Моделирование лавинно-стримерного перехода в воздухе

Автор:

Пек Борис

Постановка задачи

- ▶ Создать в пакете Comsol модель для расчета лавинно-стримерного перехода в воздухе, используя дрейфово-диффузионное приближение.
- Сравнить результаты расчета с аналогичной моделью для аргона. Выявить отличия, связанные с добавлением отрицательных ионов.
- Сравнить результаты моделирования лавинно-стримерного перехода в воздухе в пакетах Comsol и CFD-ACE. Используются разные приближения, поэтому сравнивать надо по общим параметрам: поле *E*, объемная плотность заряда, скорость и диаметр головки стримера.
- Для сравнения будут использованы модели катодонаправленного стримера в слабонеоднородном поле.

\рейфово-диффузионное приближение

Модель не учитывает:

 $b_m = 1.5e-4$

 $[adhesion] = A_2 + A_2$

- распределение электронов по энергии
- процессы, связанные с изменением энергии частиц без изменения заряда, например: возбуждение электронно-колебательных уровней, диссоциация молекул.
- Концентрации заряженных частиц (электронов, положительных и отрицательных ионов) описываются уравнением Нернста-Планка.
- Реакции ионизации, прилипания и рекомбинации задаются через функцию источника.

Коэффициенты ионизации и прилипания

Аппроксимации экспериментальных данных приведены для атмосферного давления.

 $b_{\rm s} = (2.7e-2+0.113/(1+normE\ es/1e5)^0.498)$

подвижность электронов $[M^2/B \cdot c]$

подвижность положительных ионов [м²/В·с] $b_0 = 1.5e-4$

подвижность отрицательных ионов [м²/B·c] [2]

$$A_{2} = \begin{cases} 9.54 \cdot 10^{9} \frac{\exp\left(\frac{-7.32 \cdot 10^{6}}{E}\right)}{b_{e}E}, & E \leq 2.2 \cdot 10^{6} \\ 1.54 \cdot 10^{9} \frac{\exp\left(\frac{-3.28 \cdot 10^{6}}{E}\right)}{b_{e}E}, & E > 2.2 \cdot 10^{6} \end{cases}$$

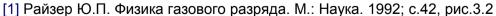
$$[ionization] = \begin{cases} 8 \cdot 10^{10} \frac{\exp\left(\frac{-13.2 \cdot 10^{6}}{E}\right)}{b_{e}E}, & E \leq 3 \cdot 10^{6} \end{cases}$$

$$0.045392 \exp\left(\frac{8.8396 + \frac{(E - 3 \cdot 10^{6})}{10^{5}}\right), & E > 3 \cdot 10^{6}, & E \leq 7.5 \cdot 10^{6} \end{cases}$$

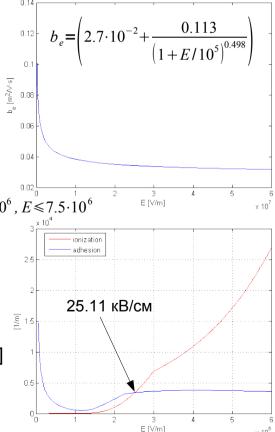
$$10^{6} \exp\left(\frac{-22 \cdot 10^{6}}{E}\right), & E > 7.5 \cdot 10^{6} \end{cases}$$

 $A_3 = \left| 9.06 \cdot 10^7 \frac{\left(1 - 6.9 \cdot 10^{-7} E\right)}{b_e E}, E \le 1.4 \cdot 10^6 \right|$

 A_3 — коэффициент прилипания в тройных столкновениях [м⁻¹]



^[2] Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Наука. 1992; формула 3.28 на с.55 и таблица 2.2 на с.27



^[3] Базелян Э.М., Райзер Ю.П. Искровой разряд. М: изд-во МФТИ. 1997; с.29-30

^[4] Базелян Э.М., Райзер Ю.П. Физика молнии и молниезащиты. М.: Физматлит. 2001; с.51-52

Система уравнений (начало)

Уравнение Нернста-Планка без электронейтральности для положительных ионов (1)

```
\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla (-D\nabla c - z u_m F c \nabla V) = R - u \cdot \nabla c \qquad R = [ionization] b_e E c_2 - \alpha c c_2 - \beta c c_3
                 коэффициент объемной электрон-ионной рекомбинации [м³/моль c] [1]
\alpha = 1e-13
                 коэффициент объемной ион-ионной рекомбинации [м³/моль c]
\beta = 1e-13
D = Dp
                                   коэффициент диффузии (изотропный) [M^2/c]
R = (t>0)*(ionization*be*normE es*c2-alpha*c*c2-beta*c*c3)
                                    скорость реакции [моль/(м<sup>3</sup> с)]
u_{m} = bp/1e5
                                   подвижность [с моль/кг]
7 = 1
                                    заряд частиц (относительно заряда электрона)
u=0. v=0
                                    компоненты вектора и [м/с]
V = V
                                    потенциал [В] (рассчитывается в третьем уравнении)
```

Уравнение Нернста-Планка без электронейтральности для электронов

 $\frac{\partial c_2}{\partial t} + \nabla (-D \nabla c_2 - z u_m F c_2 \nabla V) = R - u \cdot \nabla c_2 \qquad R = [ionization] b_e E c_2 - \alpha c c_2 - [adhesion] b_e E c_2$

D = De коэффициент диффузии (изотропный) [м²/c] $R = (t>0)*(ionization*be*normE_es*c2-alpha*c*c2-adhesion*be*normE_es*c2)$

скорость реакции [моль/(M^3 с)]

 $u_m = be/1e5$ подвижность [с моль/кг]

Z = -1 заряд частиц (относительно заряда электрона)

u=0, v=0 компоненты вектора **u** [м/c]

V = V потенциал [В] (рассчитывается в третьем уравнении)

[1] Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Наука. 1992; с.77-78

[2] Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Наука. 1992; с.79, таблица 4.4

(2)

Система уравнений (продолжение)

Уравнение Нернста-Планка без электронейтральности для отрицательных ионов (3)

```
\frac{\partial c_3}{\partial t} + \nabla (-D\nabla c_3 - z u_m F c_3 \nabla V) = R - \mathbf{u} \cdot \nabla c_3 \qquad R = [adhesion] b_e E c_2 - \beta c c_3
D = De
                                           коэффициент диффузии (изотропный) [м²/c]
R = (t>0)*(adhesion*be*normE es*c2-beta*c*c3)
```

скорость реакции $[моль/(m^3 c)]$

 $u_{m} = bm/1e5$ подвижность [с моль/кг]

7 = -1заряд частиц (относительно заряда электрона)

u=0. v=0компоненты вектора и [м/с]

V = Vпотенциал [В] (рассчитывается в третьем уравнении)

Уравнение Пуассона (модуль электростатики) (4)

диэлектрическая проницаемость $\varepsilon = 1$ ρ = electr*(c-c2-c3) объемная плотность заряда [Кл/м³]

Global expressions:

 $RR = sart(R^2+Z^2)$ VOLT = -V 0*1E-3*(1/0.001-1/RR) be = $(2.7e-2+0.113/(1+normE es/1e5)^0.498)$ ionization $1 = (normE \ es < = 3e6)*(8e10*exp(-13.2e6/normE \ es)/(be*(normE \ es+1)))$ ionization 2 = (normE es > 3e6)*(normE es < = 7.5e6)*(exp(8.8396+(normE es - 3e6)/1e5*0.045392))ionization 3 = (normE es>7.5e6)*(1e6*exp(-22e6/normE es))ionization = ionization 1+ionization 2+ionization 3

adhesion 1 = (normE es <= 2.2e6)*(9.54e9*exp(-7.32e6/normE es)/(be*(normE es+1)))+(normE_es>2.2e6)*(1.54e9*exp(-3.28e6/normE_es)/(be*(normE_es+1)))

adhesion 2 = (normE es <= 14e5)*(9.06e7*(1-6.9e-7*normE es)/(be*(normE es+1)))

adhesion = adhesion 1+adhesion 2

Constants:

bp = 1.5e-4Dp = 25e-3*bp*100alpha = 1e-13electr = 1.6e-19bm = 1.5e-4De = 0.35qq0 = 1e16V 0 = 10000Dm = 25e-3*bm*100

beta = 1e-13

Граничные условия, начальные условия

В остальной части модели начальная концентрация электронов нулевая.

ntflux с chekf – полный поток Изоляция: $n \cdot N = 0$ $N = -D \nabla c - z u_m F c \nabla V + c \mathbf{u}$ Состоит из трех слагаемых: $-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{N}=N_0$ Поток: • электрофоретическое • диффузионное (1) $n \cdot N = 0$ (изоляция) • конвекционное (2) N_0 = -ntflux_c2_chekf2 (ποτοκ) Активен только модуль электростатики (3) $N_0 = -ntflux_c3_chekf3$ (поток) (4) $\varphi(x, y) = V_0 \cdot \left(\frac{R_1}{\sqrt{r^2 + \sigma^2}} - 1 \right)$ (4) $\varphi = 0$ Анод (1) $n \cdot N = 0$ (изоляция) Ось симметрии (2) $n \cdot N = 0$ (изоляция) $V_0 = 10 \text{ kB}$ (3) $n \cdot N = 0$ (изоляция) Размеры: $R_1 = 1 \text{ MM}$ $R_2 = 2.01 \text{ MM}$ Катод $(4) \varphi = V_0 \cdot \left(\frac{R_1}{R_2} - 1 \right)$ (1) N₀ = -ntflux_c_chekf (ποτοκ) (2) $n \cdot N = 0$ (изоляция) (3) $n \cdot N = 0$ (изоляция) Начальная концентрация электронов: qq0 = 1e16 моль/м³

Настройки решателя

Solver: Time dependent segregated

Times: [0:0.1e-9:2.6e-9,2.6e-9+0.02e-9:0.02e-9:5e-9]

Relative tolerance: 5e-4

Absolute tolerance: c 5e2 c2 5e2 c3 5e2 V 5e-1

Порядок расчета переменных: V, c, c2, c3

Linear solver: GMRES

Maximum number of iterations: 10000 Number of iterations before restart: 300

Preconditioner: SSOR

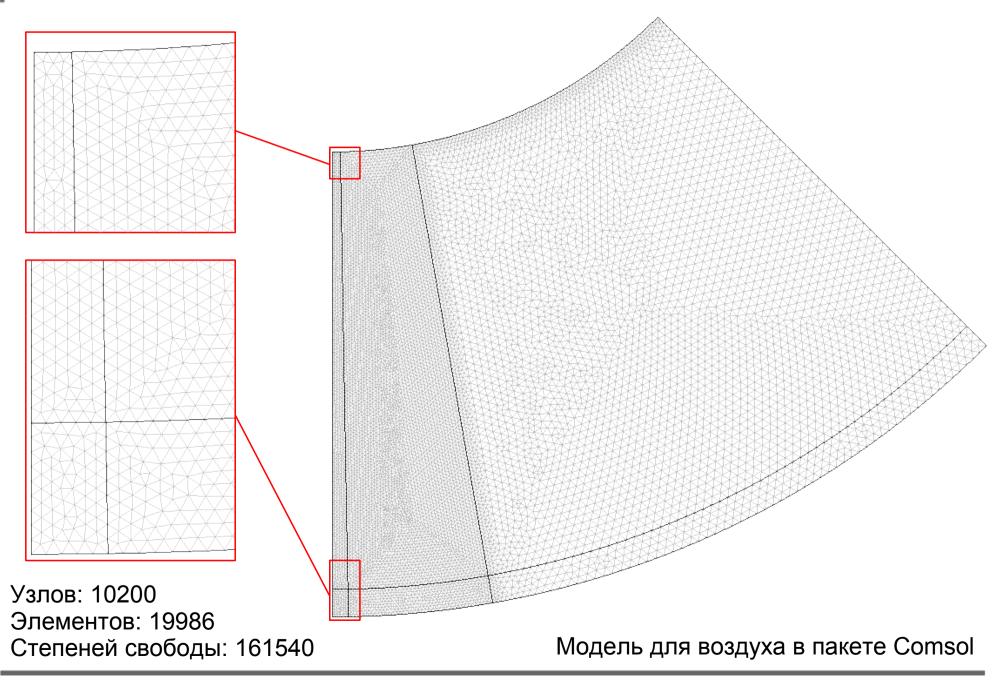
Number of iterations: 2

Time steps taken by solver: Intermediate

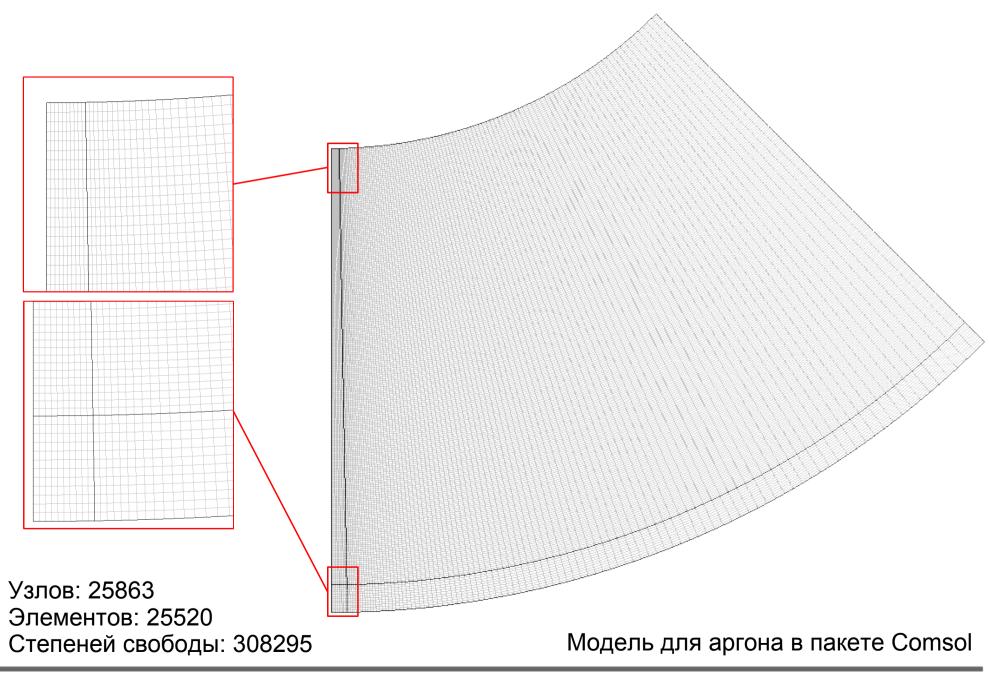
Maximum time step: 1e-11

В отличие от решателя UMFPACK, который используется по умолчанию, итерационный решатель требует меньше оперативной памяти при расчетах, что позволяет решать модели с большим количеством элементов.

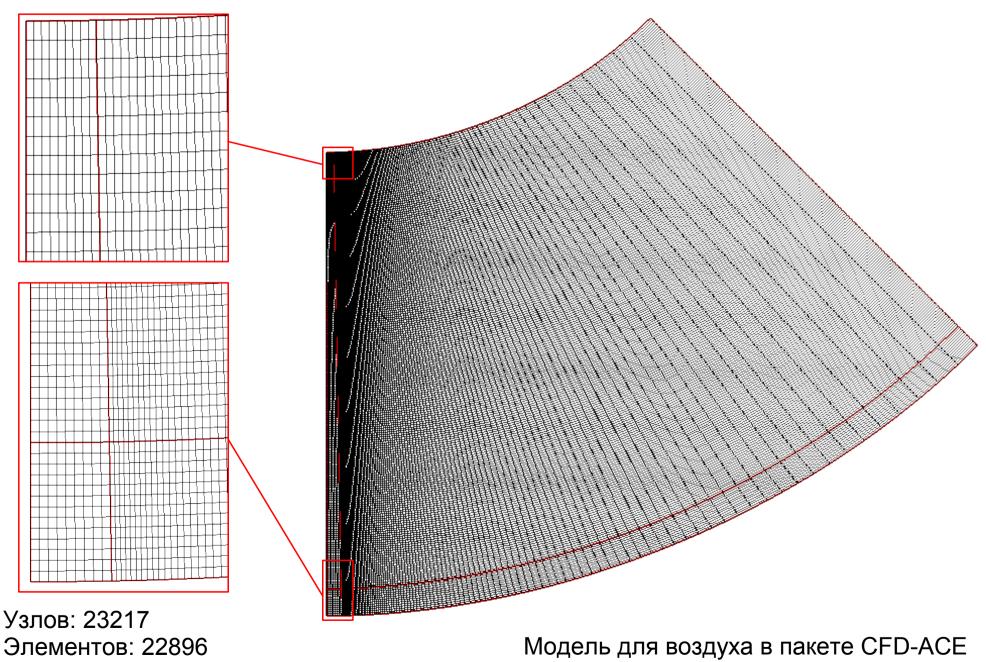
Конечноэлементная сетка



Конечноэлементная сетка



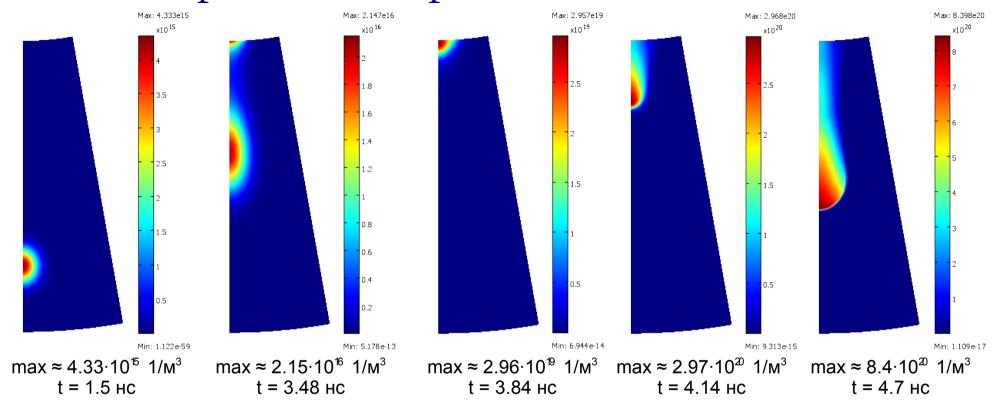
Конечноэлементная сетка



Подробности: http://tehnick-8.narod.ru/#seminar03

Концентрация электронов [1/м³]

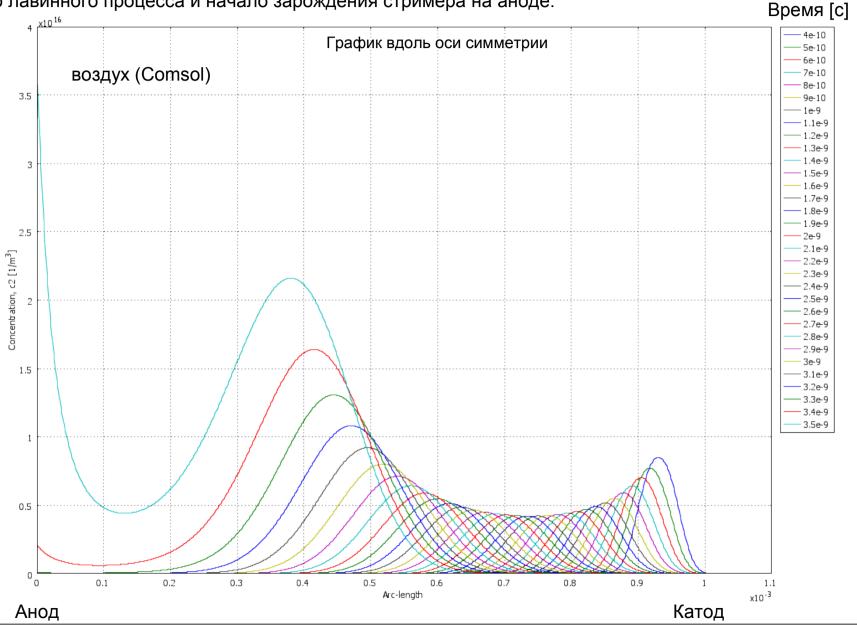
воздух (Comsol)



Затравочный пакет электронов движется во внешнем электрическом поле; начинается лавинный процесс, быстрые электроны движутся к аноду, а медленные положительные ионы плавно дрейфуют к катоду, происходит разделение объемного заряда; первые свободные электроны, достигнув анода, инициируют процесс ионизации в приэлектродной области; поскольку внешнее поле вблизи анода максимально, то интенсивность ионизации там выше чем в лавине, которая вдали от него; на аноде задано условие гибели отрицательного заряда и изоляции для положительного, поэтому вблизи анода начинает накапливаться положительный заряд; объемная плотность заряда начинает создавать собственное поле, сравнимое с внешним; от анода начинает прорастать катодонаправленный (положительный) стример; стример (он в разы быстрее лавины) прорастает навстречу лавине и оставшимся после нее свободным электронам; вначале стример ускоряется, затем его скорость становится почти постоянной, а затем он начинает тормозиться из-за резкого уменьшения количества свободных электронов перед головкой стримера; расчет остановлен, т.к. дальнейший рост стримера невозможен, для него нужен дополнительный источник свободных электронов, например: фотоионизация перед головкой, автоэмиссия с катода, фотоэлектронная эмиссия с катода, космическое излучение и/или вторичная эмиссия с катода. Последние два источника слишком малы и ими можно пренебречь.

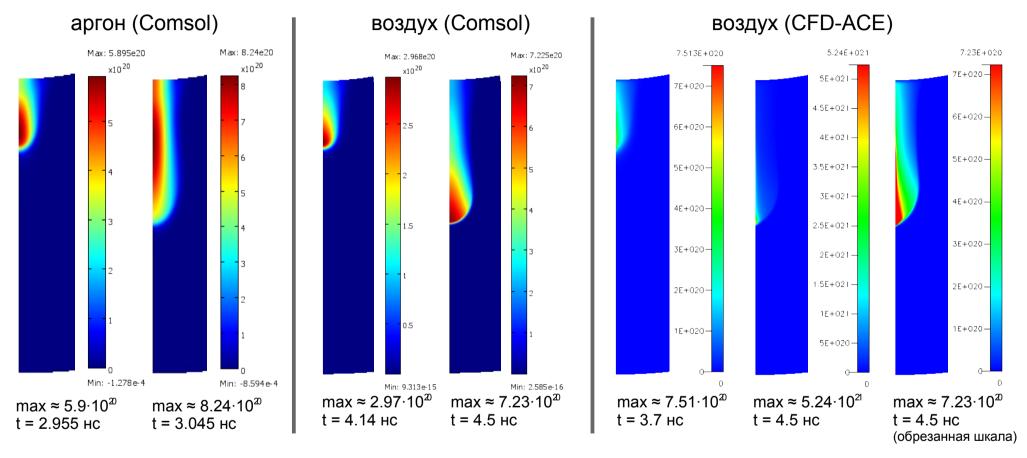
Концентрация электронов в лавине [1/м³]

На графике показано распространение начального пакета электронов от катода к аноду, начало лавинного процесса и начало зарождения стримера на аноде.



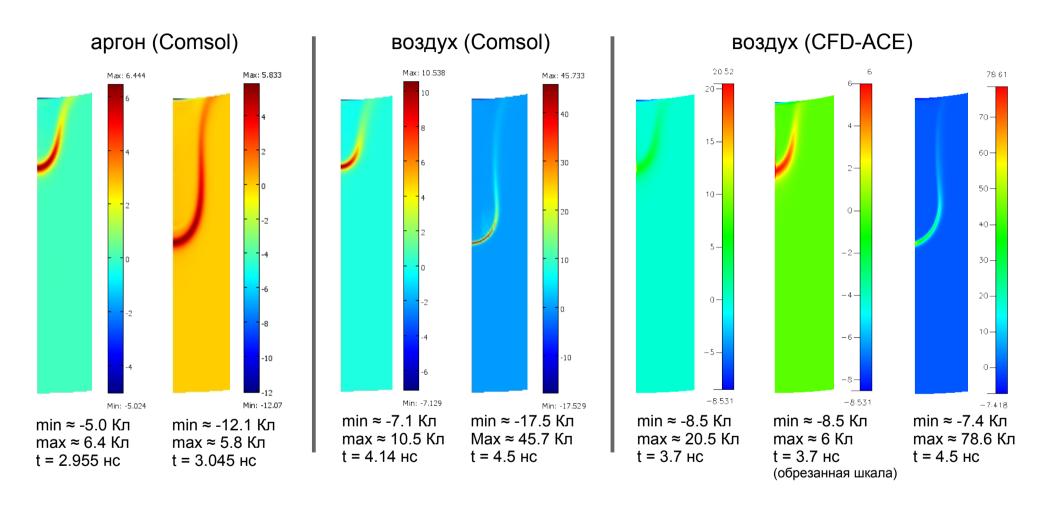
Концентрация электронов [1/м³]

Сравнивать контурные графики для различных моделей будем только для стримерной стадии процесса в два момента времени, когда длина стримеров примерно одинакова.



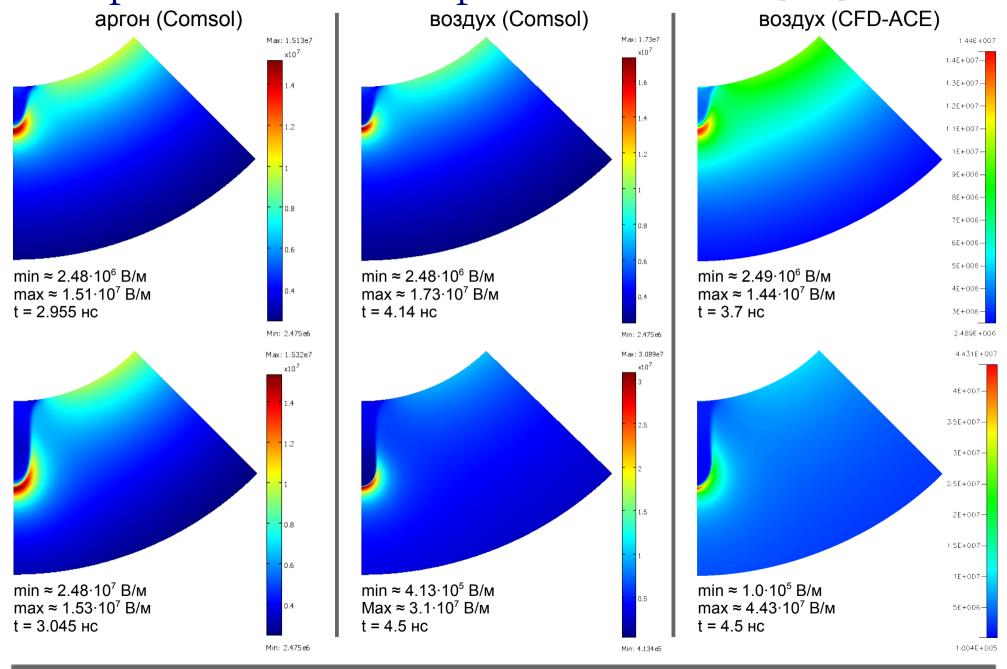
Видно, что в модели с аргоном максимум концентрации электронов находится не на фронте головке, как в моделях с воздухом, и плазменный канал в аргоне содержит больше свободных электронов, т.к. в нем нет реакции прилипания. В CFD-ACE модели возле оси симметрии возникла какая-то особенность численного счета, несмотря на хорошую сетку, но в остальном структура рассчитанного стримера похожа на результаты расчета в Comsol.

Объемная плотность заряда [Кл/м³]

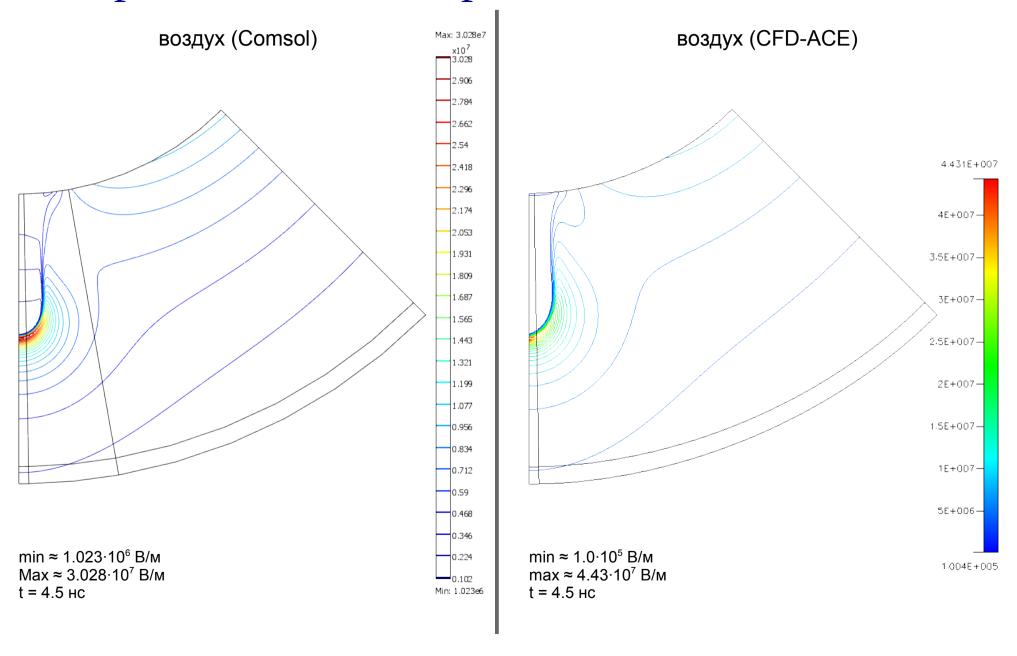


Положительный заряд (суммарный) сосредоточен в области головки стримера и на границе плазменной области. Также виден максимум отрицательного заряда в узкой прианодной области. В плазменном канале стримера суммарный заряд равен нулю.

Напряженность электрического поля [В/м]



Напряженность электрического поля [В/м]



Проверка условия однородности структуры поля в плазме

Дебаевский радиус:

$$d = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k T_e}{e^2 n_e}}$$

В данной модели:

$$\frac{kT_e}{e} = 1[B]$$

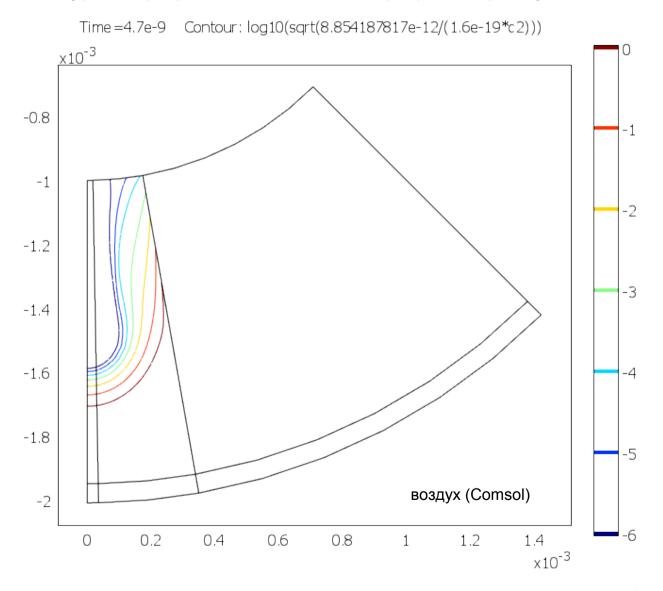
Условие:

Радиус Дебая (d) в плазменной области должен быть существенно меньше радиуса плазменного канала (R_p)

Итог:

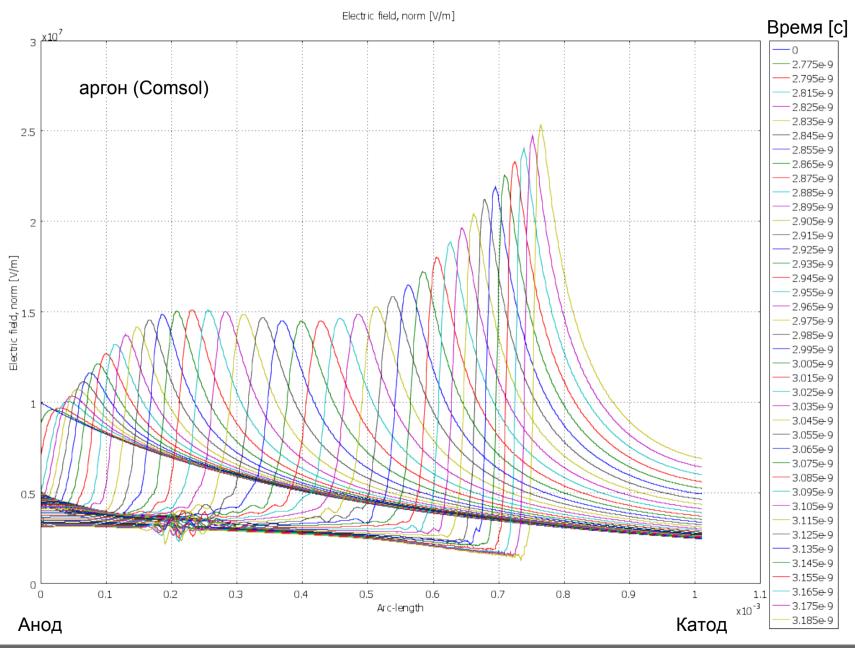
 $d \le 1 \text{ MKM}$ $R_p \approx 100 \text{ MKM}$

Контурный график десятичного логарифма от радиуса Дебая



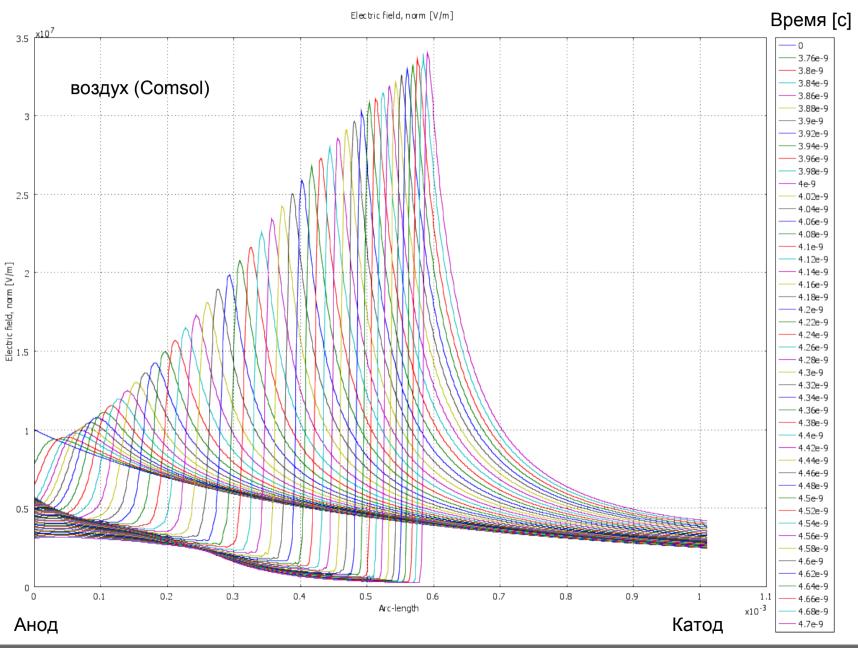
Напряженность электрического поля вдоль оси симметрии [В/м]

На графике показано прорастание стримера от анода к катоду.



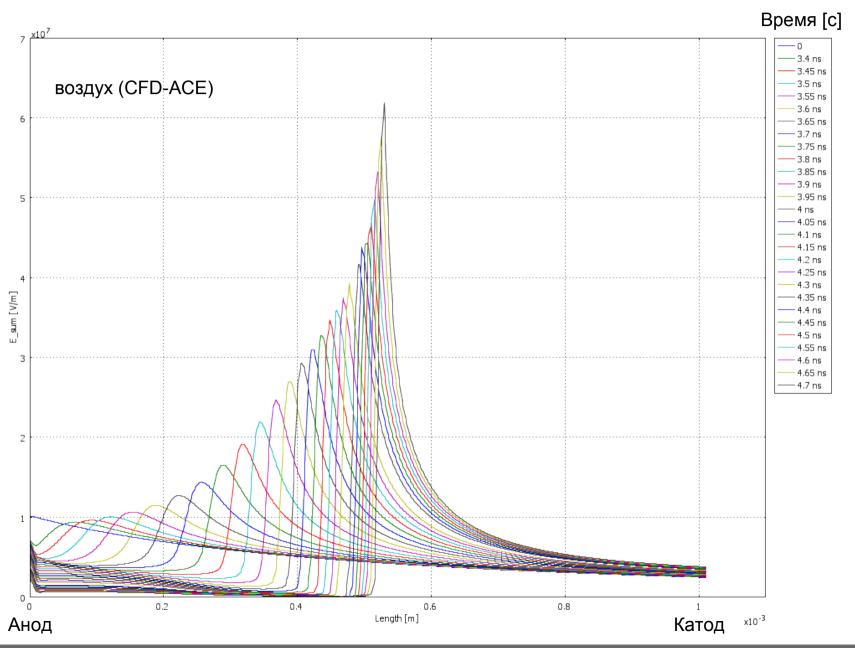
Напряженность электрического поля вдоль оси симметрии [В/м]

На графике показано прорастание стримера от анода к катоду.

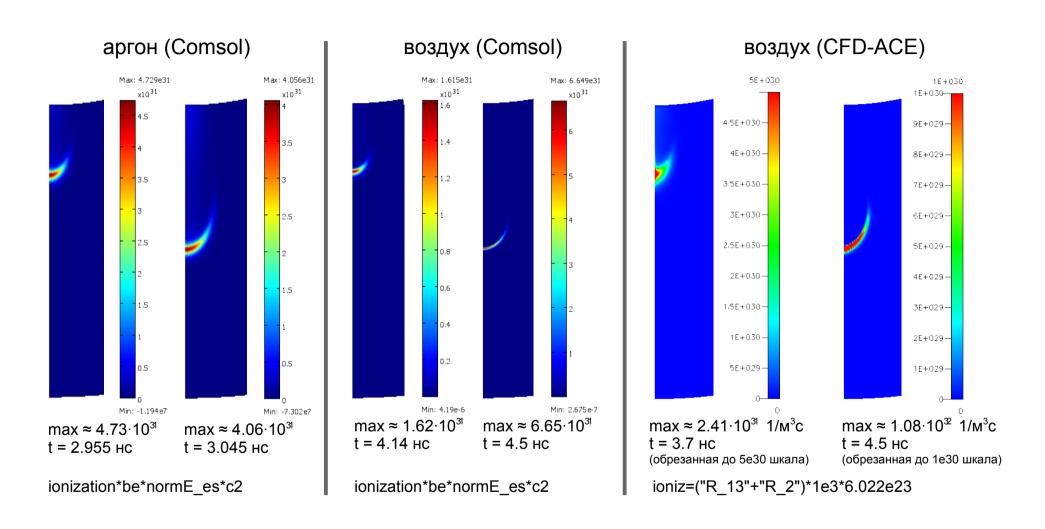


Напряженность электрического поля вдоль оси симметрии [В/м]

На графике показано прорастание стримера от анода к катоду.

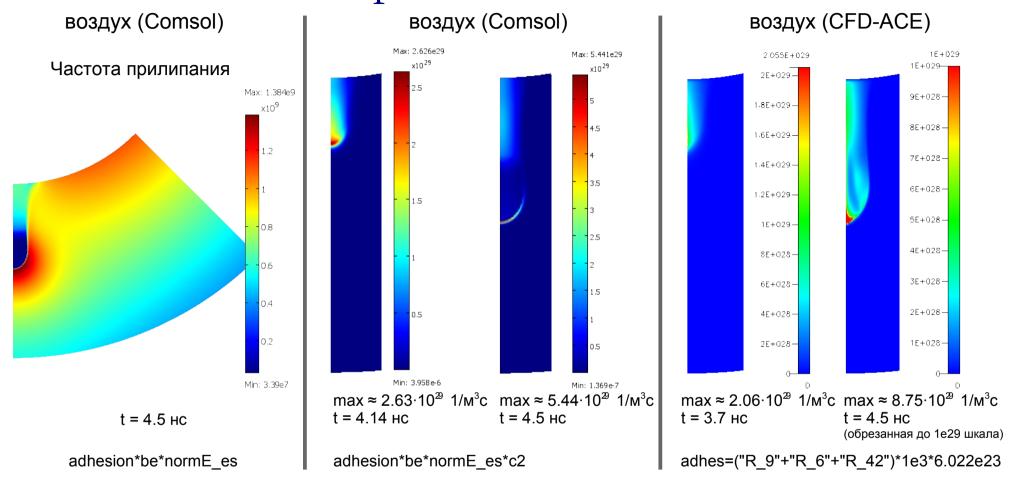


Интенсивность ионизации [1/м³с]



Максимальная частота ионизации (ionization*be*normE_es) в момент времени t = 4.5 нс в Comsol модели для воздуха получилась примерно $5 \cdot 10^{11}$ с⁻¹, что соответствует периоду 2 пс. Это минимальное время между актами ионизации перед головкой стримера.

Интенсивность прилипания [1/м³с]

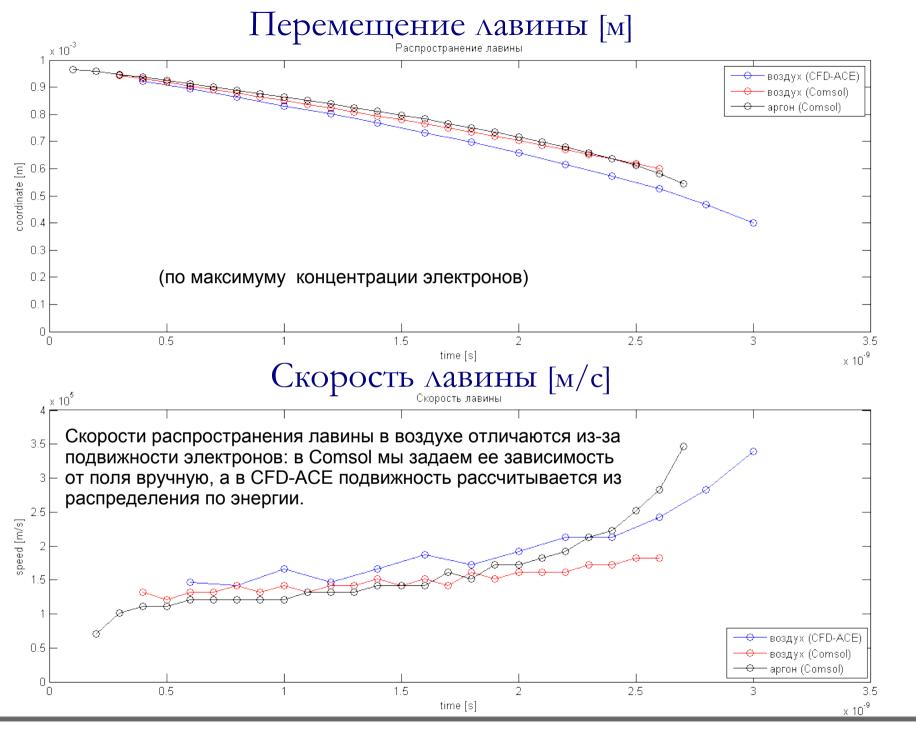


В момент времени t = 4.5 нс частота прилипания в Comsol модели для воздуха:

- максимальная $\approx 1.38 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1} \to \text{период} \approx 0.72 \text{ нс} \text{это минимальное время жизни свободного электрона$
- минимальная ≈ 3.39·10⁷ с⁻¹ → период ≈ 29 нс это максимальное время жизни свободного электрона

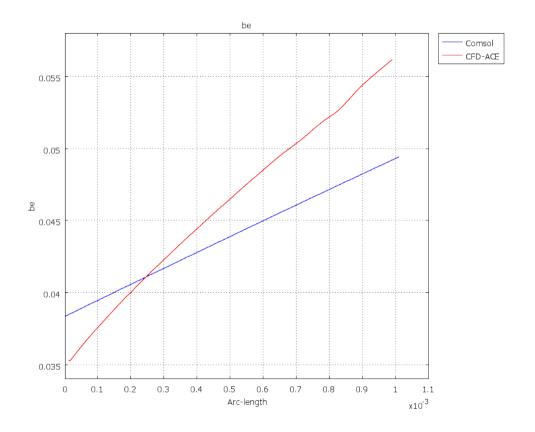
Т.о. среднее время жизни свободного электрона в воздухе для этой модели получилось около 15 нс.

Интенсивности электрон-ионной и ион-ионной рекомбинации соответственно на порядок и на два ниже, чем интенсивность прилипания и здесь приведены не будут.

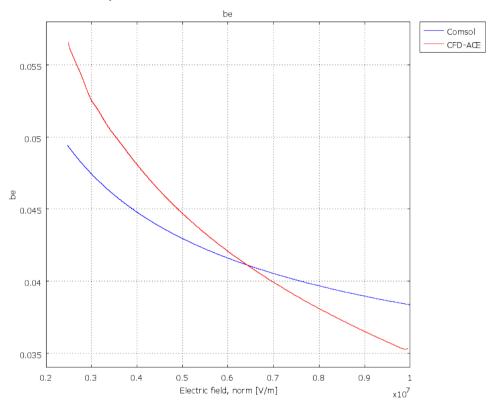


Подвижность электронов в воздухе [м²/В с]

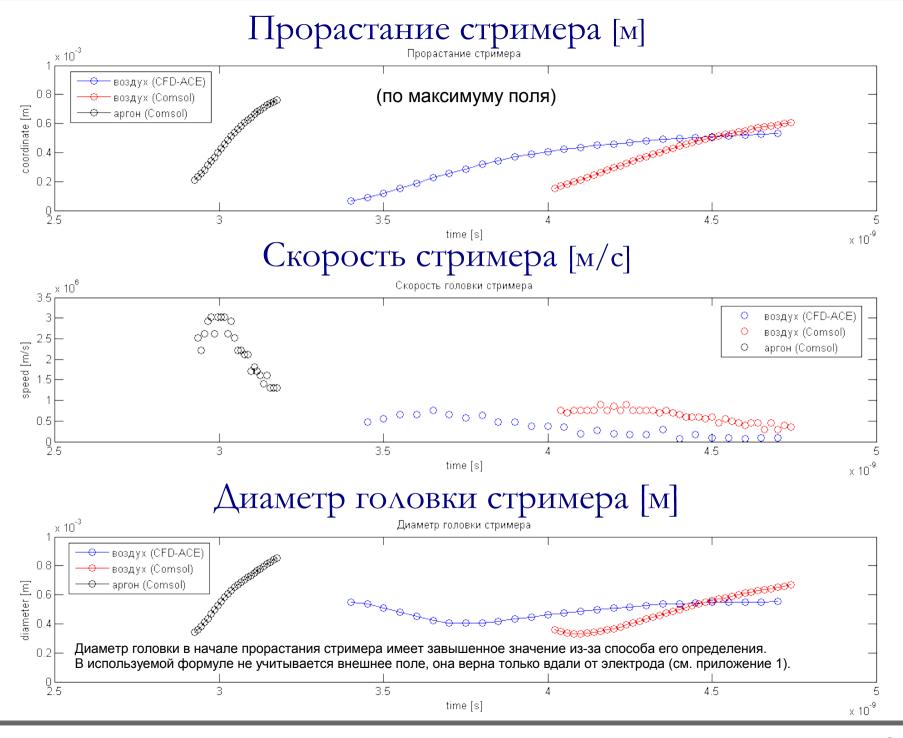
Подвижность вдоль оси симметрии на лавинной стадии (нет влияния объемного заряда)

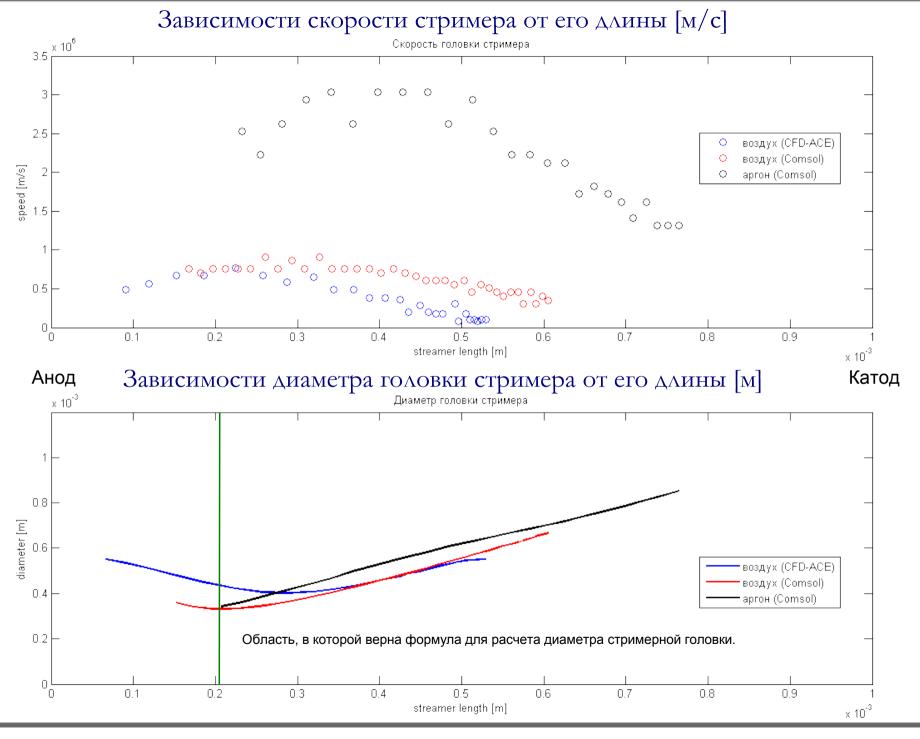


Параметрический график зависимости $b_e(E)$, в роли параметра — длина пути вдоль оси симметрии



В модели для аргона подвижность задавалась постоянной величиной: $b_e = 4.3e-2 \, [\text{M}^2/\text{B}\cdot\text{c}]$





Выводы

- В пакете Comsol создана простая модель, позволяющая рассчитать процесс лавинностримерного перехода в сухом воздухе (азот-кислородная газовая смесь). Общая расчетная система состоит всего из четырех уравнений: уравнения Пуассона и трех транспортных уравнений (для электронов, положительных и отрицательных ионов).
- У Основным достоинством данной модели является сокращение времени счета, благодаря уменьшению количества уравнений. Это так же позволяет решать модели с большим количеством элементов за разумное время. Для сравнения:
 - Для расчета 4.5 наносекунд модели лавинно-стримерного перехода в воздухе (в пакете CFD-ACE) с грубой сеткой (1584 узла, 1491 элемент) требуется около двух суток процессорного времени. (В этом документе результаты не показаны)
 - Для расчета 4.7 наносекунд той же модели с хорошей сеткой (23217 узлов, 22896 элементов) требуется около 7 недель процессорного времени.
 - Для расчета 3.2 наносекунд модели в Comsol, использующей дрейфово-диффузионное приближение, для газа аргона с хорошей сеткой (25863 узла, 25520 элементов) потребовалось около половины дня.
 - Для расчета 4.7 наносекунд модели в Comsol, использующей дрейфово-диффузионное приближение, для воздуха с хорошей сеткой (25863 узла, 25520 элементов) потребовалось чуть больше суток.
- Рассчитанная скорость прорастания стримера в воздухе составила около 300-900 км/с, что хорошо согласуется с экспериментом (100-1000 км/с), несмотря на отличия в длине стримера (смоделировано только начало), в давлении воздуха (большой разброс в экспериментах), разности потенциалов на электродах и структуре поля.
- В дальнейшем планируется создание специальной модели для сравнения с экспериментом.
- Также в модель будут добавлены дополнительные источники свободных электронов: фотоионизация перед головкой положительного стримера, фотоэмиссия и автоэмиссия с катода. Будет произведена оценка их влияния на процессы в стримере.

Приложение 1. Определение диаметра головки стримера

Диаметр головки считаем равным 4*расстояние, на котором поле перед головкой стримера спадает в 2.25 раза, т.к. при аппроксимации используется следующая зависимость:

$$E(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{UR}{r^2} \cdot K$$

 $E(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{UR}{r^2} \cdot K$ Формула для поля E на оси цилиндрического канала со сферическим окончанием (перед стримерной головкой) Э.М.Базелян, Ю.П.Райзер "Физика молнии и молниезащиты", Москва "Физматлит", 2001

Пусть
$$\frac{E(R)}{E(r_2)} = 2.25 \rightarrow E(r_2) = \frac{1}{4\pi \, \varepsilon_0} \frac{U \, R}{r_2^2} \cdot K = \frac{1}{2.25} \frac{1}{4\pi \, \varepsilon_0} \frac{U}{R} \cdot K \rightarrow \left(\frac{R}{r_2}\right)^2 = \frac{1}{2.25} \rightarrow R = \frac{r_2}{1.5}$$

Где R – радиус головки, r_2 – точка на оси, в которой поле в 2.25 раза меньше максимального.

Соответственно мы легко можем измерить на линейных графика поля E расстояние ($R-r_2$), откуда и получим

Electric field, norm [V/m]

диаметр головки.

