

Simulation numérique du collapse et de l'implosion ultrasonore de bulles de cavitation

F. COUDERC^a, D. LEGENDRE^a, J.C. BERA^b, B. GILLES^b

a. Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT), UMR CNRS/INPT/UPS 5502, Allée du Professeur Camille Soula, 31400 Toulouse

b. INSERM, U556, Therapeutic Applications of Ultrasound, 151 Cours Albert Thomas, 69424 Lyon

Résumé :

La cavitation acoustique est envisagée en thérapie ultrasonore pour la destruction des tissus biologiques et la transfection cellulaire. Certains obstacles liés à la nature très intense du phénomène sont cependant à lever. Dans ce cadre, un code de simulation numérique a été développé avec l'aide des méthodes Level Set et Ghost Fluid afin de prédire les efforts mécaniques exercés sur une paroi biologique lors du collapse et l'implosion de bulles de cavitation engendrés par une onde acoustique ultrasonore.

Abstract :

Acoustic cavitation is proposed in ultrasonic therapy for biological tissue destruction and cellular transfection. Some obstacles due to the very intensive nature of the phenomenon need however to be clear up. A numerical simulation code was developed using Level Set and Ghost Fluid methods to predict the mechanical efforts applied on a biological wall during the ultrasonic acoustic wave induced collapse and implosion of cavitation bubbles.

Mots clefs : Cavitation acoustique, Ultrasons, Simulation numérique, Level Set, Ghost Fluid

1 Introduction

1.1 Problématique physique

Il est présenté ici le développement et le début d'exploitation d'un code de calcul pour la simulation du collapse et de l'implosion ultrasonore de bulles de cavitation. On ne s'intéresse pas ici à la génération des microbulles de gaz ou de vapeur dans un liquide soumis à de fortes dépressions (la pression devant atteindre typiquement quelques bars négatifs), mais plutôt à leur vie dans le champ acoustique une fois qu'elles sont créées. En effet, non seulement un champ acoustique suffisamment intense peut créer des bulles de vapeur, mais il interagit également avec ces mêmes bulles, se manifestant en particulier par une série de compressions et de décompressions au passage des maxima et minima d'amplitude. Les bulles sont susceptibles dans ces conditions d'imploser en raison de la non sphéricité des compressions et de générer des jets locaux extrêmement violents. La pression peut ainsi atteindre localement des centaines de bars, la température des milliers de Kelvins et la vitesse des centaines de m/s . Il est même possible d'observer expérimentalement l'émission de lumière, c'est le phénomène de sonoluminescence. Il est ainsi envisagé d'exploiter ce processus local intense pour la thérapie ciblée par ultrasons : pour la destruction de tissus biologiques (comme les caillots sanguins, les tumeurs ou les calculs renaux) ou encore pour la transfection cellulaire. Cependant, cette nature très intense du phénomène d'implosion est à maîtriser pour permettre de cibler spatialement la destruction cellulaire ou, dans l'application de la transfection, de sonoperer les cellules sans les détruire. La relative méconnaissance de ce phénomène à très petite échelle (de l'ordre de la dizaine de μm) amène à placer quelques espoirs dans l'outil numérique afin de mieux le comprendre, l'appréhender et le maîtriser.

1.2 Choix numériques

Il a été fait le choix de développer un code de calcul pour la simulation d'écoulements diphasiques dont les fluides sont non miscibles, non visqueux et tous deux compressibles. Dans ce cadre, la notion d'interface liquide/gaz doit rester la plus stricte possible afin de capter au mieux la physique à très petite échelle, et en particulier le jet localement violent dû à l'implosion de la bulle. Toute diffusion de l'interface entraînerait une perte d'information trop conséquente. C'est pourquoi, on s'est orienté vers la méthode de suivi d'interface Level Set qui à défaut d'être strictement conservative (en masse) préserve intrinsèquement la notion d'interface [1]. De plus, l'accès aux propriétés locales de l'interface que sont la normale et la courbure est suffisamment

précis pour appliquer avec succès la méthode Ghost Fluid [2] et imposer précisément les conditions de saut de type Rankine-Hugoniot à la traversée de l'interface (apparentée à une discontinuité de contact), et ce, sans aucune régularisation des variables. En particulier, on doit considérer des bulles d'un rayon de quelques μm , taille caractéristique des bulles cavitantes. Or, les forces capillaires à prendre en compte étant très intenses pour un tel rayon, il est important que les fameux courants parasites restent suffisamment faibles pour ne pas détruire la bulle. Il reste alors à développer un solveur compressible monophasique (une approche à un fluide) de la meilleure qualité possible grâce à des schémas d'ordre élevé en temps et en espace pour minimiser les problèmes de diffusion et de dispersion numérique.

2 Modèle et résolution numérique

2.1 Loïs de conservation et d'état

En négligeant les effets visqueux, de transfert de masse et de chaleur, un écoulement bidimensionnel compressible diphasique est solution du système d'équations de conservation dit d'Euler,

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{U})}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

où \mathbf{U} est le vecteur des variables conservatives et \mathbf{F} et \mathbf{G} les flux physiques associés,

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \end{pmatrix} \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E + p)v \end{pmatrix} \quad E = \rho e + \rho \left(\frac{u^2 + v^2}{2} \right) \quad (2)$$

où ρ , p , $\mathbf{u} = (u, v)^T$, E et e sont respectivement la masse volumique, la pression, le vecteur vitesse, l'énergie totale par unité de volume et l'énergie interne par unité de masse. Afin de fermer complètement le système d'équations, il est nécessaire de définir l'équation d'état $p = p(\rho, e)$ pour chacun des fluides considérés. Dans la présente étude, il est considéré une loi des gaz parfait lorsqu'il s'agit d'une phase gazeuse,

$$p = (\gamma - 1)\rho e \quad (3)$$

où γ est le rapport des capacités calorifiques spécifiques, et une loi de Tait lorsqu'il s'agit d'une phase liquide,

$$p = B \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right) - A \quad (4)$$

où A , B et ρ_0 sont des paramètres ajustables, en particulier en fonction de la température puisque la pression est seulement fonction de la densité, et non de l'énergie interne e (usuellement, $A = 10^5 Pa$, $B = 3.31 \cdot 10^8 Pa$, $\rho_0 = 1000 kg.m^{-3}$ et $\gamma = 7.15$). Il est important de noter qu'une telle loi néglige tout potentiel de cavitation dans le liquide, la pression pouvant parfaitement devenir largement négative. Une telle hypothèse est tout à fait concevable puisque tel est le cas dans la réalité si le liquide est purifié des potentiels sites de nucléation et que la pression reste éloignée de la limite spinodale (lorsque la pression est inférieure à la pression de vapeur saturante sans que les bulles de vapeur n'apparaissent pour autant, le liquide est métastable sous tension).

2.2 Solveur compressible

En premier lieu, on considère un maillage cartésien uniforme $n_x \times n_y$ pour des raisons de simplicité de mise en oeuvre des schémas numériques d'intégration spatiale d'ordre élevé. Il peut toujours être envisagé par la suite d'utiliser une technique de raffinement de maillage automatique (AMR), ou plus simplement un maillage non uniforme. En respect d'une approche aux volumes finis (préférable à une approche aux différences finies), une discrétisation spatiale conservative du système d'équations d'Euler s'écrit classiquement,

$$\frac{\partial \mathbf{U}_{i,j}}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}_{i+1/2,j} - \mathbf{F}_{i-1/2,j}}{\Delta x} + \frac{\mathbf{G}_{i,j+1/2} - \mathbf{G}_{i,j-1/2}}{\Delta y} = 0 \quad (5)$$

où \mathbf{U} est le vecteur de l'intégrale sur le volume de contrôle (i, j) des variables conservatives (elles sont donc centrées sur la cellule), $\mathbf{F}_{i+1/2,j}$ et $\mathbf{G}_{i,j+1/2}$ les flux numériques associés intégrés sur les facettes de la cellule, et enfin Δx et Δy les pas d'espace constants pour chacune des directions respectives au domaine d'étude.

Afin de calculer le flux $\mathbf{F}_{i+1/2,j}$, on utilise un schéma de Godunov consistant à résoudre un problème de Riemann sur la facette de la cellule (on utilise une approche direction par direction, le flux $\mathbf{G}_{i,j+1/2}$ est évalué exactement de la même manière). On doit pour cela reconstruire les états droite et gauche $\mathbf{U}_{i+1/2,j}^R$ et $\mathbf{U}_{i+1/2,j}^L$. Or, il est connu qu'il est préférable d'effectuer une telle opération dans l'espace des variables caractéristiques

pour minimiser des problèmes d'oscillation des schémas. La matrice Jacobienne du système d'équations de conservation d'Euler $\partial \mathbf{F} / \partial \mathbf{U}$ est ainsi diagonalisée (le lecteur est invité à consulter [2] pour réaliser une telle opération pour des lois d'état quelconques). Les états droites et gauches sont alors évalués par un schéma WENO au 5^{ème} ordre puis reprojétés dans l'espace des variables conservatives afin de calculer le flux à partir d'un solveur de Riemann. Il est à noter qu'une approche aux volumes finis nécessite une approche multidimensionnelle en raison de l'intégration du flux sur la facette [3].

Maintenant, plutôt que d'utiliser un solveur de Riemann exact coûteux en temps de calcul, il est plus économique d'utiliser un solveur de Riemann approché. Le flux HLLC de Harten, Lax et van Leer [4] constitue aujourd'hui une excellente alternative. A la différence du flux de Roe, moins dissipatif mais plus coûteux, le flux HLLC préserve la positivité, une propriété critique lorsqu'on atteint de très basses densités et pressions.

La discrétisation temporelle est assurée par un schéma de Runge-Kutta explicite au 3^{ème} ordre. Cette intégration en temps explicite nécessite l'utilisation d'un pas de temps adaptatif assurant la stabilité temporelle [4].

2.3 Méthode Level Set

La fonction Level Set Φ se définit comme une fonction distance signée, l'iso-contour particulier $\Gamma = (\mathbf{x} | \Phi = 0)$ représente alors l'interface. Pour suivre son évolution dans le temps, c'est l'ensemble des iso-contours qui est advecté passivement par le champ de vitesse local,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \Phi = 0 \quad (6)$$

Un schéma WENO au 5^{ème} ordre est employé pour la discrétisation spatiale et un schéma de Runge-Kutta au 3^{ème} ordre pour la partie temporelle. Comme la propriété distance est perdue intrinsèquement dans le temps, un algorithme dit de redistanciation est appliqué à chaque pas de temps avec les mêmes schémas afin d'assurer la stabilité [1]. De tels schémas minimisent grandement les problèmes de conservation de la masse [1].

2.4 Méthode Ghost Fluid

La technique numérique Ghost Fluid a été développée originellement par Fedkiw [2] dans le but de réduire, voire supprimer, les oscillations non physiques générées par les schémas à proximité de l'interface. L'idée fondamentale est d'introduire une notion de cellules fictives de discrétisation, situées de l'autre côté de l'interface vis à vis du fluide considéré, afin des les utiliser de manière transparente dans le solveur compressible comme si un seul fluide était considéré. Il "suffit" alors de définir le vecteur \mathbf{U} dans les cellules fictives afin de respecter les conditions de saut à la traversée de l'interface. Ces conditions de type Rankine-Hugoniot se réduisent aux simples expressions suivantes étant donné que l'interface est advectée passivement et que les fluides sont considérés non visqueux,

$$\begin{aligned} [\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}] &= 0 \\ [p] &= \sigma \kappa \end{aligned} \quad (7)$$

où \mathbf{n} est la normale à l'interface, σ le coefficient de tension de surface et κ la courbure. Ces deux conditions ne suffisent cependant pas à définir complètement les cellules fictives, il existe un certain degré de liberté. Fedkiw [2] exploite ainsi ce degré de liberté en extrapolant en particulier l'entropie suivant la normale \mathbf{n} . Cette manoeuvre a pour effet de réduire les effets bien connus d'overheating à l'interface.

3 Validation interaction choc/bulle

On a commencé par valider le code de calcul par une série de cas tests académiques monodimensionnels : tout d'abord des cas tests monophasiques, puis diphasiques de type gaz/gaz pour finir par des cas tests diphasiques de type gaz/liquide. On a ainsi pu valider le code, spécialement dans les conditions de simulation envisagées. Cependant, par manque de place, on ne les présente pas ici. On va plutôt présenter une simulation bidimensionnelle qui fait souvent référence dans la littérature et représentative des possibilités du code de calcul.

Il s'agit d'un choc dans de l'air qui vient impacter et interagir avec une "bulle" cylindrique de réfrigérant R22 d'un diamètre de 50 mm, placée au point $\mathbf{x} = (156, 44.5)$ mm d'un domaine de calcul bidimensionnel de taille 356 × 89 mm. Chacun des fluides est modélisé par une loi des gaz parfait. Le choc plan $M = 1.22$ se propageant horizontalement vers la gauche est placé initialement au point $x = 206$ mm. Les conditions initiales respectives sont les suivantes,

	R22	Air (pré-choc)	Air (post-choc)
ρ ($kg.m^{-3}$)	3.15385	1	1.38
p (Pa)	10^5	10^5	$1.57 \cdot 10^5$
u ($m.s^{-1}$)	0	0	-124.82
γ	1.249		1.4

Des conditions périodiques sont utilisées dans la direction verticale et des conditions de sortie non-réfléctives dans la direction horizontale. Le maillage est composé de 2048×512 cellules pour capter la physique à petite échelle proche de l'interface. En effet, comme il peut être observé sur la Fig.1, s'il existe un très bon accord global entre la simulation et l'expérience de Hass et Sturtevant [5], et en particulier sur la forme générale de la bulle et la position des chocs, des instabilités à très faible longueur d'onde de type Richtmyer-Meshkov et Kelvin-Helmholtz se manifestent.

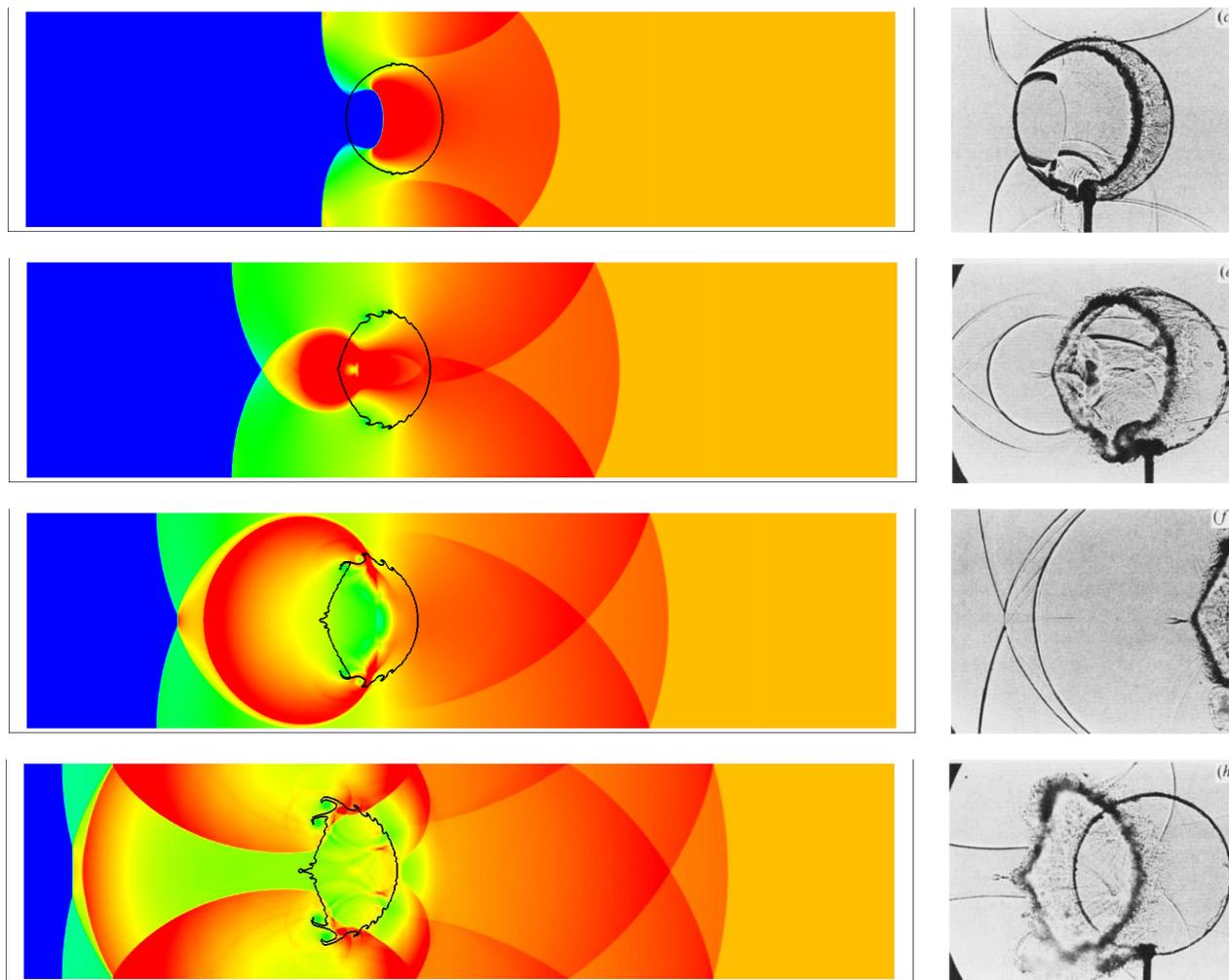


FIG. 1 – (à gauche) Simulation 2048×512 de l'interaction d'un choc avec un bulle de réfrigérant R22. Champ de pression et interface ; (à droite) Expérience de Hass et Sturtevant [5]

4 Collapse et implosion ultrasonore de bulles cavitantes

La motivation de nos recherches est de reproduire à terme par la simulation numérique les expériences menées sur les ultrasons de forte intensité en milieu biologique. Cependant, afin de pouvoir mener des comparaisons précises entre expériences et simulations, on s'est intéressé ici à la cavitation ultrasonore en eau dégazée, en prenant pour référence la configuration expérimentale simple et reproductible de Gilles et al.[6]. Dans cette étude, l'onde ultrasonore focalisée (d'une amplitude de 1 à 2 MPa et d'une fréquence de 500 kHz) est suffisamment intense pour faire apparaître des bulles de vapeur par cavitation hétérogène à proximité d'une paroi (on parle de cavitation hétérogène car ce sont les aspérités de la paroi qui sont à l'origine du potentiel de nucléation). Le rayon caractéristique de telles bulles est de quelques μm . Etant donné que la tension de surface est prise en compte, la première étape a été de réaliser la simulation d'une bulle statique afin de vérifier que les courants parasites sont suffisamment faibles pour être négligés. C'est effectivement le cas puisqu'ils ont

un ordre de grandeur de 10^{-3} à $10^{-4} m.s^{-1}$. Par soucis de minimisation du temps de calcul, on a opté pour une bulle de rayon $R = 10 \mu m$ et d'une amplitude pour l'onde acoustique ultrasonore de $5 MPa$ supérieure aux conditions expérimentales. La longueur d'onde acoustique $\lambda \approx 3 mm$ étant très largement supérieure au diamètre de la bulle, et surtout pour éviter de trop nombreuses interférences entre l'onde incidente et l'onde réfléchie sur la bulle, on a opté pour un domaine de calcul de $20R \times 20R$ nécessitant un maillage 1024^2 pour assurer un minimum de résolution dans le diamètre de la bulle. La bulle est centrée au point $\mathbf{x} = (12R, 10R)$, des conditions périodiques sont utilisées dans la direction verticale, une condition de type entrante/sortante sur la frontière gauche afin de générer l'onde acoustique ultrasonore plane, et enfin une condition de sortie non-réfléchissante sur la frontière droite.

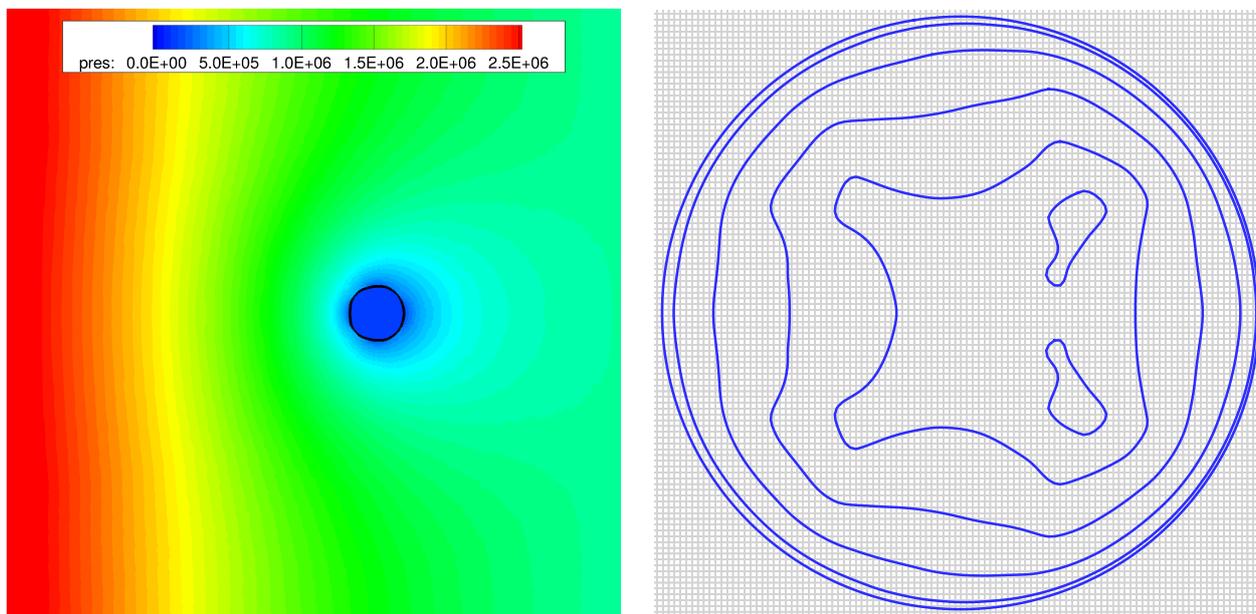


FIG. 2 – (à gauche) Simulation bidimensionnelle 1024^2 de l'interaction d'un ultrason d'amplitude $5 MPa$ et de fréquence $500 kHz$ avec une "bulle" cylindrique de rayon $10 \mu m$ à $t = 300 ns$; Champ de pression et interface; (à droite) Formes de la bulle au cours du temps et maillage.

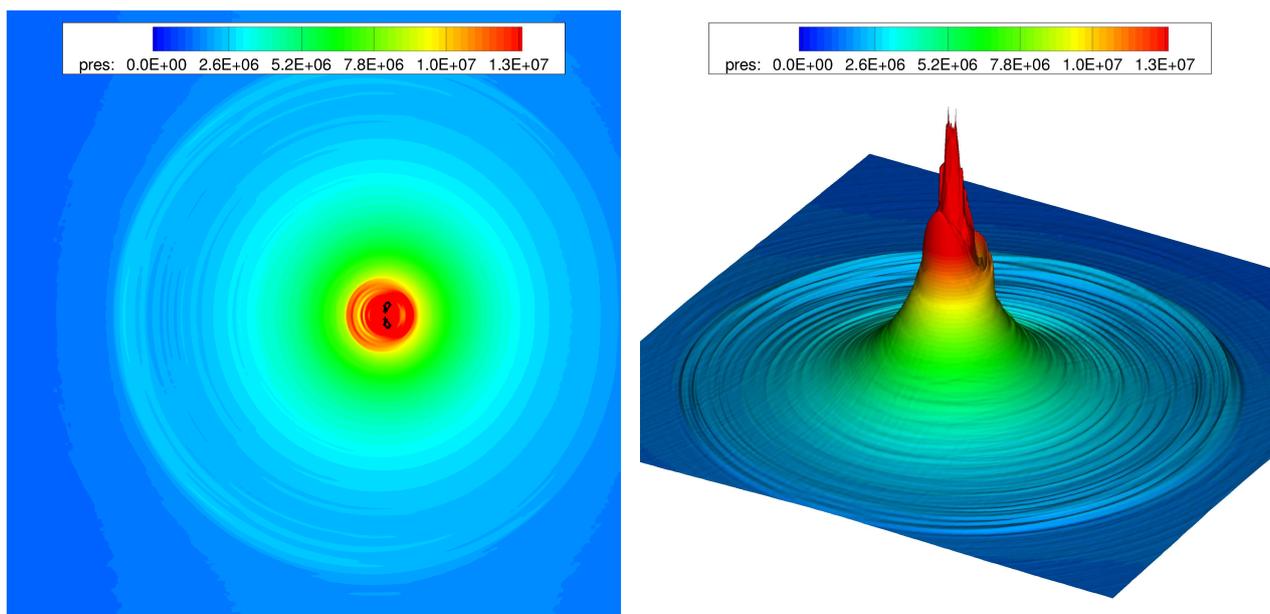


FIG. 3 – Simulation identique à la Fig.2 pour le temps $t = 600 ns$; Champ de pression à gauche en 2D comme à droite en 3D; Visualisation de la phase d'explosion suivant la collapse.

Tout d'abord, il peut être observé à gauche de la Fig.2 que l'acoustique est fortement modifiée par la présence

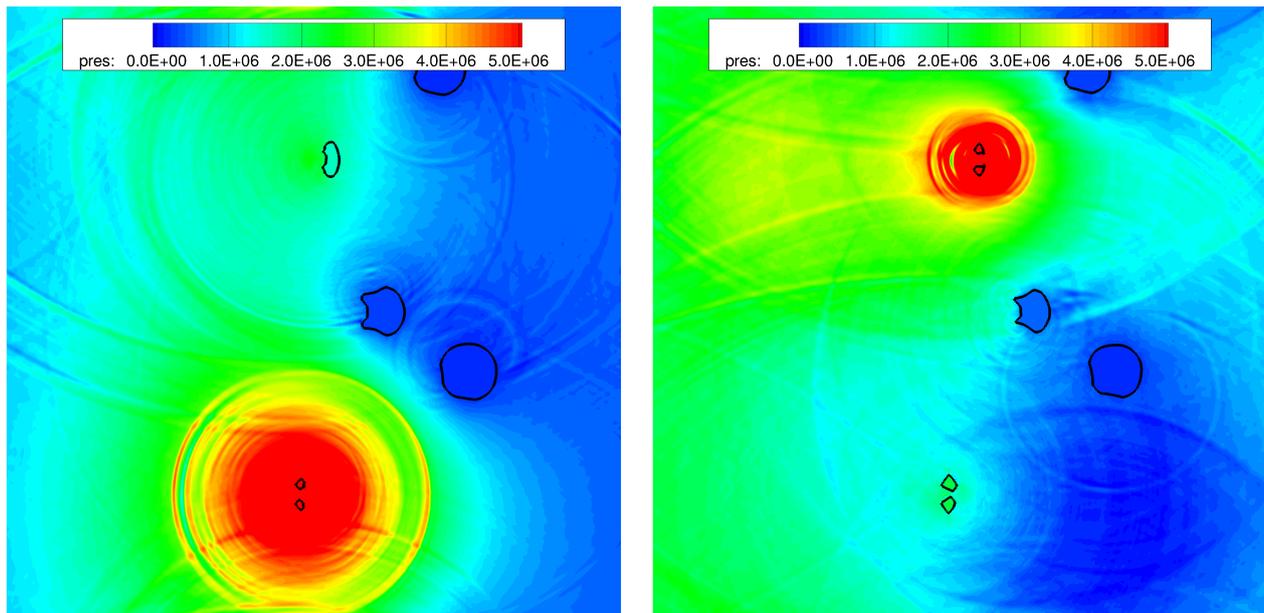


FIG. 4 – Simulation identique aux Fig.2 et Fig.3 sauf que cette fois-ci, on a placé plusieurs bulles ; (à gauche) $t = 600 \text{ ns}$; (à droite) $t = 670 \text{ ns}$.

de la bulle sans que celle-ci ne soit grandement perturbée dans un premier temps. Par la suite, la pression environnante étant très importante, la bulle subit une compression rapide au sens de l'analyse de Rayleigh-Plesset (jusqu'à 90 kg.m^{-3}). Or il peut être observé sur la droite de la Fig.2 que cette compression est sphériquement asymétrique engendrant l'implosion de celle-ci dans la direction de propagation de l'onde. Il en résulte l'apparition d'une phase d'explosion localisée violente (Fig.3) puisque la pression est ici supérieure à 200 bars et la vitesse supérieure à 50 m.s^{-1} . Il est à noter que la bulle a déjà implosé avant même le passage de la première crête de l'onde de pression ultrasonore. Pour une amplitude inférieure, il a pu être vérifié sur des maillages plus modestes que la bulle subit une série de compressions et de décompressions au passage des maxima et minima d'amplitude avant d'imploser. On a également réalisé la même simulation avec 5 bulles au lieu d'une seule (Fig.4) dans l'objectif de quantifier la part d'interaction. Il semble que l'écoulement induit par l'implosion d'une bulle n'est pas une grande influence sur l'implosion des autres, l'énergie de ces écoulements s'évanouissant assez rapidement en $1/r$.

5 Conclusion et perspectives

Il vient d'être présenté nos toutes premières simulations bidimensionnelles du collapse et de l'implosion ultrasonore de bulles de cavitation grâce au code développé. On va ainsi continuer nos investigations avec des versions axisymétrique et tridimensionnelle du code plus proches de la réalité expérimentale. Il sera pris en compte la présence à proximité des bulles d'une paroi afin de prédire les efforts mécaniques exercés dessus. Il sera également considéré une source acoustique ultrasonore bifréquentielle modulée en amplitude.

Ce projet est soutenu par l'ANR par le biais du projet Cavitherapus ANR06-BLAN-0405 ainsi que l'IDRIS et le CINES concernant les moyens de calcul.

Références

- [1] Couderc F. Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux. PhD thesis, Sup'Aéro, 2007.
- [2] Fedkiw R. P., Aslam T., Merriman B., and Osher S. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *J. Comput. Phys.*, 152(2), 457–492, 1999.
- [3] Titarev V. A. and Toro E. F. Finite-volume weno schemes for three-dimensional conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 201(1), 238–260, 2004.
- [4] Toro E. F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics - A practical introduction - 2nd edition. Springer, 1999.
- [5] Hass J. F. and Sturtevant B. Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities. *J. Fluid Mech.*, 181, 41–71, 1987.
- [6] Gilles B., Béra J. C., Mestas J. L., and Cathignol D. Reduction of ultrasound inertial cavitation threshold using bifrequency excitation. *Appl. Phys. Lett.*, 89(9), 2006.