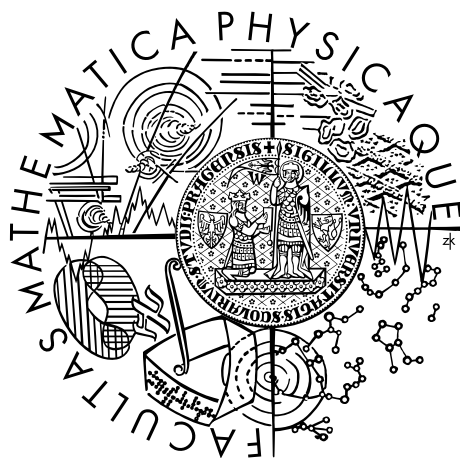


UNIVERZITA KARLOVA V PRAZE

Matematicko - fyzikální fakulta

Dizertační práce



Autor: Mgr. Petr Bartoš

Školitel: prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc.

2006

Hybridní modelování ve fyzice plazmatu

Na tomto místě chci poděkovat mému školiteli,
panu prof. RNDr. Rudolfu Hrachovi, DrSc.,
za nespočet rad a myšlenek, bez nichž by tato práce nikdy nevznikla.

Děkuji také mým konzultantům, pani doc. RNDr. Věře Hrachové, CSc. a
panu doc. RNDr. Josefu Blažkovi, CSc., kteří byli v průběhu mého studia
schopni nalézt dostatek času a zodpovědět otázky, se kterými jsem si
nevěděl rady. Můj dík patří také mým rodičům a všem, kteří mě v průběhu
mého studia podporovali.

Prohlašuji, že jsem dizertační práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce.

V Lišově dne 2. října 2006

Petr Bartoš

Obsah

Úvod	8
1 Plazma jako objekt počítačového modelování	11
1.1 Sondová diagnostika plazmatu	13
2 Spojité modelování plazmatu	16
2.1 Boltzmannova rovnice a její momenty	16
2.2 Jednotekutinové modely	19
2.3 Metody řešení momentových rovnic - základní poznatky z literatury	20
2.4 Základní principy modelování v programu COMSOL Multiphysics	22
2.4.1 Charakteristika práce v programu COMSOL Multiphysics	22
2.4.2 Vybrané aplikační módy	24
2.4.3 Charakteristika mříže	26
2.4.4 Postřehy z práce s programem COMSOL Multiphysics	27
3 Literatura a částicové a hybridní modelování	29
3.1 Částicové modelování	29
3.1.1 Výpočet poloh a rychlostí	30
3.1.2 Výpočet silových působení	31
3.1.3 Srážkové procesy	32
3.1.4 Zdroj částic	32
3.1.5 Další umělé obraty	33
3.2 Hybridní modelování	33
4 Cíle práce	35

5	Základní spojitý model plazmatu	36
5.1	Charakteristika modelu	36
5.1.1	Fyzikální předpoklady	36
5.1.2	Základní rovnice	37
5.1.3	Okrajové a počáteční podmínky	40
5.1.4	Řešení problému, další parametry	41
5.2	Výsledky	42
5.2.1	Jednodimenzionální model	42
5.2.2	Dvoudimenzionální model	45
5.2.3	Třídimenzionální model	47
6	Spojitý model plazmatu s energetickou bilancí elektronů	50
6.1	Charakteristika modelu	50
6.2	Výsledky	54
7	Spojitý model plazmatu s uvažováním srážek	55
7.1	Srážkové procesy v plazmatu a počítačové modelování	55
7.1.1	Účinný průřez σ_j	56
7.2	Realizace srážkových procesů ve spojitém počítačovém modelu	58
7.2.1	Koeficienty k_j	59
7.2.2	Koeficient C_{ela} , pružný rozptyl elektronů na neutrálech Ar	62
7.3	Popis počítačového modelu	65
8	Hybridní model plazmatu	69
8.1	Charakteristika modelu	69
8.2	Výsledky	73
9	Aplikace modelu na sondy konečných rozměrů	77
9.1	Řešení – planární sonda konečných rozměrů	79
9.1.1	Geometrie modelu	79
9.1.2	Řešení spojitě části	81
9.1.3	Řešení částicové části	81
9.1.4	Výsledky výpočtů	81
9.2	Řešení – cylindrická sonda konečných rozměrů	82
9.2.1	Parametry spojitě části modelu	82
9.2.2	Parametry částicové části modelu	83
9.2.3	Výsledky výpočtů	85

9.3	Řešení – sférická sonda s úchytem	85
9.3.1	Geometrie modelu	85
9.3.2	Parametry použité v průběhu řešení	85
9.3.3	Výsledky výpočtů	86
10	Diskuze výsledků a možnosti dalšího směřování	89
	Závěr	91
	Literatura	96

Úvod

Počítačová fyzika. Pojem, který určitě nenaleznete v knihách slavných učenců minulosti – Issaca Newtona, Jamese C. Maxwella ani Alberta Einsteina. V současnosti, kdy dochází k prudkému zvyšování výkonu výpočetní techniky, se však dostává tato oblast fyziky do stále většího zájmu vědců na celém světě. Nejen proto, že umožňuje řešit nejrůznější teoretické modely, které bychom jinak řešit nemohli, ale zároveň nám umožňuje nahradit drahé experimentální aparatury relativně levnými výpočetními stanicemi, na nichž lze pomocí vhodně napsaného programu simulovat průběh reálného experimentu. Počítačová fyzika se tak stává třetím přístupem (vedle přístupu teoretického a experimentálního), který lze s úspěchem použít ke studiu tajů přírody.

Počítačové simulace mají v současnosti nezastupitelné místo například při studiu jevů z oblasti jaderné fyziky, kde byly poprvé využívány v 50. letech a nahradily mimořádně finančně náročné a nebezpečné experimenty. Od 60. let jsou pak využívány ve fyzice tenkých vrstev a fyzice plazmatu.

Členové Katedry elektroniky a vakuové fyziky MFF UK v Praze se počítačovým modelováním zabývají již řadu let, zejména v oblasti fyziky tenkých vrstev a fyziky plazmatu. V oblasti fyziky plazmatu byla pozornost věnována jednak studiu nízkoteplotního plazmatu, dále plazmochemii a v poslední době i vysokoteplotnímu plazmatu. Za tuto dobu byly vyvinuty kvalitní částicové modely umožňující popsat chování plazmatu v okolí sondy (pozornost je věnována především rovinné, válcové a kulové geometrii Langmuirovy sondy). Tyto částicové modely umožňují realisticky popsat chování plazmatu za nejrůznějších podmínek. Narážejí však stále na svoji velkou slabinu – vysoké nároky na spotřebu strojového času.

Alternativou k těmto částicovým modelům jsou modely spojitě, které zpravidla nahlížejí na plazma jako na směs vzájemně se prostupujících tekutin jednotlivých částic. Soubor tekutin je popsán pomocí několika rovnic

(rovnice kontinuity, zákon zachování energie, Poissonova rovnice, atd.), které poté můžeme řešit vhodnou numerickou metodou. Na rozdíl od částicových modelů jsou modely spojitě méně náročné na spotřebu strojového času, větší nároky však kladou především na počítačovou paměť. Za modely částicovými navíc zaostávají především v možnosti realisticky popsat srážkové procesy, ke kterým v plazmatu dochází. Zde se musíme spokojit s použitím zjednodušujících předpokladů, které znehodnocují výsledek.

Je tedy zřejmé, že oba dva přístupy – částicový i spojitý – mají své klady i zápory. Pokusili jsme se je tedy skloubit dohromady tak, aby byl výsledný model jakýmsi kompromisem, který nebude ani příliš náročný na výpočetní čas a který bude zároveň realisticky popisovat všechny důležité srážkové procesy, ke kterým v plazmatu dochází. Výsledný model tedy bude z pohledu modelovacích metod eliminovat nedostatky obou uvedených technik, zároveň však nebude disponovat všemi výhodami, které obě metody nabízejí. Tento, tzv. hybridní přístup, se pokusilo použít již několik autorů (ve své práci se jím zabývají například Annemie Bogaerts a Renaat Gijbels). Většina autorů však řeší tuto problematiku jako úlohu jednodimenzionální, nejvýše dvoudimenzionální. Koeficienty reakcí jsou zpravidla určovány před vlastním výpočtem, čímž jsou také ovlivněny výstupy z výpočtů.

Přínosem této dizertační práce je navržení techniky, která může být efektivně použita při vícerozměrném modelování chování plazmatu v okolí pevných těles a která bude obsahovat realistický popis srážkových procesů, ke kterým v plazmatu dochází. Přínosem jsou i výsledky prezentované v deváté kapitole, kde jsme metodu použili ke studiu chování plazmatu v okolí sond konečných rozměrů.

Tento dokument jsem vypracoval v průběhu mého doktorského studia na Matematicko-fyzikální fakultě Univerzity Karlovy v Praze. Jelikož po mém příchodu na KEVF nebyly k dispozici vhodné modely založené na spojitých modelovacích technikách, bylo je potřeba nejprve vytvořit. Odtud také vychází členění této práce. Po krátkém úvodu do problematiky jsou nejprve popsány modely spojitě (model uvažující pouze pružné srážky, model umožňující popsat energetické poměry v plazmatu a model zahrnující všechny významné srážkové procesy), následuje popis navrženého algoritmu pro modelování plazmatu a v poslední kapitole je tento postup aplikován na modely sond konečných rozměrů s uvažováním elektricky izolovaného úchyty. Částicové části modelu je věnováno pouze několik stránek, protože jejich podrobnou charakteristiku lze nalézt v dostupné literatuře (viz konkrétní citace dále

v textu).

Tato práce byla vysázena v programovém balíku \LaTeX a k vytvoření grafů a obrázků jsem použil program MATLAB. Výpočty byly prováděny na počítači vybaveném procesorem Intel Pentium 4 s frekvencí 3 GHz, 1024 MB RAM, frekvence systémové sběrnice 800 MHz.

Autor

Kapitola 1

Plazma jako objekt počítačového modelování

Jak již bylo zmíněno v úvodu, poskytuje nám současná výpočetní technika cenné informace z nejrůznějších oblastí vědy a techniky (zpracování experimentálních dat, výsledky počítačového modelování, zpracování digitálního obrazu atp.). Výrazné zvýšení výkonu výpočetních stanic je mimo jiné způsobeno pokrokem v oblasti technologie tenkých vrstev a fyziky plazmatu, pomocí kterého můžeme tyto speciální vrstvy deponovat a vytvářet tak výkonnější počítačové komponenty.

Je trochu paradoxní, že ve formě plazmatu se nachází převážná část hmoty ve vesmíru, zatímco v pozemských podmínkách se s přirozeně vytvořeným plazmatem setkáváme zřídka (bleskové výboje při bouřkách, polární záře, ...). „Pozemské“ plazma je zpravidla vytvořeno umělou cestou (výboje v zářivkách, plazmové obrazovky, lasery, řezání a broušení materiálů, speciální zařízení umožňující využití moderních technologických postupů v nejrůznějších oblastech lidské činnosti, ...). Fyzika plazmatu zaznamenala za posledních sto let v oblasti teoretického i experimentálního studia řady velkých úspěchů a lidstvo je schopno těchto nových poznatků aktivně využívat k dalšímu rozvoji společnosti. Stále však zůstává velké množství nezodpovězených otázek a je zřejmé, že některé otázky nám příroda zatím ani nepoložila.

Pomocí při hledání odpovědí se v současnosti snaží také relativně nová vědní disciplína – počítačová fyzika, která dokáže efektivním způsobem propojit experimentální i teoretický přístup vědeckého bádání. Umožňuje otestovat nové teorie a získané výsledky porovnat s experimentálními daty. Na základě zjištěných odlišností mezi teoretickými a experimentálními hodnotami

lze pak novou teorii dále korigovat a zpřesňovat. Modelováním reálného experimentu na počítači můžeme získat jasnou představu o procesech, ke kterým při experimentu dochází, neboť přesně víme, které jevy jsme do počítačového modelu zahrnuli a které jsme se rozhodli zanedbat. Počítačová fyzika nám dokonce umožňuje modelovat i ty jevy, ke kterým nemůže v přírodě z různých příčin dojít.

Nezanedbatelnou roli hraje počítačové modelování také v ekonomické oblasti výzkumu, protože pomocí počítače a vhodně vytvořeného modelu lze zkoumat jevy, které lze klasickou cestou studovat pouze za vynaložení značných finančních prostředků. V neposlední řadě počítačová fyzika přispívá k ochraně životního prostředí (optimalizace konfigurace experimentálních aparatur, minimalizace nebezpečí nehody při nebezpečných experimentech atp.).

Je tedy zřejmé, že tento nový trend otevírá bránu k dalšímu poznání přírody a rozvoji naší společnosti.

Plazma se stalo objektem počítačového modelování v padesátých letech dvacátého století. Od té doby byla vytvořena řada efektivních postupů často využívajících metod známých již několik století, které však musely počkat na příchod výpočetní techniky. Například metoda Monte Carlo, jejíž principy byly popsány v roce 1873 v [1] a jejíž základy lze nalézt ještě o téměř 100 let dříve ve slavném problému s Buffonovo¹ jehlou [2], předpokládá opakování velkého množství realizací náhodného jevu, které lze bez využití výpočetní techniky provést jen velmi obtížně.

Techniky počítačového modelování plazmatu lze rozdělit do tří základních skupin:

- **Částicové techniky**

Jsou založeny na popisu translačního pohybu jednotlivých částic tvořících plazma pomocí pohybových rovnic. Velký počet částic, které je nutno v modelu použít, a tím i velký počet rovnic, které musíme vyřešit (rovnice pro polohu částice, její rychlost a sílu působící na částici), klade značné nároky na spotřebu strojového času a tím je také značně limitováno jejich praktické využití. Proto se k jejich optimalizaci často používá umělých obrátů, které dokáží výpočet zefektivnit (metoda makročástic, metody zefektivňující výpočet silových působení, ...). Tyto techniky lze dále rozdělit na metody stochastické, které vy-

¹Georges Louis Leclerc, Comte de Buffon

užívají počtu pravděpodobnosti, a metody deterministické, kdy se využívají pouze postupy klasické numerické matematiky.

- **Spojité modely**

Spojité modely jsou založeny na popisu makroskopických veličin pomocí soustavy několika diferenciálních rovnic, které jsou řešeny simultánně. Při jejich aplikaci ve fyzice plazmatu je (v porovnání s částicovými technikami) jejich nevýhodou menší přesnost výsledku a těžkopádnost při popisu jevů na elementární úrovni, výhodou jsou relativně malé nároky na spotřebu strojového času.

- **Hybridní techniky**

Tyto postupy kombinují obě dvě předchozí techniky tak, aby byly ve výsledku minimalizovány jejich nedostatky. Získáme tak modely, které sice nepatří mezi nejefektivnější, značně však minimalizují nevýhody obou dvou přístupů – částicová část zvyšuje přesnost, spojitá část zvyšuje rychlost výpočtu.

V některých případech nelze o typu použité techniky jednoznačně rozhodnout. Například Boltzmannova kinetická rovnice, jejíž použití je ve fyzice plazmatu velmi významné, nebývá jednoznačně zařazována mezi spojitě ani částicové techniky a stojí „mezi“ těmito přístupy.

Detailnější popis současného stavu vývoje uvedených technik bude popsán v následujících kapitolách.

V posledním desetiletí zaznamenaly prudký rozvoj také moderní modelovací postupy (genetické algoritmy, evoluční programování atp.), které jsou navíc podpořeny možnostmi paralelizace výpočtů.

Aplikací, kde se počítačové modelování využívá, je celá řada. Tato práce se zaměřuje na modelování chování nízkoteplotního plazmatu v okolí nejčastěji používaných typů sond, neboť sondová měření hrají významnou roli při diagnostice plazmatu.

1.1 Sondová diagnostika plazmatu

Základní parametry plazmatu můžeme rozdělit do dvou skupin:

- **Makroparametry** – jsou plazmatu dány „zvnějšku“, například tlak, driftová rychlost částic, velikost elektrického proudu procházejícího plazmatem, intenzita elektrického pole a další.

- **Mikroparametry** – parametry jednotlivých tekutin, například koncentrace částic jednoho druhu, jejich teplota, rozdělovací funkce rychlosti částic, střední srážková frekvence, ...

Znalost těchto parametrů je klíčová pro další vývoj nových technologických postupů. Proto byla od dob Langmuira navržena celá řada diagnostických metod. Ty můžeme rozdělit buď podle toho, zda do plazmatu něco vkládáme (metody aktivní, kontaktní) či nikoliv (pasivní, bezkontaktní metody) nebo podle toho, jakým způsobem data získáváme:

1. **Metody sondové** – do plazmatu vkládáme vhodně upravený vodič (sondu) s elektrickým předpětím, případně soustavu sond. Jelikož se jedná o aktivní metodu, jsou na sondu kladeny vysoké nároky (především na její velikost, tvar, typ, materiál, z kterého je vyrobena, ...). Sondové metody jsou těmi nejstaršími, které se k diagnostice plazmatu používají. Výstupem měření je například voltampérová (též sondová) charakteristika, ze které jsme schopni vyčíst mnoho důležitých parametrů. Chyba metody je však poměrně velká kvůli dosti hrubému zásahu do plazmatu. Detailní informace o sondových měřeních lze nalézt například v publikaci [3].
2. **Vysokofrekvenční (mikrovlnné) metody** – mohou být pasivní, kdy detekujeme mikrovlnné záření vydávané plazmatem a na základě naměření tzv. šumového proudu jsme například schopni určit teplotu elektronů, nebo aktivní, kdy je na plazma přivedeno vysokofrekvenční pole a pozoruje se vzájemná interakce. To umožňuje určit koncentraci částic především tam, kde se v plazmatu jejich koncentrace značně mění.
3. **Optické metody** – opět mohou být aktivní, kdy plazma ozařujeme optickým zářením a pozorujeme vzájemné interakce, nebo pasivní, kdy je analyzováno spektrum detekovaného plazmatu.

Tento výčet není samozřejmě vyčerpávající, existuje celá řada dalších alternativ, uvedené možnosti patří mezi základní a nejčastěji používané.

Pro potřeby této práce je nejdůležitější sondová diagnostika. Jak již bylo uvedeno, dochází po vložení sondy do plazmatu k jeho ovlivnění, chyba metody je velká. Největšími nevýhodami je především to, že v okolí sondy je z plazmatu „vysáván“ elektrický náboj, plazma je ovlivněno fotoemisí či sekundární emisí elektronů z jejího povrchu, případně může přítomnost

sondy způsobit vznik nehomogenit v plazmatu. Proto je konfrontace s daty získanými počítačovým modelováním žádoucí. Nejčastěji se v diagnostice používají sondy jednoduchých geometrických tvarů – sonda rovinná, válcová a kulová. Metodiku využití sond k diagnostice plazmatu vypracoval ve dvacátých letech dvacátého století Langmuir s týmem svých spolupracovníků [4]. Naneštěstí má tato teorie velké množství limitujících předpokladů a snahy o rozšíření její aplikovatelnosti na větší množinu jevů pokračují do současnosti.

Vložíme-li sondu s elektrickým předpětím φ_0 do plazmatu, dojde k ovlivnění rozložení částic v okolním plazmatu – koncentrace jednotlivých typů částic se nastaví tak, že v určité vzdálenosti od sondy její elektrický potenciál odstíní. V okolí sondy se vytváří tzv. *sheath* (česky také stěnová nebo stínící vrstva či přielektrodová oblast).

Schopnost odstínit elektricky nabitě těleso vložené do plazmatu je charakterizována veličinou debyeovská vzdálenost

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{n_e e^2}}, \quad (1.1)$$

kde ε_0 značí permitivitu vakua, k_B Boltzmannovu konstantu, T_e teplotu elektronů, n_e jejich koncentraci a e velikost náboje elektronu. Šířka sheathu je několik jednotek až desítek λ_D . Právě debyeovská vzdálenost určuje rozlišovací schopnost této sondové metody.

Kapitola 2

Spojité modelování plazmatu

2.1 Boltzmannova rovnice a její momenty

Jak již bylo zmíněno, jsou spojité modelovací techniky založeny na popisu makroskopických veličin soustavou několika diferenciálních rovnic. Přitom lze na plazma nahlížet jako na směs několika vzájemně se prostupujících tekutin tvořených jednotlivými typy částic. Soustava rovnic je pak tvořena rovnicemi popisujícími například chování tekutiny elektronů, kladných iontů, excitovaných atomů atp., které jsou vzájemně vázány například rovnicemi popisujícími elektrické a magnetické pole.

Výchozím bodem bývá Boltzmannova kinetická rovnice

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \nabla_v f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_s, \quad (2.1)$$

kde f označuje hustotu pravděpodobnosti výskytu částice v daném místě \vec{r} o dané rychlosti \vec{v} , m je jejich hmotnost, \vec{F} síla působící na částici a t čas. Operátor ∇_v označuje gradient v rychlostním prostoru:

$$\nabla_v = \left(\frac{\partial}{\partial v_x}, \frac{\partial}{\partial v_y}, \frac{\partial}{\partial v_z} \right). \quad (2.2)$$

Pravá strana rovnice, tzv. srážkový člen $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_s$, popisuje změnu rozdělovací funkce v důsledku srážek.

I když nám rovnice 2.1 detailně popisuje vliv srážkových procesů v plazmatu na rozdělovací funkci f , není pro přímé využití příliš vhodná. Komplikace způsobuje jednak hledaná hustota pravděpodobnosti f , která je funkcí sedmi

nezávislých proměnných x, y, z, v_x, v_y, v_z a t , jednak srážkový člen na pravé straně rovnice. Proto se v praxi častěji užívají její první tři momenty:

- **rovnice kontinuity**

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\vec{v}) = \frac{Q^\rho}{m}, \quad (2.3)$$

- **zákon zachování hybnosti**

$$mn \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + mn (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \nabla \vec{P} - nq (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) = \vec{Q}^p \quad (2.4)$$

- **zákon zachování energie**

$$\frac{1}{\gamma - 1} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (p\vec{v}) \right) + (\vec{P} \cdot \nabla) \vec{v} + \nabla \cdot \vec{L} = Q^E. \quad (2.5)$$

n označuje koncentraci částic daného druhu, \vec{v} jejich driftovou rychlost, \vec{P} tenzor tlaku, \vec{E} vektor intenzity elektrického pole, \vec{B} vektor magnetické indukce, Q^ρ , \vec{Q}^p a Q^E srážkové členy, které jsou definovány relacemi

$$Q^\rho = m \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_s d^3u, \quad (2.6)$$

$$\vec{Q}^p = m \int_{-\infty}^{+\infty} (\vec{u} - \vec{v}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_s d^3u \quad (2.7)$$

a

$$Q^E = \frac{1}{2} m \int_{-\infty}^{+\infty} (\vec{u} - \vec{v})^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_s d^3u. \quad (2.8)$$

Člen

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad (2.9)$$

v rovnici 2.5 označuje poměr tepelných kapacit při stejném tlaku c_p a stejném objemu c_v , q je náboj částice, \vec{u} molekulární rychlost, $\vec{v} = \langle \vec{u} \rangle$.

V modelu lze pak použít vhodně zvolený systém těchto momentů (dle povahy problému se často používá kombinace prvních dvou, v případě uvažování energetických závislostí některých fyzikálních veličin prvních tří momentů

Boltzmannovy kinetické rovnice). Systém diferenciálních rovnic se nakonec uzavře soustavou Maxwellových rovnic

$$\varepsilon_0 \nabla \cdot \vec{E} = \sigma \quad (2.10)$$

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \vec{B} = \vec{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2.11)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.12)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.13)$$

(ε_0 je permitivita vakua, μ_0 permeabilita vakua, \vec{j} vektor hustoty toku elektrického náboje, σ hustota elektrického náboje, \vec{E} intenzita elektrického pole, \vec{B} vektor magnetické indukce) a doplní se několika algebraickými rovnicemi pro některé veličiny – například stavovou rovnicí

$$p = C\rho^\gamma, \quad (2.14)$$

či rovnicemi pro tok a hustotu elektrického náboje

$$\vec{j} = \sum_j n_j q_j \vec{v}_j \quad (2.15)$$

$$\sigma = \sum_j n_j q_j \quad (2.16)$$

(sumace se provádí přes všechny druhy částic j).

V rovnicích 2.3 až 2.5 nelze srážkové členy Q^ρ , \vec{Q}^p a Q^E na pravých stranách rovnic bez detailnější znalosti studovaného jevu rovnou vyjádřit „rozumným“ analytickým předpisem. Totéž platí i pro tenzor tlaku \vec{P} a operátor \vec{L} . Proto byly pro tyto členy odvozeny aproximace, které lze s úspěchem použít v počítačovém modelu. Předpokládáme-li například srážku částic k -tého typu s neutrálními atomy o koncentraci n_n , pak lze pro člen Q^ρ psát [5]

$$Q_k^\rho = m_k \sum_r l_{rk} k_r (T_k) n_k n_n. \quad (2.17)$$

Veličina k_r je tzv. koeficient reakce (reaction rate) pro srážku typu r , který je vstupním parametrem výpočtu a může záviset na teplotě částice T_k . Člen l_{rk} udává počet nově vytvořených částic k -tého typu při jedné srážce.

Člen \vec{Q}^p v rovnici zachování hybnosti 2.4 a srážkový člen Q^E v rovnici 2.5 bývají často aproximovány tzv. Krookovo aproximací [6], [7]

$$\vec{Q}_k^p = -\sum_l \frac{m_k m_l}{m_k + m_l} n_k (\vec{u}_k - \vec{u}_l) \bar{v}_{kl} \quad (2.18)$$

$$Q_k^E = - \sum_l \frac{3}{2} k_B n_k \frac{2m_k m_l}{(m_k + m_l)^2} (T_k - T_l) \bar{v}_{kl}, \quad (2.19)$$

kde \bar{v}_{kl} označuje střední srážkovou frekvenci částic k -tého a l -tého typu.

Rovnice spojitého modelování se dále zjednodušují zanedbáním některých méně významných členů. Například tenzor tlaku \vec{P} bývá po zanedbání viskozních efektů aproximován skalární hodnotou tlaku p (viz [7]), zanedbání driftové energie částic vzhledem k energii termální vede na značné zjednodušení rovnice pro energii ([5], [6]) nebo použití Fourierovy aproximace [6] teplotního toku pro elektrony vede na vztah

$$\vec{L}_e = \frac{5}{2} \vec{\Gamma}_e k_B T_e - \frac{5}{2} k_B D_e n_e \nabla T_e. \quad (2.20)$$

($\vec{\Gamma}_e$ označuje tok elektronů o teplotě T_e , D_e koeficient difúze pro elektrony). Funkční předpisy vektoru \vec{L} pro některé další typy částic lze nalézt v literatuře, například v [7].

Použití těchto aproximací je však vždy vázáno na daný počítačový model a lze je použít až po splnění potřebných předpokladů. Autory nejčastěji používaná (například [6], [8]–[11]) tzv. drift-difúzní aproximace bude dále popsána v části týkající se spojitého modelu.

2.2 Jednotekutinové modely

V některých případech je použití vícetekutivového modelu zbytečné s ohledem na studovaný jev a místo toho se využívá pouze modelu jednotekutinového. Tento typ modelů využívá soustavu diferenciálních rovnic, kterou získáme z modelů vícetekutivových jejich lineární kombinací. Definujme měrnou hmotnost předpisem

$$\varrho = \sum_j n_j m_j, \quad (2.21)$$

celkový tlak dle Daltonova zákona

$$p = \sum_j p_j \quad (2.22)$$

a rychlost pohybu elementu tekutiny

$$\vec{v} = \frac{\sum_j n_j m_j \vec{v}_j}{\sum_j n_j m_j}. \quad (2.23)$$

Magnetohydrodynamické rovnice pak lze při zanedbání srážek zapsat ve tvaru [12]

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right) = \sigma \vec{E} + \vec{j} \times \vec{B} - \nabla \vec{P} \quad (2.24)$$

$$\frac{1}{\gamma - 1} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (p\vec{v}) \right) = - \left(\vec{P} \cdot \nabla \right) \vec{v} - \eta j^2 \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{j}) = 0 \quad (2.27)$$

$$\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} = \eta \vec{j}. \quad (2.28)$$

η označuje elektrický odpor plazmatu. Z pravé strany rovnic 2.26 a 2.27 je zřejmé, že jsou zanedbávány změny počtu částic. Soustava rovnic 2.24 – 2.28 je často používána při modelování ve fyzice horkého plazmatu.

2.3 Metody řešení momentových rovnic - základní poznatky z literatury

Jak již bylo uvedeno, nejčastěji používaná je tzv. drift-difúzní aproximace. Z literatury je patrné, že nejoblíbenější metodou řešení úloh tohoto typu je implicitní exponenciální schéma pro rovnici kontinuity, kterou vyvinuli pro potřeby simulace procesů v polovodičových zařízeních D. L. Scharfetter a H. K. Gummel [13]. Proto je tato metoda také v některých pramenech nazývána Scharfetter-Gummelovo implicitní schéma.

Uvažujme jednodimenzionální případ. Označíme-li symbolem J tok částic daného druhu, n jejich koncentraci, v_E driftovou rychlost v důsledku přítomnosti elektrického pole, D koeficient difúze a μ koeficient pohyblivosti, vyjádříme tok částic předpisem

$$J = nv_E - D \frac{\partial n}{\partial x}, \quad (2.29)$$

kde

$$v_e = \mu E. \quad (2.30)$$

Standardní diskretizační metoda vede na nestability, pokud změna napětí mezi dvěma sousedními uzly je řádově srovnatelná (nebo větší) s hodnotou výrazu $\frac{D}{v}$. A právě tento nedostatek dokáže implicitní schéma odstranit [11].

Základní myšlenkou implicitních schémat je to, že hodnota hledané veličiny v uzlu $i + 1$ není vyjádřena pouze pomocí hodnot v ostatních uzlech, ale je vyjádřena i hodnotou v uzlu $i + 1$. Implicitní exponenciální schéma dále předpokládá, že mezi dvěma sousedními uzly jsou fyzikální veličiny J , v_E a D konstantní. Pak lze pro tok částic psát

$$J_{i+1/2} = \frac{1}{\Delta x} (n_i D_i \exp(z_{i+1/2}) - n_{i+1} D_{i+1}) \frac{z_{i+1/2}}{\exp(z_{i+1/2} - 1)}, \quad (2.31)$$

kde $i + 1/2$ je bod ležící uprostřed mezi hlavními body mříže i a $i + 1$, Δx označuje vzdálenost dvou sousedních bodů mříže, přičemž se předpokládá ekvidistantní dělení pracovní oblasti. Veličina $z_{i+1/2}$ je dána výrazem

$$z_{i+1/2} = -\frac{s\mu_{i+1/2}}{D_{i+1/2}} (\varphi_{i+1} - \varphi_i), \quad (2.32)$$

φ_i je hodnota elektrického potenciálu v i -tém uzlu, $s = +1$ pro částice s kladným nábojem a $s = -1$ pro částice nabitě záporně. Pro výpočet hodnot toku částic lze pak užít diferenční schémata [14]

$$J_{i+1/2} = \frac{v_D (n_{i+1} - n_i \exp(\frac{v_D \Delta x}{D}))}{1 - \exp(\frac{v_D \Delta x}{D})}, \quad (2.33)$$

$$J_{i-1/2} = \frac{v_D (n_i - n_{i-1} \exp(\frac{v_D \Delta x}{D}))}{1 - \exp(\frac{v_D \Delta x}{D})}. \quad (2.34)$$

Užitím vztahu 2.31 lze pro rovnici kontinuity použít diferenční schéma

$$\frac{n_{i+1}^{k+1} - n_i^{k+1}}{\Delta t} + \frac{J_{i+1/2}^{k+1} - J_{i-1/2}^{k+1}}{\Delta x} = S_i^k, \quad (2.35)$$

kde Δt označuje délku časového kroku, S_i^k zdrojový člen v i -tém bodu mříže. Získaná matice je blokově třídiagonální a lze ji řešit některou z klasických numerických metod. Takto lze získat hodnoty fyzikálních veličin pro časové kroky t^k .

V literatuře lze nalézt celou řadu dalších numerických metod, používaných k nalezení řešení (metoda sítí, metoda konečných objemů, metoda konečných

prvků, metoda hraničních prvků atd.) a nemá smysl je na tomto místě uvádět, informace lze nalézt například v [15].

K dispozici je v současnosti i řada komerčních programů, které je možno využít, přičemž nejvýkonnější je zřejmě program Fluent. Při přípravě našich modelů byl využit program COMSOL Multiphysics a jeho použití se ukázalo velmi výhodné. Výkonnost programů, které byly používány před zahájením práce s tímto softwarem (a využívající výše uvedené numerické metody), značně vzrostla, v některých případech až 300 krát. O jeho síle svědčí i zpráva Computational Science: Ensuring America's Competitiveness od President's Information Technology Advisory Committee pro prezidenta USA z roku 2005, kde se píše:

„The algorithms underlying mathematical modeling have improved at a rate even greater than the hardware we have watched explode in capability in the past decades. The developers at COMSOL continually take advantage of these developments so we can offer the highest-performance codes running on the highest-performance hardware.“

Jelikož se jedná o relativně nový, ne příliš známý produkt, bude následující část věnována jeho stručné charakteristice.

2.4 Základní principy modelování v programu COMSOL Multiphysics

2.4.1 Charakteristika práce v programu COMSOL Multiphysics

Program COMSOL Multiphysics je určen pro modelování fyzikálních jevů popsaných jednou diferenciální rovnicí nebo soustavou diferenciálních rovnic, a to jak lineárních, tak nelineárních, stacionárních i nestacionárních. Od října roku 2005 je tento produkt na našem trhu k dispozici ve verzi 3.2. Zatímco verze 1.x a 2.x byly schopny pracovat pouze v prostředí MATLABu, od verze 3.0 jde o samostatný program, který lze spouštět přímo z operačního systému. Pro velmi úzkou vazbu na software MATLAB však zůstává velmi dobrá spolupráce těchto dvou programů zachována. Řešení diferenciálních rovnic bývala ve FEMLABu počítána užitím metody konečných prvků

(odtud dřívější název programu – vznikl jako zkratka počátečních písmen z výrazu *Finite Element Method LABORatory*). Současná verze COMSOL Multiphysics má k dispozici širší repertoár numerických metod a na začátku výpočtu si program sám zvolí nejlepší z nich. Z tohoto důvodu zřejmě došlo i k přejmenování produktu.

V programu lze počítačové modely vytvářet dvěma způsoby – buď pomocí interaktivního prostředí nebo pomocí klasického programování. První možnost nám umožňuje pohodlnou práci, která je však zaplácena nepříjemnými omezeními – například lze jen stěží něco potřebného doprogramovat. Současná verze programu již sice nabízí vlastní skriptovací jazyk, jeho použití se však jeví stále jako málo efektivní. Potřebujeme-li tedy řešit problémy, které nejsou formulovány pouze jako soustavy diferenciálních rovnic (tzn. například problémy využívající částicově - spojité modelovací techniky), je vhodné mít na počítači nainstalovaný program MATLAB a COMSOL Multiphysics spouštět z něho. V MATLABu pak vytvoříme vlastní zdrojový kód a COMSOL Multiphysics využijeme pouze jako knihovnu poskytující řešiče diferenciálních rovnic. Tento přístup umožňuje vytvářet efektivní aplikace, které mohou být v některých případech dále optimalizovány vhodným použitím funkcí vytvořených v jazyce C. Ty lze pak v MATLABu konvertovat do tzv. mex-files a importovat do programu. Podrobnou charakteristiku lze nalézt v [16].

Práce při vytváření počítačového modelu v programu COMSOL Multiphysics pomocí interaktivního rozhraní je intuitivní a lze ji rozdělit do několika základních kroků:

1. Spustíme program COMSOL Multiphysics a zvolíme vhodný aplikační mód. Podrobný popis práce s jednotlivými aplikačními módy lze nalézt v manuálech [17], [18] nebo v nápovědě k programu COMSOL Multiphysics [19]. Pro vytvoření našich modelů jsme využili tři z nich – aplikační mód *PDE modes/General form*, *PDE modes/Coefficient form* a *PDE modes/Classical PDEs/Poisson's Equation*. Protože se na definici jednotlivých koeficientů těchto aplikačních módů odkazujeme i v dalším textu, je o nich krátká zmínka v druhé části této kapitoly.
2. Zobrazíme pracovní plochu, na ní vytvoříme pracovní prostor a v něm rozmístíme potřebné objekty našeho modelu.
3. Zadáme hodnoty koeficientů pro daný aplikační mód a počáteční a okrajové podmínky.

4. Zadáme hodnoty konstant a předpisy funkcí, které používáme pro zprehlednění zápisů.
5. Potřebujeme-li přidat další aplikační módy (například při řešení soustavy rovnic), tak třetí krok pro každý z nich opakujeme.
6. Nastavíme parametry řešiče (například rozvržení časových kroků a jejich maximální počet, zvolíme vhodný řešič algebraických rovnic atp.) a další parametry, které jsou potřeba ke zdárnému vyřešení problému.
7. Nastavíme parametry modelu jako je například typ bazových funkcí (výchozí je Lagrangeův polynomiální konečný prvek druhého řádu), formu řešení, proměnné, pro které chceme úlohu řešit atd.
8. Zadáme parametry sítě a vygenerujeme ji.
9. Spustíme výpočet řešení.
10. Ověříme správnost řešení (zkusíme například různé počáteční podmínky, jemnější nebo hrubší síť atp.).
11. Provedeme zpracování výsledných dat (vybírat můžeme z celé řady možností – klasické grafy zobrazující řešení jako plochu, grafy typu cross-section nebo například zobrazení časového vývoje hledané veličiny pomocí video souboru ve formátu avi) a data uložíme.

2.4.2 Vybrané aplikační módy

Pro uživatele programu je připraveno několik aplikačních módů (v závislosti na rozsahu licence k dané instalaci programu), které lze použít k řešení nejčastěji se vyskytujících fyzikálních úloh (difúze, vedení tepla, proudění tekutin, problémy z oblasti elektromagnetismu atp.), případně je možné zakoupit přídatné moduly pro řešení speciálních problémů (například chemický modul). Připraveny jsou také obecněji pojaté módy umožňující řešit i problémy, které nemusí spadat do specializovaných aplikačních módů. Jak již bylo zmíněno, pro naše potřeby jsou nejdůležitější tři z nich. Proto je na tomto místě ve stručnosti uvádíme.

Coefficient form

Mód *PDE modes/Coefficient form* je určen pro řešení lineárních nebo slabě lineárních úloh, popsaných diferenciálními rovnicemi či jejich soustavami. Tento aplikační mód řeší diferenciální rovnice s neznámou u , které lze vyjádřit na oblasti Ω ve tvaru

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c \nabla u - \vec{\alpha} u + \vec{\gamma}) + \vec{\beta} \cdot \nabla u + au = f. \quad (2.36)$$

Příslušné okrajové podmínky na hranici $\partial\Omega$ pracovní oblasti lze zadat ve formě zobecněné von Neumannovy okrajové podmínky (v [20] je tato podmínka nazývána Newtonova)

$$\vec{n} \cdot (c \nabla u + \vec{\alpha} u - \vec{\gamma}) + qu = g - h^T \mu \quad (2.37)$$

nebo jako Dirichletovu okrajovou podmínku

$$hu = r. \quad (2.38)$$

Jednotlivé koeficienty $e_a, d_a, c, a, f, \vec{\alpha}, \vec{\beta}, \vec{\gamma}, q, g, r$ a h , pomocí nichž naši rovnici do programu COMSOL zadáme, získáme porovnáním řešené rovnice a rovnic 2.36 až 2.38.

General form

Tento mód zvolíme v případech, kdy potřebujeme řešit nelineární diferenciální rovnici nebo jejich soustavu. Obecný tvar diferenciální rovnice na oblasti Ω má pro tento mód tvar

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = F, \quad (2.39)$$

okrajové podmínky na hranici $\partial\Omega$ jsou vyjádřeny obecnými vztahy

$$-\vec{n} \cdot \vec{J} = G + \left(\frac{\partial R}{\partial u} \right)^T \mu \quad (2.40)$$

$$0 = R. \quad (2.41)$$

Koeficient μ v této rovnici označuje Lagrangeův součinitel, symbol T transpozici. Koeficienty tohoto módu lze také získat tak, že je zadáme v *PDE modes/Coefficient form* a poté je do *PDE modes/General form* překonvertujeme.

PDE modes/Classical PDEs/Poisson's Equation

Tento mód je navržen přímo pro řešení Poissonovy rovnice, která je pro tyto potřeby vyjádřena ve tvaru

$$-\nabla \cdot (c\nabla u) = f. \quad (2.42)$$

Příslušné okrajové podmínky lze vyjádřit ve tvaru 2.37 a 2.38.

2.4.3 Charakteristika mříže

Abychom mohli při popisu jednotlivých počítačových modelů uvádět charakteristiku základní mříže, která byla pro řešení příslušné diferenciální rovnice použita, uvedeme v této podkapitole její základní charakteristiky, které se v programu COMSOL Multiphysics používají.

Pro uživatele je připraveno 9 základních mříží, které lze rovnou použít. Hodnoty, které pak charakterizují jednotlivé elementy, jsou uvedeny pro dvou-rozměrné modely v tabulce 2.1 a pro trojrozměrné modely v tabulce 2.2.

Pokud neumožňují předdefinované mříže nalézt řešení problému, může si je uživatel sám optimalizovat přímo pro potřeby své úlohy. V tom případě je potřeba nastavit především tyto parametry:

- *Maximum element size* – určuje maximální velikost prvku. Tato hodnota je implicitně definována jako jedna desetina největší vzdálenosti v modelu.
- *Maximum element size scaling factor* – přichází v úvahu, pokud uživatel neurčí maximální velikost prvku mříže. Program vynásobí zadanou hodnotou implicitně definovanou hodnotu parametru *Maximum element size*.
- *Element growth rate* – vyjadřuje, kolikrát lze zvětšit následující mřížový prvek, pokud to geometrie problému umožňuje. Tímto způsobem lze vygenerovat mříž s trendem růstu velikosti konečných prvků.
- *Mesh curvature factor* (MCF) – definuje minimální povolenou velikost prvku v oblastech s velkým poloměrem křivosti. Program vygeneruje mříž tak, aby nejmenší prvek byl větší než velikost součinu MCF a poloměru křivosti okrajové oblasti.

Kvalita mříže	Maximum element size	Mesh curv. factor	Element growth rate	Mesh curv. cut off
Extrémně jemná	0,15	0,2	1,1	0,0001
Extra jemná	0,3	0,5	1,2	0,0003
Jemnější	0,55	0,25	1,25	0,0005
Jemná	0,8	0,3	1,3	0,001
Normální	1	0,3	1,3	0,001
Hrubá	1,5	0,4	1,4	0,005
Hrubší	1,9	0,6	1,5	0,01
Extra hrubá	3	0,8	1,8	0,02
Extrémně hrubá	5	1	2	0,05

Tabulka 2.1: Základní mříže a jejich parametry použité při 2D modelování.

- *Mesh curvature cut off* (MCCO) – umožňuje zabránit vytvoření velkého počtu velmi malých prvků na okraji pracovní oblasti a zabrání tak zbytečnému prodlužování výpočtu. Pokud je poloměr okrajové oblasti menší než hodnota součinu MCCO a největší velikosti v geometrii modelu, pak je za hodnotu poloměru zvolena hodnota tohoto součinu.

Kvalitu mříže lze speciálními prostředky ovlivňovat také na okrajových oblastech, hranách a dokonce i bodech uvnitř pracovní oblasti.

2.4.4 Postřehy z práce s programem COMSOL Multiphysics

Na závěr této kapitoly chceme čtenáře seznámit s některými zkušenostmi, které jsme získali v průběhu dvouleté práce s programem COMSOL Multiphysics.

1. Program pracuje bez problémů pod operačním systémem Windows XP i Linux. Pro instalaci pod systémem Windows se však nepodařilo řešit problémy, které vyžadují více než 1 GB paměti. Tento problém je v 64 bitové verzi odstraněn, neboť je použit jiný způsob adresování.

Kvalita mříže	Maximum element size	Mesh curv. factor	Element growth rate	Mesh curv. cut off
Extrémně jemná	0,2	0,2	1,3	0,001
Extra jemná	0,35	0,3	1,35	0,005
Jemnější	0,55	0,4	1,4	0,01
Jemná	0,8	0,5	1,45	0,02
Normální	1	0,6	1,5	0,03
Hrubá	1,5	0,7	1,6	0,04
Hrubší	1,9	0,8	1,7	0,05
Extra hrubá	3	0,9	1,85	0,06
Extrémně hrubá	5	1	2	0,07

Tabulka 2.2: Základní mříže a jejich parametry použité při 3D modelování.

- Pro potřeby spojitého modelování se jedná o vysoce výkonný software. Na škodu je snad jen omezení, které klade program při změně geometrie problému, kdy je potřeba celý program „napsat“ znovu. Jednou možností, jak tento problém obejít, je využít programového balíku MATLAB a model vytvářet v podobě m-file. Pro vytvoření geometrie lze použít skriptovací jazyk.
- Pro potřeby modelování ve fyzice plazmatu se jeví výhodné použití kombinace MATLAB – COMSOL, kdy program MATLAB funguje jako hlavní program, z kterého se volají všechny potřebné funkce a COMSOL slouží jako knihovna těchto funkcí. Programování přes COMSOL editor nedoporučujeme.
- Funkční moduly vytvořené v programovacím jazyku C lze s úspěchem implementovat pomocí *mex* souborů do zdrojového kódu v MATLABu. V případě cyklů (for, while, atd.) se tímto způsobem nechá celý výpočet zefektivnit. Takto lze i v programu COMSOL Multiphysics využívat dříve napsané zdrojové kódy.

Kapitola 3

Literatura a částicové a hybridní modelování

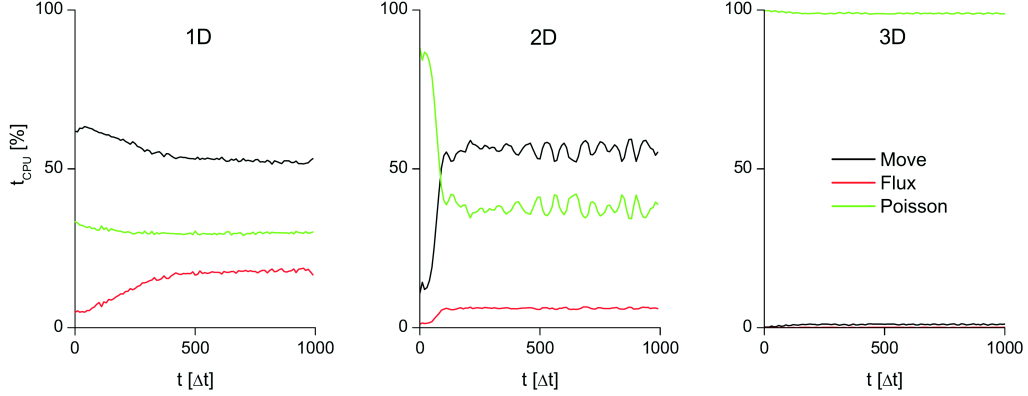
3.1 Částicové modelování

Na pracovišti KEVF MFF UK byla vytvořena řada modelů založených na filozofii částicového modelování a byly vypracovány efektivní algoritmy pro jejich řešení. Proto jsou v této kapitole shrnuty základní poznatky týkající se částicového modelování, které jsou dostupné v literatuře, a popsány některé algoritmy, které využíváme v počítačovém modelu. V druhé části této kapitoly pak uvádíme citace na literaturu, která byla k dispozici při vytváření hybridního modelu.

Základní knihou, ve které jsou popsány nejpoužívanější částicové modelovací techniky, je [21].

Částicové modely můžeme rozdělit do dvou základních skupin – modely selfkonzistentní a neselfkonzistentní. Modely neselfkonzistentního typu jsou vhodné pro případy, kdy potřebujeme ze známého rozložení elektrického potenciálu určit rozdělovací funkce rychlostí a s ní související charakteristiky. Uvažovat můžeme pouze jeden typ částic, jejichž charakteristiky hledáme, navíc v průběhu výpočtu nemusíme přepočítávat hodnoty potenciálu. Tím se celý výpočet oproti selfkonzistentnímu přístupu urychlí.

V případě selfkonzistentního modelu ([22]–[24]) jsou hodnoty elektrického potenciálu přepočítávány pravidelně mezi jednotlivými kroky částic. V modelu musí být uvažovány všechny důležité typy nabitých částic (zpravidla jsou to elektrony a kladně nabitě ionty). Z tohoto důvodu je výpočet z pohledu



Obrázek 3.1: Časové nároky jednotlivých částí částicových výpočtů – převzato z [26].

časové náročnosti poměrně neefektivní a techniky jsou vhodné pro případy, v nichž lze redukovat dimenzionalitu systému. Největší část strojového času se spotřebuje při výpočtu silových působení, jak ukazují výsledky publikované v [25]. Dle této studie v případě 1D modelu tvoří výpočet sil přibližně 35 % celkové doby výpočtu, u 2D modelu je to již 40 % a v 3D případě je to dokonce více než 99 % celkové doby výpočtu.

3.1.1 Výpočet poloh a rychlostí

K výpočtu nové polohy částice lze použít některý z následujících algoritmů (ve všech případech se předpokládá znalost počátečních poloh a rychlostí částice):

1. Eulerova metoda

Metoda je prvního řádu přesnosti v čase, diferenční schémata pro výpočet nového vektoru polohy \vec{r} , rychlosti \vec{v} a síly \vec{F} mají tvar

$$\vec{r}_i^{k+1} = \vec{r}_i^k + \vec{v}_i^k \Delta t + \frac{1}{2m_i} \vec{F}_i^k \Delta t^2 \quad (3.1)$$

$$\vec{v}_i^{k+1} = \vec{v}_i^k + \frac{1}{m_i} \vec{F}_i^k \Delta t \quad (3.2)$$

$$\vec{F}_i^{k+1} = \dots \quad (3.3)$$

Dolní indexy označují číslo částice, horní indexy číslo časového kroku.

2. Verletův algoritmus

Diferenční schéma metody má tvar

$$\vec{r}_i^{k+1} = \vec{r}_i^k + \vec{v}_i^k \Delta t + \frac{1}{2m_i} \vec{F}_i^k \Delta t^2 \quad (3.4)$$

$$\vec{F}_i^{k+1} = \dots \quad (3.5)$$

$$\vec{v}_i^{k+1} = \vec{v}_i^k + \frac{1}{2m_i} \left(\vec{F}_i^k + \vec{F}_i^{k+1} \right) \Delta t \quad (3.6)$$

Vzhledem k tomu, že sílu počítáme dříve než rychlost, nelze užít tento a následující postup v případech, kdy je síla funkcí rychlosti. Verletův algoritmus klade také větší nároky na počítačovou paměť, v níž musíme uchovávat hodnoty síly ze dvou časových kroků.

3. Metoda Leap frog

Diferenční schéma je tvaru

$$\vec{r}_i^{k+1} = \vec{r}_i^k + \vec{v}_i^{k+1/2} \Delta t + \frac{1}{2m_i} \vec{F}_i^k \Delta t^2 \quad (3.7)$$

$$\vec{F}_i^{k+1} = \dots \quad (3.8)$$

$$\vec{v}_i^{k+3/2} = \vec{v}_i^{k+1/2} + \frac{1}{m_i} \vec{F}_i^{k+1} \Delta t \quad (3.9)$$

Oproti Verletově algoritmu problémy navíc činí i určení počátečních podmínek pro rychlost, neboť první hodnota je položena do času poloviny časového kroku Δt .

Verletův algoritmus i metoda Leap frog jsou druhého řádu. V praxi se také užívají další metody numerické matematiky (metody typu Rungeho-Kutty vyšších řádů nebo vhodné metody typu prediktor-korektor), které jsou sice přesnější, ale také pomalejší. Vhodné jsou především pro výpočty s malým počtem těles (například modely slunečních soustav), pro potřeby fyziky plazmatu je jejich užití omezené.

3.1.2 Výpočet silových působení

Protože výpočet silových působení je časově nejnáročnější součástí řešení, kterou je nutné navíc během výpočtu mnohokrát opakovat, je této části potřeba věnovat zvýšenou pozornost. Byla vyvinuta řada metod, které umožňují zefektivnit výpočet. Nejčastěji používanými jsou přístupy založené na metodě

Particle in Cell (popsáno v [27]), buď ve variantě Nearest Grid Point (NGP) [21] nebo – v o něco přesnější variantě – Cloud in Cell (CIC) [21].

V případě přímé sumace silových působení se využívá ke zefektivnění výpočtu kopírování pracovní oblasti [28].

3.1.3 Srážkové procesy

Srážkové procesy jsou v modelu většinou realizovány za využití stochastických metod. Částici je na základě znalosti střední volné dráhy λ_0 všech uvažovaných srážkových procesů přidělena náhodná volná dráha ξ , která je generována vztahem

$$\xi = -\lambda_0 \ln \gamma, \quad (3.10)$$

γ je náhodné číslo s rovnoměrným rozdělením na intervalu $(0, 1)$. Vztah 3.10 lze odvodit ze vztahu pro hustotu pravděpodobnosti poissonovského jevu

$$p(x) = \frac{1}{\lambda} \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right), \quad (3.11)$$

respektive z distribuční funkce

$$F(x) = 1 - \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right), \quad (3.12)$$

a to za podmínky, že střední volná dráha není funkcí polohy ani energie částice. Pokud není tato podmínka splněna, lze její splnění vynutit použitím metody nulové srážky (Null Collision Method). Do modelu je přidán nový srážkový proces, při němž nedochází ke změně energie částice ani jejího směru rychlosti. Účinný průřez srážky je však definován tak, že celková střední volná dráha již není funkcí energie a náhodnou volnou dráhu částice lze rozehrát vztahem 3.10. Na základě statistického vyhodnocení lze ukázat, že tímto způsobem není ovlivněna povaha reálných fyzikálních problémů ani jejich náhodnost. Bližší informace k metodě nulové srážky lze nalézt v [29].

Poté, co částice urazí svou náhodnou volnou dráhu, je simulována srážka dle fyzikálních předpokladů (generuje se nová velikost a směr rychlosti částice) a rozehrává se nová náhodná volná dráha.

3.1.4 Zdroj částic

Zdroj částic bývá v modelech realizován simulací neporušeného plazmatu. Počet částic v pracovní oblasti zdroje je udržován na konstantní hodnotě,

opustí-li částice zdroj, je do něj vrácena použitím cyklických okrajových podmínek [28].

Odvozeny byly také analytické vztahy generování maxwellovského toku (příklad lze nalézt v [30]), které poskytují optimální výkon při rozehrávání rychlostí částic přilétávajících z oblasti neporušeného plazmatu. Jejich nevýhodou je, že ne vždy lze předpokládat maxwellovské rozdělení rychlostí elektronů a symetrii v geometrii modelu. Tím je jejich užití limitováno a ve speciálních případech je jejich aplikace nemožná s ohledem na komplikovanost funkce, pomocí které jsou parametry částic rozehrávány.

3.1.5 Další umělé obraty

V literatuře lze nalézt popis celé řady dalších umělých obrátů užívaných ke zefektivnění výpočtu, včetně studií jejich vlivu na přesnost výpočtu. Například jde o volbu různé délky časového kroku pro elektrony a ionty (viz [22]), nebo metody nahrazující metodu Particle-in-Cell, jako je P^3M [21], Barnesův-Hutův algoritmus [31], Evaldova sumace [32] nebo rychlá multipólová metoda FMM [33].

3.2 Hybridní modelování

I když lze v literatuře nalézt zmínky o hybridním modelování, jsou popisy prezentovaných modelů strohé, bez detailnějšího popisu vazeb mezi jednotlivými součástmi programu. Z dostupné literatury se jako nejkvalitnější jeví články publikované dvojicí Annemie Bogaerts a Renaat Gijbells: [34]–[38]. Autoři vyvinuly hybridní počítačový model, který aplikovali na případech simulací rf-plazmatu v okolí aktivní elektrody. V modelech jsou uvažovány výboje v argonu či héliu s příměsovými látkami (např. mědí).

Filozofie modelu je založena na myšlence, že ionizovat mohou pouze elektrony s energií vyšší než je prahová energie pro daný ionizační proces. Proto je tekutina elektronů rozdělena na dvě části:

- Část, v níž se nacházejí elektrony schopné ionizovat neutrální atomy (nazývané *fast electrons*), tato skupina je modelována metodou Monte Carlo.
- Skupina pomalých elektronů, neschopných vykonat ionizační proces, modelovaných spojitě.

Nastane-li neelastická srážka a částice ztratí energii, je přesunuta do skupiny pomalých elektronů a je dále modelována spojitě.

První částí výpočtu je částicový MC model, který poskytuje hodnoty koeficientů reakce R_e a R_i . Ty jsou vyjádřeny jako funkce vzdálenosti od elektrody a použity v druhé části modelu, v níž je řešen spojitý model zadaný rovnicemi

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial J_e}{\partial x} = R_e \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial J_i}{\partial x} = R_i \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e - n_{e,\text{fast}}) = 0 \quad (3.15)$$

$$J_e = \mu_e n_e \frac{\partial \varphi}{\partial x} - D_e \frac{\partial n_e}{\partial x} \quad (3.16)$$

$$J_i = -\mu_i n_i \frac{\partial \varphi}{\partial x} - D_i \frac{\partial n_i}{\partial x}, \quad (3.17)$$

kde n_e označuje koncentraci pomalých elektronů, $n_{e,\text{fast}}$ koncentraci rychlých elektronů, n_i koncentraci iontů, φ elektrický potenciál, D_e , D_i , μ_e a μ_i koeficienty difúze a pohyblivosti. K řešení soustavy se používá exponenciálního schématu, které bylo popsáno v předchozí kapitole.

Další variantou, se kterou se lze v literatuře setkat, je rozdělení pracovní oblasti na dvě disjunktní množiny. Pro oblast, v níž elektrony mají v porovnání s ostatními částmi pracovní oblasti velké energie a kde tudíž dochází k ionizaci atomů několikanásobně častěji, jsou používány částicové modelovací techniky. Oblast, kde je koeficient reakce relativně malý a kde se rozdělovací funkce elektronů příliš neliší od maxwellovské, je modelována spojitě.

Třetí možností je postup, který je navržený v této práci. Jak bude popsáno detailně dále v textu, hraje zde klíčovou roli opět tekutina elektronů. Na základě rozložení potenciálu je získávána neselfkonzistentním modelem rozdělovací funkce rychlostí elektronů, kterou lze dále využít například k získání hodnot koeficientů reakce v závislosti na vzdálenosti od povrchu sondy.

Kapitola 4

Cíle práce

Cíle práce stanovené studijním plánem, jsou následující:

Studovat fyzikální procesy probíhající v objemu plazmatu inertních plynů a při interakci tohoto plazmatu s povrchy pevných látek. Zaměřit se zejména na:

- spojitou techniku modelování ve více rozměrech (2–3),
- vývoj algoritmů pro hybridní modelování plazmatu,
- studium sondové diagnostiky v nízkoteplotním plazmatu.

V práci chci čtenáře navíc seznámit:

- s možnostmi, které nám poskytují spjité modelovací techniky,
- s programem COMSOL Multiphysics, možnostmi kompatibility s dalšími programovacími jazyky a postřehy z praktického užití.

Kapitola 5

Základní spojitý model plazmatu

5.1 Charakteristika modelu

5.1.1 Fyzikální předpoklady

Tento model argonového plazmatu byl vytvořen za účelem otestování možností zvolených metod a obsahuje celou řadu zjednodušujících nefyzikálních předpokladů. Zároveň je využit jako generátor vstupních hodnot ve výsledném hybridním modelu, proto je v této kapitole uvedena jeho stručná charakteristika. Poskytuje důležité informace o modelech založených na spojitých simulačních technikách (náročnost programu na spotřebu strojového času, nároky na počítačovou paměť atp.), přičemž tyto informace lze využít při vývoji složitějších a kvalitnějších modelů.

Předpoklady pro tento model lze shrnout do několika bodů:

1. Pro potřeby simulací se používají parametry nízkoteplotního, částečně ionizovaného argonového plazmatu o tlaku $p = 133$ Pa, teplotě elektronů $T_e = 23.200$ K a teplotě iontů $T_i = 300$ K. Koncentrace elektronů a kladných iontů v oblasti neporušeného plazmatu je rovna $n_e = n_i = 1 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$. Parametry argonového plazmatu jsou použity především z důvodu dostatku experimentálních dat, z nichž lze získat relativně dobrou představu o elementárních jevech, které hrají roli při formování sheathu.
2. Pracovní oblastí je část kladného sloupce doutnavého výboje argono-

vého plazmatu tvořeného pouze neutrálními atomy, elektrony a kladnými argonovými ionty Ar^+ . V reálném plazmatu se samozřejmě vyskytují (zpravidla v malých koncentracích) i další typy částic, například argonové ionty Ar^{2+} , excitované neutrální argonové atomy atd., ty však nejsou v této variantě uvažovány. Tvar a velikost pracovní oblasti a umístění sondy jsou zvoleny na základě použité geometrie a jsou popsány dále v textu.

3. Předpokládáme, že koeficienty difúze a pohyblivosti nabitých částic zůstávají po celou dobu experimentu konstantní, nezávislé na energii částic.
4. Rychlostní rozdělení částic je maxwellovské. Také tento předpoklad nebývá v reálném plazmatu zpravidla splněn, především pro elektrony s vyšší energií a pro elektrony v blízkosti sondy. V této oblasti bývá rychlostní rozdělení elektronů značně odlišné od Maxwellovy rozdělovací funkce (jak bude diskutováno dále).
5. Zanedbává se vliv toku nabitých částic na tekutinu neutrálních částic.
6. Nejsou uvažovány jevy způsobené magnetickým polem.
7. Ze srážkových procesů se uvažuje pouze pružný rozptyl elektronů na neutrálních atomech, energetické ztráty elektronové tekutiny v průběhu jedné srážky jsou zanedbány.

5.1.2 Základní rovnice

Model nahlíží na plazma jako na směs tří navzájem se prostupujících tekutin – tekutiny neutrálních atomů, tekutiny tvořené elektrony a tekutiny kladných iontů. Jelikož o neutrálních atomech se předpokládá, že nejsou ovlivněny toky nabitých částic, je nutno matematicky popsat pouze poslední dvě z nich (viz [12]). To lze učinit pomocí soustavy šesti diferenciálních rovnic o šesti neznámých. Soustava je tvořena rovnicemi kontinuity pro kladné ionty a elektrony

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_i = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_e = 0. \quad (5.2)$$

Funkční předpisy pro tok elektronů \vec{J}_e a kladných iontů \vec{J}_i lze odvodit ze zákona zachování hybnosti 2.4. Odvození lze nalézt pro stacionární případ, kdy lze zanedbat konvektivní člen $(\vec{v} \cdot \nabla)\vec{v}$, v publikaci [12]. Toky elektronů a iontů jsou pak dány jako součet toku částic pod vlivem elektrického pole a v gradientu koncentrace

$$\vec{J}_i = \mu_i n_i \vec{E} - D_i \nabla n_i \quad (5.3)$$

$$\vec{J}_e = -\mu_e n_e \vec{E} - D_e \nabla n_e. \quad (5.4)$$

Koeficient difúze elektronů D_e a iontů D_i a koeficient pohyblivosti μ_e a μ_i je vyjádřen ve tvaru (viz [12])

$$\mu_j = \frac{e}{m_j \nu_{j,n}} \quad (5.5)$$

$$D_j = \frac{kT_j}{m_j \nu_{j,n}}, \quad (5.6)$$

$j = e, i$, $\nu_{j,n}$ označuje srážkovou frekvenci částice s neutrály.

V případě ideálního maxwellovského rozdělení rychlostí částic bychom mohli každou z dvojic svázat užitím Einsteinova vztahu [12], [39]

$$\mu_j = \frac{eD_j}{kT_j}, \quad (5.7)$$

Ačkoliv lze v literatuře (např. [40]) nalézt semi-empirické vztahy pro funkční závislost koeficientů pohyblivosti a difúze na intenzitě elektrického pole, nejsou takové závislosti v základní variantě modelu využity. Například pro kladné ionty se pro závislost jejich teploty T_i na velikosti intenzity elektrického pole E používá vztah

$$k_B T_i = k_B T_g + \frac{m_i + m_g}{5m_i + 3m_g} m_g (\mu_i E)^2, \quad (5.8)$$

kde index g označuje neutrální částici, i iont.

Hodnoty koeficientů pohyblivosti a difúze použité v modelu jsou převzaté z [41], tzn. $D_e = 340 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, $\mu_e = 170 \text{ m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, $D_i = 0.012 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ a $\mu_i = 0.46 \text{ m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$.

Dále je potřeba využít Poissonovu rovnici

$$\Delta\varphi = -\frac{e}{\varepsilon_0}(n_i - n_e) \quad (5.9)$$

Koeficient dif. rovnice	Tekutina elektronů	Tekutina kl. iontů	Poissonova rovnice
d_a	1	1	
c	D_e	D_i	1
a	0	0	
f	0	0	$\frac{e \cdot (n_i - n_e)}{\varepsilon_0}$
$\vec{\alpha}$	$-\mu_e \cdot \nabla \varphi$	$\mu_i \cdot \nabla \varphi$	
$\vec{\beta}$	$\vec{0}$	$\vec{0}$	
$\vec{\gamma}$	$\vec{0}$	$\vec{0}$	

Tabulka 5.1: Předpisy pro koeficienty v rovnici 2.36 a 2.42 použité pro základní model plazmatu

a obecný vztah mezi elektrickým potenciálem a intenzitou elektrického pole:

$$\vec{E} = -\nabla \varphi. \quad (5.10)$$

Dosazením rovnic 5.3, 5.4 a 5.10 do rovnic 5.1 a 5.2 lze soustavu diferenciálních rovnic 5.1 až 5.10 převést na soustavu tří diferenciálních rovnic o třech neznámých n_e , n_i a φ :

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla n_i) + \nabla \cdot (-\mu_i n_i \nabla \varphi) = 0 \quad (5.11)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_e \nabla n_e) + \nabla \cdot (\mu_e n_e \nabla \varphi) = 0 \quad (5.12)$$

$$\Delta \varphi = -\frac{e}{\varepsilon} (n_i - n_e). \quad (5.13)$$

Porovnáním těchto rovnic s obecným zápisem diferenciální rovnice 2.36 používané v programu COMSOL Multiphysics získáme funkční předpisy pro jednotlivé koeficienty d_a , a , c , α , β , γ a f (viz tabulka 5.1). Jelikož tyto koeficienty závisí na neznámých n_e , n_i a φ , jde o nelineární úlohu. Pro řešení rovnic 5.11 a 5.12 je použit aplikační mód *PDE mode/Coefficient form*, který je poté překonvertován do formy *General*, která je pro řešení nelineárních diferenciálních rovnic vhodnější.

5.1.3 Okrajové a počáteční podmínky

Nedílnou součástí úlohy jsou počáteční a okrajové podmínky. V tomto případě je pro neznámé veličiny n_i , n_e a φ potřeba zadat šest okrajových podmínek a tři podmínky počáteční.

Okrajová podmínka pro elektrický potenciál

Hodnota elektrického potenciálu na sondě je rovna $\varphi_0 = 10$ V. Dále se předpokládá, že celý tento elektrický potenciál je na okraji pracovní oblasti, kde se již vyskytuje neporušené plazma, plazmatem odstíněn, proto je zde pro elektrický potenciál zvolena okrajová podmínka $\varphi_\infty = 0$ V.

Okrajové podmínky pro koncentrace částic

Správně zvolená okrajová podmínka pro koncentraci elektronů na povrchu sondy je důležitou součástí zadání úlohy, její určení je však dosti komplikované. V některých případech lze pro hodnotu koncentrace elektronů na povrchu sondy zvolit $n_{e0} = 0$ m⁻³ nebo $\nabla n_e \cdot \vec{n} = 0$, jako je tomu v publikacích [8], [42]–[44], \vec{n} značí vektor normály k ploše orientované do elektrody. I když byla takováto okrajová podmínka v prvních variantách našeho modelu také používána, nevystihuje příliš podmínky panující v reálném plazmatu. Koncentrace elektronů těsně u povrchu sondy totiž není nulová, elektrony by se navíc v oblasti sheathu musely v některých případech pohybovat rychlostí větší, než je rychlost světla.

V publikaci [45] je hodnota koncentrace na povrchu sondy zadána von Neumannovo podmínkou ve tvaru

$$\vec{n} \cdot \vec{J}_e = -k_s n_e + \gamma \vec{J}_i \cdot \vec{n}, \quad (5.14)$$

kde koeficient k_s je tzv. koeficient rekombinace elektronů na stěnách, γ je tzv. koeficient sekundární emise. Hodnoty obou koeficientů je nutné získat z experimentálních měření. Hodnoty veličiny γ se pohybují řádově v setinách.

Jako nejvhodnější se ukazuje použití Neumannovy okrajové podmínky, jako je tomu v [46]–[50]:

$$\vec{J}_e \cdot \vec{n} = -n_e \mu_e \vec{E} \cdot \vec{n} + \frac{1}{4} v_{th} n_e, \quad (5.15)$$

kde

$$v_{th} = \sqrt{\frac{8k_B T_e}{\pi m_e}}. \quad (5.16)$$

V publikaci [51] lze nalézt podobný předpis, který je po teoretickém rozboru zobecněn a uvažuje mimo jiné také vliv sekundární emise elektronů z povrchu sondy.

Na okraji pracovní oblasti, kde se předpokládá neporušené plazma, je s ohledem na podmínku kvazineutrality koncentrace elektronů rovna koncentraci iontů v elektrickém polem neovlivněném plazmatu, tedy $n_{e\infty} = n_{i\infty} = 1 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$.

Okrajová podmínka pro koncentraci kladných iontů na povrchu sondy je zvolena jako $n_{i0} = 0 \text{ m}^{-3}$, což je ospravedlnitelný předpoklad, neboť energie iontů odpovídající teplotě 300 K nestačí na překonání potenciálové jámy o výšce +10 eV.

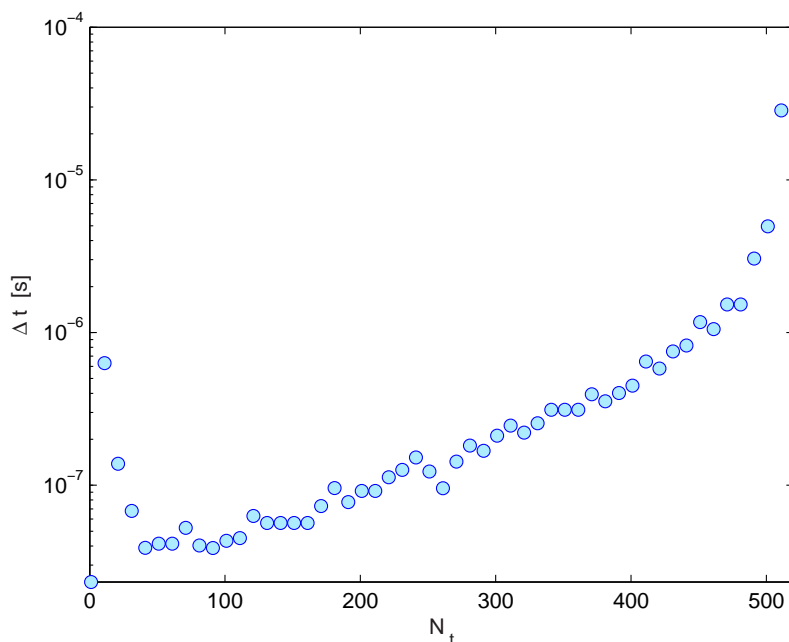
Počáteční podmínky

Počáteční koncentrace elektronů a koncentrace kladných iontů je rovna koncentraci těchto částic v neporušeném plazmatu, tedy $n_e^{t=0} = n_i^{t=0} = 1 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$, počáteční podmínka na rozložení potenciálu v celé pracovní oblasti je rovna potenciálu na povrchu sondy, tj. $\varphi^{t=0} = 10 \text{ V}$.

5.1.4 Řešení problému, další parametry

Soustava diferenciálních rovnic je řešena časovým řešičem v časovém intervalu 10^{-3} s. V systému však ustálený stav nastává o něco dříve, asi po 10^{-4} s reálného času experimentu, což je v poměrně dobré shodě s výsledky, které poskytují modely založené na částicové technice modelování – zde ustálený stav nastává přibližně po 10^{-5} s. Časový rozdíl v tomto výsledku je dán pravděpodobně různými počátečními podmínkami (v částicových modelech se zpravidla vychází z hodnot daných řešením difúzní rovnice, které se méně liší od hodnot odpovídajících ustálenému stavu).

K řešení soustav algebraických rovnic, které vynikly po diskretizaci soustavy diferenciálních rovnic, jsme použili balík UMFPACK [52]. Kromě toho jsme také otestovali další řešiče – řešič SPOOLES (Sparse Object-Oriented Linear Equations Solver) využívající přímé numerické metody [53], řešič GMRES (Generalized Minimal Residual Method) využívající iterační numerické metody [54], metodu konjugovaných gradientů [55] a metodu geometrických multigradů [56]. Řešič UMFPACK poskytoval výsledky v porovnání s ostatními řešiči v nejkratším čase, při řešení třídímenzionálních modelů byl však limitován kapacitou paměti.



Obrázek 5.1: Volba délky časového kroku Δt v závislosti na pořadí kroku N_t .

5.2 Výsledky

5.2.1 Jednodimenzionální model

Prvním typem sondy, kterou jsme studovali, byla sonda rovinná. Ke studiu chování plazmatu v okolí této sondy lze náš problém s ohledem na symetrii problému převést do jedné dimenze. Všechny neznámé n_e , n_i a φ , pomocí nichž je plazma popsáno, jsou tedy funkcemi prostorové souřadnice x a času t (při odpovídající volbě kartézské souřadné). Pracovní oblastí je úsečka délky L , která je kolmá k povrchu sondy. Jeden krajní bod ztotožňujeme s bodem ležícím na povrchu sondy, na druhý krajní bod nahlížíme tak, jakoby ležel v oblasti, která odpovídá neporušenému plazmatu. Výpočet jsme provedli pro pracovní oblasti různých délek.

Doba potřebná pro provedení výpočtu závisela dle očekávání především na kvalitě použité mříže – některé časové údaje jsou uvedeny v tabulce 5.2. V porovnání s metodami částicovými, kde u jednodimenzionálních modelů doba výpočtu zpravidla neklesá pod několik hodin (viz [57]), je právě krátká doba potřebná k výpočtu základním rysem spojitých modelů. Program COM-

Počet konečných prvků	Doba výpočtu [s]
30	5,4
60	5,5
120	7,6
240	10,6
480	16,4
960	26,4
1920	50,6

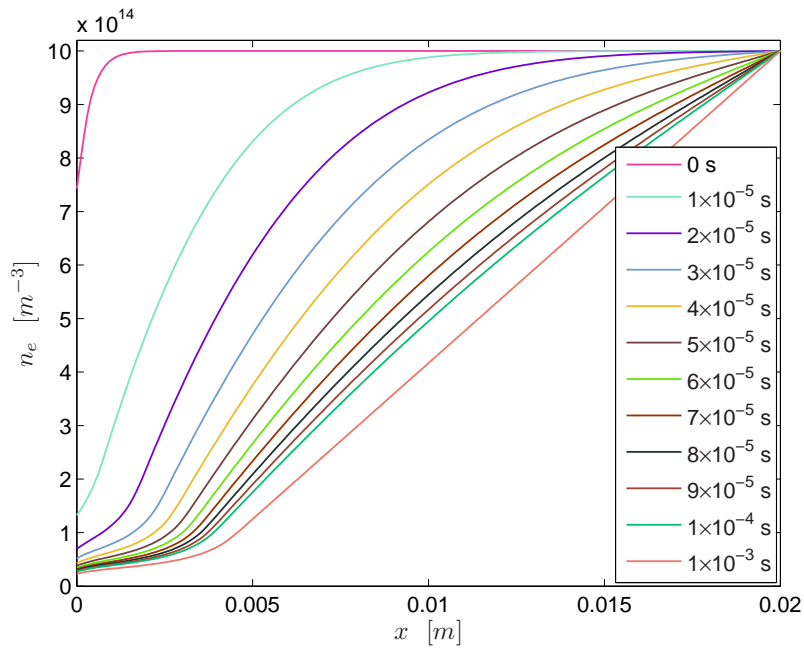
Tabulka 5.2: Doba výpočtu jednodimenzionálního modelu na síti o různém počtu konečných prvků. Tato závislost je přibližně lineární a dobu výpočtu t v sekundách je možno vyjádřit jako funkci počtu prvků N přibližně ve tvaru $t = 0,024N + 4,554$.

SOL Multiphysics navíc dokáže optimalizovat volbu délky časového kroku, čímž lze dále výpočet značně urychlit a zároveň velice zpřesnit. V okamžicích, kdy dochází k velkým změnám hodnot hledaných veličin, volí krátké časové kroky. Ke konci výpočtu, kde je již prakticky navozen ustálený stav a změna hodnot již není tak dramatická, je volen delší časový krok. Délka zvoleného časového kroku pro různé fáze výpočtu je uvedena pro ukázkou na obrázku 5.1.

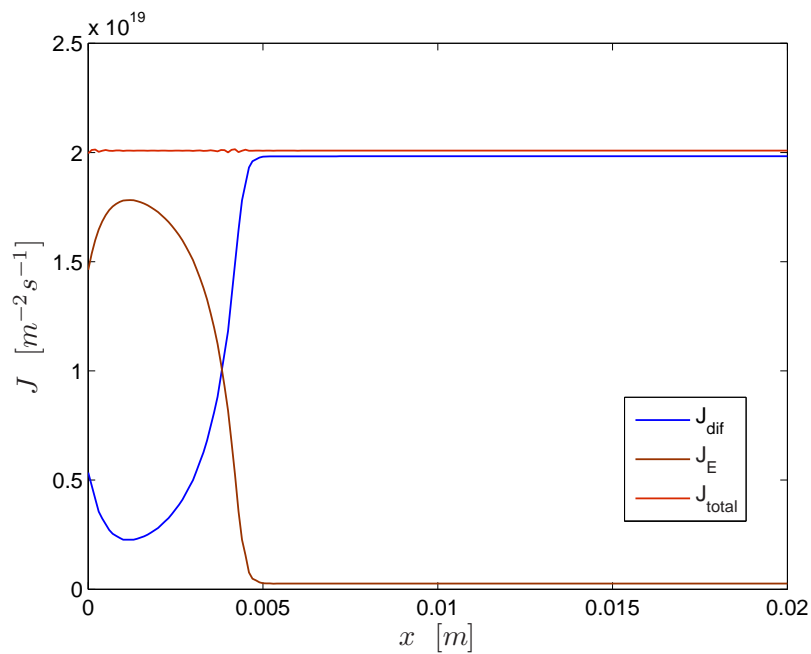
Rozložení koncentrace elektronů n_e v daných časových okamžicích je uvedeno na obrázku 5.2.

Výsledné rozložení potenciálu φ je pak uvedeno současně s rozložením potenciálu v okolí válcové a kulové sondy na obrázku 5.9. Prezentované grafy byly získány na pracovní oblasti délky $L = 2$ cm triangulované na 60 Lagrangeových konečných prvků druhého řádu.

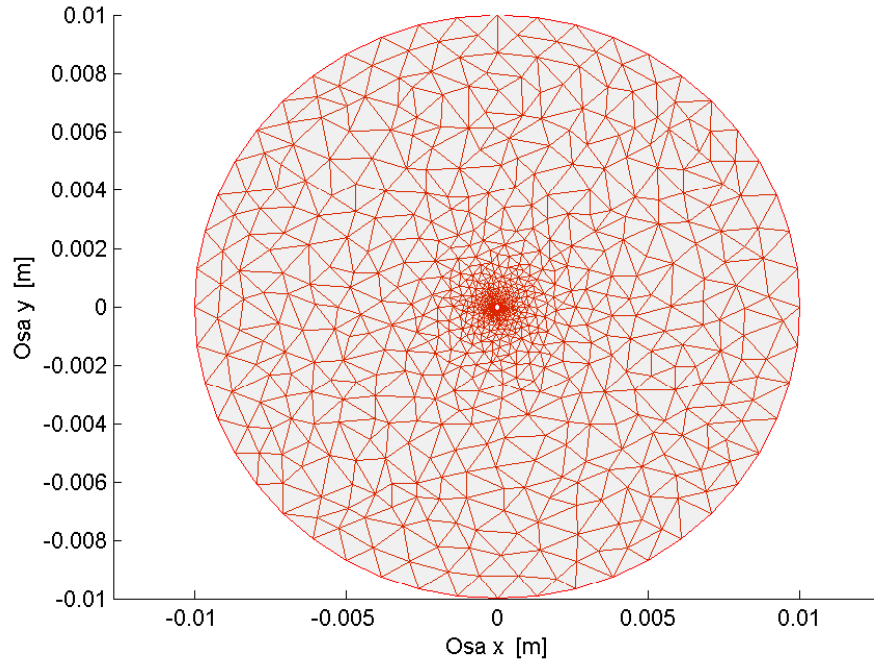
Stejně tak jako v následujících případech řešili jsme tento model také jako nelineární stacionární problém. V tomto případě lze v rovnicích 5.11 a 5.12 derivace podle času $\frac{\partial n_i}{\partial t}$ a $\frac{\partial n_e}{\partial t}$ položit rovny nule. V programu COMSOL Multiphysics lze k řešení takto získaného problému použít řešič *Stationary nonlinear solver*. Obdržené výsledky korespondovaly s výsledky získanými



Obrázek 5.2: Rozložení koncentrace elektronů n_e v závislosti na vzdálenosti x od rovinné sondy a na reálném čase experimentu. Velikost pracovní oblasti je 2 cm.



Obrázek 5.3: Velikosti celkového toku elektronů J_{total} a jeho složek – difúzní část J_{dif} a část popisující drift v elektrickém poli J_E .



Obrázek 5.4: Ukázka mříže typu *normal* použité k řešení dvoudimenzionálního problému.

pomocí časového řešiče.

Z modelu je také možné získat hodnotu toku elektronů a iontů J_e a J_i . Jelikož při ustáleném stavu vymizí v rovnicích kontinuity 5.1 a 5.2 časové derivace $\frac{\partial n_i}{\partial t}$ a $\frac{\partial n_e}{\partial t}$, platí

$$\nabla \cdot \vec{J}_i = 0 \quad (5.17)$$

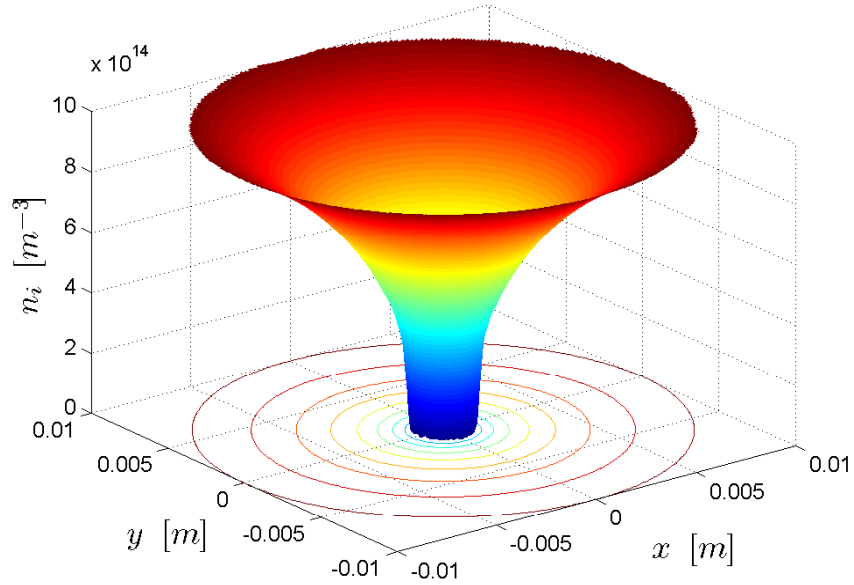
$$\nabla \cdot \vec{J}_e = 0. \quad (5.18)$$

Velikost toků J_e a J_i tedy nezávisí na vzdálenosti od sondy. Pro planární sondu udává model hodnoty $J_e = 2,0126 \times 10^{19} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ (orientováno směrem k sondě) a $J_i = 0 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$.

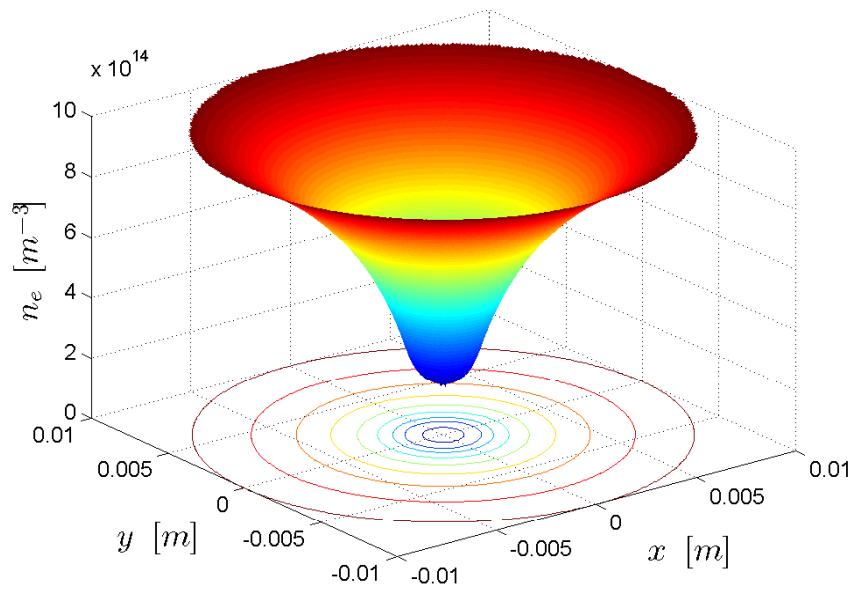
Velikost celkového toku elektronů J_e , velikost difúzní složky J_{dif} a složky popisující tok elektronů vyvolaný elektrickým polem J_E jsou na obrázku 5.3.

5.2.2 Dvoudimenzionální model

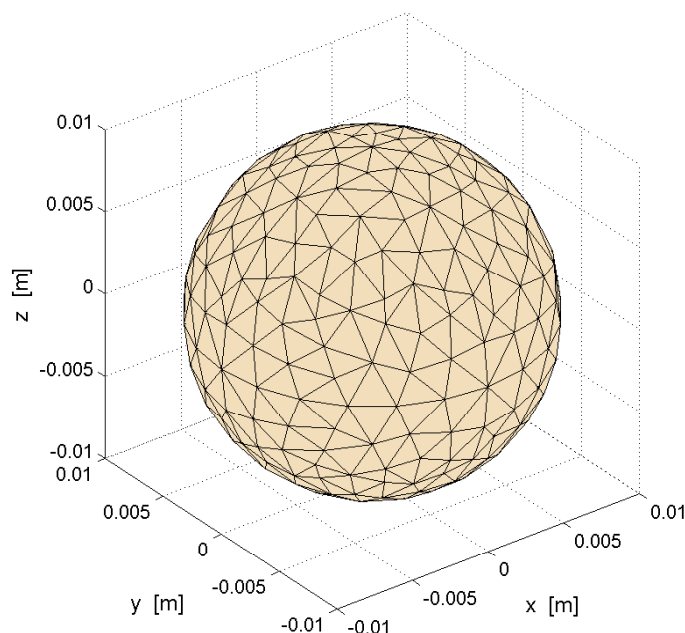
Při studiu chování plazmatu v okolí nekonečně dlouhé válcové sondy jsme s ohledem na symetrii problému ve směru rovnoběžném s její osou zvolili dvojrozměrný model řešený v kartézských souřadnicích. Pracovní oblast je



Obrázek 5.5: Rozložení koncentrace iontů n_i v okolí válcové sondy o poloměru $r = 0,1$ mm. Poloměr pracovní oblasti je roven 1 cm.



Obrázek 5.6: Rozložení koncentrace elektronů n_e v okolí válcové sondy o poloměru $r = 0,1$ mm. Poloměr pracovní oblasti je roven 1 cm.

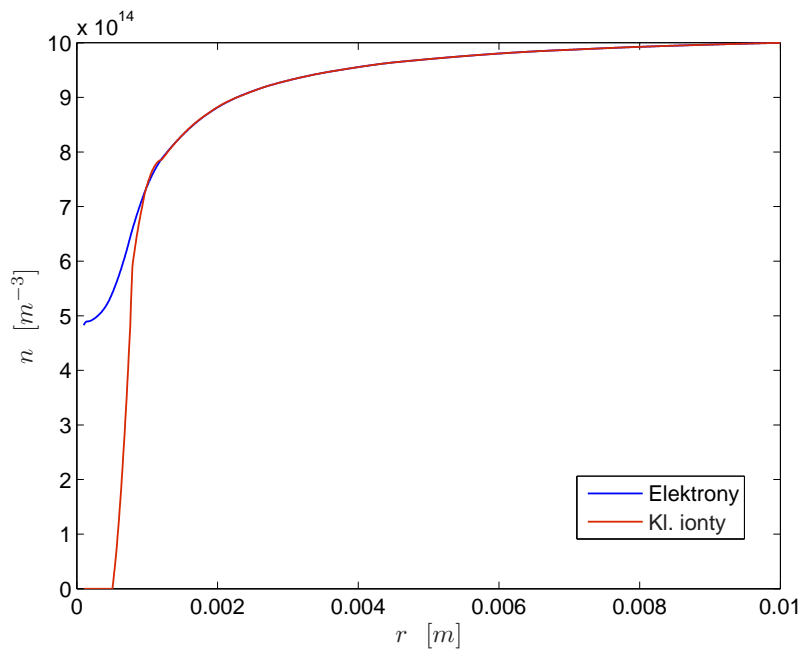


Obrázek 5.7: Ukázka triangulované pracovní oblasti při modelování plazmatu v okolí sférické sondy.

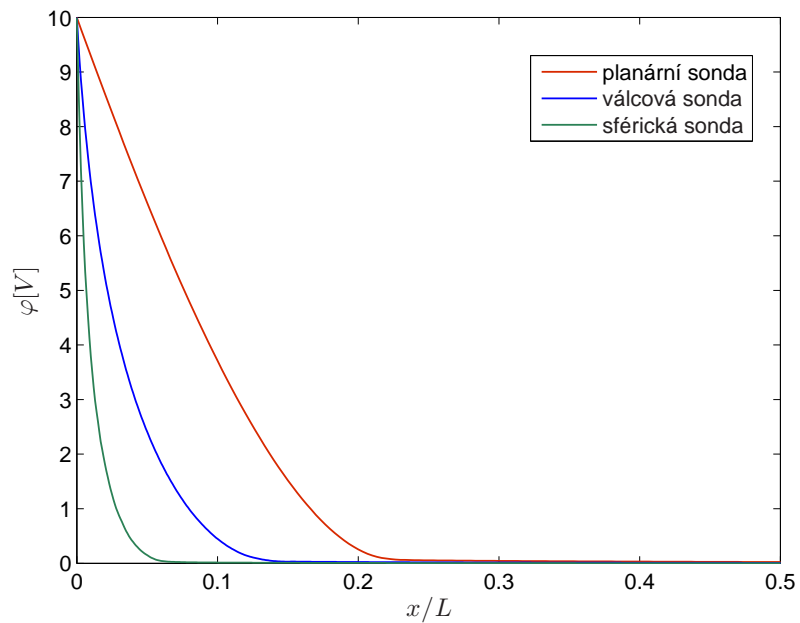
kruh o poloměru L ležící v rovině kolmé k ose sondy, jehož střed leží na ose sondy. Stejně jako v předchozím případě jsme tento problém řešili pro různé poloměry sond a pracovní oblasti. Testován byl také vliv závislosti na tlaku. Získané výsledky jsou publikovány v [58]. V grafech 5.5, 5.6 a 5.9 jsou uvedeny výsledky, které byly získány pro poloměr pracovní oblasti $L = 1$ cm a poloměr válcové sondy $R = 0,1$ mm. Celý problém byl řešen na síti s Lagrangeovými konečnými prvky druhého řádu, jejíž ukázka je na obrázku 5.4. Výpočet trval přibližně 60 s.

5.2.3 Třídímenzionální model

K otestování možnosti modelovat plazma spojitými technikami formou trojrozměrných modelů, jsme použili model sférické sondy. Tato informace je důležitá především z hlediska možnosti zavést do modelů působení magnetického pole. Stejně, jako v předchozích případech, byl problém řešen v kartézských souřadnicích, i když by bylo možné použít model jednodímenzionální využívající radiální souřadnice. Získané výsledky ukazují, že v další práci se bude možné trojrozměrným modelem plazmatu uvažujícím vliv magnetického



Obrázek 5.8: Rozložení koncentrace elektronů (modře) a kladných iontů (červeně) v okolí sférické sondy o poloměru $r = 0,1$ mm.



Obrázek 5.9: Rozložení potenciálu φ v okolí planární, cylindrické a sférické sondy. Vzdálenost x je měřena od povrchu sondy. Veličina L označuje velikost pracovní oblasti.

pole zabývat.

Pracovní oblastí je koule o poloměru $L = 1$ cm, která je umístěna tak, aby její střed splýval se středem sférické sondy o poloměru $R = 1 \times 10^{-4}$ m. Výpočet byl zahájen na mříži, která byla po uplynutí reálné doby experimentu 10^{-6} s zjemněna. Ukázka této sítě je na obrázku 5.7. Získané hodnoty neznámých n_e , n_i a φ jsou zobrazeny na obrázcích 5.8 a 5.9.

Vyřešení tohoto modelu nám zpočátku dělalo velké potíže (viz [59]). Program FEMLAB ve verzi 3.0 nebyl schopen vystačit s počítačovou pamětí, do které by uložil všechna potřebná data. K řešení nevedlo ani zmenšení velikosti pracovní oblasti na jednu osminu původní velikosti (problém byl řešen pouze pro první kvadrant). V nové verzi programu, tentokrát pod označením COMSOL Multiphysics ve verzi 3.2, však řešení problému trvalo při použití časového řešiče asi 11 minut, neboť byla použita efektivnější metoda řešení soustavy diferenciálních rovnic. Zajímavé bylo také použití stacionárního řešiče, kdy výpočet trval (v závislosti na parametrech mříže) řádově jednotky minut.

Kapitola 6

Spojité model plazmatu s energetickou bilancí elektronů

6.1 Charakteristika modelu

Výše uvedený model nám vytvořil základní představu o tom, co lze od počítačových modelů tohoto typu očekávat. Chceme-li však získat model, který by věrněji popisoval chování reálného plazmatu, musíme získat informaci o energetických poměrech jednotlivých tekutin v plazmatu (především elektronů, které mají na celkové rozložení jednotlivých veličin největší vliv). Znalost rozložení energie elektronové tekutiny nám umožní zavést do modelu různé srážkové procesy, jejichž účinné průřezy jsou funkcemi energie srážejících se částic.

Pojem energie zavedeme do modelu užitím druhého momentu Boltzmannovy kinetické rovnice – zákona zachování energie. Vzhledem k tomu, že hmotnost iontů a neutrálních částic je mnohem větší než hmotnost elektronů, lze změnu energie iontů a neutrálnů v průběhu experimentu zanedbat a celkovou energii těchto částic považovat za konstantní. Rovnici popisující změnu energie tedy použijeme pouze pro elektronovou tekutinu. Je-li ϵ_e střední hodnota energie elektronu v daném bodě, lze definovat hustotu energie jako

$$w_e = n_e \epsilon_e, \quad (6.1)$$

a zákon zachování energie lze psát ve tvaru [42]

$$\frac{\partial w_e}{\partial t} + \nabla \cdot \left(-\frac{5}{3} \mu_e w_e \vec{E} - \frac{5}{3} D_e \nabla w_e \right) + e \vec{J}_e \cdot \vec{E} = 0. \quad (6.2)$$

Význam prvního a druhého členu na levé straně této rovnice je zřejmý. Třetí člen popisuje zisk energie elektronové tekutiny v důsledku působení elektrického pole.

Hustotu energie w_e lze vyjádřit jako součet hustoty tepelné energie elektronů a hustoty kinetické energie získané driftem částic v elektrickém poli a gradientu koncentrace (u_e označuje velikost driftové rychlosti elektronů)

$$w_e = \frac{3}{2}k T_e n_e + \frac{1}{2}m_e n_e u_e^2. \quad (6.3)$$

Driftová složka bývá v některých případech mnohem menší než složka tepelná a lze ji proto zanedbat. Někteří autoři (například D. P. Lymberopoulos, D. J. Economou [45], [60]) pak ve svých pracích nahrazují po použití této aproximace hustotu energie $w_e(\vec{r}, t)$ teplotou elektronů T_e a zákon zachování energie používají ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2}n_e k_B T_e \right) + \nabla \cdot \vec{q}_e - e\vec{J}_e \cdot \nabla \varphi = 0, \quad (6.4)$$

kde tok energie nesené elektrony q_e je dán vztahem

$$q_e = -K_e \nabla T_e + \frac{5}{2}k_B T_e \vec{J}_e. \quad (6.5)$$

Pro fyzikální veličinu K_e , která má význam tepelné vodivosti elektronové tekutiny, platí

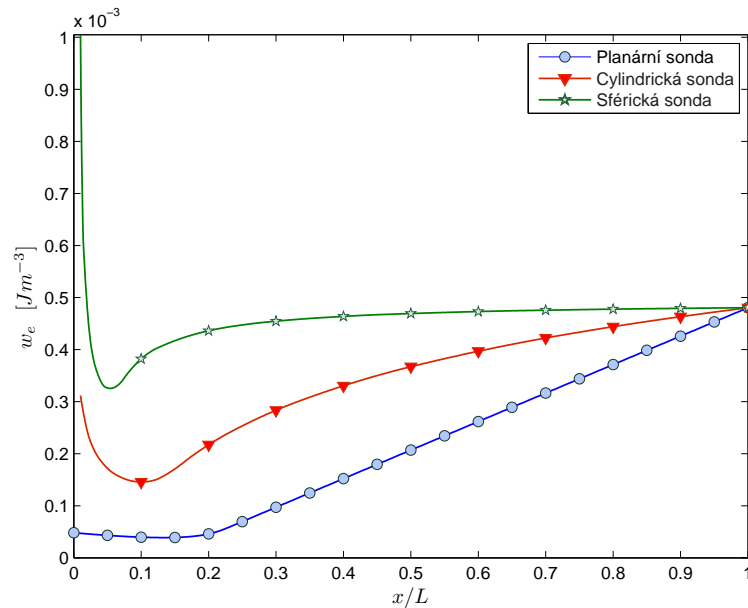
$$K_e = \frac{5}{2}k_B D_e n_e. \quad (6.6)$$

Vyzkoušeli jsme modelovat také tuto variantu, nicméně použití hustoty energie jako neznámé považujeme za výhodnější z několika důvodů:

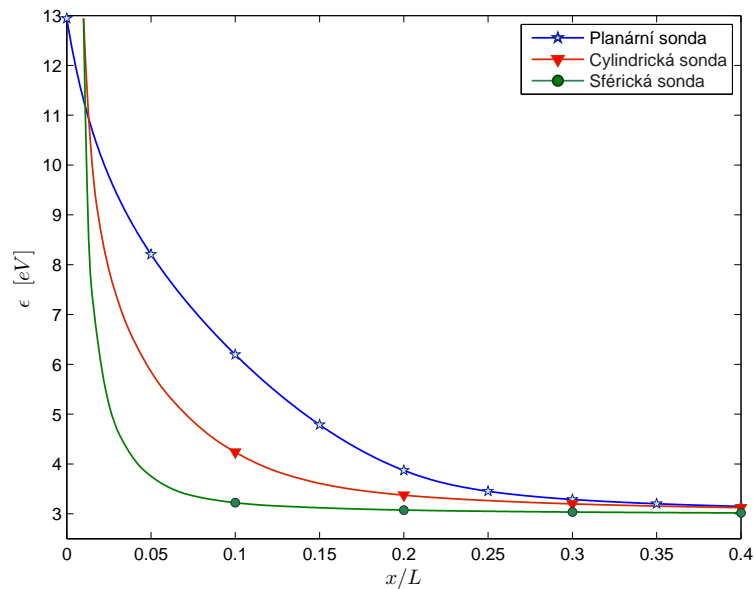
1. Minimalizují se problémy při určování počátečních podmínek.
2. Bez použití dalších zjednodušujících předpokladů lze převzít většinu experimentálních dat, jejichž funkční závislosti jsou zpravidla vyjádřeny právě jako funkce energie.
3. V oblasti sheathu, kde se energie tepelná vyrovnává energii driftové, nelze popsanou aproximací použít.
4. V případě nemaxwellovského rozdělení nelze pojem teploty použít nebo tak lze učinit pouze s jistými omezeními.

Koeficient dif. rovnice	Hustota energie	Teplota
d_a	1	n_e
c	$\frac{5D_e}{3}$	$D_e n_e$
a	0	$\frac{\partial n_e}{\partial t}$
f	$e\vec{J}_e \nabla \varphi$	$\frac{2eJ_e \nabla \varphi}{3k_B}$
$\vec{\alpha}$	$-\frac{5}{3}\mu_e \nabla \varphi$	$-\frac{5J_e}{3}$
$\vec{\beta}$	$\vec{0}$	$\vec{0}$
$\vec{\gamma}$	$\vec{0}$	$\vec{0}$
Hodnota na sondě	$0 \text{ J} \cdot \text{m}^{-3}$	69 600 K
Okraj prac. obl.	$\frac{3T_{e\infty}}{2} \cdot k_B n_{e\infty}$	$T_{e\infty}$
Počáteční hodnota	$\frac{3T_{e\infty}}{2} \cdot k_B n_{e\infty}$	$T_{e\infty}$

Tabulka 6.1: Předpisy pro koeficienty obecné rovnice 2.36 popisující rozložení hustoty energie elektronů v závislosti na vzdálenosti od sondy a použité pro model plazmatu s energetickým rozdělením rychlostí elektronů.



Obrázek 6.1: Hustota energie w_e el. tekutiny v závislosti na vzdálenosti x od povrchu planární sondy (pro 1D), od osy cylindrické sondy (pro 2D) a od středu sférické sondy (pro 3D úlohu). L označuje velikost pracovní oblasti.



Obrázek 6.2: Závislost velikosti střední energie ϵ_e elektronu na vzdálenosti x od povrchu planární sondy (pro 1D), osy cylindrické sondy (pro 2D), respektive středu sférické sondy (pro 3D úlohu).

Z výpočetního hlediska se však oba dva přístupy jeví jako rovnocenné.

V počítačovém modelu realizujeme rovnici pro w_e v aplikačním módu *PDE modes/Coefficient form*. Hodnoty jednotlivých koeficientů a volba okrajových a počátečních podmínek je uvedena v tabulce 6.1.

Shrňme tedy na závěr této kapitoly všechny rovnice, které použijeme v této variantě modelu. Máme čtyři neznámé: koncentraci elektronů n_e , koncentraci kladných iontů n_i , elektrický potenciál φ a hustotu energie elektronů w_e . Tyto čtyři neznámé máme svázány pomocí čtyř diferenciálních rovnic 5.9, 5.11, 5.12 a 6.2 doplněné odpovídajícími okrajovými a počátečními podmínkami. Soustavu opět řešíme pomocí programu COMSOL Multiphysics. Pro řešení Poissonovy rovnice byl použit aplikační mód *PDE modes/Classical PDEs/Poisson's Equation*, zbylé tři rovnice byly zadány pomocí módu *PDE modes/Coefficient form*, které byly konvertovány (vzhledem k nelineárnosti rovnic) do formy *general*.

6.2 Výsledky

Získaný model jsme řešili (stejně jako model základní) pro planární sondu (jednodimenzionální model), cylindrickou sondu (dvojdimenzionální model) a sférickou sondu (třídimenzionální model) se stejnými parametry, které byly použity v základním modelu. Získané rozložení energie a hustoty energie pro jednotlivé případy je uvedeno v grafech 6.1 a 6.2. Oproti základní variantě modelu se dle očekávání zvýšily požadavky na kvalitu mříže a nepatrně vzrostla doba potřebná k provedení výpočtu.

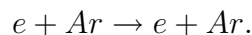
Kapitola 7

Spojité model plazmatu s uvažováním srážek

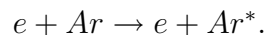
7.1 Srážkové procesy v plazmatu a počítačové modelování

V reálném plazmatu dochází k velkému počtu nejrůznějších srážkových procesů, které značně ovlivňují výsledné rozložení elektrického potenciálu, hodnoty koncentrací částic, jejich energií atp. V běžném počítačovém modelu není možné všechny tyto procesy realizovat, proto se do modelu běžně zahrnují jen ty nejdůležitější. *Annemie Bogaerts* považuje ve své práci [36] za nejdůležitější srážkové procesy následující:

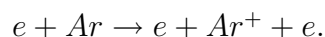
1. Pružné srážky elektronů a neutrálních atomů:



2. Excitaci neutrálního argonového atomu Ar ze základního stavu:

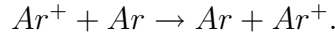


3. Ionizaci neutrálního argonového atomu Ar ze základního stavu:

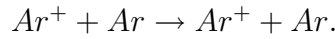


Při ionizaci argonového atomu ze základního stavu ztrácí ionizující elektron energii minimálně 15,76 eV (část této ztráty tvoří ionizační energie, druhá část připadá na nově vznikající elektron).

4. Rezonanční přenos náboje (charge transfer) mezi kladným argonovým iontem a neutrálním argonovým atomem:



5. Pružný rozptyl argonových iontů na neutrálních atomech argonu:



Jak je dále uvedeno v [36], jsou první tři srážkové procesy vzhledem k vysoké koncentraci neutrálních částic převažující a jsou klíčové pro změnu energie elektronové tekutiny. Ostatní srážkové procesy vzhledem k mnohonásobně menšímu počtu výskytů v plazmatu mnohem méně ovlivňují změnu energie elektronů a do modelů jsou tedy zahrnovány především v případech, kdy je potřeba přesněji určit rozložení koncentrací dalších typů částic (zpravidla excitovaných argonových atomů).

7.1.1 Účinný průřez σ_j

Každý ze srážkových procesů nastává s různou pravděpodobností, jejíž velikost závisí na řadě faktorů – například na energiích srážejících se částic. Základní informaci o tom, s jakou pravděpodobností k danému typu srážky dojde, nám poskytuje veličina zvaná účinný průřez. I když zavedení účinných průřezů (případně dalších veličin, které na nich závisí) do modelu způsobuje často nemalé komplikace, je to zpravidla jediná cesta umožňující vytvoření modelu poskytujícího výsledky, které jsou v poměrně dobré shodě s realitou.

V literatuře jsou účinné průřezy nejčastěji uváděny ve formě grafů. Pro některé významné srážkové procesy lze nalézt i vzorcem vyjádřené funkční závislosti. Například pro argonové plazma jsou uváděny následující relace (převzato z [38], energie elektronů $\tilde{\epsilon}_e$ jsou v elektronvoltech, účinné průřezy σ_j jsou v cm^2):

- ionizace atomu Ar ze základního stavu
 - a) pro energii elektronu menší než 15,8 eV je $\sigma_{\text{ion}} = 0 \text{ cm}^2$,
 - b) pro energie elektronu větší než 15,8 eV je

$$\sigma_{\text{ion}}(\tilde{\epsilon}_e) = \frac{9,7 \cdot 10^{-14}(\tilde{\epsilon}_e - 15,8)}{(70 + \tilde{\epsilon}_e)^2} + 6 \cdot 10^{-18}(\tilde{\epsilon}_e - 15,8)^2 \exp\left(-\frac{\tilde{\epsilon}_e}{9}\right), \quad (7.1)$$

- pro excitaci neutrálu Ar ze základního stavu (tento účinný průřez zahrnuje excitaci do všech nejdůležitějších energetických stavů)
 - a) pro energie menší než 11,5 eV je $\sigma_{\text{exc}}(\tilde{\epsilon}_e) = 0 \text{ cm}^2$,
 - b) pro energie elektronu vyšší než 11,5 eV je

$$\sigma_{\text{exc}}(\tilde{\epsilon}_e) = \frac{3,4 \cdot 10^{-18} (\tilde{\epsilon}_e - 11,5)^{1,1} \left[1 + \left(\frac{\tilde{\epsilon}_e}{15} \right)^{2,8} \right]}{1 + \left(\frac{\tilde{\epsilon}_e}{23} \right)^{5,5}} + \frac{2,3 \cdot 10^{-18} (\tilde{\epsilon}_e - 11,5)}{\left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_e}{80} \right)^{1,9}}, \quad (7.2)$$

- pro elastickou srážku elektronu s neutrálním atomem argonu

$$\sigma_{\text{ela}}(\tilde{\epsilon}_e) = 10^{-16} \times \left\{ \text{abs} \left[\frac{6}{\Upsilon_1} - \frac{1,1\tilde{\epsilon}_e^{1,4}}{\Upsilon_2} \right] + \frac{0,05}{\left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_e}{10} \right)^2} + \frac{0,01\tilde{\epsilon}_e^3}{1 + \left(\frac{\tilde{\epsilon}_e}{12} \right)^6} \right\}, \quad (7.3)$$

kde

$$\Upsilon_1 = \left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_e}{0,1} + \left(\frac{\tilde{\epsilon}_e}{0,6} \right)^2 \right)^{3,3} \quad (7.4)$$

a

$$\Upsilon_2 = \left[1 + \left(\frac{\tilde{\epsilon}_e}{15} \right)^{1,2} \right] \left[1 + \left(\frac{\tilde{\epsilon}_e}{5,5} \right)^{2,5} + \left(\frac{\tilde{\epsilon}_e}{60} \right)^{4,1} \right]^{0,5}. \quad (7.5)$$

Uvedené funkce, které jsou graficky znázorněny na obrázku 7.1, zanedbávají Ramsauerův efekt.

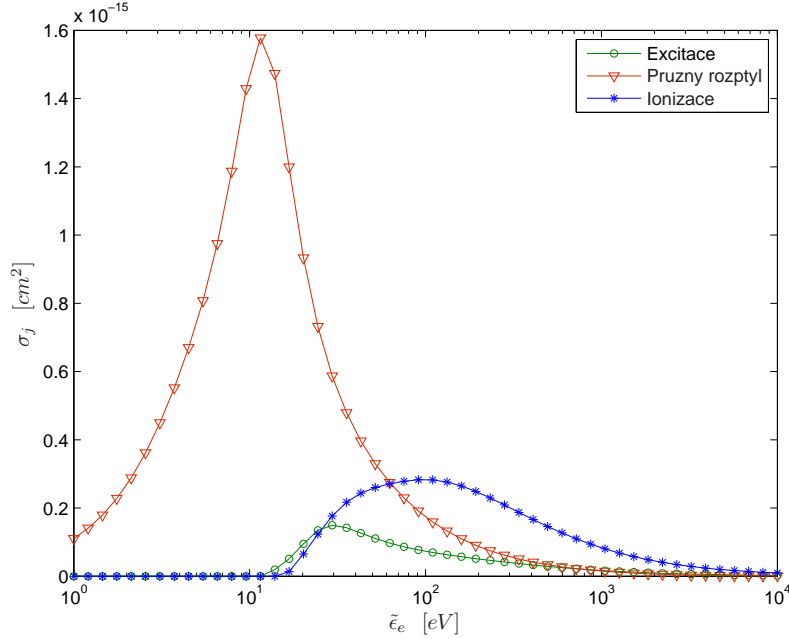
Pro další použití v počítačových modelech je dostačující také zadání účinného průřezu pomocí tabulek hodnot.

Celkový účinný průřez

Protože v plazmatu předpokládáme více srážkových procesů, každý z nich s příslušným účinným průřezem σ_j , je nutno zavést totální účinný průřez. K tomu lze užít například vztahu [24], [61]

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_j \sigma_j. \quad (7.6)$$

Ve funkčních předpisech ostatních fyzikálních veličin, jako je například koeficient difúze D_e a koeficient pohyblivosti elektronů μ_e , se v modelu odpovídajícím způsobem zamění hodnota účinného průřezu hodnotou σ_{tot} .



Obrázek 7.1: Funkční závislost účinných průřezů ionizace, excitace a elastické srážky na energii elektronu $\tilde{\epsilon}_e$ dle funkčních vztahů 7.1, 7.2 a 7.3.

7.2 Realizace srážkových procesů ve spojitém počítačovém modelu

Zavedení srážkových procesů do spojitého modelu provedeme upravením vztahů 5.1, 5.2 a 6.2. V rovnicích jednotlivých momentů Boltzmannovy kinetické rovnice přibývají nové členy. Odvození a detailní popis analytického přístupu lze nalézt v řadě knih, například [62]. Rovnice kontinuity je nyní nutno použít ve tvaru

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_i = \sum_j k_j n_{A_j} n_{B_j} \quad (7.7)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_e = \sum_j k_j n_{A_j} n_{B_j}. \quad (7.8)$$

Členy na pravé straně rovnic 7.7 a 7.8 popisují změnu počtu částic daného druhu v jednotce objemu za jednotku času. Sumace je provedena přes všechny srážkové procesy j . Koncentrace n_{A_j} a n_{B_j} označují koncentrace částic, které se daného srážkového procesu účastní. Symbol k_j je tzv. koeficient reakce a

je definován předpisem

$$k_j = \int_0^\infty f(\epsilon)\sigma_j(\epsilon)v(\epsilon)d\epsilon. \quad (7.9)$$

Koeficient daného typu reakce získáme tedy středováním přes všechny energie částice s hustotou pravděpodobnosti f . V literatuře se také často používá koeficient R_j , který charakterizuje počet reakcí v jednotce objemu za 1 s a je definován předpisem

$$R_j = k_j n_{A,j} n_{B,j}. \quad (7.10)$$

$n_{j,1}$ a $n_{j,2}$ jsou koncentrace srážejících se částic. Pro potřeby počítačového modelování je však jeho užití méně výhodné než použití koeficientu k_j .

Zákon zachování energie pro elektrony 6.2 je nyní nutné nahradit rovnicí

$$\frac{\partial w_e}{\partial t} + \nabla \cdot \left(-\frac{5}{3}\mu_e w_e \vec{E} - \frac{5}{3}D_e \nabla w_e \right) + e\vec{J}_e \cdot \vec{E} + C_{\text{ela}} + \sum_j H_j R_j = 0. \quad (7.11)$$

Prostřednictvím předposledního členu C_{ela} je do modelu začleněn vliv pružných srážek elektronů s neutrálními atomy. I když by se dal člen C_{ela} zahrnout do sumy $\sum_j H_j R_j$, je zvykem ho uvádět pro své charakteristické vlastnosti samostatně. Detailněji se mu budeme věnovat v následující podkapitole.

Poslední člen na levé straně rovnice 7.11 popisuje změnu energie elektronové tekutiny způsobenou nepružnými srážkami elektronů s dalšími částicemi. Symbol H_j označuje průměrnou změnu energie elektronové tekutiny při jedné srážce elektron – neutrální. V modelu používáme v případě ionizace hodnotu $H_{\text{ion}} = 15,8$ eV a v případě excitace argonového neutrálu ze základní energetické hladiny $H_{\text{exc}} = 11,56$ eV.

7.2.1 Koeficienty k_j

Jak již bylo uvedeno, k určení hodnoty koeficientů k_j , H_j a R_j (respektive jejich funkčních závislostí na energii srážejících se částic) je nutno použít experimentální data. Ta jsou v literatuře zpravidla prezentována v podobě grafů, z nichž lze odečtením získat pouze přibližné hodnoty, navíc často v nedostatečném energetickém rozsahu.

Ačkoliv je znalost závislosti koeficientu k_j na energii částice pro potřeby počítačového modelování klíčová, najdeme v dostupné literatuře o použitých hodnotách pouze velmi strohé informace. Je to především z toho důvodu,

že koeficient reakce k_j závisí na hustotě pravděpodobnosti rozdělení rychlosti elektronů a tuto funkční závislost nelze jednoduše mezi modely přenášet. Pro určení koeficientů reakce k_j jsou navíc používány hodnoty účinných průřezů od různých autorů, které se v závislosti na použité měřící metodě navzájem liší a integrací je tento trend ještě dále umocněn. Pěknou studii lze nalézt například v článku [63].

Někteří autoři vyjadřují závislost k_j na energii částice analytickými vztahy. Například pro ionizaci argonového atomu elektronem je v práci [34], [64] použit vztah

$$k_{\text{ion}} = 8,7 \cdot 10^{-9} (\tilde{\epsilon}_e - 5,3) \cdot \exp \frac{-4,9}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_e - 5,3}}, \quad (7.12)$$

kde střední energie elektronu $\tilde{\epsilon}_e$ je vyjádřena v elektronvoltech a koeficient reakce k_{ion} je v cm^3s^{-1} .

Vzhledem k těmto nejednoznačnostem jsme se rozhodli určit hodnoty koeficientů reakce k_j na základě znalosti účinných průřezů jednotlivých srážkových procesů sami. Otestovali jsme za tímto účelem tři přístupy:

1. Numerickou integrací pomocí funkce MATLABu *quadl*¹ [16] programového balíku MATLAB a ze znalosti polynomiálních závislostí účinných průřezů σ_j získaných z literatury [66]² jsme získali funkční závislost veličiny k_j na střední energii částic. Vzhledem k tomu, že výsledná funkce vykazovala v místech přechodu mezi jednotlivými aproximačními polynomy experimentálních dat výrazné skoky, ukázal se tento přístup k dalšímu použití nevhodný.
2. Pomocí stejné funkce *quadl* a analytických vztahů 7.1, 7.2 a 7.3 jsme získali hodnoty k_j jako funkce střední energie elektronu. Nevýhodou této metody bylo, že funkce *quadl* reagovala citlivě na volbu integračních mezí. Proto se jako nejvýhodnější ukázalo určení koeficientů reakce pomocí třetího přístupu využívajícího metody Monte Carlo.
3. Koeficient k_j představuje střední hodnotu veličiny $v\sigma_j$ při středování přes rychlosti všech částic s rozdělovací funkcí f . Znalost této funkce je pro určení koeficientu k_j nezbytná, její průběh však není v této chvíli k dispozici. O této funkci tedy v prvním přiblížení předpokládáme, že

¹Tato funkce používá adaptivní Lobattovy quadratury (viz [65]).

²Další potřebná data jsme čerpali například z [67]-[72].

je maxwellovská (i když tomu tak není, protože je ovlivněna přítomností elektrického pole, jak bude diskutováno dále) a tudíž pro ni platí (uvažujeme-li pro pohyb elektronu tři stupně volnosti)

$$f(\epsilon_e) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\epsilon_e}}{k_B T_e^{1,5}} \cdot \exp\left(-\frac{\epsilon_e}{k_B T_e}\right), \quad (7.13)$$

respektive

$$f(v) = A \cdot v^2 \exp\left(-\frac{m_e v^2}{2k_B T_e}\right), \quad (7.14)$$

kde konstantu A lze pro třírozměrný pohyb elektronů zapsat ve tvaru

$$A = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m_e}{k_B T_e}\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (7.15)$$

Středování jsme provedli metodou Monte Carlo (popis metody je uveden v [28]). K tomuto účelu byl v MATLABu odladěn následující krátký program:

```
function k=vypocita_koeficient_reakce(T)
% Tato funkce vrati hodnotu k v zavislosti na termodyna-
micke teplote T elektronu.

% Konstanty
m=9.109534e-31;           % hmotnost elektronu
k_B=1.380662e-23;        % Boltzmannova konstanta
vMax=10*sqrt(2*k_B*T/m)  % maximalni generovana rychlost el.
pocet=5000000;           % pocet pouzitych nahodnych cisel
kp=m/(k_B*T);            % substitute pro zefektivneni vypoctu

% Nacteni dat ze souboru
load DATA.mat

% Generovani distribucni funkce Maxwellova rozdeleni
v=linspace(0+eps, vMax, 1000);
f=@(v)(2/sqrt(2*pi))*(kp.^ 1.5)*(v.^ 2).*exp(-kp.*(v.^ 2)/2);
for i=1:1000
F(i) = quad(f,0,v(i));
end
```

```

% Generovani rychlosti elektronu s Maxwellovým rozdělením
rychlosti
v=interp1(F, v, rand(1,pocet));

% Vyhleda odpovídající hodnotu ucinneho prurezu
sigma=interp1(data(1,:), data(2,:), v, 'cubic');

% Vypocita empirickou stredni hodnotu reakce k
k=sum(sigma.*v)/pocet;

```

Konec výpisu programu.

Tento program nejprve načte tabelované hodnoty účinných průřezů ze souboru `data.mat`, poté nagenereje ³ 5 000 000 hodnot rychlostí s maxwellovským rozdělením rychlostí o dané teplotě T_e , k nim určí odpovídající účinné průřezy a nakonec vypočítá střední hodnotu jako

$$k_j = \frac{1}{5000000} \sum_{m=1}^{5000000} \sigma_m v_m. \quad (7.16)$$

Získaná data jsou v poměrně dobré shodě s hodnotami uváděnými jinými autory. Například u ionizace neutrálního argonového atomu elektronem se získaná data pro vyšší energie téměř shodují s hodnotami získanými použitím rovnice 7.12. Porovnání výsledků druhé a třetí metody je možné v tabulce 7.1 a v grafu 7.2.

7.2.2 Koeficient C_{ela} , pružný rozptyl elektronů na neutrálech Ar

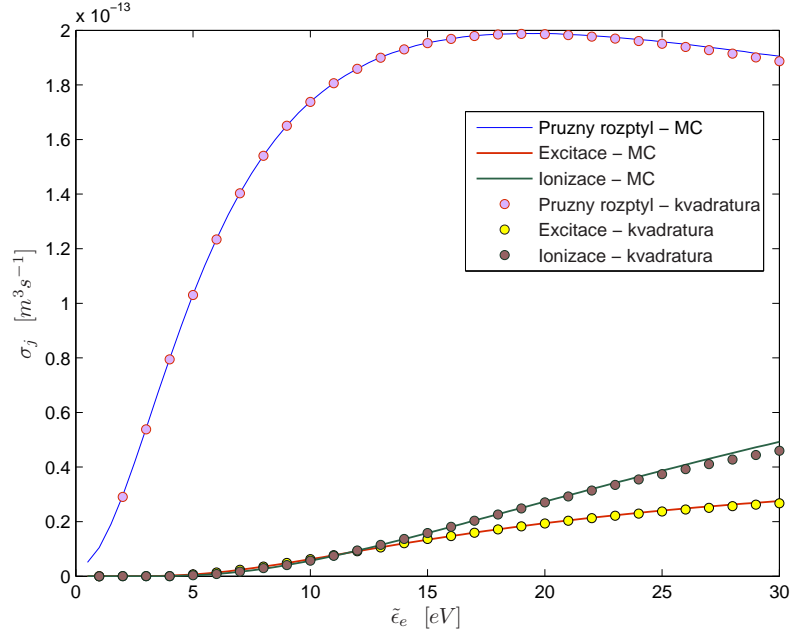
Základní varianta modelu vycházela z předpokladu, že změna energie tekutiny elektronů při pružných srážkách elektronů a neutrálních atomů je nulová. V reálném plazmatu však ztratí elektron při srážce s neutrálním atomem část své energie, přičemž velikost změny energie v závislosti na velikosti úhlu rozptylu χ je dána vztahem (viz [24])

$$\Delta E = \frac{2m_e}{m_n} (1 - \cos(\chi)). \quad (7.17)$$

³Při generování náhodných čísel se v tomto případě (a také v dalších případech uvedených dále v práci) využívá MATLABovská funkce `rand`, která umožňuje vygenerovat všechna čísla typu `double` v intervalu $(2^{-53}, 1 - 2^{-53})$. Teoreticky je perioda generátoru rovna 2^{1492} .

ϵ_e [eV]	Ionizace		Excitace		Pružný rozptyl	
	MC	Num. int.	MC	Num. int.	MC	Num. int.
1	1,3344E-21	1,0000E-29	4,8651E-21	1,0000E-29	1,0478E-14	2,4105E-17
2	1,2936E-19	4,0441E-21	1,6232E-18	3,7415E-21	2,9559E-14	2,9056E-14
3	9,9272E-18	2,2067E-18	4,1705E-17	2,0415E-18	5,4138E-14	5,3816E-14
4	8,8309E-17	4,5409E-17	2,2957E-16	4,1995E-17	7,9673E-14	7,9439E-14
5	3,3542E-16	3,4433E-16	6,6660E-16	6,6804E-16	1,0324E-13	1,0305E-13
6	8,3320E-16	7,9122E-16	1,3820E-15	1,3856E-15	1,2357E-13	1,2341E-13
7	1,6322E-15	1,7093E-15	2,3489E-15	2,3570E-15	1,4042E-13	1,4032E-13
8	2,7136E-15	2,9966E-15	3,5237E-15	3,5291E-15	1,5416E-13	1,5404E-13
9	4,0743E-15	4,1134E-15	4,8320E-15	4,8435E-15	1,6511E-13	1,6504E-13
10	5,6504E-15	5,7063E-15	6,2486E-15	6,2472E-15	1,7387E-13	1,7376E-13
11	7,4420E-15	7,4909E-15	7,6959E-15	7,6962E-15	1,8066E-13	1,8060E-13
12	9,3994E-15	9,4294E-15	9,1568E-15	9,1566E-15	1,8592E-13	1,8591E-13
13	1,1437E-14	1,1487E-14	1,0598E-14	1,0523E-14	1,9010E-13	1,8998E-13
14	1,3603E-14	1,3633E-14	1,2016E-14	1,2114E-14	1,9310E-13	1,9305E-13
15	1,5807E-14	1,5840E-14	1,3389E-14	1,3647E-14	1,9541E-13	1,9529E-13
16	1,8092E-14	1,8085E-14	1,4707E-14	1,4700E-14	1,9688E-13	1,9687E-13
17	2,0414E-14	2,0347E-14	1,5970E-14	1,5955E-14	1,9803E-13	1,9790E-13
18	2,2710E-14	2,2609E-14	1,7179E-14	1,7148E-14	1,9858E-13	1,9848E-13
19	2,5021E-14	2,4855E-14	1,8316E-14	1,8277E-14	1,9885E-13	1,9869E-13
20	2,7361E-14	2,7072E-14	1,9415E-14	1,9340E-14	1,9884E-13	1,9860E-13
21	2,9615E-14	2,9249E-14	2,0461E-14	2,0340E-14	1,9848E-13	1,9825E-13
22	3,1946E-14	3,1377E-14	2,1429E-14	2,1277E-14	1,9805E-13	1,9769E-13
23	3,4234E-14	3,3449E-14	2,2343E-14	2,2153E-14	1,9742E-13	1,9695E-13
24	3,6434E-14	3,5456E-14	2,3227E-14	2,2969E-14	1,9664E-13	1,9607E-13
25	3,8671E-14	3,7396E-14	2,4039E-14	2,3727E-14	1,9581E-13	1,9505E-13
26	4,0844E-14	3,9263E-14	2,4818E-14	2,4431E-14	1,9489E-13	1,9394E-13
27	4,3005E-14	4,1055E-14	2,5546E-14	2,5082E-14	1,9381E-13	1,9273E-13
28	4,5121E-14	4,2770E-14	2,6267E-14	2,5682E-14	1,9273E-13	1,9144E-13
29	4,7250E-14	4,4406E-14	2,6904E-14	2,6235E-14	1,9153E-13	1,9010E-13
30	4,9260E-14	4,5964E-14	2,7542E-14	2,6741E-14	1,9049E-13	1,8869E-13

Tabulka 7.1: Hodnoty koeficientů reakce k_{ion} , k_{exc} a k_{ela} v závislosti na střední energii ϵ_e elektronu. Uvedené hodnoty jsou v m^3s^{-1} .



Obrázek 7.2: Závislost koeficientu reakce k_j na střední energii elektronu $\tilde{\epsilon}_e$. Data byla získána metodou Monte Carlo a metodou numerické integrace.

Vzhledem k tomu, že při pružném rozptylu nedochází ke změnám v počtech jednotlivých druhů částic, ale pouze k předávání energie elektronové tekutiny tekutině neutrálních atomů, nebudou zavedením pružného rozptylu do modelu ovlivněny zbývající bilanční rovnice. Změna se projeví pouze v energetické bilanci 6.2, kde je velikost změny hustoty energie tekutiny elektronů popsána členem C_{ela} . Tento člen je možno popsat pomocí integrálu přes rychlostní prostor (viz [62], vztah 22.14), který je pro potřeby tohoto modelu vzhledem k jeho složitosti nepoužitelný. Použitím Krookovy aproximace [61] lze však použít přibližný vztah

$$C_{\text{ela}} = \frac{2m_e}{m_n} \nu_{e,n} n_e (\epsilon_e - \epsilon_n), \quad (7.18)$$

kde

$$\epsilon_n = \frac{3}{2} k_B T_n \quad (7.19)$$

označuje střední hodnotu energie neutrálních částic o teplotě T_n . Veličina $\nu_{e,n}$ je dána předpisem

$$\nu_{e,n} = n_n \overline{\sigma_{e,n} v_e} \quad (7.20)$$

a označuje střední frekvenci pružných srážek elektronů s neutrálními atomy. K jejímu určení je nutno použít hodnoty účinného průřezu získané z experimentálních měření a poté provést středování přes celý rychlostní prostor elektronů. To bývá zpravidla náročný problém a proto bývá často nahrazena dostačující aproximací

$$\nu_{e,n} = n_n \bar{\sigma}_{e,n} \bar{v}_e. \quad (7.21)$$

Aproximace 7.21 se nazývá Chapman-Enskogova (viz [61], str. 45).

Střední rychlost elektronů \bar{v}_e určíme ze vztahu

$$\bar{v}_e = \sqrt{\frac{8k_B T_e}{\pi m_e}}, \quad (7.22)$$

střední hodnota účinného průřezu $\bar{\sigma}_{e,n}$ je definována předpisem

$$\bar{\sigma}_{e,n} = \int_0^\infty f(v) \sigma_{e,n}(v) dv. \quad (7.23)$$

V modelu je hodnota $\bar{\sigma}_{e,n}$ určována metodou Monte Carlo. K tomu je používán krátký program, jehož zdrojový kód je uvedený v předchozí podkapitole, přičemž příkaz na posledním řádku je nahrazen příkazem

```
% Vypocita stredni hodnotu ucinného prurezu srázky
sigma_vystup=sum(sigma)/pocet;
```

a výstup funkce je přeznačen na *sigma_vystup*. O funkci f se přitom předpokládá (stejně jako při výpočtu u koeficientů k_j), že je maxwellovská.

7.3 Popis počítačového modelu

Vytvořený počítačový model s uvažováním srážkových procesů je založen na řešení soustavy rovnic 5.9, 7.7, 7.8 a 7.11 doplněné pomocnými vztahy 7.18 až 7.22. Neznámými jsou koncentrace elektronů n_e , koncentrace kladných iontů n_i , hustota energie elektronů w_e a elektrický potenciál φ . Volbu koeficientů obecné formy diferenciálních rovnic lze nalézt v tabulce 7.2.

Většina parametrů, stejně tak jako okrajové a počáteční podmínky, zůstala stejná jako u modelu s energetickým rozdělením, tedy:

- koncentrace elektronů v neporušeném plazmatu $n_{e\infty}$ $1 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$
- koncentrace kl. iontů v neporušeném plazmatu $n_{i\infty}$ $1 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$
- koncentrace kl. iontů na povrchu sondy n_{i0} 0 m^{-3}

– elektrický potenciál na sondě φ_0	+10 V
– potenciál neporušeného plazmatu φ_∞	0 V
– koeficient pohyblivosti pro elektrony μ_e	170 m ² V ⁻¹ s ⁻¹
– koeficient pohyblivosti pro kladné ionty μ_i	0,46 m ² V ⁻¹ s ⁻¹
– koeficient difúze pro elektrony D_e	340 m ² s ⁻¹
– koeficient difúze pro kladné ionty D_i	0,012 m ² s ⁻¹
– délka pracovní oblasti (1D model) L	2 cm
– poloměr pracovní oblasti (2D a 3D model) L	1 cm
– reálná doba experimentu	1 × 10 ⁻³ s

Ze srážkových procesů uvažujeme pružný rozptyl elektronů na neutrálních atomech a dále excitaci a ionizaci neutrálních atomů elektrony. Pro hodnoty koeficientů reakce jsme zvolili hodnoty získané metodou Monte Carlo (prezentované v tabulce 7.1) odpovídající teplotě elektronů 23.200 K, tedy $k_{\text{ion}} = 9,927 \times 10^{-18} \text{ m}^3\text{s}^{-1}$ a $k_{\text{exc}} = 4,170 \times 10^{-18} \text{ m}^3\text{s}^{-1}$. Střední hodnota účinného průřezu elastické srážky byla výpočtem určena jako $\bar{\sigma}_{\text{ela}} = 2,935 \times 10^{-20} \text{ m}^2$.

Použití těchto parametrů však ještě nepovede k získání hledaného řešení. Důvodem je pravá strana rovnice 7.8. Člen $n_e n_n k_{\text{ion}}$ zavádí do systému nové elektrony a jejich počet se s časem postupně zvyšuje. Tekutině elektronů je sice odebírána při každé srážce ionizační energie 15,76 eV, ale takto nastavený systém tuto ztrátu „rozděluje“ rovnoměrně mezi všechny elektrony. Ve skutečnosti však energii ztrácí poměrně malá část elektronů o vyšší energii, která je schopna ionizaci (případně excitaci neutrálního atomu na vyšší energetickou hladinu) vůbec provést. V důsledku ztráty energie počet těchto elektronů klesá a snižuje se tak i počet nově generovaných párů elektron – argonový iont.

V průběhu řešení modelu lze pak pozorovat jev, kdy po uplynutí určitého časového intervalu nabývá koncentrace neutrálních částic téměř nulových hodnot a plazma je tvořeno prakticky výhradně kladně a záporně nabitými částicemi.

Odstranění tohoto problému, který je hlavním limitujícím faktorem pro použití pouze spojitých technik, lze provést několika způsoby, například:

- Tekutinu elektronů rozdělit na dvě skupiny tak, že v první skupině budou elektrony mající energii menší než je hodnota energie potřebná k ionizaci argonového neutrálu. V druhé skupině by pak byly elektrony schopné ionizovat neutrální atom Ar, přičemž srážkové procesy by se

modelovaly částicovými technikami. Tato myšlenka odpovídá hybridní modelovací technice, jak byla popsána ve třetí kapitole.

- Abychom popsaný fakt alespoň částečně zohlednili v modelu, je možné vynásobit člen $n_e n_n k_{\text{ion}}$ koeficientem $\delta = 0,001$, který přibližně vystihuje zastoupení rychlých elektronů v celém souboru.
- Použít postup, který dokáže určit rozdělovací funkci elektronů, na jejímž základě určíme hodnotu koeficientů reakce k_{ion} . Tento postup a získané výsledky je popsán v další části práce.

Koeficient dif. rovnice	Tekutina elektronů	Tekutina kl. iontů	Hustota energie	Poissonova rovnice
d_a	1	1	1	
c	D_e	D_i	$\frac{5D_e}{3}$	1
a	0	0	0	
f	$\delta n_e n_n k_{ion}$	$\delta n_e n_n k_{ion}$	$e \vec{J}_e \nabla \varphi - C_{ela}$	$\frac{e(n_i - n_e)}{\epsilon_0}$
$\bar{\alpha}$	$-\mu_e \cdot \nabla \varphi$	$\mu_i \cdot \nabla \varphi$	$-H_{ion} \delta n_e n_n k_{ion} - H_{exc} \delta n_e n_n k_{exc}$	
$\bar{\beta}$	$\vec{0}$	$\vec{0}$	$-\frac{5}{3} \mu_e \nabla \varphi$	
$\bar{\gamma}$	$\vec{0}$	$\vec{0}$	$\vec{0}$	
Hodnota na sondě	vztah 5.15	0 m^{-3}	$n_e \left(\frac{1}{2} m_e k_s^2 + \frac{3}{2} k_B T_e \right)$	φ_0
Hodnota na okraji prac. obl.	$n_{e\infty}$	$n_{i\infty}$	$\frac{3T_{e\infty}}{2} \cdot k_B n_{e\infty}$	0 V
Počáteční hodnota	$n_{e\infty}$	$n_{i\infty}$	$\frac{3T_{e\infty}}{2} \cdot k_B n_{e\infty}$	φ_0

Tabulka 7.2: Předpisy pro koeficienty v rovnici 2.36 (pro tekutinu elektronů, tekutinu kladných iontů a mód popisující rozložení hustoty energie elektronů) a 2.42 (pro Poissonovu rovnici) použité pro model plazmatu s uvažováním srážek.

Kapitola 8

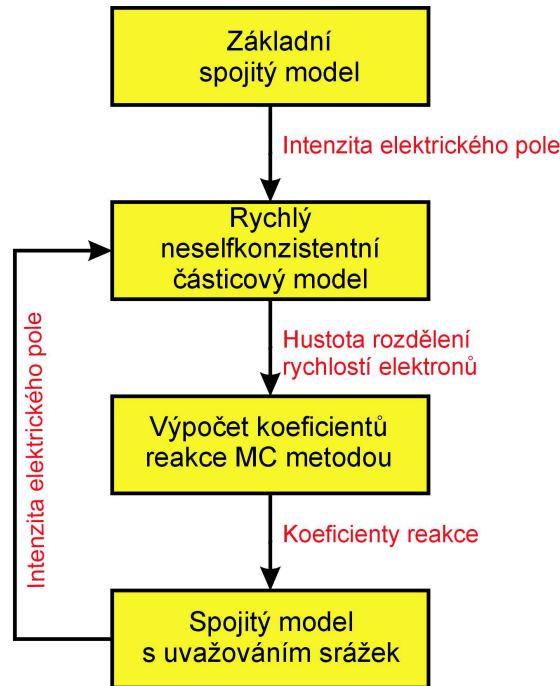
Hybridní model plazmatu

8.1 Charakteristika modelu

Spojité model plazmatu, který jsme prezentovali v předchozí kapitole, se potýkal s jedním nedostatkem – neznalostí hustoty pravděpodobnosti f . Neznalost této závislosti se projevila především v nepřesném určení koeficientů reakce k_{ion} a k_{exc} . Tento nedostatek lze odstranit použitím hybridní modelovací techniky, v níž budeme koeficienty reakce určovat metodami částicového modelování.

Schématické znázornění takto koncipovaného modelu je na obrázku 8.1. Vlastní model se sestává ze čtyř základních částí:

- 1. Základní spojitý model s daným rozložením energie elektronů**
Tento úsek nám poskytuje úvodní sadu dat, která používáme jako vstupní informace pro další kroky výpočtu – především se jedná o rozložení intenzity elektrického pole, které použijeme v následující fázi k výpočtu silových působení na částice. Ostatní získané parametry (koncentrace částic a hustota energie elektronové tekutiny) poslouží jako počáteční podmínky pro soustavu diferenciálních rovnic řešené ve fázi čtvrté. Pro tyto účely je použit spojitý model s energetickým rozdělením, který jsme popsali v předchozích kapitolách.
- 2. Neselfkonzistentní částicový model**
Druhý úsek programu umožňuje určení rozdělovací funkce rychlostí elektronů v závislosti na vzdálenosti od sondy. Jedná se o neselfkonzistentní částicový model. V oblasti elektrickým polem neporušeného



Obrázek 8.1: Schématické znázornění jednotlivých částí hybridního modelu.

plazmatu jsou ve zdroji rozehrány parametry elektronů tak, že mají maxwellovské rozdělení rychlostí. Ze zdroje částice vstupují do pracovní oblasti, kde je jejich poloha a rychlost v čase určována pomocí Verletova algoritmu pro řešení diferenciálních rovnic – rovnice 3.4 až 3.6.

Velikost síly \vec{F} působící na elektrony získáváme interpolací z aktuálních hodnot elektrické intenzity (získané ze základního spojitého modelu nebo čtvrtého kroku – spojitého modelu s uvažováním srážek), přičemž využijeme známého vztahu $\vec{F} = -\frac{\vec{E}}{e}$.

Dorazí-li částice do oblasti, kde se nachází sonda, je z modelu odstraněna. Protože nemusíme počítat vzájemná silová působení jednotlivých částic, jako je tomu v selfkonzistentních modelech, dochází ke značné úspoře výpočetního času.

Ze srážkových procesů je opět uvažována ionizace, excitace a pružný rozptyl elektronů na neutrálních atomech. Odpovídající účinné průřezy získáváme ze vztahů 7.1, 7.2 a 7.3. O tom, zda srážka nastala a o jaký typ srážky jde, rozhodujeme metodou Monte Carlo. Jelikož jsou účinné průřezy funkcemi energie, je v modelu používána metoda nulové srážky.

V případě elastické srážky je velikost nové rychlosti generována podle vztahu

$$v_{\text{new}} = v_{\text{old}} \sqrt{1 - \gamma \frac{2m_e}{m_n}}, \quad (8.1)$$

kde γ je náhodné číslo s rovnoměrným rozdělením na intervalu $\langle 0, 1 \rangle$. Směr rychlosti je generován izotropně.

V případě excitace uvažujeme, že elektron ztrácí energii 11,55 eV (přechod na tuto energetickou hladinu je v literatuře považován za nejdůležitější, viz [66]).

Při ionizaci je nejprve původní energie elektronu zmenšena o 15,76 eV, zbytek energie je poté rovnoměrně rozdělen mezi původní a nově generovaný elektron užitím relace

$$\epsilon_1 = \gamma (\epsilon_{\text{old}} - 15,76 \text{ eV}) \quad (8.2)$$

$$\epsilon_2 = (\epsilon_{\text{old}} - 15,76 \text{ eV}) - \epsilon_1. \quad (8.3)$$

Ve všech případech jsou po srážce generovány nové směry rychlosti příslušných částic.

V pravidelných intervalech jsou zaznamenávány aktuální polohy, velikosti rychlosti a složky rychlosti elektronů, které jsou ještě v průběhu výpočtu statisticky zpracovávány. Ukládání všech hodnot pro polohu a rychlosti částic je neefektivní, pro získání hledaných funkcí f postačí pouze znalost počtu částic majících danou rychlost a nalézajících se v určitém prostorovém intervalu. Proto je pracovní oblast rozdělena do několika menších buněk, na nichž je hustota pravděpodobnosti rozdělení rychlosti elektronů f určována. Aby byla získána ustálená hodnota veličiny f , je potřeba v každé buňce zaznamenat hodnoty od přibližně 10^6 částic.

3. Výpočet koeficientů reakce k_j

V této fázi výpočtu, naprogramované (stejně jako předchozí část) v prostředí MATLAB, jsou na základě hustoty pravděpodobnosti f získané v předchozím kroku určovány koeficienty k_{ela} , k_{exc} a k_{ion} . Principiálně tato část programu funguje tak, že generuje uspořádanou dvojici náhodných čísel s rovnoměrným rozdělením $[x, y]$, $x \in \langle 0, v_{\text{max}} \rangle$, $y \in \langle 0, f_{\text{max}} \rangle$, kde

$$v_{\text{max}} = 5 \sqrt{\frac{2k_B T_e}{m_e}} \quad (8.4)$$

a f_{\max} je maximální hodnota rozdělovací funkce f . Pak porovná hodnotu y s hodnotou $f(x)$ získanou interpolací. Pokud je

$$y \leq f(x), \quad (8.5)$$

vyhledá program hodnotu celkového účinného průřezu odpovídající rychlosti $v = x$ a nakonec vypočítá dle vztahu

$$k_j = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N \sigma_m v_m \quad (8.6)$$

hodnotu k_j . N ve vztahu značí počet dvojic $[v_m, y_m]$ splňujících podmínku 8.5.

4. Spojitý model s uvažováním srážek

V poslední fázi výpočtu jsou získané hodnoty koeficientů reakce k_j jako funkce vzdálenosti od sondy exportovány do spojitého modelu uvažujícího srážky. V programu lze realizovat zadání hodnoty koeficientu $k_j(x)$:

- Použitím charakteristických funkcí

$$k_j(x) = \sum_{(r)} k_j^{(r)} \cdot \chi^{(r)}(x), \quad (8.7)$$

kde $k_j^{(r)}$ udává hodnotu koeficientu reakce na intervalu $\langle x^{(r-1)}; x^{(r)} \rangle$, r označuje číslo intervalu, $r = 1, 2, \dots, N_{\text{interval}}$. N_{interval} udává počet intervalů, na které je rozdělena pracovní oblast. Pro charakteristickou funkci $\chi^{(r)}(x)$ platí

$$\chi^{(r)}(x) = \begin{cases} 1 & \text{pro } x^{(r-1)} \leq x < x^{(r)}, \\ 0 & \text{jinde.} \end{cases} \quad (8.8)$$

- Tabulkou dat s následnou interpolací. Tato varianta je použita i v modelu. V jednodimenzionálním případě se interpoluje kubickým splajnem. U vícedimenzionálních problémů interpolujeme metodou *Nearest point*, protože interpolace splajnem není u vícedimenzionálních úloh podporována.

Výstupem jsou hodnoty elektrického potenciálu, koncentrací částic a jejich energií, které slouží jako vstup do druhé fáze výpočtu, čímž lze po několikanásobném opakování jednotlivých kroků získané hodnoty dále zpřesnit. Pro urychlení výpočtu používáme získané závislosti jako nové počáteční podmínky čtvrté fáze výpočtu.

Typ úlohy	1D	2D	3D
Základní model	6 s	56 s	540 s
Neselfkonzistentní model	≈ 1200 s	≈ 1800 s	≈ 2000 s
Výpočet koeficientů	51 s	53 s	62 s
Rozšířený spojitý model	8 s	67 s	660 s

Tabulka 8.1: Porovnání času potřebného k vyřešení jednotlivých typů modelů na počítači INTEL Pentium 4, 3 GHz, 1024 MB RAM.

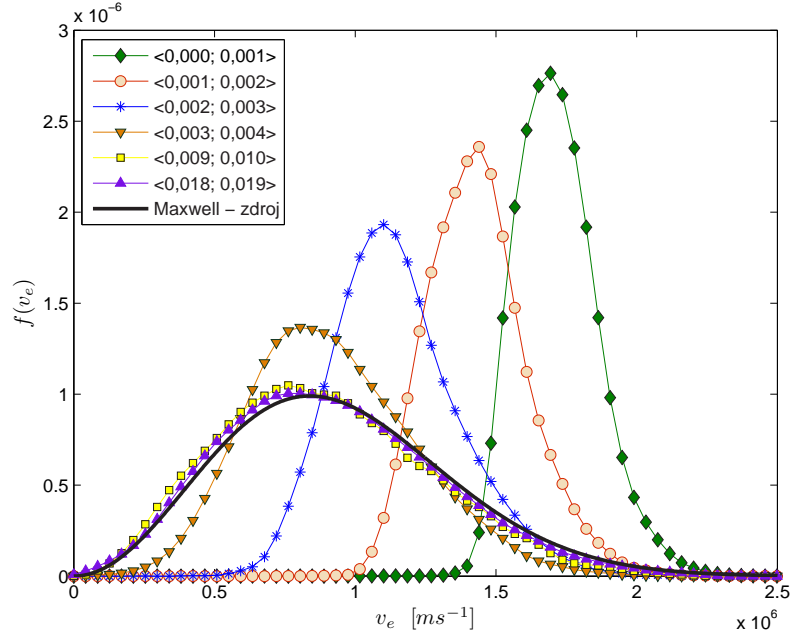
8.2 Výsledky

Algoritmus byl úspěšně otestován na všech třech doposud uvažovaných uspořádáních, tj. pro planární, cylindrickou a sférickou sondu, přičemž rozměry pracovních oblastí zůstaly stejné jako v předchozích případech. V tabulce 8.1 jsou porovnány časové nároky jednotlivých fází výpočtu v prostředí MATLAB.

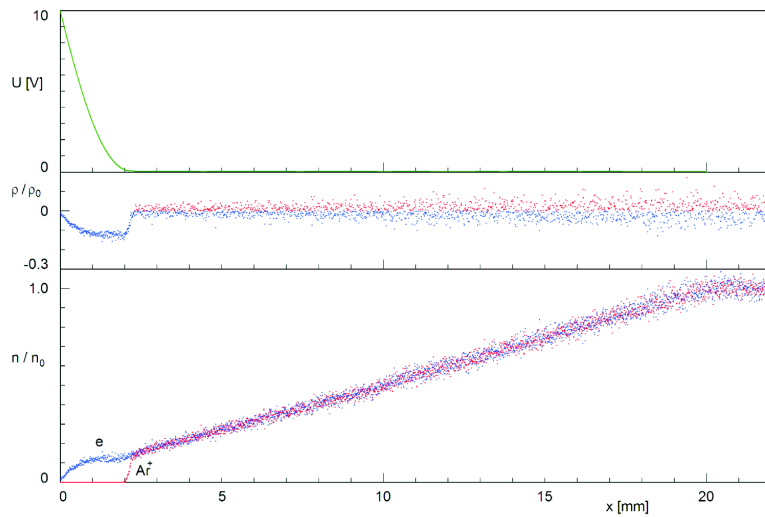
Pro ilustraci uvádíme ukázkou výstupů v případě jednodimenzionálního uspořádání, kde jsou s ohledem na velikost pracovní oblasti funkční závislosti dobře zobrazitelné. Na obrázku 8.2 jsou zobrazeny rozdělovací funkce elektronů f v závislosti na vzdálenosti od povrchu sondy. Na základě těchto závislostí byly určeny hodnoty koeficientů excitace a ionizace neutrálních argonových iontů k_{exc} a k_{ion} , výsledky jsou uvedeny v tabulce 8.2.

Porovnání výstupů získaných simulací chování plazmatu v okolí planární sondy je na obrázcích 8.3 a 8.4. Na obrázku 8.3, který byl převzat z [73], jsou funkční závislosti elektrického potenciálu a koncentrace nabitých částic získané za použití ryze částicových simulačních technik. Stejně závislosti, tentokrát získané za použití hybridního modelu, jsou na následujícím obrázku 8.4, kde je pro porovnání také zobrazena závislost obdržena na základě řešení základního spojitého modelu. Je zřejmé, že zavedení srážkových procesů a závislostí koeficientů difúze a pohyblivosti do modelu má nezanedbatelný vliv na funkční závislosti sledovaných veličin.

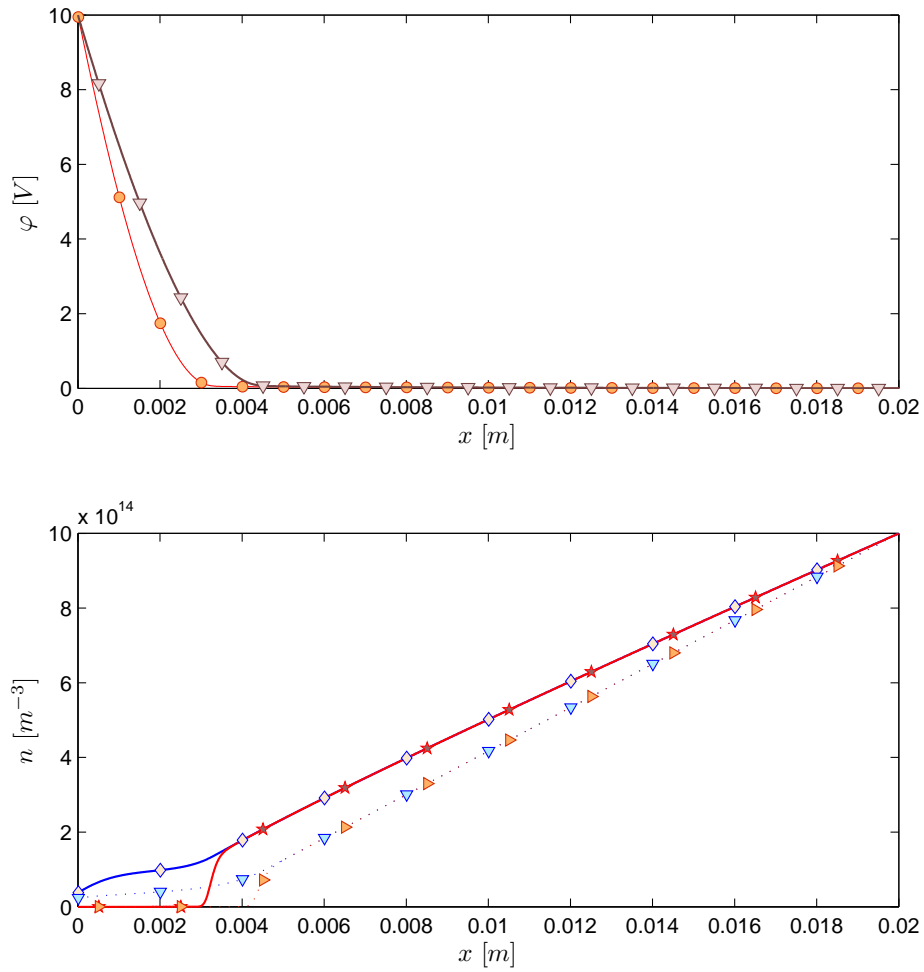
Dále byl algoritmus otestován pro geometrie sond konečných rozměrů, kde je použití modelů založených na ryze částicovém přístupu s ohledem na výkonnost počítačové techniky prozatím nereálné. Některé výsledky jsou uvedeny v následující samostatné kapitole.



Obrázek 8.2: Rozdělovací funkce rychlostí elektronů získané řešením hybridního modelu s uvažováním pružných srážek elektronů s neutrály, excitace a ionizace argonových atomů. Celý soubor elektronů byl rozdělen do 20 tříd podle vzdálenosti částice od povrchu sondy (viz legenda, hodnoty jsou uvedené v metrech).



Obrázek 8.3: Rozložení el. potenciálu (nahore), hustoty náboje (uprostřed) a koncentrace částic (dole), získané řešením částicového modelu [73].



Obrázek 8.4: Horní obrázek: Rozložení elektrického potenciálu získané řešením základního (hnědá) a hybridního modelu (červená). Dolní obrázek: Rozložení koncentrace elektronů (modře) a kladných iontů (červeně) získané řešením základního spojitého modelu (čárkovaně) a hybridního modelu (plná čára).

Vzdálenost od sondy [m]	k_{ion} [m^3s^{-1}]	k_{exc} [m^3s^{-1}]
$\langle 0,000; 0,001 \rangle$	1,34121E-17	3,45990E-16
$\langle 0,001; 0,002 \rangle$	1,07467E-20	1,28772E-17
$\langle 0,002; 0,003 \rangle$	2,96319E-21	2,55010E-18
$\langle 0,003; 0,004 \rangle$	2,04185E-21	4,06769E-19
$\langle 0,004; 0,005 \rangle$	1,81848E-21	2,82774E-19
$\langle 0,005; 0,006 \rangle$	2,32258E-21	3,94909E-19
$\langle 0,006; 0,007 \rangle$	4,09304E-21	2,88464E-19
$\langle 0,007; 0,008 \rangle$	4,54105E-21	2,98691E-19
$\langle 0,008; 0,009 \rangle$	5,61346E-21	5,72011E-19
$\langle 0,009; 0,010 \rangle$	6,72898E-21	7,68077E-19
$\langle 0,010; 0,011 \rangle$	7,02859E-21	7,87768E-19
$\langle 0,011; 0,012 \rangle$	1,05775E-20	8,80815E-19
$\langle 0,012; 0,013 \rangle$	1,09938E-20	1,17279E-18
$\langle 0,013; 0,014 \rangle$	8,80701E-21	1,22711E-18
$\langle 0,014; 0,015 \rangle$	8,20703E-21	1,37210E-18
$\langle 0,015; 0,016 \rangle$	9,56419E-21	1,51285E-18
$\langle 0,016; 0,017 \rangle$	1,34231E-20	2,13103E-18
$\langle 0,017; 0,018 \rangle$	9,71795E-21	2,81576E-18
$\langle 0,018; 0,019 \rangle$	9,55244E-20	3,93644E-18
$\langle 0,019; 0,020 \rangle$	6,65719E-19	1,16404E-17

Tabulka 8.2: Hodnoty koeficientů k_{ion} a k_{exc} získané ze třetí fáze hybridního modelu.

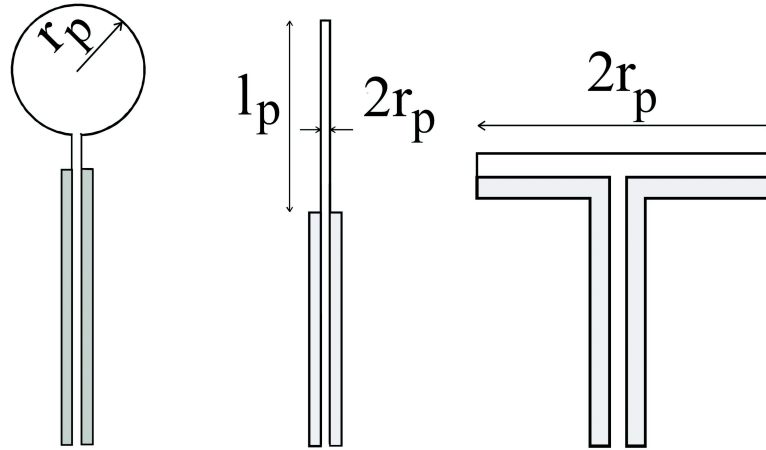
Kapitola 9

Aplikace modelu na sondy konečných rozměrů

V předchozí kapitole byla navržena metoda počítačového modelování plazmatu v okolí sond a její základní vlastnosti byly prezentovány pro případy idealizovaných geometrií. Při reálných experimentech je samozřejmě využití sond nekonečných rozměrů nemožné, součástí každé sondy je (zpravidla elektricky izolovaný) úchyt, pomocí kterého je propojena s dalšími přístroji. Proto jsme metodu otestovali také na případech geometrie sondy konečných rozměrů, kdy vlastní uchycení sondy není zanedbáno. O úchytu předpokládáme, že je dokonale elektricky nevodivý. Tento předpoklad je samozřejmě mnohem reálnější než idealizovaný případ nekonečných rozměrů sond. Na druhou stranu ale vnáší do modelů nepřesnost tím, že v reálném plazmatu jsou povrchy dielektrických úchytů nekontrolovatelně nabíjeny bombardováním nabitých částic z plazmatu a tento proces lze do počítačového modelu přenést jen velmi obtížně.

Tvary reálných, v praxi nejčastěji používaných sond, jsou zobrazeny na obrázku 9.1, převzato z [3]. Rozměry sond nejsou striktně stanoveny a závisí například na parametrech diagnostikovaného plazmatu. Hodnoty použité v našich modelech jsou uvedeny dále v textu při popisu geometrie problému. Při jejich volbě byl brán zřetel na doporučené parametry uvedené v [74].

Navržený postup byl aplikován postupně v jednotlivých krocích. Největším problémem při řešení spojitých modelů (první a čtvrtý krok výpočtu) bylo určení vhodných parametrů mřížky tak, aby byla zajištěna konvergence řešení. Zohlednit se musely jednak možnosti programového balíku COMSOL Multiphysics (limitovaná alokace paměti počítače), možnosti zvolených řešičů



Obrázek 9.1: Sférická, cylindrická a planární sonda [3].

a fyzikální omezení daného problému.

Jako pomocníka lze při této činnosti využít veličinu Q , která charakterizuje kvalitu jednotlivých prvků, definovanou pro čtyřstěn vztahem

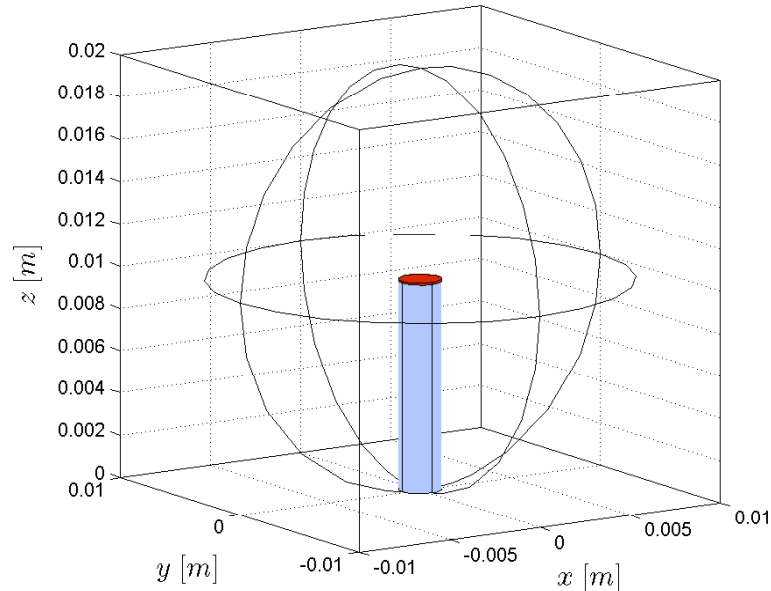
$$Q = \frac{72\sqrt{3}V}{\sqrt{(h_1^2 + h_2^2 + h_3^2 + h_4^2 + h_5^2 + h_6^2)^3}}, \quad (9.1)$$

kde V označuje objem a h_i , $i \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, velikost hrany daného prvku. $Q = 1$ v případě pravidelného čtyřstěnu. Program umožňuje veličinu graficky znázornit. Problém s konvergencí by neměl teoreticky nastat v případě, kdy je faktor kvality Q jednotlivých prvků minimálně 0,1.

Po nagenování vhodné soustavy uzlových bodů se doba řešení pohybovala v řádech desítek minut (pro stacionární řešič).

Další problém vyvstal ve druhém kroku výpočtu při řešení neselfkonzistentního modelu. V geometrii problému se vyskytují oblasti s malým poloměrem křivosti, v jejichž okolí je vzhledem k ostatním částem pracovní oblasti velká intenzita elektrického pole (jak je patrné také z výsledků výpočtů). Přesné určení rozdělovací funkce rychlosti elektronů je v těchto oblastech poměrně problematické, zpřesnění může být ale dosaženo například zmenšením velikosti časového kroku Verletova algoritmu.

Oba dva uvedené problémy bylo možné předem očekávat a byl na ně brán zřetel již při návrhu geometrie problému. Byly otestovány různé varianty



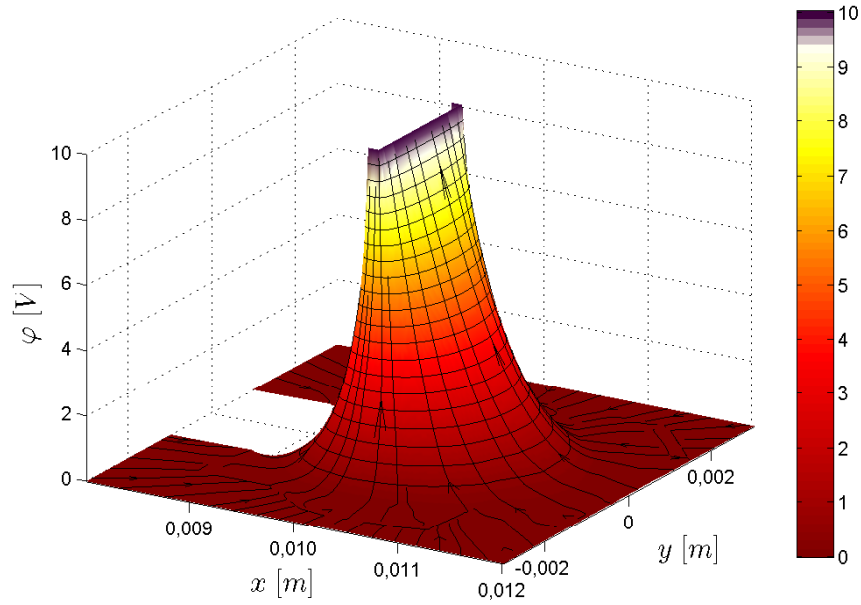
Obrázek 9.2: Uspořádání pracovní oblasti pro modelování chování plazmatu v okolí rovinné sondy. Červená oblast zobrazuje část sondy s elektrickým předpětím, modrá zobrazuje izolovaný úchyt.

uspořádání pracovní oblasti – hranol, válec, koule či elipsoid. Jako nevhodná se jeví ta uspořádání, u nichž se vyskytuje hrana (válec, hranol, ...), protože u takto pojatých modelů jsou poměrně značné problémy s konvergencí řešení.

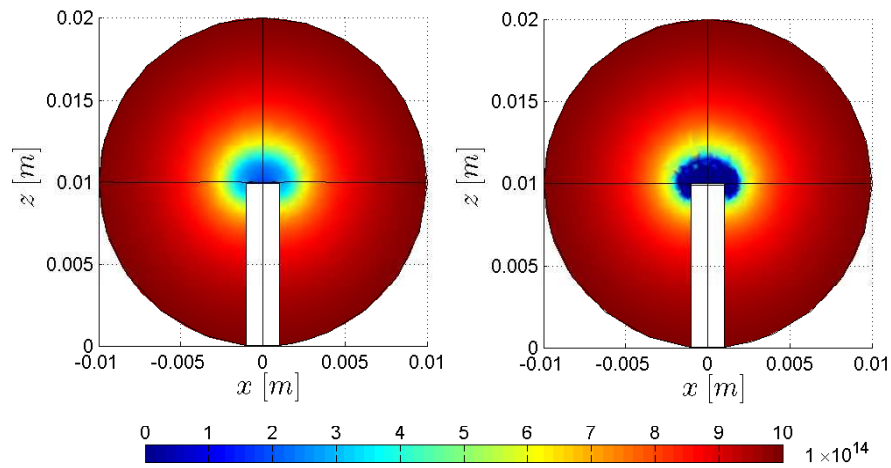
9.1 Řešení – planární sonda konečných rozměrů

9.1.1 Geometrie modelu

Vytvořený model umožňuje předpovědět chování plazmatu v okolí rovinné sondy. Geometrie problému byla zvolena tak, že sběrná oblast sondy je tvořena válcovou destičkou o poloměru $r_p = 1 \text{ mm}$ a výšce $l_p = 1 \times 10^{-4} \text{ m}$. Od okolního plazmatu elektricky izolovaný úchyt je představován válcem o poloměru r_p a délce $l_{\text{izolant}} = 10,0 \text{ mm}$. Pracovní oblastí je koule o poloměru $r_w = 0,01 \text{ m}$. Umístění jednotlivých prvků je na obrázku 9.2.



Obrázek 9.3: Rozložení potenciálu v okolí rovinné sondy.



Obrázek 9.4: Koncentrace elektronů (vlevo) a koncentrace kladně nabitých iontů (vpravo) v okolí rovinné sondy (v jednotkách m^{-3}).

9.1.2 Řešení spojitě části

Spojité část modelu byla řešena jako stacionární problém při využití řešičů GMRES a pro nekompletní LU rozklad. Základ mříže byl typu *Extra coarse*, na hlavní sběrné plošce je nastaven parametr *Maximum element size* na 0,0001, na zbylých elektricky nabitých částech sondy je mříž zkvalitněna volbou *Mesh curvature factor* na 0,1.

Po provedení výpočtu a získání řešení byla síť zjemněna a získané hodnoty posloužily jako počáteční podmínky pro opakování výpočtu. Tím byly výsledné hodnoty zpřesněny. Nalezené hodnoty potenciálu nám pak posloužily jako vstup do částicové části výpočtu.

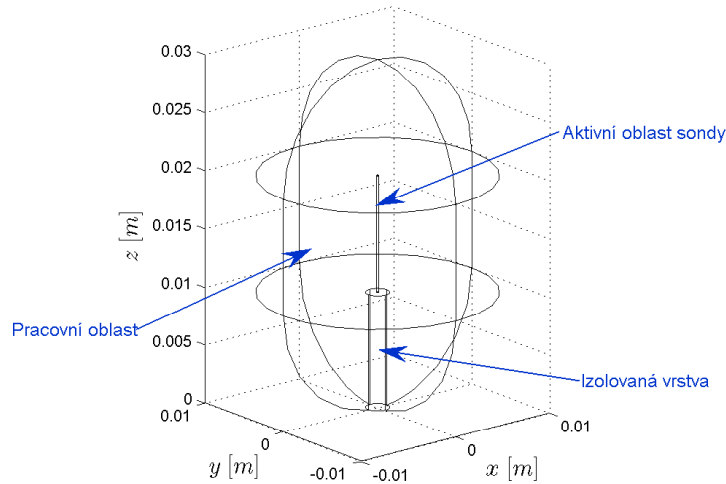
9.1.3 Řešení částicové části

Vzhledem k časové náročnosti výpočtu neselfkonzistentního modelu byla tomuto kroku věnována zvýšená pozornost. Na rozdíl od případů popsanych v předchozí kapitole, kde bylo možné vyjádřit distribuční funkce pouze v závislosti na vzdálenosti buňky od středu (respektive povrchu) sondy, potřebujeme nyní získat hodnoty v mnohem větším počtu buněk. I když by bylo možné efektivně využít metod paralelizace a značně tak snížit spotřebu strojového času, byla úloha s úspěchem vyřešena na běžné pracovní stanici. Využita přitom byla osová symetrie problému, která umožňovala redukovat počet prostorových souřadnic (distribuční funkce může být vyjádřena například jako funkce vzdálenosti částice od osy sondy a její z-ovou souřadnicí). V obou uvedených směrech byly velikosti buněk voleny s krokem 1 mm. Takto zvolená mříž umožňuje výsledky efektivně zpracovávat a spořit tak strojový čas.

Ve třetím kroku vypočítané koeficienty reakcí byly nejprve interpolovány v MATLABu na regulární mříži a posléze byly exportovány do COMSOL Multiphysics přes textový soubor jako funkce. Jelikož program neumožňuje pro 3D modely interpolaci kubickým splajnem, byla interpolovaná hodnota získána metodou *Nearest neighbor*.

9.1.4 Výsledky výpočtů

Problém se podařilo numericky vyřešit i přesto, že se v geometrii modelu vyskytují hrany. Z výsledků uvádíme rozložení potenciálu v okolí sběrné části sondy (obrázek 9.3 zobrazuje řez vedený osou sondy s vyznačením spádových přímk a ekvipotenciálních křivek s krokem 0,5 V) a rozložení koncen-



Obrázek 9.5: Geometrie modelu – umístění a tvar válcové sondy vzhledem k pracovní oblasti.

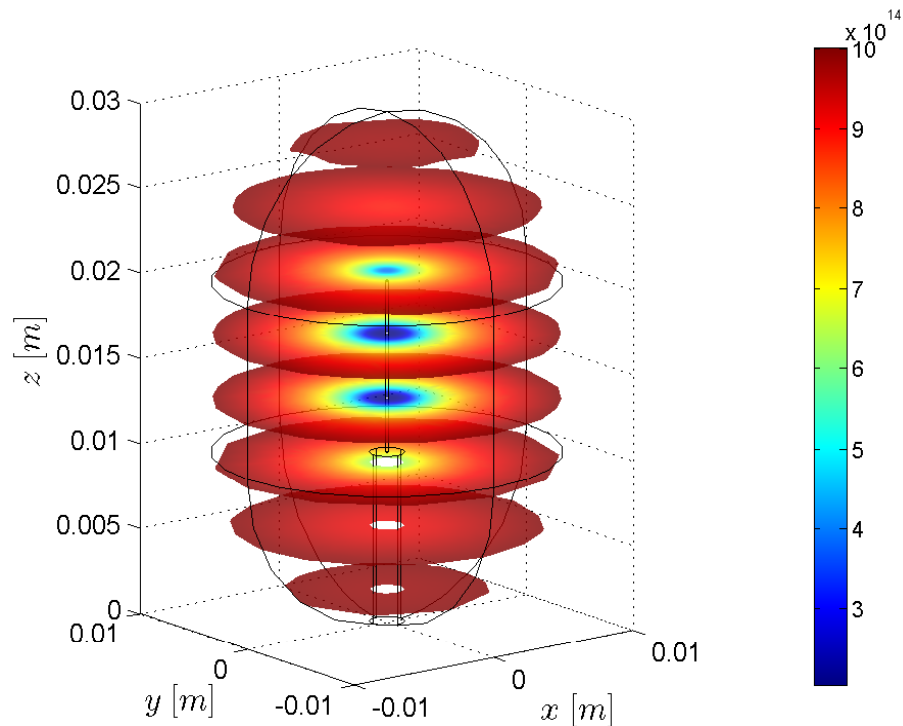
trance elektronů a kladných iontů (obrázek 9.4) v téže rovině. Šum patrný v hodnotách koncentrace iontů v oblasti s velkými hodnotami potenciálu se nepodařilo odstranit jinou volbou parametrů mříže.

9.2 Řešení – cylindrická sonda konečných rozměrů

9.2.1 Parametry spojitě části modelu

Geometrie modelu byla zvolena takto (viz obrázek 9.5). Pracovní oblast je tvořena sjednocením válce o výšce $l_w = 0,01$ m a poloměru $r_w = 0,01$ m a dvou polokoulí o tomtéž poloměru r_w . Sondou představují dva na téže ose umístěné válce. První o poloměru $r_p = 1 \times 10^{-4}$ m a délce $l_p = 0,01$ m představuje kolektivní oblast sondy, druhý o poloměru $r_{iz} = 0,01$ m a délce $l_{iz} = 0,01$ m dokonale izolující úchyt. I když bývá v reálných případech horní část sondy zakončena rovnou ploškou, uvažujeme v našem modelu zakončení polokoulí o poloměru r_p . Tím jsou z geometrie odstraněny ostré hrany a je tak umožněna snazší konvergence.

Generovaná mříž je typu *Extremely coarse*, na okrajových oblastech je

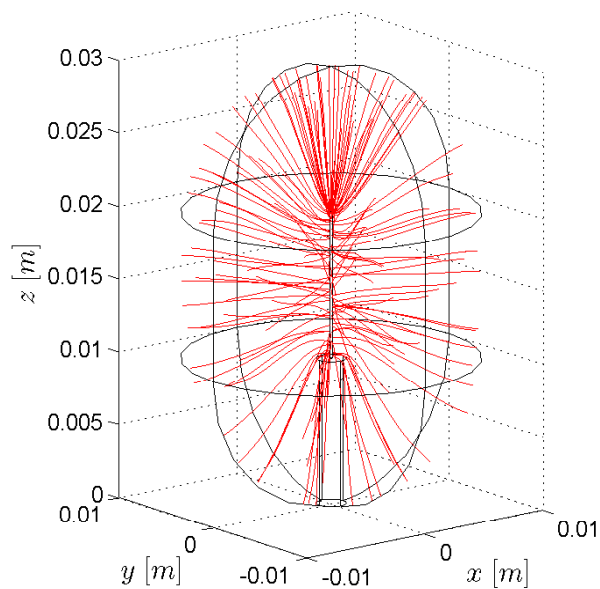


Obrázek 9.6: Rozložení koncentrace elektronů v okolí válcové sondy (v jednotkách m^{-3}).

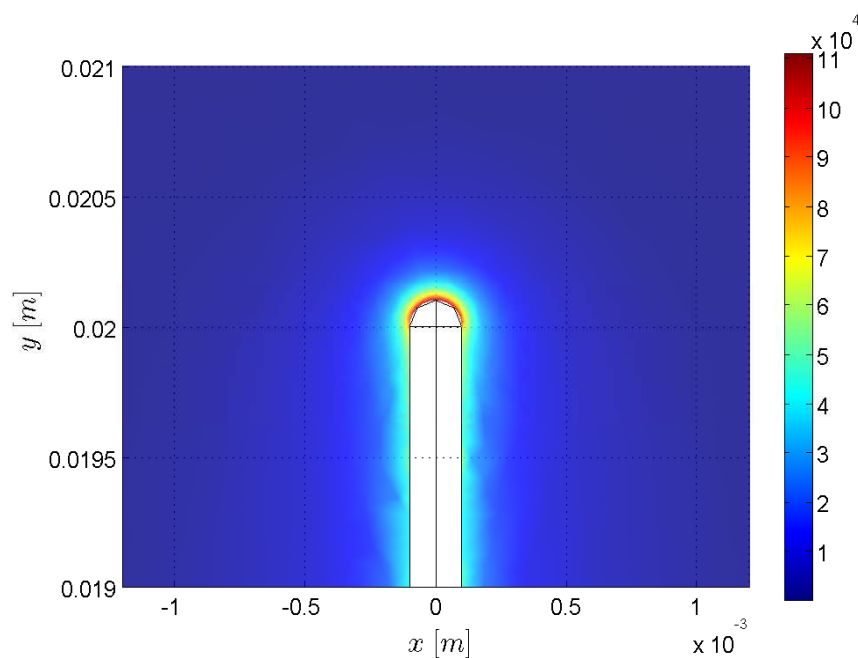
zjmněna nastavením hodnot parametru *Mesh curvature factor* na hodnotu 0,1 (část sondy s elektrickým předpětím), respektive 0,02 (oblast polokoule, která zakončuje aktivní oblast sondy). Ostatní parametry lze ponechat beze změny.

9.2.2 Parametry částicové části modelu

Rozehrávání počátečních poloh a směru a velikosti počátečních rychlostí jednotlivých částic neselfkonzistentního modelu, stejně jako realizace srážkových procesů a výpočet nových hodnot po provedení časového kroku, se řídí pravidly popsány v předchozí kapitole. Pro potřeby výsledného statistického zpracování byla pracovní oblast rozdělena na menší celky tvaru prstence (využívá se symetrie problému) o stejné výšce a šířce 1 mm. Získané hodnoty byly zpracovány ve třetím kroku a exportovány do spojitě části výpočtu.



Obrázek 9.7: Zobrazení vektorového pole toku elektronů \vec{J}_e pomocí proudnic (streamline plot).



Obrázek 9.8: Intenzita el. pole v okolí vrcholu válcové sondy (ve $V \cdot m^{-1}$).

9.2.3 Výsledky výpočtů

Na obrázcích 9.6 až 9.8 je v grafické podobě uveden výběr z výsledků. Graf 9.6 zobrazuje rozložení koncentrace elektronů v ekvidistantně vzdálených rovinách kolmých na osu sondy. Na obrázku 9.7 je pak pomocí proudových křivek znázorněno vektorové pole toku elektronů. Dle očekávání je většina elektronů elektrickým polem směřována do oblasti největší intenzity elektrického pole, což je (jak je patrné z obrázku 9.8) oblast v okolí vrcholu sběrné plochy sondy.

I když reálná válcová sonda není zpravidla zakončena útvarem tvaru polokoule, pokusili jsme se modelovat i zakončení rovinnou ploškou. Značně vzrostly požadavky na kvalitu mříže, naproti tomu porovnání výsledných řešení ukazuje, že oba dva výsledky jsou prakticky totožné a vliv aproximace v geometrii lze zanedbat.

9.3 Řešení – sférická sonda s úchytem

9.3.1 Geometrie modelu

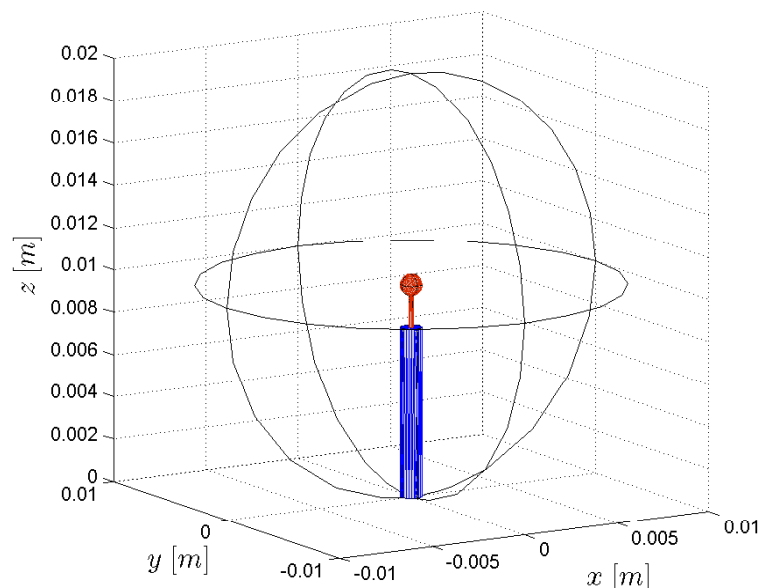
Geometrické uspořádání modelu je zobrazeno na obrázku 9.9. Aktivní oblast sondy je tvořena sjednocením koule o poloměru $r_p = 0,5$ mm a válce o výšce $l_v = 0,2$ mm a poloměru $r_v = 1 \times 10^{-4}$ m, přičemž střed válce a koule vzájemně splývají. Elektricky izolovaný úchyt představuje válec o poloměru r_p a délce $l_{iz} = 8$ mm. Pracovní oblastí je koule o poloměru $r_w = 0,01$ m.

9.3.2 Parametry použité v průběhu řešení

Spojité část

Spojité část modelu byla řešena jako stacionární problém a v porovnání s dvěma předchozími případy bylo nalezení vhodného uspořádání mříže nejjednodušší. To je dáno především vhodnou geometrií problému, která je bez ostrých hran vybíhajících do pracovní oblasti. Základ mříže byl typu *Extra coarse*, parametr *Mesh curvature factor* byl pro oblast povrchu sondy nastaven na hodnotu 0,1.

V průběhu řešení problému bylo využito řešičů algebraických rovnic GMRES a nekompletní LU rozklad.



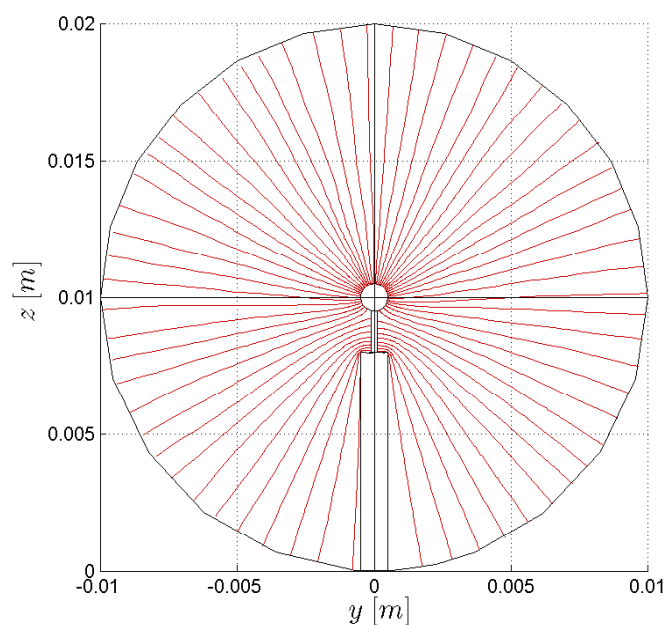
Obrázek 9.9: Pracovní oblast a sférická sonda s úchytem – geometrické uspořádání modelu.

Částicová část

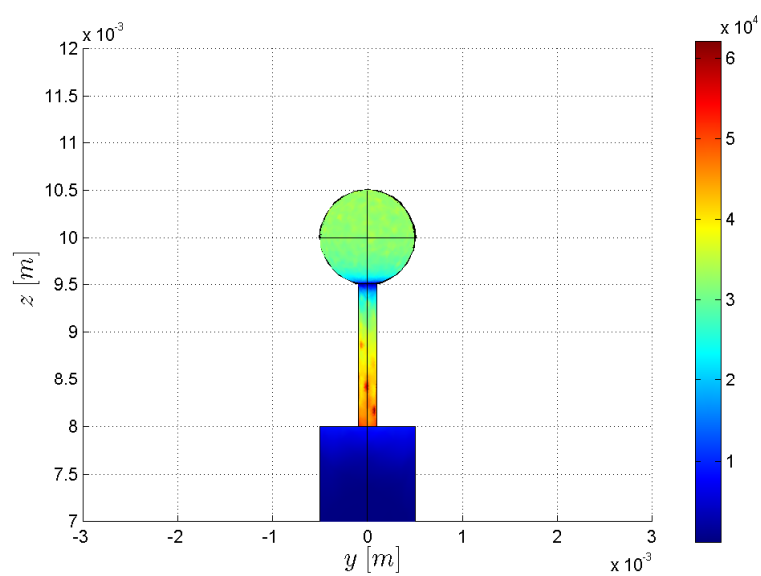
Rozklad pracovní oblasti do jednotlivých buněk byl proveden analogicky k případu rovinné a válcové sondy. Na každém úseku pak byly vypočteny hodnoty koeficientů reakcí, které byly po interpolaci kubickým splajnem exportovány do spojitě části modelu.

9.3.3 Výsledky výpočtů

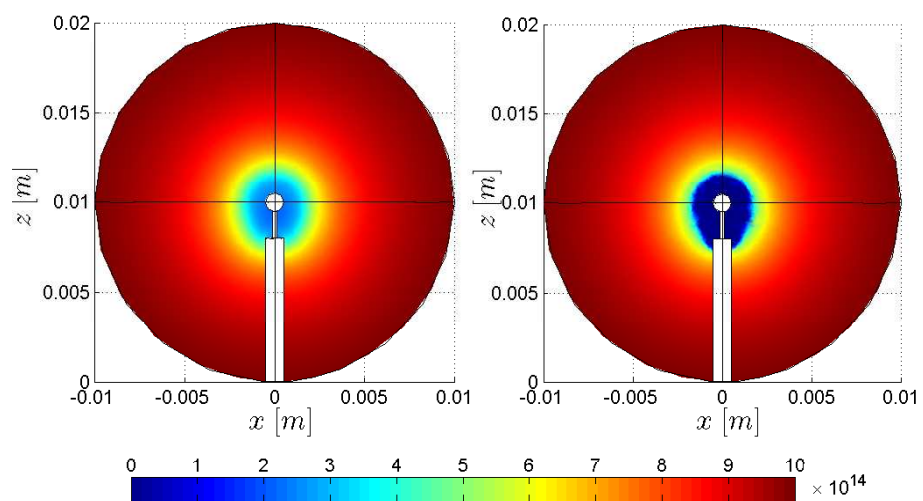
Ze zajímavých výsledků vybíráme zobrazení toku elektronů (obrázek 9.10) a rozložení intenzity elektrického pole na povrchu sondy (obrázek 9.11). Dle očekávání je velikost elektrické intenzity největší na povrchu konvexních ploch s malým poloměrem křivosti a je ovlivněna množstvím přitékajících elektronů. Na obrázku 9.12 je graficky znázorněna koncentrace elektronů v okolí sondy v rovině procházející její osou.



Obrázek 9.10: Zobrazení toku elektronů v okolí sférické sondy (streamline plot).



Obrázek 9.11: Intenzita elektrického pole na povrchu válcové sondy. Barevné odstíny udávají intenzitu elektrického pole ve $V \cdot m^{-1}$.



Obrázek 9.12: Koncentrace elektronů (vlevo) a kladně nabitých iontů (vpravo) v okolí sférické sondy. Barevné odstíny udávají koncentraci v jednotkách m^{-3} .

Kapitola 10

Diskuze výsledků a možnosti dalšího směřování

Stěžejní částí práce je algoritmus, který může být využit k efektivnímu výpočtu v oblasti fyziky plazmatu. Výstupy z jeho jednotlivých částí byly prezentovány v literatuře (základní model v [59], model uvažující energetické poměry v elektronové tekutině v [75] a zavedení srážkových členů v [76]). Samotný algoritmus (jako celek) byl prezentován na mezinárodní konferenci JVC'06 a nyní se připravuje k publikaci v jednom z čísel kvalitního britského časopisu *Vacuum*.

Za přispění modelů prezentovaných v práci byly studovány další fyzikální jevy, jako je například vliv velikosti sondy na formování sheathu, vliv tlaku na funkční závislosti fyzikálních veličin [58], možnosti studia elektropozitivního plazmatu [57], [77] atp.

Bude-li to povaha fyzikálního problému vyžadovat, lze v modelu zvětšit počet uvažovaných tekutin, například lze uvažovat tekutinu excitovaných atomů, vícemocných iontů atp. V případě vyššího předpětí na sondě může být výhodné i studium chování tekutiny neutrálních atomů, neboť hodnoty koncentrace těchto částic ovlivňují velikosti koeficientů reakcí.

V dalším kroku vývoje modelu bude vhodné odstranění předpokladu nekonečně rychlého putování částice po povrchu elektrody, což předpokládá zavedení migračních procesů jednotlivých částic na uvažovaných stěnách. Tato aproximace, kdy bude vhodné využít některých poznatků z počítačového modelování ve fyzice tenkých vrstev, by měla být v nové verzi programu COMSOL Multiphysics dobře realizovatelná.

Zároveň předpokládáme, že v budoucnu bude možné rozšířit model tak,

aby umožňoval studium fyzikálních jevů, při nichž se uplatňuje vliv magnetického pole. Za pomoci popsaného algoritmu tak budeme schopni simulovat celou řadu jevů z vědecké i technické praxe.

Na závěr lze říci, že v prezentovaném algoritmu se podařilo propojit výhody částicové i spojitě modelovací techniky. Výsledkem je relativně rychlý výpočet, který si zachovává výhody částicových technik, tj. realistický popis srážkových procesů. To umožňuje jeho aplikaci i na případy, u nichž by bylo užití ryze částicových modelů přinejmenším problematické a použití pouze spojitěho přístupu by znemožnilo uvažovat jevy způsobené srážkovými procesy s dostatečnou přesností.

Závěr

V práci byl prezentován návrh simulační techniky kombinující výhody spojitého a částicového způsobu počítačového modelování. Algoritmus značně snižuje spotřebu strojového času a zároveň zachovává pozitivum částicových metod – možnost kvalitně popsat důležité srážkové procesy v plazmatu. Pomocí této techniky, kterou lze dále rozvíjet a zobecňovat, je možné řešit zcela nové fyzikální problémy. Jako ukázka je uvedena aplikace postupu na sondy konečných rozměrů.

Předpokládáme, že po dalším vývoji bude technika v budoucnu úspěšně použita k simulování chování plazmatu v zařízeních s komplikovanou geometrií za přítomnosti magnetického pole. Vzhledem k tomu byl také zvolen styl práce – při sepisování byl mimo jiné kladen důraz na zaznamenání již získaných poznatků, čímž chceme umožnit dalším zájemcům o studium této zajímavé problematiky lehce navázat na prezentované informace.

Nechť tato práce přispěje k rozvoji lidské společnosti, ať už v rovině materiálních statků, či v rovině duchovního rozvoje jedince.

Seznam obrázků

3.1	Časové nároky jednotlivých částí částicových výpočtů – převzato z [26].	30
5.1	Volba délky časového kroku Δt v závislosti na pořadí kroku N_t .	42
5.2	Rozložení koncentrace elektronů n_e v závislosti na vzdálenosti x od rovinné sondy a na reálném čase experimentu. Velikost pracovní oblasti je 2 cm.	44
5.3	Velikosti celkového toku elektronů J_{total} a jeho složek – difúzní část J_{dif} a část popisující drift v elektrickém poli J_E	44
5.4	Ukázka mříže typu <i>normal</i> použité k řešení dvoudimenzionálního problému.	45
5.5	Rozložení koncentrace iontů n_i v okolí válcové sondy o poloměru $r = 0,1$ mm. Poloměr pracovní oblasti je roven 1 cm.	46
5.6	Rozložení koncentrace elektronů n_e v okolí válcové sondy o poloměru $r = 0,1$ mm. Poloměr pracovní oblasti je roven 1 cm.	46
5.7	Ukázka triangulované pracovní oblasti při modelování plazmatu v okolí sférické sondy.	47
5.8	Rozložení koncentrace elektronů (modře) a kladných iontů (červeně) v okolí sférické sondy o poloměru $r = 0,1$ mm.	48
5.9	Rozložení potenciálu φ v okolí planární, cylindrické a sférické sondy. Vzdálenost x je měřena od povrchu sondy. Veličina L označuje velikost pracovní oblasti.	48
6.1	Hustota energie w_e el. tekutiny v závislosti na vzdálenosti x od povrchu planární sondy (pro 1D), od osy cylindrické sondy (pro 2D) a od středu sférické sondy (pro 3D úlohu). L označuje velikost pracovní oblasti.	53

6.2	Závislost velikosti střední energie ϵ_e elektronu na vzdálenosti x od povrchu planární sondy (pro 1D), osy cylindrické sondy (pro 2D), respektive středu sférické sondy (pro 3D úlohu).	53
7.1	Funkční závislost účinných průřezů ionizace, excitace a elastické srážky na energii elektronu $\tilde{\epsilon}_e$ dle funkčních vztahů 7.1, 7.2 a 7.3.	58
7.2	Závislost koeficientu reakce k_j na střední energii elektronu $\tilde{\epsilon}_e$. Data byla získána metodou Monte Carlo a metodou numerické integrace.	64
8.1	Schématické znázornění jednotlivých částí hybridního modelu.	70
8.2	Rozdělovací funkce rychlostí elektronů získané řešením hybridního modelu s uvažováním pružných srážek elektronů s neutrály, excitace a ionizace argonových atomů. Celý soubor elektronů byl rozdělen do 20 tříd podle vzdálenosti částice od povrchu sondy (viz legenda, hodnoty jsou uvedené v metrech).	74
8.3	Rozložení el. potenciálu (nahore), hustoty náboje (uprostřed) a koncentrace částic (dole), získané řešením částicového modelu [73].	74
8.4	Horní obrázek: Rozložení elektrického potenciálu získané řešením základního (hnědá) a hybridního modelu (červená). Dolní obrázek: Rozložení koncentrace elektronů (modře) a kladných iontů (červeně) získané řešením základního spojitého modelu (čárkovaně) a hybridního modelu (plná čára).	75
9.1	Sférická, cylindrická a planární sonda [3].	78
9.2	Uspořádání pracovní oblasti pro modelování chování plazmatu v okolí rovinné sondy. Červená oblast zobrazuje část sondy s elektrickým předpětím, modrá zobrazuje izolovaný úchyt.	79
9.3	Rozložení potenciálu v okolí rovinné sondy.	80
9.4	Koncentrace elektronů (vlevo) a koncentrace kladně nabitých iontů (vpravo) v okolí rovinné sondy (v jednotkách m^{-3}).	80
9.5	Geometrie modelu – umístění a tvar válcové sondy vzhledem k pracovní oblasti.	82
9.6	Rozložení koncentrace elektronů v okolí válcové sondy (v jednotkách m^{-3}).	83

9.7	Zobrazení vektorového pole toku elektronů \vec{J}_e pomocí proudnic (streamline plot).	84
9.8	Intenzita el. pole v okolí vrcholu válcové sondy (ve $V \cdot m^{-1}$). . .	84
9.9	Pracovní oblast a sférická sonda s úchytem – geometrické uspořádání modelu.	86
9.10	Zobrazení toku elektronů v okolí sférické sondy (streamline plot). . .	87
9.11	Intenzita elektrického pole na povrchu válcové sondy. Barevné odstíny udávají intenzitu elektrického pole ve $V \cdot m^{-1}$	87
9.12	Koncentrace elektronů (vlevo) a kladně nabitých iontů (vpravo) v okolí sférické sondy. Barevné odstíny udávají koncentraci v jednotkách m^{-3}	88

Seznam tabulek

2.1	Základní mříže a jejich parametry použité při 2D modelování.	27
2.2	Základní mříže a jejich parametry použité při 3D modelování.	28
5.1	Předpisy pro koeficienty v rovnici 2.36 a 2.42 použité pro základní model plazmatu	39
5.2	Doba výpočtu jednodimenzionálního modelu na síti o různém počtu konečných prvků. Tato závislost je přibližně lineární a dobu výpočtu t v sekundách je možno vyjádřit jako funkci počtu prvků N přibližně ve tvaru $t = 0,024N + 4,554$	43
6.1	Předpisy pro koeficienty obecné rovnice 2.36 popisující rozložení hustoty energie elektronů v závislosti na vzdálenosti od sondy a použité pro model plazmatu s energetickým rozdělením rychlostí elektronů.	52
7.1	Hodnoty koeficientů reakce k_{ion} , k_{exc} a k_{ela} v závislosti na střední energii ϵ_e elektronu. Uvedené hodnoty jsou v m^3s^{-1}	63
7.2	Předpisy pro koeficienty v rovnici 2.36 (pro tekutinu elektronů, tekutinu kladných iontů a mód popisující rozložení hustoty energie elektronů) a 2.42 (pro Poissonovu rovnici) použité pro model plazmatu s uvažováním srážek.	68
8.1	Porovnání času potřebného k vyřešení jednotlivých typů modelů na počítači INTEL Pentium 4, 3 GHz, 1024 MB RAM.	73
8.2	Hodnoty koeficientů k_{ion} a k_{exc} získané ze třetí fáze hybridního modelu.	76

Literatura

- [1] HALL, A. On the experimental Determination of π . *Math*, **2**: 113, 1873.
- [2] Buffon, G. L. L. Essai d'arithmetique morale. *Suppl. a l'Histoire naturelle, Imp. Royale, Paris*, **4**, 1777.
- [3] Hippler, R., Pfau, S., Schmidt, M., Schoenbach, K.H. *Low Temperature Plasma Physics – Fundamental Aspects and Applications*. WILEY-VCH Verlag Berlin GmbH, 2001.
- [4] Langmuir, I., Mott-Smith, H.M. *Gen. Elec. Rev.* **26**, p. 731, 1923.
- [5] Bukovski, J. D., Graves, D. B. Two-dimensional fluid model of an inductively coupled plasma with comparison to experimental spatial profiles. *J. Appl. Phys.*, **80**: 2614 – 2623, 1996.
- [6] Chen, G., Raja, L. L. Fluid modeling of electron heating in low-pressure, high-frequency capacitively coupled discharges. *J. Appl. Phys.*, **96**(11): 6073 – 6081, 2004.
- [7] Golant, V. E., Yhilinski, A. P., Sakharov, I. E. *Fundamentals of Plasma Physics*. Willey, New York, 1980.
- [8] Passchier, J. D. P., Goedheer, W. J. A two-dimensional fluid model for an argon rf discharge. *J. Appl. Phys.*, **74**(6): 3744 – 3751, 1993.
- [9] Herrebout, D., Bogaerts, A., Yan, M., Gijbels, R., Goedheer, W., Dekempeneer, E. One-dimensional fluid model for an rf methane plasma of interest in deposition diamond-like carbon layers. *J. Appl. Phys.*, **90**: 570 – 579, 2001.
- [10] Herrebout, D., Bogaerts, A., Yan, M., Gijbels, R., Goedheer, W., Vanhulsel, A. Modeling of a capacitively couples radio-frequency methane

-
- plasma: Comparison between a one-dimensional and two-dimensional fluid model. *J. Appl. Phys.*, **92**: 2290 – 2295, 2002.
- [11] Boeuf, J. P. Numerical model of rf glow discharges. *Phys. Rev. A*, **36**: 2782 – 2792, 1987.
- [12] Chen, F. *Úvod do fyziky plazmatu*. Academia, 1984.
- [13] Scharfetter, D. L., Gummel, H. K. Large-Signal Analysis of Silicon Read Diode oscillator. *IEEE Transaction on Electron Devices*, **16**: 64 – 77, 1969.
- [14] Havlíčková, E. Fluid Model of Plasma and Computational methods for Solution. In *WDS'06 Proceedings of Contributed Papers, Part III*, pages 180 – 186, Praha, 2006. ISBN 80-86732-86-X.
- [15] Fletcher, C. A. J. *Computational Techniques for Fluid Dynamics 1*. Springer-Verlag, 1987.
- [16] The MathWorks, Inc. *MATLAB help pro R14SP3*, 2005.
- [17] COMSOLAB. *FEMLAB – User's Guide and Introduction, v2.2*, 2001.
- [18] COMSOLAB. *FEMLAB – Reference Manual, v2.2*, 2001.
- [19] COMSOLAB. *COMSOL Help Desk (HTML and PDF)*, 2003.
- [20] Vicher, M. *Numerika*. Interní text MFF UK v Praze, 2004.
- [21] Hockney, R. W., Eastwood, J. W. *Computer Simulation Using Particles*. Adam Hilger, 1988.
- [22] Hrach, R. Self-consistent modelling of plasma-solid interaction. *Czech. J. Phys.*, **49**(2): 155 – 165, 1999.
- [23] Hrach, R., Vicher, M. Self-consistent modelling of plasma formation: I. Sheath dynamics in eletropositive plasma. *Czech. J. Phys.*, **51**(6): 557 – 566, 2001.
- [24] Jelínek, P., Hrach, R. Self-Consistent Particle Modelling of Plasma Sheaths Surrounding Probes with Various Geometries . In *WDS'04 Proceedings of Contributed Papers, Part III*, pages 600 – 605, Praha, 2004. ISBN 80-86732-32-0.
-

-
- [25] Šimek, J., Hrach, R. Effectiveness of Particle Models of Plasma. In J. Šafránková, editor, *WDS'04 Proceedings of Contributed Papers, Part III*, pages 639 – 643, Praha, 2004. ISBN 80-86732-32-0.
- [26] Šimek, J. *Dizertační práce: Rozvoj metod počítačové fyziky pro fyziku plazmatu a fyziku tenkých vrstev*. MFF UK v Praze, 2006.
- [27] Vahedi, V., Surendra, M. Monte Carlo collision model for the particle-in-cell method: Applications to argon and oxygen discharges. *Computer Physics Comm.*, **87**: 179 – 198, 1995.
- [28] Hrach, R. *Počítačová fyzika I*. Univerzita J.E. Purkyně, Ústí nad Labem, 2003. ISBN 80-7044-521-1.
- [29] Skulerud, H. R. Null collision method. *Techn. Report EIP 72-1, Norwegian Inst. of Technology, Trondheim*, 1972.
- [30] Roučka, Š. *Bakalářská práce: Počítačové modelování interakce nízkoteplotního plazmatu s pevnými látkami*. MFF UK v Praze, Praha, 2006.
- [31] Barnes, J., Hut, P. A hierarchical $O(n \log n)$ force calculation algorithm. *Nature*, **324**: 446 – 449, 1986.
- [32] Greengard, L., Rokhlin, V. A fast algorithm for particle simulations. *J. Comput. Phys.*, **73**: 325 – 348, 1987.
- [33] Petersen, H. G. Accuracy and efficiency of the particle mesh Ewald method. *J. Chem. Phys.*, **103**: 3668 – 3679, 1995.
- [34] Bogaerts, A., Yan, M., Gijbels, R., Goether, W. Modeling of ionization of argon in an analytical capacitively coupled radio-frequency glow discharge. *J. Appl. Phys.*, **86**(6): 2990 – 3001, 1999.
- [35] Bogaerts, A., Gijbels, R., Goether, W. Hybrid Monte Carlo-fluid model of a direct glow discharge. *J. Appl. Phys.*, **78**(4): 2233 – 2241, 1995.
- [36] Bogaerts, A., Gijbels, R. Hybrid modeling network for a helium-argon-copper hollow cathode discharge used for laser applications. *J. Appl. Phys.*, **92**(11): 6408 – 6421, 2002.
-

-
- [37] Bogaerts, A., Gijbels, R. Similarities and differences between direct current and radio-frequency glow discharges: a mathematical simulation. *J. Anal. At. Spectrom.*, **15**: 1191 – 1201, 2000.
- [38] Bogaerts, A., Gijbels, R., Goedheer, W. Hybrid Modeling of a Capacitively Coupled Radio Frequency Glow Discharge in Argon: Combined Monte Carlo and Fluid Model. *J. Appl. Phys.*, **38**(7B): 4404 – 4415, 1999.
- [39] Wei, T., Phillips, J. Transport model of charged particle behaviour in the afterglow region of a microwave generated oxygen plasma. *J. Appl. Phys.*, **74**(2): 825 – 831, 1993.
- [40] Ellis, H. W., Pai, R. Y., McDaniel, E. W., Mason, E. A., Viehland, L. A. *At Data Nucl. Data Tables*. **17** (1976), page 177, 1976.
- [41] Mareš, R., Vicher, M., Hrach, R. PIC and fluid model of plasma sheath. *Czech. J. Phys.*, **52**: D705 – D709, 2002.
- [42] Meyyappan, M., Kresovsky, J. P. Glow discharge simulation through solutions to the moments of the Boltzmann transport equation. *J. Appl. Phys.*, **68**: 1506 – 1512, 1990.
- [43] Choi, K. C., Whang, K. W. Numerical analysis of the micro discharge in a DC plasma display panel by 2-D multifluid equations. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **23**: 399 – 404, 1995.
- [44] Surendra, M., Graves, D. B., Jellum, G. M. Self-consistent model of a direct-current glow discharge: Treatment of fast electrons. *Phys. Rev. A*, **41**: 1112 – 1125, 1990.
- [45] Lymberopoulos, D. P., Economou, D. J. Fluid simulations of glow discharges: Effect of metastable atoms in argon. *J. Appl. Phys.*, **73**(8): 3668 – 3679, 1993.
- [46] Boeuf, J. P., Pitchford, L. C. Two-dimensional model of a capacitively coupled rf discharge and comparisons with experiments in the Gaseous Electronics Conference reference reactor. *Phys. Rev. E*, **51**: 1376 – 1390, 1995.
-

-
- [47] Punset, C., Boeuf, J. P., Pitchford, L. C. Two-dimensional simulation of an alternating current matrix plasma display cell: Cross-talk and other geometric effects. *J. Appl. Phys.*, **83**: 1884 – 1897, 1998.
- [48] Ivanov, V. V., Mankelevich, Yu. A., Proshina, O. V., Rakhimova, A. T., Rakhimova, T. V. Modeling of a repetitive discharge in the cell of a plasma display panel. *Plasma Phys. Rep.*, **25**: 591 – 598, 1999.
- [49] Veerasingam, R., Campbell, R. B., McGrath, R. T. One-dimensional fluid simulations of a helium - xenon filled ac colour plasma flat panel display pixel. *Plasma Source Sci. Technol.*, **6**: 157 – 169, 1997.
- [50] Meunier, J., Belenguer, Ph., Boeuf, J. P. Numerical model of an ac plasma display panel cell in neon-xenon mixtures. *J. Appl. Phys.*, **78**: 731 – 745, 1995.
- [51] Hagelaar, G. J. M., Hoog, F. J., Kroesen, G. M. W. Boundary conditions in fluid models of gas discharges. *Phys. Rev. E*, **62**: 1452 – 1454, 2000.
- [52] A. T. Davis. *UMFPACK Version 4.3 User Guide*. Dept. of Computer and Information Science and Engineering, Univ. of Florida, Gainesville, FL, 2004. On-line přístupné na www.cise.ufl.edu/research/sparse/umfpack/v4.4/UMFPACKv4.4/UMFPACK/Doc/UserGuide.pdf.
- [53] Ashraft, C., Pierce, D., Wah, D. K., Wu, J. *The Reference Manual for SPOOLES, Release 2.2: An Object Oriented Software Library for Solving Sparse Linear Systems of Equations.*, 1999. On-line přístupné na <http://www.netlib.org/linalg/spooles/spooles.2.2.html>.
- [54] Saad, Y., Schultz, M. GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, **7**: 856 – 869, 1986.
- [55] E. W. Weisstein et al. *Conjugate Gradient Method*. On-line přístupné na <http://mathworld.wolfram.com/ConjugateGradientMethod.html>.
- [56] Wilson, J. D., Naff, R.L. *The U.S. Geological Survey modular groundwater model – GMG linear equation solver package documentation: U.S. Geological Survey Open-File Report 2004*, 2004.
-

-
- [57] Hrach, R., Hrachová, V., Šimek, J., Bartoš, P., Lahuta, M. Numerical modelling of Plasma-solid Interaction in Argon and Oxygen at Medium Pressures. In *Proc. 2nd International Workshop on Cold Atmospheric Pressure Plasmas CAPPSSA 2005*, pages 235 – 238, Brugges, 30. 8. – 2. 9. 2005. ISBN 988086692X.
- [58] Havlíčková, E., Bartoš, P., Hrach, R. Computational study of plasma-solid interaction in DC glow discharge in argon plasma at medium pressures. In *International Workshop and Summer School on Plasma Physics, Kiten, Bulgaria, July 3-9, 2006*, 2006. V recenzním řízení.
- [59] Bartoš, P., Jelínek, P., Hrach, R. Fluid Modelling of Plasma Behaviour in the Vicinity of Planar and Cylindrical Probes. In *WDS'05 Proceedings of Contributed Papers, Part III*, pages 625 – 630, Praha, 2005. ISBN 80-86732-59-2.
- [60] Lymberopoulos, D. P., Economou, D. J. Modeling and simulation of glow discharge plasma reactors. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **12**(4): 1229 – 1236, 1994.
- [61] Mitchner, M., Kruger, C. H. *Partially Ionized Gases*. Wiley, New York, 1973.
- [62] Kracík, J. a kolektiv. *Fyzika plazmatu*. Academia, Praha, 1964.
- [63] Yanguas-Gil, Á., Cotrino, J., Alves, L. An update of argon inelastic cross sections for plasma discharges. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **38**: 1588 – 1598, 2005. Obsahuje příložený datový soubor.
- [64] Richards, A. D., Thompson, B. E., Sawin, H. H. Continuum modeling of argon radio frequency glow discharges. *Appl. Phys. Lett.*, **50**: 492 – 494, 1987.
- [65] Gander, W., Gautschi, W. Adaptive Quadrature - Revisited. *BIT*, **40**: 84 – 101, 2000. On-line přístupné také na <http://www.inf.ethz.ch/personal/gander>.
- [66] Horváth, M. *Studium interakce plazmatu s povrchy jiných látek metodami počítačové fyziky*. Dizertační práce, Univerzita Karlova v Praze, 2002.

-
- [67] Specht, L. T., Lawton, S. A., DeTemple, T. A. Electron ionization and excitation coefficients for argon, krypton and xenon in the low E/N region. *J. Appl. Phys.*, **51**(1): 166 – 170, 1980.
- [68] Braun, C. G., Kunc, J. A. Collisional-radiative coefficients from a three-level atomic model in nonequilibrium argon plasmas. *Phys. Fluids*, **30**(2): 499 – 509, 1987.
- [69] Pack, J. L., Voshall, R. E., Phelps, A. V., Kline, L. E. Longitudinal electron diffusion coefficients in gases: Noble gases. *J. Appl. Phys.*, **71**(11): 5363 – 5371, 1992.
- [70] Nakamura, Y., Kurachi, M. Electron transport parameters in argon and its momentum transfer cross section. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **21**: 718 – 723, 1988.
- [71] McLaren, T. I., Hobson, R. M. Initial Ionization rates and Collision Cross Sections in Shock-Heated Argon. *Phys. Fluids*, **11**(10): 2162 – 2172, 1968.
- [72] Koura, K. A set of model cross sections for the Monte Carlo simulation of rarefied real gases: Atom–diatom collisions. *Phys. Fluids*, **6**(10): 3473 – 3486, 1994.
- [73] Hrach, R., Jelínek, P., Šimek, J., Bařina, O., Vicher, M. Self-consistent particle modelling of plasma–solid interaction: Influence of substrate geometry. *Czech. J. Phys.*, **54** :Suppl. C, 284.1, 2004.
- [74] Raizer, Y. P. *Gas Discharge Physics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1991.
- [75] Bartoš, P., Hrach, R. Multidimensional fluid modelling of low-temperature argon plasma. In *WDS'06 Proceedings of Contributed Papers, Part III*, pages 204 – 209, Praha, 2006. ISBN 80-86732-85-X.
- [76] Bartoš, P., Hrach, R. The influence of collision effects in DC glow discharge in argon plasma on the sheath formation. *Czech. J. Phys.*, **56** :B638 – B643, 2006.
- [77] Hrach, R., Bartoš, P., Lahuta, M., Šimek, J. Multi-dimensional Modelling of Plasma-Solid Interaction. *Czech. J. Phys.*, **56** :1445 – 1452, 2006.
-