

Az ALPACA szoftvercsomag validációja nem gömbszimmetrikus buborékok felületi hullámainak a szimulációjára

Szerző: Nagy Dániel

Konzulens:

Dr. Hegedűs Ferenc (BME–HDS)

Dr.-Ing. Stefan Adami (TUM–AER)

2022. december 19.

36. OTDK Konferencia



Hidrodinamikai
Rendszerek
Tanszék



Új Nemzeti
Kiválóság Program

Technische
Universität
München



Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	6
1.1. Szonokémia	6
1.2. Kutatás célja	7
1.3. ALPACA	8
1.3.1. Tengelyszimmetria	8
1.3.2. Fázishatár	8
1.3.3. Numerikus háló	9
2. Gömbszimmetrikus eset	11
2.1. Keller-Miksis egyenlet	11
2.2. ALPACA modell	12
2.3. Posztprocesszálas	14
2.4. Validáció	15
2.4.1. Felbontás változtatása	16
2.4.2. Paraméterek változtatása	19
2.4.3. Értékelés	20
3. Nem gömbszimmetrikus eset	24
3.1. Nem gömbszimmetrikus buborékok modellezése	25
3.2. ALPACA modell	25
3.3. Posztprocesszálas	26
3.4. Szimmetriák	27
3.5. Beállítások hatása	29
3.5.1. Határfelületi Riemann-megoldó	29
3.5.2. Level-set újrainicializálási iterációk	30
3.5.3. Buborékfelbontás változtatása	32
3.6. Validáció I – kialakuló módusok	32
3.7. Validáció II – időgörbék összehasonlítása	35
4. Összefoglalás	41
4.1. Nehézségek	41
4.2. Gömb alakú buborékok	42
4.3. Nem gömb alakú buborékok	42

Absztrakt

Nem gömbszimmetrikus buborékok elsősorban a szonokémia tudományában jelennek meg. A szonokémia lényege a kémia folyamatok kihozatalának a növelése nagy intenzitású ultrahanggal. A módszer a kavitáció egyik speciális esetén, az akusztikus kavitáción alapul. Ennek lényege, hogy egy folyadék ultrahangos besugárzás során buborékok és buborékfelhők keletkeznek, amik 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. Akusztikusan gerjesztett gömbszimmetrikus buborékok egyszerűen leírhatók a Keller-Miksis egyenlettel [1], azonban a buborékok gömbi alakja is elveszhet a pulzálás közben, ami lényegesen megnehezíti a buborékok dinamikai modellezését.

Ebben a dolgozatban egyetlen ultrahanggal gerjesztett buborék felületének a viselkedését vizsgálom az ALPACA szoftvercsomag használatával. Ez a szoftver képes többfázisú, összehasonlítható áramlások szimulációjára, korszerű numerikus módszerek segítségével [2]. A két fázis együttes szimulációja a határfelület leírását igényli, azonban az ehhez használt algoritmusok sokszor csak heurisztikusak. Nem gömbszimmetrikus buborékok esetén azonban a határfelület pontos, fizikailag valós leírása szükséges, hiszen a határfelület a buborék pulzálása során folyamatosan változik. A gömbszimmetria elvesztése esetén a buborék alakja is rendkívüli jelentőséggel bír, hiszen egy esetleges buborékszétválás esetén ez határozza meg azt, hogy a buborék hány darabra esik szét.

Numerikus módszerek használata esetén a validáció egy nélkülözhetetlen eszköz, ez különösen igaz többfázisú hidrodinamikai szimulációk esetén. A cél valódi mérések eredményeinek a reprodukálása [3] az ALPACA segítségével, ezáltal garantálható az, hogy a szimuláció eredménye megfelel a valóságnak. A sikeres validáció után a paraméterek, mint például a buboréksugár és az akusztikus besugárzási frekvencia már szabadon állítható, ezáltal a numerikus szimulációkkal nagy mennyiségű, megbízható adatot lehet generálni, ami felhasználható lenne például a buborékszétválások jobb megértésére és pontos leírására.

A dolgozatban először bemutatom, hogy az ALPACA szoftver rendkívül jól működik gömbszimmetrikus buborékok szimulációjára esetén, majd a nem gömbszimmetrikus buborékok szimulációjára során fellépő nehézségek leírása következik. Továbbá bemutatom a validációhoz elengedhetetlen, a buborékfelület sorfejtésén alapuló kvantitatív összehasonlítást a szimuláció és a mérés között, illetve az ehhez elkészített saját posztprocesszálo programot.

Abstract

Non-spherical bubbles appear mainly in the science of sonochemistry. The essence of sonochemistry is to enhance the yield of chemical processes using high-intensity ultrasound. This method is based on a special case of cavitation, namely acoustic cavitation, whereby bubbles and bubble clouds are created during ultrasonic irradiation and start to pulsate radially when excited. During pulsation, the contraction can be so large that the temperature can reach thousands of Kelvins, inducing chemical reactions. Acoustically excited spherical bubbles can be simply described by the Keller-Miksis equation [1], but the spherical shape of the bubbles can be lost during the pulsation, which makes dynamic modelling of such bubbles considerably more difficult.

In this paper, the behaviour of the surface of a single acoustically excited bubble using the ALPACA software package is investigated. This software can simulate multi-phase compressible flows using state-of-the-art numerical methods [2]. The simulation of two phases together requires a description of the interface, but the algorithms used for this are often heuristic. However, for non-spherical bubbles, an accurate, physically realistic description of the interface is required since the interface is constantly changing during the bubble pulsation. As the spherical shape of the bubble is lost, the exact shape of the bubble is also of extreme importance, since it determines the number of pieces the bubble will break into in case of a bubble breakup.

When using numerical methods, validation is an essential tool, especially for multiphase hydrodynamic simulations. The aim is to reproduce the results of real measurements [3] using ALPACA, thus guaranteeing that the simulation results are accurate. After a successful validation, parameters such as the bubble radius and the acoustic irradiation frequency can be freely adjusted, allowing numerical simulations to generate large amounts of reliable data that could be used, e.g., to better understand and accurately describe bubble breakups.

In this thesis, it is first shown that the ALPACA software works extremely well for the simulation of spherically symmetric bubbles, followed by a description of the difficulties encountered in the simulation of non-spherical bubbles. Furthermore, the quantitative comparison between the simulations and the measurements is also presented, based on the series decomposition of the bubble surface, which is essential for validation. Finally, the proprietary postprocessing program developed for this purpose is discussed.

Jelölések

A dolgozatban használt jelölések

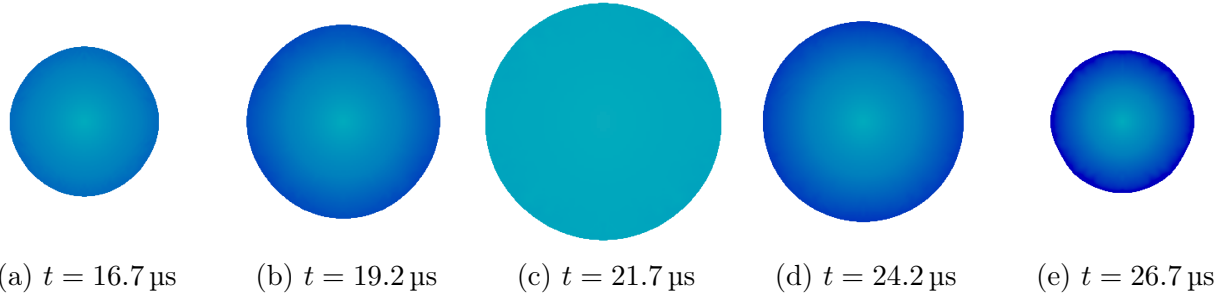
Jelölés	Megnevezés
a_0	cellaméret az l_0 szinten
$a_{\min}$	minimum cellaméret
c	hangsebesség
c_V	hőkapacitás állandó térfogaton
e	belső energia
f	akusztikus frekvencia
l_m	a változó felbontású háló m . szintje
l_{ref}	a változó felbontású háló referencia szintje
m_b	buboréktömeg
$\hat{m}_b$	dimenziótlan buboréktömeg
p	nyomás
p_0	léggöri nyomás
p_A	nyomásamplitúdó
p_b	buborék átlagos nyomása
p_∞	háttérnyomás
t	idő
x	radiális koordináta (tengelyszimmetrikus modell)
y	axiális koordináta (tengelyszimmetrikus modell)
y_0	buborék középpontja kezdetben
u	x irányú sebesség
v	y irányú sebesség
D_{cell}	cellák száma a buborékátmérő mentén
R	buboréksugár
$\tilde{R}$	ekvivalens buboréksugár
R_0	kezdeti buboréksugár
R_E	egyensúlyi buboréksugár
R_{spec}	specifikus gázállandó
T	hőmérséklet
T_b	buborék hőmérséklete
V_b	buborék térfogata
γ	hőkapacitások arány
ε_{l_m}	küszöbérték az l_m szinten
ε_{ref}	küszöbérték az l_{ref} szinten
λ	hullámhossz
ϕ	<i>level-set</i> függvény
ρ	sűrűség
ρ_0	folyadék kezdeti sűrűsége
ρ_b	buborék átlagos sűrűsége

1. Bevezetés

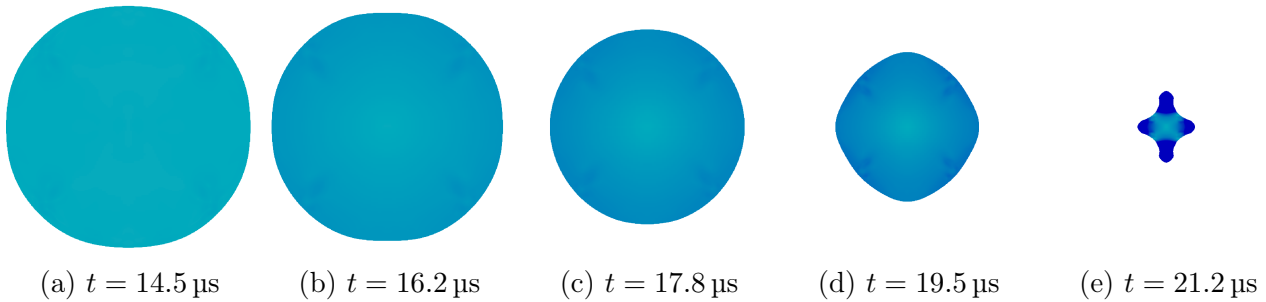
Buborékokkal számtalan helyen találkozunk a mindennapi életben, mindenki látott már széndioxid buborékokat szénsavas üdítőitalokban vagy fűjt szappanbuborékokat. Látszólag, ezek a buborékok a felületi feszültség miatt gömb alakúak, legalábbis amíg külső hatás nem éri őket. Elképzelhető azonban, hogy külső gerjesztés hatására a buborék gömbi alakja elveszik, ezzel akár szappanbuborék fújás során is találkozhatunk, amikor a szél belekap egy-egy buborékba és deformálja azokat. Amíg a buborékok gömb alakúak azok rendkívül egyszerűen modellezhetők. A gömbszimmetria lényege, hogy az állapotváltozók egyetlen koordinátával, a középponttól vett távolsággal leírhatók. Nem gömbszimmetrikus buborékok már nem írhatók le ilyen egyszerűen, ahhoz minimum két koordináta szükséges.

1.1. Szonokémia

A szonokémia egy kevésbé ismert terület, ahol buborékok nagy számban fordulnak elő. Egy folyadékban ultrahangos besugárzás hatására mikrométer méretű buborékok jönnek létre, ahol a szonokémia szempontjából fontos buborékok mérete jellemzően $1 - 10 \mu\text{m}$. Az ultrahang nem más, mint a nyomás magasfrekvenciás váltakozása. E változó nyomás hatására a folyadékban lévő buborékok pulzálni kezdenek, ahogyan az 1.1. ábrán is látható. A pulzálás során előfordulhat, hogy a buborék összeomlik, azaz a sugara és ezáltal a térfogata lényegesen lecsökken rövid idő alatt, mint az az 1.2. ábrán is megfigyelhető. A buborékösszeomlás során a nyomás és a hőmérséklet is lényegesen megemelkedik, ezt a jelenséget akusztikus kavitációnak hívják. Az 1.2. ábrán továbbá az is megfigyelhető, hogy a buborék az összeomlása során elveszíti a gömbszimmetrikus alakját.



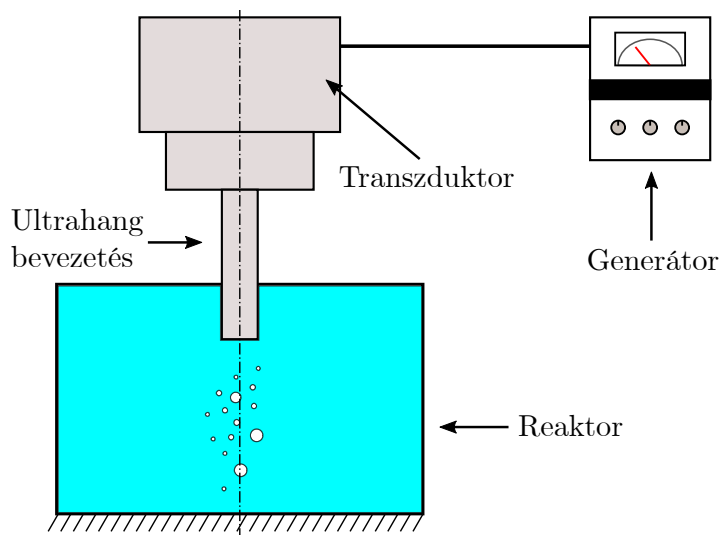
1.1. ábra. Egy buborék pulzálása ultrahang hatására ($R_E = 30 \mu\text{m}$, $f = 120 \text{ kHz}$, $p_A = 0.2 \text{ bar}$).



1.2. ábra. Egy buborék összeomlása a pulzálás során ($R_E = 30 \mu\text{m}$, $f = 120 \text{ kHz}$, $p_A = 1.5 \text{ bar}$).

A szonokémia lényege az akusztikus kavitáció felhasználása kémia folyamatok beindítására, és azok hatékonyságának a növelésére [4]. Számos potenciális alkalmazási lehetőség létezik, az

ultrahangos víztisztítástól [5, 6] a nano-részecske gyártáson át [7, 8] egészen a gyógyszeriparig [9, 10]. A szonokémia fontos a „zöld kémia” (*green chemistry*) területén is. A „zöld kémia” lényege olyan kémia folyamatok tervezése, ahol csak minimális mennyiségű veszélyes alapanyag kerül felhasználásra és a káros anyag kibocsátás is minimális [11]. A szonokémia ennek rendkívül jól megfelel, hiszen a kiindulási anyagok jellemzően nem veszélyesek és a kémiai átalakuláshoz felhasznált energia is minimális [12].



1.3. ábra. Egy szonokémia reaktor sematikus felépítése.

A korábban ismertetett alkalmazások, például a nano-részecske gyártás vagy a víztisztítás szonokémiai reaktorokban valósul meg. Egy szonokémia reaktor egy generátorból, egy transzduktorból és egy tartályból (reakciótérből) áll. A transzduktor teljesítményét a bevezetésen keresztül szokás fókuszálni, ami közvetlenül a folyadékba vezeti az akusztikus hullámokat [13]. Egy szonokémiai reaktor sematikus felépítése az 1.3. ábrán látható. A transzduktor sugárzó felülete és a tartály fala között akusztikus állóhullám alakul ki, hiszen a transzduktor által kibocsátott hullám a falon visszaverődik. A visszavert hullám és a fal felé haladó hullám összege pedig egy állóhullámot ad, ilyen állóhullámok szimulációja megtalálható a tavalyi TDK dolgozatomban [14]. Amennyiben az állóhullám amplitúdója elég nagy akkor az állóhullám duzzadóhelyei környékén buborékok és buborékfelhők jönnek létre. Egy állóhullám duzzadóhelyei azon pontok, ahol a nyomásváltozás amplitúdója a legnagyobb.

A szonokémiában a legfontosabb paraméterek az akusztikus besugárzáshoz használt frekvencia (f) és a nyomásamplitúdó (p_A), ami az akusztikus állóhullám nyomásának az amplitúdóját jelenti. Ezen paraméterek azért fontosok, mert könnyen állíthatók egy szonokémiai reaktorban a generátor megfelelő hangolásával. Fontos jellemző a létrejött buborékok egyensúlyi sugara R_E . Ez a buborék sugara nyugalmi állapotban, amikor azt semmilyen gerjesztés nem éri. Egy reaktorban az egyensúlyi buboréksugár nem állítható, hiszen a buborékok folyamatosan jönnek létre, olvadnak össze és esnek szét.

1.2. Kutatás célja

A kutatásom lényege nem gömbszimmetrikus buborékok CFD szimulációja és ezáltal azok jobb megértése. Ehhez egy olyan szimulációs környezet létrehozása szükséges, amivel megbízhatóan szimulálhatók nem gömbszimmetrikus buborékok. A probléma nehézsége, hogy a szakirodalomban nem találni jelenleg olyan validált CFD megoldót, ami alkalmas lenne egy buborék ha-

tárfelületén megjelenő felületi hullámok szimulációjára. A dolgozatban az ALPACA (**A**daptive **L**evel-**s**et **P**Arallel **C**ode **A**lpaca) programcsomagot használok, amit a *Technische Universität München*-en fejlesztett ki a *Nanoshock* kutatócsoport. Kétfázisú CFD szimulációk esetén a validáció különösen fontos, hiszen a fázishatár modellezése rendkívül sok problémát okozhat. Például korábbi szimulációk során problémát okozott a buborék tömegének a nem fizikai disszipációja, illetve a határfelületen megjelenő mesterséges zavarás ami a négyzetes hálóból adódik [15].

A szakirodalom jelenlegi állása szerint a buborékok szétesésére nincsen megbízható modell. Buborékok gömbi alakjának a stabilitása meghatározható amennyiben a radiális oszcillációt leíró egyenleteket kiegészítjük a felületi hullámokkal [16]. Ezen modellek nem adnak információt arról, hogy mi történik a stabilitásvesztés után, azonban egy szonokémiai reaktor megbízható szimulációjához fontos a buborékok szétesésének a modellezése, hiszen ez a buborékok keletkezésének egy fontos módja. Amennyiben sikerül az ALPACA szoftvercsomagot validálni nem gömbszimmetrikus buborékszimulációkra, akkor a buborékszétesésekről is pontosabb képet kaphatnánk. A dolgozatban az ALPACA szimulációk eredményét valódi mérésekkel és más egyszerűsített modellekkel (lásd Keller-Miksis egyenlet, 2.1. fejezet) hasonlítom össze. A cél annak a meghatározása, hogy milyen beállítások és paraméterek mellett használható az ALPACA akusztikusan gerjesztett buborékok szimulációjára.

1.3. ALPACA

Az ALPACA szoftvercsomag egy párhuzamos architektúrára (szuperszámítógépekre) készült áramlástani szimulációs eszköz. A szoftver már több alkalommal is sikeresen lett alkalmazva gömb alakú buborékok szimulációjára [15, 17, 18]. Az ALPACA működését és használatát már korábbi TDK dolgozatban és szemináriumon részletesen ismertettem [14, 19]. Jelenleg csak a dolgozat megértéséhez szükséges részleteket mutatom be.

Az ALPACA alapvetően egy direkt numerikus szimulációs (DNS) eszköz, tehát a Navier-Stokes egyenletek közvetlenül kerülnek megoldásra, turbulencia modellezés nélkül. A megoldó korszerű véges térfogat módszereken alapul, tehát egy numerikus háló létrehozása szükséges. A háló cellái közötti fluxusok egy-egy Riemann-probléma megoldásával kerülnek kiszámításra. A két fázis miatt, a fázishatár nyomonkövetése szükséges.

1.3.1. Tengelyszimmetria

Az ALPACA lehetőséget ad tengelyszimmetrikus modell használatára, amit a dolgozat során végig alkalmazok is. A tengelyszimmetria lényege, hogy a háromdimenziós tér a szimmetria miatt egy r radiális és egy z axiális koordinátával leírható. A szokásos jelölésektől eltérően az ALPACA-ban a szimmetriatengely mindig az y -tengely, így az axiális koordináta az y . A szimmetriatengelytől vett távolságot pedig az x koordináta adja meg, tehát ez a radiális koordináta. A következőkben az ALPACA által használt jelölésekkel összhangban a tengelyszimmetrikus modellben az x és az y koordinátákat használok, azonban fontos megjegyezni, hogy ezek egy hengeres koordináta rendszer radiális és axiális koordinátái.

1.3.2. Fázishatár

A szimulációkhoz szükséges a két különböző fázis (gáz és folyadék) megkülönböztetése. A fázishatár meghatározásához az ALPACA egy $\phi(x, y, z)$ *level-set* függvényt használ [2]. A *level-set* függvény lényege, hogy a fázishatárt a $\phi(x, y, z) = 0$ implicit egyenlet jelöli ki, ahol $\phi(x, y, z)$ egy „sima”, Lipschitz folytonos függvény minden változójában [20]. Azon cellák, ahol $\phi(x, y, z) > 0$

az első fázishoz és azon cellák ahol $\phi(x, y, z) < 0$ a második fázishoz tartoznak. A fázishatár kezdeti megadása egy gömb alakú buborék esetén egy tengelyszimmetrikus szimulációban a különböző módon lehetséges

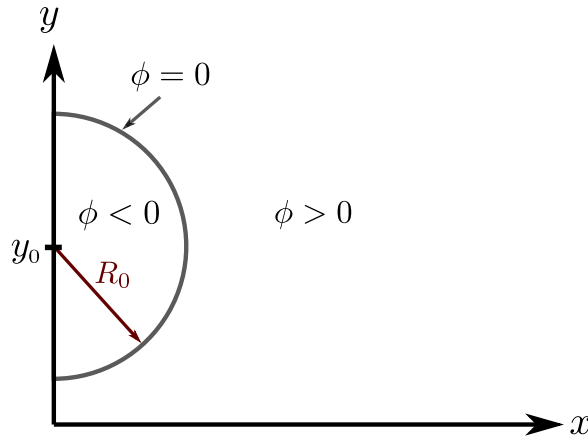
$$\phi(x, y) = -R_0 + \sqrt{x^2 - (y - y_0)^2}, \quad (1.1)$$

ahol R_0 a kezdeti buboréksugár és y_0 a buborék középpontjának az axiális koordinátája. Az 1.4. ábrán látható egy példa egy buborék kezdeti megadására az 1.1. egyenlet szerint. A kezdeti megadás után az ALPACA már automatikusan nyomonköveti a fázishatár mozgását a következő transzport egyenlet megoldásával

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u}_\phi \cdot \nabla \phi = 0, \quad (1.2)$$

ahol $\mathbf{u}_\phi$ a határfelület mozgási sebessége, ami határfelületi Riemann-megoldóval számolható. Az ALPACA lehetőséget ad több határfelületi Riemann-megoldó alkalmazására is, a dolgozat során először a legegyszerűbb linearizált határfelületi Riemann-megoldót használtam. Az 1.2. parciális differenciálegyenlet megoldás során a fázishatár közelében a derivált néha túl meredekké válik (azaz a ϕ level-set függvény túl gyorsan változik) és ezáltal a ϕ függvény megfelelő simasága elveszik. A probléma megoldásához a level-set újrainicializációja szükséges minden időlépés után [21, 22]. A level-set újrainicializáció egy iteratív eljárás ami a level-set függvényt kisimítja, az ehhez használt megoldó séma és az iterációs lépések száma is állítható az ALPACA-ban.

A fázishatártól távol a level-set abszolút értéke maximalizálásra kerül, hiszen túl nagy ϕ értékek problémát okozhatnak a szimulációk során a véges számábrázolási pontosság miatt. A dolgozat során az alapértelmezett $|\phi(x, y)|_{\max} = 8$ level-set levágási értéket használom.



1.4. ábra. Egy tengelyszimmetrikus buborék leírása a level-set függvénnyel az 1.1. egyenlet szerint. A szimmetriatengely az y tengely.

1.3.3. Numerikus háló

Az ALPACA teljesen automatikusan készít változó felbontású (*multiresolution*) hálót, felhasználói szinten minimális ráhatás van erre. Az automatikus hálózás lényege, hogy minden nem elhanyagolható részlet felbontásra kerül, ehhez az elhanyagolható részlet matematikai definíciója szükséges, aminek az alapjait a Wavelet-analízis adja meg.

A változó felbontású háló m . felbontású szintjét, jelölje l_m . Az l_0 szinten lévő háló, a felhasználó által beállított oldalhosszúságú négyzetekből (3D-ben kockákban) áll. Ha egy l_0 szinten lévő cella nem elhanyagolható részleteket tartalmaz, akkor az négy további négyzetre lesz felosztva az l_1 szinten és így tovább a magasabb szintekre. Az 1.5. ábrán látható egy az l_0

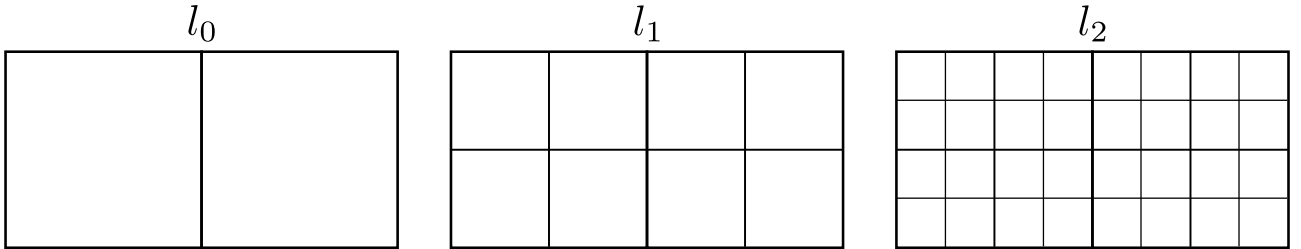
szinten 2×1 cellából álló kezdeti háló továbbosztása az l_1 és l_2 szinteken. Definiálható továbbá a *részlet* d^{l_m} , mint [23]

$$d^{l_m} = u_{l_{m+1}} - u_{l_m} \quad (1.3)$$

ahol u_{l_m} az u megmaradó változó értéke l_m szinten és $u_{l_{m+1}}$ az eggyel magasabb l_{m+1} szinten vett érték. A d^{l_m} részlet tehát azt adja meg, hogy a felbontás növelése mennyire járul hozzá az u megmaradó változó minél pontosabb reprezentációjához. Egy részlet elhanyagolható, ha

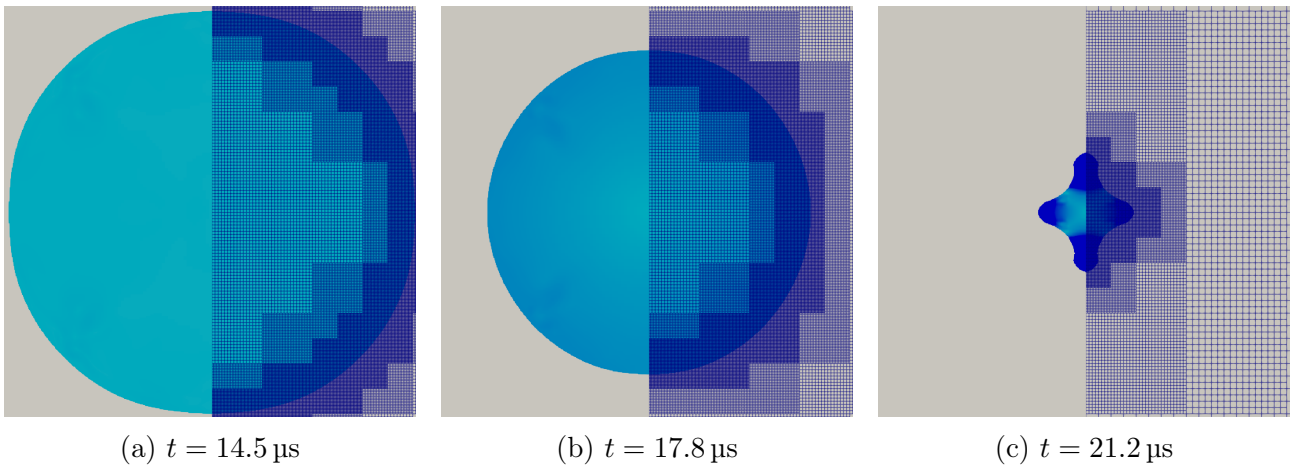
$$||d^{l_m}|| < \varepsilon_{l_m} \quad (1.4)$$

ahol ε_{l_m} egy szintenkénti küszöbérték. Az ALPACA változó felbontású algoritmus a hálót ott finomítja, ahol a d^{l_m} részlet nem elhanyagolható, ekkor a felbontás növelése érdemileg befolyásolja az u megmaradó változó pontosságát. Az ε_{l_m} szintenkénti küszöbérték az l_{ref} szinten megadott ε_{ref} referencia küszöbérték alapján lesz kiszámolva, úgy, hogy a módszer konvergens legyen [24]. Felhasználóként, mindössze az l_{ref} , ε_{ref} és az l_{max} maximum felbontási szint megadás szükséges. Akusztikusan gerjesztett buborék szimulációjához korábbi tapasztalataim szerint az $\varepsilon_{\text{ref}} = 0.01$ és $l_{\text{ref}} = l_{\text{max}}$ használata megfelelő [14].

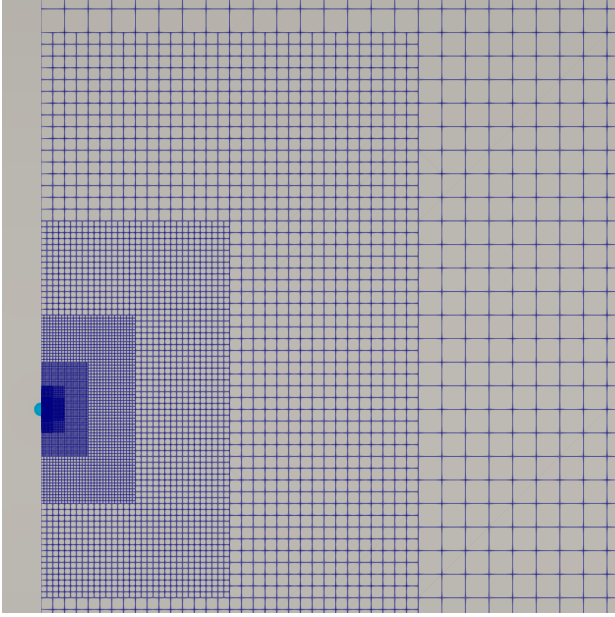


1.5. ábra. 2×1 kiindulási cella továbbosztása a felbontási szintek számának a növelésével.

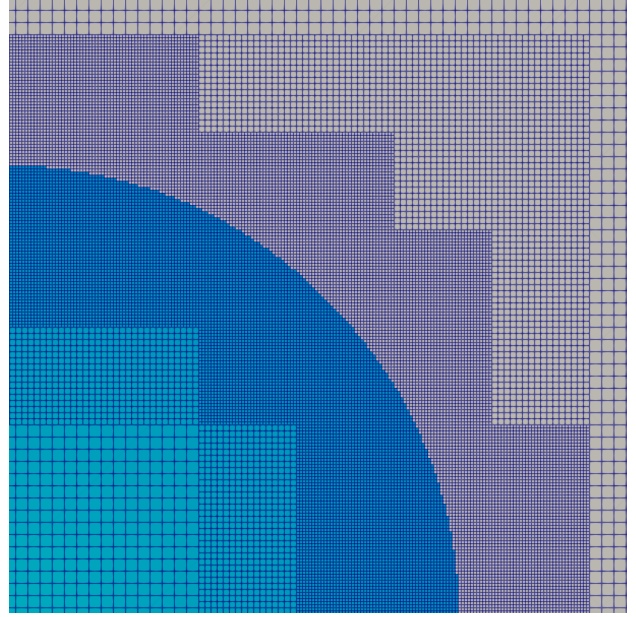
Buborékszimulációk során a fázishatár mindig a legnagyobb felbontási szinten lesz felbontva, hiszen a fázishatárnál a level-set függvény gyorsan változik. A fázishatáron kívül ilyen magas felbontás nem szükséges, mivel a buborékon belül és a körülvevő folyadéokban az állapotváltozók nem változnak hirtelen. Egy buborék és környezetének a numerikus hálója látható az 1.7. ábrán. Megfigyelhető, hogy a fázishatár környékén találhatók a legkisebb cellák. A minimális méretű cella oldalhossza a_{min} , ez pontosan meghatározható a kezdeti l_0 szintű háló és az l_{max} maximum felbontás ismeretében.



1.6. ábra. A buborék hálózásának a változása egy buborékösszeomlás során ($R_E = 30 \mu\text{m}$, $f = 120 \text{ kHz}$, $p_A = 1.5 \text{ bar}$).



(a) A háló a buborék környezetében



(b) A háló a fázishatárnál

1.7. ábra. A buborék környezetének és a buborék fázishatárának a változó felbontású hálója

A változó felbontású háló időlépésről időlépésre is változik, teljesen automatikusan, ahogy az 1.6. ábrán is látható. Az ábrákon megfigyelhető, hogy a buborék fázishatára végig a lehető legkisebb cellákkal kerül felbontásra, a fázishatártól távolodva viszont egyre nagyobb cellák lesznek használva. Nagyobb cellák használata csökkenti a cellák összesített számát, ezáltal gyorsabbá téve a szimulációt.

2. Gömbszimmetrikus eset

Ebben a fejezetben az ALPACA megoldó validálásra kerül gömb alakú buborékok radiális oszcillációira. A validációhoz a Keller-Miksis egyenletet használok fel, ami feltételezi, hogy a buborék gömb alakú. Több különböző paraméterkombináció mellett végzek szimulációkat, hogy meghatározzam, hogy az ALPACA mely esetekben használható.

2.1. Keller-Miksis egyenlet

A Keller-Miksis egyenlet egyetlen buborék sugár irányú oszcillációját írja le. A Keller-Miksis egyenlet feltételezi, hogy

- a buborék gömb alakú és
- a buborékban a nyomás és a hőmérséklet homogén.

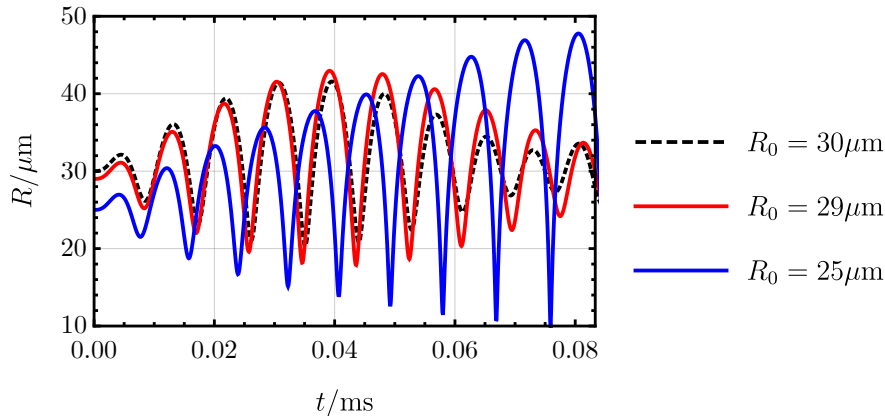
Az egyenlet felírható mint [1],

$$\left(1 - \frac{\dot{R}}{c}\right) R \ddot{R} + \left(1 - \frac{\dot{R}}{3c}\right) \frac{3}{2} \dot{R}^2 = \left(1 + \frac{\dot{R}}{c} + \frac{R}{c} \frac{d}{dt}\right) \frac{(p - p_\infty(t))}{\rho}, \quad (2.1)$$

ahol $R = R(t)$ a buboréksugár, c a hangsebesség a folyadékban, p a folyadék nyomása és ρ a folyadék sűrűsége. A gerjesztést a végtelenben értelmezett nyomás tartalmazza,

$$p_\infty(t) = p_A \sin(2\pi f \cdot t), \quad (2.2)$$

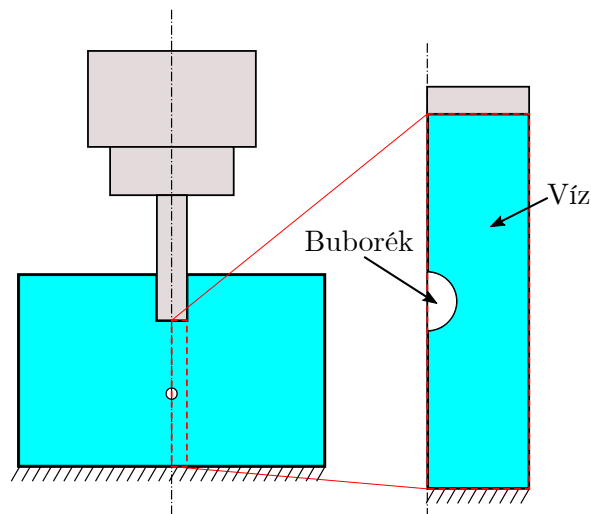
ahol a korábban ismertettek szerint p_A a gerjesztés amplitúdója és f pedig a frekvenciája. A numerikus megoldáshoz azonban az egyenlet dimenziótlan alakját használtam. A dimenziótlan alak és annak a levezetése megtalálható a szakirodalomban [25]. A Keller-Miksis egyenlet érzékeny a paraméterekre és a kezdeti feltételekre, azaz a paraméterek kis megváltoztatása egy idő után lényeges különbségeket eredményez. A 2.1. ábrán látható a Keller-Miksis egyenlet megoldása vízben – különböző kezdeti feltételekkel – az ábrán látható, hogy már $5\mu\text{m}$ kezdeti eltérés is lényegesen különböző viselkedést eredményez.



2.1. ábra. Buboréksugár az idő függvényében különböző kezdeti buboréksugarak mellett. ($f = 120\text{ kHz}$, $p_A = 0.2\text{ bar}$)

2.2. ALPACA modell

Gömbszimmetrikus buborékok szimulációjához használt modell rendkívül egyszerű ALPACA-ban. Amíg a buborék gömb alakú marad, a tengelyszimmetria egyértelműen kihasználható. Az ALPACA-ban a szimmetriatengely mindig az y -tengely, a tengelyszimmetrikus modell előnye, hogy ez a teljes 3D-hez képest lényegesen kevesebb számítást igényel. A 2.2. ábrán látható módon a reaktortérből a pirossal jelölt tengelyszimmetrikus rész kivágásra kerül, a szimuláció mindössze ezen tartományban kerül elvégzésre. Kezdetben egyetlen gömb alakú buborék kerül az áramlási térbe, a gömb alakú buborék az ábrán látható félkör y tengely körüli forgatásával jön létre.



2.2. ábra. A teljes reaktor és a szimulációs tartomány.

Állapotegyenletek

A nyomás és a sűrűség közötti kapcsolatot az állapotegyenlet adja meg. A szimulációk során a merev gáz állapotegyenletet használok a folyadék és a buborékban lévő gáz modellezésére is. A merev gáz állapotegyenlet [26, 27]

$$p = (\gamma - 1)\rho e - p_\infty \quad (2.3)$$

ahol p a nyomás, e a belső energia, ρ a sűrűség, γ a specifikus hőkapacitások aránya és p_∞ a háttérnyomás. A vízre a merev gáz állapotegyenlet a következő módon paraméterezhető [18]

$$\gamma = 4.4 \quad \text{és} \quad p_\infty = 6 \cdot 10^8 \text{ Pa}. \quad (2.4)$$

A hangsebesség ekkor a következő módon számítható,

$$c = \sqrt{\gamma \frac{p_0 + p_\infty}{\rho_0}}. \quad (2.5)$$

A merev gáz állapotegyenlet $p_\infty = 0$ esetén az ideális gáz állapotegyenletét adja vissza, felhasználva, hogy $e = c_V T$

$$p = \underbrace{(\gamma - 1)c_V}_{=R_{\text{spec}}} T \rho, \quad (2.6)$$

ahol T a hőmérséklet, c_V a hőkapacitás állandó térfogaton és R_{spec} a specifikus gázállandó. Ennek megfelelően a buborékban lévő gázra használt paraméterek

$$\gamma = 1.4 \quad \text{és} \quad p_\infty = 0 \text{ Pa}. \quad (2.7)$$

Peremfeltételek

A peremfeltételek helyes meghatározása rendkívül fontos ahhoz, hogy valós eredményeket kapjunk. Ahogyan a 2.2. ábrán látható, az északi oldalon kerülnek bevezetésre az áramlási térbe az akusztikus hullámok, ezt a szimulációban egy időben változó peremfeltételként lehet figyelembe venni. A déli oldalt egy fal helyezkedik el, ami az északi oldalon kibocsátott hullámokat tökéletesen visszaveri és ezáltal egy állóhullám jön létre az áramlási térben. Tekintettel arra, hogy a használt folyadék viszkozitása kicsi, a viszkozitásból adódó veszteségek és ezáltal az akusztikus hullámok csillapodása elhanyagolható. Így nincs is szükség az északi oldalon időben változó peremfeltétel alkalmazására, az lecserélhető egy falra, hogyha az áramlási térben az állóhullám kezdeti feltételként megadásra kerül.

Az nyugati oldal a szimmetriatengely, tehát ott szimmetria peremfeltétel kerül alkalmazásra. Feltételezve, hogy a keleti oldal a buboréktól elég távol van, ott az észak-déli irányban kialakuló állóhullám már zavartalan, tehát x irányban a változások elhanyagolhatók. Korábbi TDK dolgozatom eredményei szerint ez a feltételezés igaz, a buboréktól távol az akusztikus állóhullám zavartalan [14], így a zero-gradiens peremfeltétel jól használható a keleti oldalon.

Továbbá a level-set viselkedését a peremen, azaz a level-set peremfeltételeket is meg kell határozni. A level-set függvény csak a buborék környékén változik, a buboréktól távol a level-set levágás miatt az egy konstans értéket vesz fel. Ennek megfelelően az északi, déli és keleti peremen a zero-gradiens level-set peremfeltétel kerül alkalmazásra. A nyugati peremen pedig a szimmetria level-set peremfeltétel kerül előírásra.

Kezdeti feltételek

Az áramlási térben az akusztikus állóhullám kezdeti feltételként előírható. Feltételezzük, hogy

1. az áramlási tér hossza a hullámhossz egész számú többszöröse,
2. a folyadék viszkozitása elhanyagolható,
3. a sűrűségváltozás elhanyagolható a sebesség és a nyomás változásához képest valamint
4. a sebesség az állóhullámban lényegesen kisebb a hangsebességnél.

Ekkor az állóhullám nyomás, sűrűség és sebesség függvénye a következő módon írható fel [14]

$$p(t, y) = p_0 + p_A \sin(2\pi f \cdot t) \cos\left(2\pi \frac{f}{c} \cdot y\right), \quad (2.8)$$

$$\rho(t, y) = \rho_0 + \frac{p_A}{c^2} \sin(2\pi f \cdot t) \cos\left(2\pi \frac{f}{c} \cdot y\right), \quad (2.9)$$

$$v(t, y) = -\frac{p_A}{c\rho_0} \cos(2\pi f \cdot t) \sin\left(2\pi \frac{f}{c} \cdot y\right), \quad (2.10)$$

ahol p_0 a légköri nyomás, p_A a nyomásamplitúdó, f a frekvencia, c a hangsebesség, ρ_0 a folyadék sűrűsége nyugalmi helyzetben és v az y irányú sebesség. A 2.8.–2.10. egyenletek alapján meghatározhatók a kezdeti feltételek a folyadékban

$$p(0, y) = p_0, \quad (2.11)$$

$$\rho(0, y) = \rho_0, \quad (2.12)$$

$$u(0, y) = 0 \quad \text{és} \quad (2.13)$$

$$v(0, y) = -\frac{p_A}{c\rho_0} \sin\left(2\pi \frac{f}{c} \cdot y\right). \quad (2.14)$$

Feltételezve, hogy a buborék egyensúlyi helyzetben van, az abban lévő gáz nyomása a körülvevő folyadék nyomásából és a felületi feszültségből adódik. Gömb alakú buborék esetén az egyensúlyi helyzetben lévő buborék nyomása

$$p_b = p_0 + \frac{2\sigma}{R_E}, \quad (2.15)$$

ahol σ a felületi feszültség és R_E az egyensúlyi buboréksugár. Ha p_b ismert, akkor a 2.6. állapotegyenlet felhasználásával kiszámítható az egyensúlyi buboréksűrűség mint,

$$\rho_b = \frac{p_b}{(\gamma - 1)c_V T_b} \quad (2.16)$$

ahol T_b a buborék hőmérséklete.

2.3. Posztprocesszálas

A buborékot leíró legfontosabb változó a buboréksugár R . Azonban a legtöbb szimuláció során a buborék nem marad tökéletesen gömb alakú (lásd az 1.2. ábrát), így a buborék nem írható le egyetlen sugárral. A buboréksugár helyett az ekvivalens buboréksugár $\tilde{R}$ kerül bevezetésre.

Az ekvivalens buboréksugár alatt azt az $\tilde{R}$ sugarat értjük, amely $\tilde{R}$ sugarú gömb térfogata megegyezik a buborék valós térfogatával. Azaz,

$$\frac{4}{3}\tilde{R}^3\pi = V_b \quad (2.17)$$

ahol V_b a nem gömbi buborék térfogata. Az egyenlet átrendezésével az ekvivalens buboréksugár egyszerűen kiszámítható,

$$\tilde{R} = \sqrt[3]{\frac{3V_b}{4\pi}}. \quad (2.18)$$

A következő lépés a V_b buboréktérfogat meghatározása. Tekintettel arra, hogy a 3 dimenziós buborékot az y tengely körüli forgatás után kapjuk meg, az i . cellához tartozó térfogat a következő módon számolható, amennyiben a cellák mérete elég kicsi

$$V_i = 2x_i\pi \cdot a_i^2, \quad (2.19)$$

ahol x_i az i . cella középpontjának x koordinátája és a_i az i . cella oldalhossza. A teljes buborék térfogata pedig

$$V_b = \sum_{i \in \text{bub.}} V_i = 2\pi \sum_{i \in \text{bub.}} x_i \cdot a_i^2, \quad (2.20)$$

ahol i a buborékon belül lévő cellákon fut végig. A buboréksugáron kívül fontos mennyiség a buboréktömeg, hiszen a véges felbontású numerikus háló miatt a buborék határa pontatlanul kerül ábrázolásra, ami a buborék össztömegének nem fizikai disszipációjával járhat. A buboréktömeg a következő módon számolható

$$m_b = \sum_{i \in \text{bub.}} V_i \cdot \rho_i, \quad (2.21)$$

ahol ρ_i az i . cella sűrűsége. A következőkben a dimenziótlan buboréktömeg kerül használatra. A dimenziótlan buboréktömeg $\hat{m}_b$ a következő módon definiálható,

$$\hat{m}_b = \frac{m_b}{m_0}, \quad (2.22)$$

ahol az m_0 a kezdeti buboréktömeg, így $\hat{m}_b$ jelentése, hogy a buborék kezdeti tömegének mekkora hányada maradt meg. A posztprocesszááláshoz egy *python* alapú *Paraview* program készült, ami munkaállomáson vagy szuperszámítógépen is futtatható parancssorból, így nem szükséges a szimuláció kimeneti nyers adatait letölteni. A posztprocesszááló program elérhető GitHubon [28].

2.4. Validáció

Az ALPACA szimulációk validációjához a 2.1. fejezetben leírt Keller-Miksis egyenletet használom. A cél először annak a meghatározása, hogy milyen felbontású szimuláció szükséges ahhoz, hogy a buborék radiális oszcillációját megfelelő pontossággal szimuláljuk. A szimulációk a SUPERMUC-NG szuperszámítógépen lettek futtatva, minden futtatáshoz 24 CPU mag lett felhasználva.

2.4.1. Felbontás változtatása

A felbontás alapvetően két módon változtatható az ALPACA-ban. Legegyszerűbben a felbontási szintek maximális számának, azaz $l_{\max}$ -nak a növelésével érhető el, ennek előnye, hogy a felbontás csak a buborék felületének a közelében kerül növelésre, a buboréktól távoli cellaméret változatlan marad. A másik lehetőség a kezdeti háló finomítása, ez azonban összességében több cellát eredményez, hiszen a buboréktól távol eső részeken is finomabb hálót kapunk. Korábbi TDK dolgozatom eredményei alapján a két hálófinomítási eljárás ugyanolyan eredményt ad [14]. A következőkben a felbontási szintek maximális számának $l_{\max}$ -nak a növelésével finomítom a hálót. Az $l_{\max}$ növelése egy szinttel a legkisebb cellaoldalhosszt megfelelezi.

A felbontás egyetlen fontos mennyiséggel a buborék cellafelbontással (D_{cell}) jellemezhető. A buborék cellafelbontás (egyszerűbb szóval buborékfelbontás) azon cellák számát adja meg, amivel a kezdeti buborék felbontásra kerülne az átmérő mentén, ha a teljes buborék a legkisebb oldalhosszúságú cellával kerülne felbontásra, azaz

$$D_{\text{cell}} = \frac{2R_0}{a_{\min}}, \quad (2.23)$$

ahol R_0 a kezdeti buboréksugár és $a_{\min}$ a minimum oldalhosszúságú cella mérete. D_{cell} nem feltétlenül egyezik a buborékátmérő mentén lévő cellák valós számával, hiszen előfordulhat, hogy a buborékon belül, a fázishatártól távolabb, nagyobb méretű cellák kerülnek alkalmazásra, ahogy az 1.7. ábrán is látszik. Mindezek ellenére, mint látni fogjuk a D_{cell} ily módon vett definíciója bizonyul a leghasznosabbnak.

A felbontás változtatásának a hatása egy referencia szimuláción keresztül kerül bemutatása. A referencia eset úgy lett megválasztva, hogy a buborék a szimuláció során gömb alakú maradjon, ezáltal a Keller-Miksis egyenlettel közvetlenül összehasonlítható legyen. Továbbá fontos, hogy a nagyobb felbontású szimulációk is belátható időn belül lefussanak. A választott paramétereket és megoldó beállításokat a 2.1. táblázat foglalja össze. A szimuláció az akusztikus gerjesztés 10 periódusán keresztül tart és minden periódusban 50 időlépés kerül elmentésre.

2.1. táblázat. Referencia szimuláció paraméterei és beállításai

Leírás	Beállítás
Kezdeti és egyensúlyi buboréksugár	$R_0 = R_E = 30 \mu\text{m}$
Akusztikus gerjesztési frekvencia	$f = 120 \text{ kHz}$
Akusztikus gerjesztési nyomásamplitúdó	$p_A = 0.2 \text{ bar}$
Környező nyomás	$p_0 = 1 \text{ bar}$
Víz sűrűsége	$\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$
Merev gáz állapotegyenlet paraméterei vízre	2.4. egyenlet szerint
Merev gáz állapotegyenlet paraméterei levegőre	2.7. egyenlet szerint
Kezdeti feltételek	2.11.–2.16. egyenletek szerint
Kezdeti háló	16×48 cella
Áramlási tér mérete	$4.517 \text{ mm} \times 13.541 \text{ mm}$
Kezdeti level-set függvény	1.1. egyenlet szerint, ahol $y_0 = \lambda/2$

2.2. táblázat. Különböző felbontások a gömbszimmetrikus eset validációjához.

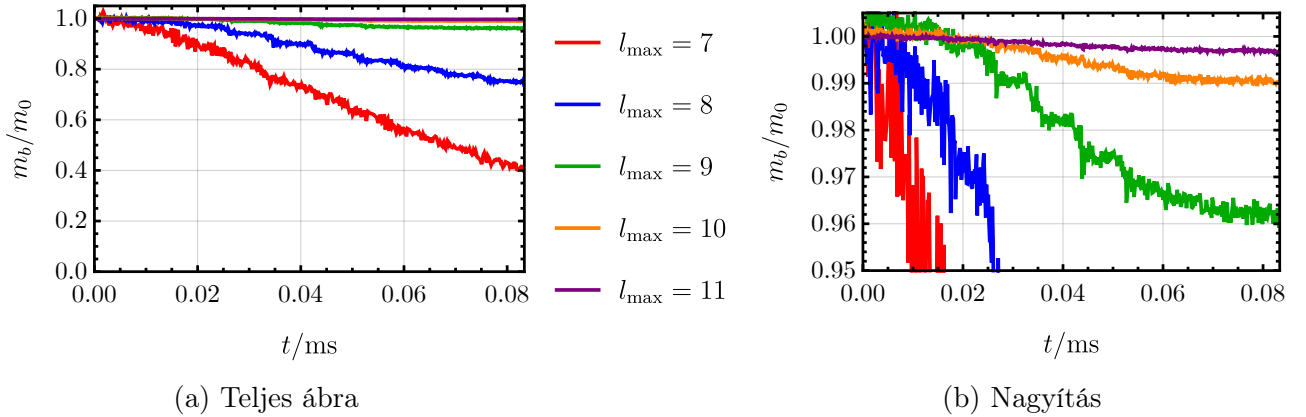
$l_{\max}$ max. felbontási szint	7	8	9	10	11
D_{cell} buborékfelbontás	27	54	109	218	436
T_{run} futási idő	0.7 h	1.4 h	4.3 h	14.8 h	48.0 h

A felbontás növelése során az $l_{\max}$ paraméter 7 és 11 között kerül beállításra. A buborékfelbontás kiszámolható a kezdeti cellaméret a_0 ismeretében mint,

$$D_{\text{cell}} = \frac{2R_0}{a_{\min}} = \frac{2R_0}{a_0 2^{-l_{\max}}} = \frac{R_0}{a_0} 2^{l_{\max}+1} \quad (2.24)$$

ahol $a_0 = 282 \mu\text{m}$. A 2.2. táblázat mutatja a buborékfelbontást és a szimulációk futási idejét 5 különböző felbontás esetén.

A validáció előtt érdemes megnézni a buboréktömeg disszipációját a különböző felbontású szimulációk esetén. A 2.3. ábrán a dimenziótlan buboréktömeg került ábrázolásra az idő függvényében. Az ábrákon egyértelműen látszik, hogy a buborékfelbontás növelése csökkenti a tömegdisszipáció mértéket. Az $l_{\max} = 7$ felbontású szimuláció során a buboréktömegnek mindössze a 40%-a marad meg, miközben $l_{\max} = 11$ esetén 99.7% megmarad.

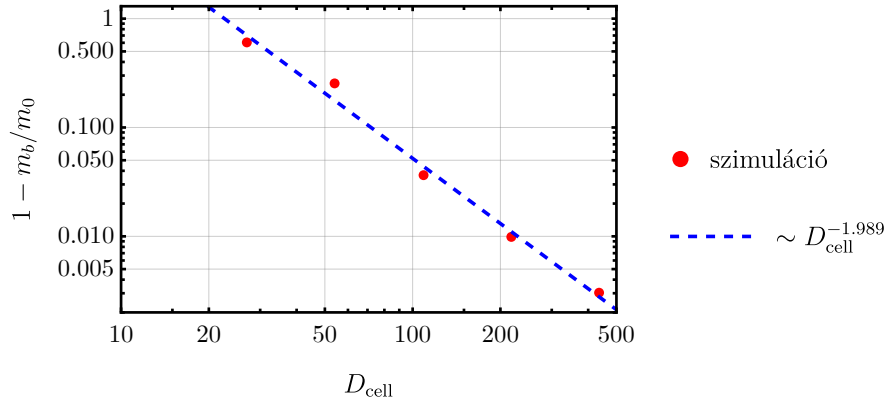


2.3. ábra. A buborék dimenziótlan tömege m_b/m_0 a különböző felbontású szimulációk során.

A 2.4. ábra logaritmikus tengelyeken ábrázolja a szimuláció során fellépő tömegdisszipációt a buborékfelbontás függvényében. Az ábra alapján megállapítható, hogy a pontok egy egyenesre esnek logaritmikus tengelyek használatával, görbeillesztéssel meghatározásra került, hogy

$$\left(1 - \frac{m_b}{m_0}\right) \sim D_{\text{cell}}^{-1.989} \quad (2.25)$$

azaz, a tömegveszteség a buborékfelbontás közel -2 . hatványával arányos. Ez azt jelenti, hogy a buborékfelbontás duplázása negyedére csökkenti a tömegdisszipációt, ez adja a buborékfelbontás 2.23. egyenlet szerinti definíciójának az értelmét. A tömegdisszipáció problémát okoz, hiszen kisebb buboréktömeghez kisebb egyensúlyi buboréksugár tartozik, ez azonban a buborék radiális oszcillációjának a dinamikáját is lényegesen megváltoztathatja.



2.4. ábra. A tömegdisszipáció a szimuláció során a buborékfelbontás D_{cell} függvényében.

A 2.5. ábrán láthatók pillanatfelvételek a szimulációból. Az ábrán látható az első, a harmadik és az ötödik periódus, megfigyelhető, hogy a buborék a változó nyomás hatására radiálisan oszcillál. Előfordul az is, hogy a buborék gömbi alakja szemmel láthatóan eltorzul, mint például az ötödik periódus közepén. A gömbi alak elvesztése problémát okozhat, hiszen ekkor a Keller-Miksis egyenlettel való közvetlen összehasonlítás nem lehetséges, mindenesetre az ötödik periódus elejéig a buborék látszólag gömb alakú marad. A gömbi alak elvesztésének kvantifikálására azonban jelenleg még nincsen szükség, ezt a következő fejezet tárgyalja.



(a) Első periódus, pillanatfelvételek $t = 0 \mu\text{s}$ -tól kezdődően $\Delta t = 1.167 \mu\text{s}$ -enként.



(b) Harmadik periódus, pillanatfelvételek $t = 16.67 \mu\text{s}$ -tól kezdődően $\Delta t = 1.167 \mu\text{s}$ -enként.

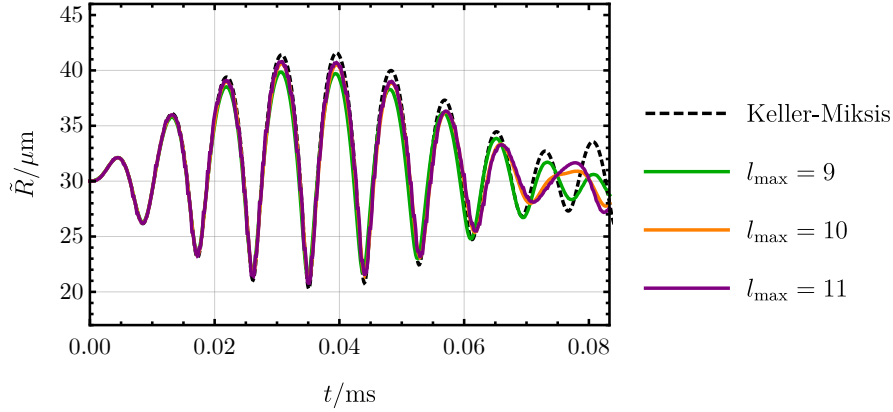


(c) Ötödik periódus, pillanatfelvételek $t = 33.33 \mu\text{s}$ -tól kezdődően $\Delta t = 1.167 \mu\text{s}$ -enként.

2.5. ábra. Pillanatfelvételek a buborék radiális oszcillációjáról az $l_{\text{max}} = 10$ szimuláció esetén. A buborék színezése a sebességmagnitúdóval arányos.

A 2.6. ábra mutatja a buboréksugár idő függését a szimulációkban. Az $l_{\text{max}} = 7$ és $l_{\text{max}} = 8$ felbontású szimuláció az átláthatóság kedvéért nem lett ábrázolva, ezen szimulációk esetén a tömegdisszipáció egyébként is túl jelentős. Az ábrán fekete szaggatott vonal jelöli a Keller-Miksis egyenlet szerinti megoldást. Megfigyelhető, hogy a szimuláció rendkívül jól visszaadja a Keller-Miksis egyenlet által jósolt viselkedést. Lényegesebb eltérések csak a hetedik periódus után mutatkoznak, azonban a Keller-Miksis egyenlet mint a 2.1. fejezetben láttuk, rendkívül érzékeny a kezdeti feltételekre, ezért a tömegdisszipáció illetve a nem tökéletes gömbi alak

miatt okozott eltérések egy idő után felerősödnek és láthatóvá válnak. Ezeket figyelembe véve a szimuláció és a Keller-Miksis egyenlet egyezése példaértékű.



2.6. ábra. A buboréksugár idő függvény a szimulációkban és a Keller-Miksis egyenlet szerint.

Összességében az látható, hogy az eredmények megfelelőek ha a tömegdisszipáció minimális. A tömegdisszipáció akkor tartható minimálisan, hogyha megfelelően nagy buborékfelbontás kerül felhasználására. A felbontás változtatásának a legfőbb tanulsága, hogy a buborékfelbontás kétszerezése körülbelül a negyedére csökkenti a tömegdisszipációt és körülbelül háromszorosára növeli a futási időt, ahogy a 2.2. táblázatban láttuk.

2.4.2. Paraméterek változtatása

Az előzőek ismeretében, a buborék átmérője mentén legalább 100 cella használata jó eredményeket ad, azaz $D_{\text{cell}} > 100$ buborékfelbontás használata célszerű. A következőkben a megfelelő eredmények érdekében $D_{\text{cell}} = 218$ -ra lesz állítva. Szimulációk 3 különböző frekvencián készülnek és minden frekvencián 6 különböző nyomásamplitúdó kerül beállításra, a buboréksugár nem kerül változtatásra. Ez összesen 18 különböző szimulációt jelent, a cél minden szimuláció összehasonlítása a Keller-Miksis egyenlettel és annak a meghatározása, hogy az ALPACA valós eredményeket ad-e.

2.3. táblázat. Szimulációk futási ideje a gömbszimmetrikus eset validációja során, $R_E = 30 \mu\text{m}$. A színkódolás jelentése a következő: zöld – a buborék végig gömb alakú marad, narancs – a buborék gömbi alakja elveszik, piros – a buborék szétesik.

	$f = 30 \text{ kHz}$	$f = 120 \text{ kHz}$	$f = 480 \text{ kHz}$
$p_A = 0.1 \text{ bar}$	$T_{\text{run}} = 38.2 \text{ h}$	$T_{\text{run}} = 12.1 \text{ h}$	$T_{\text{run}} = 2.2 \text{ h}$
$p_A = 0.2 \text{ bar}$	$T_{\text{run}} = 40.9 \text{ h}$	$T_{\text{run}} = 14.8 \text{ h}$	$T_{\text{run}} = 2.2 \text{ h}$
$p_A = 0.4 \text{ bar}$	$T_{\text{run}} = 42.8 \text{ h}$	$T_{\text{run}} = 15.6 \text{ h}$	$T_{\text{run}} = 2.3 \text{ h}$
$p_A = 0.7 \text{ bar}$	$T_{\text{run}} = 48 \text{ h+}$	$T_{\text{run}} = 48 \text{ h+}$	$T_{\text{run}} = 3.0 \text{ h}$
$p_A = 1.0 \text{ bar}$	$T_{\text{run}} = 33.3 \text{ h}$	$T_{\text{run}} = 48 \text{ h+}$	$T_{\text{run}} = 2.6 \text{ h}$
$p_A = 1.5 \text{ bar}$	$T_{\text{run}} = 48 \text{ h+}$	$T_{\text{run}} = 48 \text{ h+}$	$T_{\text{run}} = 2.6 \text{ h}$

A 2.3. táblázat tartalmazza a 18 különböző szimuláció futási idejét. A táblázatban zöld cellák jelölik azon szimulációkat ahol a buborék végig gömb alakú maradt, a validáció szempontjából ezek a legfontosabb szimulációk, hiszen itt az eredményeknek meg kell egyezniük a

Keller-Miksis egyenlettel. A narancssárga cella esetén a gömbi alak elveszik a szimuláció során, piros cellák esetén pedig a buborék több darabra szétesik. A futási időkből látszik, hogy néhány szimuláció nem ért bele a 48 órás futtatási limitbe, ezen esetekben azonban a buborék szét-esett. A buborékszétetés során a numerikus háló celláinak a száma lényegesen megnő, hiszen a fázishatár meghosszabbodik, ezért lassabbak ezek a szimulációk. A szimulációk eredményeit a 2.7.–2.9. ábrák mutatják. Az (a)–(f) ábrákon a buboréksugár összehasonlítása a Keller-Miksis egyenlettel látható, a Keller-Miksis egyenlet megoldását fekete szaggatott vonal jelöli. A (g) ábrákon a buborék dimenziótlan tömege látható a szimuláció során. Az ábrákon szürke vertikális vonal jelöli a buborék gömbi alakjának az elvesztésének az időpontját.

A 2.7. ábrán az $f = 30$ kHz-es gerjesztés mellett készült szimulációk láthatók. Amennyiben a nyomásamplitúdó 0.4 bar vagy annál kisebb, a 10 periódus során a Keller-Miksis egyenlet megoldása tökéletesen egybeesik a szimulációval, a buborék végig gömb alakú marad. Ahogyan a 2.7g ábráról leolvasható, a buboréktömeg kevesebb mint 1%-a disszipálódott a szimuláció során. Ha a nyomásamplitúdó $p_A = 0.7$ bar, akkor a buboréksugár rendkívül gyors oszcillációi figyelhetők meg, például $t = 0.02$ ms és $t = 0.04$ ms között 3 gyors buborékösszeomlás majd kitágulás követi egymást. Az ALPACA képes ezt a gyors oszcillációt is szimulálni, azonban ekkor a tömegdisszipáció már jelentősebb, illetve a szimuláció futása rendkívül lassú, így az a 48 órás időkeretbe nem ért bele. Magasabb nyomásamplitúdók mellett ($p_A = 1.0$ bar és $p_A = 1.5$ bar) a buborék gömbi alakja elveszik már az első periódus végén (ezt jelöli a szürke vonal), illetve a tömegdisszipáció is rendkívül jelentős. A szimuláció elején, amíg a buborék gömb alakú marad, az eredmény megegyezik a Keller-Miksis egyenlet megoldásával.

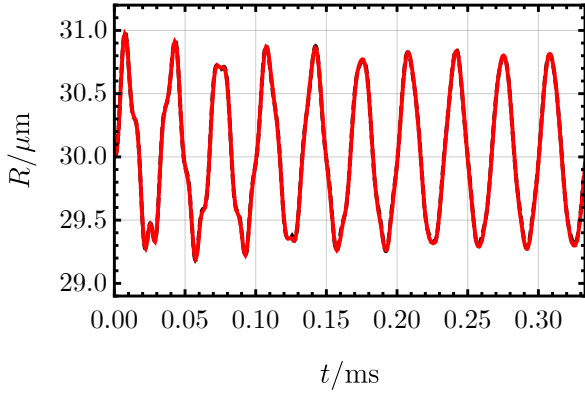
A 2.8. ábrán az $f = 120$ kHz-es gerjesztés mellett készült szimulációk láthatók. Ha a nyomásamplitúdó kicsi ($p_A = 0.1$ bar és $p_A = 0.2$ bar) akkor a buborék végig gömb alakú marad, ahogyan a 2.10a ábrán látható pillanatfelvételeken is megfigyelhető. Ebben az esetben a Keller-Miksis egyenlet megoldásával megegyezik az ALPACA szimuláció eredménye és a tömegdisszipáció kevesebb mint 1%. A szimuláció végén $t > 0.06$ ms már lényegesebb eltérés tapasztalható. A $p_A = 0.4$ bar nyomásamplitúdón készült szimuláció során a buborék gömbi alakja elveszik, a magasabb nyomásamplitúdók használata esetén a buborék szét is esik több darabra, ahogyan a 2.10b és a 2.10c ábrákon lévő pillanatfelvételeken is látható. A buborék gömbi alakjának lényeges elvesztéséig – amit a vertikális szürke vonalak jelölnek – rendkívül jó az egyezés a Keller-Miksis egyenlet megoldása és az ALPACA szimuláció között.

A 2.9. ábrán az $f = 480$ kHz-es gerjesztés mellett készült szimulációk láthatók. Az első két periódus után a buboréksugár kissé eltér a Keller-Miksis egyenlet megoldásától az ALPACA szimulációban. A szimulációkban a cellaméret $a_{\min} = 0.28 \mu\text{m}$, a buboréksugár változása viszont rendkívül kicsi, maximum $3 \mu\text{m}$, ami alig 11 cellányi változást jelent. Ahhoz, hogy pontosabb eredményeket kapjunk, a felbontás növelése lenne szükséges.

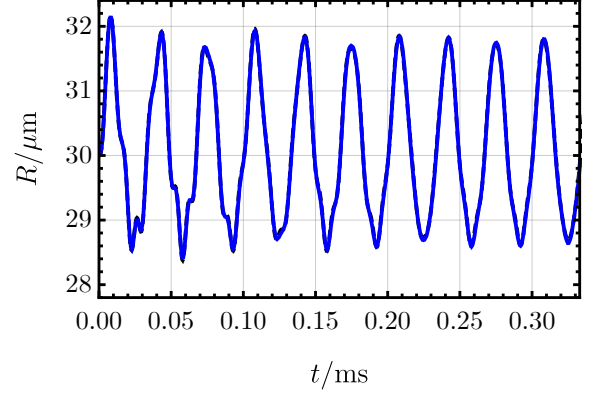
2.4.3. Értékelés

Az eddigi eredmények alapján azt látjuk, hogy akusztikusan gerjesztett buborékok radiális oszcilláció szimulálhatók az ALPACA programcsomaggal, bizonyos feltétek mellett. Ahhoz, hogy az ALPACA szimuláció eredménye a valóságnak megfelelő legyen a következőknek kell teljesülnie:

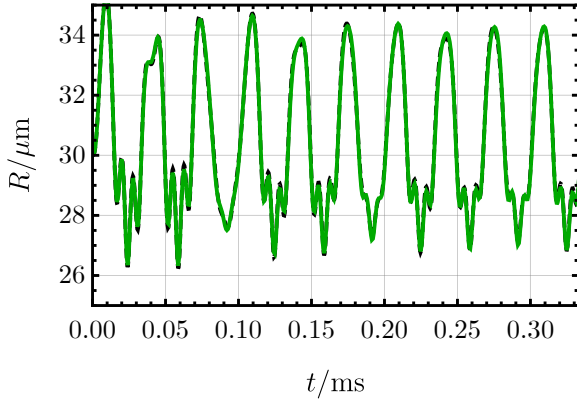
1. A buborékfelbontás legyen elég nagy ahhoz, hogy tömegdisszipáció alacsony maradjon. Az eddigi eredmények alapján érdemes a tömegdisszipációt 1% alatt tartani, a teljes szimuláció során.
2. A buborék ne veszítse el a gömbi alakját a szimuláció során, hiszen a validáció erre az esetre nem terjed ki egyelőre.



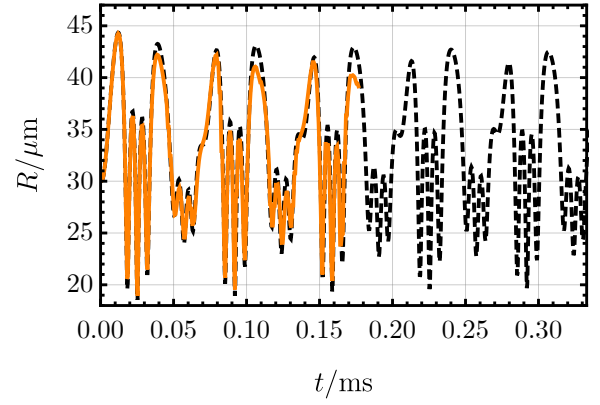
(a) $p_A = 0.1$ bar



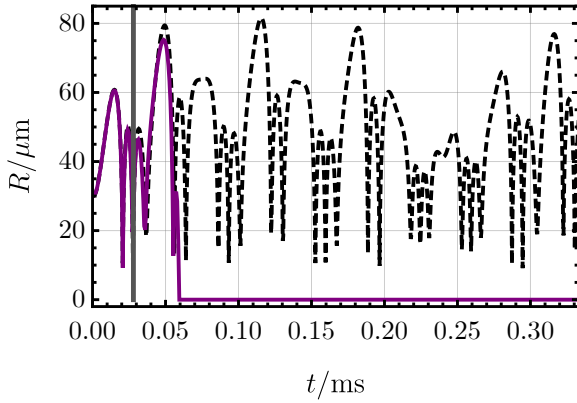
(b) $p_A = 0.2$ bar



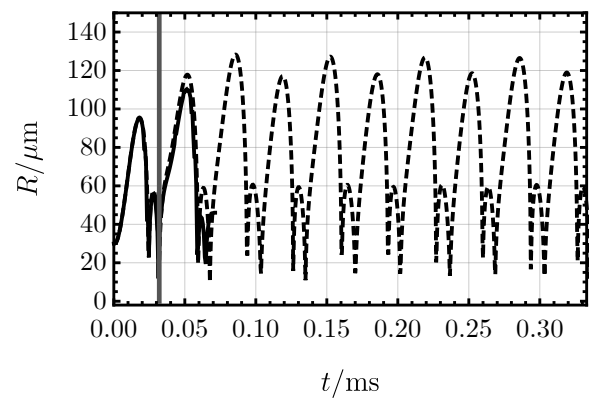
(c) $p_A = 0.4$ bar



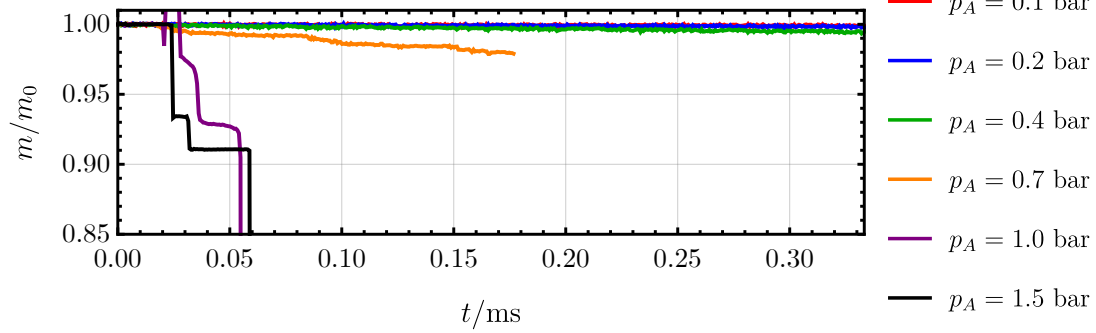
(d) $p_A = 0.7$ bar



(e) $p_A = 1.0$ bar

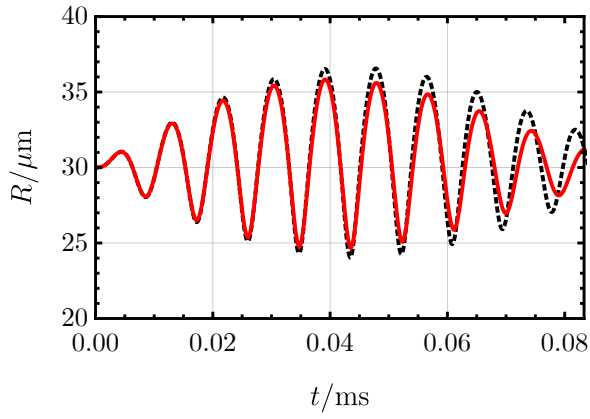


(f) $p_A = 1.5$ bar

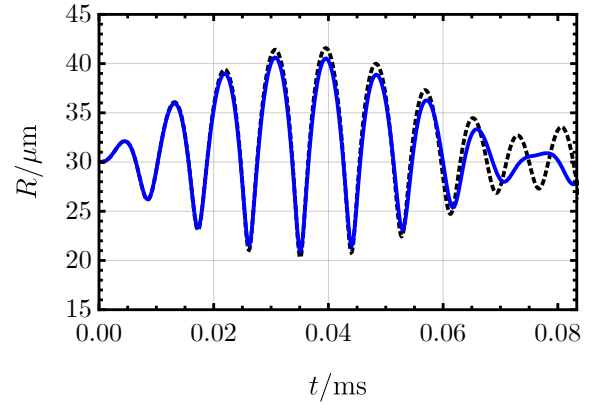


(g) Dimenziótlan buboréktömeg a szimulációk során

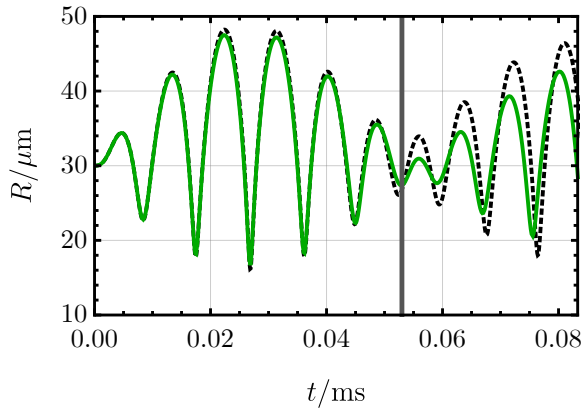
2.7. ábra. Eredmények $f = 30$ kHz-es frekvencián. A fekete szaggatott vonal az (a)-(f) ábrákon a Keller-Miksis egyenlet megoldását, a színes vonal az ALPACA szimulációt jelöli.



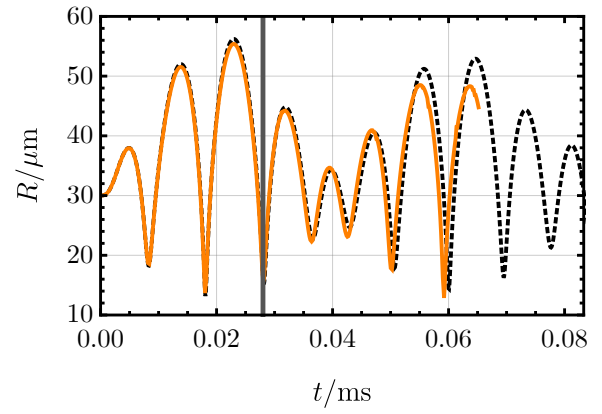
(a) $p_A = 0.1$ bar



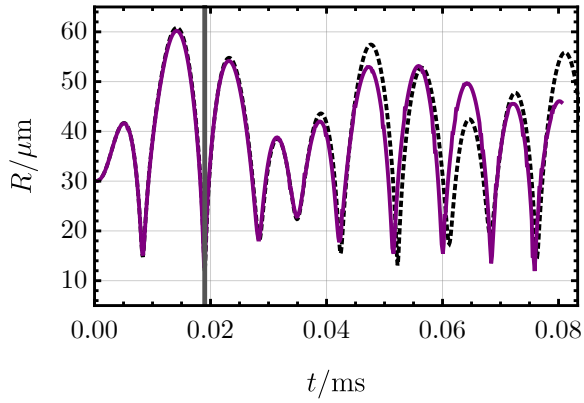
(b) $p_A = 0.2$ bar



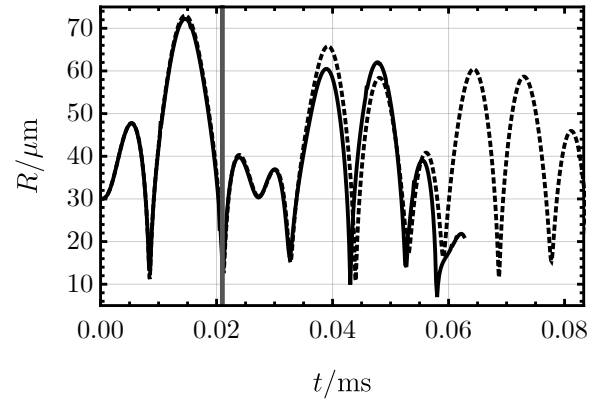
(c) $p_A = 0.4$ bar



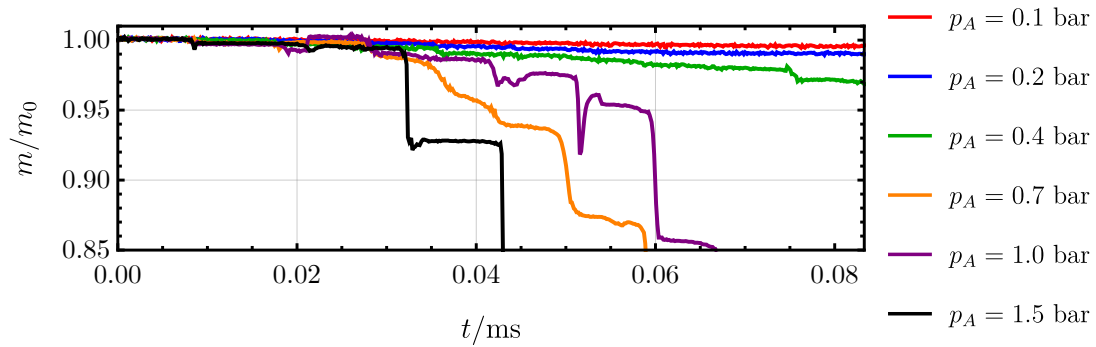
(d) $p_A = 0.7$ bar



(e) $p_A = 1.0$ bar

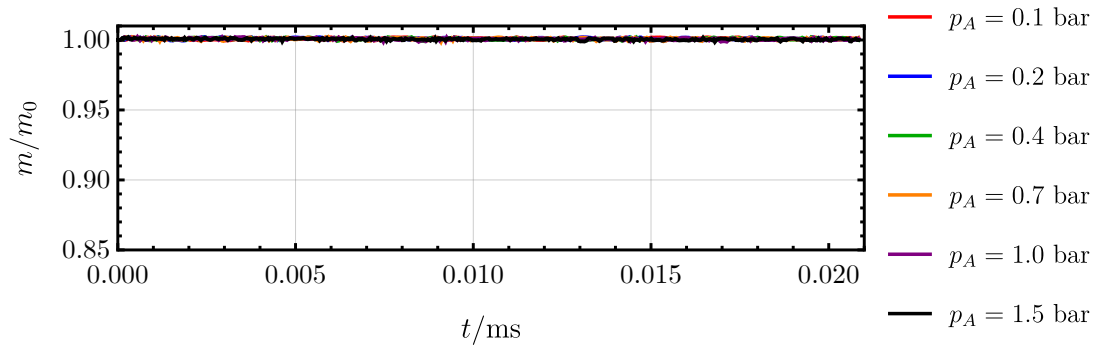
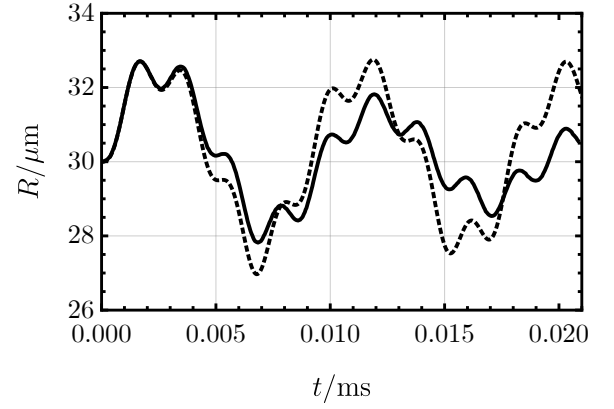
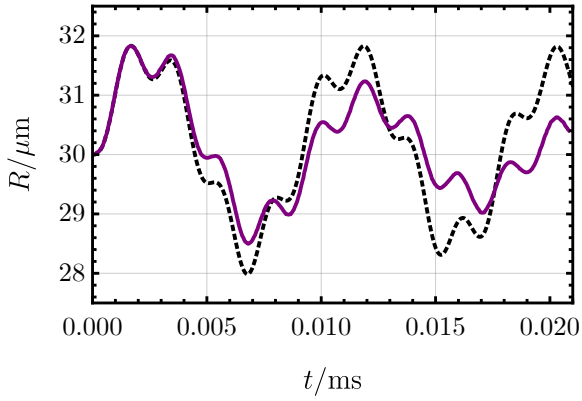
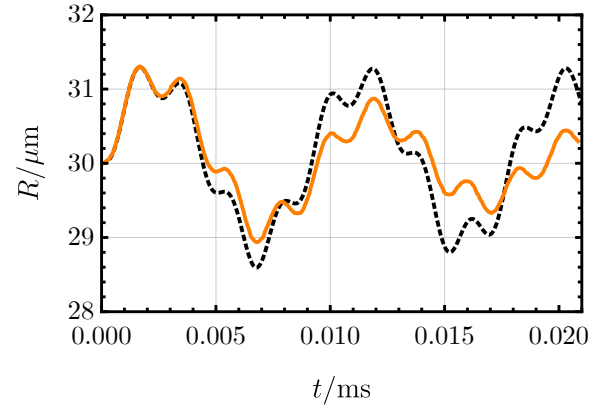
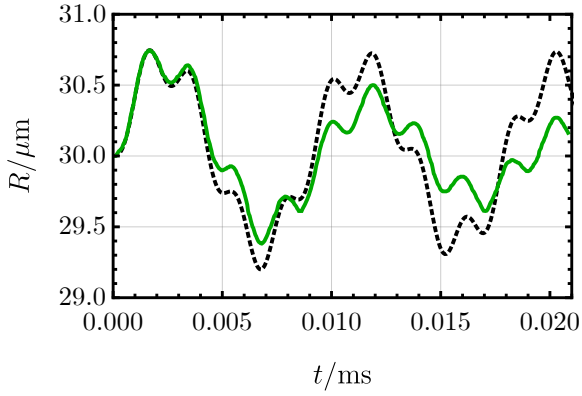
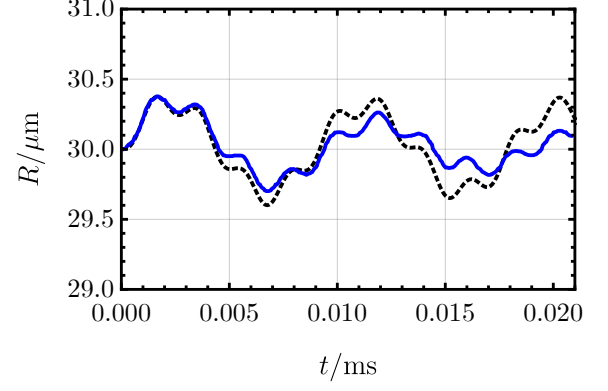
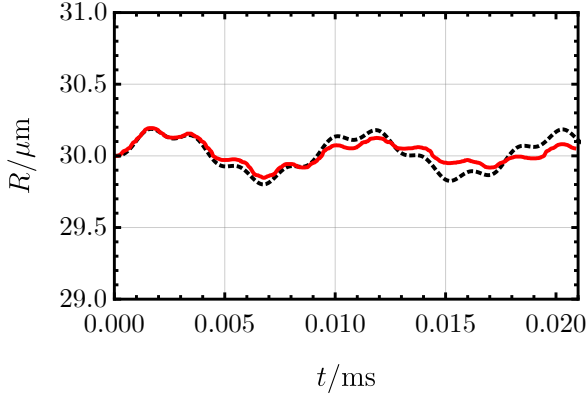


(f) $p_A = 1.5$ bar

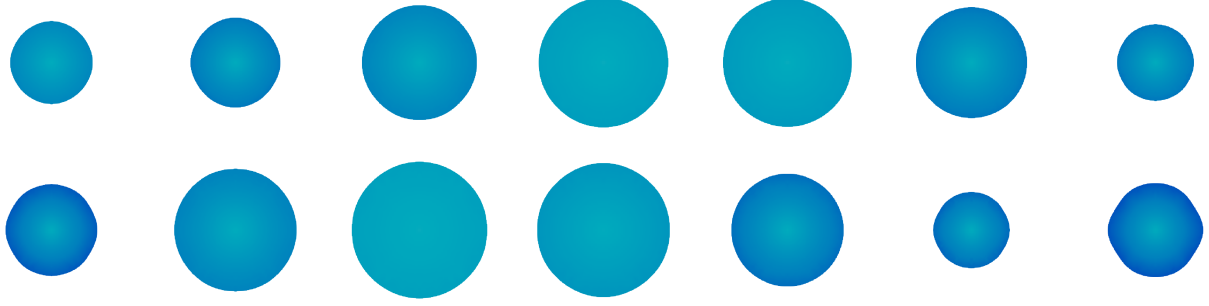


(g) Dimenziótlan buboréktömeg a szimulációk során

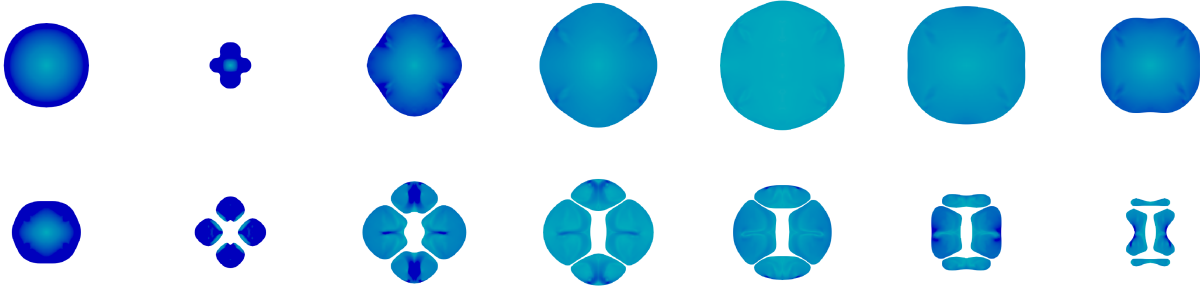
2.8. ábra. Eredmények $f = 120$ kHz-es frekvencián. A fekete szaggatott vonal az (a)-(f) ábrákon a Keller-Miksis egyenlet megoldását, a színes vonal az ALPACA szimulációt jelöli.



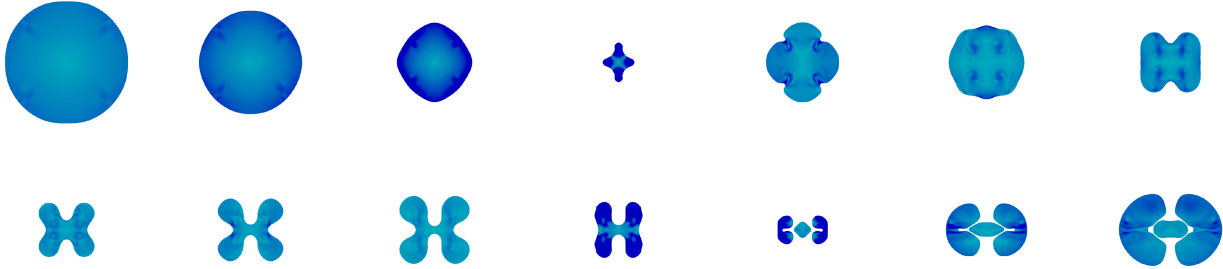
2.9. ábra. Eredmények $f = 480$ kHz-es frekvencián. A fekete szaggatott vonal az (a)-(f) ábrákon a Keller-Miksis egyenlet megoldását, a színes vonal az ALPACA szimulációt jelöli.



(a) Pillanatfelvételek az $f = 120$ kHz, $p_A = 0.2$ bar szimulációból, $t = 16.67$ μ s-tól kezdődően $\Delta t = 1.5$ μ s-enként.



(b) Pillanatfelvételek az $f = 120$ kHz, $p_A = 0.7$ bar szimulációból, $t = 16.67$ μ s-tól kezdődően $\Delta t = 1.5$ μ s-enként.



(c) Pillanatfelvételek az $f = 120$ kHz, $p_A = 1.5$ bar szimulációból, $t = 16.67$ μ s-tól kezdődően $\Delta t = 1.5$ μ s-enként.

2.10. ábra. Pillanatfelvételek a buborék oszcillációjáról 3 különböző szimuláció során. A buborék színezése a sebességmagnitúdóval arányos.

3. Nem gömbszimmetrikus eset

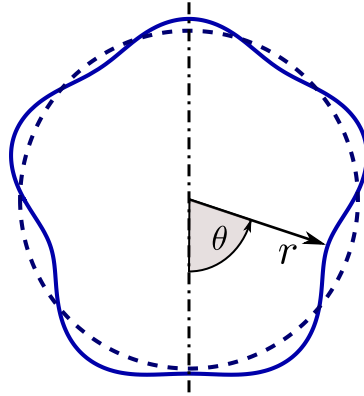
Azt már láttuk, hogy gömb alakú buborékokat megfelelően lehet szimulálni az ALPACA-val, azonban bizonyos paraméterek mellett a gömbi alak instabil. Már néhány korábbi szimulációban is látható volt, hogy a gömbi alak elveszhet, sőt a buborék is széteshet (lásd 2.10b és 2.10c ábrák). A kérdés, hogy vajon az ALPACA a gömbi alak elvesztése után is a valóságnak megfelelő eredményeket produkálja-e. Ehhez először röviden a nem gömbszimmetrikus buborékok modellezését mutatom be.

3.1. Nem gömbszimmetrikus buborékok modellezése

Nem gömbszimmetrikus buborékok matematikai modellezése általában a buborékfelület sorfejtésével történik [29]. Feltételezve, hogy a perturbált buborékfelület tengelyszimmetrikus, akkor az két koordinátával írható le polárkoordináta-rendszerben, a θ középponti szöggel és az r origótól mért távolsággal, ahogyan a 3.1. ábrán is látható. A tengelyszimmetrikus buborékfelület tehát egyértelműen leírható az $r(\theta)$ függvénnyel, ahol $0 \leq \theta \leq \pi$. A buborékfelület felbontható a radiális oszcilláció $R(t)$ és a tengelyszimmetrikus módusok összegére [30]. Az első néhány tengelyszimmetrikus módus a 3.2. ábrán látható. A buborékfelület megadható a következő sorösszegként

$$r(\theta, t) = R(t) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) P_n(\cos \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(t) P_n(\cos \theta), \quad (3.1)$$

ahol $R(t)$ a radiális oszcilláció, a_n az n . módus amplitúdója és P_n az n . Legendre polinom. Az a_1 módus a buborék transzlációs mozgását jelenti, a buboréksugár R pedig felfogható úgy, mint a 0. módus, így gyakorlatilag a buborékalakot egyenlet sorösszeggel fel lehet írni.



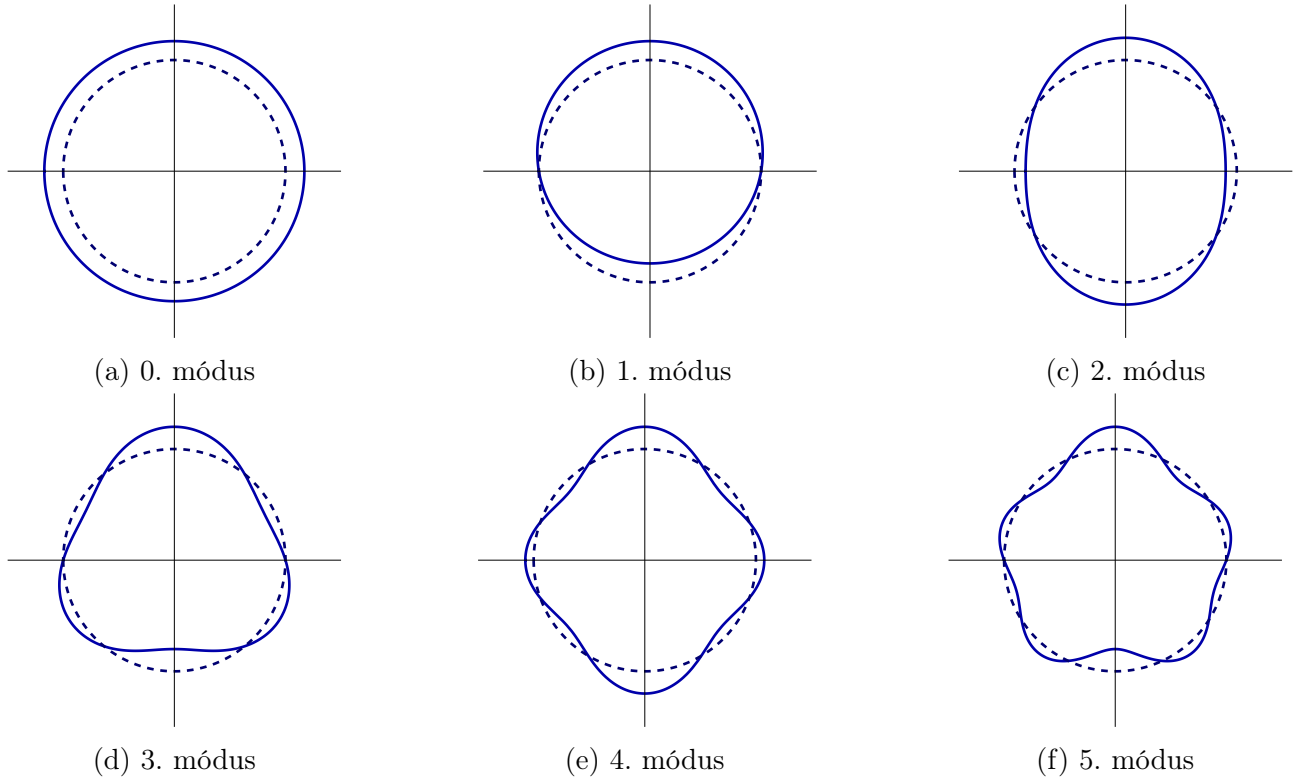
3.1. ábra. Egy perturbált buborékfelület leírása polárkoordináta-rendszerben az r és θ koordinátával.

A 3.1. egyenlet egy általánosított Fourier sor, ahol a bázist a Legendre polinomok adják. Szimulációkban, mérésekben közvetlenül meghatározható a buborékfelület $r(\theta, t)$ és az $a_n(t)$ módusamplitúdók ezután pedig általánosított Fourier sorfejtéssel kiszámolhatók,

$$a_n(t) = \frac{2n+1}{2} \int_0^\pi r(\theta, t) P_n(\cos \theta) d\theta. \quad (3.2)$$

3.2. ALPACA modell

Az ALPACA-ban használt buborékmodell nem gömbszimmetrikus buborékok szimulációja során ugyanaz mint a korábban ismertetett modell a 2.2. fejezetben. Ez a tengelyszimmetrikus modell továbbra is használható, hiszen a buborék nem gömbi oszcilláció is alapvetően tengelyszimmetrikusak [31]. A modell egészen addig érvényes, amíg a nem gömbi oszcilláció amplitúdója nem túl nagy, például a modell egy buborékszétesés során már érvényét veszti. Természetesen a tengelyszimmetria továbbra is rá van kényszerítve a buboréokra, azonban az eredmények várhatóan nem felelnek meg a valóságnak. A kezdeti feltételek, peremfeltételek, állapotegyenletek és azok paraméterei ugyanazok mint a 2.2. fejezetben ismertetett paraméterek.



3.2. ábra. A buborékfelület első néhány módusa.

3.3. Posztprocesszálas

Nem gömbszimmetrikus buborék esetén a buboréksugár mellett a buborék felületi módusamplitúdóinak a meghatározása szükséges. Ennek a kiszámítására a következő lépéseket használtam:

1. A buborék határfelületén lévő cellák kiválasztása. A buborék határfelületén az a cella található, ahol a ϕ level-set függvény értéke közel nulla, azaz $|\phi| < \varepsilon_S$, ahol ε_S egy állítható tolerancia. Amennyiben ε_S túl kicsi, úgy elképzelhető, hogy nem minden határfelületen lévő cella kerül kiválasztásra, amennyiben pedig ε_S túl nagy, akkor pedig a buborékfelületől távolabb lévő cellák is kiválasztásra kerülhetnek. A dolgozat során $\varepsilon_S = 0.6$ használata megfelelőnek bizonyult. Ennek a lépésnek az eredménye egy lista ami a felület közelében lévő cellák (x, y) koordinátáit tartalmazza. A 3.3a ábrán ezen pontok lettek megjelenítve az (x, y) síkon.
2. A buborék középpontjának a meghatározása. A buborék középpontja általában ismert, mivel a buborék a legtöbb esetben translációs mozgást nem végez, így a kezdetben beállított (x_0, y_0) középpont állandó marad. Amennyiben a buborék mozog, akkor az 1. pontban kiszámolt (x, y) pontok súlyozott közepeként megtalálható a buborék aktuális középpontja. A tengelyszimmetrikus modell esetén $x_0 = 0$ mindig igaz.
3. Az (x, y) pontok listájának a polárkoordináta transzformációja, a buborék középpontjának (x_0, y_0) az ismeretében,

$$r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} \quad \text{és} \quad \theta = \arctan\left(\frac{y - y_0}{x - x_0}\right). \quad (3.3)$$

A lépés eredménye egy (θ, r) lista.

4. A $r(\theta)$ függvény felírása és szűrése mozgó átlaggal. A mozgó átlaggal részben kiszűrhető a négyzetes háló celláiból adódó pontatlanság. Az $r(\theta)$ függvény a 3.3c ábrán látható.
5. A módusok meghatározása a 3.2. egyenlet szerint, az $r(\theta)$ függvény Fourier sorfejtésével. Ehhez az integrál numerikus közelítése szükséges

$$a_n = \frac{2n+1}{2} \int_0^\pi r(\theta) P_n(\cos \theta) d\theta \approx \frac{2n+1}{2} \sum_i r_i P_n(\cos \theta_i) \cdot (\theta_{i+1} - \theta_i), \quad (3.4)$$

ahol θ_i , r_i a rendezett (θ, r) lista i . eleme.

A módszer működésére egy példa látható a 3.3d ábrán, ahol a szűrt $r(\theta)$ függvény kerül közelítésre az első n módussal. Amennyiben $n = 0$, akkor a 3.1. egyenlet szerint $r(\theta) = R$. Az ábrán megfigyelhető, hogy minél több tagot veszünk bele a Fourier sorba, annál pontosabban kapjuk vissza az eredeti függvényt. A 3.3b ábra ugyanezt mutatja polárkoordináta-rendszerben, látható, hogy a tengelyszimmetrikus módusok a 3.1. egyenlet szerinti definíciójával ez a buborékalak tényleg leírható.

3.4. Szimmetriák

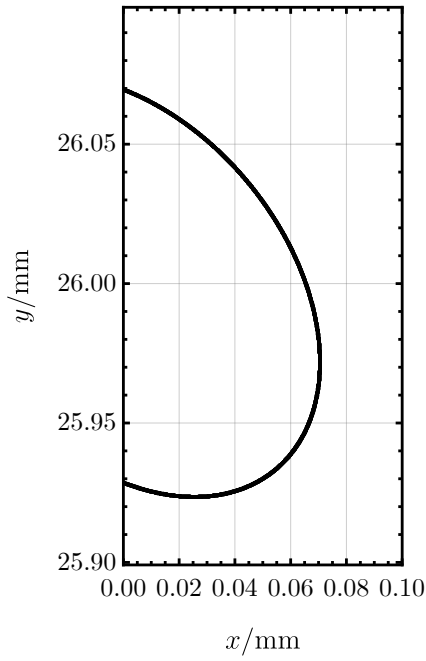
A szimulációk során problémát jelent, hogy amennyiben a buborék kezdetben gömb alakú, az nem csak y tengelyszimmetrikus, hanem szimmetrikus egy az x tengellyel párhuzamos síkra is, ahogy a 3.4a ábrán látható. Az S sík déli oldalán és az S sík északi oldalán ugyanazon egyenletek lesznek megoldva ugyanazon kezdeti és peremfeltételekkel, sőt a háló is teljesen szimmetrikus kezdetben, így az északi és déli oldal között a számábrázolási hibát leszámítva nem tudnak különbségek kialakulni. Ez azt jelenti, hogy páratlan módusok csak nagyon lassan alakulhatnak ki a szimulációk során, hiszen ahogyan a 3.2. ábrán láttuk, azok nem szimmetrikusak az S síkra. A valóságban természetesen mindig vannak kisebb zavarások, amik ezt a szimmetriát megtörik. A szimulációban a számábrázolási hibából adódó zavarás túl kicsi ahhoz, hogy a szimmetria magától megbomoljon, ezért a buborékfelület mesterséges perturbációja szükséges. Egy lehetőség a buborékfelület kezdeti perturbációja például a következő level-set függvény használata

$$\phi(x, y) = -R_0 + \sqrt{x^2 \cdot (1 + c \cdot (y - y_0 - b)^2) + a \cdot (y - y_0)^2 + d \cdot x \cdot (y - y_0)}, \quad (3.5)$$

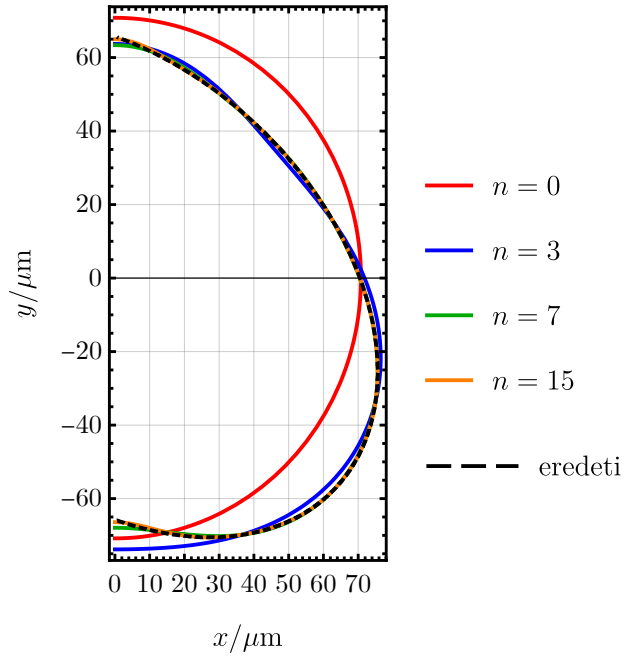
ahol $a > 0$ a buborék elliptikusságát és $b, c, d > 0$ paraméterek pedig az S síkre vett aszimmetriát állítják. Az a, b, c, d paramétert úgy szükséges megválasztani, hogy a $\phi(x, y) = 0$ görbe által bezárt felület y tengely körüli forgatása után létrejövő forgástest térfogata megegyezzen egy R_0 sugarú gömb térfogatával. Ez garantálja azt, hogy a buborék egyensúlyi sugara továbbra is R_0 legyen.

3.1. táblázat. Referencia szimuláció paraméterei és alapértelmezett beállításai a megfelelő értékek megtalálásához.

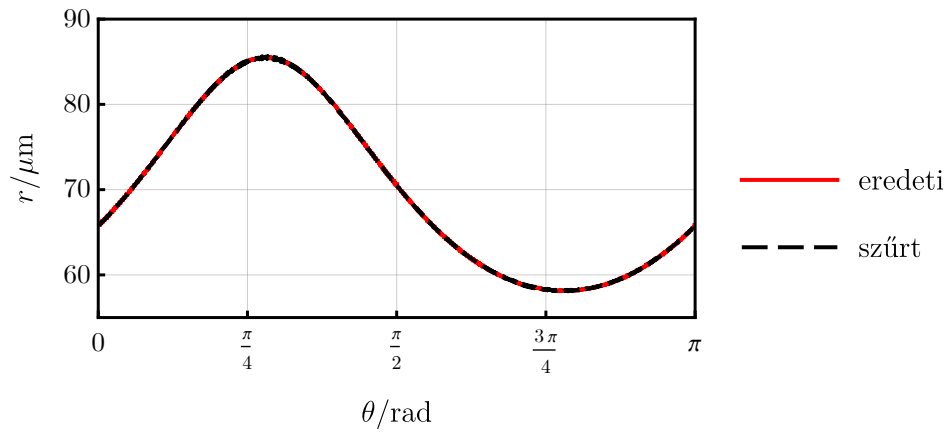
Leírás	Beállítás
Buboréksugár	$R_0 = R_E = 70.5 \mu\text{m}$
Frekvencia	$f = 31.25 \text{ kHz}$
Nyomásamplitúdó	$p_A = 0.128 \text{ bar}$
Kezdeti level-set függvény	3.5. egyenlet szerint 3.6. szerinti paraméterekkel
Buborékfelbontás	$D_{\text{cell}} = 88$



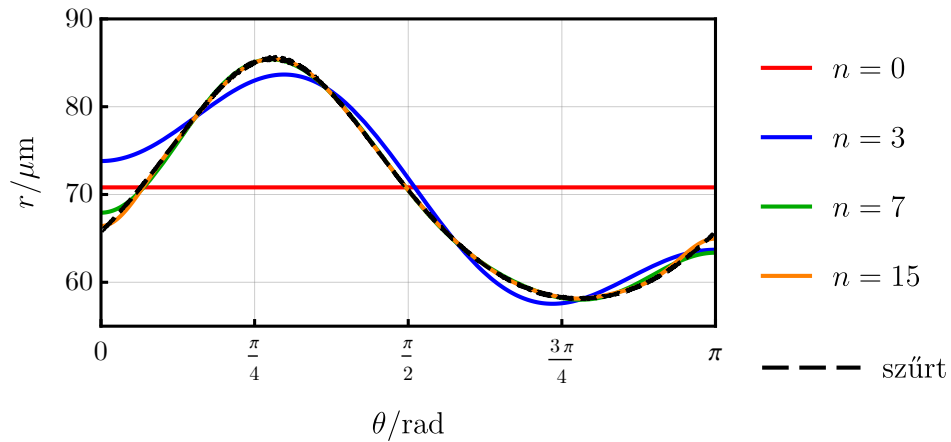
(a) A buborék határfelületén lévő cellák $\varepsilon_S = 0.6$ használata mellett.



(b) Az $r(\theta)$ függvény közelítése sorfejtéssel a 3.1. egyenlet szerint polárkoordináta-rendszerben ábrázolva.

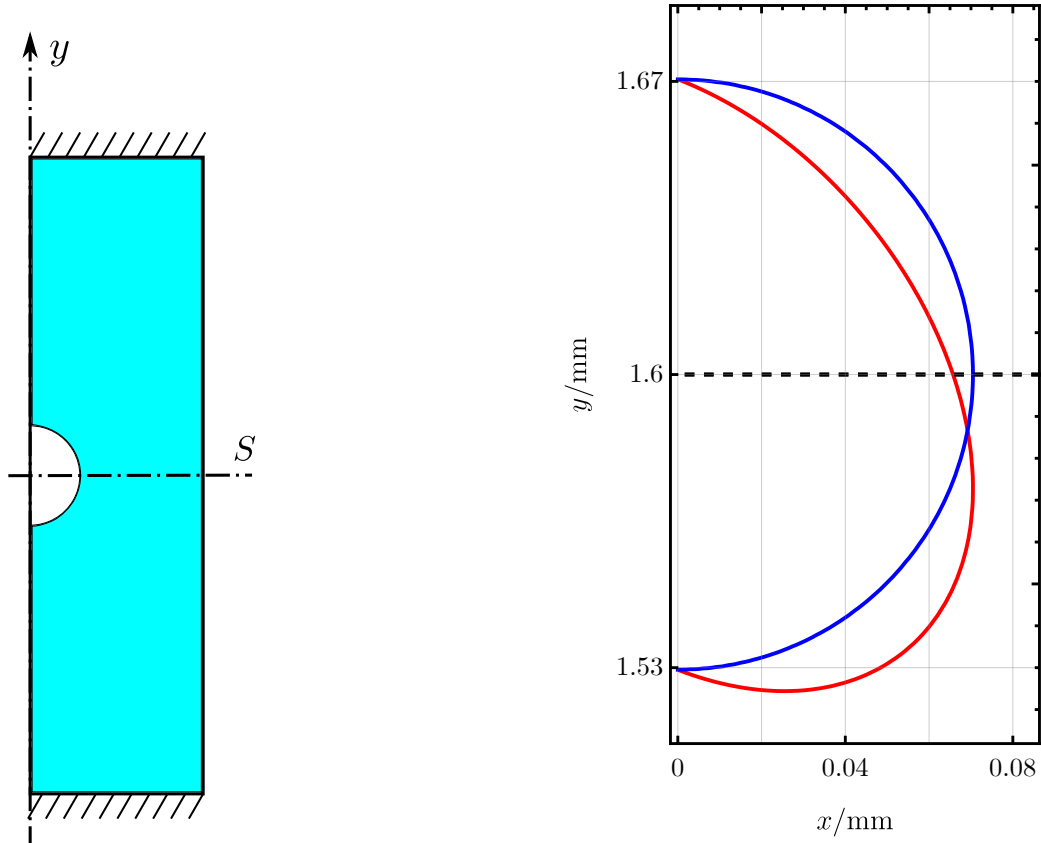


(c) Az $r(\theta)$ függvény szűrés előtt (piros) és szűrés után (fekete szaggatott).



(d) Az $r(\theta)$ függvény közelítése sorfejtéssel a 3.1. egyenlet szerint.

3.3. ábra. A módusok meghatározásának a fontosabb lépései, torzult buborékalak esetén. A buborékalak a 3.5. egyenlet szerint került beállításra, ahol $a = 1$, $b = 0.5$, $c = 0.6$ és $d = 0.7745$.



(a) Az y szimmetriatengely és az S szimmetriasík.

(b) A buborék nem gömbi inicializációja a 3.5. egyenlet szerint, ahol $R_0 = 70.5 \mu\text{m}$, $a = 1$, $b = 0.5$, $c = 0.6$ és $d = 0.7745$ (piros) és az azonos térfogatú gömb alakú buborék (kék).

3.4. ábra. Az S szimmetria sík és egy lehetőség az S szimmetria megszüntetésére.

3.5. Beállítások hatása

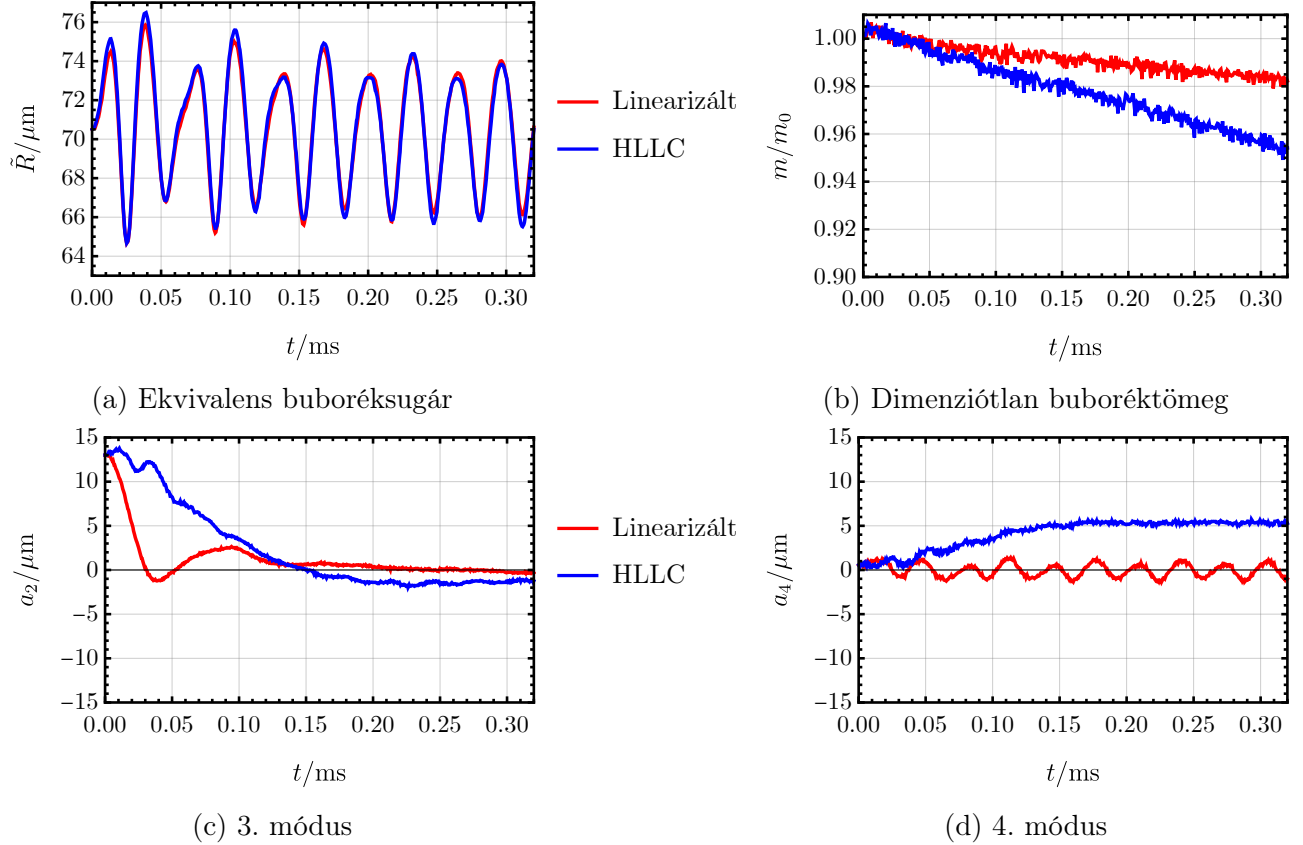
Az ALPACA-ban több különböző beállítás használható a határfelület szimulációjára. Akusztikusan gerjesztett buborékok szimulációjáról szóló szakirodalom minimális, így nem találhatók javaslatok például arra, hogy milyen határfelületi megoldót érdemes használni. Az ideális beállítások ezért kísérleti úton kerültek meghatározásra. A beállítások hatása egy referencia szimuláción keresztül kerül bemutatásra. A referencia szimuláció paraméterei a 3.1. táblázatban láthatók, a szimuláció egy perturbált buborékalakból indul. A szimuláció S. Cleve és munkatársainak a mérésének a reprodukálása [3]. A cikk szerint a hármas módus amplitúdója $a_3 = 15 \mu\text{m}$, a négyesé pedig $a_4 = 2 \mu\text{m}$, a cél olyan beállítások megtalálása amivel ez a mérés minél pontosabban reprodukálható.

3.5.1. Határfelületi Riemann-megoldó

A határfelület mozgási sebességének ($\mathbf{u}_\phi$, lásd 1.2. egyenlet) a meghatározásához egy határfelületi Riemann-megoldó szükséges. A Riemann-probléma lényege, hogy két egymás melletti cellában különböző az állapotváltozók értéke, azaz a cellák közötti határon egy ugrás található. A Riemann-probléma megoldásában lökeshullámok és ritkítási hullámok is megjelennek, a Riemann-megoldók ezek alapján számolják ki a cellák közötti fluxusokat [32]. Az ALPACA-ban használható linearizált határfelületi megoldó [33] és a HLLC határfelületi megoldó [34].

A HLLC megoldó esetén több különböző jelterjedési sebesség is használható, azonban ezek a buborékszimulációk eredményében lényeges különbséget nem okoznak, a HLLC megoldóhoz Einfeldt [35] szerinti jelterjedési sebességet használtam.

A szimuláció eredményei a 3.5. ábrán láthatók, az ekvivalens buboréksugár mindkét megoldó esetén nagyon hasonló, továbbá a hármask módus mindkét esetben lecseng a kezdeti gerjesztés után. A HLLC megoldó használata esetén a viselkedés nem mutat periodikus jelleget, ahogyan az várható lenne, illetve a négyes módus amplitúdója monoton növekszik a szimuláció során, továbbá a tömegveszteség is jelentősebb. Ezek alapján azt állíthatjuk, hogy a linearizált Riemann-megoldó jobban működik akusztikusan gerjesztett buborékok szimulációjára.

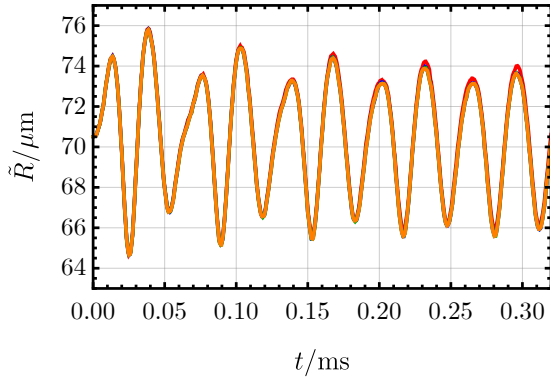


3.5. ábra. A szimuláció eredménye különböző Riemann-megoldók használata esetén.

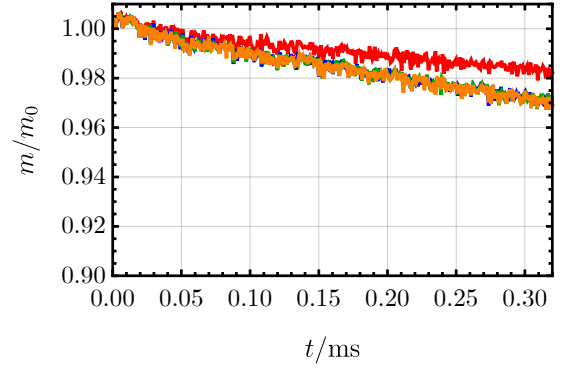
3.5.2. Level-set újrainicializálási iterációk

Mint az 1.3.2. fejezetben már említésre került, a fázisokat a level-set függvény különíti el. A level-set időbeni változását egy transzport egyenlet megoldásával lehet nyomonkövetni (lásd 1.2. egyenlet), azonban a megoldás során a level-set simasági kritériumai elvesznek, ezért a level-set újrainicializációja szükséges. A level-set újrainicializáció egy iteratív folyamat, ahol az iterációk száma állítható. Az ötlet, a level-set iterációk számának a változtatása és az ideális iterációs szám megtalálása. Ha túl kevés iterációt végzünk akkor az instabilitáshoz vezet, ha túl sokat akkor pedig előfordulhat, hogy a határfelületen kialakuló jelenségeket mesterségesen elsimítjuk.

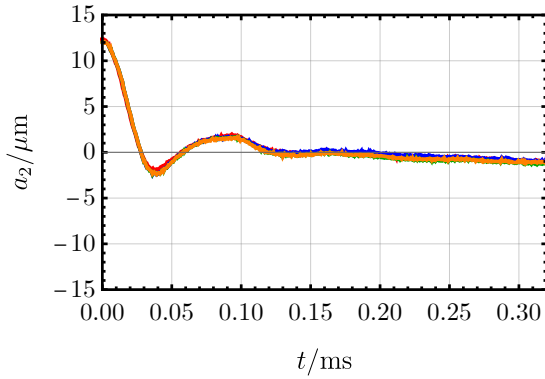
Az eredmények a 3.6. ábrán láthatók. A buboréksugár és a módusok is szinte megegyeznek a különböző szimulációk során, különbség egyedül a tömegdisszipációban figyelhető meg. A legkisebb tömegdisszipációt akkor kapjuk ha több iterációs lépést alkalmazunk, ezért a következőkben 30 iterációs lépés kerül alkalmazásra.



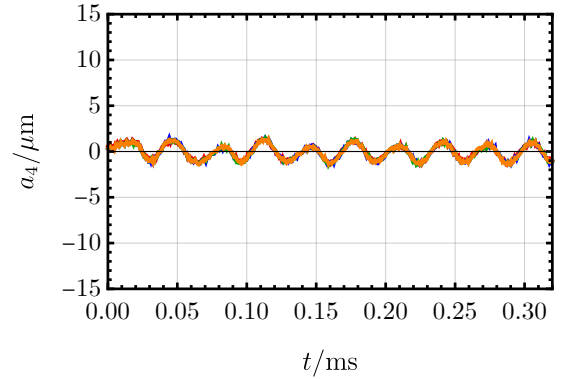
(a) Ekvivalens buboréksugár



(b) Dimenziótlan buboréktömeg

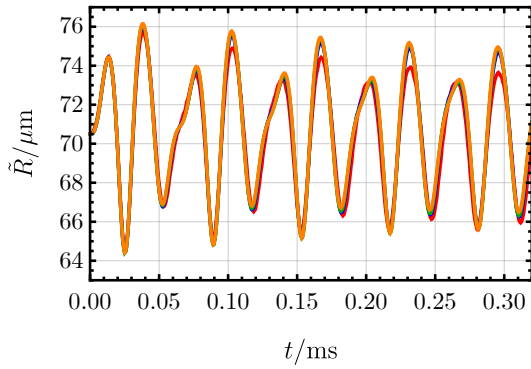


(c) 3. módus

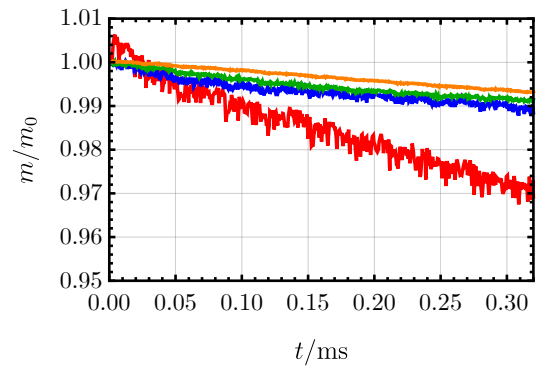


(d) 4. módus

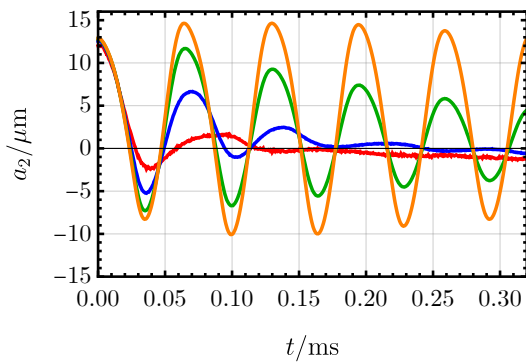
3.6. ábra. Eredmények különböző számú újrainicializálási iteráció használata esetén.



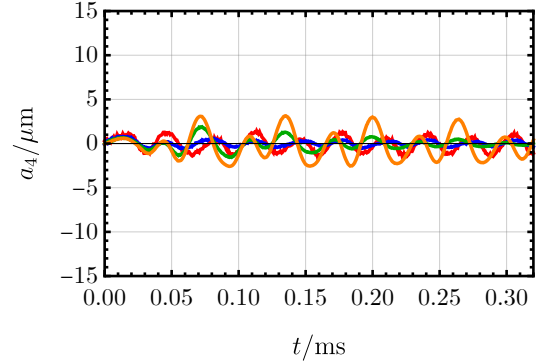
(a) Ekvivalens buboréksugár



(b) Dimenziótlan buboréktömeg



(c) 3. módus



(d) 4. módus

3.7. ábra. A szimuláció eredménye különböző buborékfelbontások használata esetén.

3.5.3. Buborékfelbontás változtatása

A buborékfelbontás növelésével a felületen kialakuló módusok is jobb felbontásra kerülnek, így várhatóan azok pontosabbak lesznek. Azt korábban láttuk, hogy a buborék felbontása az átmérő mentén közel $D_{\text{cell}} = 100$ cellával elegendő ahhoz, hogy a radiális oszcilláció reprodukálható legyen. A $70.5\text{ }\mu\text{m}$ -es buborék az első esetben 88 cellával lesz felbontva, ez $0.8\text{ }\mu\text{m}$ -es minimum cellaméretet jelent. Ez azt jelenti, hogy a hármas módus amplitúdója 19 cellával a négyesé pedig 2 cellával lesz felbontva, ami a négyes módus esetén nyilvánvalóan nem elegendő. Négy különböző szimuláció készült a buborékfelbontás duplázásával, a buborékfelbontás $D_{\text{cell}} = 88$ -tól $D_{\text{cell}} = 712$ -ig megy.

Az eredmények a 3.7. ábrán láthatók, a buboréksugárban nem mutatkozik lényeges különbség, ahogyan az várható. A tömegdisszipáció a várákosoknak megfelelően csökken a felbontás növelésével, a legnagyobb felbontás esetén ez mindössze 0.5% a szimuláció során. Látható, hogy a felbontás növelésével a hármas és a négyes módus egyre jobban kialakul. A probléma, hogy a futási idő $D_{\text{cell}} = 356$ esetén 2.4 nap, $D_{\text{cell}} = 712$ esetén pedig 6.5 nap, így a felbontás további duplázása már nem életszerű. A felületi módusok kialakulásának a szimulációja lényegesen több időt igényel, mint csak a radiális oszcilláció szimulációja.

3.6. Validáció I – kialakuló módusok

Az ALPACA validációja nem gömbszimmetrikus buborékoszcillációk esetén már nehezebb feladat. Az egyik lehetőség a Keller-Miksis egyenlet kiegészítése a tengelyszimmetrikus módusokkal [31, 36, 29], azonban ez a modell szintén validációra szorul nagyobb amplitúdójú felületi lengések esetére. Az egyetlen lehetőség tehát a mérésekkel való összehasonlítás, a validációhoz először M. Versluis és munkatársainak a *Microbubble shape oscillations excited through ultrasonic parametric driving* cikkben leírt méréseit veszem alapul [37]. A cikkben $f = 130\text{ kHz}$ -es frekvenciával gerjesztenek $20 - 50\text{ }\mu\text{m}$ méretű buborékokat és vizsgálják a kialakuló módusképeket. Az összehasonlításhoz néhány mérést választottam, amelyek a 3.2. táblázatban kerültek összefoglalásra. A mérések úgy kerültek kiválasztásra, hogy azok egy széles paramétertartományt lefedjenek, illetve minden módus megjelenjen bennük. A szimulációkban a buborékfelbontás pedig elég nagy ahhoz, hogy a módusok láthatóan kialakuljanak. A cél a módusképek reprodukálása az ALPACA szimulációkkal. A buborékfelbontás nem túl nagy mindössze $D_{\text{cell}} \approx 230$, mivel a várhatóan kialakuló módusok amplitúdója jelentős a buborékmérethez képest.

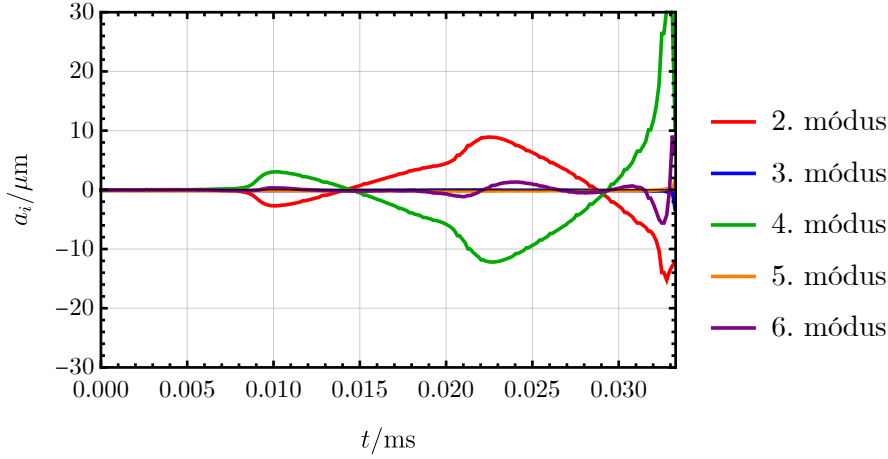
3.2. táblázat. Szimulációk paraméterei ($f = 130\text{ kHz}$ és $\sigma = 0.067\text{ N/m}$ közös)

Sorszám	Buboréksugár	Nyomásamplitúdó	Domináns módus	Buborékfelbontás
1	$R_0 = 36\text{ }\mu\text{m}$	$p_A = 1.2\text{ bar}$	4. módus	$D_{\text{cell}} = 236$
2	$R_0 = 30\text{ }\mu\text{m}$	$p_A = 1.2\text{ bar}$	3. módus	$D_{\text{cell}} = 236$
3	$R_0 = 44\text{ }\mu\text{m}$	$p_A = 1.2\text{ bar}$	5. módus	$D_{\text{cell}} = 230$
4	$R_0 = 23\text{ }\mu\text{m}$	$p_A = 0.5\text{ bar}$	3. módus	$D_{\text{cell}} = 240$
5	$R_0 = 21\text{ }\mu\text{m}$	$p_A = 0.5\text{ bar}$	2. módus	$D_{\text{cell}} = 220$
6	$R_0 = 27\text{ }\mu\text{m}$	$p_A = 0.1\text{ bar}$	nincs	$D_{\text{cell}} = 212$

1. szimuláció

A buborékot kezdetben gömbi alakból indítva a szimulációban kialakul a negyedik módus, ahogyan a 3.13a ábrán is látható. Ez nagyon hasonlít a 3.13b ábrán látható mérésben megjelenő buborékalakhoz. A módus-idő diagram a 3.8. ábrán látható, ahol megfigyelhető, hogy

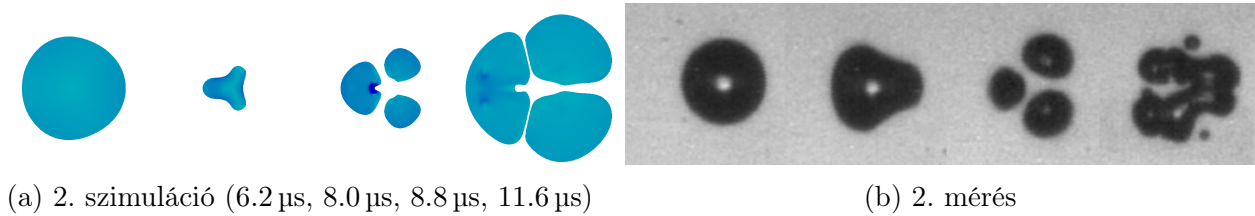
a szimulációban nem csak a négyes, hanem a kettes módus is megjelenik. A szimulációban a buborék 4 periódus után $t = 33.3\mu\text{s}$ -nél szétesik, a cikkből nem derül ki, hogy a buborék a mérés során szétesett-e. A buborékszétesésig a buboréktömeg mindössze 0.5%-a disszipálódik a szimulációban.



3.8. ábra. A módus-idő görbék az első szimulációban.

2. szimuláció

A második szimuláció során a hármas módus kialakulását várjuk, azonban a buborékot gömb alakból indítva a szimulációban a kettes és a négyes módus kombinációja alakul ki a hármas helyett. A hármas módus kialakulásához az S síkra vett szimmetria megtörése szükséges, ezért a kezdeti alak a 3.5. egyenlet szerint kerül inicializálásra. A szimulációban kialakuló buborékalak a 3.13c ábrán látható 90° -os forgatás után ami elég hasonló a a 3.13d ábrán látható mérésben megjelenő buborékalakhoz. A buborék a szimuláció során $t = 8.8\mu\text{s}$ -nál szétesik több darabra, ahogyan a mérés során is. A buborékszétesések összehasonlítása a 3.9. ábrán látható. Az ábra elforgatása miatt az ábrán a szimmetriatengely az x -tengely, ezért a szétesés után a szimulációban egy deformált gömb és egy deformált tórusz alakú buborék jön létre, a valós mérésben természetesen tórusz alakú buborékok nem jönnek létre. A tengelyszimmetrikus modell ebben az esetben már nem használható, hiszen a tengelyszimmetria rákényszerítése a buborékokra ekkor komoly hibával jár, mint az látható.

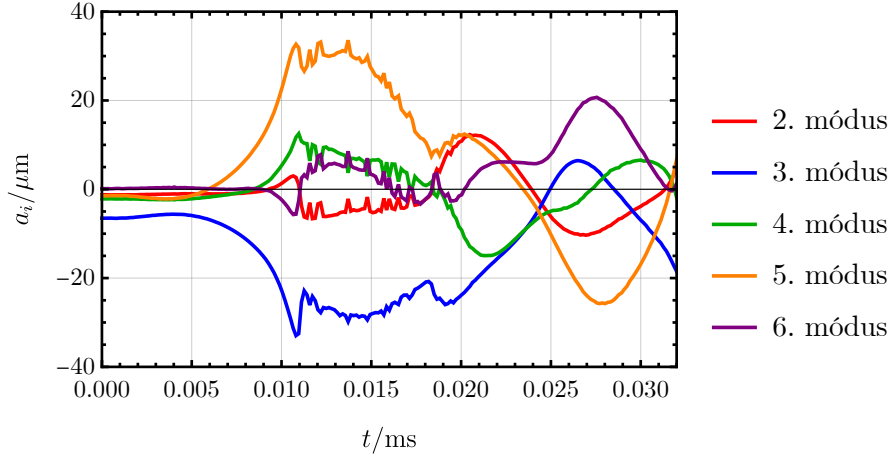


3.9. ábra. Buborékszétesés a szimulációban és a mérésben.

3. szimuláció

A második szimulációhoz hasonlóan a buborék kezdetben a 3.5. egyenlet szerinti alakban kerül inicializálásra, így páratlan számú módusok is kialakulhatnak a szimuláció során. A szimulációban kialakuló jellegzetes buborékalak $t = 18.8\mu\text{s}$ -nál a 3.13e ábrán, a mérés során létrejövő alak pedig a 3.13f ábrán látható. A módusok ábrázolásra kerültek az első négy periódus során

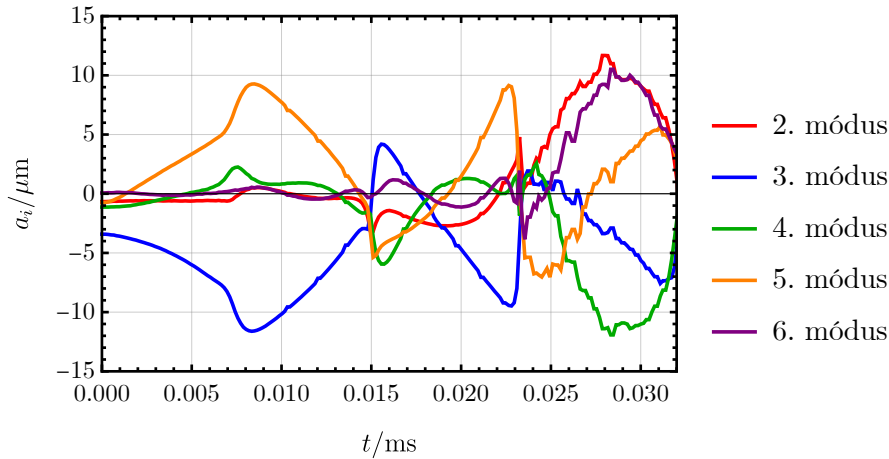
a 3.10. ábrán, ahol megfigyelhető, hogy az ötös móduson kívül a hármas is elég nagy amplitúdóval rendelkezik. Az ábrán továbbá látható, hogy a hármas és ötös módus kezdeti perturbációja ($7\text{ }\mu\text{m}$ és $2\text{ }\mu\text{m}$) lényegesen kisebb mint a később kialakuló modusamplitúdó ($30\text{ }\mu\text{m}$) azaz a kezdeti perturbáció a szimuláció során felerősödik. Az első négy periódusban a tömegdisszipáció 1% alatt marad, illetve a buborék nem esik szét.



3.10. ábra. A módus-idő görbék a harmadik szimulációban.

4. szimuláció

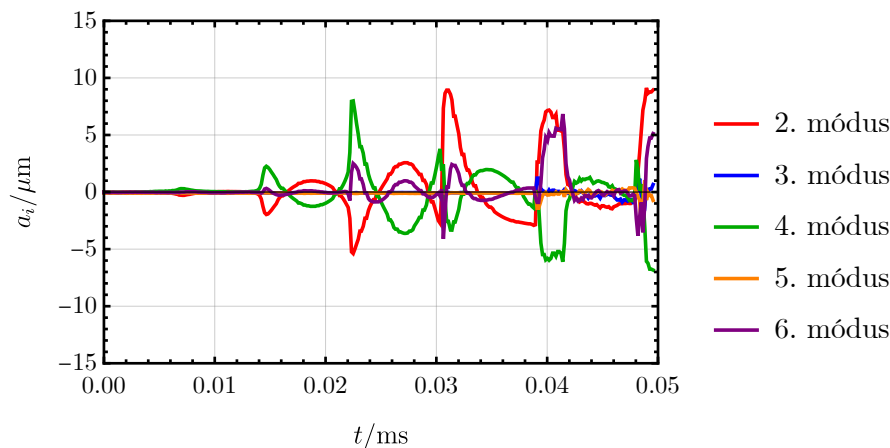
A második és a harmadik szimulációhoz hasonlóan a buborék kezdetben a 3.5. egyenlet szerinti alakban kerül inicializálásra, így páratlan számú módusok is kialakulhatnak a szimuláció során. A szimulációban kialakuló jellegzetes buborékalakok a 3.13g ábrán, a mérés során létrejövő alakok pedig a 3.13h ábrán láthatók. A módusokat jobban megnézve a 3.11. ábrán látható, hogy az ötös módus amplitúdója is jelentős, nem csak a hármasé.



3.11. ábra. A módus-idő görbék a negyedik szimulációban.

5. szimuláció

Az ötödik szimulációban a kettes módus alakul ki, ahogy a 3.13i ábrán látható. A cikk nem tartalmaz pillanatfelvételt erről a mérésről. A kettes módus mellett a négyes módus amplitúdója is jelentős ahogyan a 3.12. ábrán is látszik.



3.12. ábra. A módus-idő görbék az ötödik szimulációban.

6. szimuláció

Ezen szimuláció során a buborék gömb alakú kell hogy maradjon a cikk szerint. Az első 20 periódus során minden módus amplitúdója kisebb mint $0.2 \mu\text{m}$, tehát a buborék tényleg gömb alakú marad a szimuláció során. A buborékról két pillanatfelvétel látható a 3.13j ábrán.

Összesítés

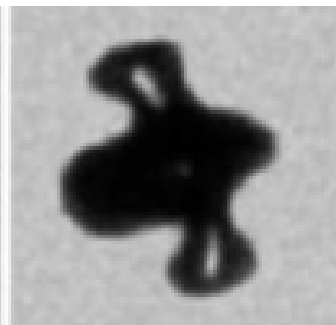
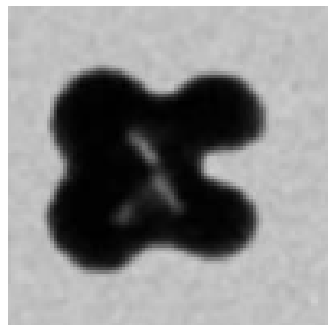
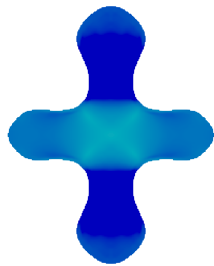
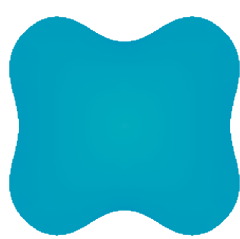
A szimulációkból megállapítható, hogy a mérésekben előkerülő módusokat az ALPACA szimulációkkal reprodukálni lehet ugyanazon paraméterek mellett. A kettes és a négyes módus kialakul a kezdetben gömb alakú buborékból, azonban a hármas és ötös módus létrehozásához a buborék kezdeti alakját meg kell perturbálni. Tulajdonképpen az összes szimuláció indítható a 3.5. egyenlet szerinti perturbált alakból, hiszen ha a perturbált páratlan módusok nem dominánsak az adott paraméterek mellett, akkor azok amplitúdója idővel lecsökken. Így végső soron nem szükséges apriori tudás a domináns módusról.

3.7. Validáció II – időgörbék összehasonlítása

A pontosabb összehasonlítás érdekében nem csak a kialakuló módusképek hanem időgörbék is összehasonlításra kerülnek. Ehhez S. Cleve és munkatársainak a *Microstreaming induced by acoustically trapped, non-spherically oscillating microbubbles* cikkben leírt mérési eredményeit veszem alapul [3]. A cikk 3 mérést tartalmaz, mindegyik mérésben más-más módus a domináns, a paramétereket a 3.3. táblázat foglalja össze.

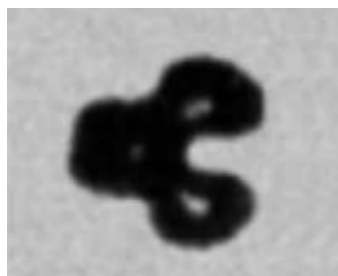
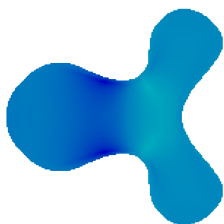
3.3. táblázat. Szimulációk paramétereit ($f = 31.25 \text{ kHz}$ közös)

Sorszám	Buboréksugár	Nyomásamplitúdó	Domináns módus	Bub.felbontás
1	$R_0 = 46.9 \mu\text{m}$	$p_A = 0.206 \text{ bar}$	2. módus	$D_{\text{cell}} = 710$
2	$R_0 = 70.5 \mu\text{m}$	$p_A = 0.128 \text{ bar}$	3. módus	$D_{\text{cell}} = 710$
3	$R_0 = 55.7 \mu\text{m}$	$p_A = 0.236 \text{ bar}$	4. módus	$D_{\text{cell}} = 702$



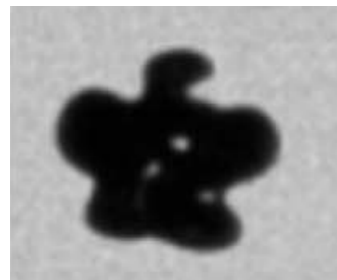
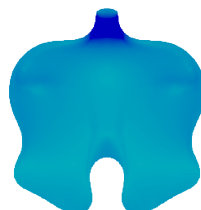
(a) 1. szimuláció ($t = 23.1 \mu\text{s}$ és $t = 32.5 \mu\text{s}$)

(b) 1. mérés



(c) 2. szimuláció

(d) 2. mérés

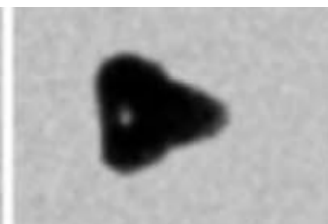
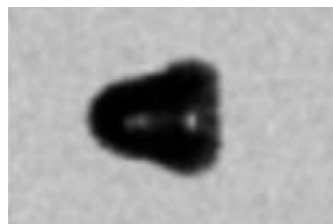


(e) 3. szimuláció

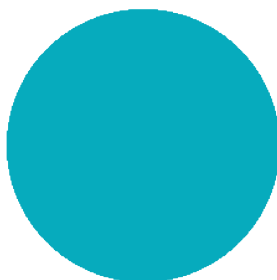
(f) 3. mérés



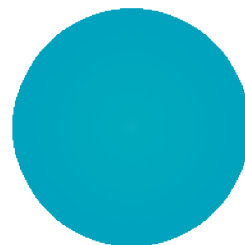
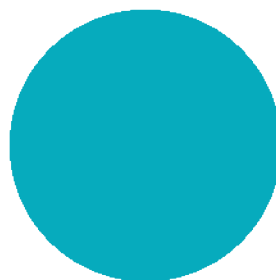
(g) 4. szimuláció ($t = 7.6 \mu\text{s}$ és $t = 15.1 \mu\text{s}$).



(h) 4. mérés



(i) 5. szimuláció ($t = 0 \mu\text{s}$ és $t = 38.9 \mu\text{s}$).



(j) 6. szimuláció ($t = 0 \mu\text{s}$ és $t = 38.9 \mu\text{s}$).

3.13. ábra. A kialakuló módusok

Az összehasonlítás során problémát okoz, hogy a méréseket nem lehet tökéletesen reprodukálni, hiszen a kezdeti feltételek nem ismertek pontosan. Ezért csak egy hosszabb tranzienst utáni összehasonlítás lehetséges. Továbbá itt is probléma, a páratlan módusok létrejötte, így a 3.5. egyenlet szerinti perturbált alakban kerülnek a buborékok inicializálásra, függetlenül attól, hogy melyik a domináns módus. A perturbált alak paramétereit egységesen a következők:

$$a = 1, \quad b = 0.5 \mu\text{m}, \quad c = 0.6 \mu\text{m}^{-2} \quad \text{és} \quad d = 0.7745. \quad (3.6)$$

Azt várjuk, hogy ha a hármas módus nem domináns, mint az első és a harmadik mérésben, akkor annak a kezdeti gerjesztése idővel lecsökken és a domináns kettes vagy négyes módus pedig

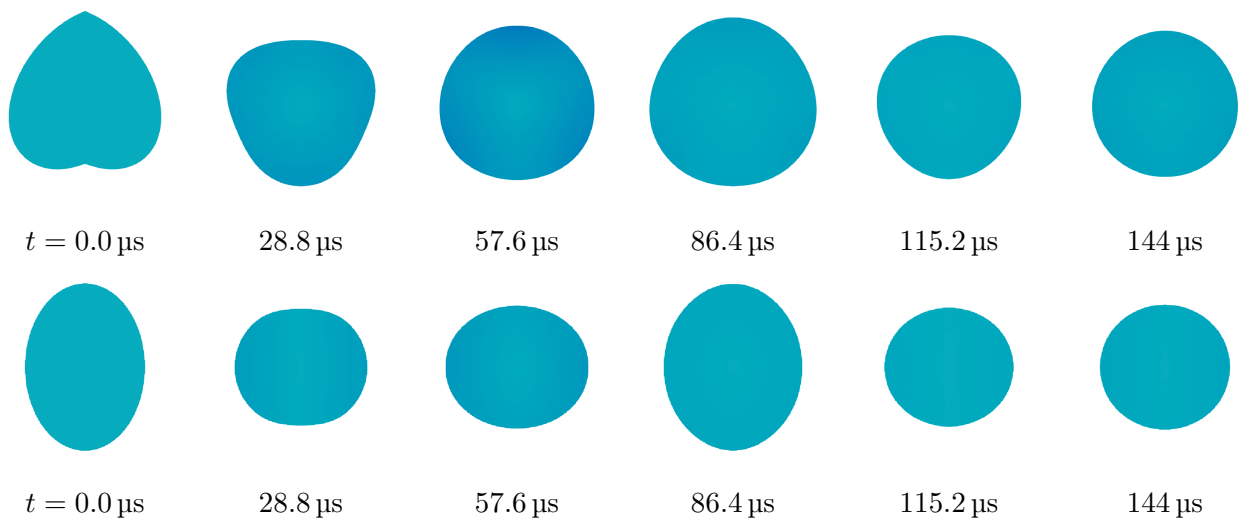
idővel kialakul. Továbbá a szimulációk során rendkívül magas buborékfelbontást alkalmazok, hogy a kialakuló módusok amplitúdói a lehető legpontosabban felbontásra kerüljenek. Például az első szimuláció során a négyes módus várható amplitúdója $2\text{ }\mu\text{m}$, ami a szokásos 200 cellás buborékfelbontás mellett mindössze 4 cellával kerülne felbontásra, ami várhatóan nem elég pontos az összehasonlításhoz. Azonban $D_{\text{cell}} = 710$ használatával ez már 15 cellával kerül felbontásra. Az eredmények összehasonlítása a 3.15.–3.18. ábrákon látható, fekete szaggatott vonal jelöli S. Cleve méréseit és piros folytonos vonal jelöli az ALPACA szimuláció eredményét.

1. szimuláció

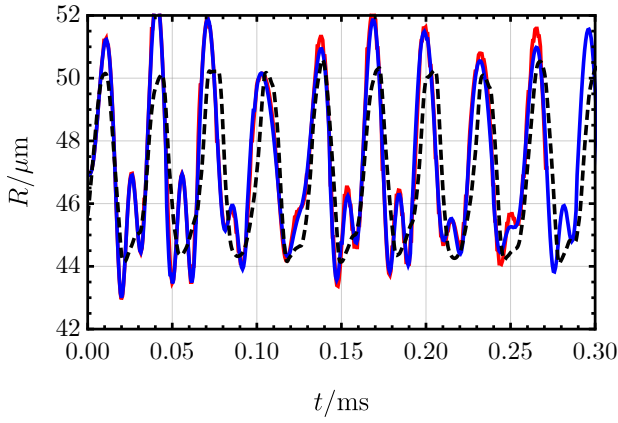
Az első szimulációban a második módus megjelenését várjuk. Azonban ahogy a 3.15c ábrán a piros görbén látható, a kettes módus nem alakul ki a szimuláció során, ezért egy másik kezdeti feltétellel is lefuttatásra kerül a szimuláció. A kék görbe egy olyan kezdeti alakból indított szimulációt mutat, ahol a level-set függvény kezdetben a következő ellipszis

$$\phi(x, y) = -R_y + \sqrt{\left(\frac{R_y}{R_x}x\right)^2 + (y - y_0)^2}, \quad (3.7)$$

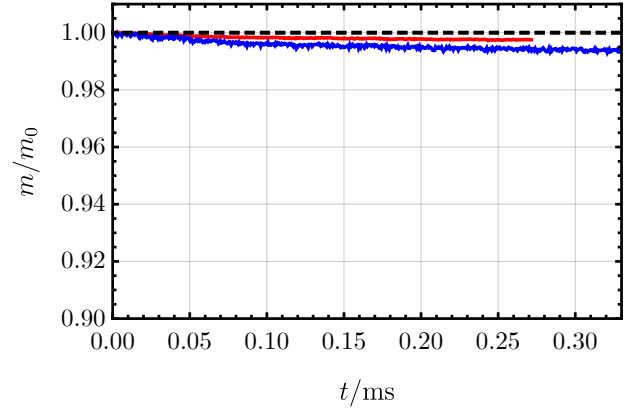
ahol $R_x = 42\text{ }\mu\text{m}$ az ellipszis fél kistengelye és $R_y = 58.48\text{ }\mu\text{m}$ az ellipszis fél nagytengelye. A paraméterek úgy kerültek megválasztásra, hogy a létrejövő ellipszoid térfogata megegyezzen egy $R_E = 46.9\text{ }\mu\text{m}$ sugarú gömb térfogatával. A 3.15c ábrán a kék görbe mutatja az ellipszoid alakú buborék második módusának az amplitúdóját, látható, hogy a kettes módus amplitúdója ebben az esetben nullához tart. Összességében megállapítható a 3.15c–3.15f ábrákból, hogy a buborék összes módusa a nullához tart a szimulációkban, a kezdeti alaktól függetlenül. A szimuláció szerint, a buborék gömbi alakja stabil az adott paraméterek mellett. A buboréksugár összehasonlítása a 3.15a ábrán látható, megfigyelhető, hogy a szimuláció viszonylag jól visszaadja a buborék radiális oszcillációit. A tömegveszteség mindkét kezdeti feltételből indított szimuláció esetén minimális ahogyan a 3.15b ábrán látható. A 3.14. ábrán láthatók pillanatfelvételek a buborékról a két különböző kezdeti feltételből való indítás során, megfigyelhető, hogy mindkét esetben a buborék egy tranziens után gömb alakúvá válik.



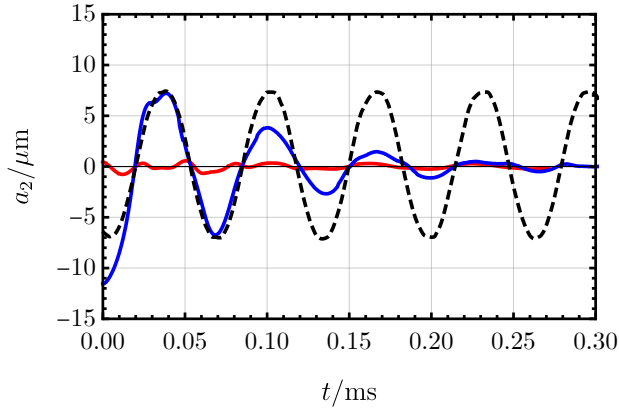
3.14. ábra. Pillanatfelvételek az első szimulációból.



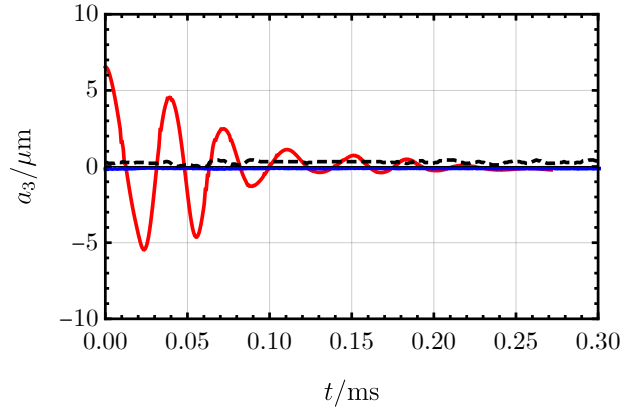
(a) Ekvivalens buboréksugár



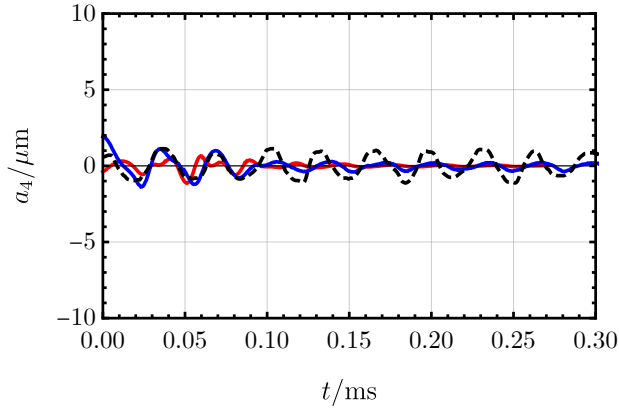
(b) Dimenziótlan buboréktömeg



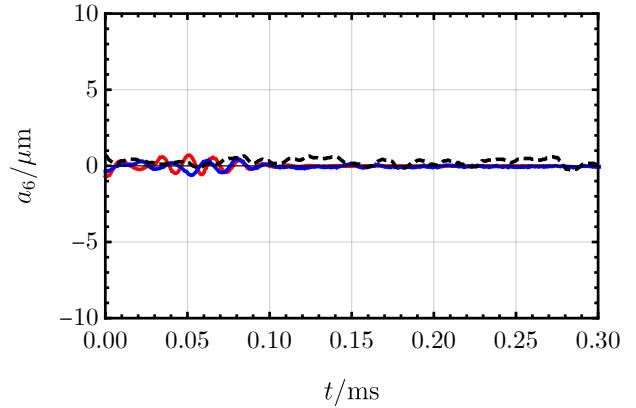
(c) 2. módus



(d) 3. módus



(e) 4. módus



(f) 6. módus

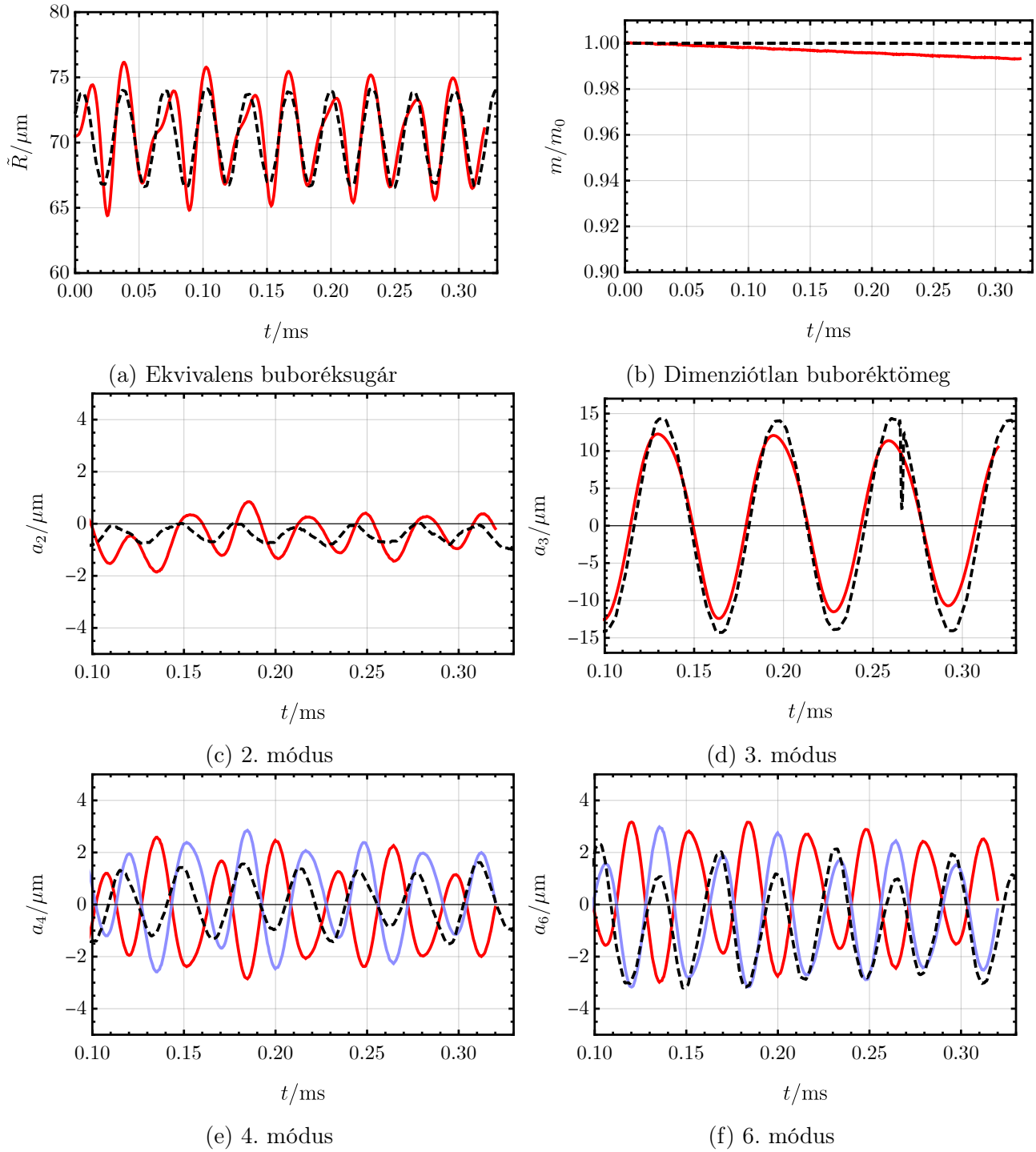
3.15. ábra. Az első szimuláció eredményei. Piros – kezdeti alak a 3.5. egyenlet szerint, kék – kezdeti alak a 3.7. egyenlet szerint, szaggatott fekete – mérés.

2. szimuláció

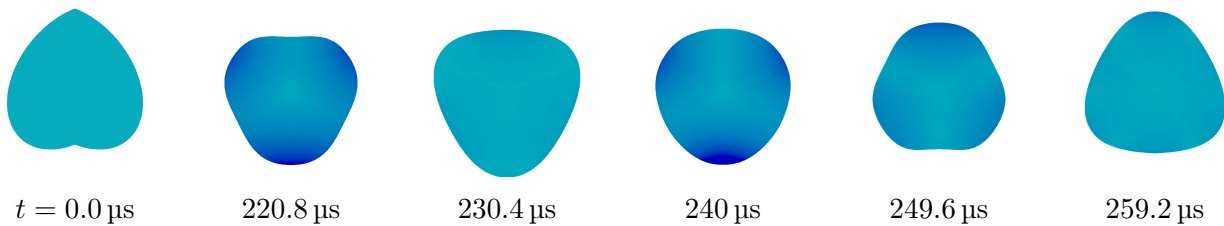
A pillanatfelvételeket a második szimulációról a 3.17. ábra mutatja, ahol látható a harmadik módusra jellemző buborékalak. A buboréksugár, a dimenziótlan buboréktömeg és a módus-amplitúdók a 3.16. ábrán láthatók. Az ábrákon fekete szaggatott vonal jelöli a méréseket ([3] szerint) és piros vonal az ALPACA szimuláció eredményét. A szimuláció során a buboréktömeg disszipációja kevesebb mint 1% ahogyan a 3.16b ábrán látható, így ez nem okoz problémát. A 3.16a ábrán a buboréksugárban kisebb eltérés mutatkozik. A második és a harmadik mó-

dust a szimuláció elég jól visszaadja. A negyedik és a hatodik módus azonban a szimulációban ellentétes fázisban jelentkezik mint a mérésben, a 3.16e és a 3.16e ábrákon világoskék jelöli a fél fázissal eltolt görbéket. Látható, hogy az eltolt görbék már jobban illeszkednek a mérési eredményekre.

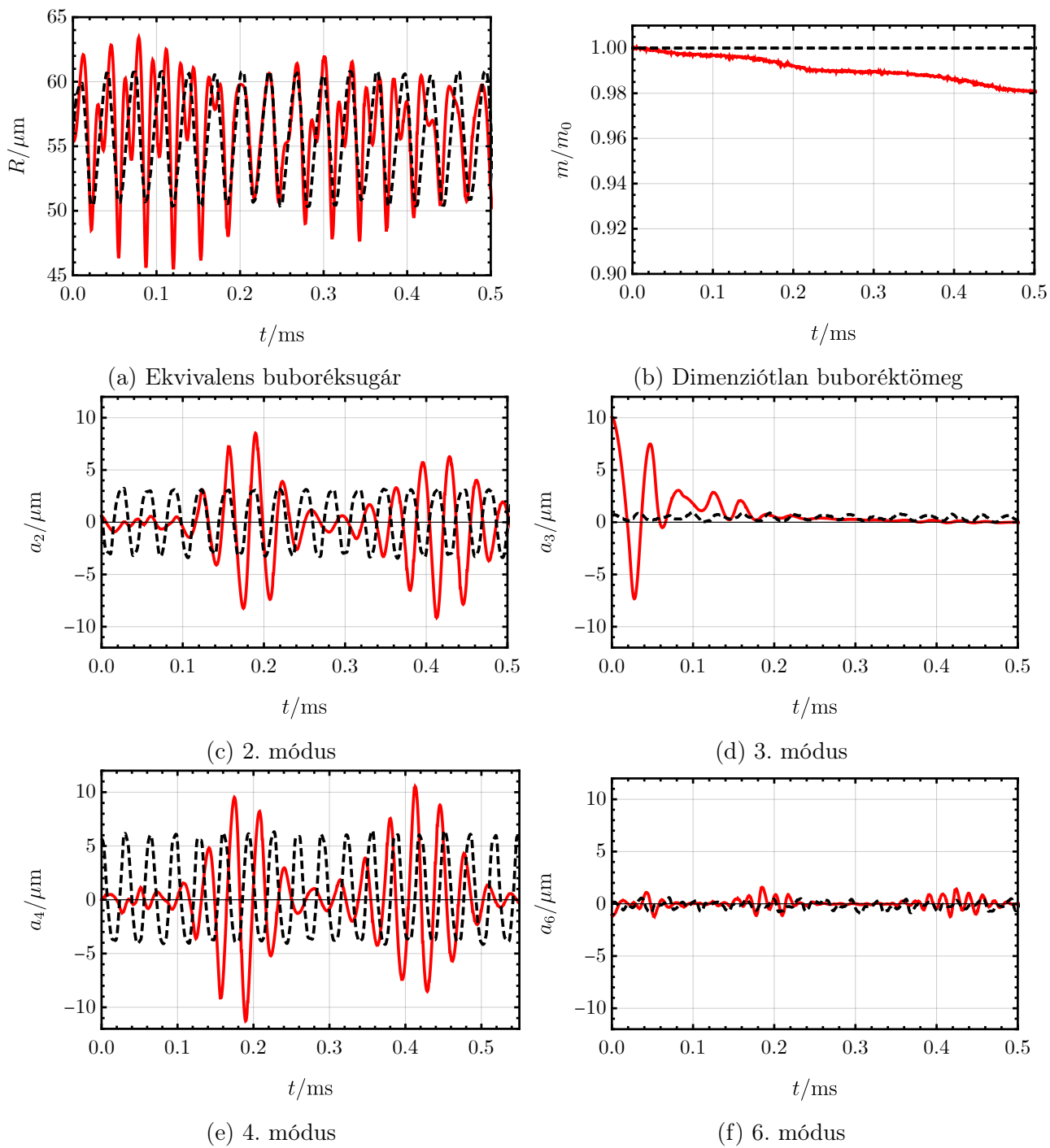
Összességében az látható, hogy ebben a szimulációban a harmadik módus tényleg domináns, ugyanúgy mint a mérés során. A többi módus amplitúdója is nagyságrendileg megegyezik, azonban a magasabb módusok ellentétes fázisban jelennek meg a szimulációban, ezek az ellentétes módusok okozzák a buboréksugár eltérését is.



3.16. ábra. A második szimuláció eredményei. Piros – szimuláció, szaggatott fekete – mérés.



3.17. ábra. Pillanatfelvételek a második szimulációból.



3.18. ábra. A harmadik szimuláció eredményei. Piros – szimuláció, szaggatott fekete – mérés.

3. szimuláció

A 3.18. ábrán a korábbiakhoz hasonlóan a mérés (fekete szaggatott) és a szimuláció (piros) összehasonlítása látható. A szimuláció során a buboréktömeg disszipációja közel 2% ahogyan a 3.18b ábrán látható. A buboréksugár amplitúdójában jó egyezés mutatkozik a mérés és a szimuláció között, viszont a méréssel ellentétben a szimulációban van hogy egy periódus alatt több oszcilláció is történik (lásd $t = 0.3$ ms és $t = 0.4$ ms között). A módusok időgörbéi kvantitatívan eltérnek, azonban várakozásoknak megfelelően a negyedik módus amplitúdója nagyobb mint a másodiké. A többi módus amplitúdója szinte nulla, a mérésben és a szimulációban is. A harmadik módus kezdetben lényeges perturbációval kerül inicializálásra, azonban ez egy rövid tranzienst után ($t \approx 0.2$ ms) teljesen lecsillapodik.

Összességében az látható, hogy a kezdetben perturbált hármas módus gerjesztése lecsillapodik, miközben a kettes és a négyes módus pedig felerősödik, ahogyan az várható.

4. Összefoglalás

4.1. Nehézségek

A dolgozatban láthattuk, hogy akusztikusan gerjesztett buborékokat jól lehet szimulálni az ALPACA megoldóval, azonban a szimulációk során több probléma is felmerült.

1. A buborék tömege a szimuláció során disszipálódik, ami egy nem fizikai jelenség. A tömegdisszipációt a fázishatár pontatlan nyomonkövetése okozza. A dolgozat során láttuk, hogy a tömegdisszipáció igen jelentős tud lenni egy buborékösszeomlás során (lásd 2.8. ábra). A legtöbb esetben az eredmények megfelelőek voltak akkor, ha a tömegdisszipáció 1% alatt maradt a szimuláció során. Megállapításra került, hogy a buborékfelbontás (D_{cell}) duplázásával negyedére csökkenthető a tömegdisszipáció mértéke, így a felbontás növelésével a szimulációk megjavíthatók.
2. A szimuláció rendkívül lassan fut le akkor, ha a szimulációkban alacsonyabb az akusztikus gerjesztési frekvencia vagy a buborék szétesik. Ennek az oka, hogy alacsonyabb frekvenciákon a periódusidő hosszabb, így ugyanannyi periódus szimulálása összességében több időlépést igényel. A futási idő a felbontás duplázásával a háromszorosára nő, ez látható a 2.2. táblázatban, illetve ez egyezik a tavalyi TDK dolgozatom megállapításaival [14]. A SUPERMUC-NG szuperszámítógépen egy feladat futási ideje maximum 48 óra lehet a feladatütemezés hatékonyabbá tétele miatt. Természetesen a szimuláció később folytatható egy korábbi állapotból, így ez a probléma megoldható.
3. Amennyiben a buborék kezdetben gömb alakú, az nem csak y tengelyszimmetriával rendelkezik, hanem szimmetrikus az x tengellyel párhuzamos S síkra is ahogyan a 3.4a ábrán látható. A páratlan módusok nem szimmetrikusak az S síkra, azonban ez a szimmetria magától nagyon lassan bomlik meg, így a szimulációk felgyorsítása érdekében a buborék kezdetben nem gömb alakban, hanem a harmadik módus lényeges perturbációjával került inicializálásra. A 3.7. fejezetben minden szimulációt ebből a perturbált alakból indítottam, akkor is ha a szimulációban páratlan módusok nem alakulnak ki. Ennek a megközelítésnek az előnye, hogy nem szükséges előzetes tudás a kialakuló domináns módusokról, amennyiben a harmadik módus nem domináns az lecseng a szimulációban ahogyan a 3.15d és a 3.18d ábrákon is történt.

4.2. Gömb alakú buborékok

A 2. fejezetben gömb alakú buborékok szimulációját mutattam be az ALPACA megoldóval. Gömb alakú buborékok oszcillációit a Keller-Miksis egyenlettel is le lehet írni. A fejezetben megállapításra került, hogy a gömbi lengések pontos szimulációjához nem szükséges túl nagy buborékfelbontás, $D_{\text{cell}} \approx 200$ a legtöbb esetben elégséges, így a szimulációk futtatása belefér a 48 órás futtatási limitbe, még alacsonyabb frekvenciák esetén is.

Gömb alakú buborékok szimulációja akkor ad valós eredményeket, ha a tömegdisszipáció kicsi, amit megfelelő buborékfelbontással lehet elérni. Mindezek ellenére is adódhatnak eltérések, ahogyan azt a magas frekvenciás ($f = 480$ kHz) szimuláció során láthattuk. Összességében azonban megállapítható, hogy mind a 18 szimuláció során kvantitatív egyezés mutatkozik a szimuláció és a Keller-Miksis egyenlet között, egészen a buborék gömbi alakjának az elvesztéséig. Kijelenthető tehát, hogy *az ALPACA alkalmas gömb alakú buborékok megbízható szimulációjára.*

4.3. Nem gömb alakú buborékok

A 3. fejezetben láttuk, hogy nem gömbszimmetrikus buborékok szimulációja lényegesen nehezebb, hiszen itt rendszeresen előkerül a nagy futási idő és a páratlan módusok kialakulásának a problémája. Ezek azonban a dolgozatban megoldásra kerültek. A dolgozatban bemutatásra került a szakirodalom alapján a nem gömbi buborékok modellezése, ez a buborék alakjának a Fourier sorfejtésével lehetséges Legendre polinomok bázisában. Ezt a posztprocesszálás során a saját magam által készített programban felhasználtam a módusok amplitúdójának a pontos meghatározásához.

Először a megfelelő határfelületi megoldó beállítások kerültek meghatározásra. Az eredményeim szerint a linearizált határfelületi Riemann-megoldó jól működik, amennyiben a felületen kialakuló módusokat szeretnénk szimulálni. A level-set újrainicializációs iterációk száma is változtatásra került, ennek a változtatása nem okoz különbséget a kialakuló módusokban. Megállapításra került, hogy nem gömb alakú buborékok szimulációja lényegesen nagyobb felbontást igényel, hiszen nem elég a gömbi oszcilláció elégséges felbontása, a módusok elég jó felbontása is szükséges.

Validáció I

A validáció első lépése az volt, hogy M. Versluis és munkatársainak a mérési eredménye alapján [37] létrehoztam az első 5 módust. A cél annak a megmutatása volt, hogy a mérések során adott paraméterek mellett kialakuló buborékalakok az ALPACA szimuláció esetén is létrejöhetnek ugyanazon paraméterek mellett. Ez egy kvalitatív összehasonlítás, M. Versluis cikke mindössze a buborékalakokat és a domináns módusokat tartalmazza. Mint látható a 3.13. ábrán, mind a hat szimulációban hasonló buborékalakokat kaptam, mint amik a mérésekben megfigyelésre kerültek. Azonban ez nem elegendő az ALPACA validációjához hiszen

1. a módusok amplitúdója nem került közvetlen összehasonlításra,
2. a kezdeti feltételek a páratlan módusok esetén mások voltak mint páros módusok esetén, hogy a páratlan módusok kialakulhassanak, továbbá
3. a buborék több szimuláció során is szétesett néhány periódus után, azonban a cikkből a buborékszétesés nem minden esetben derült ki.

Validáció II

A validáció második lépése kvantitatív összehasonlítás volt S. Cleve és munkatársainak a mérésével [3]. Itt már a módusamplitúdók közvetlen összehasonlításra kerülnek, illetve minden esetben ugyanazt a kezdeti buborékalakot használtam, továbbá a szimulációk során a buborék sem esik szét, sem a mérésben sem a szimulációban. A szimulációkban rendkívül nagy buborék-felbontást alkalmaztam, így mindegyik szimuláció futási ideje közel egy hét volt. A módus-idő görbék összehasonlítása alapján megállapítható, hogy a három esetből kettőt sikerült reprodukálni az ALPACA-val. Az első szimulációban a buborék kezdeti perturbációja lecsengett, pedig a mérés szerint a második módus oszcillációjának kellett volna kialakulni. A második és a harmadik szimulációban a domináns módusok egyeznek a mérésben és a szimulációban, a módusok amplitúdója is nagyjából megegyezik. Különbségek adódnak, például a második szimulációban a magasabb módusok ellentétes fázisban jelentek meg, a negyedik szimulációban pedig egy perióduson belül a buboréksugár több oszcillációja is megfigyelhető volt.

Az eltéréseket okozhatják a különböző kezdeti feltételek, hiszen a valós kezdeti feltételek, például a buborékon belüli kezdeti nyomás- és sűrűségeloszlás nem ismert. A paraméterek, mint például a viszkozitás, a felületi feszültség, a hangsebesség, a nyomásamplitúdó és az egyensúlyi buboréksugár a mérések során hibával terheltek és ezek a kis eltérések is nagy különbségeket okozhatnak. Mindezeket figyelembe véve, megállapítható, hogy az ALPACA használható buborékok nem gömbi módusainak a szimulációjára is, amennyiben

1. a buborékfelbontás elég nagy,
2. a módusamplitúdók nem túl nagyok, azaz a buborék nem esik szét, továbbá
3. a buborék egyik páratlan módusa kezdetben perturbált, hogy páratlan módusok is kialakulhassanak.

Összességében mindezek betartása mellett sem várhatunk pontos kvantitatív egyezést, azonban a domináns módust és annak az amplitúdóját megállapíthatjuk egy ALPACA szimulációval a legtöbb esetben. A nagyobb megbízhatóság érdekében azonban további összehasonlítások készítése szükséges.

Hivatkozások

- [1] 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.
- [2] Nils Hoppe és tsai. „ALPACA - a level-set based sharp-interface multiresolution solver for conservation laws”. *Computer Physics Communications* 272 (2022), 108246. old.
- [3] Sarah Cleve és tsai. „Microstreaming induced by acoustically trapped, non-spherically oscillating microbubbles”. *Journal of Fluid Mechanics* 875 (2019), 597–621. old.
- [4] Werner Lauterborn és Thomas Kurz. „Physics of bubble oscillations”. *Reports on progress in physics* 73.10 (2010), 106501. old.
- [5] 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.
- [6] TJ Mason, AP Newman és SS Phull. „Sonochemistry in water treatment”. *Division of Chemistry, Coventry University, Coventry CVI 5FB* (1994), 3927–3933. old.
- [7] Amir Hassanjani-Roshan és tsai. „Synthesis of iron oxide nanoparticles via sonochemical method and their characterization”. *Particuology* 9.1 (2011), 95–99. old.
- [8] Mohammed Ali Dheyab és tsai. „Mechanisms of effective gold shell on Fe₃O₄ core nanoparticles formation using sonochemistry method”. *Ultrasonics sonochemistry* 64 (2020), 104865. old.
- [9] 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.
- [10] W Bonrath. „Industrial applications of sonochemistry in the syntheses of vitamin-building blocks”. *Ultrasonics sonochemistry* 10.2 (2003), 55–59. old.
- [11] Timothy J Mason. „Sonochemistry and the environment—Providing a “green” link between chemistry, physics and engineering”. *Ultrasonics sonochemistry* 14.4 (2007), 476–483. old.
- [12] Timothy J Mason. „Sonochemistry and sonoprocessing: the link, the trends and (probably) the future”. *Ultrasonics Sonochemistry* 10.4-5 (2003), 175–179. old.
- [13] Seyedali Asgharzadehahmadi és tsai. „Sonochemical reactors: Review on features, advantages and limitations”. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 63 (2016), 302–314. old.
- [14] Nagy Dániel. „Akusztikusan gerjesztett buborékok többfázisú numerikus szimulációja korszerű véges térfogat módszerrel”. *BME-GPK TDK Konferencia* (2021).
- [15] Nagy Dániel és Hegedűs Ferenc. „Akusztikusan gerjesztett gázbuborékok direkt numerikus szimulációja”. *Nemzetközi Gépészeti Konferencia–OGÉT* (2022), 84–87. old.
- [16] Kálmán Klapcsik. „GPU accelerated numerical investigation of the spherical stability of an acoustic cavitation bubble excited by dual-frequency”. *Ultrasonics Sonochemistry* 77 (2021), 105684. old.
- [17] Axel Zimmermann. „Simulation of acoustic excited bubble oscillations with the compressible, multi-phase framework ALPACA”. Dissz. 2020.

- [18] 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.
- [19] Nagy Dániel. *ALPACA szeminárium*. 2022. URL: shorturl.at/bezP9 (elérés dátuma 2022. 09. 28.).
- [20] Stanley Osher és Ronald P Fedkiw. „Level set methods: an overview and some recent results”. *Journal of Computational Physics* 169.2 (2001), 463–502. old.
- [21] Chohong Min. „On reinitializing level set functions”. *Journal of Computational Physics* 229.8 (2010), 2764–2772. old.
- [22] Xiang Yu Hu és Boo Cheong Khoo. „An interface interaction method for compressible multifluids”. *Journal of Computational Physics* 198.1 (2004), 35–64. old.
- [23] Ami Harten. „Multiresolution algorithms for the numerical solution of hyperbolic conservation laws”. *Communications on Pure and Applied Mathematics* 48.12 (1995), 1305–1342. old.
- [24] Nils Hoppe, Stefan Adami és Nikolaus A. Adams. „A parallel modular computing environment for three-dimensional multiresolution simulations of compressible flows”. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 391 (2022), 114486. old. ISSN: 0045-7825. DOI: 10.1016/j.cma.2021.114486.
- [25] 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.
- [26] Francis H Harlow és Anthony A Amsden. *Fluid Dynamics. A LASL Monograph*. Techn. jel. Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States), 1971.
- [27] 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.
- [28] Nagy Dániel. *Command Line Pvpython Postprocessor for Bubble Dynamics*. 2022. URL: <https://github.com/nnagyd/Command-Line-Pvpython-Postprocessor> (elérés dátuma 2022. 10. 27.).
- [29] Stephen J Shaw. „Nonspherical sub-millimeter gas bubble oscillations: Parametric forcing and nonlinear shape mode coupling”. *Physics of Fluids* 29.12 (2017), 122103. old.
- [30] Matthieu Guédra és Claude Insera. „Bubble shape oscillations of finite amplitude”. *Journal of Fluid Mechanics* 857 (2018), 681–703. old.
- [31] Stephen J Shaw. „Translation and oscillation of a bubble under axisymmetric deformation”. *Physics of Fluids* 18.7 (2006), 72104. old.
- [32] Eleuterio F Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [33] Richard Saurel, Sergey Gavriluk és François Renaud. „A multiphase model with internal degrees of freedom: application to shock–bubble interaction”. *Journal of Fluid Mechanics* 495 (2003), 283–321. old.
- [34] XY Hu és tsai. „Modeling full-Mach-range cavitating flow with sharp interface model”. *Proceedings of the Summer Program*. 2008, 183. old.

- [35] Bernd Einfeldt. „On Godunov-type methods for gas dynamics”. *SIAM Journal on numerical analysis* 25.2 (1988), 294–318. old.
- [36] Stephen J Shaw. „The stability of a bubble in a weakly viscous liquid subject to an acoustic traveling wave”. *Physics of Fluids* 21.2 (2009), 22104. old.
- [37] Michel Versluis és tsai. „Microbubble shape oscillations excited through ultrasonic parametric driving”. *Physical review E* 82.2 (2010), 26321. old.

Köszönetnyilvánítás

Köszönet *Dr. Hegedűs Ferenc* témavezetőmnek 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. A Kulturális és Innovációs Minisztérium **UNKP-22-2-I-BME-68** kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.



NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI
ÉS INNOVÁCIÓS HIVATAL



KULTURÁLIS ÉS INNOVÁCIÓS
MINISZTERIUM

UNKP Új Nemzeti
Kiválóság Program