

Моделирование анизотропного распада бинарных смесей типа жидкость–растворенный газ в сильных электрических полях методом решеточных уравнений Больцмана*

А.Л. КУПЕРШТОХ

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск
e-mail: skn@hydro.nsc.ru

A lattice Boltzmann equation (LBE) method is used for computer modeling of the anisotropic decay of initially uniform binary mixtures of dielectric liquid and solute gas to two-phase system liquid – gas. The parallel calculations are produced on graphics processing unit GTX-580. Two and three dimensional simulations are carried out for nonpolar dielectrics. New regions of low density phase arise in the form of thin quasi-cylindrical channels oriented along the electric field. The critical values of electric field for such type of binary mixtures are considerably less than for pure dielectric liquids. This anisotropic instability is possibly key mechanism of gas phase inception at the electrical breakdown of dielectric liquids in strong electric fields.

Введение

Ранее нами было показано [1, 2], что для веществ с нелинейной зависимостью диэлектрической проницаемости от плотности, находящихся первоначально в однородном стабильном жидком состоянии, возможен анизотропный распад на жидкую и газовую фазы под действием сильных электрических полей. Принципиально то, что новые участки менее плотной фазы возникают в виде узких каналов, ориентированных вдоль поля. Анизотропный распад позволяет легко объяснить ряд экспериментально наблюдаемых явлений при пробое жидких диэлектриков [3] (высокие скорости распространения стримерных каналов более 100 км/с, возникновение веера несветящихся каналов пониженной плотности вблизи острия с последующим пробоем одного из них, примерно цилиндрическую форму сегментов каналов и их ветвление). Авторы чисто экспериментальной работы [3] объясняют свои результаты по пробое жидких диэлектриков, основываясь на нашей модели роста стримеров по механизму анизотропного распада жидких диэлектриков в электрическом поле [1, 4]. Однако для анизотропного распада чистых диэлектриков необходимы электрические поля начиная с десятков МВ/см. В большинстве же экспериментов по пробое электрические поля значительно меньше (от нескольких десятых до нескольких единиц МВ/см).

В данной работе исследуется анизотропный распад бинарных смесей типа жидкий диэлектрик–растворенный газ. Для компьютерного моделирования эволюции таких систем с возникающими границами раздела фаз жидкость–пар используется метод решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Equation, LBE), который представляет собой дискретную модель сплошной среды и в настоящее время широко применяется

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 10-08-00805), Президиума РАН (проект № 12.12), ОЭМПУ РАН (проект № 14.14.3) и Сибирского отделения РАН (проекты № 58-2009 и № 116-2009).

для моделирования течений жидкостей, включая многофазные и многокомпонентные. Проведены двухмерные и трехмерные расчеты для неполярного жидкого диэлектрика. Для бинарных систем с растворенным газом величина критического электрического поля оказалась гораздо меньше, чем для чистого жидкого диэлектрика. При пробое жидких диэлектриков в сильных электрических полях, локально достигающих величин $\sim 1\text{--}10$ МВ/см, описанная анизотропная неустойчивость, возможно, является определяющим механизмом зарождения газовой фазы, возникновения проводящих стримерных структур, их быстрого распространения в виде тонких каналов (скорость роста может превышать 100 км/с), а также их ветвления в процессе распространения.

1. Метод решеточных уравнений Больцмана

Для компьютерного моделирования эволюции систем с границами раздела фаз жидкость-пар используется метод LBE [5, 6], который в настоящее время широко применяется для моделирования течений жидкости, включая многофазные и многокомпонентные [7, 8, 9]. Метод LBE представляет собой дискретную модель сплошной 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 \mathbf{c}_k . Для двухмерных и трехмерных расчетов использовались варианты метода LBE D2Q9 и D3Q19, соответственно. Уравнения эволюции для функций распределения каждого из компонентов s и σ имеют вид

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

где $\Omega_k = (N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) - N_k(\mathbf{x}, t))/\tau$ – оператор столкновений в виде релаксации к равновесному состоянию, $\Delta N_k = N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u})$ – изменение функций распределения за счет действия объемных сил [7, 8, 9]. Взаимодействие компонентов моделировалось силами отталкивания, действующими в узле i на вещество каждого компонента со стороны вещества другого компонента, присутствующего в соседних узлах j ,

$$\mathbf{F}_{i,j}^s = G\psi(\rho^s(\mathbf{x}_i))\psi(\rho^\sigma(\mathbf{x}_j))(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i), \quad \mathbf{F}_{i,j}^\sigma = G\psi(\rho^\sigma(\mathbf{x}_i))\psi(\rho^s(\mathbf{x}_j))(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i), \quad (2)$$

где G – параметр взаимодействия. Обоснованием метода LBE является тот факт, что во втором порядке разложения Чепмена – Энскога из уравнений LBE получаются макроскопические уравнения гидродинамики, то есть уравнения неразрывности и Навье – Стокса. В настоящее время метод LBE вполне может конкурировать с традиционными методами, а в некоторых областях (течения в пористой среде, многофазные и многокомпонентные) он имеет значительные преимущества.

2. Параллельные вычисления на графических ускорителях

Графические процессоры на видеокартах — Graphics Processing Unit (GPU) имеют возможность параллельных вычислений на большом количестве ядер. Параллельные расчеты выполнялись на графическом ускорителе GTX-580, имеющем 512 потоковых процессоров (ядер). Все ядра имеют доступ к относительно быстрой общей внутренней памяти объемом 1.5 Гигабайта. Алгоритм LBE включает в себя вычисления преимущественно в локальном узле расчетной сетки, за исключением переноса частиц и сил

взаимодействия между узлами, что позволяет его распараллелить на большое количество ядер с использованием технологии CUDA. При этом ускорение расчетов достигало 70-90 раз при вычислениях с двойной точностью по сравнению с одним ядром процессора Intel Core 2 Duo с частотой 3.3 ГГц. Для двумерных расчетов использовались сетки размерами до 2000×2000 , а для трехмерных — до $128 \times 128 \times 256$.

3. Моделирование распада бинарных смесей в сильных электрических полях методом решеточных уравнений Больцмана

В наших работах [1, 2] теоретически и в двумерных компьютерных экспериментах было обнаружено и исследовано новое ранее неизвестное явление – неустойчивость жидких диэлектриков в экстремальных электрических полях под действием сил электрострикции и последующий анизотропный распад на двухфазную систему нитевидных паровых каналов в жидкости, параллельных локальному вектору электрического поля.

Такой распад для жидких диэлектриков с нелинейной зависимостью диэлектрической проницаемости от плотности $\varepsilon(\rho)$ происходит в первоначально однородном электрическом поле E_0 из-за сил электрострикции

$$F_x = \frac{E_0^2 \rho}{8\pi} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial \rho^2} \right)_T \frac{\partial \rho}{\partial x}, \quad F_y = \frac{E_0^2 \rho}{8\pi} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial \rho^2} \right)_T \frac{\partial \rho}{\partial y}, \quad (3)$$

направленных перпендикулярно электрическому полю $E_z = E_0$ в сторону увеличения плотности, что может приводить к неустойчивости.

В данной работе проведено трехмерное моделирование этого эффекта. Для жидкого диэлектрика использовалось уравнение состояния Ван-дер-Ваальса в приведенных переменных $\tilde{P} = 8\tilde{\rho}\tilde{T}/(3 - \tilde{\rho}) - 3\tilde{\rho}^2$. На рис. 1 показана начальная стадия распада чистого диэлектрика, первоначально находившегося в жидкой фазе. При значениях электрического поля выше критического в жидкости формируются тонкие паровые каналы, ориентированные вдоль линий электрического поля.

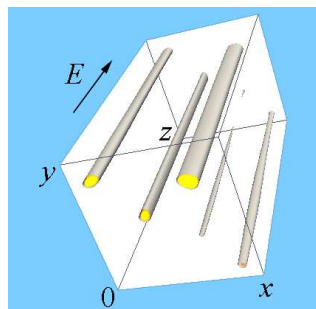


Рис. 1. Анизотропный распад чистого жидкого диэлектрика в электрическом поле на систему паровых каналов. Показано начало зарождения паровых каналов. $T = 0.9 T_{cr}$, $\tilde{\rho}_0 = 1.66$. Безразмерная величина квадрата электрического поля $\tilde{A} = E_0^2/(8\pi p_{cr}) = 60$. Расчетная область $128 \times 128 \times 256$ узлов.

Предварительные результаты (рис. 2,в), полученные в одномерном приближении, показали возможность аналогичных эффектов при распаде бинарных смесей жидких диэлектриков с растворенными в них газами. При этом значения критических полей оказались гораздо меньше, чем для чистых диэлектрических жидкостей.

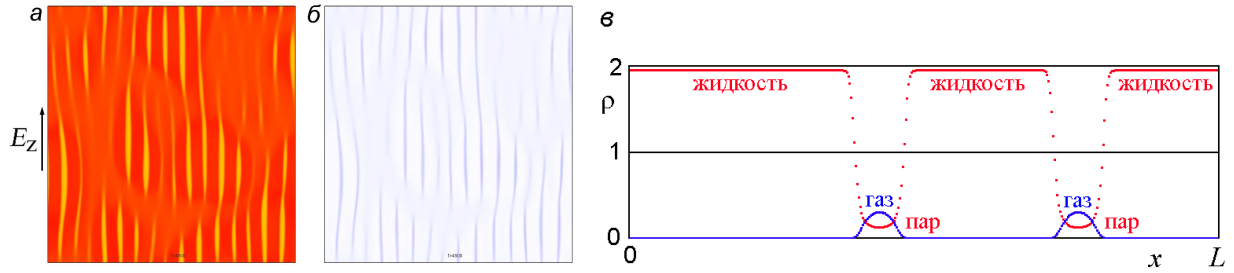


Рис. 2. Распад первоначально однородной бинарной смеси жидкого диэлектрика с растворенным газом на компоненты в сильном электрическом поле. (а) – плотность жидкого диэлектрика: красный цвет – жидкость, желтый цвет – пар. (б) – синим цветом показана плотность второго компоненте бинарной смеси – газа. Температура $\tilde{T} = 0.9$. Начальная плотность жидкого компонента $\tilde{\rho}_0 = 1.657$ соответствует кривой насыщения. Начальная относительная концентрация растворенного газа $q = 0.02$. $G = -0.02$, $\tilde{A} = 40$ (а,б), 27 (в). Сетка 800×800 .

В данной работе разработаны двухмерный и трехмерный варианты метода ЛВЕ для многокомпонентных сред, находящихся в электрическом поле, с возможностью фазового перехода жидкость–пар и с учетом зависимости растворимости компонентов от давления. Расчет электрического поля выполнялся с учетом изменения диэлектрической проницаемости бинарной среды во времени и в пространстве $\text{div}(\varepsilon \text{ grad } \varphi) = 0$. Использовалась нелинейная зависимость диэлектрической проницаемости диэлектрика от плотности для неполярных жидких диэлектриков $\varepsilon(\rho) = 1 + 3\alpha\rho/(1 - \alpha\rho)$.

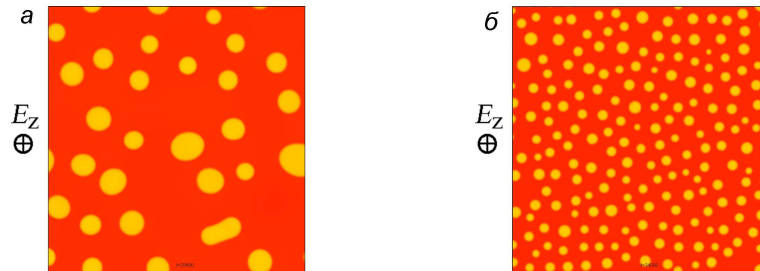


Рис. 3. Распад первоначально однородной бинарной смеси жидкость – газ на жидкость и парогазовые каналы, ориентированные вдоль электрического поля $E_z = E_0$ (показано сечение поперек поля). $\tilde{T} = 0.9$, $\tilde{\rho}_0 = 1.657$, $q = 0.02$, $G = -0.02$. $\tilde{A} = 27$ (а), 40 (б). Сетка 800×800 .

Пример распада первоначально однородной бинарной смеси “жидкий диэлектрик – растворенный газ” на компоненты под действием сильного электрического поля показан на рис. 2 и 3. При любом случайном возмущении пониженной плотности давление в этом месте уменьшается. При этом растворимость газа в жидком диэлектрике тоже уменьшалась, и происходило выделение газа, за счет чего еще более возрастал градиент плотности. Поэтому процесс выделения газа в виде парогазовых каналов носил взрывной характер. Парогазовые каналы расширяются как за счет диффузии растворенного газа из жидкости и испарения жидкого вещества внутрь каналов, так и за счет коалесценции каналов друг с другом (рис. 3,а). Из экспериментальных работ по пробою жидких диэлектриков известно, что чем больше электрическое поле, тем больше каналов стримеров образуются в том же объеме диэлектрика. Этот эффект хорошо моделируется и в наших расчетах. На рис. 3,б показан вариант расчетов, в которых

для заданного начального состояния бинарной смеси безразмерная величина квадрата электрического поля ($\tilde{A} = 40$) заметно выше критической ($\tilde{A}_{cr} = 25$).

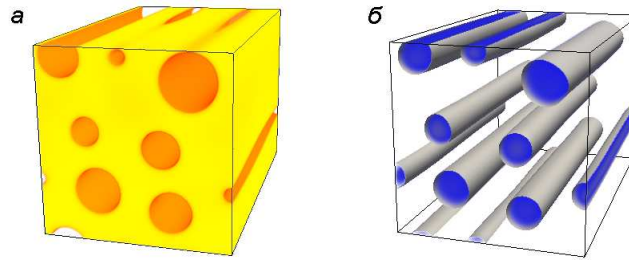


Рис. 4. Распад бинарной смеси в трехмерном электрическом поле. (а) – жидкий диэлектрик, (б) – газовые полости. $\tilde{T} = 0.9$, $\tilde{\rho}_0 = 1.66$, $q = 0.02$, $G = -0.02$, $\tilde{A} = 60$. Сетка $128 \times 128 \times 208$.

На рис. 4 показаны результаты трехмерных расчетов распада бинарной смеси в электрическом поле на компоненты – жидкий диэлектрик и парогазовые каналы, ориентированные вдоль электрического поля.

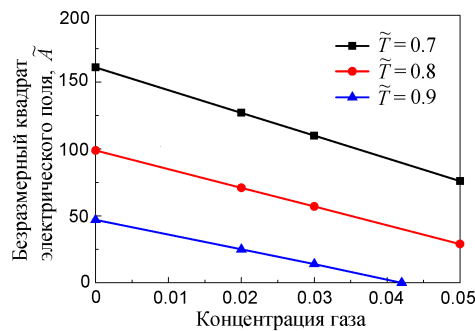


Рис. 5. Зависимость критических значений \tilde{A} от начальной концентрации растворенного газа q . Начальные состояния бинарной смеси при каждой температуре соответствуют состояниям жидкости на кривой насыщения. $G = -0.02$.

На рис. 5 показана зависимость безразмерной величины квадрата критической напряженности электрического поля, которая необходима для анизотропного распада бинарной системы “жидкий диэлектрик – растворенный газ” на компоненты (систему цилиндрических парогазовых каналов малой плотности в жидкости), от начальной концентрации растворенного газа q при разных температурах. Начальные состояния бинарной смеси при каждой температуре соответствуют состояниям жидкости на кривой насыщения: $\tilde{\rho}_0 = 2.14$ при $\tilde{T} = 0.7$, $\tilde{\rho}_0 = 1.93$ при $\tilde{T} = 0.8$, $\tilde{\rho}_0 = 1.66$ при $\tilde{T} = 0.9$. Показано, что критическая напряженность однородного электрического поля значительно уменьшается при увеличении концентрации растворенного газа (рис. 5) примерно линейно для модели $\psi(\rho) = \rho$. Это означает, что при учете влияния растворенных газов значения электрических полей, при которых возможен механизм развития и роста каналов стримеров в жидких диэлектриках путем анизотропного распада, значительно уменьшаются по сравнению с гомогенными диэлектриками.

Кроме того, чем ближе состояние смеси к критической точке ($\tilde{T} = 1$), тем меньше электрическое поле, необходимое для разделения бинарной смеси на компоненты (рис. 6). Первоначальные состояния выбирались для жидкости на кривой насыщения

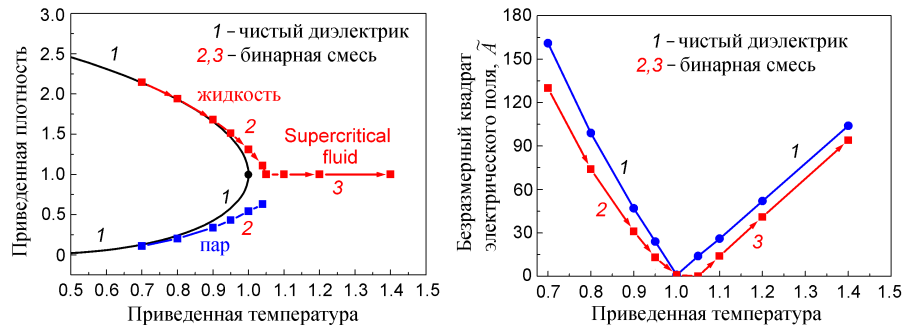


Рис. 6. (а) Кривые сосуществования фаз жидкость-пар для чистого жидкого диэлектрика (кривая 1) и для бинарной смеси жидкий диэлектрик – растворенный в нем газ (кривая 2). (б) Критические значения \tilde{A} для распада чистого диэлектрика (кривая 1) и для бинарной смеси (кривые 2 и 3).

($\tilde{\rho} > 1$) и в сверхкритических состояниях с плотностью $\tilde{\rho} = 1$ (рис. 6,а). На рис. 6,б показаны значения \tilde{A} , необходимые для распада при этих начальных состояниях (кривые 2 и 3). Для сравнения показаны результаты для чистого диэлектрика (кривая 1).

Список литературы

- [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. Vol. 74, N 2. 2006. P. 021505.
- [2] КАРПОВ Д.И., КУПЕРШТОХ А.Л. Анизотропный спинодальный распад полярного диэлектрика в сильном электрическом поле: метод молекулярной динамики // Письма в ЖТФ. 2009. Т. 35. Вып. 10. С. 87–94.
- [3] AN W., BAUMUNG K., BLUMH H. Underwater streamer propagation analyzed from detailed measurements of pressure release // J. Appl. Phys. 2007. Vol. 101, N 5. P. 053302.
- [4] KUPERSHTOKH A.L., KARPOV D.I. Simulation of ultra-fast streamer growth governed by the mechanism of anisotropic decay of a dielectric liquid into a liquid-vapor system in high electric fields // Proc. 5th Conf. SFE, Grenoble, France. 2006. P. 179–184.
- [5] MCNAMARA G.R., ZANETTI G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata // Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 61, N 20. P. 2332–2335.
- [6] HIGUERA F.J., JIMÉNEZ J. Boltzmann approach to lattice gas simulations // Europhys. Lett. 1989. Vol. 9, N 7. P. 663–668.
- [7] КУПЕРШТОХ А. Л. Моделирование течений с границами раздела фаз жидкость-пар методом решеточных уравнений Больцмана // Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”. 2005. Т. 5, № 3. С. 29–42.
- [8] 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.
- [9] KUPERSHTOKH A.L. Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // Computers and Mathematics with Applications, 2010. Vol. 59, N 7. P. 2236–2245.