





Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2023. Т. 31, № 1
Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy. Applied Nonlinear Dynamics. 2023;31(1)

Научная статья
УДК 530.182

DOI: 10.18500/0869-6632-003020
EDN: BMTNBQ

Подход к расчету параметра нелинейности ультразвуковых волн в жидкости, основанный на масштабной теории термодинамических флуктуаций давления

Р. Н. Беленьков , Е. Б. Постников

Курский государственный университет, Россия
E-mail:  belenkov.roman@bk.ru, postnikov@kursksu.ru

Поступила в редакцию 10.08.2022, принята к публикации 20.09.2022,
опубликована онлайн 29.12.2022, опубликована 31.01.2023

Аннотация. Параметр нелинейности B/A является характеристикой жидкостей и мягкой материи и привлекает все большее внимание благодаря своей чувствительности к составу материалов. Это делает параметр нелинейности перспективным показателем для приложений неразрушающего контроля на основе ультразвукового зондирования, подходящим для различных приложений от физической химии до биомедицинских исследований. В то же время, термодинамическое определение параметра нелинейности требует обширных измерений при повышенных давлениях, которые не всегда доступны; кроме того, известны определенные противоречия таких данных с данными, полученными методами нелинейной акустики. **Цель.** Мы рассматриваем недавно предложенный подход к предсказанию скорости звука при высоких давлениях, который использует свойство инвариантности флуктуаций приведенного давления и данные, полученные только при нормальном давлении окружающей среды. Метод обобщает классическую модель Номото, которая, однако, дает лишь качественную картину, и приводит к количественному соответствию экспериментальным значениям в пределах их неопределенности. **Методы.** Аналитические методы теории термодинамических флуктуаций в приложении к параметрам уравнений нелинейной акустики, а также численное моделирование в среде COMSOL Multiphysics[®]. **Результаты.** Получены выражения для расчета параметра нелинейности с приемлемой точностью, используя только термодинамические данные, определенные при атмосферном давлении. Численные расчеты были проведены для толуола. Кроме того, на основе численного решения уравнения Вестервельта проанализировано несоответствие между значениями параметра нелинейности, полученными термодинамическим и нелинейно-акустическим способами, объясненное недостаточным учетом эффектов поглощения для волн конечной амплитуды при последнем.

Ключевые слова: параметр нелинейности, ультразвук высокой интенсивности, термодинамические флуктуации, нелинейные волны.

Для цитирования: Беленьков Р. Н., Постников Е. Б. Подход к расчету параметра нелинейности ультразвуковых волн в жидкости, основанный на масштабной теории термодинамических флуктуаций давления // Известия вузов. ПНД. 2023. Т. 31, № 1. С. 45–62. DOI: 10.18500/0869-6632-003020. EDN: BMTNBQ

Статья опубликована на условиях Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0).

Approach to nonlinearity parameter in liquids calculation based on the scaling theory of thermodynamic fluctuations

R. N. Belenkov✉, E. B. Postnikov

Kursk State University, Russia

E-mail: ✉belenkov.roman@bk.ru, postnikov@kursksu.ru

Received 10.08.2022, accepted 20.09.2022, available online 29.12.2022,

published 31.01.2023

Abstract. The nonlinearity parameter B/A is a characteristic of liquids and soft matter, which gains growing attention due to its sensibility to the composition of materials. This makes it a prospective indicator for nondestructive testing applications based on the ultrasound sounding suitable for a variety of applications from physic chemistry to biomedical studies. At the same time, the thermodynamic definition of the nonlinearity parameter requires extensive measurements at elevated pressures that are not always available; in addition, there are known certain contradiction of such data with the data obtained by methods of nonlinear acoustics. **Objective.** In this work, we consider a recently proposed approach to the prediction of the speed of sound at high pressures, which uses the property of invariance of the reduced pressure fluctuations and the data obtained at normal ambient pressure only. The method generalises the classic Nomoto model, which however gives only a qualitative picture, and results in the quantitative correspondence to the experimental values within their range of uncertainty. **Methods.** Analytical methods of the theory of thermodynamic fluctuations applied to the parameters of equations of nonlinear acoustics as well as numerical simulation in the COMSOL Multiphysics® environment. **Results.** Expressions for calculating the nonlinearity parameter with acceptable accuracy were obtained using thermodynamic data obtained only at atmospheric pressure. Numerical calculations were performed for toluene. In addition, the discrepancy between values of the nonlinear parameter obtained via the thermodynamic and nonlinear acoustic routes is analysed based on the numerical solution of the Westervelt equation; it is revealed that this deviation emerges when the effects of absorption of finite-amplitude waves were not properly taken into account.

Keywords: nonlinearity parameter, high-intense ultrasound, thermodynamic fluctuations, nonlinear waves.

For citation: Belenkov RN, Postnikov EB. Approach to nonlinearity parameter in liquids calculation based on the scaling theory of thermodynamic fluctuations. *Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics*. 2023;31(1):45–62. DOI: 10.18500/0869-6632-003020

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0).

Введение

Параметр нелинейности B/A (явные выражения для величин A и B через параметры состояния среды будут приведены ниже) как характеристика искажения формы волн конечной амплитуды в жидкостях [1] введен в работе [2] (хотя позднее было отмечено [3], что данный подход концептуально восходит к работе Рэлея, посвященной акустическому давлению [4]).

Более общий подход, связывающий параметр нелинейности с термодинамическими величинами, которые не требуют для его определения работы с мощным ультразвуком, базируется на подходе, изложенном в статье Байера (R. T. Beyer) [5] (в силу этого в ряде источников параметр B/A носит название «параметра нелинейности Байера»), и является основным в теории нелинейной акустики и ее приложении к исследованию широкого круга проблем, варьирующихся от физической химии жидкостей до биомедицинских приложений [6–8]. Подробный обзор современного состояния исследований и значимости нелинейного параметра представлен в [9]. Существенная чувствительность параметра нелинейности к составу и физико-химическим свойствам жидкостей, коллоидов и мягких сред делает его эффективным маркером в области диагностических ультразвуковых исследований и ультразвуковой томографии [10, 11]. В области физики и физической химии жидкости в последние годы растет внимание к параметру нелинейности как к важной характеристике свойств ионных жидкостей и глубоко эвтектических растворителей [12, 13]. В связи с ростом интереса к их использованию в качестве сред для химического синтеза

и теплоносителей при высоких давлениях, встает вопрос о поведении параметра нелинейности в таких условиях, практически не исследованный экспериментально. Соответственно, открытым является вопрос о возможности предсказательного расчета величины B/A как функции температуры и давления по данным, полученным в условиях нормального давления. Помимо этого, существует и фундаментальная задача связи параметра нелинейности B/A и коэффициентов дифференциальных уравнений нелинейной акустики [14, 15].

Первой попыткой теоретического определения параметра нелинейности B/A , универсального относительно температуры и давления, является работа О. Номото [16], выполненная в предположении так называемой «жидкости Рао» (см. также работу [17], представившую более глубокий термодинамический анализ), то есть среды, для которой выполняется эмпирическое степенное соотношение между плотностью и скоростью звука (правило Рао) [18] или же плотностью и изотермической или адиабатической сжимаемостью (правило Вада) [19]. Несмотря на то, что к настоящему времени достаточно ясно, что соотношения Рао–Вада являются существенно приближёнными, они по-прежнему используются в качестве практического метода (с введением эмпирических поправочных коэффициентов), см. например [20–24]. Вместе с тем, использование модели «жидкости Рао» ведет к постоянному значению $B/A = 6$, которое не зависит от температуры и давления, что не соответствует экспериментам и, более того, само значение демонстрирует только качественное согласие с реальностью (для различных жидких и мягких сред эта величина варьируется в пределах от 5 до 12).

В настоящее время было показано [25] на основе аналогии между анализом дифференциальных уравнений термодинамики и динамических систем, что более физически корректная картина взаимосвязи плотности, скорости звука и температуры жидкости должна базироваться на рассмотрении термодинамических флуктуаций плотности и давления, рассматриваемых в комплексе.

1. Параметр нелинейности

Параметр нелинейности B/A для звуковых волн большой амплитуды определяется соотношением коэффициентов разложения изменения давления в среде по отношению к адиабатическому изменению (при постоянной энтропии, что далее указано индексом S в частных производных) ее плотности

$$P - P_0 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{S, \rho=\rho_0} (\rho - \rho_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2} \right)_{S, \rho=\rho_0} (\rho - \rho_0)^2 + \dots,$$

где вводятся обозначения

$$A = \rho_0 \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{S, \rho=\rho_0} = \rho_0 c_0^2, \quad B = \rho_0^2 \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2} \right)_{S, \rho=\rho_0}.$$

Здесь ρ_0 и P_0 — равновесные (невозмущенные) плотность и давление, c_0 — скорость звука малой амплитуды (термодинамическая (адиабатическая) скорость звука).

Соответственно (здесь и далее индекс 0 относится к производным, взятым при невозмущенных параметрах термодинамического состояния),

$$\frac{B}{A} = \frac{\rho_0}{c_0^2} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2} \right)_{S, \rho=\rho_0} = 2\rho_0 c_0 \left(\frac{\partial c}{\partial P} \right)_{0, S}. \quad (1)$$

Из этого определения видно, что параметр нелинейности может быть найден, исходя и из термодинамических соотношений, заданных уравнением состояния жидкости $\rho = \rho(P, T)$, с практической точки зрения — из функциональных соотношений, связывающих параметры состояния на основе регрессии равновесных термодинамических экспериментальных данных. Однако следует

отметить, что непосредственное применение формулы (1) затрудняется тем, что энтропия не является непосредственно измеримой термодинамической величиной (хотя и существует специальный фазово-импульсный метод [26], позволяющий определять адиабатическую производную скорости звука в эксперименте, достигая относительной неопределенности значения параметра нелинейности в 2.2%). В силу этого, более практичным является представление (1) через изобарную и изотермическую производные скорости звука, используя стандартные соотношения между термодинамическими производными:

$$\frac{B}{A} = 2\rho_0 c_0 \left(\frac{\partial c}{\partial P} \right)_{0,T} + \frac{2c_0 T \alpha_P}{C_P} \left(\frac{\partial c}{\partial T} \right)_{0,P} = \left(\frac{B}{A} \right)' + \left(\frac{B}{A} \right)'' , \quad (2)$$

где $\alpha_P = -\rho^{-1} (\partial \rho / \partial T)_P$ – коэффициент изобарного расширения и C_P – изобарная удельная теплоемкость.

В то же время, использование выражения (2) требует наличия достаточного количества данных о скорости звука, измеренных вдоль изотерм при повышенных давлениях, которые не всегда имеются в наличии (что особенно актуально для задач медицинской ультразвуковой диагностики, проводимой при атмосферном давлении). Соответственно, встает вопрос о том, как рассчитать изотермическую производную, оперируя только изобарными данными.

2. Модель Номото

Классической простой предиктивной моделью параметра нелинейности, опирающейся на физико-химические свойства жидкости, является модель Номото [16], основанная на допущениях

$$\left(\frac{\partial c}{\partial T} \right)_P = \frac{3c}{2\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P , \quad (3)$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial P} \right)_T = \frac{3c}{2\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T , \quad (4)$$

которые следуют из так называемого правила Рао

$$\frac{M}{\rho} c^{1/3} = R_w , \quad (5)$$

где M – молярная масса, а R_w – специфическая для вещества константа (молекулярная скорость звука), которая может быть рассчитана с приемлемой точностью по методу групповых вкладов по межатомным химическим связям или субмолекулярным химическим группам либо непосредственно, либо через сжимаемость жидкости [19–21, 27].

Однако данная модель приводит к постоянному значению

$$\frac{B}{A} = 6 , \quad (6)$$

что не выполняется для большинства жидкостей (за исключением воды, имеющей близкий по величине слабо меняющийся параметр нелинейности [8]; следует отметить, что для воды величина R_w действительно слабо зависит как от давления, так и от температуры [28]).

Количественное и качественное отличие результата Номото от экспериментально наблюдаемой ситуации для подавляющего большинства молекулярных и ионных жидкостей можно связать прежде всего с невыполнением условия независимости параметра Рао R_w от выбора термодинамического пути (изобарного или изотермического), что обсуждалось еще в контексте исследования зависимости скорости звука как таковой от плотности вдоль изотерм и вдоль изобар [29, 30]. Таким образом, встает задача выбора комбинации термодинамических параметров, удовлетворяющей требуемому свойству инвариантности с большей точностью.

3. Флуктуационная модель

В качестве упомянутого выше инварианта, позволяющего осуществить отображение изобарной производной скорости звука в изотермическую, в работе [25] было предложено рассмотреть квадрат термодинамических флуктуаций давления в жидкости

$$\langle(\Delta P)^2\rangle = \frac{RT}{M} \rho^2 \frac{1}{\rho \kappa_S}, \quad (7)$$

непосредственно связанных со скоростью звука, в силу выражения последней $c = (\rho \kappa_S)^{-1/2}$ через адиабатическую сжимаемость $\kappa_S = \rho^{-1} (\partial \rho / \partial P)_S$, входящую в (7).

Более точно, используется безразмерная величина приведенных флуктуаций давления, определенная как отношение действительной величины флуктуаций давления к величине квадрата давления в гипотетической среде, обладающей свойствами идеального газа при той же плотности, которую имеет рассматриваемая жидкость ($P_{ig} = \rho RT/M$)

$$v_s \equiv \frac{\langle(\Delta P)^2\rangle}{P_{ig}^2} = \frac{M}{R} \frac{1}{T \rho \kappa_S} \equiv \frac{M c^2}{R T}.$$

В работе [25] для широкого набора жидких углеводородов и их смесей была показана экспоненциальная зависимость параметра приведенных адиабатических флуктуаций v_s от плотности:

$$v_s \equiv \frac{M c^2}{R T} = \Lambda \rho^\lambda, \quad (8)$$

где M/R , Λ , λ — константы (R — газовая постоянная).

Проделаем процедуру, аналогичную той, которая была выполнена при выводе модели Номото, рассмотрев комбинацию

$$\frac{M c^2}{R T^n} = \Lambda \rho^\lambda,$$

в которой введен искусственный показатель степени n с целью проследить в явном виде различия между моделью Номото (для которой $n = 0$, $\lambda = 6$, см. (5)) и флуктуационной моделью, для которой $n = 1$ и λ определяется регрессией выражения (8) вдоль изобары нормального давления.

После взятия частных производных при постоянном давлении и температуре,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{M c^2}{R T^n} \right) \right)_P &= \left(\frac{\partial}{\partial T} (\Lambda \rho^\lambda) \right)_P, \\ \left(\frac{\partial}{\partial P} \left(\frac{M c^2}{R T^n} \right) \right)_T &= \left(\frac{\partial}{\partial P} (\Lambda \rho^\lambda) \right)_T, \end{aligned}$$

получаем следующие выражения:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial T} \right)_P = \frac{\lambda c}{2\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P + \frac{nc}{2T}, \quad (9)$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial P} \right)_T = \frac{\lambda c}{2\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T. \quad (10)$$

Видно, что при $n = 1$ в равенстве (9) имеется дополнительный аддитивный член по сравнению с (3), что приводит к изменению величины изобарной производной по сравнению с моделью Номото; равенство же (10) сохраняет ту же функциональную форму, что и (4) для изотермической производной.

Исходя из определения параметра нелинейности (1), раскрывая адиабатическую производную

$$\left(\frac{\partial c}{\partial P}\right)_S = \left(\frac{\partial c}{\partial P}\right)_T + \left(\frac{\partial c}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S, \quad (11)$$

и подставляя выражения (9), (10) в (11), получаем

$$\left(\frac{\partial c}{\partial P}\right)_S = \frac{\lambda c}{2\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T + \frac{\lambda c}{2\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P + \frac{nc}{2T} \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S = \frac{\lambda c}{2\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_S + \frac{nc}{2T} \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S. \quad (12)$$

С учетом определения скорости звука, $(\partial \rho / \partial P)_S = c^{-1}$,

$$\frac{B}{A} = \lambda + \frac{n\rho_0 c_0^2}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S, \quad (13)$$

и так как

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S = \frac{T}{C_P} \left(\frac{\partial V_0}{\partial T}\right)_P \equiv \frac{VT\alpha_P}{C_P}, \quad (14)$$

то подставляя (14) в (13), принимая во внимание, что плотность есть величина, обратная удельному объему V_0 , то есть $\rho_0 V_0 = 1$, и сокращая температуру в числителе и знаменателе, получаем

$$\frac{B}{A} = \lambda + n \frac{c^2 \alpha_P}{C_P}. \quad (15)$$

При $n = 0$, то есть для «жидкости Рао», выражение (15) сводится к известной формуле Номото (6) при соответствующем $\lambda = 6$, а при условии выполнения степенного масштабирования флуктуаций плотности, $n = 1$, к искомому выражению

$$\frac{B}{A} = \lambda + \frac{c^2 \alpha_P}{C_P}. \quad (16)$$

Таким образом, видно, что допущение инвариантного степенного масштабирования не скорости звука самой по себе, а связанных с нею приведенных флуктуаций плотности приводит к появлению в (16) дополнительного слагаемого, зависящего от термодинамического состояния жидкости.

4. Результаты для параметра нелинейности толуола

В качестве вещества для теста расчета параметра нелинейности жидкости при атмосферном давлении выбран толуол, который является хорошо исследованной стандартной референсной жидкостью [31], для которой известно уравнение состояния типа Шпана–Вагнера (Span–Wagner) в форме многопараметрического выражения для свободной энергии Гельмгольца с коэффициентами, полученными регрессией всего наличного набора критически проанализированных экспериментальных данных в широкой области параметров состояния. Это позволяет пользоваться соответствующими аналитическими производными свободной энергии (используя ThermoData Engine (TDE) — NIST [32]) для нахождения всех термодинамических величин, требуемых для

расчета параметра нелинейности B/A по формуле (2). Относительные неопределенности полученных таким образом термодинамических параметров, согласно [31] и сравнению с прямыми экспериментальными данными посредством TDE: 0.05% – плотность, 0.5% – изобарная теплоемкость, 1% – скорость звука, 2% – изотермическая сжимаемость, 1% – изобарный коэффициент расширения. Соответствующие значения параметра нелинейности показаны на рис. 1 маркерами – кружками с указанием интервала стандартной неопределенности $u_r(B/A) = 0.05$, найденного с применением NIST Uncertainty Machine [33].

Кроме того, с точки зрения нелинейно-волновой динамики, существенным является то, что для толуола известно также значение параметра нелинейности, определенного не только косвенным термодинамическим расчетом, но и непосредственно по отношению амплитуд второй и первой гармоник для волн конечной амплитуды [34]; соответствующее значение показано на рис. 1 маркером – звездочкой, снабженной интервалом неопределенности (порядка 10% согласно цитируемой экспериментальной работе).

Результаты расчета по модели (16) показаны на рис. 1 маркерами – квадратиками. Можно заметить, что при низких температурах они демонстрируют определенное завышение величины параметра нелинейности по отношению к величине, полученной на основе термодинамического расчета; разница достигает полутора единиц, что превышает размах интервалов неопределенности (хотя такая разница все равно в полтора раза меньше, чем для модели Номото). При температурах, выше 263.15 К интервалы неопределенности расчетных и термодинамических данных начинают перекрываться и далее, вплоть до температуры кипения они различаются в их пределах.

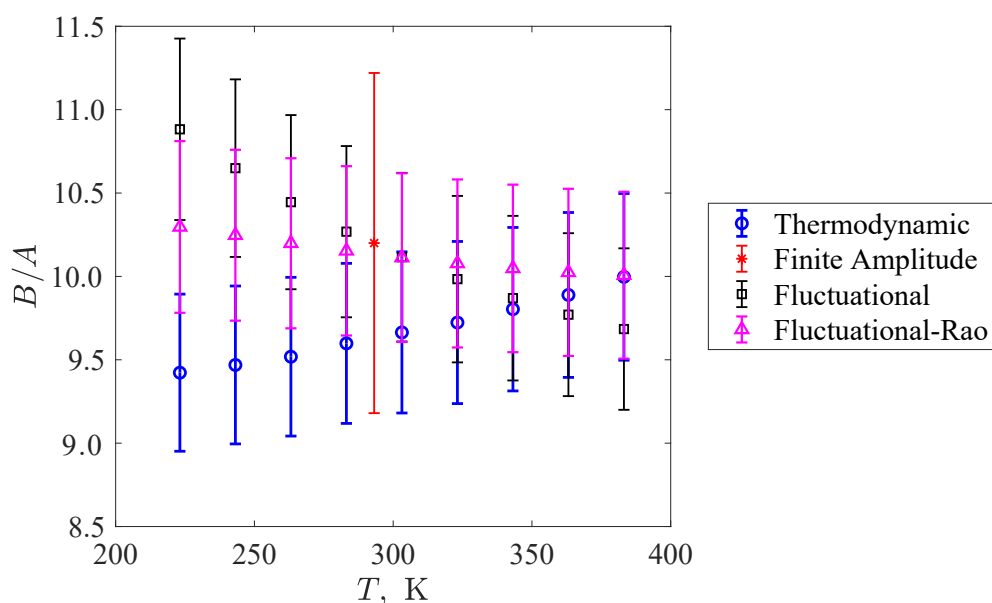


Рис. 1. Зависимость параметра нелинейности толуола от температуры при атмосферном давлении: «Thermodynamic» – рассчитанный согласно (2) по термодинамическим данным; «Finite amplitude» – из эксперимента, непосредственно использующего волны конечной амплитуды [34]; «Fluctuational» – рассчитанный согласно уравнению (16); «Fluctuational-Rao» – при комбинированном расчете с использованием правила Рао для изобары и флуктуационной модели для изотермических производных

Fig. 1. Dependences of the nonlinearity parameter in toluene on temperature at atmospheric pressure, where “Thermodynamic” is calculated according to (2) from thermodynamic data; “Finite amplitude” is taken from the experiment directly using finite amplitude waves [34]; “Fluctuational” is calculated according to the equation (16); “Fluctuational-Rao” follows from a combined calculations, which uses the Rao rule along the isobar and the fluctuational model for isothermal derivatives

При этом тренды температурной зависимости различаются, хотя следует помнить, что в соответствующие выражения (2) и (16) входят производные термодинамические величины, точность определения которых существенно ниже, чем у исходных термодинамических характеристик.

При этом следует также отметить, что экспериментальное значение, полученное непосредственно для волн конечных амплитуд, весьма точно лежит на линии, которую можно провести через маркеры точек данных, полученных из флуктуационной модели.

Рассмотрим возможные причины отклонения расчета по формуле (16) от термодинамических выражений более подробно. Рис. 2 показывает тест масштабной зависимости для выражения (8) и для правила Рао (5). Использование логарифмических координат служит линеаризующим преобразованием, с углом наклона прямых, аппроксимирующих экспериментальные данные, показанные маркерами, соответствующим масштабному показателю λ : $\lambda = 9.1$ (рис. 2, *a*), $\lambda = 6.0$ (рис. 2, *b*) — соответствует правилу Рао.

Однако, несмотря на приемлемую линейность обоих графиков, можно отметить, что отклонения маркеров от прямой на рис. 2, *b* явно меньше. Отсюда возникает вопрос о воспроизводимости отдельных компонентов параметра нелинейности в формуле (2), для чего главным образом следует рассмотреть производные (9), (10), графическое представление которых приведено на рис. 3. Из рис. 3, *a* видно, что флуктуационное выражение дает кривую, существенно более близкую к экспериментальной, чем полученная из допущения $R_w = \text{const}$, для изотермической производной. В то же время для изобарной зависимости (рис. 3, *b*) следует, что зависимость Рао (5) выполняется количественно практически на всем интервале температур, в то время как флуктуационная зависимость приводит к качественно неверной температурной зависимости. Последнее является следствием только приближенной линейности на рис. 2, *a*, что сказывается на поведении производной скорости звука.

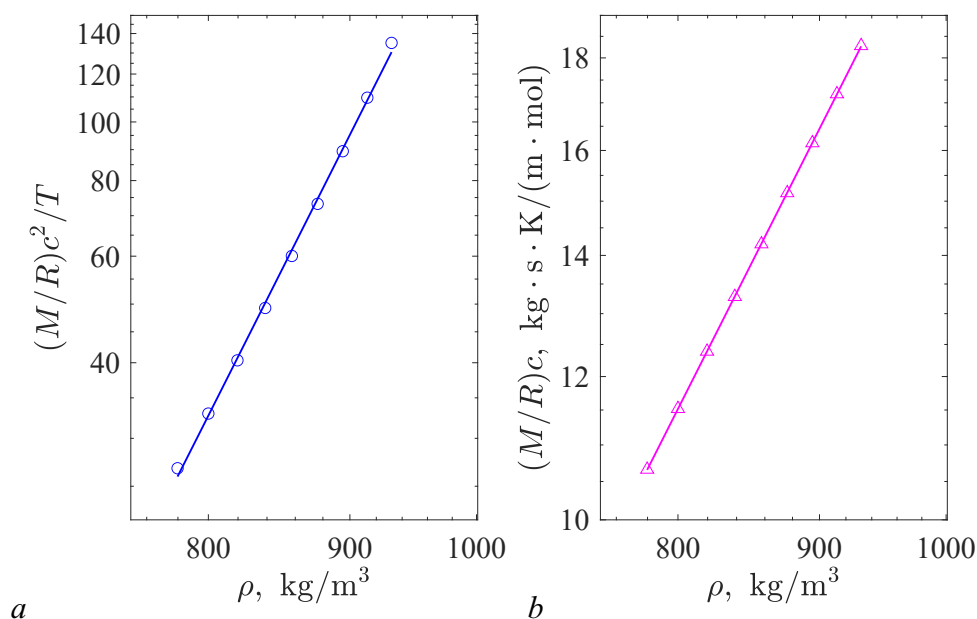


Рис. 2. Графики зависимостей параметра приведенных флуктуаций плотности (*a*) и соотношения, выражающего правило Рао (*b*) в логарифмических координатах как функции плотности вдоль изобары нормального атмосферного давления

Fig. 2. Plots of the dependences of the parameter of reduced density fluctuations (*a*) and the relation expressing Rao's rule (*b*) in logarithmic coordinates as functions of the density along the isobar of normal atmospheric pressure

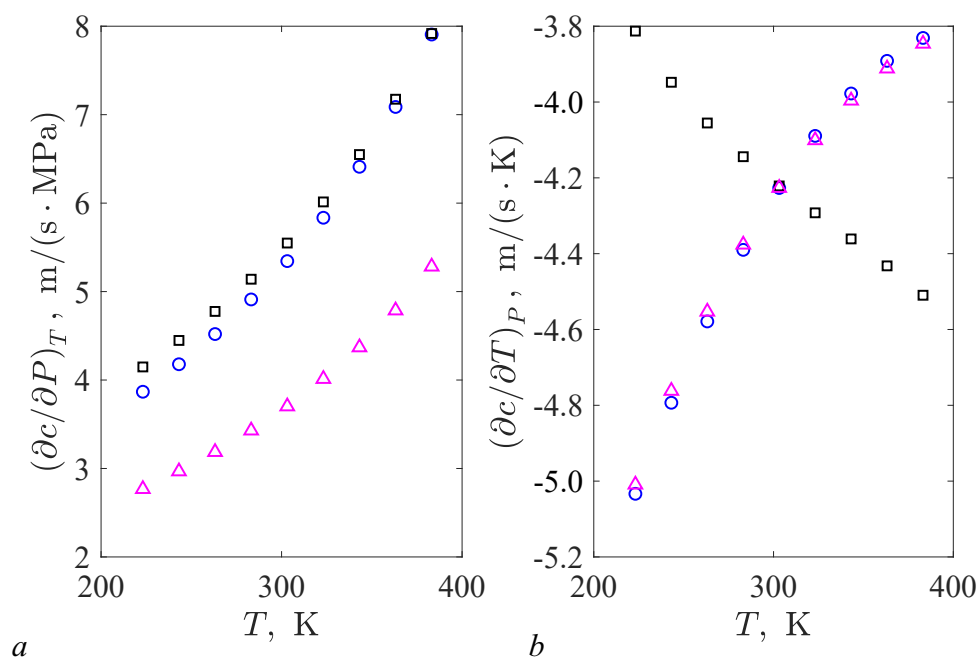


Рис. 3. Изотермическая (а) и изобарная (б) производные скорости звука в толуоле при нормальном атмосферном давлении, полученные из экспериментальных данных (кружки), флуктуационной модели (квадратики) и по правилу Рао (треугольники)

Fig. 3. The isothermal (a) and isobaric (b) derivatives of the sound speed in toluene at normal atmospheric pressure obtained from the experimental data (circles), the fluctuation model (squares), and the Rao rule (triangles)

Таким образом, открывается возможность уточнения расчетной модели следующим образом: изотермическая часть $(B/A)'$ формулы (2) рассчитывается по формуле (10) с масштабным показателем λ , полученным линейной регрессией показателя приведенных флуктуаций давления (заметим, что это соответствует успешной предсказательной модели для расчета скорости звука вдоль изотерм при высоких давлениях, обсужденной в [25]), а изобарная $(B/A)''$ — по формуле Рао–Номото (4). Результат такой комбинации представлен на рис. 1 треугольниками. В данном случае видно, что изменение параметра нелинейности в целом как функции температуры становится малым, что характерно для органических жидкостей, и несмотря на некоторое завышение величины B/A (среднее абсолютное отклонение составляет 4.7%, что согласуется с неопределенностью данных), полученный результат свидетельствует о возможности оценки параметра нелинейности ультразвуковых волн в жидкости на основе данных термодинамических и акустических величин малой амплитуды, измеренных только при атмосферном давлении.

5. Различие величины параметра нелинейности по нелинейно-акустическим и термодинамическим измерениям

Как показано выше, имеется определенная разница между параметром нелинейности толуола, определенным по стационарным термодинамическим свойствам жидкости и на основе анализа затухания гармоник акустического сигнала конечной амплитуды [34]. Методика, реализованная в последнем подходе, основывается на том, что искажение волны непосредственно зависит от параметра нелинейности B/A . Амплитуда второй гармоники (P_2) при удалении от источника на

расстояния $x_2 = X < x_{sh}$ (x_{sh} – расстояние возникновения ударной волны) вычисляется согласно выражению

$$P_2 = \frac{n+1}{4} \left(P_1^2 \frac{X\omega}{\rho_0 c_0^3} \right), \quad (17)$$

где P_1 – амплитуда первой гармоники вблизи источника звука (измеренная на расстоянии x_1), ω – частота сигнала, параметр $n = B/A + 1$, откуда определяется искомый параметр нелинейности B/A .

Для воспроизведения условий данного эксперимента воспользуемся численным моделированием, имитирующим соответствующие условия данных измерений при помощи COMSOL Multiphysics[®]. Основным стандартным уравнением нелинейной акустики [35], моделирующим распространение и эволюцию формы звуковой волны в приближении умеренной (квадратичной) нелинейности, является уравнение Вестервелта (Westervelt equation), которое реализовано в модели COMSOL Multiphysics[®] [36] в форме [37]

$$\frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \nabla \left(\frac{1}{\rho_0} \left(\nabla p + \frac{\delta}{c_0^2} \frac{\partial(\nabla p)}{\partial t} \right) \right) = \frac{\beta}{\rho_0^2 c_0^4} \frac{\partial^2 p^2}{\partial t^2}, \quad (18)$$

где c_0 – скорость звука малой интенсивности; ρ_0 – плотность невозмущенной жидкости; коэффициент, учитывающий нелинейность волны $\beta = 1 + B/(2A)$, выраженный через параметр нелинейности; коэффициент, учитывающий релаксационные явления (коэффициент диффузии звука – sound diffusivity)

$$\delta = \frac{1}{\rho_0} \left[\left(\frac{4}{2} \mu + \zeta \right) + \kappa \left(\frac{1}{C_V} - \frac{1}{C_P} \right) \right] \quad (19)$$

(μ и ζ – коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости, C_P и C_V – изобарная и изохорная удельные теплоемкости, κ – коэффициент теплопроводности).

Следует отметить, что в настоящее время активно исследуется возможность использования уравнения Вестервелта не только для моделирования распространения звуковых волн конечной амплитуды, но и непосредственно для нахождения параметра нелинейности жидкой среды путем сравнения численных решений с регистрируемыми сигналами [15, 38].

В нашем случае параметры для моделирования были выбраны максимально приближенными к экспериментальным [34, 39], а именно: интенсивность излучателя $I = 288 \text{ Вт/м}^2$, частота возбуждения излучателя $f \equiv \omega/(2\pi) = 1.5 \text{ МГц}$, $T = 20^\circ\text{C}$. Термодинамические параметры [31]: $\rho_0 = 866.89 \text{ кг/м}^3$, $c_0 = 1324.3 \text{ м/с}$; следующий из них «термодинамический коэффициент нелинейности» $\beta = 5.8$ (для $(B/A)_{\text{therm}} = 9.6$); коэффициенты вязкости [40] $M = 5.8714 \cdot 10^{-4} \text{ Па}\cdot\text{с}$, $\zeta = 0.0076 \text{ Па}\cdot\text{с}$; членом в (19), зависящим от теплопроводности, пренебрегается в силу малости коэффициента [41] $\kappa = (0.13088 \pm 0.00085) \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$ и больших значений теплоемкости.

Генерация колебаний в среде производится плоским излучателем, колеблющимся со скоростью $u(t) = u_0 \sin \omega t$ с амплитудой $u_0 = 0.0224 \text{ м/с}$, заданной равенством $u_0 = p_0/(\rho_0 c_0)$.

Областью моделирования является интервал $0 \leq x \leq 4.5x_{sh}$. Источник излучения с амплитудой $p_0 = \sqrt{2I\rho_0 c_0} = 25715 \text{ Па}$ располагается в точке $x = 0$, точка $x = 4.5x_{sh}$ терминирована для исключения отражения сигнала. Расстояние возникновения ударной волны

$$x_{sh} = \frac{c_0^2}{\omega\beta u_0} \quad (20)$$

в данном случае составляет 1.43 м.

Зависимость давления $p(t)$ вблизи излучателя фиксировалась на расстоянии $x_1 = 1 \text{ см}$, удаленной от излучателя точкой считалась $x_2 = 20 \text{ см}$, то есть на расстоянии много меньшем

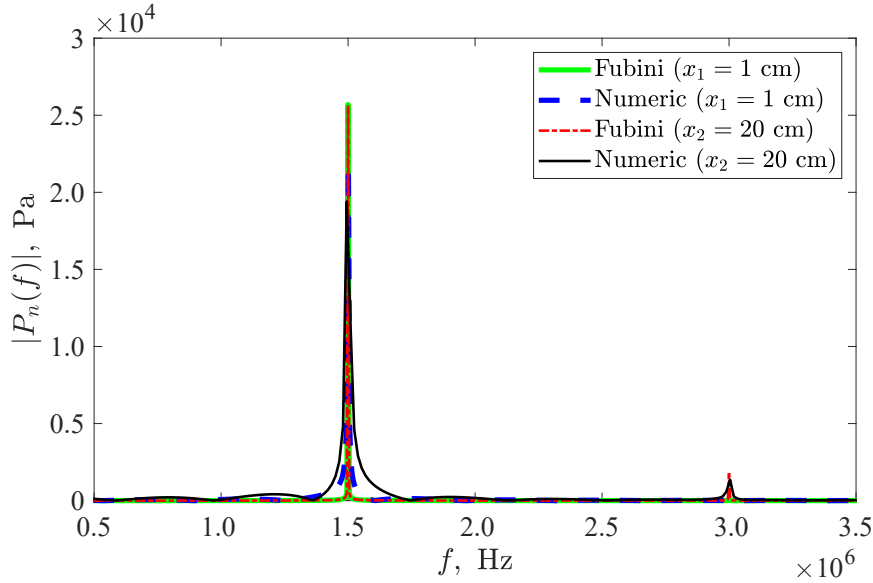


Рис. 4. Спектры сигналов вблизи и на удалении от излучателя по данным численного моделирования и для решения Фубини (цвет онлайн)

Fig. 4. Spectra of signals near the wave source and at a distance from the transmitter according to numerical simulations and from the Fubini solution (color online)

расстояния формирования ударной волны. Для сигналов, полученных численным решением уравнения (18) в соответствующих точках посредством быстрого преобразования Фурье были получены спектры, графики которых представлены на рис. 4.

Амплитуда первой гармоники вблизи излучателя составила $P_1 = 21825.2$ Па, амплитуда второй гармоники на удалении от излучателя $P_2 = 1355.6$ Па. Их подстановка в выражение (17) приводит к значению параметра нелинейности $B/A = 10.2$, что практически совпадает с результатами, приведенными в работе [34], где в ходе эксперимента было получено значение $B/A = 10.4$. Вместе с тем, данное значение очевидно завышено по сравнению с «термодинамическим» значением $(B/A)_{\text{therm}} = 9.6$, использованным как параметр решаемого уравнения (18). Таким образом, можно сделать вывод, что значение, приведенное в работе [34], обусловлено методикой измерения и обработки полученных данных.

В самом деле, выражение (17) базируется на одновременном выполнении двух допущений: малости затухания звуковой волны и малости расстояния от источника до точки измерения второй гармоники, что можно показать аналитически. Касательно первого допущения, решение уравнения Вестервельта при $\sigma = x/x_{\text{sh}} \leq 1$ может быть представлено [8] в форме ряда решения Фубини

$$p(x, t) = p_0 \sum_{n=1}^{\infty} B_n(\sigma) \sin \left(n\omega \left(t - \frac{x}{c} \right) \right), \quad (21)$$

где

$$B_n(\sigma) = \frac{2}{n\sigma} J_n(n\sigma). \quad (22)$$

Подставляя $P_1 = p_0 B_1(\sigma_1)$ и $P_2 = p_0 B_2(\sigma_2)$, где $\sigma_1 = x_1/x_{\text{sh}}$ и $\sigma_2 = x_2/x_{\text{sh}}$ – безразмерные расстояния от излучателя, на которых производятся измерения, в (17), и оставляя только первый член разложения функций Бесселя в ряд Тейлора ($J_1(\sigma) \approx \sigma$, $J_2(2\sigma) \approx \sigma^2/2$), то есть применяя второе допущение, указанное выше, приходим к тождеству.

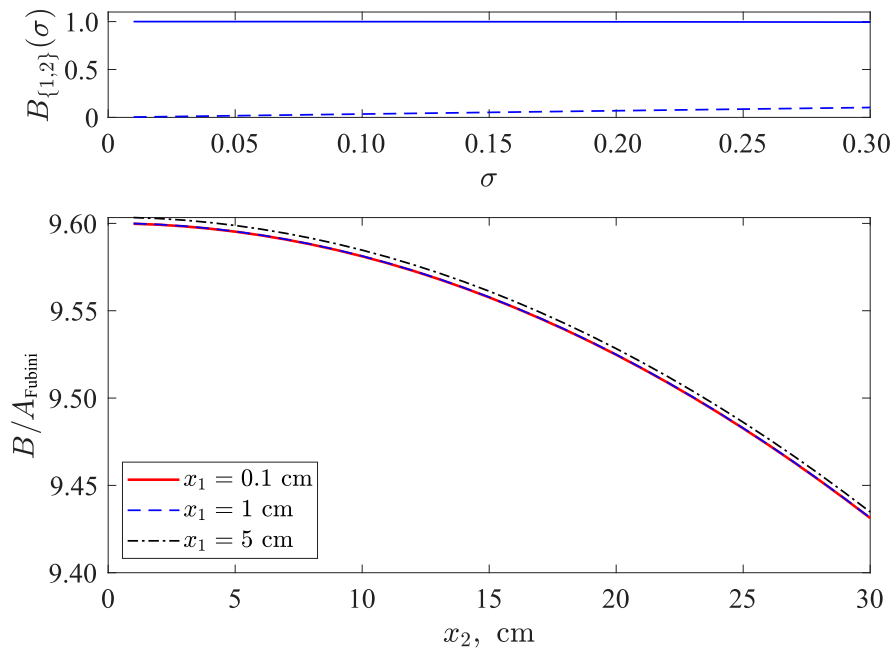


Рис. 5. Коэффициенты $B_1(\sigma)$ и $B_2(\sigma)$ членов ряда решения Фубини (21), (22), показанные сплошной и штриховой линиями, соответственно (верхняя панель), и параметр нелинейности согласно формуле (17) для решения Фубини, измеренный в различных начальных и конечных точках (нижняя панель)

Fig. 5. The coefficients $B_1(\sigma)$ and $B_2(\sigma)$ in the series representing the Fubini solution (21), (22) shown with solid and dashed lines, respectively (upper panel), and the nonlinearity parameter according to the formula (17) for the Fubini solution measured at different initial and end points (lower panel)

Использованное значение $\sigma_2 = 0.14$ уже не может рассматриваться как малое, что проиллюстрировано рис. 5, однако отклонение от исходного значения параметра нелинейности, выявляемого при $x_1 \rightarrow 0$, $x_2 \rightarrow 0$, находится в пределах одного процента. Более существенным является влияние коэффициента затухания нелинейных волн в реальной жидкости. Этот эффект проявляется как в припоршневой области для основной гармонике, см. существенно меньшее значение спектрального пика при x_1 по сравнению с соответствующим пиком решения Фубини на рис. 4, так и на расстоянии x_2 для второй гармонике. Так как P_1 при расчете параметра нелинейности по формуле возводится в квадрат и находится в знаменателе, это и дает существенный вклад в завышение величины B/A . Кроме того, сравнивая рис. 5 и рис. 4, следует отметить, что реалистичное значение амплитуды первой гармонике акустического сигнала заметно ниже на расстоянии x_2 , чем на расстоянии x_1 , что свидетельствует о вкладе затухания в толуоле на таких расстояниях в отличие от идеальной среды, соответствующей решению Фубини, для которой уменьшением первой гармонике только за счет развития второй можно пренебречь.

Таким образом, можно сделать вывод, что непосредственно исходные экспериментальные данные, полученные в работе [34], сами по себе обладают достаточно высокой точностью для нахождения параметра нелинейности, однако их корректная обработка должна обращаться не к формуле (17), а к численному решению нелинейного уравнения (18), существенно зависящему от величины поглощения и положения экспериментальных датчиков акустического давления, при различных наборах входящего в уравнение параметра β с последующим выявлением его численного значения, которое наилучшим образом согласует гармоники численного решения с экспериментальными.

Заключение

Основным выводом данной работы является заключение о том, что параметр, выражающий собой величину приведенных флуктуаций плотности, позволяет с приемлемой точностью оценивать не только скорость звука как функцию изменяющегося давления (то есть первую адиабатическую производную плотности), как это показано в настоящее время в практическом приложении к различным типам жидких сред [25, 42], но и параметр нелинейности, связанный со второй производной, существенно более чувствительной к ходу исходных дифференцируемых функций.

Помимо этого, выявлено, что противоречие, существующее в различных источниках касательно значения параметра нелинейности, определенного в ходе термодинамических и нелинейно-акустических измерений, базируется на излишне упрощенном аналитическом приближении к решению нелинейного уравнения Вестервелта, моделирующего распространение нелинейной волны большой амплитуды. При этом согласование численного решения с измеримыми значениями амплитуд первой и второй гармоники нелинейной волны дает принципиальную возможность найти параметр нелинейности, входящий в исходное дифференциальное уравнение, согласующееся с термодинамическим значением параметра нелинейности.

Список литературы

1. *Зарембо Л. К., Красильников В. А.* Некоторые вопросы распространения ультразвуковых волн конечной амплитуды в жидкостях // *Успехи физических наук.* 1959. Т. 68, № 4. С. 687–715. DOI: 10.3367/UFNr.0068.195908e.0687.
2. *Fox F. E., Wallace W. A.* Absorption of finite amplitude sound waves // *Journal of the Acoustical Society of America.* 1954. Vol. 26, no. 6. P. 994–1006. DOI: 10.1121/1.1907468.
3. *Beyer R. T.* Lord Rayleigh and nonlinear acoustics // *Journal of the Acoustical Society of America.* 1995. Vol. 98, no. 6. P. 3032–3034. DOI: 10.1121/1.414465.
4. *Lord Rayleigh O. M. F. R. S. XLII.* On the momentum and pressure of gaseous vibrations, and on the connexion with the virial theorem // *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science.* 1905. Vol. 10, no. 57. P. 364–374. DOI: 10.1080/14786440509463381.
5. *Beyer R. T.* Parameter of nonlinearity in fluids // *Journal of the Acoustical Society of America.* 1960. Vol. 32, no. 6. P. 719–721. DOI: 10.1121/1.1908195.
6. *Shutilov V. A.* *Fundamental Physics of Ultrasound.* London: CRC Press, 1988. 394 p. DOI: 10.1201/9780429332227.
7. *Cobbold R. S. C.* *Foundations of Biomedical Ultrasound.* Oxford: Oxford University Press, 2006. 832 p.
8. *Lauterborn W., Kurz T., Akhatov I.* Nonlinear acoustics in fluids // In: *Rossing T. (eds) Springer Handbook of Acoustics.* Springer Handbooks. New York: Springer, 2007. P. 257–297. DOI: 10.1007/978-0-387-30425-0_8.
9. *Panfilova A., van Sloun R. J. G., Wijkstra H., Sapozhnikov O. A., Mischi M.* A review on B/A measurement methods with a clinical perspective // *Journal of the Acoustical Society of America.* 2021. Vol. 149, no. 4. P. 2200–2237. DOI: 10.1121/10.0003627.
10. *Duck F. A.* Nonlinear acoustics in diagnostic ultrasound // *Ultrasound in Medicine & Biology.* 2002. Vol. 28, no. 1. P. 1–18. DOI: 10.1016/S0301-5629(01)00463-X.
11. *Gan W. S.* B/A nonlinear parameter acoustical imaging // In: *Nonlinear Acoustical Imaging.* Singapore: Springer, 2021. P. 37–48. DOI: 10.1007/978-981-16-7015-2_6.
12. *Dzida M., Zoreński E., Zoreński M., Żarska M., Geppert-Rybczyńska M., Chorążewski M.,*

- Jacquemin J., Cibulka I.* Speed of sound and ultrasound absorption in ionic liquids // *Chemical Reviews*. 2017. Vol. 117, no. 5. P. 3883–3929. DOI: 10.1021/acs.chemrev.5b00733.
13. *Tiwari R. K., Verma V., Awasthi A., Trivedi S. K., Pandey P. K., Awasthi A.* Comparative study of acoustic non-linearity parameter in binary mixtures of N,N-dimethylacetamide with Polyethylene Glycols at different temperatures // *Journal of Molecular Liquids*. 2021. Vol. 343. P. 117707. DOI: 10.1016/j.molliq.2021.117707.
 14. *Jordan P. M.* A survey of weakly-nonlinear acoustic models: 1910–2009 // *Mechanics Research Communications*. 2016. Vol. 73. P. 127–139. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2016.02.014.
 15. *Kaltenbacher B., Rundell W.* On the identification of the nonlinearity parameter in the Westervelt equation from boundary measurements // *Inverse Problems & Imaging*. 2021. Vol. 15, no. 5. P. 865–891. DOI: 10.3934/ipi.2021020.
 16. *Nomoto O.* Nonlinearity parameter of the “Rao liquid” // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1966. Vol. 21, no. 4. P. 569–571. DOI: 10.1143/JPSJ.21.569.
 17. *Sharma B. K.* Nonlinearity acoustical parameter and its relation with Rao’s acoustical parameter of liquid state // *Journal of the Acoustical Society of America*. 1983. Vol. 73, no. 1. P. 106–109. DOI: 10.1121/1.388842.
 18. *Rao M. R.* Velocity of sound in liquids and chemical constitution // *Journal of Chemical Physics*. 1941. Vol. 9, no. 9. P. 682–685. DOI: 10.1063/1.1750976.
 19. *Wada Y.* On the relation between compressibility and molal volume of organic liquids // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1949. Vol. 4, no. 4–6. P. 280–283. DOI: 10.1143/JPSJ.4.280.
 20. *Daridon J.-L., Coutinho J. A. P., Ndiaye E. H. I., Paredes M. L. L.* Novel data and a group contribution method for the prediction of the speed of sound and isentropic compressibility of pure fatty acids methyl and ethyl esters // *Fuel*. 2013. Vol. 105. P. 466–470. DOI: 10.1016/j.fuel.2012.09.083.
 21. *Gupta A. K., Gardas R. L.* The constitutive behavior of ammonium ionic liquids: a physiochemical approach // *RSC Advances*. 2015. Vol. 5, no. 58. P. 46881–46889. DOI: 10.1039/C5RA02391B.
 22. *Zhang Y., Zheng X., He M.-G., Chen Y.* Speed of sound in methyl caprate, methyl laurate, and methyl myristate: measurement by Brillouin light scattering and prediction by Wada’s group contribution method // *Energy & Fuels*. 2016. Vol. 30, no. 11. P. 9502–9509. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.6b01959.
 23. *Praharaj M. K., Misra S.* Ultrasonic and conductometric studies of NaCl solutions and study of ionicity of the liquid solution through the Walden plot and various ultrasonic parameters // *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. 2018. Vol. 132, no. 2. P. 1089–1094. DOI: 10.1007/s10973-018-7038-9.
 24. *Daridon J.-L.* Predicting and correlating speed of sound in long-chain alkanes at high pressure // *International Journal of Thermophysics*. 2022. Vol. 43, no. 5. P. 78. DOI: 10.1007/s10765-022-02999-x.
 25. *Postnikov E. B., Jasiok B., Melent’ev V. V., Ryshkova O. S., Korotkovskii V. I., Radchenko A. K., Lowe A. R., Chorążewski M.* Prediction of high pressure properties of complex mixtures without knowledge of their composition as a problem of thermodynamic linear analysis // *Journal of Molecular Liquids*. 2020. Vol. 310. P. 113016. DOI: 10.1016/j.molliq.2020.113016.
 26. *Lu Z., Daridon J. L., Lagourette B., Ye S.* A phase-comparison method for measurement of the acoustic nonlinearity parameter B/A // *Measurement Science and Technology*. 1998. Vol. 9, no. 10. P. 1699–1705. DOI: 10.1088/0957-0233/9/10/009.
 27. *Lagemann R. T., Corry J. E.* Velocity of sound as a bond property // *Journal of Chemical Physics*. 1942. Vol. 10, no. 12. P. 759. DOI: 10.1063/1.1723659.
 28. *Schaaffs W.* Molekularakustische Ableitung einer Zustandsgleichung für Flüssigkeiten bei hohen Drucken // *Acustica*. 1974. Bd. 30. S. 275–280.

29. Kudryavtsev B. B., Samgina G. A. Use of ultrasonic measurements in the study of molecular interactions in liquids // Soviet Physics Journal. 1966. Vol. 9, no. 1. P. 5–8. DOI: 10.1007/BF00818478.
30. Aziz R. A., Bowman D. H., Lim C. C. An examination of the relationship between sound velocity and density in liquids // Canadian Journal of Physics. 1972. Vol. 50, no. 7. P. 646–654. DOI: 10.1139/p72-089.
31. Lemmon E. W., Span R. Short fundamental equations of state for 20 industrial fluids // Journal of Chemical & Engineering Data. 2006. Vol. 51, no. 3. P. 785–850. DOI: 10.1021/je050186n.
32. Diky V., Muzny C. D., Lemmon E. W., Chirico R. D., Frenkel M. ThermoData Engine (TDE): Software implementation of the dynamic data evaluation concept. 2. Equations of state on demand and dynamic updates over the web // Journal of Chemical Information and Modeling. 2007. Vol. 47, no. 4. P. 1713–1725. DOI: 10.1021/ci700071t.
33. Lafarge T., Possolo A. The NIST Uncertainty Machine // NCSLI Measure. 2015. Vol. 10, no. 3. P. 20–27. DOI: 10.1080/19315775.2015.11721732.
34. Шкловская-Корди В. В. Акустический метод определения внутреннего давления в жидкости // Акустический журнал. 1963. Т. 9, № 1. С. 107–111.
35. Wu J. Handbook of Contemporary Acoustics and Its Applications. Singapore: World Scientific, 2016. 468 p. DOI: 10.1142/9470.
36. Nonlinear Acoustics – Modeling of the 1D Westervelt Equation [Electronic resource]. Application ID: 12783. COMSOL Multiphysics®, 2022. Available from: <https://www.comsol.ru/model/nonlinear-acoustics-8212-modeling-of-the-1d-westervelt-equation-12783>.
37. Hamilton M. F., Blackstock D. T. Nonlinear Acoustics. San Diego: Academic Press, 1998. 455 p.
38. Chien L. D., Cormack J. M., Everbach E. C., Hamilton M. F. Determination of nonlinearity parameter B/A of liquids by comparison with solutions of the three-dimensional Westervelt equation // Proceedings of Meetings on Acoustics. 2021. Vol. 45, no. 1. P. 020003. DOI: 10.1121/2.0001563.
39. Зарембо Л. К., Красильников В. А., Шкловская-Корди В. В. О распространении ультразвуковых волн конечной амплитуды в жидкостях // Акустический журнал. 1957. Т. 3, № 1. С. 29–36.
40. Dukhin A. S., Goetz P. J. Bulk viscosity and compressibility measurement using acoustic spectroscopy // Journal of Chemical Physics. 2009. Vol. 130, no. 12. P. 124519. DOI: 10.1063/1.3095471.
41. Ramires M. L. V., Nieto de Castro C. A., Perkins R. A., Nagasaka Y., Nagashima A., Assael M. J., Wakeham W. A. Reference data for the thermal conductivity of saturated liquid toluene over a wide range of temperatures // Journal of Physical and Chemical Reference Data. 2000. Vol. 29, no. 2. P. 133–139. DOI: 10.1063/1.556057.
42. Jasiok B., Postnikov E. B., Pikalov I. Y., Chorążewski M. Prediction of the speed of sound in ionic liquids as a function of pressure // Journal of Molecular Liquids. 2022. Vol. 363. P. 119792. DOI: 10.1016/j.molliq.2022.119792.

References

1. Zarembo LK, Krasil'nikov VA. Some problems in the propagation of ultrasonic waves of finite amplitude in liquids. Sov. Phys. Usp. 1959;2(4):580–599. DOI: 10.1070/PU1959v002n04ABEH003149.
2. Fox FE, Wallace WA. Absorption of finite amplitude sound waves. Journal of the Acoustical Society of America. 1954;26(6):994–1006. DOI: 10.1121/1.1907468.
3. Beyer RT. Lord Rayleigh and nonlinear acoustics. Journal of the Acoustical Society of America. 1995;98(6):3032–3034. DOI: 10.1121/1.414465.

4. Lord Rayleigh OMFRS. XLII. On the momentum and pressure of gaseous vibrations, and on the connexion with the virial theorem. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*. 1905;10(57):364–374. DOI: 10.1080/14786440509463381.
5. Beyer RT. Parameter of nonlinearity in fluids. *Journal of the Acoustical Society of America*. 1960;32(6):719–721. DOI: 10.1121/1.1908195.
6. Shutilov VA. *Fundamental Physics of Ultrasound*. London: CRC Press; 1988. 394 p. DOI: 10.1201/9780429332227.
7. Cobbold RSC. *Foundations of Biomedical Ultrasound*. Oxford: Oxford University Press; 2006. 832 p.
8. Lauterborn W, Kurz T, Akhatov I. Nonlinear acoustics in fluids. In: Rossing T, editor. *Springer Handbook of Acoustics*. Springer Handbooks. New York: Springer; 2007. P. 257–297. DOI: 10.1007/978-0-387-30425-0_8.
9. Panfilova A, van Sloun RJG, Wijkstra H, Sapozhnikov OA, Misch M. A review on B/A measurement methods with a clinical perspective. *Journal of the Acoustical Society of America*. 2021;149(4):2200–2237. DOI: 10.1121/10.0003627.
10. Duck FA. Nonlinear acoustics in diagnostic ultrasound. *Ultrasound in Medicine & Biology*. 2002;28(1):1–18. DOI: 10.1016/S0301-5629(01)00463-X.
11. Gan WS. B/A nonlinear parameter acoustical imaging. In: *Nonlinear Acoustical Imaging*. Singapore: Springer; 2021. P. 37–48. DOI: 10.1007/978-981-16-7015-2_6.
12. Dzida M, Zoreński E, Zoreński M, Źarska M, Geppert-Rybczńska M, Chorążewski M, Jacquemin J, Cibulka I. Speed of sound and ultrasound absorption in ionic liquids. *Chemical Reviews*. 2017;117(5):3883–3929. DOI: 10.1021/acs.chemrev.5b00733.
13. Tiwari RK, Verma V, Awasthi A, Trivedi SK, Pandey PK, Awasthi A. Comparative study of acoustic non-linearity parameter in binary mixtures of N,N-dimethylacetamide with Polyethylene Glycols at different temperatures. *Journal of Molecular Liquids*. 2021;343:117707. DOI: 10.1016/j.molliq.2021.117707.
14. Jordan PM. A survey of weakly-nonlinear acoustic models: 1910–2009. *Mechanics Research Communications*. 2016;73:127–139. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2016.02.014.
15. Kaltenbacher B, Rundell W. On the identification of the nonlinearity parameter in the Westervelt equation from boundary measurements. *Inverse Problems & Imaging*. 2021;15(5):865–891. DOI: 10.3934/ipi.2021020.
16. Nomoto O. Nonlinearity parameter of the “Rao liquid”. *Journal of the Physical Society of Japan*. 1966;21(4):569–571. DOI: 10.1143/JPSJ.21.569.
17. Sharma BK. Nonlinearity acoustical parameter and its relation with Rao’s acoustical parameter of liquid state. *Journal of the Acoustical Society of America*. 1983;73(1):106–109. DOI: 10.1121/1.388842.
18. Rao MR. Velocity of sound in liquids and chemical constitution. *Journal of Chemical Physics*. 1941;9(9):682–685. DOI: 10.1063/1.1750976.
19. Wada Y. On the relation between compressibility and molal volume of organic liquids. *Journal of the Physical Society of Japan*. 1949;4(4–6):280–283. DOI: 10.1143/JPSJ.4.280.
20. Daridon JL, Coutinho JAP, Ndiaye EHI, Paredes MLL. Novel data and a group contribution method for the prediction of the speed of sound and isentropic compressibility of pure fatty acids methyl and ethyl esters. *Fuel*. 2013;105:466–470. DOI: 10.1016/j.fuel.2012.09.083.
21. Gupta AK, Gardas RL. The constitutive behavior of ammonium ionic liquids: a physiochemical approach. *RSC Advances*. 2015;5(58):46881–46889. DOI: 10.1039/C5RA02391B.
22. Zhang Y, Zheng X, He MG, Chen Y. Speed of sound in methyl caprate, methyl laurate, and methyl

- myristate: measurement by Brillouin light scattering and prediction by Wada's group contribution method. *Energy & Fuels*. 2016;30(11):9502–9509. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.6b01959.
23. Praharaj MK, Misra S. Ultrasonic and conductometric studies of NaCl solutions and study of ionicity of the liquid solution through the Walden plot and various ultrasonic parameters. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. 2018;132(2):1089–1094. DOI: 10.1007/s10973-018-7038-9.
 24. Daridon JL. Predicting and correlating speed of sound in long-chain alkanes at high pressure. *International Journal of Thermophysics*. 2022;43(5):78. DOI: 10.1007/s10765-022-02999-x.
 25. Postnikov EB, Jasiok B, Melent'ev VV, Ryshkova OS, Korotkovskii VI, Radchenko AK, Lowe AR, Chorążewski M. Prediction of high pressure properties of complex mixtures without knowledge of their composition as a problem of thermodynamic linear analysis. *Journal of Molecular Liquids*. 2020;310:113016. DOI: 10.1016/j.molliq.2020.113016.
 26. Lu Z, Daridon JL, Lagourette B, Ye S. A phase-comparison method for measurement of the acoustic nonlinearity parameter B/A. *Measurement Science and Technology*. 1998;9(10):1699–1705. DOI: 10.1088/0957-0233/9/10/009.
 27. Lagemann RT, Corry JE. Velocity of sound as a bond property. *Journal of Chemical Physics*. 1942;10(12):759. DOI: 10.1063/1.1723659.
 28. Schaaffs W. Molekularakustische Ableitung einer Zustandsgleichung für Flüssigkeiten bei hohen Drucken. *Acustica*. 1974;30:275–280 (in German).
 29. Kudryavtsev BB, Samgina GA. Use of ultrasonic measurements in the study of molecular interactions in liquids. *Soviet Physics Journal*. 1966;9(1):5–8. DOI: 10.1007/BF00818478.
 30. Aziz RA, Bowman DH, Lim CC. An examination of the relationship between sound velocity and density in liquids. *Canadian Journal of Physics*. 1972;50(7):646–654. DOI: 10.1139/p72-089.
 31. Lemmon EW, Span R. Short fundamental equations of state for 20 industrial fluids. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2006;51(3):785–850. DOI: 10.1021/je050186n.
 32. Diky V, Muzny CD, Lemmon EW, Chirico RD, Frenkel M. ThermoData Engine (TDE): Software implementation of the dynamic data evaluation concept. 2. Equations of state on demand and dynamic updates over the web. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2007;47(4):1713–1725. DOI: 10.1021/ci700071t.
 33. Lafarge T, Possolo A. The NIST Uncertainty Machine. *NCSLI Measure*. 2015;10(3):20–27. DOI: 10.1080/19315775.2015.11721732.
 34. Shklovskaya-Kordi VV. An acoustic method of determining the internal pressure in a liquid. *Acoustic Journal*. 1963;9(1):107–111 (in Russian).
 35. Wu J. *Handbook of Contemporary Acoustics and Its Applications*. Singapore: World Scientific; 2016. 468 p. DOI: 10.1142/9470.
 36. *Nonlinear Acoustics – Modeling of the 1D Westervelt Equation* [Electronic resource]. Application ID: 12783. COMSOL Multiphysics®; 2022. Available from: <https://www.comsol.ru/model/nonlinear-acoustics-8212-modeling-of-the-1d-westervelt-equation-12783>.
 37. Hamilton MF, Blackstock DT. *Nonlinear Acoustics*. San Diego: Academic Press; 1998. 455 p.
 38. Chien LD, Cormack JM, Everbach EC, Hamilton MF. Determination of nonlinearity parameter B/A of liquids by comparison with solutions of the three-dimensional Westervelt equation. *Proceedings of Meetings on Acoustics*. 2021;45(1):020003. DOI: 10.1121/2.0001563.
 39. Zarembo LK, Krasilnikov VA, Shklovskaya-Kordi VV. On the propagation of ultrasonic waves of finite amplitude in liquids. *Acoustic Journal*. 1957;3(1):29–36 (in Russian).
 40. Dukhin AS, Goetz PJ. Bulk viscosity and compressibility measurement using acoustic spectroscopy. *Journal of Chemical Physics*. 2009;130(12):124519. DOI: 10.1063/1.3095471.
 41. Ramires MLV, Nieto de Castro CA, Perkins RA, Nagasaka Y, Nagashima A, Assael MJ,

Wakeham WA. Reference data for the thermal conductivity of saturated liquid toluene over a wide range of temperatures. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 2000;29(2): 133–139. DOI: 10.1063/1.556057.

42. Jasiok B, Postnikov EB, Pikalov IY, Chorążewski M. Prediction of the speed of sound in ionic liquids as a function of pressure. *Journal of Molecular Liquids*. 2022;363:119792. DOI: 10.1016/j.molliq.2022.119792.



Беленьков Роман Николаевич — родился в Курске (1996). Окончил с отличием факультет физики, математики и информатики Курского государственного университета по направлениям «Электроника и наноэлектроника» (2018) и «Прикладная математика и информатика» (2020). С 2020 года — аспирант кафедры физики и нанотехнологий. Область научных интересов — физика жидкости, цифровая обработка сигналов, программируемые логические интегральные схемы.

Россия, 305000 Курск, Радищева, 33
Курский государственный университет
E-mail: belenkov.roman@bk.ru
ORCID: 0000-0003-0349-5961
AuthorID (eLibrary.Ru): 1022960



Постников Евгений Борисович — родился в Курске (1977). Окончил Курский государственный педагогический университет (1998). Защитил диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук (2000) и доктора физико-математических наук (2011). Заведующий отделом теоретической физики НИЦ физики конденсированного состояния и профессор кафедры физики и нанотехнологий Курского государственного университета. Область научных интересов — математическое моделирование в биофизике, транспортные процессы в сложных средах, физика жидкости.

Россия, 305000 Курск, Радищева, 33
Курский государственный университет
E-mail: postnikov@kursksu.ru
ORCID: 0000-0001-7904-1881
AuthorID (eLibrary.Ru): 137444