

# Metodologie numeriche particellari e drift-diffusion per lo studio di plasmi debolmente ionizzati in applicazioni di interesse industriale

## Progetto di Ricerca

Il presente bando per assegno di ricerca riguarda un'attività di modellistica teorico numerica rivolta all'analisi di plasmi debolmente ionizzati. In particolare, si intende perfezionare e mettere a punto tecniche numeriche basate su modelli Drift-Diffusion e Particle In Cell (PIC). I principali ambiti a cui si rivolge il lavoro proposto sono:

- plasmi freddi
- propulsione elettrica spaziale

Un plasma freddo combina i vantaggi derivanti dalla condizione di non equilibrio con la facilità di funzionamento a pressione atmosferica e con la flessibilità nella scelta dei materiali usati. Le scariche a barriera dielettrica (DBD) in aria producono generalmente specie chimiche attive (ozono, radicali OH, ecc.), che sono alla base di molte applicazioni industriali finalizzate alla sterilizzazione, al trattamento di flussi di gas ed alla combustione. Una delle maggiori difficoltà nel modellare un plasma freddo prodotto da una DBD è la corretta rappresentazione del regime di non equilibrio. In particolare, la formazione degli streamer all'interno della DBD è contraddistinta da tempi e lunghezze caratteristiche molto diversi da quelli relativi alla scarica stessa.

La propulsione elettrica differisce da quella chimica nella modalità utilizzata per energizzare e accelerare il gas. La propulsione al plasma utilizza energia elettrica per ionizzare il propellente e quindi impartire energia cinetica al plasma risultante. I propulsori al plasma rappresentano un'interessante alternativa tecnica ai propulsori chimici grazie a un impulso specifico molto più elevato (cambiamento di quantità di moto per unità di propellente impiegata), maggiore efficienza di spinta e capacità di integrazione del sistema. Molti tipi di propulsori al plasma sono stati sviluppati negli ultimi 60 anni e possono essere suddivisi in tre categorie principali dipendenti dal meccanismo di accelerazione: (1) propulsori elettrotermici, (2) elettrostatici e (3) elettromagnetici. Le attività proposte nell'ambito dell'assegno di ricerca riguardano i propulsori Hall, che rientrano nella seconda delle categorie precedenti. Questo tipo di propulsore, sebbene rappresenti una tecnologia piuttosto matura rispetto ad altri dispositivi recenti, mostra un importante degrado delle prestazioni se ridimensionato a potenze ridotte e molto basse, sotto la gamma di kW. Ciò rappresenta una grande sfida tecnica, poiché negli ultimi anni è emersa una tendenza molto importante verso l'impiego della propulsione elettrica per le manovre e il mantenimento della stazione di piccoli satelliti.

Un modello Drift-Diffusion è basato sull'equazione macroscopica che studia l'evoluzione delle specie nel plasma:

$$\frac{\partial N_s}{\partial t} = -\nabla \cdot (-\nabla N_s + \mu_s \vec{E}) + \Omega_s. \quad (1)$$

I termini di sorgente che compaiono al secondo membro della (1) sono derivati dal modello chimico e includono i fenomeni rilevanti nella descrizione della cinetica del plasma, come ionizzazioni ricombinazioni attaccamenti, dissociazioni. Il modello è completato da un'equazione che descrive la dipendenza del campo elettrico dalla distribuzione delle cariche e dalle condizioni esterne.

Un'importanza rilevante assume inoltre l'interazione tra il plasma e la parete.

Modelli particellari (PIC) modellizzano il plasma come una collezione di macro particelle, ciascuna delle quali rappresenta un gruppo di particelle appartenenti ad una determinata specie. Il comportamento delle macroparticelle è determinato integrando numericamente per ciascuna di esse l'equazione del moto. Ai fini di determinare le forze elettromagnetiche agenti sulle particelle cariche, il solutore PIC deve essere accoppiato ad un modello per il calcolo del campo magnetico (che si assume generalmente stazionario) ed elettrico (che dipende a sua volta dalla distribuzione delle cariche e va ricalcolato ad ogni passo temporale).

I modelli descritti sono adatti alla descrizione di plasmi in differenti regimi. Il modello DD è adatto a condizioni in cui pressione e densità sono relativamente alte (è quindi adatto allo studio di applicazioni con pressioni prossime a quella atmosferica), con contenute deviazioni dall'equilibrio termodinamico. Il modello PIC risulta computazionalmente molto più oneroso, ma permette una appropriata trattazione di una vasta gamma di condizioni operative. Il modello risulta quindi adatto a trattare plasmi in bassa pressione, come il plume di propulsori elettrici per applicazioni spaziali.

Le attività previste nell'ambito dell'assegno si pongono come scopo l'evoluzione dei codici di calcolo già sviluppati dal gruppo di ricerca operante nel Laboratorio di Ingegneria Magnetofluidodinamica e Plasmi (LIMP) [1- 3] e si articolano su tre obiettivi principali:

- l'ampliamento delle potenzialità del codice DD;
- l'ottimizzazione del codice PIC;
- lo sviluppo di modelli avanzati per la descrizione dei fenomeni a parete.

- Attività sul codice di calcolo DD (Task 1)

Una delle principali finalità dell'assegno è l'estensione del range di applicabilità del modello DD già sviluppato presso il LIMP. Questo risultato può essere raggiunto aggiungendo al modello un'equazione di conservazione per l'energia elettronica. Questo accorgimento permette di tenere conto di possibili scostamenti da condizioni di equilibrio termodinamico, caratterizzati da temperature elettroniche diverse da quelle del plasma. Risulterà in questo modo possibile trattare in maniera più adeguata applicazioni industriali che utilizzano plasmi freddi.

L'attività prevede una fase di validazione che verrà messa in atto seguendo due percorsi paralleli.

- Validazione tramite confronto con codici PIC: verrà identificata una condizione di plasma che possa essere convenientemente trattata con gli approcci DD e PIC. I risultati saranno quindi confrontati e discussi.
- Validazione tramite confronto con dati sperimentali: All'interno del LIMP, verranno condotte indagini sperimentali allo scopo di acquisire dati utili per una validazione dei codici sviluppati. Sarà inoltre possibile fare riferimento a dati disponibili in letteratura.

- Attività sul codice di PIC (Task 2)

Le attività sul solutore PIC saranno incentrate essenzialmente sull'ottimizzazione del codice di calcolo. Più specificatamente, si intende mettere in atto strategie efficienti per la parallelizzazione del codice su sistemi multiprocessore a memoria distribuita. Questo consentirà di estendere le potenzialità del codice a sistemi tridimensionali di grande complessità, così come alla trattazione di plasmi a pressioni e densità relativamente alte. Si

intende raggiungere in tal modo un ampio range di condizioni operative in cui l'applicabilità dei codici DD e PIC risulta adeguata.

Un primo risultato di questa attività sarà pertanto la possibilità di eseguire la già menzionata validazione incrociata con il codice DD.

- Attività sui modelli di interazione plasma parete (Task 3)

L'interazione plasma-parete riveste un'importanza fondamentale in molte applicazioni industriali. In casi di elevato rapporto tra superficie reagente e volume di plasma, i fenomeni di parete assumono un ruolo dominante nella cinetica chimico fisica del sistema. Le attività di questa fase si prefiggono lo studio e la messa a punto di modelli avanzati per la descrizione dei fenomeni a parete. Verrà condotta un'analisi critica dello stato dell'arte sull'argomento, e verranno identificati i meccanismi dominanti nelle applicazioni di interesse. Saranno quindi elaborati i modelli, che verranno quindi implementati e messi a punto nei solutori DD e PIC.

- Anche in questo caso, si prevede un'attività di validazione che potrà contare su dati sperimentali ottenuti presso il LIMP (per dispositivi basati su DBD e plasmi freddi) o tramite una collaborazione già in atto con il "Laboratory on Plasma and Conversion of Energy (LAPLACE)" dell'Università Paul Sabatier di Toulouse (propulsori elettrici spaziali di piccola taglia).

Il profilo ideale di assegnista prevede:

- una buona esperienza delle tecniche numeriche utilizzate;
- una buona esperienza nel campo di modelli di plasmi e gas debolmente ionizzati;
- una buona conoscenza delle applicazioni industriali di plasmi debolmente ionizzati (DBD, plasmi freddi, plasmi per propulsione spaziale)
- esperienza nel campo del calcolo parallelo;

## **Bibliografia**

[1] A. Cristofolini and A. Popoli, "A Multi-stage approach for DBD modelling," J. Phys. Conf. Ser., vol. 1243, no. 1, p. 012012, May 2019.

[2] A. Cristofolini, A. Popoli, and G. Neretti, "Multi-stage Modelling of a DBD," Proc. of HES-19, Padua, May 22-24, 2019.

[3] A. Cristofolini and A. Popoli, "A Multi-Stage Model for Dielectric Barrier Discharge in Atmospheric Pressure Air"

## Piano di Attività

### Task 1: Codice DD

- T 1.1 (Mese 1-2): studio sulle metodologie di implementazione dell'equazione dell'energia per gli elettroni nel del codice esistente. Tale attività verrà coadiuvata da una analisi critica della bibliografia esistente in materia. Al termine di questa fase, sarà individuata l'approccio più adatto per un'integrazione nel codice esistente.
- T 1.2 (Mese 2-6): implementazione e test del modulo di calcolo per l'equazione dell'energia elettronica. Sarà inizialmente sviluppato un modulo stand-alone in ambiente Matlab per le fasi iniziali di test. Il modulo sarà successivamente tradotto in linguaggio FORTRAN 90 e accoppiato con il solutore DD. Al termine di questa fase, sarà disponibile un solutore DD che includerà il modulo di conservazione dell'energia elettronica.

### Task 2: Codice PIC

- T 2.1 (Mese 6-9): studio sulle strategie per la parallelizzazione del codice su sistemi multiprocessore a memoria distribuita. Questa fase verrà condotta sfruttando un progetto per ottenere l'assegnazione di ore-calcolo su macchine per supercalcolo. Al termine di questa fase, sarà disponibile un solutore PIC parallelizzato e adatto a l'utilizzo su macchine da supercalcolo.

### Task 3: Fenomeni a parete

- T 3.1 (Mese 1-2): studio critico dello stato dell'arte sui principali meccanismi di interazione plasma-parete. Al termine di questa fase, saranno individuati i modelli e le modalità di implementazione nei codici esistenti.
- T 3.2 (Mese 2-9): implementazione e test del modulo di calcolo per interazione plasma-parete. Sarà inizialmente sviluppato un modulo stand-alone in ambiente Matlab per le fasi iniziali di test. Il modulo sarà successivamente tradotto in linguaggio FORTRAN 90 e accoppiato con i solutori DD e PIC. Al termine di questa fase, i modelli avanzati sviluppati saranno utilizzabili dai codici DD e PIC.

### Task 4: Validazione dei codici

- T 4.1 (Mese 10-12): validazione dei codici. In questa fase, i codici sviluppati saranno utilizzati per lo studio di una condizione di plasma appositamente concepita. Saranno altresì individuati esperimenti da condurre all'interno del LIMP e disponibili in letteratura che possano essere utilizzati come base per una validazione sperimentale. Il prodotto delle attività sarà un'analisi critica delle prestazioni dei due codici in termini di onere computazionale, affidabilità e accuratezza dei risultati.

## Particle and drift-diffusion numerical methodologies for the study of weakly ionized plasmas in applications of industrial interest

The present call for a research grant concerns a theoretical and numerical modeling activity aimed at the analysis of weakly ionized plasmas. In particular, the activities will be aimed at an improvement and development of the numerical techniques based on Drift-Diffusion (DD) and Particle In Cell (PIC) models. The main areas of interest of the proposed work are:

- cold plasmas
- spatial electric propulsion

A cold plasma combines the advantages deriving from the non-equilibrium condition in a plasma with the ease of operation at atmospheric pressure and with the flexibility in the choice of the materials used. The dielectric barrier discharges (DBD) in air generally produce active chemical species (ozone, OH radicals, etc.), which are the basis of many industrial applications aimed at sterilization, gas flow treatment and combustion. One of the greatest difficulties in modeling a cold plasma produced by a DBD is the correct representation of the non-equilibrium regime. In particular, the formation of streamer within the DBD is characterized by characteristic times and lengths very different from those relating to the discharge itself. In streamers, very high ionization degree can be achieved for very short times (tens of ns) and electrons can reach temperature exceeding 15,000 K.

The electric propulsion differs from the chemical one in the way used to energize and accelerate the gas. Plasma thrusters utilize electrical energy to ionize the propellant and then impart kinetic energy to the resulting plasma. Plasma thrusters represent an interesting technical alternative to chemical thrusters due to a much higher specific impulse (change of momentum per propellant unit used), greater thrust efficiency and system integration capability. Many types of plasma thrusters have been developed over the last 60 years and can be divided into three main categories dependent on the acceleration mechanism: (1) electrothermal, (2) electrostatic and (3) electromagnetic propulsion systems. The activities proposed within the research grant concern the Hall thrusters, which fall into the second of the previous categories. This type of engine, although it represents a rather mature technology compared to other recent devices, shows a significant degradation of performance if it is reduced to reduced and very low powers, below the kW range. This represents a great technical challenge, since in recent years a very important trend has emerged towards the use of electric propulsion for maneuvering and maintaining the station of small satellites.

A Drift-Diffusion model is based on the macroscopic equation that studies the evolution of species in the plasma:

$$\frac{\partial N_s}{\partial t} = -\nabla \cdot (-\nabla N_s + \mu_s \vec{E}) + \Omega_s. \quad (1)$$

The source terms appearing on the second member of (1) are derived from the chemical model and include the relevant phenomena to the description of plasma kinetics, such as ionizations recombinations, attachments, dissociations. The model is completed by an equation describing the dependence of the electric field on the distribution of charges and on external conditions.

The interaction between the plasma and the wall also plays a significant role.

Particle models (PIC) treat a plasma as a collection of macro particles, each representing a group of particles belonging to a given species. The behaviour of the macroparticles is determined by numerically integrating the motion equation for each of them. In order to determine the electromagnetic forces acting on the charged particles, the PIC solver must be coupled to a model for calculating the magnetic field (which is generally assumed to be stationary) and electric (which in turn depends on the distribution of the charges and must be recalculated to every time step).

The models described are suitable for the description of plasmas in different regime ranges. The DD model is suitable for conditions where pressure and density are relatively high (it is therefore suitable for the study of applications with pressures close to atmospheric), with limited deviations from the thermodynamic equilibrium. The PIC model involves a considerably higher computational burden, but allows an appropriate treatment of a wide range of operating conditions. The model is therefore suitable for treating low pressure plasmas, such as the plume of electric propellers for space applications.

The activities to be carried out in the framework of the grant are aimed at the evolution of the calculation codes which has already been developed by the research group operating at the Laboratory of Magnetofluidynamic Engineering and Plasmas (LIMP) [1-3]. The activities are articulated on three main objectives:

- the expansion of the capabilities of the DD code;
  - the optimization of the PIC code
  - the development of advanced models for the description of wall phenomena.
- 
- Activities on the DD code (Task 1)

One of the main purposes of the research is the extension of the range of applicability of the DD model already developed at LIMP. This result can be achieved by adding a conservation equation for electronic energy to the model. This allows us to account for possible deviations from thermodynamic equilibrium conditions, characterized by electronic temperatures different from plasma temperature. This will allow a more adequate study of industrial applications relying on cold plasmas.

The activity includes a validation phase that will be implemented following two parallel paths.

    - Validation by comparison with PIC codes: a plasma condition that can be conveniently treated with the DD and PIC approaches will be identified. The results will then be compared and discussed.
    - Validation through comparison with experimental data: Within the LIMP, experimental investigations will be carried out in order to acquire useful data for a validation of the codes developed. It will also be possible to refer to data available in the literature.
- 
- Activities on the PIC code (Task 2)

The activities on the PIC solver will essentially focus on the optimization of the calculation code. More specifically, the work will be aimed at implementing efficient strategies for the parallelization of the code on distributed memory multiprocessor systems. This will allow to extend the capabilities of the code to highly complex three-dimensional systems, as well as to the treatment of plasmas at relatively high pressures and densities. In this way, a wide range of conditions in which the DD and PIC codes can be adequately utilized will be reached.

A first result of this activity will therefore be the possibility of performing the aforementioned cross-validation with the DD code.

- Activities on plasma-wall interaction (Task 3)

Plasma-wall interaction is of fundamental importance in many industrial applications. In cases of high ratio between reactant surface and plasma volume, wall phenomena play a dominant role in the system's chemical-physical kinetics. The activities of this phase aim at the study and development of advanced models for the description of wall phenomena. A critical analysis of the state of the art on the subject will be conducted, and the dominant mechanisms in the applications of interest will be identified. The models will then be processed, which will then be implemented and fine-tuned in the DD and PIC solvers.

Also in this case, a validation activity is envisaged that will be able to count on experimental data obtained at the LIMP (for devices based on DBD and cold plasmas) or through a collaboration already in place with the "Laboratory on Plasma and Conversion of Energy (LAPLACE)" of the Paul Sabatier University of Toulouse (small-sized electric space engines).

The ideal assignee profile includes:

- a good experience of the numerical techniques used;
- good experience in the field of weakly ionized plasmas and gases models;
- a good knowledge of the industrial applications of weakly ionized plasmas (DBD, cold plasmas, plasmas for space propulsion)
- experience in the field of parallel computing;

## **Bibliography**

[1] A. Cristofolini and A. Popoli, "A Multi-stage approach for DBD modelling," J. Phys. Conf. Ser., vol. 1243, no. 1, p. 012012, May 2019.

[2] A. Cristofolini, A. Popoli, and G. Neretti, "Multi-stage Modelling of a DBD," Proc. of HES-19, Padua, May 22-24, 2019.

[3] A. Cristofolini and A. Popoli, "A Multi-Stage Model for Dielectric Barrier Discharge in Atmospheric Pressure Air"

## Activity Plan

### Task 1: DD Code

- T 1.1 (Months 1-2): study on the implementation methodologies of the energy equation for electrons in the existing code. This activity will be supported by a critical analysis of the existing bibliography on the subject. At the end of this phase, the most suitable approach for integrating the electron energy equation into the existing code will be identified.
- T 1.2 (Months 2-6): implementation and test of the calculation module for the electronic energy equation. A stand-alone module will be initially developed in the Matlab environment for the first test phases. The module will then be translated into FORTRAN 90 language and coupled with the DD solver. At the end of this phase, a DD solver including the electronic energy conservation module will be available.

### Task 2: PIC code

- T 2.1 (Months 6-9): study on strategies for parallelizing the code on distributed memory multiprocessor systems. This phase will be carried out using a CINECA project to obtain the assignment of work hours on supercomputing machines. At the end of this phase, a PIC parallelized solver will be available for use on supercomputing systems.

### Task 3: Wall phenomena

- T 3.1 (Months 1-2): critical study of the state of the art on the main mechanisms of plasma-wall interaction. At the end of this phase, the models and implementation methods in the existing codes will be identified.
- T 3.2 (Months 2-9): implementation and test of the calculation module for plasma-wall interaction. A stand-alone module will be initially developed in the Matlab environment for the initial test phases. The module will then be translated into FORTRAN 90 language and coupled with the DD and PIC solvers. At the end of this phase, the developed advanced models will be available for the DD and PIC codes.

### Task 4: Validation of the codes

- T 4.1 (Months 10-12): validation of the codes. In this phase, the codes developed will be used for the study of a specially designed plasma condition. Experiments will also be identified to be conducted within the LIMP and available in the literature that can be used as a basis for experimental validation. The product of the activities will be a critical analysis of the performance of the two codes in terms of computational burden, reliability and accuracy of the results.