中性粒子动力学模型对霍尔推力器等离子体放电粒子网格模拟的影响

F. Faraji *†, M. Reza*, A. Knoll*

*等离子体推进实验室，航空系，伦敦帝国理工学院，展览路，伦敦，SW7 2AZ，英国

†通讯作者（f.faraji20@imperial.ac.uk）

摘要：霍尔推力器中中性原子的动力学会影响多个等离子体过程，从电离到电子迁移率。在霍尔推力器粒子网格（PIC）建模中，中性粒子通常采用与等离子体粒子种类相似的动力学方法处理，并使用直接模拟蒙特卡罗（DSMC）算法解析中性粒子之间以及中性粒子与离子之间的相互作用。然而，DSMC方法的计算资源需求较高。因此，在不涉及径向坐标、因而无法解析中性粒子径向膨胀的模拟中，也有人尝试将中性粒子建模为一维流体。本文对霍尔推力器放电的PIC模拟对所采用中性粒子动力学模型的敏感性进行了广泛研究。我们采用多种中性粒子的流体和动力学模型开展了一维轴向 PIC 模拟，并采用不同的中性粒子流体描述开展了自洽准二维轴向—方位向模拟。结果表明，无论是一维还是二维构型，模拟预测结果都高度依赖于中性粒子模型；对中性粒子采用不同的处理方式会改变放电的时空演化。此外，我们观察到，考虑离子-中性粒子碰撞会导致中性粒子温度发生显著变化，因此还需要在其中性粒子流体方程组中加入能量方程。最后，自洽轴向-方位向模拟表明，仅基于连续性守恒方程的中性粒子模型并不适用，并会导致物理上出乎意料的高频全局放电振荡。

第 1 节：引言

霍尔推力器是一种静电式空间等离子体推进装置，通过电离中性推进剂（通常为氙或氪）并加速生成的等离子体离子来产生推力。霍尔推力器中的等离子体处于电场与磁场交叉的构型中。外加磁场通常近似呈径向分布，其强度足以使等离子体电子磁化，并在霍尔推力器放电通道周围沿方位方向发生 $E \times B$ 漂移运动；而离子几乎未磁化，仅受主要沿轴向、自持的电场作用。霍尔推力器的高性能运行一方面依赖于对持续注入通道的中性推进剂进行高效电离的能力，另一方面则依赖于有效抑制电子的横磁场运动；后者进而决定加速轴向电场的强度。

在这方面，中性原子的动力学具有相对较低的时间演化频率，并沿推力器通道轴向呈现较大的空间梯度，因此对霍尔器件运行的性能和稳定性起着重要作用。事实上，中性粒子会影响霍尔推力器中的电离过程和加速过程。就前者而言，人们认为，中性粒子因电离而周期性耗减，并因推进剂注入而得到补充，这会触发所谓的“呼吸模”振荡 [1][2]。这种特征振荡模态是中性粒子对霍尔推力器中等离子体整体响应最显著的影响之一。此外，研究表明，中性粒子的轴向漂移速度决定了粒子在通道内的驻留时间，并会影响电离过程及等离子体放电的整体稳定性 [3]。

关于加速过程，中性原子与等离子体电子之间的碰撞相互作用，为电子沿轴向跨磁场输运提供了经典机制，从而在一定程度上抵消磁场对电子轴向运动的阻碍。更重要的是，研究表明，电子-中性粒子碰撞在放电演化的每个周期内，能够调节高频微观方位角不稳定性的激发 [4]。研究还表明，这些高频不稳定性会引发显著的跨磁场电子输运 [2][5]，，进而在一定程度上影响加速过程的效率。

因此，对中性粒子动力学进行适当建模，对于通过仿真代码准确预测霍尔推力器中的等离子体放电行为十分重要。在这方面，通常有两种方法

本文已投稿至《应用物理学杂志》。发表后可在 链接 中找到。

用于等离子体模拟[6]：（1）拉格朗日（动力学）方法，其中中性粒子是分布函数的样本或宏粒子，通过对每个宏粒子的运动方程进行积分来解析其演化；（2）流体方法，其中将中性原子视为单能流。在前一种处理中，中性粒子之间以及中性原子与等离子体离子种类之间的碰撞相互作用，按照直接模拟蒙特卡罗碰撞算法[7][8]进行建模。中性粒子的动力学直接模拟蒙特卡洛处理已用于动理学粒子网格（PIC）[9][10] 以及混合流体/PIC[11][12] 模拟。中性粒子的流体建模已应用于不同的等离子体模拟方法，从全流体方法到PIC[13]-[15]。特别是在PIC模拟中，提出采用中性粒子的流体描述，以降低这类等离子体模型的计算成本 [15]。对于不涉及径向坐标、主要用于研究轴向动力学以及等离子体放电在较长模拟时间内行为的模拟，这种方法尤其有帮助。需要指出的是，用于处理动力学描述中性粒子碰撞的DMSC算法本身计算负担较重，因为它涉及粒子排序，并且需要执行大量浮点运算。因此，该算法最适合用于详细研究初始放电瞬态，即模拟时间为几十微秒量级的阶段；在这一阶段，中性粒子的空间分布预计会发挥关键作用。

在粒子网格模拟中将中性粒子描述为流体时，典型做法是仅求解连续性守恒方程，以确定中性粒子密度的时间演化 [4][16]。大多数全流体模拟以及将中性粒子视为流体的混合代码也通常采用这种做法 [6]。最近，有人提出在霍尔推力器的二维轴向-方位向粒子网格模拟中，同时求解中性粒子流的连续性方程和动量守恒方程，以捕捉中性粒子密度和速度的变化 [15][17]。

尽管如此，迄今为止，关于采用不同的中性粒子流体/动力学模型会如何影响 PIC模拟预测结果的研究，仅有一项近期发表的工作。具体而言，文献 [18], 的作者研究了中性粒子模型对轴向-径向粒子网格模拟的影响，并指出放电动力学会受到中性粒子模型的显著影响。本文的研究问题与这项近期研究相辅相成，且采用了更为全面的方法，这凸显了本研究的及时性和重要意义。尤其如此，因为文献 [18] 中的研究采用了相当简单的中性粒子模型，并且为了加快计算而对模拟中的物理常数进行了缩放。此外，尽管离子-中性粒子碰撞会显著影响中性粒子动力学，尤其是在霍尔推力器的近羽流区 [19], , 但 PIC代码中的中性粒子流体模型尚未纳入这些碰撞。因此，离子-中性粒子动量传递对流体描述下中性粒子演化的影响尚不清楚。最后，近期研究表明，霍尔推力器阳极处的离子复合会影响呼吸模振荡的起始及其行为 [20][21]。然而，在 PIC模拟中采用不同中性原子流体模型时，这一现象的重要性也尚未得到研究。

受上述研究启发，我们采用不同的中性粒子流体模型，对代表SPT100霍尔推力器的一种装置进行了轴向一维模拟和降阶准二维（Q2D）轴向-方位向PIC模拟。轴向一维模拟还采用了中性原子的动力学直接模拟蒙特卡罗描述。本文详细介绍了模拟中中性粒子动力学模型和流体模型的实现。本文的数值研究使用了帝国等离子体推进实验室（IPPL）开发的两种粒子模拟代码。对于一维模拟，我们使用IPPL-1D代码 [22], ；而准二维模拟则使用新型IPPL-Q2D代码 [23]。IPPL-1D通过了广为人知的CCP基准算例 [22]的验证。此外，IPPL-Q2D在轴向-方位向构型和径向-方位角构型下的深入验证结果，分别见参考文献 [23] 和 [24]。

本文的主要目标如下：（1）研究动力学模拟结果对中性粒子组分演化模型的敏感性；（2）探究在无离子-中性粒子碰撞和存在离子-中性粒子碰撞的情况下，对于轴向模拟和轴向-方位向模拟中等离子体与中性粒子的预测动力学而言，中性粒子的流体描述在多大程度上能够代表其动力学直接模拟蒙特卡罗处理；（3）评估阳极离子复合对采用各种中性粒子流体模型进行模拟所得预测结果的影响；（4）评估中性粒子流体模型对电子迁移率自洽求解模拟结果的影响。此外，还在一维构型下，采用基于连续性守恒方程的中性粒子流体模型，开展了辅助参数研究，以了解电子-壁面碰撞模型对模拟的影响。

第 2 节：模拟设置及条件概述

模拟设置总体上基于 LANDMARK 基准测试项目中定义的测试案例[25]，该案例用于验证一维轴向流体代码和混合流体/PIC 代码。因此，本文所述模拟将 LANDMARK 的一维基准案例扩展至动力学一维轴向模拟以及准二维轴向-方位向模拟。

准二维模拟的计算域为笛卡尔 $x-y$ 平面，代表 SPT-100 霍尔推力器的轴向-方位向截面。x 沿轴向，y 沿方位角方向。z坐标表示径向，而本文中的所有模拟均未对该方向进行自洽求解。计算域在 x方向长 5 cm，在 y方向长 1 cm。推力器的放电通道从 $x=0$ 延伸至 x = 2.5 cm。

对于一维轴向模拟，仅对 x坐标进行求解。因此，为了纳入方位角不稳定性对增强电子跨场输运的影响，采用了与参考 LANDMARK 案例 [25], 中所用模型类似的一般形式为 $\nu_{Bohm}=\alpha\omega_{ce}$ 的 Bohm 型输运模型。在该输运模型关系式中，ν_{Bohm} 为玻姆碰撞频率，ω_{ce} 为电子回旋频率，α 为调节参数。放电通道内及近羽流区的 α 值按 LANDMARK 案例的建议分别设为 0.1 和 1.0。这组 α 值产生的玻姆碰撞频率分布如图 1(a) 所示。

图 1(a) 还展示了用于一维轴向模拟和准二维轴向-方位向模拟的磁场强度（B）轴向分布。与 LANDMARK 工况一致，磁场呈双高斯分布，最大强度为 15 mT，出现在通道出口平面处（x = 2.5 cm）[25]。

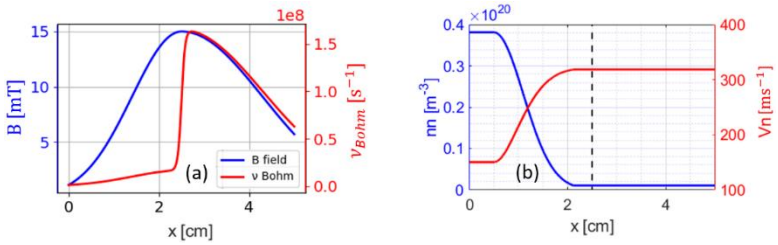


图 1：若干模拟参数的轴向分布：（a）一维轴向模拟中的磁场强度（B）和 Bohm 碰撞频率（ν_{Bohm}）；（b）中性粒子的初始数密度和速度

初始时，离子和电子均匀加载在整个计算域内，密度为 $5\times10^{17}\ m^{-3}$。粒子按麦克斯韦分布抽样，离子温度为 0.5 eV，电子温度为 10 eV。中性粒子根据图 1(b) 所示的数密度和速度分布加载。对于采用动力学方式模拟中性粒子的情形，中性粒子按初始加载温度为 640 K 的麦克斯韦分布抽样。

关于等离子体电势的轴向边界条件，在计算域的阳极侧 ($x=0$) 施加 300 V 的狄利克雷边界条件，而在阴极侧 ($x=5\ cm$)，电势设为 0 V。对于准二维模拟，在计算域的方位角端部施加周期性边界条件。一维轴向模拟使用托马斯三对角算法求解电势，而准二维模拟中的等离子体电势则由降维泊松求解器（RDPS）[23] 求解；该求解器采用基于 LU 分解的直接矩阵求解算法，求解降阶泊松方程组。

粒子边界条件的实现方式如下：沿轴向，离开计算域并到达阳极的电子将从模拟中移除。除第 4.3 节中的模拟外，所有案例均考虑到达阳极的离子发生复合。对于采用动力学-直接模拟蒙特卡罗方法处理中性粒子的一维轴向模拟，到达阳极表面的中性粒子会各向同性反射回计算域。此外，复合中性粒子从其初始加载温度对应的麦克斯韦分布中抽样。不过，在采用中性粒子流体描述的模拟案例中，复合中性粒子的通量会计入阳极粒子流率。离开计算域并从阴极侧逸出的离子将从模拟中移除。

为维持放电，根据阴极处的准中性条件，从阴极边界向计算域内注入电子 [15]。注入的电子按照初始电子加载温度（即 10 eV）从半麦克斯韦分布中采样。

对于准二维模拟，采用粒子周期性边界条件；因此，沿方位方向从一侧离开计算域的粒子会从另一侧重新进入计算域。

关于粒子之间的相互作用，我们考虑了电子-中性粒子碰撞和离子-中性粒子碰撞。在采用动力学直接模拟蒙特卡洛方法处理中性粒子组分的模拟中，还将中性粒子间相互作用明确建模为变硬球碰撞（第4.2节）。

电子与中性粒子之间的碰撞按照蒙特卡罗碰撞（MCC）算法 [26]进行处理。为与参考 LANDMARK 算例保持一致，仅考虑电离和弹性动量交换碰撞，所用的相应截面见参考文献 [25]。每次碰撞事件中，电子均发生各向同性反射。此外，发生电离事件时，也按照参考文献 [25]中所述的方法考虑入射电子的能量损失。

对于离子-中性粒子碰撞，我们考虑了弹性动量交换碰撞和电荷交换碰撞。当中性粒子采用流体模型时，使用MCC算法处理离子与中性粒子之间的碰撞。而当中性粒子作为粒子处理时，则按照直接模拟蒙特卡罗（DSMC）算法处理离子-中性粒子碰撞。关于所进行模拟中离子-中性粒子碰撞的处理方式（包括所用碰撞截面）的更多细节，见第3.2节。

	值 [单位]	
参数	一维轴向	准二维轴向-方位向
计算参数		
计算域的轴向长度（L_x）	5 [厘米]	5 [厘米]
计算域的方位向长度（L_y）	---	1 [厘米]
计算域的实际横截面积（A_{real}）	40.035 [cm^2]	40.035 [cm^2]
轴向网格尺寸（Δx）	20 [μ米]	16.6 [μm]
周向网格尺寸（Δy）	---	16.6 [μm]
轴向网格数（N_i）	2500	3000
周向网格数（N_j）	---	600
时间步长（ts）	2.5×10^{-12} [s]	2×10^{-12} [s]
轴向网格的每个网格单元的初始宏粒子数（N_{ppc}）	50	50
总模拟时间	250 [μs]	200 [μs]
物理参数		
初始等离子体数密度（$n_{i,0}$）	5×10^{17} [米$^{-3}$]	5×10^{17} [米$^{-3}$]
初始电子温度（$T_{e,0}$）	10 [eV]	10 [eV]
初始离子温度（T_i,0）	0.5 [eV]	0.5 [eV]
中性粒子温度（T_n）	640 [K]	640 [K]
阳极质量流率（$AMFR$）	5 [mgs^{-1}]	5 [mgs^{-1}]
阳极电压（V_a）	300 [V]	300 [V]
人为设定的壁面碰撞频率（ν_{wall}）	10^7 [s^{-1}]	5×10^6 [s^{-1}]

表1：一维轴向和准二维轴向-方位向模拟的计算参数与物理参数汇总

最后，除第4.4节报告结果的模拟外，所有模拟均采用经验方法处理电子-壁面碰撞及相关能量损失，具体遵循参考文献[27] 中阐述的方法，该方法也用于 LANDMARK 模拟案例。在蒙特卡罗碰撞模块中，电子-壁面碰撞被实现为一种虚拟碰撞事件，一维轴向

模拟的特定频率为$\nu_{wall} = 5 \times 10^6\ s^{-1}$，准二维模拟的特定频率为$\nu_{wall} = 5 \times 10^6\ s^{-1}$。轴向-方位向模拟的壁面碰撞频率为何是一维轴向模拟的一半，将在第4.5节中说明。若发生电子-壁面碰撞事件，粒子会发生各向同性反射并损失部分能量，该能量损失根据以下关系计算

$$\mathcal{W} = \epsilon \exp\left(-\frac{\mathcal{U}}{\epsilon}\right), \quad \text{(Eq. 1)}$$

其中，ϵ 是以 eV 为单位的电子动能，$\mathcal{U}$ 是阈值电子能量，设为 20 eV，以与 LANDMARK 案例描述 [25]保持一致。

在上述模拟设置说明之后，表1总结了本研究模拟所采用的主要计算参数和物理参数。作为参考，需要指出的是，根据我们对物理参数的选择，所进行的模拟对应于 LANDMARK 针对流体/混合代码的三个模拟案例中的案例1（测试案例3）[25]。

第3节：中性粒子流体和动力学模型的描述

本节详细介绍我们在模拟中用于解析中性粒子动力学的模型。下一节将给出中性粒子的一维流体方程组；在第3.2节中，我们将讨论 DSMC 模块的实现，该模块用于采用中性粒子动力学直接模拟蒙特卡洛方法处理的模拟中，对中性粒子-中性粒子碰撞和离子-中性粒子碰撞进行建模。

3.1. 中性粒子**的**流体模型

霍尔推力器中的中性粒子可近似为绝热无黏流。因此，假设中性粒子特性的变化主要沿轴向，则其时空演化可通过以下形式的一维欧拉方程组描述：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} = S_1, \quad \text{(Eq. 2)}$$

$$\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2)}{\partial x} = -\frac{\partial P}{\partial x} + S_2, \quad \text{(Eq. 3)}$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u E)}{\partial x} = -\frac{\partial P u}{\partial x} + S_3. \quad \text{(Eq. 4)}$$

在上述方程中，ρ 为中性粒子密度，u 为轴向漂移速度，P 为压力，$E = e + \frac{1}{2}u^2$ 为比总能，e 为比内能，$e = \frac{n k_B T}{\rho\ \gamma - 1}$()。在$e$的关系式中，$n$ 为数密度，k_B 为玻尔兹曼常数，T 为中性粒子温度，γ 为比热比。利用理想气体关系$P = n k_B T$，比内能可表示为$e = \frac{P}{\rho}$ $(\gamma - 1)$。

在方程2至4中，S_1、S_2和S_3 分别为连续性方程、动量方程和能量方程的源项，我们稍后将对其进行定义。为了对方程2至4给出的方程组进行数值求解，我们将其写成一般的守恒形式：

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma(U)}{\partial x} = S(U), \quad \text{(Eq. 5)}$$

采用离散形式

$$U_i^{t+1} = U_i^t - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\Gamma_{i+\frac{1}{2}} - \Gamma_{i-\frac{1}{2}}\right) + S\Delta t. \quad \text{(Eq. 6)}$$

在公式 6 中，U 是守恒量的状态向量，$\Gamma(U)$是相应通量的向量，而$S(U)$是源项的向量。这些向量定义如下：

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \Gamma = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho u E + P u \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} -S_i \\ -u S_i \\ -u^2 S_i \end{pmatrix}. \quad \text{(Eq. 7)}$$

在方程（公式 6）的离散形式中，U_i^t 是在时间t的状态向量值，$\Gamma_{i-\frac{1}{2}}$ 和$\Gamma_{i+\frac{1}{2}}$ 分别是第i个单元左右边界处的通量向量，Δt 是时间步长，Δx 是单元尺寸。此外，公式 7 中的S_i 是定义为$\rho\nu_{ion}$的电离源项，其中 ν_{ion} 是电离频率。需要指出的是，电离导致的中性粒子流能量变化被假定为可忽略不计，因此在本文的模拟中将其忽略。

假设中性粒子为等温流，可以简化上述一维欧拉方程组；这是霍尔推力器建模中常用的假设 [6][15]。该假设意味着欧拉方程组中不再需要能量方程，可用状态方程 $P = \frac{\rho}{M} k_B T$ 替代，其中 M 为原子质量。

由方程 6 可知，时间推进采用了一阶欧拉格式。不过，在将中性粒子流体模型与 Sod 激波管问题进行基准测试时（见附录 A.1 节），我们也采用三阶龙格-库塔格式进行时间推进并开展了模拟，所得结果与采用一阶欧拉格式时相同。为求解空间离散后的方程组，我们采用了包含 5 个网格点的加权本质无振荡格式（即五阶加权本质无振荡格式）。计算单元间通量时，我们使用了 HLLC 黎曼求解器 [28]。这些格式所用的算法均按照参考文献 [29] 中的描述实现。我们还在一个简化的霍尔推力器问题中验证了中性粒子流体模型，具体如附录 A.2 节所述。

中性粒子密度和速度的初始分布如图 1(b) 所示。此外，假设中性粒子温度均匀，(T_n) 为 640 K。本文采用的中性粒子流体模型纯粹为一维轴向模型，并未尝试以临时方式将中性粒子-壁面碰撞的影响纳入模型，这与参考文献 [30] 中采用的方法类似。将此类项加入模型所产生的影响留待未来研究。

关于边界条件，在计算域的阴极侧，由于阴极边界处的中性粒子流为超音速，因此采用式 8 所示的诺伊曼边界条件是合理的。

$$\left.\frac{\partial U}{\partial x}\right|_{x=L_x} = \frac{U_{N_i} - U_{N_i-1}}{\Delta x} = 0 \Longrightarrow U_{N_i} = U_{N_i-1}. \tag{Eq. 8}$$

在计算域的阳极边界处，向计算域注入恒定的中性粒子质量流率 $(\dot{m}_a)$，以及额外的可变质量流率 $(\dot{m}_r)$，后者对应于在阳极表面复合的离子通量。因此，按照参考文献 [15]，提出的方法，在时刻 $t+1$，阳极边界处（即第一个计算网格单元）的流动特性可写为

$$u_1^{t+1} = u_1^t + \Delta u\,, \tag{Eq. 9}$$

$$\rho_1^{t+1} = \frac{\dot{m}_a + \dot{m}_a^t}{u_1^{t+1} A}, \tag{Eq. 10}$$

$$P_1^{t+1} = \frac{\rho_1^{t+1}}{M} k_B T_{n0}\,. \tag{Eq. 11}$$

在公式 9 中，Δu 的定义与公式 12 相同，使用计算域中第一个（下标 1）和第二个（下标 2）单元的流动特性

$$\Delta u = \frac{u_1^2 (u_1 - C_{s1})[P_2 - P_1 - \rho_1 C_{s1}(u_2 - u_1)]}{\left(\frac{\dot{m}}{A} K_B N_A T_{n0} - \rho_1 C_{s1}\right)\left(\frac{\Delta x}{\Delta t} - (u_1 - C_{s1})\right)}. \tag{Eq. 12}$$

在上述关系式中，A 表示横截面积，N_A 表示阿伏伽德罗常数，C_{s1} 表示单元 1 中的声速，其定义为$\sqrt{\frac{\gamma P_1}{\rho_1}}$，其中$\gamma$ 为比热比。

在本研究中，我们采用了上述中性粒子流体模型的几种变体进行了模拟。在最简单的情况下，我们假设中性粒子的速度分布在整个模拟过程中保持不变，因此仅求解连续性方程，以获得中性粒子密度随时间的变化；这种变化源于电离导致的中性粒子耗减，以及气体注入和阳极表面离子复合所导致的中性粒子补充。本文将该模型称为“仅连续性方程”模型。

复杂程度提高一个层级后，我们采用的第二种中性粒子流体模型是一维欧拉方程组的简化版本，该模型考虑了等温中性粒子的密度和速度分布随时间的变化。下文将该模型称为“一维欧拉方程”模型。

最后，本文所考虑的最复杂中性粒子流体描述求解了式2–4所表述的完整一维欧拉方程组，并进一步考虑了离子通过离子-中性粒子碰撞传递给中性粒子的轴向动量。文中将该模型称为“完整一维欧拉方程组 + 离子动量传递”。在考虑离子-中性粒子动量传递时为何需要完整欧拉方程组，将在第4.1节中阐明；该节还展示了存在离子-中性粒子碰撞时，采用等温连续性方程与动量方程中性粒子流体模型所得的模拟结果，并将其称为“一维欧拉方程组+ 离子动量传递”。值得注意的是，文献近期提出了中性粒子“一维欧拉方程组+ 离子动量传递”模型 [15]。模型通过在式3右侧增加另一源项（S_m），来引入离子-中性粒子碰撞对中性原子动量的影响。离子-中性粒子碰撞所伴随的能量传递也作为源项以uS_m的形式纳入式4。

在涉及离子-中性粒子碰撞的情况下，通过蒙特卡罗碰撞方法对其进行模拟。其中考虑了离子-中性粒子动量交换（MEX）碰撞和电荷交换（CEX）碰撞。这些碰撞的截面绘于图 2 中。动量源项 S_m 可以近似为 $-\rho_i(v_i - u)\nu_{in}$，其中 v_i 是离子的轴向漂移速度，ν_{in} 是总离子-中性粒子碰撞频率；也可以通过计算离子群体在碰撞前后的总轴向动量之差来显式求得。本文采用后者。

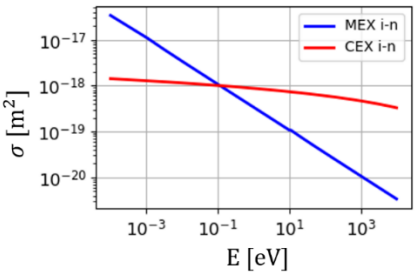


图 2：用于解析离子-中性粒子相互作用的模拟中的离子-中性粒子碰撞截面。数据来源于参考文献 [25]。

最后需要指出的是，与上述不包含能量方程的其他中性粒子流体模型相比，式 2-4 给出的完整一维欧拉方程组在数值上稳定性较差。因此，为了从完整欧拉方程组中获得稳定解，采用了更严格的 CFL（Courant–Friedrichs–Lewy）条件。此外，该方程组对能量方程中 S_m 源项的噪声非常敏感。因此，对于采用“完整一维欧拉 + 离子动量传递”中性粒子流体模型的一维轴向和准二维轴向-方位向模拟，在将相应数组传递给中性粒子动力学函数之前，对 S_m 源项应用了窗口大小为 100 的移动平均滤波器。

3.2. 采用直接模拟蒙特卡罗碰撞的中性粒子动力学模型

在以动力学方式对中性粒子动力学进行建模的模拟中，即采用与处理等离子体粒子种类相同的方式处理它们时，引入了直接模拟蒙特卡罗（DSMC）模块，用于模拟涉及重粒子的碰撞。该模块考虑了三种碰撞类型，包括中性粒子之间的弹性碰撞（n-n），以及离子与中性粒子之间的各向同性动量交换（MEX i-n）碰撞和电荷交换（CEX i-n）碰撞。中性粒子之间动量交换碰撞的截面根据 Bird 的可变硬球（VHS）模型获得 [31]

$$\sigma = \pi \left(d_{ref} \left(\frac{v_{r,ref}}{v_r} \right)^{\gamma} \right)^2, \qquad \text{(Eq. 13)}$$

其中，d_{ref}、$v_{r,\,ref}$和γ 的值依次为5.74×10^{-10} m、209.8 m/s和-0.7。v_r 是碰撞粒子对之间的相对速度。MEX和电荷交换碰撞的截面如图2所示。

DSMC算法首先根据粒子所在的单元对粒子进行排序。在每个单元中，按照“无时间计数器”（NTC）方法计算每种碰撞类型的最大碰撞事件数（或碰撞对数（n_p））[32]

$$n_p = N_1\, N_2\, W (v_r \sigma)_{max} \frac{\Delta t}{V_{cell}}. \qquad \text{(Eq. 14)}$$

在上述方程中，N_1 和N_2 分别是单元内各物种的宏粒子数，V_{cell} 是网格单元体积，W 是宏粒子权重较大的物种的宏粒子权重；在本文的模拟中，该物种对应中性粒子群。$(v_r\sigma)_{max}$ 以估算值初始化，并在模拟过程中遇到大于该估算值的数值时进行更新。如果碰撞发生在同一物种的两个粒子之间，则必须将公式（14）中的碰撞对数量减半。因此，每个单元内的碰撞对总数为

$$n_p = \left(\frac{1}{2} N_n^2\, W_n (v_r\sigma)_{max,n} + N_n N_i\, W_n (v_r\sigma)_{max,MEX} + N_n N_i\, W_n (v_r\sigma)_{max,CEX}\right) \frac{\Delta t}{V_{cell}}, \qquad \text{(Eq. 15)}$$

其中，索引“n”和“i”分别表示中性粒子和离子物种。为在每个单元中选取一对碰撞粒子，随机选取两个数 $p_1 \in [1, N_n]$ 和 $p_2 \in [1, N_n + 2N_i]$，其中 N_n 和 N_i 分别是该单元中的中性粒子宏粒子数和离子宏粒子数。按照图3所示，使用蒙特卡洛方法确定这对粒子的碰撞类型。每对粒子的碰撞概率定义为

$$P_i = \frac{v_r \sigma}{(v_r \sigma)_{max}}, \qquad \text{(Eq. 16)}$$

其中，σ 是所选碰撞类型的截面。为判断是否发生碰撞，将式 16 中的概率 P_i 与一个均匀分布随机数进行比较。

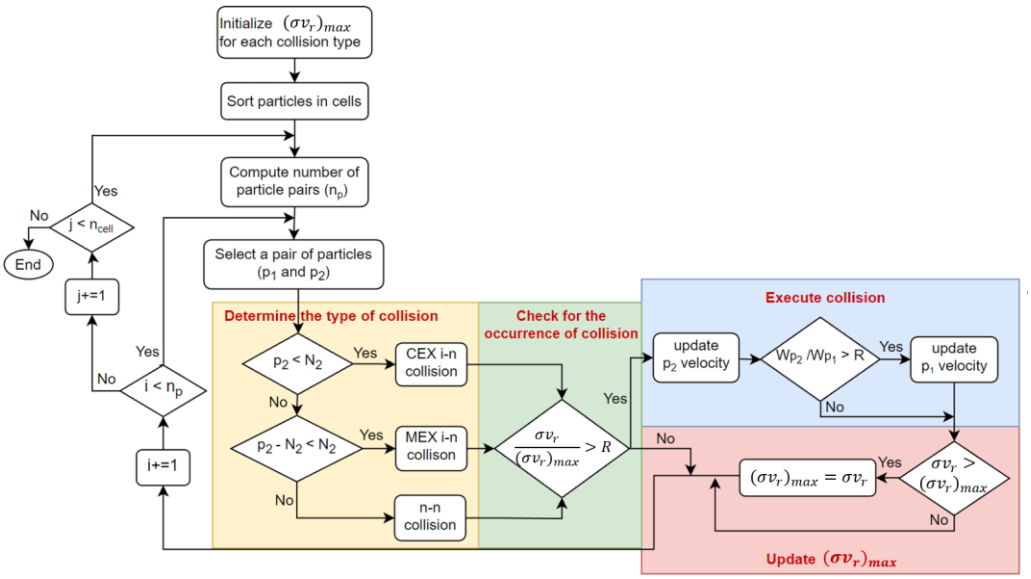


图 3：DSMC碰撞算法实现流程图。

对于中性粒子-中性粒子或中性粒子-离子MEX碰撞，参与碰撞粒子的碰撞后速度根据动量和能量守恒确定

$$\vec{v}'_{r1} = \frac{m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2}{m_1 + m_2} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_r \vec{R}, \qquad \text{(Eq. 17)}$$

$$\vec{v}'_{r2} = \frac{m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2}{m_1 + m_2} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} v_r \vec{R}, \qquad \text{(Eq. 18)}$$

其中，$\vec{R}$ 是一个方向随机的单位向量。假设粒子之间发生硬球相互作用，则散射是各向同性的。因此，散射角（ψ 和ϕ）定义为

$$\psi = \cos^{-1}(2\mathcal{R}_1 - 1), \quad \phi = 2\pi\mathcal{R}_2, \quad \text{where} \quad \mathcal{R}_1 \text{ and } \mathcal{R}_2 \in [0,1). \qquad \text{(Eq. 19)}$$

在中性粒子-离子电荷交换碰撞中，只需交换两个粒子的速度，即可更新发生碰撞的粒子的速度。

式 17 和 18 仅在发生碰撞的粒子具有相同宏粒子权重时成立。然而，为了在宏粒子权重不相等的情况下，经过统计上大量的碰撞事件后仍能确保动量和能量守恒，始终对宏粒子权重较小的粒子（W_{p_2}）进行速度更新；而只有当 R $>$ W_{p_2}/W_{p_1} 时，才会改变宏粒子权重较大的粒子的速度（W_{p_1}），其中 R 是一个随机数。

在本研究的模拟中，中性粒子的宏粒子权重是带电粒子的十倍。正如第 2 节所述，最初按照图 1(b) 中的密度和漂移速度分布将中性粒子加载到计算域中。在整个模拟过程中，中性粒子以恒定的阳极质量流率（$\dot{m}_a$）从阳极表面注入，假设其轴向漂移速度为 150 m/s。由于未解析径向坐标，因此未考虑中性粒子-壁面相互作用。

在一维轴向模拟中，对所述 DSMC碰撞模型的两个版本进行了比较。在第一个版本中，我们仅考虑中性粒子-中性粒子碰撞；而在第二个版本中，还将离子-中性粒子的动量交换和电荷交换碰撞纳入考虑。

最后，正如第 4 节所述，为突出中性粒子碰撞对等离子体放电动力学的影响，我们还进行了额外的参考模拟：采用动力学中性粒子处理，但不考虑任何中性粒子碰撞，并使用不同的中性粒子注入漂移速度。

第 4 节：结果与讨论

本节讨论采用各种中性粒子动力学模型开展的一维轴向和准二维轴向-方位向模拟的结果。首先，我们在第 4.1 节和第 4.2 节中介绍采用流体模型和动力学直接模拟蒙特卡洛方法中性粒子模型的一维轴向粒子网格模拟结果。在第 4.3 节和第 4.4 节中，我们在一维轴向构型下，评估采用不同中性粒子流体模型时，阳极表面的离子复合和电子-壁面碰撞对放电动力学的影响。在第 4.5 节中，我们介绍准二维轴向-方位向模拟的结果，以评估在对电子跨场迁移率进行自洽求解的模拟中，中性粒子模型对等离子体动力学的影响。最后，我们在第 4.6 节中比较各种模拟得到的整体性能参数。

4.1. 采用不同**中性粒子流体模型**的一维轴向 PIC 模拟

图4和图5分别展示了采用不同中性粒子流体模型进行一维轴向模拟得到的离子数密度和电离率时空分布图。

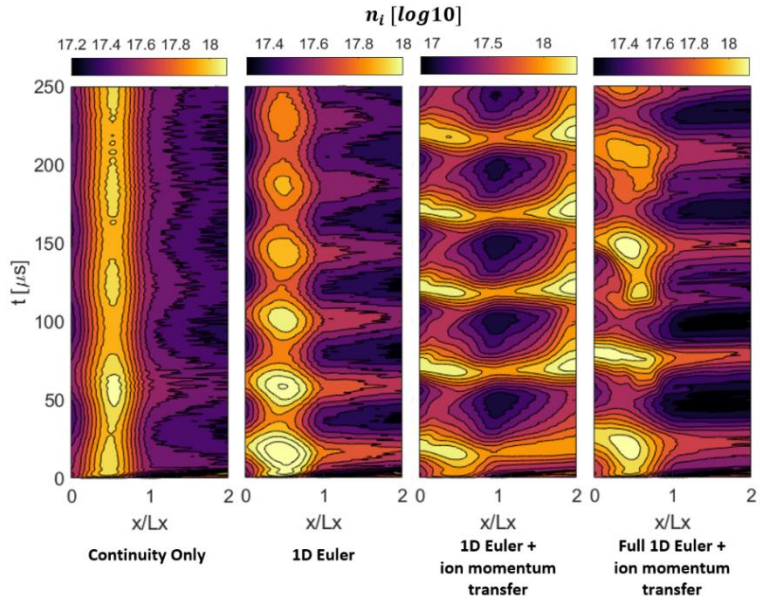


图4：采用不同中性粒子流体模型的一维轴向模拟所得离子数密度的时空演化

同样，图6和图7展示了中性流动特性，即数密度和速度随时间和空间的变化。从这四幅图中可以看出，在采用“仅连续性”模型的情况下，呼吸振荡相当微弱，并且在模拟早期就已衰减。在这种情况下，放电从大约 150 μs 开始变得几乎稳定。

相比之下，从图4和图5的时空演化图中可以看出，在“一维欧拉”模型中解析中性粒子速度的变化，会使呼吸振荡更加明显。此外，在“一维欧拉 + 离子动量传递”情形中考虑离子-中性粒子动量传递，会产生更强且持续时间更长的呼吸振荡，而“一维欧拉”模拟中的振荡则不然。无论如何，这两种情形下的放电振荡总体上都呈现出阻尼行为。

可以看出，与采用“1D Euler”和“1D Euler + ion momentum transfer”中性粒子模型的模拟相比，采用“Full 1D Euler + ion momentum transfer”进行模拟时的振荡模式存在相对明显的差异；在该模拟中，中性粒子流不采用等温假设。此外，还注意到，“Full 1D Euler + ion momentum transfer”模拟中的振荡频率低于采用“1D Euler + ion momentum transfer”模型的模拟。

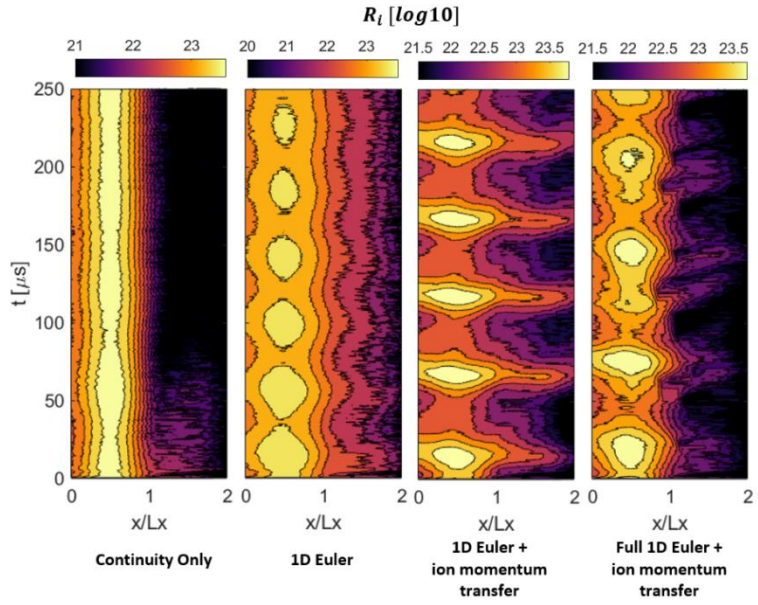


图5：采用不同中性粒子流体模型的一维轴向模拟所得电离率的时空演化

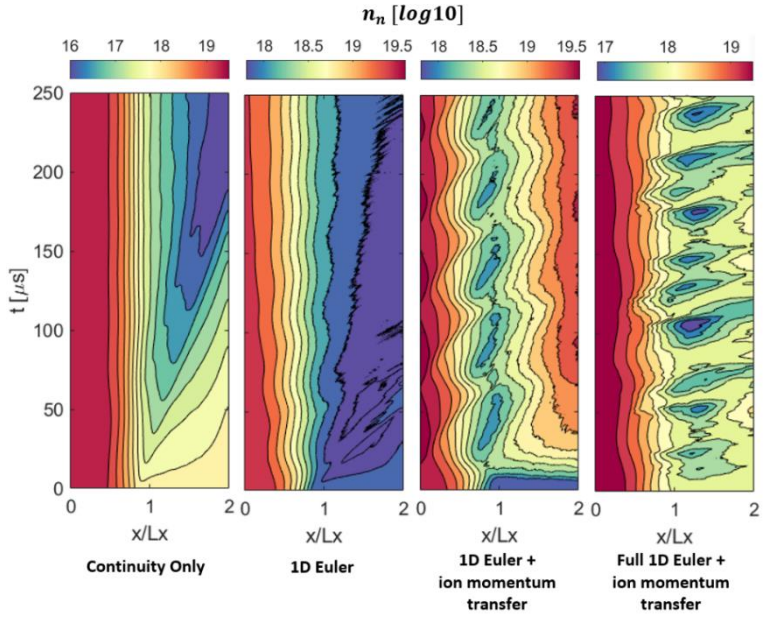


图6：　采用不同中性粒子流体模型的一维轴向模拟所得中性粒子数密度的时空分布图

参考图4至图7，还可以有趣地发现，对于“1D Euler + ion momentum transfer”和“full 1D Euler + ion momentum transfer”模型，离子数密度和电离率时空分布图中的振荡行为也反映在中性粒子数密度和速度演化中。这是离子-中性粒子碰撞及其产生的动量传递所导致的结果，后者能够进一步耦合等离子体与中性粒子动力学。

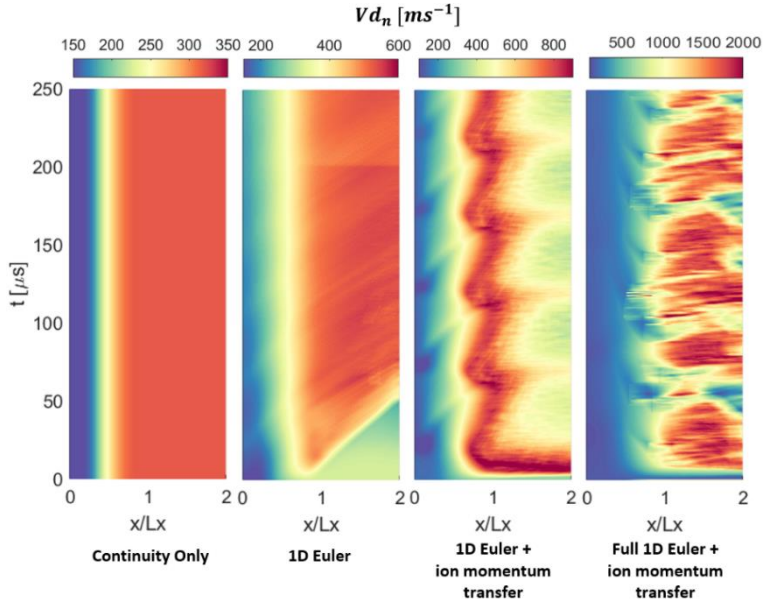


图7：采用不同中性粒子流体模型进行一维轴向模拟所得的中性粒子轴向速度时空分布图

关于图4和图6，另一个值得注意的现象是，在采用“1D Euler + 离子动量传递”中性粒子模型的模拟中，羽流区的离子和中性粒子数密度显著增加。羽流区中性粒子密度的增加，导致图5中周期性出现的电离率空间分布范围扩大。此外，羽流区中性粒子密度升高会不切实际地增强离子-中性粒子碰撞。羽流区电离增强与离子-中性粒子动量传递被夸大共同作用，使该区域的离子密度相当高。采用“1D Euler + 离子动量传递”模型进行模拟所得的这些不切实际结果，可归因于对中性粒子作出的等温假设，因为采用“完整1D Euler + 离子动量传递”中性粒子流体模型进行模拟时，并未得到相同的预测结果。

图8展示了采用不同中性粒子流体模型的一维轴向模拟所得的若干等离子体和中性粒子性质的时间平均轴向分布。图8第一列和第二列的图中，以黑色虚线叠加显示了 LANDMARK 一维流体模拟得到的可用参考剖面。

首先可以看到，采用“仅连续性”模型（蓝色曲线）的一维PIC模拟结果与参考剖面非常吻合。这两种情况下结果相似，是因为 LANDMARK 模拟同样只求解了中性粒子密度的演化。唯一明显的差异出现在轴向电场分布中（图8(a)）：我们的结果中没有 LANDAMRK 剖面里的不连续现象。这与我们的模拟对电子采用动力学处理，而 LANDMARK [25] 对电子组分采用流体描述有关。

其次，观察采用“1D Euler”中性粒子模型进行模拟所得的剖面（红色实线），可以发现，与“Continuity Only”情况的对应剖面相比，电场和等离子体电势分布（图8(a)和(g)）没有显著变化。不过，与“Continuity Only”情况相比，“1D Euler”情况下的中性粒子速度（图8(i)）整体较高，因此其阳极附近的电离率峰值（图8(e)）、离子数密度峰值（图8(b)）以及中性粒子数密度（图8(h)）均较低。然而，由于“1D Euler”情况下出口平面（黑色竖直虚线）附近及近羽流区内的电离率相对较高，这些区域的电子动能低于“Continuity Only”情况。

第三，“完整一维欧拉方程 + 离子动量传递”模拟案例的时间平均剖面（如图8中的绿色实线所示），在大多数情况下与“一维欧拉方程”模拟的剖面非常相似。

尤其是，电场、等离子体电势和电子能量的剖面主要与电子组分的动力学有关，受离子-中性粒子碰撞的影响似乎很小。

采用“1D Euler”和“full 1D Euler + ion momentum transfer”中性粒子模型进行模拟所得分布之间的主要差异，正如预期，出现在羽流区：离子-中性粒子碰撞使中性粒子速度显著增加（图8(i)）、离子温度整体升高（图8(f)），并使离子轴向速度略微降低（图8(c)）。阳极附近离子与中性粒子的相互作用使该区域的中性粒子密度增加（图8(h)），从而使电离略有增强（图8(e)），因此近阳极区的离子（等离子体）数密度也有所增加（图8(b)）。

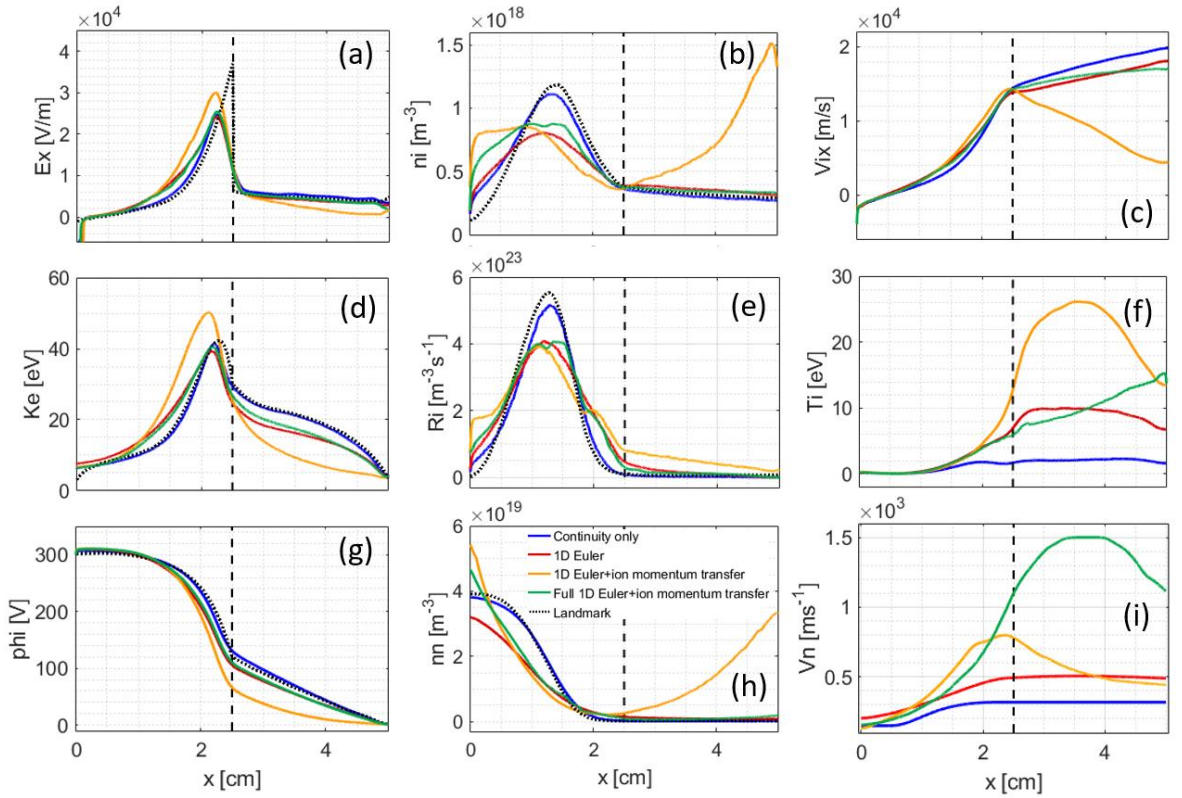


图8：采用不同中性粒子流体模型进行一维轴向 PIC 模拟得到的等离子体和中性粒子特性轴向分布的时间平均值（在 250 μs 上平均）。文献 [25] 中的 LANDMARK 结果以绿色虚线叠加显示。(a) 轴向电场（E_x），(b) 离子数密度（n_i），(c) 离子轴向速度（V_{ix}），(d) 电子动能（Ke），(e) 电离率（R_i），(f) 离子温度（T_i），(g) 电势（phi），(h) 中性粒子数密度（n_n），以及 (i) 中性粒子轴向速度（V_n）。

第四，采用等温“一维欧拉方程 + 离子动量传递”中性粒子模型进行模拟所得的剖面（黄色实线）与采用其他中性粒子模型得到的剖面存在显著差异。具体而言，从图8(c)可以看出，羽流中的离子轴向速度显著降低。此外，朝阴极方向的离子数密度（图8(b)）大幅增加；这一现象在采用该中性粒子流体模型时离子密度的时空演化中也有所体现（图4）。此外，羽流中的中性粒子密度（图8(h)）显著升高，而出口平面之后的中性粒子速度（图8(i)）则有所降低。

由于离子-中性粒子碰撞，羽流中的 n_i 和 V_{ix} 出现了明显变化。在“1D Euler + 离子动量传递”模拟中，由于羽流中的中性粒子数密度较高，这些变化显然被夸大了。对此，我们推测，尽管中性粒子从加速的离子处获得了动量，但中性粒子密度显著升高且羽流中的中性粒子速度意外下降，主要是因为在等温“1D Euler + 离子动量传递”模拟工况下，中性粒子流中出现了意料之外的激波。我们将在第4.2.1节重新审视这一假设。无论如何，激波会使中性粒子流减速，同时增大其压力。在“1D Euler + 离子动量传递”模拟工况下，由于我们对中性粒子流采用了等温假设（第3.1节），压力升高会直接转化为数密度升高。在这方面，预期会出现的突变.....

由于激波导致的中性粒子性质变化，在图8的相关曲线图中并不可见，因为中性粒子的电离会随着时间推移平滑势不连续性。

图 9 展示了一维轴向 PIC 模拟中放电电流（I_d）、离子电流（I_i）和电子电流（I_e）的时间演化图，这些模拟分别采用“仅连续性方程”（图 (a)）、“一维欧拉方程”（图 (b)）、“一维欧拉方程 + 离子动量传递”（图 (c)）以及“完整一维欧拉方程 + 离子动量传递”中性粒子模型。各电流项根据参考文献 [22] 所述方法计算。由图 9 可见，电流振荡的振幅从图 (a) 中的“仅连续性方程”模拟，到图 (c) 中的“一维欧拉方程 + 离子动量传递”模拟，持续增大。不过，“完整一维欧拉方程 + 离子动量传递”模拟（图 (d)）中各电流项的整体演化与其他情况截然不同。具体而言，其电流振荡的振幅与“一维欧拉方程”模拟更为接近；振荡阻尼所需的时间则长于“一维欧拉方程”情况，但略短于“一维欧拉方程 + 离子动量传递”模拟。

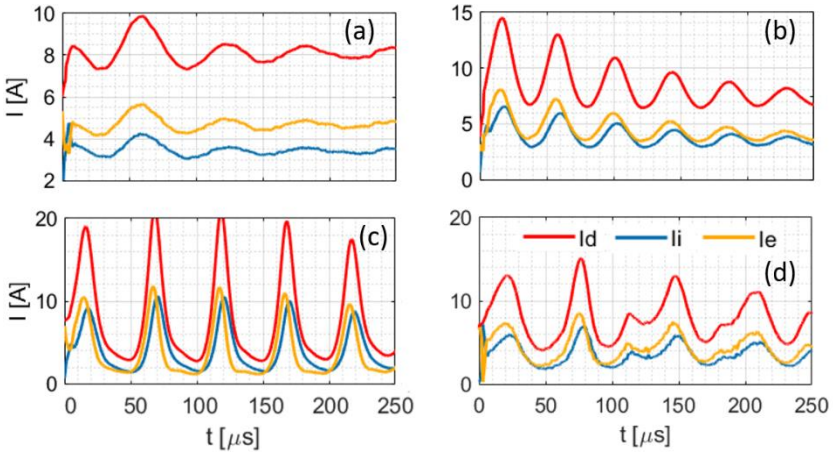


图 9： 采用不同中性粒子流体模型的一维轴向模拟中各电流项随时间的演化；(a) “连续性方程 仅”, (b) “一维欧拉方程”, (c) “一维欧拉方程 + 离子动量传递”, (d) “完整的一维欧拉方程 + 离子动量传递” .

4.2. 采用中性粒子动力学处理的一维轴向 PIC 模拟

本节展示一维轴向模拟的结果，其中中性粒子被视为粒子，其演化通过动力学方式解析。以下结果有助于评估：采用中性粒子流体描述时模拟得到的放电动力学，在多大程度上能够代表使用精度更高的中性粒子动力学模型所解析出的动力学。

4.2.1. 采用 DSMC 碰撞的模拟结果

图 10 显示了采用 DSMC 碰撞的一维轴向模拟中，离子数密度、中性粒子数密度和中性粒子速度在 230 μs 模拟时间内的时空演化。

图 10 中值得强调的要点是，无论是仅考虑中性粒子-中性粒子碰撞（“n-n DSMC”），还是同时考虑中性粒子-中性粒子碰撞和离子-中性粒子碰撞（“n-n + i-n DSMC”），从放电特性的演化图中都可以看到，放电最终达到稳态，全局振荡消失或较弱。具体而言，仅考虑 n-n 碰撞时，振荡模式会持续更长时间；而同时考虑离子-中性粒子碰撞时，放电在经历高振幅初始瞬态后便趋于稳态。

上文所述采用不同 DSMC 碰撞的模拟所呈现的放电行为，也体现在图 11 所示各电流项的时间演化图中。此外，图 11(b) 中一个值得注意的现象是，仅考虑中性粒子-中性粒子碰撞的轴向模拟所得电流项的平均值，与图 9(b) 中采用“ 一维欧拉方程”中性粒子流体模型的轴向模拟所得相应数值非常相似。当然，这两个模拟案例中的电流随时间演化情况有所不同：采用“中性粒子-中性粒子 DSMC”的模拟，其振荡振幅较低，持续时间也较短。尽管如此，可以看出，采用不同中性粒子模型的两种模拟最终达到的稳态非常相似。

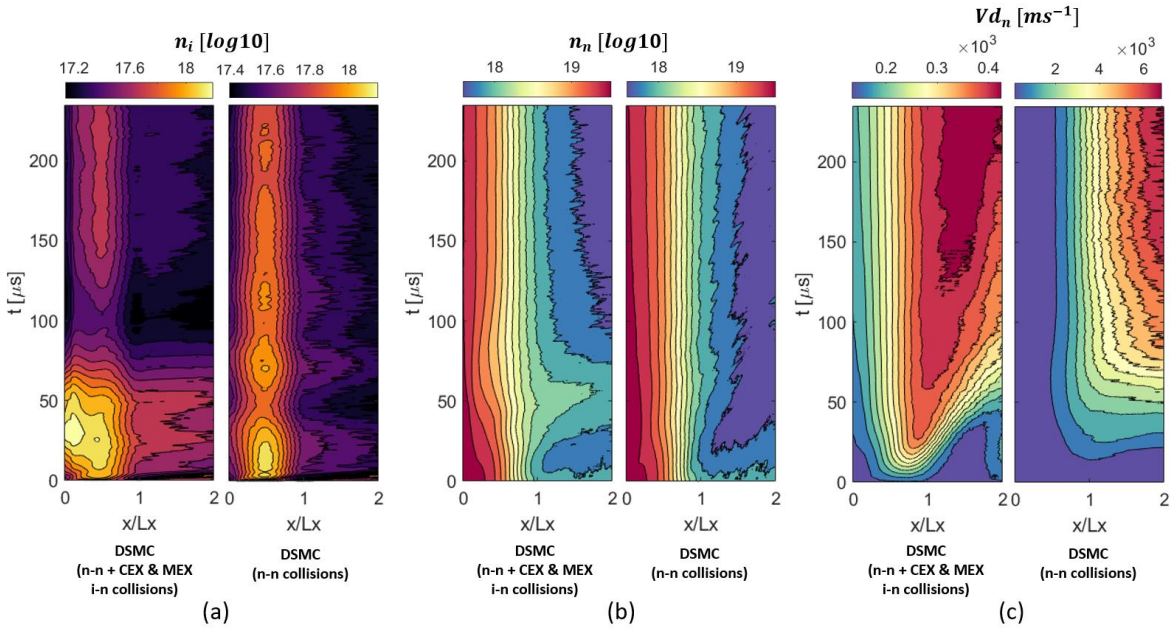
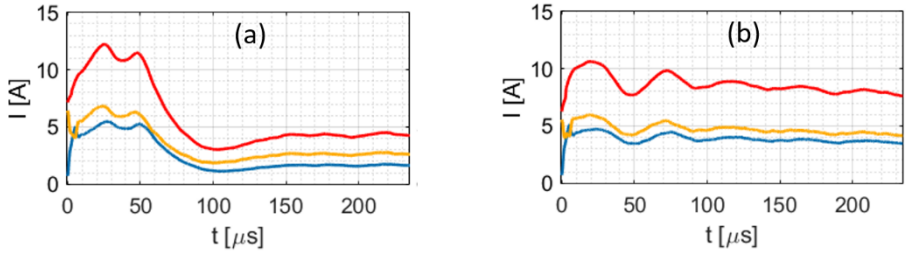


图 10：采用中性粒子动力学直接模拟蒙特卡罗模型的一维轴向 PIC 模拟中，(a) 离子数密度、(b) 中性粒子数密度和 (c) 中性粒子轴向速度随时间的演化。



采用中性粒子动力学直接模拟蒙特卡罗模型的一维轴向模拟中，各电流项随时间的演化；(a) 中性粒子-中性粒子碰撞以及离子-中性粒子的电荷交换和动量交换碰撞，(b) 仅中性粒子-中性粒子碰撞。

采用“一维欧拉方程”流体模型和“中性粒子-中性粒子 DSMC”动力学中性粒子模型的模拟，其稳态结果相似；这一点也体现在图 12 所示放电特性的时间平均轴向分布中。事实上，与中性粒子的“一维欧拉方程”和“中性粒子-中性粒子 DSMC”模型相对应的曲线吻合得非常好。在这方面，观察到的细微差异主要体现在中性粒子密度和速度上，其根源在于：在中性粒子流体模型中，流动为单能，而在动力学直接模拟蒙特卡洛处理中，粒子是从分布函数中抽取的样本，因此中性粒子之间必然存在能量弥散。参考文献 [21] 也报告了中性粒子能量分布对放电特性的类似影响。

关于“一维欧拉方程”和“中性粒子-中性粒子 DSMC”模拟案例的分布，另一个值得注意的点是，与“中性粒子-中性粒子 DSMC”相比，“一维欧拉方程”案例在羽流中的电离率更高（图12(e)）。因此，由于电离会产生“冷”离子，这些冷离子导致的羽流中离子群速度分布范围扩大，表现为“一维欧拉方程”案例的羽流中时间平均离子温度更高（图12(f)）。

关于图12中采用“n-n + i-n DMSC”碰撞的模拟时间平均剖面，我们观察到，尽管电场、电子动能和等离子体电势与另外两个模拟案例的剖面一致，但其余剖面因离子-中性粒子碰撞而出现变化。具体而言，羽流中的离子速度有所降低，因此出口平面下游的离子数密度略有增加。此外，从通道出口平面上游（黑色虚线）向羽流方向，中性粒子速度显著升高，导致通道内中性粒子数密度降低，进而使电离率降低、离子密度峰值减小。

当然，与现实情况相比，“n- n + i-n DMSC”模拟中离子-中性粒子碰撞对中性粒子群的影响被认为有所夸大，这是因为模拟未能解析

本研究模拟中中性粒子的径向膨胀。中性粒子的这种径向膨胀会降低推力器加速离子锥内的中性粒子密度，从而降低离子与中性粒子之间的碰撞概率，进而减弱传递给中性粒子的动量。

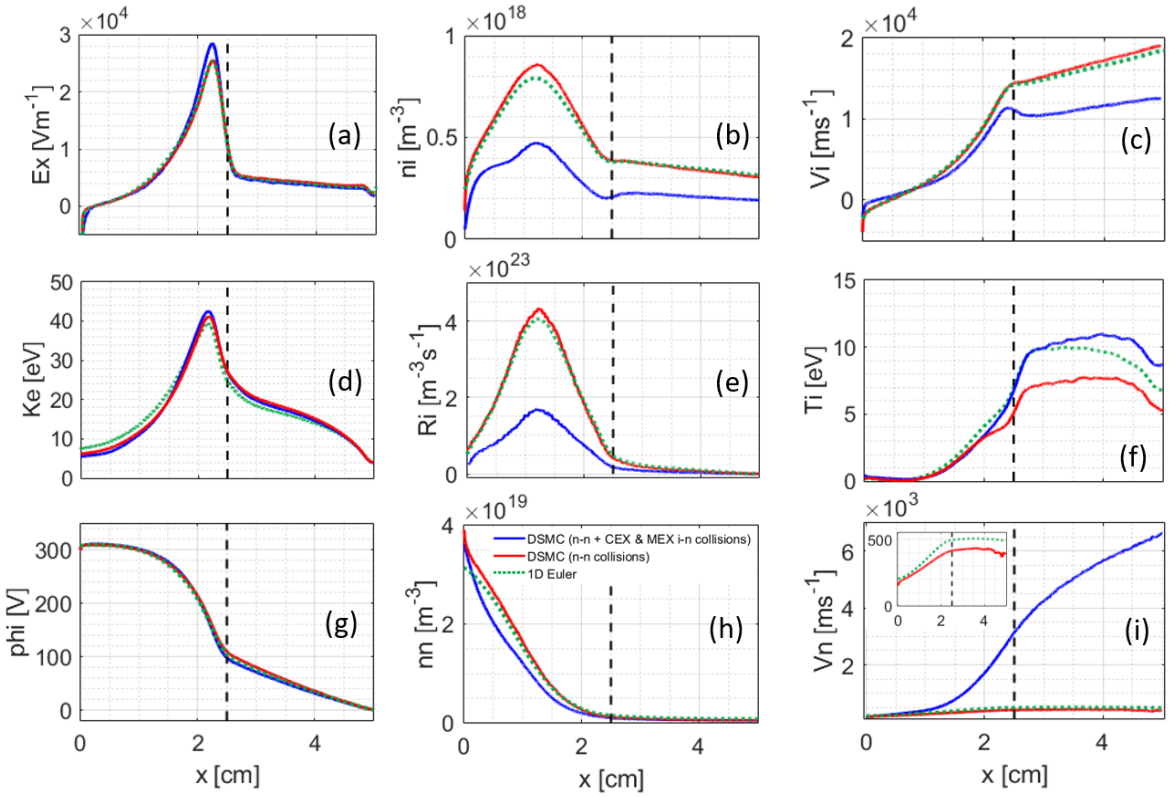


图12：采用中性粒子动力学模型的一维轴向模拟所得等离子体和中性粒子特性的时间平均轴向分布（对 $100-230\ \mu s$ 进行平均）。图中叠加了“ 一维欧拉方程”模拟得到的相应分布；(a) 轴向电场，(b) 离子数密度，(c) 离子轴向速度，(d) 电子动能，(e) 电离率，(f) 离子温度，(g) 电势，(h) 中性粒子数密度，(i) 中性粒子轴向速度。

将图12中的模拟分布与图8中等温“ 一维欧拉方程 + 离子动量传递”模拟的分布进行比较可以发现，后一模拟案例中离子密度、离子轴向速度、中性粒子密度和中性粒子速度分布中的不合理特征在此处并未出现。

对此需要回顾的是，在第4.1节中，我们曾推测，羽流中中性粒子密度显著升高（图8(h)）以及图8(i)中观察到的中性粒子速度下降，是由于中性粒子流中出现了意料之外的激波。我们还强调，在“ 一维欧拉方程 + 离子动量传递”中性粒子模型的等温假设下，激波后的中性粒子压力升高会直接反映为中性粒子密度升高。

考虑到上述说明，图 13(a) 中采用动力学“中性粒子-中性粒子 + 离子-中性粒子 DMSC”模拟以及采用“完整一维欧拉方程 + 离子动量传递”中性粒子流体模型所得的中性粒子温度分布表明：如果解析离子-中性粒子碰撞，中性粒子温度会发生显著变化，因此不能再采用等温假设。因此，显然，如果要在流体方程组中考虑离子-中性粒子碰撞对中性粒子流的影响，就必须在中性粒子的流体描述中求解能量方程。由此产生的中性粒子温度变化可避免形成意外激波；该激波会导致等温“一维欧拉方程 + 离子动量传递”模拟中的中性粒子性质分布不切实际。

最后，参见图13(b)，该图展示了采用动力学直接模拟蒙特卡罗方法、等温“一维欧拉方程 + 离子动量传递”以及“完整一维欧拉方程 + 离子动量传递”中性粒子模型进行模拟所得的离子向中性粒子体积动量传递（S_m）的时间平均轴向分布。

关于这张图，首先值得注意的是，“n-n + i-n 直接模拟蒙特卡罗”和等温“1D Euler + 离子动量传递”模拟中的S_m 剖面存在显著差异，尤其是在羽流区域。这与“1D Euler + 离子动量传递”模拟中发生了激波有关，该激波导致羽流中的中性粒子数密度几乎与阳极附近一样高。相比之下，“n-n + i-n 直接模拟蒙特卡罗”模拟得到的S_m 剖面在物理上是合理的，因为最大离子-中性粒子

动量传递发生在出口平面附近，此处离子已基本加速完成，而粒子数密度仍相对较高。

其次，“完整一维欧拉+ 离子动量传递”模拟的S_m 分布（绿色点线）与等温“一维欧拉 + 离子动量传递”模拟的相应分布直到$x \sim 2$ cm处都非常吻合，但在羽流中并未表现出明显上升。此外，与“n-n + i-n 直接模拟蒙特卡罗”模拟中的S_m 值相比，“完整一维欧拉+ 离子动量传递”情况下通道内的S_m 值，即竖直黑色虚线之前的值，要低得多。造成这种差异的原因被认为是：在中性粒子的流体描述中，粒子只有一个轴向速度分量，而在其动力学描述中，中性粒子具有三个速度分量。因此，三维速度动力学中性粒子与离子的碰撞可能导致离子群体总动量发生更大的变化。

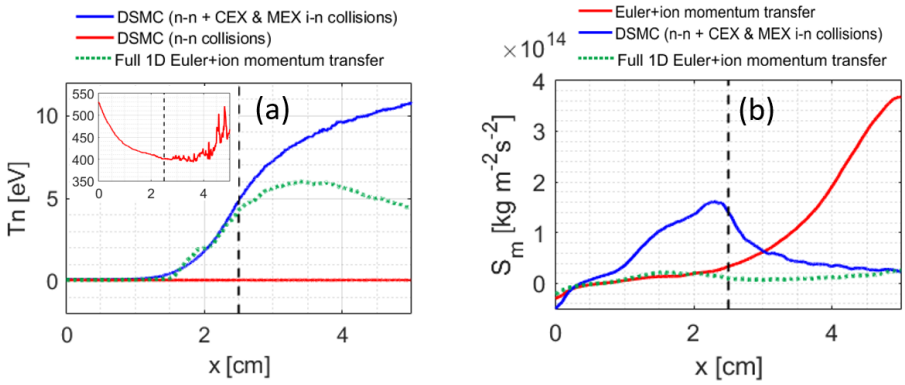


图 13：（a）采用动力学-直接模拟蒙特卡罗和“完整一维欧拉+ 离子动量传递”中性粒子流体模型的一维轴向模拟所得的中性粒子温度时间平均轴向分布；（b）采用“n-n + i-n 直接模拟蒙特卡罗”、等温“一维欧拉+离子动量传递”和“完整一维欧拉+ 离子动量传递”中性粒子模型的一维轴向模拟所得的离子-中性粒子动量传递项时间平均轴向分布。

4.2.2. 采用无碰撞中性粒子动力学模型的模拟结果

为了评估在动力学描述中解析中性粒子之间的碰撞对等离子体放电动力学的重要性，我们使用不包含任何中性粒子-中性粒子碰撞的中性粒子动力学模型，并采用三种不同的中性粒子注入漂移速度，开展了一组一维轴向模拟。结果分别以离子和中性粒子数密度的时空演化以及放电电流的时间演化表示，见图 14 和图 15。

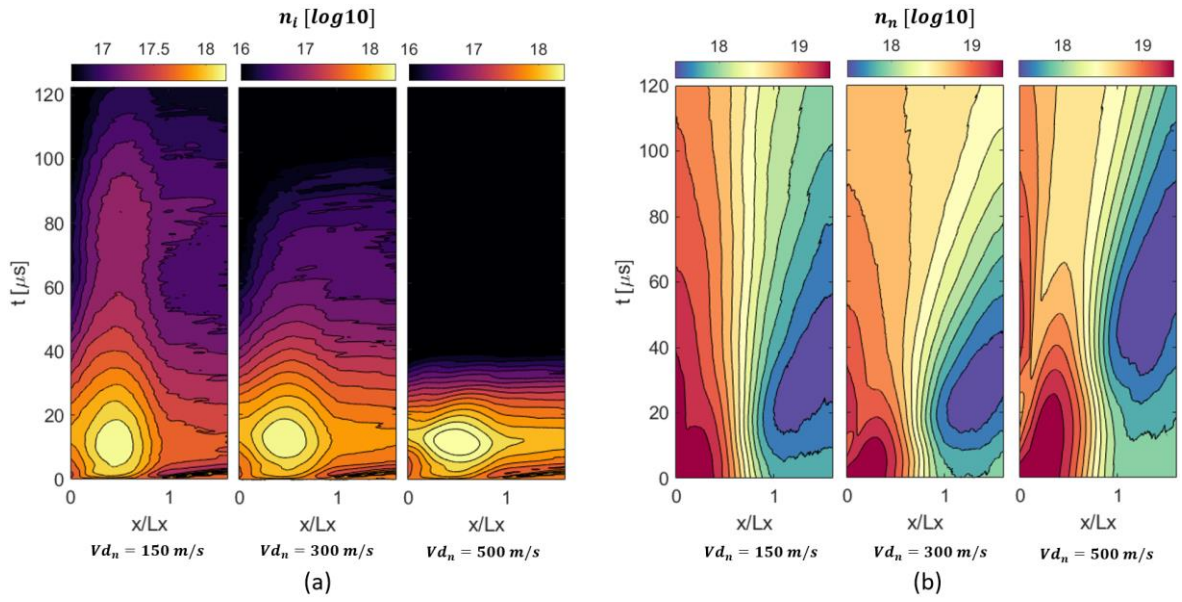


图 14：采用无碰撞中性粒子动力学模型和不同中性粒子注入漂移速度的一维轴向模拟中，(a) 离子数密度和 (b) 中性粒子数密度的时间演化。

从这些图中的曲线可以看出，无论中性粒子轴向速度取何值，在不存在中性粒子-中性粒子碰撞、因而无法解析中性粒子压力影响的情况下，放电都无法维持并最终熄灭。然而，随着中性粒子漂移速度增加，放电特性中更为显著的初始瞬态以及更短的放电持续时间也随之出现。

将本节结果与上一节的结果，尤其是图 10 和图 11 中的结果进行比较，可以明显看出，中性粒子压力项对维持等离子体放电起着关键作用。事实上，在中性粒子之间不存在任何碰撞的情况下，初始瞬态之后，粒子在通道内的驻留时间似乎不足以维持放电。对此，从图 14(b) 可以观察到，随着模拟的进行，羽流中的中性粒子密度不断增加。这反过来可能会妨碍电子有效电离，从而无法维持放电。

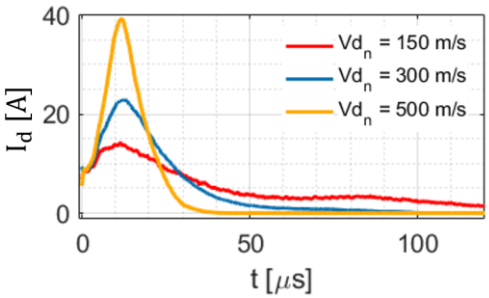


图 15：采用无碰撞中性粒子动力学模型、不同注入漂移速度的一维轴向模拟中放电电流的时间演化。

4.3. 效 应的阳极表面离子复合：**采用不同中性粒子流体模型的一维PIC模拟**
流体模型

本节采用具有不同中性粒子流体模型的动力学一维轴向模拟，评估阳极处离子复合对放电行为的影响。为此，图 16 展示了离子数密度、中性粒子数密度和电离率的时间平均轴向分布，以及有无阳极离子复合时模拟所得放电电流随时间的变化。

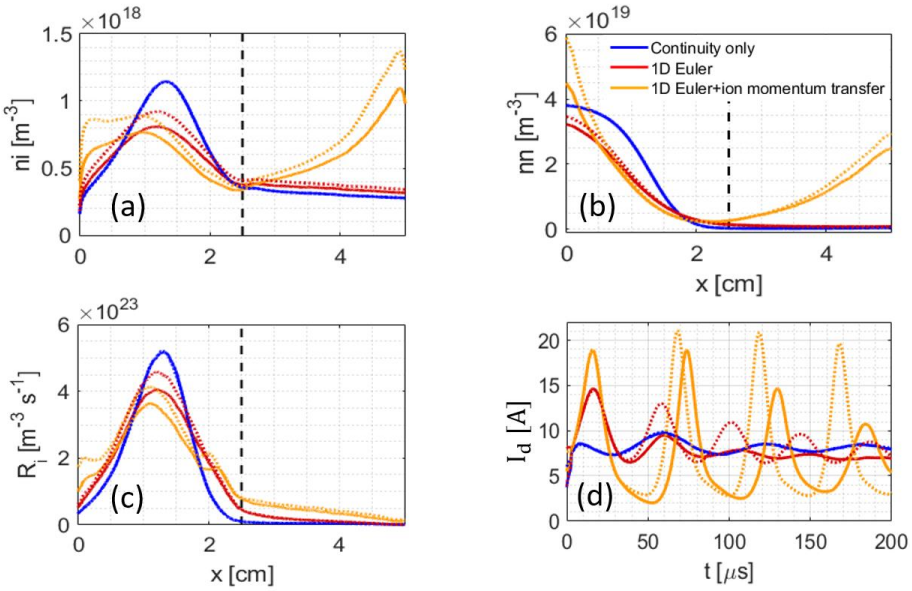


图 16：具有不同中性粒子流体模型的一维轴向模拟中，存在阳极离子复合（点线）和不存在阳极离子复合（实线）时，(a) 离子数密度、(b) 中性粒子数密度和 (c) 电离率的时间平均（在 200 μs 时间内）轴向分布。(d) 图展示了不同模拟中相应的放电电流随时间的变化。

从图 16 的曲线可以观察到，对于“仅连续性”模型，阳极离子复合不会对时间平均特性和放电电流振荡产生任何明显影响。然而，对于“ 一维欧拉”和等温“一维欧拉 + 离子动量传递”模型，

这两个模型均解析了中性粒子速度的变化；我们可以看到，阳极离子复合影响了放电特性的轴向分布及其时间行为。

关于时间平均特性，正如预期的那样，阳极处离子复合产生的额外中性粒子通量使近阳极区的中性粒子数密度增加，进而提高了该区域的电离率和离子数密度。同时考虑离子-中性粒子动量交换的影响后，我们发现，在采用等温“一维欧拉方程 + 离子动量传递”模型进行模拟并得到合理预测的近阳极区，由离子复合引起的中性粒子和离子密度增幅约为 25 %。

更值得关注的是，从图 16(d) 可以看出，在“一维欧拉方程”模拟和等温“一维欧拉方程 + 离子动量传递”模拟中，未考虑阳极离子复合会降低放电电流振荡的振幅，从而使放电相对趋于稳定。此外，在缺少阳极离子复合的情况下，两种模拟案例中的振荡频率均有所降低。

4.4. 使用“仅连续性方程”中性粒子流体模型进行一维PIC模拟时电子-壁面碰撞的影响

本节评估电子-壁面碰撞对采用“仅连续性方程”中性粒子流体模型的一维轴向模拟预测结果的影响。为此，我们进行了无壁面碰撞的模拟（$\nu_{wall} = 0$），并将其结果与另外两个人为设定的电子-壁面碰撞频率值对应的模拟结果进行了比较，分别为 $\nu_{wall} = 5 \times 10^6$ 和 $1 \times 10^7\ s^{-1}$。后一个壁面碰撞频率值是我们在迄今展示的模拟中采用的数值，也与参考 LANDMARK 模拟中使用的数值相同（[25]）。因此，鉴于我们已在第4.1节证明，采用“仅连续性方程”中性粒子流体模型的一维轴向PIC模拟结果与 LANDMARK 的结果高度吻合，本节的模拟也可作为对 LANDMARK 案例研究的参数研究扩展（[25]）。

图17展示了采用不同壁面碰撞频率进行模拟所得到的离子数密度时空分布图。此外，对于三个 ν_{wall} 值，图18给出了相应的模拟结果，包括电子（J_e）和离子（J_i）电流密度的轴向分布，以及放电电流随时间的变化。

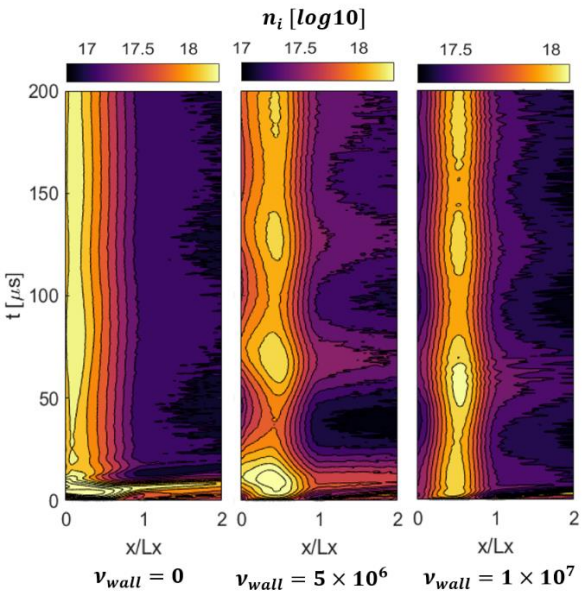


图18: 采用不同壁面碰撞频率进行一维轴向模拟时离子数密度的时间演化 .

从图17和图18(b)可以看出，在没有任何壁面碰撞的情况下，经过离子数密度和放电电流的大振幅初始瞬态后，放电达到以极弱振荡为特征的稳态。然而，考虑电子-壁面碰撞后，放电在系统的准稳态下呈现出振荡模式。此外，从图17和图18(b)可以看出，随着电子-壁面碰撞频率增加，放电特性中的振荡振幅会减小，这一现象在稳态和初始瞬态期间均可观察到。然而，随着壁面引起的

电子轴向迁移率在较高的壁面碰撞频率下增加，图18中的(a)和(b)分别显示，电子电流密度和平均放电电流在$\nu_{wall} = 1 \times 10^7\ s^{-1}$的情况下均高于另外两种情况。

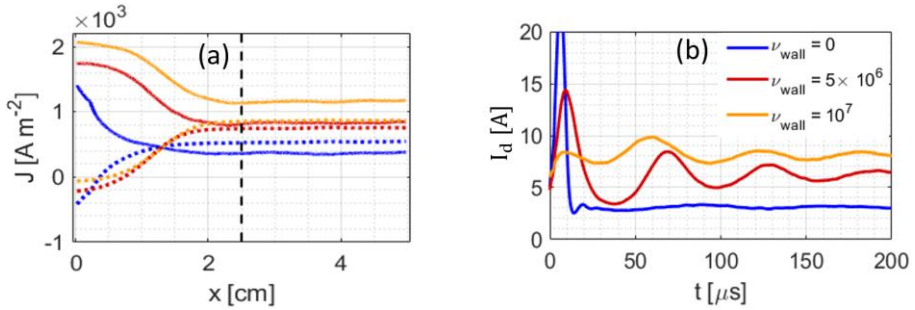


图18：（a）电子（实线）和离子电流密度（虚线）的时间平均轴向分布，以及（b）采用不同壁面碰撞频率的一维轴向模拟中放电电流的时间演化。

图19展示了采用不同ν_{wall}值的模拟所得放电特性的时间平均轴向分布。图19中最显著的一点是，无壁面碰撞模拟所得的分布与其他模拟所得的放电特性分布有很大差异。事实上，在没有壁面碰撞的情况下，电子动能（图19(d)）不受壁面损失限制，导致电离显著增强，进而使近阳极区域的中性粒子耗减（图19(e)和（h）），同时阳极附近的离子数密度较大（图19(b)）。此外，较高的电子能量使近阳极区的等离子体电势升高（图19(g)），进而导致电场相对较强（图19(a)），因此离子轴向速度也较高（图19(c)）。

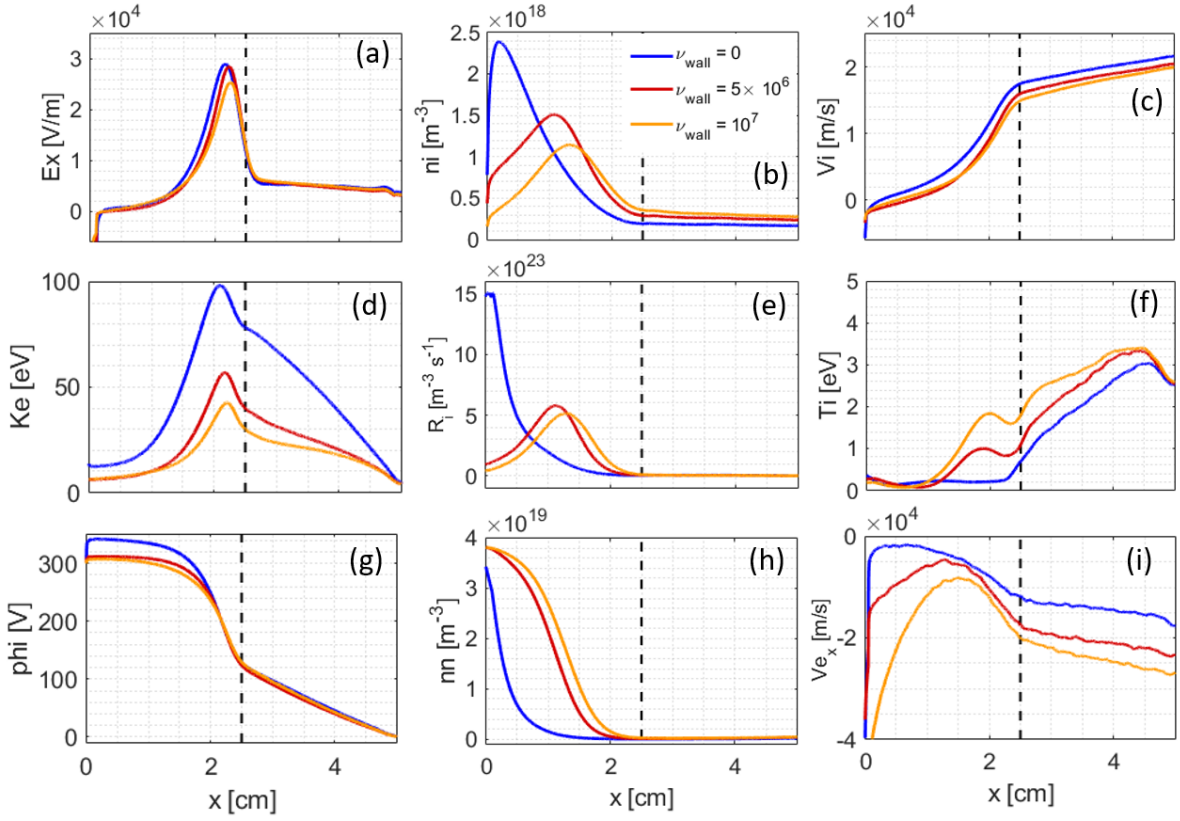


图19：采用不同壁面碰撞频率进行一维轴向模拟得到的等离子体和中性粒子特性的时间平均（在200 μs上）轴向分布，包括：（a）轴向电场，（b）离子数密度，（c）离子轴向速度，（d）电子动能，（e）电离率，（f）离子温度，（g）电势，（h）中性粒子数密度，以及（i）电子轴向速度。

从图19可以看出，在模拟中考虑电子-壁面碰撞会使预测的电子动能降低，这反映在受电子组分能量影响最大的属性的轴向分布中

例如电离率和离子数密度。此外，在壁面碰撞频率较高时，轴向电子漂移速度朝阳极方向增大（图19(i)），这会使等离子体电势的斜率略微减小（图19(g)），进而降低电场峰值（图19(a)）。

壁面碰撞对放电特性时间平均轴向分布的影响，也体现在表2所示的整体性能参数中。性能参数——推力（T）、比冲（I_{sp}）和推力效率（η_T）——根据公式20至22计算。在这些公式中，下标s表示特定物种，A表示横截面积，m_s表示粒子种类质量，n_s表示密度，

v_{sx} $\dot{m}_{out\ s}$ $\sum_{ts=1}^{n}\sum_{j=1}^{N_{cell}} n_s\ j\ t\ v_{sx}\ j\ t$ 表示轴向漂移速度。g，表示粒子种类出口质量流率，计算方式为（V_a），（），表示海平面处的重力加速度，表示阳极电压。表达式$\dot{m}_{out,\ s}$以及公式20中的求和符号$\Sigma_{ts=1}^{n}$表示时间平均，此处对模拟时间的200 μs取平均。此外，求和符号$\Sigma_{j=1}^{N_{cell}}$表示空间平均；在本文中，空间平均取自计算域最后100个单元。

$$T_s = \frac{A\ m_s}{n\ N_{cell}} \sum_{ts=1}^{n} \sum_{j=1}^{N_{cell}} n_s(j,t)\ \ v_{sx}^2(j,t)\,, \qquad \text{(Eq. 20)}$$

$$I_{sp,s} = \frac{T_s}{\dot{m}_{out,\,s}\ g}, \qquad \text{(Eq. 21)}$$

$$\eta_T = \frac{\Sigma_s (T_s)^2}{2\ \dot{m}_a\ I_d V_a}. \qquad \text{(Eq. 22)}$$

对于表2中报告的性能参数，根据式20和式21计算的中性粒子所产生的推力和比冲可以忽略不计，因此予以忽略。由表2可见，壁面碰撞频率越高，电流项越大，尤其是电子电流。此外，尽管壁面碰撞频率升高会使羽流中的离子数密度增大（图19(b)），从而提高推力，但由于发生壁面碰撞时电子轴向电流增强，放电电流显著增加，最终导致壁面碰撞频率较高时推力效率整体下降。

	采用Bohm迁移率和特设壁面碰撞模型的一维轴向模拟		
	$\boldsymbol{\nu_{wall} = 0}$	$\boldsymbol{\nu_{wall} = 5 \times 10^6}$	$\boldsymbol{\nu_{wall} = 1 \times 10^7}$
$\boldsymbol{I_d\ (A)}$	4.3	6.55	8.11
$\boldsymbol{I_i\ (A)}$	2.6	3.17	3.44
$\boldsymbol{I_e\ (A)}$	1.7	3.38	4.67
$\boldsymbol{T\ (mN)}$	72	85	94
$\boldsymbol{I_{sp}\ (s)}$	2206	2085	2031
$\boldsymbol{\eta_T}$ (%)	47	38	37

表2：不同壁面碰撞频率下模拟的整体性能参数

4.5. 使用不同中性粒子动力学流体模型的准二维轴向-方位向模拟

本节报告了我们在轴向-方位向构型下进行的降阶准二维模拟结果。讨论的整体结构与第4.1节相似。准二维模拟采用单区域分解[23]，，以解析方位角不稳定性对电子输运的平均影响[22]。我们此前的研究[22][33] 已证实，这种对不稳定性诱导的电子跨场迁移率的自洽平均表征，无需使用任何临时输运模型。因此，以下讨论的结果均未采用用于一维轴向模拟的玻姆型输运模型。

然而，这些模拟确实包含了第 2 节所述的电子-壁面碰撞人为设定模型，该模型也曾用于一维轴向模拟。我们发现，人为设定的壁面碰撞频率取一维轴向模拟所用值的一半

，即 $\nu_{wall} = 5 \times 10^6\ s^{-1}$，便可使准二维模拟达到准稳态。事实上，我们首先进行了一组准二维模拟，采用与一维轴向模拟相同的 ν_{wall} 值，但注意到无论采用何种中性粒子动力学模型，放电都会熄灭。对此，我们强调，由于 LANDMARK 在轴向模拟案例中采用了 $1 \times 10^7\ s^{-1}$ 的壁面碰撞频率，并针对玻姆输运模型进行了特定调参，因此预计这一数值可能并不适用于准二维模拟；后者会自洽求解方位波导致的电子动量和能量变化。

继续讨论之前，我们先看图20。该图展示了采用“一维欧拉方程”中性粒子模型的单区域准二维模拟中方位角电场涨落的时空分布图。可以观察到，已经形成了规则的小尺度波结构。采用其他中性粒子流体模型的准二维模拟也得到了这一结果，这表明所选计算域的方位向长度（1 cm）足以捕捉多个方位波波长。

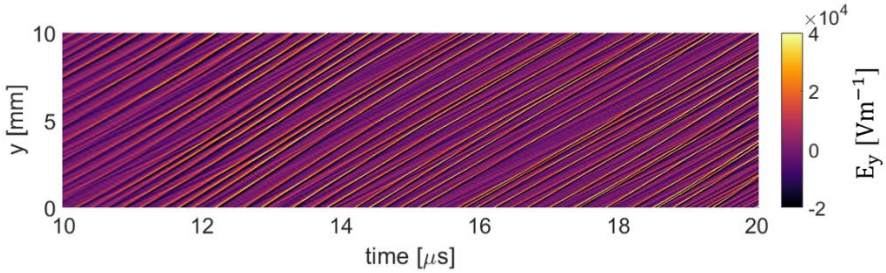


图20：采用“一维欧拉方程”中性粒子流体模型的准二维模拟中，10-20 μs 时间段内方位角电场涨落的时空演化

图21至图24分别展示了不同准二维模拟中放电特性、离子数密度、电离率、中性粒子密度和中性粒子轴向速度的时空演化。首先值得指出的是，单区域准二维模拟捕捉到了足够的由不稳定性诱导的电子轴向迁移率，因此无需任何临时输运模型，也能维持放电并呈现周期性振荡行为。这一观察证实了我们此前对降阶粒子网格方案 [22][33] 的评估结果，不过本次模拟设置采用了对电离过程的自洽描述。

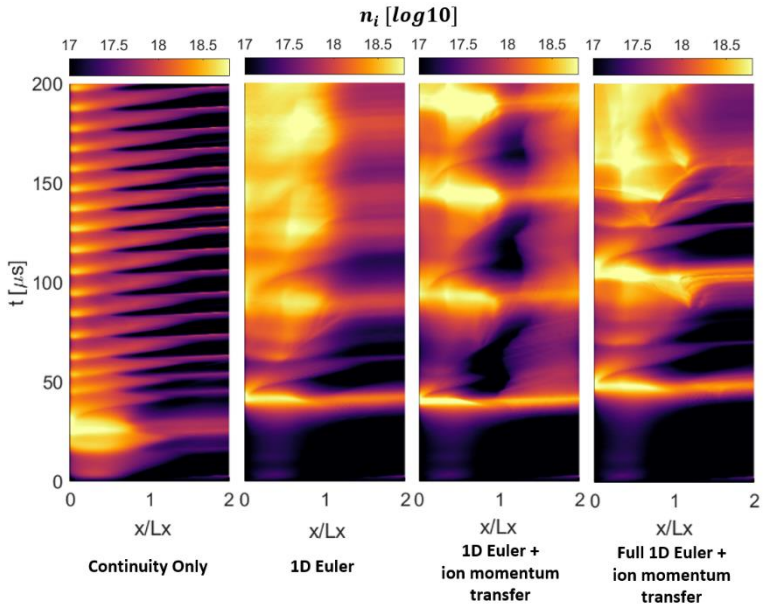


图21：采用不同中性粒子流体模型的准二维轴向-方位向模拟中离子数密度的时空演化。

从图21和图22还可以看出，与一维轴向模拟（图4和图5）相比，采用所有中性粒子动力学模型时，放电的瞬态阶段持续时间更长。这或许是

因为方位波的发展以及不稳定性诱导过程使电子输运趋于稳定都需要时间。

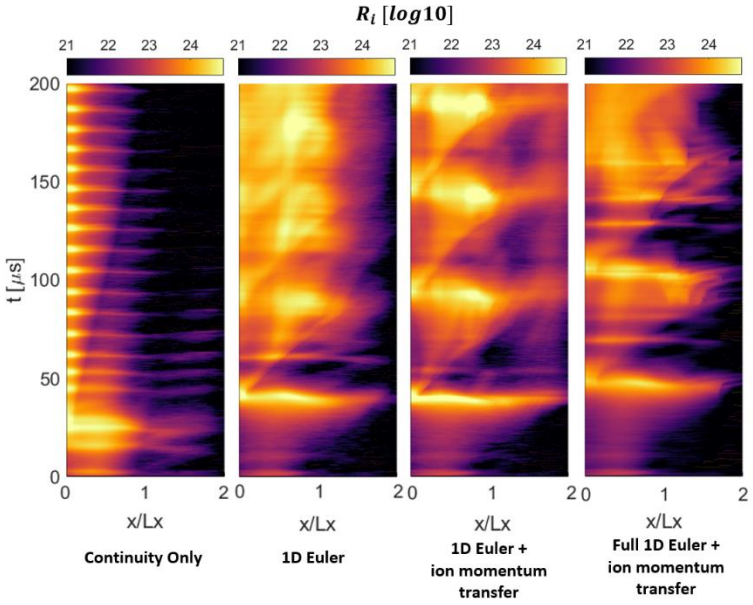


图22：S　准二维轴向-方位向模拟中采用不同中性粒子　　s’流体模型。

将图23和图24中的时空分布图与一维轴向模拟对应的图6和图7进行比较，可以发现，对于每种特定的中性粒子流体模型，一维轴向模拟与准二维轴向-方位向模拟中解析得到的中性粒子动力学总体相似。不过，在准二维轴向-方位向模拟中，“一维欧拉”模型的中性粒子密度和轴向速度的振荡模式更为显著。

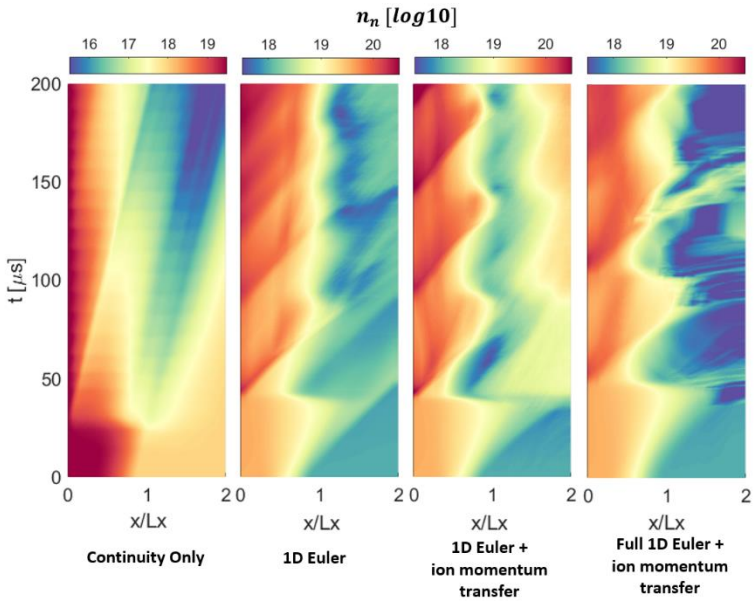


图23：准二维轴向-方位向模拟中采用不同中性粒子流体模型时，中性粒子数密度的时空演化。

从图21和图22的曲线中还可以观察到，采用“仅连续性”中性粒子流体模型的准二维模拟预测放电的动力学变化相当快，振荡频率约为100 kHz。文献报道，放电中的全局振荡频率通常为5–25 kHz，因此一般不会预期如此高的频率 [2][34]。此外，如图25(a)所示，这些快速的全局振荡是放电电流中唯一占主导地位的模式，这表明这些振荡不能归因于离子渡越时间不稳定性（ITTI）[35]。因此，

我们得出结论：在自洽轴向-方位向模拟中，“仅连续性”模型并不适用，也无法使我们恰当地解析系统动力学。

事实上，从图25(a)可以观察到，在初始瞬态之后，该模拟案例中的放电电流、离子电流和电子电流的演化呈现低幅高频振荡，这与采用“1D Euler”、等温“1D Euler + ion momentum transfer”和“Full 1D Euler + ion momentum transfer”中性粒子模型进行模拟所得的电流项演化图截然不同（图25(b)至(d)）。

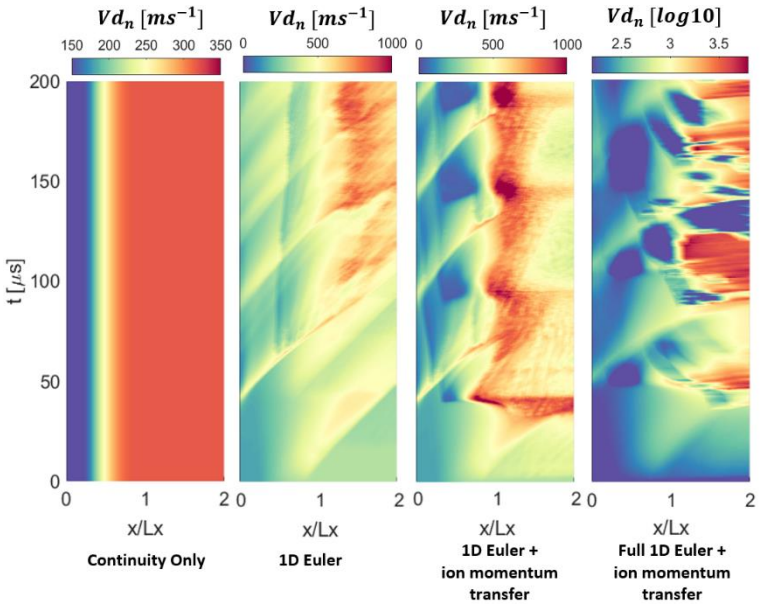


图24：采用不同中性粒子流体模型的准二维轴向-方位向模拟中，中性粒子轴向速度的时空演化。

对于轴向-方位向“1D Euler”和等温“1D Euler + ion momentum transfer”模拟案例，从图25(b)和(c)可以看出，这两种中性粒子模型产生的全局振荡频率非常相近（约15千赫），主要差异在于振荡振幅，而采用“1D Euler + ion momentum transfer”进行模拟时振幅更大。不过，采用“Full 1D Euler + ion momentum transfer”准二维模拟预测的全局振荡频率（图25(d)）约为10千赫，低于未解析中性粒子能量演化的模拟所得频率。

关于图25的最后一点，我们讨论图（e），该图展示了采用不含玻姆迁移率模型、仅包含特设壁面碰撞模型的“一维欧拉”中性粒子描述进行一维轴向模拟时各电流项的演化。对于这一模拟案例，电流非常低，而仅由壁面碰撞驱动的电子电流几乎为零。将该案例中的电流演化趋势与准二维模拟中的趋势进行比较，可以清楚地证明，单区域准二维模拟能够解析出足够的电子输运，从而维持放电并使系统达到准稳态。

图26展示了采用不同中性粒子模型的准二维模拟，以及采用“一维欧拉”模型的一维轴向无玻姆迁移率模拟所得到的等离子体和中性粒子特性的时间平均轴向分布。对于后一个模拟案例，其轴向分布在图26的各图中以黑色点线表示。我们观察到，由于缺乏足够的电子轴向迁移率，等离子体无法正常发展，因此总体离子数密度（图26(b)）远低于准二维模拟的结果。此外，图26(g)中一维轴向无玻姆迁移率模拟的电势斜率较小，与“一维欧拉”、等温“一维欧拉 + 离子动量传递”以及“完整一维欧拉 + 离子动量传递”模拟案例相比，其电场峰值明显更低（图26(a)）。

观察对应“仅连续性方程”准二维模拟的剖面，即图26中的蓝色曲线，可以发现这种情况下电势的轴向梯度也相当低，因此通道内的斜率几乎与无 Bohm 迁移率模拟的斜率相同。相应地，电场分布在出口平面附近（由黑色竖直虚线标示）及近羽流区呈现平台区。因此，“仅连续性方程”情况下的离子轴向速度（图26(c)）呈现非常缓慢的增长。

对于“仅连续性方程”情形，图26(d)中的电子动能分布在出口平面附近也呈现出平台状行为。

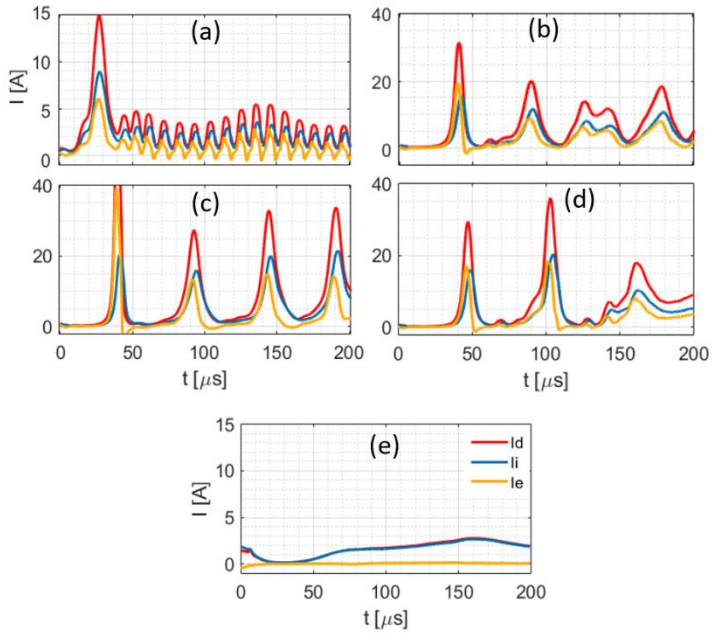


图25：采用中性粒子流体模型的准二维轴向-方位向模拟中各电流项的时间演化：(a)“仅连续性方程”，(b)“一维欧拉方程”，(c)等温“一维欧拉方程 + 离子动量传递”，以及(d)“完整的一维欧拉方程 + 离子动量传递”。图(e)作为参考，展示了无人为设定的电子迁移率时一维轴向模拟中各电流项的时间演化。

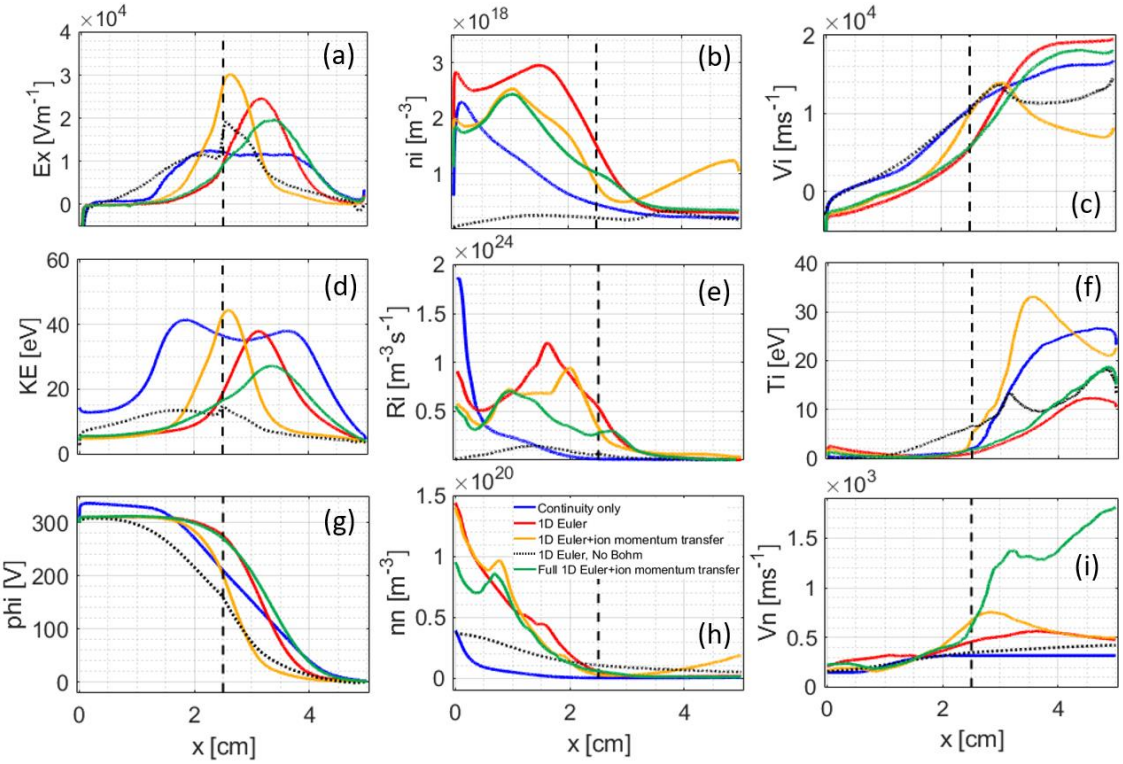


图26：采用不同中性粒子流体模型的准二维轴向-方位向模拟以及无人为设定迁移率的一维轴向模拟所得的等离子体和中性粒子特性的时间平均（在 200 μs 时间内）轴向分布：(a)轴向电场，(b)离子数密度，(c)离子轴向速度，(d)电子动能，(e)电离率，(f)离子温度，(g)电势，(h)中性粒子数密度，以及(i)中性粒子轴向速度。

关于采用“一维欧拉方程”、“一维欧拉方程 + 离子动量传递”和“完整一维欧拉方程 +离子动量传递”中性粒子模型的准二维模拟，可以看出，其时间平均剖面与

与此前讨论的另外两个模拟案例相比，尤其是这些案例的轴向电场峰值更高。此外，与第4.1节中相应的一维轴向模拟所得的电场分布相比，“一维欧拉”、“一维欧拉 + 离子动量传递”和“完整一维欧拉 + 离子动量传递”轴向-方位向模拟中的电场峰值位置均向下游偏移。此外，采用“完整一维欧拉 + 离子动量传递”模型的模拟中，电场峰值位置最靠外，其最大电场强度低于采用“一维欧拉”模型和等温“一维欧拉 + 离子动量传递”模型的模拟。这里的观察结果凸显了中性粒子流体模型的选择对等离子体性质分布的显著影响，尤其是在电子迁移率经过自洽求解时。

研究发现，采用“一维欧拉”模型的准二维模拟所得离子数密度分布，与文献 [15] 中报道的、采用相同中性粒子模型且模拟设置相近的完整二维轴向-方位向模拟所得分布相当相似。

最后，第4.1节和第4.2节解释了，在等温“ 一维欧拉方程 + 离子动量传递”情形下，由于出现了意料之外的激波，羽流中的中性粒子数密度不合理地升高、中性粒子轴向速度不合理地降低；采用该模型的准二维模拟中也能观察到这一现象。不过，与一维轴向模拟相比，激波对准二维模拟中的中性粒子以及随后对离子性质的影响较弱。此外，与一维轴向情形（第4.1节）类似，使用“完整一维欧拉方程 + 离子动量传递”模型时，准二维模拟不再呈现羽流中与等温“ 一维欧拉方程 + 离子动量传递”模拟的剖面相关的不合理特征。

4.6. 比较 采用不同中性粒子模型进行的模拟所得到的整体性能参数 **ls**

		I_d [A]	I_i [A]	I_e [A]	T [mN]	I_{sp} [s]	η_T [%]
Q2D 轴向-方位向	仅连续性方程	2.51	1.8	0.71	48	1743	30.5
	一维欧拉方程	7.3	4.2	3.08	92.8	2046	39.3
	一维欧拉方程 + 离子动量传递	8.55	5.63	2.92	64	883	16
	完整的一维欧拉方程 + 离子动量传递	6.5	3.88	2.62	97	1815	48
一维轴向 采用 Bohm （流体中性粒子模型）	仅连续性方程	8.11	3.44	4.67	94	2052	36.3
	一维欧拉方程	7.99	3.70	4.29	93	1897	36
	一维欧拉方程 + 离子动量传递	7.73	4.00	3.72	33.7	495	5
	完整的一维欧拉方程 + 离子动量传递	8.05	3.61	4.44	84.5	1733	29.6
一维轴向 采用 Bohm （动力学直接模拟蒙特卡洛方法 中性粒子模型）	中性粒子-中性粒子碰撞	8.25	3.74	4.51	96	1973	37.6
	中性粒子-中性粒子碰撞 + 电荷交换与动量交换 离子-中性粒子碰撞	4.04	1.54	2.5	44.4	1952	16
参考	一维欧拉方程，无Boh	1.59	1.55	0.04	25	1468	13
	LANDMARK	8.15 – 8.36	3.67 – 3.68	4.48 – 4.67	---	---	---
	实验	4.5	---	---	83	1600	50

表3：汇总了采用不同中性粒子动力学模型进行模拟所得的预测性能参数。另列出一些参考值以供比较。LANDMARK 数据取自参考文献 [25],，而实验性能数据取自参考文献 [36]。

表3比较了采用不同中性粒子动力学模型进行的一维轴向模拟和准二维轴向-方位角模拟所得的整体性能参数。作为参考，表中还列出了无Bohm迁移率的一维轴向模拟的性能数值，以及在可获得时列出LANDMARK一维轴向情形和参考文献[36] 所提供的SPT100实验结果。放电电流、离子电流和电子电流采用参考文献[22]中的方法计算。我们模拟所得的推力（T）、比冲（I_{sp}）和推力效率（η_T）均包含离子和中性粒子的贡献，并根据公式20–22计算。

关于表3中性能数据，首先需要指出的是，采用玻姆输运模型的“仅连续性方程”一维轴向模拟所得电流项数值，与文献 [25] 中 LANDMARK 案例报告的数值非常一致。此外，“一维欧拉”轴向模拟所得的电流项也与相应的 LANDMARK 数值相当吻合。

需要强调的第二点是，采用“一维欧拉”中性粒子流体模型的一维轴向模拟所得性能参数，与采用动力学“中性粒子-中性粒子 DSMC”模型描述中性粒子的一维轴向模拟所得性能参数相当一致。

第三点是，准二维“一维欧拉”模拟预测的推力与实验值相比误差约为10%，而比冲的误差约为20%。有趣的是，采用“完整一维欧拉 + 离子动量传递”模型的准二维模拟所预测的性能与实验值相当接近，其中放电电流、推力、比冲和推力效率的误差分别为44%、17%、13%和4%。在考虑这些误差是否可接受时，当然应注意到，准二维模拟缺乏对等离子体-壁面相互作用的自洽描述，而是采用了特设壁面模型。第4.4节表明，特设壁面模型会显著影响性能预测，尤其是放电电流。因此，预测的性能参数可能无法直接与实验值进行比较。尽管如此，“一维欧拉”和“完整一维欧拉 + 离子动量传递”模拟所得的性能预测仍然是合理的。此外，将这两个模拟案例的性能值与一维轴向无玻姆迁移率模拟所得的性能值进行比较，可以观察到，在最简单的单区域实现中，准二维模拟对电子迁移率进行自洽求解后，性能预测得到了改善。

第四，在采用等温“ 一维欧拉+ 离子动量传递”中性粒子模型的一维轴向和准二维模拟中，观察到性能显著下降。性能下降的根源在于，该中性粒子流体模型夸大了离子-中性粒子动量交换对模拟的影响。尽管如此，再次观察到，过度预测离子-中性粒子动量传递所产生的影响在准二维模拟中较小。在一维轴向和准二维轴向-方位向模拟中，考虑离子-中性粒子动量传递时求解中性粒子的能量方程，消除了性能不切实际地下降的问题。

最后，在采用动力学“n-n + i-n”中性粒子直接模拟蒙特卡罗模型的一维轴向模拟中，性能预测偏低的主要原因是未能解析中性粒子的径向膨胀。第4.2节指出，这会导致中性粒子与离子物种之间的动量交换被不切实际地增强，进而显著提高中性粒子轴向速度，导致电离效率降低，并随后造成推力下降。因此可以得出结论，对于不解析径向坐标的霍尔推力器粒子网格模拟，动力学“n-n + i-n”中性粒子直接模拟蒙特卡罗模型并非合适的选择。

第5节：结论

在本研究中，我们全面考察了用于解析中性粒子组分动力学的模型选择对霍尔推力器等离子体放电的动力学轴向及轴向-方位向粒子模拟结果的影响。总体而言，我们发现，用于解析中性粒子动力学的模型会显著改变模拟预测结果。具体来说，系统达到准稳态时，放电特性的时空演化、时间平均剖面以及呼吸模振荡的特征，都强烈依赖于所采用的中性粒子模型。

我们开展了一维轴向 PIC 模拟，其中采用了用于描述电子轴向输运和电子-壁面碰撞的特设模型。对于这些模拟，我们使用了中性粒子的流体模型和动力学 DSMC 模型。对于后者，我们根据 DSMC 模块中是仅处理中性粒子-

中性粒子碰撞，还是同时考虑中性粒子-中性粒子碰撞和离子-中性粒子碰撞，实现了 DSMC 算法的两种变体。

中性粒子的流体描述基于一维欧拉方程组。在这方面，我们将本研究中的PIC模拟与多种中性粒子流体模型耦合，这些模型之间的区别在于保留了欧拉方程组中的哪些方程。所用的最简单流体模型仅求解中性粒子密度的演化，称为“仅连续性”模型。通过求解等温中性粒子的连续性方程和动量方程，并采用欧拉守恒方程的一个子集，我们同时求解了中性粒子密度和速度的演化，并将其简称为“一维欧拉”模型。此外还使用了两种中性原子流体模型，二者均将离子-中性粒子动量传递作为额外源项纳入方程。不过，其中一种名为“完整一维欧拉 + 离子动量传递”模型，包含中性粒子的连续性方程、动量方程和能量方程；另一种则仅求解等温中性原子的连续性方程和动量方程，因此称为“一维欧拉 + 离子动量传递”模型。

通过轴向 PIC 模拟，我们强调，等离子体性质的时间演化及其时间平均分布显著取决于用于描述中性粒子性质动力学的模型。关于这一点，轴向模拟得出的三个主要结论是：(1) 对中性粒子采用“1D Euler”流体模型，能够很好地代表采用中性粒子间 DSMC 碰撞的动力学描述，因此，在时间平均等离子体性质和整体性能参数方面，采用任一模型的轴向 PIC 模拟所得预测都高度相似；(2) 存在离子-中性粒子碰撞时，离子与中性粒子之间的能量交换会使中性原子的温度显著升高，这意味着等温“1D Euler + 离子动量传递”模型无法准确解析中性流动特性的变化。(3) 对于未解析径向坐标的 PIC 模拟，考虑离子-中性粒子碰撞的“n-n + i-n DSMC”模型并不合适。这是因为未能捕捉中性粒子沿径向的膨胀，会导致离子-中性粒子碰撞频率被高估，进而过度影响羽流中中性粒子和离子的性质。

通过采用对中性粒子使用不同流体描述的一维轴向 PIC 模拟，我们还评估了阳极处离子复合的影响。结果发现，在“仅连续性”模型中，这一现象对模拟结果没有明显影响。然而，在“一维欧拉”和“一维欧拉 + 离子动量传递”模型中，阳极离子复合会使近阳极中性粒子与等离子体密度升高，同时也会提高放电电流振荡的频率和振幅。

我们还在采用“仅连续性”模型的一维轴向模拟中研究了电子-壁面碰撞的影响。研究发现，壁面碰撞会提高电子轴向迁移率并限制其动能，从而影响放电的时空演化以及等离子体在稳态下的状态。此外，从性能参数来看，壁面碰撞会导致放电电流和推力增加，但比冲和推力效率下降。

在轴向-方位角构型中，我们采用与轴向模拟相同的一组中性粒子流体模型，进行了降阶单区域准二维模拟。准二维模拟自洽地解析了电子轴向迁移率，但对电子-壁面碰撞采用了特设描述。这些模拟表明，对于所有中性粒子流体模型，轴向-方位向问题的一阶单区域近似所捕捉到的轴向平均不稳定性诱导的电子迁移率，使放电得以维持，并使准稳态下能够形成周期振荡。

然而，采用“仅连续性”模型的模拟被发现会预测放电具有快速的全局动力学，其频率约为 100 kHz，且等离子体性质呈现出独特的时间平均分布。因此得出结论：在对电子迁移率进行自洽描述的模拟中，“仅连续性”模型并不适用。

相比之下，研究发现，“一维欧拉方程”和“完整一维欧拉方程+ 离子动量传递”准二维模拟能够对等离子体性质的分布以及整体性能参数做出合理预测，尤其是推力、比冲和推力效率。

最后，在一维轴向和准二维轴向-方位向模拟中，通过采用“完整一维欧拉方程 + 离子动量传递”模型求解中性粒子的能量方程，修正了等温“一维欧拉方程 + 离子动量传递”模型对羽流中性粒子特性所做的不切实际的预测。

值得注意的是，尽管本文未予展示，我们采用中性粒子动力学“中性粒子-中性粒子 DSMC”模型进行的初步准二维轴向-方位向模拟表明，模拟结果似乎与本文报道的流体“一维欧拉方程”准二维模拟结果一致。

附录：中性粒子流体模型的基准测试

1. Sod 激波管问题

我们对著名的 Sod 激波管问题 [37] 进行了模拟，以验证中性粒子流体模型的基本实现。该问题由一个无源一维欧拉方程组描述，其中包括连续性方程、动量方程和能量守恒方程。

图 27 所示的模拟区域由一根管道组成，管道中间由隔膜隔开高压区域和低压区域。各区域内的气体性质均匀，并作为初始条件给出。在 t_0，隔膜被移除，高压区域的气体迅速膨胀至低压区域。根据理论，这会伴随膨胀扇和激波的产生。两者之间存在一个接触间断，将熵（或总能量）不同的区域分隔开。鉴于该问题中存在间断，采用 HLLC 黎曼求解器计算单元间通量是合理的，因为它能够恰当地解析解中的间断，这是其一大优势。

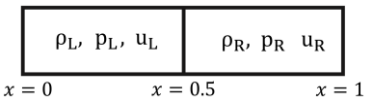


图 27：Sod 激波管基准问题的模拟区域

为进行模拟，选取了 1 m 的计算域长度、0.2 s 的总模拟时间以及两种不同的单元尺寸。采用 $N = 200$ 个单元进行模拟，并将结果与采用 8000 个单元进行模拟所得的高分辨率解进行比较，以验证结果的准确性；该高分辨率解实际上相当于解析解。计算域两端均采用狄利克雷边界条件。采用 0.5 的 CFL 条件，并使用式 A.1 中的初始条件：

$$\begin{pmatrix}\rho_L\\ p_L\\ u_L\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1.0\\ 1.0\\ 0.0\end{pmatrix}\quad \text{for } x<0.5,\quad \text{and}\quad \begin{pmatrix}\rho_R\\ p_R\\ u_R\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0.125\\ 0.1\\ 0.0\end{pmatrix}\quad \text{for } x>0.5. \qquad \text{(Eq. A. 1)}$$

图 28 展示了采用两种计算单元数量进行模拟的结果。可以看出，采用 200 个单元得到的近似解与采用 8000 个单元得到的高分辨率解高度吻合；后者与该问题的稳态解完全重合。对于采用 200 个单元的模拟，仅在不连续面附近观察到轻微的数值振荡。此外，膨胀扇以及接触不连续面和激波不连续面引起的气体性质变化均得到了准确捕捉。以上观察结果证实，中性粒子流体模型得到了准确实现。

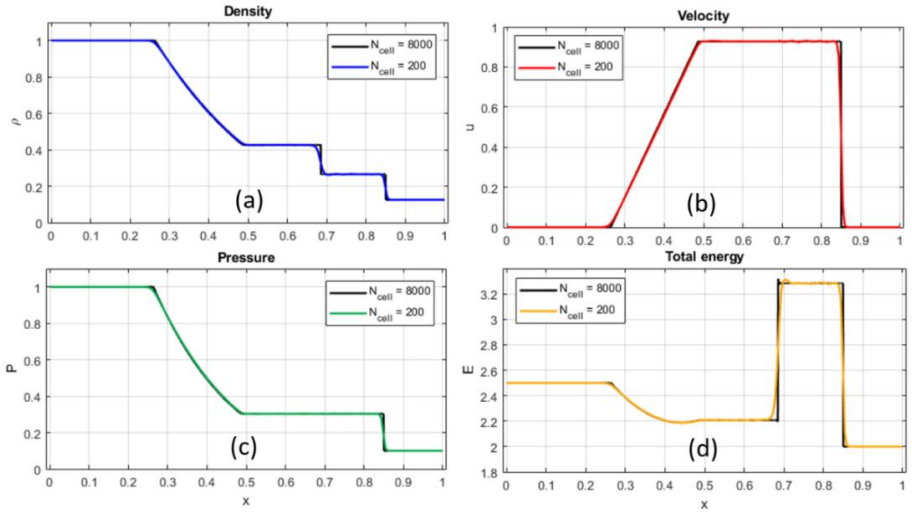


图 28：Sod 测试问题模拟结束时中性粒子流体模型给出的中性粒子特性分布；(a) 密度 (ρ)、(b) 速度 (u)、(c) 压力 (p) 和 (d) 总能量 (E)。

2. 简化的霍尔推力器等温中性粒子问题　　粒子

这项测试参考文献 [15]，的方法设计，旨在评估第 3.1 节所述中性粒子流体模型在具有代表性的霍尔推力器模拟案例中的准确性。我们考虑一个长度为 4 cm 的一维轴向计算域。如图 29 所示，该域内施加了高斯电离源。控制方程组对应于方程 2–4，边界条件则分别与计算域阴极侧和阳极侧的方程 8 及方程 9–11 相同。我们在此验证中采用了欧拉方程组的三种变体：其中两种分别与第 3.1 节介绍的“仅连续性方程”模型和“一维欧拉”模型相同；第三种为完整欧拉方程组（连续性方程、动量方程和能量方程），并采用专门的能量源项（$\frac{E-E_0}{\tau}$），该方法取自文献 [15]，，以确保中性粒子保持等温。τ在该源项的关系式中，E 表示中性粒子的比总能，E_0 表示根据初始中性粒子温度（640 K）计算的比总能，τ 为弛豫因子，其值根据文献 [15] 设为 10^{-8} 。

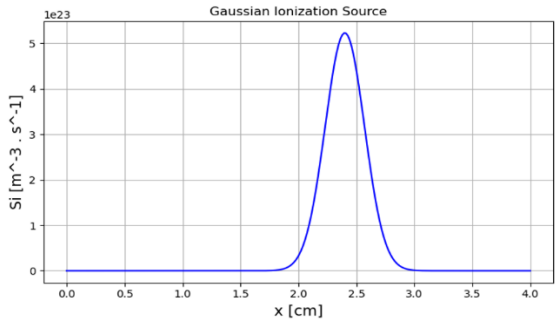


图 29：教授　霍尔推力器中施加的电离源分布　　测试问题

初始中性粒子密度和速度分布以蓝色虚线显示于图 30 中。本文考虑质量流率为 5 mg/s，初始中性粒子速度为 200 m/s 的情形。模拟采用 200 个单元和 0.5 的 CFL 条件，运行时间为 2 ms。图 30 的 (a) 至 (c) 展示了系统达到稳态时中性粒子特性（密度、速度和压力）的分布。从图中可以看出，对于等温中性粒子的情况，“一维欧拉”模型所得结果与求解完整欧拉方程组所得结果无法区分。

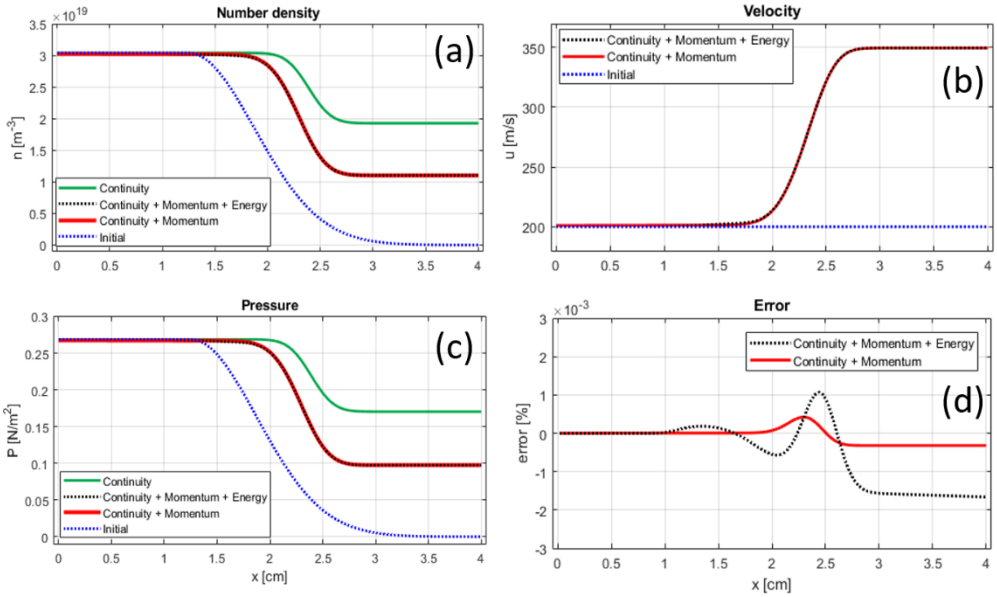


图 30：简化霍尔推力器问题中中性粒子流体模型的验证结果；图中展示了模拟开始和结束时各种中性粒子特性的分布；(a) 中性粒子密度，(b) 轴向速度，(c) 中性粒子压力（$p = nk_BT$）。图 (d) 展示了根据方程 A.3 计算得到的误差分布。

为定义结果的误差指标，我们采用公式 A.2 给出的特征关系。该关系是将等温中性粒子的连续性方程和状态方程代入动量方程，并对所得常微分方程积分后得到的。

$$\frac{1}{2}u^2 + \frac{k_B T}{M}\ln(\rho) = C;\ \text{with}\ C = \frac{1}{2}u_0^2 + \frac{k_B T_0}{M} ln(\rho_0). \quad \text{(Eq. A. 2)}$$

常数 C 在阳极边界处确定，每个单元中的中性粒子密度和速度局部值都必须满足公式 A.2。因此，误差项定义如下，其分布如图 30(d) 所示：

$$error = \frac{\frac{1}{2}u^2 + \frac{K_B T}{M}\ln(\rho) - C}{C}. \quad \text{(Eq. A. 3)}$$

从图 30(d)可以明显看出，“一维欧拉方程”和等温全欧拉方程组模型所得解的误差约为 10^{-3} %，这是完全可以接受的。

致谢：

本研究在“用于创新实现太空探索的先进空间推进（ASPIRE）”项目框架内开展。ASPIRE 项目获得了欧盟地平线 2020 创新计划的资助，资助协议编号为 101004366。本文所述观点绝不能被视为欧盟委员会的官方意见。

作者还谨此感谢帝国理工学院研究计算服务提供的计算资源和支持（http://doi.org/10.14469/hpc/2232）。

数据可用性声明：

支持本研究结论的数据可在合理请求后向通讯作者索取。

参考：

[1] Barral S、Ahedo E，《霍尔放电中呼吸振荡的低频模型》，《物理评论 E》79，046401（2009年）[2] Boeuf JP，《教程：霍尔推力器的物理与建模》，《应用物理学杂志》121，011101（2017年）[3] Reid BM，《中性粒子流率对霍尔推力器运行的影响》，博士论文，密歇根大学（2009年）[4] Coche P、Garrigues L，《霍尔推力器的二维（方位角–轴向）粒子模拟模型》，《等离子体物理》21，023503（2014年）[5] Kaganovich I.D. 等，《与等离子体推进及类似技术相关的 E × B 放电物理》，《等离子体物理》27，120601（2020年）[6] Taccogna F 和 Garriguez L，《霍尔推力器等离子体建模的最新进展》，《现代等离子体物理评论》，新加坡施普林格，3（1）（2019年）[7] Taccogna F，《低温等离子体模拟的蒙特卡罗碰撞法》，《等离子体物理学杂志》，剑桥大学出版社，81（1）（2015年）[8] Alexander FJ、Garcia AL，《直接模拟蒙特卡罗法》，《物理学中的计算机》11，588（1997年）[9] Taccogna F、Longo S、Capitelli M、Schneider R，《等离子体推力器的动力学模拟》，《等离子体源科学与技术》17，024003（2008年）。[10] Cho S、Watanabe H、Kubota K、Iihara S、Fuchigami K、Uematsu K、Funaki I，《通过轴向–径向全动力学粒子模拟研究霍尔推力器中的电子输运》。《等离子体物理》22（10），103523（2015年）[11] Mikellides IG、Katz I，《在磁场对齐网格上对霍尔效应等离子体加速器进行数值模拟》，《物理评论 E》86，046703（2012年）

[12] Perales-Díaz J、Domínguez-Vázquez A、Fajardo P、Ahedo E、Faraji F、Reza M、Andreussi T，《磁屏蔽霍尔推力器的混合等离子体模拟》，《应用物理学杂志》131，103302（2022年）[13] Ahedo E、Gallardo JM、Martínez-Sánchez M，《具有热传导的霍尔推力器等离子体放电模型》，《等离子体物理》9，4061（2002年）Joncquieres V、Pechereau F、Alvarez Laguna A、Bourdon A、Vermorel O、Cuenot B，《霍尔效应推力器中含鞘层等离子体的十矩流体数值求解器[14] 》，美国航空航天学会 2018-4905，第54届美国航空航天学会/美国机械工程师学会/美国汽车工程师学会/美国工程教育学会联合推进会议及展览（2018年）[15] Charoy T，《霍尔推力器中电子输运的数值研究》，等离子体物理学 [physics.plasm-ph], 巴黎综合理工学院。英语。NNT: 2020IPPAX046 t el-02982367（2020年）[16] Lafleur T 和 Chabert P，《不稳定性增强摩擦在霍尔效应推力器“异常”电子和离子输运中的作用》，等离子体源科学与技术 27，015003（2018年）Petronio F、Charoy T、Alvarez Laguna A、Bourdon A、Chabert P，《霍尔推力器中静电不稳定性的二维效应[17] 。I. 粒子模拟与双点功率谱密度重构技术的见解》，《等离子体物理》30，012103（2023年）[18] Pan R、Ren J、Mao R、Tang H，《霍尔推力器粒子模拟中不同中性粒子算法的实用分析》，《等离子体源科学与技术》32，034005（2023年）[19] Domínguez-Vázquez A、Cichocki F、Merino M、Fajardo P、Ahedo E，《利用二维和三维粒子代码对轴对称等离子体羽流进行表征》，《等离子体源科学与技术》27，104009（2018年）[20] Dale ET、Jorns BA，《霍尔推力器呼吸模态动力学的实验表征》，《应用物理学杂志》130，133302（2021年）[21] Chapurin O、Smolyakov AI、Hagelaar G、Boeuf JP、Raitses Y，《霍尔推力器中电离不稳定性的流体与混合模拟》，《应用物理学杂志》132，053301（2022年）[22] Faraji F、Reza M、Knoll A，《改进一维粒子模拟，以自洽地解析霍尔推力器中不稳定性诱导的电子输运》。J. Appl. Phys. 131，193302（2022年）[23] Reza M、Faraji F、Knoll A，《广义降阶粒子模拟方案的概念及其在轴向–方位角霍尔推力器构型中的验证》，J. Phys. D: Appl. Phys. 56，175201（2023年）[24] Faraji F、Reza M、Knoll A，《广义降阶粒子模拟方案在径向–方位角 E×B 等离子体构型中的验证》，《AIP进展》13，025315（2023年）[25] Landmark项目网页：https://jpb911.wixsite.com/landmark/test-case-3，访问日期：2023年1月18日[26] Vahedi V、Surendra M，《粒子模拟方法的蒙特卡罗碰撞模型：在氩和氧放电中的应用》，《计算物理通讯》87，179–198（1995年）[27] Hagelaar GJM、Bareilles J、Garrigues L、Boeuf JP，《稳态等离子体推力器的二维模型》，J. Appl. Phys. 91，5592（2002年）[28] Toro EF、Spruce M、Speares W，《HLL黎曼求解器中接触面的恢复》，《冲击波》4（1994年）[29] Pawar S、San O，《CFD Julia：构建计算流体力学导论课程的学习模块》，《流体》4，159（2019年）

[30] Adam JC, Heron A, Laval G, 《采用二维全动理学模拟研究稳态等离子体推力器》, 《等离子体物理》11, 295（2004）[31] Bird GA, 《分子气体动力学》, 克拉伦登出版社, 伦敦（1976）[32] Birdsall CK, Langdon AB, 《通过计算机模拟研究等离子体物理》, CRC出版社（1991）[33] Reza M, Faraji F, Knoll A, 《使用降阶粒子网格方案解析霍尔效应推力器中的多维等离子体现象》, 《电推进杂志》1, 19（2022）[34] Choueiri EY, 《霍尔推力器中的等离子体振荡》, 《等离子体物理》8, 1411-1426（2001）Petronio F, Charoy T, Alvarez Laguna A, Bourdon A, Chabert P, 《静电不稳定性对霍尔推力器的二维效应。I. 粒子模拟与双点功率谱密度重构技术的研究结果》[35] 《等离子体物理》30, 012103（2023）[36] Panelli M, Morfei D, Milo B, D'Aniello FA, Battista F, 《霍尔效应推力器的轴对称混合等离子体模型》, 《Particles》4（2021）[37] Sod GA, 《非线性双曲守恒律方程组若干有限差分法综述》, 《计算物理学杂志》27（1978）