

Компьютерная графика в моделировании газоразрядной плазмы

В.П. Будак¹, И.И. Железнов¹

¹ НИУ «МЭИ», Красноказарменная ул., 13, Москва, 111250, Россия

Аннотация

В настоящей статье обсуждается значимость развития программно-аппаратных комплексов для визуализации данных и улучшения алгоритмов их представления при моделировании излучения низкотемпературной газоразрядной плазмы и связанных с ним физических процессов. Рассматриваются проблемы создания специализированной распределенной среды для решения задач по моделированию газового разряда. Визуализация с помощью компьютерной графики позволила наглядно оценивать полученные данные и вносить необходимые коррективы в процессе построения сетки в режиме взаимодействия. В работе представлены результаты визуализации самосогласованной модели ртутно-аргоновой плазмы в коаксиальном СВЧ разряде. Применение локальных сечений расчетной области визуализации позволило выявить внутреннюю структуру и особенности распределения электрического поля и концентрации электронов в разрядной трубке. Полученные данные легли в основу оптимизации конструкции коаксиального газоразрядного источника бактерицидного УФ излучения.

Ключевые слова

Визуализация данных, моделирование низкотемпературной плазмы, газоразрядная плазма.

Computer Graphics in the Simulation of Gas-discharge Plasma

V.P. Budak¹, I.I. Zheleznov¹

¹ NRU "MPEI", Krasnokazarmennaya str., 13, Moscow, 111250, Russia

Abstract

This article discusses the importance of the development of specialized software and hardware complexes for data visualization and improvement of algorithms for their representation in the simulation of low-temperature gas-discharge plasma radiation and related physical processes. The problems of creating a specialized distributed environment for solving problems of modeling a gas discharge are considered. Visualization using computer graphics made it possible to visually evaluate the data obtained and make the necessary adjustments in the process of constructing the grid in the interaction mode. The paper presents the results of visualization of a self-consistent model of mercury-argon plasma in a coaxial microwave discharge. The use of local cross-sections of the computational visualization area made it possible to reveal the internal structure and features of the distribution of the electric field and the concentration of electrons in the discharge tube. The obtained data formed the basis for optimizing the design of a coaxial gas-discharge source of bactericidal UV radiation.

Keywords

Data visualization, simulation of low-temperature plasma, gas-discharge plasma.

ГрафиКон 2023: 33-я Международная конференция по компьютерной графике и машинному зрению, 19-21 сентября 2023 г., Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова Российской академии наук, г. Москва, Россия

EMAIL: budakvp@gmail.com (В.П. Будак); zheleznov96y@gmail.com (И.И. Железнов)

ORCID: 0000-0003-4750-0160 (В.П. Будак); 0009-0004-8875-2991 (И.И. Железнов)



© 2023 Copyright for this paper by its authors.

Use permitted under Creative Commons License Attribution 4.0 International (CC BY 4.0).

1. Введение

Моделирование процессов излучения в газоразрядной плазме играет важную роль во многих научно-технических исследованиях. В частности, в медицинских приложениях низкотемпературная газоразрядная плазма используется для обеззараживания воздушно-водной среды. Такое применение плазмы основано на ее способности уничтожать микроорганизмы, такие как бактерии, вирусы и грибки. При этом газоразрядная плазма генерирует различные виды излучения, включая ультрафиолетовое (УФ), озон и различные активные частицы. Эти компоненты играют ключевую роль в процессе обеззараживания и уничтожении патогенных организмов [1].

Процесс визуализации данных при моделировании излучения низкотемпературной газоразрядной плазмы представляет собой задачу, предполагающую учет уникальных характеристик данного состояния материи и требующую тщательного регулирования визуального отображения полученных результатов. В отличие от аналогичных задач, связанных с более высокими температурами плазменных состояний, такими как плазма в солнечной короне или в установках типа токамак, где тепловое движение частиц играет более существенную роль, низкотемпературная газоразрядная плазма обладает более выраженной химической активностью и взаимодействием с нейтральными атомами и молекулами.

Следовательно, для успешной визуализации данных данного процесса требуется использование специализированных методов, способных учитывать уникальные характеристики низкотемпературной плазмы и передавать информацию о молекулярных и химических взаимодействиях, которые играют значимую роль в этом контексте:

1. *Колориметрия и контурные диаграммы*: такой подход опирается на использование разнообразных цветов и цветовых шкал для демонстрации параметров плазмы. Таким образом можно визуализировать, например, интенсивность излучения или плотность частиц. Применение контурных диаграмм позволяет выделить линии, обозначающие постоянные значения параметров, что способствует обнаружению структур и закономерностей.
2. *Изолинии и изосеры*: в этом методе используются изолинии – кривые, соединяющие точки с одинаковыми значениями параметров. Изосеры, в свою очередь, представляют заштрихованные области между изолиниями, которые окрашиваются в зависимости от уровня параметра. Данный метод позволяет выявлять градиенты и изменения в параметрах плазмы.
3. *Объемная визуализация (3D визуализация)*: для более глубокого понимания структуры плазмы используется объемная визуализация. Она предоставляет возможность наблюдать структуры в трехмерном пространстве и взаимодействовать с ними.
4. *Анимация и временная визуализация*: в случае, если моделирование плазмы охватывает временную динамику, анимации становятся информативными. Такой подход позволяет следить за изменением параметров плазмы во времени и выявлять динамические процессы.

При использовании этих методов для визуализации плазменных процессов исследователи сталкиваются с многочисленными проблемами и ограничениями:

- **Высокая сложность моделирования**: газоразрядная плазма является сложной системой, которая включает в себя множество взаимодействующих частиц, энергетических процессов и химических реакций. Моделирование такой плазмы требует учета всех этих факторов, что может быть трудоемкой задачей. Необходимость учесть широкий спектр переходов и взаимодействий между различными компонентами плазмы усложняет моделирование и требует высокой вычислительной мощности.
- **Ограничения баз данных**: для моделирования процесса излучения необходимы базы данных по спектрам излучения различных элементов и молекул, присутствующих в плазме. Однако, данные могут быть неполными или недоступными для некоторых элементов или условий плазмы, что приводит к снижению точности и достоверности моделирования.

- Учет трехмерной геометрии: газоразрядная плазма часто имеет сложную трехмерную геометрию, такую как разрядные камеры или электроды. Учет такой геометрии в моделировании и визуализации может быть сложной задачей и требует использования соответствующих алгоритмов трехмерной компьютерной графики.
- Ограничения вычислительных ресурсов: моделирование и визуализация процессов излучения в газоразрядной плазме требуют значительных вычислительных ресурсов. Расчеты могут быть времязатратными, особенно при использовании высокоразрешенных трехмерных моделей и сложных алгоритмов трассировки лучей. Ограничения вычислительных мощностей могут сказаться на точности моделирования и времени получения результатов.
- Валидация моделей: визуализация процессов излучения и поглощения в плазме требует валидации моделей. Проверка точности моделей может быть сложной задачей, поскольку экспериментальные данные могут быть ограниченными или труднодоступными. Поэтому необходимо устанавливать адекватность моделей и сравнивать результаты с имеющимися экспериментальными данными [2].

Принимая во внимание все эти аспекты, особенности визуализации данных при моделировании излучения низкотемпературной газоразрядной плазмы заключаются в разработке специальных методов и инструментов, которые учитывают уникальные характеристики данного типа плазмы. Такие методы и инструменты позволяют исследователям осуществлять полноценный анализ и взаимодействие с полученными вычислительными результатами. Поэтому с постоянным развитием компьютерных технологий и улучшением физических моделей, выше оговоренные проблемы могут быть преодолены, позволяя получать более точные и реалистичные визуализации плазменных процессов.

2. Параметры модели

Для наглядной демонстрации, рассмотрим пример визуализации коаксиального ртутно-аргонового разряда, возбужденного СВЧ электромагнитным полем магнетрона [3].

Согласно рисунку 1, цилиндрический резонатор имеет кварцевую трубку длиной 200 мм, с внутренним диаметром 8 мм и внешним диаметром 12 мм. Внутри трубки находится аргон при давлении $p_{Ar} = 0.75$ Торр, и ртуть $p_{Hg} \approx 0,01 - 0,06$ Торр. Резонатор содержит кварцевую трубку, которая проходит через его ось симметрии. Внешняя часть трубки, выходящая за пределы резонатора, имеет ту же длину. Вокруг верхних и нижних металлических пластин резонатора расположен цилиндр большего диаметра, который окружает кварцевую трубку. Источник ТЕМ-волны - магнетрон с частотой 2,45 ГГц находится сверху волновода таким образом, что его нижнее сечение находится на верхней пластине цилиндрического резонатора. Центральный электрод коаксиала вводится в резонансную полость, а его торец находится посередине между верхней и нижней пластинами резонатора. Кварцевый стержень подстройки находится в горизонтальной плоскости и вводится в резонатор через боковую стенку. Основные параметры источника представлены в таблице 1.

Для математического обоснования представленной модели в работе использованы уравнения, описывающие баланс для электронов, ионов и атомов в электронно-возбужденных состояниях:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \Gamma_e = S_e \\ \nabla \cdot \Gamma_p^i = S_p^i \\ \nabla \cdot \Gamma_n^i = S_n^i \\ \Gamma_e = -\mu_e n_e E_c - D_e \nabla n_e \\ \Gamma_p^i = -\mu_p^i n_p^i E_c - D_p^i \nabla n_p^i \\ \Gamma_n^i = -D_n^i \nabla n_n^i \end{array} \right. \quad (1)$$

Здесь: $\Gamma_e, \Gamma_p^i, \Gamma_n^i, n_e, n_p^i, n_n^i$ – потоки и плотности электронов (e), ионов и нейтральных частиц (n) i -ого типа; $S_{e,p,n}^i$ – суммарная скорость появления и гибели соответствующих частиц i -ого типа; $\mu_{e,p}^i, D_{e,p,n}^i$ – коэффициенты подвижности и диффузии соответствующих частиц i -ого типа;

$E_c = -\nabla\varphi$ – локальное электрическое поле, обусловленное разделением зарядов, выводимое из уравнения Пуассона для потенциала φ :

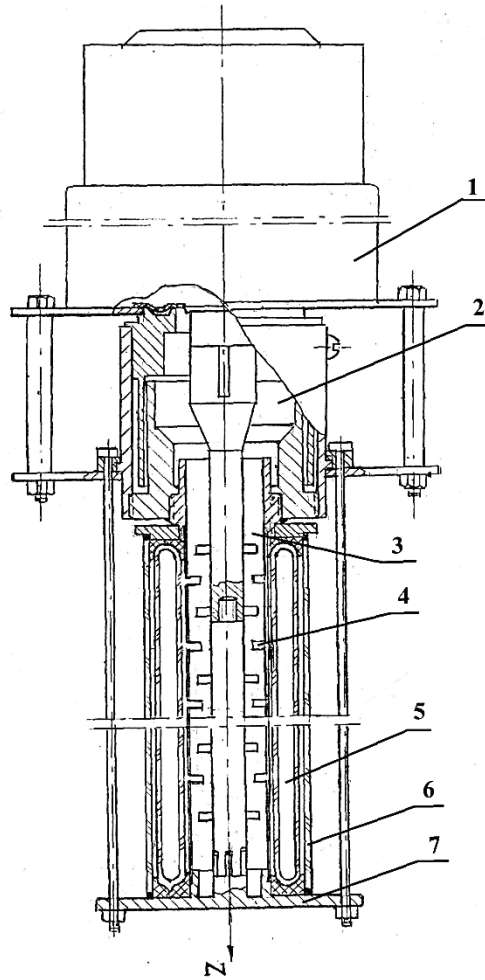


Рисунок 1 – Чертеж безэлектродного СВЧ источника УФ излучения: 1 – безэлектродный коаксиальный источник оптического излучения; 2 – коаксиальный тракт; 3 – центральный проводник тракта; 4 – наружный проводник тракта с поперечными СВЧ-излучающими щелями; 5 – выходное устройство магнетрона; 6 – СВЧ-прозрачный чехол; 7 – съемный СВЧ-экран; 8 – заглушка.

$$\nabla \cdot \nabla \varphi = -\frac{e}{\varepsilon_0} \sum_{i=1}^{\infty} (n_p^i - n_e) \quad (2)$$

где e это заряд электрона, ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума.

Относительная диэлектрическая проницаемость дисперсионной среды рассчитывалась по модели Друде [4]. В этой модели частота столкновений ν_m , плазменная частота электронов ω_{pe} и поле пробоя E_c являются тремя ключевыми параметрами. Плазменная частота электрона ω_{pe} определялась с помощью уравнения:

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{n_e e^2}{\varepsilon_0 m_e}} \quad (3)$$

где m_e — масса электрона, n_e — плотность электронов.

При этом частота столкновений ν_m электронов с нейтральными атомами:

$$v_m = \frac{\sqrt{8kT_e/\pi m_e}}{\lambda_e} \quad (4)$$

где k - постоянная Больцмана, T_e — температура электронов, λ_e — длина свободного пробега между нейтральными атомами и электронами.

При этом напряженность электрического поля пробоя E_c выражалась уравнением:

$$E_c = \frac{kT\omega}{pS\Lambda \sqrt{\frac{m_e v_i}{3e}}} \quad (5)$$

Λ — характерная длина диффузии электронов в цилиндре размерами:

$$\Lambda = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\pi}{l}\right)^2 + \left(\frac{2,405}{R}\right)^2}} \quad (6)$$

где l — длина трубки, R — внутренний диаметр цилиндра, S — сечение упругого столкновения, T — температура рабочей смеси (пары ртути, газ, v_i — потенциал ионизации нейтральной частицы, ω – круговая частота микроволн).

После создания математической модели необходимо учесть взаимодействие излучения с ее компонентами. Это включает в себя учет излучательных переходов, поглощения и рассеяния излучения на атомах и молекулах плазмы. Для этого необходимо использовать базы данных по спектрам излучения различных элементов и частиц [5].

Таблица 1 – Параметры источника, использованные при моделировании

Параметр	Физическое значение	Значение
$W_{ш}$	Ширина всех прорезей	16 мм
φ	Центральный угол всех металлических пазов	315°
d	Наружный диаметр внутреннего проводника коаксиального излучателя	8 мм
D	Внутренний диаметр внешнего проводника коаксиального излучателя	12 мм
l	Общая длина коаксиального излучателя	200 мм
l_1	Расстояние от центра первой прорези до поверхности короткого замыкания	15 мм
l_2	Расстояние между соседними металлическими центрами с прорезями	18 мм
$P_{вх}$	Входная мощность	687 Вт
f	Частота микроволн	2450 МГц

2.1. Программное обеспечение, используемое в работе

Существует несколько видов программных инструментов для моделирования и визуализации низкотемпературной газоразрядной плазмы. Кратко рассмотрим их основные особенности (таблица 2).

Исходя из проведенного сравнения, рекомендуется делать выбор в пользу COMSOL Multiphysics [6]. Важно подчеркнуть, что данный программный комплекс использует метод конечных элементов (Finite Element Method, FEM) для решения системы уравнений (1-6). Этот метод базируется на разбиении сложных областей или систем на более простые подобласти,

обладающие уникальными геометрическими и математическими характеристиками. Другими словами, задача декомпозируется на конечное число подзадач, которые затем решаются численно. Такой подход обеспечивает возможность получения более подробных и точных результатов для сложных систем, учитывая разнообразные физические взаимодействия.

Основной интерфейс программы предоставляет графическую среду, в которой пользователь может создавать геометрию модели, задавать граничные условия, материальные свойства и другие параметры (рисунок 2).

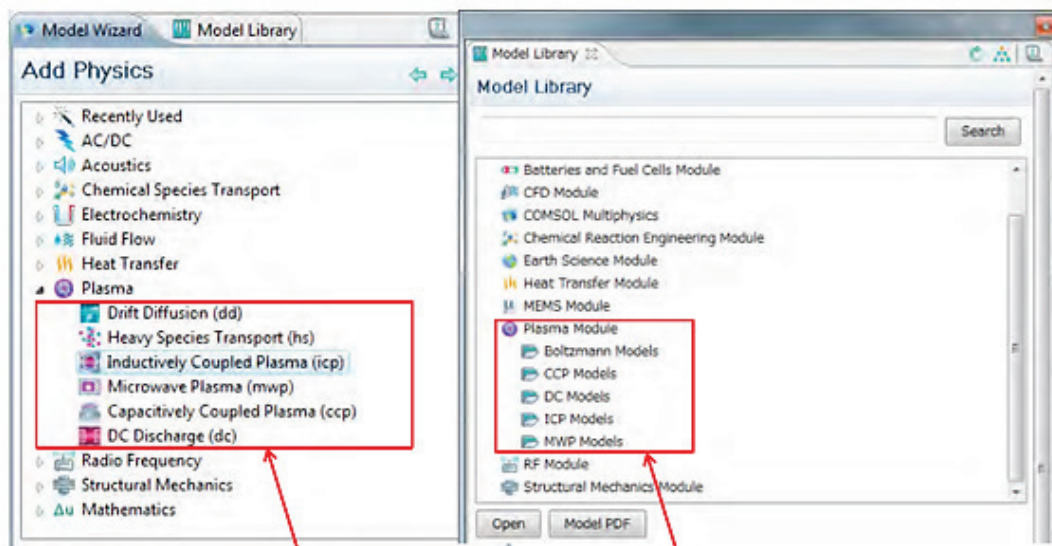
Таблица 2 – Сравнение программных инструментов

Инструмент	Преимущества	Ограничения и недостатки
ANSYS Plasma Simulation	Обеспечивает высокую точность моделирования, позволяя анализировать разнообразные параметры плазмы	Требует значительную вычислительную мощность, особенно для сложных моделей
CST Studio Suite	Предоставляет средства для визуализации и анализа электромагнитных и плазменных явлений	Изначальная специализация на электромагнитном моделировании ограничивает анализ явлений излучения
PlasmaLab	Эффективен для узконаправленных задач в области плазмы	Не является универсальным и может оказаться ограниченным в возможностях для моделирования других физических процессов
OpenFOAM	Открытое программное обеспечение с гибкими возможностями для моделирования течений и теплопередачи	Требует дополнительной адаптации и конфигурирования для моделирования плазмы
COMSOL Multiphysics	Обладает многозадачностью и гибкостью: позволяет интегрировать различные физические явления в единой модели, предоставляет широкий выбор разнообразных физических моделей	Потребуется некоторое время для освоения из-за богатства функциональности и сложности

Выделим основные шаги, которые можно предпринять при моделировании в COMSOL:

1. Создание геометрии: инструменты COMSOL позволяют создавать сложные трехмерные геометрии с помощью интуитивного пользовательского интерфейса или импорта моделей из других CAD-программ.
2. Определение физических свойств материалов, используемых в модели.
3. Введение граничных условий для различных поверхностей модели
4. Задание основной системы уравнений.
5. Решение модели: как уже отмечалось, COMSOL Plasma Module использует численные методы для решения системы уравнений, описывающих физические процессы модели.
6. Анализ результатов: после завершения расчета необходимо проанализировать результаты моделирования. Для этого мы использовали различные режимы программы:
 - Режим "Cross-Section Plot Parameters" позволил исследовать параметры модели путем создания поперечных сечений трехмерного объекта.

- Режим "Domain Plot Parameters" использовался для изучения переменных на границе области раздела объектов. Режим "Arrow Plot" - для визуализации векторного СВЧ-поля.
- Режим "Slice" - для отображения параметров задачи в выбранной плоскости с использованием цветовой шкалы.



Интерфейс плазмы

Библиотека моделей плазмы

Рисунок 2 – Пример импорта 3D модели в программу COMSOL Multiphysics

Эти шаги представляют оптимальный процесс моделирования, который может быть легко адаптирован в зависимости от введения дополнительных граничных условий или параметров.

По вышеописанному алгоритму на рисунке 3 показана реализация пространственного моделирования коаксиальной цилиндрической трубки, имитирующей ртутно-аргоновой разряд.

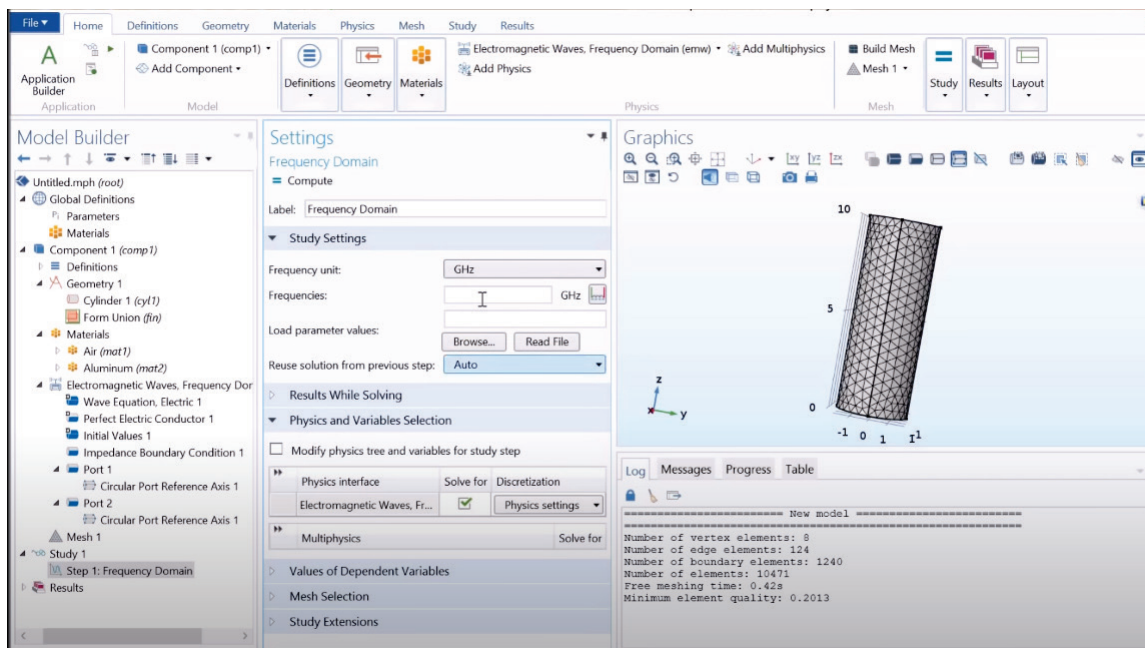


Рисунок 3 – Моделирование в COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics позволяет отображать сетку в графическом окне. Можно добавлять и удалять узлы и элементы, изменять их размеры и формы, а также регулировать плотность сетки

в нужных областях. Это позволило последовательно увеличивать количество точек сетки в тех областях, где наблюдаются наибольшие изменения напряженности электрического поля. Использование последовательных итераций для увеличения количества точек сетки в областях с большими изменениями напряженности электрического поля является хорошей стратегией для достижения более точных результатов и удовлетворения критериев точности в этих областях.

Для расчетов был выделен кластерный узел с 10 CPU ядрами и памятью RAM – 32 GB. Поскольку нагрузка на вычислительные ядра CPU составляет около 100% в течение всего времени вычислений, а использование памяти остается низким (не превышает 30%), это указывает на то, что CPU выполняет основную часть работы. При такой конфигурации использование графических ускорителей (GPU) не требуется и не оказывает значительного влияния на производительность счета и визуализации.

Однако, если впоследствии нужна обработка задач, которые могут быть эффективно распараллелены с использованием графических ускорителей, то необходимо рассмотреть добавление GPU в текущую конфигурацию. GPU могут быть полезными при выполнении определенных типов вычислительных задач, таких как глубокое обучение нейронных сетей или научные расчеты, где большое количество параллельных вычислений может быть эффективно выполнено с использованием CUDA или других графических библиотек.

2.1.1. Результаты моделирования и их обсуждение

В результате проведенных расчетов получены данные 3D визуализации численного моделирования СВЧ разряда в ртутно-аргоновой низкотемпературной плазме.

На рисунке 4 показаны два важных параметра: радиальное распределение резонансных атомов в плоскости (r, z) и пространственное распределение концентрации. Радиальное распределение резонансных атомов отображает их концентрацию в зависимости от радиуса и вертикальной координаты плоскости. Пространственное распределение концентрации показывает распределение концентрации во всем объеме модели.

Оба распределения получены с помощью режима Slice в программе COMSOL Multiphysics, который позволил визуализировать выбранные срезы или плоскости внутри модели для более детального анализа данных.

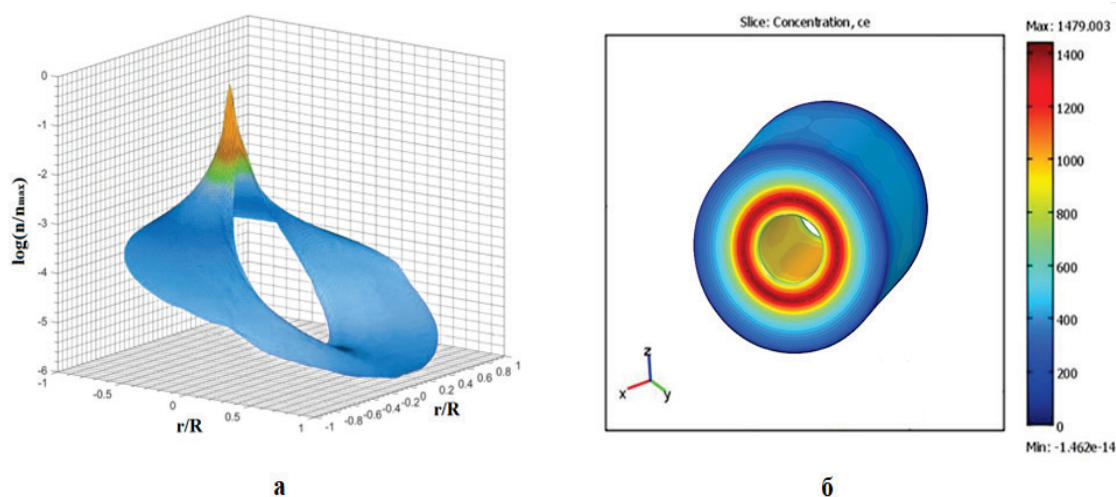


Рисунок 4 – Радиальное распределение резонансных атомов (а) и пространственное (б) распределение концентрации электронов в ртутно-аргоновом разряде

На рисунке 4а наблюдаются явления, связанные с попаданием фотонов в область за отражающим препятствием в результате актов перепоглощения. Использование локальных сечений внутри исследуемого объекта позволило выявить его внутреннюю структуру и особенности параметров расчета при трехмерной визуализации. Локальные сечения представляли собой плоскости, которые пересекают объект в определенных местах. Это способствовало более детальному изучению внутренних компонент объекта. Результат

визуализации концентрации электронов в разряде представлен на рис. 4б, где $se = N_e/n_c$. Здесь N_e - концентрация электронов, $n_c = 7 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ - максимальная концентрация.

Что касается определения распределения электрического поля в разряде, то на практике чаще всего пользуются различными экспериментальными методами, к примеру микроволновой спектроскопией [7] или методами электростатических зондов [8]. Однако это требует дорогостоящего оборудования и высокой точности измерительных приборов. Благодаря совместному использованию программ Comsol Multiphysics и алгоритму, написанному на Python, удалось решить данную проблему.

На рисунке 5 показано двумерное распределение электрического поля на разных частотах в разрезе вдоль коаксиального излучателя, где максимальное значение напряженности электрического поля установлено равным 6000 В/м.

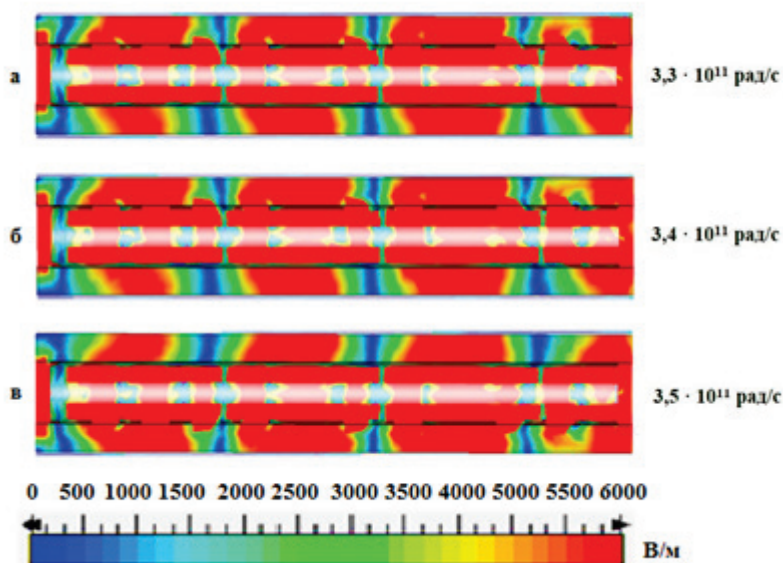


Рисунок 5 – Распределение электрического поля при различных частотах: а – $3,3 \cdot 10^{11} \text{ рад/с}$, б – $3,4 \cdot 10^{11} \text{ рад/с}$, в – $3,5 \cdot 10^{11} \text{ рад/с}$

Из рисунка 5 следует, что при изменении частоты столкновений плазмы из-за изменения относительной диэлектрической проницаемости, распределение электрического поля претерпевало незначительные изменения. Электрическое поле периодически распределяется в осевом направлении. В радиальном направлении распределение электрического поля близко к равномерному. Это в свою очередь влияет на поведение параметра S11 на различных частотах плазмы. S11 представляет собой коэффициент отражения волны от входа СВЧ устройства и равен отношению комплексной величины отраженной волны к комплексной величине падающей (рисунок 6).

Коэффициент отражения ниже -10 дБ указывает на низкое количество отражаемой обратно мощности. Если при изменении частоты плазмы отраженная мощность остается относительно низкой и наблюдается минимальное отклонение, это говорит о том, что рассматриваемая структура подходит для использования с различными типами источников излучения. Следовательно, отраженная мощность остается стабильно низкой, независимо от частоты плазмы, что является обязательным условием для эффективной работы устройства.

Визуализация полученных данных моделирования позволила сделать соответствующие коррективы в конструкции и схеме питания рассмотренного в работе источника оптического излучения, что привело к повышению потока УФ излучения на 11% по сравнению с [9].

Фотография доработанного источника в рабочем состоянии представлена на рисунке 7.

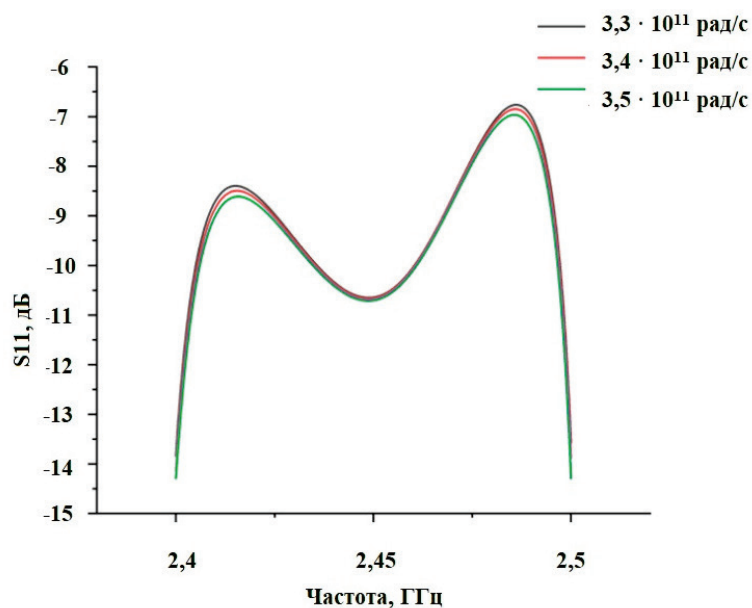


Рисунок 6 – Распределение S11 на разных плазменных частотах



Рисунок 7 – Фотография газоразрядного источника в рабочем состоянии

3. Заключение

Таким образом, компьютерное моделирование процессов излучения в газоразрядной плазме играет ключевую роль в исследованиях низкотемпературной плазмы и способствует разработке эффективных и безопасных источников обеззараживания в медицине.

Визуализация процессов обеззараживания с использованием низкотемпературной плазмы с помощью инструментов компьютерной графики позволило оценить взаимодействие плазмы с окружающей средой и анализировать пространственные распределения напряженности электрического СВЧ поля и концентрации электронов в разрядной ртутно-аргоновой трубке.

На основании проведенного в работе моделирования оптимизирована конструкция коаксиального газоразрядного источника оптического излучения, что позволило увеличить поток бактерицидного УФ излучения на 11%.

4. Список источников

- [1] Перспективы использования низкотемпературной газовой плазмы как антимикробного агента / С.А. Ермолаева [и др.] // Вестник Российской АМН. 2011. №10 С.15 – 21.

- [2] Разработка системы интерактивного визуального анализа многомерных данных / Масленников О.П. [и др.] // Научная визуализация. 2014. №4. С. 30-49.
- [3] Железнов И.И., Попов О.А. Исследование излучательных и спектральных характеристик источников УФ-излучения на основе коаксиальных СВЧ-разрядов в парах ртути низкого давления // Вестник МЭИ. 2023. № 2. С. 137-143.
- [4] Маймистов А.И., Ляшко Е.И. Модифицированная модель Друде-Лоренца, позволяющая учесть топологические характеристики среды // Оптика и спектроскопия. 2019. Т. 127. № 11. С. 804-810.
- [5] Лебедев Ю.А., Юсупова Е.В. Влияние постоянного поля на приповерхностную плазму сильно неоднородного СВЧ разряда. Физика плазмы. 2012. Т. 38. № 8. С. 677-693.
- [6] COMSOL 3.5a . URL: <http://www.comsol.com>.
- [7] Moustafaev, J. Project Scope Management: A Practical Guide to Requirements for Engineering, Product, Construction, IT and Enterprise Projects (1st ed.). Auerbach Publications. (2014). URL: <https://doi.org/10.1201/b17797>.
- [8] Демидов В.И., Колоколов Н.Б., Кудрявцев А.А. Зондовые методы исследования низкотемпературной плазмы. М. Энергоатомиздат. 1996.
- [9] Zheleznov I. I., Popov O. A. Electrodeless source of UV radiation based on low pressure microwave mercury discharge // Light & Engineering. 2023. Vol. 31, No. 3. P. 36-42.