

Nagy Dániel

Gépészmérnöki Kar

Hidrodinamikai Rendszerek Tanszék

Nagy teljesítményű számítástechnika alkalmazása buborékok 3 dimenziós dinamikai modellezésére a szonokémiában

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

Szonokémiai reaktorok szimulációja során figyelembe kell venni a buborékok dinamikáját, a buborékok mozgását az akusztikus térben, illetve a buborékok összeolvadását és szétesését. Jelenleg a fő kihívást a buborékok szétesésének a leírása jelenti; még nem léteznek megbízható modellek, amikkel buborékok szétesése leírható. **A kutatásom során egyetlen ultrahanggal gerjesztett buborék viselkedését vizsgálom közvetlen numerikus szimulációval, ahol a hosszú távú cél, a buborékszétesések jobb megértése.** A szimulációkhoz a nyílt forráskódú ALPACA programcsomagot használom, ami alkalmas szuperszámítógépes futtatásra is. Továbbá az ALPACA lehetővé teszi többfázisú, összenyomható áramlások szimulációját adaptív hálózással, így az alkalmas egyetlen néhány mikron méretű buborék szimulációjára.

A szimulációk során a buborékot egy akusztikus állóhullám amplitúdópontjába helyezem és a számítási igény csökkentése érdekében kihasználom a buborékok szimmetriáját. Az akusztikus gerjesztés hatására a buborék pulzálni kezd, illetve a buborék felszínén felületi lengések jelennek meg. A buborék pulzálását a Keller-Miksis egyenlet írja le, ami kiegészíthető a felületi módusok figyelembe vételével. **A fél éves kutatásom célja az ALPACA szimuláció összevetése a felületi módusokat leíró modellel, illetve kísérletekkel.** Az előadásban kitérek a szimulációk és az eredmények feldolgozásának a részleteire.

