基于 PIC 方法的离子发动机光学系统粒子模拟

刘 畅 汤海滨 顾 佐 江豪城

(北京航空航天大学 宇航学院, 北京 100083) (中国空间技术研究院 第510研究所, 兰州 730000)

摘 要: 采用单元内粒子(PIC, Particle2In2Cell)方法对离子发动机光学系统进行了等离子体粒子模拟. PIC 方法可有效地对等离子体进行粒子模拟, 其中电场求解采用 SOR(Succes2sive Over Relaxation)方法, 离子加速方法采用蛙跳格式. 推进剂采用氙, 模拟粒子为单核离子. 模拟得到了栅极间电势分布、电场强度分布及栅极间氙离子数密度分布. 计算结果表明, 在所取的光学系统电压参数和几何参数下, 粒子束能够顺利通过栅极孔, 不会撞击到栅极孔壁上. 粒子模拟为今后开展离子发动机光学系统腐蚀机理分析及寿命评估提供了有效的数值方法.

关 键 词: 离子发动机; 光学系统; 等离子体; 粒子模拟

中图分类号: V 439

文献标识码: A 文 章 编 号: 1001-5965(2006)04-0382-05

Particle simulation of ion thruster optical system based on PIC method

Liu Chang Tang Haibin

(School of Astronautics, Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100083, China)

Gu Zuo Jiang Haocheng

(510 Institute, Chinese Academy of Space Technology, Lanzhou 730000, China)

Abstract: The plasma particle simulation of ion thruster optical system was carried out by the PIC (particle2in2cell) method. PIC method is an efficient method in plasma particle simulation, in which the SOR(successive over relaxation) method was adopted to calculate the electric field and the leap2frog method was adopted to accelerate the particles. Xenon was used as propellant and only singly charged Xenon ions was included in the simulation. The simulation results include the distribution of the electric potential between the grids and distribution of the electric field strength, and also the distribution of Xenon ion number density. The simulation results show that under the electrical parameters and the geometric parameters used, the ion beam can get across the grid aperture, with no hits on the grid wall. The simulation of the optical system provided an efficient method to analyze the characteristic of the grid erosion and to evaluate the life time of an ion thruster.

Key words: ion thruster; optical system; plasma; particle simulation

离子发动机自上世纪中叶问世至今, 已经越来越受到人们的关注, 许多国家都投入了相当的人力和物力进行相关研究. 离子发动机光学系统主要由屏幕栅极和加速栅极组成, 若为三栅极系统, 则还应有减速栅极. 光学系统设计是离子发动机研制中的关键技术, 离子发动机光学系统腐蚀情况是影响发动机寿命的主要因素, 而栅极腐蚀主要是由粒子对栅极的碰撞引起的, 因此对光学系统进行粒子模拟对于离子发动机寿命评估具有重要意义. 目前研究光学系统腐蚀机理主要采用实验和数值模拟 2 种方法. 寿命实验可以获得真实的栅极腐蚀情况, 但实验消耗过大; 数值模拟方法可以大大降低时间消耗与资金消耗, 目前已被广为采用. 离子发动机光学系统粒子模拟大多采用 PIC(Particle2In2Cell)方法, 该方法通过直接跟踪粒子在电场中的加速运动过程, 以得到所需的结

收稿日期: 2005-02-14

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50306001)

作者简介: 刘 畅(1980-), 男, 北京人, 博士生, bhliuchang@buaa.edu.cn.

果. 文献[1]中, 开发了二维光学系统粒子模拟程序, 并研究了施加离子束加速电压后离子束引出瞬时过程, 并通过实验进行了验证. 文献[2]中, 采用 PIC2MCC 方法对光学系统进行了模拟, 预示了栅极腐蚀特性. 文献[3, 4]中, 开发了三维粒子模拟程序, 预示了栅极腐蚀深度的平面分布, 并与实验进行了对比验证. 本文发展了无碰撞的二维等离子体粒子模拟程序, 对电离室等离子体引出过程及离子束聚焦特性进行了研究.

1　离子发动机工作原理

如图 1 所示, 推进剂由空心阴极进入放电室, 空心阴极放电产生的电子在电磁场的加速作用下, 不断与推进剂气体分子发生碰撞, 气体分子被电离, 在放电室中形成等离子体. 电子最终被阳极吸收, 离子在光学系统静电场加速作用下, 高速喷出产生推力. 高速喷出的离子流再与中和器空心阴极产生的电子流中和, 以免航天器带电.

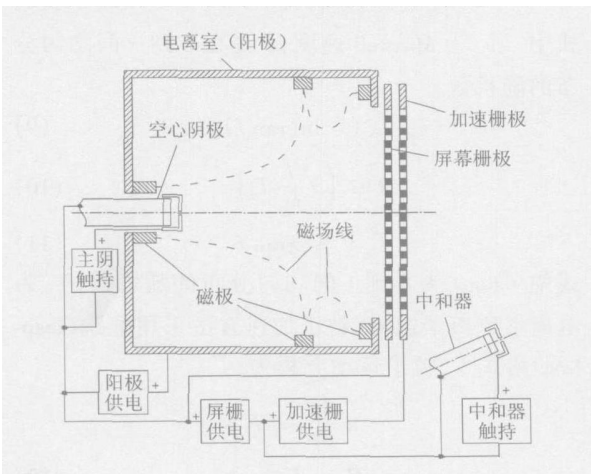

图 1　离子发动机原理图

离子发动机栅极结构见图 2, 屏幕栅极和加速栅极都是很薄的电极板, 上面打有规则分布的小孔, 一般为六角形分布. 屏幕栅极带正电, 加速栅极带负电, 在两栅极间会形成很强的电场. 离子束进入栅极孔后, 大部分被电场加速后喷出, 小部分撞击到栅极上. 图 3 为离子束引出过程示意图, 图 3 左边部分为电离室等离子体, 黑色部分为栅极, 等离子体会在屏幕栅极左边形成等离子体鞘层, 在栅极间电场的静电力作用下, 等离子体会被聚焦为离子束, 如图 3 中所示, 经电场加速后高速喷出, 产生推力.

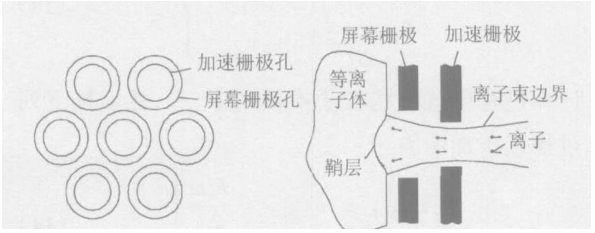

图 2　栅极示意图　　图 3　离子束引出过程示意图

2　计算模型

2.1　计算域及网格划分

由于栅极上的每个孔都具有轴对称特性, 因此采用二维轴对称计算模型. 计算域如图 4 所示.

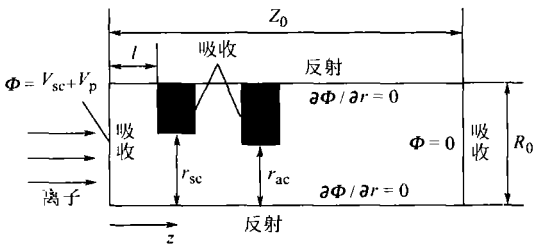

图 4　计算域及边界条件

图 4 中 r_{sc} 为屏幕栅极孔半径, r_{ac} 为加速栅极孔半径, 5 为电势, V_{sc} 为屏幕栅极电势, V_p 为等离子体电势, r, z 分别为径向和轴向位置, R_0, Z_0 分别为计算域径向和轴向长度, l 为计算域左边界与屏幕栅极上表面距离(即鞘层厚度), 图中黑色部分为栅极, 下边界为孔的轴线, 坐标原点选在计算域左下角. 计算区域大小为 5.7 mm @1.35 mm, 划分为 228@54 的正交等距网格, 网格大小为 $\$z = \$r = 2.5 @10^{-5}$ m. 在等离子体粒子模拟中网格大小需满足一定条件[5], 即 $\$z < K_D$, $\$r < K_D$, 其中 K_D 为电离室中等离子体的德拜长度, K_D 由下式确定[6]:

$$K_D = 7.43 @10^3 \sqrt{T_e / n_p} \qquad (1)$$

式中　T_e 为电离室中的电子温度; n_p 为电离室等离子体数密度, 本文中 T_e 取 5 eV, n_p 取 $4.5 @10^{17}$ m^{-3}, 由式(1)可计算出 $K_D = 2.5 @10^{-5}$ m, 满足等离子体模拟的要求.

2.2　电磁场控制方程及边界条件

完整描述光学系统的电磁场应采用 Maxwell 方程组:

$$\left.\begin{aligned} \$\#E &= 4\pi Q \\ \$@E &= -\frac{1}{c}\frac{\partial B}{\partial t} \\ \$@B &= \frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{1}{c}4\pi J \\ \$\#B &= 0 \end{aligned}\right\} \qquad (2)$$

式中　E 为电场强度; Q为电荷密度; B 为磁感应

强度; c 为光速; J 为电流密度.

由于光学系统受磁场影响不大, 因此电磁场求解可简化为静电场求解问题[1], 即只需求解 Poisson 方程:

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{e}{\varepsilon_0}(n_i - n_e) \tag{3}$$

式中 e 为电子电量; ε_0 为真空介电常数; n_i 为氙离子数密度; n_e 为电子数密度.

在二维轴对称模型的情况下, Poisson 方程为

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = -\frac{e}{\varepsilon_0}(n_i - n_e) \tag{4}$$

求解出电势后, 可求出:

$$E = -\nabla \varphi \tag{5}$$

静电场求解采用有限差分法, 差分方程组求解采用逐次超松弛(SOR, Successive Over Relaxation)方法, 边界条件见图 4, 栅极为等势体, 左边界为电离室等离子体, $\varphi = V_{sc} + V_p$, 右边界可取为空间 0 电势面或取 Neumann 型边界条件, 当计算域 z 方向足够长时, 该边界条件取法对计算结果影响不大[3]. 上边界与下边界取 Neumann 型边界条件.

2.3 粒子模拟方法

采用 PIC 方法[5], 该方法是等离子体粒子模拟的有效方法. PIC 方法的基本思想为: 通过求解电场 Poisson 方程得到电势分布, 用插值法求得粒子所在位置处的电场力, 然后加速粒子, 再用新的粒子位置求解新的电场分布, 上述过程循环进行, 直至收敛. 其算法流程图见图 5.

粒子加速过程边界条件见图 4, 粒子以初始位置和初始速度从计算域左边喷入, 经加速后从右边离开计算域. 计算域上边界和下边界为反射边界, 左边界、右边界和栅极为吸收边界. 在加速过程中若粒子越出左边界或右边界, 或撞到栅极, 则将粒子删除, 若到达上边界或下边界则将粒子

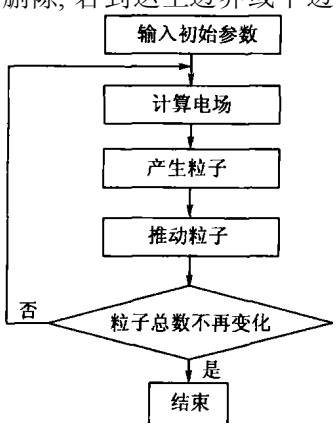

图 5 PIC 方法流程图

反射回计算域, 反射过程为镜面反射, 即粒子切向速度不变, 法向速度变号. 计算域左边界应处于电离室等离子体鞘层位置处, 本文中取 $l = 0.7$ mm. 在每一个时间步中都有一定数量的粒子喷入计算域, 该数量取决于电离室等离子体电流密度[1]:

$$j = en_{i0}\left(\frac{kT_e}{m_i}\right)^{1/2} \pi R^2 \exp\left(-\frac{1}{2}\right) \tag{6}$$

式中 j 为电流密度; n_{i0} 为电离室等离子体数密度; k 为 Boltzmann 常数; T_e 为电离室电子温度; m_i 为氙离子质量. 在粒子初始化中, 须确定粒子的初始位置与初始速度, 粒子初始位置都位于计算域左边界发射面上, 其径向位置随机给定, 并保证粒子在整个圆形发射面上均匀分布, 粒子初始发射速度轴向分量由 Bohm 准则确定[2]:

$$v_B = \sqrt{\frac{kT_e}{m_i}} \tag{7}$$

发射速度径向分量满足 Maxwell 速度分布:

$$v_r = v_M \cos H \tag{8}$$

式中 v_r 为 Maxwell 速度; H 是在 0 到 π 间均匀分布的随机数;

$$v_M = (-\ln(\mathrm{ran}f))^{1/2} \pi B \tag{9}$$

$$B = \left(2\frac{k}{m_i}T_i\right)^{-1/2} \tag{10}$$

$$H = \pi \mathrm{ran}f \tag{11}$$

式中 ranf 为 0 到 1 间均匀分布的随机数; T_i 为电离室氙离子温度. 粒子加速方法采用蛙跳(leap-frog)格式[5], 粒子运动方程为

$$\left.\begin{aligned} m\frac{dv}{dt} &= F \\ F &= Eq \\ \frac{dx}{dt} &= v \end{aligned}\right\} \tag{12}$$

式中 m 为粒子质量; v 为粒子速度; F 为电场力; q 为电量; x 为粒子位置, 电场强度由与粒子邻近的 4 个网格点上的电场强度插值得到. 运动方程的差分方程为

$$\left.\begin{aligned} m\frac{v_{new} - v_{old}}{\Delta t} &= F_{old} \\ \frac{x_{new} - x_{old}}{\Delta t} &= v_{new} \end{aligned}\right\} \tag{13}$$

计算过程中首先将粒子推回到 $v_{-\Delta t/2}$, 然后按下列过程逐步加速粒子:

$$\left.\begin{aligned} v_{t+\Delta t/2} &= v_{t-\Delta t/2} + \frac{F_t m}{\Delta t} \\ x_{t+\Delta t} &= x_t + v_{t+\Delta t/2}\Delta t \end{aligned}\right\} \tag{14}$$

计算完每一个时间步之后, 都要将粒子的电荷分配到网格点上, PIC 方法中粒子的电荷分配到邻近的 4 个网格点上, 详见文献[4].

为简化问题, 在粒子模拟过程中, 本文只考虑一阶氙离子, 不考虑电子、二阶氙离子与中性原子, 氙离子数密度通过上述 PIC 方法求得. 等离子体中存在多种粒子之间的碰撞, 如带电粒子之间的库仑碰撞, 离子与中性粒子间的电荷交换碰撞 (charge exchange collision) 等, 为简化问题, 本文暂不考虑粒子间的碰撞.

3　算例及结果分析

本模拟程序需要输入的初始参数包括: 光学系统的几何参数、栅极的加速电压以及电离室中等离子体的参数. 粒子模拟程序中栅极的几何参数与加速电压见表 1, 等离子体参数见表 2.

表 1　栅极参数

栅极参数	数值
r_{sc}/mm	1.10
r_{ac}/mm	0.65
l/mm	0.70
V_{sc}/V	1000
V_{ac}/V	- 500

表 2　放电室等离子体参数

等离子体参数	数值
$n_{i0}/10^{17}m^{-3}$	4.5
$n_{e0}/10^{17}m^{-3}$	4.5
T_i/K	500
T_e/eV	5
V_p/V	31

图 6 为栅极间电势等值线图, 图 7 为电场强度向量分布图. 从图 6 中可以看出栅极孔内以及栅极之间的电势等值线基本垂直于轴线, 电场强度向量应垂直于电势等值线, 并指向电势减小的方向, 因此相应地从图 7 中可看出上述区域中的电场强度基本为水平方向, 并指向出口. 这种水平向右的电场会使电离室等离子体中的正离子聚焦为离子束之后加速引出, 若采用氙为推进剂, 则单核离子和双核离子在此电场中被加速后高速喷出, 产生推力. 在栅极上游区域, 电势的分布主要由栅极的几何参数和栅极电势决定, 而在栅极的下游区域电势的分布除受栅极几何参数和栅极电势的影响外, 还受引出的离子束分布的影响. 离子束聚焦及引出特性会对发动机的推力和比冲产生很大影响, 聚焦效果越好, 离子束发散角越小, 越有利于减小推力损失. 离子束喷出后与中和器发射出的电子中和, 以防止航天器带电.

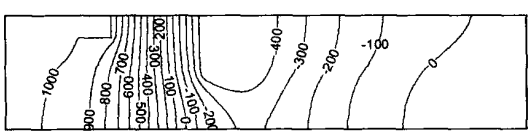

图 6　栅极间电势等值线图

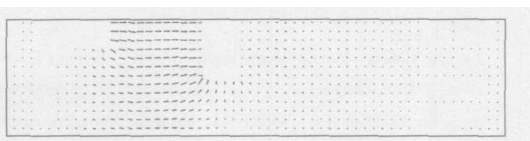

图 7　电场强度向量分布图

图 8 为氙离子空间分布图, 从图中可明显看出, 电离室中的氙离子在栅极间电场的作用下, 经过聚焦后喷出, 好的离子束聚焦应该使离子束喷出时具有较小的束发散角, 从图中可以看出, 离子束喷出时较为平直, 发散角较小. 图 8 中可看出, 屏幕栅极上游表面离子撞击现象严重, 所产生的栅极腐蚀会影响光学系统寿命, 但离子束经过加速栅极孔时, 束直径小于加速栅极孔直径, 这说明离子束绝大部分通过栅极孔, 只有少部分氙离子撞到加速栅极上, 这是为了避免过度的离子撞击而引起的栅极腐蚀. 程序统计出的屏幕栅极电流为 162LA, 加速栅极电流为 3LA, 束电流为310LA, 可以看出加速栅极电流几乎为 0. 需要指出的是, 虽然不希望有加速栅极电流, 但在离子发动机实际工作过程中, 加速栅极电流总是存在的, 这是由于等离子体中存在电荷交换碰撞, 碰撞产生的带电粒子会在电场力的作用下撞到栅极上, 这是加速栅极下游表面产生腐蚀的主要原因. 在本模拟中, 计算出的加速栅极电流较小的原因是模拟中未考虑中性粒子以及离子间的碰撞因素.

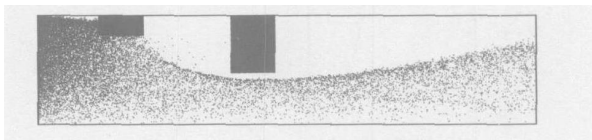

图 8　氙离子空间分布图

图 9 为电离室与加速栅极下游(z= 3 mm) 处的径向离子数密度分布图, 从图中可以看出, 电离室中径向离子数密度分布较为均匀, 而加速栅极下游离子分布随 r 的增长先增大, 到达极值后突

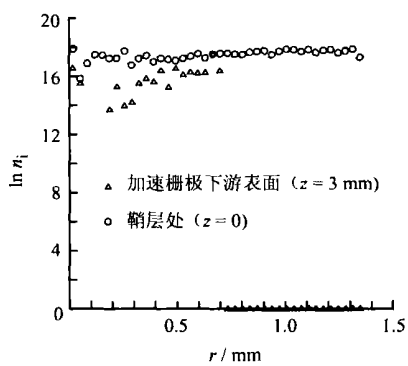

图 9　径向离子数密度分布

然变为0, 相应地从图9中可看出, 加速栅极下游喷出的离子束中心部分比较稀疏, 而边缘部分比较密集, 这是由于电离室和屏幕栅极孔附近径向位置较高处电场强度向量稍向右下方偏斜, 而径向位置较低处的电场强度向量则基本水平向右, 见图7, 径向位置较高处的离子经过聚焦后径向位置变低, 大量的离子聚集到了离子束的边缘部位, 因此密度较高, 而电离室中径向位置较低的离子经加速后径向位置基本保持不变. 文献[1]中也有类似的计算结果.

图10为光学系统电势曲线, 图中的栅极电势, 即图4中上边界电势, 栅极孔轴线电势, 即图4中下边界电势, 栅极电势中的两段水平部分为屏幕栅极与加速栅极, 曲线最左端电势与屏幕栅极之间的电势差即为电离室等离子体电势 V_p, 该电势是由等离子体固有特性而形成的, 即等离子体会在与固体壁面接触的地方形成等离子体鞘层, 该鞘层厚度量级为十几个德拜长度, 鞘层电势差即为等离子体电势, 该电势量级为几十伏, 可通过实验测量得到.

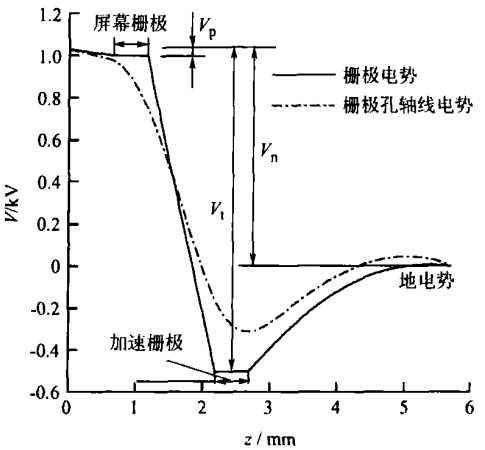

图10 栅极电势V变化曲线

从图10中还可看出, 在加速栅极与右边界之间存在着一个电势逐渐升高的区域, 在该区域中由于电场强度方向向左, 因此会对正离子产生减速作用, 虽然该减速作用小于光学系统对离子总的加速作用, 但该减速作用仍会对离子束的聚焦效果产生显著的负面影响[7], 增大离子束发散角, 增大推力损失, 进而影响发动机性能. 当氙离子到达中和面后, 与中和器喷出的电子中和, 此时束等离子体的静电屏蔽作用会减弱加速栅极对离子束的影响. 加速栅极下游存在的这种反向电场对离子束的减速发散作用主要取决于净2总加速电压比(net2to2total accelerating voltage ratio):

$$R = V_n P V_t \quad (15)$$

式中 V_n 为净加速电压; V_t 为总加速电压, 见图10. 增大R可减小反向电场对离子束的减速发散作用, 由式(15)可看出, 改变加速栅极电压可改变R, 极限情况下, 当加速栅极电压为0时, R为最大值1. 减小加速栅极电压虽可增大R, 进而减小对离子束的减速发散作用, 但当加速栅极电压的绝对值过小时, 中和器发射出的电子会在电场力的作用下回流到电离室或撞到栅极上, 产生腐蚀, 影响发动机寿命, 因此需对R进行优化. 在本算例中, V_n= 1 031V, V_t= 1 531V, R= 0. 67.

4 结 论

离子发动机光学系统数值模拟是研究光学系统寿命以及发动机性能预估的有效方法, 本文采用PIC方法对光学系统进行了等离子体粒子模拟, 并得到以下结论: ¹ 本文所取的光学系统几何参数和电压参数合理, 可以使离子束良好的聚焦; º 栅极间电场等势线应尽量垂直于轴线, 以减小离子束发散角, 获得好的离子束聚焦特性; » 加速栅极与右边界之间存在正离子减速区, 该区域会影响离子束聚焦效果, 增大R可以减小减速发散作用, 但R过小会产生栅极腐蚀, 因此需对R进行优化.

本文的后续工作包括带碰撞的粒子模拟方法开发以及栅极腐蚀模型的建立与模拟方法研究.

参考文献 (References)

[1] Okawa Y. Numerical analysis of ion beam extraction phenomena in an ion thruster[A]. International Electric Propulsion Conference[C]. Pasadena, California, 2001

[2] Inanaga Y, Ozaki T. Particle simulation for ion thruster grid design [A]. International Electric Propulsion Conference[C]. Pasadena, California, 2001

[3] Wang J, Polk J, Brophy J, et al. Three2dimensional particle simulations of ion2optics plasma flow and grid erosion[J]. Journal of Propulsion and Power, 2003, 19(6): 1192~ 1199

[4] Wang J, Anderson J, Polk J. Three2dimensional particle simulations of ion optics plasma flow[R]. AIAA 9823799, 1998

[5] Birdsall C K, Langdon A B. Plasma physics via computer simulation [M]. New York: McGraw2Hill, 1985

[6] 菅井秀郎. 等离子体电子工程学[M]. 北京: 科学出版社, 2002
Jianjing Xiulang. Plasma electric engineering[M]. Beijing: Science Press, 2002(in Chinese)

[7] Aston G, Kaufman H R, Wilbur P J. Ion beam divergence characteristics of two2grid accelerator systems[J]. AIAA Journal, 1978, 16(5)516~ 524