

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 (bubstons) 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

A. Situación física inicial

Buscar en internet cómo hacer un índice en Latex

INTRODUCCIÓN

CAPÍTULO I: EVOLUCIÓN HASTA EL RADIO MÁXIMO

1 [Resumen del capítulo]

- En este capítulo se discute el proceso a partir del cual un láser incidente en un medio líquido es capaz de producir una burbuja de cavitación
- El proceso se desarrolla en **Referencia al Bunkin**
- Se parte de un medio líquido, en nuestro caso agua deuterada, en el cual se asume existen burbujas de gas (bubstons) agrupadas en clusters en la zona focal del haz de luz.
- Se asume que dentro de cada bubston hay inicialmente un electrón libre
- Bajo estas condiciones, se demuestra en el paper que bajo determinadas condiciones de la burbuja y de la intensidad del haz, se desarrolla una avalancha de electrones
- Esta produce una presión eléctrica que expande el bubston hasta que los bubstons del cluster se fusionan entre sí y forman una gran burbuja o "núcleo".
- Este efecto se denomina SOC
- Explicar brevemente qué ocurre luego
- Las cuentas se hacen en el sistema CGS

Armo el cuento hasta la coalescencia

- Resumen: en esta sección se explica la situación física inicial antes de la incidencia del láser.
- Se parte de un medio líquido en el que se encuentran clusters de burbujas estables (bubstons) de radio R_0 .
- Explicar cómo calcular R_0 y dar el valor aproximado
- La estabilidad de los bubstons se basa en la condición $R_0 l_{em}$. Explicar
- Se considera que dentro de la burbuja hay al menos un electrón libre
- Definir R_0 en algún lado

B. Avalancha de electrones dentro de los bubstons

2 [Resumen]

- En esta sección se explicará el proceso a través del cual aumenta la cantidad de electrones N_e dentro de cada bubston.
- También se verá que para que ocurra la avalancha es necesario que el haz supere una determinada intensidad **dada por qué parámetros? del líquido?**
- Además, se verá que durante la avalancha no aumenta la cantidad de electrones indefinidamente, sino que se llega a un valor máximo en un tiempo relativamente rápido

3 [La avalancha comienza con un electrón dentro de la burbuja inmerso en el campo electromagnético producido por el láser]

- La situación física inicial corresponde a un electrón dentro de un bubston inmerso en un campo electromagnético oscilatorio.
- Debido al campo, el electrón se va a mover y va a chocar con las paredes de la burbuja con una frecuencia $\nu_{ew} =$

$\bar{\nu}_e/R_0$ donde $\bar{\nu}_e$ es la velocidad media aritmética de los electrones.

- En cada choque existe una probabilidad de que ionice alguna molécula de la pared, contribuyendo a la avalancha, y una probabilidad de que se quede adherido a alguna de ellas, en decremento de la avalancha.
- El primer caso ocurre con frecuencia $\nu_i = \dot{\mathcal{E}}_e/\Delta$ donde $\dot{\mathcal{E}}_e$ es la velocidad media de aumento de la energía cinética del electrón \mathcal{E}_e debido al movimiento caótico. Mientras que Δ es la energía de ionización de una molécula de la pared. Esta puede ser mucho menor que la energía de ionización de una molécula individual del líquido y se estima en ~ 6 eV. **Leer la referencia 4 en el Bunkin.**
- El segundo caso ocurre con frecuencia $(\bar{\nu}_e/R_0)w_{a,e}$ donde $w_{a,e}$ es la probabilidad de adhesión a la pared.

4 [Determinación de la frecuencia de ionización]

- Asumiendo que el efecto del campo eléctrico es mayor al magnético, la velocidad $\dot{\mathcal{E}}_e$ corresponde a la potencia entregada por el haz a un electrón.
- Además, considerando que la amplitud de oscilación del electrón es mucho menor a la longitud de onda del haz, el campo eléctrico se puede considerar uniforme.
- Entonces, el campo eléctrico se puede expresar como $E(t) = E_0 \sin(\omega t)$, con ω frecuencia del haz y E_0 amplitud.
- Para calcular la potencia es necesario analizar el movimiento del electrón
- La posición del electrón está dada clásicamente por la ley de Newton
- $m\dot{v} = -eE(t) - m\nu_{ew}v$
- donde m es la masa del electrón, v su velocidad y e su carga. En esta ecuación las colisiones con la pared se tuvieron en cuenta a partir del término de fricción $m\nu_{ew}v$.
- Para tiempos largos (**definir esto**) se puede resolver la ecuación diferencial obteniendo la velocidad
- **expresión de la velocidad de la cuenta de Gustavo**
- En base a esta velocidad se puede calcular la potencia entregada por el campo al electrón

5 [Determinación de la frecuencia de pérdida de electrones]

- test

6 [Determinación del nro de electrones en función del tiempo]

- Si la frecuencia de ionización es mayor a la de pérdida de electrones, se desarrolla una avalancha.
- De este modo, a tiempos cortos (**para los que no creció demasiado el radio y se puede asegurar que solo ocurren los dos fenómenos anteriores?**)
- **Expresión (2) del Bunkin**
- donde **derivación de θ** .

7 [Condición mínima para la intensidad del haz]

- Esto da además una condición sobre la intensidad del haz. **Hacer una cuenta con el láser del laboratorio**

8 [Aumento indefinido de electrones?]

- Esto demuestra que aumentan los electrones y se forma dentro de la burbuja un gas de electrones.

- Además, en la superficie se forma una esfera de carga uniforme positiva debido a los iones
- La anterior evolución vale solo cuando la densidad media de electrones es pequeña y por lo tanto el camino libre medio de colisión entre electrones es más grande que el tamaño de la burbuja.
- Cuando esto deja de valer, las colisiones de los electrones con la pared deben disminuir y por lo tanto debería disminuir la cantidad de electrones.
- En la competencia de ambos procesos debería llegarse a un equilibrio en el que la cantidad de electrones no aumenta.
- Este justificativo físico es necesario para continuar el análisis
- El tiempo en el que ocurre esto y el valor de la densidad media máxima será determinado próximamente

9 [Cálculo de la densidad media máxima]

- Debido a la interacción coulombiana la densidad de electrones $n_e(r)$ debe ser no uniforme
- Determinación instantánea de la densidad de electrones y el potencial eléctrico
- Gráficos de ambas funciones

10 [Cálculo del tiempo al que se alcanza la densidad media máxima t_0]

C. Coalescencia de los bubstons y formación del núcleo

- Se busca calcular la evolución del radio. Para esto se cuenta con la ecuación diferencial aproximada
- donde en la término de presión hay que considerar tanto la hidrostática como la de los electrones
- Se parte de un gas de electrones dentro de la burbuja.
- Explicar la formación de la capa superficial y su justificación a partir del camino libre medio
- Determinación del campo eléctrico
- Determinación de la presión eléctrica en la superficie de la burbuja ($p_{gas} + p_{coulomb}$)
- Lo único que queda determinar es la temperatura. Para

I. EVOLUCIÓN DE LA BURBUJA

Armo el cuento desde la coalescencia hasta llegar a los resultados importantes de radio máximo y el tiempo al que se da

- Luego del tiempo de coalescencia se asume que todos los bubstons se fusionan para formar una burbuja grande, a partir de ahora denominada "núcleo".
- Condiciones iniciales de la burbuja
- 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 $\bar{n}_e = 3.4 * 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 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 $R_{cl} \approx 10^{-2} \text{ cm}$.

- La velocidad inicial está dada por
- condiciones para la fórmula de Willis. Buscar bien y explicar por qué se plantea la igualdad de energías a tiempo inicial. No me queda claro por qué deja de valer la evolución que hicimos con la presión de electrones.
- Ecuación diferencial de evolución del radio de la burbuja
- Esta es una aproximación de la ecuación de momento Referencial el libro "The Acoustic Bubble" de T.G.Leighton
- teniendo en cuenta como presión a la hidrostática (el interior de la burbuja se considera vacío).
- Mientras que las condiciones iniciales son
- Se obtuvo el radio máximo $R_{\text{max}} = \text{valor?}$ cm a tiempo $t_{\text{max}} = \text{valor?}$ s.

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 \dot{m} 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 expresión. 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.

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, n 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 el 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 bubston, 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