



Centrum voor Wiskunde en Informatica

REPORTRAPPORT

MAS

Modelling, Analysis and Simulation



Modelling, Analysis and Simulation

Vroege vonken onder de virtuele microscoop

C. Montijn

REPORT MAS-E0530 DECEMBER 2005

CWI is the National Research Institute for Mathematics and Computer Science. It is sponsored by the Netherlands Organization for Scientific Research (NWO).

CWI is a founding member of ERCIM, the European Research Consortium for Informatics and Mathematics.

CWI's research has a theme-oriented structure and is grouped into four clusters. Listed below are the names of the clusters and in parentheses their acronyms.

Probability, Networks and Algorithms (PNA)

Software Engineering (SEN)

Modelling, Analysis and Simulation (MAS)

Information Systems (INS)

Copyright © 2005, Stichting Centrum voor Wiskunde en Informatica

P.O. Box 94079, 1090 GB Amsterdam (NL)

Kruislaan 413, 1098 SJ Amsterdam (NL)

Telephone +31 20 592 9333

Telefax +31 20 592 4199

ISSN 1386-3703

Vroege vonken onder de virtuele microscoop

ABSTRACT

Wanneer een sterk elektrisch veld wordt aangelegd op een neutral medium, kunnen geïoniseerde kanalen ontstaan, zogeheten streamers. Streamers worden veelvuldig in de industrie gebruikt, bijvoorbeeld voor het reinigen van gassen. Ze komen ook voor in de natuur, waar ze een rol spelen in de opbouw van bliksem en elektrische vonken. Door hun complexe structuur is het een zware rekenkundige taak om de ontwikkeling van streamers op adequate wijze te simuleren, waardoor men tot nu toe gelimiteerd was in de keuze van de externe parameters zoals veldsterkte en systeemgrootte. Aan het Centrum voor Wiskunde en Informatica is er een numerieke methode ontwikkeld die op efficiënte wijze omgaat met de aan streamersimulaties inherente moeilijkheden, en waarmee het nu mogelijk is om de voortplanting en vertakking van streamers zeer nauwkeurig te voorspellen.

2000 Mathematics Subject Classification: 35K57 ; 65M50 ; 78A35

Keywords and Phrases: Elektrische doorslag ; adaptieve roosterverfijningen

Note: Dit werd financieel mogelijk gemaakt door de Nederlandse Organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek NWO in het Computational Science Programma.

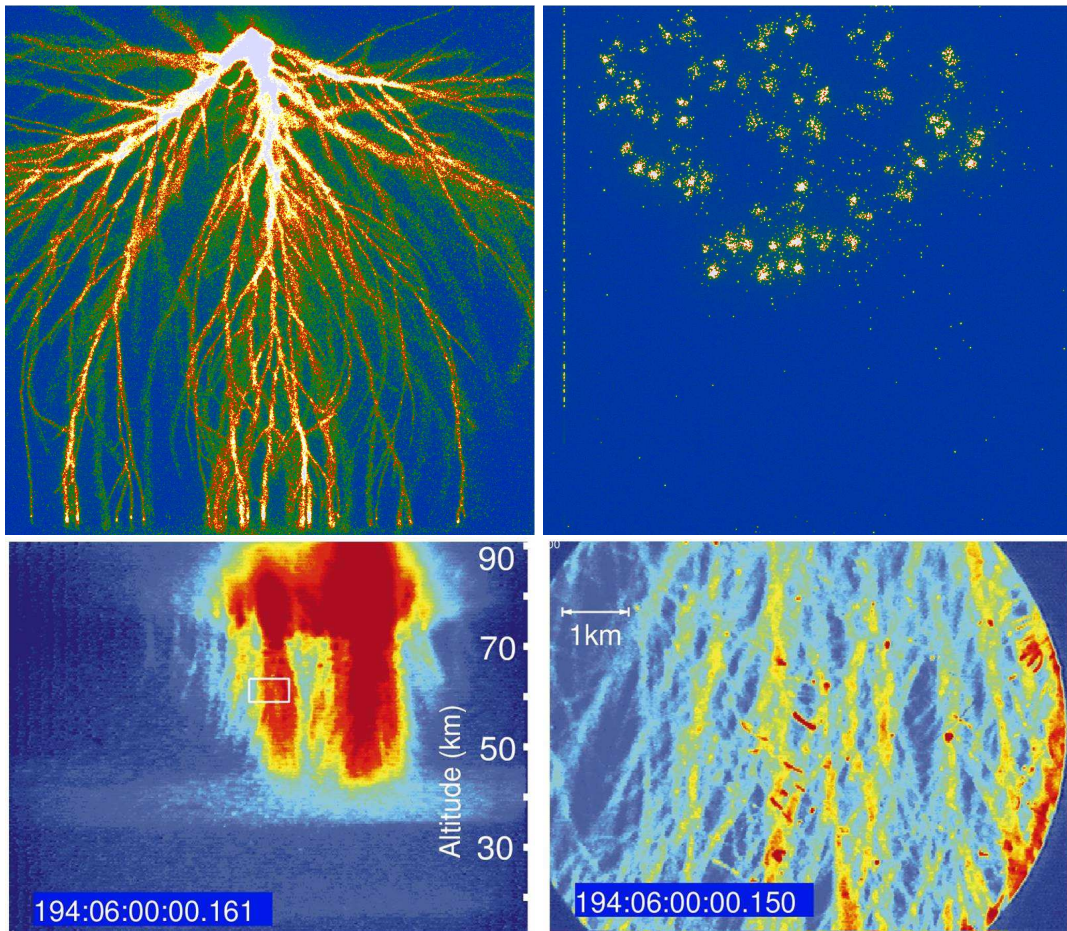
Vroege vonken onder de virtuele microscoop

Carolynne Montijn



Carolynne Montijn studeerde in 2001 af aan de faculteit Technische Natuurkunde van de Technische Universiteit Delft. Van 2001 tot 2005 voerde ze haar promotieonderzoek naar numerieke methodes voor elektrische doorslag uit aan het Centrum voor Wiskunde en Informatica (CWI) in Amsterdam. Dit project maakte deel uit van het NWO programma "Computational Science" en werd uitgevoerd onder leiding van prof.dr. U.Ebert en dr. W. Hundsdorfer.

Contact: Carolynne.Montijn@cwi.nl



Figuur 1: Boven: foto van de ontwikkeling van streamerontladingen bij normale druk, links een belichtingstijd van 300 ns, rechts van 1 ns. Op een puntelectrode boven in het midden van de foto is een spanning van 30 kV opgelegd. De streamers leggen een afstand van enkele centimeters af, en hun diameter is tientallen micrometers (T. Briels, promotie onderzoek aan de TU Eindhoven onder leiding van E. v. Veldhuizen en U. Ebert). Onder: spriteontladingen in de atmosfeer (met dank aan E. Gerken), inzoomen met een telescoop toont aan dat deze sprites uit een groot aantal streamers bestaan, die tot tientallen kilometers lang worden en honderden meters breed.

Wanneer een sterk elektrisch veld wordt aangelegd op een neutral medium, kunnen geïoniseerde kanalen ontstaan, zogeheten streamers. Streamers worden veelvuldig in de industrie gebruikt, bijvoorbeeld voor het reinigen van gassen. Ze komen ook voor in de natuur, waar ze een rol spelen in de opbouw van bliksem en elektrische vonken.

Door hun complexe structuur is het een zware rekenkundige taak om de ontwikkeling van streamers op adequate wijze te simuleren, waardoor men tot nu toe gelimiteerd was in de keuze van de externe parameters zoals veldsterkte en systeemgrootte. Aan het Centrum voor Wiskunde en Informatica is er een numerieke methode ontwikkeld die op efficiënte wijze omgaat met de aan streamersimulaties inherente moeilijkheden, en waarmee het nu mogelijk is om de voortplanting en vertakking van streamers zeer nauwkeurig te voorspellen.

Streamers en sprites

Streamer zijn, door hun sterke reactiviteit, van groot belang gebleken voor industriële toepassingen die zich richten op het ontsmetten van allerlei vervuilde media, zoals verbrandingsgassen. Er is echter nog veel onderzoek gaande om dergelijke toepassingen op gecontroleerde wijze uit te voeren en de achterliggende fysische processen beter te begrijpen.

De nieuwste cameratechnieken en de mogelijkheid tot het opwekken van enorme spanningen maken het nu mogelijk om nauwkeurige metingen aan streamers te doen [1]. De bovenste fotos van figuur 1 tonen de uitkomst van dergelijke experimenten. De linker foto laat de complexe en vertakkende ontwikkeling van streamers over een tijd van enkele honderden nanosecondes zien, terwijl de rechter foto de actieve kop van de streamer toont.

Zeergelijkbare verschijnselen zijn ook waar te nemen in de hogere gedeeltes van de atmosfeer, in de vorm van zogeheten *sprites* en *blue jets* [2]. Doordat de karakteristieke lengteschalen omgekeerd evenredig zijn met de druk, zijn deze structuren vele ordes van grootte groter dan de streamers die bij normale druk worden waargenomen. Dit is duidelijk te zien in de onderste foto van figuur 1, die een sprite toont. Als men nu inzoomt in deze immense structuur, ziet men dat ze uit een grote hoeveelheid streamers bestaat.

Naast experimenteel is ook theoretisch en numeriek onderzoek noodzakelijk. Zo stellen numerieke simulaties ons in staat grootheden te bekijken waar experimenteel moeilijk of geen grip op te krijgen is. Daarnaast kunnen, door afzonderlijke processen artificieel in of uit te schakelen, hun specifieke effecten nauwkeurig worden bestudeerd.

Het fysische model

Om een model voor de ontwikkeling van streamers op te bouwen kan men gebruik maken van de welbekende wetten van Ohm en Coulomb, samen met het begrip botsingsionisatie.

Volgens de wet van Ohm beweegt een elektron zich met een snelheid die evenredig is met en tegengesteld aan het lokaal elektrisch veld waarin het zich bevindt. Het elektron zal op zijn pad tegen neutrale deeltjes aan botsen die hij, mits hij voldoende energie bezit, kan ioniseren. Hierdoor ontstaan dan een positief ion en een nieuw elektron. Het nieuwe en het oude elektron zullen zich dan weer volgens de wet van Ohm verplaatsen, terwijl het ion door zijn zware massa veel trager is. Dit proces herhaalt zich, en er ontstaat een geïoniseerd kanaal waarin de elektronen vooruit lopen op de ionen. Ook oefenen de geladen deeltjes, volgens de wet van Coulomb, onderling krachten uit (denk aan de repulsie tussen twee gelijk geladen deeltjes).

Door de grote hoeveelheid elektronen en ionen die zich in streamers bevinden kunnen we beide deeltjessoorten in een continuum benadering beschouwen. Daarnaast wordt de dichtheid van de neutrale deeltjes als constant beschouwd doordat ze wel vijf ordes van grootte groter is dan die van de geladen deeltjes. De dynamica van streamers kan dan beschreven worden door de wet van Ohm, het botsingsionisatiemechanisme en de wet van Coulomb toe te passen op de dichtheden van elektronen en ionen in plaats van op de deeltjes zelf (zie kader). Het verkregen model bevat de generieke processen die een rol spelen in de ontwikkeling van streamers. Door de onderlinge

wisselwerking tussen de deeltjesdichtheden en het elektrisch veld is het gehele verschijnsel niet-lineair.

Dit model kan herschaald worden naar de karakteristieke schalen van lengte, tijd, veld en ionisatie. Deze zijn, zoals eerder al is opgemerkt voor de lengteschaal, een functie van de druk. We verkrijgen dan een model in *dimensieloze eenheden*, waardoor de resultaten uiteindelijk naar elke gewenste druk of gas kunnen worden vertaald.

In negatieve streamers in pure gassen driften en diffunderen de electronen, terwijl de ionen door hun veel grotere massa op korte tijdschalen als immobiel kunnen worden beschouwd. De geladen deeltjes worden geproduceerd door botsingsionisatie, die beschreven kan worden met Townsend's benadering in het lokaal elektrisch veld [3]. In dimensieloze eenheden kan de continuïteitsvergelijking voor de geladen deeltjes dan worden geschreven als

$$\begin{aligned}\frac{\partial \sigma}{\partial \tau} &= \nabla \cdot \left(\overbrace{\sigma \mathcal{E}}^{\text{drift}} + \overbrace{D \nabla \sigma}^{\text{diffusie}} \right) + \overbrace{\sigma |\mathcal{E}| e^{-1/|\mathcal{E}|}}^{\text{botsingsionisatie}}, \\ \frac{\partial \rho}{\partial \tau} &= \sigma |\mathcal{E}| e^{-1/|\mathcal{E}|},\end{aligned}$$

waarin σ en ρ de dichtheidsverdelingen van elektronen- respectievelijk ionen zijn, D de diffusiecoëfficiënt en \mathcal{E} het elektrisch veld. Deze kan worden bepaald met behulp van de Poissonvergelijking voor de (dimensieloze) elektrische potential ϕ ,

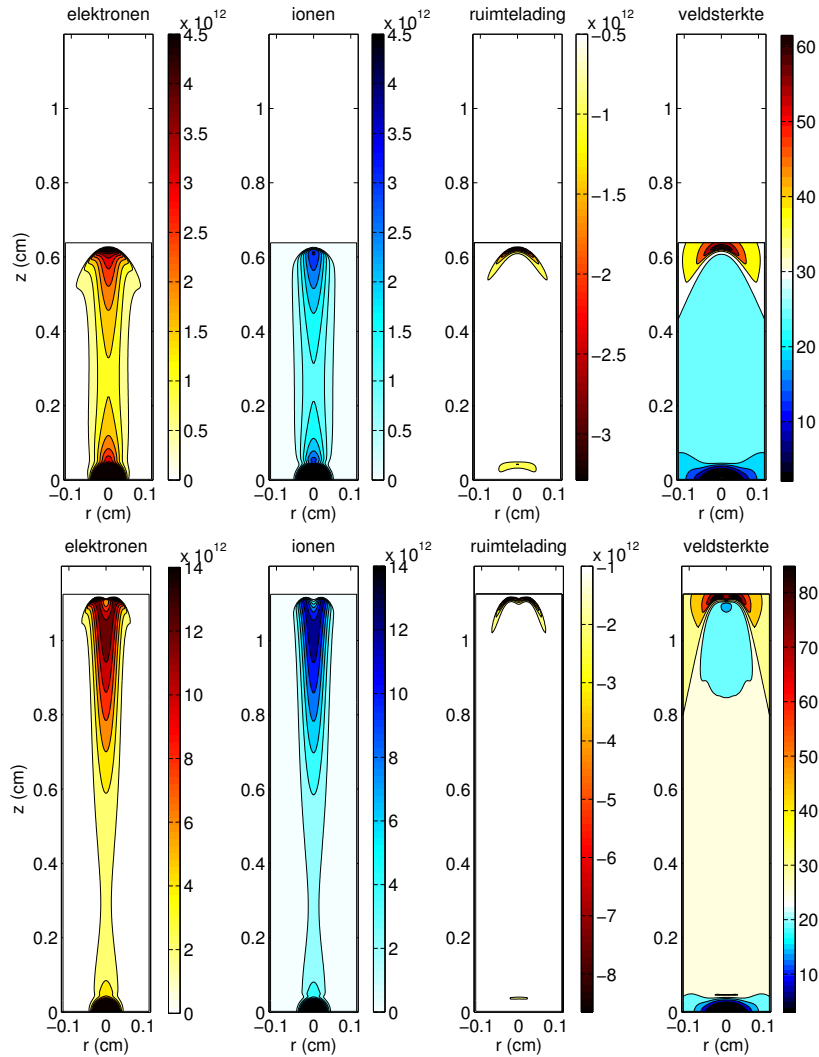
$$\nabla^2 \phi = \sigma - \rho, \quad \mathcal{E} = -\nabla \phi.$$

Het achtergrond elektrisch veld wordt opgelegd door het potentiaal ϕ op de externe elektrodes vast te leggen.

Groeiende en vertakkende ionisatiekanalen

Met behulp van dit model kan men nu de ontwikkeling van streamers op een computer berekenen. Dergelijke simulaties tonen een groeiend geïoniseerd kanaaltje met een generieke structuur zoals getoond in de bovenste rij van figuur 2. De dichtheid aan vrije elektronen in de streamer is hoog, waardoor het kanaal geleidend en elektrisch afgeschermd is. Om deze afscherming van het veld te bewerkstelligen is er ruimtelading nodig aan het uiteinde van het kanaal. Deze ruimtelading heeft naast de elektrische afscherming in het kanaal ook een veldversterking vóór het kanaal ten gevolg. Dit gefocuserde veld versterkt op zijn beurt de processen van drift en ionisatie, waardoor de streamer groeit.

Er hoopt zich dan ruimtelading op in een alsmaar dunner wordend schilletje, dat uiteindelijk instabiel wordt en vertakt, zoals gezien kan worden in de onderste rij van figuur 2. Als we nu de staat van de streamer beschouwen vlak voor het moment van vertakken, dan kunnen we drie kenmerken waarnemen: 1) De snelheid van het streamer front is een groeiende functie van het elektrisch veld. 2) De binnenkant van de streamer is elektrisch afgeschermd. 3) De kromtestraal van de ruimteladingschil is veel groter dan zijn dikte, waardoor het front bijna vlak is. Bernard Meulenbroek heeft tijdens zijn promotieonderzoek aan het CWI analytisch bewezen dat een streamer met deze drie kenmerken inderdaad een instabiliteit vertoont [4].

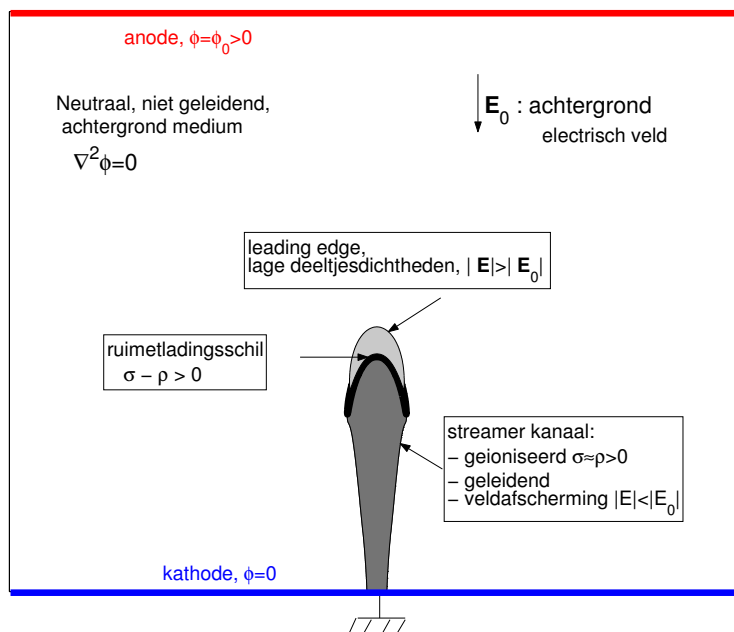


Figuur 2: De dichtheidsverdelingen van de geladen deeltjes en de ruimtelading (in cm^{-3}) en de elektrische veldsterkte (in kV/cm) voor een streamer in een achtergrond veld van 30 kV/cm na 22 ns (bovenste rij) en 34 ns (onderste rij). Het veld is, in tegenstelling tot het potentiaal, alleen berekend daar waar de deeltjesdichtheid niet nul is.

Rekenkundige uitdagingen

Het optreden van deze vertakkingen in de laboratorium- en computerexperimenten is dus theoretisch te verklaren. Ze waren echter tot dusver alleen gesignaleerd in simulaties op relatief grove, uniforme rekenroosters. Het was door gebrek aan rekengeheugen toen niet mogelijk om fijnere roosters te gebruiken, en door het (nog) niet-convergerende gedrag van de resultaten kon men dan ook geen nauwkeurige voorspelling doen over het optreden van de instabiliteit. Hierdoor was het noodzakelijk een code te ontwikkelen, die wél in staat was convergerende resultaten op te leveren.

Er zijn verschillende redenen waarom het moeilijk, zo niet onmogelijk, is om streamers op eenvoudige uniforme rekenroosters te simuleren. Allereerst is er de verscheidenheid aan lengteschalen: het uitwendige gebied waarin het potentiaal berekend moet worden is veel groter dan het geïoniseerde kanaal zelf, dat op zijn beurt veel groter is dan het kleine actieve gebied in de streamerkop. Bovendien worden de ruimtelijke dichtheidsgradiënten in de kop steiler naarmate de streamer



Figuur 3: De verschillende gebieden die in de simulaties van streamers in acht moeten worden genomen.

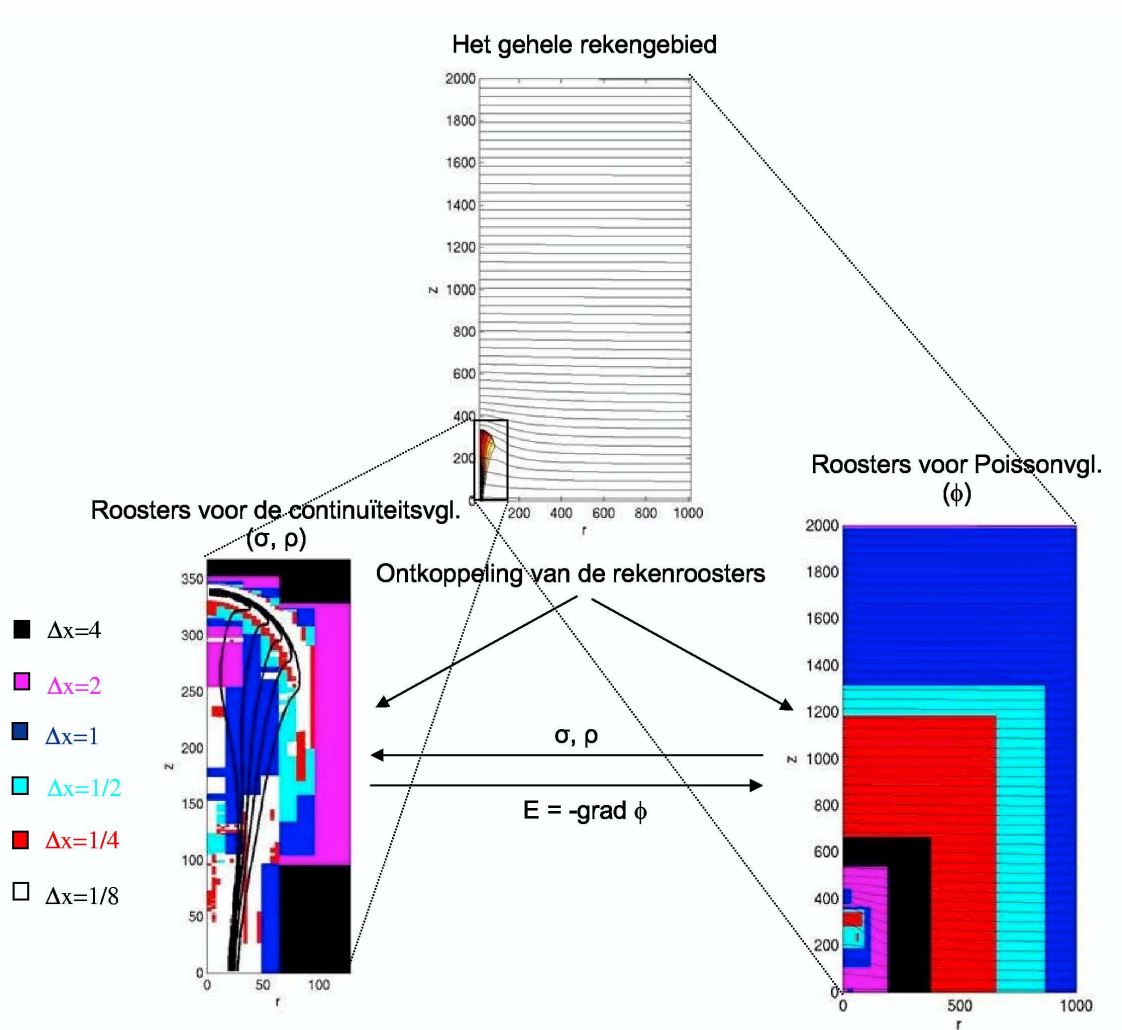
zich verder voortplant, en vereisen daarmee een steeds hogere nauwkeurigheid van de numerieke methode. Tenslotte komt er een moeilijkheid bij door de instabiele natuur van streamers: elke geïoniseerde verstoring in de *leading edge*, het niet-geïoniseerde gebied met hoge veldsterktes vlak voor de streamer kop, zal groeien. Figuur 3 geeft een schematisch overzicht van elk van de gebieden in de streamer.

Door deze kenmerken zijn simpele rekenmethoden niet adequaat voor het simuleren van streamers, in de eerste plaats omdat ze heel veel rekengeheugen vergen. Een veld van enkele tientallen kV/cm vereist bijvoorbeeld een ruimtelijke resolutie van $5\mu\text{m}$ in het ionisatiefront. Voor een realistische streamer in een volume van $(2.5\text{ cm})^3$ zijn er al meer dan $2 \cdot 10^7$ roosterpunten nodig als men een cilindrisch symmetrisch coördinatenstelsel gebruikt. Volledig drie-dimensionale simulaties zijn met zo'n aanpak dan ook uitgesloten.

Slimme rekenroosters

Om de simulaties van streamers, die we hier als cilindrisch symmetrisch beschouwen, op efficiënte wijze aan te pakken kan men gebruik maken van zogeheten *adaptieve roosterrefineringen*. Hierin worden de geladen deeltjesdichtheden en het elektrisch veld eerst berekend op relatief grove (en dus computationeel goedkope) rekenroosters, die vervolgens stapsgewijs verfijnd worden aan de hand van een verfijningscriterium, die de gebieden aanwijst waarin de oplossingen een grote ruimtelijke nauwkeurigheid vereisen. Omdat we hier een dynamisch systeem beschouwen zullen deze roosters zich in de loop van de tijd met de streamer moeten verplaatsen. Dit geeft dus een soort van meebewegende, virtuele microscoop waarmee in het actieve streamergebied ingezoomd kan worden.

Er is al veel ervaring met dergelijke verfijningsmethoden. Standaard verfijningsmethoden houden echter geen rekening met de aanwezigheid van de eerder genoemde *leading edge*. Kleine numerieke fouten ten gevolge van een te grof rekenrooster aldaar zullen dan snel groeien en grote gevolgen hebben voor de verdere ontwikkeling van de streamer. We hebben ons verfijningsalgoritme dan ook zodanig ontworpen dat het hier wél rekening mee houdt. Ook zijn de adaptieve roosterrefineringen zo geïmplementeerd, dat de continuïteitsvergelijkingen en de Poissonvergelijking op verschillende



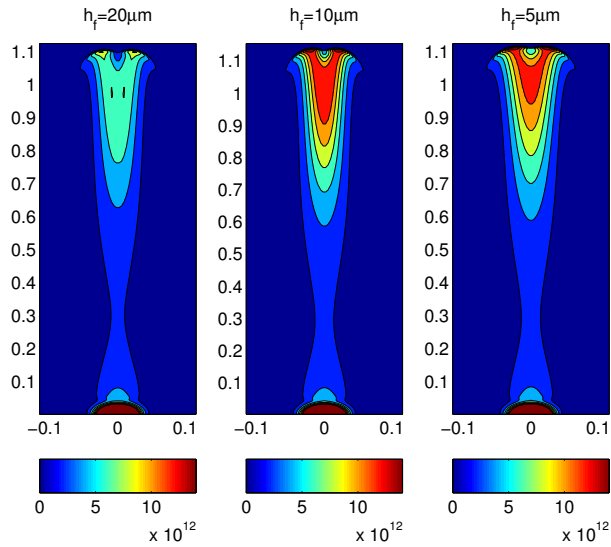
Figuur 4: Het ontkoppelen van de rekenroosters voor de continuïteitsvergelijkingen enerzijds en voor de Poisson vergelijking anderzijds.

roosters kunnen worden berekend. Hierdoor passen de roosters zich specifiek aan elk van de vergelijkingen aan (zie figuur 4).

Deze numerieke methode geeft een enorme winst zowel in rekestijd als, wat belangrijker is, in rekestuur, waardoor het nu mogelijk is om de ontwikkeling van streamers in zowel grote systemen als in zeer hoge velden nauwkeurig te berekenen op een pc, iets wat tot dusver niet kon. Eindelijk is het nu mogelijk om naast een kwalitatieve uitleg ook een kwantitatieve voorspelling voor de ontwikkeling en vertakking van streamers te maken, zoals getoond in figuur 5, waaruit blijkt dat we nu wél een convergerend gedrag hebben voor het optreden van de instabiliteit.

En nu?

Het hier beschreven algoritme maakt het mogelijk streamers in nieuwe gebieden van het parameterregime op nauwkeurige wijze te simuleren. Het stelt ons in staat de vertakkingen kwantitatief



Figuur 5: De vertakkende streamer berekend op steeds fijnere roosters, het fijnste rekenrooster is, van links naar rechts, 20, 10 en 5 μm in elke richting. In de drie gevallen is het tijdstip van de opname 34 ns.

te voorspellen, en analytisch onderzoek toont aan dat deze instabiliteiten inherent zijn aan het simpele deterministische model. De vraag is nu hoe andere – deterministische dan wel stochastische – ionisatieprocessen de ontwikkeling van streamers zullen beïnvloeden. Dit is het onderwerp van huidig onderzoek aan het Centrum voor Wiskunde en Informatica.

Referenties

- [1] T.M.P. Briels, E.M. van Veldhuizen en U. Ebert, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **33** (2005), 264-265.
- [2] V. Pasko, M. Stanley, J. Methews, U. Inan en T. Wood, *Nature* **416** (2002), 152-154.
- [3] J. Townsend, *The theory of ionization of gases by collision*, Constable&Company Ltd., London, 1910.
- [4] B. Meulenbroek, U. Ebert and L. Schäffer, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005), 195004