

声致发光的数字模拟

谢志行 魏荣爵

(南京大学声学研究所 近代声学国家重点实验室 南京·210093)

1 引言

早在本世纪30年代,人们就发现水中的空气泡在声能量的驱动下,可发射出光来,这种现象被称之为声致发光(sonoluminescence)^[1]。该现象自发现后一直是物理学界和声学界的热门课题之一。及至1988年,Felipe Gaitan^[2]成功地将单个气泡稳定地悬浮在周期性声场之中,实现了所谓单泡声致发光(single-bubble sonoluminescence),人们由此可在空间上定位,时间上持续地对该现象进行观察和研究。让人不可思议的是,对单泡的观察表明,空气泡在声场作用下,呈径向搏动,这种搏动在气泡被压缩至微米数量级时仍能保持其良好的球对称性,并最终导致能量密度上升12个数量级,压强高达大气压的数十万倍,温度与黑体辐射谱比较大约在16400~30000K之间,整个闪光的宽度小于50ps。而所有这一切可以几十微秒的周期稳定地重复上亿次不变^[3,4],本文对该现象进行了计算机数值模拟,采用了一种非绝热非均匀的模型,证明在气泡的收缩过程中,气泡内部确实产生了激波,并获得了和实验基本一致的数据。

2 理论模型

为描述气泡的运动,Rayleigh于1917年首次提出了气泡振荡的数学模型^[5],经Noltingk、Neppiras^[6]和Plesset^[7]等人发展,得到所谓的Rayleigh-Plesset方程,公式如下:

$$RR + \frac{3}{2} \dot{R}^2 = \frac{1}{\rho} [P(R, t) - P_0 - P_a(t)] + \frac{R}{\rho c_w} \cdot \frac{d}{dt} [P(R, t) - P_a(t)] - \frac{4}{R} \sigma \quad (1)$$

式中: R 为气泡瞬时半径, c_w 为液体声速, ρ 为液体的密度, σ 为液体的动态粘滞度。 P_0 为静止时环境压力, $P(R, t)$ 为气泡内气体内压, $P_a(t) = -P_a \sin(\omega t)$ 为驱动声压。

假设气泡内气体是均匀且绝热的,我们可用一简单的范德瓦尔斯方程^[8]来描述它:

$$P/P_0 = [(V_0 - b)/(V - b)] \quad (2)$$

式中 $V = 4\pi R^3/3$, ρ 为气体密度, b 为气体范德瓦尔斯排斥体积, γ 为比热比, P 为气体压强。方程(1)和(2)构成了声致发光的均匀绝热模型,利用龙格库塔

法将其数值求解,得到如图1所示的气泡半径-时间曲线。图中实线为由方程(1)、(2)组成的均匀绝热模型所得结果。虚线为由方程(1)、(3)~(8)组成的非均匀非绝热模型所得结果。初始条件选为:气泡未扰半径 $R_0 = 4.5 \mu\text{m}$,驱动声压幅度 $P_a = 1.275 \text{atm}$,驱动声压频率 $\omega/2 = 26.5 \text{kHz}$ 。该曲线与实验中所得曲线能较好拟合,表明该模型可较好解释气泡的宏观运动,但是它不能描述气泡在快速塌缩时气泡内激波的产生及传播状况,并且其预言的泡内温度与气泡内实际温度相比较低,因此我们必须发展一非均匀非绝热模型考察气泡内气体的微观运动情况。

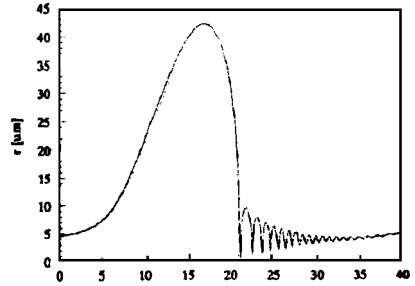


图1 气泡半径随时间的变化曲线

采用球对称的流体力学欧拉方程组,可描绘泡内气体的具体运动,公式如下:

$$-\frac{1}{t} + \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (ur^2) = 0 \quad (3)$$

$$-\frac{1}{t} (u) + \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (u^2 r^2) + \frac{P}{r} = 0 \quad (4)$$

$$\frac{E}{t} + \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} [(E + P)ur^2] = 0 \quad (5)$$

式中 r 为离气泡中心的距离, ρ 为气体密度, $E = (1/2) \rho u^2 + e$ 为能量密度, e 为单位质量气体内能, $u(r, t)$ 为气体的径向速度。

结合边界条件和气体热力学状态方程组:

$$u(r, t) |_{r=R} = dR(t)/dt \quad (6)$$

$$p = \frac{RT}{V - b}, \quad e = C_v T = \frac{V - b}{-1} p \quad (7)$$

C_v 为气体定容比热。另外假设气体发光为韧致辐射,在能量密度 E 中考虑到单位体积的韧致辐射功率 P_{Br} 引起的损失:

$$P_{Br} = 1.57 \times 10^{-40} q^2 N^2 T^{1/2} W_m^{-3} \quad (8)$$

q 为气体电离度, N 为原子密度, T 为温度。

公式(1)、(3)~(8)组成了一完备的非均匀非绝热模型, 利用该模型我们可以计算声致发光的气泡内气体的微观运动状况。

3 数值模拟算法

由于声致发光过程中气泡半径大小变化可达上百倍, 因此为确保足够的精确度, 我们必须在浮动网格上进行气泡的数值计算。考虑一种浮动网格, 如图2所示。网格由等距的直线簇 $t = \text{常数}$ (对应时间步长为 Δt) 和等距的曲线簇 $r = r(t)$ (对应空间步长为 h) 构成。曲线簇 $r = r(t)$ 的左边界为气泡的中心点 $r = 0$, 右边界为气泡壁 $r = R(t)$ 。

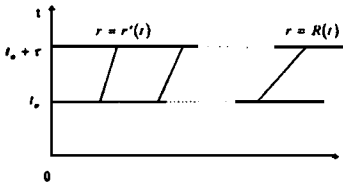


图2 浮动网格示意图

将方程(3)~(5)中沿直线簇 $r = \text{常数}$ 进行的时间偏导数用沿曲线簇 $r = r(t)$ 进行的时间偏导数来代替, 则方程转化为:

$$\frac{\partial}{\partial t} - V \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (ur^2) = 0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (u) - V \frac{\partial}{\partial r} (u) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (u^2 r^2) + \frac{P}{r} = 0 \quad (10)$$

$$\frac{E}{t} - V \frac{E}{r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} [(E+P)ur^2] = 0 \quad (11)$$

其中 V 为网格运动的速度, $V = dr(t)/dt = \dot{R} r/R$, 将方程(9)~(11)用 Lax-Friedrich 格式差分化, 就可得到所需的浮动网格下的差分方程, 以气体密度为例, 方法如下:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\rho_j^{k+1} - \frac{1}{2}(\rho_j^k + \rho_{j+1}^k)}{\Delta t} \quad (12)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \frac{\rho_{j+1}^k - \rho_{j-1}^k}{2h} \quad (13)$$

上式中 ρ_j^k 代表时间为 k 时 $r = jh$ 处气体的密度。由于 L-F 格式含有隐式粘滞项, 因此该差分方法可自动捕捉激波。为确保该算法能够收敛, 时间步长

取值必须小于 h/c , c 为各格点内气体声速的最大值。考虑计算区域的右边界是中心奇点 $r = 0$, 该处公式(12)(13)不适用, 为此必须对其进行特殊处理。考虑气泡中心处气体的流动, 由球对称性原理可知, 该处速度为:

$$u_0^k = 0 \quad (14)$$

将公式(9)沿半径从 $0 \sim h$ 的圆球积分, 并将积分 $\int_{r=0}^{r=h} dr^3$ 用 $\frac{1}{2}(\rho_0^k + \rho_h^k)h^3$ 代替, 再同理将公式(9)沿半径从 $0 \sim 2h$ 的圆球积分, 将最终所得 2 个公式相减, 最后可得用以计算中心处密度的外插公式:

$$\rho_0^{k+1} = \rho_0^k + \frac{R}{R} (13\rho_1^k - 18\rho_2^k + 5\rho_3^k) - \frac{45}{h} (\frac{45}{8}\rho_3^k u_3^k - 27\frac{45}{2}u_2^k + \frac{283}{8}\rho_1^k u_1^k) \quad (15)$$

同法可得计算中心处能量密度的外插公式:

$$E_0^{k+1} = E_0^k + \frac{R}{R} (13E_1^k - 18E_2^k + 5E_3^k) - \frac{45}{h} [(E_3^k + P_3^k)u_3^k - 27(E_2^k + P_2^k)u_2^k + \frac{283}{8}(E_1^k + P_1^k)u_1^k] \quad (16)$$

公式(14)、(15)、(16)构成区域的右边界条件。

区域的左边界为气泡壁, 我们将其作为绝热的硬边界处理, 该处气体的速度取为气泡壁的速度, 压强取值为前一格点压强值以使法向压强梯度为零, 温度处理方法和压强相同, 公式如下:

$$u_m^k = R, \quad P_m^k = P_{m-1}^k, \quad T_m^k = T_{m-1}^k \quad (17)$$

以上给出了描绘气体运动的欧拉方程的数值模拟算法, 至于描绘气泡壁运动的 R-P 方程(1)的数值计算可采用四阶龙格库塔法, 再结合初致辐射公式(8)我们就可对声致发光过程进行具体的数值模拟。

4 模拟结果

我们采用 101 点的浮动网格对水中的空气泡进行了声致发光的模拟计算。初始条件选为: 气泡未扰半径 $R_0 = 4.5 \mu\text{m}$, 驱动声压幅度 $P_a = 1.275 \text{atm}$, 驱动声压频率 $\omega/2 = 26.5 \text{kHz}$ 。图3为所得气泡半径-时间曲线和气泡壁速度-时间曲线。由图中可知, 在气泡迅速塌缩期间, 气泡壁速度高达 3000m/s , 和气泡内声速相比已超过了 4 马赫, 因此气泡内一定会产

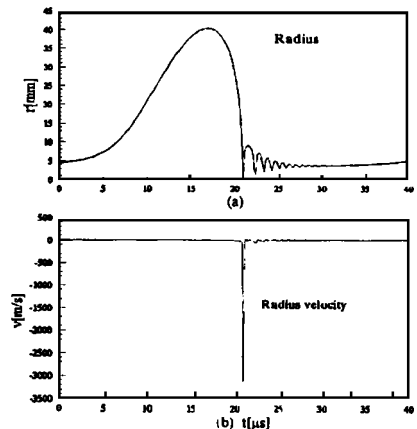
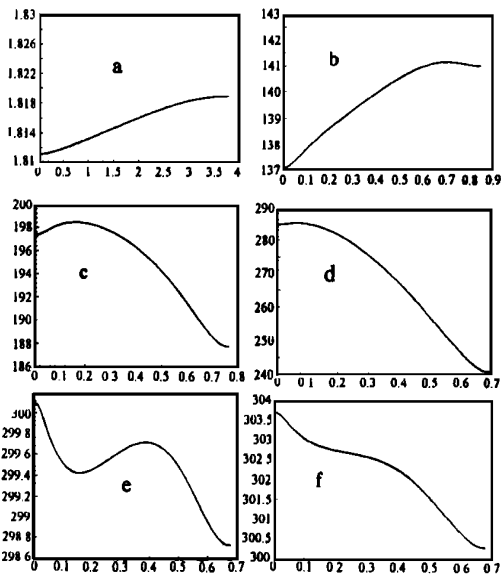


图3 气泡半径(a)和气泡壁速度(b)随时间变化曲线



纵坐标为气体密度, 单位为 kg/m^3 ,

横坐标为离气泡中心的距离, 单位为 m

图4 气泡到最小半径附近不同时刻气泡内质量径向分布生激波。图4显示了气泡在压缩至最小半径附近 0.96ns 间期内气体质量分布随时间的变化过程。图a所在时间为 $t = t_a = t_d - 0.48\text{ns}$, 图b所在时间为 $t = t_b = t_d - 0.0384\text{ns}$, 图c所在时间为 $t = t_c = t_d - 0.0192\text{ns}$, 此时我们可看到有一激波形成并向气泡中心传播, 至图d所在时间 $t = t_d$ 时, 激波到达气泡中心, 在图e所在时间 $t = t_e = t_d + 0.0192\text{ns}$ 时, 激波反弹后向气泡壁传播, 在图f所在时间 $t = t_f = t_d + 0.48\text{ns}$ 时, 激波进一步向气泡壁处传播。在整个气泡收缩过程中, 由于会聚激波的作用, 气泡中心温度可高达 $10^5 \sim 10^6\text{K}$, 中心附近平均温度高达 $10^4 \sim 10^5\text{K}$, 发光间期小于 38.4ps , 和实验数据符合较好。

5 结论

振动激励下的颗粒物质的有效隆起力

陈伟中 魏荣爵

(南京大学声学研究所 近代声学国家重点实验室 南京·210093)

直到80年代末, 有关颗粒物质的研究才引起人们的高度重视, 发现了许多令人感兴趣的现象^[1], 如

本文利用非均匀非绝热模型对声致发光进行了数值模拟, 模拟过程中成功地解决了激波捕捉和中心奇点的问题, 得到了和实验较一致的结果, 证实了声致发光气泡内确实产生了激波会聚, 并因此造成了气泡中心处极高的温度和皮秒级的发光间期。

因计算机速度所限, 目前模型仅将网格划分为101点, 故模拟时激波无法进一步向气泡中心会聚, 未来可以将网格进一步细分而得到更高的气泡中心温度, 不过这并不影响中心附近的平均温度值, 而模拟中发现正是这一部分对发光有主要影响。

另外可作改进的是我们可以将分子作用力、原子电离能和可能发生的化学反应等因素进一步考虑进模型, 从而对气泡内气体状态能更精确地描述, 这些都还等待我们进一步完善。

参考文献

- 1 H. Frenzel, and H. Schultes, Z. Phys. Chem. 1934; 27B: 421
- 2 D. F. Gaitan, L. A. Crum, in Frontiers of Nonlinear Acoustics, Proc. 12th Int. Symp. on Nonlinear Acoustics, M. Hamilton, D. T. Blackstock, eds., Elsevier, New York 1990: 459. D. F. Gaitan, L. A. Crum, R. A. Roy, C. C. Church, J. Acoust. Soc. Am. 1992; 91: 3166
- 3 B. P. Barber, and S. J. Putterman. Nature, 1991; 352: 318
- 4 L. A. Crum. Physics Today, 1994; 47: 22
- 5 Lord Rayleigh, Philos. Mag., 1917; 34: 94
- 6 B. E. Noltingk, and E. A. Neppiras, Proc. Phys. Soc. London, 1950; 63B: 674
- 7 M. S. Plesset and D. Y. Heith, Phys. Fluids, 1960; 3: 882
- 8 R. L. ofstedt, B. P. Barber, and S. J. Putterman, Phys. Fluids, 1993; 5A: 2911

颗粒大小分离, 声传播反常, 隆起和对流^[2-8]等等, 所谓隆起和对流指的是盛在容器中的颗粒物质, 当