

Akusztikusan gerjesztett gázbuborékok direkt numerikus szimulációja

Direct numerical simulation of acoustically excited gas bubbles

NAGY Dániel, M.Sc. hallgató, HEGEDŰS Ferenc, egyetemi docens

Budapesti 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, fhgedus@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. Currently, an important topic in sonochemistry is the description of bubble break-ups, where a possible method to describe this is based on axisymmetric surface oscillation modes. In our work, a direct numerical simulation is applied to simulate a single bubble and observe its break-up in the antinode of an acoustic standing wave.

Keywords: : sonochemistry, direct numerical simulation, spherical stability, ALPACA, bubble dynamics

Kivonat

Akusztikusan gerjesztett gázbuborékok elsősorban a szonokémiában jelennek meg. A szonokémia célja kémiai folyamatok kihozatalának a növelése ultrahangos gerjesztéssel. A szonokémia egyik fontos témaköre a buborékok felbomlásának a modellezése, aminek leírására egy lehetséges módszer a tengelyszimmetrikus felületi oszcillációk módusain alapul. Ezen munka során közvetlen numerikus szimulációt alkalmazunk egy akusztikus állóhullám amplitúdópontjában lévő buborék és annak szétesésének a szimulálására.

Kulcsszavak: szonokémia, közvetlen numerikus szimuláció, gömbi stabilitás, ALPACA, buborékdinamika

1. BEVEZETÉS

Egy folyadékban jelen lévő buborékok az akusztikus gerjesztés hatására pulzálni kezdenek. A szonokémia szempontjából jelentős buborékok mérete jellemzően néhány mikron. A buborék körül változó nyomás hatására a buborék kitágulhat vagy összeszűkülhet. A pulzálás során előfordulhat, hogy a buborék átmérője egy buborékösszeomlás során nagyságrendeket csökken, ezt a jelenséget akusztikus kavitációnak nevezzük. Ekkor a buborék gyors térfogatváltozása miatt a hőmérséklet jelentősen megnövekszik és ezáltal kémiai reakciók indulhatnak be a folyadékban. A szonokémia alkalmazási potenciálja az akusztikus kavitáció megfelelő felhasználásában rejlik [1].

Az akusztikusan gerjesztett gömbszimmetrikus buborékok matematikai leírása lehetséges a Keller-Miksis egyenlettel, ez kiegészíthető a folyadékban lévő buborékok egymásra hatásával is. Így lehetséges egy szonokémia reaktor szimulációja, akár több ezer buborékkal; ezen modell kiegészíthető a buborékok mozgásával is az akusztikus térben. Előfordulhat, hogy a reaktorban buborékok összeolvadnak, ez azonban könnyen kezelhető. Szonokémiai reaktorok szimulációja során a fő problémát a buborékok szétesése jelenti, ami során a buborék gömbszimmetriája elveszik; ez a kísérletekben megfigyelhető, azonban megbízható matematikai modell nem létezik akusztikusan gerjesztett buborékok szétesésének a leírására. A buborékshétesések megfigyelése direkt numerikus szimulációk során hozzájárulhat egyszerűsített buborékshétesés modellek validációjához, ami végső soron hozzájárulna a szonokémiai reaktorok pontosabb szimulációjához. A jelen kutatás célja akusztikusan gerjesztett buborékok direkt numerikus szimulációja és ezen eljárás validálása gömbszimmetrikus buborékokra, illetve a gömbszimmetria elvesztésének a megfigyelése a szimulációkban.

A szimulációkat a többfázisú, összenyomható áramlások direkt szimulációjára képes ALPACA programcsomaggal végezzük. Az ALPACA alapvetően véges térfogat módszerre alapul, amelyhez az áramlási

tér hálózása szükséges. A program egy térben és időben adaptív multiresolution algoritmust használ ehhez [2], ezáltal a szimulációban jelen lévő nagy méretbeli különbség könnyen kezelhető (lásd az áramlási tér mérete kb. a buborékméret ezerszerese). A direkt szimuláció számítási igénye rendkívül nagy, azonban az ALPACA alkalmas a számítások megfelelő párhuzamosítására, azaz elosztására több száz CPU mag között.

2. MODELL

A direkt numerikus szimuláció során egyetlen buborékot vizsgálunk. Az áramlási tér hossza (l), pont egy hullámhosszi, azaz $l = \lambda$. Az 1. ábrán, a déli oldalt elhelyezkedő ultrahangos távadó nagyfrekvenciás akusztikus hullámot bocsát ki, ezen hullám az áramlási térben északi irányba halad, majd az északi falon visszaverődik. A visszaverődött hullám a kibocsátott hullámra szuperponálódik, ezáltal az áramlási térben egy akusztikus állóhullám jön létre. Az ultrahangos távadó megfelelő állításával az állóhullám nyomásamplitúdója (p_A) és frekvenciája (f) állítható. Az ultrahangos távadó a szimulációban időben változó peremfeltétel használatával vehető figyelembe, ekkor a nyomásra a következő függvény lesz előírva a peremen

$$p(t) = p_0 + \frac{p_A}{2} \sin(2\pi f t),$$

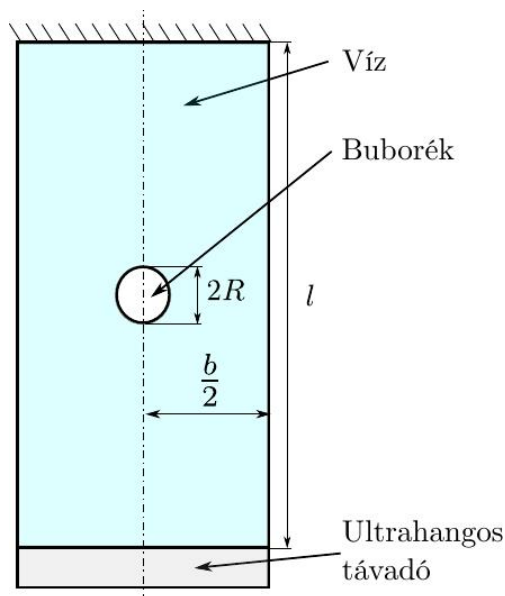
ahol p_0 a légköri nyomás. Az ultrahangos távadóval szembeni peremen egy fal helyezkedik el, ahol az akusztikus hullámok visszaverődnek. A buborék sugara (R) és ezen buborék az áramlási tér közepére, azaz az állóhullám legnagyobb nyomásamplitúdójú pontjába (a duzzadóhelyre) kerül. Kezdetben a buborék egyensúlyban van, azaz

$$p_{B0} = p_0 + 2 \frac{\sigma}{R_E},$$

ahol σ 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, amely korábban már jól működött hasonló ALPACA szimulációk során [3]. A merev gáz állapotegyenlet

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

ahol e a belső energia, γ a specifikus hőkapacitások aránya és p_∞ a hattérnyomás. A paraméterek vízre $\gamma_v = 4.4$ és $p_{\infty,v} = 6 \cdot 10^8 \text{ Pa}$ és levegőre $\gamma_l = 1.4$ és $p_{\infty,l} = 0 \text{ Pa}$. A teljes elrendezés az 1. ábrán látható. Ezzel az elrendezéssel a buborékszimulációt el lehet végezni egy téglalapos alakú áramlási tér teljes felbontásával három dimenzióban vagy az elrendezés tengelyszimmetriájának a kihasználásával két dimenzióban, egy hengeres áramlási térben. Bár az áramlási tér alakja a két esetben más, hasonló eredmények várhatóak, hiszen a buborék hatása a kialakuló állóhullámra – a buboréktól távol – minimális, tehát az áramlási tér formája a buboréktól távol nem számít. A következőkben tengelyszimmetrikus buborékszimulációk kerülnek bemutatásra, hiszen ezen szimulációk futási ideje kisebb, mint teljes három dimenziós szimulációké.



1. ábra. A szimulációk során használt elrendezés.

3. EREDMÉNYEK

Validáció

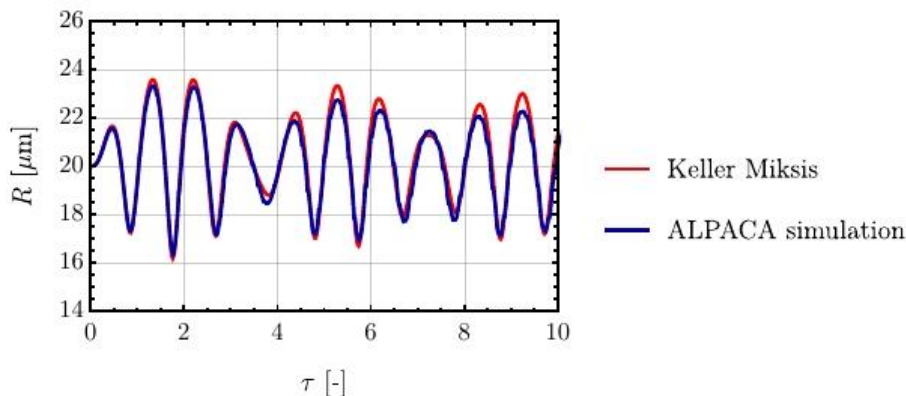
Az első lépés a tengelyszimmetrikus modell validálása. Ez a Keller-Miksis egyenlettel való összevetés során lehetséges, amennyiben a buborék gömszimmetrikus marad. A Keller-Miksis egyenlet megoldása az $R(t)$ buboréksugár – idő függvény. A numerikus szimulációból egy ekvivalens buboréksugár számítható, feltételezve, hogy a buborék gömb alakú

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

ahol $V_B(t)$ a buborék térfogata. Ez a következő módon számolható

$$V_B(t) = 2\pi \sum_i r_i A_i$$

ahol r_i az i . cella távolsága a szimmetriatengelytől és A_i az i . cella területe a tengelyszimmetrikus szimulációban, i pedig a buborékban lévő cellákon fut végig. A 2. ábrán látható a buboréksugár összehasonlítása $R_E = 20 \mu\text{m}$, $p_A = 0.2 \text{ bar}$ és $f = 130 \text{ kHz}$ paraméterek mellett. Az első tíz periódus során rendkívül jó egyezés tapasztalható, tehát a direkt numerikus szimuláció jó eredményeket ad amíg a buborék gömb alakú marad.



2. ábra. Az ALPACA szimuláció eredményeinek összehasonlítása a Keller-Miksis egyenlettel, $R_E = 20 \mu\text{m}$, $p_A = 0.2 \text{ bar}$ és $f = 130 \text{ kHz}$ paraméterek mellett. $\tau = t \cdot f$ a dimenziótlan idő, az ábrán az első 10 periódus került ábrázolásra.

Felületi módusok és buborékszétesések szimulációja

A paraméterek függvényében, mint a buboréksugár R és a gerjesztési frekvencia f , különböző tengelyszimmetrikus felületi módusok gerjesztődnek a leginkább. Az n . felületi módus sajátfrekvenciája a következő módon számolható [4]

$$\omega_n = \sqrt{\frac{(n-1)(n+1)(n+2) \cdot \sigma}{\rho \cdot R_E^3}},$$

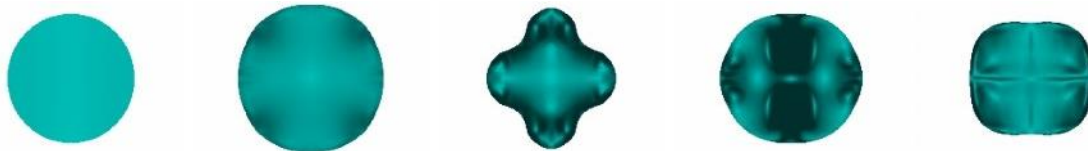
ahol ρ a folyadék sűrűsége, R_E a buborék egyensúlyi sugara és σ a felületi feszültség együttható. Az n . módus akkor gerjesztődik, hogyha az akusztikus hullám körfrekvenciája $2 \cdot \omega_n$. A 3-5. ábrán látható a második, harmadik és negyedik módus szimulációja egy $R_E = 20 \mu\text{m}$ egyensúlyi sugarú buborékra. Az ábrákon a buborék 5 pillanatfelvétele látható, a felvételek között $\tau = t \cdot f = 0.6$ periódus telik el. A gerjesztési frekvencia úgy lett megválasztva, hogy az adott módus gerjesztődjön, tehát $f = \omega_n/\pi$. Az akusztikus hullám nyomásamplitúdója elég nagyra lett választva ahhoz, hogy a felületi módus gerjesztése jól megfigyelhető legyen, azonban nem túl nagyra ahhoz, hogy a buborék szétesessen. A szimulációkban buborékok szétesése is megfigyelhető, ez látható a 6. ábrán egy nagyobb buborék esetén. Az ábrán a kezdetben gömb alakú buborék 2 tengelyszimmetrikus tórusz alakú buboréokra esik szét a kitéágulási szakaszban.



3. ábra. A második felületi módus szimulációja, ahol $R_E = 20 \mu\text{m}$, $p_A = 0.5 \text{ bar}$ és $f = 105.2 \text{ kHz}$



4. ábra. A harmadik felületi módus szimulációja, ahol $R_E = 20 \mu\text{m}$, $p_A = 0.5 \text{ bar}$ és $f = 192.0 \text{ kHz}$



5. ábra. A negyedik felületi módus szimulációja, ahol $R_E = 20 \mu\text{m}$, $p_A = 0.9 \text{ bar}$ és $f = 288.1 \text{ kHz}$



6. ábra. Buborékszátesés szimulációja, ahol $R_E = 30 \mu\text{m}$, $p_A = 0.7 \text{ bar}$ és $f = 130.0 \text{ kHz}$

4. ÖSSZEFOGLALÁS

Az eredmények alapján az ALPACA megfelelő akusztikusan gerjesztett buborékok numerikus szimulációjára. A tengelyszimmetrikus modellel egyetlen szimuláció lefuttatása mindössze pár óra, így több különböző szimuláció is készíthető. A szimulációkban sikerült megfigyelni három különböző felületi módot az elméletnek megfelelően, sőt sor került buborékszátesések szimulálására is.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült. A bemutatott kutatás a BME-NVA-02 számú projekt részeként az Innovációs és Technológiai Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatással, a TKP2021 pályázati program finanszírozásában valósult meg. kutatást az MTA által finanszírozott Bolyai János kutatói ösztöndíj támogatta. 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 szerző konferencia részvételét a BME Gépészmérnöki Kar NTP-HHTDK-21-0051 pályázata 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] 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
- [3] 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
- [4] Lamb, H. (1924), *Hydrodynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1924.