

DOI: 10.12158/j.2096-3203.2025.05.016

# 电热联合故障下天然气合成油分解特性

陈贝贝<sup>1</sup>, 李晓涵<sup>2</sup>, 刘金凤<sup>1</sup>, 江军<sup>1</sup>

(1. 南京航空航天大学(江苏省新能源发电与电能变换重点实验室), 江苏 南京 211106;

2. 国网江苏省电力有限公司电力科学研究院, 江苏 南京 211103)

**摘要:**天然气合成油(gas to liquid, GTL)以天然气为原料, 具备优良的环保性能和电气性能, 可用作新型变压器绝缘油。为更好地了解 GTL 绝缘油的产气规律, 文中基于分子动力学仿真, 构建 GTL 绝缘油微观体系, 模拟其在电热联合故障下的分解过程。结合仿真结果, 分析 GTL 绝缘油分解产物的种类和数量的变化趋势, 并通过同位素标记法得到其产气路径和机理。仿真结果表明: GTL 绝缘油分解的最终产物为  $C_2H_4$ 、 $C_2H_2$ 、 $CH_4$ 、 $H_2$ 、 $C_2H_6$  等小分子气体和自由基; 随着故障温度的升高, GTL 绝缘油的分解愈发充分; 电热联合故障下, 温度是影响 GTL 绝缘油分解的主要因素, 强电场的存在会加速其分解; 在相同故障条件下, GTL 绝缘油分解产生的  $H_2$  和  $CH_4$  占比更高, 相比传统矿物油提高了 5% 左右。文中研究成果将为 GTL 绝缘油变压器的故障诊断与状态评估提供理论支撑与参考。

**关键词:**天然气合成油(GTL); 分子动力学模拟; ReaxFF 反应力场; 电热联合故障; 油中溶解气体; 分解特性

中图分类号: TM855

文献标志码: A

文章编号: 2096-3203(2025)05-0168-08

## 0 引言

油浸式变压器在电力系统中充当重要角色, 其安全可靠运行对电网的稳定性具有重大影响。变压器油具有绝缘、散热和消弧的功能, 通常作为信息载体用于分析设备运行状况。目前, 广泛使用的变压器油是传统 25 号矿物油<sup>[1]</sup>。传统矿物油燃点低、难降解且原料资源有限, 难以满足绝缘油安全、环保及可持续发展的需求<sup>[2-3]</sup>。天然气合成油(gas to liquid, GTL)具有不含硫、无芳香烃、黏度低、氧化安定性好、生物降解率高等特点<sup>[4-5]</sup>, 环保性能好、电气性能优良, 可作为一种新型的变压器绝缘油使用。目前, 全球范围内最大的壳牌 GTL 工厂可日产 14 万桶天然气制油产品<sup>[6]</sup>, GTL 绝缘油已经在国内外变压器中有一定规模的应用, 主要集中在 220 kV 及以下电压等级的电力设备<sup>[7]</sup>。

在变压器的运行过程中, 过热和放电故障最为普遍<sup>[8-9]</sup>, 若不能被及时发现, 将严重威胁变压器的安全可靠运行。变压器发生电热故障会导致绝缘油分解, 不同故障条件下分解产生的气体不同, 因此绝缘油分解规律是变压器故障诊断的重要依据。由于绝缘油在电热故障下的分解过程复杂, 仅靠宏观实验很难全面深入地揭示其分解规律, 因此, 在微观层面开展绝缘油分解模拟, 研究其分解机理及产气规律具有重要意义。

收稿日期: 2024-12-31; 修回日期: 2025-03-17

基金项目: 江苏基础研究计划自然科学基金资助项目“电热混合故障下气制绝缘油产气及扩散机理研究”(BK20220218)

在不同故障条件下, 绝缘油分解产生的气体种类、数目和比例不同。Halstead W D 和 Shirai M 等利用宏观热力学方法计算矿物油在热故障下分解产气的过程, 总结出绝缘油热分解的两个阶段<sup>[10-11]</sup>; 杜林等基于分子动力学仿真, 研究不同故障温度下矿物油的受热分解过程, 着重分析温度对热解微观过程的影响<sup>[12]</sup>; 张颖等通过追踪分子元素, 分析绝缘油分子在温度作用下分解的动态过程, 明确了其分解机理和产气机制<sup>[13]</sup>。以上研究重点关注矿物油在热故障下的分解规律, 但忽略了电故障对气体分解的影响。油中放电故障包括局部放电、火花放电和击穿放电。刘琴等对比 3 种放电模型在不同电极间隙、不同放电时间下的产气量变化, 总结了不同放电模型下油中放电产气规律<sup>[14]</sup>; 邢亚东等研究不同种类的绝缘油在不同放电能量下的产气规律与差异, 利用产气量和气体含量比值判断电故障的严重程度<sup>[15]</sup>。上述研究仅分析了单一温度下不同放电程度对绝缘油分解的影响, 但在实际工况下, 由于变压器内部环境复杂多变, 电故障与热故障通常会同时发生<sup>[16-17]</sup>。因此, 现有研究对影响绝缘油分解规律的因素考虑尚不全面。

目前, 针对矿物油油中溶解气体的研究较为普遍, 新型 GTL 绝缘油也逐步得到国内外的重视和研究。英国曼彻斯特大学 Lu W 等对 GTL 绝缘油的电气性能进行了一定研究, 发现在正、负极性的雷电冲击下, GTL 绝缘油的击穿电压始终高于矿物绝缘油<sup>[18]</sup>。中国电科院王健一团队对 GTL 绝缘油的物理、化学和电气性质进行了系统测试, 并与其他

3种常见变压器油进行对比,说明了GTL绝缘油电气性能的优异性<sup>[19]</sup>。上述研究主要集中在GTL绝缘油的理化性能和电气性能等方面,但电热联合故障下GTL绝缘油的分解与产气规律模拟尚未得到充分关注。

因此,为研究电热联合故障下GTL绝缘油的分解机理及规律,文中基于ReaxFF反应力场构建GTL绝缘油分子模拟体系,分别开展不同电热故障下GTL绝缘油的分子动力学模拟。在此基础上,结合仿真动态轨迹过程,分析系统产物的种类和数量变化趋势,深入研究不同故障条件对GTL绝缘油分解的影响,明晰GTL绝缘油的动态分解过程和产气规律,为GTL绝缘油变压器的故障监测与诊断提供理论支撑与参考。

## 1 GTL 绝缘油分子组成和分解原理

### 1.1 GTL 分子组成成分

变压器绝缘油是众多电力设备中不可或缺的绝缘介质,其性能对设备安全可靠运行至关重要。为确保电力设备优质绝缘油的供应和安全可靠使用,电力行业不断探索更加安全、环保的产品替代传统矿物绝缘油。在此背景下,一种基于天然气制油技术的异构变压器油(即GTL绝缘油)于2013年出现<sup>[20]</sup>,其合成工艺如图1所示。

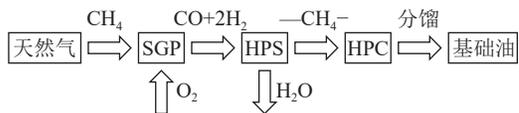


图1 天然气合成变压器油工艺流程

Fig.1 Natural gas synthesis transformer oil process

其中SGP、HPS和HPC分别为壳体气化工艺、重石蜡合成和重石蜡转化过程。最后对基础油进行精炼可得到成品变压器油<sup>[4]</sup>。由于天然气储量丰富,新型GTL绝缘油的广泛应用有望解决未来优质变压器油供应不足的问题。

GTL绝缘油的原料、制备工艺与传统矿物油不同,其分子组成成分也不同。文献<sup>[18]</sup>利用质谱对GTL绝缘油组成成分进行测试。GTL绝缘油和矿物油分子组成成分如表1所示。GTL绝缘油主要由饱和异构链烷烃组成,总芳烃显著低于传统矿物油,因此具备更加优良的环保性能和电气性能。

### 1.2 GTL 绝缘油分解理论

GTL绝缘油分解过程主要发生碳氢化合物的断链、脱氢和开环反应<sup>[21]</sup>。当故障能量较低或者故障持续时间较短时,GTL绝缘油主要发生烷烃分解。该阶段主要是大分子烷烃断键和脱氢,生成小

表1 GTL 绝缘油和矿物油分子组成成分

Table 1 Molecular composition of GTL insulating oils and mineral oils

组成成分	质量分数/%		
	矿物油	GTL绝缘油	
饱和烃	链烷烃	58.1	93.0
	总环烷烃	28.3	6.7
不饱和烃	总芳烃	13.6	0.3

分子烷烃和H<sub>2</sub>等。长碳链烷烃更易分解,而GTL绝缘油分子大多为16烷<sup>[8]</sup>,因此在高温或放电故障下易发生分解反应。

随着故障持续时间增长、故障程度加深,GTL绝缘油将发生进一步分解,主要为烷烃分解的产物——烯烃以及环烷烃的分解。烯烃中含有双键,稳定性好,分解温度较高。在高温下,烯烃会发生断键或脱氢反应,生成烷烃或炔烃。同时,环烷烃也会发生开环、断链和脱氢反应,生成小分子烃类气体和H<sub>2</sub>。

### 1.3 ReaxFF 反应力场原理

力场的选择是分子动力学模拟的关键。传统力场无法模拟反应中化学键的形成与断裂过程,而量子力学计算量较大,难以对分解过程进行长时间的细致描述。ReaxFF为2001年由VAN Duijn<sup>[22]</sup>提出的基于键级的反应力场,其原理为通过原子间距确定键级,进而判断化学键的成断,实现对分解反应的模拟。ReaxFF力场在分子动力学仿真领域中具有广泛的应用和验证,能够在有限条件下真实地模拟化学键的形成、断裂过程<sup>[23-25]</sup>。

若 $t_i$ 时刻原子 $a$ 、 $b$ 间距为 $r_{ab}$ ,则 $a$ 、 $b$ 间键级 $B_{ab}$ 为:

$$B_{ab} = \exp\left(p_{bo1}\left(\frac{r_{ab}}{r_0^\sigma}\right)^{p_{bo2}}\right) + \exp\left(p_{bo3}\left(\frac{r_{ab}}{r_0^\zeta}\right)^{p_{bo4}}\right) + \exp\left(p_{bo5}\left(\frac{r_{ab}}{r_0^\tau}\right)^{p_{bo6}}\right) \quad (1)$$

式中: $r_0^\sigma$ 、 $r_0^\zeta$ 、 $r_0^\tau$ 均为原子参量; $p_{bo1}$ — $p_{bo6}$ 为键参量。

基于ReaxFF反应力场理论,分子动力学模拟过程如图2所示。首先,输入分子动力学仿真模型,并设置仿真参数:温度、电场强度、仿真时间( $t_s$ )和仿真步长( $\Delta t$ )等。然后,根据当前时刻原子位置坐标,计算原子间距 $r_{ab}$ 和键级 $B_{ab}$ ,当 $B_{ab} \geq 0.3$ 时,认为化学键形成,否则,化学键断裂。最后,统计产物分布情况,重新计算与变化相关的原子间相互作用能量,并进行更新。如此迭代,直至 $t_i$ 与设置的仿真时间 $t_s$ 相等,结束循环,输出模拟结果,从而实现对分解反应过程的分子动力学模拟。

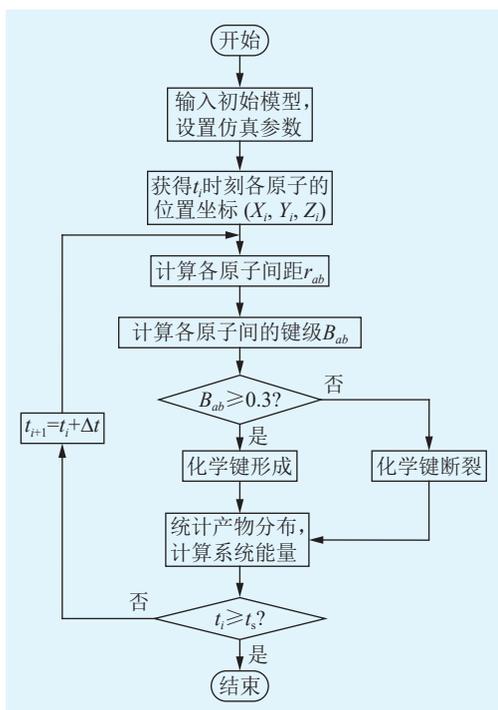


图2 反应分子动力学模拟流程  
Fig.2 Flow chart of reaction molecular dynamics simulation

## 2 GTL 绝缘油模型构建与优化

### 2.1 GTL 绝缘油分子模型的构建

由表 1 可知, GTL 绝缘油主要由饱和烷烃组成, 基本无芳烃, 其烷烃分子 100% 为异构烃, 16 烷居多<sup>[8]</sup>。因此, 文中仿真选取链烷烃 C<sub>16</sub>H<sub>34</sub> 和双环烷烃 C<sub>16</sub>H<sub>30</sub> 两种单体, 按照 93 : 7 的比例, 组成具有 100 个分子的 GTL 绝缘油分子动力学模拟体系。首先, 在仿真软件 Materials Studio(简称 MS)中构建 GTL 绝缘油的单体模型, 如图 3 所示。

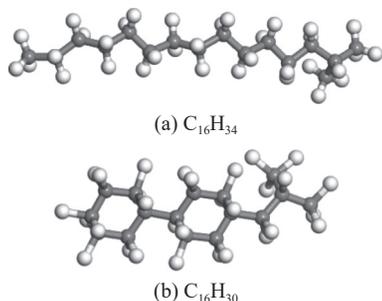


图3 GTL 绝缘油单体模型  
Fig.3 GTL insulating oil monomer model

在构建 GTL 绝缘油混合体系前, 需要通过 MS 的分子动力学模块对两种单体进行几何优化, 使其处于能量最低、最稳定的状态, 该过程中选择聚合物一致力场 (polymer consistent force field, PCFF) 作为优化力场。进一步地, 使用无定形晶胞模块构建 GTL 绝缘油混合体系。体系密度为 0.3 g/cm<sup>3</sup>, 晶

胞边长为 51 Å, 选择边界约束条件为周期性。体系中共包含 100 个分子, 链烷烃、双环烷烃个数分别为 93、7, 构建的 GTL 绝缘油混合体系模型如图 4 所示。

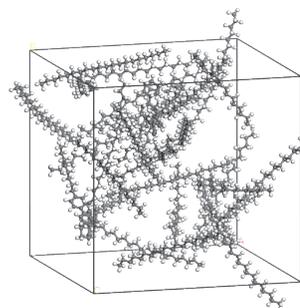


图4 GTL 绝缘油混合体系模型  
Fig.4 GTL insulating oil mixing system model

### 2.2 GTL 绝缘油分子模型的优化

在进行仿真计算之前, 为使系统达到最稳定状态, 需要对构建好的混合体系进行弛豫和平衡。弛豫与平衡仿真步骤如图 5 所示。为提高计算的准确性, 使用 Smart 算法<sup>[26]</sup>, 截断半径设置为 12.5 Å, 优化后的晶胞边长为 31.4 Å, 系统密度为 0.78 g/cm<sup>3</sup>, 如图 6 所示。

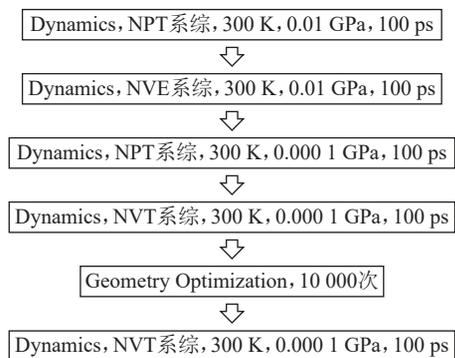


图5 内部弛豫与平衡仿真步骤  
Fig.5 Steps in the simulation of internal relaxation and equilibrium

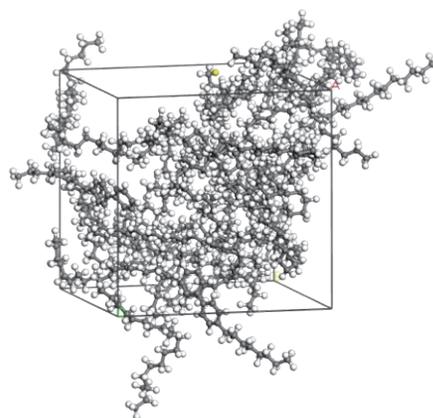


图6 优化后的 GTL 绝缘油混合体系模型  
Fig.6 Optimised GTL insulating oil mixing system model

基于以上流程,将优化后的 GTL 绝缘油混合体系模型从 MS 中导出,导入 LAMMPS 软件,通过编写脚本对矿物油模型进行分子动力学模拟。在脚本中设置仿真温度和电场强度,力场选择 ReaxFF,设置 NVT(等温等体积)系综,仿真总时长为 100 ps,步长为 0.1 fs,每 1 000 步输出一帧。

### 3 GTL 绝缘油分子动力学模拟及结果分析

#### 3.1 热应力下分子动力学模拟

提高温度可加速分解反应,而不改变产物信息<sup>[27-28]</sup>,因此设置较高的仿真温度可以减少仿真时间<sup>[29-30]</sup>。温度过低会导致分解缓慢从而使计算时间较长,而温度过高会导致部分分解路径丢失<sup>[31]</sup>,因此文中研究将 GTL 绝缘油分解的仿真温度范围设置为 2 400~3 000 K。不同温度下分解产物的统计如图 7、图 8 所示。

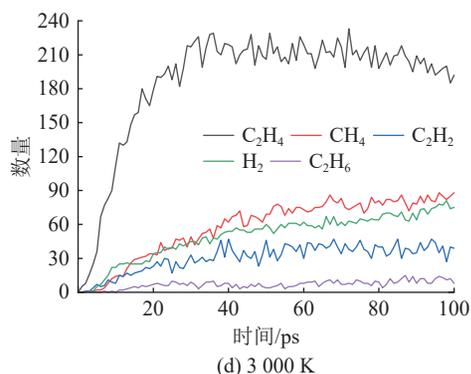
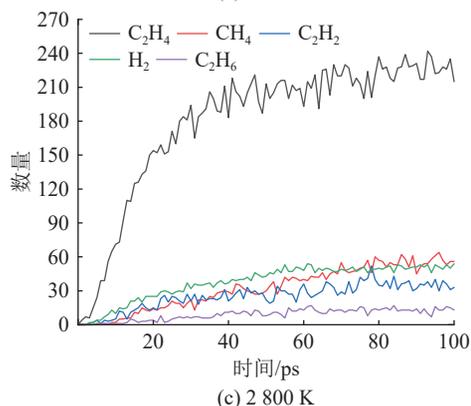
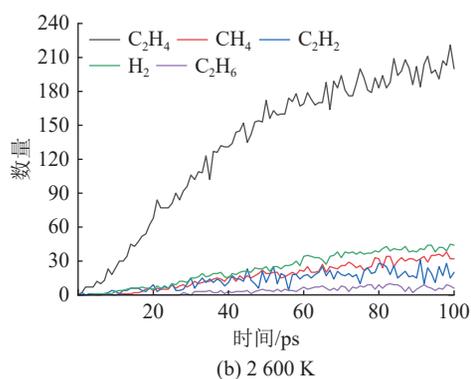
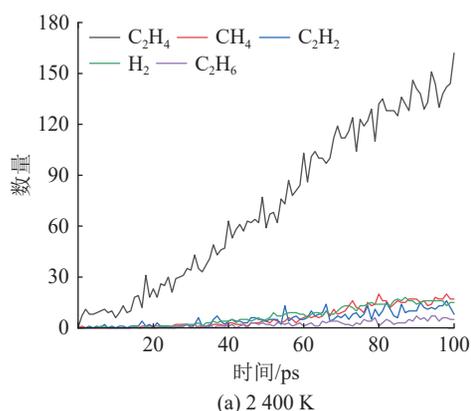


图 7 不同温度下 GTL 绝缘油热解产气情况

Fig.7 Gas production of GTL insulating oil under pyrolysis at different temperatures

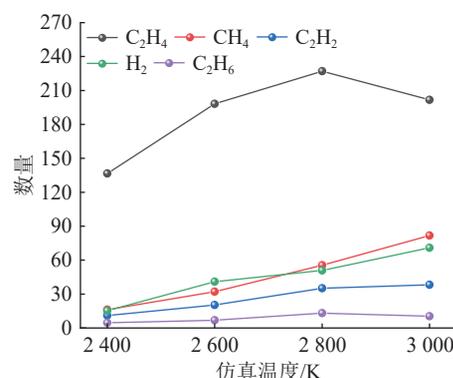


图 8 GTL 绝缘油热解特征气体生成情况

Fig.8 Characteristic gas generation of GTL insulating oil under pyrolysis

对仿真结果进行统计分析,可知 GTL 绝缘油分子动力学模拟的分解产气情况与实际基本一致。文中仅对特征气体  $H_2$ 、 $CH_4$ 、 $C_2H_2$ 、 $C_2H_4$  和  $C_2H_6$  进行研究。其中, $C_2H_4$  与  $C_2H_6$  变化趋势相似,数量均先增加后减少,拐点出现在 2 800 K。相比其他气体, $C_2H_4$  数量最多,而  $C_2H_6$  的数量较少。 $C_2H_2$  是高能气体,只在高温条件下产生,随着故障温度的提高, $C_2H_2$  数量不断增多。 $H_2$ 、 $CH_4$  作为 GTL 绝缘油分解的最终产物,随着温度的升高,其数量也不断增多。该仿真结果与 GTL 绝缘油分解理论具有一致性,符合实际情况。

#### 3.2 电应力下分子动力学模拟

变压器电故障主要有局部放电、火花放电、击穿放电 3 种故障。局部放电是引起火花放电或击穿放电的前兆,随着放电能量增加,故障程度加深。由于电场强度过低不足以使 GTL 绝缘油分解,强度过高时仿真结果完全不符合分解规律和实际情况<sup>[32]</sup>,文中在电场强度为  $5 \times 10^{-4} \text{ V/\AA}$  和  $1 \times 10^{-3} \text{ V/\AA}$  下进行仿真,同时为加快反应速率,将仿真温度设置为 2 800 K。不同电场强度下 GTL 绝缘油分解情况如图 9 所示。可以看出,随着电场强度增加,GTL

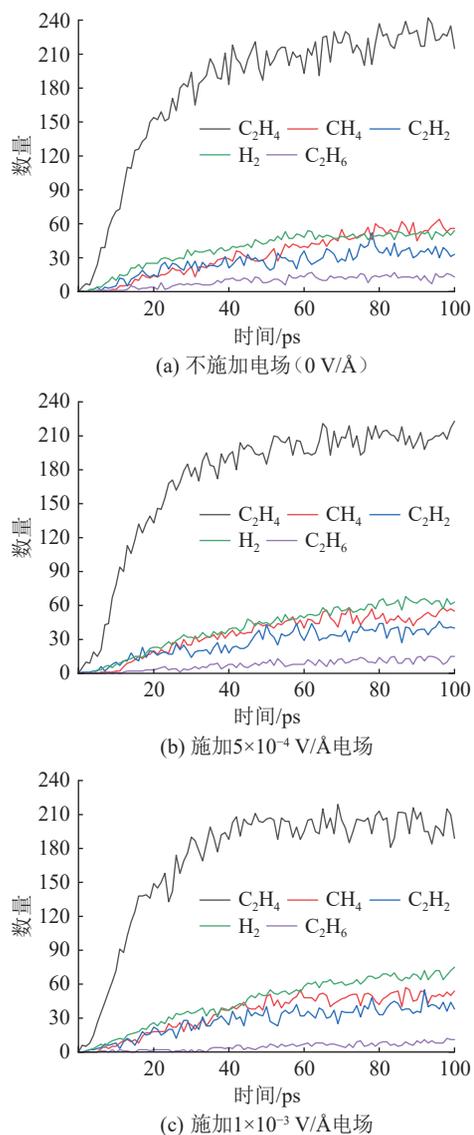


图9 不同电场条件下GTL绝缘油分解产气情况  
Fig.9 Gas production from decomposition of GTL insulating oil under different electric field conditions

绝缘油分解产生的小分子气体的数量增加,强电场的存在会加速GTL绝缘油分解产生小分子气体。

改变仿真温度,可研究在不同故障温度下电场强度对GTL绝缘油分解的影响,并得出电热联合故障下GTL绝缘油的分解规律。不同故障条件下GTL绝缘油热解特征气体生成情况见图10,横坐标1—6对应不同的故障条件,如表2所示,故障1、3、5仅为热应力作用,故障2、4、6为热应力和电应力同时作用。由图10可知,温度是影响GTL绝缘油分解的主要因素,强电场的存在会加速烷烃分解产生小分子气体。随着温度升高,电场对GTL绝缘油分解的促进作用增强。这是由于在热应力和电应力共同作用下,较高的能量促使分子链中的原子运动加剧,发生二次分解反应,产生了更多气体。

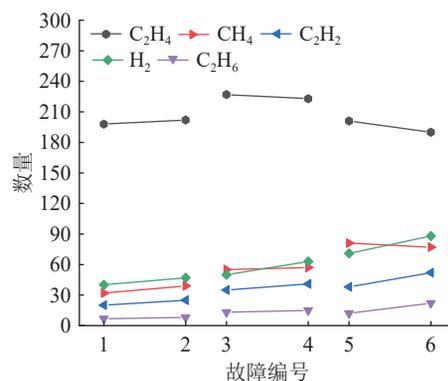


图10 不同故障条件下GTL绝缘油分解产气情况  
Fig.10 Gas production from decomposition of GTL insulating oil under different fault conditions

表2 故障编号及对应故障条件  
Table 2 Fault number and corresponding fault condition

故障编号	故障条件
1	2 600 K
2	2 600 K、 $5 \times 10^{-4}$ V/Å
3	2 800 K
4	2 800 K、 $5 \times 10^{-4}$ V/Å
5	3 000 K
6	3 000 K、 $5 \times 10^{-4}$ V/Å

### 3.3 GTL 绝缘油分子分解机理

以上述研究为基础,利用同位素标记法,对GTL绝缘油分子的分解过程进行分析。碳、氢元素分别使用橙色、紫色进行标记,通过仿真得到其分解过程中的动态轨迹文件,从中可清晰地观察到GTL绝缘油分解的动态图像,进而对其分解和产气路径进行分析。

以链烷烃为例, $C_{16}H_{34}$ 在故障条件下分解动态图像如图11所示,随着仿真时间的增加,链烷烃不断分解,生成大量小分子产物。

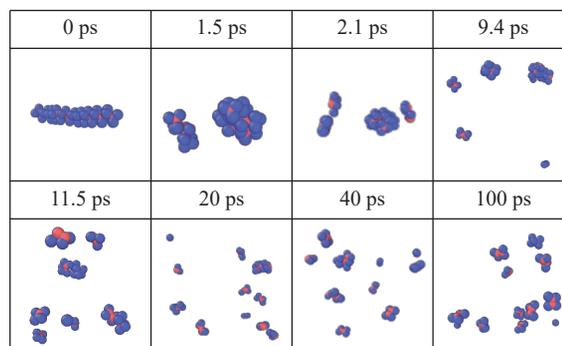


图11  $C_{16}H_{34}$ 分子分解动态图像  
Fig.11 Dynamic image of the molecular decomposition of  $C_{16}H_{34}$

图12为 $C_{16}H_{34}$ 分子分解的路径之一,方框标记产物为常见油中溶解气体。 $C_{16}H_{34}$ 在故障条件下不断断键、脱氢,生成小分子气体和自由基。其中,

$C_2H_4$  的大量生成主要与分解前期长链自由基的  $\beta$  键断裂有关。当体系温度较高时, 键能较低的  $C_2H_4$  会进一步分解脱氢, 生成键能较高的  $C_2H_2$  或  $C_2H_3\cdot$  自由基。该反应是高温热解后期  $C_2H_4$  减少的主要原因, 也是  $C_2H_2$  的主要生成路径。GTL 绝缘油脱氢反应生成大量的  $H\cdot$  自由基,  $H\cdot$  与自由基  $C_2H_5\cdot$ 、 $CH_3\cdot$  和  $H\cdot$  结合是生成  $C_2H_6$ 、 $CH_4$  和  $H_2$  等小分子气体的主要反应路径。

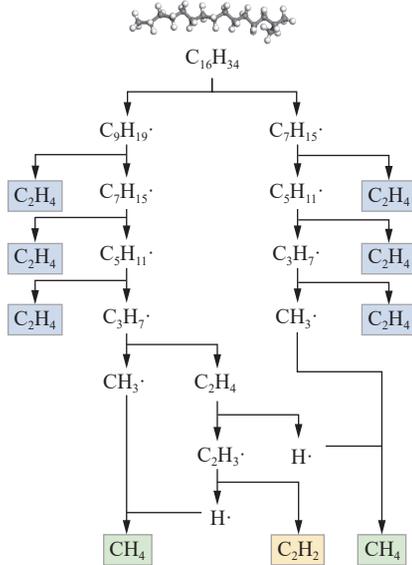


图 12  $C_{16}H_{34}$  分子分解路径

Fig.12  $C_{16}H_{34}$  molecular decomposition pathway

### 3.4 GTL 绝缘油与矿物油分解产气规律对比

为分析电热联合故障下 GTL 绝缘油与传统矿物油产气规律的差异, 按照相同步骤, 对传统矿物油进行建模和分子动力学仿真, 矿物油分子组成成分见表 1。GTL 绝缘油与传统矿物油电、热故障下的产气规律对比见图 13。

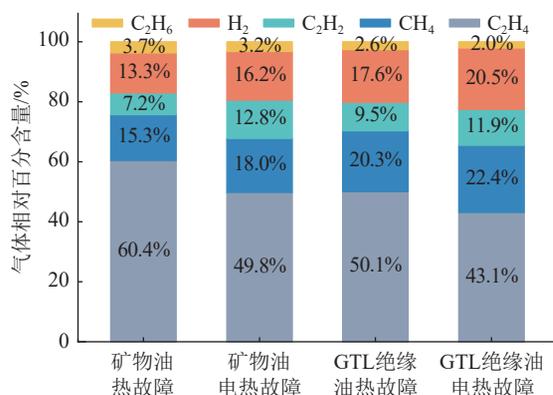


图 13 GTL 绝缘油和传统矿物油电、热故障下产气规律

Fig.13 GTL insulating oil and conventional mineral oil gas production pattern under electrical and thermal faults

由图 13 可知, 与传统矿物油相比, GTL 绝缘油分解产物中特征气体相对百分含量发生变化,  $H_2$  和  $CH_4$  相对百分含量更高。在热故障和电热故

障条件下, GTL 绝缘油分解产物中  $H_2$  和  $CH_4$  的相对百分含量均比矿物油高 5% 左右。这主要是因为 GTL 绝缘油分子的异构结构以及其几乎不含难以分解的芳烃。

## 4 结论

文中基于分子动力学仿真, 分析了电热联合故障下 GTL 绝缘油的分解特性及产气机理, 结论如下:

(1) GTL 绝缘油分解的主要产物为  $C_2H_4$ 、 $CH_4$ 、 $C_2H_2$ 、 $H_2$ 、 $C_2H_6$  等小分子气体和自由基。随着温度的升高, GTL 绝缘油的分解更加充分。

(2) 温度是影响 GTL 绝缘油分解的主要因素, 强电场的存在会加速其分解产生小分子气体。随着温度的升高, 电场对分解的促进作用增大。

(3) 文中通过同位素标记法对 GTL 绝缘油的分解过程进行跟踪, 得到产物的主要生成路径, 为 GTL 绝缘油变压器的故障监测和诊断提供参考。

(4) GTL 绝缘油与传统矿物油的特征气体相对百分含量具有一定差异。在相同故障条件下, GTL 绝缘油分解产生的  $H_2$  和  $CH_4$  占比更高, 相比传统矿物油高 5% 左右。

### 参考文献:

- [1] WANG X B, TANG C, HUANG B, et al. Review of research progress on the electrical properties and modification of mineral insulating oils used in power transformers[J]. *Energies*, 2018, 11(3): 487.
- [2] LYUTIKOVA M N, KOROBENNIKOV S M, RAO U M, et al. Mixed insulating liquids with mineral oil for high-voltage transformer applications: a review[J]. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, 2022, 29(2): 454-461.
- [3] 宋浩永, 黄青丹, 陈于晴, 等. 110 kV 环保型天然酯绝缘油变压器绕组的温度场分析[J]. *高压电器*, 2024, 60(5): 117-123. SONG Haoyong, HUANG Qingdan, CHEN Yuqing, et al. Temperature field analysis of windings of natural ester insulating oil-immersed transformer 110 kV environment friendly[J]. *High Voltage Apparatus*, 2024, 60(5): 117-123.
- [4] ALSUDANI F T, SAEED A N, ALI N S, et al. Fisher-Tropsch synthesis for conversion of methane into liquid hydrocarbons through gas-to-liquids (GTL) process: a review[J]. *Methane*, 2023, 2(1): 24-43.
- [5] 吴长或, 王栋, 胡静, 等. 天然气合成基础油发展现状及展望[J]. *现代化工*, 2014, 34(3): 5-7, 9. WU Changyu, WANG Dong, HU Jing, et al. Situation and prospect of base stocks derived from gas-to-liquids[J]. *Modern Chemical Industry*, 2014, 34(3): 5-7, 9.
- [6] Shell China. Shell launches Shell DIALA S4 ZX-I, a new premium oxidation-resistant transformer oil based on GAS-TO-

- LIQUIDS technology[EB/OL]. [2024-08-21]. [https://www.shell.com.cn/zh\\_cn/media/press-releases/2013-media-releases/shell-diala-launch-20130820.html](https://www.shell.com.cn/zh_cn/media/press-releases/2013-media-releases/shell-diala-launch-20130820.html), 2013.
- [7] 王健一, 周远翔, 程涣超, 等. 加氢异构非环烷基变压器油的最新进展与展望[J]. 中国电机工程学报, 2020, 40(16): 5373-5383.  
WANG Jianyi, ZHOU Yuanxiang, CHENG Huanchao, et al. Recent progress and prospect of hydroisomerized non-naphthenic transformer oil[J]. Proceedings of the CSEE, 2020, 40(16): 5373-5383.
- [8] 刘志华, 崔彦捷, 汲胜昌, 等. 热机联合应力对油浸纸板绝缘及机械特性影响研究[J]. 电力工程技术, 2020, 39(5): 126-132.  
LIU Zhihua, CUI Yanjie, JI Shengchang, et al. Influence of thermo-mechanical combined stress on insulation and mechanical characteristics of oil-impregnated paperboard[J]. Electric Power Engineering Technology, 2020, 39(5): 126-132.
- [9] 范慧芳, 咸日常, 刘兴华, 等. 基于能量系数的电力变压器热故障严重性评估方法[J]. 电测与仪表, 2024, 61(2): 83-88.  
FAN Huifang, XIAN Richang, LIU Xinghua, et al. Evaluation method of thermal fault severity of power transformer based on energy coefficient[J]. Electrical Measurement & Instrumentation, 2024, 61(2): 83-88.
- [10] HALSTEAD W D. A thermodynamic assessment of the formation of gaseous hydrocarbons in faulty transformers[J]. Journal of the Institute of Petroleum, 1973, 59(5): 239-241.
- [11] SHIRAI M, SHIMOJI S, ISHII T. Thermodynamic study on the thermal decomposition of insulating oil[J]. IEEE Transactions on Electrical Insulation, 1977, EI-12(4): 272-280.
- [12] 杜林, 王五静, 张彼德, 等. 基于 ReaxFF 场的矿物绝缘油热解分子动力学模拟[J]. 高电压技术, 2018, 44(2): 488-497.  
DU Lin, WANG Wujing, ZHANG Bide, et al. Molecular dynamics simulation of mineral insulating oil pyrolysis based on force field ReaxFF[J]. High Voltage Engineering, 2018, 44(2): 488-497.
- [13] 张颖. 电力变压器油纸绝缘热解过程微观机制研究[D]. 北京: 华北电力大学, 2016.  
ZHANG Ying. Research on key micro-mechanism of pyrolysis process of oil-paper insulation in power transformer[D]. Beijing: North China Electric Power University, 2016.
- [14] 刘琴, 谢雄杰, 胡伟, 等. 油绝缘典型电极放电产气特性对比分析[J]. 中国电力, 2021, 54(12): 186-194.  
LIU Qin, XIE Xiongjie, HU Wei, et al. Comparative analysis on discharge gas production characteristics of typical electrodes with oil insulation[J]. Electric Power, 2021, 54(12): 186-194.
- [15] 邢亚东, 董明, 刘阳, 等. 不同放电能量下酯类绝缘油的产气差异性分析[J]. 中国电机工程学报, 2023, 43(15): 6099-6112.  
XING Yadong, DONG Ming, LIU Yang, et al. Gas generation difference analysis of ester insulating oil under different discharge energy[J]. Proceedings of the CSEE, 2023, 43(15): 6099-6112.
- [16] 杜诗悦. 植物油变压器电热故障产气规律与诊断方法[D]. 北京: 华北电力大学, 2019.  
DU Shiyue. Gas generation characteristic and diagnosis method of electric-thermal fault in vegetable oil transformer[D]. Beijing: North China Electric Power University, 2019.
- [17] 李强, 张睿智, 范晓丹, 等. 基于特征气体和比值准则的 RAPO 植物油变压器故障诊断方法[J]. 高压电器, 2023, 59(9): 294-303.  
LI Qiang, ZHANG Ruizhi, FAN Xiaodan, et al. Fault diagnosis method of RAPO vegetable oil transformer based on characteristic gas and ratio criterion[J]. High Voltage Apparatus, 2023, 59(9): 294-303.
- [18] LU W, LIU Q, WANG Z D, et al. Lightning impulse breakdown performance of an inhibited gas-to-liquid (GTL) hydrocarbon transformer oil[C]//2014 IEEE 18th International Conference on Dielectric Liquids (ICDL). Bled, Slovenia. IEEE, 2014: 1-4.
- [19] 王健一, 李金忠, 张书琦, 等. 以天然气为原料的气制变压器油的典型性能分析[J]. 高电压技术, 2016, 42(9): 2974-2979.  
WANG Jianyi, LI Jinzhong, ZHANG Shuqi, et al. Typical properties analysis of gas-to-liquid transformer oil with natural gas as raw material[J]. High Voltage Engineering, 2016, 42(9): 2974-2979.
- [20] EILERS J, POSTHUMA S A, SIE S T. The shell middle distillate synthesis process (SMDS)[J]. Catalysis Letters, 1990, 7(1): 253-269.
- [21] 邹仁黎. 石油化工裂解原理与技术[M]. 北京: 化学工业出版社, 1981.  
ZOU Renjian. Principles and technology of petrochemical cracking [M]. Beijing, China: Chemical Industry Press, 1981.
- [22] VAN DUIN A C T, DASGUPTA S, LORANT F, et al. ReaxFF: a reactive force field for hydrocarbons[J]. Journal of Physical Chemistry A, 2001, 105(41): 9396-9409.
- [23] 连鸿松, 郑东升, 刘慧鑫, 等. 电热应力对硅油产气特性协同效应的实验研究[J]. 高压电器, 2024, 60(1): 100-107,117.  
LIAN Hongsong, ZHENG Dongsheng, LIU Huixin, et al. Experimental study on synergistic effect of the electrical-thermal stress on gas production characteristics of silicone insulating oil[J]. High Voltage Apparatus, 2024, 60(1): 100-107,117.
- [24] 刘宗杰, 王威, 付珂, 等. 基于 ReaxFF 的聚异丁烯高温裂解机理及影响因素研究[J]. 高压电器, 2024, 60(3): 170-178.  
LIU Zongjie, WANG Wei, FU Ke, et al. Study on pyrolysis mechanism and influence factor of polyisobutylene based on ReaxFF[J]. High Voltage Apparatus, 2024, 60(3): 170-178.
- [25] 高煦轩, 常曦文, 全殿杰, 等. 基于分子动力学的聚丙烯电热应力老化特性分析[J]. 电力电容器与无功补偿, 2024, 45(1): 88-94.  
GAO Xuke, CHANG Xiwen, TONG Dianjie, et al. Analysis of electrothermal stress aging characteristics of polypropylene based on molecular dynamics[J]. Power Capacitor & Reactive

- Power Compensation, 2024, 45(1): 88-94.
- [26] 张艳芳, 黄磊峰, 李伯男, 等. 纳米 SiO<sub>2</sub> 增强脲醛树脂机械性能分子模拟研究[J]. *电力工程技术*, 2020, 39(2): 146-151. ZHANG Yanfang, HUANG Leifeng, LI Bonan, et al. Molecular simulation study on mechanical properties of poly (urea-formaldehyde) reinforced by nano-SiO<sub>2</sub>[J]. *Electric Power Engineering Technology*, 2020, 39(2): 146-151.
- [27] SO/RENSEN M R, VOTER A F. Temperature-accelerated dynamics for simulation of infrequent events[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2000, 112(21): 9599-9606.
- [28] 李云鹏, 王靖瑞, 李庆民, 等. 不同含水率下电—热耦合应力对油纸绝缘界面小分子气体扩散特性的影响机制[J]. *高压电器*, 2023, 59(8): 12-21. LI Yunpeng, WANG Jingrui, LI Qingmin, et al. Influence mechanism of electro-thermal coupling stress on diffusion characteristics of small molecule gas of oil paper insulating interface under different water content[J]. *High Voltage Apparatus*, 2023, 59(8): 12-21.
- [29] 凡朋, 周登波, 严海健, 等. 纳米二氧化硅掺杂低密度聚乙烯微观特性的分子模拟[J]. *高电压技术*, 2017, 43(9): 2875-2880. FAN Peng, ZHOU Dengbo, YAN Haijian, et al. Microcosmic properties of LDPE/SiO<sub>2</sub> nano-composite by molecular simulation[J]. *High Voltage Engineering*, 2017, 43(9): 2875-2880.
- [30] CASTRO-MARCANO F, KAMAT A M, RUSSO M F, et al. Combustion of an Illinois No.6 coal char simulated using an atomistic char representation and the ReaxFF reactive force field[J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(3): 1272-1285.
- [31] 鲁旭, 韩帅, 李庆民, 等. 聚酰亚胺高温裂解机理的反应分子动力学模拟[J]. *电工技术学报*, 2016, 31(12): 14-23. LU Xu, HAN Shuai, LI Qingmin, et al. Reactive molecular dynamics simulation of polyimide pyrolysis mechanism at high temperature[J]. *Transactions of China Electrotechnical Society*, 2016, 31(12): 14-23.
- [32] 辛喆, 赵彤, 韩智云, 等. GIL 中聚酯薄膜在电热作用下裂解机理的分子动力学模拟[J]. *电工技术学报*, 2018, 33(22): 5196-5205. XIN Zhe, ZHAO Tong, HAN Zhiyun, et al. Molecular dynamics simulation of the pyrolysis mechanism of polyester films in gas insulation lines under electrothermal stresses[J]. *Transactions of China Electrotechnical Society*, 2018, 33(22): 5196-5205.

#### 作者简介:



陈贝贝

陈贝贝(2000), 女, 硕士在读, 研究方向为电力变压器状态监测与故障诊断(E-mail: 2918340713@qq.com);

李晓涵(1994), 男, 博士, 工程师, 从事电力设备先进状态监测及故障诊断工作;

刘金凤(2000), 女, 硕士在读, 研究方向为电力变压器状态监测与故障诊断。

## The decomposition characteristics of gas to liquid insulating oil under electric-thermal fault conditions

CHEN Beibei<sup>1</sup>, LI Xiaohan<sup>2</sup>, LIU Jinfeng<sup>1</sup>, JIANG Jun<sup>1</sup>

(1. Nanjing University of Aeronautics and Astronautics (Jiangsu Key Laboratory of New Energy Generation and Power Conversion), Nanjing 211106, China; 2. State Grid Jiangsu Electric Power Co., Ltd.

Research Institute, Nanjing 211103, China)

**Abstract:** Gas to liquid (GTL) synthetic oil, produced from natural gas, exhibits excellent environmental and electrical properties, making it suitable for use as a new type of transformer insulating oil. In order to better understand the gas generation characteristics of GTL insulating oil, this study utilizes molecular dynamics simulation to construct a microscopic system of GTL insulating oil and simulate its decomposition process under electro-thermal combined fault conditions. Through analysis of the simulation results, changes in the types and quantities of decomposition products of GTL insulating oil are examined, and the gas generation pathways and mechanisms are determined using isotope labeling. The simulation results indicate that the final products of GTL insulating oil decomposition include small-molecular gases such as C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, and free radicals. With increasing fault temperatures, the decomposition of GTL insulating oil becomes more complete. Under the electro-thermal faults, temperature is identified as the dominant factor influencing decomposition, while the presence of a strong electric field further accelerates the process. Under the same fault conditions, the proportion of H<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> generated from GTL oil is about 5% higher than that from conventional mineral insulating oil. This study's findings can provide theoretical support and the reference for the fault diagnosis and condition assessment of transformers using GTL insulating oil.

**Keywords:** gas to liquid (GTL); molecular dynamics simulation; ReaxFF force field; electro-thermal fault; dissolved gas in oil; decomposition properties

(编辑 陆海霞)