

Cálculos Computacionales en Plasmas Producidos por Cavitación Láser y colapso de burbujas - trabajo realizado hasta 27 de Octubre de 2022

Pablo Chehade

pablo.chehade@ib.edu.ar

Instituto Balseiro, CNEA-UNCuyo, Bariloche, Argentina, 2022

- Se estudió numéricamente la expansión de una burbuja de cavitación láser. **y la compresión**
- La evolución temporal se divide en dos partes, cada una de ellas gobernada por fenómenos físicos distintos.
- La primera consta desde la creación de la burbuja hasta la expansión rápida al radio máximo. El fenómeno que creemos ocurre es la interacción del láser con los electrones de burbujas microscópicas (bubston) para dar lugar a una avalancha de electrones impulsora de la expansión (fenómeno electromagnético y fluidodinámico). El fenómeno se debe principalmente a la acción de los electrones y las moléculas ionizadas que rodean exteriormente la burbuja.
- La segunda, desde el radio máximo hasta su implosión al radio mínimo. En este momento el efecto de los electrones se diluye y comienzan a preponderar efectos de conducción del calor, cambios en la masa contenida dentro de la esfera debido a reacciones químicas, difusión y condensación/evaporación, entre otros. El fenómeno se debe principalmente a la acción de los iones y moléculas dentro y fuera de la burbuja (fenómeno fluidodinámico, termodinámico y químico).
- Se exploraron además distintos métodos numéricos y técnicas de resolución computacionales para resolver este problema complejo que inherentemente es del tipo stiff debido a las diferencias de órdenes de magnitud entre las constantes de tiempo involucradas.

ÍNDICE

Buscar en internet cómo hacer un índice en Latex

INTRODUCCIÓN

CAPÍTULO I: EVOLUCIÓN HASTA EL RADIO MÁXIMO

A.

B. Avalancha de electrones dentro de los bubston

- Resumen cualitativo
- Determinación instantánea de la densidad de electrones y el potencial eléctrico
- Determinación del campo eléctrico
- Determinación de la presión eléctrica en la superficie de la burbuja ($p_{gas} + p_{coulomb}$)
-

C. Coalescencia de los bubston y formación del núcleo

■

I. EVOLUCIÓN DE LA BURBUJA

- Ecuación diferencial para $R(t)$ (la aproximada o la de Gabriela más completa?)
- Referencia a la expresión de la presión eléctrica
- Gráfico de $R(t)$

■

Se busca calcular la presión eléctrica en $R = R_{cl}$ a tiempo inicial. La presión eléctrica está dada por la ecuación (17) del Bunkin

$$p_e = \frac{2}{3} \bar{n}_e T_e \frac{x}{3} \left[1 + \pi \left(\frac{x-1}{x} \right)^2 \frac{e^2 R_{cl}^2 \bar{n}_e}{T_e} \right]$$

donde $\bar{n}_e = 3.4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ es la densidad media de electrones en el cluster, $T_e \approx 0.1 \text{ eV}$ es la temperatura de los electrones, $x \approx 17.9$ es un parámetro, e es la carga eléctrica y R_{cl} es el radio del cluster que a $t = 0$ es $R_{cl} \approx 10^{-2} \text{ cm}$.

CAPÍTULO II: EVOLUCIÓN DESDE EL RADIO MÁXIMO

A. Resumen del capítulo

- Resumen de los fenómenos que participan en esta parte de la evolución (están en la tesis de Gabriela).
- El objetivo es calcular la evolución del radio $R(t)$ de la burbuja desde su valor máximo.
- Hay que resolver la ecuación de movimiento **Presentar ecuación, de dónde se obtuvo, qué es cada factor y de dónde se sacan los valores, son los mismos para deuterio e hidrógeno?**
- La variación de masa \dot{m} está dada por 3 fenómenos: reacciones químicas, difusión y condensación y evaporación. **Por qué en la tesis de gabriela solo hay variación de mp por condensación y evaporación**
- Comentar que en este trabajo se logró implementar el código de reacciones y de condensación/evaporación.
- Por otro lado, para calcular la variación de p_B es necesario calcular dT/dt para lo cual se necesita una ex-

presión. Aquí es donde se introduce la conservación de la energía.

- Comentar qué modelo se considera para la presión de los gases dentro de la burbuja y qué modelo para la energía
- Comentar que se trata de un problema del tipo stiff y deberá ser trabajado con cuidado. No definir problemas stiff, eso conviene hacerlo en otra sección. enditemize

B. Fenómenos físicos

1. Reacciones químicas

Gabriela obtuvo el modelo de reacciones qcas del paper de Yasui 1997. **Podría verificar si no hay un mejor modelo.** Yasui escribió un libro sobre burbujas. Quizás sea útil leerlo. Mi principal foco estaría en el capítulo 2. Se desarrollan no solo las reacciones químicas sino también los demás fenómenos.

Toegel Phase diagrams for sonoluminescing bubbles: A comparison between experiment and theory. En este se desarrolla el modelo hidrodinámico de la burbuja, junto tmb a modelos de transferencia de calor. En cuanto a las reacciones químicas en particular, el modelo no es exactamente el de la ecuación de Arrhenius, sino de la "ley de Arrhenius modificada". En teoría esto se explica en mayor detalle en el libro "Gas-Phase Combustion Chemistry" de W. C. Gardiner pero no me puse a buscarlo

- Releer la parte de reacciones químicas de la tesis de Gabriela y el paper de Yasui al que se hace referencia. Esta sección intenta resumir eso.
- **DUDA: en el código de Gabriela, ¿es nro de partículas o concentración? En la tesis es concentración**
- **Vale la pena agregar acá la contribución de las reacciones químicas a la conservación de la energía?**
- Las reacciones químicas dentro de la burbuja son de no equilibrio **Referencia al libro de Yasui** y es necesario emplear un modelo de cinética química
- Ocurren cuando las temperaturas en el interior de la burbuja son elevadas
- En este trabajo se consideró sólo la presencia inicial de moléculas de H_2O , O_2 y H_2 , lo cual da lugar a 8 reacciones+
- El cambio total

2. Condensación y Evaporación

- Tengo que repasar la tesis de Gabriela y el paper de Yasui para comenzar a escribir esto
- Sí se podría hacer mención a las ecuaciones para calcular la conducción de calor.

C. Método numérico

- Mencionar que es un problema del tipo stiff. Explicar brevemente de qué se trata esto
- Historia de cómo el código pasó de ejecutar en días (el mío) o minutos (el de Gabriela) a segundos (el mío):
- Comentar que ya se contaba con un código en C++ programado en Borland por Gabriela (y en qué año), pero que resolvía el sistema de ecuaciones diferenciales usando Runge-Kutta Ferhber **corroborar cómo se escribía.** Comentar qué complicaciones tenía y que se programó otro código en C++
- Se usó el cluster.
- Se optó por python. Se usó la librería scipy. Nuevamente el código era muy lento con RK45 pero con el método de Radau todo mejoró. **Explico esto?**

CONCLUSIONES

1. Se calculó numéricamente el radio máximo de la burbuja, obteniendo un valor 10 veces mayor a los resultados experimentales (y teóricos del Bunkin)
2. Se calculó numéricamente el tiempo al que la burbuja alcanza el radio máximo, obteniendo un valor 10 veces mayor a los resultados experimentales (y teóricos del Bunkin)
3. Ídem para la energía, salvo por un factor 600
4. Se encontró que el problema es de naturaleza stiff, lo cual permitió elegir un mejor método numérico que el que se venía usando. Esto permitió disminuir enormemente el tiempo de cómputo
5. Se logró calcular la evolución de un único bubstón, obteniendo los mismos resultados que el paper de Bunkin
6. Se logró implementar un módulo de reacciones, de conducción del calor y de condensación y evaporación.
7. Se pudo usar el cluster de MECOM para agilizar las cuentas del código en C++, aunque luego se decidió trabajar en python
8. Se lograron reproducir las cuentas más importantes del Bunkin con Mathematica