arXiv:2304.05968v1 [physics.plasm-ph] 12 Apr 2023

电感耦合等离子体放电的自洽建模

Alessandro Munafò, [a)] Sanjeeev Kumar, [b)] 以及 Marco Panesi[c)]高超声速与进入系统研究中心（CHESS），伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校，陶瓷楼，南古德温大道105号，厄巴纳，伊利诺伊州 61801（美国）

摘要。本文旨在开发一种用于ICP放电的自洽多物理场建模框架。与单体式方法不同，流体动力学和电磁场由独立的求解器处理，这些求解器均由伊利诺伊大学高超声速与进入系统研究中心（CHESS）开发。流体动力学采用 HEGEL 建模，这是一种用于非平衡等离子体的有限体积求解器。该求解器与 PLATO 库相连接，由后者负责计算所有与等离子体相关的量（例如热力学性质和输运性质）。电场由 FLUX 处理，这是一种有限元求解器。通过开源库 PRECICE 实现耦合。本文介绍并讨论了相关应用，以展示所提出建模策略的有效性。

引言

电感耦合等离子体（ICPs）有广泛的应用，包括喷雾工艺 [1], 废物处理 [2], 电弧焊接 [3], 等离子切割 [4], 纳米粉末制备 [5], 以及大气层进入飞行器热防护系统（TPS）材料的测试。

在上述应用中，等离子体通常通过适当设计的炬产生。在最简单的构型中，等离子体炬由一根石英管组成，石英管周围环绕着由一系列载流环组成的感应线圈。流经电感器的射频电流会在气体中感应出环向电流，气体因欧姆耗散而被加热 [6, 7]。如果所供能量足够大，炬内的气体就可能发生电离，并达到甚至超过10000K 的温度。由于加热是通过电磁感应进行的，电感耦合等离子体基本上不会受到污染。电弧风洞设施则并非如此，因为电极侵蚀产生的材料碎片可能会改变等离子体组成，并对诊断技术（例如光谱学）产生不良影响。

处于或接近大气压下的电感耦合等离子体通常被称为热等离子体 [7]，因为自由电子与重粒子（即原子和分子）之间的大量碰撞确保了它们的温度几乎相等。在此基础上，高压电感耦合等离子体通常采用局部热力学平衡（LTE）假设进行建模。从计算角度来看，这种选择很有吸引力，因为流体控制方程仍然是全局质量、动量和能量平衡关系 [8, 9, 10, 11, 12, 13]。 [14] 唯一的复杂之处在于，热力学性质和输运性质取决于温度和压力；这一问题可以利用适当的查找表或曲线拟合来处理 [15]。

然而，在某些情况下，局部热力学平衡假设会失效。除了低压感应耦合等离子体之外，即使在大气压附近，非局域热力学平衡（NLTE）效应也可能很重要。例如，等离子体射流的边缘区就是这种情况，此处冷腔室气体被热层流核心卷吸[16]。随后的混合最终会导致向湍流转变，这本质上是一个非平衡过程，涉及扩散以及复合和退激。此外，即使在炬出口处非平衡效应可能可以忽略，放电过程中等离子体状态仍可能受到非局域热力学平衡的影响 [17, 18]。在这些情况下，局部热力学平衡模拟往往会高估温度，并导致对等离子体体积的化学组成和大小产生显著误差。将模拟与实验进行比较时，必须考虑这些事实。

由上述讨论可知，对感应耦合等离子体放电或风洞进行建模，本质上是一个多物理场问题，需要耦合等离子体动力学与电磁现象。此外，值得重申的是，实际的感应耦合等离子体装置总会存在一定程度的非定常性，这是由流体动力学不稳定性、湍流和/或电弧重燃造成的 [19]。尽管如此，模拟主要采用工程湍流模型（例如雷诺平均纳维–斯托克斯）进行稳态计算。

a）通讯作者：munafo@illinois.edu b）电子邮箱：sanjeeev4@illinois.edu c）电子邮箱：mpanesi@illinois.edu

本文旨在为 ICP放电开发一个计算框架。与单体式方法不同，等离子体流体动力学和电磁场的建模依赖于分别开发的内部求解器。流体动力学采用 HEGEL [20], 建模，该软件是用于局部热力学平衡/非局部热力学平衡等离子体的有限体积求解器。电场仿真则通过 FLUX 实现；它是一个基于 MFEM 库 [22, 23]开发的有限元求解器 [21] 。耦合通过开源库 PRECICE [24] 实现。

本文结构如下：首先介绍物理模型，随后简要介绍计算框架。接着介绍并讨论局部热力学平衡/非局部热力学平衡等离子体放电的应用。最后概述结论与未来工作。

物理模型

等离子体

本文研究的等离子体由自由电子、中性粒子和离子构成，均建模为理想气体（例如，不考虑压力电离 [25]）。等离子体组分/物种存储在集合 $\mathscr{S} = \{\mathrm{e}^-\} \cup \mathscr{S}_\mathrm{h}$ 中，其中符号 e^- 表示自由电子。重粒子子集 $\mathscr{S}_\mathrm{h}$ 包含原子和分子： $\mathscr{S}_\mathrm{h} = \mathscr{S}_\mathrm{a} \cup \mathscr{S}_\mathrm{m}$。在这里，物种一词既可指多温度（MT）模型 [26, 27, 28], 中的 N_2 或 NO^+ 等化学组分，也可指逐态（StS） [29, 30, 31, 32, 33,34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44] 或分组方法 [45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58,59, 60, 61, 62] 中的单个束缚态/组（例如 N(i)）。在这两种情况下，重粒子和自由电子都被赋予不同的平动温度（分别为 $\mathrm{T_h}$ 和 $\mathrm{T_e}$），以考虑电子-重粒子碰撞中能量传递效率低下所导致的潜在热非平衡。

通过 Chapman-Enskog（CE）展开求解玻尔兹曼方程 [63, 64, 65, 66, 67, 68, 69,70, 71]），可得到非局部热力学平衡控制方程，以及热力学、输运和动力学过程的本构关系。此处展开在一阶处截断；对于由无内能粒子构成的纯气体，分别得到描述黏性应力和热流的牛顿定律与傅里叶定律。动力学过程（例如电离）则按麦克斯韦反应机制 [64, 65, 71] 处理。

热力学 鉴于理想气体假设，等离子体压力根据道尔顿定律得出：$\mathrm{p} = \mathrm{p_h} + \mathrm{p_e}$，其中自由电子和重粒子的分压分别为 $\mathrm{p_h} = \mathrm{n_h k_B T_h}$ 和 $\mathrm{p_e} = \mathrm{n_e k_B T_e}$，$\mathrm{k_B}$ 为玻尔兹曼常数。符号 $\mathrm{n_e}$ 和 $\mathrm{n_h}$ 分别表示自由电子和重粒子的数密度，其中 $\mathrm{n_h} = \sum_{s\in\mathscr{S}_\mathrm{h}} \mathrm{n}_s$。引入摩尔分数 $\mathrm{X}_s = \mathrm{n}_s/\mathrm{n}$ 后，可由压力求得数密度：

$$n = \frac{p}{k_\mathrm{B} T_\mathrm{h} \left[1 + X_\mathrm{e} \left(T_\mathrm{e}/T_\mathrm{h} - 1\right)\right]}. \tag{1}$$

等离子体密度为 $\rho = \sum_{s\in\mathscr{S}} \rho_s$，其中各组分密度为 $\rho_s = \mathrm{m}_s \mathrm{n}_s$，$\mathrm{m}_s$ 是 s 的（粒子）质量。各物种的单位质量能量为 [72, 73]:

$$e_s = \begin{cases} e_s^\mathrm{tr}(T_\mathrm{e}), & s = \mathrm{e}^-, \\ e_s^\mathrm{tr}(T_\mathrm{h}) + e_s^\star + \Delta h_s^\mathrm{f}, & s \in \mathscr{S}_\mathrm{h}, \end{cases} \tag{2}$$

其中平动贡献为 $\mathrm{e}_s^\mathrm{tr}(\mathrm{T}) = 3/2(\mathrm{k_B T}/\mathrm{m}_s)$ [74]。符号 $\Delta\mathrm{h}_s^\mathrm{f}$ 表示绝对生成焓，包含生成和激发（采用 StS 方法时）所对应的焓。剩余项 $\mathrm{e}_s^\star$表示储存在集合 $\mathscr{G}$中的热化内部自由度（例如转动、振动）的能量：

$$e_s^\star = e_s^\star(\tilde{T}_1, \ldots, \tilde{T}_m) = \sum_{g\in\mathscr{G}} e_{sg}^\star(\tilde{T}_1, \ldots, \tilde{T}_m), \quad s \in \mathscr{S}_\mathrm{h}, \tag{3}$$

~ ~其中，T1、.....、T_m是所考虑的非局部热力学平衡公式中的内部温度（例如振动温度、电子温度），具体取决于所采用的方案（例如多温度方案、分组方案）。

借助上述定义，等离子体、自由电子以及热化内部自由度的单位质量能量可写为：

$$e = \sum_{s\in\mathscr{S}_\mathrm{h}} y_s \left[e_s^{\mathrm{tr}}(T_\mathrm{h}) + \Delta h_s^{\mathrm{f}} \right] + \sum_{g\in\mathscr{G}} \tilde{e}_g + \tilde{e}_\mathrm{e}, \tag{4a}$$

$$\tilde{e}_g = \sum_{s\in\mathscr{S}_\mathrm{h}} y_s e_{sg}^{\star}(\tilde{T}_1, \ldots, \tilde{T}_m), \quad g \in \mathscr{G}, \tag{4b}$$

$$\tilde{e}_\mathrm{e} = y_\mathrm{e} e_\mathrm{e}^{\mathrm{tr}}(T_\mathrm{e}), \tag{4c}$$

其中质量分数为 $\mathrm{y}_s = \rho_s/\rho$。

输运 CE方法的应用可得输运通量的显式表达式。在一阶近似下，这些通量与速度、温度等宏观量的梯度呈线性关系，比例系数即为输运性质。前者由括号积分给出，实际计算时通常采用索尼恩-拉盖尔多项式展开 [63, 64]。此处忽略热扩散等次要效应。不过，ICP建模框架中已包含这些效应。以下仅列出主要结果（详情请参阅上述动理学理论相关参考文献）。

黏性应力由牛顿定律给出：

$$\tau = \mu \left[\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^{\mathrm{T}} - \frac{2}{3}(\nabla\cdot\mathbf{v})\mathrm{I} \right], \tag{5}$$

其中，上标 T 表示转置，I 表示单位张量。在第一索尼恩-拉盖尔近似下，动力黏度为 [64]：

$$\mu = \mathbf{z}_\mathrm{h}^{\mu} \cdot \mathbf{X}_\mathrm{h}, \tag{6}$$

其中，向量 X_h 存储重粒子的摩尔分数。z^{μ} 的各分量是以下线性代数方程组的解：

$$\mathbf{G}^{\mu}\mathbf{z}_\mathrm{h}^{\mu} = \mathbf{X}_\mathrm{h}, \tag{7}$$

其中 G^{μ} h 是重粒子子系统的黏度对称输运矩阵。由于自由电子的质量很小 [66]，因此不会产生黏性应力。

扩散速度 U_s 满足斯特凡-麦克斯韦方程：

$$\sum_{p\in\mathscr{S}} G_{p\mathrm{e}}^{U}\mathbf{U}_p - \kappa_\mathrm{e}\frac{T_\mathrm{h}}{T_\mathrm{e}}\mathbf{E} = -\mathbf{d}_\mathrm{e}'\frac{T_\mathrm{h}}{T_\mathrm{e}}, \tag{8a}$$

$$\sum_{p\in\mathscr{S}} G_{ps}^{U}\mathbf{U}_p - \kappa_s\mathbf{E} = -\mathbf{d}_s', \quad s \in \mathscr{S}_\mathrm{h}, \tag{8b}$$

其中，G_{sp}^{U} 是对称斯特凡-麦克斯韦矩阵 G^{U}的元素，而 E 是电场。一般而言，后者同时考虑外部源和等离子体内部的电荷分布（即自感电场）。κ_s 定义为 $\kappa_s = (\mathrm{X}_s\mathrm{Q}_s - \mathrm{y}_s\mathrm{Q})/\mathrm{k}_\mathrm{B}\mathrm{T}_\mathrm{h}$，其中等离子体电荷为 $\mathrm{Q} = \sum_{s\in\mathscr{S}}\mathrm{X}_s\mathrm{Q}_s$，而 Q_s 表示 s 的电荷。式（8）中的修正扩散驱动力为：

$$\mathbf{d}_s' = \left(\frac{p}{nk_\mathrm{B}T_\mathrm{h}}\right)\nabla X_s + \left(\frac{X_s - y_s}{nk_\mathrm{B}T_\mathrm{h}}\right)\nabla p, \quad s \in \mathscr{S}. \tag{9}$$

值得一提的是，d_s' 并非相互独立，因为 $\sum_{s\in\mathscr{S}}\mathrm{d}_s' = \mathbf{0}$，直接计算即可得出这一点。对于本研究所考虑的 ICP 模拟，方程（9）可简化如下。由于压力基本保持不变，右侧第二项可以舍去。此外，如果重粒子温度与自由电子温度之间的差异不太大，则压力变为 $\mathrm{p} \simeq \mathrm{n}\,\mathrm{k}_\mathrm{B}\mathrm{T}_\mathrm{h}$，从而得到 $\mathrm{d}_s' \simeq \nabla\mathrm{X}_s$。

通过联立求解方程（8）、质量守恒方程和双极扩散约束，可求得扩散速度；将这些方程结合后可得 $\sum_{s\in\mathscr{S}}\kappa_s\mathrm{U}_s = \mathbf{0}$ [68]。结合前述关系求解方程（8），即可得到扩散速度和（双极）电场。

对于多组分非局域热力学平衡等离子体，总热流、内热流和自由电子热流分量均包含热传导和质量扩散，其表达式如下：

$$\mathbf{q} = -\lambda_{\mathrm{h}}\nabla T_{\mathrm{h}} + \sum_{s\in\mathscr{S}_{\mathrm{h}}} \mathbf{J}_s \left[h_s^{\mathrm{tr}}(T_{\mathrm{h}}) + \Delta h_s^{\mathrm{f}}\right] + \sum_{g\in\mathscr{G}} \tilde{\mathbf{q}}_g + \mathbf{q}_{\mathrm{e}}, \tag{10a}$$

$$\tilde{\mathbf{q}}_g = -\tilde{\lambda}_g\nabla\tilde{T}_g + \sum_{s\in\mathscr{S}_{\mathrm{h}}} \mathbf{J}_s\, e^{\star}_{sg}(\tilde{T}_1,\ldots,\tilde{T}_m), \quad g\in\mathscr{G} \tag{10b}$$

$$\mathbf{q}_{\mathrm{e}} = -\lambda_{\mathrm{e}}\nabla T_{\mathrm{e}} + \mathbf{J}_{\mathbf{e}}\, h_{\mathrm{e}}^{\mathrm{tr}}(T_{\mathrm{e}}), \tag{10c}$$

其中的 translationa 焓和质量扩散通量为 h^{tr} $_s(\mathrm{T}) = \mathrm{e}^{\mathrm{tr}}_s(\mathrm{T}) + \mathrm{k_B T}/\mathrm{m}_s$ and $\mathrm{J}_s = \rho_s \mathrm{U}_s$ ，研究范围界定 - 地。Th

e translatio重粒子的热导率采用第二阶 Sonine–Laguerre 近似计算 :

$$\lambda_{\mathrm{h}} = \mathbf{z}_{\mathrm{h}}^{\lambda}\cdot\mathbf{X}_{\mathrm{h}}, \tag{11}$$

其中，类比黏度，$\mathrm{z}_{\mathrm{h}}^{\lambda}$ 的各项由以下线性方程组的解得到：

$$\mathbf{G}_{\mathrm{h}}^{\lambda}\mathbf{z}_{\mathrm{h}}^{\lambda} = \mathbf{X}_{\mathrm{h}}, \tag{12}$$

其中，$\mathrm{G}_{\mathrm{h}}^{\lambda}$ 为重粒子子系统的热导率对称输运矩阵 [64]。对于自由电子，则采用三阶 Sonine 近似 [66, 68]:

$$\lambda_{\mathrm{e}} = \frac{75}{64}k_{\mathrm{B}}X_{\mathrm{e}}^2\sqrt{\frac{2\pi k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}}{m_{\mathrm{e}}}}\frac{\Lambda_{\mathrm{ee}}^{22}}{\Lambda_{\mathrm{ee}}^{11}\Lambda_{\mathrm{ee}}^{22}-\Lambda_{\mathrm{ee}}^{12}\Lambda_{\mathrm{ee}}^{21}}, \tag{13}$$

其中，$\Lambda_{\mathrm{ee}}^{ij}$ 为电子子系统对称输运矩阵 [20, 68]的各项。内部热化自由度 λ_g对˜热导率的贡献，采用广义 Eucken 修正 [64, 71]进行建模。

等离子体中的传导电流采用欧姆定律 $\mathrm{j} = \sigma_{\mathrm{e}}\mathrm{E}$ 建模，其中电导率采用第二阶 Sonine–Laguerre 近似计算 [68]:

$$\sigma_{\mathrm{e}} = \frac{3}{8}\frac{X_{\mathrm{e}}^2 Q_{\mathrm{e}}^2}{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}}\sqrt{\frac{2\pi k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}}{m_{\mathrm{e}}}}\frac{\Lambda_{\mathrm{ee}}^{11}}{\Lambda_{\mathrm{ee}}^{00}\Lambda_{\mathrm{ee}}^{11}-\Lambda_{\mathrm{ee}}^{01}\Lambda_{\mathrm{ee}}^{10}}. \tag{14}$$

动力学 本文采用的非局部热力学平衡动力学机制包括：

- 重粒子碰撞和电子碰撞导致的解离，
- 粒子与电荷交换（例如泽尔多维奇反应），
- 电子碰撞导致的电离和电子碰撞激发，
- 缔合电离和解离复合，
- 电子-重粒子碰撞中的弹性能量传递。

未考虑谱线发射和吸收等辐射过程。

上述过程导致的质量与能量生成项同样源自CE方法。由于假设采用麦克斯韦反应机制，因此通过对玻尔兹曼方程中的碰撞算子取矩，并将分布函数设为相应温度下的麦克斯韦-玻尔兹曼分布，可获得源项 [64, 65]。

控制方程 本文所研究的等离子体流体动力学控制方程如下：

$$\frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t} + \nabla\cdot(\mathsf{F}-\mathsf{D}) = \mathbf{S}, \tag{15}$$

其中，t表示时间。守恒变量和源项向量，以及无黏性通量张量和扩散通量张量为：

$$\mathbf{U}=\begin{pmatrix}\rho_s\\ \rho\mathbf{v}\\ \rho E\\ \rho\tilde{e}_g\\ \rho\tilde{e}_e\end{pmatrix},\quad \mathbf{S}=\begin{pmatrix}\omega_s\\ \langle\mathbf{f}^L\rangle\\ \langle\Omega^J\rangle\\ \tilde{\Omega}_g\\ \langle\Omega^J\rangle+\Omega_e-p_e\nabla\cdot\mathbf{u}\end{pmatrix},\quad \mathsf{F}=\begin{pmatrix}\rho\mathbf{v}\mathsf{I}\\ \rho\mathbf{v}\mathbf{v}+p\mathsf{I}\\ \rho\mathbf{v}H\mathsf{I}\\ \rho\mathbf{v}\tilde{e}_g\mathsf{I}\\ \rho\mathbf{v}\tilde{e}_e\mathsf{I}\end{pmatrix}\quad\text{and}\quad \mathsf{D}=\begin{pmatrix}-\mathbf{J}_s\mathsf{I}\\ \tau\\ (\tau\mathbf{v}-\mathbf{q})\mathsf{I}\\ -\tilde{\mathbf{q}}_g\mathsf{I}\\ -\mathbf{q}_e\mathsf{I}\end{pmatrix},\tag{16}$$

对于 $s\in\mathscr{S}$和 $g\in\mathscr{G}$。单位质量的总能量和焓分别定义为 $E=e+v\cdot v/2$和 $H=E+p/\rho$，其中 $u=(u, v, w)$ 为质量平均速度。时间平均洛伦兹力 $\langle\mathbf{f}^L\rangle$和焦耳热 $\langle\Omega^J\rangle$描述了等离子体与电磁场之间的相互作用（见下文）。最后，˜质量生成项 ω_s以及能量传递项 Ω_g 和 Ω_e表示动力学过程对等离子体质量与能量平衡的影响。

电磁场

电磁现象由麦克斯韦方程组支配。为使问题便于处理，引入以下假设 [10, 75, 76]:

- 低频近似。电感器频率 *f*远低于等离子体频率，因此可以忽略静电波和电磁波。
- 等离子体是准中性、非磁化且碰撞主导的。
- 低磁雷诺数。
- 所有电磁量均呈谐波时间变化：

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t)=\mathbf{E}_c(\mathbf{r})\exp(\imath\omega t),\tag{17}$$

其中角频率为 $\omega=2\pi f$，而 $\imath$ 表示虚数单位。在上述关系中，下标 c 表示复数量（即相量）。

在麦克斯韦方程组中采用上述假设，可得电场相量的感应方程：

$$\nabla\times\nabla\times\mathbf{E}_c+\imath\mu_0\sigma\omega\mathbf{E}_c=-\imath\mu_0\omega\mathbf{j}_s,\tag{18}$$

其中 μ_0 是真空磁导率。电导率，σ，取为等离子体在炬内部的电导率，而假定在其他所有位置均为零。等式 (18) 右侧的$\mathbf{j}_s$ 矢量表示外部源的电流密度贡献（即感应线圈）。

已知电场后，焦耳热和洛伦兹力分别由以下公式得出 $\Omega^J=\mathbf{j}\cdot\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{f}^L=\mathbf{j}\times\mathbf{B}$，其中磁感应强度 **B**可通过法拉第定律由电场求得。 由于电感耦合等离子体的工作频率为兆赫兹量级，因此可以合理地假设，在一个电感器周期内，等离子体实际上受到时间平均电磁力和能量沉积的作用 [75, 76]:

$$\langle\mathbf{f}^L\rangle=\frac{1}{2}\left(\frac{\sigma}{\omega}\right)\Re\left[\mathbf{E}_c\times(\imath\nabla\times\mathbf{E}_c)^*\right]\quad\text{and}\quad\langle\Omega^J\rangle=\frac{1}{2}\sigma\,\mathbf{E}_c\cdot\mathbf{E}_c^*,\tag{19}$$

wh这里的 $*$上标 表示 复共轭，而 $\Re(z)$ 表示 z的实部。

根据 Boulos [8], , 在仿真过程中，流经电感器的电流强度会更新，以匹配焦耳热耗散功率的目标值：

$$P=\int\langle\Omega^J\rangle\,dv.\tag{20}$$

计算框架

如上一节所示，等离子体所经历的体力和能量沉积取决于电场的幅值和梯度，而电场的幅值和梯度又受到等离子体电导率的影响。因此，为实现自洽性，必须将两组方程（即等离子体方程和电磁场方程）联立求解。这里通过耦合两个独立的求解器来实现这一点。与单体式方法相比，该策略具有降低软件复杂性和维护工作量的优势。此外，还可以针对每个子问题采用最合适的数值方法和算法。下面总结了求解器及其耦合的主要特征。

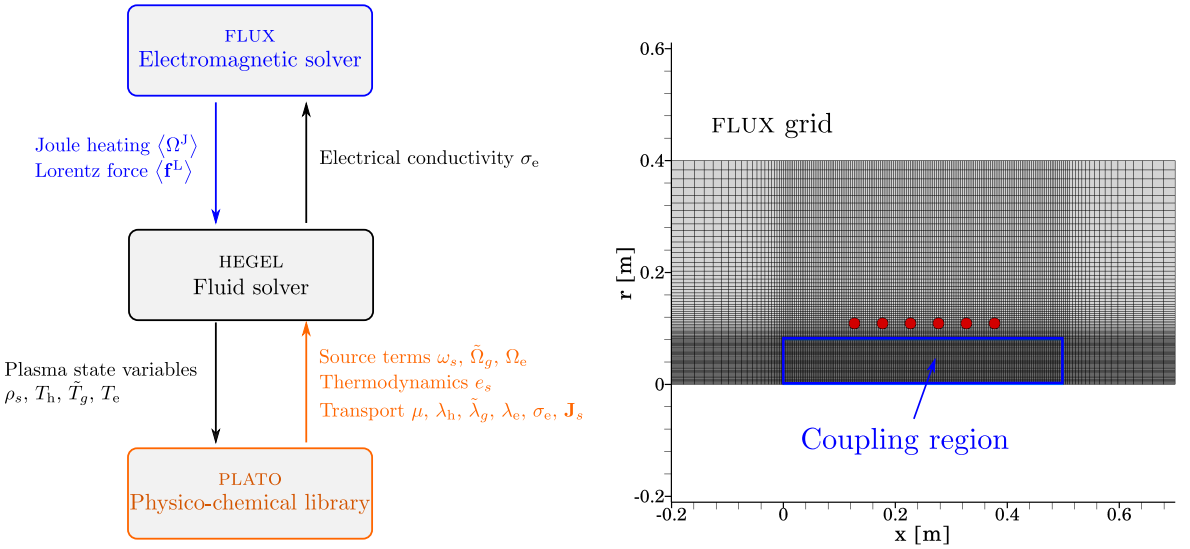


图 1. HEGEL 与 FLUX 耦合以模拟局部热力学平衡和非局部热力学平衡 ICP 放电的示意图。左侧的框图展示了交换的量。右侧的网格系统（为清晰起见，使用粗网格）标示了发生耦合的区域（例如，炬）。红色圆圈表示线圈的位置。

求解器

等离子体流体/等离子体求解器为HEGEL（用于磁流体动力学仿真的高保真工具），这是一个采用面向对象Fortran 2008 [20, 77] 编写的、用于局部热力学平衡和非局部热力学平衡等离子体的并行多块结构化代码。利用MPI 以及PETSc库提供的数据结构 [78,79, 80]，在各进程之间分配数据。热力学性质、输运性质和源项的计算通过 PLATO（热力学非平衡等离子体）库 [20] 完成。

控制方程 (16) 基于单元中心有限体积法进行空间离散。无黏通量采用 Roe 近似黎曼求解器 [81] 或 AUSM 系列方法[82] 计算，并结合 MUSCL [83] 或 WENO [84] 等重构过程，以实现高阶精度。扩散通量则通过 Green-Gauss 定理计算，以确定面平均梯度。空间离散后的方程组通过显式、隐式或隐式-显式 (IMEX) 方法 [20] 进行时间积分。

电磁场：控制电场相量(18) 的方程采用 FLUX [21], 基于 C++MFEM 的 [22, 23] 混合有限元求解器求解，用于时域和频域电磁学。详情见配套论文 [21]。

耦合

HEGEL与FLUX之间的耦合实际上通过PRECICE开源库 [24] 实现。在本工作中，FLUX 从 HEGEL 接收等离子体电导率，随后用于计算电

场。完成此步骤后，将计算时间平均的洛伦兹力和焦耳热，并将其发送至 HEGEL（见图 1）。

结果

本节介绍所开发的ICP建模框架的应用。这里的主要目的是通过与文献中已有的数据进行比较来验证该框架。针对更复杂的情形（例如，弧段建模）的应用将在配套论文中讨论 [21]。

局部热力学平衡电感耦合等离子体炬

第一个基准测试是计算带有环形喷射的感应耦合等离子体炬中的二维轴对称无旋流流动（见图2）。工质为空气，并假定处于局部热力学平衡状态。几何结构、运行条件和参考解取自文献 [75]。

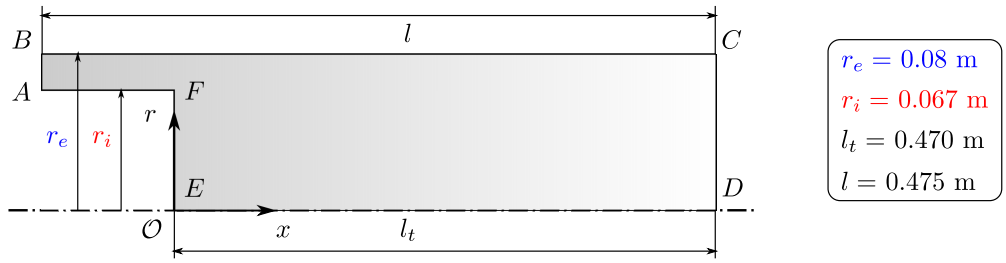


图2. 带有环形喷射的感应耦合等离子体炬：几何结构和尺寸。

边界条件如下 [17]。

- 入口 (AB):

$$\rho u = \frac{\dot{m}}{\pi\left(r_e^2 - r_i^2\right)}, \quad \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \quad \text{and} \quad T = T_{\text{in}}, \tag{21}$$

  其中 ṁ 和 T_{in} 分别是注入的冷气体的质量流量和温度。该符号 s r_i 和 r_e 站立。分别对应喷射器的内半径和外半径。

- 中心线 (DE):

$$\frac{\partial \rho}{\partial r} = \frac{\partial u}{\partial r} = \frac{\partial p}{\partial r} = 0 \text{ 和 } v = 0 \quad , \tag{22}$$

- 壁面（AF 和 BC）：

$$u = v = 0 \quad \text{and} \quad T = T_{\text{w}}, \tag{23}$$

  其中，T_w 表示壁面温度。

- 壁面（EF）

$$u = v = 0 \quad \text{and} \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \tag{24}$$

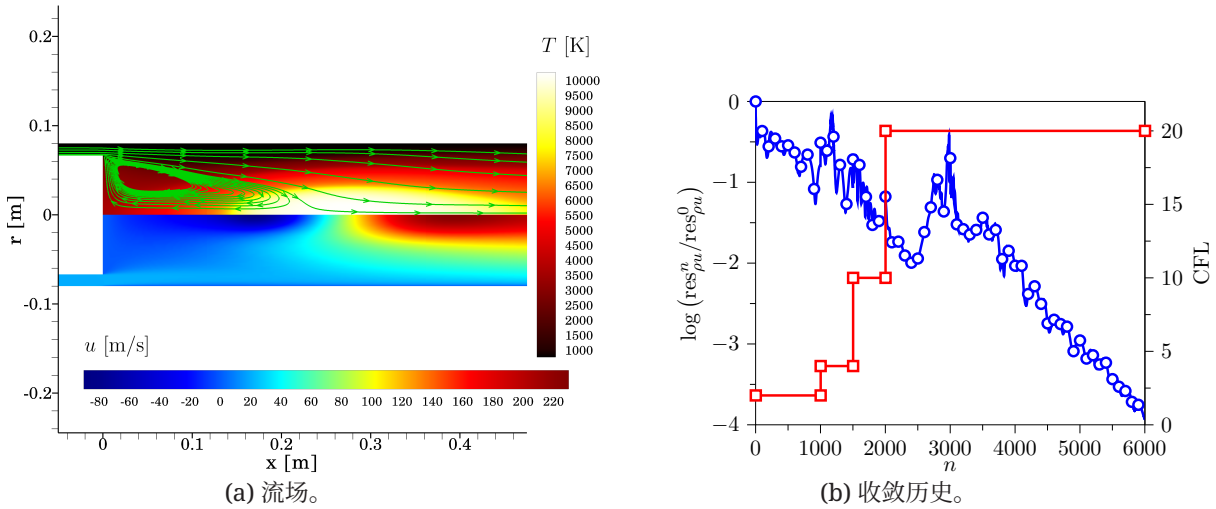
- 出口（CD）：

$$p = p_{\text{a}}, \tag{25}$$

  其中，p_a 为环境压力。

质量流量和环境压力分别设为 6 g/s 和 5000Pa，而壁面温度和入口温度均为 350 K。目标耗散功率和流经电感器的电流频率分别为 50 kW 和 0.45 兆赫兹。

由于等离子体形成的建模不属于本研究的范围，因此计算通过在炬中施加高温等离子体团来启动 [76]。随后，采用后向欧拉法 [85] 结合局部时间步进推进流体控制方程，以加速收敛至稳态 [86]。为此，在仿真过程中还逐步增大 Courant-Friedrichs-Levy（CFL）数。在每个流体时间步结束时，通过显式耦合在 HEGEL 和 FLUX 之间进行数据交换。在当前情况下，即使每十个流体 时间步 交换一次数据，也不会降低数值解的收敛性。



(a) 流场。 (b) 收敛历史。

图 3。

图 4。感应耦合等离子体炬仿真（LTE空气等离子体）：(a) 温度和轴向速度分布及流线；(b) 带圆圈的线表示轴向动量密度残差的对数 [见式 (26)]，以首次迭代为基准归一化；带方块的线表示 CFL 数（$\dot{m} = 6\,\mathrm{g/s}$，$f = 0.45\,\mathrm{MHz}$，$P = 50\,\mathrm{kW}$，$p_a = 5000\,\mathrm{Pa}$，$T_w = 350\,\mathrm{K}$；无旋流）。

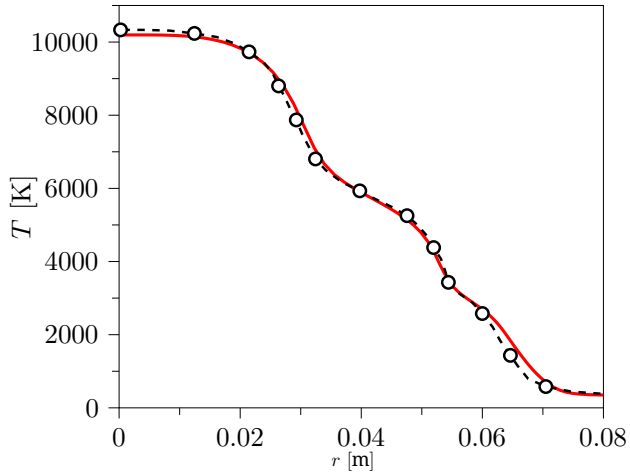


图 5。感应耦合等离子体模拟（LTE空气等离子体）：$x = 0.265\,\mathrm{m}$ 处的温度径向分布。实线表示本文结果，带圆圈的虚线表示参考文献 [75] 中的解（$\dot{m} = 6\,\mathrm{g/s}$，$f = 0.45\,\mathrm{MHz}$，$P = 50\,\mathrm{kW}$，$p_a = 5000\,\mathrm{Pa}$，$T_w = 350\,\mathrm{K}$；无旋流）。

图 4 展示了计算得到的轴向速度和温度分布，以及通过绘制轴向动量密度残差来监测的收敛历史：

$$\mathrm{res}_{\rho u}^{n} = \sqrt{\frac{1}{\mathrm{N_I N_J}} \sum_{i}^{\mathrm{N_I}} \sum_{j}^{\mathrm{N_J}} \left(\delta \rho \, u_{i,j}^{n} \right)^2}, \tag{26}$$

其中，对于单元(i,j)，时间层 n 与 $n+1$ 之间的解增量为 $\delta \rho u_{i,j}^{n} = \rho u_{i}^{n+1}{}_{,j} - \rho u_{i,j}^{n}$，其中 N_I 和 N_J 分别为沿轴向和径向的单元数。

温度场上方的流线显示了电磁泵送产生的特征性回流涡 [10, 11]。温度在轴线上达到最大值，峰值约为 10000K，如图 5所示，该图将当前结果与参考解 [75]进行了比较。总体而言，两者吻合得非常好，存在的细微差异可能是由于采用了不同的物理化学数据库（例如输运碰撞积分）和数值方法。由于忽略了辐射损失，径向温度分布在靠近轴线处较为平坦 [18] 并经历了一系列拐点。这些现象是空气总局部热力学平衡热导率局部最大值的结果。

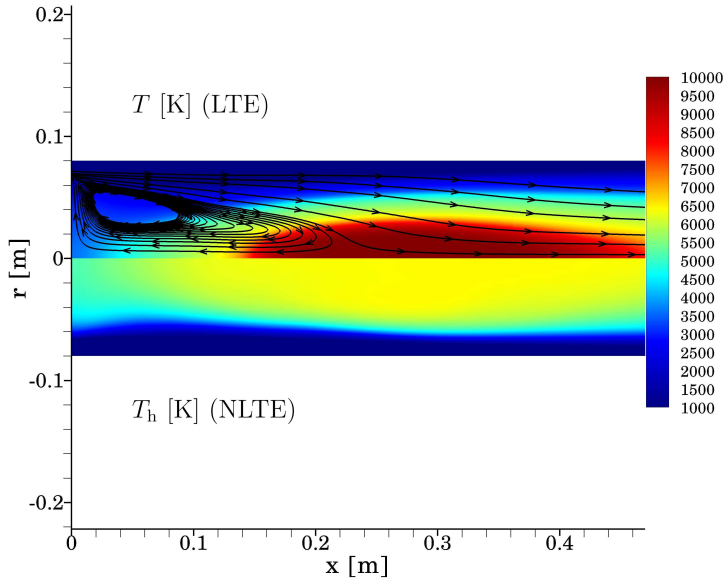


图 6. 感应耦合等离子体模拟（局部热力学平衡和非局部热力学平衡空气等离子体）：上图为局部热力学平衡温度分布及流线，下图为非局部热力学平衡重粒子温度分布（$\dot{m} = 6\,\mathrm{g/s}$，$f = 0.45$ 兆赫兹，$P = 50\,\mathrm{kW}$，$p_\infty = 5000\,\mathrm{Pa}$，$T_w = 350\,\mathrm{K}$；无旋流）。

非局部热力学平衡电感
耦合等离子体炬

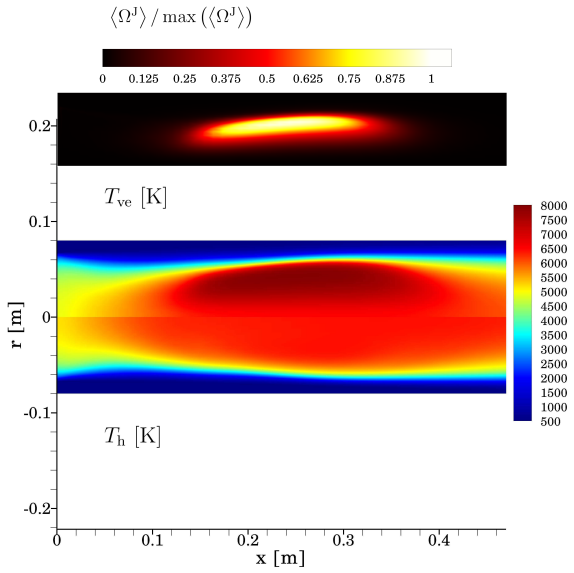
在评估了两个求解器的局部热力学平衡公式的正确实现后，之前的局部热力学平衡仿真在非局部热力学平衡条件下重复进行。

空气等离子体由 N_2 和 O_2，组成，其主要解离产物和电离产物包括：

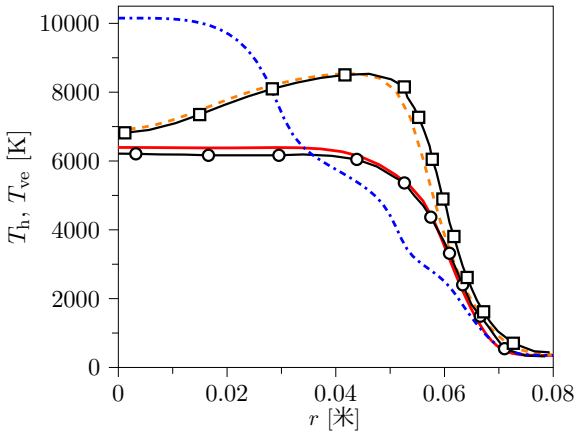
$$\mathscr{S} = \left\{ \mathrm{e^-}, \mathrm{N_2}, \mathrm{O_2}, \mathrm{NO}, \mathrm{N}, \mathrm{O}, \mathrm{N_2^+}, \mathrm{O_2^+}, \mathrm{NO^+}, \mathrm{N^+}, \mathrm{O^+} \right\}. \tag{27}$$

基于 Park 双温度模型 [87] 以及 Dunn 和 Kang 反应动力学方案 [88]，将非平衡效应纳入考量。为确保验证程序的一致性，各种化学反应（例如解离、交换反应）的速率控制温度取自参考文献 [75]。需要指出的是，非局部热力学平衡模型采用与局部热力学平衡模拟相同的数据库（例如热力学、输运）。这确保了局部热力学平衡与非局部热力学平衡对比的一致性。

图7展示了炬内的温度分布。与局部热力学平衡模拟相比，非局部热力学平衡计算得到的温度较低，等离子体体积也更大 [17]。放电中的热非平衡在焦耳热达到最大值的区域尤为显著（见图7(a)顶部）。相反，在炬出口处，等离子体基本处于热平衡状态，不过如图8所示，与局部热力学平衡对应值相比，温度显著较低；图8对比了局部热力学平衡和非局部热力学平衡下的轴向速度及温度分布曲线。与局部热力学平衡模拟的情况一样，结果与文献数据一致。

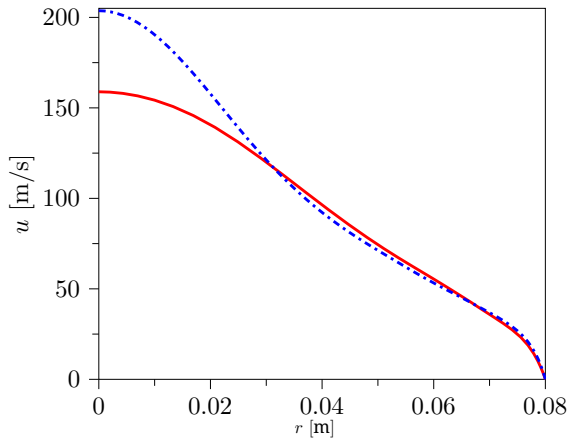


(a) 温度和焦耳热。

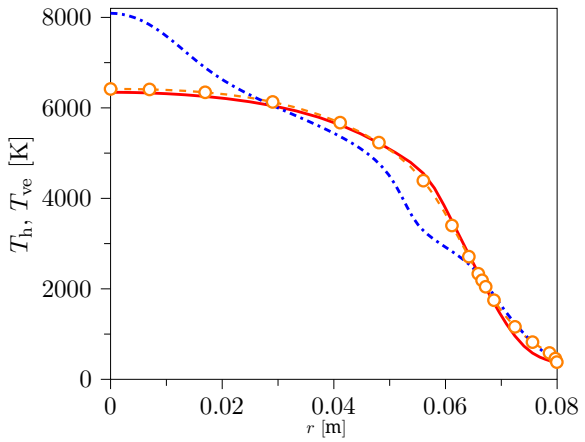


(b) 温度 (x = 0.235m)。

图7。ICP炬仿真（非局部热力学平衡空气等离子体）：(a)中的温度和归一化焦耳热分布，(b)中x = 0.235米处的温度径向分布曲线。在(b)中，实线表示重粒子温度（本工作），虚线表示振电子温度（本工作），带圆圈的实线表示重粒子温度（参考文献 [75]），带方块的实线表示振电子温度（参考文献 [75]），点划线表示局部热力学平衡温度（本工作）（ ˙米 = 6克/秒，f = 0.45 兆赫兹，P = 50 千瓦，p_a = 5000 帕，T_w = 350 开尔文；无旋流）。



(a) 轴向速度。



(b) 温度。

图 8. ICP炬仿真（非局部热力学平衡空气等离子体）：炬出口处（x = 0.47 m）的 (a) 轴向速度和 (b) 温度的径向分布曲线。(b) 中，实线表示重粒子温度，带圆圈的虚线表示振电子温度。(a) 和 (b) 中的点划线表示局部热力学平衡模拟（ ˙m = 6g/s，f = 0.45 兆赫兹，P = 50 kW，p_a = 5000 Pa，T_w = 350 K；无旋流）。

结论

本文介绍并讨论了电感耦合等离子体（ICP）风洞多物理场框架的开发。与单体式方法不同，该框架将负责等离子体和电磁场演化的独立求解器耦合起来。本文针对二维轴对称构型证明了所提方法的可行性，并通过与文献中的数据进行比较，成功验证了该方法的实现。

未来工作将重点把该框架扩展至三维和非定常场景，纳入辐射损失和 TPS 样品，并通过与伊利诺伊大学开展的实验进行比较来验证模型。

致谢

本研究得到伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校高超声速与进入系统研究中心（CHESS）的支持。

参考文献

1. P. Fauchais，《物理学杂志D：应用物理》37，R86（2004）。2. J. Heberlein，A. B. Murphy，《物理学杂志D：应用物理》41，053001（2008）。3. A. B. Murphy，M. Tanaka，K. Yamamoto，S. Tashiro，T. Sato，J. J. Lowke，《物理学杂志D：应用物理》42，194006（2009）。4. V. Colombo，A. Concetti，E. Ghedini，S. Dallavalle，M. Vancini，《等离子体源科学与技术》18，023001（2009）。5. M. Shigeta，A. B. Murphy，《物理学杂志D：应用物理》44，174025（2011）。6. T. B. Reed，《应用物理学杂志》32，821–824（1961）。7. M. I. Boulos，P. Fauchais，E. Pfender，《热等离子体：基础与应用》第1卷（Spinger，1994）。8. M. I. Boulos，《IEEE等离子体科学汇刊》4，28–39（1976）。9. J. Mostaghimi，P. Proulx，M. I. Boulos，《等离子体化学与等离子体处理》4，199–217（1984）。10. J. Mostaghimi，M. I. Boulos，《等离子体化学与等离子体处理》9，25–44（1989）。11. T. Watanabe，K. Yanase，T. Honda，A. Kanzawa，《日本化学工程杂志》23，389–395（1990）。12. D. Bernardi，V. Colombo，E. Ghedini，A. Mentrelli，《欧洲物理学杂志D》22，119–125（2003）。13. V. Colombo，A. Concetti，E. Ghedini，M. Gherardi，P. Sanibondi，《IEEE等离子体科学汇刊》，IEEE核与等离子体科学学会39，2894–2895（2011）。14. 只要忽略去混合，这一结论就成立。15. E. Rinaldi，R. Pecnik，P. Colonna，《计算物理学杂志》270，459–477（2014）。16. E. Pfender，J. Fincke，R. Spores，《等离子体化学与等离子体处理》11，529–543（1991）。17. W. Zhang，A. Lani，M. Panesi，《等离子体物理》23，073512（2016）。18. A. Munafò，S. A. Alfuhaid，，J.-L. Cambier，M. Panesi，《应用物理学杂志》118，133303（2015）。19. M. Shigeta，《物理学杂志D：应用物理》49，493001（2016）。20. A. Munafò，A. Alberti，C. Pantano，J. B. Freund，M. Panesi，《计算物理学杂志》406，109190（2020）。21. S. Kumar，A. Munafò，S. M. Jo，M. Panesi，《第32届国际稀薄气体动力学研讨会论文集》（2022）。22. R. Anderson，J. Andrej，A. Barker，J. Bramwell，J.-S. Camier，J. C. V. Dobrev，Y. Dudouit，A. Fisher，T. Kolev，W. Pazner，M. Stowell，V. Tomov，I. Akkerman，J. Dahm，D. Medina，S. Zampini，《计算数学及其应用》81，42–74（2021）。23. MFEM：模块化有限元方法 [软件]，https://mfem.org（2021）。24. H.-J. Bungartz，F. Lindner，B. Gatzhammer，M. Mehl，K. Scheufele，A. Shukaev，B. Uekermann，《计算流体》141，250–258（2016），流固耦合进展。25. Y. B. Zel’dovich，Yu. P. Raizer，《冲击波与高温流体动力学现象物理学》（Academic Press Inc.，纽约，纽约州，1967）。26. C. Park，《非平衡高超声速气动热力学》（Wiley，纽约，纽约州，1990）。27. G. Degrez，A. Lani，M. Panesi，O. Chazot，H. Deconinck，《物理学杂志D：应用物理》42，194004（2009）。28. D. V. Kotov，H. C. Yee，M. Panesi，D. K. Prabhu，A. A. Wray，《计算物理学杂志》269，215–233（2014）。29. M. Capitelli，C. M. Ferreira，B. F. Gordiets，A. I. Osipov，《大气气体中的等离子体动力学》（施普林格，2000）。30. A. Bultel，B. van Ootegem，A. Bourdon，P. Vervisch，《物理评论E》65，046406（2002）。31. M. Capitelli，I. Armenise，D. Bruno，M. Cacciatore，R. Celiberto，G. Colonna，O. De Pascale，P. Diomede，F. Esposito，C. Gorse，K. Hassouni，A. Laricchiuta，S. Longo，D. Pagano，L. D. Pietanza，M. Rutigliano.，《等离子体源科学与技术》16，30–44（2007）。32. J. G. Kim，O. J. Kwon，C. Park，《热物理与传热杂志》23，443–453（2009）。33. M. Panesi，T. E. Magin，A. Bourdon，A. Bultel，O. Chazot，《热物理与传热杂志》23，236–248（2009）。34. M. Panesi，T. E. Magin，A. Bourdon，A. Bultel，O. Chazot，《热物理与传热杂志》25，361–374（2011）。35. L. D. Pietanza，G. Colonna，A. De Giacomo，M. Capitelli，《光谱学报B辑》65，616–626（2010）。36. A. Munafò，M. Panesi，R. L. Jaffe，G. Colonna，A. Bourdon，T. E. Magin，《欧洲物理学杂志D》66，188（2012）。37. A. Munafò，A. Lani，A. Bultel，M. Panesi，《等离子体物理》20，073501（2013）。38. M. Panesi，R. L. Jaffe，D. W. Schwenke，T. E. Magin，《化学物理学杂志》138，044312（2013）。

39. A. Bultel，J. Annaloro，《等离子体源科学与技术》22，025008（2013）。40. M. Panesi，A. Munafò，T. E. Magin，R. L. Jaffe，《物理评论E》90，013009（2014）。41. J. D. Bender，P. Valentini，I. Nompelis，Y. Paukku，Z. Varga，D. G. Truhlar，T. Schwartzentruber，G. V. Candler，《化学物理杂志》143，054304（2015）。42. R. L. Macdonald，A. Munafò，C. O. Johnston，M. Panesi，《物理评论：流体》1，043401（2016）。43. H. Luo，M. Kulakhmetov，A. Alexeenko，《化学物理杂志》146，074303（2017）。44. S. M. Jo，S. Venturi，M. P. Sharma，A. Munafò，M. Panesi，《物理化学杂志A辑》126，3273–3290（2022）。45. G. Colonna，I. Armenise，D. Bruno，M. Capitelli，《热物理与传热杂志》20，477–486（2006）。46. A. Munafò，M. Panesi，T. E. Magin，《物理评论E》89，023001（2014）。47. A. Munafò，T. E. Magin，《流体物理》26，097102（2014）。48. Y. Liu，M. Panesi，A. Sahai，M. Vinokur，《化学物理杂志》142，134109（2015）。49. A. Munafò，Y. Liu，M. Panesi，《流体物理》27，127101（2015）。50. A. Munafò，N. N. Mansour，M. Panesi，《天体物理学杂志》838，126（2017）。51. A. Sahai，B. Lopez，C. O. Johnston，M. Panesi，《化学物理杂志》147，054107（2017）。52. R. L. Macdonald，R. L. Jaffe，D. W. Schwenke，M. Panesi，《化学物理杂志》148，054309（2018）。53. R. L. Macdonald，M. S. Grover，T. E. Schwartzentruber，M. Panesi，《化学物理杂志》148，054310（2018）。54. A. Sahai，C. O. Johnston，B. Lopez，M. Panesi，《物理评论：流体》4，093401（2019）。55. L. Campoli，E. Kustova，P. Maltseva，《数学》10，928（2019）。56. M. P. Sharma，Y. Liu，M. Panesi，《物理评论E》101，013307（2020）。57. S. Venturi，M. P. Sharma，B. Lopez，M. Panesi，《物理化学杂志A辑》124，8359–8372（2020）。58. S. Venturi，R. L. Jaffe，M. Panesi，《物理化学杂志A辑》124，5129–5146（2020）。59. J. G. Kim，S. M. Jo，《国际传热传质杂志》169，120950（2021）。60. I. Zanardi，S. Venturi，M. Panesi，AIAA论文2022-1639（2022），AIAA科技论坛，圣迭戈，加利福尼亚州。61. A. Kosareva，O. Kunova，E. Kustova，E. Nagnibeda，《流体物理》33，016103（2021）。62. A. Kosareva，O. Kunova，E. Kustova，E. Nagnibeda，《流体物理》34，026105（2022）。63. J. H. Ferziger，H. G. Kaper，《气体输运过程的数学理论》（北荷兰出版公司，1972）。64. V. Giovangigli，《多组分流动建模》（Birkhäuser，柏林，1999）。65. E. Nagnibeda，E. Kustova，《非平衡反应气体流动》（施普林格，柏林，2009）。66. R. S. Devoto，《流体物理》9，1230–1240（1966）。67. R. S. Devoto，《流体物理》10，354–364（1967）。68. T. E. Magin，G. Degrez，《计算物理学杂志》198，424–449（2004）。69. T. E. Magin，G. Degrez，《物理评论E》70，046412（2004）。70. D. Bruno，C. Catalfamo，O. D. M. Capitelli，G. Colonna，P. Diomede，C. Gorse，A. Laricchiuta，S. Longo，D. Giordano，F. Pirani，《等离子体物理》17，112315（2010）。71. M. Capitelli，D. Bruno，A. Laricchiuta，《等离子体物理基础：输运》，施普林格原子、光学与等离子体物理丛书，第74卷（施普林格，海德堡，2013）。72. Y. Liu，M. Vinokur，《计算物理学杂志》83，373–397（1989）。73. B. Grossman，P. Cinnella，《计算物理学杂志》88，131–168（1990）。74. H. B. Callen，《热力学与热统计学导论》（约翰·威立父子公司，纽约，纽约州，1985），第二版。75. D. V. Abeele，博士论文，布鲁塞尔自由大学，布鲁塞尔，比利时，2000。76. D. V. Abeele，G. Degrez，《AIAA杂志》38，234–242（2000）。77. A. Alberti，A. Munafò，M. Koll，M. Nishihara，C. Pantano，J. B. Freund，G. S. Elliott，M. Panesi，《物理学杂志D：应用物理》53，025201（2019）。78. S. Balay，S. Abhyankar，M. F. Adams，S. Benson，J. Brown，P. Brune，K. Buschelman，E. M. Constantinescu，L. Dalcin，A. Dener，V. Eijkhout，J. Faibussowitsch，W. D. Gropp，V. Hapla，T. Isaac，P. Jolivet，D. Karpeev，D. Kaushik，M. G. Knepley，F. Kong，S. Kruger，D. A. May，L. C. McInnes，R. T. Mills，L. Mitchell，T. Munson，J. E. Roman，K. Rupp，P. Sanan，J. Sarich，B. F. Smith，S. Zampini，H. Zhang，H. Zhang，J. Zhang，PETSc网站，https://petsc.org（2022）。79. S. Balay，S. Abhyankar，M. F. Adams，S. Benson，J. Brown，P. Brune，K. Buschelman，E. M. Constantinescu，L. Dalcin，A. Dener，V. Eijkhout，J. Faibussowitsch，W. D. Gropp，V. Hapla，T. Isaac，P. Jolivet，D. Karpeev，D. Kaushik，M. G. Knepley，F. Kong，S. Kruger，D. A. May，L. C. McInnes，R. T. Mills，L. Mitchell，T. Munson，J. E. Roman，K. Rupp，P. Sanan，J. Sarich，B. F. Smith，S. Zampini，H. Zhang，H. Zhang，J. Zhang，《PETSc/TAO用户手册》，技术报告ANL-21/39–第3.18版（阿贡国家实验室，2022）。80. S. Balay，W. D. Gropp，L. C. McInnes，B. F. Smith，E. Arge，A. M. Bruaset，H. P. Langtangen（1997），163–202。81. P. L. Roe，《计算物理学杂志》43，357–372（1981）。82. M. S. Liou，《计算物理学杂志》129，364–382（1996）。83. B. van Leer，《计算物理学杂志》32，101–136（1979）。84. G.-S. Jiang，C.-W. Shu，《计算物理学杂志》126，202–228（1996）。85. C. Hirsch，《内流与外流的数值计算》，第1卷：数值离散基础（约翰·威立父子公司，1988），第一版。86. J. Blazek，《计算流体力学：原理与应用》（巴特沃思-海涅曼，2015），第三版。87. C. Park，《热物理与传热杂志》7，385–398（1993）。88. P. A. Gnoffo，R. N. Gupta，J. L. Shinn，NASA技术报告2867（1989）。