

$\text{SF}_6\text{-N}_2$ 中粒子动力学特性的蒙特卡罗仿真

张连星, 郑殿春, 陈雪锋

(哈尔滨理工大学 电气与电子工程学院, 黑龙江 哈尔滨 150080)

摘要: 为了模拟 $\text{SF}_6\text{-N}_2$ 混合气体的汤逊脉冲实验过程, 求出不同状态下混合气体的电子能量分布特性, 在电场强度与气体分子密度之比为 $(250 \sim 450)$ Td 范围内, 采用蒙特卡罗法仿真了 $\text{SF}_6\text{-N}_2$ 混合气体的电子雪崩发展过程. 求出了电子能量分布随电场强度与气体分子密度之比的变化规律、有效电离系数及临界耐电强度随 SF_6 分压比变化的规律, 且与实验结果作了比较和分析. 结果表明, 混合气体临界击穿场强 E_b 随着 SF_6 分压比的增加而提高, 与实验结果比较, 有很好的一致性.

关键词: 蒙特卡罗法; SF_6 和 N_2 混合气体; 电子雪崩; 临界电场

中图分类号: TM213 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-2683(2010)04-0089-05

Monte Carlo Simulating on Particle Dynamics of $\text{SF}_6\text{-N}_2$ Mixtures

ZHANG Lian-xing, ZHENG Dian-chun, CHEN Xue-feng

(School of Electrical and Electronic Engineer, Harbin University of Science and Technology, Harbin 150080, China)

Abstract: To simulate the experiments of the pulsed Townsend in the $\text{SF}_6\text{-N}_2$ gas mixtures and obtain the distributions of the electronic energies in different states, the development of the electron avalanche in $\text{SF}_6\text{-N}_2$ gas mixtures is traced using the Monte Carlo simulation for the ratio of electric field to gas density $(250 \sim 450)$ Td. The effective ionization coefficients, the distributions of the electronic energies and critical electric field of gas mixtures are directly obtained from the simulation, and the results obtained are compared with the experiment data, the results show that breakdown field strength increases with SF_6 ratio increasing gas which accords well with the experiment data.

Key words: Monte Carlo method; $\text{SF}_6\text{-N}_2$ mixtures; electron avalanche; critical electric field

0 引言

在1997年通过的全球变暖《京都议定书》中, SF_6 气体被列入受限制的六种温室气体之一^[1]. 因此人们把研究目标转向 SF_6 与一些惰性气体组成的混合气体, 其中 $\text{SF}_6\text{-N}_2$ 混合气体的应用前景较为广阔.

对于 SF_6 混合气体放电特性的研究可以从宏观和微观两方面进行. 宏观一般是直接通过实验手段

测量气体在各种条件下的击穿电压的研究; 微观则是通过测量混合气体的微观放电参数而对混合气体的放电性能加以研究, 其中临界电场最为重要, 模拟计算时临界电场 $(\text{EN}^{-1})_{\text{lim}}$ (E 为电场, N 为气体分子数密度, $1 \text{ Td} = 10^{-17} \text{ Vcm}^2$) 是气体电离率与附着率相等时 EN^{-1} 的值. 虽然通过实验可确定 SF_6 混合气体在一定条件下的放电特性, 但要耗费大量人力物力, 特别是在各种条件下确定 SF_6 混合气体的最佳组合, 显然非常困难, 且有些微观特性较难通过实验求出^[2].

收稿日期: 2009-08-05

作者简介: 张连星(1983—), 男, 硕士研究生, E-mail: zhanglianxing1@163.com;

郑殿春(1956—), 男, 教授, 博士, 硕士生导师.

本文采用蒙特卡罗模拟法仿真 $\text{SF}_6 - \text{N}_2$ 混合气体的汤逊脉冲实验过程, 求出不同状态下混合气体的电子能量分布特性, 进而求出气体的放电参数.

1 仿真方法

蒙特卡罗方法的基本思想是建立在物理现象的概率模型基础之上的, 并根据待求随机数变化规律, 进行随机抽样试验, 计算出某事件发生的百分比. 只要试验次数足够大, 该百分比将近似于事件发生的概率, 利用概率模型, 便可求出其估计参量. 计算机不会产生绝对随机的随机数, 只能产生“伪随机数”. 本文采用的随机数是通过马特赛特旋转演算法 (Mersenne twister 算法) 在 $[0, 1]$ 上产生的均匀分布的伪随机数.

在气体放电机理的研究过程中, 蒙特卡罗方法可以直接模拟粒子在气体放电过程中的动力学行为及其输运特性, 即由计算机产生一些随机数来模拟电子雪崩发生、发展历程^[3].

1.1 碰撞概率模型

计算电子飞行时间的近似方法有平均碰撞距离和平均碰撞时间两种. 本文采用在均匀电场下气体中的带电粒子的平均碰撞时间来模拟电子雪崩的发展. 初始电子从发射源释放, 在电场作用下获得能量, 与气体分子发生碰撞. 其平均碰撞时间为:

$$T_m = [NQ_T(\varepsilon) v(\varepsilon)]^{-1}$$

式中: N 是气体分子数密度; Q_T 是总的碰撞截面; v 是电子的漂移速率; ε 是电子能量.

采用平均碰撞时间进行模拟时, 因为计算过程中一个电子的能量变化较大, 可能带来较大误差. 因此, 每次计算的步长是将平均碰撞时间划分为更短的 K 段时间进行计算. 即每次计算的步长为

$$dt = \frac{T_m(\varepsilon)}{K}$$

由于平均碰撞时间模型是电子能量的函数, 平均碰撞时间间隔应按照电子能量的高低划分^[4].

对于足够大的 K , 电子与分子碰撞的概率可认为在步长 dt 中是恒定的, 其碰撞概率为

$$P = 1 - \exp\left(-\frac{dt}{T_m}\right)$$

碰撞发生与否是由随机数 R_1 (本文中 R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 均为 $[0 \sim 1]$ 上均匀分布的随机数) 来决

定的, 即当小于上面计算得到的 P 时发生碰撞. 若没有发生碰撞, 则继续模拟电子在下一个步长中运动; 若碰撞发生, 则根据碰撞类型来确定电子的能量变化和数量增减, 整个过程将在下一个步长中被重复, 直到电子被附着或者到达设定的终止条件^[5].

1.2 粒子运动过程表述

本文采用球面坐标系定义电子运动过程中的空间坐标, z 轴方向与电场方向相反, 设电子只受到两平行极板间均匀电场的作用, 则电子在自由飞行时间内满足能量守恒定律. 电子的状态参量为: 空间坐标 (x, y, z) ; 电子能量 e ; 方向余弦 (u_m, v_m, w_m) .

1.2.1 首次碰撞点的状态参量

确定初始时刻的状态参量: 初始位置设为在阴极中心位置, 即 $x = 0, y = 0, z = 0$; 电子初始能量 $e = 1 \text{ eV}$ (这个能量足够小到不影响电子雪崩的行为), 则初始速度 v_0 通过动能方程确定. 即

$$\varepsilon = \frac{1}{2}mv_0^2$$

根据余弦分布的随机角度确定初始电子入射到电场中的方向角 θ_0 和 φ_0 , 即

$$\cos\theta_0 = 2R_2 - 1; \sin\theta_0 = \sqrt{1 - \cos^2\theta_0}; \phi_0 = 2\pi R_2.$$

则电子运动的方向余弦为

$$u_m = \sin\theta_0 \cos\varphi_0; v_m = \sin\theta_0 \sin\varphi_0; w_m = \cos\theta_0$$

则电子在 x, y, z 方向的运动速度及在 z 轴上的加速度为

$$v_x = v_0 u_m; v_y = v_0 v_m; v_z = v_0 w_m; a_z = \frac{qE}{m}.$$

式中: m 是电子的质量; q 是电子电荷; E 是极板间均匀场强.

通过电子运动方程可计算出当前时刻粒子的状态参量. 若发生碰撞, 则需选择碰撞类型; 否则电子继续在下一步长 dt 内自由飞行, 直至碰撞, 重复上述过程.

1.2.2 碰撞类型的确定

电子与分子碰撞有两种基本类型: 弹性碰撞和非弹性碰撞. 以 SF_6 气体分子为例, 碰撞类型为弹性碰撞, 非弹性碰撞包括振动激发、电子激发、电离、附着, 与其对应的碰撞截面分别为 $Q_m, Q_v, Q_{ex}, Q_i, Q_a$ ^[6]. 则总的碰撞截面为

$$Q_T = Q_m + Q_v + Q_{ex} + Q_i + Q_a$$

对于 N_2 的截面^[7]还要细分, 例如: N_2 的振动激发, 电子激发:

$$Q_v = Q_{v1} + Q_{v2} + Q_{v3} + \cdots; Q_{ex} = Q_{ex1} + Q_{ex2} + Q_{ex3} + \cdots$$

若电子与分子发生碰撞,则各种碰撞类型的概率可以按照以下办法确定:

$$r_1 = Q_m / Q_T; r_2 = (Q_m + Q_v) / Q_T$$

$$r_3 = (Q_m + Q_v + Q_{ex}) / Q_T$$

$$r_4 = (Q_m + Q_v + Q_{ex} + Q_i) / Q_T$$

式中: r_1, r_2, r_3, r_4 分别为发生相应碰撞类型的概率,只需产生随机数 R_3 ,便可确定碰撞类型. 即:

$0 \leq R_3 \leq r_1$, 发生弹性碰撞;

$r_1 < R_3 \leq r_2$, 发生振动激发;

$r_2 < R_3 \leq r_3$, 发生电子激发;

$r_3 < R_3 \leq r_4$, 发生碰撞电离;

$r_4 < R_3 \leq 1$, 发生碰撞附着.

若气体是由几种气体分子组成,首先要判断碰撞的分子类型,然后再确定其碰撞类型,碰撞分子的选择与上述碰撞类型的选择方法相似^[8].

1.2.3 碰撞后粒子的状态参量

在电子与分子碰撞完成的时刻,电子的空间坐标不变,而剩余的电子能量与碰撞类型相关. 如果碰撞为弹性碰撞,考虑到电子和与它发生碰撞的 SF_6 分子或 N_2 分子的质量相差很大,则认为它们之间没有能量传递,电子无能量损失;若发生非弹性碰撞,电子则损失该非弹性碰撞的阈值能量,其中发生附着后电子消失,不再考虑;而发生碰撞电离,电子增加,入射电子损失电离的阈值能量,剩余能量随机分配到两个电子上.

电子的运动方向通过方向余弦给出,首先确定电子散射角 χ 和方位角 ϕ . 通常,方位角 ϕ 的概率密度分布为 $[0, 2\pi]$ 均匀分布,易于求出,只要产生随机数 R_4 ,便可得到 $\phi = 2\pi R_4$. 假设散射各向同性,即散射角 χ 的余弦均匀分布在 $[-1, 1]$ 之间,只需产生随机数 R_5 ,即

$$\cos \chi = 2R_5 - 1, \sin \chi = \sqrt{1 - \cos^2 \chi}$$

则碰撞后电子运动的方向余弦按文^[8]获取. 继续开始计算电子在下一个步长 dt 内的运动,仿真在连续的时间段内进行,直到一个预先设定的终止时间或发生附着.

跟踪大量电子,对其进行抽样和计算,就可得到在不同状态下的电子分布函数^[9],而电子雪崩参数通过下式计算:

$$V_d = d\bar{z}/dt; \bar{\alpha} = \frac{1}{V_d} \frac{d \ln(n/n_0)}{dt}$$

式中: V_d 是电子的平均漂移速度; $\bar{\alpha}$ 是气体的有效电离系数; n 是自由电子总数; n_0 是初始电子数^[9].

2 结果及分析

本文通过 Matlab 语言,在计算机上对上述数学模型进行求解. 在计算过程中所用到的条件与文^[8]实验条件一致,即气体分子密度为 $3.32 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (压强 1 Torr (1 Torr = 133.322 Pa), 温度为 20 °C). 为了验证文中采用的数学模型和碰撞截面的正确性,先对单一气体 SF_6 和 N_2 进行数值模拟计算,将得到的电子雪崩参数和实验结果^[9]进行比较. 如图 1、2 所示. 由图可见,计算值与实验结果有很好的—致性,说明本文采用蒙特卡罗方法可行,采用的碰撞截面与真实值相近.

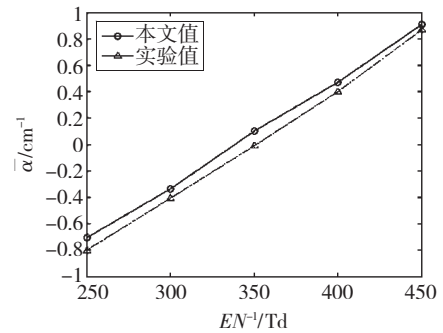


图1 SF_6 的有效电离系数 $\bar{\alpha}$ 与 EN^{-1} 的关系曲线

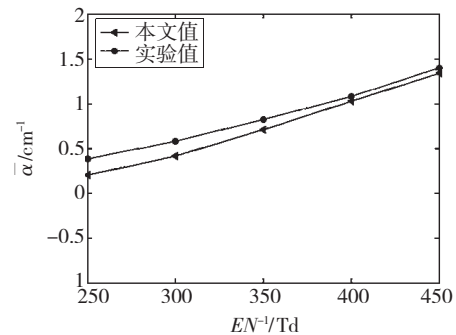


图2 N_2 的电离系数 $\bar{\alpha}$ 与 EN^{-1} 的关系曲线

图3为 SF_6 电子分布函数 $f(\varepsilon)$ 在不同 EN^{-1} 下的分布图形,由图中可以看出,随着的 EN^{-1} 增大,图形趋于平缓,表示低能量的电子数目逐渐减少,而高能量的电子数目逐渐增多. 从气体绝缘的角度考虑,可以解释为:随着 EN^{-1} 增大,即随着外施电场的增加,电子在电场作用下获得的能量随之增加,导致电离更容易发生,电离释放出更多的新电子,使电子雪崩迅速扩展,形成等离子体通道.

图4为 $EN^{-1} = 323 \text{ Td}$ 时,电子能量分布函数随 SF_6 分压比 k 的变化规律,图中分压比 k 分别取 0.2、0.5、0.9. 从图中可见,随着 SF_6 分压比 k 的增

加电子能量分布函数趋于陡峭,即低能量的电子数目增多,高能量的电子数目减少.从微观上理解,当 SF_6 分压比增大时,气体中电子与分子发生碰撞附着的概率增加,使有效电离系数($\bar{\alpha}$)减小,导致电子的平均能量下降.

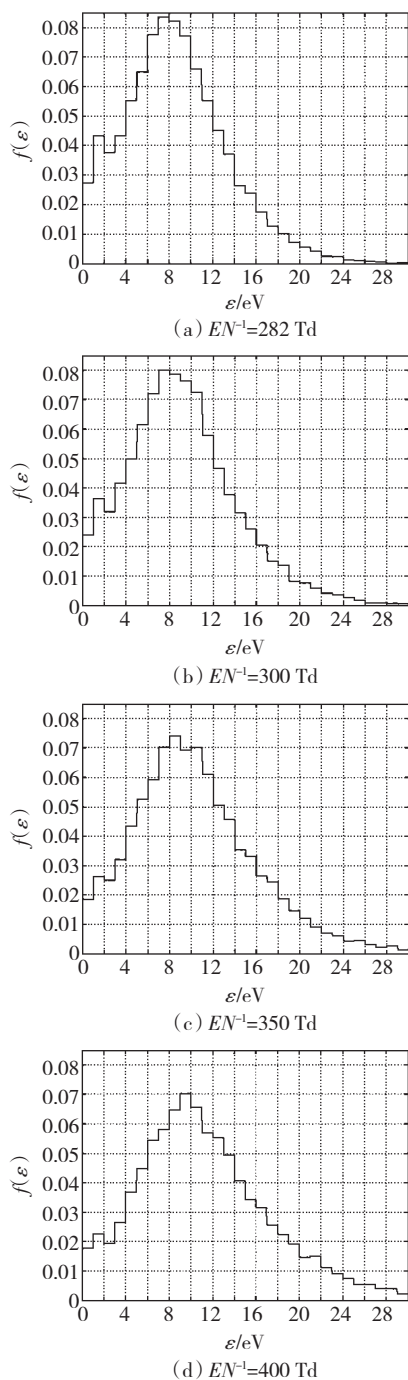


图3 SF_6 的电子能量分布函数 $f(\varepsilon)$ 在不同 EN^{-1} 下的分布曲线

图5为在不同的 EN^{-1} 下, $\text{SF}_6 - \text{N}_2$ 混合气体的有效电离系数 $\bar{\alpha}$ 随着 SF_6 分压比 k 的变化曲线. 由图可见, $\bar{\alpha}$ 随着 SF_6 分压比 k 的增大而减小, 随着

EN^{-1} 的增大而增大. 前者的机理可由图4解释, 后者的机理可由图3解释.

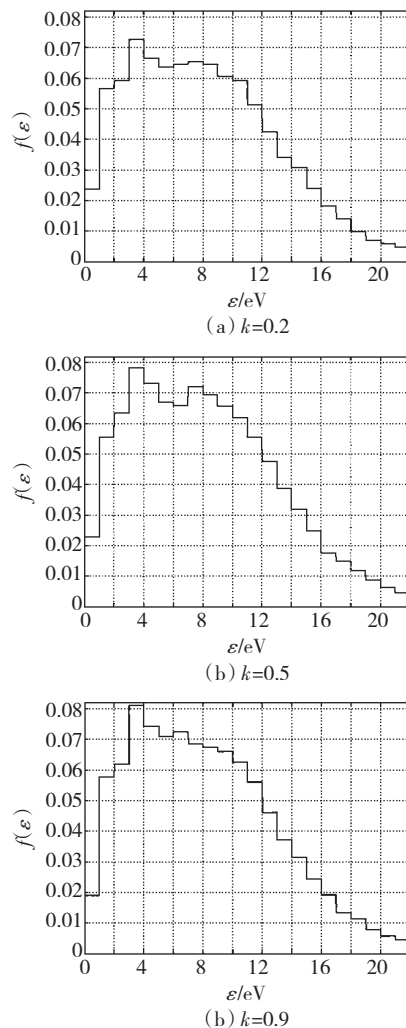


图4 电子能量分布函数 $f(\varepsilon)$ 随 SF_6 分压比 k 的变化规律 ($EN^{-1} = 323 \text{ Td}$)

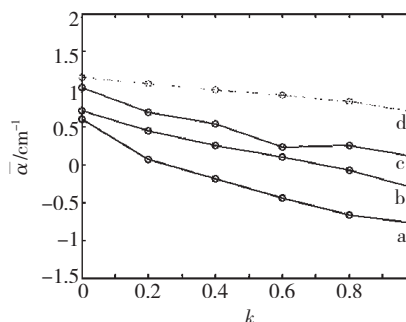


图5 在不同 EN^{-1} 值下, $\bar{\alpha}$ 与 SF_6 分压比 k 的关系曲线 (a: 250 Td; b: 300 Td; c: 350 Td; d: 400 Td)

图6为混合气体的临界击穿场强 $(EN^{-1})_{\text{lim}}$ 随着 SF_6 分压比 k 的变化规律. 图中给出了本文计算值与实验结果^[8], 通过比较可看出两者趋势一致. 由图可见, 随着 SF_6 分压比 k 的增加, 气体临界击

穿场强增加. 可以通过图 1、2 解释, 在相同外施电场下, SF_6 的有效电离系数小于 N_2 , 因此, 前者比后者耐电强度高. $\text{SF}_6 - \text{N}_2$ 可按一定比例混合, 既能减少 SF_6 , 又能保证临界击穿场强 E_b .

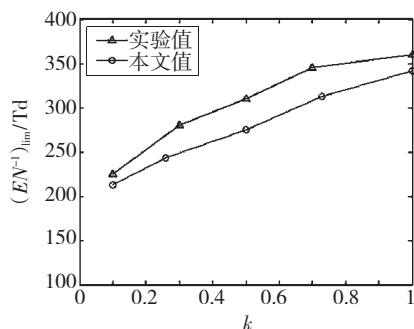


图6 混合气体临界击穿场强随 SF_6 分压比 k 的关系曲线

3 结 语

在 $EN^{-1} = 250 \sim 450 \text{ Td}$ 范围内对单一气体 SF_6 和 N_2 进行数值计算, 得出电子雪崩参数, 与实验结果比较, 有很好的一致性, 验证了蒙特卡罗法的可行性及碰撞截面的正确性. 采用蒙特卡罗法仿真了 SF_6 和 N_2 混合气体的电子雪崩运动, 仿真结果表明: 混合气体临界击穿场强 E_b 随着 SF_6 分压比的增加而提高. 随着计算机的发展, 计算精确度将会大大

增加. 文中得出混合气体的预放电参数可供实际工程应用参考.

参 考 文 献:

- [1] TAKUMA T. Gas Insulation and Greenhouse Effect [J]. J IEE Japan, 1999, 119: 232 - 235.
- [2] KÜÇÜKARPACI H N, LUCAS J. Simulation of Electron Swarm Parameters in Carbon Dioxide and Nitrogen for High E/N [J]. J Phy D: Appl Phys, 1979, 12: 2123 - 2137.
- [3] WU B T, XIAO D M. Predicting the Dielectric Strength of $\text{c-C}_4\text{F}_8$ and SF_6 Gas Mixtures by Monte Carlo Method [J]. Journal of Shanghai Jiaotong University, 2007, E - 12(1): 121 - 124.
- [4] DINCER M S, GOVINDA G R Raju. Monte Carlo Simulation of the Motion of Electrons in SF_6 in Uniform Electric Fields [J]. J. Appl. Phys, 1983, 54(11): 6311 - 6316.
- [5] DINCER M S, AYDIN T. Simulation of Limiting Field Behavior in Electron Swarms in $\text{SF}_6 - \text{N}_2$ Gas Mixtures [J]. IEEE Trans Elec Insul, 1994, 1(1): 139 - 145.
- [6] ITOH H, Miura Y, NAKAO Y, et al. Electron Swarm Development in SF_6 : I. Boltzmann Equation Analysis [J]. J. Phys. D.: Appl. Phys., 1988, 21: 922 - 930.
- [7] PHELPS A V, PITCFORD L C. Anisotropic Scattering of Electrons by N_2 and its Effect on Electron Transport [J]. Phys. Rev. A, 1985, 31(5): 2932 - 2949.
- [8] 裴鹿成, 张孝泽. 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中得应用 [M]. 北京: 科学出版社, 1980: 500.

(编辑: 王 萍)

(上接第 88 页)

- [1] 张洪业, 曲朝阳, 王宇新. QPSO 算法在生产调度中的应用 [J]. 计算机工程与应用, 2009, 45(20): 208 - 210.
- [2] 谢小峰, 张文俊, 杨之康. 微粒群算法综述 [J]. 控制与决策, 2003, 18(2): 129 - 134.
- [3] SUM J, FENG B, XU W B. Particle Swarm Optimization with Particles Having Quantum Behavior [C] // Proceedings of the IEEE Congress on Evolutionary Computation. Portland, Oregon: IEEE Press, 2004: 325 - 331.
- [4] 张洪业, 金 刚, 王宇新. 微粒群算法在印染企业车间调度中的应用 [J]. 计算机工程与应用, 2009, 45(21): 245

- 248.

- [5] FIREDMAN N, GEIGER D. Bayesian Network Classifier [J]. Machine Learning, 1997, 29: 103 - 130.
- [6] 郑建军, 刘 炜, 刘琼听. 基于选择性的贝叶斯分类器集成方法 [J]. 北京理工大学学报, 2003, 23(6): 724 - 727.
- [7] 胡为成, 程转流, 王本年. 基于模拟退火遗传算法的贝叶斯分类 [J]. 计算机工程, 2007, 33(9): 219 - 221.

(编辑: 付长缨)