



Pedagogická  
fakulta  
Faculty  
of Education

Jihočeská univerzita  
v Českých Budějovicích  
University of South Bohemia  
in České Budějovice

Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích  
Pedagogická fakulta  
Katedra aplikované fyziky a techniky

Bakalářská práce

# Počítačové modelování interakce plazma – materiál: tok částic

Vypracovala: Veronika Strapcová  
Vedoucí práce: doc. RNDr. Petr Bartoš Ph.D.

České Budějovice 2014

## **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem svoji bakalářskou práci vypracovala samostatně, pouze s použitím pramenů a literatury uvedených v seznamu citované literatury.

Prohlašuji, že v souladu s § 47b zákona č. 111/1998 Sb. v platném znění souhlasím se zveřejněním své bakalářské práce, a to v nezkrácené podobě elektronickou cestou ve veřejně přístupné části databáze STAG provozované Jihočeskou univerzitou v Českých Budějovicích na jejích internetových stránkách, a to se zachováním svého autorského práva k odevzdanému textu této kvalifikační práce. Souhlasím dále s tím, aby toutéž elektronickou cestou byly v souladu s uvedeným ustanovením zákona č. 111/1998 Sb. zveřejněny posudky školitele a oponentů práce i záznam o průběhu a výsledku obhajoby kvalifikační práce. Rovněž souhlasím s porovnáním textu své kvalifikační práce s databází kvalifikačních prací Theses.cz provozovanou Národním registrem vysokoškolských kvalifikačních prací a systémem na odhalování plagiátů.

Datum:

Podpis:

## **Anotace:**

Bakalářská práce se zabývá počítačovým modelováním interakce plazmatu s povrchem pevného materiálu, a to především stanovením toku elektricky nabitých částic k povrchu. Hlavní důraz je kladen na studium tohoto jevu pomocí programu COMSOL Multiphysics.

Po úvodní kapitole, v níž je stručně charakterizováno čtvrté skupenství hmoty - plazma, následuje kapitola seznamující se základními technikami počítačového modelování. Ve třetí kapitole je představen software pro technické výpočty, jehož užití je v následující kapitole prakticky demonstrováno na příkladu spojitého modelování. Poslední část práce tvoří ukázkové výstupy tohoto modelu. Závěrem je zhodnocení celé bakalářské práce a možnosti jejího dalšího využití.

Klíčová slova: plazma, počítačové modelování, software pro technické výpočty.

## **Abstract:**

Bachelor thesis deals with computer modeling of the interaction of plasma with the surface of the solid material, primarily by determining the flow of electrically charged particles to the surface. The main emphasis lays on study of this phenomenon using COMSOL Multiphysics.

After introductory chapter, in which is briefly characterized the fourth state of matter – plasma, there is a chapter introducing the basic techniques of computer modeling. The third chapter presents software for technical calculations, the use of which is practically demonstrated in the next chapter by the example of the continuous modeling. The last part of the thesis forms a sample output of the model. Conclusion is the evaluation of the whole bachelor thesis and the possibilities of its further use.

Keywords: plasma, computer modeling, software for technical computing.

## **Poděkování:**

Na tomto místě chci poděkovat svému vedoucímu bakalářské práce, **doc. RNDr. Petru Bartošovi Ph.D.**, za nespočet cenných rad, myšlenek a připomínek, bez nichž by tato práce nemohla vzniknout.

Také bych chtěla poděkovat panu Mgr. Janu Ptáčnickovi za pomoc při tvorbě modelu použitého v této bakalářské práci.

## Obsah:

<b>Úvod</b>	<b>6</b>
<b>1. PLAZMA</b>	<b>7</b>
1.1 Interakce plazmatu s povrchem	9
1.2 Interakce plazmatu s materiálem z pohledu procesu	10
<b>2. POČÍTAČOVÉ MODELOVÁNÍ PLAZMATU</b>	<b>12</b>
2.1 Částicové techniky	13
2.2 Spojité modely	17
<b>3. SOFTWARE PRO TECHNICKÉ VÝPOČTY</b>	<b>18</b>
3.1 MATLAB	18
3.2 Simulink	21
3.3 COMSOL Multiphysics	22
3.3.1 Pracovní postup	24
3.3.2 Rozšiřující moduly	26
<b>4. MODEL PRO STANOVENÍ TOKU ČÁSTIC NA POVRCH MATERIÁLU</b>	<b>34</b>
4.1 Základní rovnice	34
4.2 Okrajové a počáteční podmínky	36
4.3 Výsledky	37
4.4 Určení voltampérové charakteristiky pomocí modelu	41
<b>Závěr</b>	<b>45</b>
<b>Seznam použité literatury</b>	<b>46</b>

## Úvod

O obrovském potenciálu, který využití nízkoteplotního plazmatu v různých lidských činnostech nabízí, zřejmě nikdo nepochybuje. Svědčí o tom nespočet velice kvalitních publikací v odborných časopisech a v současnosti již také řada technických aplikací, které jsou na trhu dostupné. Ačkoliv by se mohlo zdát, že o plazmatu již víme vše potřebné, není tomu tak. Plazma je velice komplikované prostředí, ve kterém platí velice složité zákonitosti. Ostatně právě tato složitost je tím, co plazmatu dává vlastnosti, kterých v běžných podmínkách nejsme schopni dosáhnout.

Tématem této bakalářské práce je využití softwarových prostředků a současných numerických metod ke studiu chování nízkoteplotního plazmatu. Hlavní pozornost je věnována především stanovení toku elektricky nabitých částic k povrchu materiálu pomocí spojitého modelu. Navržený model byl numericky realizován v programu COMSOL Multiphysics. Mým hlavním cílem nebylo dosažení výsledků, které by mohly být rovnou publikovány. Snažila jsem se spíše sestavit text, ve kterém jsou uvedeny podstatné informace, které s návrhem modelu souvisí a které mohou být dále využívány a rozšiřovány dalšími studenty.

# 1 PLAZMA

Plyny, kapaliny a pevné látky jsou nejběžnějším stavem hmoty, se kterým se na Zemi setkáváme. Je proto pochopitelné, že jejich vlastnosti byly prozkoumány mnohem dříve než vlastnosti čtvrtého skupenství hmoty – plazmatu.

Na Zemi se s plazmatem setkáváme spíše jen výjimečně. K jeho vytvoření a udržení je zpravidla potřeba zahřát látku na vysokou teplotu nebo v ní vytvořit elektrický náboj. Ve vesmíru se s plazmatem setkáváme mnohem častěji a dá se říci, že plazma je zde prakticky všudypřítomné. Uvádí se, že ve formě plazmatu je ve vesmíru více než 99 procent hmoty. Pojem plazma poprvé použil americký chemik a fyzik Irwing Langmuir (1881 – 1957).

Plazma je definováno jako kvazineutrální plyn, tj. jsou v něm zastoupené částice s kladným i záporným elektrickým nábojem, ale navenek plazma vystupuje jako elektricky neutrální. Přitom vykazuje kolektivní chování, tzn. že mezi částicemi plazmatu jsou coulombovské síly, neboli síly dlouhého dosahu [1].

Základní vlastností plazmatu je jeho kvazineutralita, což znamená, že nashromáždí-li se v nějakém místě plazmatu elektrický náboj, nashromáždí se v jeho okolí díky coulombovské interakci také náboje opačné polarity. To má za následek odstínění elektrického pole od původního náboje. Jak již bylo uvedeno výše, plazma vzniká nejčastěji dvěma základními mechanismy:

**1) Zahříváním plynu** – při zahřátí na dostatečnou teplotu je energie některých částic dostatečná na to, aby došlo ve srážce k ionizaci neutrálních částic.

**2) Elektrickým polem** – podstatným jevem jsou v tomto případě interakce elektricky nabitých částic s elektrickým polem. Nabité částice převezmou od elektrického pole energii, což se projeví zvýšením jejich kinetické energie. Při srážkách mohou elektrony ostatní částice disociovat, excitovat nebo ionizovat. Elektrony jsou schopné díky své malé hmotnosti získat mnohem větší rychlost než těžší ionty, což se projevuje v jejich rychlé odezvě na změny v rozložení elektrického pole v plazmatu. V případě nízkoteplotního plazmatu se energie těžkých elektricky nabitých částic příliš neliší od energie neutrálního pozadí, ve výsledku tak mají neutrály i ionty podobnou teplotu.

V případě izotermického plazmatu se energie elektronů a iontů téměř neliší, zpravidla je stejná [2].

Jak již bylo zmíněno, plazma je směs různých druhů částic, z nichž velká část má elektrický náboj. Podle stupně ionizace rozlišujeme plazma na silně ionizované a slabě ionizované. V silně ionizovaném plazmatu převládají elektricky nabitě částice nad neutrálními, v slabě ionizovaném plazmatu převažují neutrální atomy a molekuly nad částicemi elektricky nabitými.

K určení stupně ionizace používáme tzv. Sahovu rovnici [1]:

$$\frac{n_1}{n_2} \approx 2,4 \cdot 10^{21} \cdot \frac{T^{\frac{3}{2}}}{n_1} \exp\left(-\frac{U_i}{kT}\right), \quad (1)$$

kde  $n_1$  označuje koncentraci nabitých částic a  $n_2$  koncentraci neutrálních částic.  $T$  je teplota plynu a  $U_i$  ionizační potenciál atomů plynu. Aby byl stupeň ionizace nezanedbatelný, je nutné plyn ohřát na teplotu, při které budou mít částice plynu energie blízké ionizačnímu potenciálu  $U_i$ . Ten je pro elektrony vyskytující se na nejvyšších atomárních hladinách typický v řádu elektronvoltů, což odpovídá teplotám větším než 10.000 K.

V částečně ionizovaných plynech se vyskytuje pět typů částic:

1. *Foton* – nemá vnitřní strukturu, nabývá libovolných energií.
2. *Elektron* – nemá vnitřní strukturu, energie volného elektronu závisí jen na jeho translační rychlosti.
3. *Atom nebo molekula* - vyskytující se v základním nebo excitovaném stavu.
4. *Kladně nebo záporně elektricky nabitý iont* – může se vyskytovat jednou nebo vícekrát ionizovaný a v základním nebo excitovaném stavu.

V plazmatu se vyskytují volné nosiče náboje. Právě volné nosiče náboje plazma zcela odlišují od plynů. Plazma je elektricky vodivé a silně reaguje na elektrické a magnetické pole. Za plazma nepovažujeme například svazky nabitých částic (nesplňují kvazinetralitu) nebo velmi slabě ionizované plyny, jako například plamen svíčky (nesplňují kolektivní chování) [3].



V současnosti nachází plazma uplatnění v celé řadě technologických postupů. Používáme ho např. v metalurgii při svařování a řezání materiálů, v polovodičovém průmyslu (injektování iontů do materiálů) a ve strojírenství a zdravotnictví. Mezi významné aplikace patří například úprava materiálů, zejména jejich povrchů. Vysoký aplikační potenciál má využití plazmatu k nanášení tenkých vrstev se speciálními vlastnostmi, jako je zvýšená fotoaktivita, velmi tvrdé či elastické vrstvy, ochranné vrstvy s nízkým stupněm abrazivnosti či speciální optické vrstvy.

## 1.1 Interakce plazmatu s povrchem

Jak již bylo několikrát zmíněno, plazma je tvořeno nejen elektrony, ionty, neutrálními atomy, molekulami, fotony a excitovanými atomy, ale také radikály. Často se v plazmatu vyskytují částice, které není možné vytvořit běžnými chemickými reakcemi. Částice interagují nejen mezi sebou, ale také mohou interagovat s povrchem materiálu, jak je vidět na obrázku 2.

Nejčastější jsou čtyři interakce částice s povrchem materiálu:

### a) *Fyzikální adsorpce na povrchu*

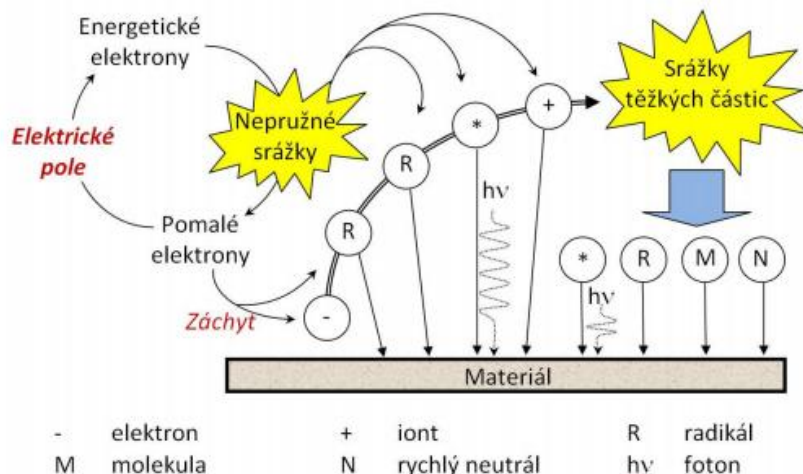
Nastává téměř pro všechny kombinace plynu a povrchu. K adsorpci dochází v důsledku Van der Waalsových sil. Adsorpční energie je menší než 0,5 eV a částice je na povrchu vázána polarizačním mechanismem. Díky slabé vazbě se může částice pohybovat po povrchu materiálu.

### b) *Chemická adsorpce*

Je tvořena chemickými vazbami mezi atomy povrchu a částicí. Je silnější než fyzikální adsorpce. Energie jsou nejčastěji řádově několik elektronvoltů.

### c) *Adsorpce částice uvnitř materiálu*

d) *Rekombinace elektricky nabitých částic na povrchu – důsledkem rekombinace je vykompenzování elektrického náboje.*



**Obrázek 2:** Schematické znázornění vzniku reaktivních částic v plazmatu a jejich interakce s elektricky záporně nabitým povrchem (upraveno z [4]).

## 1.2 Interakce plazmatu s materiálem z pohledu procesu

V materiálovém inženýrství jsou z tohoto pohledu podstatné tři procesy, a to:

- a) *depozice (nanášení) tenkých vrstev,*
- b) *plazmové leptání a*
- c) *modifikace povrchu.*

ad a) Depozice neboli nanášení tenkých vrstev se rozumí vrstva materiálu s tloušťkou od několika nanometrů až po několik milimetrů. K nejběžnějším postupům depozice patří postupy z plynné fáze pomocí chemické nebo fyzikální depozice vrstvy. Depozicí se například docílují úprava implantátů v medicíně, v automobilovém průmyslu, antikoroziční vrstvy a ve spoustě dalších odvětví.

ad b) Při plazmovém leptání se využívají hlavně vysoce reaktivní částice (např. atomy halogenidů) k odstraňování povrchových vrstev z materiálů nebo méně reaktivních, ale těžších atomů (hlavně argon) k odstranění mikroskopických částic z povrchu substrátů. V plazmatu existuje řada částic nesoucích náboj, které lze elektrostatickým polem urychlovat buď

k substrátu, nebo od něj. Mluví se o přikládání předpětí na substrát. Plazmovým leptáním se vyrábí mikroelektronické prvky, kdy jsou v křemíkovém substrátu vytvořeny pravoúhlé prohlubně s šířkou v řádu jednotek nm. Přesnost této operace umožňuje zvýšit hustotu tranzistorů v elektronických součástkách [2].

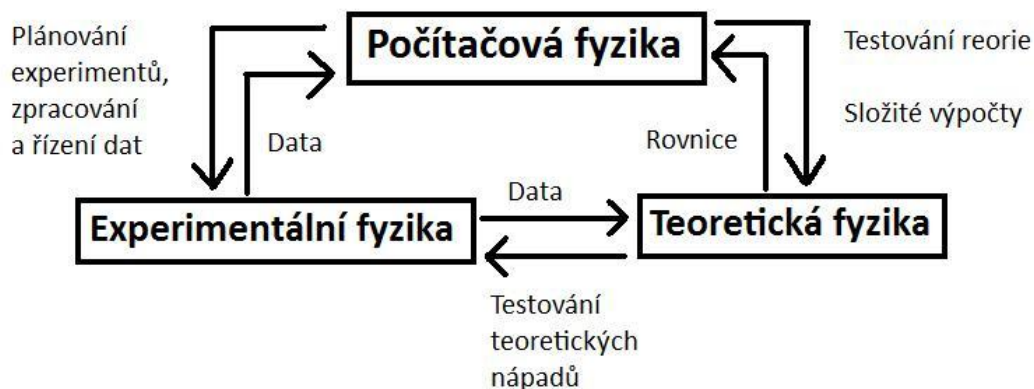
ad c) Modifikace povrchových vlastností materiálů

Pomocí plazmatu je možné na povrchu materiálu vytvářet chemické funkční skupiny, jejichž přítomnost je zodpovědná za změnu vlastností povrchu. Tak je například možné ovlivnit povrchovou energii a tím smáčivost polymerních materiálů.

## 2 POČÍTAČOVÁ MODELOVÁNÍ PLAZMATU

Plazma je velice komplexní systém, jehož chování není možné jednoduše předpovídat. To s sebou přináší celou řadu problémů jak při vývoji nových zařízení, tak i při optimalizaci technologického procesu. V těchto případech vědeckým pracovníkům pomáhá řešit problémy právě počítačové modelování.

V posledních desetiletích byl zaznamenán poměrně prudký vývoj počítačů. Dnes jsou využívány prakticky ve všech lidských činnostech. Není tedy překvapením, že počítače hrají důležitou roli také ve vědě a v průmyslu, kde jsou využívány v celé řadě aplikací, jako například pro simulaci chování různých systémů, při řízení experimentů, pro zpracování dat a další. Dříve fyzika používala dva přístupy, a to teoretické a experimentální. V současné době již toto rozdělení nestačí. Díky tomu vznikla nová vědecká disciplína - počítačová fyzika. Tyto tři přístupy k vědecké práci nabízejí výrazně efektivnější cestu pro studium systémů, než tomu bylo od dob Isaaca Newtona po druhou světovou válku. Vztahy mezi počítačovou, teoretickou a experimentální fyzikou jsou zobrazeny na obrázku č. 3.



**Obrázek 3:** Vztahy mezi třemi hlavními přístupy ve fyzice plazmatu (upraveno z [5]).

V této kapitole se zaměříme na popis nejdůležitějších technik, které jsou v počítačovém modelování využívány. V uplynulých šedesáti letech bylo navrženo nespočetné množství algoritmů pro počítačové modelace plazmatu. K lepší orientaci v této problematice mohou být algoritmy rozděleny do skupin, jak je patrné z obrázku č. 4 - techniky pro částicové simulace a spojité techniky.



**Obrázek 4:** Modelovací techniky a stupně hybridizace (upraveno z [5]).

Tyto skupiny se dále dělí do několika podtříd, případně mohou být také navzájem kombinovány, vznikají tak tzv. hybridní modely (hybridizace).

Podobně jako jiné algoritmy také výpočetní metody používané ve fyzice plazmatu mají své výhody a nevýhody. Každá metoda je vhodná pro simulaci jiného systému, jak bude popsáno v následujících odstavcích.

## 2.1 Částicové techniky

Techniky pro částicové modelování jsou založeny na sledování pohybu každé částice v systému, a to včetně srážkových procesů vzájemně mezi částicemi a interakcí částic s pevným povrchem (např. interakce se substráty atd.). Tyto techniky umožní detailní popis elementárních procesů, ke kterým dochází ve studovaném systému. Díky tomu jsou tyto techniky relativně přesné. Bohužel velký počet částic, které musí být ve výpočtu uvažovány, dělá tyto modely velmi časově náročné a často i početně nerealizovatelné. Takový výpočet může zabrat i několik měsíců případně let. Nicméně v současnosti se

zvyšují výkony počítačů a jejich možnosti při využití paralelního programování snižují výpočetní čas na několik dní.

Jak bylo uvedeno výše, techniky částicového modelování poskytují velmi přesné výpočty, přičemž tato přesnost je vykoupena neefektivitou nebo delším výpočtem.

Jak je patrné z obrázku č. 4, existují dva hlavní přístupy k částicovému modelování - stochastická a deterministická metoda.

#### a) Stochastická metoda

Tato metoda je založená na zákonech pravděpodobnosti. Nejčastěji je využívána metoda Monte Carlo a její modifikace. Pro každou částici je nagenеровána náhodná volná dráha pro daný časový okamžik. K výpočtům náhodné dráhy se využívá vzorec

$$\lambda_{\text{rand}} = \lambda_{\text{total}} \ln \gamma , \quad (2.1)$$

kde  $\lambda_{\text{total}}$  je střední volná dráha částice,  $\gamma \in (0,1)$  je náhodné číslo s rovnoměrným rozdělením. Vzorec (2.1) je platný za předpokladu, že celkový účinný průřez je nezávislý na energii částice. K výpočtům střední volné dráhy se používá vzorec (2.2)

$$\lambda_{\text{total}} = \frac{1}{N\sigma_{\text{total}}} , \quad (2.2)$$

kde  $N$  je koncentrace částic a  $\sigma_{\text{total}}$  je celkový účinný průřez.

V reálných systémech je účinný průřez konstantní, tudíž musí být použity pomocné metody, aby byly splněny podmínky platnosti rovnice (2.1). Například metoda nulové srážky umožňuje použití vztahu (2.1), ačkoliv celkový účinný průřez není konstantní pro všechny energie částice. Metoda je založena na přidání další virtuální srážky, která nemění směr ani energii částice a jejíž účinný průřez je

v závislosti na energii částice zvolen tak, aby celkový účinný průřez byl konstantní. Tudíž platí vztah

$$\sigma_{\text{null}} = \sigma_{\text{total}} - \sigma_{\text{real}}, \quad (2.3)$$

kde  $\sigma_{\text{null}}$  je účinný průřez,  $\sigma_{\text{total}}$  je celkový průřez a  $\sigma_{\text{real}}$  je skutečný průřez.

Zde je pro ukázkou na obrázku č. 5 uveden příklad s použitím plynu argonu:

$$\sigma_{\text{ela}} = \left\{ \left| \frac{6}{Y_1} - \frac{1.1E^{1.4}}{Y_2} \right| + \frac{0.05}{\left(1 + \frac{E}{10}\right)^2} + \frac{0.01E^3}{1 + \left(\frac{E}{12}\right)^6} \right\} \times 10^{-16},$$

$$Y_1 = \left( 1 + \frac{E}{0.1} + \left( \frac{E}{0.6} \right)^2 \right)^{3.3},$$

$$Y_2 = \left[ 1 + \left( \frac{E}{15} \right)^{1.2} \right] \left[ 1 + \left( \frac{E}{5.5} \right)^{2.5} + \left( \frac{E}{60} \right)^{4.1} \right]^{0.5}.$$

**Obrázek 5:** Ukázka účinných průřezů pro plyn argon (převzato z [5]).

Největší nevýhodou těchto metod je znalost účinných průřezů, která je klíčová pro přesný výpočet. U některých plynů účinné průřezy nejsou a musejí se provádět složité simulace, aby byly stanoveny a mohlo se s nimi dále pracovat.

## b) Deterministické metody

Deterministické přístupy vycházejí z fyzikálních zákonů mechaniky. Pohyb částice je popsán pohybovými rovnicemi. Poloha

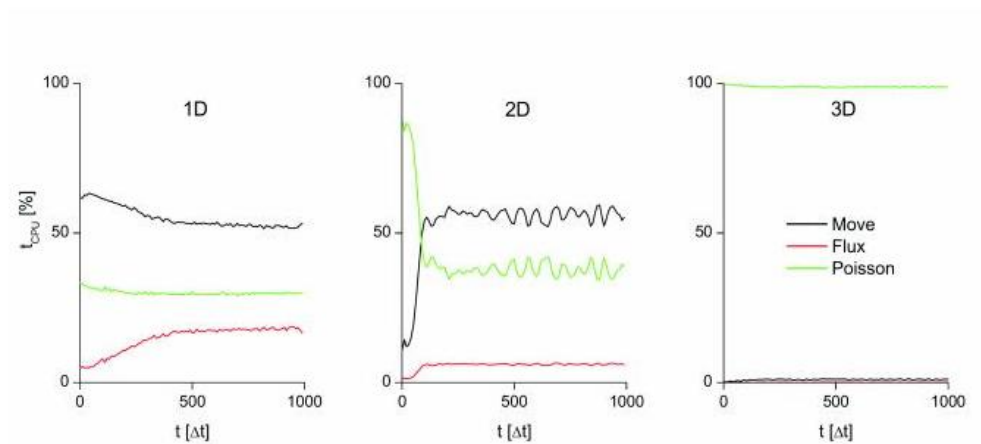
a rychlost částice v čase  $t$  je dána soustavou rovnic, které jsou následně diskretizovány pro potřeby výpočtu. V prvním přiblížení je využíván Eulerův algoritmus, který je popsán rovnicemi (2.4), (2.5) a (2.6)

$$r_i^{k+1} = r_i^k + v_i^k \Delta t + \frac{1}{2m_i} F_i^k \quad (2.4)$$

$$v_i^{k+1} = v_i^k + \frac{1}{2m_i} (F_i^k) \Delta t \quad (2.5)$$

$$F_i^{k+1} = \dots \quad (2.6)$$

Přesnost algoritmů může být zvýšena metodami vyššího řádu, například Verletův algoritmus, metody Leap Frog, Runge - Kuty a jinými. Časově nejnáročnější částí výpočtu je výpočet síly působící na nabitě částice (2.6).



**Obrázek 6:** Časová náročnost výpočtů (převzato z [6]).

Tyto tři grafy na obrázku č. 6 ukazují, že výpočet je nejvíce náročnou částí, u 1D modelu zabírá výpočet 35 % celkové doby výpočtu, 2D zabírá 40 % a 3D zabírá dokonce 99 % celkové doby výpočtu.

Protože částicové postupy mají problémy s realizací srážkových procesů mezi nabitými částicemi, srážky jsou obvykle popsány pomocí stochastické metody (to znamená, že z pohledu množství



částic se částice odrážejí v náhodném směru). Někdy se tato skutečnost nazývá hybridizace na nízké úrovni a v takových modelech je pohyb částic popsán pomocí vhodné deterministické metody a srážkové procesy jsou realizovány stochasticky

## **2.2 Spojité modely**

Spojité modely vznikly na popisu makroskopických veličin, pomocí soustavy několika diferenciálních rovnic, které se řeší simultánně. Jejich nevýhodou je menší přesnost výsledků a složité popisování jevů na elementární úrovni. Nezanedbatelnou výhodou ale mají v malých nárocích na spotřebu strojového času. Podrobněji jsou spjité metody popsány v řešeném příkladu v kapitole 4.

## 3 SOFTWARE PRO TECHNICKÉ VÝPOČTY

### 3.1 MATLAB

MATLAB je program s integrovaným prostředím pro vědecko-technické výpočty, modelování, návrhy algoritmů, simulace, analýzu a prezenci dat, návrhy řídicích a komunikačních systémů, paralelní výpočty, měření a zpracování signálů. Program MATLAB je nástroj pro vývoj širokého spektra aplikací a pohodlnou interaktivní práci.

System MATLAB se stal celosvětovým standardem v oblasti technických výpočtů a simulací ve sféře vědy, výzkumu, průmyslu a vzdělávání. Program umožňuje svým uživatelům využívat dobré grafické a výpočetní nástroje, ale i rozsáhlé specializované knihovny funkcí spolu s výkonným programovacím jazykem čtvrté generace. Knihovny se svým obsahem jsou využitelné skoro ve všech oblastech lidské činnosti.

Díky své struktuře je program MATLAB určen hlavně těm, kteří potřebují řešit početně náročné úlohy, ale nechtějí zkoumat matematickou podstatu problémů. Více jak milión uživatelů po celém světě využívá možnosti jazyka MATLABu, který je v porovnání s jinými (jako např. Fortran) mnohem jednodušší. Za nejsilnější stránku programu je považováno velmi rychlé výpočetní jádro s optimálními algoritmy, které jsou prověřeny léty provozu na pracovištích po celém světě. MATLAB byl přizpůsoben do všech významných platforem, jako jsou Windows, Linux, Solaris a Mac [7].

#### 1. Výpočetní jádro

Nejdůležitější součástí jádra MATLABu jsou algoritmy pro operace s maticemi komplexních a reálných čísel. V programu je možné provádět matematické operace jako násobení, inverze, determinant a další. V nejjednodušší podobě je možné program MATLAB použít jako maticový kalkulátor, protože operace v MATLABu se zapisují téměř, jako kdybychom je psali na papíře. MATLAB také podporuje složitější datové typy, jako jsou například vícerozměrná pole komplexních nebo reálných čísel. Program podporuje také tzv. pole buněk, struktury podobné maticím, ve kterých může být každý prvek jiného typu. Podobně lze tvořit struktury, kde její prvky nejsou rozlišeny souřadnicemi, ale jmény. Tím pádem připomínají

struktury známé z ostatních běžných programovacích jazyků. Program MATLAB ukládá všechna data v tzv. dvojité přesnosti, je možné ale nastavit úspornější formu (single). Vektory v MATLABu mohou prezentovat časové řady, signály nebo polynomy. Další velmi důležitou vlastností jazyka MATLAB je možnost pracovat s objekty. Tyto objekty umožňují rozšíření výpočetního prostředí o nové datové typy, na kterých je možné definovat operátory a libovolné funkce.

## **2. Grafický subsystém**

Díky grafice programu MATLAB je možné snadno zobrazit a prezentovat výsledky získané výpočtem nebo experimentálně. Můžeme stvořit různé druhy grafů, například dvourozměrné (pro funkce jedné proměnné), třírozměrné (pro funkce o dvou proměnných), koláčové grafy, histogramy a další. Všem objektům je možné nastavit vzhled již při jejich vytváření, případně je možné tyto hodnoty i později změnit. Je možné vytvářet animované grafy, stínovat, zobrazovat kontury a transparentní objekty a další. Většinu efektů lze docílit jedním nebo několika příkazy. Program MATLAB používá algoritmy Z-buffer nebo technologii OpenGL, pokud ji počítač podporuje.

Objekty v grafickém okně programu nejsou statické (každý nakreslený objekt v programu má přiřazený identifikátor, díky němuž je možné měnit vlastnosti objektu i jeho vzhled). Vzhled objektů je možné měnit i interaktivně díky liště nástrojů umístěné pod záhlavím obrázku. V programu MATLAB je také možné vkládat do obrázků ovládací prvky (tlačítka a další).

## **3. Otevřená architektura**

Otevřená architektura je vlastností, která nejvíce přispěla k rozšíření programu MATLAB. Uživatelé mohou vytvářet funkce nejvhodnější pro jejich aplikace. Tyto funkce jsou pak uloženy v souborech v dobře čitelné formě.

Většina funkcí dodávaných s programem MATLAB funguje vlastně jako nadstavba, reálně vestavěné jsou jen základní funkce. Díky tomu je program

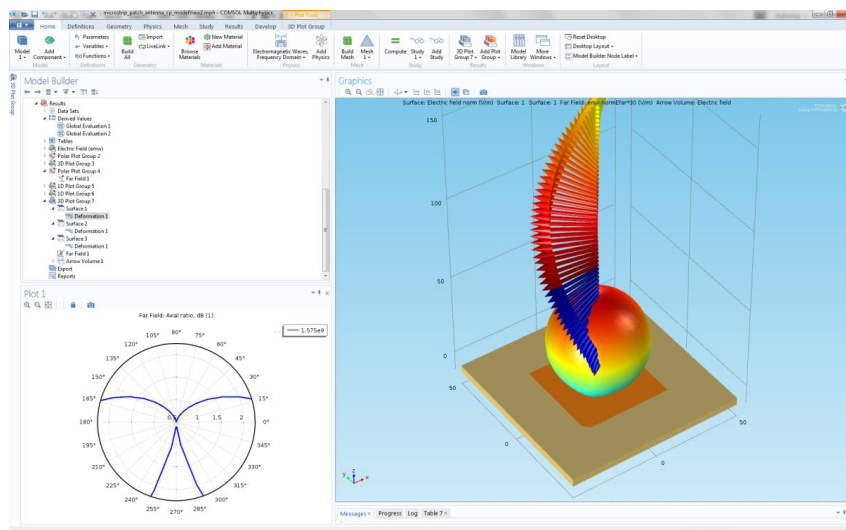
téměř neomezeně rozšiřitelný a uživatel se může poučit z dodaných algoritmů. Tyto funkce jsou pak lehce přenosné mezi různými platformami, na kterých je program používán.

#### **4. Pracovní nástroje**

V MATLABu je možné programovat i aplikace. Programovací jazyk MATLABu obsahuje příkazy pro psaní programů, jako jsou příkazy pro větvení, podmíněné příkazy, cykly a další. I když je programovací jazyk MATLABu jednoduchý a dá se snadno zvládnout, jdou v něm programovat i velice složité aplikace (programovací jazyk obsahuje příkazy pro psaní programů, jako např. podmíněné příkazy, větvící příkazy, cykly a další).

Program MATLAB využívá uživatelské rozhraní Desktop. Prohlížeč adresářů a souborů, okno historie příkazů, prohlížeč pracovního prostoru, interaktivní spouštěč aplikací, profiler, editor, debugger, příkazové okno a hypertextová nápověda všechny tyto pracovní nástroje jsou do prostředí plně integrovány. Díky konfigurovatelnosti prostředí si může uživatel přizpůsobit počet a rozměry zobrazených nástrojů tak, jak sám chce a aby to vyhovovalo jeho potřebám. Díky tomu je možné vytvořit plochu jak pro začátečníky, tak i pro pokročilé uživatele. Dobrým pomocníkem pro uživatele je interaktivní nástroj pro import dat, který usnadňuje načítání dat prakticky z jakéhokoliv zdroje (např.: text, tabulky, obrázky, animace, binární data,...).

Programovací jazyk MATLABu těsně spolupracuje s jazykem Java. Objekty jazyka Java mohou být použity v programu MATLAB, díky čemuž lze tvořit složitá grafická rozhraní, s využitím knihoven stvořených v jazyce Java. K MATLABu lze také připojovat moduly v jazyce C a Fortran.



**Obrázek 7:** Ukázka Desktopu programu (převzato z [8])

## 5. Toolboxy

Díky otevřené architektuře vznikly knihovny funkcí, nazývaných toolboxy. Toolboxy rozšiřují použití programu MATLAB ve vědních a technických oborech. Knihovny nabízejí funkce, které je možné rozšiřovat, modifikovat nebo jen z nich čerpat informace z přehledných algoritmů. Díky toolboxům lze MATLAB využít v různých oblastech, jako jsou např. aplikovaná matematika, zpracování signálu a komunikace, měření a testování, výpočetní biologie, finanční modelování a analýza, modelování fyzikálních soustav a další.

V současnosti se program MATLAB hojně využívá v aplikované matematice, automatickém řízení a regulaci, zpracování signálu a komunikace, zpracování obrazu, měření a testování, výpočetní biologii, finančním modelování a analýze a modelování fyzikálních soustav [9].

## 3.2 Simulink

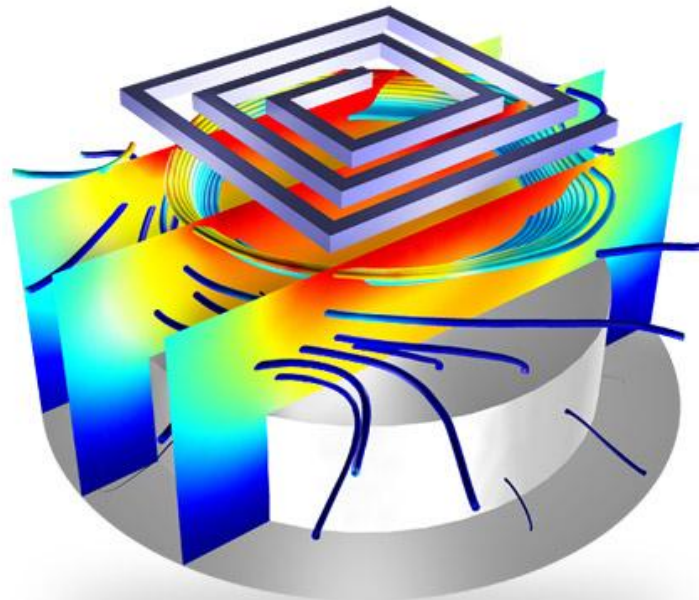
Simulink je nadstavbový program programu MATLAB. Díky němu je možné simulovat a modelovat dynamické systémy, které využívají algoritmy MATLABu pro numerické řešení nelineárních diferenciálních rovnic. Uživatel může tvořit modely dynamických soustav ve formě blokových schémat a rovnic [10].

S tímto programem je možné simulovat „stiff“ systémy s využitím paměti počítače. S programem Simulink a s jeho grafickým editorem se dají vytvářet lineární a nelineární systémy pouze přesouváním funkčních bloků myší. Je zde možné také spouštět části simulačního schématu na základě simulačních experimentů. [10]

Program Simulink má otevřenou architekturu, díky které může uživatel tvořit své vlastní funkční bloky a rozšiřovat knihovnu Simulinku. V programu je možné simulovat i složité systémy. Simulink také (jako MATLAB) dovoluje připojovat funkce od uživatele, v jazyce C. Program Simulink má velmi dobré grafické možnosti, přenositelné modely a schémata. Tyto modely je možné přenášet na více počítačů a tím umožnit řešení složitějších problémů.

Simulink obsahuje knihovny bloků, nazývané blocksety. Blocksety rozšiřují základní knihovny bloků programu Simulink, které může uživatel rozšiřovat. Díky těmto knihovnám je možné řešit problémy příslušných vědních a technických oborů.

### 3.3 COMSOL Multiphysics



**Obrázek 8:** Ukázka výstupu z programu: Časově proměnné elektrické a magnetické pole v okolí cívky, které vede ke generování plazmatu ve zředěném plynu (převzato z [11])

COMSOL Multiphysics je inženýrský program k modelování simulací fyzikálních jevů. Většina fyzikálních jevů, se kterými se setkáváme v reálném životě má multifyzikální povahu (také jinak komplexní, tzn. zahrnuje více fyzikálních projevů). Proto musíme při procesech a studiu o chování různých fyzikálních systémů uvažovat vzájemné působení několika vlivů současně. Díky tomu byl vyvinut program COMSOL Multiphysics.

COMSOL Multiphysics je určený k řešení inženýrských úloh, pomocí metody konečných prvků. Tímto postupem je možné dosáhnout vyšší přesnosti modelovaného systému. Uživatel může zahrnout libovolný počet fyzikálních jevů, které bere v úvahu při vytváření modelu.

Tento program je určen inženýrům, konstruktérům i vědeckým pracovníkům, kterým jde o detailní proniknutí do fyzikálních jevů sledovaného systému. Součástí programu a jeho rozšíření jsou předdefinované typové úlohy (například proudění tekutin, přestup tepla, zatížení konstrukcí), které ulehčují uživateli práci při vytváření fyzikálního modelu. Program COMSOL Multiphysics obsahuje funkce potřebné k tvorbě a samotné analýze modelu, nejprve definice geometrie, zadávání okrajových podmínek, vytvoření sítě až po vizualizaci výsledků.

#### **a) Elektromagnetismus (Electrical)**

Nadstavbové moduly ze skupiny Electrical pomáhají modelovat úlohy z oblasti elektromagnetismu nízkých a vysokých frekvencí, šíření světla, MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems, k výrobě například pohybových systémů), pomáhají analyzovat nízkoteplotní nejaderná plazma nebo nabízejí detailní analýzu polovodičových prvků. Tyto moduly jsou vhodné pro modelování elektromotorů, antén, vlnodů, různých typů osvětlení, plazmových reaktorů atd. Výhodou těchto modelů je možnost integrace modelů do schémat ve formátu SPICE, kdy se model stává součástí definovaného elektrického obvodu.

#### **b) Strojírenství (Mechanical)**

Tyto moduly umožňují modelovat problémy z oblasti pružnosti a pevnosti, tzn. provádět analýzy nosníků, vzpěry konstrukcí až po skořepiny a membrány. Pružnost a pevnost lze rozšířit o nelineární materiály, zahrnout creep (tečení, deformace pevného materiálu pod konstantním zatížením, následkem dlouhého vystavení napětí, které je pod mezí kluzu nebo pevnosti materiálu), plasticitu se životností konstrukcí a také teplotu. Díky těmto aspektům se rozšíří aplikační oblast a simulace se přiblíží realitě.

#### **c) Mechanika tekutin (Fluid)**

Nadstavbové moduly z oblasti tekutin pokrývají kompletně mechaniku tekutin od laminárního proudění až po turbulentní, jednofázové i vícefázové. Modelace a analýzy rozsáhlých potrubních systémů lze řešit pomocí těchto modelů velmi efektivně. S příslušným modulem je možné simulovat proudění v porézních médiích nebo proudění spojené s geologií při modelování spodních vod.

#### **d) Chemie (Chemical)**

V chemických modulech jsou předdefinovaná rozhraní pro modelování chemických reakcí, transportu rozpustných látek atd. Z elektrochemie se dají simulovat cykly bakterií či palivových článků. Dají se také simulovat např. procesy galvanizace nebo koroze.

### **3.3.1 Pracovní postup**

Celý pracovní postup při modelování v COMSOL Multiphysics lze rozdělit do několika kroků. Tyto kroky patří mezi hlavní uzly tzv. modelovacího stromu, který uživatel při zpracování své úlohy doplňuje. Výhodou je přehlednost kroků a snadný náhled na jakýkoliv detail vytvořeného modelu a jeho snadná adaptace.

#### **1. Geometrie**

Geometrii zkoumaného modelu můžeme vytvořit CAD nástroji v grafickém editoru COMSOL Multiphysics. Podkladem pro řešení úloh



mohou také být geometrické modely z externích CAD systémů. Program COMSOL Multiphysics načítá geometrické soubory ve formátu STL nebo VRML, které definují model povrchovou sítí, 2D soubory v DXF formátu a modely popsané 3D sítí ve formátu NASTRAN. Další geometrická data zajišťuje specializovaný modul s nastavbami.

## **2. Okrajové podmínky a vlastnosti oblastí**

Zadávání okrajových podmínek a vlastností je nezbytnou podmínkou pro řešení úloh. Přiřazujeme proměnné (výrazy nebo funkce) částem geometrie, jako jsou oblasti, plochy (ve 3D), hrany nebo body, které lze dále využít v simulaci. Při zadávání materiálů subdomén je k dispozici knihovna předdefinovaných materiálů i chemických prvků. Stvořený model může obsahovat několik oblastí a ke každé z nich lze přiřadit vlastnosti rozdílného prostředí nebo materiálu. Do připravené materiálové knihovny je možné přidávat další materiály nebo lze vytvořit knihovnu vlastní.

## **3. Generování výpočetní sítě**

V dalším kroku se připravuje generování výpočetní sítě, v jejíž uzlových bodech budou vypočtena potřebná data. Síť můžeme generovat buď automaticky, nebo lze vlastnosti sítě ovlivňovat nastavováním parametrů ve zvolených částech modelu. Lze najednou kombinovat několik variant sítí s různým typem elementů.

## **4. Řešení modelu**

COMSOL Multiphysics obsahuje několik typů řešení pro výpočet lineárních a nelineárních úloh, úloh ve frekvenční a časové oblasti nebo úloh se zvoleným proměnlivým parametrem. Pro řešení soustav lineárních rovnic jsou v programu k dispozici jak přímá, tak iterační řešení, kde k iteračním řešením je k dispozici řada solverů. Řešení modelu pak může být spuštěno z grafického rozhraní COMSOL Multiphysics nebo v případě propojení s programem MATLAB také z jeho příkazové řádky. Program COMSOL

Multiphysics podporuje chod jak na vícejádrových počítačích, tak i na počítačových clusterech.

## 5. Konečné zpracování výsledků

Zpracování výsledků může být provedeno mnoha způsoby. Multifyzikální úlohy obsahují řadu vypočtených proměnných, které lze ve zvolených jednotkách současně zobrazovat pomocí různých typů grafů, například izobar, barevných map, proudnic, šipek, částic nebo řezů. Úlohy, které jsou řešené v čase, lze snadno animovat s možností zápisu do formátu AVI, GIF a Flash. Jakékoliv řešení je možné exportovat do jednoduchých textových souborů. Samozřejmostí je také export vytvoření obrázků a grafů. Zpracovaný model je možné uložit ve formátu Java nebo do textového m-souboru (MATLAB).

## 3.3.2 Rozšiřující moduly

Rozšiřující moduly programu COMSOL Multiphysics týkající se elektromagnetismu (Electrical):

### 1. AC/DC Module

Tento nadstavbový modul je určený pro modelování úloh, kde se využívají vlivy střídavého a stejnosměrného proudu s elektromagnetismem. S tímto modulem je možné modelovat nízkofrekvenční elektromagnetické systémy (např. motory, induktory, kondenzátory, mikrosenzory, transformátory).

AC/DC Module obsahuje aplikace pro obecný statický a kvazistatický elektromagnetismus 2D a 3D geometrie včetně symetrických těles s možností harmonické, přechodové, statické nebo časově závislé analýzy, případně řešení pro zadané frekvence [12].

Do stvořené simulace je možné zahrnout další fyzikální vlivy z aplikací, jako jsou například přestup tepla, řešení Joulova nebo indukčního ohřevu.

S tímto modulem je možné modelovat elektrické obvody (SPICE formát); obvody je možné zahrnovat do stvořeného modelu s budicími nebo tlumicími elementy.

Oblasti využití AC/DC Module: rezistory, induktory, elektromagnetické převodníky, izolátory a vodiče, motory, řešení S – parametrů soustav, výroba polovodičů, šíření vysokého napětí, řídicí obvody, analýza malých signálů a spousta dalších.

## **2. RF Module**

Tento RF Module je určen k modelování elektromagnetického vlnění o vysokých frekvencích. Umožňuje uživateli také simulovat mikrovlnná záření nebo optiku. Díky tomuto modulu RF Module je možné modelovat prototypy zařízení přenášející, přijímající nebo zpracovávající elektromagnetické vlny (s frekvencí od radiových až po optické vlny). S RF Module je možné modelovat vlnění o různých frekvencích. Je možné také modelovat elektrické obvody, které mohou být zahrnuty jako tlumicí nebo budicí elementy. S tímto modulem je možné propojovat další aplikační módy a tím řešit například vliv tepla na frekvenční odezvu mikrovlnného filtru nebo výkonové vlnovody [13].

Oblasti využití RF Module: antény, filtry, elektrická vedení a vlnovody, mikrovlnné ohříváče, fotonové krystaly, formulace rozptýlených polí, optická vlákna a další.

## **3. Wave Optics Module**

S tímto modulem je možné simulovat šíření elektromagnetických vln v lineárních a nelineárních médiích. Rozšiřující modul Wave Optics Module pracuje s metodou „Beam Envelopes“, kterou může uživatel využít při řešení optických vláken, optických senzorů laserových paprsků a dalších. Tento modul nejlépe využijí uživatelé již používající RF Module k výpočtům v oblasti optiky.

Oblasti využití Wave Optics Module: optické kabely a senzory, obousměrné spojky, plasmatické zařízení, šíření laserového a nelineárního optického paprsku.

#### **4. MEMS Module**

Celý název modulu zní MiroElectroMechanical Systems. Ten je uzpůsoben pro návrhy a analýzu fyzikálních jevů probíhajících v mikrozařízeních, jako například u akčních členech, filtrech nebo snímačích. Tento modul je silně multifyzikální (umožní propojení aplikace z různých fyzikálních oblastí od jednoho modelu). U MEMS Module je nutné řešit elektrické i mechanické zatížení, popřípadě zahrnout tepelné a elektromechanické jevy a další.

Oblasti využití MEMS Module: akcelerometry, integrované silikonové tlakové senzory, mikrovlnné snímače, RF zařízení, snímače pohybu a akustické snímače.

#### **5. Plasma Module**

Rozšiřující modul Plasma Module je určen k simulaci a modelování nejaderných nízkoteplotních plazmových reaktorů.

Oblasti využití: indukčně vázané plazma ICP (Inductively Coupled Plasmas), kapacitně vázané plazma CCP (Capacitively Coupled Plasmas), mikrovlnné plazma, elektrické výboje DC (Discharges) [14].

Do modulu je možné zahrnout schéma elektrického obvodu díky modulům AC/DC a RF. Příklady použití: osvětlení, pohonná zařízení, výroba polovodičů, plazmové svítivny a další.

#### **6. Semiconductor Module**

V tomto modulu je využívána metoda transportu náboje, díky této metodě se modelují a analyzují polovodičová zařízení. Uživatel je schopen pomocí tohoto modulu řešit rovnice drift – diffusion (model driftu a difúze) pro elektrony a díry. Semiconductor Module používá numerické metody konečných prvků a objemů. Uživatelům usnadní práci pokud podobné úlohy řešily složitě pomocí (ODE) obyčejných a (PDE) parciálních diferenciálních rovnic. [15]

Oblasti využití: bipolární tranzistory, PM přechody, tyristory, Schottkyho diody a další.

Rozšiřující moduly programu COMSOL Multiphysics týkající se mechaniky tekutin(Fluid):

### **1. CFD Module**

Díky tomuto modulu je možné simulovat proudění tekutin a kombinovat všechny možnosti CFD balíků se samotným programem COMSOL Multiphysics. S tímto modulem se dají modelovat stlačitelná a nestlačitelná proudění. Je zde možné řešit laminární proudění i využívání turbulentních modelů. S turbulentním modelem se dají řešit proudění více fází. CFD Module umožňuje řešení proudění v porézním prostředí (průsaky zemin) a v tenkých vrstvách (promazávání mechanismů) [16].

Oblasti využití: aeronautika, modelování bouří, proudění v trubkách, větráky a pumpy, chlazení elektroniky, tepelné výměníky a chladící příruby, emulze a suspenze a další.

### **2. Mixer Module**

Rozšíření CFD Module. Díky Mixer Module může uživatel simulovat mixéry a míchané reaktory. Tento modul je zaměřen na modelování proudění tekutin v rotujících nádobách, je zde možné simulovat více fázové proudění nebo volnou hladinu.

Oblasti využití: výroba spotřebního zboží, farmacie a další.

### **3. Microfluidics Module**

Tento modul obsahuje aplikace, které popisují jednorázové nebo vícerázové proudění v mikrokanálech, elektrokinetické nebo Stokesovo proudění, vlivy povrchového napětí, společně s MEMS Module nebo se Structural Mechanics Module je možné řešit interakce tekutiny s konstrukcí [17].

V modelech je důležité uvažovat o laminárním proudění, roste význam elektrokinetických jevů a spousta dalších. V některých případech je nutný kinetický popis tekutiny. Pro takovéto typy simulací je k dispozici rozhraní pro řešení molekulárního proudění.

Oblasti využití: molekulární biologie, elektroosmotické vlivy, mikroreaktory, mikrotepelné výměníky, vakuové systémy, palivové články a další.

#### **4. Subsurface Flow Module**

S tímto modulem je možné simulovat jednoduché i složité procesy povrchového proudění, proudění ropy nebo plynů v mediích podobných zemskému povrchu. Je zde možné modelovat také proudění podzemních vod nebo znečištění zemského povrchu. Subsurface Flow Module využívá Richardsovy rovnice (pro proudění s proměnnou hustotou) , Darcyho zákon (pro rychlost průtoku kapaliny nasycenou zónou pevného porézního tělesa), Navier-Stokesovy rovnice (pro volné proudění). S modulem je možné také simulovat transport a reakce látek rozpouštěných v roztocích a šíření tepla v pórovitých médiích [18].

Oblasti využití: rezervoáry plynu, magnetohydrodynamické proudění lávy, analýzy těžby ropy, mělké proudění a transport sedimentů, analýza ústí vrtu a další.

#### **5. Pipe Flow Module**

Tento modul se může použít pro simulování proudění tekutin, přenos tepla a hmoty v potrubích a kanálech. Je možné zde také řešit přechodové jevy a akustiku v dříve zmíněných sítích. Potrubní síť je nutné aproximovat pomocí 1D modelu, kde je možné přiřadit jednotlivým kanálům průměr. Pipe Flow Module obsahuje předem připravená kolena, ventily, T – spoje nebo pumpy.

Oblasti využití: návrhy a optimalizace ventilátorů a chladicích systémů, tepelné výměníky, geotermální ohřev a další.

#### **6. Molecular Flow Module**

Modul Molecular Flow Module pomáhá simulovat zředění plynů při nízkém tlaku (vakuu) ve složitých geometrických strukturách. Nejdůležitější vlastností pro uživatele je využití molekulárního proudění metodou lomeného koeficientu [34].

Oblasti využití: výpočet hmotových spektrometrů, urychlovače částic, vakuové systémy a další.

Rozšiřující moduly programu COMSOL Multiphysics týkající se mechaniky strojírenství (Mechanical):

### **1. Heat Transfer Module**

Díky tomuto modulu je možné řešit úlohy z oblasti přestupu tepla. Modul Heat Transfer Module obsahuje okrajové podmínky pro řešení tepelně vysoce vodivých nebo tepelně izolačních vrstev, je zde možné řešit modely 2D i 3D. K dispozici jsou řešení multifyzikálních aplikací (neizotermální proudění). V tomto modelu je možné simulovat fázové změny a volné i řízené konvekce. Je zde k dispozici formulace k řešení zahřívání živých tkání (rovnice biotepla).

Oblasti využití: svařování, odlévání a tepelné zpracování materiálů, sublimace, tuhnutí, návrhy kotlů a hořáků, tepelné výměníky a chladičí příruby, odporové a indukční teplo a další.

### **2. Structural Mechanics Module**

Tento modul pomáhá řešit deformace konstrukcí v důsledku zatížení. Modul Structural Mechanics Module obsahuje aplikace pro simulování skořepin, nosníků, Mindlinovských desek (tlusté desky s vlivem zkosení) a příhradových konstrukcí. Uživatel může využívat nelineární materiálové modely (elastoplastický, hyperplastický, viskoelastický). Je zde také možnost řešení multifyzikálních úloh za pomoci nadstavbového modulu Geomechanics Module.

Oblasti využití: kontaktní prvky včetně tření, viskoelastická a tepelná roztažnost, analýza vzpěru, elektromechanické stroje a další.

### **3. Nonlinear Structural Materials Module**

Tímto modulem se rozšiřují moduly Structural Mechanics a MEMS. Díky Nonlinear Structural Materials Module je možné simulovat nelineární materiálové modely (elastoplastické, viskoplastické, hyperplastické, creep – plasticita za vyšších provozních teplot).

Hyperelastické: Neo – Hookean, ST. Venant Kirchhoff, Mooney – Rivlin, Ogden, Arruda – Boyce, Murnaghan [20]

Viskoplastické: Anand [20]

Creep: Norton, Norton – Bailey, Garofalo, Navarro – Herring, Coble, Weertman, Potential, Volumetric, Deviatoric [20]

Elastoplastické: Isotropic, Large – strain plasticity, Orthotropic Hill plasticity, Tresca and von Mises yield criterion [20].

#### **4. Geomechanics Module**

Tento modul je nadstavbou modulu Structural Mechanics Module a modelují se v něm geotechnické aplikace. Rozšiřuje materiálové modely nelineární a elastoplastické modely zemin, hornin a betonu. V modulu Geomechanics Module je možné simulovat deformace a poruchy v zeminách a skalách i interakci s betonem a stavbami [21].

Oblasti využití: silnice, záchytné konstrukce, stabilita svahů a nábřeží, modelování zemin a další.

#### **5. Fatigue Module**

Díky tomuto modelu je možné řešit úlohy z oblasti životnosti a únavy materiálů založených na nízkocyklových a vysokocyklových metodách. Tento modul je často používán s modulem Structural Mechanics Module pro řešení životnosti. V kombinaci s Fatigue Module a Nonlinear Structural Materials Module je možné simulovat únavu elastoplastických materiálů.

S využitím Fatigue Module je nutné nejdříve vyřešit model zatížení konstrukce, výsledky poté vstupují do simulace únavy materiálu.

Využité modely: vysokocyklové metody (Findley Criterion, Mataka Criterion, Maximum Normal Stress Criterion), nízkocyklové metody (Smith – Watson – Topper (SWT) Model, Wang – Brown Model, Fatemi – Socie Model) [22].



## 6. Multibody Dynamics Module

S tímto modulem se simulují sestavy tuhých a pružných těles, které mají velké translačními a rotačními posuvy. V Multibody Dynamics Module je možné simulovat kinematickou analýzu mechanismů, určovat síly a momenty působící ve spojích nebo deformaci a napjatost v pružných součástech sestavy. Díky tomuto modulu je možné analyzovat časově závislé úlohy, používat nelineární materiály a kombinovat pružná a tuhá tělesa. Zatížení a podpory je zde možné definovat časově závislými funkcemi. [23].

Oblasti využití: robotika, mechatronika, dynamika vozidel a motorů, simulace obecné dynamiky mechanických sestav a další.

## 7. Acoustics Module

Díky tomuto modulu se řeší akustické úlohy. Acoustics Module zahrnuje oblasti tlakové akustiky, aeroakustiky (i v tekutinách), vlivu zvukových vln na tuhé konstrukce a termoakustiku. Je zde možné simulovat i vibrace a šíření tlakových vln v elastických a viskoelastických materiálech [4].

Oblasti využití: sluchové pomůcky, simulace ultrazvuku, zvukové snímače v MEMS, hlukové bariéry, návrh piezoelektrických snímačů, reakční a absorpční tlumiče, návrh sonaru a další.

## 4 MODEL PRO STANOVENÍ TOKU ČÁSTIC NA POVRCH MATERIÁLU

Cílem této bakalářské práce je navrhnout počítačový model, který může být využit pro stanovení velikosti toku elektricky nabitých částic na povrch materiálu z pevné látky. Navržený model, který bude popsán v následující kapitole, je založený na spojitě modelovací technice a simuluje chování plazmatu v okolí povrchu materiálu. Pro jednoduchost byl zvolen rovinný povrch, který umožňuje řešit problém jako jednodimenzionální. Model umožňuje stanovit nejen tok elektricky nabitých částic k povrchu, ale také koncentrace těchto částic a rozložení elektrického potenciálu v závislosti na vzdálenosti od materiálu.

### 4.1 Základní rovnice

Vytvořený model nahlíží na plazma jako na směs tří navzájem se prostupujících tekutin - tekutiny neutrálních atomů, tekutiny tvořené elektrony a tekutiny kladných iontů, které spolu vzájemně interreagují. Jako pracovní plyn je uvažován plyn argon. Matematicky je systém popsán pomocí soustavy tří diferenciálních rovnic – rovnice kontinuity pro elektricky nabitě částice a Poissonovo rovnicí pro popis elektrického pole. Soustava je doplněna počátečními a okrajovými podmínkami.

Zmíněné rovnice je možno zapsat ve tvaru

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot J_e = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot J_i = 0 \quad (4.2)$$

$$\Delta\varphi = -\frac{e}{\varepsilon_0}(n_i - n_e), \quad (4.3)$$

kde vektor elektrické intenzity je dán vztahem

$$E = -\nabla\varphi. \quad (4.4)$$

V rovnicích (4.1) – (4.4) použité symboly označují:  $n_e$  – koncentrace elektronů,  $n_i$  – koncentrace iontů,  $t$  – čas,  $\nabla$  – gradient,  $J_e$  – tok elektronů,  $J_i$  – tok iontů,  $\varphi$  – elektrický potenciál,  $e$  – elektrony,  $\varepsilon_0$  – permitivita vakua.

Toky elektronů a iontů je možno v drift-difúzní aproximaci vyjádřit jako součet toku částic pod vlivem elektrického pole a gradientu koncentrace

$$J_i = \mu_i n_i E - D_i \nabla n_i \quad (4.5)$$

$$J_e = -\mu_e n_e E - D_e \nabla n_e, \quad (4.6)$$

kde  $\mu_i$  je koeficient pohyblivosti iontů,  $\mu_e$  koeficient pohyblivosti elektronů,  $D_i$  difúze iontů,  $D_e$  – difúze elektronů a  $E$  – intenzita elektrického pole.

Koeficienty pohyblivosti  $\mu_i$ ,  $\mu_e$  a difúze  $D_i$  a  $D_e$  je možné vyjádřit ve tvarech

$$D_j = \frac{kT_j}{m_j v_{jn}} \quad (4.7)$$

$$\mu_j = \frac{e}{m_j v_{jn}}, \quad (4.8)$$

kde index  $j$  označuje veličiny vztahující se na elektrony (resp. ionty),  $v_{jn}$  označuje srážkovou frekvenci daného typu částice s neutrály.

V našem modelu jsme pro koeficienty difúze a pohyblivosti uvažovali hodnoty, které odpovídají plynu argonu:  $D_e = 340 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $\mu_e = 170 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,  $D_i = 0,012 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  a  $\mu_i = 0,46 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  [35].

Dosazením rovnic (4.4), (4.5) a (4.6) do rovnic (4.1) a (4.2) je možné soustavu diferenciálních rovnic (4.3) až (4.8) převést do soustavy tří diferenciálních rovnic se třemi neznámými  $n_e$ ,  $n_i$  a  $\varphi$ :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_e \nabla n_e) + \nabla \cdot (\mu_e n_e \nabla \varphi) = 0 \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla n_i) + \nabla \cdot (\mu_i n_i \nabla \varphi) = 0 \quad (4.10)$$

$$\Delta\varphi = -\frac{e}{\varepsilon}(n_i - n_e). \quad (4.11)$$

Odtud je možné po porovnání s rovnicemi obecně definovanými v programu COMSOL Multiphysics určit konkrétní koeficienty používané v tomto programu – viz tabulka 1.

**Tabulka 1:** Předpisy koeficientů pro tvorbu základního modelu plazmatu

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	$\frac{e \cdot (n_i - n_e)}{\varepsilon_0}$
$\alpha$	$-\mu_e \cdot \nabla\varphi$	$\mu_i \cdot \nabla\varphi$	
$\beta$	0	0	
$\gamma$	0	0	

## 4.2 Okrajové a počáteční podmínky

Nezbytnou součástí formulace problému jsou tzv. okrajové a počáteční podmínky. V případě tohoto modelu je nutné pro neznámé veličiny  $n_e$ ,  $n_i$  a  $\varphi$  zadat 6 okrajových podmínek.

### Okrajové podmínky pro elektrický potenciál

Počáteční hodnota elektrického potenciálu na sondě je rovna  $\varphi_0 = -20$  V. V modelu je tato hodnota interaktivně měněna (například při zjišťování voltampérové

charakteristiky, kde roste s každým krokem o 1 V až na hodnotu 10 V). V oblasti, kde je uvažováno neporušené plazma je zvolena okrajová podmínka  $\varphi_{\infty} = 0$  V.

### Okrajové podmínky pro koncentrace částic

Důležitou součástí zadání úlohy je správně zvolená okrajová podmínka pro koncentraci elektronů na okraji sondy. Na povrchu sondy je pro elektricky nabitě částice zvolena koncentrace  $n_{e0} = n_{i0} = 0$  m<sup>-3</sup>. Tato podmínka sice nevystihuje nejpřesněji podmínky reálného plazmatu, v případě potřeby je ji ale možno nahradit přesnějšími formulacemi (například von Neumannovo podmínkou pro tok elektricky nabitých částic). Na okraji pracovní oblasti, kde je předpokládáno neporušené plazma, je s ohledem na kvazineutralitu koncentrace elektronů rovna koncentraci iontů v elektrickém polem neovlivněném plazmatu, lze tedy psát  $n_{e\infty} = n_{i\infty} = 1 \times 10^{15}$  m<sup>-3</sup>.

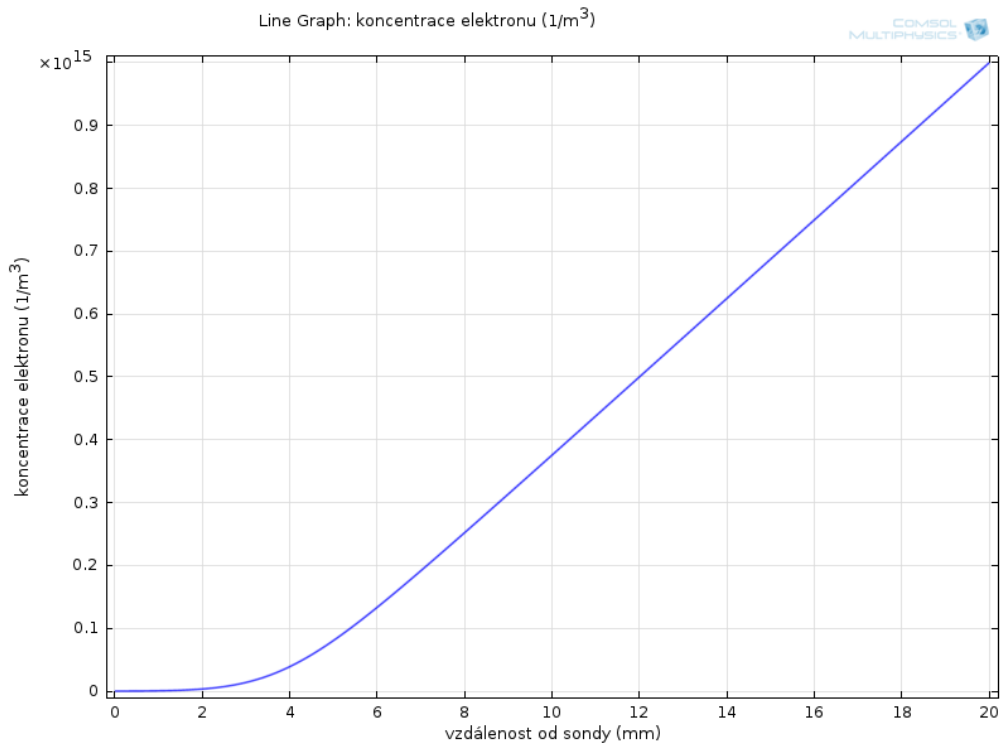
### Počáteční podmínky

Počáteční koncentrace elektronů a koncentrace kladných iontů je  $n_e^{t=0} = n_i^{t=0} = 0,1 \times 10^{15}$  m<sup>-3</sup>. Počáteční podmínka potenciálu je  $\varphi^{t=0} = -20$  V.

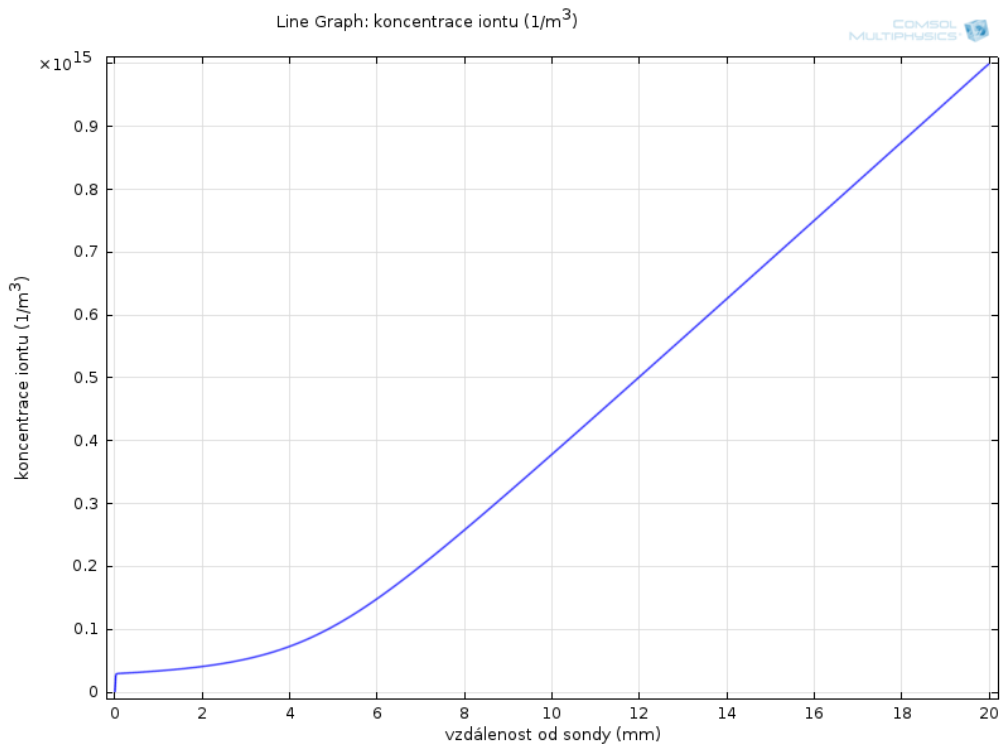
## 4.3 Výsledky

Model byl řešen jako jednodimenzionální případ, kdy pracovní oblastí byla úsečka kolmá k povrchu sondy. Jedním krajním bodem této úsečky byl bod ležící na povrchu a druhý krajní bod představoval bod ležící v oblasti neporušeného plazmatu. Délka úsečky byla zvolena jako 2 cm. Při výpočtech byla následně použita mřížka o velikosti jednoho prvku  $2 \cdot 10^{-5}$  m.

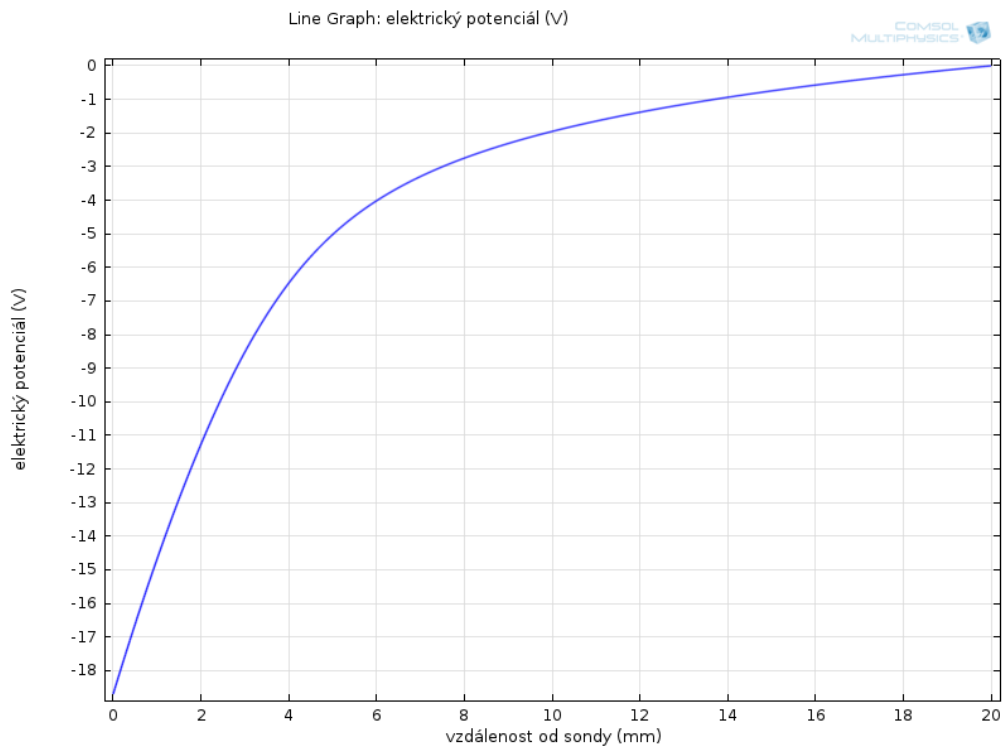
V tomto jednodimenzionálním modelu jsou všechny neznámé, tedy koncentrace elektronů  $n_e$ , koncentrace iontů  $n_i$  a elektrický potenciál  $\varphi$ , které jsou funkcemi prostorové souřadnice  $x$  a času  $t$ . Program COMSOL Multiphysics, jenž byl k řešení problému použit, umožňuje rovnou zobrazit rozložení koncentrace elektronů, iontů a elektrického potenciálu v závislosti na těchto veličinách. Získané výsledky jsou zobrazeny na obrázcích č. 9, 10 a 11.



**Obrázek 9:** Rozložení koncentrace elektronů  $n_e$  v závislosti na vzdálenosti  $x$  od povrchu. Velikost pracovní oblasti je 2 cm.



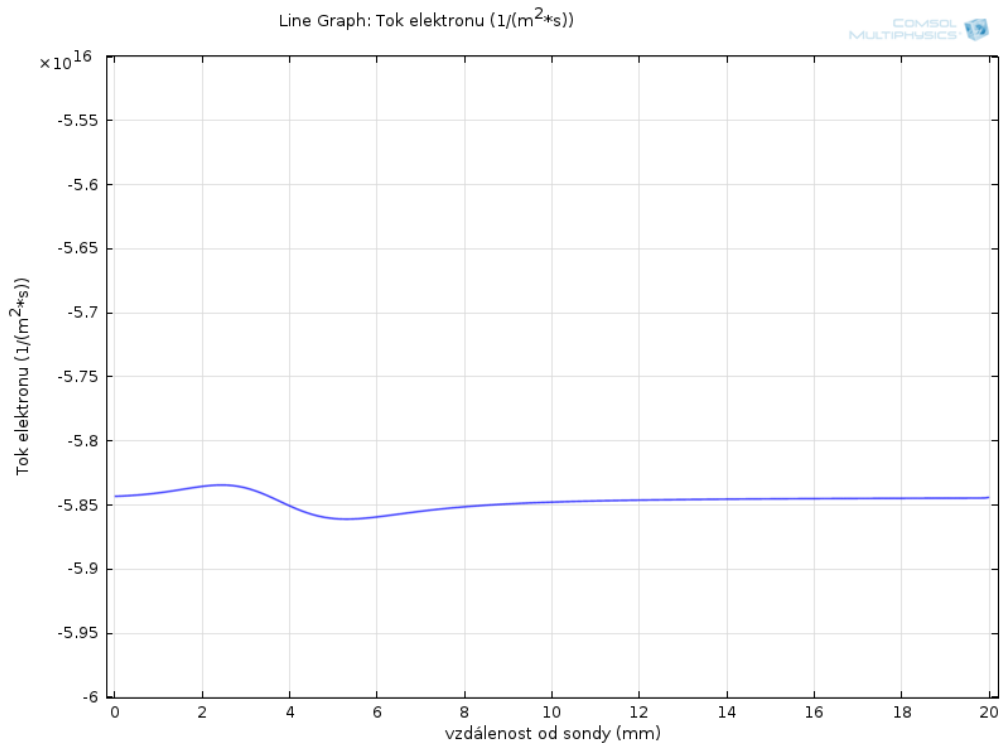
**Obrázek 10:** Rozložení koncentrace iontů  $n_i$  v závislosti na vzdálenosti  $x$  od povrchu. Velikost pracovní oblasti je 2 cm.



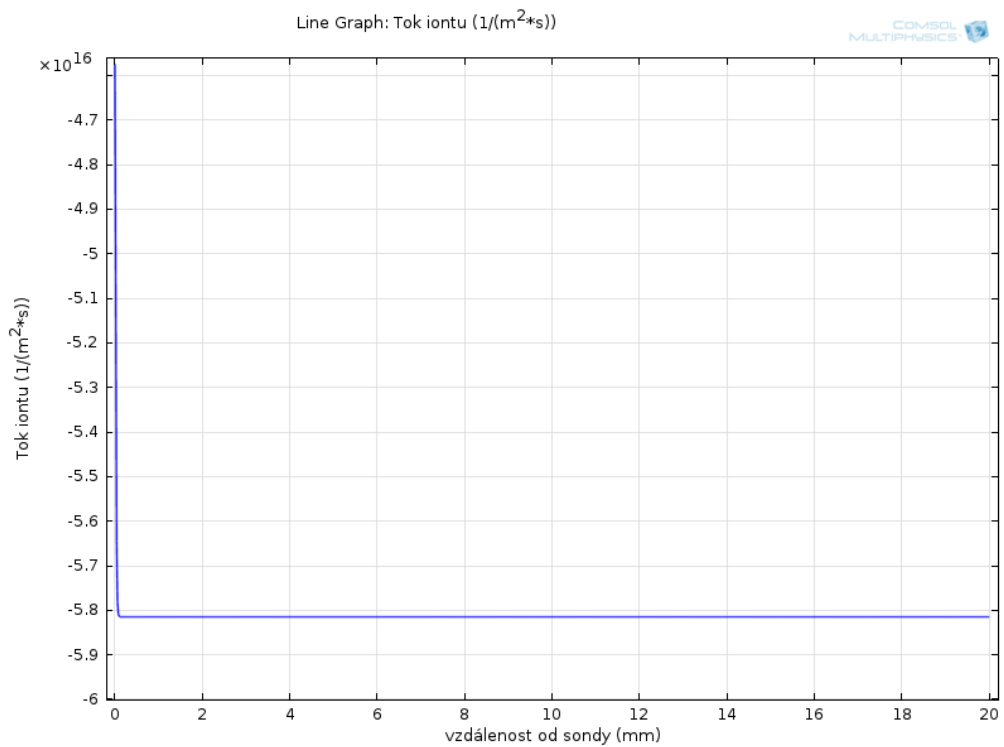
**Obrázek 11:** Rozložení potenciálu  $\varphi$  v závislosti na vzdálenosti od povrchu. Velikost pracovní oblasti je 2cm.

Vytvořený model umožňuje určit toky elektricky nabitých částic jako funkce polohy. Ukázkové výsledky jsou znázorněny na obrázku č. 12 a 13. Jak je z těchto obrázků patrné, v průběhu výpočtu vznikla numerická fluktuace toku částic. Byla vyzkoušena různá nastavení mříže a nakonec byla zvolena velikost základní buňky. Vhodnou volbou mříže je možné tyto fluktuace eliminovat, v našem případě byla zvolena velikost základní buňky na  $2 \cdot 10^{-5}$  m. Pro tuto velikost byla fluktuace nejmenší. Předpokládá se, že v ustáleném stavu bude vycházet tok konstantní, nezávislý na poloze. Tok iontů je znázorněny na obrázku č 13.

Z obrázků č. 12 a 13 je zároveň patrné, že tok elektronů i tok kladně elektricky nabitých iontů vychází záporný. Částice se tedy pohybují ve směru záporné osy x. U obou toků vycházejí záporné hodnoty, což je způsobeno ionty, směřujícími doleva (do záporného směru).



**Obrázek 12:** Rozložení toku elektronů  $J_e$  v závislosti na vzdálenosti od povrchu. Velikost pracovní oblasti je 2cm. Měření bylo prováděno pro potenciál -18,7 V.



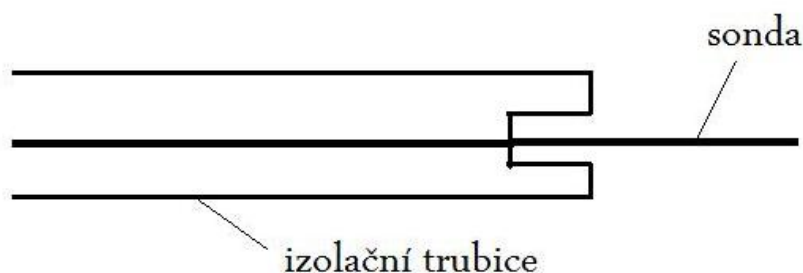
**Obrázek 13:** Rozložení toku iontů  $J_i$  v závislosti na vzdálenosti od povrchu. Velikost pracovní oblasti je 2cm. Měření bylo prováděno pro potenciál -18,7 V.



## 4.4 Určení voltampérové charakteristiky pomocí modelu

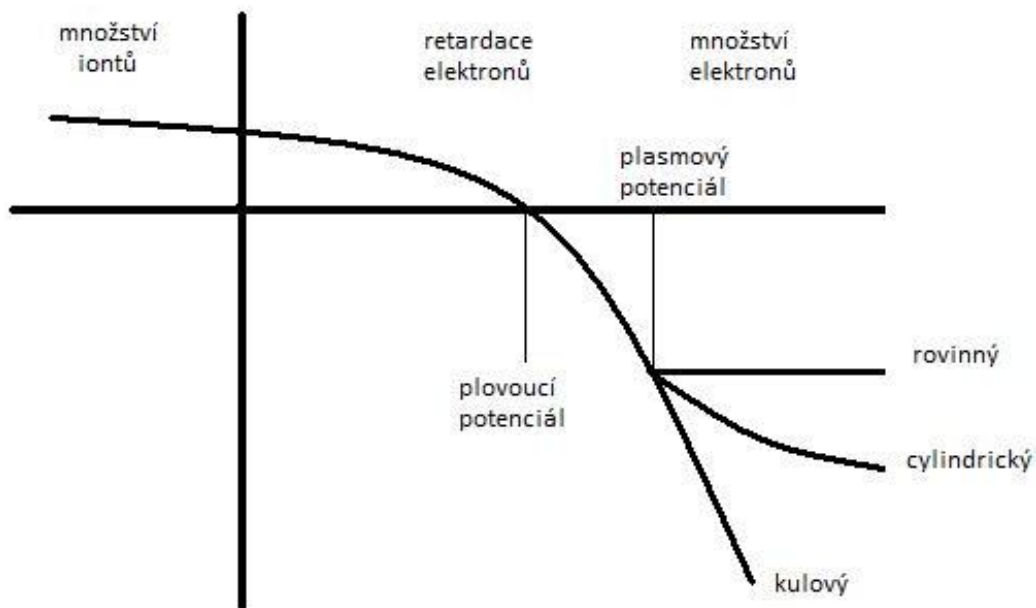
Vytvořený model byl využit ke stanovení voltampérové charakteristiky. Pro tento účel se postupovalo tak, že se postupně měnila hodnota elektrického potenciálu na povrchu z hodnoty -25 V až na hodnotu +10 V a to s krokem 1 V. Následně byl určen celkový tok elektrického náboje k povrchu.

Experimentálně byla voltampérová charakteristika studována poprvé pány Langmuirem a Mott-Smittem [24]. Tato metoda spočívá v tom, že do plazmatu, které se vyskytuje v elektrickém poli, je umístěna speciálně upravená elektroda (sonda). Procházející proud sondou je snímán a výsledek je zaznamenáván do voltampérové charakteristiky znázorněné na obrázku č. 15



**Obrázek 14:** Příklad sondy (překresleno z [24]).

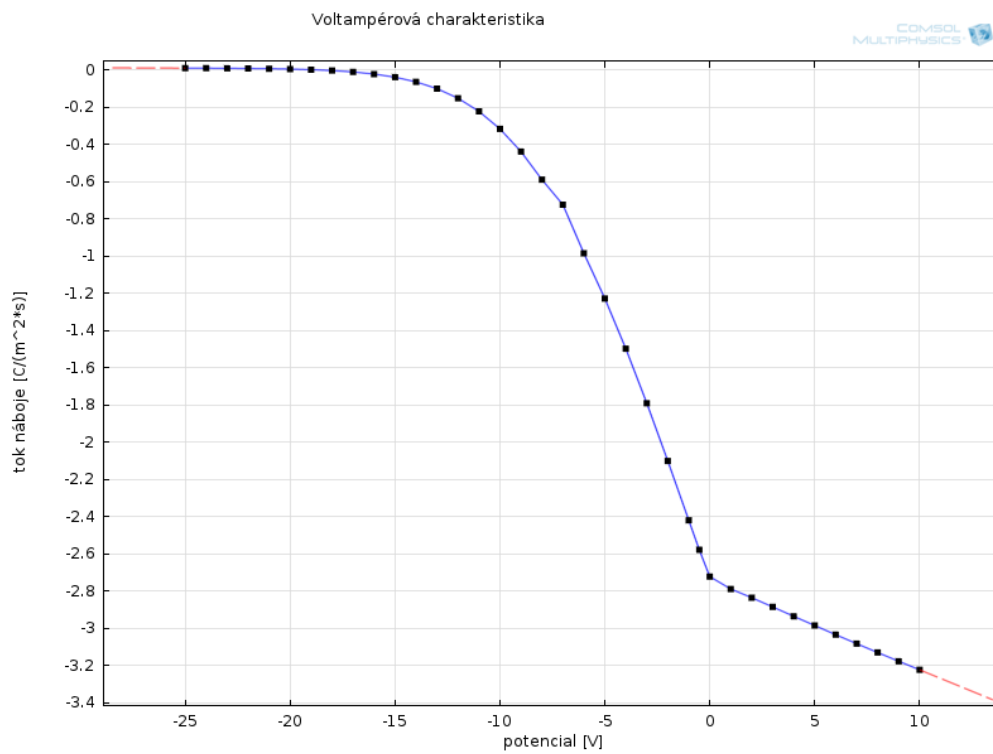
Jde o metodu aktivní, musí se proto zohlednit tvar, velikost a vlastnosti materiálu, z něhož je sonda vyrobena. Na sondu bylo přivedeno napětí a jeho změnou při měření proudu je možné získat voltampérovou charakteristiku (v některých publikacích také nazývanou sondovou charakteristiku). Ze sondového proudu je možné zjistit (při známém sondovém napětí) parametry plazmatu, jako jsou například potenciál plazmatu, teplota elektronů a koncentrace elektronů.



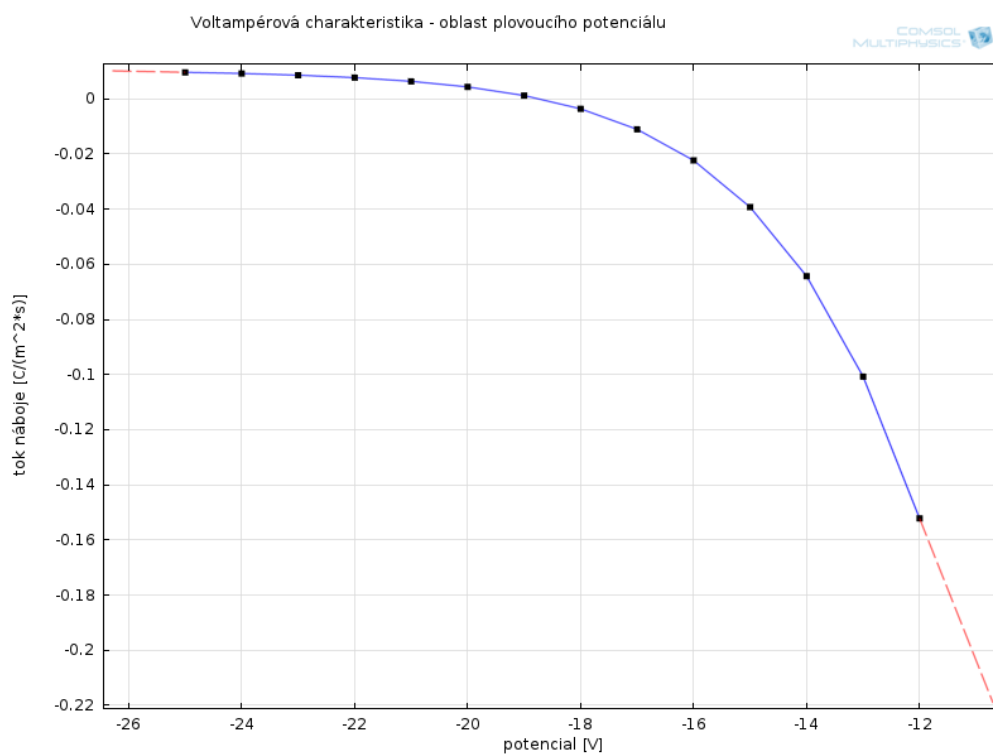
**Obrázek 15:** Příklad sondové charakteristiky (překresleno z [24]).

Na obrázku č. 15 je znázorněna ukázková charakteristika v oblasti nasyceného elektronového proudu a závislost jejího průběhu na tvaru sondy. Zobrazením této charakteristiky v logaritmickém grafu je možné ze směrnice tečny určit elektronovou teplotu  $T_e$ . Z elektronové teploty je následně možné spočítat koncentraci elektronů případně další charakteristiky plazmatu. Díky této metodě je možné najít a stanovit potenciál plazmatu [24].

V následujících obrázcích č. 16 a 17 jsou zobrazeny voltampérové charakteristiky, které byly získány řešením modelu. Obrázek č. 17 pak zobrazuje detailně oblast, kde tok náboje dosáhne nulové hodnoty. Jak je z obrázků patrné, tak hodnota plovoucího potenciálu, v případě predikovaného modelu, odpovídá hodnotě  $-18,7\text{ V}$



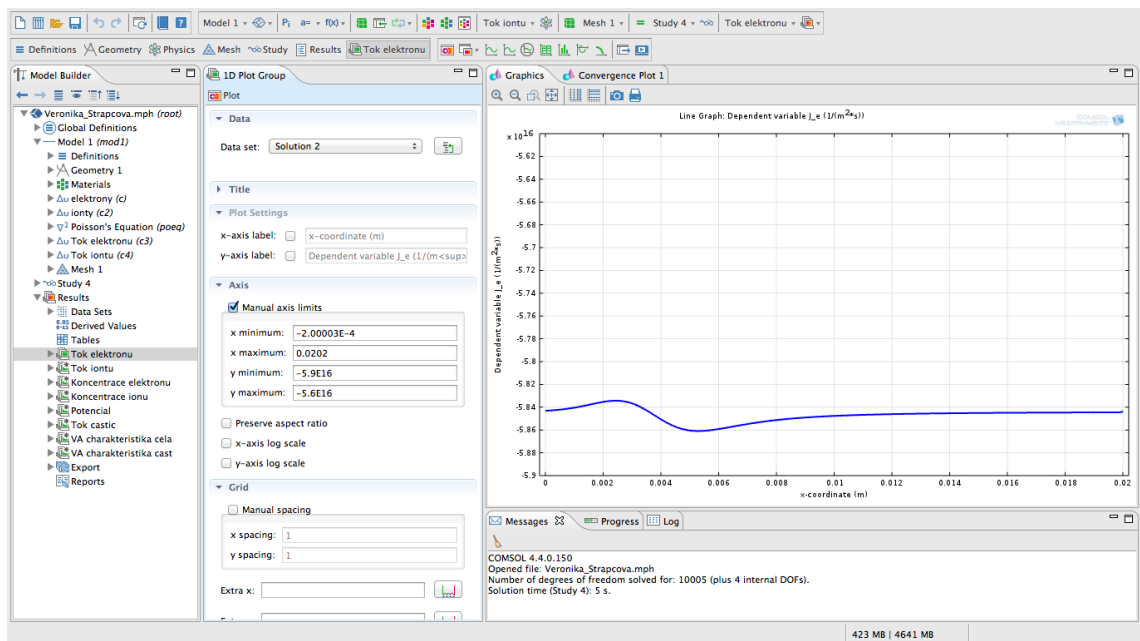
**Obrázek 16:** Graf voltampérové charakteristiky v rozmezí -25 V až 10 V



**Obrázek 17:** Graf voltampérové charakteristiky v rozmezí -25 V až -10 V.

Sondová měření jsou nejrozšířenější metodou při zkoumání plazmatu, neboť přes svoji jednoduchost poskytují celou řadu plazmatických parametrů. Největší nevýhodou je velká chyba metody, která představuje hrubý zásah do plazmatu přes veškerou snahu o jeho minimalizaci [24].

Výpočet byl realizován na běžné pracovní stanici a jedna kalkulace trvala v průměru 5 s. Na obrázku č. 18 je ukázka jedné konfigurace.



**Obrázek 18:** Ukázka pracovního okna programu s vytvořeným modelem.

## **Závěr**

Předložená bakalářská práce shrnuje základní poznatky z několika oblastí. V první části se jedná o poznatky z oblasti interakce nízkoteplotního plazmatu s povrchem materiálu. Následně jsou představeny základní postupy pro počítačové modelování této interakce a softwarové produkty, které je možné pro tento účel využít. V praktické části práce je popsán vlastní model, který byl vytvořený v programu COMSOL Multiphysics. Pomocí tohoto modelu byly určeny hodnoty toku elektricky nabitých částic na rozhraní plazma - materiál a to při různých předpětích na povrchu.

Jsem přesvědčena, že tato bakalářská práce usnadní práci budoucím diplomantům a zájemcům o počítačové modelování. Při psaní této práce byl kladen důraz na uvedení poznatků, které pomohou zorientovat se v programech užívaných v této oblasti a v základních modelovacích technikách.

## Seznam použité a citované literatury

- [1] <http://fykos.cz/rocnik26/serial/serial1.pdf>, 18.12.2014
- [2] HALLIDAY D., RESNICK R., WALKER J. Fyzika část 5 Moderní fyzika, Brno: Vutium, Praha: Prometheus, 2000
- [3] KULHÁNEK PETR, ROZEHNAL JAKUB Hvězdy, planety, magnety. Praha: Mladá fronta, 2007, str. 13 – 37
- [4] MARTIN, M. PETER, Handbook on Deposition Technologies for Films and Coatings, Elsevier, United States, 2010
- [5] BARTOŠ PETR, HRACH RUDOLF, *On computer simulations of glow discharges in low – temperature plasma*, JČU České Budějovice a MFF UK Praha
- [6] BARTOŠ PETR, *Hybridní modelování ve fyzice plazmatu*, dizertační práce, MFF UK v Praze, Praha, 2003
- [7] <http://www.humusoft.cz/produkty/matlab/matlab/> 11.3.2014
- [8] <http://www.comsol.com/release/4.4#toc> 25.4.2014
- [9] <http://www.humusoft.cz/produkty/matlab/simulink/> 11.4.2014
- [10] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/comsol/> 11.3.2014
- [11] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/plasma/> 4.4.2014
- [12] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/rf/> 4.4.2014
- [13] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/wave-optics/> 4.4.2014
- [14] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/semiconductor/> 4.4.2014
- [15] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/cfd/> 8.4.2014
- [16] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/mixer-module/> 8.4.2014
- [17] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/subsurface-flow/> 9.4.2014
- [18] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/pipe-flow/> 9.4.2014
- [19] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/heat-transfer/> 9.4.2014
- [20] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/geomechanics/> 9.4.2014
- [21] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/fatigue/> 9.4.2014
- [22] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/multibody-dynamics/> 9.4.2014
- [23] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/acoustics/> 9.4.2014
- [24] <http://atrey.karlin.mff.cuni.cz/~marble/d/?p=2> 25.6.2014
- [25] KREJČÍ VÁCLAV Plazma, čtvrté skupenství hmoty. Praha: Orbis, 1974
- [26] PISTORIUS VLADIMÍR Jak se chytá slunce. Praha: Albatros, 1981
- [27] KULHÁNEK PETR Blýskání. Praha: AGA, 2011
- [28] BEISER ARTHUR, Úvod do moderní fyziky, Brno: Academia, 1978m
- [29] <http://www.deskeng.com/de/an-introduction-to-multiphysics/> 11.4.2014

- [30] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/> 11.3.2014
- [31] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/acdc/> 4.4.2014
- [32] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/mems/> 4.4.2014
- [33] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/microfluidics/>  
8.4.2014
- [34] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/molecular-flow/>  
9.4.2014
- [35] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/structural-mechanics/> 9.4.2014
- [36] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/nonlinear-structural-materials/> 9.4.2014
- [37] <http://www.humusoft.cz/produkty/comsol/moduly/nonlinear-structural-materials/> 9.4.2014
- [38] <http://www.uni plasma.cz/modifikace/> 25.4.2014.