

Az ALPACA szoftver validációja akusztikusan gerjesztett gázbuborékok szimulációjára

Validation of ALPACA for the simulation of acoustically excited gas bubbles

NAGY Dániel¹, M.Sc. hallgató HEGEDŰS Ferenc¹, egyetemi docens

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Gépészmérnöki Kar,
Hidrodinamikai Rendszerek Tanszék
H-1111, Budapest, Műegyetem rkp. 3. Tel.: +361-463-1680. Fax: +361-463-3091.
E-mail: nagyd@edu.bme.hu, fhegedus@hds.bme.hu Web: http://www.hds.bme.hu

Abstract

Acoustically excited gas bubbles appear primarily in sonochemistry. The objective of sonochemistry is to increase the yield of chemical processes with ultrasound excitation. CFD simulations of acoustically excited bubbles can give us new insights into bubble dynamics, such as the break-up of a bubble. In this paper an extensive validation of the ALPACA solver is presented by comparing the simulation results to the Keller-Miksis equation, which describes the oscillations of a spherical bubble in an acoustic field.

Keywords: : sonochemistry Keller-Miksis equation, ALPACA, validation, bubble dynamics

Kivonat

Akusztikusan gerjesztett gázbuborékok elsősorban a szonokémiában jelennek meg. A szonokémia lényege, kémia folyamatok kihozatalának a növelése ultrahangos gerjesztéssel. Akusztikusan gerjesztett buborékok CFD szimulációi új betekintést nyújthatnak a buborékok dinamikájába, például a buborékok felbomlásába. Ez a munka az ALPACA megoldó átfogó validációját mutatja be, a szimulációk eredményei a Keller-Miksis egyenlettel kerülnek összevetésre, amely egyetlen gömb alakú buborék oszcillációját írja le akusztikus térben.

Kulcsszavak: szonokémia, Keller-Miksis egyenlet, ALPACA, validáció, buborékdinamika

1. Bevezetés

Akusztikusan gerjesztett gázbuborékok elsősorban a szonokémiában jelennek meg. Amennyiben egy folyadékot nagy intenzitású ultrahanggal besugárunk, akkor abban buborékok és buborékfelhők jönnek létre a jelentős nyomásváltozás miatt. A buborékok mérete jellemzően néhány mikron, ezek a buborékok a változó nyomás miatt periodikusan kitágulnak és összehúzódnak. Előfordulhatnak gyors buborékösszeomlások is, amikor a buborék sugara – és ezáltal a térfogata – rövid idő alatt nagyságrendekkel lecsökken, ezt hívjuk akusztikus kavitációnak. Az akusztikus kavitáció során a buborékban lévő gáz nyomása és hőmérséklete is lényegesen megnő. A szonokémia lényege az akusztikus kavitáció felhasználása kémia folyamatok hatékonyabbá tételére. Számos alkalmazási lehetőség létezik, például a hidrogéngyártás, a nano-fémrészecske gyártás vagy a víztisztítás [1].

Akusztikusan gerjesztett gömbszimmetrikus buborékokat a Keller-Miksis egyenlettel tudunk leírni [2]. A Keller-Miksis egyenlet egy másodrendű differenciálegyenlet a buboréksugárra amely feltételezi, hogy a buborék gömb alakú és annak nyomása és sűrűsége homogén. A buborékok gömbi alakja azonban a nagyobb buborékösszeomlások után jellemzően elveszik és a határfelületen különféle hullámok jelennek meg. A kutatásunk célja a felületi hullámok és a buborékszétesések jobb megértése többfázisú CFD szimulációk által. A szimulációk előnye a mérésekkel szemben, hogy a kisméretű buborék ($\approx 10 \mu\text{m}$) amelyek összeomlása rendkívül rövid ideig tart ($\approx 10 \mu\text{s}$) könnyen és pontosan megfigyelhetők. A legnagyobb nehézség az akusztikus tér szimulációja, amely a folyadék és a gáz összenyomható modellezését igényli. Továbbá, a buborék-határfelület numerikus leírása is problémákba ütközhet. Numerikus szimulációk során a validáció elengedhetetlen ahhoz, hogy meggyőződjünk, hogy a szimuláció valós eredményeket ad, ez különösen igaz

többszáz számú numerikus szimulációkra. Ebben a dolgozatban a nyílt-forráskódú ALPACA szoftvercsomag [3,4] validációját mutatjuk be, gömbszimmetrikus buborékok szimulációjának az esetére. Négy különböző eset kerül bemutatásra és mindegyik összevetésre kerül a Keller-Miksis egyenlettel. A Keller-Miksis egyenlet megoldását ezen dolgozat nem tárgyalja, az számos szakirodalomban megtalálható [5].

2. Modell

A szimulációk során egyetlen gömbszimmetrikus buborékot vizsgálunk egy tengelyszimmetrikus modell segítségével. Az áramlási tér hossza l és szélessége b . Állóhullámok kialakulásának az érdekében az áramlási tér hossza a hullámhossz λ egész számú többszöröse, azaz $l = n \cdot \lambda$. Az áramlási térnek elég szélesnek kell lennie, hogy a szélén elhelyezett peremfeltétel ne befolyásolja a buborékot. Az 1. ábra bal oldalán látható a szimuláció elrendezése, a gömbszimmetrikus buborék az áramlási tér közepére kerül. Az északi és a déli oldalon egy-egy fal helyezkedik el, a nyugati oldalon egy szimmetriatengely, a keleti oldalon pedig zéró gradiens peremfeltétel kerül alkalmazásra. Az állóhullám inicializálásának az érdekében először írjuk fel egy y irányban kialakuló állóhullám nyomás p , sűrűség ρ és sebesség v függvényét:

$$p(t, y) = p_0 + p_A \sin(2\pi f \cdot t) \cos(2\pi k \cdot y), \quad (1)$$

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

$$v(t, y) = -\frac{p_A}{c \rho_0} \cos(2\pi f \cdot t) \sin(2\pi k \cdot y), \quad (3)$$

ahol $p_0 = 10^5 \text{ Pa}$ a légköri nyomás, p_A a nyomásamplitúdó, $k = 1/\lambda$ a hullámszám, $c = 1625 \text{ m/s}$ a hangsebesség vízben, f a frekvencia és $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$ a víz sűrűsége légköri nyomáson. A kezdeti feltételek az (1)-(3) egyenletekből következnek a $t = 0$ esetre:

$$p(0, y) = p_0, \quad (4)$$

$$\rho(0, y) = \rho_0 \quad \text{és} \quad (5)$$

$$v(0, y) = -\frac{p_A}{c \rho_0} \sin(2\pi \lambda \cdot y). \quad (6)$$

A buborék kezdeti sugara R_0 és a buborék az áramlási tér közepén, az állóhullám duzzadóhelyén (legnagyobb nyomásamplitúdójó pont) helyezkedik el. Kezdetben a buborék egyensúlyban van, azaz a buboréknyomás

$$p_{B0} = p_0 + 2 \frac{\sigma}{R_E}, \quad (7)$$

ahol $\sigma = 0.0728 \text{ N/m}$ a felületi feszültség együttható és R_E a kezdeti egyensúlyi buboréksugár. A szimulációk során a vízre és a levegőre is a merev gáz állapotegyenletet használjuk. A merev gáz állapotegyenlet [6] a

$$p = (\gamma - 1)pe - p_\infty, \quad (8)$$

egyenlettel írható le, ahol e a belső energia, γ a specifikus hőkapacitások aránya és p_∞ a hattérnyomás. A paraméterek vízre $\gamma_v = 4.4$ és $p_{\infty, v} = 6 \cdot 10^8 \text{ Pa}$ [7]. A gázra pedig, $\gamma_g = 1.4$ és a $p_{\infty, g} = 0 \text{ Pa}$ és ezekkel a paraméterekkel az ideális gáz állapotegyenletét kapjuk.

Az ALPACA a numerikus hálót automatikusan készíti el multiresolution algoritmus használatával. Továbbá, a háló időlépésről időlépésre változik, mindig négyzetekből áll és a hálózási paraméterek úgy kerültek beállításra, hogy a legkisebb cellaméret mindig a buborék határfelületén kerüljön alkalmazásra. Egy tipikus háló az 1. ábra jobb oldalán látható. A háló finomságát a buborékfelbontással jellemezhetjük. A buborékfelbontás (D_{cell}) azon cellák számát adja meg, amellyel a buborék kezdetben az átmérője mentén felbontásra kerülne, hogyha a teljes átmérő a legkisebb cellamérettel kerülne felbontásra, tehát

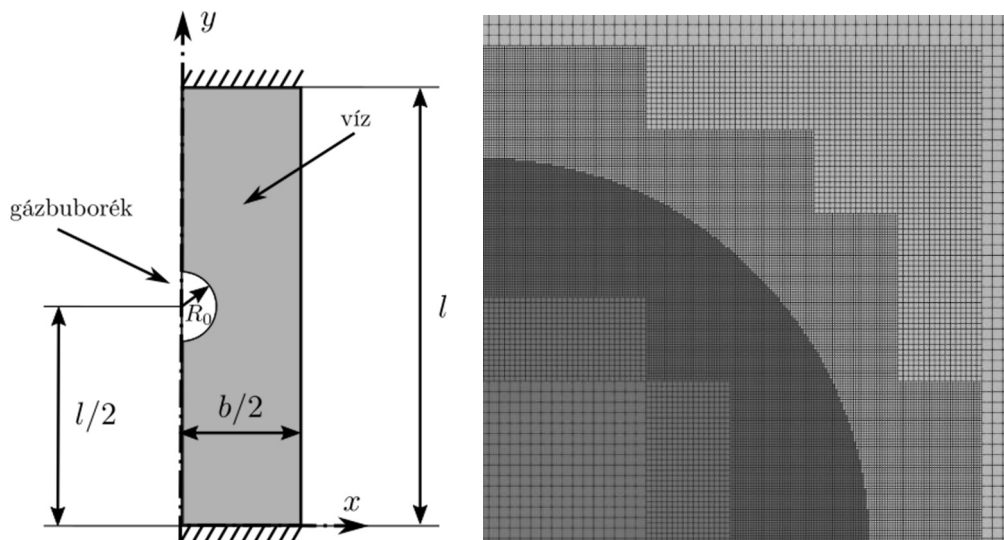
$$D_{\text{cell}} = \frac{2R_0}{a_{\min}}, \quad (9)$$

ahol $a_{\min}$ a legkisebb méretű cella oldalhossza. A validáció során egy $R_E = R_0 = 30 \text{ }\mu\text{m}$ sugarú buborékot szimulálunk különböző p_A nyomásamplitúdók és f frekvenciák mellett. A különböző paraméterkombinációk az 1. táblázatban láthatók.

A validációhoz használt paraméterkombinációk

1. táblázat

Sorszám	f/kHz	p_A/bar	D_{cell}	Megjegyzés
1.	30	0.7	218	Gyors oszcillációk egy perióduson belül
2.	120	0.1	218	
3.	120	0.7	218	Buborékszátesés $t = 28.5 \mu\text{s}$ után
4.	480	0.7	218	Jelentős állóhullám disszipáció



1. ábra. Bal: A szimulációk során használt elrendezés. Jobb: A háló a buborékfelület közelében.

3. Eredmények

A Keller-Miksis egyenlettel való összehasonlítás miatt a legfontosabb a buboréksugár meghatározása a szimulációból. Tekintve, hogy a buborék nem minden esetben marad gömb alakú, az nem írható le egyetlen sugárral. Ezért az ekvivalens buboréksugár kerül bevezetésre, ami a következő módon számolható a buboréktérfogatból:

$$R(t) = \sqrt[3]{\frac{3V(t)}{4\pi}}, \quad (10)$$

ahol $V(t)$ a buborék térfogata. A buboréktérfogat meghatározható a szimulációból:

$$V(t) = 2\pi \sum_i x_i a_i^2, \quad (11)$$

ahol x_i az i . cella távolsága a szimmetriatengelytől és a_i az i . cella oldalhosszúsága a tengelyszimmetrikus szimulációban, i pedig a buborékban lévő cellákon fut végig. Hasonlóképp számítható a buboréktömeg is:

$$m(t) = 2\pi \sum_i \rho_i x_i a_i^2, \quad (12)$$

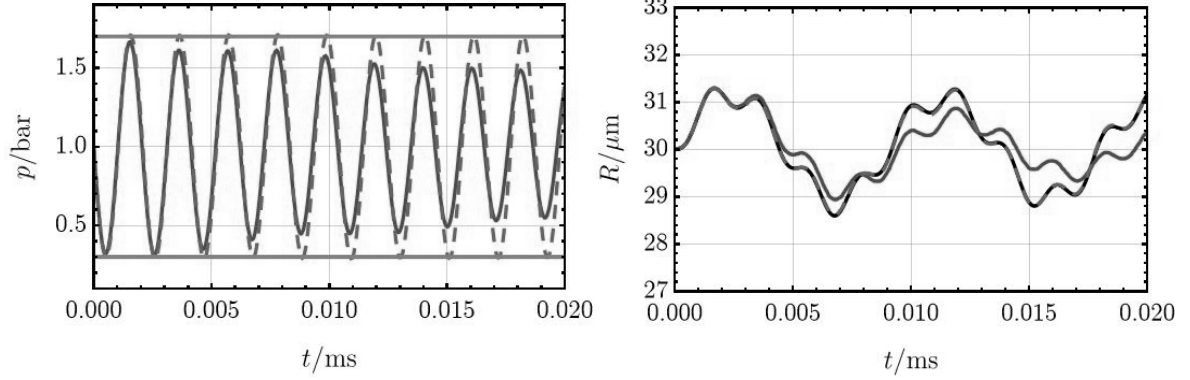
ahol ρ_i az i . cella sűrűsége.

3.1. Áramlási tér mérete

Elsőként azt vizsgáljuk, hogy az áramlási tér mérete hogyan befolyásolja a buborékdinamikát és az akusztikus teret a szimulációban. A 4. szimuláció különböző áramlási tér méretek mellett került futtatásra, először egy mindössze egy hullámhossznyi áramlási tér kerül beállításra, ahol $l = \lambda$ és $b = \lambda/3$. Az eredmény a 2. ábrán pirossal látható, ahol baloldalt megfigyelhető, hogy a buborék környékén a nyomásamplitúdó idővel

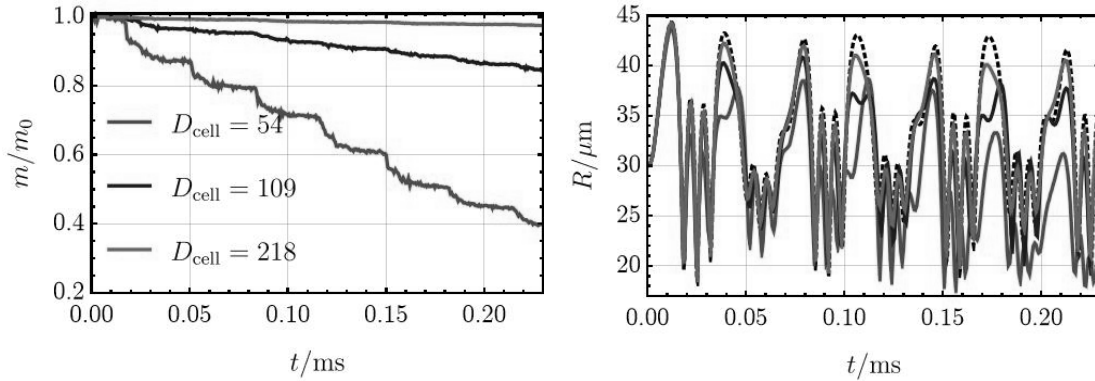
lecsökken az állóhullám disszipációja miatt. Az áramlási tér méretét minden dimenzió mentén háromszorosa növelve ($l = 3\lambda$ és $b = \lambda$) az állóhullám disszipációja megszüntethető. Ez a 2. ábrán zöld szaggatott görbével látható. Az ábrán jobboldalt a buboréksugár látható. Feketével került jelölésre a Keller-Miksis egyenlet megoldása. Látható, hogy ha az áramlási tér elég nagy, akkor a szimuláció ezt tökéletesen visszaadja.

Az eredményekből arra következtethetünk, hogy az állóhullám disszipációját nem a viszkozitás okozza. A buborék mérete relatív nagy az áramlási tartomány szélességéhez képest így az a kialakuló állóhullámot lényegesen ki tudja takarni.



2. ábra. Jelmagyarázat: fekete a Keller-Miksis egyenlet megoldása, piros az $l = \lambda, b = \lambda/3$ eset, zöld az $l = 3\lambda, b = \lambda$ eset Bal: A nyomás a buborék környékén. Jobb: A buboréksugár.

3.2. Buborékfelbontás hatása



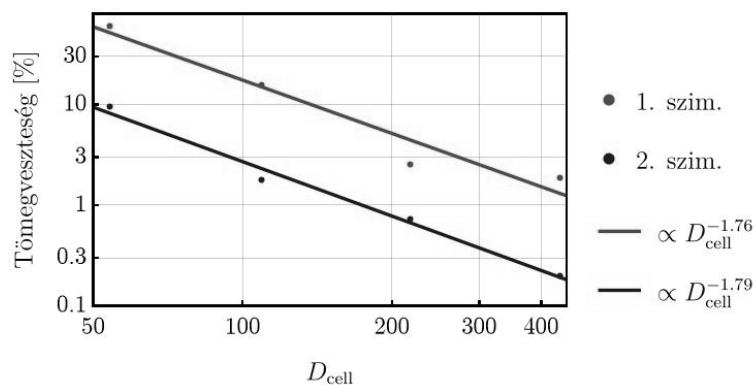
3. ábra. Bal: A dimenziótlan buboréktömeg. Jobb: A buboréksugár, a fekete szaggatott vonal a Keller-Miksis egyenlet megoldását jelöli.

A buborékfelbontás lényegesen befolyásolja a szimuláció eredményeit, elsősorban a tömegdisszipáció miatt. A tömegdisszipáció egy nem fizikai jelenség, amit a buborék határfelületének a nem elég pontos leírása okoz. A 3. ábrán baloldalt látható a dimenziótlan buboréktömeg, megfigyelhető, hogy a buborékfelbontás növelésével a tömegdisszipáció egyre kisebb. A jobboldalt a buboréksugár látható, a felbontás növelésével egyre inkább visszakapjuk a feketével látható Keller-Miksis egyenlet megoldását. Összességében megfigyelhető, hogy az ALPACA szimuláció jól visszaadja a buborék gyors oszcillációit is.

A tömegvesztesség a szimuláció végén a buborékfelbontás függvényében a 4. ábrán került ábrázolásra az első és a második szimuláció esetén (lásd 1. táblázat). A logaritmus ábrán megfigyelhető, hogy a buborékfelbontás növelésével a tömegvesztesség csökken, méghozzá

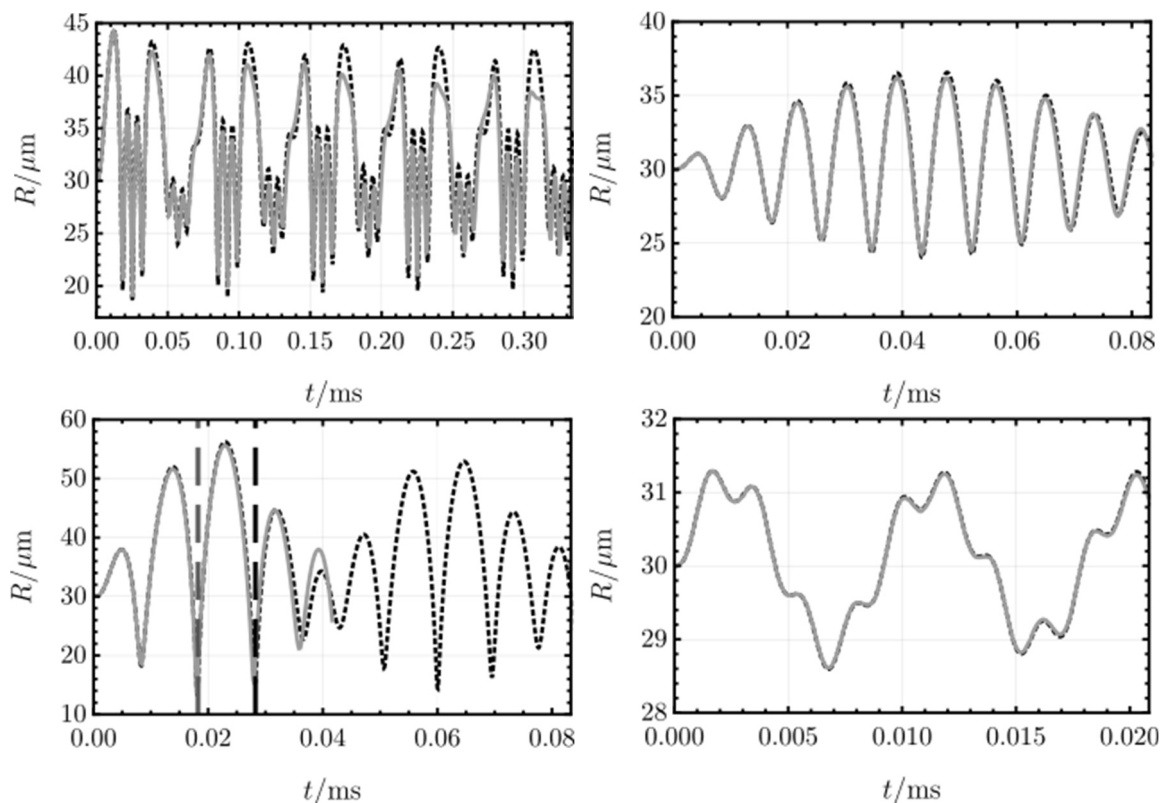
$$\text{tömegvesztesség} \propto \frac{1}{D_{cell}^p},$$

ahol $p = 1.76$ az első szimuláció során és $p = 1.79$ a második szimuláció során. Látható, hogy a háló finomságát érdemes a buborékfelbontással jellemezni, hiszen az eredmények ennek a növelésével arányosan javulnak. Azt mondhatjuk, hogy a buborékfelbontás duplázásával a tömegdisszipáció több mint harmadára csökken. Eközben a tapasztalatok alapján a futási idő a buborékfelbontás duplázásával háromszorosára nő.



4. ábra. A tömegvesztés a buborékfelbontás (D_{cell}) függvényében logaritmusos diagrammon.

3.3. Validáció



5. ábra. Jelmagyarázat: fekete a Keller-Miksis egyenlet megoldása, narancs az ALPACA szimuláció. Bal fent: Első szimuláció. Jobb fent: Második szimuláció. Bal lent: Harmadik szimuláció, a függőleges vonal a gömbi alak elvesztése és a buborékszétválás. Jobb lent: Negyedik szimuláció.

Az előző alfejezetekben bemutatott korrekciókkal, azaz megfelelően nagy áramlási tér és megfelelően nagy buborékfelbontás használatával mind a négy szimuláció során rendkívül jó egyezést tapasztalunk, ahogyan az 5. ábra mutatja. A 3. szimuláció során a buborék két periódus után elveszíti a gömbi alakját és a harmadik periódus után szétesik több darabra, ezeket az időpillanatokat szaggatott vonalak jelzik az ábrán. Az ábrán látható érdekesség, hogy az ekvivalens buboréksugár még a buborékszétválás után is egyezik Keller-Miksis egyenletből számolt buboréksugárral, noha a Keller-Miksis egyenlet csak egyetlen gömb alakú buborékra érvényes a szakirodalom szerint.

4. Összefoglalás

Az eredmények alapján az ALPACA szoftvercsomag rendkívül jól használható gömbszimmetrikus buborékok szimulációjára. A bemutatott összehasonlításokkal sikeresen validáltuk az ALPACA megoldót gömbszimmetrikus buborék esetére. Az ALPACA megbízható megoldást ad, amennyiben az áramlási tér

méretét elég nagyra választjuk a buborék méretéhez képest, ezzel megakadályozva az állóhullám disszipációját. Továbbá a buborékfelbontást elég nagyra kell választani ahhoz, hogy a buboréktömeg ne csökkenjen lényegesen a szimuláció során. A tengelyszimmetrikus modellel egyetlen szimuláció lefuttatása mindössze pár óra, így a későbbiekben a validáció akár egy nagyobb paramétertartományra is kiterjeszthető. A hosszú távú cél az ALPACA használata nem gömbszimmetrikus buborékok szimulációjára és a validáció kiterjesztése a buborékfelületen megjelenő tengelyszimmetrikus felületi hullámok szimulációjára.

Köszönetnyilvánítás

A Kulturális és Innovációs Minisztérium UNKP-22-2-I-BME-68 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alapról finanszírozott szakmai támogatásával készült. A szerzők köszönetet mondanak a Gauss Center for Supercomputingnak (www.gauss-centre.eu), hogy finanszírozták ezt a projektet azzal, hogy számítási időt biztosítottak a Leibniz Supercomputing Centerben (www.lrz.de) található GCS SuperMUC-NG szuperszámítógépen. A bemutatott kutatás a BME-NVA-02 számú projekt részeként az Innovációs és Technológiai Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapról nyújtott támogatással, a TKP2021 pályázati program finanszírozásában valósult meg. A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal NKFIH OTKA FK142376 számú pályázat támogatta.

Irodalmi hivatkozások

- [1] Mason T., Newman A., Phull S., *Sonochemistry in water treatment*, Division of Chemistry, Coventry University, 1994. Coventry CVI 5FB, 3927–3933.
- [2] Keller J.B., Miksis M., *Bubble oscillations of large amplitude*, The Journal of the Acoustical Society of America 1980, 68.2, 628–633.
- [3] Hoppe N., Adami S., Adams N.A., *A parallel modular computing environment for three-dimensional multiresolution simulations of compressible flows*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2022, 391, 114486.
- [4] Hoppe N., Winter J.M., Adami S., Adams N.A., *ALPACA - a level-set based sharp-interface multiresolution solver for conservation laws*. Computer Physics Communications. 2022, 272, 108246.
- [5] Kalmár Cs., Klapcsik K., Hegedűs F., *Relationship between the radial dynamics and the chemical production of a harmonically driven spherical bubble*. Ultrasonics Sonochemistry. 2020, 64, 104989.
- [6] Harlow F.H., Amsden A.A., *Fluid Dynamics*. A LASL Monograph. Los Alamos, NM (United States), 1971.
- [7] Kaiser J., Adami S., Adams N. A., *Three-dimensional direct numerical simulation of shock-induced bubble collapse near gelatin*, 11th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, 2019