának az idejét mértem. A szimulációkat lefuttattam mind az otthoni munkaállomáson mind a SUPERMUC-NG szuperszámítógépen, a futási időket a 3.22. ábra mutatja. A futási időt n CPU magon T_n jelöli, az ábrán T_n órában lett megadva. Az ábrán szembevető lehet,

hogy a szuperszámítógépen a futási idő hosszabb mint az otthoni munkaállomáson, azonban ez abszolút nem meglepő, hiszen az otthoni munkaállomás órajele (3.8 GHz) közel kétszerese a szuperszámítógép órajelének (1.5 – 2 GHz). A problémát az okozza, hogy a futási idő alig csökken, miközben n -et 20 és 100 között változtatom.

Az Amdahl törvény segítségével kiszámolható, hogy a program mekkora része párhuzamos, ehhez először az S gyorsulást kell kiszámolni. Az alap futási időnek az $n = 1$ CPU magon vett T_1 futási időt veszem, így

$$S(n) = \frac{T_1}{T_n}.$$

Ezután a mért $(n, S(n))$ pontokra görbeillesztéssel ráilleszthető az Amdahl törvény (lásd a 3.22. egyenlet) és így a szuperszámítógépen futtatott szimulációk esetére meghatározható, hogy $p = 0.876$. Ebből számolható a maximális gyorsulás 2 dimenziós buborékszimulációkra, ami $S_{\max} = 8.06$ a mért adatok alapján. A 3.23. ábra mutatja a mért $(n, S(n))$ pontokat, és az arra illesztett görbét, látható, hogy az Amdahl törvény tényleg jól leírja a szimulációk szuperszámítógépes skálázhatóságát.



3.23. ábra. Az elért gyorsulás S a használt CPU magok n függvényében.

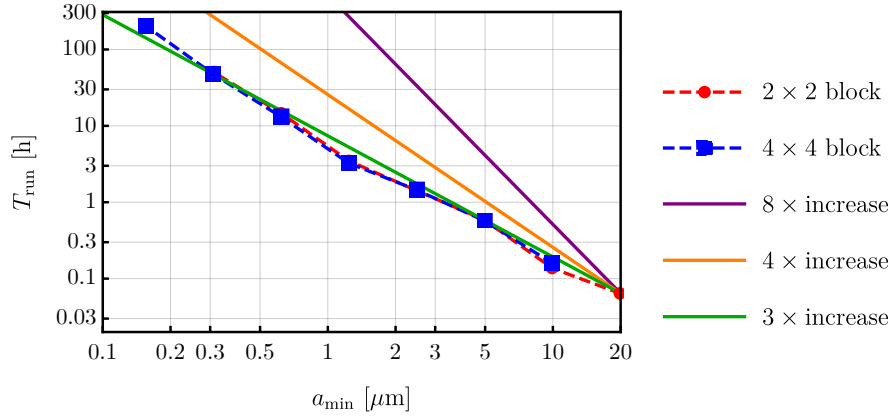
Összességében tehát megállapítottam, hogy bármennyi CPU magot használok a futtatások során, a futási idő nem csökken a kiinduló futási idő nyolcadánál kevesebbre, ami közel sem ideális. Ezt az okozhatja, hogy az időlépés rendkívül kicsi $\Delta t = 10^{-10}$ s körüli, miközben a szimuláció hossza $5 \cdot 10^{-5}$ s, tehát összesen ötszázezer időlépés szükséges. Ez azért okoz problémát mert a különböző magok az áramlási tér különböző részeit számolják, és az időlépések után a magok között adatot kell cserélni és ezen memóriaműveletek általában nem tökéletesen párhuzamosak.

3.3.2. Felbontás növelése

Az erős skálázhatóságon kívül vizsgáltam a felbontás változtatásának a hatását a futási időre. Ha a felbontást egyenletesen finomítanánk, például azt megdupláznánk, akkor a futási idő a nyolcszorosára nőne 2 dimenzióban, hiszen a cellaszám mindkét irányban a kétszere nő, az időlépés pedig a cellaméret felezése miatt szintén feleződik. Azonban az MR algoritmus csak a szükséges helyeken finomítja tovább a hálót, a lokális időlépés pedig lehetővé teszi, hogy a kevésbé részletes tartományok nagyobb időlépéssel lépjenek, ezért a felbontás duplázásával azt várjuk, hogy a futási idő nem nyolcszorosára, hanem annál kedvezőbben nő.

A konvergencia vizsgálat során (lásd a 3.2.5. fejezet) a szimulációk futási idejét is mértem. Mint korábban említésre került, ugyanolyan maximum felbontású hálót többféle képen is létre

lehet hozni. A 3.24. ábrán látható a futási idő a minimum cellaméret függvényében, ugyanazt a minimum cellaméretet kétféle kép is létrehozta, a piros görbe esetén 2×2 blokkból kiindulva a kék görbe esetén pedig 4×4 blokkból kiindulva. Az ábrán fel van tüntetve a legkisebb felbontástól kiindulva, hogy milyen futási időt várunk, hogyha a futási idő a felbontás duplázásával nyolcszorozódik, négyszereződik és háromszorozódik. Az ábráról leolvasható, hogy a felbontás duplázásával a futási idő mindössze a háromszorosára nő.



3.24. ábra. A futási idő a minimum cellaméret $a_{\min}$ függvényében két különböző konfigurációra. A folytonos vonalak a három, négy és nyolcszoros futási idő növekedést jelölik a felbontás duplázásának az esetére.

Tehát az látható, hogy az MR algoritmus rendkívül jól működik és ezzel tényleg jelentős mértékű számítási erőforrás takarítható meg, kétdimenziós szimulációk esetén a felbontás duplázása a futási időt körülbelül a háromszorosára növeli, ami rendkívül kedvező.

4. Háromdimenziós szimulációk

A háromdimenziós szimulációk rendkívül számításigényesek, de a futási idő a kétdimenziós szimulációk alapján előrejelezhető. A futási idő előrejelzése rendkívül fontos a megvalósíthatóság szempontjából, ezért a következőkben egy durva becslést teszek a futási időre. Már ismert, hogy a buborékot legalább száz cellára kell bontani az átmérő mentén, magasabb nyomásamplitúdók esetén. Feltételezve, hogy ez háromdimenzióban is igaz, úgy ott ez már azzal járna, hogy a buborékot $N_{b,3D} = 523 \cdot 10^3$ cellára kell bontani. A legnagyobb készített 2 dimenziós szimuláció esetén a buborék $N_{b,2D} = 33908$ cellát tartalmazott, ekkor a futási idő 4 magon 203 óra, tehát összesen a CPU idő $T_{2D} = 812$ h volt két periódusra. A futási időt leginkább a buborék és a fázishatár közelében lévő cellák száma befolyásolja, hiszen ezek a legkisebbek, ezek teszik meg a legtöbb időlépést, tehát a futási idő közel arányos a buborékban lévő cellák számával. Ha feltételezzük, hogy ez igaz 3 dimenzióban is akkor a futási idő becsülhető egy 3 dimenziós szimulációra

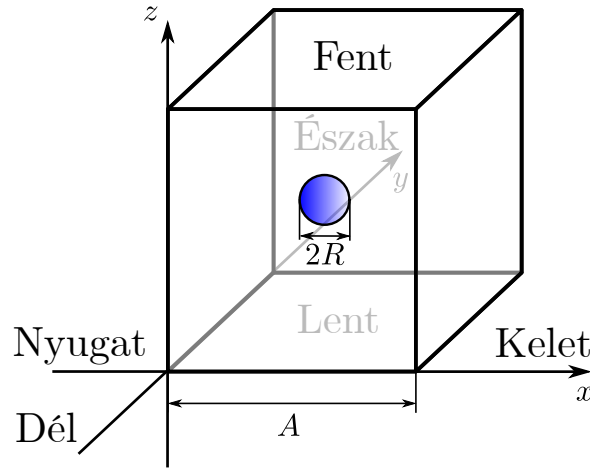
$$T_{3D} = T_{2D} \frac{N_{b,3D}}{N_{b,2D}} = 12\,524 \text{ h.}$$

Azonban az is ismert, hogy a futási idő a nyolcadára csökkenthető a szuperszámítógépen, hiszen a program nagyrészt párhuzamos, így ha elegendő CPU magot használunk egyetlen buborék két periódusának a szimulációja 1565 óráig, azaz 65 napig tartana. Ez elfogadhatatlanul sok, habár a CPU idő keretbe bőven belefér, azonban a program rendkívül rossz skálázhatósága miatt nem használhatók ki elég jól a szuperszámítógép képességei.

A 3 dimenziós szimulációk során érdemes először a megfelelő futtatási konfigurációt megtalálni ahhoz, hogy a futási idő kezelhető legyen. Ez azt jelenti, hogy lehetőség szerint egy szimuláció férjen bele 48 órában, hogyha azt néhány száz CPU magon futtatom. Ezután lehetséges a buborékok részletes vizsgálata. Ezen dolgozat mindössze egy kitekintést nyújt a 3 dimenziós szimulációk lehetőségére. A 3 dimenziós szimulációk során végig ugyanazt a beállítást használok, a beállításokat és a paramétereiket a 6.6. táblázat mutatja.

4.1. Skálázhatóság

A korábbi feltételek miatt és a kezdeti tapasztalatok alapján 3 dimenzióban először csak a buborékot és annak a közvetlen környezetét szimulálok. Tehát az $R_0 = 20\ \mu\text{m}$ kezdeti sugarú buborékot egy $A = 100\ \mu\text{m}$ oldalhosszúságú kocka közepére teszem. Ez a beállítás látható a 4.1. ábrán. Az ábra mutatja az irányokat és a tengelyeket is, az x tengely nyugatról keletre, az y tengely délről északra és a z tengely letről felfelé mutat.



4.1. ábra. A három dimenziós áramlási tér, a buborék, a tengelyek és az irányok megnevezései.

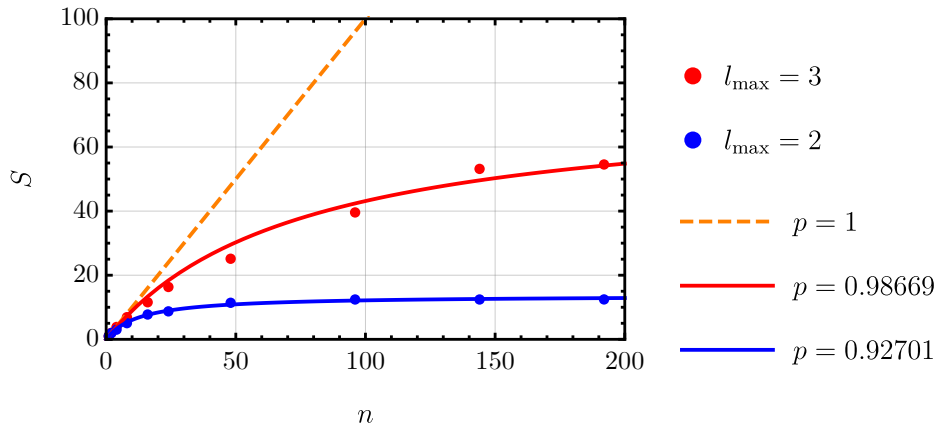
A peremfeltételek úgy kerültek megválasztásra, hogy a buborék közeléből kiinduló nyomáshullámok az áramlási tér szélén ne verődjenek vissza, azaz az áramlási tér a lehető legkevésbé hasson a buboréokra. Állóhullámok ilyen beállítás mellett nem hozhatók létre, kivéve ha időben változó peremfeltételt helyezek el két szemközti oldalon más-más fázisban, ezt az ALPACA azonban jelenleg nem támogatja. A szimulációk során így haladóhullámokat használok és a p_A nyomásamplitúdó a haladó hullám nyomásamplitúdóját jelenti. A keleti oldalt időben változó peremfeltételt állítottam be f gerjesztési frekvenciával és p_A nyomásamplitúdóval. Az összes többi oldalon zéró gradiens peremfeltételt alkalmazok, így az áramlási tér egyik oldalán sincsen visszaverődés.

A szimulációkat alapvetően $2 \times 2 \times 2$ kezdeti blokkal inicializálom, és maximum az $l_{\max} = 3$ -as szintig növelem az MR felbontást. Ez l_0 szinten $32 \times 32 \times 32$ cellát jelent, l_3 szinten pedig $256 \times 256 \times 256$ cellát. A szimulációk során felhasználható az xy és a xz síkra vett szimmetria, és ezzel az összes cella száma negyedelhető. A 4.1. táblázat mutatja a különböző konfigurációkat, az első sorban a különböző maximálisan használt szintek vannak, ehhez lett meghatározva a minimum méretű cella oldalhossza, a buborékban lévő cellák aránya és a buborékátmérő mentén lévő cellák száma. Előzetesen megállapítható, hogy $l_{\max} = 3$ szükséges egy elég jó minőségű szimulációhoz, mert ez eredményezi azt, hogy a buborék legalább 100 cellára legyen bontva az átmérő mentén.

4.1. táblázat. A minimális cellaméret $a_{\min}$, a buborékban lévő cellák aránya N_b/N_Σ és a buborékátmérő mentén lévő cellák száma D_{cells} .

$l_{\max}$	1	2	3
$a_{\min}$	1.56 μm	0.78 μm	0.39 μm
N_b/N_Σ	2186/65536	17 560/466 944	140 526/1 441 790
D_{cells}	25	51	102

A skálázhatóság vizsgálásához nem szükséges teljes periódusokat szimulálni, ezen szimulációk során mindössze az első 0.1 μs -t szimulálom. A 3 dimenziós szimulációk skálázhatóságát a 4.2. ábra mutatja, a mérési adatokra ráillesztettem az Amdahl törvényt. Az Amdahl törvény szerint a szimuláció párhuzamos része $l_{\max} = 3$ esetén $p = 0.987$, $l_{\max} = 2$ esetén pedig $p = 0.927$. Ez sokkal jobb eredmény, mint amit 2 dimenzióban sikerült elérni, hiszen az egy időlépésen belüli számítások száma 3 dimenzióban lényegesen nagyobb, és ezen számítások teljesen elosztottak a CPU magok között.



4.2. ábra. A 3 dimenziós szimulációk skálázhatósága, két különböző beállítás mellett (kék $l_{\max} = 2$ és piros $l_{\max} = 3$), a szaggatott narancssárga vonal az ideális skálázhatóságot mutatja.

Az eredményekből extrapolálhatunk egy több periódus hosszú szimuláció futási idejére. Az eddigi szimulációk hossza 0.1 μs volt, azonban a következőkben legalább négy periódust, azaz 100 μs -t szeretnék szimulálni. Feltételezhetjük, hogy a futási idő ebben az esetben az ezerszeresére nő. A skálázhatósági teszt alapján azt látjuk, hogy $l_{\max} = 2$ esetén elég 96 CPU mag használata a közel maximális gyorsulás eléréséhez, $l_{\max} = 3$ esetén ehhez 144 CPU mag szükséges. A 4.2. táblázatban ezeket nevezem referencia szimulációnak, a teljes szimuláció pedig négy periódus szimulációjára vonatkozik, ennek a futási ideje a referencia szimuláció futási idejének az ezerszerese. A CPU idő meghatározható mint $T_n \cdot n$, ez azért fontos mert szuperszámítógép idő pályázáshoz általában ezt a mennyiséget kell megadni.

4.2. táblázat. Extrapoláció a teljes szimuláció futási idejére

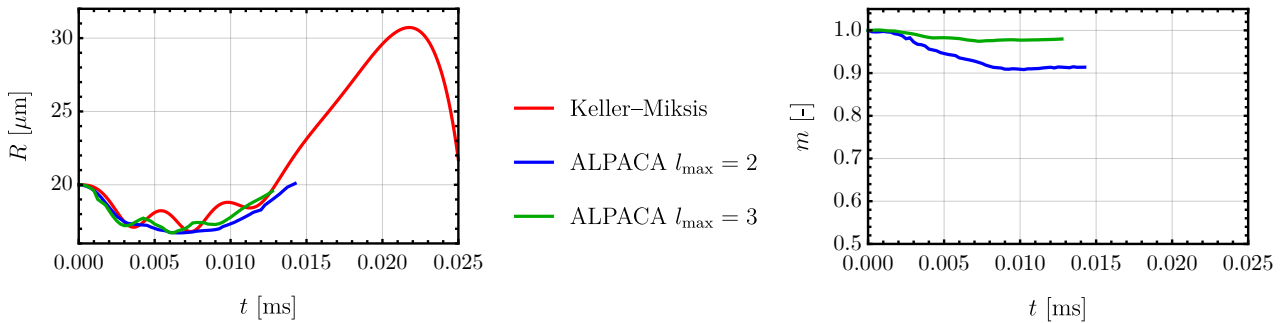
	Referencia szimuláció		Teljes szimuláció, 4 periódus		
$l_{\max}$	Futási idő (T_n)	CPU magok (n)	Futási idő (T_n)	CPU magok (n)	CPU idő
2	0.169 h	96	169 h $\approx$ 7 day	96	16 213 h
3	0.250 h	144	250 h $\approx$ 10 day	144	36 040 h

Összességében megállapítható a 4.2. táblázatból, hogy $l_{\max} = 2$ esetén, 48 óra alatt le lehet szimulálni egyetlen periódust, $l_{\max} = 3$ esetén ebbe a 48 órás futási idő limitbe már nem fér be egyetlen periódus szimulációja sem. Természetesen 48 óránál hosszabb szimulációk is futtathatók több darabban, tehát megoldható, hogy lefuttatok fél periódust, majd a második fél periódust az első félperiódus végső állapotával inicializálom.

4.2. Kezdeti szimuláció

Ebben az alfejezetben az eddig megvalósult három dimenziós szimulációkat mutatom be. A szimulációk során a 6.6. táblázatban felsorolt paramétereket használom. Mint a 4.2. táblázat mutatja a 3 dimenziós szimulációk futási ideje több nap, eddig két 24 órás futtatást sikerült elvégezni. Az első futtatásban $l_{\max} = 2$ mellett egy félperiódust, a második futtatásban $l_{\max} = 3$ mellett pedig szintén egy félperiódust sikerült leszimulálni. A 3 dimenziós szimulációkat össze lehet hasonlítani a Keller-Miksis egyenlettel, ami egyetlen buborék oszcillációját írja le (lásd Appendix 6.2.). A Keller-Miksis egyenlet egy közönséges differenciálegyenlet, aminek a numerikus megoldását a *DifferentialEquations.jl* csomaggal állítottam elő a *Julia* programnyelvben [39]. Ezen megoldás összehasonlítható az ALPACA szimuláció eredményével.

A 4.3a ábra mutatja a buboréksugár időbeni változását, az ábrán pirossal lett jelölve a Keller-Miksis egyenletből számolt megoldás, ezen megfigyelhető a buborék kezdeti oszcillációja. A magasabb felbontású ALPACA szimuláció ($l_{\max} = 3$) reprodukálja a buboréksugár kezdeti oszcillációját és viszonylag jól illeszkedik a Keller-Miksis egyenletből számolt eredményekre. Az alacsonyabb felbontású szimuláció ($l_{\max} = 2$) ezt a kezdeti oszcillációt nem adja vissza, de a kvalitatívan hasonló eredményt ad. A Keller-Miksis egyenlet a valóság leegyszerűsítése, hiszen az feltételezi a buborék gömbi szimmetriáját, így a szimulációkkal való tökéletes egyezést nem lehet elvárni. A 4.3b ábrán a buboréktömeg időbeni változása látható, itt is megfigyelhető egy jelentős disszipáció, azonban a disszipáció mértéke a felbontás növelésével csökkenthető.

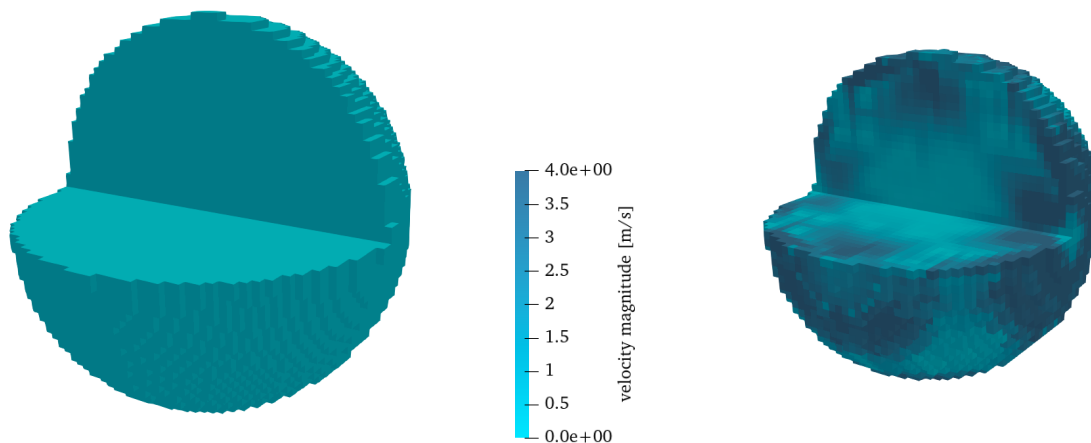


(a) A buboréksugár időben változása, a két ALPACA szimuláció és a Keller-Miksis egyenlet szerint.

(b) A buboréktömeg időbeni változása.

4.3. ábra. 3 dimenziós szimulációk eddigi eredményei

A buborék két pillanatfelvételét a 4.4. ábra mutatja. A 4.4a ábrán látható a buborék kezdeti állapota, ekkor a buborékban a sebesség magnitúdó egységesen nulla, a 4.4b ábra $t = 0.0065$ ms-nél ábrázolja a buborékot, amikor a buboréksugár minimális. Megfigyelhető, hogy a buborék belsejében a sebesség magnitúdó közel nulla, a felülethez közeledve viszont ez nő. A teljes felvétel megtekinthető a melléklet 6.5. ábráján animálva is (lásd a 6.4. fejezet).



(a) A buborék kinézete $t = 0$ ms-nál, a kiinduló helyzetben.

(b) A buborék kinézete $t = 0.0065$ ms-nél, amikor a buboréksugár minimális.

4.4. ábra. A három dimenziós buborék kinézete két időpillanatban

Összességében láttuk, hogy 3 dimenzióban is lehetséges buborékokat szimulálni az ALPACA-val, azonban ez rendkívül számításigényes, az eddigi szimulációkból komolyabb konklúziót még nem lehet levonni. Ezen rövid szimulációk is majdnem 2400 CPU-óra szuperszámítógép időt igényeltek.

5. Összefoglalás

A dolgozatban bemutatásra került az ALPACA áramlásmegoldó és az abban használt módszerek, például a *level-set* és a *multiresolution*. Az ALPACA megoldót sikeresen használtam állóhullámok létrehozására, az analitikusan levezetett eredményeket sikerült reprodukálni és két dimenziós buborékokat is sikerült szimulálni.

5.1. Kétdimenziós eredmények

A kétdimenziós tesztek során először a konvergenciát vizsgáltam a 3.2.5. fejezetben. Megállapítottam, hogy a numerikus megoldás hibája legalább másodrendben csökken a minimális cellaméret csökkentésével. A megoldóban végig harmadrendű algoritmust használtam az időbeni integrálásra, így a konvergenciarend nem teljesen ideális. A minimális cellaméret felezésével a mérések alapján a futási idő háromszorozódik ami jónak tekinthető. A cella oldalhossz csökkentésével négyszerannyi cella szükséges egyenletes finomítás esetén, és az időlépés nagyságát a stabilitás miatt szintén felezni kell, ez összességében nyolcsszorozná a futási időt, azonban a *multiresolution* lehetővé teszi a háló nagymértékű adaptálását a kritikus helyeken, így a finomítás során a cellaszám körülbelül másfélszeresére nő, a futási idő ezzel együtt a háromszorosára növekszik. A megfelelő felbontás rendkívül fontosnak bizonyult, hiszen kicsi felbontás esetén a buboréktömeg nagyon gyorsan disszipálódott, azonban ennek mértéke a felbontás növelésével jelentősen csökkent.

Ezután vizsgáltam magasabb nyomásamplitúdókat a 3.2.7. fejezetben, amely során megállapítottam, hogy nagyobb nyomásamplitúdók esetén a buborékot minimum 100 cellára kell bontani az átmérője mentén. Ez a felbontás elegendő ahhoz, hogy rövidebb szimulációk során

a buboréktömeg több mint 90%-a megmaradjon, azonban hosszabb szimulációk során a felbontást ennél is tovább kell növelni. Fontos, hogy a minimum 100 cellának a buborékösszeomlás után is teljesülnie kell, tehát ha a buboréksugár a kezdeti sugár felére csökken egy összeomlás során, akkor nem elég az, hogy a buborék kezdetben 100 cellával van felbontva az átmérő mentén. Ebben az esetben a buborékot kezdetben legalább 200 cellával kell felbontani. Magasabb nyomásamplitúdók használata esetén is konvergensen bizonyult a szimuláció, itt is legalább másodrendű konvergenciát tapasztaltam a tömegdisszipációra. Tehát az ALPACA-val sikeresen lefedhető a lényeges nyomásamplitúdó tartomány ($p_A = 1 \text{ bar} \dots 2 \text{ bar}$) azonban ehhez rendkívül nagy buborékfelbontás szükséges.

Következőnek a 3.2.8. fejezetben a frekvencia változtatását vizsgáltam. A hosszútávú cél szempontjából fontos, hogy probléma nélkül lehetett használni az ALPACA-t az $f = 20 \text{ kHz} \dots 200 \text{ kHz}$ frekvenciatartományban. A frekvencia növelése nem növeli lényegesen a szükséges időlépések számát és a futási időt. A szimulációk során sikerült reprodukálni azt a valóságban is létező jelenséget, hogy a buborékösszeomlást egy kisebb amplitúdójú és nagyobb frekvenciájú buborékoszcilláció követi, a szimulációk során az is látszott, hogy ezen oszcillációk során áll helyre a buborék gömbszimmetriája.

Vizsgáltam a buborék hatását az állóhullámra, az látszott, hogy magasabb nyomásamplitúdók mellett a létrejövő akusztikus kavitáció egy nyomáshullámot indít el az áramlási térben. A nyomáshullám amplitúdója annál nagyobb, minél nagyobb a buborékösszeomlás. A nyomáshullám az áramlási téren hangsebességgel halad végig, és csak a keleti falon verődik vissza. Azonban könnyen megoldható, hogy a visszaverődés ne befolyásolja a buborékot, ehhez az áramlási tartomány hosszát kell változtatni, és a buborékot a lehető legtávolabb helyezni a faltól. Ha például 10 periódust szeretnénk visszaverődés mentesen szimulálni, akkor elég egy 6 hullámhossz hosszú áramlási tér. Ekkor a buborékot a távadóhoz legközelebb eső duzzadópontra helyezve, az a faltól 5.5 hullámhossznyira lesz. Tehát az első visszaverődés csak 11 periódus múlva ér vissza a buborékhoz. Szerencsére ez a futási időt sem befolyásolja lényegesen, hiszen a buboréktól távol nagyméretű cellákat használ az ALPACA, amik pedig sokkal nagyobb időlépéssel lépnek.

Végül megállapítottam az Amdahl törvény segítségével, hogy kétdimenziós szimulációk esetén a programnak mindössze a 87.6%-a párhuzamos, tehát maximum nyolcszoros gyorsulást lehet elérni szuperszámítógépek használatával, ami nem számít túl jónak.

Természetesen kétdimenziós buborékok a valóságban ilyen formában nem léteznek, így az itt megfigyelt jelenségek bár kvalitatív visszaadják a háromdimenziós valóságban megfigyelt jelenségeket, kvantitatív eltérések azonban adódnak. Például a felületi feszültség hatása háromdimenzióban lényegesen nagyobb, így a kétdimenziós szimulációkat nem lehet közvetlen összehasonlításra használni.

5.2. Háromdimenziós próbaszimuláció

A kétdimenziós szimulációk után bemutattam a háromdimenziós szimulációkat, azonban azok már rendkívül számításigényesek. Így először egy olyan konfigurációt kellett keresni ami egy szuperszámítógépen belátható időn belül lefut. Ilyen beállítást az áramlási tartomány lényeges lecsökkentésével és a szimmetriák kihasználásával sikerült elérni. A 3 dimenziós szimulációk már jobban skálázódnak, itt a mérések szerint a program 98.7%-a párhuzamos, így szuperszámítógépen akár hetvenötszörös gyorsulást is el lehet érni, tehát itt már van értelme a szuperszámítógépek használatának. A dolgozatban bemutattam egyetlen kezdetleges szimuláció eredményeit is, ahol bár a tömeg viszonylag gyorsan disszipálódik, de a szimuláció megmutatta, hogy *háromdimenzióban is lehet akusztikusan gerjesztett buborékokat numerikusan szimulálni az*

ALPACA használatával.

Rövid távú terv nagyobb felbontású és hosszabb időtartamú szimulációk futtatása és az eredmények összevetése kísérletekkel és matematikai modellekkel (például komolyabb összehasonlítás a Keller-Miksis egyenlettel). A szimmetriák kihasználása a kezdeti szimulációk esetén elfogadható, azonban cél annak a meghatározása, hogy mi történik ha a gömbszimmetria megszűnik, tehát a szimmetriát ekkor már nem lehet felhasználni. Az ALPACA fejlesztőivel közösen dolgozva szeretnénk elérni a 3 dimenziós buborékszimulációkra a 99.5% párhuzamos részt, ami esetén a szimulációk futási idejét a szuperszámítógép használata már több mint két nagyságrenddel csökkentené. Jövőbeni terv pályázat beadása 20 millió CPU óra szuperszámítógép időre, ami már elegendő hosszabb és nagyobb felbontású háromdimenziós buborékszimulációk készítéséhez is és több paraméterkombináció kipróbálásához. Nagyméretű paramétertanulmányokat így sem lehet még készíteni, előre láthatóan a 20 millió óra is mindössze néhány száz szimuláció lefuttatására elegendő.

A dolgozatban több kérdés is megválaszolatlanul maradt, például, hogy a buborékösszeomlást követő gömbszimmetria elvesztése tényleg az összeomlást követő oszcillációk során áll-e helyre, ez az állítás háromdimenziós szimulációval már igazálható. Három dimenziós szimuláció szükséges ahhoz is, hogy buborékok szétesését lehessen szimulálni, azonban az továbbra sem nyilvánvaló, hogy ehhez milyen körülmények és paraméterek kellenek.

Hivatkozások

- [1] Axel Zimmermann. „Simulation of acoustic excited bubble oscillations with the compressible, multi-phase framework ALPACA”. Dissz. 2020.
- [2] JWJ Kaiser, S Adami és NA Adams. „Three-dimensional direct numerical simulation of shock-induced bubble collapse near gelatin”. *11th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, TSFP 2019*. 2019.
- [3] Mohammed Ali Dheyab és tsai. „Mechanisms of effective gold shell on Fe₃O₄ core nanoparticles formation using sonochemistry method”. *Ultrasonics sonochemistry* 64 (2020), 104865. old.
- [4] Csanád Kalmár, Kálmán Klapcsik és Ferenc Hegedűs. „Relationship between the radial dynamics and the chemical production of a harmonically driven spherical bubble”. *Ultrasonics sonochemistry* 64 (2020), 104989. old.
- [5] JL Silva Junior és tsai. „Copper molybdate synthesized by sonochemistry route at room temperature as an efficient solid catalyst for esterification of oleic acid”. *Ultrasonics sonochemistry* 73 (2021), 105541. old.
- [6] Sangyeon Cho és Seok Hyun Yun. „Structure and optical properties of perovskite-embedded dual-phase microcrystals synthesized by sonochemistry”. *Communications Chemistry* 3.1 (2020), 1–7. old.
- [7] Ruo Feng és tsai. „Enhancement of ultrasonic cavitation yield by multi-frequency sonication”. *Ultrasonics sonochemistry* 9.5 (2002), 231–236. old.
- [8] U Parlitz és tsai. „Spatio-temporal dynamics of acoustic cavitation bubble clouds”. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 357.1751 (1999), 313–334. old.
- [9] Robert Mettin. „Bubble structures in acoustic cavitation”. *Bubble and particle dynamics in acoustic fields: modern trends and applications* (2005), 1–36. old.
- [10] Werner Lauterborn és Thomas Kurz. „Physics of bubble oscillations”. *Reports on progress in physics* 73.10 (2010), 106501. old.
- [11] Joseph B Keller és Michael Miksis. „Bubble oscillations of large amplitude”. *The Journal of the Acoustical Society of America* 68.2 (1980), 628–633. old.
- [12] Forrest R Gilmore. „The growth or collapse of a spherical bubble in a viscous compressible liquid”. (1952).
- [13] Nagy Dániel és Plavec Lambert. „Nagyméretű paramétert tanulmányok hatékony megoldása CPU-n és GPU-n”. *BME-GPK TDK Konferencia* (2020).
- [14] Parag R Gogate és Aniruddha B Pandit. „Sonochemical reactors: scale up aspects”. *Ultrasonics Sonochemistry* 11.3-4 (2004), 105–117. old.
- [15] Amir Hassanjani-Roshan és tsai. „Synthesis of iron oxide nanoparticles via sonochemical method and their characterization”. *Particuology* 9.1 (2011), 95–99. old.
- [16] W Bonrath. „Industrial applications of sonochemistry in the syntheses of vitamin-building blocks”. *Ultrasonics sonochemistry* 10.2 (2003), 55–59. old.
- [17] HD Liang, J Tang és M Halliwell. „Sonoporation, drug delivery, and gene therapy”. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part H: Journal of Engineering in Medicine* 224.2 (2010), 343–361. old.

- [18] Sonja Lauterborn és Wilhelm Urban. „Ultrasonic cleaning of submerged membranes for drinking water applications”. *Journal of the Acoustical Society of America* 123.5 (2008), 3291–3291. old.
- [19] TJ Mason, AP Newman és SS Phull. „Sonochemistry in water treatment”. *Division of Chemistry, Coventry University, Coventry CVI 5FB* (1994), 3927–3933. old.
- [20] Timothy J Mason. „Sonochemistry and the environment—Providing a “green” link between chemistry, physics and engineering”. *Ultrasonics sonochemistry* 14.4 (2007), 476–483. old.
- [21] Slimane Merouani és tsai. „A method for predicting the number of active bubbles in sonochemical reactors”. *Ultrasonics sonochemistry* 22 (2015), 51–58. old.
- [22] Rashid Jamshidi és Gunther Brenner. „An Euler–Lagrange method considering bubble radial dynamics for modeling sonochemical reactors”. *Ultrasonics sonochemistry* 21.1 (2014), 154–161. old.
- [23] Kazuki Maeda és Tim Colonius. „Bubble cloud dynamics in an ultrasound field”. *Journal of fluid mechanics* 862 (2019), 1105–1134. old.
- [24] Vladimir A Titarev és Eleuterio F Toro. „Finite-volume WENO schemes for three-dimensional conservation laws”. *Journal of Computational Physics* 201.1 (2004), 238–260. old.
- [25] Albert Cohen és tsai. „Fully adaptive multiresolution finite volume schemes for conservation laws”. *Mathematics of Computation* 72.241 (2003), 183–225. old.
- [26] Jakob WJ Kaiser és tsai. „An adaptive local time-stepping scheme for multiresolution simulations of hyperbolic conservation laws”. *Journal of Computational Physics: X* 4 (2019), 100038. old.
- [27] Eleuterio F Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [28] Nils Hoppe, Stefan Adami és Nikolaus A. Adams. „A modular massively parallel computing strategy for three-dimensional multiresolution simulations of compressible flows”. (2020).
- [29] Herbert Oertel jr, Martin Böhle és Thomas Reviol. *Strömungsmechanik: für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Springer-Verlag, 2015.
- [30] Richard Saurel, Jean Pierre Cocchi és P Barry Butler. „Numerical study of cavitation in the wake of a hypervelocity underwater projectile”. *Journal of Propulsion and power* 15.4 (1999), 513–522. old.
- [31] Ronald P Fedkiw és tsai. „A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multi-material flows (the ghost fluid method)”. *Journal of computational physics* 152.2 (1999), 457–492. old.
- [32] Jishnu Chandran és A Salih. „A modified equation of state for water for a wide range of pressure and the concept of water shock tube”. *Fluid Phase Equilibria* 483 (2019), 182–188. old.
- [33] JM Winter és tsai. „Numerical investigation of 3D drop-breakup mechanisms using a sharp interface level-set method”. *11th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, TSFP 2019*. 2019.
- [34] Xiang Yu Hu és Boo Cheong Khoo. „An interface interaction method for compressible multifluids”. *Journal of Computational Physics* 198.1 (2004), 35–64. old.

- [35] Ami Harten. „Multiresolution algorithms for the numerical solution of hyperbolic conservation laws”. *Communications on Pure and Applied Mathematics* 48.12 (1995), 1305–1342. old.
- [36] Gergely Kristof. „Lecture notes for the subject of Computational Fluid Mechanics”. *Faculty of Mechanical Engineering of BME* (2021).
- [37] Nagy Dániel. *Command Line Pypytho Postprocessor for Bubble Dynamics*. 2021. URL: <https://github.com/nnagyd/Command-Line-Pvpython-Postprocessor> (elérés dátuma 2021. 10. 21.).
- [38] Gene M Amdahl. „Validity of the single processor approach to achieving large scale computing capabilities”. *Proceedings of the April 18-20, 1967, spring joint computer conference*. 1967, 483–485. old.
- [39] C. Rackauckas és Q. Nie. „Differentials.jl—a performant and feature-rich ecosystem for solving differential equations in Julia”. *Journal of Open Research Software* 5.1 (2017).

Köszönetnyilvánítás

Köszönet a BME Gépészmérnöki Kar, Hidrodinamikai Rendszerek Tanszékének a kezdeti szimulációkhoz szükséges számítási kapacitás biztosításáért. Köszönet *Dr. Hegedűs Ferenc* témavezetőnek az ötleteiért, javaslataiért és az elméleti segítségért. Továbbá köszönöm *Dr.-Ing. Stefan Adami* és a *Nanoshock* kutatócsoport (Technical University of München) együttműködését és segítségét az ALPACA használatában és a szuperszámítógép idő pályázatban. Köszönet a *Nanoshock* kutatócsoportnak az ALPACA új verziójához való, megjelenés előtti hozzáférés biztosítását. Köszönet a *Gauss Centre for Supercomputing*-nak a HPC infrastruktúra és a 300000 óra CPU idő biztosításáért. Az Innovációs és Technológiai Minisztérium UNKP-21-1 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alapról finanszírozott szakmai támogatásával készült.



NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI
ÉS INNOVÁCIÓS HIVATAL



Új Nemzeti
Kiválóság Program

6. Appendix

6.1. Változó felbontású analízis waveletekkel

Változó felbontású analízissel minden függvény felírható végtelen sok egyre finomabb felbontású wavelet sorösszegeként. Egy függvény $u(x)$ felbontható tehát waveletekkel mint

$$u(x) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{k \in \mathbb{Z}} d_k^{l_m} \Psi_k^{l_m}(x) \quad (6.1)$$

ahol $d_k^{l_m}$ a részlet és $\Psi_k^{l_m}(x)$ pedig egy wavelet, amit például a következő módon lehet képezni [35]

$$\Psi_k^{l_m}(x) = 2^{-l_m/2} \Psi(2^{l_m} x - k) \quad (6.2)$$

ahol $\Psi(x)$ az anyawavelet. A $d_k^{l_m}$ részlet pedig a következő módon határozható meg

$$d_k^{l_m} = \int_{\mathbb{R}} u(x) \Psi_k^{l_m}(x) dx. \quad (6.3)$$

Az adaptív MR algoritmus lényege, hogy azokon a helyeken ahol a részlet $d_k^{l_m}$ elenyésző, azaz kisebb mint a meghatározott küszöbérték, ott a tagokat teljesen elhanyagolhatjuk, ami így $u(x)$ függvény változó felbontású reprezentációját eredményezi.

6.2. Keller-Miksis egyenlet

A Keller-Miksis egyenlet egyetlen buborék akusztikus térbeni oszcillációját leíró közönséges differenciálegyenlet. A Keller-Miksis egyenlet alakja

$$\left(1 - \frac{\dot{R}}{c_L}\right) R \ddot{R} + \left(1 - \frac{\dot{R}}{3c_L}\right) \frac{3}{2} \dot{R}^2 = \left(1 + \frac{\dot{R}}{c_L} + \frac{R}{c_L} \frac{d}{dt}\right) \frac{(p_L - p_\infty(t))}{\rho_L}, \quad (6.4)$$

ahol $R(t)$ a buboréksugár, c_L a hangsebesség és ρ_L a folyadék sűrűsége. A végtelenben értelmezett nyomás tartalmazza a gerjesztést is [13],

$$p_\infty(t) = 1 + P_{A1} \sin(\omega_1 t) + P_{A2} \sin(\omega_2 t + \theta). \quad (6.5)$$

A numerikus megoldáshoz azonban az egyenlet dimenziótlan alakját használtam. A dimenziótlan alak és annak a levezetése megtalálható a szakirodalomban [4].

6.3. Beállítások és paraméterek

Ezen alfejezet a szimulációk során használt paramétereket mutatja táblázatos formában.

6.1. táblázat. A referencia beállításhoz használt algoritmusok és paraméterek, ezen beállításokat használtam minden 2 dimenziós szimuláció során.

Leírás	Használt beállítás
Riemann-megoldó	Roe Riemann-megoldója
Fluxus felosztási séma	Roe sémája
Határfelületi Riemann-megoldó	Linearizált megoldó
Időbeni integrálás	Harmadrendű TVD-Runge-Kutta
<i>level-set</i> újrainicializáció	Weno
<i>level-set</i> advector	Reconstruction Stencil
Cellák száma egy blokkban (IC)	16
Navier-Stokes egyenlet advekció tag	aktív
Navier-Stokes egyenlet gravitáció tag	nem aktív
Navier-Stokes egyenlet viszkozitás tag	aktív
Navier-Stokes egyenlet hővezetés tag	nem aktív
Navier-Stokes egyenlet felületi feszültség tag	aktív
Dimenziók száma	2

6.2. táblázat. A 3.1. alfejezetben az állóhullámok szimulációjához használt paraméterek és beállítások összefoglalása

Paraméter	Érték
Gerjesztési frekvencia	$f = 20 \text{ kHz}$
Hullámhossz	$\lambda = 81.25 \text{ mm}$
Nyomásamplitudó	$p_A = 0.1 \text{ bar}$
Áramlási tér	$81.25 \text{ mm} \times 40.62 \text{ mm}$
Blokkok száma	2×1
Szintek száma	$l_{\max} = 4$
Felbontás a 0. szinten	$32 \times 16 \text{ cella}$
Felbontás a max szinten	$512 \times 256 \text{ cella}$
MR algoritmus referenciák	$l_{\text{ref}} = 4, \varepsilon_{\text{ref}} = 0.01$

6.3. táblázat. A 3.2.5. alfejezetben a konvergenciavizsgálathoz használt paraméterek és beállítások összefoglalása.

Paraméter	Érték
Kezdeti buboréksugár	$R_0 = 20 \mu\text{m}$
Kezdeti buboréknyomás	$p_0 = 1 \cdot 10^5 \text{ Pa}$
Kezdeti buboréksűrűség	$\rho_0 = 1.002 \text{ kg/m}^3$
Gerjesztési frekvencia	$f = 20 \text{ kHz}$
Hullámhossz	$\lambda = 81.25 \text{ mm}$
Nyomásamplitudó	$p_A = 0.1 \text{ bar}$
Áramlási tér	$81.25 \text{ mm} \times 81.25 \text{ mm}$

6.4. táblázat. A 3.2.7. alfejezetben a nyomásamplitúdó változtatás során használt paraméterek és beállítások összefoglalása.

Paraméter	Érték
Kezdeti buboréksugár	$R_0 = 20 \mu\text{m}$
Kezdeti buboréknyomás	$p_0 = 1 \cdot 10^5 \text{ Pa}$
Kezdeti buboréksűrűség	$\rho_0 = 1.002 \text{ kg/m}^3$
Gerjesztési frekvencia	$f = 40 \text{ kHz}$
Hullámhossz	$\lambda = 40.62 \text{ mm}$
Nyomásamplitúdó	$p_A = 0.05 \text{ bar} - 1.6 \text{ bar}$
Áramlási tér	$40.62 \text{ mm} \times 20.31 \text{ mm}$
Szimmetria	kihasználva
Blokkok	2×1
Szintek száma	$l_{\text{max}} = 11$
Felbontás a 0. szinten	32×16
Felbontás a max szinten	65536×32768
MR algoritmus referenciák	$l_{\text{ref}} = 11, \varepsilon_{\text{ref}} = 0.01$
Minimum cellaméret	$0.62 \mu\text{m}$
Buborék/összes cellaszám	1634/25088

6.5. táblázat. A 3.2.8. alfejezetben a frekvencia változtatás során használt paraméterek és beállítások összefoglalása.

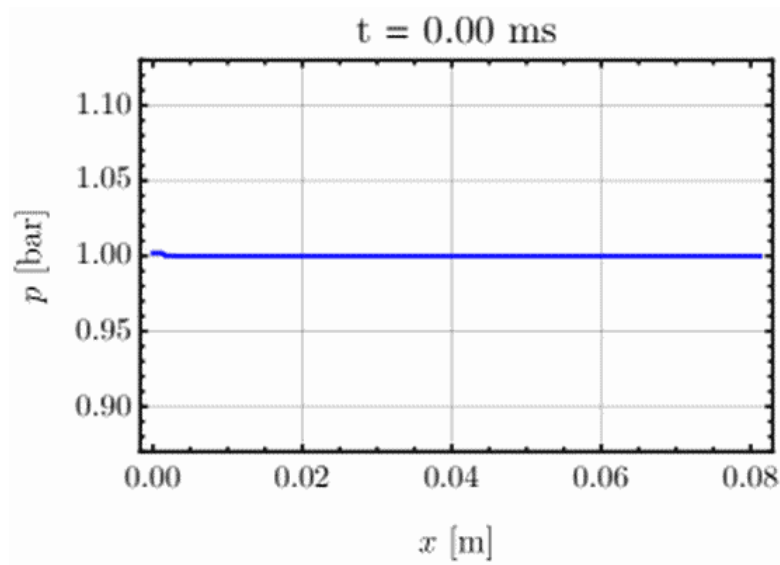
Paraméter	Érték
Kezdeti buboréksugár	$R_0 = 20 \mu\text{m}$
Kezdeti buboréknyomás	$p_0 = 1 \cdot 10^5 \text{ Pa}$
Kezdeti buboréksűrűség	$\rho_0 = 1.002 \text{ kg/m}^3$
Gerjesztési frekvencia	$f = 20 \text{ kHz} - 160 \text{ kHz}$
Nyomásamplitúdó	$p_A = 0.8 \text{ bar}$
Szimmetria	kihasználva
Blokkok	2×1
MR algoritmus referencia	$\varepsilon_{\text{ref}} = 0.01$
Minimum cellaméret	$a_{\text{min}} = 0.31 \mu\text{m}$
Buborék/összes cellaszám, N_b/N_Σ	7093/42752

6.6. táblázat. A háromdimenziós buborékszimuláció során használt paraméterek és beállítások.

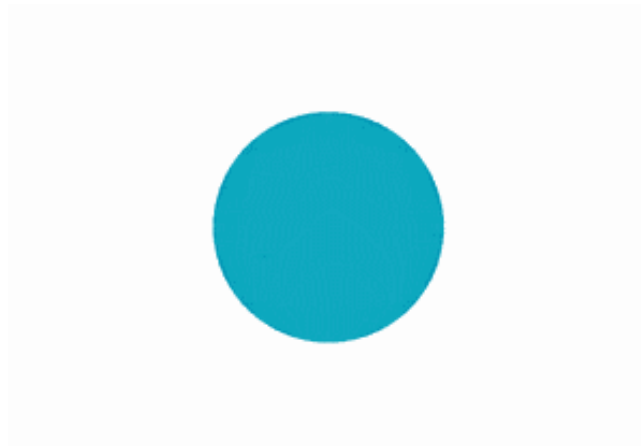
Paraméter	Érték
Kezdeti buboréksugár	$R_0 = 20 \mu\text{m}$
Kezdeti buboréknyomás	$p_0 = 1 \cdot 10^5 \text{ Pa}$
Kezdeti buboréksűrűség	$\rho_0 = 1.002 \text{ kg/m}^3$
Gerjesztési frekvencia	$f = 40 \text{ kHz}$
Hullámhossz	$\lambda = 40.62 \text{ mm}$
Nyomásamplitúdó	$p_A = 0.8 \text{ bar}$
Áramlási tér	$100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$
Szimmetria	kihasználva

6.4. Mellékletek

A mellékletek az ábrára kattintással lejátszhatók számítógépen az *Adobe Acrobat* pdf megtekintővel. A mellékletek elérhetők a dolgozathoz csatolt zip fájlban is.



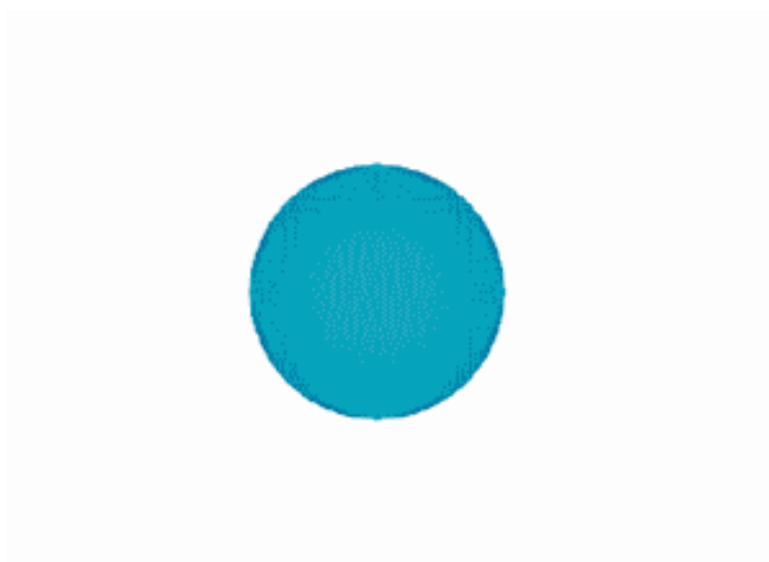
6.1. ábra. Első melléklet. Állóhullámok kialakulása.



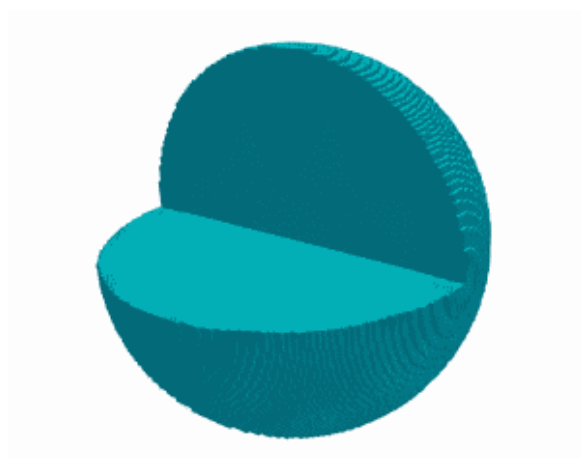
6.2. ábra. Második melléklet. Buborékoszcilláció $p_A = 0.8$ bar amplitúdón és $f = 20$ kHz frekvencián.



6.3. ábra. Harmadik melléklet. A buborék hatása az áramlási térre $p_A = 0.8$ bar amplitúdón.



6.4. ábra. Negyedik melléklet. Buborékoszcilláció $p_A = 0.8$ bar amplitúdón és $f = 20$ kHz frekvencián.



6.5. ábra. Ötödik melléklet. Buborékoszcilláció $p_A = 0.8$ bar amplitúdón 3 dimenzióban.