

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE ONDAS DE PRESIÓN Y DE CHOQUE EN SONOLUMINISCENCIA UTILIZANDO ESQUEMAS DE UPWIND

Pablo L. García Martínez*, **Fabián J. Bonetto†**

*Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Av. Bustillo 9,500
8400, Bariloche, Río Negro, Argentina
e-mail: garciamp@ib.cnea.gov.ar
†Laboratorio de Cavitación y Biotecnología
Centro Atómico Bariloche
Av. Bustillo 9,500
8400, Bariloche, Río Negro, Argentina
e-mail: bonetto@cab.cnea.gov.ar

Palabras Clave: Sonoluminiscencia, Ondas de choque, Ecuaciones de Euler, Esquemas de Upwind.

Abstract. *En este trabajo simulamos el movimiento del gas en el interior de una burbuja durante un colapso típico de sonoluminiscencia. Las condiciones en el interior de la burbuja en los instantes previos al colapso se estimaron mediante un modelo simple que supone a la presión espacialmente uniforme, y se utilizaron como condición inicial para el cálculo de detalle. Debido a la corta escala de tiempo asociada al colapso (algunos nanosegundos) y a las altas velocidades que alcanza la interfaz de la burbuja (más de 1000 m/s), se utilizó un modelo invíscido para el gas, constituido por las ecuaciones de Euler. Para resolver estas ecuaciones utilizamos un esquema de upwind basado en el método de volúmenes finitos y en la forma de propagación de ondas (**wave propagation form**) del método de Godunov. Como resultado de la simulación no observamos la formación de ondas de choque que produzcan un calentamiento de la zona central de la burbuja, sino que el proceso que experimenta el gas es muy similar a una simple compresión adiabática.*

1 INTRODUCCIÓN

En la sonoluminiscencia de una única burbuja (*Single Bubble Sonoluminescence*) una burbuja de gas atrapada en un campo de ultrasonido experimenta en cada ciclo un colapso tan violento que se produce la emisión de luz visible. El mecanismo responsable de esta emisión de luz es aun hoy uno de los interrogantes de este experimento.

Una de las teorías con mayor aceptación proponía la formación de ondas de choque esféricas convergentes que producían un rápido calentamiento de la zona central de la burbuja. Dadas las altas velocidades que alcanza la interfaz de la burbuja durante la etapa de compresión (del orden de 1000m/s), la formación de este tipo de ondas era una hipótesis razonable. Simulaciones de la hidrodinámica del gas encerrado en la burbuja utilizando modelos invíscidos confirmaban esta teoría^{1, 2}

Sin embargo, en trabajos posteriores basados en modelos más completos que incluían la disipación viscosa y térmica, así como la transferencia de calor a través de la interfaz líquido-gas, no se observó la formación de ondas de choque en burbujas de Argón.³ En este caso el gran calentamiento responsable de la emisión del pulso de luz era más parecido a una simple compresión adiabática, que a un proceso de propagación no lineal de ondas. Este resultado fue atribuido al gradiente térmico que se establece en el interior de la burbuja debido al calentamiento por compresión sumado a la conducción de calor. El gradiente térmico se traduce en un gradiente de velocidad del sonido capaz de evitar que las características se junten a medida que avanzan hacia el centro de la burbuja.

En este trabajo simulamos el gas en el interior de la burbuja durante un colapso típico de sonoluminiscencia utilizando un modelo invíscido. Para conocer las condiciones del gas en los instantes previos al colapso empleamos un modelo simplificado que supone espacialmente uniforme la presión en el interior de la burbuja.

2 DESCRIPCIÓN DEL CÁLCULO

El movimiento de la interfaz de la burbuja está descrito por la ecuación de Rayleigh-Plesset que, despreciando los efectos de la viscosidad y la tensión superficial, puede escribirse como

$$\ddot{R} = -\frac{3}{2} \left(\frac{1 - \dot{R}/3c_l}{1 - \dot{R}/c_l} \right) \frac{\dot{R}^2}{R} + \left(\frac{1 + \dot{R}/c_l}{1 - \dot{R}/c_l} \right) \frac{p_g - p_s}{\rho_l R} + \frac{\dot{p}_g}{(1 - \dot{R}/c_l) \rho_l c_l}, \quad (1)$$

donde R es el radio de la burbuja, p_g es la presión en el interior de la burbuja, p_s es la suma de la presión acústica debida al ultrasonido y la presión atmosférica y c_l y ρ_l son la velocidad del sonido y la densidad del líquido que rodea la burbuja.

Para cerrar la Ec. (1) y poder calcular la evolución del radio de la burbuja es necesario conocer el valor de la presión del gas p_g . Una hipótesis comúnmente utilizada para simplificar el problema es suponer que la presión en el interior de la burbuja es espacialmente uniforme. En el trabajo de Lin *et. al.*⁴ se analiza la validez de esta suposición. En ese análisis se descarta al número de Mach de la interfaz como indicador de la no uniformidad del flujo en el interior de la burbuja y se introduce el parámetro ϵ_p definido como una aceleración adimensional,

$$\epsilon_p = \frac{\ddot{R}R}{\bar{c}^2}, \quad (2)$$

donde \bar{c} es la velocidad del sonido media en el interior de la burbuja. Cuando la cantidad ϵ_p es cero, el estado de presión uniforme es solución de las ecuaciones de movimiento del gas. Por lo tanto, se espera que la hipótesis de presión uniforme falle sólo en aquellos momentos en que ϵ_p no sea pequeño. En la Fig. 1 se muestran los valores que adopta la aceleración adimensional ϵ_p durante un ciclo de ultrasonido para una burbuja sometida a condiciones típicas de sonoluminiscencia ($p_a = 1.5$ bar y $R_0 = 4.6\mu\text{m}$).

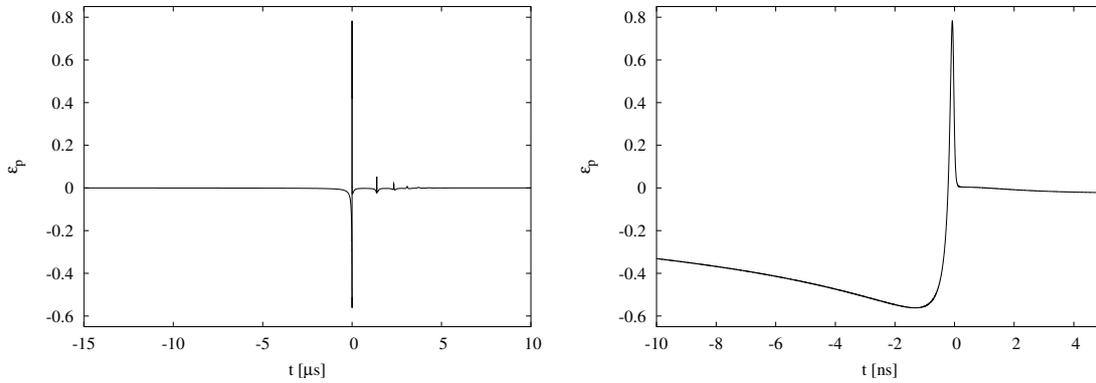


Figure 1: Aceleración adimensional de la interfaz líquido-gas de una burbuja con $p_a = 1.5$ bar y $R_0 = 4.6\mu\text{m}$. Se muestran los valores a lo largo del ciclo de ultrasonido (izquierda) y una ampliación de los instantes próximos al colapso (derecha). Mientras ϵ_p tome valores pequeños la hipótesis de presión uniforme es una buena aproximación.⁴

Se observa que un movimiento ondulatorio en el interior de la burbuja sólo es esperable en los instantes próximos al colapso. A partir de esta observación proponemos resolver el detalle espacial del flujo en el interior de la burbuja sólo durante el colapso, suponiendo uniforme la presión en el resto de la evolución. Dada la corta escala de tiempo asociada al colapso y las altas velocidades que alcanza la interfaz, despreciamos los efectos difusivos empleando las ecuaciones de Euler para describir el comportamiento del gas. Las ecuaciones de Euler para un problema unidimensional con simetría esférica pueden escribirse en forma conservativa como,

$$\begin{aligned} \rho_t + (\rho u)_r &= -\frac{2}{r}(\rho u), \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p)_r &= -\frac{2}{r}(\rho u^2), \\ E_t + [(E + p)u]_r &= -\frac{2}{r}[(E + p)u], \end{aligned} \quad (3)$$

donde $E = 1/2\rho u^2 + \rho e$. El sistema se cierra proponiendo una ecuación de estado para el gas. En el caso de gas ideal politrópico la ecuación de estado se reduce a $p = (\gamma - 1)\rho e$.

La condición inicial para el cálculo de detalle queda completamente definida con cuatro valores, la densidad, la presión, el radio de la burbuja y la velocidad de la interfaz. Tanto la presión como la densidad son uniformes en todo el dominio mientras que el perfil de velocidades es lineal, siendo cero en el centro de la burbuja e igual a la velocidad de la interfaz en $r = R$. Estos valores se obtienen utilizando un modelo de presión uniforme que tiene en cuenta el intercambio de calor con el líquido, como el descrito por Toegel *et. al.*⁵

Las condiciones de borde para este cálculo son de reflexión en el centro de la burbuja, $r = 0$, y condición de pared móvil⁶ en la interfaz líquido-gas ($r = R$).

3 ESQUEMA NUMÉRICO

El sistema de ecuaciones (3) puede ser interpretado como un sistema de leyes de conservación con término fuente, de la forma

$$q_t + f(q)_x = \psi(q, x), \quad (4)$$

donde $q = q(x, t) \in \mathfrak{R}^m$ y $f : \mathfrak{R}^m \rightarrow \mathfrak{R}^m$, con $m = 3$ en nuestro caso. Para la resolución numérica de la parte homogénea de este sistema utilizamos el método de volúmenes finitos en conjunto con la forma de propagación de ondas (*Wave Propagation Form*) del método de Godunov, propuesta por Leveque.⁷ Este método se basa en la solución del problema de Riemann para dos estados Q_{i-1}^n y Q_i^n cualesquiera (Q_i^n es el promedio de q en el volumen i al tiempo t_n). Esta solución consiste en M_w ondas $\mathcal{W}_{i-1/2}^p$ (3 en este caso) que se propagan a velocidades $s_{i-1/2}^p$, que cumplen

$$\sum_{p=1}^{M_w} \mathcal{W}_{i-1/2}^p = Q_i^n - Q_{i-1}^n. \quad (5)$$

Además de las ondas y sus velocidades, la solución del problema de Riemann debe utilizarse para definir las fluctuaciones hacia izquierda $\mathcal{A}^- \Delta Q_{i-1/2}$ y hacia derecha $\mathcal{A}^+ \Delta Q_{i-1/2}$ que, para que el método sea conservativo deben satisfacer

$$\mathcal{A}^- \Delta Q_{i-1/2} + \mathcal{A}^+ \Delta Q_{i-1/2} = f(Q_i) - f(Q_{i-1}). \quad (6)$$

Si para encontrar la solución del problema de Riemann se utiliza la linealización propuesta por Roe,⁸ las fluctuaciones a izquierda y derecha pueden definirse directamente como

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^- \Delta Q_{i-1/2} &= \sum_p (s_{i-1/2}^p)^- \mathcal{W}_{i-1/2}^p, \\ \mathcal{A}^+ \Delta Q_{i-1/2} &= \sum_p (s_{i-1/2}^p)^+ \mathcal{W}_{i-1/2}^p, \end{aligned} \quad (7)$$

donde $(s_{i-1/2}^p)^- = \min(0, s_{i-1/2}^p)$ y $(s_{i-1/2}^p)^+ = \max(0, s_{i-1/2}^p)$. De esta forma las fluctuaciones cumplen la Ec. (6) y se consigue un método conservativo.

En base a estas definiciones, el esquema explícito de segundo orden utilizado, adopta la forma

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{A}^+ \Delta Q_{i-1/2} + \mathcal{A}^- \Delta Q_{i+1/2}) - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\tilde{F}_{i+1/2} - \tilde{F}_{i-1/2}), \quad (8)$$

donde

$$\tilde{F}_{i-1/2} = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^m |s_{i-1/2}^p| \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} |s_{i-1/2}^p| \right) \tilde{\mathcal{W}}_{i-1/2}^p. \quad (9)$$

El término $\tilde{\mathcal{W}}_{i-1/2}^p$ representa una versión limitada de la onda $\mathcal{W}_{i-1/2}^p$, obtenida comparando $\mathcal{W}_{i-1/2}^p$ con $\mathcal{W}_{i-3/2}^p$ si $s^p > 0$ o con $\mathcal{W}_{i+1/2}^p$ si $s^p < 0$, mediante alguno de los limitadores descriptos por Leveque.⁷

La contribución del término fuente se tiene en cuenta resolviendo en cada paso de tiempo la ecuación

$$q_t = \psi, \quad (10)$$

mediante un esquema explícito tipo Runge-Kutta de segundo orden.

La implementación de este esquema se efectuó tomando como base las rutinas del código CLAWPACK, disponible en internet.⁹

4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para el cálculo de detalle tomamos los resultados del modelo de presión uniforme 6.5 ns antes del colapso, para una burbuja de Argón, con $R_0 = 4.6 \mu\text{m}$, sometida a un campo de ultrasonido de 1.5 bar. En ese instante las condiciones de la burbuja son $R = 4.8858 \mu\text{m}$, $\dot{R} = -341.85 \text{ m/s}$ y $p_g = 3.17 \text{ bar}$. En la Fig. 2 (izquierda) vemos la evolución de los perfiles de presión, cada 10 ps, desde 320 ps hasta 10 ps antes del colapso.

Se observa que en los instantes cercanos al colapso la presión es mayor en el centro y varía suavemente hasta un valor menor en la interfaz. Como la presión en esa zona es la responsable de vencer a la inercia del líquido y producir el rebote, éste se produce un poco más tarde que en los modelos que consideran uniforme la presión en toda la burbuja. Además de la suave inhomogeneidad, se observa una onda de presión proveniente de la interfaz que forma una pequeña onda de choque que rebota en el centro (a $t \approx 180 \text{ ps}$) y vuelve a la interfaz.

En la Fig. 2 (derecha) se muestran 20 líneas de corriente durante 4 ns alrededor del colapso. La curva externa representa la posición de la interfaz en función del tiempo. En este gráfico vemos que la onda de choque está presente desde un tiempo $\approx 1.65 \text{ ns}$ antes del colapso y permanece rebotando en el interior de la burbuja durante toda la simulación.

Es posible mostrar que esta pequeña onda de choque no corresponde a un comportamiento físico real del gas, sino que se debe al cambio brusco en la aceleración de la interfaz que se produce al aplicar el valor de aceleración calculado mediante la Ec. (1) a una condición de flujo uniforme, que corresponde a un movimiento no acelerado de la interfaz.

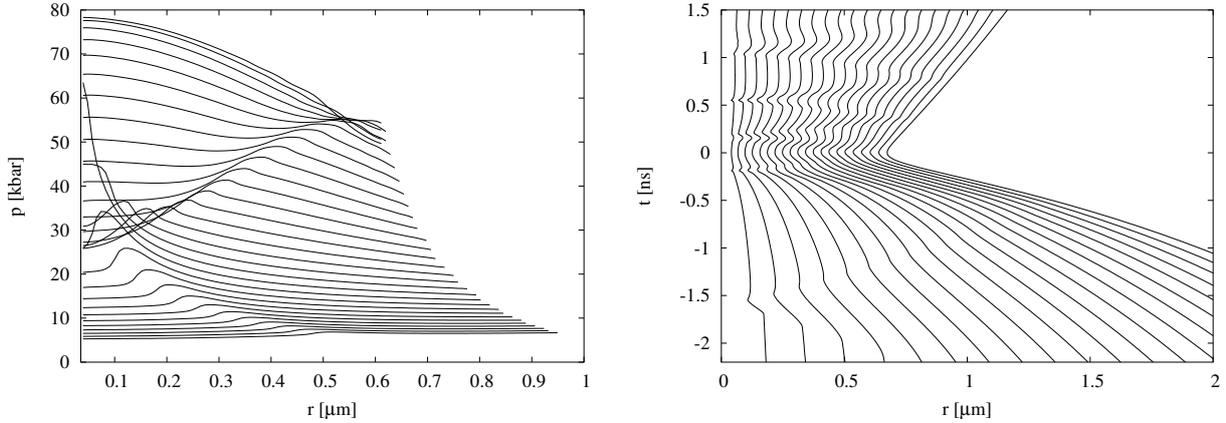


Figure 2: Perfiles de presión en el interior de la burbuja (izquierda), desde 320 ps hasta 10 ps antes del colapso, representados cada 10 ps. Se observa la presencia de una onda de choque que llega al centro de la burbuja. A la derecha, 20 líneas de corriente en los instantes próximos al colapso. La línea externa representa la posición de la interfaz líquido-gas.

Una forma de evitar este cambio brusco puede lograrse modulando la aceleración que se obtiene con la Ec. (1), de forma que la aceleración de la interfaz cambie desde cero hasta el valor de Rayleigh-Plesset adecuado siguiendo una rampa temporal. Para hacer esto debemos determinar qué pendiente tendrá la rampa de aceleración, que sea lo suficientemente suave como para no convertirse en un cambio brusco, y lo suficientemente grande como para alcanzar el valor de Rayleigh-Plesset antes del colapso.

Para ello proponemos que la aceleración adimensional ϵ_p varíe según $\epsilon_p = -\alpha t$. Como el cambio no debe ser brusco, tomamos α del orden de $1/\tau$, donde $\tau = R/c$ es el tiempo típico en que la información recorre una distancia igual al radio de la burbuja. De esta manera obtenemos $\epsilon_p = -t/\tau$, y despejando \ddot{R} ,

$$\ddot{R} = -\frac{c^3}{R^2}t. \quad (11)$$

Para estimar el valor de c , la velocidad del sonido media en el gas, consideraremos que el gas experimenta una compresión adiabática uniforme, en cuyo caso vale

$$c^2 = c_0^2 \left(\frac{R_0}{R} \right)^{3\gamma-3}, \quad (12)$$

donde R_0 y c_0 son el radio y la velocidad del sonido media en el instante inicial. Si tomamos $\gamma = 5/3$, para el caso del Argón y reemplazamos (12) en (11), obtenemos

$$\ddot{R} = -(c_0 R_0)^3 \frac{t}{R^5}. \quad (13)$$

Utilizamos la Ec. (13) para determinar la aceleración hasta alcanzar el valor de Rayleigh-Plesset, y luego continuamos el cálculo con la Ec. (1). De esta forma se obtiene la aceleración adimensional que se muestra en línea de trazos (rampa temporal de aceleración) en la Fig. 3.

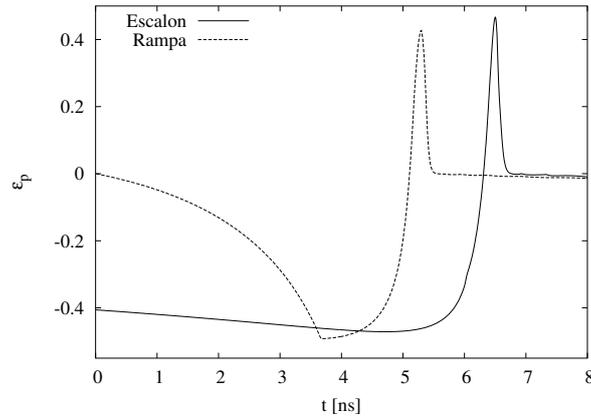


Figure 3: Aceleración adimensional ϵ_p para los casos en que la interfaz acelera siguiendo una rampa temporal (línea de trazos) y un escalón temporal (línea continua).

Se observa que en este caso la aceleración sigue una rampa temporal comenzando desde cero, a diferencia del caso anterior en que se aplica un escalón de aceleración en el instante inicial.

Al modificar la aceleración, como lo muestra la Fig. 3, la velocidad de la interfaz en el momento del colapso será menor, a menos que aumentemos artificialmente la velocidad inicial para obtener un colapso similar al original.

En la Fig. 4 (izquierda) se muestran los perfiles de presión resultantes desde 260 ps hasta 50 ps antes del colapso, cada 10 ps. La velocidad inicial de la interfaz se impuso igual a 600 m/s, para compensar la menor aceleración en este caso.

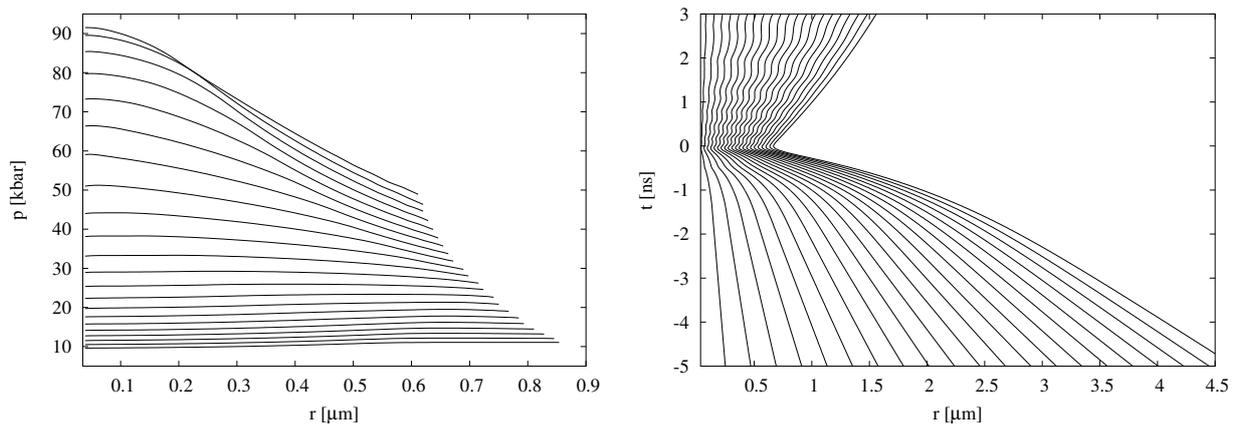


Figure 4: A la izquierda, perfiles de presión desde 260 ps hasta 50 ps antes del colapso, cada 10 ps. Se observa que al aumentar la aceleración en forma gradual no se producen ondas de choque. A la derecha, líneas de corriente para este caso. Si bien no se observan ondas de presión antes del colapso, después de éste sigue presente un suave movimiento ondulatorio.

Podemos ver que en este caso, al no efectuar un cambio brusco en la aceleración en el instante inicial, la onda de choque desaparece. Esta observación es confirmada por las líneas de

corriente, Fig. 4 (derecha), que muestran que el flujo en el interior de la burbuja es uniforme hasta el colapso, después del cual presenta un movimiento ondulatorio suave.

Finalmente, vemos en las curvas en líneas de trazos de la Fig. 5 la evolución de la temperatura en el centro de la burbuja.

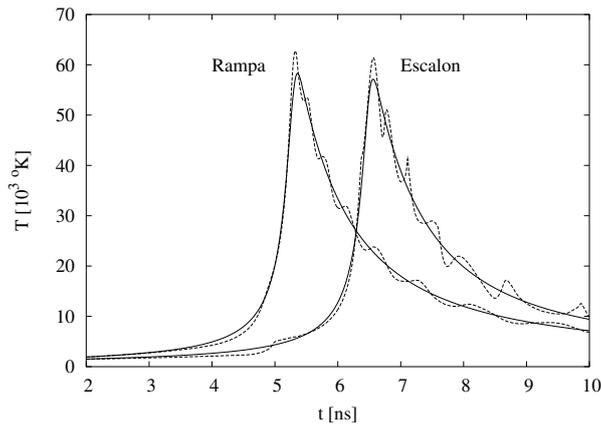


Figure 5: Temperatura en el centro (línea de trazos) y temperatura de una burbuja adiabática con el mismo radio en función del tiempo pero espacialmente uniforme en su interior (línea continua). Se observa que en ambos casos el comportamiento del gas es similar a una simple compresión adiabática.

Se observa que en el caso en que la interfaz acelera siguiendo un escalón de aceleración, se produce un salto en la temperatura, a $t \approx 5$ ns, que corresponde a la llegada de la onda de choque al centro de la burbuja. Cuando la aceleración sigue una rampa temporal este salto no aparece y también disminuyen las oscilaciones posteriores al colapso.

Las curvas en línea continua de la Fig. 5 muestran la temperatura correspondiente a una compresión adiabática uniforme que evoluciona con el mismo radio en función del tiempo. Estas curvas ponen de manifiesto que el comportamiento del gas en el interior de la burbuja durante el colapso es muy similar a una simple compresión adiabática.

5 CONCLUSIONES

En este trabajo simulamos el movimiento del gas en el interior de una burbuja durante un colapso típico de sonoluminiscencia. En lugar de efectuar un cálculo detallado del ciclo completo de oscilación de la burbuja, utilizamos los resultados de un modelo de presión uniforme como condición inicial para la simulación detallada del colapso. Debido a la corta escala de tiempo y a las altas velocidades que desarrolla la interfaz de la burbuja en los instantes previos al colapso, utilizamos un modelo invíscido para describir el comportamiento del gas. Los resultados de este procedimiento indican que el calentamiento que experimenta el gas es similar a una simple compresión adiabática, y no se observa la presencia de ondas de choque que calienten la zona central de la burbuja. Este resultado es independiente de los efectos disipativos en el gas y del gradiente térmico que puede establecer la conducción del calor entre el gas y el líquido.

REFERENCES

- [1] Wu, Roberts, Phys. Rev. Lett., **70**, 3424-3427, 1993.
- [2] Moss, Clarke, White, Young, Science, **276**, 1398-1401, 1997.
- [3] Vuong, Szeri, Phys. Fluids, **8**, 2354-2364, 1996.
- [4] Lin, Storey, Szeri, J. Fluid. Mech., **452**, 145-162, 2002.
- [5] Toegel, Gompf, Pecha, Lohse, Phys. Rev. Lett., **85**, 3165-3168, 2000.
- [6] Leveque, J. Comp. Phys, **78**, 36-63, 1988.
- [7] Leveque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, Cambridge University Press, 2002.
- [8] Roe, J. Comp. Phys, **43**, 357-372, 1981.
- [9] Leveque, <http://www.amath.washington.edu/~rjl/clawpack.html>