
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.

Дрейфово-диффузионное приближение

- Модель не учитывает:
 - 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.

$$b_e = (2.7e-2 + 0.113 / (1 + \text{norm}E_{es}/1e5)^{0.498})$$

подвижность электронов [м²/В·с] [1]

$$b_p = 1.5e-4 \quad \text{подвижность положительных ионов [м}^2\text{/В·с]} \quad [2]$$

$$b_m = 1.5e-4 \quad \text{подвижность отрицательных ионов [м}^2\text{/В·с]} \quad [2]$$

$$A_2 = \begin{cases} 9.54 \cdot 10^9 \frac{\exp\left(\frac{-7.32 \cdot 10^6}{E}\right)}{b_e E}, & E \leq 2.2 \cdot 10^6 \\ 1.54 \cdot 10^9 \frac{\exp\left(\frac{-3.28 \cdot 10^6}{E}\right)}{b_e E}, & E > 2.2 \cdot 10^6 \end{cases} \quad [4]$$

$$[\text{ionization}] = \begin{cases} 8 \cdot 10^{10} \frac{\exp\left(\frac{-13.2 \cdot 10^6}{E}\right)}{b_e E}, & E \leq 3 \cdot 10^6 \\ 0.045392 \exp\left(8.8396 + \frac{(E - 3 \cdot 10^6)}{10^5}\right), & E > 3 \cdot 10^6, E \leq 7.5 \cdot 10^6 \\ 10^6 \exp\left(\frac{-22 \cdot 10^6}{E}\right), & E > 7.5 \cdot 10^6 \end{cases} \quad [3]$$

$$A_3 = \begin{cases} 9.06 \cdot 10^7 \frac{(1 - 6.9 \cdot 10^{-7} E)}{b_e E}, & E \leq 1.4 \cdot 10^6 \\ 0, & E > 1.4 \cdot 10^6 \end{cases} \quad [4]$$

A_2 – коэффициент прилипания в парных столкновениях [м⁻¹]

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

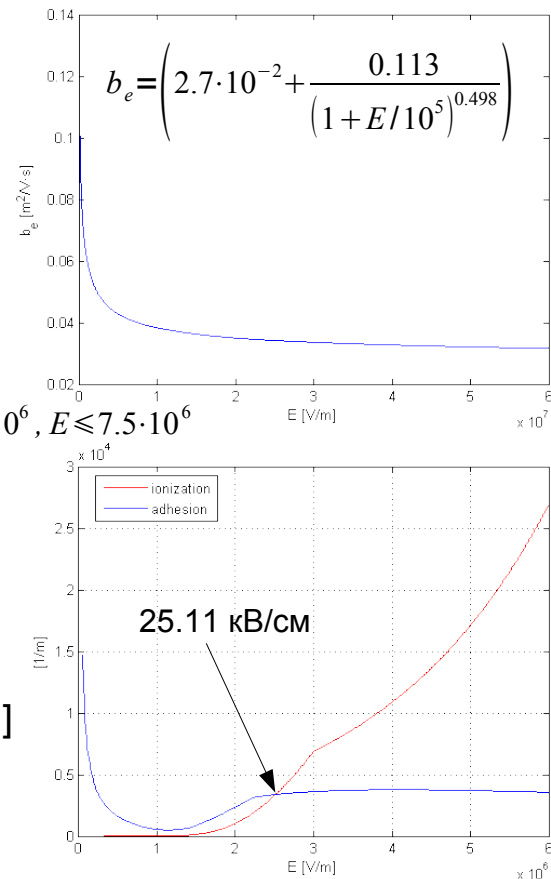
$$[\text{adhesion}] = A_2 + A_3$$

[1] Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Наука. 1992; с.42, рис.3.2

[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)

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(-D \nabla c - z u_m F c \nabla V) = R - \mathbf{u} \cdot \nabla c \quad R = [\textit{ionization}] b_e E c_2 - \alpha c c_2 - \beta c c_3$$

$\alpha = 1e-13$ коэффициент объемной электрон-ионной рекомбинации [м³/моль с] ^[1]

$\beta = 1e-13$ коэффициент объемной ион-ионной рекомбинации [м³/моль с] ^[2]

$D = D_p$ коэффициент диффузии (изотропный) [м²/с]

$R = (t>0) * (\textit{ionization} * b_e * \textit{normE_es} * c^2 - \alpha * c * c_2 - \beta * c * c_3)$

скорость реакции [моль/(м³ с)]

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

$Z = 1$ заряд частиц (относительно заряда электрона)

$u=0, v=0$ компоненты вектора \mathbf{u} [м/с]

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

Уравнение Нернста-Планка без электронейтральности для электронов (2)

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

$D = D_e$ коэффициент диффузии (изотропный) [м²/с]

$R = (t>0) * (\textit{ionization} * b_e * \textit{normE_es} * c^2 - \alpha * c * c_2 - \textit{adhesion} * b_e * \textit{normE_es} * c^2)$

скорость реакции [моль/(м³ с)]

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

$Z = -1$ заряд частиц (относительно заряда электрона)

$u=0, v=0$ компоненты вектора \mathbf{u} [м/с]

$V = V$ 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

Система уравнений (продолжение)

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

$$\frac{\partial c_3}{\partial t} + \nabla(-D \nabla c_3 - z u_m F c_3 \nabla V) = R - \mathbf{u} \cdot \nabla c_3 \quad R = [\text{adhesion}] b_e E c_2 - \beta c c_3$$

$D = D_e$ коэффициент диффузии (изотропный) [м²/с]
 $R = (t > 0) * (\text{adhesion} * b_e * \text{normE_es} * c_2 - \beta * c * c_3)$
 $u_m = b_m / 1e5$ скорость реакции [моль/(м³ с)]
 $Z = -1$ подвижность [с моль/кг]
 $u=0, v=0$ заряд частиц (относительно заряда электрона)
 $V = V$ компоненты вектора \mathbf{u} [м/с]
потенциал [В] (рассчитывается в третьем уравнении)

Уравнение Пуассона (модуль электростатики) (4)

$$-\nabla \cdot \varepsilon_0 \varepsilon \nabla V = \rho \quad \rho = F (z_1 c_1 + z_2 c_2 + z_3 c_3) \quad \text{Постоянная Фарадея: } F = e N_a \approx 96485 \text{ [Кл/моль]}$$

$\varepsilon = 1$ диэлектрическая проницаемость
 $\rho = \text{electr} * (c - c_2 - c_3)$ объемная плотность заряда [Кл/м³]

Global expressions:

$RR = \sqrt{R^2 + Z^2}$
 $VOLT = -V_0 * 1E-3 * (1/0.001 - 1/RR)$
 $b_e = (2.7e-2 + 0.113 / (1 + \text{normE_es} / 1e5))^{0.498}$
 $\text{ionization_1} = (\text{normE_es} <= 3e6) * (8e10 * \exp(-13.2e6 / \text{normE_es})) / (b_e * (\text{normE_es} + 1))$
 $\text{ionization_2} = (\text{normE_es} > 3e6) * (\text{normE_es} <= 7.5e6) * (\exp(8.8396 + (\text{normE_es} - 3e6) / 1e5 * 0.045392))$
 $\text{ionization_3} = (\text{normE_es} > 7.5e6) * (1e6 * \exp(-22e6 / \text{normE_es}))$
 $\text{ionization} = \text{ionization_1} + \text{ionization_2} + \text{ionization_3}$
 $\text{adhesion_1} = (\text{normE_es} <= 2.2e6) * (9.54e9 * \exp(-7.32e6 / \text{normE_es})) / (b_e * (\text{normE_es} + 1)) +$
 $(\text{normE_es} > 2.2e6) * (1.54e9 * \exp(-3.28e6 / \text{normE_es})) / (b_e * (\text{normE_es} + 1))$
 $\text{adhesion_2} = (\text{normE_es} <= 14e5) * (9.06e7 * (1 - 6.9e-7 * \text{normE_es})) / (b_e * (\text{normE_es} + 1))$
 $\text{adhesion} = \text{adhesion_1} + \text{adhesion_2}$

Constants:

$b_p = 1.5e-4$
 $D_p = 25e-3 * b_p * 100$
 $\alpha = 1e-13$
 $\text{electr} = 1.6e-19$
 $b_m = 1.5e-4$
 $D_e = 0.35$
 $qq0 = 1e16$
 $V_0 = 10000$
 $D_m = 25e-3 * b_m * 100$
 $\beta = 1e-13$

Граничные условия, начальные условия

Изоляция: $n \cdot N = 0$

Поток: $-n \cdot N = N_0$

$$N = -D \nabla c - z u_m F c \nabla V + c u$$

ntflux_c_chekf – полный поток

Состоит из трех слагаемых:

- электрофоретическое
- диффузионное
- конвекционное

(1) $n \cdot N = 0$ (изоляция)

(2) $N_0 = -ntflux_c2_chekf2$ (поток)

(3) $N_0 = -ntflux_c3_chekf3$ (поток)

(4) $\varphi = 0$

Активен только модуль электростатики

$$(4) \varphi(x, y) = V_0 \cdot \left(\frac{R_1}{\sqrt{r^2 + z^2}} - 1 \right)$$

Размеры:

$R_1 = 1$ мм

$R_2 = 2.01$ мм

Ось симметрии

(1) $n \cdot N = 0$ (изоляция)

(2) $n \cdot N = 0$ (изоляция)

(3) $n \cdot N = 0$ (изоляция)

$V_0 = 10$ кВ

Катод

$$(4) \varphi = V_0 \cdot \left(\frac{R_1}{R_2} - 1 \right)$$

(1) $N_0 = -ntflux_c_chekf$ (поток)

(2) $n \cdot N = 0$ (изоляция)

(3) $n \cdot N = 0$ (изоляция)

Начальная концентрация электронов:

$qq0 = 1e16$ моль/м³

В остальной части модели начальная концентрация электронов нулевая.

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

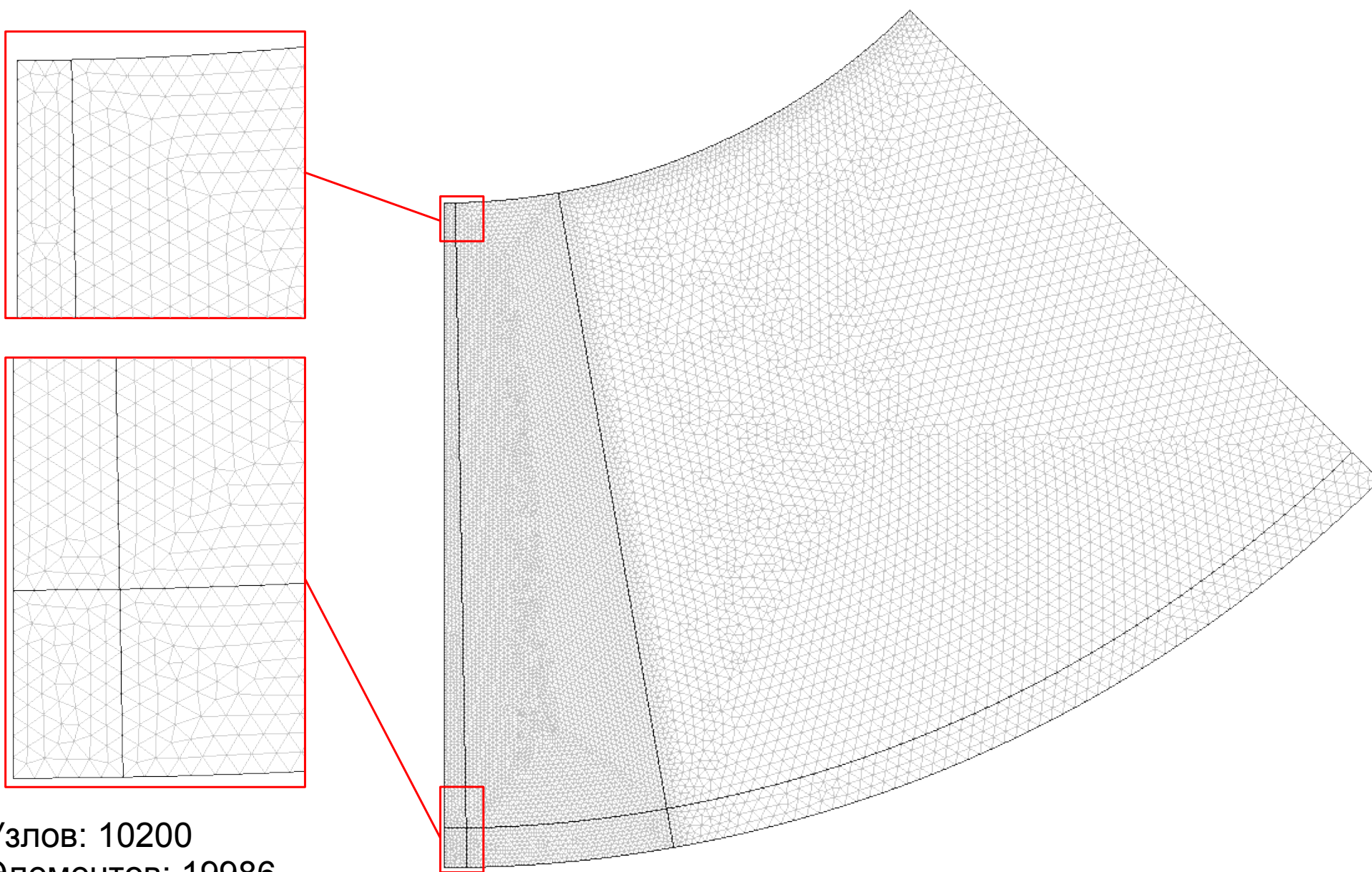
Number of iterations: 2

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.

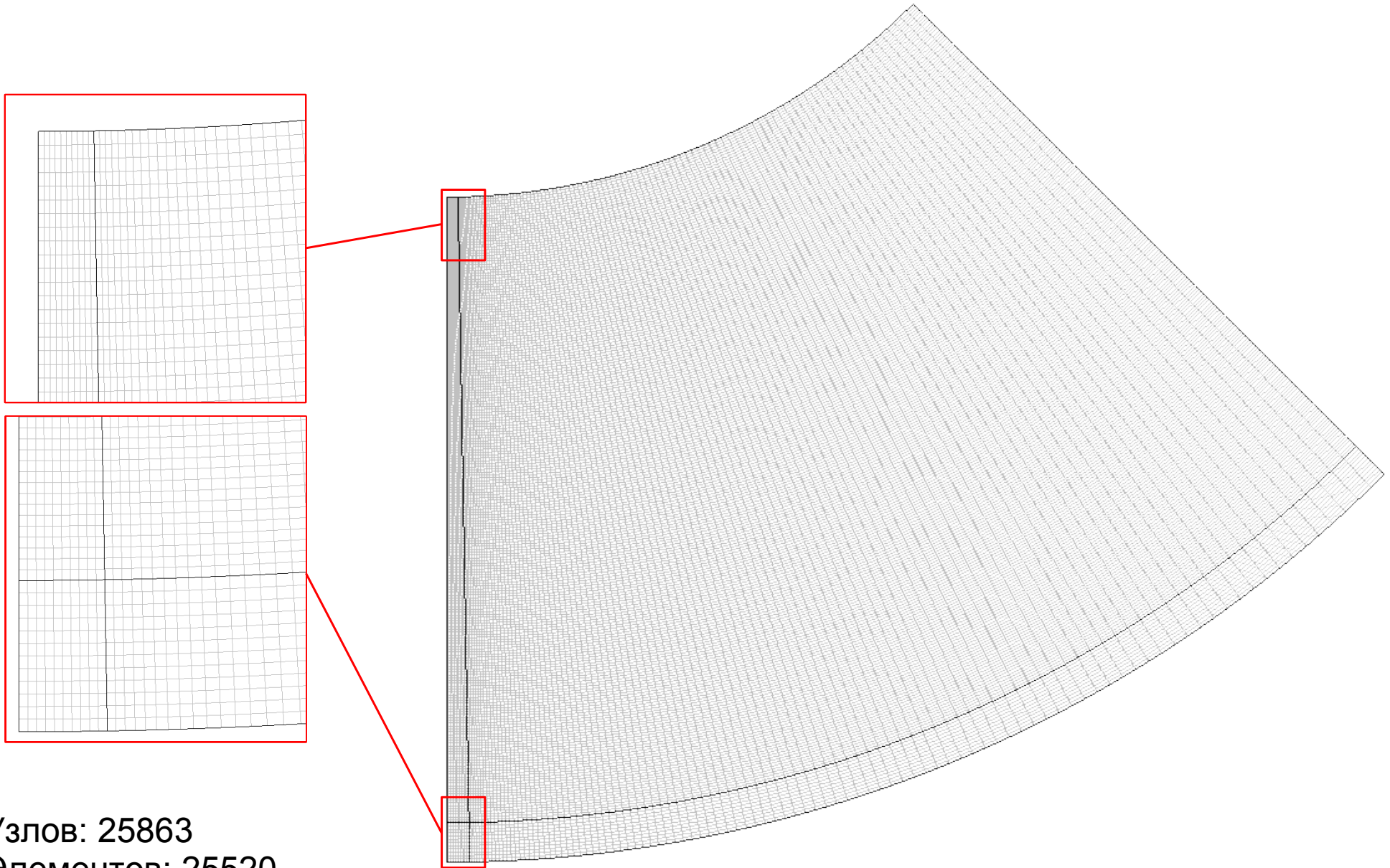
Конечноэлементная сетка



Узлов: 10200
Элементов: 19986
Степеней свободы: 161540

Модель для воздуха в пакете Comsol

Конечноэлементная сетка



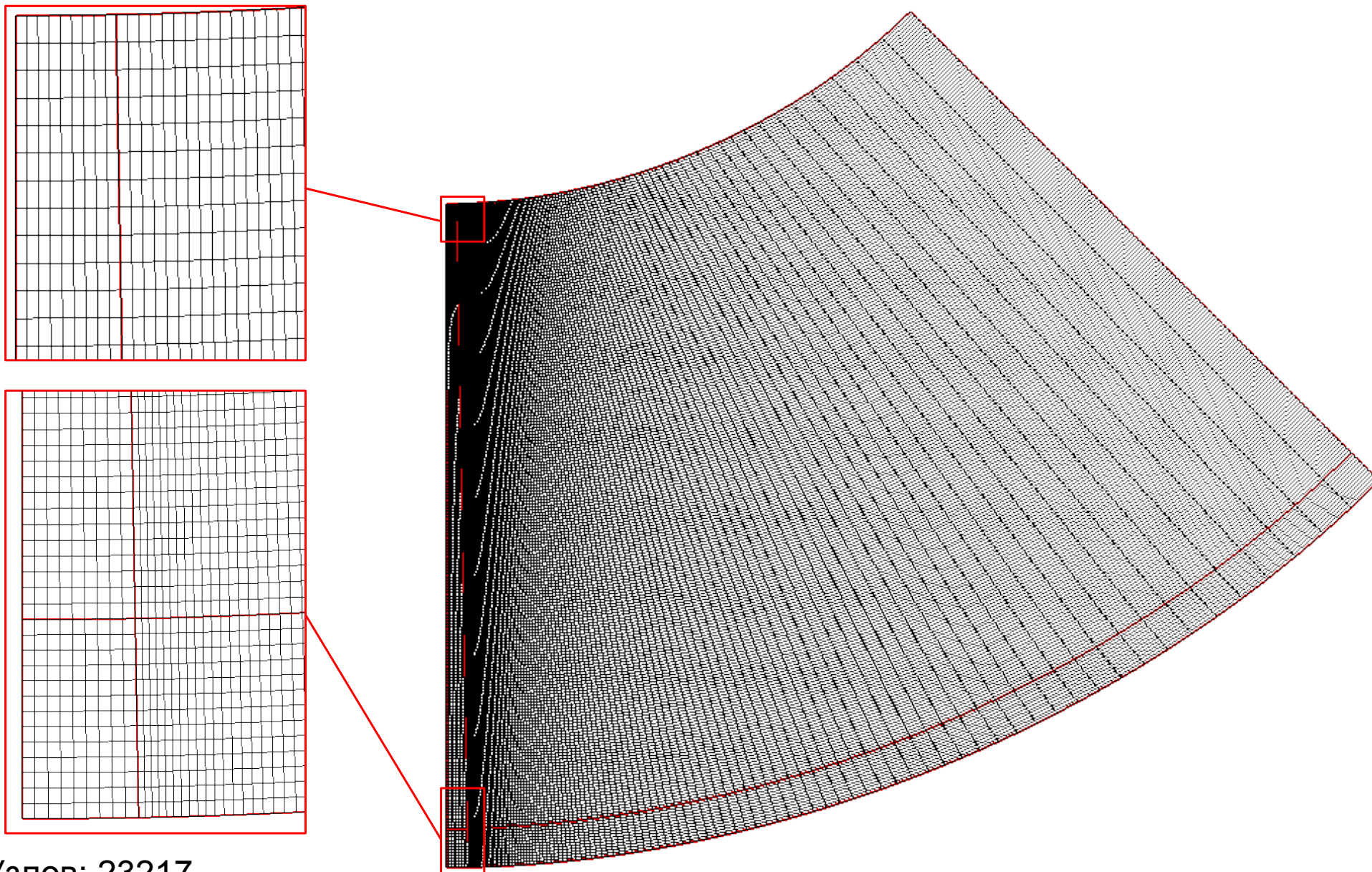
Узлов: 25863

Элементов: 25520

Степеней свободы: 308295

Модель для аргона в пакете Comsol

Конечноэлементная сетка



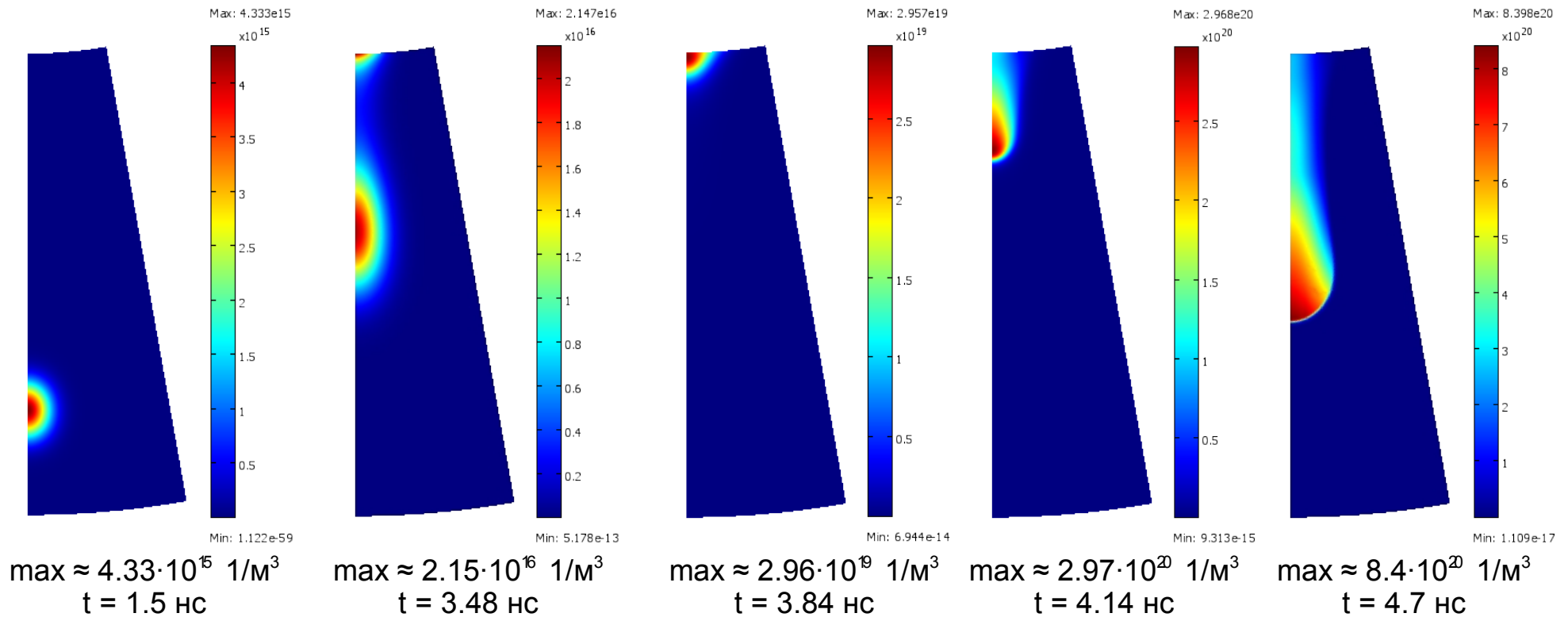
Узлов: 23217

Элементов: 22896

Модель для воздуха в пакете CFD-ACE

Концентрация электронов [1/м³]

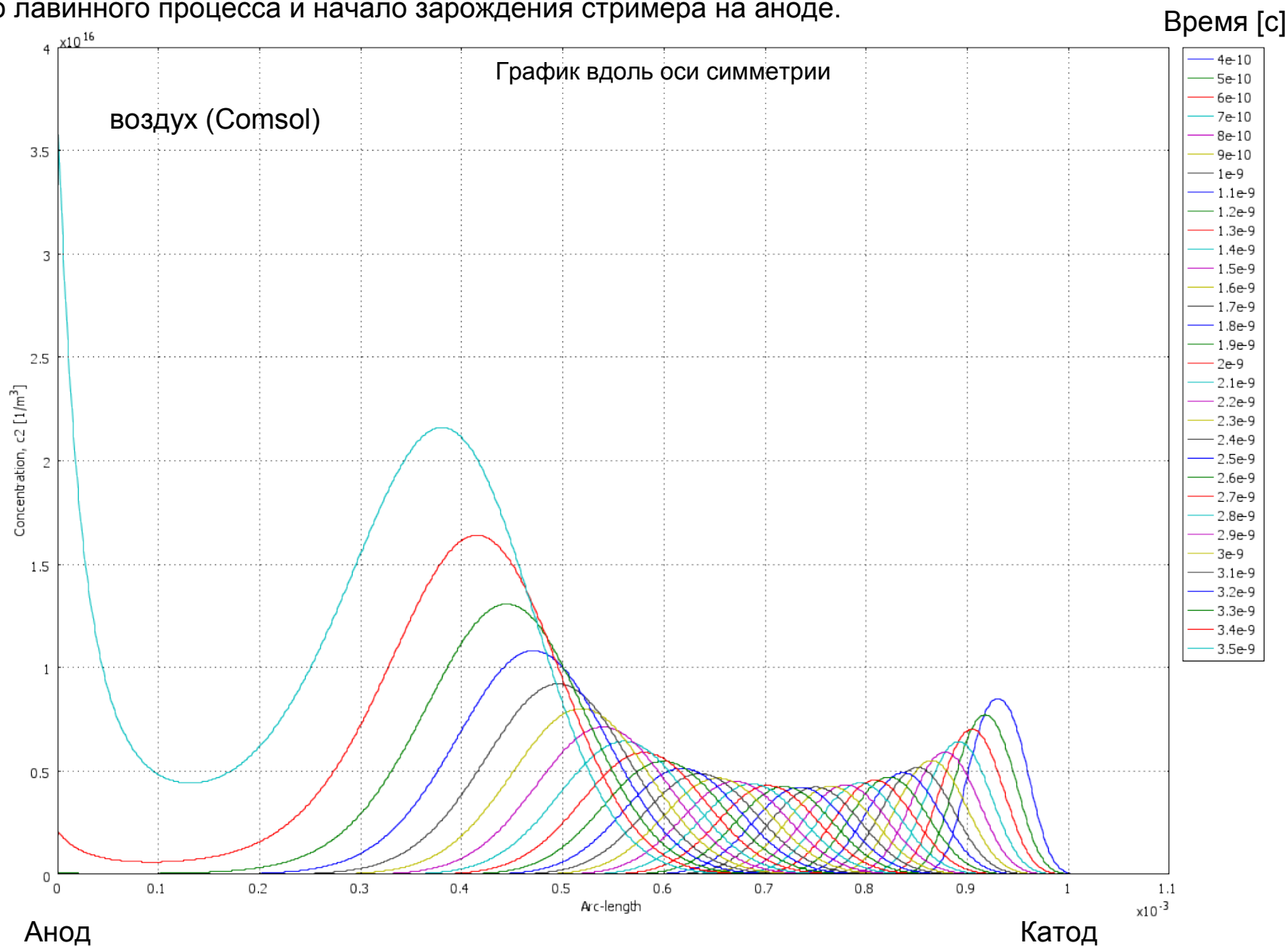
воздух (Comsol)



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 прорасти 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]

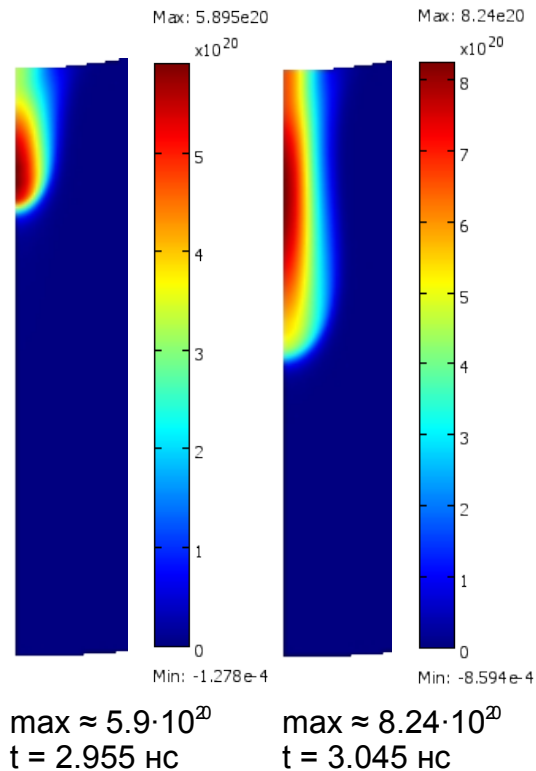
На графике показано распространение начального пакета электронов от катода к аноду, начало лавинного процесса и начало зарождения стримера на аноде.



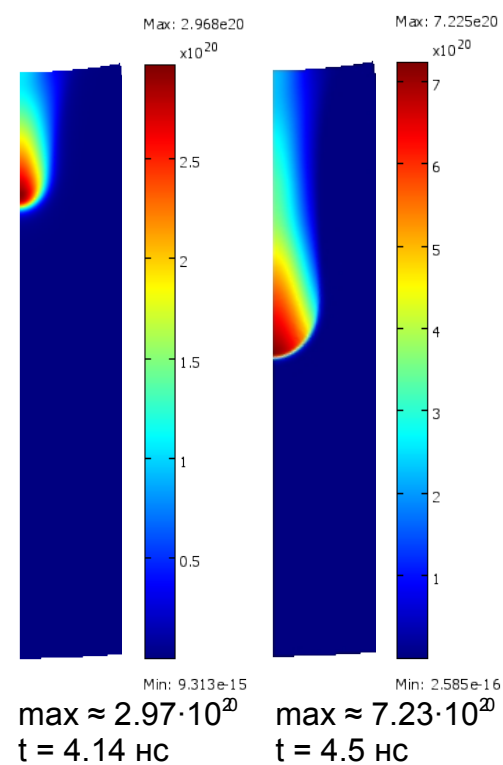
Концентрация электронов [1/м³]

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

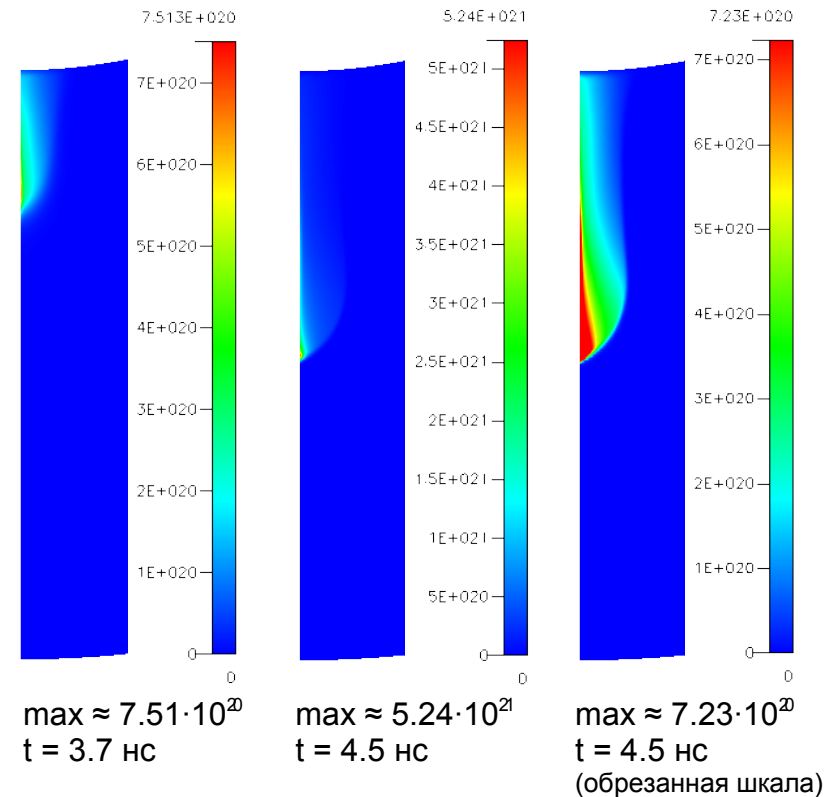
аргон (Comsol)



воздух (Comsol)



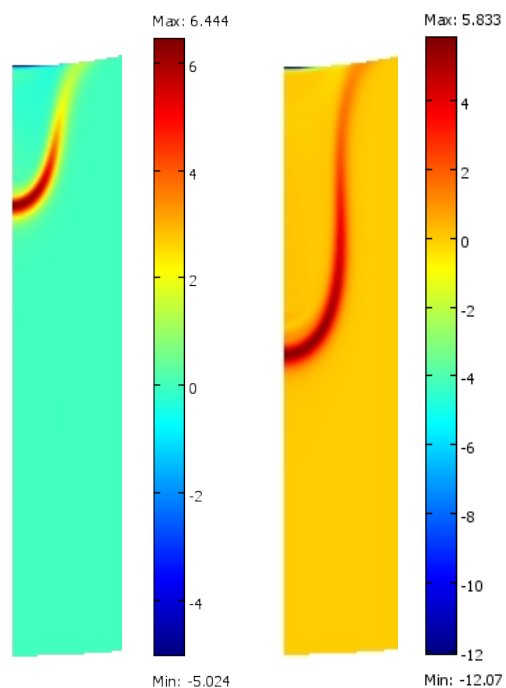
воздух (CFD-ACE)



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]

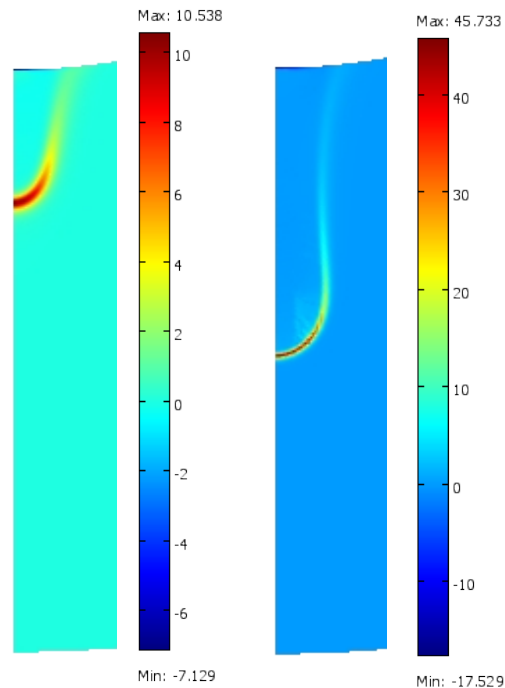
аргон (Comsol)



min \approx -5.0 Кл
max \approx 6.4 Кл
t = 2.955 нс

min \approx -12.1 Кл
max \approx 5.8 Кл
t = 3.045 нс

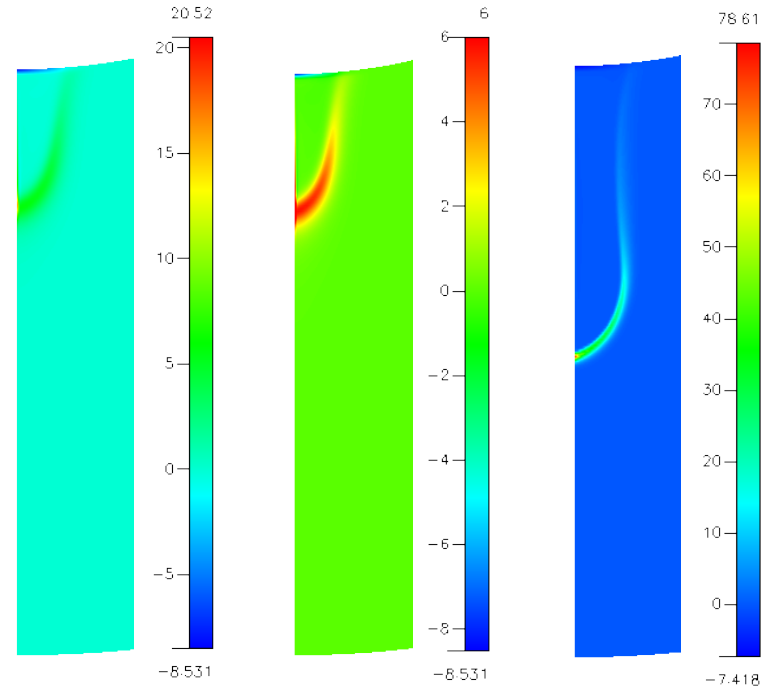
воздух (Comsol)



min \approx -7.1 Кл
max \approx 10.5 Кл
t = 4.14 нс

min \approx -17.5 Кл
Max \approx 45.7 Кл
t = 4.5 нс

воздух (CFD-ACE)



min \approx -8.5 Кл
max \approx 20.5 Кл
t = 3.7 нс

min \approx -8.5 Кл
max \approx 6 Кл
t = 3.7 нс

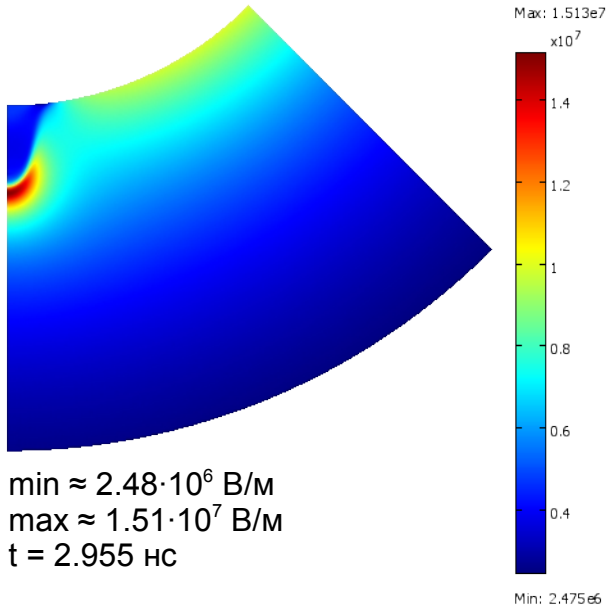
(обрезанная шкала)

min \approx -7.4 Кл
max \approx 78.6 Кл
t = 4.5 нс

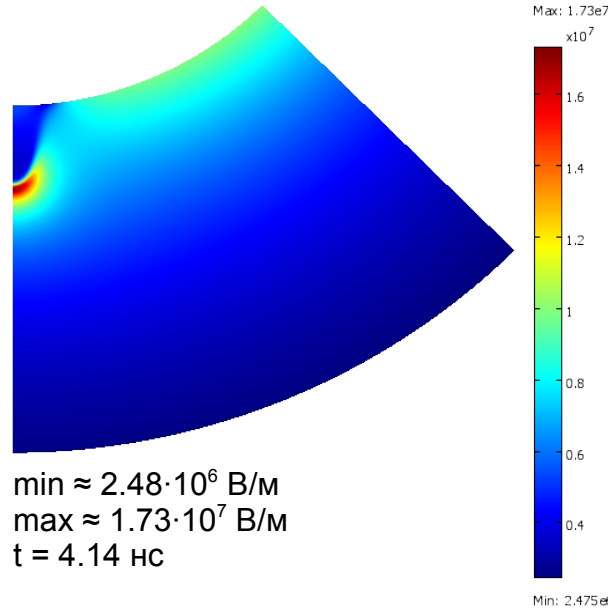
Положительный заряд (суммарный) сосредоточен в области головки стримера и на границе плазменной области. Также виден максимум отрицательного заряда в узкой прианодной области. В плазменном канале стримера суммарный заряд равен нулю.

Напряженность электрического поля [В/м]

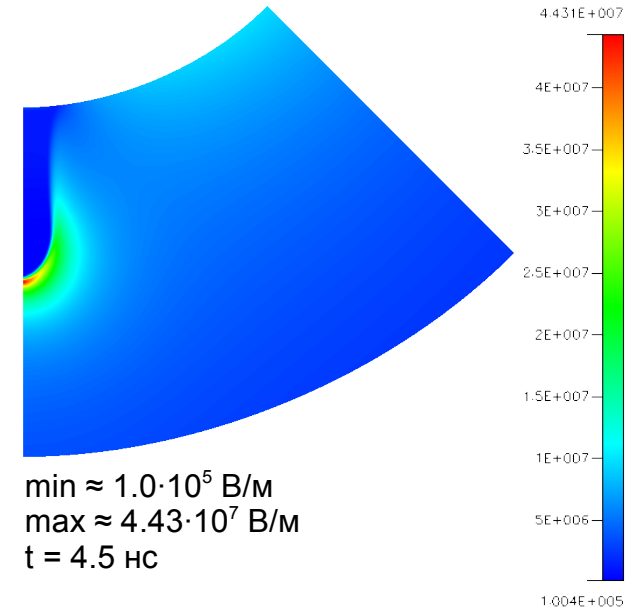
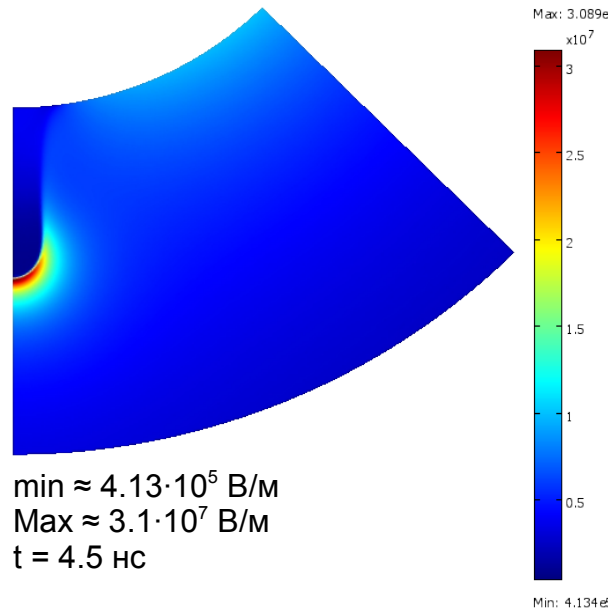
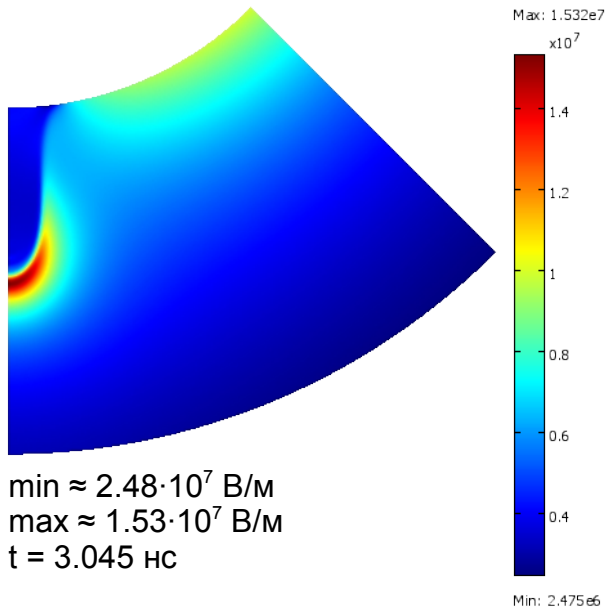
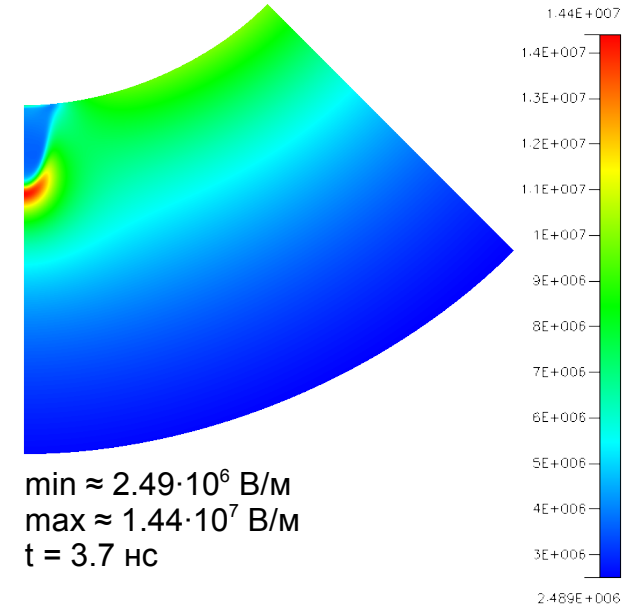
аргон (Comsol)



воздух (Comsol)

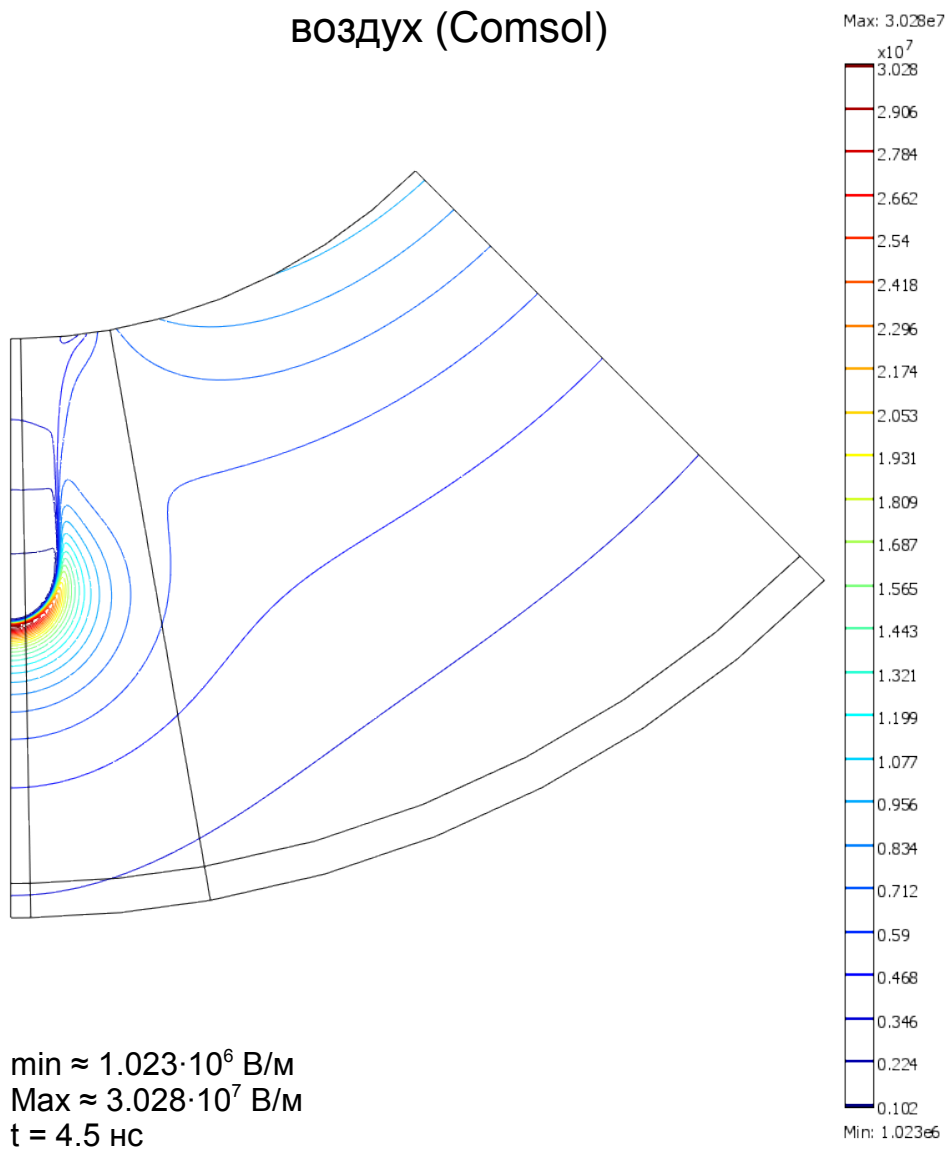


воздух (CFD-ACE)

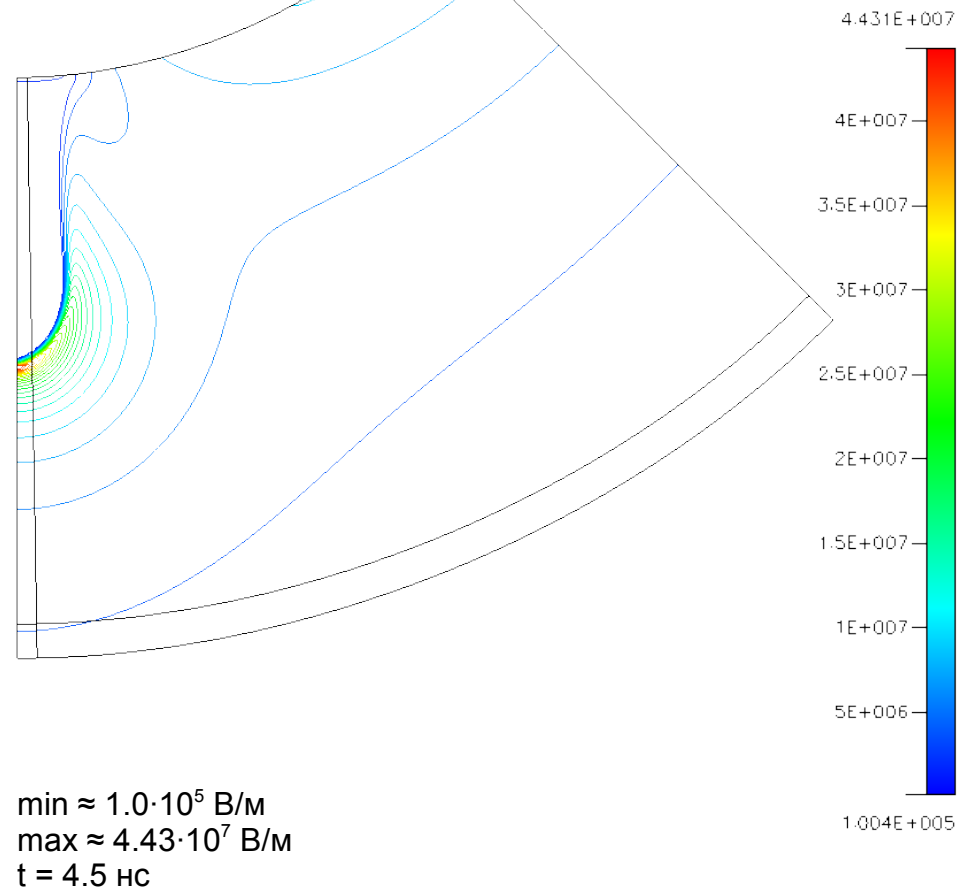


Напряженность электрического поля [В/м]

воздух (Comsol)



воздух (CFD-ACE)



Проверка условия однородности структуры поля в плазме

Дебаевский радиус:

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

В данной модели:

$$\frac{k T_e}{e} = 1 [B]$$

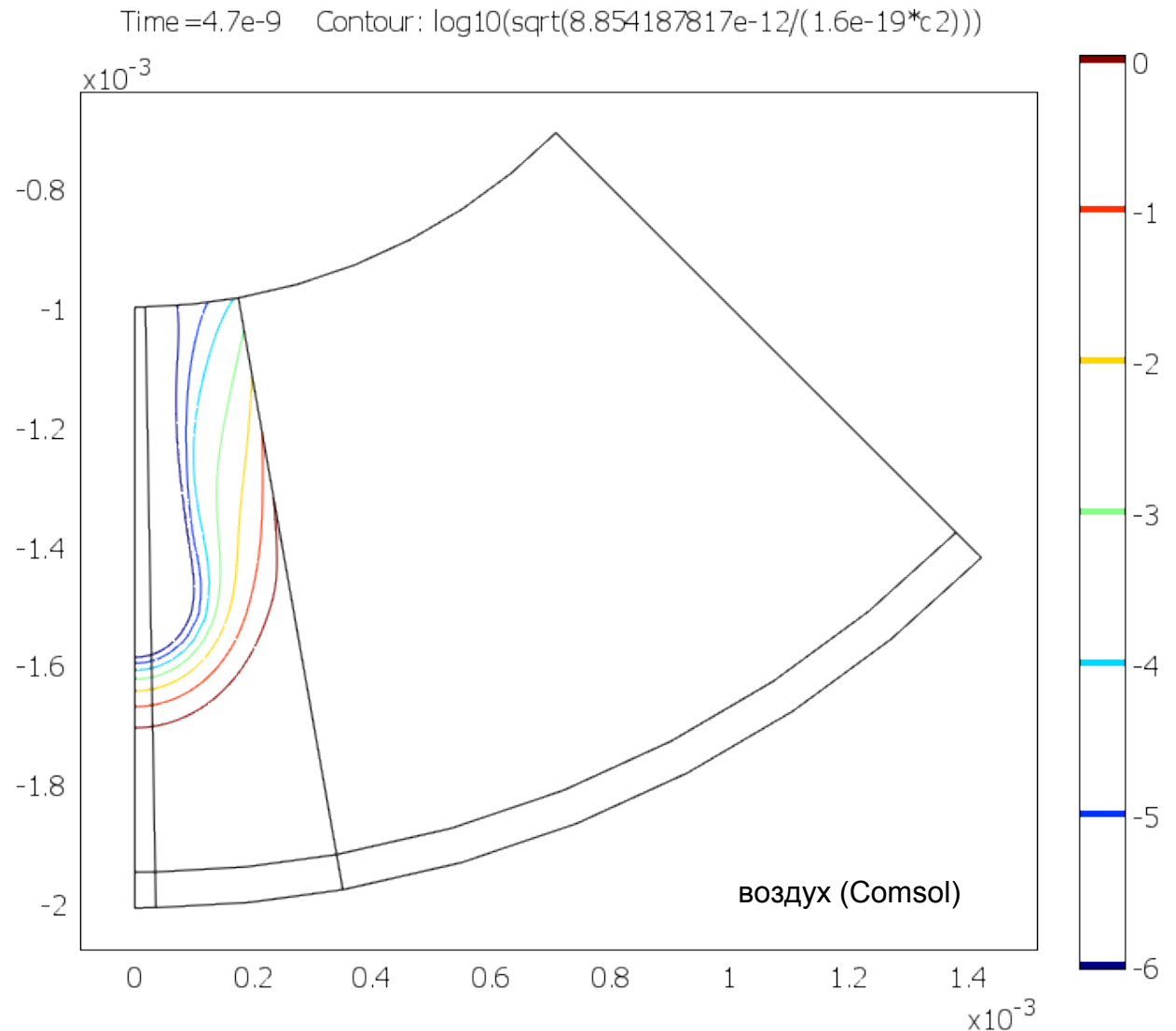
Условие:

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

Итог:

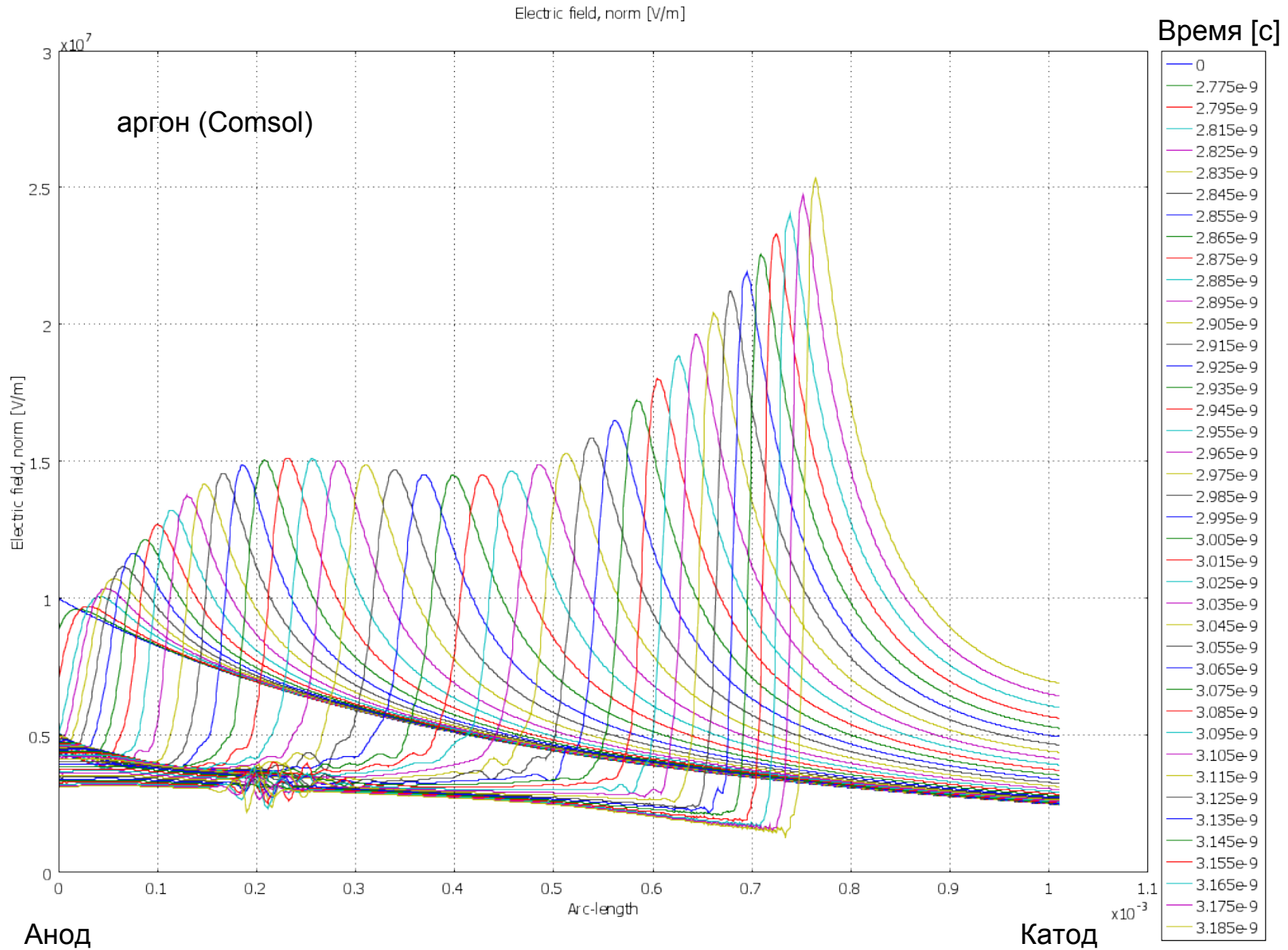
$$d \leq 1 \text{ мкм}$$
$$R_p \approx 100 \text{ мкм}$$

Контурный график десятичного логарифма от радиуса Дебая



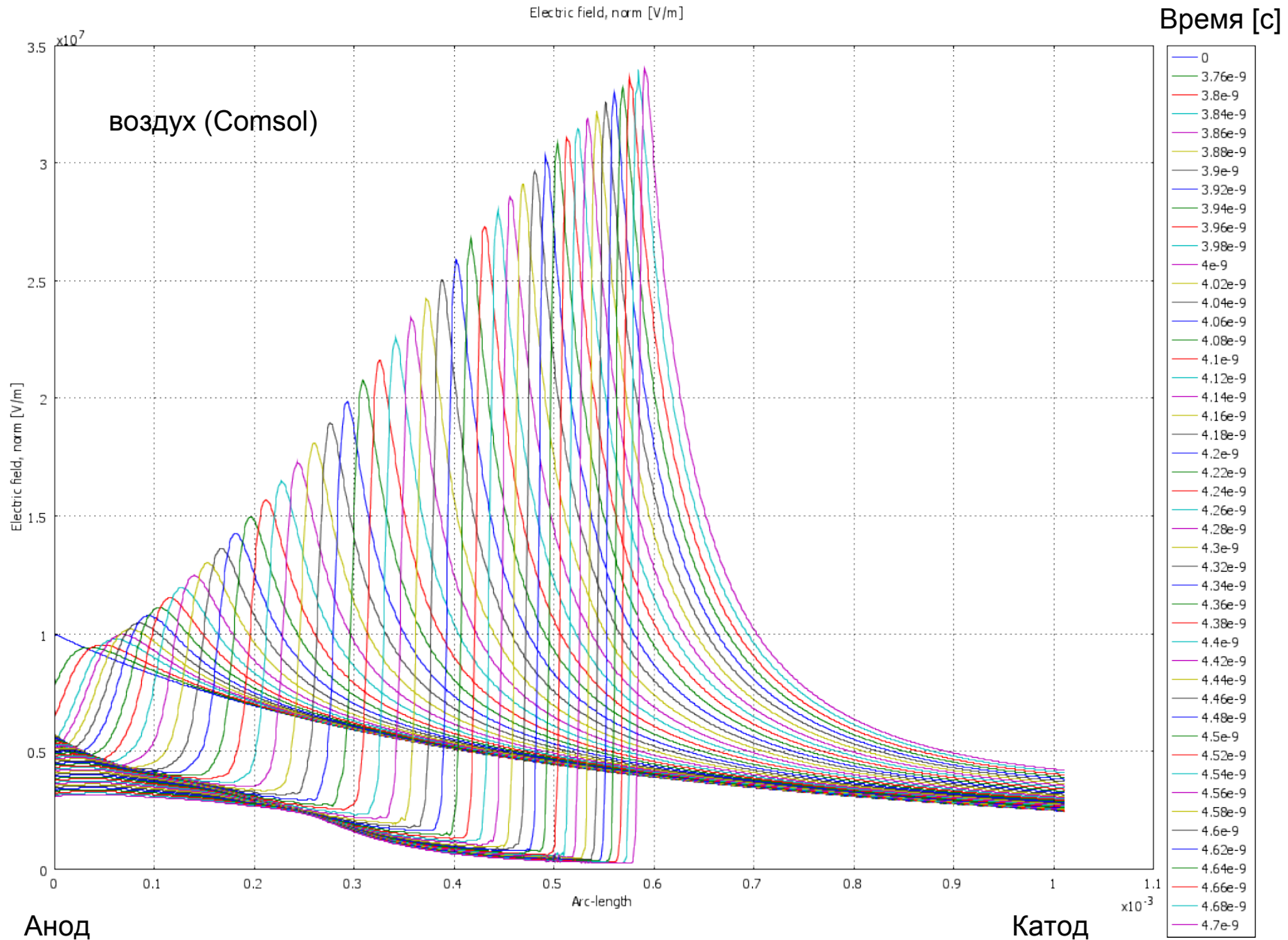
Напряженность электрического поля вдоль оси симметрии [В/м]

На графике показано прорастание стримера от анода к катоду.



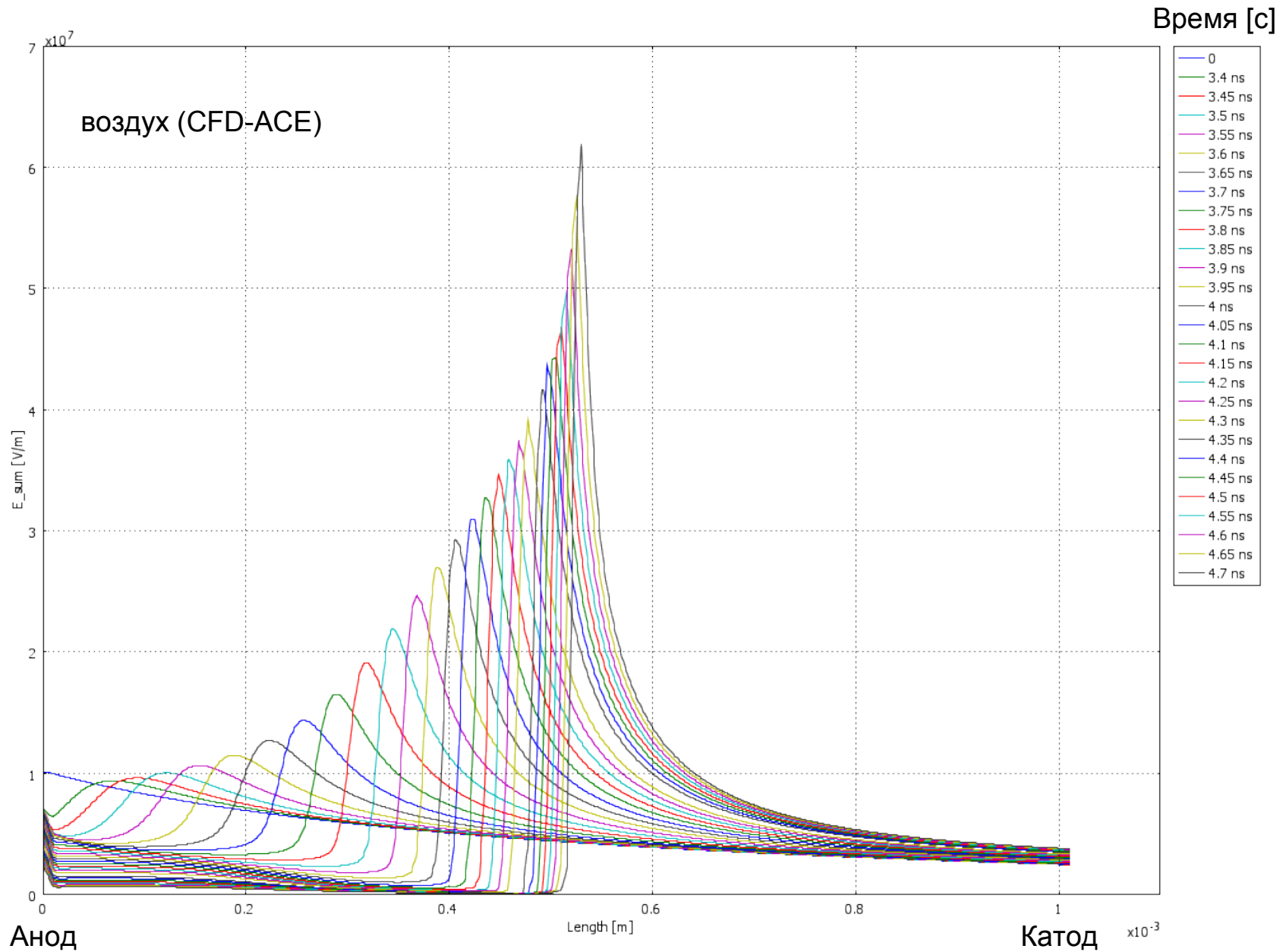
Напряженность электрического поля вдоль оси симметрии [В/м]

На графике показано прорастание стримера от анода к катоду.



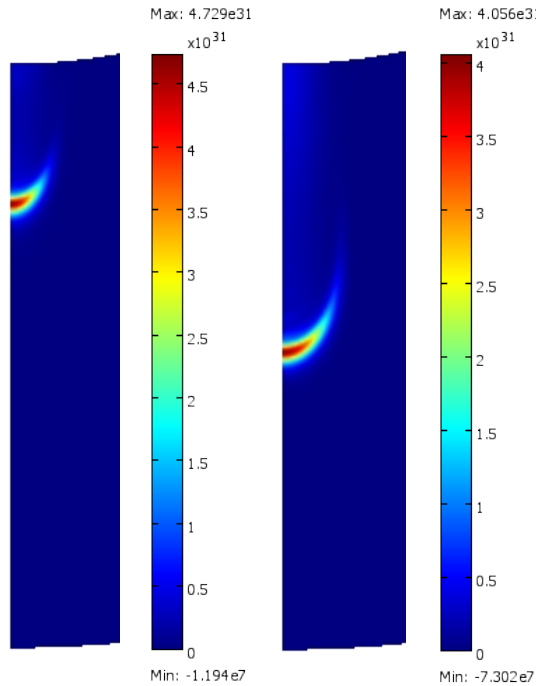
Напряженность электрического поля вдоль оси симметрии [В/м]

На графике показано прорастание стримера от анода к катоду.



Интенсивность ионизации [$1/\text{м}^3\text{с}$]

аргон (Comsol)

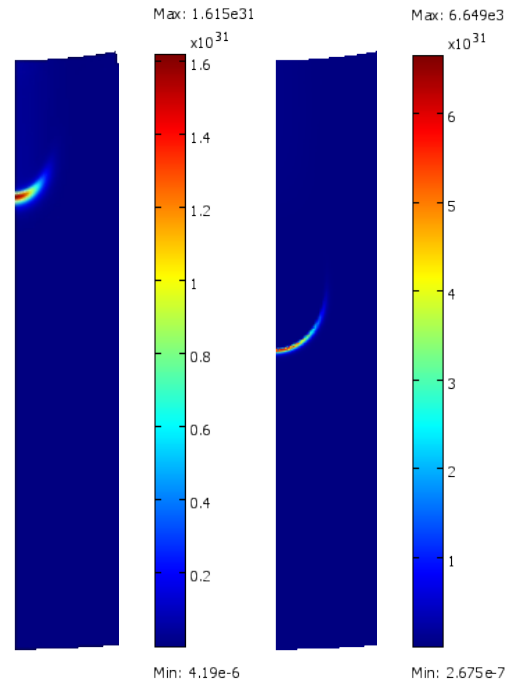


$\max \approx 4.73 \cdot 10^{31}$
 $t = 2.955 \text{ нс}$

$\max \approx 4.06 \cdot 10^{31}$
 $t = 3.045 \text{ нс}$

$\text{ionization} * \text{be} * \text{normE_es} * \text{c}2$

воздух (Comsol)

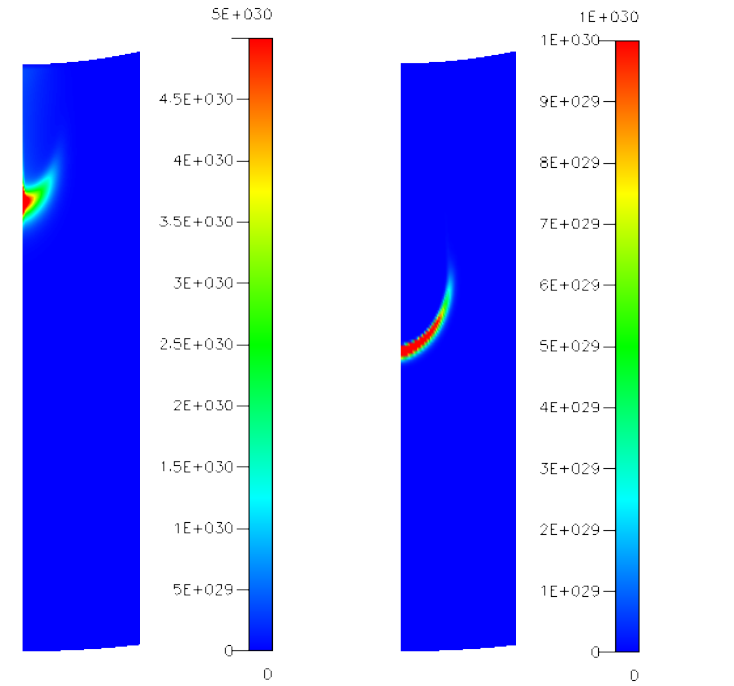


$\max \approx 1.62 \cdot 10^{31}$
 $t = 4.14 \text{ нс}$

$\max \approx 6.65 \cdot 10^{31}$
 $t = 4.5 \text{ нс}$

$\text{ionization} * \text{be} * \text{normE_es} * \text{c}2$

воздух (CFD-ACE)



$\max \approx 2.41 \cdot 10^{31} \text{ 1/м}^3\text{с}$
 $t = 3.7 \text{ нс}$
(обрезанная до 5e30 шкала)

$\max \approx 1.08 \cdot 10^{32} \text{ 1/м}^3\text{с}$
 $t = 4.5 \text{ нс}$
(обрезанная до 1e30 шкала)

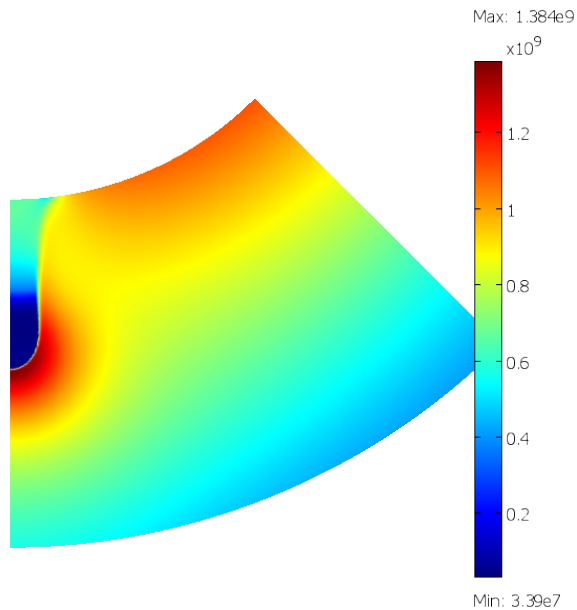
$\text{ioniz} = ("R_13" + "R_2") * 1e3 * 6.022e23$

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

Интенсивность прилипания [1/м³с]

воздух (Comsol)

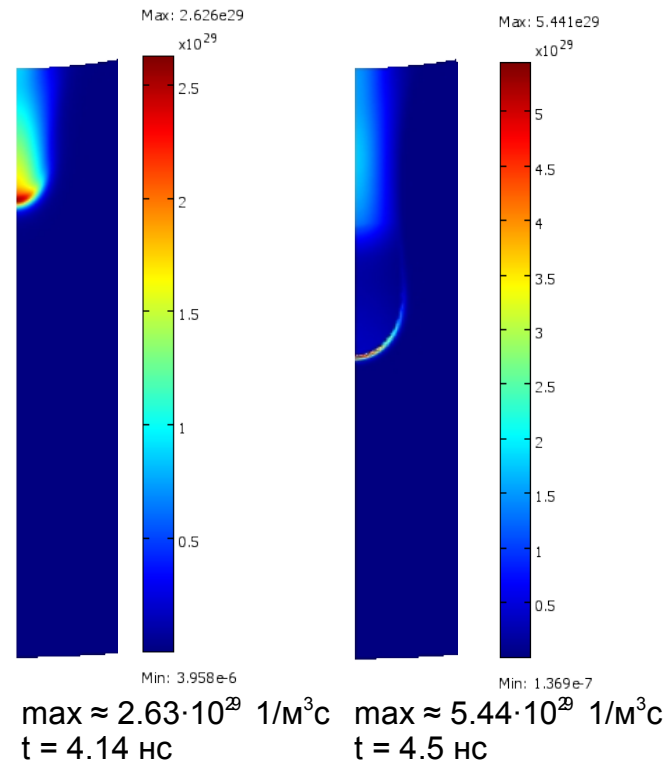
Частота прилипания



t = 4.5 нс

adhesion*be*normE_es

воздух (Comsol)

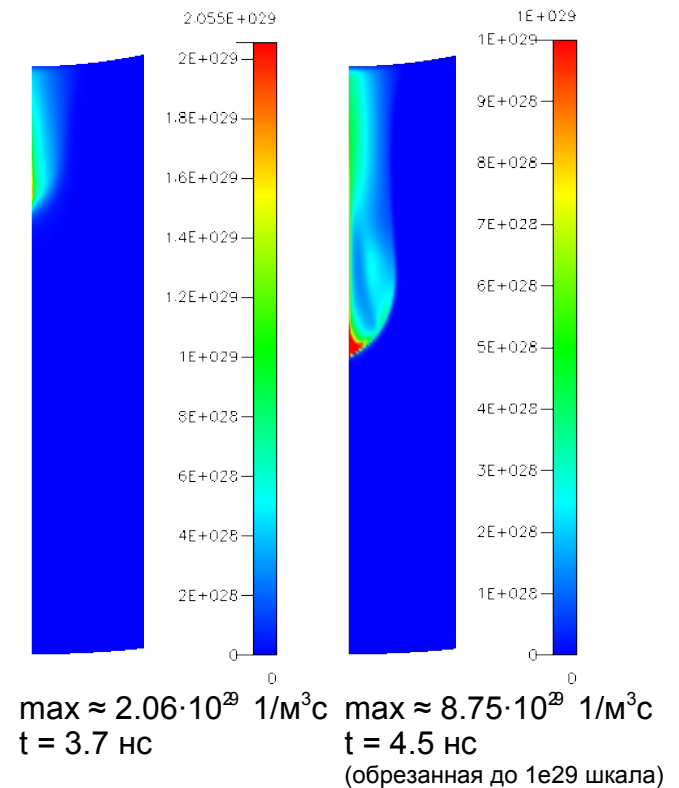


max $\approx 2.63 \cdot 10^{29}$ 1/м³с
t = 4.14 нс

max $\approx 5.44 \cdot 10^{29}$ 1/м³с
t = 4.5 нс

adhesion*be*normE_es*c2

воздух (CFD-ACE)



max $\approx 2.06 \cdot 10^{29}$ 1/м³с
t = 3.7 нс

max $\approx 8.75 \cdot 10^{28}$ 1/м³с
t = 4.5 нс
(обрезанная до 1e29 шкала)

adhes=("R_9"+"R_6"+"R_42")*1e3*6.022e23

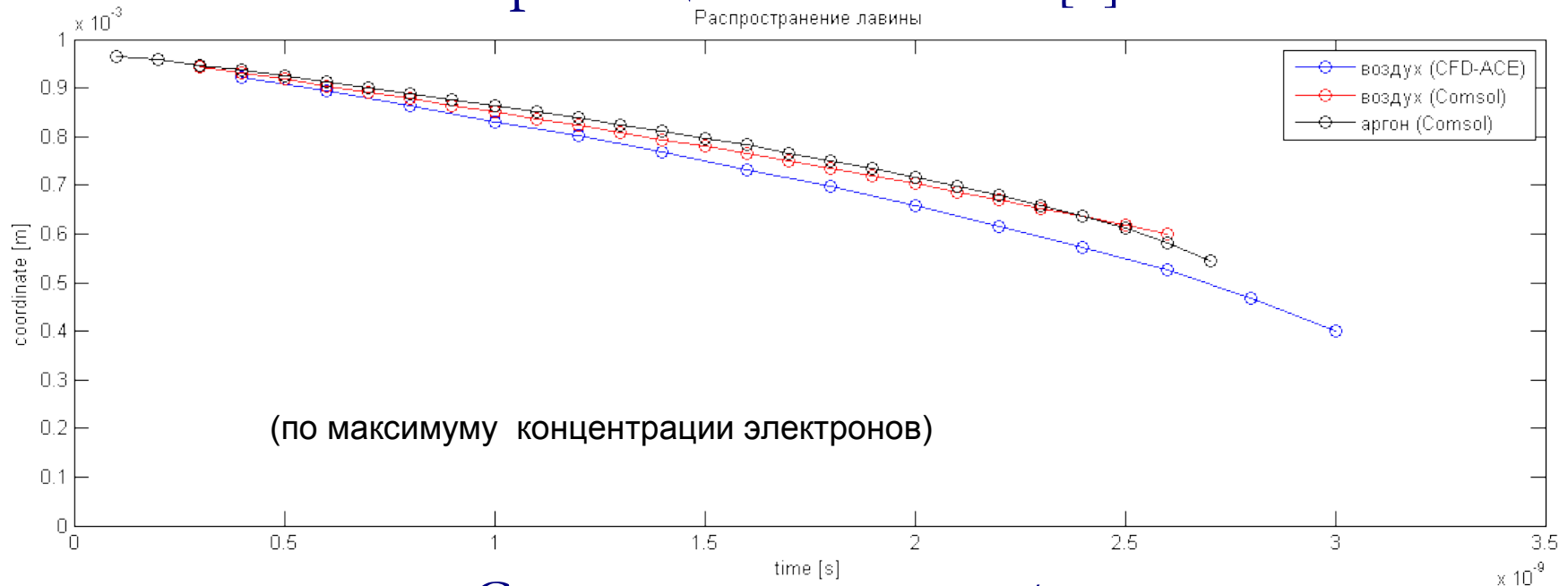
В момент времени t = 4.5 нс частота прилипания в Comsol модели для воздуха:

- максимальная $\approx 1.38 \cdot 10^9$ с⁻¹ → период ≈ 0.72 нс – это минимальное время жизни свободного электрона
- минимальная $\approx 3.39 \cdot 10^7$ с⁻¹ → период ≈ 29 нс – это максимальное время жизни свободного электрона

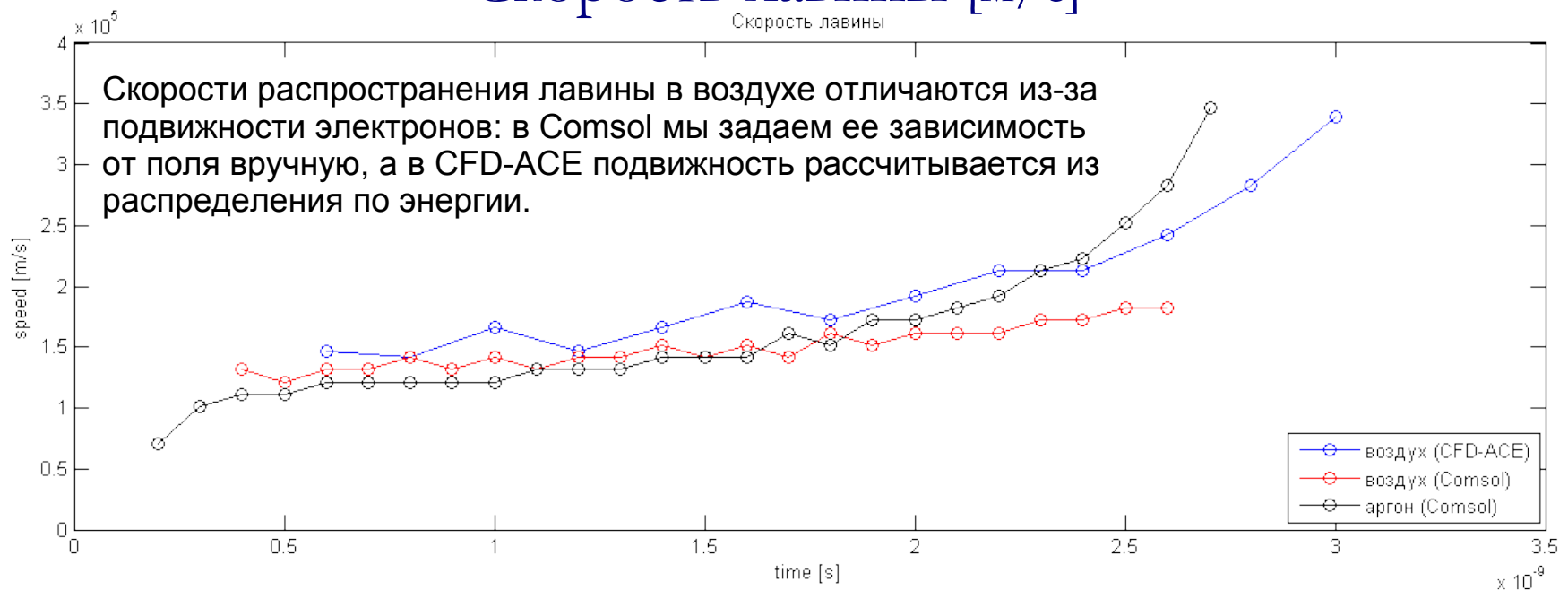
Т.о. среднее время жизни свободного электрона в воздухе для этой модели получилось около 15 нс.

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

Перемещение лавины [м]

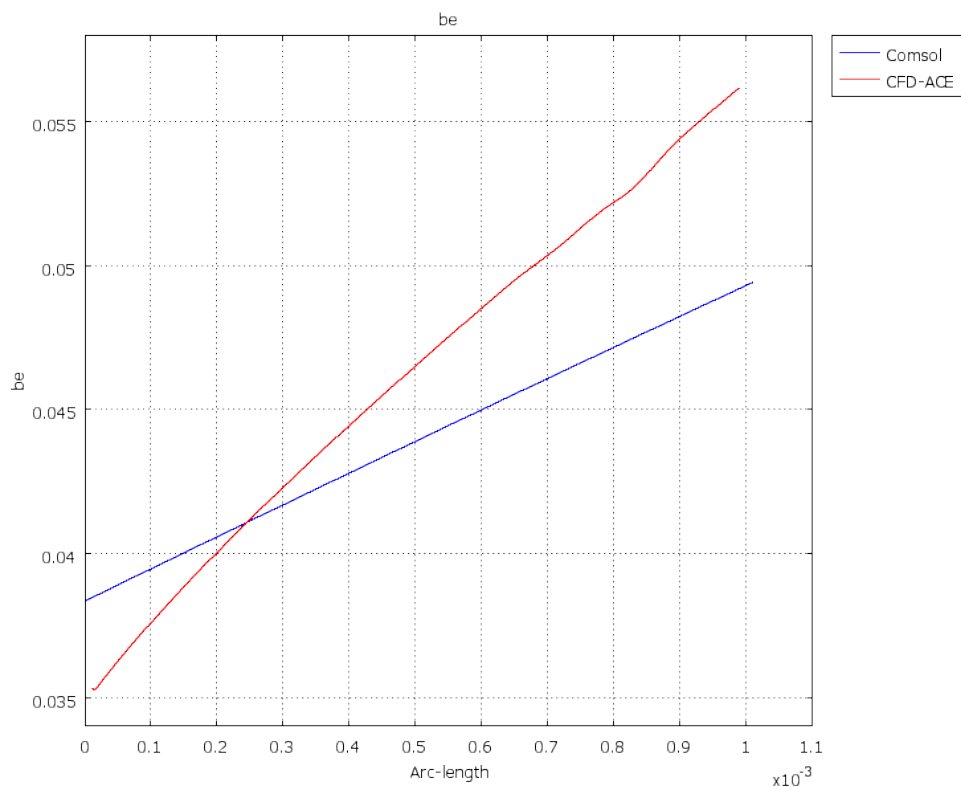


Скорость лавины [м/с]

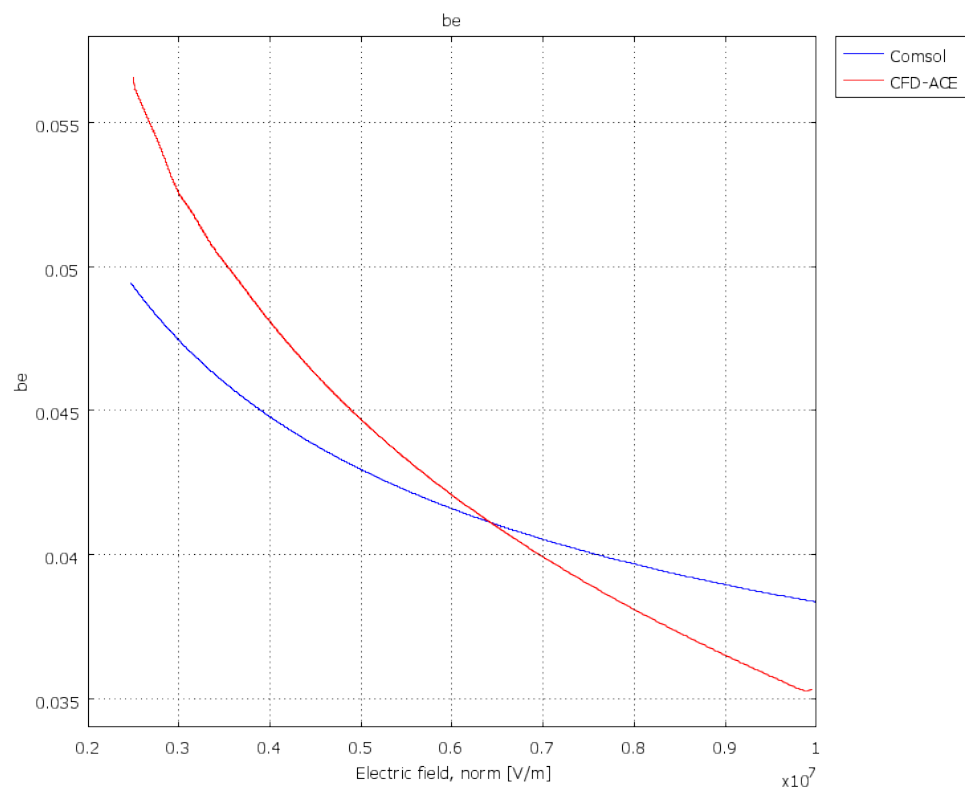


Подвижность электронов в воздухе [$\text{m}^2/\text{V}\cdot\text{s}$]

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

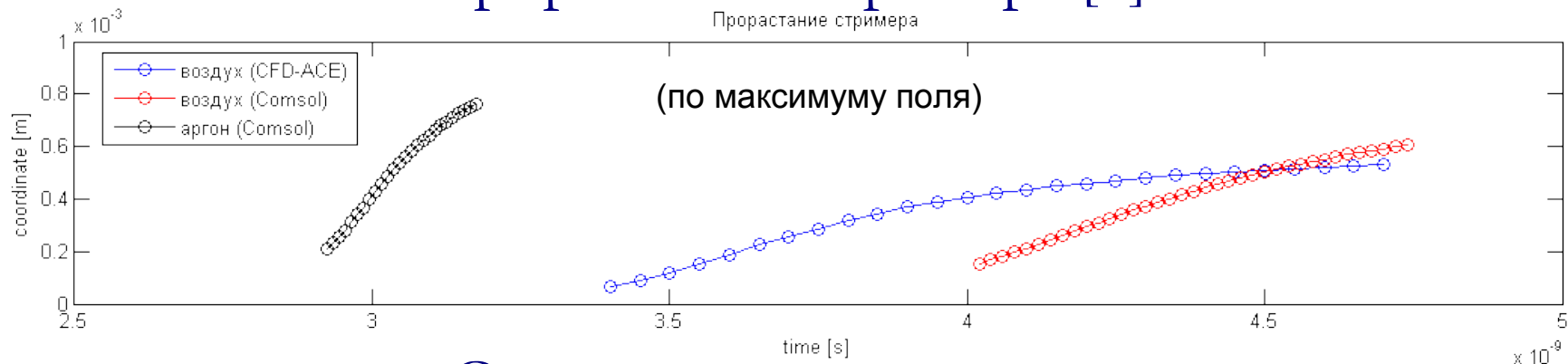


Параметрический график зависимости $b_e(E)$, в роли параметра – длина пути вдоль оси симметрии

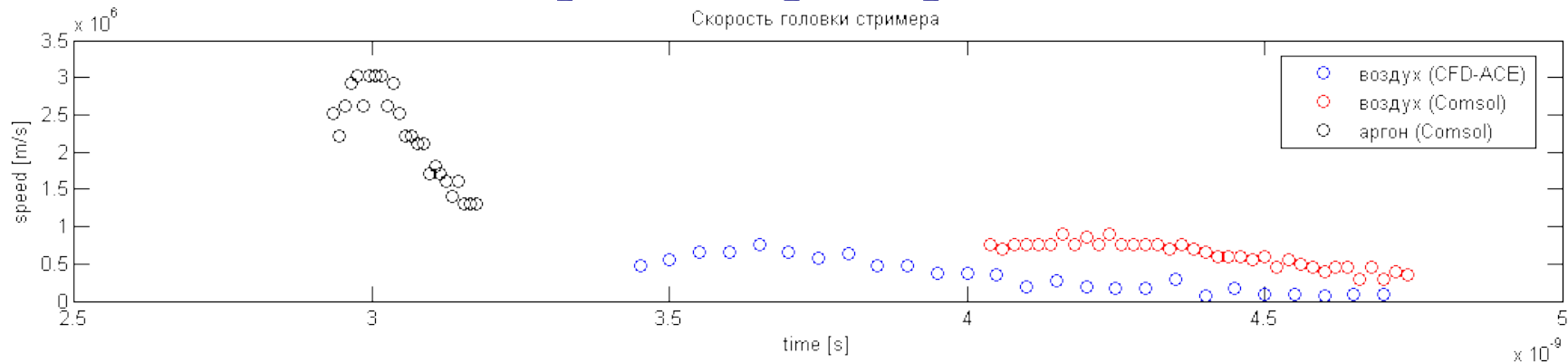


В модели для аргона подвижность задавалась постоянной величиной: $b_e = 4.3\text{e-}2$ [$\text{m}^2/\text{V}\cdot\text{s}$]

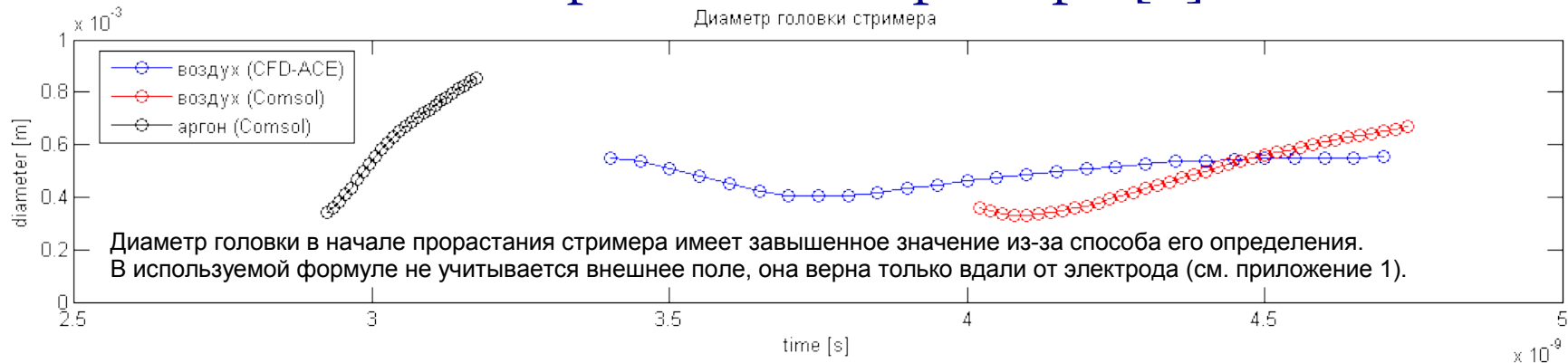
Прорастание стримера [м]



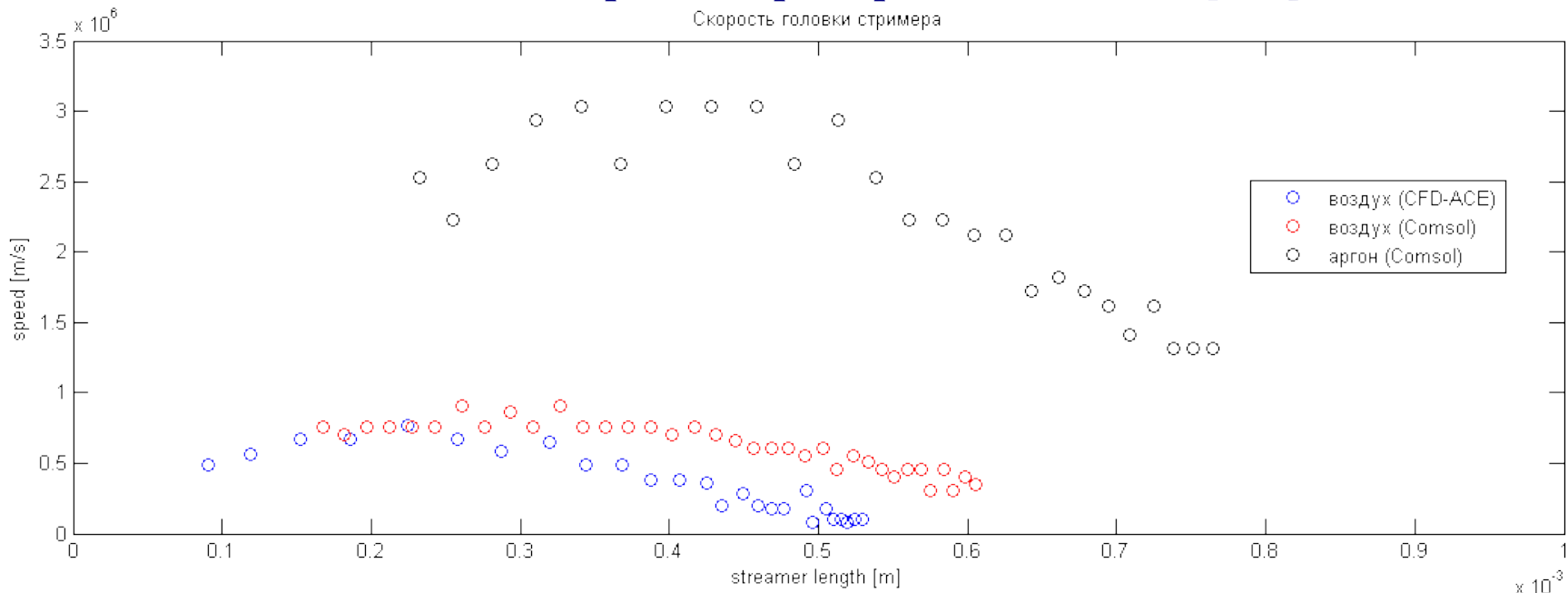
Скорость стримера [м/с]



Диаметр головки стримера [м]



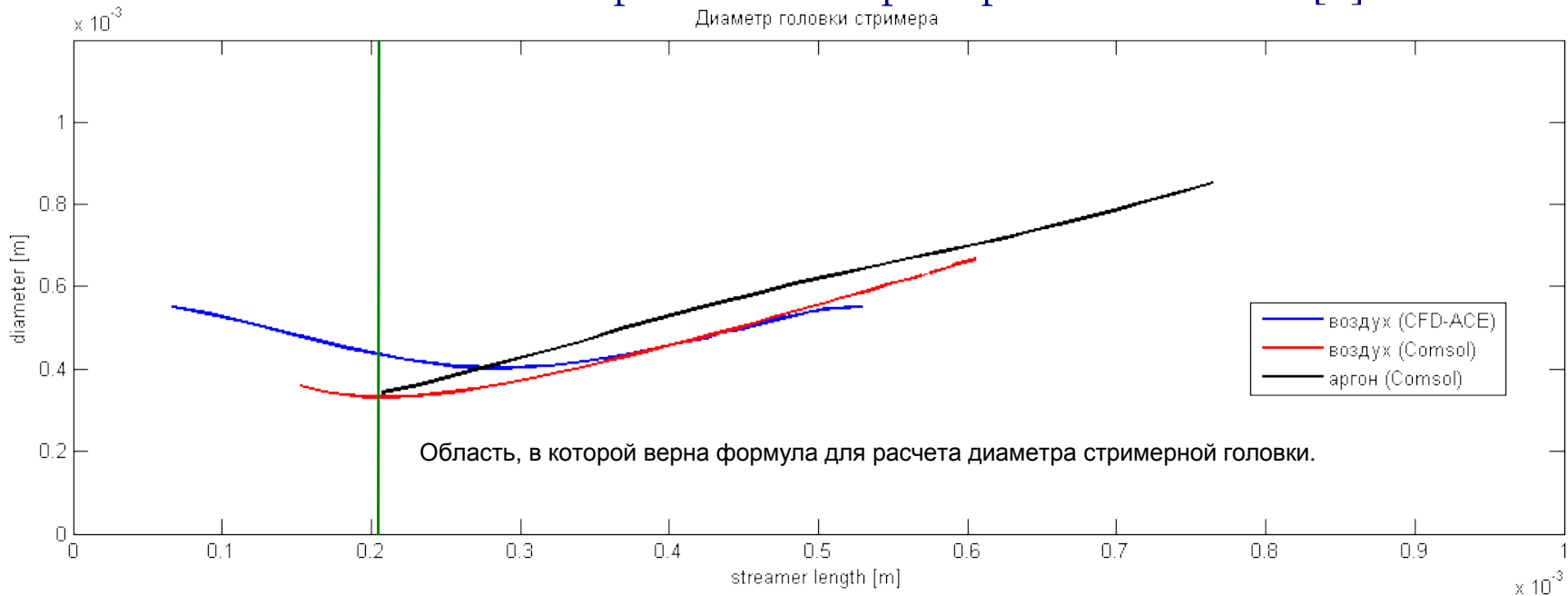
Зависимости скорости стримера от его длины [м/с]



Анод

Зависимости диаметра головки стримера от его длины [м]

Катод



Выводы

- В пакете Comsol создана простая модель, позволяющая рассчитать процесс лавинно-стримерного 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).
- 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:

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

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 $\frac{E(R)}{E(r_2)} = 2.25 \rightarrow E(r_2) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{UR}{r_2^2} \cdot K = \frac{1}{2.25} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{U}{R} \cdot K \rightarrow \left(\frac{R}{r_2}\right)^2 = \frac{1}{2.25} \rightarrow R = \frac{r_2}{1.5}$

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 диаметр головки.

