

Akustische Kavitation und ihre numerische Modellierung

Robert Mettin, Sergey Lesnik, Gunther Brenner

Intensive Schallfelder in Flüssigkeiten führen zur akustischen Kavitation: Es bilden sich Blasen, deren Eigenschaften und Dynamik im Schallfeld zu einer Vielzahl weiterer physikalischer und chemischer Effekte führen. Dies wird insbesondere im Bereich der Verfahrenstechnik, aber auch in Anwendungen wie der Ultraschallreinigung genutzt. Da es sich bei der akustischen Kavitation um ein Mehrskalenproblem handelt, ist eine allumfassende Modellierung bisher kaum möglich, und man beschränkt sich auf jeweils behandelbare interessierende Teilaspekte.

In diesem Beitrag werden nach einem generellen Überblick neuere Ergebnisse zur Simulation von Kavitationszonen und Kavitationsblasenstrukturen, zu dem durch die Blasen induzierten Flüssigkeitsstrom sowie zum Verhalten kollabierender Blasen an festen Grenzflächen vorgestellt. Die verwendeten numerischen Verfahren umfassen Finite Elemente / Finite Volumen Methoden mit Partikelverfolgung zur Beschreibung von Schall-, Strömungs- und Blasenfeld; bei Studien zur Kollapsdynamik wird die Volume-of-Fluid-Methode zur Darstellung der Gas- und Flüssigkeitsphase eingesetzt.

Einleitung

Wird intensiver Ultraschall in Flüssigkeiten erzeugt, so kommt es zu einer Reihe von physikalischen Effekten, die durch das primäre akustische Feld allein nicht erklärt werden können (siehe z.B. [1; 2; 3]). So wird eine Wirkung auf Objektoberflächen beobachtet, die von Abreinigung bis zu Erosion und Zerstörung reichen kann. Weiterhin können chemische Reaktionen durch Ultraschall hervorgerufen oder beeinflusst werden (Sonochemie), und es kommt zu Leuchterscheinungen (Sonolumineszenz). Grundlage dieser Phänomene sind Blasen im Mikrometerbereich, die durch das Schallfeld erzeugt und in Schwingungen versetzt werden – man spricht von akustischer Kavitation. Insbesondere bei heftigen Implosionen („Kollaps“) derartiger Kavitationsblasen wird die Schallenergie stark konzentriert, und die Energiedichte steigt am Ort der Blase kurzzeitig um viele Zehnerpotenzen an. Dadurch können extreme Zustände im Blaseninneren entstehen: Typische gemessene Spitzenwerte von Temperatur und Druck im Blasenkolaps liegen bei einigen tausend Kelvin und mehreren Kilobar [4], unter spezifischen Bedingungen auch

Acoustic cavitation and its numerical modeling

High-intensity sound fields in liquids lead to acoustic cavitation: Bubbles are formed whose properties and dynamics in the sound field lead to a variety of other physical and chemical effects. This is used in particular in process engineering but also in applications such as ultrasonic cleaning. Since acoustic cavitation is a multi-scale problem, an all-encompassing modelling is hardly possible so far, and one is limited to treatable partial aspects of interest.

In this paper, after a general overview, recent results on the simulation of cavitating regions and cavitation bubble structures, on the fluid flow induced by the bubbles, and on the behaviour of collapsing bubbles at solid interfaces are presented. The numerical methods used include finite element / finite volume methods with particle tracking to describe sonic, flow and bubble fields; in collapse dynamics studies, the volume of fluid method is used to represent both the gas and liquid phases.

deutlich höher. Ionisations- und Dissoziationsreaktionen in der heißen komprimierten Blase führen zu chemischer Aktivität und Lichtemission, starke Scherströmungen und akustische Stoßwellen in der Flüssigkeit bewirken Reinigung und Erosion benachbarter Objekte. Neben dem spektakulären Kollaps der Kavitationsblasen gibt es noch weitere Effekte, die akustische Kavitation für Anwendungen interessant machen. Unter anderem werden die im Schallfeld oszillierenden Blasen durch akustische Kräfte in rasche Bewegung versetzt, welches Sekundärströmungen und kleinskalige Turbulenz erzeugt. Hierdurch kann „kontaktlos“ ein erhöhter Stofftransport und eine Durchmischung in der beschallten Flüssigkeit bewirkt werden. Um den Einsatz der akustischen Kavitation in technischen Prozessen besser zu verstehen und zu optimieren, gilt es, die relevanten physikalischen Aspekte in Modellen abzubilden und effektive Berechnungsverfahren zu erstellen. Auch wenn die verfügbare Leistung moderner Rechner in den letzten Jahren um Größenordnungen gestiegen ist, ist eine skalenauflösende Modellierung und Berechnung auf absehbare Zeit jedoch nicht möglich.

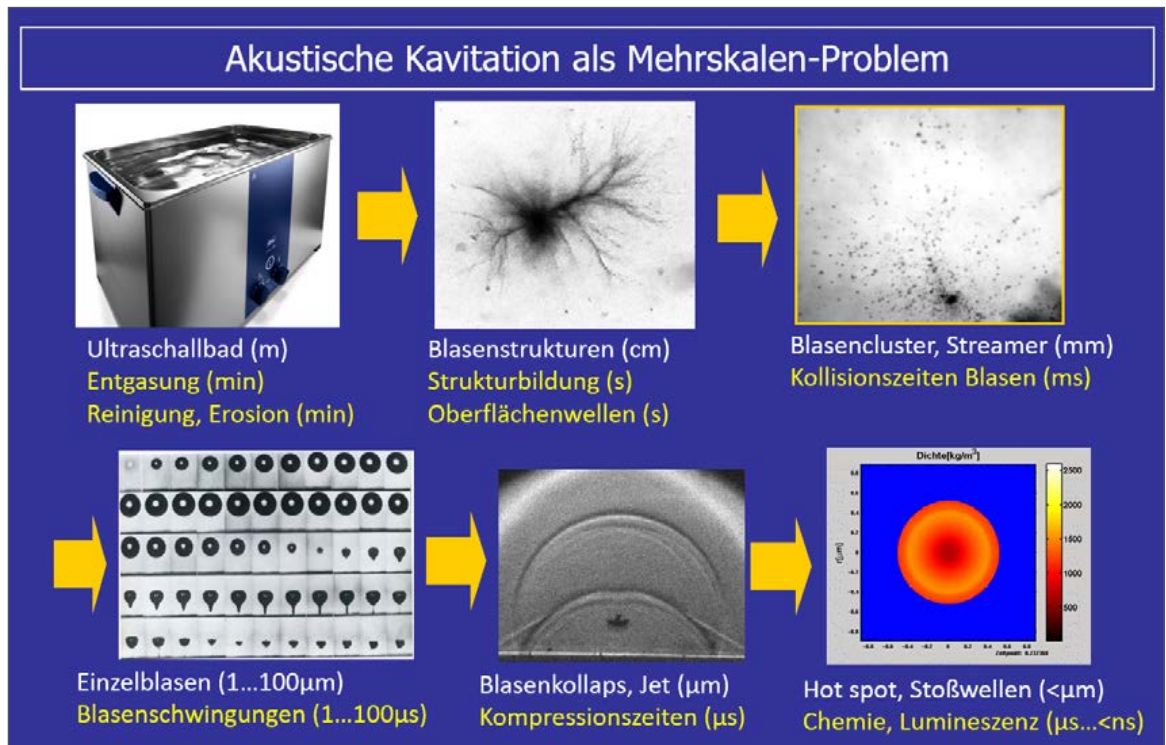


Abb. 1: Skalen von relevanten Teilphänomenen akustischer Kavitation: in weiß ungefähre Längenskalen, in gelb typische Zeitskalen. Bilder: ELMA Schmidbauer GmbH, [5], S. Luther, W. Lauterborn, D. Kröninger, B. Metten.

Abbildung 1 zeigt einen Überblick der relevanten physikalischen Phänomene in Relation zu typischen Raum- und Zeitskalen, hier bezogen auf ein Ultraschallreinigungsbad betrieben bei etwa 20 kHz. Beginnend mit Wanne und Wellenfeld, deren Abmessungen im Bereich m und dm liegen, durchlaufen wir Längen von einigen cm zu mm, wenn wir die akustischen Wellenlängen sowie Blasenstrukturen („Streamer“) und deren Substrukturen (Zweige, Cluster) genauer auflösen. Eine weitere Vergrößerung zeigt einzelne Kavitationsblasen. Da die Blasen vom Wechseldruck angetriebene Volumenschwingungen ausführen, oszilliert ihre Größe teilweise signifikant, wobei sie etwa Maximalradien von einigen 100 μm und Minimalradien im Kollaps von weniger als 1 μm erreichen können. Größere Blasen im mm-Bereich, die z. B. durch Koagulation und Entgasungsprozesse entstehen, verhalten sich in Bezug auf die Kavitationswirkungen eher passiv und steigen normalerweise relativ schnell an die Oberfläche. Die kleinsten relevanten Skalen liegen unterhalb von 1 μm . Sie treten innerhalb der kollabierten Blasen, aber auch an den Grenzflächen zwischen Gas und Flüssigkeit bzw. Objekten sowie an den Fronten von Stoßwellen auf. Zudem entstehen Kavitationsblasen i. d. R. an sog. „Keimen“, deren Größe bis in den nm-Bereich herunterreichen kann. Hierfür kommen z. B. an Verunreinigungen, Staubpartikeln oder an Wänden stabilisierte Gastaschen in Frage, und auch Nanoblasen werden in jüngster Zeit verstärkt diskutiert [6].

Die bei Vorgängen in einem Reinigungsbad beteiligten Zeitskalen überstreichen ebenfalls viele Größenordnungen. Während sich Entgasungsprozesse der Flüssigkeit über viele Minuten hinziehen, liegen die Perioden von Oberflächenwellen oder Umstrukturierungen der Blasenmuster bei Sekunden und darunter. Die Lebensdauer einzelner Kavitationsblasen kann hunderte akustische Schwingungen (ms) betragen oder auch nur eine einzige – je nachdem, ob die Blasen eine Weile ohne Kollisionen umherwandern oder sich rasch mit Nachbarblasen vereinigen. Ebenso können die Blasen durch Instabilitäten oder Wechselwirkungen in Fragmente zerfallen. Die Periode des akustischen Feldes ($\sim 50 \mu\text{s}$) bestimmt die Volumenschwingung der Blasendynamik, aber im Kollaps treten noch viel kürzere Skalen in Erscheinung: Kompression über etwa 1 μs , chemische Reaktionen innerhalb einiger ns, und die Dauer der Sonolumineszenz, die als kurzer Blitz abgestrahlt wird, liegt sogar nur bei einigen hundert ps [7].

Man erkennt schnell, dass sich eine numerische Modellierung der akustischen Kavitation auf wenige Größenordnungen beschränken muss, wobei dann geeignete Näherungen oder Vernachlässigungen Eingang finden können. Zudem gibt es eine ganze Reihe von Teilaspekten und Einflussfaktoren, die das Problem komplex gestalten. Eine Übersicht potenziell relevanter Größen und Phänomene für ein numerisches Modell wird in Abbildung 2 dargestellt. Im Folgenden seien nun exemplarisch einige Simulati-

onen von Kavitationsvorgängen gezeigt, die sich auf verschiedene Aspekte beziehen und die mit teilweise unterschiedlichen Modellen sowie teilweise auf verschiedenen Skalen arbeiten.

Schallfeldmodellierung

Da wir vom Schallfeld als erzeugende und anregende Größe der Kavitation ausgehen, ist es naheliegend, sich bei großskaligen Analysen einen Überblick über das Schallfeld in der vorliegenden Geometrie zu verschaffen. Hinreichend großer (negativer) Schalldruck sollte Blasen nucleation bewirken. Hohe Wechsel-druckamplituden führen zu heftigen Blasen-schwingungen und Implosionen mit den entsprechenden Kavitationswirkungen. Im einfachsten Fall vernachlässigt man in einer Schallfeldberechnung den Einfluss einer Gasphase (Blasen) zunächst völlig und schließt a posteriori über die sich ergebenden Wechsel-druckamplituden in reiner Flüssigkeit auf die räumliche Verteilung von Kavitation. Abbildung 3 zeigt ein Beispiel aus [9], wobei in einem Reaktor die lineare ungedämpfte Helmholtz-Gleichung für den komplexwertigen Druck P im Frequenzbereich

$$\nabla^2 P + k^2 P = 0, \quad k = \frac{\omega}{c_l}, \quad \omega = 2\pi f$$

mit entsprechenden Randbedingungen und Geometrievierungen (Abb. 3a) bei der Anregungsfrequenz von $f = 580$ kHz für Salzwasser gelöst wurde. Es bezeichnen hier k die Wellenzahl, c_l die Schallgeschwindigkeit der Flüssigkeit und ω die Kreisfrequenz. Bereiche relativ hoher Druckamplitude (rot/blau in Abb. 3b) werden mit relativ „aktiven“ Kavitationsgebieten identifiziert, ohne allerdings eine scharfe Schwelle für den Druck gegenüber geringen Amplituden (grüne Bereiche) zu verwenden. Als Vergleich mit experimentellen Beobachtungen wird die Sonochemilumineszenz von Luminol (Abb. 3c) herangezogen, wobei sich hierbei die „Aktivität“ der Kavitation auf die chemische Produktion von Hydroxyl-Radikal-Molekülen ($\text{OH}\cdot$) bezieht: Letztere oxidieren das Luminol-Molekül zu einem angeregten Zustand, der das blaue Licht auf den Fotos aussendet. Die Korrelation zwischen experimenteller und numerischer Bestimmung der Kavitationsmuster fällt zufriedenstellend aus, solange man sich, z. B. wie in der gezeigten Arbeit, im Wesentlichen für die Aktivität in der Nähe der eingetauchten Platte bei verschiedenen Kippwinkeln interessiert, die recht gut reproduziert werden kann. Derartige Berechnungen erfordern mit kommerziellen FEM-Solvern nur geringen Aufwand, sind schnell und lassen daher das rasche Testen vieler Geometrien oder Konfigurationen zu. Sie liefern aber auch nur grobe Aussagen, die mit Experimenten abgeglichen werden sollten. Denn es zeigt sich, dass oft der Einfluss

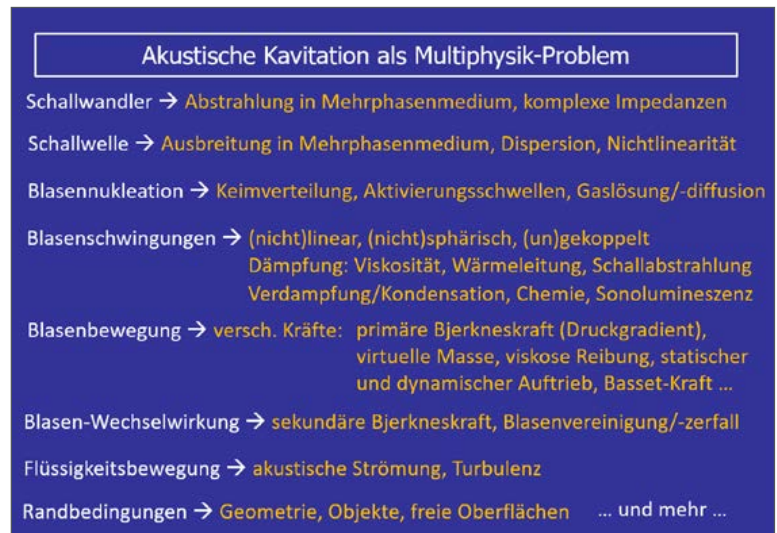
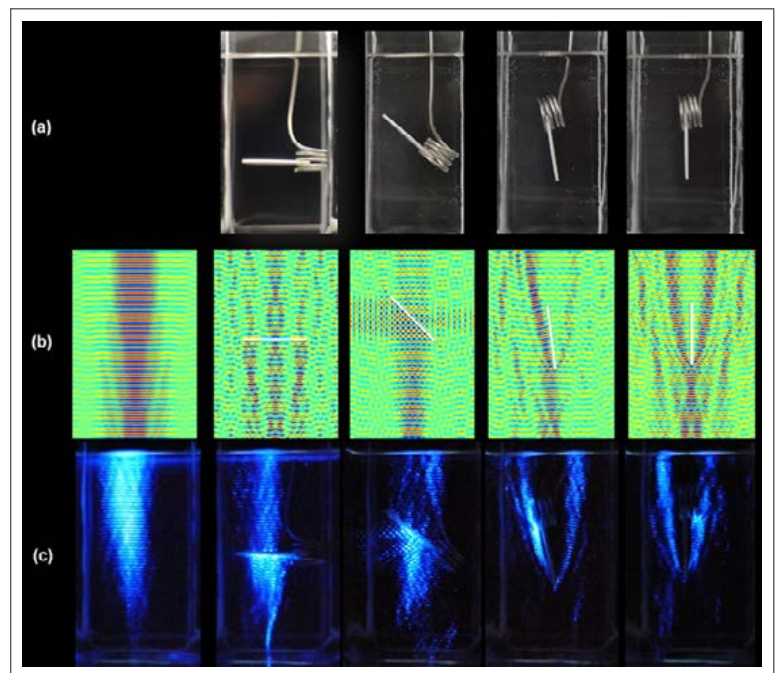


Abb. 2: Eine ganze Reihe von Phänomenen und Aspekten findet potenziell Eingang in eine Modellierung akustischer Kavitation, je nach beabsichtigter oder möglicher Berücksichtigung.

einer Gasphase eine nicht zu vernachlässigende Rolle spielt. Abhängig von Schallfrequenz, Schallintensität, Blasendichte und Blasengrößen kommt es bei der Schallausbreitung zu Streuung, Dispersion und Dissipation. Insbesondere durch die erhöhte Kompressibilität können auch schon sehr geringe Volumenanteile von Gas die Schallgeschwindigkeit in einer blasenhaltigen Flüssigkeit signifikant herabsetzen (vgl. z. B. den sog. Cappuccino-Effekt [10]). Ein verbesser-

Abb. 3: (a) Verschieden gekippte Platte in einem Sonoreaktor (Schallwandler 580 kHz unten). (b) Simulationen des Schalldrucks für dieselben Geometrien mit Comsol Multiphysics® [8]. (c) Luminol-Emissionen (0,1 mM, pH 11, Belichtungszeit 30 s). Bild aus [9], Copyright (2017), with permission from Elsevier.



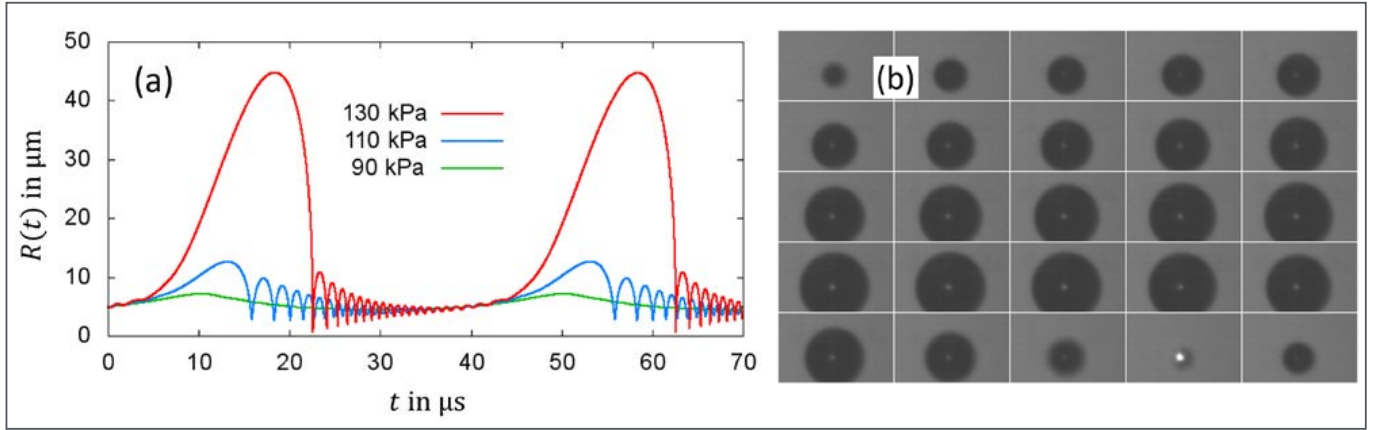


Abb. 4: Einsetzen der Kollapsschwingung bei stärkerer Anregung. (a): Mit dem Keller-Miksis-Modell berechnete Radius-Zeit-Kurven einer Blase mit 5 μm Ruheradius unter 20 kHz Anregung; die Schalldruckamplituden sind angegeben. (b): Hochgeschwindigkeitsaufnahme einer mit heftigem Kollaps oszillierenden Blase in Phosphorsäure (Bildfolge zeilenweise von links oben nach rechts unten, Bildabstände 1.9 μs). Beim Kollaps auf dem vorletzten Bild entsteht ein Lichtblitz; der Minimalradius wird nicht aufgelöst. Bild: C. Cairós, vgl. [12].

ter Modellansatz berücksichtigt daher vorhandene (nichtkondensierbare) Gasblasen in der Flüssigkeit mit gewissem (Ruhe)-Radius R_0 und zeitabhängigem Radius $R=R(t)$. Mit der Blasenanzahldichte n und dem ebenfalls zeitabhängigen Gas-Volumenanteil $\beta(t) = n \frac{4\pi}{3} R^3(t)$ sowie der Flüssigkeitsdichte ρ_l bekommt man nach Caflisch [11] eine Wellen-Gleichung mit Quellterm für den Druck p im Zeitbereich:

$$\nabla^2 p = \frac{1}{c_l^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \frac{1}{\rho_l} \frac{\partial^2 \beta}{\partial t^2}$$

Diese lässt sich wieder in eine Helmholtz-Gleichung umschreiben, wenn man den Schall nur bei einer Frequenz betrachtet, nun allerdings mit komplexer Wellenzahl k . Nimmt man lineare radiale Schwingungen der Blasen um R_0 an, so führt das auf die häufig verwendete Dispersionsrelation

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c_l^2} + \frac{4\pi R_0 \omega^2 n}{\omega_0^2 - \omega^2 + 2ib\omega}$$

Hierbei bezeichnen ω_0 die Eigenfrequenz der Blasen und b einen geeigneten Dämpfungsfaktor. Bei höheren Schallintensitäten und insbesondere nach Einsetzen der Kavitation sind lineare Blasenschwingungen allerdings oft unrealistisch, da die oben erwähnte nichtlineare Dynamik mit heftigem Kollaps auftritt; siehe Abbildung 4.

Berücksichtigt man dies, kann man einen verbesserten Dispersionsterm herleiten, indem man für den Imaginärteil der quadrierten Wellenzahl realistische Dämpfungsterme benutzt [13]:

$$\text{Re}(k^2) = \frac{\omega^2}{c_l^2} + \frac{4\pi R_0 \omega^2 n}{\omega_0^2 - \omega^2}, \text{Im}(k^2) = -2\rho_l \omega n \frac{\Pi_{th} + \Pi_v}{|P|^2}$$

Die Koeffizienten Π_{th} und Π_v beschreiben die thermische und viskose Dämpfung der Blasenoszillation und werden über entsprechende Integrale unter

Berücksichtigung der nichtlinearen Schwingung berechnet. In Abbildung 5a sind diese Dämpfungskoeffizienten in normierter Darstellung gegen die mit dem statischen Druck p_∞ normierte Anregungsamplitude aufgetragen. Man erkennt einen steilen Anstieg um mehrere Größenordnungen an der sog. Blakeschwelle, die den Übergang zur Kollapsschwingung der Blasen markiert. Dort ist $|P|$ etwas größer als p_∞ und der Schall(unter)druck reicht aus, die Oberflächenspannung kleiner Keimblasen zu überwinden – es kommt zu einer deutlichen Blasenexpansion mit anschließendem heftigen Kollaps (vgl. Abbildung 4a), der für die stark vergrößerte Dissipation verantwortlich ist. Abbildung 5b zeigt beispielhaft für einen eindimensionalen Resonator stehende Wellenfelder, die sich mit der erweiterten Dispersionsrelation bei verschieden starker Anregung ergeben. Wichtigster Effekt ist eine Sättigung der Schalldruckamplitude, die sich durch den starken Anstieg der Dissipation beim Einsetzen der Kollapsschwingungen erklären lässt. Dies beobachtet man auch in Experimenten. Abbildung 5c zeigt schließlich den mit dem erweiterten Modell berechneten Amplitudenverlauf in Relation zu den Ansätzen mit linearen Blasenschwingungen bzw. ganz ohne Blasen. Für beide findet man unrealistisch hohe Druckwerte.

Akustische Kräfte und Partikelmodelle

Mit dem oben skizzierten Modell nach Louisnard [13] kann man bereits recht gut Schallfeldverteilungen unter Kavitationsbedingungen berechnen. Blasen dichten und -größen gehen dabei zunächst als im Raum statisch vorgegebene Größen ein. In einem weiteren Schritt kann man nun versuchen, auch die Variabilität und insbesondere die Bewegung der Blasen einzubeziehen. Während die Blasenstrukturen in einem kavitierenden Reinigungsbad oder unter einem

Ultraschallhorn oft durchaus stationär erscheinen, sind es die einzelnen Blasen normalerweise nicht. Auf mikroskopischer Skala herrscht enorme Bewegung und Variabilität vor, und Ursache sind in erster Linie akustische Kräfte, die sog. Bjerkneskräfte [2]. Ganz analog zur statischen Auftriebskraft in einem hydrostatischen Schweredruckgradienten bewirken auch die oszillierenden Druckgradienten des Schallfeldes $p(t)$ instantane Kräfte in der Form $\vec{F}(t) = \nabla p(t) V_b(t)$ auf Blasen mit Volumen V_b . Die Blasengrößen werden hierbei als klein gegenüber der Wellenlänge des Schalls angenommen. Das Zeitmittel der Kräfte verschwindet allerdings i. d. R. auch bei harmonischem Druckverlauf nicht, weil die Volumenoszillationen der Blasen mit dem Druck (und seinem Gradienten) korrelieren. Man definiert daher die primäre Bjerkneskraft als $\vec{F}_{B1} = \langle \nabla p(t) V_b(t) \rangle_T$ mit $\langle \cdot \rangle_T$ als Ausdruck für die Mittelung über eine Schwingungsperiode. Es zeigt sich, dass $\vec{F}_{B1}$ in vielen Situationen dominant gegenüber allen anderen auf die Blasen wirkenden Kräften ist und so z. B. ihre rasche Translationsbewegung im Schallfeld antreibt. Auch wird die Strukturbildung in erster Linie durch die primäre Bjerkneskraft bestimmt. Erst wenn sich zwei Blasen hinreichend annähern, kommt es zu deren Wechselwirkung aufgrund der sekundären Bjerkneskraft $\vec{F}_{B2}$. Diese beruht auf dem von der Nachbarblase gestreuten bzw. abgestrahlten Schallfeld, in dessen Gradienten wiederum momentane „Auftriebskräfte“ entstehen. Für das Zeitmittel der Kraft zwischen zwei Blasen der Volumina V_{b1} und V_{b2} findet man unter gewissen Näherungen [15] den Ausdruck $\vec{F}_{B2} = -\frac{\rho}{4\pi d^2} \langle \dot{V}_{b1}(t) \dot{V}_{b2}(t) \rangle_T$; ein negatives Vorzeichen zeigt die gegenseitige Anziehung der Blasen an. Neben den Zeitableitungen $\dot{V}_{b1}$ und $\dot{V}_{b2}$ der Volumina beider wechselwirkenden Blasen geht in die sekundäre Bjerkneskraft der Blasenabstand d in quadratischer Weise reziprok ein, welches ein interessantes Analogon zur Gravitation und zur elektrostatischen Wechselwirkung ist. Durch die starke Abnahme der Kraft mit der Entfernung ist die Wechselwirkung zwischen schwingenden Blasen bei größeren Abständen nur sehr klein und dann oft vernachlässigbar. Eine Modellierung der Blasenbewegung im Schallfeld kann nun auf Basis eines „Lagrange“-Ansatzes erfolgen, der einzelne Blasen im Raum verfolgt und als, gemäß den lokal wirkenden Kräften, bewegte „Partikel“ behandelt. Neben den Bjerkneskräften muss man mindestens noch eine der Bewegung entgegengesetzte viskose Reibungskraft und die virtuellen Massen der Blasen berücksichtigen, alle anderen Kräfte (Gravitation, lokale Strömung u. a.) können oft zunächst vernachlässigt werden. Für eine Berechnung ist nun zu beachten, dass die Bjerkneskräfte vom lokalen Schalldruck und Schalldruckgradienten abhängen. Außerdem kommen noch Regeln für Blasenent-

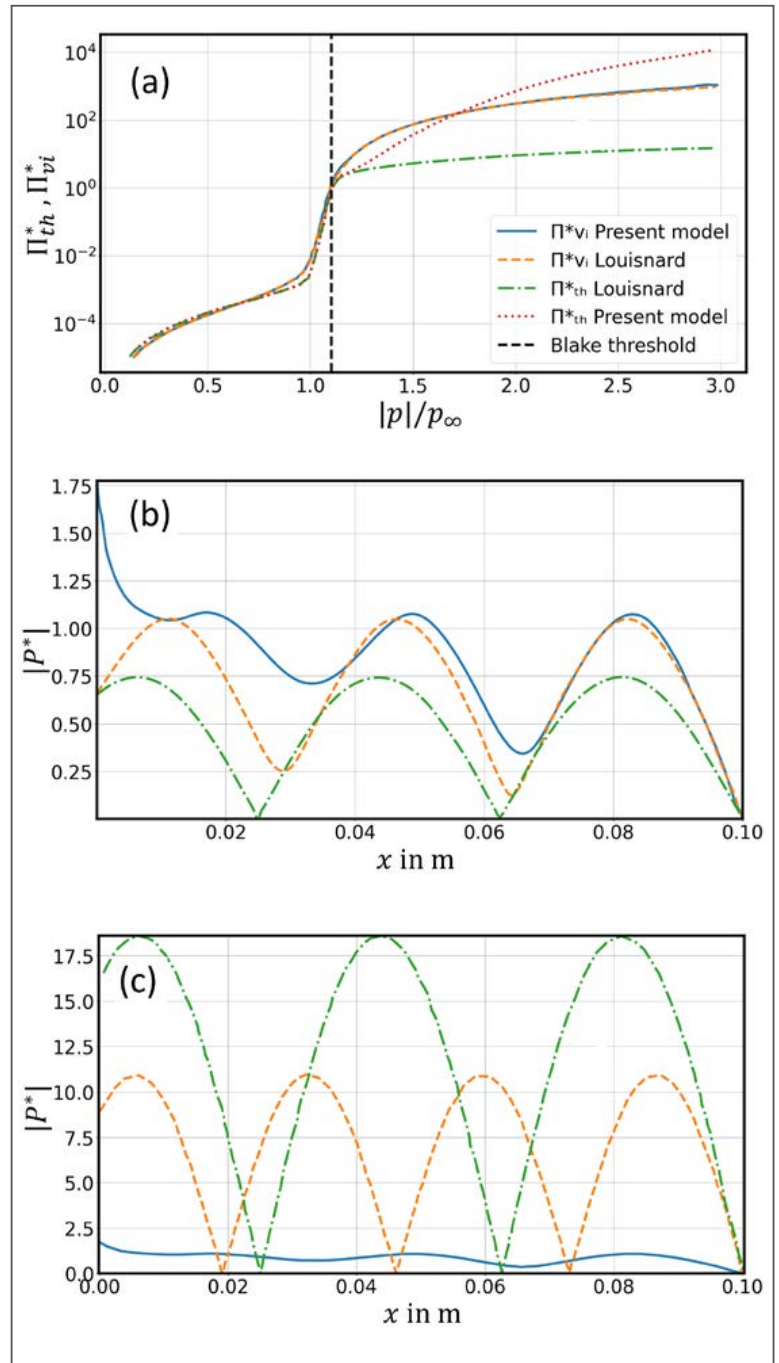


Abb. 5: Nichtlineare Dämpfungsterme und Schalldruckamplituden unter verschiedenen Modellbedingungen.

(a) Verlauf der normierten Dämpfungskoeffizienten Π_{th}^* und Π_{vi}^* in Abhängigkeit zum normierten Anregungsdruck und im Vergleich zu den Werten aus [13]; Bildquelle [14].

(b) Normierte Stehwellenamplitude bei verschieden starker Anregung eines eindimensionalen Resonators unter Anwendung der nichtlinearen Dämpfungsterme. Bei steigender Anregung (grün – orange – blau) sättigt die Druckamplitude (blau).

(c) Bei Anwendung des linearen Dämpfungsmodells (orange) oder in reiner Flüssigkeit ohne Blasen (grün) ergeben sich zu große Druckamplituden im Resonator.

Die in [14] berechnete Kurve (blau) wird in den Grafiken (b) und (c) mit Daten aus [13] verglichen.

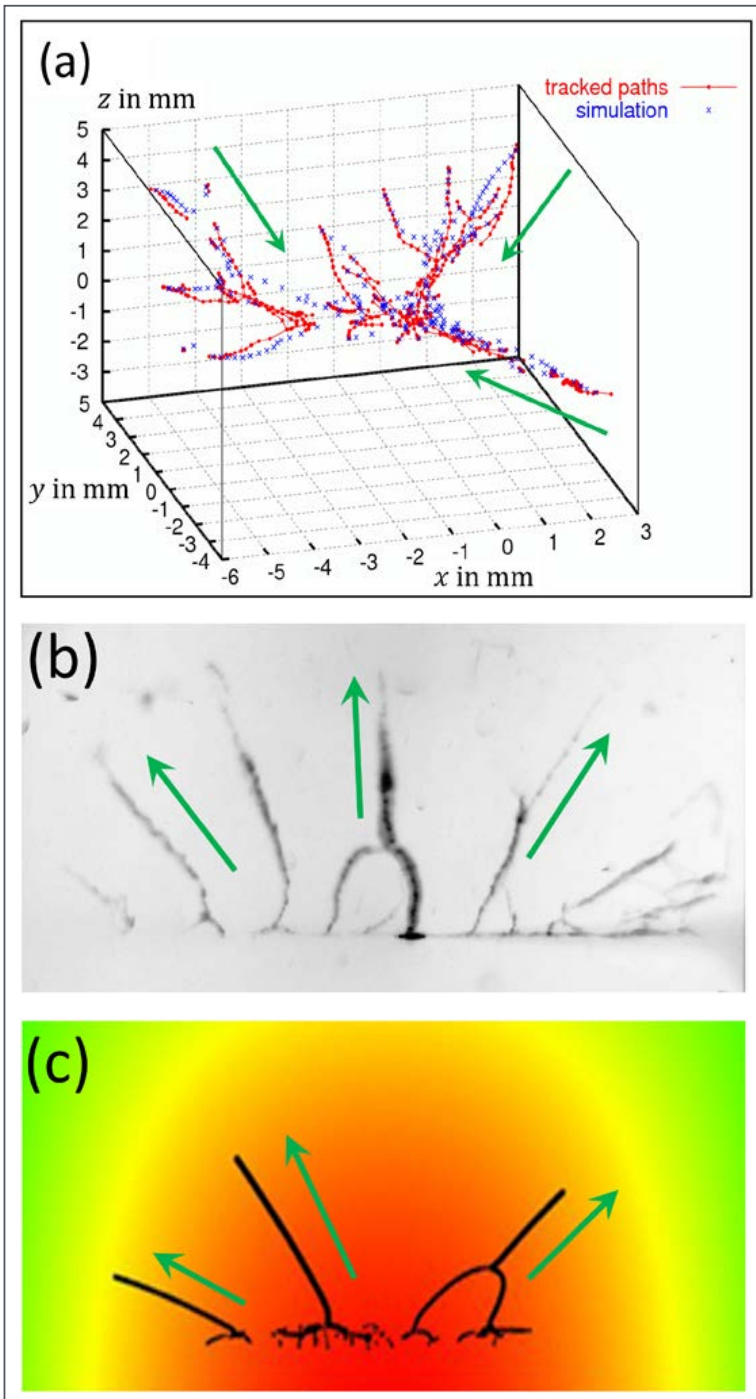


Abb. 6: Blasenwege unter Einfluss primärer und sekundärer Bjerkneskräfte, Bewegungsrichtung der Blasen durch grüne Pfeile angezeigt.

(a) Gemessene dreidimensionale Blasentrajektorien um einen Schalldruckbauch bei 25 kHz in Wasser (rot) und Reproduktion durch simulierte Blasenwege; adaptiert von [17], Copyright (2004), with permission from Elsevier. Der Druckbauch im Zentrum wirkt auf die Blasen anziehend, die Bewegungen finden nach innen statt.

(b) Gemessene und (c) simulierte Blasenwege um einen Druckbauch bei 25 kHz in 85%iger Phosphorsäure. Der Druckbauch (rot-orange) wirkt hier abstoßend, die Blasenbewegungen finden in Richtung niedrigerer Schalldruckamplitude statt. Bildbreite jeweils 5 cm; adaptiert von [18].

stehung (Nukleation) und Blasenkollision hinzu. Im einfachsten Fall werden eine unveränderliche Schalldruckverteilung und bestimmte, aus Experimenten motivierte Anfangspositionen und -größen vorgegeben. Abbildung 6 zeigt zwei Beispiele für simulierte Blasenbewegungen auf Basis von Partikelmodellierungen im Vergleich zu experimentellen Daten. In beiden Fällen handelt es sich um Blasen in der Nähe eines Schalldruckmaximums in einer stehenden Welle, die Abmessungen liegen also etwa im akustischen Wellenlängenbereich. Der Unterschied zwischen den Experimenten liegt in der Schalldruckamplitude des Druckbauchs: Bei geringerer Amplitude wie in Abbildung 6a werden die Blasen angezogen, laufen also von außen nach innen. Bei hinreichend großer Amplitude dagegen, wie sie in Abbildung 6b vorliegt, wirkt der Druckbauch abstoßend, und die Blasen laufen von innen nach außen. Dieser Vorzeichenwechsel der primären Bjerkneskraft bei großen Druckamplituden [16] ist wichtige Grundlage zum Verständnis der Blasenstrukturen. Er kann u. a. zu einer effektiven Begrenzung der maximalen Druckanregung von Blasen in einer Stehwelle führen, da diese den Druckbauch verlassen und sich irgendwo zwischen Bauch und Knoten einfinden. Neben den gerichteten Blasenbewegungen erkennt man in Abbildung 6 außerdem charakteristische Y-Figuren, die bei der Annäherung benachbarter Blasen und schließlich ihrer Vereinigung auftreten. Dadurch entsteht eine verästelte Filament-Struktur der Blasenpfade, auch Streamer oder „akustische Lichtenbergfigur“ genannt. Diese Muster werden von den Partikelmodellierungen gut reproduziert, so dass man von einem hinreichenden Verständnis dieses „mesoskopischen“ Blasenverhaltens ausgehen kann. Essentielle Näherungen, die in den vorliegenden Simulationen gemacht wurden, sind allerdings als kugelförmig angenommene Blasen und eine fehlende Rückwirkung der Blasenverteilung auf das Schallfeld. Der letzte Punkt wird in der im Folgenden beschriebenen Erweiterung mit einbezogen.

Euler-Lagrange-Simulationen

In vielen Anwendungen sind nicht nur die direkten Wirkungen der Kavitationsblasen und ihrer Implosionen in Form von Scher- und Stoßwellen oder chemischen Reaktionen von Interesse, sondern auch indirekte Effekte wie verstärkte Flüssigkeitsströmung, Mikroturbulenz und die damit verbundene Erhöhung von Massen- und Wärmetransport. Ein Beispiel ist das Recycling von wertvollen Metallen, wobei deren Zersetzung in Säuren durch akustische Kavitation beschleunigt werden kann. Abbildung 7 illustriert dies an einem Testaufbau [19; 20; 14]. Hier kommt ein Ultraschallhorn (Sonotrode) als Schallquelle zum Einsatz. Neben den bekannten Ultraschallbädern,

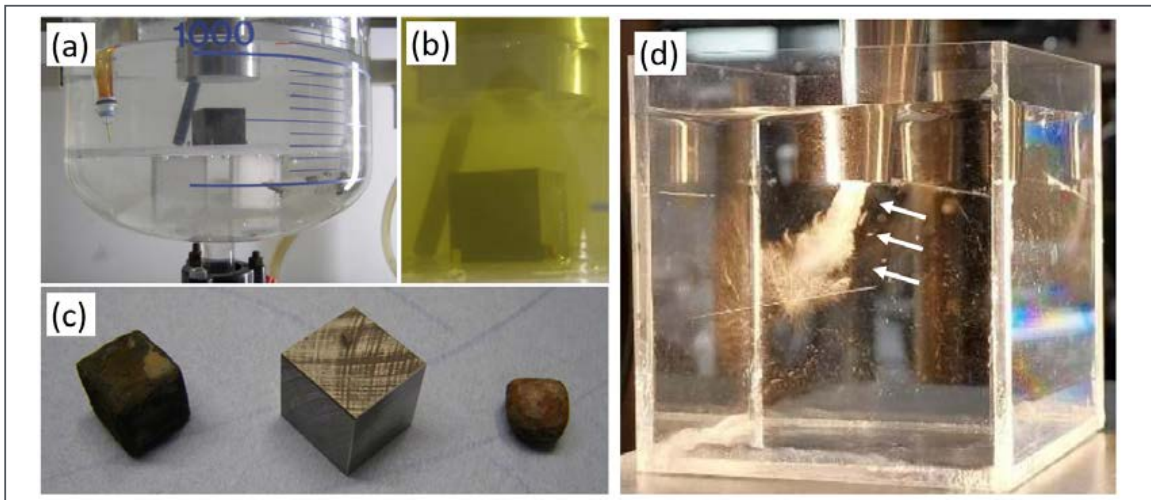


Abb. 7: (a) Testaufbau zur Kavitationswirkung auf Metallblöcke in Säuren (BFI, Sonotrode von oben mit Durchmesser 4 cm, 20 kHz).

(b) Metallcarbid-Würfel in Schwefelsäure unter Kavitationswirkung.

(c) Würfel zu Beginn (Mitte, Kantenlänge 1 cm) und nach 15 h Säurebad ohne (links) und mit Kavitation (rechts) [20].

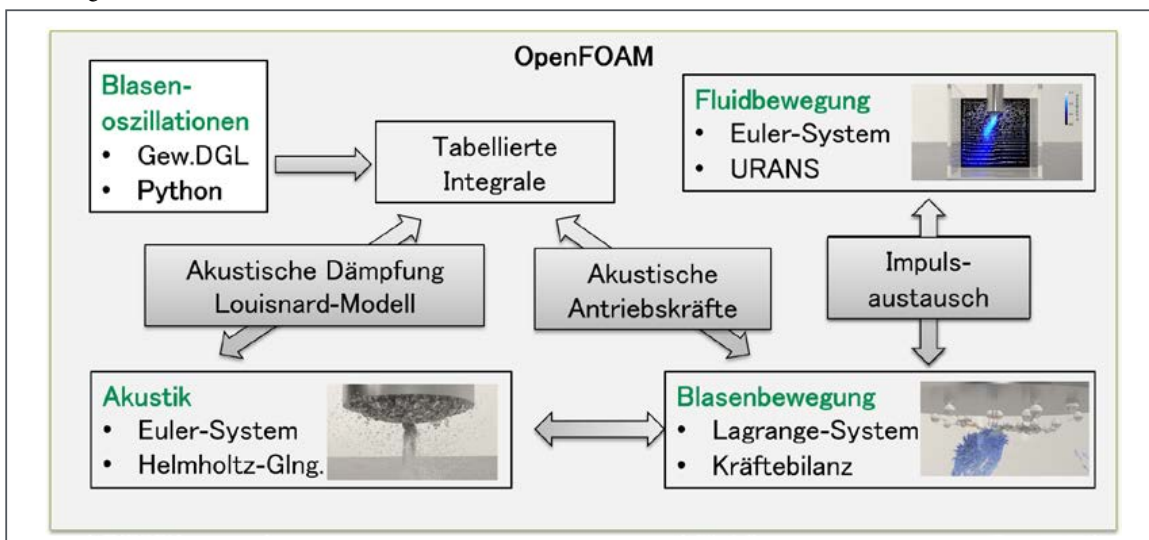
(d) Typische Kavitation an einem Exponentialhorn bei 20 kHz in Wasser, wie sie sich in Streulicht für das Auge darstellt. Die Pfeile deuten auf den mit Blasen bevölkerten Flüssigkeitsstrahl (Jet), der von der Hornspitze (Durchmesser 1 cm) ausgeht. Bild Lesnik/Aghelmaleki, aus [14].

die i. d. R. durch Wandschwinger großflächig angeregt werden, sind Sonotroden eine zweite verbreitete Methode, intensive Kavitation zu erzeugen. Bei ihnen wird der Ultraschall von einer relativ kleinen Fläche am stark oszillierenden Hornende abgestrahlt. Bei höheren Intensitäten wird Kavitation unter der Sonotroden spitze und auch ein intensiver Flüssigkeitsstrahl von der Sonotrode weg beobachtet. Dieser Jet mit Strömungsgeschwindigkeiten der Größenordnung m/s führt zu guter Durchmischung und entspricht gewissermaßen kontaktlosem Rühren. Man muss ihn

allerdings von einer „reinen“ akustischen Strömung („acoustic streaming“), die auf Absorption und Nichtlinearität der Schallausbreitung in reiner Flüssigkeit beruht, unterscheiden. Denn hier spielen die Kavitationsblasen eine entscheidende Rolle, ohne die das acoustic streaming ein bis zwei Größenordnungen schwächer ausfällt [21].

Um nun sowohl Flüssigkeitsströmung als auch Schallfeld und Blasenbewegung in einer Simulation zu erfassen, kann man z. B. ein sog. Euler-Lagrange-Modell einsetzen, wie es in Abbildung 8 dargestellt ist und in

Abb. 8: Überblick zum Euler-Lagrange-Modell (nach [14]). Das Lösen der gewöhnlichen Differentialgleichungen („gew. DGL“) der Blasenoszillationen für die Dämpfungskoeffizienten geschieht in einer Python-Umgebung außerhalb von OpenFOAM. „URANS“ bezeichnet die „Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes“-Modellierung turbulenter Strömungen.



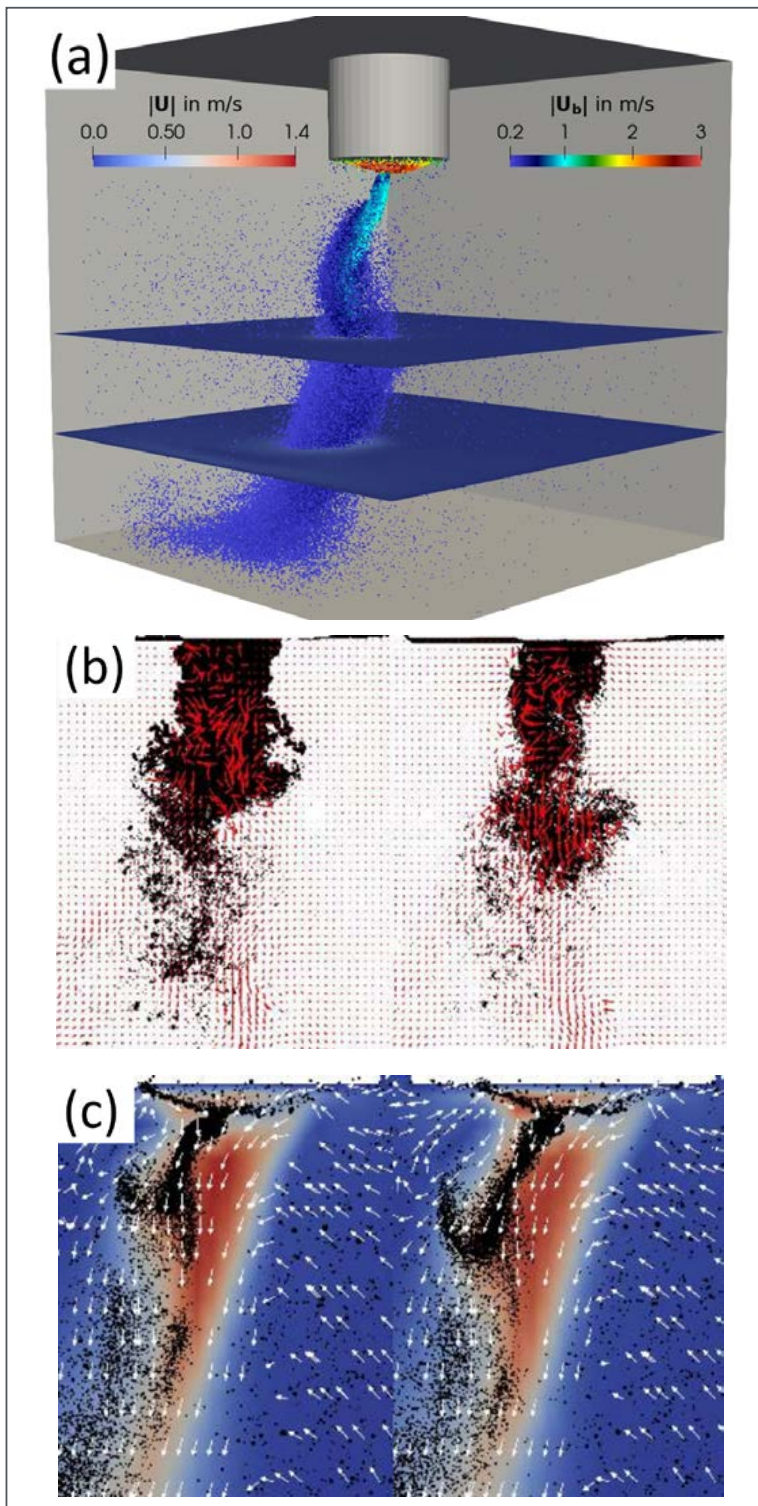


Abb. 9: Simulationsergebnisse des Euler-Lagrange-Modells für Kavitation an einer Sonotrode von 1 cm Durchmesser bei 20 kHz.

(a) 3D-Darstellung der Blasen und ihrer Geschwindigkeiten (rechte Farbskala U_b). Besonders hohe Geschwindigkeiten treten direkt vor der Spitze auf, wodurch der Flüssigkeitsjet nach unten angetrieben wird [14].

(b) Sequenz aus experimentellen Messungen von Blasen (schwarz) und Strömungsgeschwindigkeiten (rote Pfeile) in einem 2D-Schnitt; aus [24], Bildabstand 2 ms.

(c) Bildfolge aus der Simulation mit gleichen Parametern und Bildabständen; Blasen schwarz und Strömungsgeschwindigkeit durch Pfeile dargestellt sowie farbcodiert, siehe linke Farbskala in (a) [23].

[14] vorgestellt wurde. Hierbei werden Schallfeld und Strömungsfeld getrennt und auf verschiedenen Berechnungsgittern im „Euler“-System, d. h. dem raumfesten Laborsystem, dargestellt. Diese Trennung bietet sich an, wenn z. B. Strömungsdrücke und -geschwindigkeiten klein gegenüber Schalldrücken und der Schallgeschwindigkeit sind und insbesondere keine Kavitation durch die Strömung selbst hervorgerufen wird. Hier wird die Strömung im Zeitbereich auf der Basis der instationären Navier-Stokes-Gleichungen modelliert und berechnet, während das Schallfeld für eine vorgegebene und dominierende Frequenz im Frequenzbereich, auf der Basis der oben beschriebenen modifizierten Helmholtz-Gleichung, berechnet wird. Kavitationsblasen werden weiterhin als kugelförmig angenommen und als „Lagrange“-Partikel, also im mit der jeweiligen Blase mitbewegten Koordinatensystem betrachtet. Sie werden nach gewissen Regeln erzeugt und vernichtet. Ihre Bewegung wird angetrieben durch die primären Bjerkneskräfte und abgebremst durch viskose Reibung. Die genauen Kräfte auf eine Blase ergeben sich aus dem aktuellem Ruheradius sowie der Schalldruckamplitude, dem Schalldruckgradienten und der Flüssigkeitsströmung am Ort der Blase. Um dabei redundante Berechnungen zu vermeiden, werden oft benötigte Koeffizienten vorher ermittelt und in Tabellen abgelegt. Aus der Blasenverteilung kann nun der Gasphasenanteil in einer Rechenzelle ermittelt werden, der Eingang in die Schallfeldberechnung nach Louisnard [13] findet. Neben dieser Rückwirkung auf das Schallfeld koppelt die Kavitation nun außerdem an das Strömungsfeld, indem pro Rechenzelle der durch die Relativbewegung der Blasen übertragene Impuls auf die Flüssigkeit berücksichtigt wird. Durch die gegenseitige Abhängigkeit von Schallfeld und Blasen sowie von Strömungsfeld und Blasen ergibt sich ein relativ komplexes numerisches Modell, das in OpenFOAM [22] und mit Tabellenberechnung in Python realisiert wurde. Die Anwendung auf die Sonotrodegeometrie aus Abbildung 7d reproduziert sehr gut den visuellen Eindruck und auch die gemessenen Blasen- und Strömungsgeschwindigkeiten aus Experimenten, wie in Abbildung 9 dargestellt. Genauere Betrachtung zeigt u. a., dass die unter dem Horn induzierte Strömung im Wesentlichen durch schnelle Blasen direkt vor der Hornspitze erzeugt wird. Abstoßende primäre Bjerkneskräfte treiben die Blasen, die am Schallwandler entstehen, aus der Zone hohen Schalldrucks an der Spitze zunächst heraus. Hierdurch wird die Flüssigkeit nach unten beschleunigt. Die Trägheit der Flüssigkeitsströmung bewirkt dann, dass der Jet noch viel weiter nach unten strömt, als die Abstoßung der Blasen reicht. Dies kann auch die zunächst erstaunliche experimentelle Beobachtung erklären, dass in einem Abstand von

der Hornspitze größere Blasen im Flüssigkeitsstrom ungefähr ortsfest bleiben oder gar nach oben laufen: Die primäre Bjerkneskraft ändert dort ihr Vorzeichen, zeigt nach oben und kompensiert die von der Strömung ausgeübte Reibungskraft nach unten.

Die vorgestellte Euler-Lagrange-Simulation kann bereits recht realistisch Blasenverteilungen und Strömungsfelder in intensiven Ultraschallfeldern berechnen. Erweiterungen betreffen z. B. eine Einbeziehung der sekundären Bjerkneskräfte, die hier bisher noch vernachlässigt sind, sowie verbesserte Methoden der Blasen nukleation und -vernichtung (Auflösung). Letztere Vorgänge sind allerdings auch experimentell noch nicht hinreichend gut verstanden und müssen daher weiter untersucht werden. Sie koppeln vermutlich sensitiv an Gasgehalt und Diffusionsvorgänge zwischen Flüssigkeit und Blasen. Es ist aber durchaus möglich, in Zukunft auch Diffusion oder den Wärmefluss in das Modell mit einzubeziehen und dadurch noch mehr Aussagen aus den Simulationen zu gewinnen, die sonst nur schwer messtechnisch zugänglich sind.

Multiphasensimulationen

Abschließend sollen Simulationen auf der Größenskala von einzelnen Blasen vorgestellt werden.

Hierbei werden akustisches Feld und globales Strömungsfeld zunächst außer Acht gelassen und nur die Kollapsdynamik einer Blase betrachtet. Im Unterschied zu den bisher gezeigten Modellen, die auf größeren Skalen arbeiten, ist aber explizit die nicht-sphärische Verformung der Blase von Interesse, und zwar im Falle einer benachbarten festen Grenzfläche. Der Fokus liegt auf den Details, wie Kavitationsblasen härteste Materialien erodieren können, also z. B. zur Zersetzung der oben gezeigten Metallwürfel beitragen. Denn neben dem erhöhten Strömungstransport der Säure spielt auch die mechanische Wirkung der Blasenimplosionen direkt am Metall eine große Rolle. Um sich dem Erosionsphänomen zu nähern, setzt man u. a. Experimente mit gezielt erzeugten Einzelblasen an Objekten ein. Die Blasen werden durch fokussierte Laserpulse kontrolliert generiert und mit Hochgeschwindigkeitskameras beobachtet. Da viele Details allerdings messtechnisch kaum oder gar nicht zu erfassen sind, wird die teilweise sehr komplexe Dynamik mithilfe numerischer Mehrphasensimulationen genauer untersucht. Weiterhin kann man sonst unerreichbare Parameterbereiche numerisch zugänglich machen.

Die Berechnung basiert hier wieder auf der Navier-Stokes-Gleichung und der Finite-Volumen-Methode.



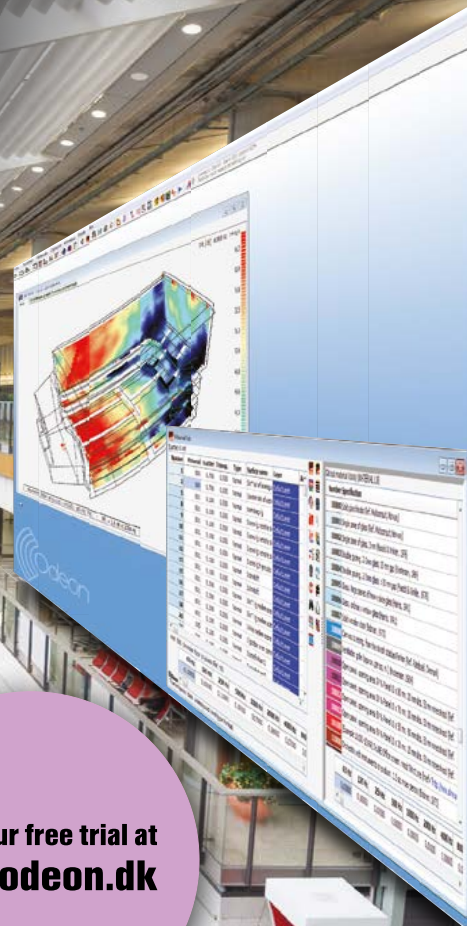
Make better spaces with the complete software solution for room acoustics

Elegant and user friendly interface

Fast and reliable simulations and measurements

Available as: **B** Basics, **I** Industrial, **A** Auditorium & **C** Combined

Start your free trial at
www.odeon.dk



Für die Bewegung der Phasengrenzfläche zwischen Gas und Flüssigkeit wird die „Volume of Fluid“ (VOF)-Methode verwendet, bei der für den Volumenanteil einer Phase innerhalb einer Berechnungszelle eine zusätzliche Advektionsgleichung gelöst wird.

Abbildung 10 zeigt Ergebnisse der Untersuchung eines für die Erosion kritischen Falls, nämlich den Kollaps einer direkt an der festen Oberfläche befindlichen Blase von ungefähr Halbkugelgestalt. Da die Blase vor ihrer Implosion zunächst aus dem viel kleineren Plasma im Laserfokus expandiert ist, besitzt sie eine charakteristische Glockenform, die letztlich zur Bildung eines extrem schnellen, dünnen Flüssigkeitsstrahles durch die Blase hin zur Oberfläche führt (ein sog. „schneller Jet“). Zusammen mit den beim Zusammensturz der Blase am Objekt entstehenden hohen Drücken und Stoßwellen kommt für die Erosionswirkung auch der Aufprall des schnellen Jets in Betracht, der in der Simulation Geschwindigkeiten in der Größenordnung von 1000 m/s erreicht. Bisher ging man davon aus, dass die Flüssigkeitsstrahlen kollabierender Blasen an Grenzflächen mit Geschwin-

digkeiten im Bereich von etwa 100 m/s strömen. Dies ist auch bei größeren Abständen der Blase zur Wand der Fall, kann aber die Erosion nicht befriedigend erklären. Der Mechanismus der „schnellen“ Jetbildung wurde übrigens zuerst in numerischen Untersuchungen gefunden [25] und dann im Labor verifiziert [26; 27; 28], da er sich auf so kleinen und schnellen Skalen abspielt, dass er bei direkten Beobachtungen bisher nicht aufgefallen war. Eine Ausnahme bildet ein Experiment aus den 60er Jahren mit Blasen in Unterdruckatmosphäre [29], wobei das Phänomen aber nicht weiter analysiert oder erklärt werden konnte. Dies zeigt erneut den Wert geeigneter Simulationen von Kavitationsblasen, wodurch heute auch die mikroskopischen und extrem schnellen Vorgänge zugänglich werden. Die komplexe Kollapsdynamik einzelner Blasen an Objekten und die Rolle des schnellen Jets bei Oberflächenerosion sind weiterhin hochaktueller Forschungsgegenstand [30; 31].

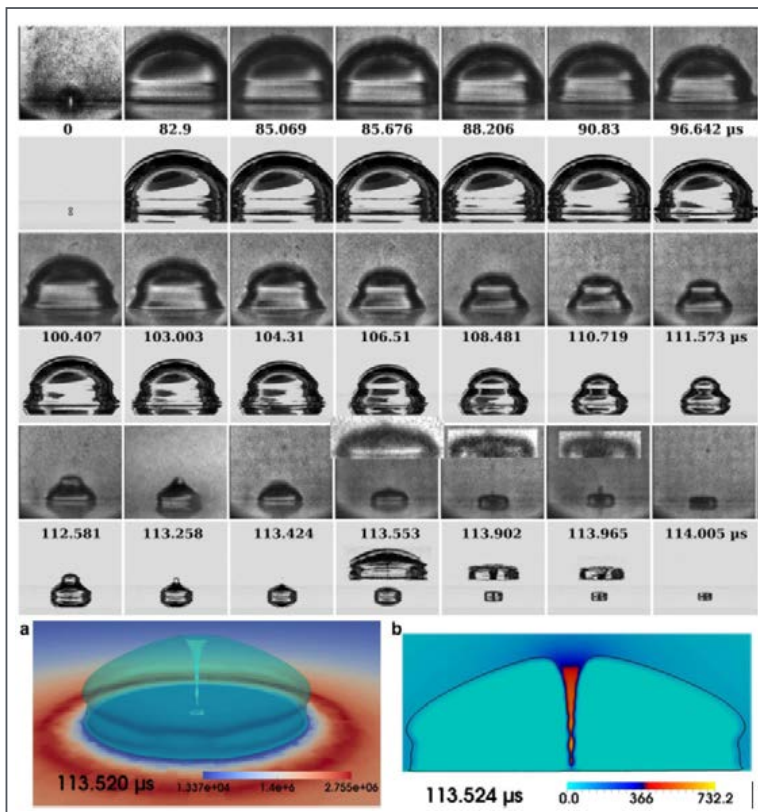
Schlussbemerkungen

In den Beispielen wurde gezeigt, dass sich die Problemstellungen in der akustischen Kavitation über einige Größenordnungen in Raum und Zeit erstrecken, so dass man je nach interessierendem Aspekt geeignete numerische Methoden auswählen muss. Dies wird voraussichtlich auch in näherer Zukunft so bleiben, auch wenn die Rechenleistungen weiter steigen. Dennoch werden die Modelle immer ausgefeilter und können inzwischen auch komplexere Zusammenhänge von Schallfeld, Blasendynamik und Flüssigkeitsströmungen erfassen und in annehmbarer Rechenzeit darstellen. Daher haben sich numerische Simulationen von Kavitation neben Experimenten als wichtiges zweites Standbein in der Grundlagenforschung etabliert, und auch zum Design und zur Optimierung von Anwendungen werden sie in zunehmendem Maße eingesetzt. Abschließend möchten wir feststellen, dass die angesprochenen und vorgestellten Methoden nur einen kleinen Ausschnitt zeigen und keinen Anspruch auf Vollständigkeit haben. Viele Ansätze mussten unerwähnt bleiben, so z. B. die eher von den Methoden der hydrodynamischen Kavitation entlehnten Modelle mit „intrinsischer“ Dampfblasennukleation bei Unterschreiten des Dampfdrucks in der Flüssigkeit. Da außerdem die Forschungstätigkeit und die Anzahl der Publikationen im dargestellten Problemfeld stark im Anstieg begriffen ist, wird man aufmerksam die Entwicklungen verfolgen und darf auf weitere Fortschritte gespannt sein.

Danksagung

Die Autoren bedanken sich bei allen Kolleginnen und Kollegen der Arbeitsgruppen und Kooperationen für die tatkräftige Unterstützung. Ebenso danken sie

Abb. 10: Kollaps einer etwa halbkugelförmigen Blase an einer festen Grenzfläche. Oben: Experimentell beobachtete Dynamik (Reihen 1, 3 und 5) zusammen mit simulierter Dynamik (Reihen 2, 4 und 6; Bilder durch ray-tracing mithilfe der numerischen Blasenformen generiert). Die Zahlen geben die Zeit nach Blasenenerzeugung in μs an. In den Bildern rund um die Bildung des schnellen Jets sind Vergrößerungen eingefügt. Unten: 3D-Ansicht und Schnitt durch die simulierte Blase kurz nach Entstehung des schnellen Jets. aus: [27], Springer (2021), Open Access Creative Commons CC BY.



für finanzielle Förderung der dargestellten Arbeiten durch die DFG (ME 1645/5-1/-2, BR 1864/12-1/-2), die EU (Grant Agreement no. 721290 (MSCA-ETN COSMIC)), AiF (IGF-Vorhaben Nr. 18486N) und BFI (VDEh-Betriebsforschungsinstitut GmbH, Düsseldorf).

Literatur

- [1] Young, F. R.: Cavitation. McGraw-Hill, 1989.
- [2] Leighton, T. G.: The Acoustic Bubble. Academic Press, 1997.
- [3] Lauterborn W.; Kurz, T.: Physics of bubble oscillations. Rep. Prog. Phys. 73, pp. 106501, 2010.
- [4] Pflieger, R.; Nikitenko, S. I.; Cairós, C.; Mettin, R.: Characterization of cavitation bubbles and sonoluminescence. Springer, 2019.
- [5] Mettin, R.: Bubble structures in acoustic cavitation. In: Doinikov, A. A. (ed.): Bubble and Particle Dynamics in Acoustic Fields: Modern Trends and Applications, pp. 1–36. Research Signpost, 2005.
- [6] Mörch, K. A.: Cavitation inception from bubble nuclei. Interface Focus 5, pp. 20150006, 2015.
- [7] Gompf, B.; Günther, R.; Nick, G.; Pecha, R.; Eisenmenger, W.: Resolving sonoluminescence pulse width with time-correlated single photon counting. Phys. Rev. Lett. 79, pp. 1405–1408, 1997.
- [8] COMSOL Multiphysics®, www.comsol.com. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
- [9] Kauer, M.; Belova-Magiri, V.; Cairós, C.; Schreier, H. J.; Mettin, R.: Visualization and optimization of cavitation activity at a solid surface in high frequency ultrasound fields. Ultrason. Sonochem. 34, pp. 474–483, 2017.
- [10] <https://de.wikipedia.org/wiki/Cappuccino-Effekt> (letzter Aufruf: 03.04.2023)
- [11] Caffisch, C. E.; Miksis, M. J.; Papanicolaou, G. C.; Ting, L.: Effective equations for wave propagation in bubbly liquid. J. Fluid Mech. 153, pp. 259–273, 1985.
- [12] Cairós, C.; Mettin, R.: Simultaneous high-speed recording of sonoluminescence and bubble dynamics in multibubble fields. Phys. Rev. Lett. 118, pp. 064301, 2017.
- [13] Louisnard, O.: A simple model of ultrasound propagation in a cavitating liquid. Part I: Theory, nonlinear attenuation and traveling wave generation. Ultrason. Sonochem. 19, pp. 56–65, 2012.
- [14] Lesnik, S.: A Macroscopic Multi-physics Approach for Modeling Acoustically Cavitating Flows. Dissertation, Technische Universität Clausthal, 2022.
- [15] Mettin, R.; Akhatov, I.; Parlitz, U.; Ohl, C. D.; Lauterborn, W.: Bjerknes forces between small cavitation bubbles in a strong acoustic field. Phys. Rev. E 56, pp. 2924–2931, 1997.
- [16] Akhatov, I.; Mettin, R.; Ohl, C. D.; Parlitz, U.; Lauterborn, W.: Bjerknes force threshold for stable single bubble sonoluminescence. Phys. Rev. E 55, pp. 3747–3750, 1997.
- [17] Appel, J.; Koch, P.; Mettin, R.; Krefting, D.; Lauterborn, W.: Stereoscopic high-speed recording of bubble filaments. Ultrason. Sonochem. 11, pp. 39–42, 2004.
- [18] Rosselló, J. M.; Stephens, D. S.; Mettin, R.: Bubble “lightning” streamers from laser induced cavities in phosphoric acid. In: Fortschritte der Akustik – DAGA 2020, 46. Jahrestagung für Akustik, Berlin, pp. 413–416, 2020.
- [19] Lesnik, S.; Mettin, R.; Brenner, G.: Study of ultrasound propagation and cavitation activity in a packing bed of spherical particles. Chemie Ingenieur Technik, 89, pp. 1379–1384, 2017.
- [20] Lesnik, S.; Werner, M.; Wolters, R.; Brenner, G.: Neuartiger Ultraschall-Reaktor zur Wertmetallrückgewinnung aus Reststoffen der stahl- und metallverarbeitenden Industrie. Tech. Rep. Düsseldorf: VDEh-Gesellschaft zur Förderung der Eisenforschung mbH, 2019.
- [21] Nowak, T.; Cairós, C.; Batyrshin, E.; Mettin, R.: Acoustic streaming and bubble translation at a cavitating ultrasonic horn. In: AIP Conference Proceedings Vol. 1685, No. 1, pp. 020002. AIP Publishing, 2015.
- [22] <https://openfoamwiki.net> (letzter Aufruf: 03.04.2023)
- [23] Lesnik, S.; Aghelmaleki, A.; Mettin, R.; Brenner, G.: Modeling acoustic cavitation with inhomogeneous polydisperse bubble population on a large scale. Ultrason. Sonochem. 89, pp. 106060, 2022.
- [24] Nowak, T.: Untersuchung von akustischen Strömungen im kHz- und GHz-Bereich. Dissertation Georg-August-Universität Göttingen, 2013.
- [25] Lechner, C.; Lauterborn, W.; Koch, M.; Mettin, R.: Fast, thin jets from bubbles expanding and collapsing in extreme vicinity to a solid boundary: A numerical study. Phys. Rev. Fluids, 4, pp. 021601, 2019.
- [26] Koch, M.: Laser cavitation bubbles at objects: Merging numerical and experimental methods. Dissertation, Georg-August-Universität Göttingen, 2020.
- [27] Koch, M.; Rosselló, J. M.; Lechner, C.; Lauterborn, W.; Eisener, J.; Mettin, R.: Theory-assisted optical ray tracing to extract cavitation-bubble shapes from experiment. Exp. in Fluids 62, pp. 1–19, 2021.
- [28] Reuter, F.; Ohl, C. D.: Supersonic needle-jet generation with single cavitation bubbles. Appl. Phys. Lett. 118, pp. 134103, 2021.
- [29] Benjamin, T. B.; Ellis, A. T.: The collapse of cavitation bubbles and the pressures thereby produced against solid boundaries. Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A 260, pp. 221–240, 1966.
- [30] Koch, M.; Rosselló, J. M.; Lechner, C.; Lauterborn, W.; Mettin, R.: Dynamics of a laser-induced bubble above the flat top of a solid cylinder – Mushroom-shaped bubbles and the fast jet. Fluids 7, 2, pp. 1–39, 2022.
- [31] Reuter, F.; Deiter, C.; Ohl, C. D.: Cavitation erosion by shockwave self-focusing of a single bubble. Ultrason. Sonochem. 90, pp. 106131, 2022. ■

Dr. Robert Mettin
Georg-August-Universität Göttingen

Dr. Sergey Lesnik
Wikki GmbH, Wernigerode

Prof. Dr. Gunther Brenner
Technische Universität Clausthal