

PASSKEY2

Multiphysics Plasma Source Solver

多物理场耦合低温等离子体装置求解器

User Manual

用户手册

Last edited:

2024.9

关于 PASSKEy2

PASSKEy2 是在 PASSKEy 框架基础上，重新开发数据结构形成的多物理场耦合低温等离子体装置求解器代码，可用于计算包含复杂化学反应的气体放电低温等离子体中的电场、组分浓度、含热、化学的流体动力学特性时空演化过程。

该代码由朱益飞博士团队开发，在等离子体计算工坊团队和航空动力系统与等离子体技术全国重点实验室支持下发展完善。用户可在非商业用途授权下免费使用 PASSKEy2 代码，并作以下引用：

- [1] Yifei ZHU, Xiaochi MA, Luying BAI, Yifan QIU, Yun WU: PASSKEy2 code [software]. Available from <http://www.plasma-tech.net/passkey2/passkey2/>, Xi'an Jiaotong University and Gongfang Tech Co, Ltd., China, 2024).
- [2] Xiaochi Ma, Luying Bai, Yifei Zhu, Xinxian Jiang, and Yun Wu. "Numerical investigation of discharge evolution and breakdown characteristics of ArF excimer lasers." *Plasma Sources Science and Technology* 33, no. 7 (2024): 075012.
- [3] Yifei ZHU, Xiancong CHEN, Yun WU, Pierre Tardiveau. Simulation of the ionization wave discharges: a direct comparison between the fluid model and E--FISH measurements. *Plasma Sources Sci. Technol.* (2021). doi:10.1088/1361-6595/ac0714

开发者：朱益飞 马啸驰 白鹭影 仇一帆 任晨华

等离子体装置先进计算与主动调控团队

等离子体计算工坊&航空动力系统与等离子体技术全国重点实验室

Email: yifei.zhu.plasma@gmail.com

第一部分 *PASSKEY2* 简介

一、PASSKEy2 程序特点

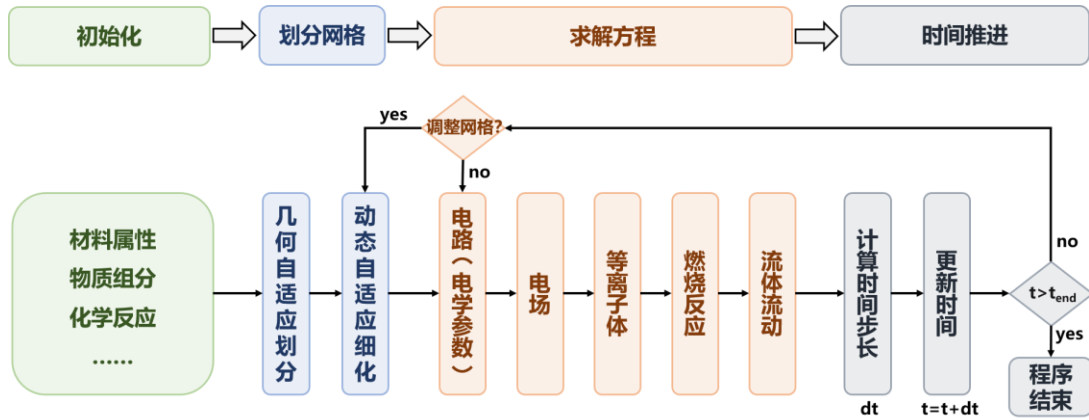
PASSKEy2 是在 PASSKEy1 的思想基础上, 基于全新数据结构开发的等离子体数值模拟程序。PASSKEy2 在具备解决低温等离子体模拟问题的能力基础上, 进行了重大升级, 新增了以下重要功能:

功能	PASSKEy1	PASSKEy2
核心功能		
网格划分	固定笛卡尔网格	动态自适应网格
时间格式	显式积分	显式积分、 隐式积分
多物理场耦合	等离子体与流动、燃烧的不完全耦合	完全耦合流体流动、燃烧、外部电路
辅助功能		
生成几何	仅能通过代码生成几何文件	可通过代码/输入文件/载入 CAD 文件, 三种方式生成
电压输入	仅能指定单个电极电压	支持多电极电压输入

伴随以上升级, PASSKEy2 具备了更多样的耦合能力、更快的计算速度和更准的计算精度, 能够处理大多数气压高于 100Pa 以上的等离子体工艺场景问题, 并具有快速处理低气压问题的混合模拟能力。

除上述升级外, PASSKEy2 等离子体流体-粒子 (蒙特卡洛) 混合模块、电磁场模块、离子动量方程模块等即将推出。

二、PASSKEy2 的计算流程



PASSKEy2 的计算流程（逻辑）如上图所示，主要分为四个步骤：

1. 初始化

程序计算前，需要用户设置一系列和求解等离子体问题相关的参数，如几何构型、材料属性、物质性质、气压温度、化学反应等。初始化的过程决定了等离子体问题在程序中能否被正确定义和描述，也是用户在使用过程中最需要关注的部分。

2. 划分网格

PASSKEy2 中，采取了两种网格划分策略。

首先，程序会根据几何形状和用户定义的几何网格大小，自动划分出初始网格，这一过程被称为“几何自适应网格细化”。

其次，在计算过程中，还会根据参数（如组分密度、电场、气压等关键参数）动态调整网格尺寸和网格分布，自动加密或粗化网格，这一过程为“动态自适应网格细化”。

用户在使用时，需要设置几何自适应的网格大小，以及动态自适应的加密准

则，合理的网格加密策略可以大大提升计算速度，达到事半功倍的效果。

3. 求解方程

此部分是 PASSKEy2 程序的核心，除了求解电场和等离子体方程外，还可选求解外部电路、流体流动和燃烧模块。用户需要在计算开始前确认各个物理场模块是否开启，以及进行相关的参数设置。

4. 时间推进

当方程求解完成后，程序会根据物理约束自动计算时间步长，对时间进行积分直到计算结束。PASSKEy2 支持用户选择等离子体方程的显式时间积分格式和隐式时间积分格式。

三、PASSKEY2 中求解的物理化学方程

1. PASSKEY2 中的等离子体模型

PASSKEY2 所解决的非平衡等离子体数值模拟问题通常在大气压范围内, 故采用流体模型进行描述。等离子体流体模型将等离子体区域视为存在大量高频碰撞反应的、并满足连续介质假设的流体。

等离子体流体模型已广泛应用于研究在电场影响下、包含反应动力学过程非平衡等离子体的时空演化和物理特性, 虽然不同数值模型的计算测量和实现算法有所区别, 但都基于求解连续性方程:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma = S \quad (1)$$

其中, n 代表粒子的数密度, Γ 代表密度通量, S 代表粒子的反应源项。通常, 我们采用漂移-扩散近似计算通量来封闭方程, 密度通量可以表示为:

$$\Gamma = \text{sgn}(q)\mu n \mathbf{E} - D \nabla n \quad (2)$$

其中, q 是组分所带的电荷, μ 是迁移率, n 是组分密度, E 是电场, D 是扩散率。上式中等号右侧第一项代表了电场引起的漂移通量, 第二项代表了由于浓度梯度引起的扩散通量。

从上述方程可以看出, 组分密度 n 的求解需要已知电场 E , 反应源项 S , 以及输运参数 μ 、 D 。电场求解基于耦合空间电荷的泊松方程, 必要时还需要考虑表面电荷累积效应:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla \phi) &= -\rho_c - \rho_s \delta_s \\ \mathbf{E} &= -\nabla \phi \\ \rho_c &= \sum_{i=1}^{N_{char}} q_i n_i \\ \frac{\partial \rho_s}{\partial t} &= \sum_{i=1}^{N_{char}} n_i [-\nabla \cdot \Gamma_i]\end{aligned}\quad (3)$$

上式中, ϕ 是电势, ε_0 和 ε_r 分别代表真空介电常数和相对介电常数, ρ_c 代表空间电荷的变化, ρ_s 代表了带电物质在介质表面沉积的电荷, n_i 、 q_i 和 Γ_i 分别代表组分 i 的密度、电荷和密度通量。

反应源项 S 等离子体中发生的反应产生。它由产生组分 i 的反应 (正贡献) 和丢失此类组分的反应 (负贡献) 组成:

$$S_i = \sum_r N_{i,r} R_r \quad (4)$$

式中, 下标 r 代表反应的编号, $N_{i,r}$ 是反应化学计量数, 代表了在发生一次 r 反应时, 产生组分 i 的净数量, R_r 是反应速率, 是反应速率系数和参与反应的物质密度的乘积, k_r 是反应速率系数:

$$R_r = k_r n_1 n_2 \cdots n_m \quad (5)$$

运输参数 μ 、 D , 反应速率系数 k_r 取决于粒子的能量分布, 而能量分布的获得依赖于近似的方式, 如果将电子碰撞反应速率系数和电子运输系数存储为电场的函数, 那么该模型即遵循局域场近似 (Local field approximation, LFA)。局域场近似假设局部吸收的电功率与电离耗散的功率完全平衡, 只需要计算密度连续方程和电势方程, 通过电势方程得到电场, 从而确定电子群参数, 再求解连续性方程; 如果将电子碰撞反应速率系数和电子运输系数存储为电子能量的函数, 那么

该模型即遵循局域能量近似 (Local mean energy approximation, LMEA)。在局域能量近似下, 不仅需要计算密度连续性方程和电势方程, 还要额外计算电子能量守恒方程得到电子能量分布, 以电子能量为索引确定电子群参数。一般而言, LMEA 相较于 LFA 而言具有更高的精度, 已有相关工作讨论了其优缺点和适用范围。在 PASSKEY2 程序中, 同时支持了 LFA 和 LMEA 近似, 但更为推荐使用 LMEA 进行计算。

综上所述, PASSKEY2 求解采取漂移-扩散近似和局域能量近似下的等离子体流体方程, 可总结如下:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_i &= S_i, i = 1, 2, 3, \dots, N_{total} \\
 \Gamma_i &= \text{sgn}(q_i) \mu_i n_i \mathbf{E} - D_i \nabla n_i \\
 \frac{\partial (n_e e_m)}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_{e_m} &= -|q_e| \cdot \Gamma_e \cdot \mathbf{E} + S_{e_m} \\
 \Gamma_{e_m} &= -\mu_{e_m} n_{e_m} \mathbf{E} - D_{e_m} \nabla (n_e e_m)
 \end{aligned} \tag{6}$$

上式中, n_i 、 Γ_i 、 S_i 分别为组分 i 的粒子数密度、通量以及反应源项, q_i 、 μ_i 、 D_i 分别为组分 i 的电荷量、迁移率和扩散率, e_m 为平均电子能量, $e_m = 3k_B T_e / 2$, Γ_{e_m} 为电子通量源项, μ_{e_m} 、 D_{e_m} 分别代表平均电子能量的迁移率和扩散率。 S_{e_m} 代表电子能量损失功率 (源项), 主要由三部分组成:

$$S_{e_m} = P_{el} + P_{in} + P_{growth} \tag{7}$$

上式的右端项, 从左至右分别代表电子碰撞过程中的弹性碰撞损失功率 P_{el} , 非弹性碰撞损失功率 P_{in} 以及由于电离/吸附等反应带来电子生成或消失的增长功率 P_{growth} 。

2. PASSKEY2 中等离子体与流动-燃烧的耦合

通常, 流动-燃烧的计算基于计算流体力学 (CFD) 和燃烧反应动力学, 即求解 Navier-Stokes 方程、组分输运方程与燃烧反应源项(包括组分源项和热源项)。当引入非平衡等离子体时, 组分输运方程与等离子体连续性方程实质上是等价的, 故不再重复考虑。根据已有研究工作, 总结等离子体与流动-燃烧的耦合关系, 具体分别体现于质量、动量、能量三方面:

(1) 质量 (密度)

这里指等离子体受到电场迁移作用而影响质量密度分布。由于只有等离子体中的带电粒子 (电子、离子) 会受到电场的影响, 而电子的质量非常小, 而在低电离度的情况下, 离子密度相对于中性组分的密度又很少, 所以等离子体由于电场迁移对宏观密度的影响较为有限。

(2) 动量

等离子体对气体动量的影响主要体现在电场作用下, 净电荷所产生的电动流体力 (Electrohydrodynamic Force), EHD force 是等离子体产生离子风的本质原因, 也是等离子体低速流动控制的核心机制, 作用于 Navier-Stokes 动量方程的右端项上, 表达式为:

$$\mathbf{F}_{EHD} = q\mathbf{E} \quad (8)$$

另一方面, 气体流动也会影响等离子体的输运过程, 此时需要对组分通量进行修正, 即考虑气体速度 \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} \Gamma_i &= \text{sgn}(q_i)\mu_i n_i \mathbf{E} - D_i \nabla n_i + \mathbf{u} \\ \Gamma_{e_m} &= -\mu_{e_m} n_{e_m} \mathbf{E} - D_{e_m} \nabla (n_e e_m) + \mathbf{u} \end{aligned} \quad (9)$$

需要注意的是，有时还要考虑组分的质量扩散通量 J_i ，而质量扩散通量的标准近似方法给出了非物理的结果，无法保证质量守恒。可以采用校正扩散速度修正模型，或采取 Ramshaw 和 Chang 的自洽二元扩散模型，此模型被认为是一种相对简单但物理上现实的近似模型。在 PASSKEY2 中，考虑流动扩散通量需要用户输入输运参数文件以计算质量扩散系数。

(3) 能量

等离子体中的能量传递关系可总结为以下几点：

第一，电场加速气体中的带电粒子（电子和正负离子），将电势能转化为电子动能（离子焦耳热忽略不计）。这是整个等离子体体系中获得的总能量，可以用单位时刻下的焦耳热来表示：

$$P_{total} = \mathbf{j}_e \cdot \mathbf{E} \quad (10)$$

式中， \mathbf{j}_e 代表电子电流密度。

第二，电子的动能在体系中对应为电子温度 T_e ，由于等离子体中存在大量的电子碰撞反应，这些反应会损耗电子的能量。电子碰撞反应对电子能量的损失主要分为三种：

1) 电子和重粒子的弹性碰撞反应 (e.g. $e + N_2 \rightarrow e + N_2$)，此类反应将电子的能量直接传递给了基态重粒子。弹性碰撞反应使电子直接损失能量，气体直接获得能量，功率为 P_{el} 。

2) 电子和重粒子的非弹性碰撞反应 (e.g. $e + N_2 \rightarrow e + N_2^*$)，此类反应将电子的能量传递给了重粒子，使重粒子的能级发生变化。非弹性碰撞反应使电子直接损失能量，气体需要通过高能级重粒子和基态重粒子发生碰撞反应间接获得能量，

功率为 P_{in} 。

3) 电子和重粒子的电离、吸附反应 (e.g. $e+N_2 \rightarrow e+e+N_2^+$, $e+O_2 \rightarrow e+e+O_2^-$), 此类反应造成了电子数量变化, 使电子直接损失能量, 气体间接获得能量, 功率为 P_{growth} 。

第三, 宏观气体能量的获得主要来自三种不同形式的能量传递: 离子焦耳热、电子和重粒子的非弹性碰撞反应和重粒子之间的反应。

1) 离子焦耳热对气体加热的贡献存在一个加热效率, 即离子在电场中获得的局部动能不会完全转化为气体温度, PASSKEY2 根据参考文献给出了离子焦耳热加热效率的建议值。

2) 电子和重粒子的弹性碰撞功率, 已在上文中进行了说明, 在此不再赘述。

3) 重粒子-重粒子间的碰撞反应功率, 此部分体现为重粒子-重粒子反应焓的总和, 反应能量源项的表达式为:

$$P_{react} = \sum_{i=1}^{N_{react}} \Delta H_i R_i \quad (11)$$

需要说明的是, 计算结果表明, 在中低约化电场 ($E/N < 200$ Td) 的条件下, 空气体系中的振动激发态组分会得到大于 50% 的电子能量, 而振动激发态物种会发生 V-T 弛豫过程, 这一过程由于特征时间尺度较长 ($\sim \mu s$) 而被称为慢速气体加热。

3. PASSKEY2 中等离子体与外部电路的耦合

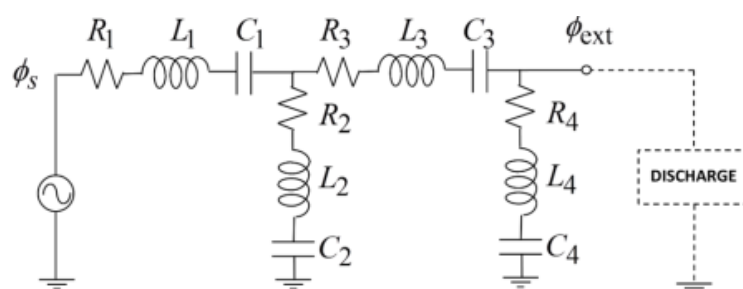
对于等离子体的外部耦合电路，等离子体相当于一个非线性黑盒，只能进行时域暂态分析，因此电路模块通过求解 ODE 方程在时域中实时求解电路电压电流值，并通过端口电压电流与等离子体模块进行耦合。

(1) 外部电路模型与方程简介

模型将等离子体视作电流源，解得电路 ODE 方程后，得到该电流源的端口电压，作为计算域内泊松方程的边界条件。其中，电极电流的计算包含两部分，即位移与传导电流。传导电流通过对电极表面的各成分通量积分求和得到，位移电流则是电位移矢量对时间的导数在电极表面的积分。其计算式如下所示：

$$I = \int_{Electrode} \left(\sum_i q_i \vec{\phi}_i \cdot \hat{n} + \frac{d(\epsilon \vec{E})}{dt} \cdot \hat{n} \right) \cdot dA$$

电路回路及可调参数如下图所示，共设置了四条 RLC 支路及一电压源，通过参数设置可满足大多数简单电路需求。



(2) 电路模型与等离子体方程的耦合关系

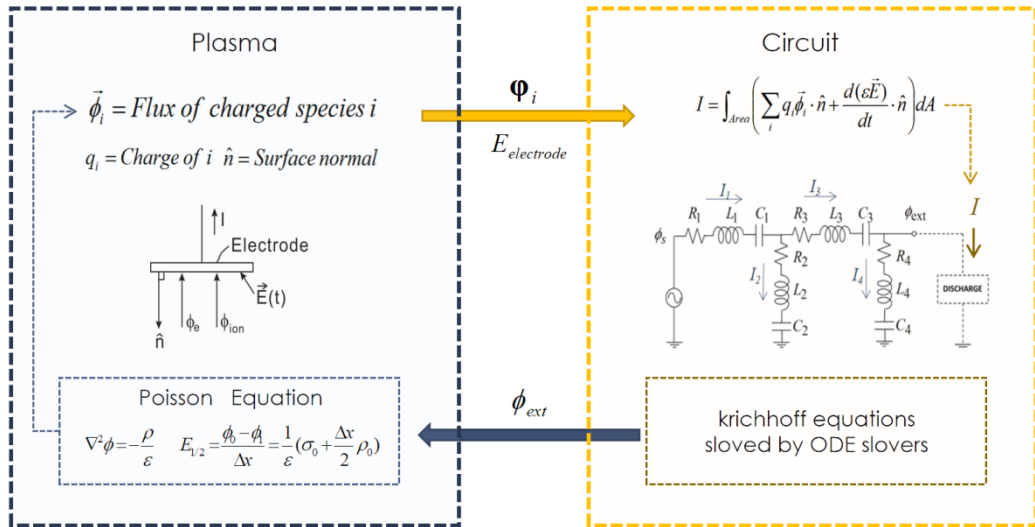
模型将等离子体视作一电流源，解得电路 ODE 方程后，得到该电流源的端口电压 U_{ext} ，作为等离子体中泊松方程的边界条件。泊松方程求解得到电极边

界网格的电场值后，求解边界电荷通量及电位移通量的时间变化率，继而通过积分得到对应的传导电流和位移电流。

位移电流密度作为电位移矢量对时间的导数，通过存储过去的电场值可以求出。总位移电流值可通过下式得到：

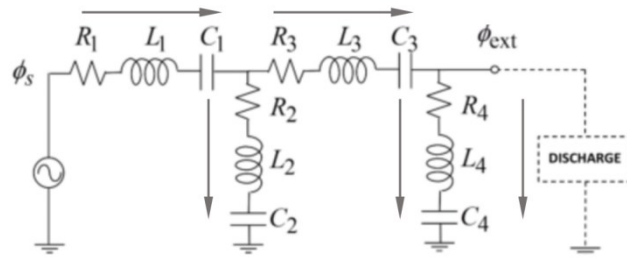
$$I_D = \int_{Electrode} \frac{\partial(\epsilon E)}{\partial t} \cdot dA = \sum_{i=1}^m \epsilon \left(\frac{E_i(t) - E_i(t - \Delta t)}{\Delta t} \right)$$

其中 m 为电极边界的总边界数目。继而求解得到总电流后，就可以如上节中通过存储过去的电流值可以求出等离子体等效电流源的时间导数 dI ，在电路 ODE 中更新此步 dI 值即可求解得到下一时刻的端口电压 U_{ext} ，如此循环往复。整体交互过程可概括为下图。



(3) 电路模块注意事项

注意电流/电压初始值的配置尽量符合真实物理情况，否则电路初始时刻可能会出现震荡。四条支路的 RLC 编号顺序及电压、电流默认正方向如下图所示，配置时注意正负。



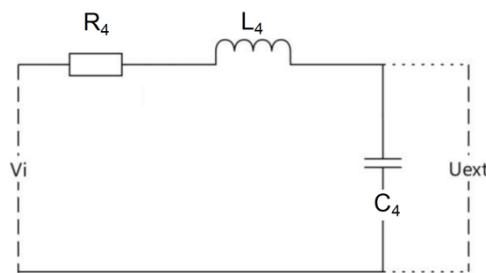
短路及开路情况支路中电路器件的的赋值可参考下表：

各支路电路器件短路/开路赋值

Circuit Element Type	Short Circuit	Open Circuit
Resister	$R=0$ (in practice use 0Ω)	$R=\infty$ (in practice use 0Ω)
Capacitor	$C=\infty$ (in practice use 10^9 F)	$C=0$ (in practice use 10^{-14} F)
Inductor	$L=0$ (in practice use 10^{-20} H)	$L=\infty$ (in practice use 10^9 H)

出于 ODE 参数决定的计算稳定性，若想删去某条支路，建议通过为此电容/电感做开路赋值来实现。

若电路为纯 LC 回路，本身易产生谐振，或是初始值不是特别自治，数值模拟中可能由于算法产生非物理的震荡，耗费计算时间。此时支路 4 可以做为 RLC 二阶滤波回路使用，配置 Voltage_mode=1 后，需要根据所使用电路的基波大致频率和震荡谐波频率，配置支路 4 的 RLC 参数，使其产生滤波功效。



以百 ns 级别脉冲电压为例，若仿真出现谐波的频率在 1 GHz 左右，而放电波形的频率在 10^7 量级。根据截止频率 f_L 选取原则，应当远小于出现的最低次谐

振频率, 又远大于基波频率 (一般为: $10f_1 < f_L < f_{\min}$), 取截止频率为 1.6×10^8 Hz,

品质因数 $Q=0.707$, 根据:

$$\xi = \frac{1}{2R} \sqrt{\frac{L}{C}} \quad Q = \frac{1}{2\xi}$$
$$f_L = \frac{\omega_n}{2\pi} = \frac{1}{2\pi\sqrt{LC}}$$

取二阶滤波参数 $R=70.71 \Omega$, $L=100 \text{ nH}$, $C=10 \text{ pF}$ 。前期测试中, 已验证该参数对百 ns 级别脉冲基波无削弱 (保证电路计算结果无影响), 且保证了回路中不再出现高频震荡。若使用其他时间尺度的电压, 用户根据此原则自行配置即可。

第二部分 *PASSKEY2* 的使用

四、运行 PASSKEy2 的软硬件要求

1. 软件要求 (操作系统+编译器)

PASSKEy2 求解器对操作系统、编译器有特定要求。

- 操作系统：请使用 Linux 操作系统。目前，主流商用/云超算系统均为 Linux。
- 编译器：建议（默认）使用 Intel Fortran 编译器，因此用户需预装 Intel OneAPI basekit 和 Intel OneAPI HPCkit 环境。PSKy2 同时支持基于 gfortran 进行编译，但是基于计算性能考量，仍强烈建议使用 Intel OneAPI 编译环境。

*Windows 用户可通过使用 Windows10 以上操作系统自带的 Linux 虚拟机 WSL 功能无缝使用 PASSKEy2 求解器，用户可选择自行配置或联系开发团队下载已经配置好所有软件环境的虚拟机系统。

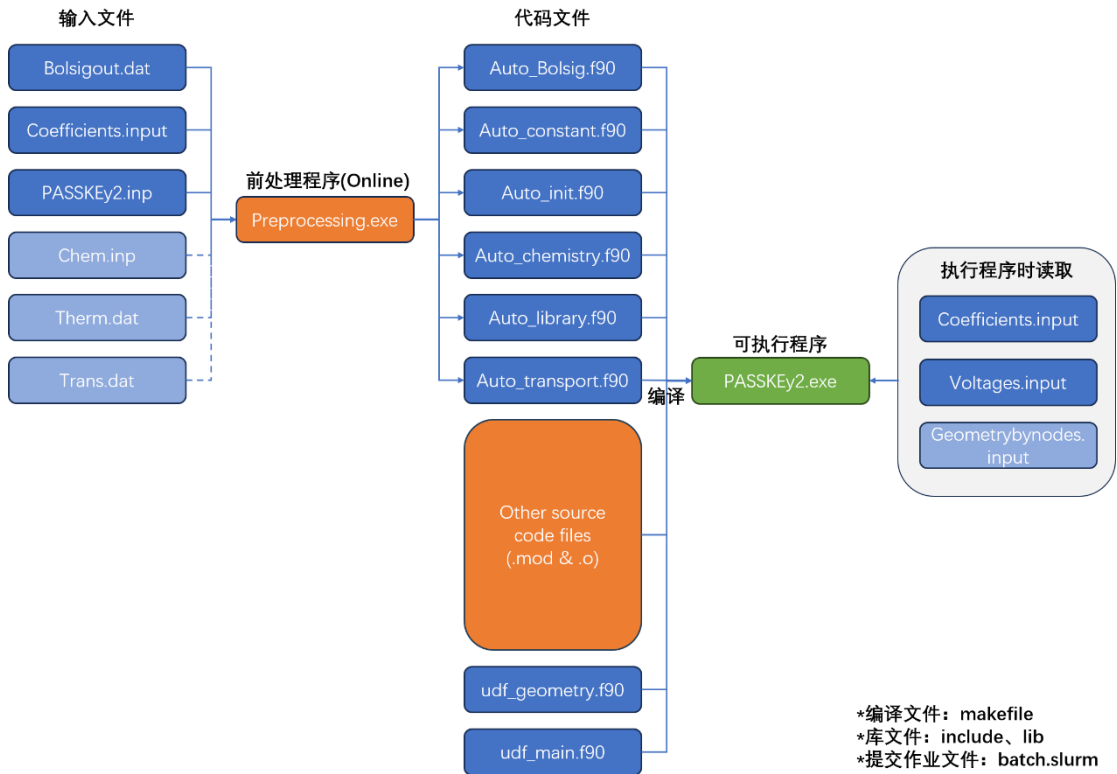
2. 硬件要求 (HPC, 单节点并行)

PASSKEy2 基于 OpenMP 框架开展并行计算，建议每个用于计算的节点（计算机）拥有尽可能多的 CPU 内核。

推荐硬件配置：

- CPU：AMD 7950x (16-cores 32-threads) 以上等工作站级 CPU
- RAM：64GB DDR5 及以上（最好采用 ECC 内存）
- SSD：512GB 及以上（有时输出文件较大，硬盘尽可能大）

五、PASSKEy2 的编译与运行



1. 代码准备

如上图所示，运行 PASSKEy2 之前，要将所有文件准备好，其中包括：

(1) Auto 代码文件（共 6 个），Auto 文件需要通过输入文件经前处理器生成。输入文件中，Chem.inp, Therm.dat, Trans.dat 是可选输入文件，当考虑等离子体和流体、燃烧耦合时才需要输入。

(2) .mod 和.o 文件（共 36 个），这些文件是由在线生成器自动生成的，需要和 auto 代码文件一起放入 src 文件夹中。

(3) udf 文件, udf_geometry 是几何定义文件, udf_main 是输出控制文件, 需要放入 src 文件夹中。

(4) 执行程序时需要读取的三个文件, 其中 Geometrybynodes 文件是可选文件, 只在 coefficients.input 中的 input_mode=3 时才需要提供。

2. 代码编译

(1) 文件夹构建

准备好代码后, 按照如下图的形式将所有文件放入一个文件夹中, 其中

\Include: 外部库文件夹, 无需用户修改

\Lib: 外部库文件夹, 无需用户修改

\Src: 代码文件夹, 其中有所有.f90/.o/.mod 文件










Coefficients.input: 此文件设置了 PASSKEY2 的物理模型信息, 程序执行时需要读取

Geometrybynodes.input : 此文件是几何的外部输入文件, 仅在 Coefficients.input 文件中的 input_mode=3 时生效。

Voltages.input: 电压输入文件

Batch.slurm: 此脚本用于在 SLURM 任务管理系统中提交作业。在 Linux 中执行

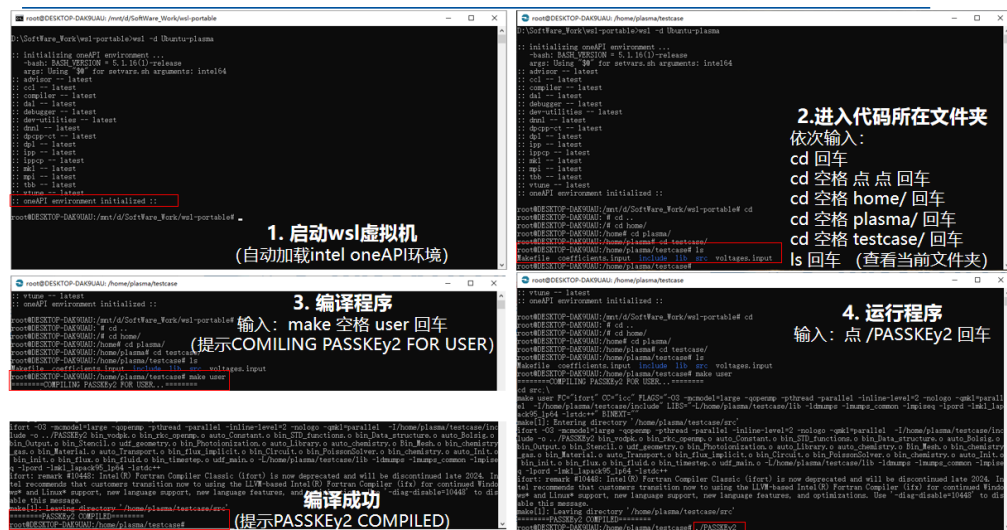
Makefile: 编译文件

	include	库文件（用户无需修改）
	lib	库文件（用户无需修改）
	src	代码文件（Auto_xxx.f90/xxx.mod/xxx.o/udf_xxx.f90）+ 编译文件（Makefile，用户无需修改）
	coefficients.input	程序执行时读取的文件（模型设置）
	geometrybynodes.input	程序执行时读取的文件（几何文件，可选项，仅在input_mode=3时生效）
	voltages.input	程序执行时读取的文件（电压文件）
	batch.slurm	作业提交文件
	Makefile	编译文件
	PASSKEY2	可执行程序（仅在编译成功后出现）

(2) 编译操作（以 Linux 平台为例）：

第一步：准备好文件夹后，加载 oneAPI 编译环境，进入程序所在的文件夹。

注意：Linux 系统可能会自动加载 Intel OneAPI 编译环境（如下图 1 所示），也可能需要手动加载，请咨询超算平台技术人员确认。



注意：右上图中 plasma 文件夹、testcase 文件夹仅作为示例，用户实际使用时需要自行新建文件夹

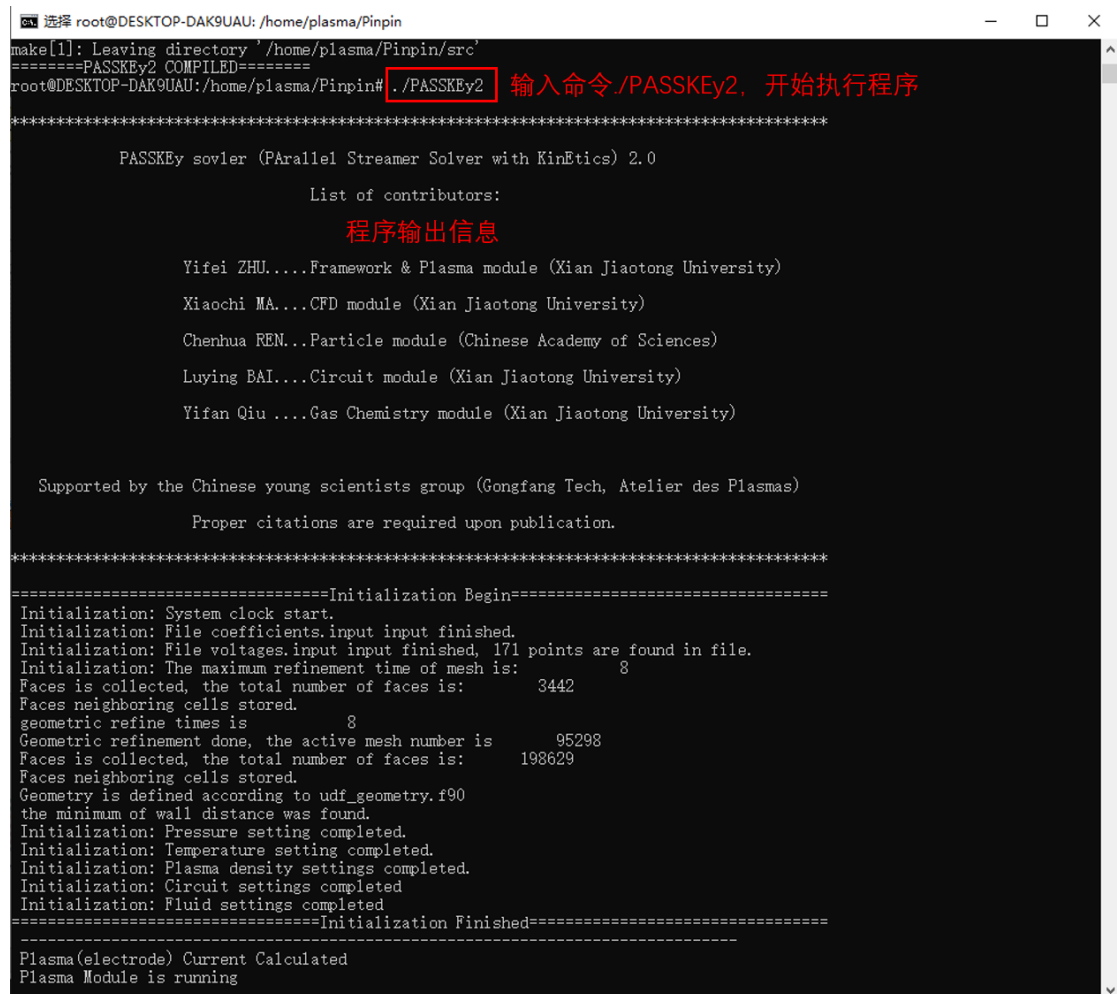
第二步：输入命令：make user。即可编译出 PASSKEY2.exe

第三步：执行 PASSKEY2 程序。

- 1) SLURM 或 PBS 等多任务管理系统用户, 可提交 slurm 脚本文件执行程序, 命令通常是: sbatch batch.slurm。注意, 任务提交脚本详情需要和超算平台技术人员进行确认。
- 2) 单机用户可直接执行命令: ./PASSKEy2 运行程序。注意, 如果用户是通过远程系统进入的计算服务器, 则退出远程登录时会默认关闭所有进程。为了避免该情况, 用户可自行检索 screen 命令的使用方法。

3. 代码执行

在编译完成后, 输入./PASSKEy2 开始执行程序, 程序启动界面如下图所示。



```
root@DESKTOP-DAK9UUAU: /home/plasma/Pinpin
make[1]: Leaving directory '/home/plasma/Pinpin/src'
=====PASSKEy2 COMPILED=====
root@DESKTOP-DAK9UUAU: /home/plasma/Pinpin# ./PASSKEy2 输入命令./PASSKEy2, 开始执行程序
*****
PASSKEy sovler (Parallel Streamer Solver with KinEtics) 2.0

List of contributors:
程序输出信息
Yifei ZHU...Framework & Plasma module (Xian Jiaotong University)
Xiaochi MA...CFD module (Xian Jiaotong University)
Chenhua REN...Particle module (Chinese Academy of Sciences)
Luying BAL...Circuit module (Xian Jiaotong University)
Yifan Qiu ...Gas Chemistry module (Xian Jiaotong University)

Supported by the Chinese young scientists group (Gongfang Tech, Atelier des Plasmas)

Proper citations are required upon publication.
*****
=====Initialization Begin=====
Initialization: System clock start.
Initialization: File coefficients.input input finished.
Initialization: File voltages.input input finished, 171 points are found in file.
Initialization: The maximum refinement time of mesh is:      8
Faces is collected, the total number of faces is:      3442
Faces neighboring cells stored.
geometric refine times is      8
Geometric refinement done, the active mesh number is      95298
Faces is collected, the total number of faces is:      198629
Faces neighboring cells stored.
Geometry is defined according to udf_geometry.f90
the minimum of wall distance was found.
Initialization: Pressure setting completed.
Initialization: Temperature setting completed.
Initialization: Plasma density settings completed.
Initialization: Circuit settings completed
Initialization: Fluid settings completed
=====Initialization Finished=====
-----
Plasma(electrode) Current Calculated
Plasma Module is running
```

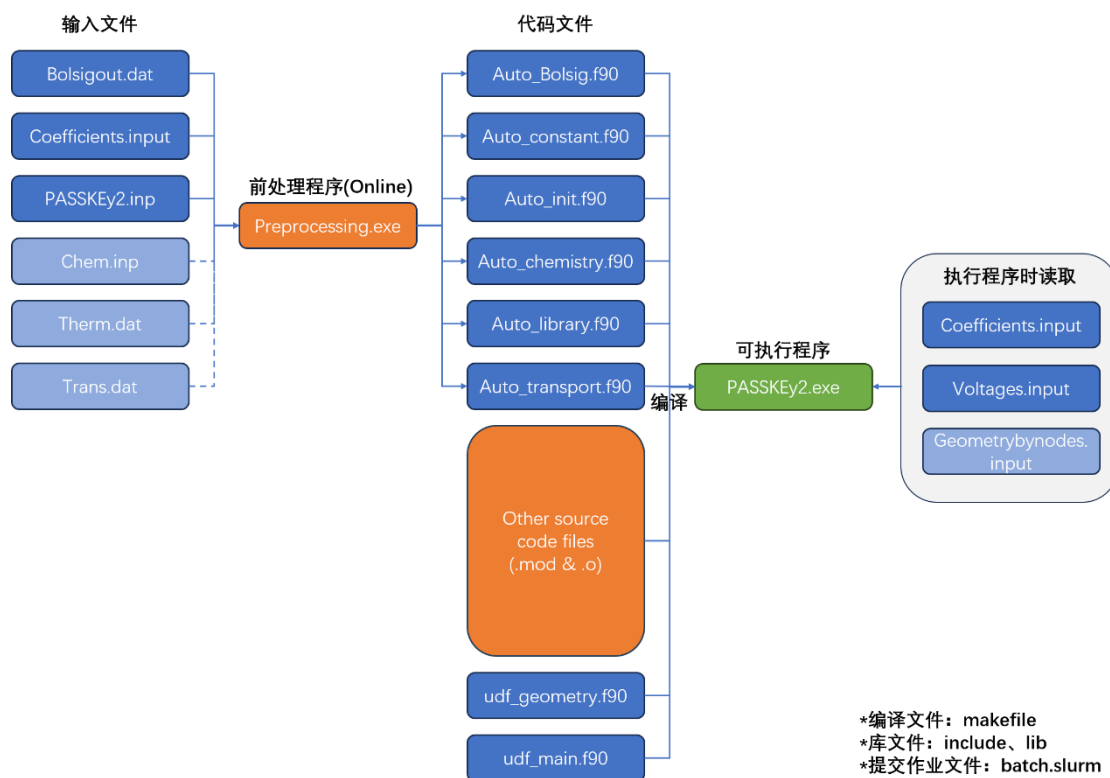
运行过程中，程序执行一步计算的过程如下图所示。

```

-----
"等离子体电流已被计算" Plasma(electrode) Current Calculated
"等离子体模块正在运行" Plasma Module is running
"等离子体密度检查 (初始)" density checked at the beginning
Poisson A matrix Assigned
Poisson RHS Assigned
Poisson equation Solved ... iparm(20)= 2
CPU time for solving Poisson equation= 0.2450000000000000
"电场被更新" Efield updated.
"泊松方程被求解" Poisson Equation Solved
"化学反应被求解" Chemistry Solved
"等离子体密度检查 (化学)" density checked after plasma chemistry
"光电离没有被求解" Photoionization Unsolved
"等离子体密度检查 (光电离)" density checked after photo-ionization
Plasma A matrix Assigned and RHS Assigned
"电子连续性方程被求解 (隐式)" Implicit electron continuity equation solved ... iparm_density(20)= 2
Plasma A matrix Assigned and RHS Assigned
"电子连续性能量被求解 (隐式)" Implicit electron energy equation solved ... iparm_density_E(20)= 4
"连续性方程被求解" Continuity Equation Solved
"等离子体密度检查 (输运)" density checked after drift-diffusion flux
"流体流动模块正在运行" Fluid Module is running
"流动方程被求解" Fluid equations (Euler/NS) are solved
Time = 1.04E-08 dTime = 5.16E-13
CFL time (electron) = 5.44E-12 Diffusion time (electron)= 1.00E-10
CFL time (energy) = 3.60E-12 Diffusion time (energy)= 7.30E-11
Dielectric time = 5.48E-13 Chemistry time (plasma)= 5.16E-13
CFL time (fluid) = 1.67E-09
-----

```

六、输入文件

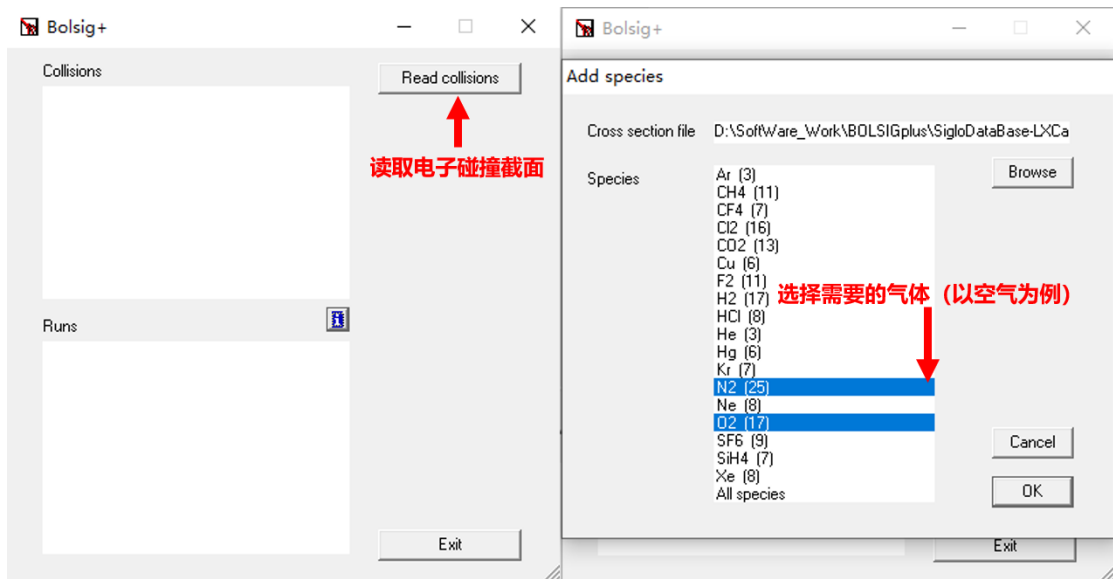


1. 等离子体输入文件 (必选)

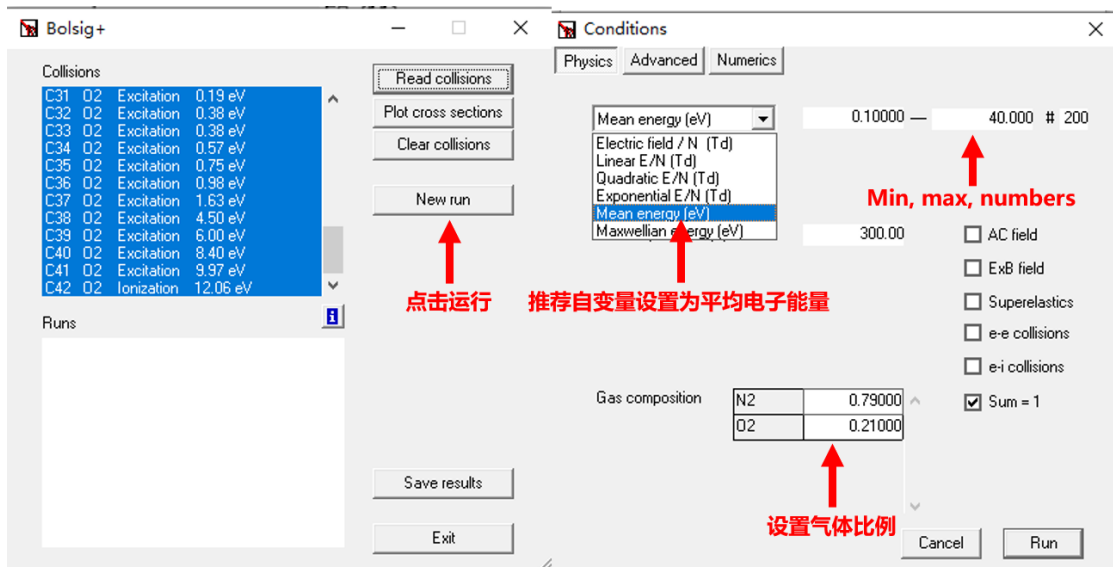
(1) Bolsig_output.dat

Bolsig_output.dat 是由 Bolsig+软件(Hagelaar et al. 2005 PSST)生成的文件, 包含了电子群参数的查找表 (电子碰撞反应速率、输运系数、碰撞功率等)。此文件会被程序和输入文件 PASSKEY2.inp 引用。

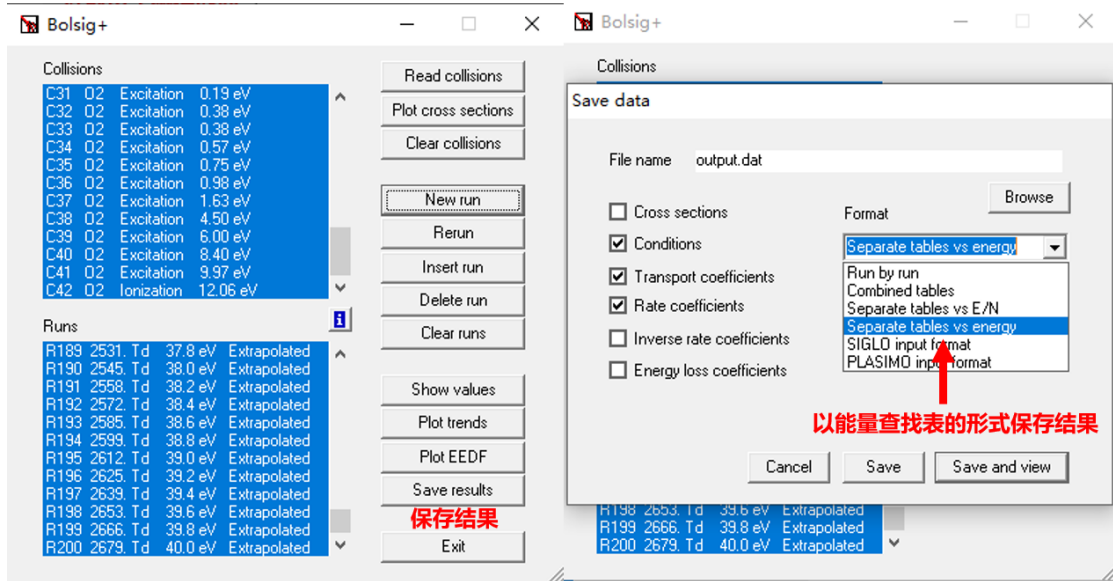
Step1: 打开 Bolsig+软件, 载入电子碰撞界面数据 (以空气为例)



Step2: 设置自变量 (通常是电场或平均电子能量) 的范围, 开始计算



Step3: 保存结果 (强烈推荐以平均电子能量的形式保存)



输出的文件结果如下所示，其中第一列为平均电子能量（自变量）第二列为迁移率（因变量），除迁移率外还有多种不同参数，如扩散率、电子碰撞反应速率，碰撞功率等。

Energy (eV)	Mobility *N (1/m/V/s)
0.1000	0.1459E+26
0.3005	0.5274E+25
0.5010	0.3878E+25
0.7015	0.2961E+25
0.9020	0.2180E+25
1.103	0.1491E+25
1.303	0.1339E+25
1.504	0.1295E+25
1.704	0.1264E+25
1.905	0.1243E+25
2.105	0.1224E+25
2.306	0.1200E+25
2.506	0.1183E+25
2.707	0.1174E+25
2.907	0.1155E+25
3.108	0.1145E+25
3.308	0.1130E+25
3.509	0.1120E+25
3.709	0.1108E+25
3.910	0.1097E+25
4.110	0.1083E+25
4.311	0.1075E+25
4.511	0.1061E+25

Energy (eV)	Energy diffusion coef. *N (1/m/s)
0.1000	0.1228E+25
0.3005	0.1484E+25
0.5010	0.1765E+25
0.7015	0.1925E+25
0.9020	0.2005E+25
1.103	0.1965E+25
1.303	0.2237E+25
1.504	0.2590E+25
1.704	0.2900E+25
1.905	0.3170E+25
2.105	0.3403E+25
2.306	0.3608E+25
2.506	0.3789E+25
2.707	0.3955E+25
2.907	0.4104E+25
3.108	0.4243E+25
3.308	0.4371E+25
3.509	0.4493E+25
3.709	0.4606E+25
3.910	0.4716E+25
4.110	0.4821E+25
4.311	0.4924E+25
4.511	0.5024E+25

C1	N2	Elastic
0.1000	0.1082E-13	
0.3005	0.2689E-13	
0.5010	0.3754E-13	
0.7015	0.4732E-13	
0.9020	0.5744E-13	
1.103	0.6590E-13	
1.303	0.7798E-13	
1.504	0.8358E-13	
1.704	0.8649E-13	
1.905	0.9301E-13	
2.105	0.9722E-13	
2.306	0.1012E-12	
2.506	0.1050E-12	
2.707	0.1087E-12	
2.907	0.1122E-12	
3.108	0.1155E-12	
3.308	0.1187E-12	
3.509	0.1217E-12	
3.709	0.1247E-12	
3.910	0.1275E-12	
4.110	0.1302E-12	
4.311	0.1327E-12	

Energy (eV)	Power /N (eV m3/s)
0.1000	0.7676E-18
0.3005	0.1389E-16
0.5010	0.3471E-16
0.7015	0.6473E-16
0.9020	0.1592E-15
1.103	0.1694E-14
1.303	0.3965E-14
1.504	0.5331E-14
1.704	0.6506E-14
1.905	0.7611E-14
2.105	0.8701E-14
2.306	0.9800E-14
2.506	0.1096E-13
2.707	0.1220E-13
2.907	0.1350E-13
3.108	0.1488E-13
3.308	0.1640E-13
3.509	0.1803E-13
3.709	0.1987E-13
3.910	0.2179E-13
4.110	0.2401E-13
4.311	0.2628E-13
4.511	0.2892E-13

(2) Coefficients.input

Coefficients.input 是设置各个计算模块及其参数的综合性输入文件，下面对此文件的每个变量的含义进行说明。

变量	说明
1) &Parallel	
Num_cores	线程数 (用于 OpenMP 并行计算)
2) &Geometrydata	
	几何输入模式 (三选一)
input_mode	1: 根据 PASSKEy2.inp 中的&Surface_define 定义 2: 根据 udf_geometry.f90 中的代码定义 3: 根据外部输入文件 Geometrybynodes.input 定义
	设置坐标系
type_axis	1: 二维平面笛卡尔坐标 (x, y) 2: 二维轴对称坐标 (r, z)
3) &SAMR	
global_size_max	用户设定的全局网格最大尺寸, 单位: m
global_size_min	用户设定的全局网格最小尺寸, 单位: m
samr_refine_mode	自适应网格细化标准, 可根据需要选择 1~5 中的数字, 具体细化标准可在 auto_library.f90 中查看或修改

samr_size_max	用户设定的自适应细化最大网格尺寸, 单位: m
samr_size_min	用户设定的自适应细化最小网格尺寸, 单位: m

4) &Approx

	漂移-扩散近似
LFA	1: 局域场近似 (bolsigout.dat 需保存为电场的函数) 0: 局域能量近似 (推荐)
Poisson_implicit	是否打开半隐式求解 Poisson 方程 1: 打开; 0: 关闭
Chemistry_implicit	是否打开隐式等离子体化学反应求解器 1: 打开 (Dvode solver); 0: 关闭 (RKC solver) (推荐使用 RKC 求解器)
CFL_release	解除 CFL 限制 (推荐不打开) 1: 打开, 当时间步长主要受到 CFL 数限制时, 此时不求解电场和化学反应, 只计算通量以节省计算时间 0: 关闭

5) &Constraints

ELimit	模型中约化电场的可能出现的最大值, 单位: Td
EbarLimit	模型中平均电子能量的可能出现的最大值, 单位: eV

6) &Flux

BC_mode	等离子体边界条件设置
---------	------------

	1: 简单边界 (忽略鞘层和电极表面二次电子发射)
	2: 物理边界 (考虑鞘层和电极表面二次电子发射)
	通量格式 (仅在显式时间积分时生效)
Scheme_flux	1: SG 格式
	2: SG+UNO 混合格式
	时间格式
	1: 显式时间积分; 2: 隐式时间积分
Scheme_time	*注意: 隐式时间积分仍在完善, 在处理强间断问题的计算结果可能会不准确; 可能存在内存溢出问题; 模型不自洽时容易求解失败; 请用户谨慎使用。

7) &Photo_options

Photo_switch	光电离模型开关 (三指数形式 Helmholtz 方程)
	1: 打开光电离; 2: 关闭光电离
PartialP	光电离模型中的气体分压
Pquenching	辐射组分的熄灭气压, 单位: Torr
k_Efficiency	光电离效率
A_photo	光电离模型拟合系数, 单位: $m^{-2}Torr^{-1}$
Lambda_photo	光电离模型拟合系数, 单位: $m^{-1}Torr^{-1}$

8) &Neutral_options

	准中性模型开关 (开启后关闭泊松方程, 根据电流守恒方程求解双极扩散场)
Neutral_mode	0: 关闭 1: 打开, 开启由时间触发 2: 打开, 开启由电流触发 3: 打开, 开启由时间步长触发
Time_trigger	准中性模型触发时间和关闭时间, (Neutral_mode=1 时生效) 单位: s
Current_trigger _material	准中性通过电流触发时, 确定对应的材料的电流, (Neutral_mode=2 时生效)
Current_trigger _neutral	准中性模型触发电流, (Neutral_mode=2 时生效), 单位: A
Timestep_trigger _neutral	准中性模型触发时间步长, (Neutral_mode=3 时生效), 单位: s

9) &Field_options

	电场求解模式设置 (请勿在隐式时间积分下使用)
Field_mode	0: 默认求解静电方程/Laplace 场 (Neutral_mode=1) 1: 打开线性场, 开启由时间触发 2: 打开线性场, 开启由电流触发 3: 打开线性场, 开启由等离子体电阻触发

Time_trigger_Field	线性场触发时间和关闭时间, (Field_mode=1 时生效) 单位: s
Current_trigger_Field	线性场触发电流 (Field_mode=2 时生效), 单位: A
Rplasma_trigger_Field	线性场触发电阻 (Field_mode=3 时生效), 单位: Ω
immersion_edge	浸没边界开关 (此功能暂未开启, 请保持默认设置) 1: 打开; 0 关闭

10) &Equilibrium_options

Switch_thermal	热等离子体开关 (使用 Maxwell 分布的电子群参数计算等离子体, 此功能暂未开启, 请保持默认设置) 1: 打开; 0: 关闭
IonizationDegree_thermal	电离度触发热等离子体开关
Temperature_thermal	气体温度触发热等离子体开关, 单位: K

11) &Circuit_options

Power_source	Power_source=1 为直接从 voltage.input 读取电压插值作为电极电压, Power_source=2 耦合外电路自治求解电极电压。若设置 Power_source=2, 则 voltage.input 将作为电路中电压源 ϕ_s 的输入
Pulse_forming_mode	目前不对用户开放, 请保持默认

Voltage_multiplier	<p>针对 Voltages.input 的修正系数, 在 Power_source=1 或 2 的情况下均起作用, 最终电压值等于基于 Voltages.input 的插值结果再乘上 Voltage_multiplier, 可用来调整电压极性或幅值</p>
Voltage_mode	<p>是支路四作为二阶 RLC 低通滤波回路使用的模式, 此时电极电压等于 U_{c4}, Voltage_mode=0 是根据前文求解 U_{ext} 的公式正常求解电极电压</p>
Circuit_implicit	<p>电路隐式求解器开关 1: 打开 (Dvode solver), 0: 关闭 (Vopdk solver)</p>
RLC_R	支路 1-4 中的电阻大小, 单位: Ω
RLC_L	支路 1-4 中的电容大小, 单位: F
RLC_C	支路 1-4 中的电感大小, 单位: L
init_Uc	支路 1-4 中电容的电压初始值, 单位: V
init_I1	支路 1-4 中电感的电流初始值, 单位: A

12) &Fluid_options

Switch_Fluid	<p>流体模块开关 1: 打开; 0: 关闭</p>
Switch_inviscidflux	<p>对流通量开关 (Euler 方程) 1: 打开; 0: 关闭</p>
Switch_viscidflux	<p>扩散通量开关 (N-S 方程)</p>

	1: 打开; 0: 关闭
	湍流模型
Turbulence_mode	0: 关闭 (层流模型) 1: 打开 SA 湍流模型 2: 打开 SST k-w 湍流模型
Turbulence_k_SST	SST k-w 模型中, k 的初始值 (仅在 Turbulence_mode=2 事生效)
Turbulence_w_SST	SST k-w 模型中, w 的初始值 (仅在 Turbulence_mode=2 事生效)
Multispecies_mode	多组分输运模型开关 0: 关闭; 1: 打开
	输运参数模式
TransportCoef_mode	0: 自洽计算, 此时需要提供 Therm.dat 和 Trans.dat 文件 1: 使用经验公式计算, 此时用户无需提供输运参数文件, 默认为空气输运参数, 用户可进入 Auto_transport.f90 修改
wall_bc	壁面边界条件 3: 粘性壁面; -3: 无粘壁面
	计算域上边界的边界条件
up_bc	1: 入口边界条件 2: 出口边界条件

	3: 粘性壁面; -3: 无粘壁面
down_bc	计算域下边界的边界条件, 设置同 Up_bc
left_bc	计算域左边界的边界条件, 设置同 Up_bc
right_bc	计算域下右边界的边界条件, 设置同 Up_bc
d_inf	无穷远流流的质量密度, 用于入口边界条件, 单位: kg/m ³
p_inf	无穷远流流的压力, 用于入口边界条件, 单位: Pa
T_inf	无穷远流流的温度, 用于入口边界条件, 单位: K
u_inf	无穷远流流的 x 方向速度, 用于入口边界条件, 单位: m/s
v_inf	无穷远流流的 y 方向速度, 用于入口边界条件, 单位: m/s
p_far	出口压力, 用于出口边界条件, 单位: Pa
	壁面温度, 单位: K
T_wall	T_wall 设置为小于零的值时, 设置为绝热边界条件 T_wall 设置为大于零的值时, 设置为等温边界条件

13) &Gas_Chemistry_options

Switch_GasChemistry	气相化学 (燃烧) 模块开关 1: 打开; 0: 关闭
Update_temp	是否更新温度 (仅在关闭流体模块时生效) 1: 打开; 0: 关闭

dtime_gaschem	化学反应时间步长, 单位: s
---------------	-----------------

14) &Coupling_options

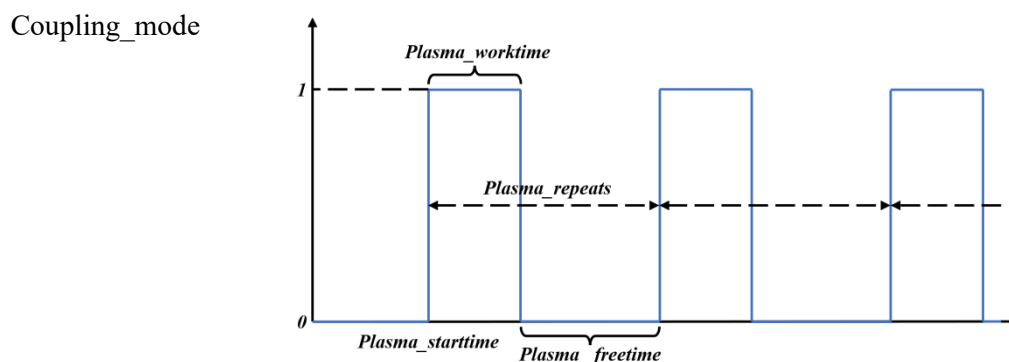
Switch_Plasma	等离子体模块开关 1: 打开; 0: 关闭
---------------	--------------------------

耦合模式

1: 周期性耦合; 0 紧密耦合 (总是更新所有物理场)

周期性耦合的设置原理如下图所示, 以 plasma module 为

例



Time_end	总计算时间, 单位: s
plasma_starttime	等离子体模块开始计算的时刻, 单位: s
plasma_worktime	等离子体模块一个周期内运行的时长, 单位: s
plasma_freetime	等离子体模块一个周期内关闭的时长, 单位: s
plasma_repeats	等离子体模块的重复周期
fluid_starttime	流体模块开始计算的时刻, 单位: s
fluid_worktime	流体模块一个周期内运行的时长, 单位: s
fluid_freetime	流体模块一个周期内关闭的时长, 单位: s

fluid_repeats	流体模块的重复周期
gas_chemistry_starttime	燃烧模块开始计算的时刻, 单位: s
gas_chemistry_worktime	燃烧模块一个周期内运行的时长, 单位: s
gas_chemistry_freetime	燃烧模块一个周期内关闭的时长, 单位: s
gas_chemistry_repeats	燃烧模块的重复周期

15) &Time_Output_options

	结果输出模式
output_mode	1: 所有结果输出到一个文件中 2: 各个时间的结果单独输出
Time_interval	输出间隔的时间步长, 单位: s
Time_interval_Fluid1	等离子体开启时流体输出的时间步长, 单位: s
Time_interval_Fluid2	等离子体关闭时流体输出的时间步长, 单位: s
	控制台输出模式
ScreenLog	1: 完整输出; 2: 简单输出

(3) PASSKEy2.inp

PASSKEy2.inp 是设置等离子体模型、初始值、以及化学反应的综合性输入文件，下面对此文件的每一部分的意义进行说明。

1) &Material_define: 定义材料属性

```
&Materials_define
#  index  level  name                state  Permittivity  GammaSee  Potential  Voltage_source  Current
1     1     1     plasma              1     1.0           0.0       0.0          0                0.d0
2     3     3     ground,electrode    3     1.0           0.1       0.0          0                0.d0
3     4     4     driven,electrode    3     1.0           0.2       1.0          1                0.d0
4     2     2     dielectric           2     4.0           0.01      0.0          0                0.d0
5     0     0     neutralgas          0     1.0           0.0       0.0          0                0.d0
6     5     5     floating,dielectric 2     1.0           0.0       0.0          0                0.d0
```

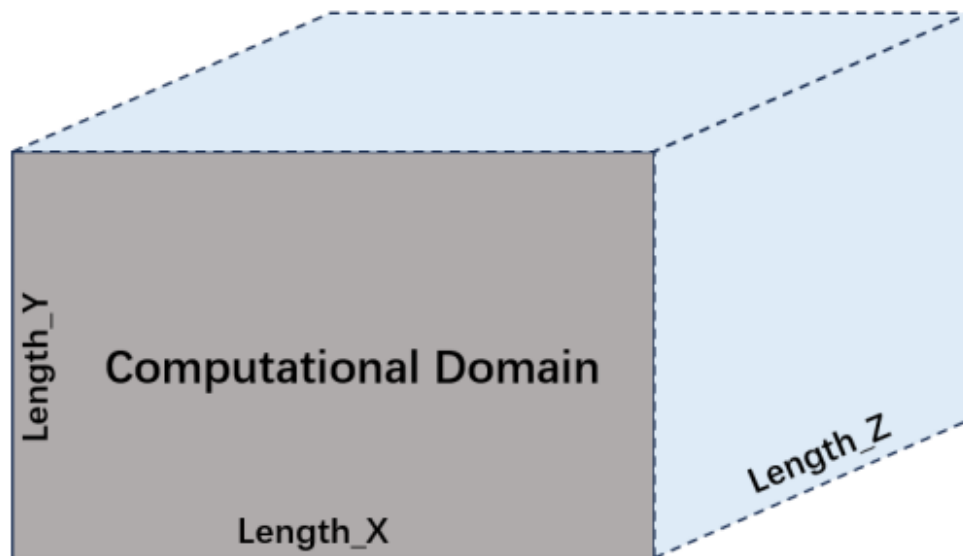
- index: 材料的编号。该值通常应保持不变。用户可以在列表中继续添加新的材料
- level: 设置材料的相互覆盖级别 (低 level 的材料会被高 level 材料覆盖)。覆盖级别遵循以下顺序: 金属>介质>等离子体>气体
- name: 材料的名称, 用户可随意修改
- state: 材料的状态。1 是气体(包括等离子体), 2 是固体非金属, 3 是固体金属
- Permittivity: 材料的相对介电常数
- GammaSee: 材料的相对介电常数
- Potential: 材料的电势 (此变量在 Voltage_source=0 时才会起作用)
- Voltage_source: 决定材料的电势由变量 Potential 决定还是由外部输入文件决定, Voltage_source=0 时取决于 Potential, Voltage_source=1 时取决于输入文件
- Current: 材料的电流, 此变量暂时不起任何作用, 用户无需设置

2) &Domain_define: 定义计算域

```
&Domain_define
#   given by the input geometry or by user
#   length_x   length_y   length_z   num grids max
      50.0d-3   50.0d-3   1.0d0     1000000
```

- length_x: 计算域的总长度, 单位: m
- length_y: 计算域的总高度, 单位: m
- length_z: 计算域的总深度, 单位: m
- num_grids_max: 计算域中的总网格数 (若网格加密过多导致网格数超过此值, 则会引起程序报错, 用户需合理估计网格数量)

length_X, Y, Z 的含义如下图所示



3) &Surface_define: 定义几何和网格尺寸

```

&Surfaces_define
# the index correspond to the number given in user's CAE model
# index name shape_type point1 point2 point3 Coeff1 Cross_Size Internal_Size material_index
1 base 1 (/0.0d-3,0.0d-3/) (/50.0d-3,50.0d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-3 1.0d-3 5
2 plasma 1 (/8.0d-3,0.0d-3/) (/31.0d-3,2.1d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-3 1.0d-3 1
3 dielectric 1 (/0.0d-3,0.0d-3/) (/32.0d-3,0.5d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 5.0d-6 1.0d-3 4
4 driven,electrode 1 (/0.0d-3,0.5d-3/) (/10.0d-3,0.55d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 5.0d-6 1.0d-3 3
5 ground,electrode 1 (/10.0d-3,0.0d-3/) (/30.0d-3,0.05d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-5 1.0d-3 2

```

- index: 几何面的编号。该值通常应保持不变。用户可以在列表中继续添加新的面
- name: 几何面的名称，用户可随意修改
- shape_type: 几何面的类型，1 为矩形，2 为椭圆，3 为三角形

point1: 矩形的左下角点/椭圆的左（下）焦点/三角形的一个顶点

point2: 矩形的右上角点/椭圆的右（上）焦点/三角形的一个顶点

point3: 三角形的一个顶点

coeff1: 椭圆方程 $(x-x_0)^2/a^2+(y-y_0)^2/b^2=r^2$ 中的 a, b, r

注意: shape_type/point1~3/coeff1 的单位都是 m。

注意: shape_type/point1~3/coeff1 属于快速定义简单几何的方法，仅在 Coefficients.input 中的变量 input_mode=1 时生效，其余情况不生效。

- cross_size: 几何面的边界网格尺寸，单位: m
- internal_size: 几何面的内部网格尺寸，单位: m
- material_index: 此几何面的材料属性，与&Material_define 的 index 对应

4) &SAMR_ArtificialRefine: 定义人工加密区域

```
&SAMR_ArtificialRefine
# Artificial encrypted grid region, mode1 for circle, mode2 for rectangle
# mode point1 point2 radius size
1 (/0.0d-3,0.0d-3/) 0.1d0 5.0d-4
2 (/0.0d-3,0.0d-3/) (/0.0d-3,0.0d-3/) 0.1d0 5.0d-4
```

- mode: mode=1 时, 人工加密一个圆的区域; mode=2 时, 人工加密一个矩形区域
- point1: 圆心/矩形的左下角点, 单位: m
- point2: (仅在 mode=2 时生效) 矩形的右上角点, 单位: m
- radius: (仅在 mode=1 时生效) 加密半径, 单位: m
- size: 人工加密网格的尺寸, 单位: m

注意: 如果不需要人工加密, 则用“#”注释此行设置即可

5) &Fluid_conditions: 定义初始压力 (单位: Pa)、温度 (单位: K)、速度

场 (单位 m/s)

```
&Fluid_conditions
# Init_value = C*exp(-(X-X0)^2/A0^2-(Y-Y0)^2/B0^2) + D
# name C X0 Y0 A0 B0 D
Pressure 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 101325.0d0
Temperature 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 300.0d0
velocity_x 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0d0
velocity_y 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0d0
```

- name: 物理场的名字, 此处用户无需修改
- C/X0/Y0/A0/B0/D: 二维高斯分布的参数, 具体意义见上图表表达式

6) &Species_define: 定义组分性质

```
&Species_define
#  index  name      charge  switch  iphoto  iplasmadyn  iconservatio  inletratio  molemass
01  E      -1.0    1.0    1       1.0         0.0           0.0         0.0d0
02  N2^+   +1.0    1.0    0       1.0         0.0           0.0         28.0129d-3
03  O2^+   +1.0    1.0    1       1.0         0.0           0.0         31.9983d-3
04  N4^+   +1.0    1.0    0       0.0         0.0           0.0         56.0263d-3
05  O4^+   +1.0    1.0    0       0.0         0.0           0.0         63.9971d-3
06  O2^N2  +0.0    1.0    0       0.0         0.0           0.0         60.0122d-3
07  O2^-   -1.0    1.0    0       1.0         0.0           0.0         31.9993d-3
08  O^-    -1.0    1.0    0       0.0         0.0           0.0         15.9999d-3
09  N       +0.0    1.0    0       0.0         0.0           0.0         14.0067d-3
10  O       +0.0    1.0    0       0.0         0.0           0.0         15.9994d-3
11  N2C3p  +0.0    1.0    0       0.0         0.0           0.0         28.0134d-3
12  N2B3p  +0.0    1.0    0       0.0         0.0           0.0         28.0134d-3
13  O1D    +0.0    1.0    0       0.0         0.0           0.0         15.9994d-3
14  N2A3   +0.0    1.0    0       0.0         0.0           0.0         28.0134d-3
15  N2     +0.0    1.0    0       0.0         1.0           0.79        28.0134d-3
16  O2     +0.0    1.0    0       0.0         0.0           0.21        31.9993d-3
```

- index: 组分编号
- name: 组分名称, 此处对于组分的命名请参照以下规则

a) 电子写法:

电子在所有文件内统一写为 E

b) 离子写法 (以 H⁺为例):

- PASSKEy2.inp 中: H⁺

沿用等离子体化学常用写法, 用 ^+ 代表一个正电荷, ^- 代表一个负电荷

- Chem.inp, Therm.dat 及 Trans.dat 中: H+

沿用传统反应动力学写法, 不需要 ^, 用 + 代表一个正电荷, 用 - 代表一个负电荷

c) 分子/原子激发态写法:

统一将描述分子/原子状态的信息写在分子/原子后的括号内, 如: H₂(v1), N₂(A),

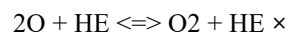
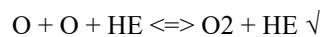
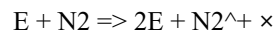
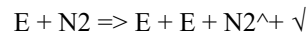
N(2D)。不可写作 H₂v1, N₂A, N₂D, 避免元素混淆。

d) 各文件组分符号关系:

除离子的电荷描述不同外 (PASSKEy2.inp 中为⁺及⁻, Chem.inp, Therm.dat 及 Trans.dat 中为+及-), 各文件所有组分的符号应完全一致, 如: PASSKEy2.inp 写作 O2(a1)的分子在 Chem.inp, Therm.dat 及 Trans.dat 中也应写作 O2(a1), 不可写为 O2(a), 否则无法读取。

e) 反应前后组分计量数写法:

计量数不可大于 1, 即有两个相同分子/原子参与反应时, 应将两个相同的组分拆开写:



- charge: 组分所带的电荷
- switch: 组分开关, switch=1.0 代表考虑此组分的反应, switch=0.0 代表关闭此组分的反应
- iphoto: 该组分是否是光电离反应的产物。请确保 iphoto = 1 的产物是正负成对的, 以确保电荷之和为 0。
- iplasmadyn: 是否考虑该组分受电场作用的运动。如果是, 那么必须设置其运输参数。
- iconservation: 设置守恒组分, 此处是为了考虑耦合流体时, 宏观密度不等于组分密度和的情况, 建议设置最大化学计量数的组分为 1.0 (如空气中的氮气)

- inletratio: 设置气流入口的摩尔分数, 此处是为了考虑耦合流体时, 存在外部气流吹入的情况, 如果不考虑与流体耦合, 此处可忽略
- molemass: 组分的摩尔质量, 单位: kg/mol

7) &Species_distribution: 设置初始组分分布

```
&Species_distribution
# Init_density = C*exp(-(X-X0)^2/A0^2-(Y-Y0)^2/B0^2) + D
# Electron density is automatically calculated as the sum of all ions
#   index   C      X0      Y0      A0      B0      D
#   1       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    0.0
#   2       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d10*0.79d0
#   3       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d10*0.21d0
#   4       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d5
#   5       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d5
#   6       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d5
#   7       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d5
#   8       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d5
#   9       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d5
#  10       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d5
#  11       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d5
#  12       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d5
#  13       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d5
#  14       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    1.0d5
#  15       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    DensN*0.79d0
#  16       0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    DensN*0.21d0
```

- index: 组分编号, 与&Species_define 中的 index 一一对应
- C/X0/Y0/A0/B0/D: 二维高斯分布的参数, 具体意义见上图表达式

注意: DensN 指中性粒子数密度

8) &Species_distribution: 设置等离子体输运系数

```
&Species_Transport_plasma
#   index   mobility                diffusion
#   1       BOLSIG                  BOLSIG
#   2       4.0d21/DensN             (1.43073+0.00936*EN) *1.d20/DensN
#   3       3.8d21/DensN             (1.34677+0.02671*EN) *1.d20/DensN
#   7       1.2*1.d-4                 4*1.d20/DensN
```

- index: 组分编号, 与&Species_define 中的 index 一一对应
- mobility: 离子的迁移率, 单位: $\text{m}^2/(\text{Vs})$

- diffusion: 离子的扩散率, 单位: m^2/s

9) &Reactions_plasma: 定义等离子体反应

```
&Reactions_plasma
# Rate constant is in dependence on pressure and temperature
#reactions containing electrons, excited species and other diluted species
#
# name enthalpy switch iphoto rate_const
E+N2=>N2^++E+E -15.60 1 1 BOLSIG C25
E+O2=>O2^++E+E -12.06 1 1 BOLSIG C42
E+N2=>E+N2A3 -6.22 1 0 BOLSIG C12
E+N2=>E+N2B3p -7.39 1 0 BOLSIG C15
E+N2=>E+N2C3p -11.03 1 0 BOLSIG C21
E+O2=>E+O+O 0.8 1 0 BOLSIG C39
E+O2=>E+O+O1D 1.26 1 0 BOLSIG C40
N2^++N2+N2=>N4^++N2 1.057 1 0 5.d-29*1.d-12
N2^++N2+O2=>N4^++O2 1.057 1 0 5.d-29*1.d-12
N4^++O2=>O2^++N2+N2 2.453 1 0 2.5d-10*1.d-6
N2^++O2=>O2^++N2 3.51 1 0 6.d-11*1.d-6
O2^++N2+N2=>O2^N2+N2 0.0 1 0 9.d-31*1.d-12
O2^N2+N2=>O2^++N2+N2 0.0 1 0 4.3d-10*1.d-6
O2^N2+O2=>O4^++N2 0.0 1 0 1.d-9*1.d-6
O2^++O2+N2=>O4^++N2 0.425 1 0 2.4d-30*1.d-12
O2^++O2+O2=>O4^++O2 0.425 1 0 2.4d-30*1.d-12
E+O2+O2=>O2^-+O2 0.0 1 0 2.d-29*(300.d0/(Te+1.d0))*1.0d-12
E+O2=>O^-+O 0.0 1 0 BOLSIG C27
O^-+O=>O2+E 0.0 1 0 1.4d-10*1.d-6
O2^-+O=>O2+O+E 0.0 1 0 1.5d-10*1.d-6
E+N4^+=>N2+N2C3p 3.49 1 0 2.3d-6*(300.d0/Te)**0.53*1.d-6
E+N2^+=>N+N 2.25 1 0 1.8d-7*(300.d0/Te)**0.39*1.d-6
E+O4^+=>O+O+O2 4.6 1 0 1.4d-6*(300.d0/(Te+1.d0))*0.5*1.d-6
E+O2^+=>O+O 5.0 1 0 2.d-7*(300.d0/(Te+1.d0))*1.d-6
O2^-+O4^+=>O2+O2+O2 6.5 1 0 1.d-7*1.d-6
O2^-+O4^++N2=>O2+O2+O2+N2 6.5 1 0 2.d-25*1.d-12
O2^-+O4^++O2=>O2+O2+O2+O2 6.5 1 0 2.d-25*1.d-12
O2^-+O2^++N2=>O2+O2+N2 7.0 1 0 2.d-25*1.d-12
O2^-+O2^++O2=>O2+O2+O2 7.0 1 0 2.d-25*1.d-12
O^-+N2^+=>O+N+N 2.25 1 0 2.d-7*(300.d0/Tgas)**0.5*1.d-6
N2C3p+N2=>N2B3p+N2 0.0 1 0 0.13d-10*1.d-6
N2C3p+O2=>N2+O+O1D 4.83 1 0 3.d-10*1.d-6
N2C3p=>N2B3p 0.0 1 0 2.45d7
N2B3p+O2=>N2+O+O 2.35 1 0 3.d-10*1.d-6
N2B3p+N2=>N2A3+N2 0.0 1 0 1.d-11*1.d-6
N2A3+O2=>N2+O+O 1.0 1 0 2.5d-12*(Tgas/300.d0)**0.5d0*1.d-6
O1D+O2=>O+O2 0.33 1 0 3.3d-11*exp(67.d0/Tgas)*1.d-6
O1D+N2=>O+N2 1.37 1 0 1.8d-11*exp(107.d0/Tgas)*1.d-6
```

- name: 反应的表达式, 应保证物质守恒和电荷守恒
- enthalpy: 反应焓 (放热为正)
- switch: 反应是否在计算时加以考虑
- iphoto: 反应是否参与计算光电离强度
- rate_const: 反应速率常数。rate_const 的定义可以是一个常量、一个表达式 (遵循 Fortran 格式)或“BOLSIG Cxx”的形式。如果使用“BOLSIG Cxx”形式,

则需要在 BOLSIG+输出文件中找到对应电子碰撞反应的编号 (XX 值)。

rate_const 的单位为 m^6/s 、 m^3/s 或 s ，具体取决于反应级别。

2. 化学反应输入文件 (可选)

(1) Chem.inp

Chem.inp 为燃烧反应的数据文件, 该文件包含燃烧相关反应机理。首先, 文件需指定出现在反应体系的元素及粒子名称, 每部分均以 END 结尾:

随后是反应机理的描述, 以 REACTIONS 开头, 另起一行开始输入反应机理。输入的反应可分为如下五类: 一般反应、重复反应、逆反应速率系数已知的反应、三体反应及压力相关反应:

1) 一般反应:

该类反应仅需输入反应式及 Arrhenius 系数, 示例如下所示。每一行依次为描述反应的字符串、三个 Arrhenius 系数 (顺序为指前因子、温度指数、活化能):

```
H+O2<=>O+OH 1.040E+14 0.000 15286.0
O+H2<=>H+OH 3.818E+12 0.000 7948.0
```

2) 重复反应:

有时两个或两个以上的反应会涉及同一套反应物和产物, 但是明显经过不同的过程, 这时几个反应的字符串时相同的, 但 Arrhenius 系数相去甚远, 此时需要使用 DUPLICATE 符号来表示重复反应, 仅需在每个反应的下一行输入 DUPLICATE 即可:

```
O+H2<=>H+OH 3.818E+12 0.000 7948.0
DUPLICATE
O+H2<=>H+OH 8.792E+14 0.000 19170.0
DUPLICATE
```

3) 逆反应速率系数已知的反应:

当逆反应速率系数未知时, 程序会默认使用平衡常数法计算逆反应速率。但当逆反应速率的 Arrhenius 系数已知时, 直接使用 Arrhenius 系数计算会大大提高

速率的准确性。这需要在正常反应的下一行输入 REV 及逆反应的 Arrhenius 系数:

```
CH3CO2+M<=>CH3+CO2+M 4.400E+15 0.000 1.050E+04  
REV/ 4.548E+08 1.378 1.752E+04/
```

4) 三体反应:

作为单分子/重组三体反应的一个例子, 考虑甲基重组。在高压极限下, 反应的恰当描述是 $\text{CH}_3+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_6$ 。而在低压极限下, 需要第三体碰撞来提供反应进行所需的能量, 即适当的描述是 $\text{CH}_3+\text{CH}_3+\text{M}\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_6+\text{M}$ 。而当压力和温度使反应处于极限之间时, 速率表达式更为复杂。为了表示在这个极限之间的反应, 使用 $\text{CH}_3+\text{CH}_3(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_6(+\text{M})$ 来进行描述。该类反应的机理输入需要使用 TROE 形式来进行描述:

```
H+O2 (+M) <=>HO2 (+M) 4.651E+12 0.440 0.0  
LOW/ 9.042E+19 -1.500 492.2/  
TROE/ 0.500 1.00E-30 1.00E+30/  
H2/ 3.0/ H2O/ 21/ O2/ 1.1/ CO/ 2.7/ CO2/ 5.4/ HE/ 1.2/ N2/ 1.5/
```

第一行为反应的表示式及高压极限下的 Arrhenius 系数。第二行需要先输入 LOW, 随后是低压极限下的 Arrhenius 系数。第三行首先为字符 TROE, 随后依次为 F 的计算中的 a、T***、T*以及 T**, 其中 T**可省略。最后是不可能涉及的 M 名称及其增强效率。

5) 压力相关反应:

部分反应的速率系数是与压力息息相关的, 这类反应的 Arrhenius 系数需使用 PLOG 形式来描述:

```

CH2CHO<=>H+CH2CO 1.320E+34 -6.570 49460.0
PLOG/ 0.010 2.390E+25 -4.800 43429.0/
PLOG/ 0.025 2.480E+27 -5.230 44309.0/
PLOG/ 0.100 2.370E+30 -5.860 46120.0/
PLOG/ 1.000 1.320E+34 -6.570 49460.0/
PLOG/ 10.000 3.460E+36 -6.920 52986.0/
PLOG/ 100.000 1.180E+36 -6.480 55178.0/

```

第一行为反应描述及其在一个大气压下的 Arrhenius 系数, 随后几行均以 PLOG 开头, 其后几个数据分别为该速率系数可使用的最大压力(以 atm 为单位)及三个 Arrhenius 系数。

附 Chem.inp 案例:

```

ELEMENTS
C H N O AR HE KR E
END
SPECIES
H O2 OH HO2
CH2CHO CH2CO CH3CO2 CH3 CO2
H2 CO HE N2
E
END
REACTIONS
H+O2<=>O+OH 1.040E+14 0.000 15286.0
O+H2<=>H+OH 3.818E+12 0.000 7948.0
DUPLICATE
O+H2<=>H+OH 8.792E+14 0.000 19170.0
DUPLICATE
H+O2 (+M) <=>HO2 (+M) 4.651E+12 0.440 0.0
LOW/ 9.042E+19 -1.500 492.2/
TROE/ 0.500 1.00E-30 1.00E+30/
H2/ 3.0/ H2O/ 21/ O2/ 1.1/ CO/ 2.7/ CO2/ 5.4/ HE/ 1.2/ N2/ 1.5/
CH3CO2+M<=>CH3+CO2+M 4.400E+15 0.000 1.050E+04
REV/ 4.548E+08 1.378 1.752E+04/
CH2CHO<=>H+CH2CO 1.320E+34 -6.570 49460.0
PLOG/ 0.010 2.390E+25 -4.800 43429.0/
PLOG/ 0.025 2.480E+27 -5.230 44309.0/
PLOG/ 0.100 2.370E+30 -5.860 46120.0/
PLOG/ 1.000 1.320E+34 -6.570 49460.0/
PLOG/ 10.000 3.460E+36 -6.920 52986.0/
PLOG/ 100.000 1.180E+36 -6.480 55178.0/
END

```

(2) Therm.dat

therm.dat 是包含体系内粒子热物性参数的文件, 该文件数据格式与 Chemkin 相关文件的格式相同。

下图给出了一些热力学性质输入的例子。第一个热力学数据行必须以单词 THERMO 开始。在这些 OH、OH⁺和 OH⁻的例子中, 从第 25-34 列可以看出, 每个分子的元素组成是一个 O 原子和一个 H 原子。此外, 第 35 - 39 列表明 OH⁺和 OH⁻这两种物质是离子形态的, 因为它们分别含有-1 和+1 的电荷(E)。第 45 列中的 G 表示所有三种物种都是气态的。对于 OH, 第 66-73 列中的 1000.00 表示高低温拟合之间的公共温度为 1000.00 K。如果第 66-73 列是空白的, 如 OH⁺和 OH⁻, 那么公共温度是第 2 行中所给出的温度范围。每一种粒子后必须立即跟随其物种数据: 每一中粒子名称所在行的下三行数据分别为高温区间、低温区间的拟合参数。

```
THERMO
  300.000  1000.000  5000.000

OH          1212860  1H  1          G  0300.00  5000.00  1000.00  1
0.02882730E+02 0.10139743E-02-0.02276877E-05 0.02174683E-09-0.05126305E-14 2
0.03886888E+05 0.05595712E+02 0.03637266E+02 0.01850910E-02-0.16761646E-05 3
0.02387202E-07-0.08431442E-11 0.03606781E+05 0.13588605E+01 4
OH+        1212860  1H  1E -1      G  0300.00  5000.00          1
0.02719058E+02 0.15085714E-02-0.05029369E-05 0.08261951E-09-0.04947452E-13 2
0.15763414E+06 0.06234536E+02 0.03326978E+02 0.13457859E-02-0.03777167E-04 3
0.04687749E-07-0.01780982E-10 0.15740294E+06 0.02744042E+02 4
OH-        1212860  1H  1E  1      G  0300.00  5000.00          1
0.02846204E+02 0.10418347E-02-0.02416850E-05 0.02483215E-09-0.07775605E-14 2
-0.01807280E+06 0.04422712E+02 0.03390037E+02 0.07922381E-02-0.01943429E-04 3
0.02001769E-07-0.05702087E-11-0.01830493E+06 0.12498923E+01 4
END
```

(3) Trans.dat

该文件为可选的输入文件，内含所有气相组分（包含等离子体特有的离子/激发态分子等）的输运计算参数，需与 Therm.dat 一同输入。Trans.dat 的文件格式较为简单，仅须包含：

第一列：组分名称

第二列：组分构型。如果指数为 0，则分子为单个原子。如果指数为 1，分子是线性的；如果指数为 2，分子是非线性的。

第三列：以 K 为单位的 Lennard-Jones 势阱深度

第四列：以 Å 为单位的 Lennard-Jones 碰撞直径

N	0	71.400	3.298
NO	1	97.530	3.621
NH	1	80.000	2.650
N2O	1	232.400	3.828
NO2	2	200.000	3.500
HNO	2	116.700	3.492
HONO	2	350.000	3.950
O3	2	180.000	4.100

注意：该文件可以直接使用符合 Chemkin 格式的输入文件，虽然 Chemkin 输入文件比所需文件多出三列数据，但读取数据时多余的数据并不会被读取：

H	0	145.000	2.050	0.000	0.000	0.000	! Chemkin transport database
H2	1	38.000	2.920	0.000	0.790	280.000	! Chemkin transport database
O	0	80.000	2.750	0.000	0.000	0.000	! Chemkin transport database
O2	1	107.400	3.458	0.000	1.600	3.800	! Chemkin transport database
OH	1	80.000	2.750	0.000	0.000	0.000	! Chemkin transport database
H2O	2	572.400	2.605	1.844	0.000	4.000	! Chemkin transport database
N2	1	97.530	3.621	0.000	1.760	4.000	! Chemkin transport database
HO2	2	107.400	3.458	0.000	0.000	1.000	! Chemkin transport database
H2O2	2	107.400	3.458	0.000	0.000	3.800	! Chemkin transport database
AR	0	136.500	3.330	0.000	0.000	0.000	! Chemkin transport database
HE	0	10.200	2.576	0.000	0.000	0.000	! Chemkin transport database

3. 程序运行时需要读取的文件

(1) Coefficients.input (必选)

前文已详细说明，在此不再赘述。

(2) Voltages.input (必选)

Voltages.input 是电压输入文件，支持多个材料的电压输入，当材料设置中的 voltage_source=1 时，程序会读取对应材料的电压，如下图所示：

Materials_define										Material 3的voltage_source=1	
#	index	level	name	state	Permittivity	GammaSee	Potential	Voltage_source	Current		
1	1	1	plasma	1	1.0	0.0	0.0	0	0.d0		
2	3	3	ground,electrode	3	1.0	0.1	0.0	0	0.d0		
3	4	4	driven,electrode	3	1.0	0.2	1.0	1	0.d0		
4	2	2	dielectric	2	4.0	0.01	0.0	0	0.d0		
5	0	0	neutralgas	0	1.0	0.0	0.0	0	0.d0		
6	5	5	floating,dielectric	2	1.0	0.0	0.0	0	0.d0		

Time	Mat1	Mat2	Mat3	Mat4	Mat5	Mat6	Mat7	Mat8
0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	1.1050E+01	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
1.0800E-11	0.0000E+00	0.0000E+00	1.1050E+01	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
1.3800E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	2.8238E+01	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
2.6600E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	4.2971E+01	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
3.9000E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	6.7526E+01	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
5.0300E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	1.0804E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
6.0100E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	1.6575E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
6.8100E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	2.3450E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
7.4800E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	3.1062E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
8.0200E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	3.9165E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
8.4700E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	4.7514E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
8.8800E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	5.5863E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
9.2600E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	6.4334E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
9.5800E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	7.2928E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
9.8700E-10	0.0000E+00	0.0000E+00	8.1522E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
1.0100E-09	0.0000E+00	0.0000E+00	9.0239E+02	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00

程序仅读取Mat3这一列的电压

注意：请尽量不要让初始时刻的电压为零，可以给一个较小的值以防程序出错

(3) Geometrybynodes (可选)

Geometrybynodes.input 是一个三列的数据表，仅在 input_mode=3 时生效，第一列是 X 坐标，第二列是 Y 坐标，第三列是几何面的编号，示例如下：

x	y	surf_index
0	0	3
0	2.58E-04	3
0	4.51E-04	3
0	5.95E-04	3
0	7.04E-04	3
0	7.86E-04	3
0	8.47E-04	3
0	8.94E-04	3
0	9.28E-04	3
0	9.54E-04	3
0	9.74E-04	3
0	9.89E-04	3

注意 1：此文件中节点 (node) 的数量决定了几何生成的质量，在允许的范围内，节点应尽可能的多。建议节点的之间的尺寸应小于设置网格的尺寸。

注意 2：可使用其他 CAD 或 CAE 软件的几何构建模块完成结构绘制，并将结构数据以三列数据表形式输出给 PASSKEY2。

七、几何定义与网格划分

1. 几何定义

比较	PASSK	udf_geometry.	Geometrybynodes.i
	Ey2.inp	f90	nput
input_mode	1	2	3
定义方法	设置参数	编写代码	构建输入文件
能力	矩形、椭圆、 三角形的组合	任意图形 (需已知解析式)	任意图形
优点	快速、便捷	自由、精确	自由、便捷
缺点	仅能定义简单 图形	需编写代码，容易出 错，实现复杂	需借助外部工具，与网格尺寸紧 密相关

(1) 使用 PASSKEy2.inp 定义几何

```

$Surfaces_define
# the index correspond to the number given in user's CAE model
# index name shape_type point1 point2 point3 Coeff1 Cross_Size Internal_Size material_index
1 base 1 (/0.0d-3,0.0d-3/) (/50.0d-3,50.0d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-3 1.0d-3 5
2 plasma 1 (/8.0d-3,0.0d-3/) (/31.0d-3,2.1d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-3 1.0d-3 1
3 dielectric 1 (/0.0d-3,0.0d-3/) (/32.0d-3,0.5d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 5.0d-6 1.0d-3 4
4 driven,electrode 1 (/0.0d-3,0.5d-3/) (/10.0d-3,0.55d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 5.0d-6 1.0d-3 3
5 ground,electrode 1 (/10.0d-3,0.0d-3/) (/30.0d-3,0.05d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-5 1.0d-3 2
    
```

上图中红框区域为使用 PASSKEy2.inp 定义几何的部分，用户可通过调整红框中的参数快速设置几何。

shape_type: 几何面的类型，1 为矩形，2 为椭圆，3 为三角形

point1: 矩形的左下角点/椭圆的左（下）焦点/三角形的一个顶点

point2: 矩形的右上角点/椭圆的右（上）焦点/三角形的一个顶点

point3: 三角形的一个定点

coeff1: 椭圆方程 $(x-x_0)^2/a^2+(y-y_0)^2/b^2=r^2$ 中的 a, b, r

(2) 使用 udf_geometry.f90 定义几何

用户需要手工编写 Fortran 代码来定义几何结构，基本方法是确定面的几何形状，结合坐标(x, y)，用 if else then 语句描述出面的范围，并确定此范围内的面的编号：

```
%Surfaces_define
# the index correspond to the number given in user's CAE model
#
# index  name          shape_type  point1          point2          point3          Coeff1          Cross_Size      Internal_Size    material_index
# 1      base             1          (/0.0d-3,0.0d-3/) (/50.0d-3,50.0d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-3 1.0d-3 5
# 2      plasma          1          (/8.0d-3,0.0d-3/) (/31.0d-3,2.1d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-3 1.0d-3 1
# 3      dielectric       1          (/0.0d-3,0.0d-3/) (/32.0d-3,0.5d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 5.0d-6 1.0d-3 4
# 4      driven,electrode 1          (/0.0d-3,0.5d-3/) (/10.0d-3,0.55d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 5.0d-6 1.0d-3 3
# 5      ground,electrode 1          (/10.0d-3,0.0d-3/) (/30.0d-3,0.05d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-5 1.0d-3 2
```

下面是一小段描述 Pin-pin 放电的几何体，对下面的代码进行解释以供用户参考：

k=1：定义第一个几何面，即给所有区域盖上一层 index=1 的“base”区域。

k=2：X 小于 10 mm，Y 在 10~30 mm 之间，即此区域是一个矩形，被设置为 index=2 的“plasma”区域。

k=3：没有定义此区域的几何，跳过。

k=4： $Y > 10000/6 * X^2 + 0.0225$ 且 $X < 0.001$ 的区域，指的是二次函数的和直线围起来的一部分区域，作为了 index=4 的“driven electrode”区域。

k=5： $Y < -10000/6 * X^2 + 0.02$ 且 $X < 0.001$ 的区域，指的是二次函数的和直线围起来的一部分区域，作为了 index=5 的“ground electrode”区域。

```

subroutine Set_udfgeometry(X,Y,k)
! Users can define complex geometry in this subroutine (like the way in PASSKEy_1.0 version)
!!! Not to use a line or a cell boundary to define the gemetry.

```

```

double precision, intent(in) :: X,Y
integer, intent(out) :: k

```

需要用户修改的部分

```

!=====!
! user define geometry function
! assign default surface index (base gas)
  k = 1

! assign plasma surface
if ((X <= 10.0d-3) .and. (Y >= 10.0d-3) .and. (Y <= 30.0d-3)) then
  k = 2
endif

! assign dielectric surface

! assign Driven electrode surface
if ((Y >= (1.d4/6.d0*X**2+2.25d-2)) .and. (X <= 1.d-3)) then
  k = 4
endif

! assign Ground electrode surface
if ((Y <= (-1.d4/6.d0*X**2+2.d-2)) .and. (X <= 1.d-3)) then
  k = 5
endif
!=====!

```

```

end subroutine Set_udfgeometry

```

```

end module udf_geometry

```

(3) 使用输入文件 Geometrybynodes.input 定义几何

上文中已进行了说明，请见“六-3-(3)”小节，在此不再赘述。

2. 网格划分与网格尺寸设置

```

$Surfaces_define
# the index correspond to the number given in user's CAE model
# index name shape_type point1 point2 point3 Coeff1 Cross_Size Internal_Size material_index
1 base 1 (/0.0d-3,0.0d-3/) (/50.0d-3,50.0d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-3 1.0d-3 5
2 plasma 1 (/8.0d-3,0.0d-3/) (/31.0d-3,2.1d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-3 1.0d-3 1
3 dielectric 1 (/0.0d-3,0.0d-3/) (/32.0d-3,0.5d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 5.0d-6 1.0d-3 4
4 driven,electrode 1 (/0.0d-3,0.5d-3/) (/10.0d-3,0.55d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 5.0d-6 1.0d-3 3
5 ground,electrode 1 (/10.0d-3,0.0d-3/) (/30.0d-3,0.05d-3/) (/99,99/) (/1,1,1/) 1.0d-5 1.0d-3 2

```

PASSKEy2 中，网格划分是自动进行的，用户只需要指定每个面的两个尺寸

即可：

位于面和面的交界面处的网格尺寸，即 Cross_size

位于面内部的网格尺寸，即 Internal_size

自适应网格的设置是在 Coefficients.input 中，请参考上文。

关于网格尺寸，在大气压下的放电可设置为 $5\mu\text{m}$ 左右，可参考等离子体计算工坊公众号的往期推送《模拟 tips（三）：等离子体空间尺度与 CPD 网格》：

https://mp.weixin.qq.com/s/IgykcDZ_Bu2v9h-i_gatIQ

第三部分 后处理

PASSKEy2 可通过调用一系列输出函数将计算结果输出到硬盘上。在主文件夹中的 udf_main.f90 文件里，可以查阅使用方法示例。

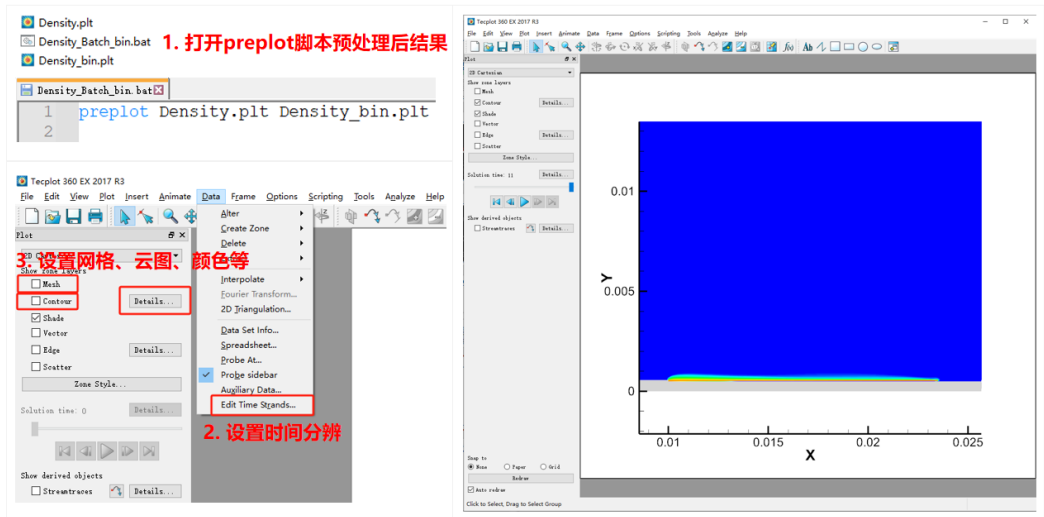
1. 常用的输出子程序

所有的输出函数均在 bin_output 模块文件中进行了定义，包括(但不限于)：

函数名	功能
output_mesh()	输出网格
output_charge()	输出净电荷
output_circuitStatus()	输出电路电学参数
output_current()	输出电流
Output_Density()	输出组分密度和电子温度
Output_Efield()	输出电场和约化电场
Output_Fluid()	输出流场(质量密度、压力、速度、温度、密度梯度)
Output_Material()	输出材料编号(常用于检查几何)
Output_Photoionization_source()	输出光电离源项
Output_Potential()	输出电势
Output_reaction_source()	输出反应源项

2. 输出文件格式

二维结果的输出文件通常为 XXX.plt 文件，用户可运行批处理命令将其转换为读取更快的二进制文件。将其拖动到 Tecplot 图标上即可打开，可参考下图所示流程操作查看结果。



电学参数结果的输出文件为 XXX.dat 文件，可使用 MATLAB，Origin 等画图软件打开，电学参数文件含义如下：

output_current()输出结果为 Current_driven_ground.dat

第一列为时间（单位 ns）

第二列为高压电极传导电流（单位 A，后续电流相关输出单位均为 A）

第三列为高压电极位移电流

第四列为地电极传导电流

第五列为地电极位移电流

第六列为电极电压（单位 V）

最后一列为代码调试用，用户可忽略

output_CircuitStatus()输出结果为 CircuitStatus.dat

第一列为时间（单位 ns）

第二列至第五列为电容 C1~C4 的电压 UC1~UC4（单位 V）

第六列至第九列为电感 L1~L4 的电流 IL1~IL4（单位 A）

第十列为高压电极总电流（正方向）

第十一列为电流上升率（单位 A/s）。

*2025 年 1 月更新:

1. 由于认为等离子体模块关闭时电场默认为零, 故此时不再在流体动量守恒方程中求解体积力。
2. 除了通过反应焓变自治计算气体加热以外, 还增加了设置电子焦耳热 \times 气体加热效率的方式来计算气体加热, 设置方法见 `Coefficients.input`