УДК 536.4.032, 538.93, 537.528

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СРЕДЫ В ЭКСТРЕМАЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Карпов Д.И.

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 13-08-00763) и СО РАН (интеграционный проект №79).

АННОТАЦИЯ

В работе реализован метод молекулярной динамики с учетом электрических сил для расчета поведения жидкого диэлектрика в сильном электрическом поле. Исследовалось поведение полярных диэлектриков в сильных электрических полях. Для ускорения расчетов в 40-50 раз разработана программа для параллельных вычислений на графических сопроцессорах фирмы NVIDIA. Применялась технология программирования CUDA. Проведен расчет анизотропного спинодального распада полярного диэлектрика под действием сильного электрического поля для большого ансамбля молекул. Рассчитана область влияния иона в жидкой среде на полярные молекулы среды в зависимости от плотности диэлектрика. Рассчитаны распределения электрического потенциала в среде вблизи иона при разных значениях плотности среды. Глубина потенциальной ямы вблизи иона уменьшается с плотностью среды. Полученные результаты важны для понимания механизмов возникновения гидродинамических течений при электрическом разряде в жидком диэлектрике.

ВВЕДЕНИЕ

Процессы проводимости в жидких и плотных газообразных средах, и, в частности, явление электрического пробоя в этих физических системах, тесно связаны с развитием в них электрогидродинамических (ЭГД) течений. Исследование ЭГД течений помимо фундаментального научного интереса обусловлено также возможностью использования их на практике (в частности, при проектировании микродозаторов, ЭГД насосов и др.) Развитие течений под действием электрических сил возникает как в электролитах, так и в диэлектрических жидкостях. В первом случае причиной движения является движение ионов, увлекающих за собой слои жидкости. Во втором – объемные силы, действующие на дипольные молекулы в неоднородном электрическом поле. В реальной жидкости (не модельной), как правило, присутствуют и полярные молекулы и ионы.

Длина свободного пробега электронов в жидкости мала, поэтому возникновение электрического пробоя жидких диэлектриков невозможно объяснить ударной ионизацией и возникновением электронных лавин. Другой путь зарождения электрического пробоя связан с возникновением в жидкости локальных областей паровой фазы, в которых происходит электрический газовый разряд. При этом пузырьки газа могут либо присутствовать на электродах и в объеме жидкости изначально, либо возникать после подачи напряжения.

В настоящее время известно три основных механизма возникновения в жидкости паровой фазы под действием сильных электрических полей:

Тепловой механизм фазового перехода из-за локального нагрева вещества ионным электрическим током. Фазовый переход из-за локального понижения давления вблизи электродов под действием электростатических сил, действующих на инжектированные электрические заряды (электродинамическая кавитация). Анизотропная неустойчивость с последующим распадом на систему паровых каналов в жидкости, ориентированных в среднем вдоль поля, из-за действия сил электрострикции, разрывающих жидкость в перпендикулярном полю направлении [1].

Обычные континуальные подходы не позволяют детально исследовать такие процессы на микро- и наноуровнях. Наиболее адекватным инструментом для изучения перечисленных механизмов и выявления новых процессов является метод молекулярной динамики. К настоящему моменту имеется лишь несколько работ, в которых для исследования электрогидродинамических микротечений применялся метод молекулярной динамики, или его комбинация со стандартными конечно-разностными методами (гибридный метод) [2].

Главным препятствием для применения метода МД к описанию течений является ограничение вычислительных мощностей. Еще 4-5 лет назад в среднем по сложности МД-расчете было возможно рассчитать ансамбль ~ 10^6 частиц. При учете электрических сил это количество уменьшалось еще более чем на порядок. При этом удавалось проследить эволюцию ансамбля на временах ~ 1 нс или менее. В настоящее время, с появлением высокопроизводительных графических карт для физических расчетов появилась возможность моделировать поведение значительно больших ансамблей на более длительных интервалах времени.

В работе [3] методом молекулярной динамики был рассчитан анизотропный спинодальный распад в сильном электрическом поле для ансамбля ~ 1000 частиц. Этого количества явно недостаточно для понимания динамики распада. Поэтому в настоящей работе реализован метод молекулярной динамики с учетом электрических сил в полярных диэлектриках в сильных электрических полях для параллельных расчетов на графических сопроцессорах фирмы NVIDIA, что позволило существенно увеличить скорость расчета и размер ансамбля. При разработке кода применялась технология CUDA. Кроме того, для модельной системы исследована область влияния иона на молекулы полярного диэлектрика. Постановки предлагаемых задач сформулированы впервые.

ПРОГРАММИРОВАНИЕ НА GPU

Графические процессоры на видеокартах – Graphics Processing Unit (GPU) имеют возможность параллельных вычислений на большом количестве ядер.

Значительное ускорение вычислений на GPU обусловлено: большим количеством ядер GPU; тем, что 80 % электронных компонентов внутри GPU специализированы только для вычислений (у CPU вычислительная часть – всего ~ 20 %); высокой скоростью обмена данными с внутренней памятью GPU (~ 10 раз выше скорости обмена данными CPU с оперативной памятью) и другими.

В нашей работе параллельные расчеты выполнялись на графическом ускорителе GTX-580, имеющем 512 потоковых процессоров (ядер). Все ядра имеют доступ к относительно быстрой общей внутренней памяти объемом 3 ГБ. Распараллеливание основано на создании сотен миллионов потоков, каждый их которых осуществляет относительно простые вычисления для каждой частицы ансамбля.

Большая часть времени в МД-моделировании тратится на расчет парных взаимодействий. Число пар частиц равно $N(N-1)/2$ (N – число частиц в системе), тогда как число операций для интегрирования уравнений движения пропорционально N. При расчете парных дальнодействующих сил параллельно (в отдельном потоке) вычисляются силы для каждой частицы, то есть двойной цикл вычислений парных взаимодействий превращается в одинарный. Таким образом, при линейном расчете время вычислений увеличивается пропорционально квадрату N, а при использовании параллельных вычислений – пропорционально N.

Для достижения высокой производительности достаточно реализовать параллельный расчет сил. Первое упоминание расчета парных межчастичных взаимодействий на графических процессорах относится к 2004 г. [4].

В настоящий момент имеются специализированные пакеты для молекулярно-динамических расчетов, например [5]. Однако, для целей предлагаемой работы пакеты требуют специальной адаптации, по затратам сравнимые с разработкой собственной программы.

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ЖИДКОСТЬ – ПАР В ОДНОРОДНОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Создана программа для расчета эволюции больших двумерных ансамблей дипольных молекул методом молекулярной динамики (микроскопический подход). Алгоритм парал-

лельных вычислений реализован на графических процессорах (GPU) GTX-580 по технологии CUDA.

Молекулы представляли собой сферические частицы. Молекулярное взаимодействие моделировалось потенциалом Леннарда-Джонса. Для учета электрических взаимодействий внутрь каждой молекулы помещалась пара зарядов одинаковой величины и разного знака. Дипольные взаимодействия молекул рассчитывались с использованием двумерного кулоновского потенциала для каждой пары зарядов разных молекул. В расчетах за единицу длины принят радиус молекулы, за единицу массы – масса молекулы, за единицу энергии – энергия взаимодействия в потенциале Леннарда-Джонса. Единицы измерений остальных величин были производными от длины, массы, энергии взаимодействия.

С использованием графических процессоров смоделирован анизотропный распад двумерного ансамбля дипольных молекул на жидкость и паровые каналы на новом уровне масштабов. Размер ансамбля частиц увеличен в ~ 10 раз по сравнению с расчетами на CPU. В частности, это позволило более подробно наблюдать процесс формирования разрыва сплошности в диэлектрической жидкости после приложения экстремально сильного электрического поля.

После установления теплового равновесия в ансамбле (порядка 100 000 шагов по времени) на электроды подавалось постоянное во времени напряжение. Его действие сводилось к возникновению пары сил, действующих на каждую дипольную молекулу. Молекулы ориентировались вдоль поля. На микроскопическом уровне в плотной части они выстаивались вдоль электрического поля таким образом, чтобы отрицательные хвост одного диполя находился рядом с положительным хвостом другого диполя. Там, где это происходило, возникало уплотнение среды. При этом в других участках среда становилась более разреженной и в сильных полях возникали полости.

На рис. 1 представлен кадр, на котором показано состояние диэлектрической жидкости через некоторое время после подачи напряжения. В жидкости под действием растягивающих напряжений возникают небольшие каверны, вытянутые вдоль поля. Затем часть из них объединяется, формируя большую вытянутую полость. По сути, образование и рост каналов в жидком диэлектрике под действием поля напоминает формирование трещин в твердом теле.

Согласно расчету, время формирования микрополостей по механизму анизотропного распада ~ 0.1 нс. Рост полости сопровождается также ее расширением, генерирует волну сжатия в жидкости и гидродинамическое течение. В полости, также как и в жидкости, существует сильное электрическое поле ~ 10 МВ/см. Этого поля недостаточно для возникновения разряда в жидкости в силу большой плотности среды. В газовом же канале возможен газовый разряд. В настоящее время нет данных, позволяющих сделать оценку, при какой плотности и за какое время в развивающейся полости произойдет электрический пробой газа. Эстраполяция из области низких полей дает времена не более 1 нс. Рассмотренные механизм может объяснить формирование быстрых стримеров (скорость продвижения вершины – более 100 км/с) в жидких диэлектриках в сильных электрических полях.

Использование графических процессоров позволило увеличить скорость расчетов в 40-50 раз. Таким образом, использование графического процессора подтверждает выводы о возможности анизотропного спинодального распада под действием сильного электрического поля на примере достаточно большого ансамбля молекул.

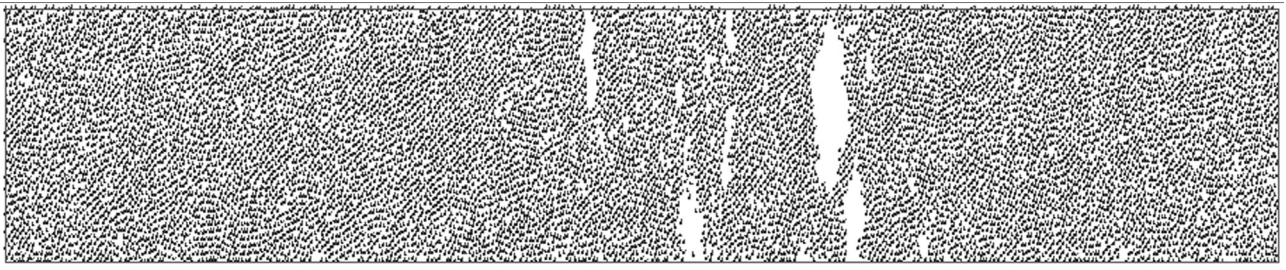

Рис.1 Ансамбль 11000 частиц. Формирование паровых каналов в экстремально сильном электрическом поле.

ОБЛАСТЬ ВЛИЯНИЯ ИОНА В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЖИДКОСТИ

В электрических полях ~ 1 МВ/см развиваются медленные структуры разряда – оптически плотные сплошные образования с нерегулярной границей, возникающие на электроде. Они развиваются со скоростями от ~ 100 м/с до ~ 1 км/с и представляют собой расширяющиеся газовые полости. В [6] выполнено моделирование роста газовых полостей в электрическом поле. Было показано, что динамика роста полости в электрическом поле и развитие гидродинамических течений определяются поведением ионов, внедренных в жидкость вблизи границы пар-жидкость. Поэтому представляет интерес исследовать движение иона, помещенного в жидкую среду, под действием электрического поля.

На основе молекулярно-динамических расчетов исследованы размеры зоны влияния иона на соседние дипольные молекулы среды и микроструктура окружения иона при разных значениях плотности среды. Смоделировано образование потенциальной ямы вокруг положительного иона вследствие поляризации среды под действием поля иона. Глубина ямы уменьшается с уменьшением плотности среды.

Для исследования размеров зоны влияния иона на соседние дипольные молекулы среды и микроструктуру окружения иона в среду дипольных молекул помещался один положительный ион.

Ориентация диполей вблизи иона определяется электрическим полем иона, которое радиально, и взаимодействием с диполями-соседями. В среднем дипольные молекулы при положительном заряде иона направлены радиально от центра иона (рис. 2). Это особенно заметно для ближайших соседей.

После установления теплового равновесия в ансамбле (порядка 100 000 шагов по времени) выполнялся расчет корреляционной функции ориентации дипольных моментов молекул с направлением на ион $\gamma(r)$, которая имеет вид:

$$\gamma(r) = \frac{1}{2\pi r\, n(r)} \sum_{i=0}^{n(r)} (\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}_i), \qquad (1)$$

где r – расстояние от иона, суммирование берется по всем диполям, содержащимся в тонком слое на расстоянии от r до $(r+\Delta r)$ от иона, $\mathbf{r}_i$ – радиус-вектор, соединяющий ион с частицей с номером i, $\mathbf{p}_i$ – дипольный момент i-ой частицы.

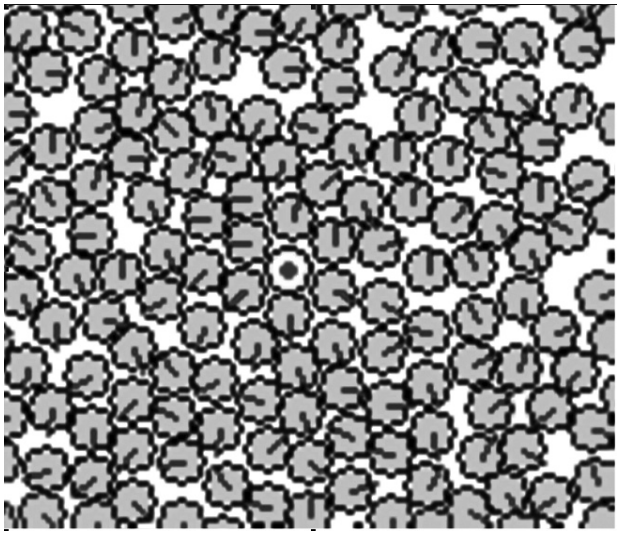

Рис.2 Ориентация диполей (стрелки) в среде дипольных молекул (темные кружки) вблизи иона (светлый кружок с точкой).

При вычислении $\gamma(r)$ наблюдаются очень сильные флуктуации ее значений во времени. Поэтому, для получения корреляционной зависимости рассчитанные значения (1) усреднялись на интервалах времени, соответствующих ~ 400 000 шагам моделирования.

График корреляционной функции – спадающая кривая с максимумом вблизи иона. Форма графика хорошо аппроксимируется экспонентой вида:

$$f(r) = A\exp(-r/\Delta_r) + B. \qquad (2)$$

Параметр Δ_r характеризует область влияния иона на дипольные молекулы среды. В этой области ориентация дипольных молекул зависит в основном от электрического поля иона.

Например, при плотности $\rho = 0.549$ влияние иона уменьшается на расстояниях ~ 3 – 4 диаметра молекулы (30 – 50 дипольных молекул). Можно ожидать, что при воздействии внешнего не слишком сильного электрического поля подвижность иона будет отчасти ограничиваться движением этой оболочки как целого кластера.

Для получения зависимости характерной области влияния иона на ориентацию диполей от плотности расчеты корреляционной функции были выполнены 3-4 раза для каждого значения плотности. Затем рассчитывалась средняя корреляционная функция, кото-

рая аппроксимировалась формулой (2), и вычислялся параметр Δ_r .

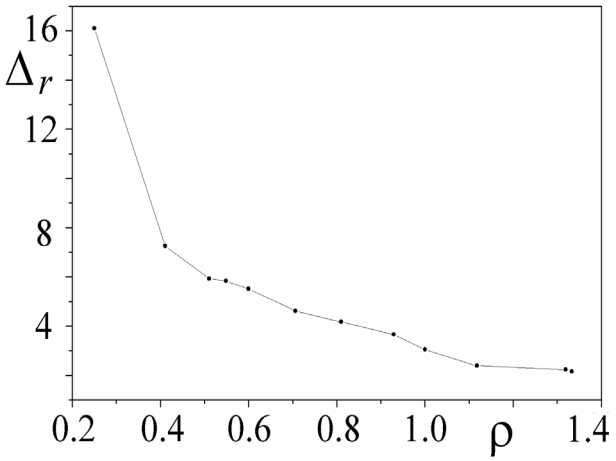

Рис.3 Зависимость от плотности среды. За единицу расстояния принят радиус иона.

Зависимость Δ_r от плотности среды представлена на рис. 3. Расчеты показывают, что область влияния иона заметно уменьшается при увеличении плотности среды. В более плотной среде поворот молекулы под действием электрических сил затруднен вследствие более сильного взаимодействия ее дипольного момента с моментами окружающих ее молекул.

Рассчитана зависимость потенциала электрического поля от расстояния от иона. Вследствие сильных флуктуаций плотности вблизи иона электрическое поле также сильно флуктуирует. Вычислялись средние значения потенциала в зависимости от расстояния от иона для заданного набора расстояний. На каждом шаге по времени осуществлялось усреднение по углу. Также выполнялось усреднение по времени значений потенциала для каждого из расстояний (на промежутке времени, соответствующем 400 000 шагов по времени).

На рис. 4 представлена зависимость потенциала электрического поля от расстояния от иона. Чем выше плотность, тем глубже минимум потенциала вблизи иона. Глобальный и локальные минимумы функции $\varphi(r)$ на рис. 2 возникают в областях с избытком отрицательного заряда, максимумы – положительного. Вблизи иона образуется потенциальная электростатическая яма, глубина которой уменьшением с уменьшением плотности среды.

Таким образом, в двумерной постановке смоделировано образование потенциальной ямы вблизи иона в плотной среде дипольных молекул. Определена область влияния иона на ближайшее окружение, в частности на ориентацию дипольных молекул по направлению к иону.

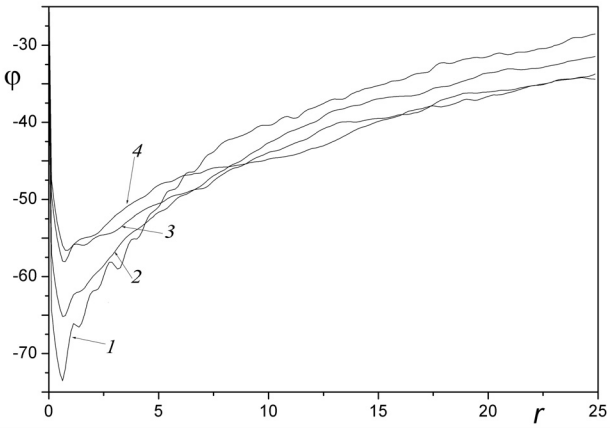

Рис.4 Распределение электрического поля в зависимости от расстояния от иона при 4 значениях относительной плотности: 1 – $\rho = 1.1$, 2 – $\rho = 0.929$, 3 – $\rho = 0.705$, 4 – ρ=0,52. За единицу расстояния принят радиус иона.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, выполнены расчеты анизотропного спинодального распада жидкого полярного диэлектрика на систему паровых каналов в жидкости под действием электрического поля методом молекулярной динамики для большого ансамбля молекул. Показано, что развитие каналов напоминает формирование трещин в твердом теле. Также исследована область влияния иона на дипольные молекулы в диэлектрике в зависимости от плотности среды. Полученные результаты важны для понимания процессов развития гидродинамических течений при электрическом пробое жидких диэлектриков.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kupershtokh A. L. and Medvedev D. A. (2006). "Anisotropic instability of a dielectric liquid in a strong uniform electric field: Decay into a two-phase system of vapor filaments in a liquid", *Physical Review E*, V. 74, no. 2, pp. 021505(1-5).
2. Jie Sun, Ya-Ling He, and Wen-Quan Tao (2012). "Molecular dynamics–continuum hybrid simulation for condensation of gas flow in a microchannel", *Microfluidics and Nanofluidics*; V. 7, no. 3, pp. 407-422.
3. Karpov D. I., Kupershtokh A. L. (2009) "Anisotropic spinodal decay of polar dielectric in strong electric field: method of molecular dynamics", *Technical Physics Letters*, V. 35, no. 5, pp. 479-482.
4. Buck, I., Rangasayee, V., Darve, E., Pande, V., and Hanrahan, P. "Accelerating molecular dynamics with GPUs". *Proceedings of ACM Workshop on General Purpose Computing on Graphics Processors*, (http://www.cs.unc.edu/Events/Conferences/GP2/proc.pdf)
5. Anderson, J. A., Lorenz, C. D., and Travesset A. (2008). "General purpose molecular dynamics simulations fully implemented on graphics processing units", *Journal of Computational Physics,* V. 227, no.10, pp. 5342-5359.
6. Kupershtokh, A. L., Karpov, D. I., Medvedev, D. A., Stamatelatos, C., Charalambakos, V.P., Pyrgioti, E. C., and Agoris D. P. (2007). "Stochastic models of partial discharge activity in solid and liquid dielectrics". *IET Sci. Meas. Technol.*, V. 1, no. 6, pp. 303-311.

© Карпов Д.И.