

MPPE 2015

XI ПЭФЭГД 2015



**XI Международная научная конференция
СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ЭЛЕКТРОФИЗИКИ И
ЭЛЕКТРОГИДРОДИНАМИКИ**

**29 июня – 3 июля 2015
ПЕТЕРГОФ, РОССИЯ**

**11TH INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONFERENCE
MODERN PROBLEMS OF ELECTROPHYSICS AND
ELECTROHYDRODYNAMICS**

**JUNE 29 – JULY 3, 2015
PETERHOF, RUSSIA**

Трехмерное моделирование поведения жидких диэлектрических капель в насыщенном паре под воздействием сильных электрических полей

Д.И. Карпов^{1,2}, Д.А. Медведев^{1,2}, А.Л. Куперштох^{1,2}

¹ Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения РАН, Новосибирск, Россия
² Национальный исследовательский Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
e-mail: skn@hydro.nsc.ru

Three-dimensional simulations of the dynamics of liquid dielectric droplets in saturated vapor under the action of strong electric fields

D.I. Karpov^{1,2}, D.A. Medvedev^{1,2}, A.L. Kupershtokh^{1,2}

¹ Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS, Novosibirsk, Russia
² Novosibirsk National Research State University, Novosibirsk, Russia

Abstract — Simulation of the condensation of saturated water vapor under the action of electric field was performed. Dynamics of liquid and gaseous phases was calculated using the lattice Boltzmann equation (LBE) method with account of possible phase transitions liquid–vapor [1]. Near the ions, dielectric is pulled into the region of stronger electric field which leads to the formation of small droplets. These droplets become the centers for further condensation. The mechanism of condensation enhancement in strong uniform electric field was demonstrated.

Using the molecular dynamics method, we simulated the condensation of a saturated vapor of model molecules as well as the condensation of the same vapor near an ion. The nucleus at the ion is formed at lower supersaturation.

Keywords — lattice Boltzmann method, molecular dynamics, formation of droplets, ions, phase transitions, computer simulations, parallel computations, graphics processing units.

I. Введение

Под действием космического излучения в верхних слоях атмосферы возникают ионы, которые являются зародышами (ядрами) конденсации пересыщенного водяного пара (по принципу камеры Вильсона). В

результате происходит конденсация пара в мелкие капельки жидкости и образование облаков.

Как известно, критический размер зародыша капли в паре резко возрастает с уменьшением пересыщения [2]. Методы сплошной среды и термодинамики позволяют моделировать процесс конденсации, когда в системе существуют зародыши уже субмикронных размеров, на которых могут формироваться капли. Процесс формирования зародыша на ионе, когда количество осевших на нем молекул исчисляется единицами или десятками, остается за кадром. Поэтому, для описания начальной фазы формирования зародыша был применен метод молекулярной динамики.

Дискретные модели динамики сплошных сред, среди которых особую нишу занимает метод решеточных уравнений Больцмана, основаны на мезопредставлениях в описании поведения среды. В отличие от классических методов расчета течений жидкости путем решения уравнений Навье – Стокса метод решеточных уравнений Больцмана рассматривает течение как движение ансамбля псевдо-частиц, имеющих некоторую функцию распределения по дискретным скоростям. В последние годы этот метод адаптирован для двухфазных течений с границами раздела фаз, вновь возникающих, исчезающих и изменяющих топологию. В этом методе жидкая и газообразная фазы описываются единообразно. При этом на границах раздела фаз естественным образом обес-

печивается поверхностное натяжение, а также испарение и конденсация вещества.

II. Метод молекулярной динамики

Методом молекулярной динамики исследован начальный этап конденсации насыщенного пара на внедренном ионе. Использовалась сферическая модель молекулы. Межмолекулярные силы описывались двумя видами потенциалов. Симметричное притяжение и отталкивание описывалось с помощью потенциала Леннарда-Джонса. Электрическое взаимодействие между полярными молекулами и молекулами и ионом описывалось в приближении точечного диполя, помещенного в центр молекулы. В случае полярных молекул использовалось приближение точечного диполя с постоянным дипольным моментом. При внесении иона дипольные молекулы ориентируются вдоль поля и втягиваются в область пространства, где напряженность поля выше. Для расчета поворотов реализован алгоритм, основанный на применении алгебры кватернионов. При расчете электрического поля учитывалось как взаимодействие иона и диполя, так и взаимное влияние диполей друг на друга.

Неполярные молекулы поляризуются в поле иона и притягиваются к нему. В расчетах коэффициент поляризуемости молекул считался постоянным. Для вычисления поляризации молекул в поле иона и самосогласованном поле других диполей на каждом шаге по времени использовался метод «предиктор-корректор» [3]. На каждом шаге по времени метода молекулярной динамики решалась итерационным методом самосогласованная задача об определении дипольного момента для каждой молекулы в поле иона и других молекул.

Для интегрирования уравнений движения использовался метод Верле. Все расчеты выполнялись в кубической области. Разработано программное обеспечение для параллельных расчетов на графических процессорах с технологией программирования CUDA.

III. Метод решеточных уравнений Больцмана

Для компьютерного моделирования эволюции систем с границами раздела фаз жидкость-пар используется метод решеточных уравнений Больцмана (LBE), который в настоящее время широко применяется для моделирования течений жидкости, включая многофазные и многокомпонентные. В отличие от

классических методов расчета течений жидкости путем решения уравнений Навье – Стокса метод решеточных уравнений Больцмана рассматривает течение как движение ансамбля псевдочастиц, имеющих некоторую функцию распределения по дискретным скоростям \mathbf{c}_k .

Уравнения эволюции для функций распределения $N_k^{s,\sigma}$ каждого из компонентов s и σ имеют вид

$$N_k^{s,\sigma}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k^{s,\sigma}(\mathbf{x}, t) + \Omega_k^{s,\sigma} + \Delta N_k^{s,\sigma}, \quad (1)$$

где

$\Omega_k^{s,\sigma} = (N_k^{eq}(\rho^{s,\sigma}, \mathbf{u}^{s,\sigma}) - N_k^{s,\sigma}(\mathbf{x}, t)) / \tau$ – оператор столкновений, а

$$\Delta N_k^{s,\sigma} = N_k^{eq}(\rho^{s,\sigma}, u^{s,\sigma} + \Delta u^{s,\sigma}) - N_k^{eq}(\rho^{s,\sigma}, \mathbf{u}^{s,\sigma})$$

– изменения функций распределения за счет действия объемных сил [4]. Компьютерное моделирование фазовых переходов методом решеточных уравнений Больцмана представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз [1, 5, 6]. Для этого вводятся силы притяжения, действующие на вещество в узле со стороны соседних узлов.

Расчет электрического поля $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$ с учетом зависимости диэлектрической проницаемости от плотности осуществлялся согласно уравнению Пуассона

$$\nabla(\varepsilon \nabla\varphi) = -4\pi q. \quad (2)$$

Уравнение (2) решалось итерационным методом на каждом шаге по времени.

IV. Параллельные вычисления на графических ускорителях

Графические процессоры на видеокартах – Graphics Processing Unit (GPU) имеют возможность параллельных вычислений на большом количестве ядер. Расчеты выполнялись на нескольких графических ускорителях TITAN-Black, имеющих по 2880 процессоров (ядер) каждый. Для распараллеливания алгоритма на ядрах и между GPU использовалась технология CUDA.

V. Результаты моделирования образования капель на заряженных частицах

Сила притяжения поляризованной молекулы к иону $\sim r^{-6}$, в то время как сила межмолекулярного притяжения $\sim r^{-7}$. Поэтому конденсация на ионе идет быстрее, чем на флуктуациях плотности в паре.

Выполнены расчеты формирования микрокапли молекул плотного газа на ионе при разных значениях плотности пара. Согласно расчетам, влияние иона приводит к образованию на ионе зародыша жидкой фазы (рис. 1). В неоднородном поле дипольные молекулы оседают на ионе. Влияние электрического поля на динамику формирования микрокапли существенно, пока слой диполей имеет толщину 2–3 диаметра молекулы. Этот результат хорошо согласуется с известными теоретическими оценками. При больших радиусах капли напряженность поля спадает значительно медленнее, чем вблизи иона, что, очевидно, следует из теоремы Гаусса, и рост в большей степени

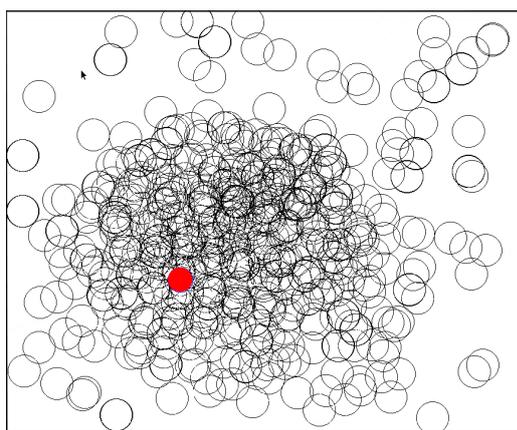


Рис. 1. Капля, образовавшаяся на ионе (кружок красного цвета) в насыщенном паре, состоящем из нейтральных молекул, поляризующихся под действием электрического поля иона. Показана проекция на плоскость трехмерного распределения молекул.

определяется межмолекулярными силами, описываемыми потенциалом Леннарда-Джонса.

Для исследования динамики образования зародыша жидкой фазы использовался метод подсчета среднего числа молекул в сфере заданного радиуса $N_d(t)$. Вокруг иона (диполя) строилась сфера заданного радиуса (рис. 2). В процессе моделирования на каждом шаге фиксировалось количество частиц, оказавшихся внутри этой сферы. Затем это количество усреднялось для равных интервалов времени (каждый равен 10000 шагов по времени молекулярно-динамического расчета) и результат записывался в массив значений $N_d(t)$. На рис. 3 показаны зависимости $N_d(t)$ для конденсации на ионе и на диполе, для сфер радиусом $R = 2d$ и $R = 4d$, где d – диаметр молекулы. По графикам видно, что капля на ионе больше и на начальном этапе формирования растет в среднем заметно быстрее.

Серия расчетов позволила сделать следующие выводы. На ионе конденсация начинается раньше, чем

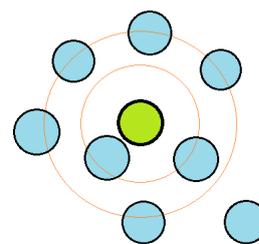


Рис. 2. Сферы для подсчета числа молекул, осевших на ионе и на диполе.

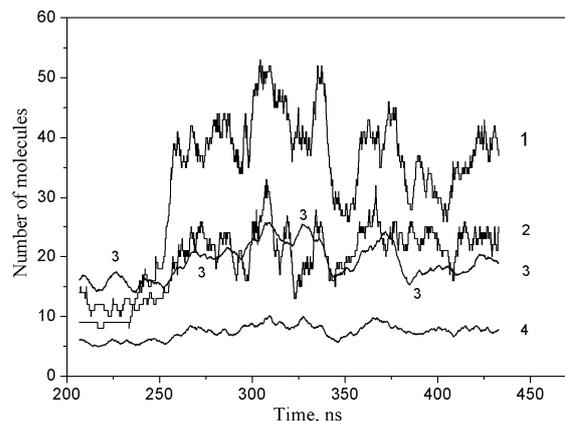


Рис. 3. Количество соседних молекул в сферах радиусом $R = 2d$ (кривые 2, 4) и $R = 4d$ (кривые 1, 3) в зависимости от времени для иона (кривые 1, 3) и молекулы пара (кривые 2, 4).

на флуктуациях плотности. На ионе конденсация происходит при температурах выше, чем температура образования капель в паре без примесей. Показано, что зародыш на ионе образуется при любом пересыщении. Область влияния иона на молекулы среды уменьшается с плотностью среды. На ионе зародыш образуется под действием главным образом электрических сил.

Методом решеточных уравнений Больцмана выполнено трехмерное компьютерное моделирование двухкомпонентной среды воздух–пересыщенный пар с учетом конденсации, испарения и коалесценции капель в электрических полях. В качестве модельной системы рассматривалась среда, состоящая из инертного газа и насыщенных паров, способных конденсироваться в жидкость. Для пара и жидкости использовалось модельное уравнение состояния Ван-дер-Ваальса. Инертный газ описывался уравнением состояния идеального газа.

Проводилось моделирование конденсации пара в присутствии точечных зарядов (ионов). Происходит вытягивание диэлектрика в область сильного поля, приводящее к образованию капель вблизи ионов, которые служат зародышами конденсации. На рис. 4 показаны положение капель и плотность среды вдоль оси x .

Проводилось моделирование конденсации пара в однородном электрическом поле. Показано, что в сильных электрических полях конденсация происходит анизотропным образом с возникновением капель жидкости, сильно вытянутых вдоль поля (рис. 5). Наблюдается не только конденсация пара в виде жидких

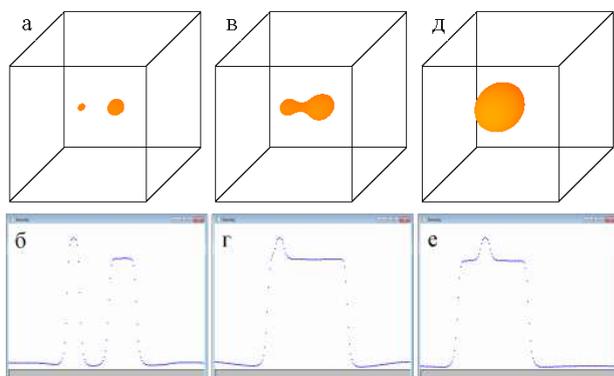


Рис. 4. (а), (в), (д) – конденсация пара на ионе и коалесценция заряженной и незаряженной капель. (б), (г), (е) – графики плотности вдоль оси симметрии. $t = 250$ (а, б), 1000 (в, г), 3500 (д, е). Сетка $160 \times 160 \times 160$.

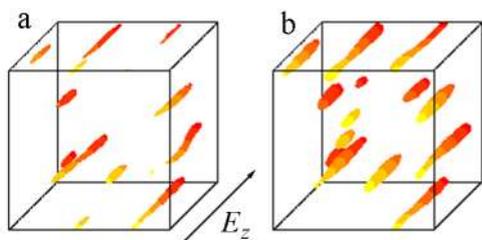


Рис. 5. Анизотропная конденсация пара в сильном однородном электрическом поле.

вытянутых образований, но и их коалесценция, которая ускоряется из-за поляризации капель в электрическом поле.

Выполнены расчеты одновременного образования нескольких капель вокруг точечных ионов и на зародышах с распределенным зарядом. Конденсация пара в каждую из капель приводит к возникновению в паре волны разрежения, распространяющейся от капли наружу. Волны от разных капель взаимодействуют между собой. Это может приводить к тому, что для маленьких капель пар становится ненасыщенным, и такие капли испаряются, а крупные растут, поглощая вещество мелких.

VI. Заключение

Выполнены молекулярно-динамические расчеты формирования микрокапли молекул плотного газа на ионе при разных значениях плотности пара. На ионе

конденсация начинается раньше, чем на флуктуациях плотности. На ионе конденсация происходит при температурах выше, чем температура образования капель в паре без примесей. Показано, что зародыш на ионе образуется при любом пересыщении. Область влияния иона на молекулы среды уменьшается с плотностью среды.

Выполнено моделирование конденсации пара в присутствии точечных зарядов (ионов) методом LBE. Происходит втягивание диэлектрика в область сильного поля, приводящее к образованию капель вблизи ионов, которые служат зародышами дальнейшей конденсации. Наблюдается коалесценция капель из-за их поляризации и взаимного притяжения. Кроме того, имеет место рост больших капель за счет конденсации насыщенного пара.

Показан механизм усиления конденсации насыщенного пара в сильном однородном электрическом поле. В этом случае происходит конденсация насыщенного пара в виде жидких вытянутых образований, аналогично образованию парогазовых каналов в жидкости в экстремальных электрических полях. В умеренных полях происходит деформация капель.

Благодарности

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Минобрнауки России и грантов РФФИ № 13-08-00763 и № 13-01-00526.

Литература

- [1] Kupershtokh A.L., Medvedev D.A. Anisotropic instability of a dielectric liquid in a strong uniform electric field: Decay into a two-phase system of vapor filaments in a liquid // *Phys. Rev. E*. 2006. Vol. 74, N 2. P. 021505.
- [2] Амелин А.Г. Теоретические основы образования тумана при конденсации пара. Издание третье, переработанное и дополненное. М.: Химия. 1972. 304 с.
- [3] Kolafa J. Numerical integration of equations of motion with a self-consistent field given by an implicit equation // *Mol. Simul.* 1996. Vol. 18. P. 193–212.
- [4] Куперштох А.Л. Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана // *Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”*. 2004. Т. 4, № 2. С. 75–96.
- [5] Kupershtokh A.L. Three-dimensional LBE simulations of a decay of liquid dielectrics with a solute gas into the system of gas-vapor channels under the action of strong electric fields // *Computers and Mathematics with Applications*. 2014. Vol. 67, N 2. P. 340–349.
- [6] Kupershtokh A.L., Medvedev D.A., Karpov D.I. On equations of state in a lattice Boltzmann method // *Computers and Mathematics with Applications*. 2009. Vol. 58, N 5. P. 965–974.