

MPPE 2015

ХІ ПЭФЭГД 2015



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

29 июня – 3 июля 2015  
ПЕТЕРГОФ, РОССИЯ

11<sup>TH</sup> INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONFERENCE  
**MODERN PROBLEMS OF ELECTROPHYSICS AND  
ELECTROHYDRODYNAMICS**

JUNE 29 – JULY 3, 2015  
PETERHOF, RUSSIA

# Моделирование анизотропного распада жидкого диэлектрика в сильных электрических полях с реальной зависимостью диэлектрической проницаемости воды от плотности

А.Л. Куперштох<sup>1,2</sup>, Д.И. Карпов<sup>1,2</sup>, Д.А. Медведев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения РАН, Новосибирск, Россия

<sup>2</sup> Национальный исследовательский Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия  
e-mail: skn@hydro.nsc.ru

## Simulations of an anisotropic decay of dielectric liquid with real density dependence of permittivity of water under the action of strong electric fields

A.L. Kupershtokh<sup>1,2</sup>, D.I. Karpov<sup>1,2</sup>, D.A. Medvedev<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS, Novosibirsk, Russia

<sup>2</sup> National Research Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

**Abstract** — The static permittivity of water in supercritical region is calculated for a wide range of density using the molecular-dynamic simulations and the SPC/E model of water molecule. A lattice Boltzmann equation (LBE) method is used for computer modeling the anisotropic decay of water with solute gas to two-phase system liquid – gas. 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 necessary for decay of water with solute gas are considerably lower than for “pure” water.

**Keywords** — lattice Boltzmann method, phase transitions, molecular-dynamic method, permittivity, dynamics of multiphase media, computer simulations, parallel computations, graphics processing units.

### I. Введение

В общем случае объемная сила, действующая на диэлектрическую не содержащую свободных зарядов жидкость в электрическом поле, выражается формулой Гельмгольца [1]

$$\mathbf{F} = -\frac{\varepsilon_0 E^2}{2} \nabla \varepsilon + \frac{\varepsilon_0}{2} \nabla \left[ E^2 \rho \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right)_T \right]. \quad (1)$$

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 [2-4]. 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 (высокие скорости распространения стримерных каналов более 100 км/с, примерно цилиндрическую форму сегментов каналов, их ветвление и возникновение веера несветящихся каналов пониженной плотности вблизи острия с последующим пробоем одного из них).

Критическое значение электрического поля  $E_0$ , при котором происходит распад жидкого диэлектрика, определяется полученным в работе [2] уравнением для спинодали вещества в электрическом поле,

$$\left( \frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{\rho}} \right)_T = \frac{\varepsilon_0 E_0^2 \tilde{\rho}}{2P_{cr}} \left( \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial \tilde{\rho}^2} \right)_T, \quad (2)$$

Здесь  $\tilde{P} = P/P_{cr}$ ,  $\tilde{\rho} = \rho/\rho_{cr}$  и  $\tilde{T} = T/T_{cr}$  –

приведенные переменные, где  $P_{cr}$ ,  $\rho_{cr}$  и  $T_{cr}$  – значения давления, плотности и температуры в критической точке. Таким образом, возникновение спиноподобного распада определяется безразмерным параметром  $A = \varepsilon_0 E^2 / (2P_{cr})$ .

Экспериментальные данные о значениях диэлектрической проницаемости воды при разной плотности носят отрывочный характер, что делает невозможным вычисление второй производной  $(\partial^2 \varepsilon / \partial \rho^2)_T$ . В настоящей работе зависимость  $\varepsilon(\rho)$  получена в расчетах с использованием известной модели воды SPC/E.

## II. Расчет диэлектрической проницаемости воды методом молекулярной динамики

Разработан и реализован алгоритм вычисления статической диэлектрической проницаемости воды в широком диапазоне температур и плотностей. Алгоритм включает в себя: генерацию ансамбля молекул воды заданной плотности, расчет эволюции ансамбля при фиксированной температуре методом молекулярной динамики, обработку массива данных о координатах электрических зарядов атомов кислорода и водорода, расчет дипольного момента ансамбля  $M$  через равные промежутки времени, усреднение по времени дипольного момента ансамбля  $\langle M \rangle$  и вычисление средних по времени флуктуаций квадрата дипольного момента. Молекулярно-динамические расчеты выполнялись с помощью свободно распространяемого пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [5].

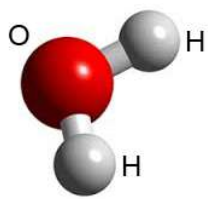


Рис. 1. Трехатомная модель молекулы воды для SPC/E.

Для описания молекулы воды использовалась модель SPC/E (рис. 1). Симметричное межмолекулярное взаимодействие описывалось потенциалом Леннарда-Джонса, центрированным на атоме кислорода (параметр взаимодействия 0.65 кДж/моль и параметр расстояния 0.3166 нм). Для описания кулоновского взаимодействия в центрах атомов водорода размещались положительные заряды 0.42 е, в центре атома кислорода – отрицательный

заряд 0.84 е. В проведенных нами расчетах длины связей О-Н и Н-Н, а также угол Н-О-Н, были фиксированы. Согласно [6], модель SPC/E значительно лучше описывает бинадаль для воды в области температур 300 К и выше, чем ряд других моделей (TIP4P, TIP5P, Dang-Chang).

Ансамбль молекул воды размещался в области, имеющей форму параллелепипеда. Использовались периодические граничные условия. На начальной стадии расчета ансамбль термализовался в течение 50000 шагов по времени. Расчет диэлектрической проницаемости ансамбля молекул воды характеризуется медленной сходимостью, поэтому моделирование проводилось для большого промежутка времени 50 нс ( $5 \cdot 10^6$  временных шагов). Расчеты выполнялись на кластере HP BL2x220c G7 Информационно-вычислительного центра Новосибирского государственного университета [7].

Значения диэлектрической проницаемости вычислялись по формуле [8,9]

$$\varepsilon - 1 = \frac{4\pi}{3VkT} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) + (\varepsilon_\infty - 1). \quad (3)$$

Выполнены расчеты статической диэлектрической проницаемости воды в закритической области температур для  $T = 670$  °К в диапазоне плотностей от 0.03 до 1.11 г/см<sup>3</sup>. Полученную зависимость диэлектрической проницаемости воды от плотности  $\varepsilon(\rho)$  (рис. 2) можно аппроксимировать формулой

$$\varepsilon = 1 + 11.25\rho + 14.05\rho^2 - 0.983\rho^3. \quad (4)$$

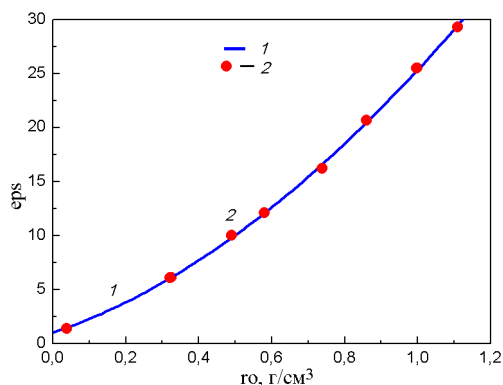


Рис. 2. 1 – зависимость диэлектрической проницаемости воды  $\varepsilon$  от плотности на изотерме  $T = 670$  °К. 2 – результаты расчетов.

Положительность второй производной  $(\partial^2 \varepsilon / \partial \rho^2)_T$  в рассматриваемом диапазоне плотностей означает возможность анизотропного спиноподобного распада при воздействии достаточно сильного электрического поля.

### III. Метод решеточных уравнений Больцмана

Для компьютерного моделирования эволюции систем с границами раздела фаз жидкость-пар используется метод решеточных уравнений Больцмана (LBE) [4,10,11]. Метод LBE рассматривает течение флюида как движение ансамбля псевдо-частиц, имеющих некоторую функцию распределения по дискретным скоростям  $\mathbf{c}_k$ .

Уравнения эволюции для функций распределения  $N_k^{s,\sigma}$  каждого из компонентов  $s$  и  $\sigma$  имеют вид [4,10]

$$N_k^{s,\sigma}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k^{s,\sigma}(\mathbf{x}, t) + \Omega_k^{s,\sigma} + \Delta N_k^{s,\sigma}, \quad (5)$$

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

$\Delta N_k^{s,\sigma} = N_k^{eq}(\rho^{s,\sigma}, \mathbf{u}^{s,\sigma} + \Delta \mathbf{u}^{s,\sigma}) - N_k^{eq}(\rho^{s,\sigma}, \mathbf{u}^{s,\sigma})$  – изменения функций распределения за счет действия объемных сил [11]. Компьютерное моделирование фазовых переходов методом решеточных уравнений Больцмана представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз [4,10,11].

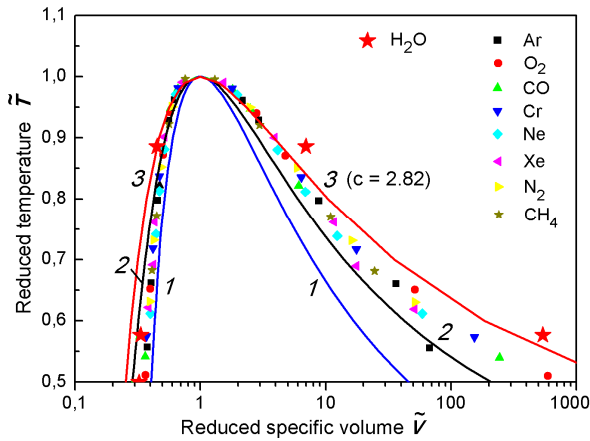


Рис. 3. Сравнение расчетов кривой сосуществования фаз по УС Ван-дер-Ваальса (1), Карнахана–Старлинга (2) и Каплуна – Мешалкина – Куперштоха (3) с экспериментальными данными для ряда веществ.

Для описания фазовых переходов жидкость-пар использовалось уравнение состояния (УС) Каплуна–Мешалкина [12]. Это УС было модифицировано нами в работе [10] так, чтобы возможно точнее описать кривую сосуществования фаз в окрестности критической точки. В приведенных переменных оно имеет вид

$$\tilde{P} = c\tilde{T}\tilde{\rho} \left( 1 + \frac{d}{1/\tilde{\rho} - b} \right) - a\tilde{\rho}^2. \quad (6)$$

Свободный параметр был выбран равным  $c = 2.82$ , а выражения для коэффициентов  $b = 3 - c$ ,  $a = 1/b$  и  $d = (12c - 6c^2 + c^3 - 8)/(cb)$  найдены согласно трем условиям в критической точке  $\tilde{P} = 1$ ,  $(\partial \tilde{P} / \partial \tilde{\rho})_T = 0$  и  $(\partial^2 \tilde{P} / \partial \tilde{\rho}^2)_T = 0$ . Уравнение состояния (6) лучше описывает экспериментальные точки на кривой сосуществования фаз для воды (рис. 3), чем уравнения состояния Ван-дер-Ваальса и Карнахана–Старлинга.

Расчет электрического поля  $\mathbf{E} = -\text{grad}\phi$  выполнялся с учетом изменения диэлектрической проницаемости среды во времени и в пространстве

$$\text{div}(\varepsilon \text{grad}\phi) = 0. \quad (7)$$

Уравнение (6) 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 распада жидких диэлектриков в сильных электрических полях

Используя метод решеточных уравнений Больцмана и полученные данные (4) о зависимости диэлектрической проницаемости воды  $\varepsilon(\rho)$ , выполнено моделирование спиноподобного распада в сильном электрическом поле. Для чистого диэлектрика с температурой выше критической  $T = 1.035 T_{cr}$  получены пороговые значения напряженности поля анизотропного распада (рис. 4 и рис. 5) при начальных значениях приведенной плотности от 0.5 до 2. Результаты расчетов хорошо совпадают с формулой (2). При плотности флюида  $\tilde{\rho} = 1.4$  критическое значение поля  $E_0 \sim 10$  МВ/см.

Проведены расчеты по анизотропному распаду бинарной смеси диэлектрика с растворенным газом при  $T = 1.035 T_{cr}$  (рис. 4 и рис. 5). Показано, что для полученной зависимости  $\varepsilon(\rho)$  добавление 1% растворенного газа в флюид плотности  $\tilde{\rho} = 1.4$



снижает напряженность поля пробоя примерно в 2 раза до  $\approx 4$  МВ/см.

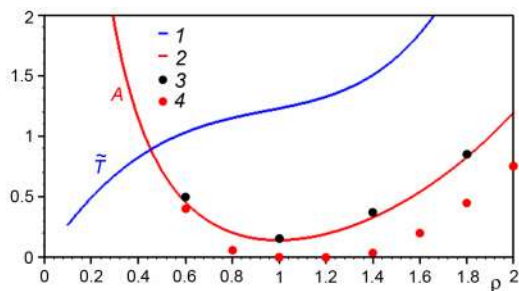


Рис. 4. 1 – Изотерма воды  $T = 1.035T_{cr}$  для уравнения состояния Каплуна–Мешалкина–Куперштоха. 2 – Критические значения безразмерного параметра  $A$  по уравнению (2). 3 и 4 – результаты моделирования методом LBE без газа и с газом, соответственно.

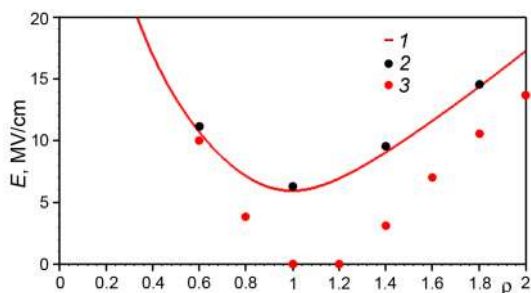


Рис. 5. Значения критического электрического поля в МВ/см, необходимые для спиноподобного распада “чистой” воды при  $T = 1.035T_{cr}$ . 1 – теоретическая формула (2), 2 – значения, полученные при моделировании методом LBE. 3 – то же при наличии растворенного газа.

На рис. 6 показаны результаты трехмерного моделирования распада жидкого диэлектрика с растворенным в нем газом на систему парогазовых каналов в жидкости. Парогазовые каналы расширяются за счет испарения жидкого диэлектрика и за счет диффузии растворенных газов. Кроме того, происходит коалесценция каналов между собой.

## VI. Заключение

Методом молекулярной динамики получена зависимость диэлектрической проницаемости воды в закритической области при  $T = 1.035T_{cr}$  в широком диапазоне плотностей. Показано, что уравнение состояния Каплуна – Мешалкина – Куперштоха удовлетворительно описывает кривую сосуществования фаз воды. Вычислены критические значения напряженности электрического поля, при которых возможен анизотропный спиноподобный распад “жидкость-пар”. Показано, что для закритической области температур напряженность однородного электрического поля, достаточного для

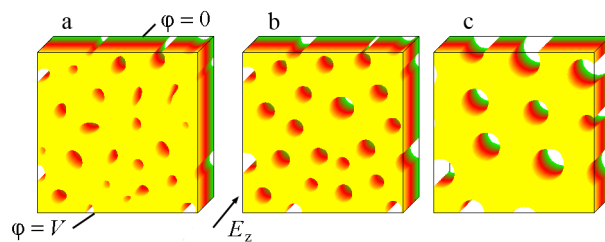


Рис. 6. Спиноподобный распад смеси жидкости с растворенным газом (1%) в электрическом поле.  $\tilde{T} = 1.035$ ,  $\tilde{\rho}_0 = 1.4$ ,  $A = 0.35$ ,  $t = 4500$  (a),  $7100$  (b),  $100000$  (c). Сетка  $256 \times 256 \times 64$ .

анизотропного распада диэлектрика, значительно уменьшается при наличии в воде растворенного газа.

## Благодарности

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

## Литература

- [1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. – М.: Гос. изд-во физ.-мат. литературы, 1959. 532 с.
- [2] 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.
- [3] Карпов Д.И., Куперштох А.Л. Анизотропный спиноподобный распад полярного диэлектрика в сильном электрическом поле: метод молекулярной динамики // Письма в ЖТФ. 2009. Т. 35. Вып. 10. С. 87–94.
- [4] 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.
- [5] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. <http://lammps.sandia.gov>.
- [6] Yoo S., Zeng X.C. Monte Carlo simulation of vapor-liquid binodal of water // J. Chem. Phys. 2002. Vol. 117, No. 2. P. 9518–9519.
- [7] Информационно-вычислительный центр (ИВЦ) Новосибирского государственного университета. <http://www.nusc.ru>.
- [8] Lomba E., Lombardero M. New aspects in the simulation and behavior of polar molecular fluids // Molecular Physics. 1989. Vol. 68, N 5. P. 1067–1078.
- [9] Caillol J.M., Levesque D., Weis J.J., Perkyns J.S., Patey G.N. A theoretical study of a polar-polarizable model for liquid ammonia // Molecular Physics. 1987. Vol. 62, N 5. P. 1225–1238.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] Каплун А.Б., Мешалкин А.Б. О термодинамическом обосновании формы единого уравнения состояния жидкости и газа // ТВТ. 2003. Т. 41, № 3. С. 373–380.