

文章编号: 1001-4322(2009)11-1741-04

# 一种补偿时间步长限制的粒子模拟- 蒙特卡罗碰撞模型\*

李永东, 王洪广, 刘纯亮, 周 岩, 刘美琴

(西安交通大学 电子物理与器件教育部重点实验室, 西安 710049)

**摘 要:** 从碰撞次数的概率分布出发,推导出一种补偿蒙特卡罗碰撞模型,采用以正态分布计算得到的平均碰撞次数作为碰撞概率,来补偿传统方法中忽略的多次碰撞。通过模拟不同折合电场强度条件下 He 气放电产生电子的运动规律,验证了补偿蒙特卡罗碰撞模型的正确性。计算结果表明:补偿蒙特卡罗碰撞模型可以有效地提高计算效率,特别适用于高气压气体放电现象的粒子模拟。

**关键词:** 粒子模拟; 蒙特卡罗碰撞模型; 时间步长限制; 气体放电

**中图分类号:** TL501 **文献标志码:** A

自 Buneman<sup>[1]</sup> 和 Dawson<sup>[2]</sup> 等人提出粒子模拟(PIC)方法以来,PIC 方法已经成为等离子体模拟的一种重要方法。PIC 方法采用最基本的运动方程和电磁场方程,所作近似很少,保持了等离子体的物理特性,包括一些非线性特征、空间电荷效应、相对论效应及等离子体中的其它集体效应。Boswell<sup>[3]</sup> 等人首次将蒙特卡罗碰撞(MCC)方法引入到 PIC 程序中,形成 PIC-MCC 模型。随后,Vahedi<sup>[4]</sup> 等人引入随能量变化的碰撞截面及空碰撞方法对 PIC-MCC 模型进行了改良,应用于 Ar 气和 O<sub>2</sub> 的放电模拟。PIC 方法的时间步长受到多种限制,如差分方程稳定性(CFL)条件、等离子体频率的限制,若存在磁场还受到粒子回旋频率的限制<sup>[5]</sup>。引入 MCC 方法后,时间步长还受到粒子碰撞频率的限制。传统的 MCC 模型要满足空碰撞模型(Vahedi)限制,即在一个时间步长  $\Delta t$  内的总碰撞概率小于 0.1 的条件<sup>[4]</sup>。在高气压气体放电现象的粒子模拟中,Vahedi 限制将成为限制模拟时间步长的主要因素<sup>[6]</sup>。本文根据 PIC-MCC 模型中碰撞次数的概率分布推导出一种补偿 MCC (CMCC) 模型,并在不同折合电场强度下对电子在 He 气中的运动规律进行了模拟,对 CMCC 模型进行了验证。

## 1 传统 PIC-MCC 模型

PIC-MCC 模型的流程图如图 1 所示。首先给定初始电磁场和初始粒子,在电场和磁场的作用下按照 Newton-Lorentz 方程更新粒子位置和速度,并采用 MCC 模型得到碰撞后的位置和速度。然后根据粒子运动

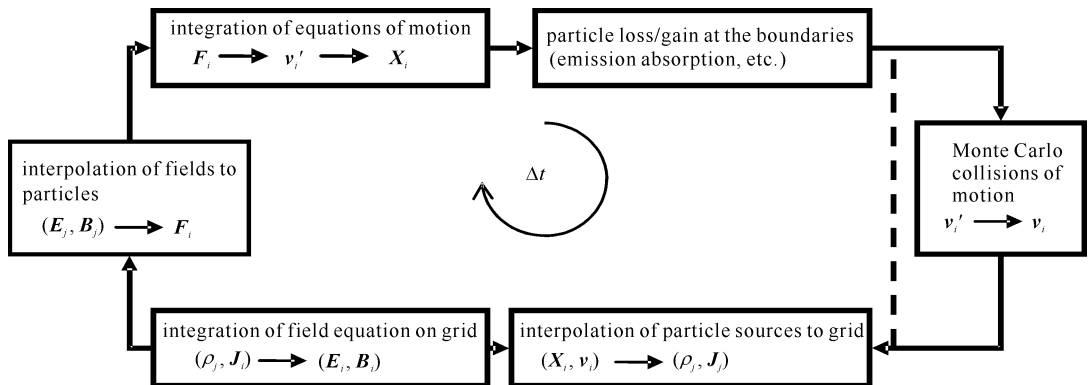


Fig. 1 Flowchart of PIC-MCC model

图 1 PIC-MCC 模型的流程图

\* 收稿日期:2009-04-13; 修订日期:2009-07-03

基金项目:国家自然科学基金项目(50637010, 50807045)

作者简介:李永东(1974—),男,博士,讲师,从事脉冲功率器件及其数值模拟研究; leyond@mail.xjtu.edu.cn。

前后的位置和速度,在空间网格上分配电荷、电流密度,最后利用 Maxwell 方程组求解新的电场和磁场。再在新的电场和磁场下更新粒子位置和速度,如此循环下去,模拟出等离子体的动态物理过程。图中  $F_i, v_i$  和  $X_i$  分别为第  $i$  个宏粒子的受力、速度和位置;  $E_j, B_j, \rho_j$  和  $J_j$  分别为第  $j$  个网络结点上的电场强度、磁感应强度、电荷密度和电流密度。

一般的蒙特卡罗碰撞是采用碰撞时间随机的方法,而 PIC 方法中的 MCC 模型不同于一般的蒙特卡罗碰撞。在 PIC 方法中,粒子推进和场推进的时间步长是固定的,采用在一个时间步长内随机决定粒子之间是否发生碰撞来实现蒙特卡罗碰撞。Vahedi 和 Surendra 提出的空碰撞 MCC 方法是一种高效的传统 MCC 方法。空碰撞即不发生任何作用的碰撞<sup>[4]</sup>,其频率为

$$\gamma_{\text{null}}(\epsilon) = \gamma_{\text{max}} - \sum_{i=1}^N \gamma_i(\epsilon) \quad (1)$$

$$\gamma_i(\epsilon) = n_g \sigma_i(\epsilon) v \quad (2)$$

$$\gamma_{\text{max}} = \max_x(n) \max_{\epsilon_j} \left[ v \sum_{i=1}^M \sigma_i(\epsilon_j) \right] \quad (3)$$

式中:  $\gamma_{\text{max}}$  为最大总碰撞频率;  $M$  为源粒子与靶粒子的实际碰撞过程种类数;  $\gamma_i(\epsilon)$  为能量  $\epsilon$  下第  $i$  种碰撞过程的频率;  $n_g$  为靶粒子密度;  $\sigma_i(\epsilon)$  为第  $i$  种碰撞的碰撞截面;  $v$  为源粒子速度;  $\max(\cdot)$  和  $\max(\cdot)$  函数分别表示在某空间范围和能量范围求最大值。

加入空碰撞后的总碰撞频率  $\gamma_{\text{max}}$  不随源粒子能量变化,那么每一个源粒子在时间步长  $\Delta t$  内的最大碰撞概率  $P_{\text{max}}$  也是常值。初始时刻确定  $P_{\text{max}}$ ,以后每一时间步长无需计算粒子能量和碰撞频率即可判断是否发生碰撞(包含空碰撞)。如果均匀分布在  $[0, 1]$  区间的随机数  $R_1$  小于  $P_{\text{max}}$ ,则发生碰撞;反之不发生碰撞。若发生碰撞,再采用另外一个均匀随机数  $R_2$  判断碰撞类型,如表 1 所示。若  $R_2 > (\gamma_1 + \gamma_2 + \dots + \gamma_{N-1} + \gamma_N) / \gamma_{\text{max}}$ ,则发生空碰撞,不进行任何处理;若发生其它实际碰撞,则根据碰撞类型进行粒子速度、方向的处理。

表 1 随机数  $R_2$  对应的碰撞类型

Table 1 Collision type versus random number  $R_2$

| range of $R_2$  | collision type |
|---|----------------|
| $0 \sim \gamma_1 / \gamma_{\text{max}}$   | 1              |
| $\gamma_1 / \gamma_{\text{max}} \sim (\gamma_1 + \gamma_2) / \gamma_{\text{max}}$   | 2              |
| ...   | ...            |
| $(\gamma_1 + \gamma_2 + \dots + \gamma_{N-1}) / \gamma_{\text{max}} \sim (\gamma_1 + \gamma_2 + \dots + \gamma_{N-1} + \gamma_N) / \gamma_{\text{max}}$ | N              |
| $(\gamma_1 + \gamma_2 + \dots + \gamma_{N-1} + \gamma_N) / \gamma_{\text{max}} \sim 1$  | null collision |

假设在某个时间步有  $N_s$  个源粒子,则最多有  $P_{\text{max}} N_s$  个发生碰撞,只需计算  $P_{\text{max}} N_s$  个源粒子的能量和碰撞频率。为了保证模型的精度,一般需要选择较小的时间步长  $\Delta t$ ,即要满足 Vahedi 限制:  $\gamma_{\text{max}} \Delta t < 0.1$ 。当气压较高时(如大气压下),该限制远比 CFL 稳定性条件的限制苛刻。

## 2 CMCC 模型

上述 MCC 方法中忽略了  $\Delta t$  时间内的多次碰撞,只处理单次碰撞,且  $P_{\text{max}}$  为常值,则在  $\Delta t$  内一个粒子是否碰撞是一个贝努里过程,因此一个粒子在  $n\Delta t$  时间内发生  $k$  次碰撞的概率服从二项分布

$$P_b^k = C_n^k P_{\text{max}}^k (1 - P_{\text{max}})^{n-k} \quad (4)$$

而实际上,一个频率为  $\gamma_{\text{max}}$  的碰撞过程,  $n\Delta t$  时间内发生  $k$  次的概率服从泊松分布

$$P_p^k = \exp(-n\Delta t\gamma_{\text{max}}) (n\Delta t\gamma_{\text{max}})^k / k! \quad (5)$$

二项分布和泊松分布在  $n\Delta t$  非常大时都近似于正态分布,分别为  $N[nP_{\text{max}}, nP_{\text{max}}(1 - P_{\text{max}})]$  和  $N(n\Delta t\gamma_{\text{max}}, n\Delta t\gamma_{\text{max}})$ 。因此采用 MCC 方法应该尽量满足相应的均值和误差都相等,即

$$P_{\text{max}} = \Delta t\gamma_{\text{max}} \quad (6)$$

$$P_{\text{max}}(1 - P_{\text{max}}) = \Delta t\gamma_{\text{max}} \quad (7)$$

但是明显地,两式不可能同时满足。

传统 MCC 方法根据式(5)计算总碰撞概率。将  $k=0$  代入式(5)中可以得到  $\Delta t$  内不发生碰撞的概率为

$$P_{P,0} = \exp(-\gamma_{\text{max}}\Delta t) \quad (8)$$

则  $\Delta t$  内发生碰撞的总概率为

$$P_{P,\text{total}} = 1 - P_{P,0} = 1 - \exp(-\gamma_{\text{max}}\Delta t) \quad (9)$$

采用  $P_{P,\text{total}}$  作为  $P_{\text{max}}$ , 将  $\Delta t$  内发生的多次碰撞当作一个单次碰撞来处理, 忽略了单次以上的碰撞。当时间步长  $\Delta t \ll 1/\gamma_{\text{max}}$  时,  $\gamma_{\text{max}}\Delta t \ll 1$ , 采用  $P_{P,\text{total}}$  计算  $P_{\text{max}}$  可以近似满足式(6)和式(7)。但随着时间步长的增大, 两者的误差都相应增大。当时间步长接近 Vahedi 限制时,  $\Delta t_{\text{Vahedi}} = 0.1/\gamma_{\text{max}}$ ,  $P_{\text{max,Vahedi}} = 0.095$ , 传统 MCC 模型的碰撞次数均值与式(5)的均值的相对误差为 5%, 方差的相对误差为 13.9%。

事实上, 对于一个碰撞过程,  $n\Delta t$  时间内发生碰撞的平均次数更加重要, 直接以式(6)来计算  $P_{\text{max}}$ , 即采用  $\Delta t$  内的一个源粒子的平均碰撞次数为最大碰撞概率, 则消除了时间步长对平均碰撞次数所产生的误差。这种方法相当于将  $\Delta t$  内的多次碰撞当作多个单次碰撞来处理, 在相邻的时间步长中完成, 补偿了忽略的多次碰撞, 称之为 CMCC 模型。

当满足式(6)且  $\Delta t \ll 1/\gamma_{\text{max}}$  时,  $P_{\text{max}} \ll 1$ , 式(7)也可近似满足。而当时间步长接近 Vahedi 限制时, CMCC 模型的均值没有误差, 方差的相对误差为 10.0%, 比传统 MCC 模型更加准确。

### 3 计算结果

采用 2.5 维 PIC 软件 UNIPIC<sup>[7]</sup> 模拟不同折合电场强度  $E/N$  下的电子在 He 气中的运动规律, 并对 CMCC 模型与传统 MCC 模型的模拟结果进行比较。

模拟区域为  $0.5 \text{ m} \times 0.5 \text{ m}$ ,  $x$  和  $y$  方向都为周期性边界, 在整个空间初始加载 10 000 个静止电子, 外加  $x$  方向电场, 忽略带电粒子自身产生的电磁场。设电场强度为  $E$ , 气体粒子密度为  $N$ , 在  $E/N = 1 \text{ Td}$  ( $1 \text{ Td} = 10^{-17} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$ ),  $E/N = 40 \text{ Td}$ , 时间步长  $\Delta t$  分别为  $0.01\Delta t_{\text{max}}$  ( $\Delta t_{\text{max}} = 1/\gamma_{\text{max}}$ ),  $0.1\Delta t_{\text{max}}$  (相当于 Vahedi 限制),  $0.2\Delta t_{\text{max}}$ ,  $0.5\Delta t_{\text{max}}$ ,  $\Delta t_{\text{max}}$  下进行了模拟, 模拟总时间为  $1000\Delta t_{\text{max}}$ 。对于每种参数组合采用不同的初始随机种子运行 10 次, 模拟结束后通过 3 个方向的速度计算电子速度分布、温度和漂移速度。另外在时间步长为  $0.001\Delta t_{\text{max}}$  对传统 MCC 模型下进行了模拟, 以其结果作为精确参考值。

$E/N = 1 \text{ Td}$  时, 粒子在平均自由程内获得的电能低, 与靶粒子仅发生弹性碰撞, 没有激发碰撞和电离碰撞。时间步长  $\Delta t$  分别为  $0.2\Delta t_{\text{max}}$  和  $0.5\Delta t_{\text{max}}$  下采用 CMCC 模型和传统 MCC 模型得到的电子速度分布与参考值的比较如图 2 所示。可以看出, 传统 MCC 模型在时间步长大于  $0.2\Delta t_{\text{max}}$  时的模拟结果有较大偏差, 而 CMCC 模型的模拟结果几乎没有误差。电子温度  $T$  及  $x$  方向漂移速度  $v_x$  随时间步长  $\Delta t$  的变化如图 3 所示, 同样可以看出 CMCC 模型结果的精度高于传统 MCC 模型; 在同等精度下 CMCC 模型时间步长可以是传统 MCC 模型时间步长的两倍以上。传统 MCC 模型由于忽略了多次碰撞, 电子平均自由程增大, 电子从外场中获

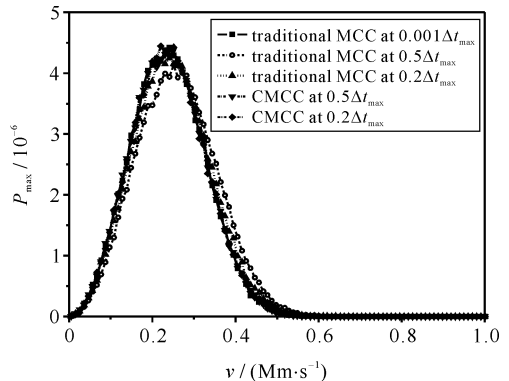


Fig. 2 Comparison of velocity distribution between CMCC and traditional MCC model ( $E/N = 1 \text{ Td}$ )

图 2 CMCC 与传统 MCC 模型得到的速度分布 ( $E/N = 1 \text{ Td}$ )

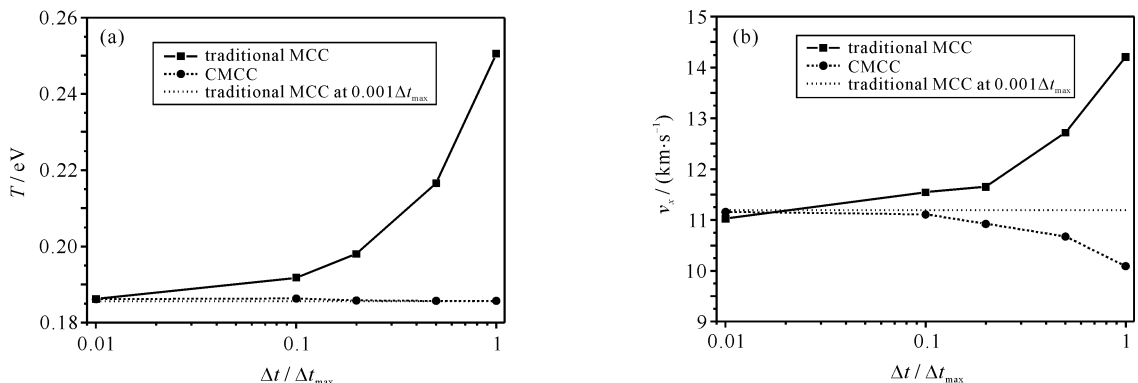


Fig. 3 Comparison of electron temperature and electron drift velocity between CMCC model and traditional MCC model ( $E/N = 1 \text{ Td}$ )

图 3 CMCC 与传统 MCC 模型得到的电子温度和漂移速度随时间步长的变化 ( $E/N = 1 \text{ Td}$ )

得了更多的能量,因此传统 MCC 模型得到的速度分布向右偏移,电子温度偏大, $x$  方向漂移速度也偏大。

$E/N=40$  Td 时,电子在平均自由程内获得的电能高,与靶粒子不仅发生弹性碰撞,而且发生激发碰撞和电离碰撞。不同时间步长下模拟得到的碰撞电离  $\text{He}^+$  数目、电子温度、 $x$  方向漂移速度分别如图 4 所示。可以看出,CMCC 模型的误差远小于传统 MCC 模型的误差。

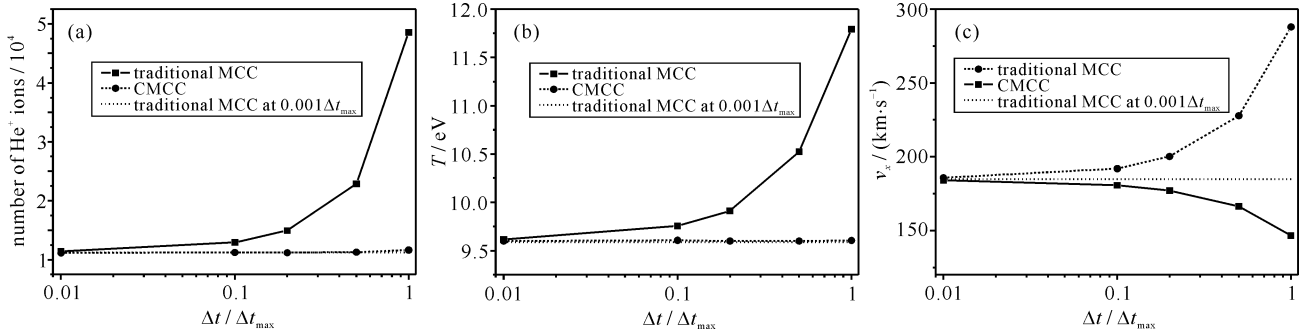


Fig. 4 Number of  $\text{He}^+$ , electron temperature and drift velocity of CMCC model and traditional MCC model ( $E/N=40$  Td)

图 4 CMCC 与传统 MCC 模型碰撞电离  $\text{He}^+$  数目、电子温度和漂移速度随时间步长的变化 ( $E/N=40$  Td)

## 4 结 论

本文对采用空碰撞的 PIC-MCC 模型进行了分析,根据碰撞次数的概率分布推导出一种补偿 MCC (CMCC) 模型,该模型将 PIC 模拟中单时间步长内的多次碰撞等效为多个单次碰撞,使平均碰撞次数与解析的平均碰撞次数完全相等。通过模拟不同折合电场强度  $E/N$  下电子在 He 气中的运动规律,发现采用大时间步长的 CMCC 模型得到的结果与采用小两个以上数量级的小时间步长的传统 MCC 模型得到的模拟结果基本一致。结果表明 CMCC 模型提高了计算精度,降低了 MCC 模型对时间步长的要求,特别适用于高气压气体放电现象的粒子模拟,如大气放电、气体开关等。

## 参考文献:

- [1] Buneman O. Dissipation of currents in ionized media[J]. *Phys Rev*, 1959, **117**(3):503-517.
- [2] Dawson J M. One-dimensional plasma model[J]. *Physics of Fluids*, 1962, **5**(4):445-459.
- [3] Boswell R W, Morey I J. Self-consistent simulation of a parallel-plate RF discharge[J]. *Appl Phys Lett*, 1988, **52**(1):21-23.
- [4] Vahedi V, Surendra M A. Monte Carlo collision model for the particle-in-cell method: applications to argon and oxygen discharges[J]. *Computer Physics Communications*, 1995, **87**(1-2):179-198.
- [5] Birdsall C K, Langdon A B. Plasma physics via computer simulation[M]. New York: Adam Hilger, 1991.
- [6] Worts E J, Kovaleski D K. Particle-in-cell model of a laser-triggered spark gap[J]. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2006, **34**(5): 1640-1645.
- [7] Li Yongdong, He Feng, Liu Chunliang. A volume-weighting cloud-in-cell model for simulation of axial symmetrical plasmas[J]. *Plasma Science and Technology*, 2005, **7**(1):2653-2656.

## Compensated particle in cell-Monte Carlo collision model with wide time step limit

Li Yongdong, Wang Hongguang, Liu Chunliang, Zhou Yan, Liu Meiqin  
(Key Laboratory for Physical Electronics and Devices of the Ministry of Education,  
Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

**Abstract:** A compensated Monte-Carlo collision model (CMCC) was proposed, which took the average collision times computed from normal distribution as the probability of single particle collision during a time step. Hereby the ignored multi-time collisions were compensated by additive single collisions. The electron motion in discharged He gas was simulated with CMCC model on different reduced field conditions. Simulation results showed that CMCC model with long time step got the same electron velocity distribution and temperature as conventional MCC model with short time step. It was proved that the CMCC model had high efficiency especially for PIC simulation of high pressure gas discharges.

**Key words:** particle-in-cell simulation; Monte-Carlo collision model; time step limit; gas discharge