

JIHOČESKÁ UNIVERZITA V ČESKÝCH BUDĚJOVICÍCH

PEDAGOGICKÁ FAKULTA

KATEDRA FYZIKY

**Počítačové modelování
ve fyzice plazmatu**

Diplomová práce

Autor: Bc. Vojtěch Soukup

Vedoucí práce: RNDr. Petr Bartoš, Ph. D.

2009

Anotace

Diplomová práce má rešeršní formu. Práce obsahuje obrázky, tabulky, barevné grafy. Cílem práce je zmapovat základní poznatky v oblasti vývoje počítačové fyziky a možnost jejího následného využití při řešení, či modelování reálných problémů ve fyzice plazmatu. Součástí práce je porovnání jednotlivých přístupů při modelování plazmatu.

Abstract

This thesis is in the form of a background research. It contains pictures, schemes and colored graphs. The aim is to chart basic findings in the area of progress in computer physics and the possibility of their subsequent usage or the simulation of real problems in plasma physics. The component of my thesis is a comparison of particular accesses in the course of plasma simulation.

Prohlášení:

Prohlašuji, že svoji diplomovou práci jsem vypracoval 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 diplomové práce, a to v nezkrácené podobě elektronickou cestou ve veřejně přístupné části databáze STAG, provozované Jihočeskou univerzitou v Českých Budějovicích, na jejích internetových stránkách.

.....
datum

.....
podpis

Poděkování

Za nevšední ochotu a pomoc, za cenné rady a konzultace děkuji vedoucímu práce RNDr. Petru Bartošovi, Ph.D. Rovněž bych chtěl poděkovat rodičům za dostatek trpělivosti.

Obsah

Úvod	7
1 Plazma	8
1.1 Fyzikální pohled na plazma aneb co považujeme za plazma	8
1.2 Tekutinový pohled na plazma.....	10
1.3 Metody diagnostiky plazmatu.....	12
1.3.1 Metoda sondová.....	12
1.3.2 Vysokofrekvenční (mikrovlnné) metody.....	13
1.3.3 Optické metody.....	14
1.4 Využití výpočetní techniky v plazmatu	15
1.5 Využití počítačové fyziky při simulacích plazmatu za přítomnosti magnetického pole	16
1.5.1 Magnetohydrodynamika	16
1.5.2 Zkoumání slunečního maxima.....	17
1.5.3 Meziplanetární prostředí	19
1.5.4 Projekt ITER.....	19
2 Počítačové modelování plazmatu	22
2.1 Základní historické milníky počítačové fyziky	22
2.1.1 Hardware - Jak to bylo kdysi dávno	22
2.1.2 Hardware - Koncepce von-Neumanna.....	23
2.1.3 Software – vhodný programovací jazyk	24
2.1.4 Software – vhodný operační systém	25
2.1.5 Režim práce výpočetní techniky.....	26
2.2 Počítačové modelování	27
2.2.1 Částicový model	28
2.2.2 Spojitý model.....	29
2.2.3 Hybridní model.....	29
3 Částicový model pro řešení plazmatu	30
3.1 Metody modelování částic v praxi.....	30
3.2 Metoda Monte Carlo	31
3.2.1 Postup při použití metody Monte Carlo.....	32

3.3	Metoda molekulární dynamiky.....	33
3.3.1	Pracovní oblast.....	34
3.3.2	Algoritmy pro řešení soustavy diferenciálních rovnic.....	35
3.3.3	Půlkrokový algoritmus pro magnetické pole.....	36
3.4	Metoda P-I-C.....	37
3.5	Shrnutí poznatků o částicových technikách.....	41
4	Spojité modely pro řešení plazmatu.....	42
4.1	Boltzmannova rovnice.....	42
4.2	Tekutinné modely.....	44
4.3	Shrnutí poznatků o spojitých technikách.....	45
5	Hybridní modelování.....	46
5.1	Energetický model.....	48
5.2	Prostorový model.....	50
5.3	Iterační model.....	51
6	Porovnání jednotlivých modelů v praxi.....	53
6.1	Tekutinný model.....	53
6.2	Monte Carlo simulace.....	55
6.3	Particle-in-Cell-Monte Carlo Collisions (PIC-MCC) simulace.....	57
6.4	Hybridní model Monte Carlo spojený s tekutinovým modelováním.....	58
6.5	Shrnutí jednotlivých používaných metod.....	60
Závěr	62
Literatura	63

Úvod

Téma diplomové práce „Počítačové modelování ve fyzice plazmatu“ jsem si vybral, jelikož mě od útlého mládí fascinuje využití počítačové techniky v praxi. Cílem práce je shrnout základní poznatky o počítačové fyzice a její využití ve fyzice plazmatu.

Počítačová fyzika je poměrně široký vědní obor, který se zabývá počítačovým modelováním, počítačovou grafikou a vizualizací, zpracováním obrazu, zpracováním dat a integrálními transformacemi. Z těchto oblastí má v počítačové fyzice výsadní postavení počítačové modelování. Je to technika používaná fyziky různých specializací nejčastěji, protože jim poskytuje často neocenitelnou pomoc při experimentálním i teoretickém studiu nejrůznějších fyzikálních jevů a procesů.

V mé práci se nejprve zaměřím na lehkou historickou exkurzi do vývoje počítačové fyziky. V následujících kapitolách se budu věnovat nejpodstatnějším dosud získaným poznatkům, týkajícím se počítačového modelování fyziky plazmatu. Nejprve shrnu modelovací techniky, a pak se zaměřím na jejich uplatnění v reálných problémech a nezapomenu zhodnotit jejich jednotlivé výhody, či problémy, se kterými se můžeme setkat.

1 Plazma

Plazma je kvazineutrální soubor částic s volnými nosiči nábojů, který vykazuje kolektivní chování [5]. Základním problémem je, jak na plazma nahlížet. Plazma se může chovat jako tekutina, nebo jako soubor jednotlivých částic. Záleží, které vlastnosti v daném okamžiku převládnu, je to podobné jako u světla. Plazma označujeme za čtvrté skupenství hmoty.

1.1 Fyzikální pohled na plazma aneb co považujeme za plazma

Podívejme se na to, proč se plazma v pozemských podmínkách nevyskytuje tak často. Důvod vyplývá ze Sahovy rovnice [9], udávající stupeň ionizace plynu v tepelné rovnováze:

$$\frac{n_i}{n_g} \approx 2,4 \times 10^{21} \frac{T^{\frac{3}{2}}}{n_i} \exp\left(-\frac{U_i}{kT}\right), \quad (1.1)$$

kde n_i - hustota iontů a n_g - hustota neutrálních částic, U_i - ionizační potenciál plynu, T - teplota. V našich pozemských podmínkách (např. v pokoji) se ukazuje, že tento poměr má hodnotu 10^{-122} [9]. S růstem teploty se automaticky nezačne zvyšovat stupeň ionizace. Vše se začne měnit v momentě, kdy U_i začne být porovnatelné s kT . Díky tomu poměr roste velmi rychle, hustota iontů (n_i) převýší hustotu neutrálních částic (n_g) a plazma se stává plně ionizované, proto se plazma snáze vyskytuje v oblastech s velmi vysokou teplotou.

V neutrálním plynu se částice pohybuje nerušeně až do srážky s jinou částicí, pokud na ní nepůsobí pole. Ukazuje se, že nejen srážky rozhodují o pohybu částic. Ty při svém pohybu vytvářejí místní prostorový náboj s pozitivní, či negativní vodivostí a to má za následek vznik elektrických polí. Elektrické pole má velký dosah, a proto ovlivňuje pohyb částic i na hodně vzdálených místech.

Základní vlastností plazmatu je schopnost odstínit elektrické pole. Tato vlastnost je známá jako Debyeovské stínění a je charakterizována veličinou Debyova délka, pro kterou platí vztah:

$$\lambda_D = \left(\frac{\varepsilon_0 k T_e}{ne}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.2)$$

Je-li rozměr systému L , tak podmínky kvazineutality, tedy toho, že n_i je přibližně rovno n_g , pokud nastane rovnost elektromagnetické síly vymizejí, je:

$$L \gg \lambda_D. \quad (1.3)$$

Aby měl výraz pro potenciál smysl, musí být ve stínící vrstvě dostatek částic, a to nám zajistí podmínka pro počet částic v tzv. Debyeovské vrstvě:

$$N_D = n \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3 \gg 1. \quad (1.4)$$

Z těchto úvah stanovme podmínky, abychom ionizovaný plyn mohli nazvat plazmatem:

$$L \gg \lambda_D, \quad (1.5)$$

$$N_D \gg 1, \quad (1.6)$$

$$\omega T > 1, \quad (1.7)$$

kde první dvě podmínky vyplývají z úvah uvedených výše. Rovnice 1.7 označuje poslední podmínku, kde ω je frekvence klasických oscilací a T je střední doba mezi srážkami. Ukazuje se, že díky ostré nerovnosti je ionizovaný plyn více ovlivněn působením elektromagnetických sil, než srážkami samotnými.

Plazma má mnoho různých podob, které sice splňují i kritéria plazmatu, ale přesto se liší natolik, že vyžadují odlišné způsoby studia. Základní dělení plazmatu převezmeme z odborné literatury [5].

Podle míry ionizace dělíme plazma na slabě ionizované a silně ionizované. Ve slabě ionizovaném plazmatu je koncentrace nabitých částic o několik řádů menší, než koncentrace neutrálních částic. Nabité částice se sráží s neutrálními částicemi. V silně ionizovaném plazmatu se naopak koncentrace neutrálních částic blíží nule. Zde jsou dominantní interakce mezi nabitými částicemi. Toto dělení má velký fyzikální význam. Srážky nabitých částic s neutrálními částicemi ve slabě ionizovaném plazmatu jsou dané silami, které mají velmi krátký dosah. Nabité částice v silně ionizovaném plazmatu na sebe působí Coulombovou silou, a ta může působit i na dálku. Díky tomu se vlastnosti slabě a silně ionizovaného plazmatu výrazně liší.

S vysokoteplotním plazmatem se setkáváme v kosmu, v laboratorních podmínkách a mezi něj patří i plazma vytvořené v důsledku termionizace. Ukázkou nízkoteplotního plazmatu je například doutnavý výboj.

Vlastnosti plazmatu jsou ovlivněny celou řadou parametrů. Jedním z nich, zřejmě nejvýraznějším, je vliv tlaku. Zvyšování tlaku ovlivňuje celou řadu parametrů, například: stupeň ionizace s rostoucím tlakem většinou klesá, objemová koncentrace nabitých částic s tlakem obvykle roste, protože roste výrazně celková koncentrace částic. Rostoucí tlak většinou zapříčiní změnu v poměru koncentrací jednotlivých složek. S tím úzce souvisí změna v zastoupení jednotlivých srážkových procesů. Většinou dochází ke zvyšování průměrného počtu srážek v objemu. Ukazuje se, že rostoucí počet srážek představuje velkou časovou náročnost při zpracování modelu pomocí výpočetní techniky, proto se v počítačovém modelu snažíme mít tlak na nižších hodnotách, pokud to situace umožňuje. V reálných procesech se snažíme mít co nejvyšší tlak, abychom mohli pracovat při atmosférickém výboji, protože je to ekonomicky výhodnější a nemusíme pořizovat další podpůrná zařízení, například čerpadla.

Dalším významným parametrem, který ovlivňuje chování plazmatu je jeho teplota. Podle teploty se plazma jen velmi těžko dělí, protože teplota uvnitř plazmatu není všude stejná a reálně má i několik teplot najednou. Obvykle dělíme plazma na izotermické a na neizotermické. U izotermického plazmatu mají ionty a elektrony shodnou teplotu (platí i pro energii), u neizotermického plazmatu mají elektrony výrazně vyšší teplotu a i energii. Každá složka plazmatu (elektrony, různé druhy iontů a neutrály) může mít vlastní energetické rozdělení, kterému odpovídá příslušná teplota. Příčinou je příliš malá frekvence srážek mezi částicemi různého druhu, která nestačí k dosažení celkové tepelné rovnováhy. Teploty různých složek plazmatu se mohou lišit i o několik řádů. S tímto jevem se často setkáváme v nízkoteplotním plazmatu, které je slabě ionizované. Velmi často pracujeme s nízkoteplotním plazmatem, ve kterém je teplota iontů a neutrálních částic přibližně stejná 300 K (pokojová teplota), zatímco teplota elektronů je 23 000 K.

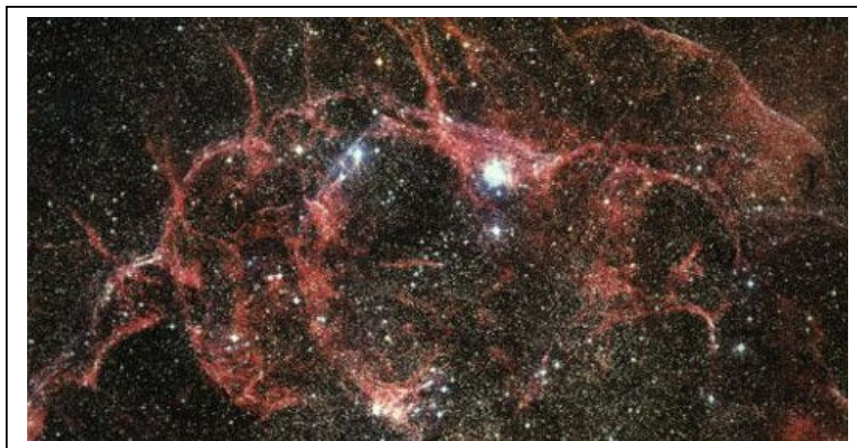
1.2 Tekutinový pohled na plazma

Plazmatem ve fyzice označujeme čtvrté skupenství hmoty, ve kterém se látka může za určitých podmínek vyskytovat, a to nejen v laboratoři, ale i v běžné přírodě. Ač s podivem, většina hmoty ve vesmíru se nachází v plazmatickém stavu. Podle některých odhadů je to více než 99 %. Nitra i atmosféry hvězd jsou ve formě plazmatu, jak je patrné z obrázku 1.1. Na Zemi je výskyt plazmatu poměrně vzácný. Většinou je omezen na polární záři, úder blesku, výboj obloukové lampy, světlo ve výbojkách a

neonových reklamách. Zjednodušeně řečeno, plazma je elektricky vodivý plyn, v němž jsou atomy, elektrony, ionty, případně molekuly. Atomy se mohou nacházet v základní formě, nebo mohou být i excitované [5]. Ukazuje se, že tato formulace není vůbec přesná a je lehce zavádějící, protože v každém plynu se vyskytují ionizované částice, a tudíž je do jisté míry ionizován. Navíc nositeli záporného náboje nemusí být pouze elektrony, ale i záporné ionty. Přesná definice říká, že plazma je kvazineutrální plyn nabitých a neutrálních částic v různém kvantovém stavu, který vykazuje kolektivní chování [11]. V této definici se vyskytují dva zásadní pojmy. Je to jednak pojem kolektivní chování a kvazineutrální.

Pojem kolektivní chování je úzce spjat s výskytem a pohybem nabitých částic v plazmatu. Při pohybu nabitých částic mohou v plazmatu vznikat místa s rozdílnou lokální koncentrací kladného a záporného náboje. Příмым důsledkem existence těchto nábojů je vznik elektrických polí, která ovlivňují pohyb ostatních nabitých částic nacházejících se i na vzdáleném místě. Je známo, že elektrické pole působí na nabitě částice Coloubovskou silou. Díky ní dochází k ovlivňování pohybu i vzdáleně nabitých částic. Je tedy vidět, že pod pojmem kolektivního chování rozumíme pohyby částic v plazmatu, které nejsou ovlivňovány pouze podmínkami v jejich blízkém okolí, ale jejichž pohyb je rovněž ovlivňován stavem plazmatu ve vzdálených oblastech.

Plazma považujeme za kvazineutrální platí-li, že koncentrace kladných a záporných nositelů elektrického náboje je přibližně stejná.



Obrázek 1.1: Pozůstatky po explozi supernovy v Plachtách [15].

1.3 Metody diagnostiky plazmatu

Nejvíce nás bude zajímat, jaké máme možnosti při detekování přítomnosti plazmatu. Existují dvě základní skupiny vlastností (parametry) plazmatu, které nám ovlivní další diagnostiku plazmatu [2]:

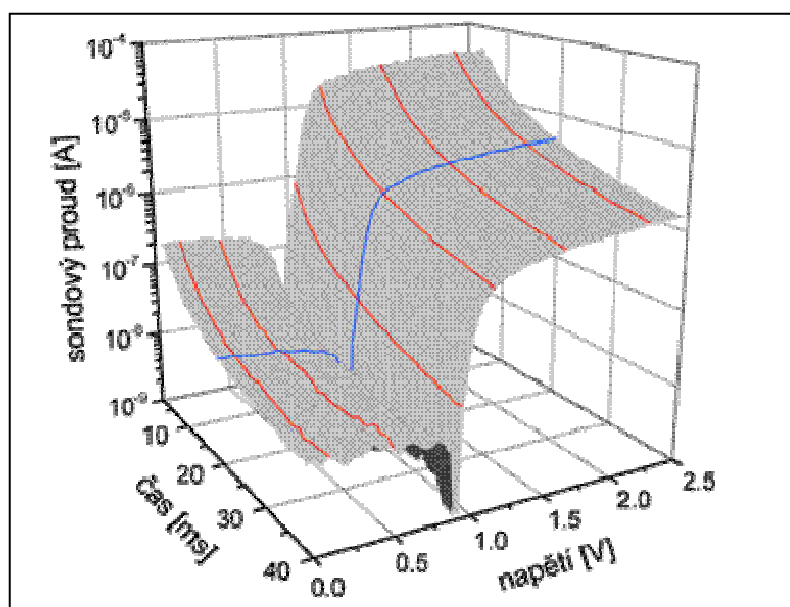
- ❑ Vnější parametry – ovlivňují vlastnosti plazmatu zvenku. Mezi nejvýznamnější parametry patří: tlak, vlhkost, driftová rychlost částic, intenzita elektrického, či magnetického pole. Obecně můžeme říci, že tyto parametry ovlivňují plazma jako celek.
- ❑ Vnitřní parametry – ovlivňují vlastnosti plazmatu uvnitř. Řadíme sem následující parametry: koncentrace jednoho druhu částic, jejich teplota, rychlost. Dále nás zajímá např. střední srážková frekvence. Pochopitelně těchto parametrů jsou desítky.

Metody diagnostiky plazmatu se dělí podle různých kritérií, například podle toho jakým způsobem data získáváme [1, 2].

1.3.1 Metoda sondová

Sondové metody jsou těmi nejstaršími, které se k diagnostice plazmatu používají. Patří mezi nejjednodušší a nejvíce používanou metodu diagnostiky plazmatu. Do plazmatu vložíme sondu. Prakticky se jedná o vodič, či soustavu vodičů, které mají elektrické předpětí. Problém této metody je, že sondu musíme vložit do plazmatu. Tato sonda nám plazma ovlivní, a to v praxi znamená, že bude důležitá velikost sondy, její tvar a materiál, ze kterého je zhotovena. Výsledkem měření bývají převážně voltampérové charakteristiky, které musíme správně interpretovat a velmi často korigovat. Ve většině případech se stává, že se díky tomu změní některé vnitřní parametry plazmatu, a proto je chyba metody značná. K největšímu ovlivnění dochází v okolí sondy. Jak již bylo zmíněno, sonda ovlivňuje plazma tím, že v okolí sondy „vysává“ elektrický náboj, dále dochází k fotoemisi elektronů z jejího povrchu a vznikají v plazmatu nehomogenní oblasti. Můžeme se setkat i s dalšími ovlivněními. Pokud vezmeme čisté plazma a vložíme do něj metalickou sondu, ze které se rozprašují jednotlivé skupiny atomů, dochází k tomu, že plazma obsahuje prachové částice. Aby nám sonda narušila zkoumané plazma co nejméně, musíme volit vhodné (nejlépe jednoduché) tvary sondy. Ukážeme si praktické použití a získané výsledky z jednoho typu sond.

V praxi je výhodné získané experimentální charakteristiky porovnat s výsledky počítačových simulací. Reálně se musí tyto experimentální hodnoty porovnat s nasimulovanými hodnotami, které provádíme za pomoci počítačové fyziky. Na MFF UK v Praze se sondová měření využívají zejména v experimentech FALP (Flowing Afterglow Langmuir Probe). Ukázkový výstup z experimentu je zobrazen na obrázku 1.2.



Obrázek 1.2: Ukázka měření plazmatických parametrů sondou na příkladu FALP [16].

Jedná se o graf, který fyzikům umožňuje se dozvědět o plazmatu další informace. Z grafu lze získat závislost proudu na napětí v libovolném časovém úseku.

1.3.2 Vysokofrekvenční (mikrovlnné) metody

Vysokofrekvenční metody dělíme na aktivní a pasivní.

- **Aktivní metody** – vystavují plazma vysokofrekvenčnímu poli. Jsou založeny na měření změn konstanty šíření (útlumu i fáze) po průchodu vlny plazmatem. Z těchto změn je možné určovat různé parametry, například koncentraci. Plazma jakožto vodivé prostředí vede vysokofrekvenční signál. V důsledku vlastností plazmatu existuje tzv. plazmatická frekvence. Hodnota plazmatické frekvence je úzce spjata s koncentrací částic v plazmatu, a to nepřímou úměrou. Tohoto efektu

můžeme využít například tehdy, existují-li v plazmatu vedle sebe oblasti o různých koncentracích – od míst s nadkritickou koncentrací se dopadající mikrovlny odráží, a my získáme tzv. „stroboskopický obrázek“. Pokud se dopadající vysokofrekvenční elektromagnetická vlna od plazmatu neodrazí a začne jím procházet, dochází k jejímu zeslabování s rostoucí dráhou uraženou v plazmatu. Parametr, který udává zmenšování elektrické, resp. magnetické složky vlny podél dráhy, označujeme γ a nazýváme jej konstanta šíření. V praxi si jej představme jako komplexní číslo, jehož reálná složka je tvořena útlumem, který představuje změnu amplitudy, zatímco imaginární složka se mění s fází.

- ❑ **Pasivní metoda** – spočívá v detekci a zkoumání mikrovlnného záření vydávaného plazmatem v důsledku urychlení elektronů v poli atomů či iontů. V plazmatu navíc detekujeme tzv. šumový proud způsobený náhodným pohybem elektronů, což způsobíme jejich urychlením. Změříme-li tento proud, můžeme určit i šumovou teplotu, kterou za určitých předpokladů, považujeme za teplotu elektronovou.

Srovnáme-li četnost použití této metody a metody sondové, ukazuje se, že metoda sondová se používá častěji k určení teploty elektronů, protože je celkově méně náročná.

1.3.3 Optické metody

Optické metody mohou fungovat jak v aktivní podobě, kdy plazma z vnějšku ozařujeme optickým pásmem a pozorujeme vzájemné srážky, tak i v pasivní formě, která spočívá v analýze a vyhodnocení spektra detekovaného z plazmatu. Nejrozšířenější metoda je optické emisní spektroskopie, která je založená na detekci a analýze záření emitovaného excitovanými částicemi v plazmatu. Příkladem jejího užití je určování vibračních a rotačních teplot na základě změřené intenzity emitovaného záření. Rotační teplota má navíc velký význam proto, že se její hodnotou aproximuje hodnota teploty neutrálních částic, která má zásadní vliv na procesy probíhající v plazmatu.

Optické metody obecně patří k hlavním diagnostickým metodám pro doutnavý výboj. Její předností je, že pouze minimálně ovlivňuje zkoumané plazma. Optických metod je celá řada a jejich detailní charakteristika je uvedena v [16].

1.4 Využití výpočetní techniky v plazmatu

Ukazuje se, že současná výpočetní technika nám poskytuje cenné informace z nejrůznějších vědeckých a technických oblastí. Mezi nejdůležitější patří zpracování experimentálních dat, výsledky počítačového modelování, zpracování digitálního obrazu. Tyto technické prostředky jsou díky tomu, že dnešní výkon, zejména stolních počítačů, je na jiné dimenzionální úrovni než před 10 lety. K tomu pochopitelně přispívají inovativní poznatky v oblasti technologie tenkých vrstev a fyziky plazmatu, pomocí kterého můžeme tyto speciální vrstvy oddělovat a vytvářet tak výkonné počítačové komponenty.

Největším paradoxem zůstává, že ve formě plazmatu se nachází převážná část vesmírné hmoty, a proto jí také pozorujeme a zkoumáme. V našich pozemských podmínkách se setkáváme s plazmatem vytvořeným přírodní cestou zcela výjimečně. Mezi nejznámější přírodní plazma patří blesky, polární záře. Ukazuje se, že člověk je velmi hloubavý a vynalézavý. Díky tomu dokázal vytvořit plazma nejprve v laboratorních podmínkách. V současné době se s ním běžně setkáváme v zářivkách, v plazmových obrazovkách, v automobilovém průmyslu a v mnohých dalších moderních oblastech. Přes prudký rozvoj této oblasti, nejsme schopni odpovědět na velké množství otázek fyziky plazmatu. Velkým pomocníkem v této oblasti se nám v posledním desetiletí stala počítačová fyzika. Můžeme s ní ověřovat nové teoretické poznatky a výsledky získané teorií je možno porovnávat s experimentálně naměřenými daty. To umožňuje rozvoj dalších teorií a nalézání odpovědí na některé otázky.

Modelováním reálného experimentu na počítači získáváme konkrétní představu o dějích, ke kterým v průběhu experimentu dochází. Velké uplatnění nachází využití metod počítačové fyziky v technické praxi. Ukazuje se, že díky tomu můžou firmy a vlastně celá společnost ušetřit velkou část finančních prostředků. V neposlední řadě bychom neměli opomenout, že díky tomu nemusíme každý experiment laboratorně testovat, dochází k úspoře některých vzácných látek, laboratorních zařízení a i k úspoře lidských zdrojů.

1.5 Využití počítačové fyziky při simulacích plazmatu za přítomnosti magnetického pole

Počítačová fyzika nachází uplatnění i při simulacích v plazmatu za přítomnosti magnetického pole jako je tomu například v meziplanetárním prostoru, u zkoumání sluneční aktivity, v projektu ITER. Většinou se jedná o oblasti, kde nejsme schopni dopředu odhadnout, jak se daný fyzikální problém bude dopředu odvíjet. Velmi dobře se uplatňuje v oboru zvaném magnetohydrodynamika. Podíváme se na tento obor podrobněji.

1.5.1 Magnetohydrodynamika

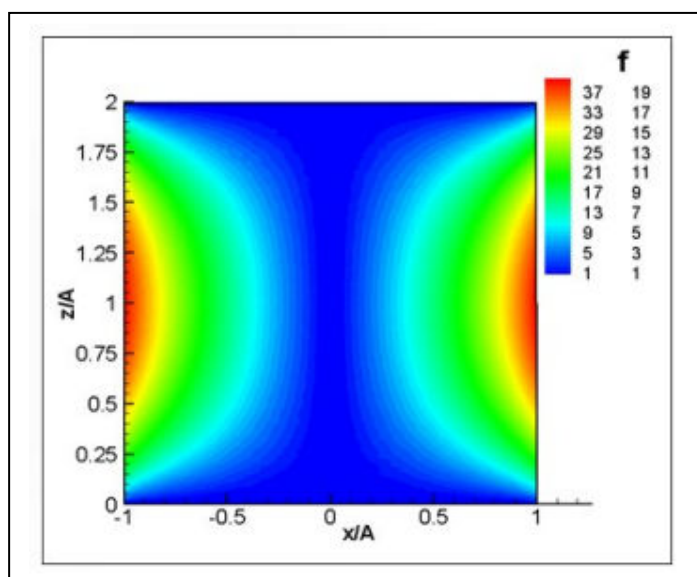
Magnetohydrodynamika je nauka o chování vodivé tekutiny (kapaliny nebo plazmatu) v magnetickém poli. Vzájemný pohyb vodivé tekutiny a magnetického pole indukuje elektrické pole a proudy. Elektrické proudy budí ve svém okolí magnetické pole, čímž je zpětně ovlivňován pohyb vodivé tekutiny. Jedná se o komplikovanou interakci vodivé tekutiny s elektromagnetickým polem. Vyskytují se zde silně nelineární jevy a vzájemné přeměny magnetické, mechanické a tepelné energie. Počátečním mechanismem přeměn může být silné elektrické pole vytvářené elektrickými výboji a silné magnetické pole. První začátky magnetohydrodynamiky byly spojeny s experimenty prováděnými se rtuť. Ve dvacátých až padesátých letech se začal tento obor zabývat řešením kosmických jevů, problémů zemského jádra, Slunce, hvězd a plazmatu v mezihvězdném prostoru. V pozdějším období docházelo k rozvoji laboratorních výzkumů, zejména při udržení plazmatu magnetickým polem pro řízenou jadernou fúzi.

Galaktické plazma, nitro hvězd, laserové a pinčové plazma s vysokou hustotou energie spojuje řada analogií i přes obrovské rozdíly desítek řádů v prostorových a časových dimenzích. V kosmu jsou zdrojem energetických proměn magnetická pole a v laboratorním prostředí silná elektrická pole nebo intenzivní elektromagnetická záření výkonných laserů.

Magnetohydrodynamika umožňuje hlubší pochopení souvislostí ve vesmíru a jevů, spojených s vysokou koncentrací energie v laboratořích, pro studium rentgenových zdrojů a jadernou fúzi. Magnetické pole je zdrojem formy energie se silnou samoorganizační schopností, která se projevuje v magnetohydrodynamických turbulencích, v magnetickém dynamu a stabilních prstencových strukturách.

V praxi znalostí magnetohydrodynamiky využíváme při výrobě monokrystalických materiálů, slitin kovů a polovodičů. Při procesu ochlazování dochází ke vzniku přirozeného proudění v důsledku nerovnoměrného teplotního pole, což má za následek nestejnorodé tuhnutí materiálu. Způsobuje různou strukturu materiálu, pnutí a defekty v důsledku špatného promíchávání jednotlivých komponent slitin.

Vodivé tekutiny v magnetickém poli jsou vystaveny účinku externích magnetických sil, jež mají stejný charakter jako účinek gravitačních sil, ovšem v libovolném směru. Tyto externí síly jsou schopny uvést do pohybu tekutinu, či ji v tomto pohybu udržovat. Materiály, které při svém procesu zpracování (např. odlévání) jsou vystaveny rovnoměrnému pohybu, vykazují rovnoměrné rozložení teplotních polí (obrázek 1.3).



Obrázek 1.3: Rovnoměrné rozložení teplotních polí [19].

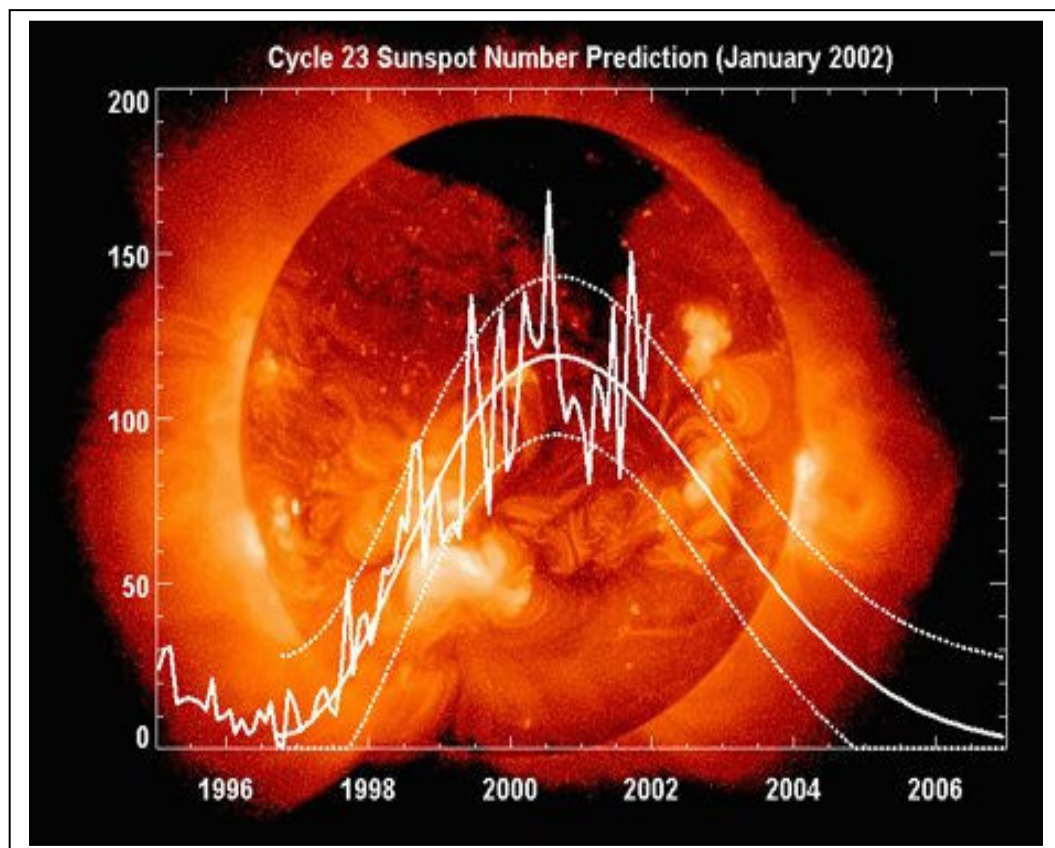
Za přispění počítačové fyziky získalo toto odvětví v posledních letech novou dynamiku. Nyní je možné zefektivnit mnohé výrobní procesy, např. odlévání odlitků, a tím i snížit výrobu nekvalitních výrobků („zmetků“). V konečném důsledku tím dosáhneme nemalé úspory.

1.5.2 Zkoumání slunečního maxima

Slunce se snažíme zkoumat již několik stovek let. Největší problém tkví v tom, že nemůžeme navštívit jeho povrch a podrobně prozkoumat fyzikální jevy, které

se v něm odehrávají. Jedním z procesů, který dlouhodobě na Slunci zkoumáme je sluneční aktivita. Víme o ní jen základní informace. Nejvíce nás v 21. století zajímá, její podrobné zmapování a možnost předpovědět její další vývoj. Z dosud získaných informací víme, že sluneční aktivita dosahuje svého vrcholu v periodě jedenácti let. Bohužel i během této periody se stává, že Slunce dosáhne takové sluneční aktivity, mající negativní vliv na Zemi. Např. výpadky elektřiny v našich rozvodných elektrických sítích, družice na oběžné dráze jsou dočasně vyřazeny z provozu [3].

Byly vynaloženy velké prostředky na zkoumání tohoto jevu. Díky počítačové fyzice se podařilo najít alespoň částečnou odpověď na tento problém. Počítačovému modelu se podařilo zjistit, že během jedné periody sluneční aktivity jsou dvě maxima. Jejich rozdělení je následující: Nejprve dojde k maximální sluneční aktivitě. K druhému maximu dojde v rozmezí 16 - 18 měsíců (obrázek 1.4). V praxi se tento poznatek mohl poprvé naplno uplatnit na přelomu tisíciletí. V roce 2000 byla maximální sluneční aktivita. Druhého vrcholu bylo dosaženo o 18 měsíců později.

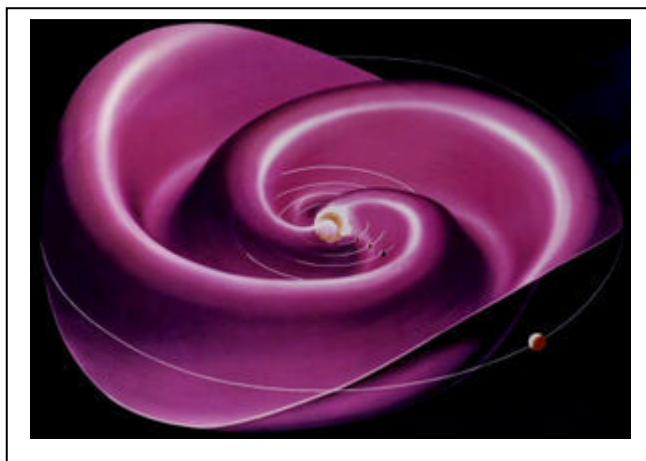


Obrázek 1.4: Model vývoje sluneční aktivity na Slunci [3].

Při této modelaci se přišlo na doposud neznámé problémy doprovázející sluneční aktivitu. Sluneční skvrny jsou jen jedním z projevů sluneční aktivity, která je celá řízena velmi komplikovaným magnetickým polem. Právě ze stability magnetického pole se odvíjí i další jevy, které aktivitu Slunce doprovázejí (erupce, protuberance, koronární ejekce hmoty).

1.5.3 Meziplanetární prostředí

Prostředí vyplňující prostor v naší sluneční soustavě je ovlivňováno Sluncem, nebo spíše proudem částic, které Slunce vyzařuje (plazma). Hlavními parametry, které nás ovlivňují jsou teplota plazmatu, hustota výskytu jednotlivých částic a rozložení magnetického pole. Jakým způsobem se plazma pohybuje v meziplanetárním prostoru je znázorněno na následujícím obrázku 1.5.



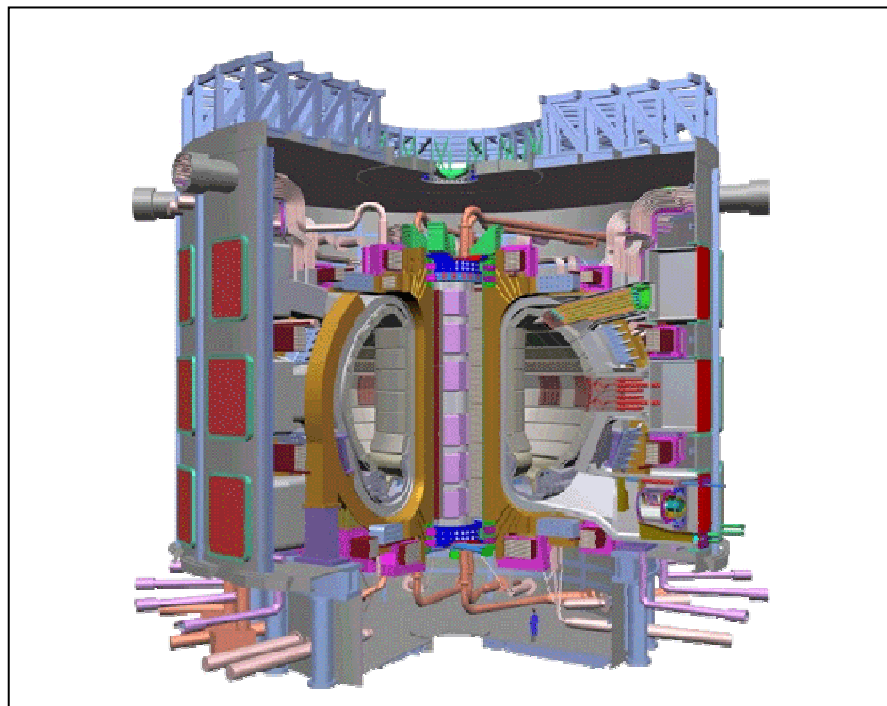
Obrázek 1.5: Pohyb plazmatu v meziplanetárním prostoru [4].

1.5.4 Projekt ITER

Projekt ITER (International Thermonuclear Experimental Reaktor) je typem TOKAMAKu (TOroidnaja KAMERA a MAGnetnyje KATuški), který by měl vyprodukovat více energie, než je množství energie potřebné k rozpoutání a udržení termonukleární reakce. Jedná se vlastně o prototyp termonukleárního (fúzního) reaktoru. Reaktor by měl odpovědět na základní otázky kolem termonukleární fúze. Výsledkem projektu by měla být stavba fúzní elektrárny, a to v horizontu několika desítek let.

ITER obsahuje soustavu obřích supravodivých elektromagnetů chlazených tekutým heliem. Skládá se celkem z 18 cívek toroidálního pole o rozměrech 14×9 m z nichž každá váží 290 t. Dále je použito 6 cívek poloidálního pole a jeden centrální solenoid o váze 840 t, o průměru 4 m a výšce 12 m. Řez TOKAMAKem ITER je znázorněn na obrázku 1.6. Další podstatnou součástí prstence, kde probíhá termonukleární reakce, je tzv. divertor, což je zařízení na dně prstence sloužící k odčerpávání nabitých částic unikajících z magnetického pole. Jedná se zejména o helium a nečistoty způsobené interakcí částic plazmatu se stěnami reaktoru.

Jak již bylo zmíněno, využívá se zde termonukleární fúze. Přitom tento proces můžeme rozdělit do několika kroků. Nejprve do prstence umístíme několik gramů paliva. Palivo následně zahřejeme na teplotu kolem 100 miliónů °C. Díky vysoké teplotě se dostanou atomy vodíku k sobě na dostatečně malou vzdálenost a sloučí se na helium se čtyřmi nukleony. Hlavní část energie, vzniklá touto reakcí, je odnášena přebytečnými neutrony, které nejsou zachycovány magnetickou pastí. Vysokoenergetické neutrony jsou zachycovány až obálkou reaktoru. Tato obálka je tvořena vodou chlazenými štíty s velkým obsahem beryllia.



Obrázek 1.6: Řez TOKAMAKem ITER, [27].

V projektu ITER je spousta nezodpovězených otázek a odpovědi na ně hledáme v několika rovinách, a to v rovině experimentální i teoretické, v ní hraje podstatnou roli počítačové modelování fyziky plazmatu. Díky počítačovému modelování získáme odpovědi na jím inspirované experimenty směřující k fyzikální interpretaci anomální difúze a pinč-efektů. Dále bychom od počítačové fyziky chtěli znát odpovědi na otázky týkající se stability a rovnováhy plazmatu, případně zdokonalit metody, zabývající se měřením plazmatu.

2 Počítačové modelování plazmatu

Ve fyzice plazmatu existuje mnoho problémů, které jsou jen stěží jednoduchým způsobem řešitelné. Lépe řečeno existuje jen málo problémů řešící se jednoduchým analytickým způsobem. I pro zdánlivě jednoduchý problém, existuje několik teorií, které se s užitím různých aproximací snaží o co možná nejlepší popis v oblasti svého řešení. Velmi často jsou tyto teorie silně omezeny svými předpoklady (probíhajícími interakcemi, tlakem). Chceme-li zkoumat chování plazmatu, kde probíhají složitější procesy, jako například chemické reakce, je stále základní metodou samozřejmě experiment. Nejnáročnější je naměřené hodnoty správně interpretovat. Z tohoto důvodu je velmi dobré dělat simulaci prováděných experimentů pomocí výpočetní techniky, čímž minimalizujeme nejen náklady na jednotlivá měření, ale můžeme tím předejít možným škodám. V další fázi se počítačová fyzika zabývá vyhodnocováním těchto údajů.

Je třeba si uvědomit, že modelování plazmatu je součástí většího celku, kterým je počítačová fyzika. V ní se prolíná soubor několika oborů, a to: výpočetní technika, matematika, fyzika, chemie.

2.1 Základní historické milníky počítačové fyziky

V této kapitole bychom se stručně seznámili s historickými milníky počítačové fyziky. Zaměříme se především na 19. a 20. století. V dalších částech zhodnotíme vývoj hardware a softwarových prostředků, díky nimž můžeme efektivně řešit nastalé fyzikální problémy. Neopomeneme ani rady pro vybrání vhodného operačního systému, jež nám zrychlí řešení daného problému.

2.1.1 Hardware - Jak to bylo kdysi dávno

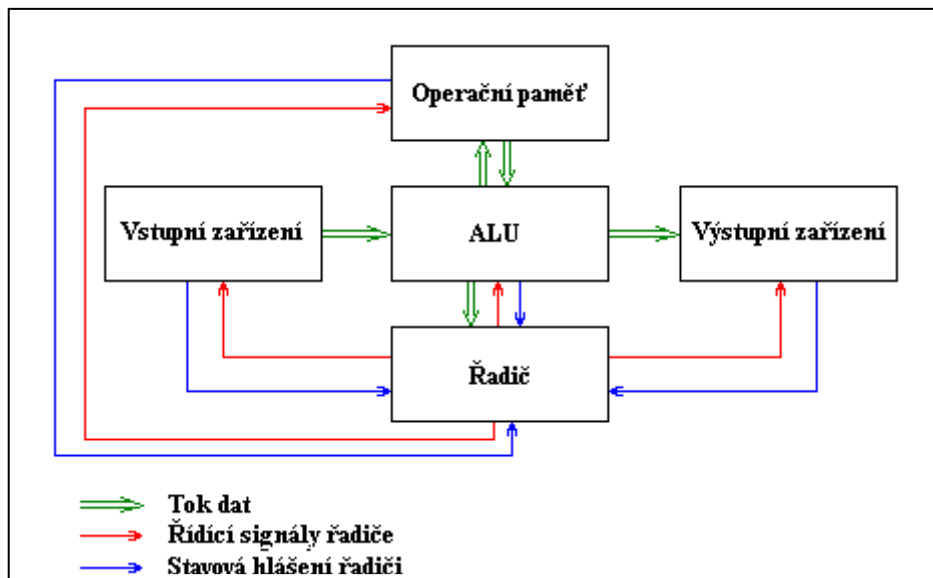
Nebudu se zabývat detailní prehistorií výpočetní techniky, i když je velmi zajímavá a poučná. Již v ranném středověku byly první pokusy o sestrojení umělých bytostí. Nemůžeme objektivně rozhodnout, kam přesně datovat sestrojení prvního počítače. S určitostí se nejedná o dvacáté století, neboť již v 19. století se objevují dvě výrazné postavy světa počítačů - profesor matematiky Charles Babbage a první

programátorka Augusta Ada Lovelace, po které byl později pojmenován programovací jazyk s označením ADA.

Nejvíce nás zajímá období 2. světové války, kdy vzniká počítačová fyzika. Enrico Fermi pracuje na projektu Manhattan, který vede k sestrojení atomové bomby.

2.1.2 Hardware - Koncepte von-Neumanna

Reálný rozvoj výpočetní techniky začal až v první polovině dvacátého století. Tehdy se již formovaly pojmy, které dnes již běžně používáme, jako například: bit, byte, převodní soustava (dvojková, desítková, osmičková, šestnáctková). K průlomu dochází se vznikem von-Neumannovské koncepce architektury počítače. Koncepce je znázorněna na obrázku 2.1. Uvědomujeme si, že toto schéma není jediné, které se do dnešní doby používá.



Obrázek 2.1: von Neumannovská koncepce počítače.

Podle von Neumannovské koncepce lze počítač rozdělit do několika základních bloků: operační paměť, vstupní zařízení, aritmeticko logická jednotka, řadič a výstupní zařízení. Ačkoliv toto schéma není úplně nejvhodněji řešeno, používá se do dnešních dnů. Základní postavení má operační paměť, do které se ukládají jak vstupní data ze vstupního zařízení, tak i mezivýsledky a konečné výsledky, které zobrazí výstupní zařízení. Samostatný celek tvoří ALU (aritmeticko logická jednotka) zajišťující logické zpracování informací a veškeré výpočty, které jsou potřebné k zajištění provedení příslušného úkolu.

Stručně shrňme základní postup počítače sestaveného podle von Neumannovské koncepce. Před počátkem výpočtu jsou vstupní data načtena do operační paměti. Jednotlivé příkazy jsou posílány do řadiče, který je nejprve roztřídí podle důležitosti a pak nařizuje ostatním blokům počítače, aby vykonaly příslušnou činnost. Např. Zajišťujeme tak prezentaci zpracovaných výsledků (Operační paměť → Výstupní zařízení). Nejvíce práce máme se správným provedením aritmeticko logických operací v aritmeticko logické jednotce. Konkrétně operační paměť posílá jednotlivé operandy do aritmeticko logické jednotky, která pak provede příslušnou operaci a vrátí výsledek do operační paměti a do řadiče. Díky tomu řadič operativně řeší vzniklé problémy. Např. může být znova seřazen seznam neproběhlých operací. Tento model je používán do současné doby.

2.1.3 Software – vhodný programovací jazyk

Programovací jazyk je posloupnost příkazů ve strojovém kódu. Program ve strojovém kódu je tvořen posloupností příkazů, které oznamují řadiči počítače, jakou operaci má provést, s jakými argumenty, co všechno má udělat s výsledkem operace (forma její prezentace) a jak má program pokračovat. Mějme na paměti, že tyto základní pokyny jsou uvedeny ve dvojkové soustavě.

Uvědomme si, že pro běžného programátora, natož pro uživatele, je strojový kód naprosto nečitelný a složitý, proto od počátku výpočetní techniky byla snaha činnost programátorovi maximálně zjednodušit a ulehčit. Jelikož vytváření programu ve strojovém kódu je mimořádně náročné, byly zavedeny programovací jazyky.

Přehled používaných programovacích jazyků [1]:

- ❑ **FORTRAN** – v dnešní době patří mezi zastaralé, ale stále používané jazyky.
- ❑ **ALGOL** – základ programovacího jazyka, který byl později přebudován na jazyk Pascal.
- ❑ **PASCAL**
- ❑ **C**
- ❑ **C++**
- ❑ **JAVA**

Rozhodnout, který jazyk je na fyzikálních pracovištích více zastoupen je prakticky nemožné. V současné době jsou nejčastěji používanými jazyky: C, C++, PASCAL, JAVA. Zastoupení jazyka JAVA v posledních letech začíná narůstat.

Z historického hlediska mají pro počítačovou fyziku největší význam dva nejdominantnější jazyky: jazyk FORTRAN-90/95 a jazyk C, ve kterých je napsáno více než 90% všech programů [1]. Zajímavé je zastoupení těchto jazyků ve světě. V USA převažuje jazyk C, v Japonsku jazyk FORTRAN a v Evropě je to rovnoměrně rozvrstveno mezi oba dva jazyky.

Vybrat správný jazyk patří mezi jednu z nejdůležitějších činností při vlastní optimalizaci výpočetního výkonu počítače. Zajišťuje dostatečné a vhodné využití hardwarových prostředků. Navíc musí být dostatečně stabilní na daném operačním systému. Ukazuje se, že vybrání vhodného jazyka, ve kterém budeme daný problém řešit není jednoduchá záležitost.

Kromě těchto klasických programovacích jazyků velmi často používáme na řešení dílčích problémů specializované programovací balíky, jako jsou Comsol Multiphysic, Mathlab, Fluent.

2.1.4 Software – vhodný operační systém

V 60. letech byla veškerá obsluha počítače prováděna pouze z uživatelské konzole a všechny problémy byly řešeny pomocí strojového kódu. V 70. – 80. letech byl vyvinut již zmiňovaný programovací jazyk. S dalším postupným rozvojem výpočetní techniky bylo třeba zjednodušit a hlavně zefektivnit práci uživatele či programátora, což vedlo k zavedení operačního systému. V něm bylo možné dopředu pomocí programovacího jazyka naprogramovat některé hodně využívané činnosti. To vedlo k zrychlení práce.

Operačních systémů existuje celá řada. Uvedu zde pouze tři základní platformy: MS-DOS, UNIX, Microsoft Windows – používají se v různých modifikacích. V dnešní době to můžeme zredukovat na operační systém Windows (2000, XP), LINUX, převzato [1]. Podle mých osobních zkušeností se dnes pomalu začínají používat operační systémy Windows Vista. Jejich velkou nevýhodou je hardwarová náročnost a stabilita. Jako nejideálnější se jeví počítačová sestava osazená LINUXEM, protože výpočetní čas bývá až o 20 % kratší než na stanicích osazených operačním systémem Windows. Bohužel ideální operační systém nemáme, proto i LINUX má řadu nectností a problémů. Důležitá je škálovatelnost klastrů jednotlivých pracovních stanic, která nám zajišťuje výkon počítače rostoucí lineárně s jeho rozšiřováním (se zvyšováním počtu procesorů a operačních pamětí). Efektivnost klastrů v LINUXU (poměr dosaženého

výkonu k instalovanému výkonu) je srovnatelná s tradičními výkonnými systémy, jestliže nezahrnují více než přibližně 32 procesorů. Při zvyšujícím se počtu efektivnost rychle klesá. Příčiny nalézáme především v pomalém spojení jednotlivých uzlů, malém rozsahu sdílené paměti, spolehlivosti systému, ale také v tom, že dvouúrovňová paměť je nevhodná. V LINUXU zatím postrádáme kompletní implementační funkce, které by dokázaly tyto problémy odstranit. Dále potřebujeme funkce, jež by se dokázaly vypořádat se specifiky náročných výpočtů. Přechodně tyto problémy řešíme tak, že buď nevyužijeme celou výpočetní kapacitu, nebo musíme pro každý konkrétní fyzikální problém tuto funkci napsat samostatně, a to je časově i finančně nákladné. Současnost a hlavně budoucnost bude patřit virtuálním superpočítačům, vytvoříme je díky propojení více počítačových stanic pomocí internetu.

2.1.5 Režim práce výpočetní techniky

Nedílnou součástí při řešení fyzikálního problému bylo rozdělení práce uživatele a její následné navázání na výpočetní techniku. Z pramenu [1] a současné praxe jsme sestavili režimy práce s výpočetní technikou:

- ❑ **Samostatný režim** – Uživatel využívá počítač sám pro sebe. Po ukončení jeho činnosti začíná pracovat další uživatel. To je velmi neefektivní, protože není využita výpočetní kapacita počítače.
- ❑ **Dávkový režim** – Ve vstupním zařízení jsou předem připravena vstupní data od více uživatelů. Samotnou práci řídí operační systém, který automaticky po dokončení práce pro jednoho uživatele, spustí zpracování dat pro uživatele dalšího. Tím se využije vzniklých časových prostojů, avšak nezajistí to plné vytížení výpočetní kapacity počítače.
- ❑ **Multitasking (Multiprogramování)** – Do operační paměti jsou uloženy vstupní data (programy) od více uživatelů mající různou prioritu (důležitost). Nejprve začne být zpracováván program s nejvyšší prioritou. Po uvolnění tohoto programu z procesoru, bude místo něj načten program s druhou nejvyšší prioritou. Jakmile však původní program (s nejvyšší prioritou) požaduje znovu procesor, tak vzhledem k jeho nejvyšší prioritě právě zpracováváný program přeruší práci a program s nejvyšší prioritou pokračuje ve zpracovávání. Tento postup opakujeme několikrát.

V dnešní době se ve velké většině případů využívá multitasking. Tento režim musí podporovat hlavně operační systém. V počátcích svého vývoje s tím měl operační systém Windows značné problémy. Poslední verze operačního systému Windows multitasking již podporují a na zvýšení jeho spolehlivosti se pracuje. V operačním systému LINUX počítalo se již od prvních vývojových krůčků s multitaskingem.

Ukazuje se, že než se vůbec pustíme do řešení fyzikálního problému pomocí počítače, musíme vyřešit spousta problémů nesouvisejících přímo s fyzikou, avšak řešený problém je na nich závislý.

2.2 Počítačové modelování

Počítačová fyzika má několik desítek směrů. Mezi nejvýznamnější patří počítačové modelování, proto se s ním seznámíme. V další části práce popíšeme jednotlivé typy modelů. Zaměříme se na jejich praktické použití.

Řešení fyzikálního problému pomocí počítačového modelování rozdělíme do následujících kroků [1]:

- 1) **Formulace problému** – Při formulaci problému vyjdeme z jevu, který chceme studovat. Jev musíme popsat pomocí pojmů odpovídající vybrané technice modelování.
- 2) **Vytvoření modelu** – Model vytváříme přímo pro konkrétní studovaný jev. Zachováme propojení jevu původního a vytvořeného modelu. Máme stále na paměti, že vztah vytvořeného modelu a reálného jevu není ekvivalentní. Objevují se dvě úskalí:
 - ❑ Model (skoro) vždy studovaný jev zjednoduší. Je to z toho důvodu, že studovaný jev neznáme do patřičné hloubky. Druhou možností je, že bychom nebyli schopni studovaný jev vyřešit pomocí výpočetní techniky. Dáme si pozor, aby model nebyl příliš zjednodušený, to by vedlo k nesprávnému řešení, a tím pádem i k nesprávným závěrům z toho vyvozených. Z tohoto důvodu musíme výsledky modelování srovnat s experimentálně naměřenými daty.
 - ❑ Výsledky počítačového modelování vypovídají pouze o počítačovém modelu a nemusejí vůbec odpovídat studovanému jevu. Ve většině případech se zapomíná na míru přesnosti experimentálních dat, na nichž je model založen. Většina uživatelů si neuvědomí, že i když počítač nám vyhodnotí data v modelu

s přesností desítky desetinných míst, celý model může být znehodnocen nepřesností dat na vstupu.

- 3) **Řešení modelu** – Podle techniky řešení modelu, zvolíme příslušné matematické řešení. Nejčastěji se jedná o řešení soustav obyčejných či parciálních diferenciálních rovnic a případně o další matematické oblasti (např. statistika).
- 4) **Porovnání výsledků** – Na závěr musíme porovnat výsledky modelování s experimentálními údaji. Snažíme se do modelu zabudovat zpětnou vazbu, a to provedeme následujícím způsobem. Používáme nezávislá data, která nebyla při formulování modelu známá a měla by vyplynout z výsledku modelu sama. Nebude-li tomu tak, je třeba znova zformulovat model a celý ho otestovat.

Tento postup není třeba brát jako dogma, nicméně je vhodné jej dodržovat.

Existují různé přístupy k počítačovému modelování, a to podle charakteristiky jevu. Lze je rozdělit do několika skupin: na metody částicové, metody spojité a metody hybridní, které se ještě dále dělí.

2.2.1 Částicový model

Nejlepší by bylo studovaný jev popsat na co možná nejnižší úrovni (mikroskopické). Díky tomu můžeme detailně studovat chování jednotlivých částí, ze kterých se skládá. Nejprve si definujeme mikroskopickou oblast. Pro plazmu budeme za mikroskopickou oblast považovat jednotlivé atomy, ionty nebo elektrony a jejich chování budeme podrobně zkoumat. Zatímco u vesmíru (např. u galaxie) bereme jako mikroskopickou část jednotlivé hvězdy.

Než začneme testovat chování modelu musíme provést statistické vyhodnocení těchto dat, protože experimentální fyzik nám není schopen poskytnout některé důležité informace (o poloze a rychlosti všech atomů nebo molekul ve studovaném souboru). Vzhledem k tomu, jak popisujeme chování jednotlivých částí studovaného souboru, rozeznáváme několik metod:

- ❑ **Metoda Monte Carlo** – je souhrn postupů dovolujících pomocí mnohonásobných náhodných pokusů získat řešení problémů z nejrůznějších oblastí vědy. Vytvoření modelu pak znamená zjednodušení popsaného zkoumaného jevu pomocí konkrétní náhodné veličiny s daným oborem hodnot a rozdělením pravděpodobností. Současně

určíme, která charakteristika této náhodné veličiny obsahuje námi hledanou odpověď. Při počítačové simulaci metodou Monte Carlo musíme náhodnou veličinu vytvořit na počítači, a to provedeme ve dvou krocích. Nejprve nageneryjeme na počítači náhodnou veličinu s určitým pevně daným rozdělením pravděpodobnosti. Dále podle požadavků našeho modelu tuto veličinu přetransformujeme v námi hledanou náhodnou veličinu, která má statistický charakter.

- **Metoda molekulární dynamiky** - Technika počítačové simulace, kde je časový vývoj množiny interagujících atomů popsán integrací jejich pohybových rovnic. Metoda vychází ze zákonů klasické mechaniky (především z Newtonových pohybových rovnic). Jedná se o deterministickou techniku (rozdíl oproti metodě Monte Carlo), kdy počáteční množina poloh a rychlostí zcela určuje následný časový vývoj.
- **Hybridní techniky** – V těchto postupech budeme kombinovat obě předchozí techniky dohromady. Snažíme se zde uplatňovat na částicové úrovni deterministický a stochastický popis tak, aby byl výpočet co nejefektivnější.

2.2.2 Spojitý model

Spojité modely jsou druhou skupinou modelů, které se používají pro simulaci plazmatu. Systém sledujeme z makroskopického hlediska. Na plazma se díváme jako na směs tekutin, které mají určitou teplotu, tlak, rozložení rychlosti proudění atd. Mezi těmito makroskopickými veličinami platí fyzikální zákony například: zákon zachování energie, hybnosti, náboje, rovnice kontinuity, atd. Matematicky tyto zákony popisujeme zpravidla pomocí diferenciálních rovnic (při použití určitých aproximací).

2.2.3 Hybridní model

S hybridním modelem jsme se již setkali při rozlišování částicových metod, kde byl chápán jako kombinace metody Monte Carlo a metody molekulární dynamiky. Ukazuje se, že zde pod pojmem hybridního modelu rozumíme kombinaci modelu částicového s modelem spojitým. Cílem tohoto spojení je získat co možná nejpřesnější a nejrychlejší výsledek našeho fyzikálního jevu.

3 Částicový model pro řešení plazmatu

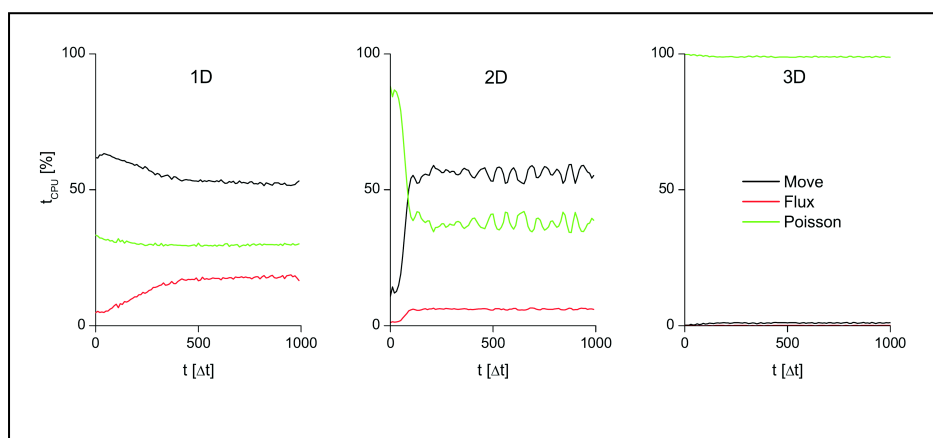
3.1 Metody modelování částic v praxi

Základní fyzikální poznatky o částici pohybující se v elektrickém a magnetickém poli nám umožňují pomocí počítačového modelování vytvořit dostatečně efektivní algoritmy. Zaměříme se na základní poznatky týkající se částicového modelování [2, 7].

Částicové modely dělíme do dvou základních skupin na modely selfkonzistentní a neselfkonzistentní. Tato dělení vycházejí z přístupu k elektrickému potenciálu.

□ Model selfkonzistentní

V modelu musíme hodnoty elektrického potenciálu přepočítávat pravidelně mezi jednotlivými kroky. Vzhledem k tomu je počet částic poměrně vysoký, výpočet je velmi zdoluhavý, neefektivní a vyžaduje poměrně velké hardwarové nároky. V praxi tuto modelovací techniku využíváme pouze v případech, kde redukuje dimenzionalitu systému. Problémem se zabývá článek [8], ze kterého vyplývá, že nejdéle trvá výpočet silových působení. Ukazuje se, že při výpočtu v jednodimenzionálním modelu je zapotřebí 35 % z celkového výpočetního času právě na výpočet působení sil. Ve dvoudimenzionálním modelu připadne přibližně 40 % na tento výpočet. Největší časová zátěž je v třidimenzionálním případě. Dosahuje hodnot přesahujících hranici 99 % z celkového výpočetního času. Časové nároky jednotlivých fází výpočtu jsou patrné z obrázku 3.1.



Obrázek 3.1: Časové nároky výpočtů jednotlivých modelů [2, 9].

□ Model neselfkonzistentní

Neselfkonzistentní model je vhodný pro případy, kdy potřebujeme ze známého rozložení elektrického potenciálu určit rozdělovací funkce rychlostí a s ní související charakteristiky. Výhoda této metody spočívá v tom, že můžeme použít pouze jeden druh částic, jehož hledané charakteristiky nás zajímají. Tímto způsobem v průběhu výpočtu nemusíme přepočítávat hodnoty potenciálu, což vede k výraznému zkrácení výpočetního času. V praxi byl tento přístup využit například v modelu válcové sondy [10].

Metody dělíme na stochastické a deterministické podle zvoleného přístupu. Mezi stochastické metody řadíme metodu Monte Carlo. Mezi metody deterministické patří algoritmy pro řešení pomocí diferenčních schémat.

3.2 Metoda Monte Carlo

Metoda Monte Carlo je obecně simulační metoda založená na teorii pravděpodobnosti. Princip metody Monte Carlo je popsán např. v [17]. Pomocí metody Monte Carlo lze určit přibližná řešení celé řady jak stochastických, tak i deterministických problémů. Ve fyzice plazmatu metodu Monte Carlo používáme pro řešení například Boltzmannovy rovnice, která umožňuje získat rozdělovací funkci rychlostí elektronů s minimálními aproximacemi i v případě, kdy je řešení Boltzmannovy rovnice příliš náročné.

Metodou Monte Carlo byl simulován transport elektronů v mikrovlnném poli. Získané výsledky byly použity pro srovnání s výsledky řešení Boltzmannovy rovnice. Metodou Monte Carlo řešíme problém transportu iontů a elektronů numerickou simulací pohybu velkého počtu částic s uvažováním srážkových procesů, které jsou zavedeny generováním náhodných čísel s požadovaným rozdělením.

Myšlenku použití náhodných čísel pro výpočet deterministických veličin poprvé použil Buffon v 17. století, dále tyto myšlenky rozšiřovali John von Neumann a Ulam. Ti je používali k vícerozměrné integraci a výpočtu inverzní matice.

Posledně jmenovaný autor navrhl termín Monte Carlo simulace. Později Metropolis a další aplikovali metodu Monte Carlo na řešení stavových rovnic stlačené tekutiny. Nejranější použití metody Monte Carlo je případ transportu nabitých částic a tím se zabývali Itoha, Mushaha a také Skulleruda. Tato technika je používána jako alternativní metoda k numerickému řešení Boltzmannovy rovnice.

3.2.1 Postup při použití metody Monte Carlo

V této kapitole se zaměříme na použití metody Monte Carlo podrobněji a zkusíme si její jednotlivé části rozklíčovat. Základní schéma řešení problému pomocí metody Monte Carlo se skládá z těchto etap [1]:

1. Analýza problému a vytvoření modelu

Vytvoření modelu pak znamená zjednodušeně popsat zkoumaný jev pomocí konkrétní náhodné veličiny s daným oborem hodnot a rozdělením pravděpodobností a současně určit, která charakteristika této náhodné veličiny obsahuje námi hledanou odpověď.

2. Generování a transformace náhodné veličiny

Při počítačové simulaci metodou Monte Carlo musíme náhodnou veličinu vytvořit na počítači. To provedeme ve dvou krocích:

- a) Nejprve nageneryjeme na počítači náhodnou veličinu s určitým pevně daným rozdělením pravděpodobnosti.
- b) Potom podle požadavků našeho modelu tuto veličinu přetransformujeme v hledanou náhodnou veličinu. Tento postup je mnohem jednodušší než vytvářet přímo generátory nejrůznějších náhodných veličin a hlavně je z hlediska výpočetního času daleko méně náročný. V praxi díky tomuto postupu výrazně šetříme výpočetní i lidské zdroje.

3. Opakování kroku 2. a statistické vyhodnocení výsledků

Jelikož se jedná o stochastickou metodu modelování, dostaneme pouze jednu realizaci hledané náhodné veličiny. Proces je nutno proto několikrát opakovat, přičemž metoda Monte Carlo konverguje relativně pomalu. Počet opakování musí být proto poměrně velký. Po získání dostatečného počtu konkrétních realizací naší náhodné veličiny, systém zkonverguje k hledané hodnotě.

Počet kroků, které musíme vykonat je dán chybou, kterou můžeme ve výpočtu připustit. Při zpracování dat metodami matematické statistiky bylo určeno, že chyba metody je dána vztahem [1]:

$$g \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (3.1)$$

Použití této metody ve fyzice je poměrně významné a používáme jí například ke studiu simulace srážek.

3.3 Metoda molekulární dynamiky

Metoda molekulární dynamiky patří mezi metody částicového modelování. Reálně to znamená, že studovaný jev popisujeme na základě chování souboru a jeho dílčích částí. V této metodě řešíme klasické pohybové rovnice. Budeme simulovat chování většího množství částic rozsáhlého souboru dat, včetně interakcí mezi jednotlivými částicemi a to jak silovými, tak srážkovými.

Vznik metody datujeme do první poloviny 50. let. Mezi první oblasti použití patřilo studium chování kapalin, později pevných látek a dalších interagujících systémů. V dnešní době tuto metodu používáme pro velmi rozmanité spektrum problémů, počínaje studiem atomů.

Za rozhodující se ukazuje, že částice, jejichž chování popisujeme pomocí pohybových rovnic, představují relativně mikroskopickou úroveň studovaného jevu. Typické problémy řešené metodou molekulární dynamiky jsou problémy řešící trajektorii částic (případně těles).

Obecný postup při použití metody molekulární dynamiky je následující:

- ❑ Vytvoříme co nejvěrnější model studovaného jevu.
- ❑ Systém popíšeme pomocí souboru N částic.
- ❑ Sestavíme klasické pohybové rovnice pro všechny částice.
- ❑ Určíme počáteční podmínky pohybové rovnice a ty pak vyřešíme. Při tomto řešení obvykle pracujeme v časovém intervalu $\langle t_0, t_{\max} \rangle$. Cílem může být nalezení trajektorií všech částic. Tyto výsledky dále zpracujeme. Určíme například koncentrace částic.

Při praktickém řešení fyzikálního problému pomocí metody molekulární dynamiky zvolíme pracovní oblast, najdeme všechny síly působící na jednotlivé částice souboru, určíme počáteční stav částic, numericky vyřešíme příslušné pohybové rovnice všech částic a případně statisticky zpracujeme výsledné dráhy (trajektorie).

3.3.1 Pracovní oblast

Velmi důležitým krokem je správné zvolení velikosti pracovní oblasti a určení okrajových podmínek. Tuto volbu ovlivňuje vlastní povaha problému. Studujeme-li například pohyb komet ve Sluneční soustavě zvolíme pracovní oblast tak, aby studovaná soustava byla celá umístěna v této oblasti.

Pokud částice neopouští pracovní oblast, nemusíme sledovat okrajové podmínky. Tento případ nastává při studiu pohybu komet kolem Slunce. Jestliže tento případ výjimečně nastane, program se ukončí.

Reálně máme k dispozici daleko složitější systémy, ve kterých musíme postupovat odlišně. Tvar a další parametry pracovní oblasti musíme určovat v případě, kdy pracovní oblast tvoří jen malou část prostoru zaplněného částicemi. Postupovat budeme následovně: určíme tvar pracovní oblasti, velikost pracovní oblasti, okrajové podmínky.

❑ **Tvar pracovní oblasti** – Jsou-li částice rozloženy pravidelně, podřídíme tvar pracovní oblasti tomuto rozložení. Příkladem může být studium pohybu elektronů v pevné látce. Když studovaný problém nemá žádnou výraznou symetrii, volíme tvar pracovní oblasti co nejjednodušší, abychom si zjednodušili práci s daty při modelování, a tím šetřili výpočetní čas. Vícerozměrné systémy jsou popsány v publikacích [1, 9, 10].

❑ **Velikost pracovní oblasti** – Při volbě velikosti pracovní oblasti máme dvě kritéria. První zohledňuje výpočetní a druhé fyzikální hledisko.

– Podívejme se na hledisko výpočetní. Při modelování nejraději pracujeme, co možná nejjednodušeji. Snažíme se volit velikost pracovní oblasti podle počtu částic, které má obsahovat. Omezujícím faktorem je pro nás současný výkon výpočetní techniky. Počet částic nemůžeme volit libovolně vysoký. Na druhou stranu je třeba počítat s tím, že v případě nízkého počtu částic, například řádově 10^3 , bude docházet k poměrně velkým fluktuacím. Tyto fluktuace nám znemožňují vypočítat další veličiny, například velikost elektrické intenzity, koncentrace, atd. Při velkém počtu částic je výpočet příliš pomalý a narazíme na limity výpočetní techniky (malá kapacita paměti).

– Fyzikální hledisko. Rozeznáváme síly dalekodosahové, kdy jejich velikost klesá se vzdáleností. Řadíme sem např. sílu gravitační a elektrostatickou a další. Pak máme síly krátkodosahové, které mají závislost na vzdálenosti mnohem silnější.

□ **Okrajové podmínky** - Jak již bylo zmíněno např. při modelování plazmatu, plynu nebo tekutin budou nám částice opouštět naši pracovní oblast. S rostoucím časem bychom všechny částice z pracovní oblasti ztratili, proto je třeba přistoupit k volbě okrajových podmínek. Uvědomme si, že nám vznikají jistá fyzikální omezení, například v systému nesmí být přítomen žádný usměrněný tok částic a je potřeba zajistit homogenitu prostředí.

3.3.2 Algoritmy pro řešení soustavy diferenciálních rovnic

Deterministická metoda molekulární dynamiky je založena na řešení soustavy pohybových rovnic pro všechny částice. Na základě postupů numerické matematiky převedeme tyto diferenciální rovnice druhého řádu na dvojnásobný počet rovnic prvního řádu, které budeme řešit jedním z popsaných algoritmů.

Jedním z problémů je, jak efektivně vypočítat polohu a rychlost nové částice. Ukazuje se, že k vyřešení tohoto problému je vhodnější použít některého z uvedených algoritmů. Abychom mohli tuto metodu použít potřebujeme znát vstupní podmínku a tou je znalost počáteční polohy a rychlosti částice. Základními algoritmy pro deterministické modelování jsou metody: Eulerova, Verletův algoritmus a metoda Leap frog. Podíváme se na každou metodu samostatně.

□ Eulerova metoda

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

$$\mathbf{r}_i^{k+1} = \mathbf{r}_i^k + \mathbf{v}_i^k \Delta t + \frac{1}{2m_i} \mathbf{F}_i^k \cdot \Delta t^2 \quad (3.2)$$

$$\mathbf{v}_i^{k+1} = \mathbf{v}_i^k + \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i^k \Delta t \quad (3.3)$$

$$\mathbf{F}_i^{k+1} = \dots \quad (3.4)$$

Dolní indexy označují číslo částice a horní indexy uvádějí číslo časového kroku.

V této metodě počítáme parametry u částice v následujícím pořadí: poloha, rychlost, síla. Můžeme tento algoritmus použít právě v případech, když je působící síla

funkcí rychlosti. Výhodou je relativní paměťová nenáročnost algoritmu a i rychlost zpracování (kratší výpočetní čas).

□ Verletův algoritmus

Je to metoda druhého řádu. Diferenční schéma metody má následující tvar:

$$\mathbf{r}_i^{k+1} = \mathbf{r}_i^k + \mathbf{v}_i^k \Delta t + \frac{1}{2m_i} \mathbf{F}_i^k + \Delta t^2 \quad (3.5)$$

$$\mathbf{F}_i^{k+1} = \dots \quad (3.6)$$

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

Je třeba si uvědomit, že nejprve počítáme působící sílu a pak až rychlost částice, tudíž nemůžeme tento algoritmus použít v případech, kdy je síla funkcí rychlosti, například při výpočtech v magnetických polích. Nevýhodou je též, větší paměťová náročnost než u Eulerova algoritmu, protože v paměti musíme uchovávat hodnoty působící síly ze dvou časových kroků.

□ Metoda Leap frog

Je to metoda druhého řádu. Diferenční schéma má tvar:

$$\mathbf{r}_i^{k+1} = \mathbf{r}_i^k + \mathbf{v}_i^{k+\frac{1}{2}} \Delta t + \frac{1}{2m_i} \mathbf{F}_i^k + \Delta t^2 \quad (3.8)$$

$$\mathbf{F}_i^{k+1} = \dots \quad (3.9)$$

$$\mathbf{v}_i^{k+\frac{3}{2}} = \mathbf{v}_i^{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i^{k+1} \Delta t \quad (3.10)$$

Nevýhodou metody je problematické určení počátečních podmínek pro rychlost, neboť první hodnota je položena do času poloviny časového kroku. Ukazuje se, že nejsou tyto metody ve fyzice plazmatu příliš vhodné pro svou časovou náročnost.

3.3.3 Půlkrokový algoritmus pro magnetické pole

U nabitých částic se generují všechny tři složky rychlostí. Musíme počítat nejen změnu rychlosti částice vlivem elektrického pole, ale i magnetického pole. Pohybové rovnice částic je nejlépe počítat metodou Leap frog, kterou musíme doplnit o magnetické pole. Úprava spočívá v odlišném postupu při výpočtu x-ové a y-ové rychlosti částice po každém časovém kroku. Tuto modifikaci nazveme jako půlkrokový

algoritmus [11] a má následující tři části: half acceleration, rotation, half acceleration. Přiblížíme si princip tohoto algoritmu. V prvním kroku vypočteme změnu rychlosti částice za časový krok $\frac{\Delta t}{2}$ vlivem elektrického pole. V druhém kroku provedeme rotaci částice. Ve třetím kroku určíme změnu rychlosti částice za časový krok $\frac{\Delta t}{2}$ vlivem elektrického pole.

Matematické vyjádření tohoto algoritmu rozdělíme do tří částí:

1. krok změna rychlosti částice („half acceleration“)

$$v_x(t_1) = v_x\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{q}{m} E_x(t) \left(\frac{\Delta t}{2}\right), \quad (3.11)$$

$$v_y(t_1) = v_y\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right), \quad (3.12)$$

2. krok rotace („rotation“)

$$v_x(t_2) = \cos(\omega_c \Delta t) v_x(t_1) + \sin(\omega_c \Delta t) v_y(t_1), \quad (3.13)$$

$$v_y(t_2) = -\sin(\omega_c \Delta t) v_x(t_1) + \cos(\omega_c \Delta t) v_y(t_1), \quad (3.14)$$

3. krok změna rychlosti částice („half acceleration“)

$$v_x\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v_x(t_2) + \frac{q}{m} E_x(t) \left(\frac{\Delta t}{2}\right), \quad (3.15)$$

$$v_y\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v_y(t_2), \quad (3.16)$$

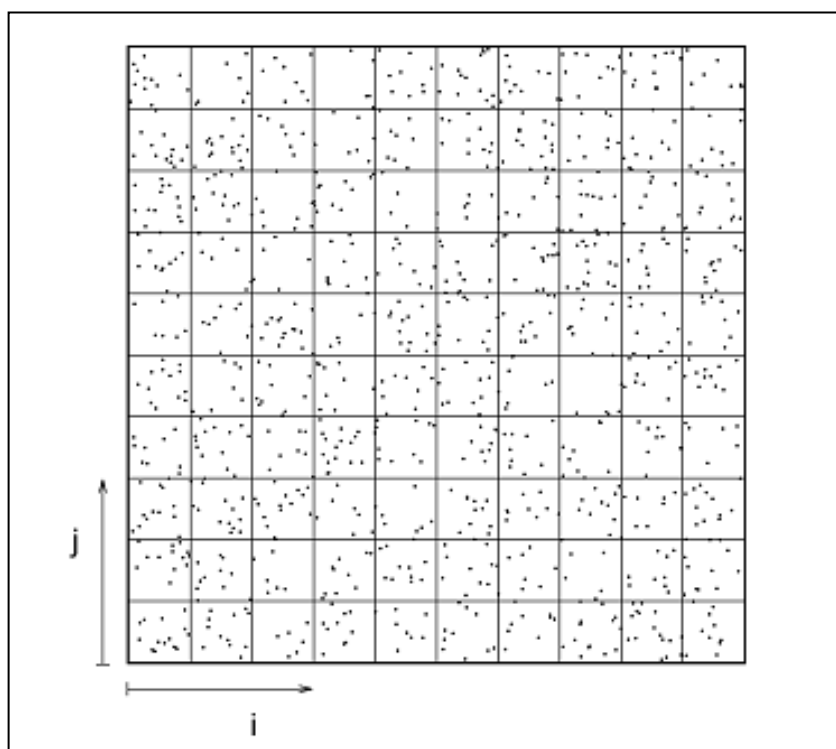
kde Δt je základní časový krok a pro časy t_1, t_2 platí následující podmínka:

$$\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) < t_1 < t_2 < \left(t + \frac{\Delta t}{2}\right).$$

E je intenzita elektrického pole působící na částici s nábojem q , m je hmotnost částice, v je její rychlost a ω_c je Larmorova frekvence.

3.4 Metoda P-I-C

Ve fyzice plazmatu je zřejmě nejrozšířenější metoda Particle-In-Cell (P-I-C), která převádí interakci částic na interakci s mříží. Liší se od ostatních v tom, že nerozlišuje mezi krátkodosahovou a dalekodosahovou interakcí. Veškeré silové působení mezi částicemi určíme tak, že vypočítáme nábojovou hustotu, vypočteme potenciál a z něj určíme síly. Složitost tohoto algoritmu je řádově $O(N \log N)$.



Obrázek 3.2: Rozdělení pracovní oblasti pro metodu P-I-C [1].

Popíšeme si obecný postup při použití této metody. Pracovní oblast převedeme na soustavu s mříží (rozdělíme na menší buňky, obrázek 3.2). Vypočítáme intenzitu lokálního elektrostatického pole podle následujícího postupu [1, 18]:

1. Celkový elektrický náboj všech částic v buňce složíme do jedné výsledné částice (q_{ij}) ve středu buňky. Lze udělat různými způsoby, nejčastěji se používá metoda NGP a metoda CIC:
 - a) Metoda NGP (Nearest Grid Point). Sečteme hodnotu všech nábojů v buňce a přeneseme výsledný náboj do středu buňky.
 - b) Metodu CIC (Cloud In Cell). Využijeme toho, že v okolí částice přeneseme jednu malou oblast (jeden čtvereček na obrázku 3.2) a podle toho jaká část dílku zasahuje do dalšího čtverečku, rozdělíme náboje do čtyř oblastí. Nevýhoda je, že částice zasahuje do více buněk a přispívá k několika výsledným nábojům. Předpokládáme, že částice s nábojem má stálou hustotu a tvarově je stejná jako buňka.
2. Abychom získali prostorovou hustotu náboje ρ_{ij} musíme vydělit částici objemem buňky.

3. Vyřešíme Poissonovu rovnici:

$$\Delta U = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}, \quad (3.17)$$

tím získáme hodnoty elektrického potenciálu v každé buňce.

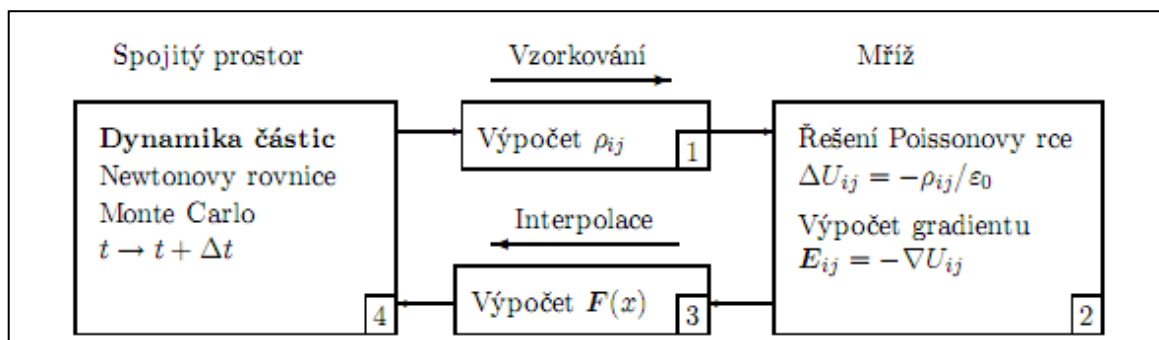
4. Přejdeme od elektrického potenciálu k výsledné intenzitě elektrického pole. K tomu použijeme následující diferenční schémata typu:

$$(E_{ij})_x = \frac{U_{i+1,j} - U_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad (3.18)$$

V metodě P-I-C je rozhodující správná volba metody v kroku 1. Metoda NGP rozloží náboj s podstatně většími fluktuacemi než při použití metody CIC. To má za následek získání většího rozptylu hodnot intenzit lokálního elektrického pole. V praxi se více používá metoda CIC, která v konečném důsledku představuje lineární interpolaci náboje. Reálně můžeme použít i silnější interpolační metody.

Volba vhodného schématu je kompromisem mezi výpočetní náročností a přesností výpočtu. Ve fyzice plazmatu dáváme přednost rychlosti výpočtu před přesností, neboť výpočetní náročnost modelů je vysoká, a navíc nedokonalá znalost vstupních parametrů často způsobuje podstatně větší chybu, než použité numerické metody.

Pro přehlednost můžeme obecný postup shrnout v následujícím schématu (obrázek 3.3), který je podrobně popsán v [18].



Obrázek 3.3: Schéma časového kroku v metodě P-I-C, nalezneme v [18].

Důležitým krokem při použití metod molekulární dynamiky je realizace srážek. Pojmem srážky rozumíme krátkodobý kontakt dvou těles (částic). Coulombovská interakce je sice v modelu již zahrnuta, avšak vlivem interpolace na mříž jsou krátkodosahové účinky této interakce vyhlazeny. Proto musíme v případě, že je coulombovský rozptyl do velkých úhlů významný, zahrnout tuto interakci do srážek.

V modelu typu Particle-In-Cell simulujeme srážky zpravidla metodou Monte Carlo (MCC neboli Monte Carlo Collisions). Důvodem je jednak náhodná povaha srážkových procesů, a potom také fakt, že neutrální atomy a molekuly v modelu nejsou částicemi, neboť z hlediska P-I-C modelu nemají neutrální částice žádný vliv na potenciál.

Princip metody MCC spočívá v simulaci srážek pro náhodně vybrané částice v náhodných okamžicích. Také druh probíhající interakce, rychlost interagujícího partnera a výsledek srážky jsou náhodné. Veličiny, které nám ovlivňují srážky jsou: volná dráha, střední volná dráha a účinný průřez.

Základním úkolem při řešení transportního problému ve fyzice je rozehrání náhodné volné dráhy. V této souvislosti nás nejvíce zajímá náhodná volná dráha a střední volná dráha. Náhodná volná dráha ξ je vzdálenost, kterou urazí částice mezi dvěma po sobě jdoucími srážkami a zároveň se jedná o veličinu náhodnou. Naproti tomu střední volná dráha λ je nenáhodné číslo udávající průměrnou vzdálenost mezi srážkami a charakterizuje tak prostředí, v němž přenos probíhá. Zajímá nás vztah pro rozehrání náhodné volné dráhy ze střední volné dráhy

$$\xi_i = -\lambda \cdot \ln \gamma_i, \quad (3.19)$$

kde γ je rovnoměrně rozdělená náhodná veličina v intervalu $(0,1)$, přičemž hodnota 0 nesmí být mezi hodnotami zastoupena.

Další veličina, která se používá k charakterizování srážkového procesu, se nazývá účinný průřez σ , která nám vyjadřuje pravděpodobnost, s jakou určitá srážka nastane. Účinný průřez lze definovat jako koeficient úměrnosti mezi počtem částic, které nalétávají rychlostí na rozptylové centrum a počtem částic, které jsou rozptýleny za jednotku času. Účinný průřez zjišťujeme z experimentu, popřípadě z kvantově-mechanických vztahů.

3.5 Shrnutí poznatků o částicových technikách

Shrňme základní poznatky o částicovém modelování. Mezi hlavní výhody patří:

- ❑ Získáme podrobné informace o studované soustavě na základní (mikroskopické) úrovni.
- ❑ Díky tomu mají výsledky daleko větší vypovídací schopnost, než v případě spojitého modelování.
- ❑ Velmi dobrých výsledků dosahujeme, pokud není systém rozsáhlý a je složený z homogenních částic.

Mezi nevýhody patří:

- ❑ Problém nastává, je-li systém rozsáhlý. Ukazuje se, že v systému musíme vyřešit přibližně $10^4 - 10^8$ rovnic [1]. Výpočetní náročnost roste exponenciálně.
- ❑ Uplatňujeme poměrně komplikované algoritmy urychlující výpočty, což je náročné jak na výpočetní čas a lidské zdroje. Díky tomu mnohdy musíme velmi dlouho čekat na odpovídající výsledky.
- ❑ Ve většině případech neexistuje přímá vazba na experiment.

4 Spojitý model pro řešení plazmatu

Jak jsme výše uvedli v předchozích kapitolách, spojitý model lze použít pro studium fyzikálního jevu na makroskopické úrovni. Pracujeme přitom s makroskopickými veličinami jako je teplota, tlak, koncentrace, rychlost proudění, intenzita elektrického, magnetického či gravitačního pole atp. Vztahy mezi těmito veličinami jsou popsány pomocí rovnic s využitím platných fyzikálních zákonů (zákony zachování energie, hybnosti, hmoty, atp.). Ze znalostí některých veličin hledáme závislosti veličin ostatních. Při popisu pomocí makroskopických veličin určíme zpravidla soustavu několika mála parciálních diferenciálních rovnic, přičemž využíváme postupy numerické matematiky.

4.1 Boltzmannova rovnice

Plazma se skládá z mnoha částic nacházejících se často daleko od termodynamické rovnováhy, a proto k jeho popisu využíváme metod statistické fyziky. Stav souboru identických částic je určen jejich rozdělovací funkcí

$$f(x, v, t) dx dv, \quad (4.1)$$

kde pod symbolem dx rozumíme součin dx_1, dx_2, dx_3 a obdobně to platí pro dv . V případě, že se systém skládá z více složek, je každá popsána samostatnou rozdělovací funkcí f_i . Velmi často rozdělovací funkci normujeme ke koncentraci částic.

$$\int f(x, v, t) dv = n(x, t), \quad (4.2)$$

Hodnota $f(x, v, t) dx dv$ při tomto normování vyjadřuje střední počet částic v objemu $dv dx$. Podrobnější informace lze nalézt v [18].

Soustava rovnic je tvořena rovnicemi popisujícími například chování tekutiny elektronů, kladných iontů, které jsou vzájemně vázány. Například rovnicemi popisujícími elektrické a magnetické pole, které lze získat jako momenty Boltzmannovy kinetické rovnice. Odvození nalezneme v publikaci [20]. Boltzmannova rovnice má tvar:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \nabla_v f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_s, \quad (4.3)$$

kde f označuje hustotu pravděpodobnosti výskytu částice v daném místě o dané rychlosti \vec{v} , m je hmotnost daného typu částic, \vec{F} je působící síla, t je čas, ∇_v gradient v rychlostním prostoru a $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_s$ srážkový člen popisující změnu rozdělovací funkce v důsledku srážek.

Ukazuje se, že řešení Boltzmannovy kinetické rovnice je ve většině případech poněkud komplikované, přičemž největší komplikace jsou způsobeny právě hledanou veličinou, tzn. hustotou pravděpodobnosti f , jelikož je funkcí proměnných (rychlost, poloha, čas a dále). Podrobnější informace nalezneme v [2, 18]. V praxi používáme zpravidla tři momenty:

rovnice kontinuity:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\vec{v}) = \frac{Q^\rho}{m}, \quad (4.4)$$

zákon zachování hybnosti:

$$mn \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + mn(\vec{v} \cdot \nabla)\vec{v} + \nabla \vec{P} - nq(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) = \vec{Q}^p, \quad (4.5)$$

zákon zachování energie:

$$\frac{1}{\gamma-1} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (p\vec{v}) \right) + (\vec{P} \cdot \nabla)\vec{v} + \nabla \cdot \vec{L} = Q^E, \quad (4.6)$$

n označuje koncentraci částic příslušného druhu, p označuje tlak, \vec{E} označuje vektor intenzity elektrického pole, \vec{B} vektor magnetické indukce, \vec{P} tenzor tlaku, γ označuje poměr tepelných kapacit při stejném tlaku a stejném objemu, q je náboj částice. Podívejme se na srážkové členy Q^ρ, \vec{Q}^p, Q^E . Podrobný rozbor těchto členů naleznete v [2].

Systém uzavřeme soustavou Maxwellových rovnic:

$$\varepsilon_0 \nabla \cdot \vec{E} = \sigma, \quad (4.7)$$

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \vec{B} = \vec{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (4.8)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (4.9)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (4.10)$$

kde ϵ_0 je permitivita vakua, μ_0 označuje permeabilitu vakua, σ představuje hustotu náboje, \vec{j} je vektor hustoty toku elektrického náboje, \vec{E} intenzita elektrického pole, \vec{B} vektor magnetické indukce. Některé veličiny je třeba vyjádřit pomocí vhodných algebraických vztahů, například pomocí stavové rovnice:

$$p = C\rho^\gamma, \quad (4.11)$$

rovnice pro toku hustoty elektrického náboje:

$$\vec{j} = \sum_j n_j q_j \vec{v}_j, \quad (4.12)$$

rovnice hustoty elektrického náboje:

$$\sigma = \sum_j n_j q_j. \quad (4.13)$$

4.2 Tekutinové modely

V případě, že předmětem zájmu není samotná rozdělovací funkce, nýbrž prostorové rozdělení koncentrace a toku jednotlivých tekutin, je výhodné použít takzvané tekutinové modely. Jak již název napovídá, tyto modely popisují plazma jako směs tekutin chovajících se dle dynamiky kontinua.

Výchozím bodem pro sestavení rovnic tekutinového modelu je opět Boltzmannova kinetická rovnice. Postupujeme tak, že násobíme Boltzmannovu rovnici n -tou mocninou hybnosti, a poté středujeme přes prostor hybnosti. Tímto způsobem získáme n -tý moment Boltzmannovy kinetické rovnice. Nultý moment potom popisuje zachování hmoty, první moment zachování hybnosti, druhý moment zachování energie, atd.

Ukazuje se, že použití vícetekutinového modelu je v těchto případech zbytečné, a proto se používá model jednotekutinový. Nejjednodušší z této třídy modelů jsou magnetohydrodynamické modely, které nahlíží na plazma jako na jednosložkovou vodivou tekutinu. Používáme soustavu diferenciálních rovnic získanou z modelů vícetekutinových lineární kombinací [2, 5]. Praktické použití nacházíme v magnetohydrodynamických rovnicích, které mají při zanedbání srážek tvar [5]:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right) = \sigma \vec{E} + \vec{j} \times \vec{B} - \nabla \vec{P}, \quad (4.14)$$

$$\frac{1}{\gamma - 1} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (p \vec{v}) \right) = -(\vec{P} \cdot \nabla) \vec{v} - \eta j^2, \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0, \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{j}) = 0, \quad (4.17)$$

$$\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} = \eta \vec{j}. \quad (4.18)$$

Soustavu těchto pěti rovnic velmi často používáme při modelování ve fyzice horkého plazmatu.

4.3 Shrnutí poznatků o spojitých technikách

Mezi výhody patří:

- ❑ Programy jsou ve většině případů velmi nenáročné na strojový výpočetní čas. Pohybujeme se řádově v desítkách minut, případně v hodinách strojového času. Markantní je to v porovnání se dny či měsíci u částicových modelů.
- ❑ Porovnání výsledků modelu s experimentem bývá poměrně jednoduché.

Mezi nevýhody patří:

- ❑ Použité rovnice matematické fyziky jsou velmi obecné a i přes jejich konkretizaci volbou počátečních a okrajových podmínek jsou získávané výsledky dosti obecné a nepřesné.
- ❑ Rovnic u spojitých modelů máme méně, bohužel jsou výrazně komplikovanější. Vytvoření algoritmu řešení těchto rovnic a jeho naprogramování bývá komplikované. Výrazně se zvyšuje časová náročnost.
- ❑ Částicové modely jen velmi obtížně uplatňujeme při studiu chemické kinetiky. V plazmochemii dochází k tomu, že ve výboji se složitější sloučeniny z plazmatu rozkládají a v následujícím řetězu reakcí vytvářejí sloučeniny nové. Příkladem takových procesů je vytváření diamantových vrstev výbojem v uhlovodících nebo vznik a zánik ozonu v kyslíkovém výboji pod vlivem dalších příměsí jako je metan nebo freony.

5 Hybridní modelování

Hybridní modelování je kombinací částicových a spojitých modelů. Při použití těchto technik se snažíme o využití předností obou technik a o minimalizaci či úplné odstranění jejich nevýhod. Hybridních metod je velké množství, uvedeme si pouze základní a nejvíce používané postupy. V praxi musíme přesný model vytvářet na míru příslušnému systému.

V rámci doposud probíraných metod počítačového modelování ve fyzice mluvíme o několika možných postupech či přístupech hybridního modelování:

1. Částečné hybridní modelování (modelování nižší úrovně)

Při použití tohoto postupu kombinujeme pouze metody částicového modelování, a to například: metodu molekulární dynamiky a metodu Monte Carlo.

2. Úplné hybridní modelování (modelování vyšší úrovně)

V tomto případě kombinujeme modelování spojitě s modelováním částicovým. Z modelování spojitého si převezmeme rychlost výpočtu a z modelování částicového si vypůjčíme přesnost.

Každý model hybridního typu je výsledkem řady kompromisů. Ve většině případů hybridní modely nepatří mezi nejpřesnější ani nejrychlejší. Důležité však je, že tento typ modelů nemá výrazné nedostatky. Ukazuje se, že nic není zadarmo, a proto za přijatelné výsledky platíme složitostí přípravy modelu a výsledného programu. Doba přípravy programu bývá ve většině případech minimálně stejná, jako je časový součet obou technik či ho výrazně překračuje.

Podívejme se na reálný příklad využití hybridního modelování, převzato z [1, 10]. Skutečné částicové hybridní modelování je základní technikou modelování v nízkoteplotním plazmatu a využijeme zde postup nižší úrovně modelování, kde kombinujeme částicové techniky. O chování plazmatu rozhodují především nabitě částice, proto právě jejich chování musíme namodelovat co nejpřesněji.

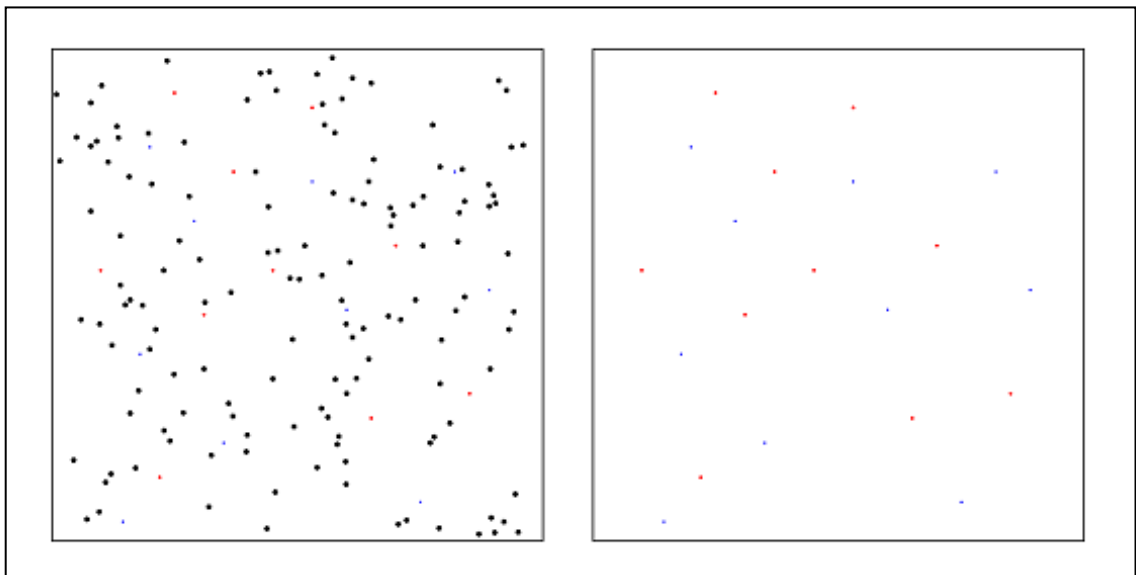
Hybridní model rozdělíme do těchto částí:

- Nejprve snížíme počet částic. Hybridní přístup pracuje pouze s nabitými částicemi, čímž značně omezuje rozsah souboru. Neutrální částice přesuneme do vlastností

prostředí. Pohyb nabitých částic studujeme v látkovém prostředí, jehož vlastnosti odpovídají interakcím s neutrálními částicemi.

- ❑ Model bude tvořen dvěma druhy tekutin. V molekulárně-dynamické části vytvoříme řídicí program, který bude řešit pohybové rovnice. Díky zavedení omezení pro silové působení uvažujeme pouze interakci s vnějšími poli a vzájemné interakce nabitých částic.
- ❑ Druhou část modelu bude tvořit metoda Monte Carlo. Pro každou nabitou částici rozehrajeme náhodnou volnou dráhu s charakteristikami danými interakcí s neutrálními částicemi.
- ❑ Současně probíhá výpočet v rámci hlavního programu, tj. budeme počítat trajektorie částic na základě pohybových rovnic. Testujeme, zda délka trajektorie od poslední interakce není rovna rozehrané náhodné volné dráze. Nastane-li tento případ, přejdeme do podprogramu Monte Carlo a rozhodneme o typu interakce mezi nabitou a neutrální částicí a odpovídajícím způsobem ošetříme energii a směr pohybu částice.
- ❑ Pak rozehrajeme novou náhodnou volnou dráhu a vrátíme se zpět do hlavního molekulárně-dynamického programu.

Tento přístup vede ke značnému urychlení výpočtu. Celkový počet částic v modelu klesne, protože zde budou pouze nabité částice. V praxi se ukazuje, že zavedením metody Monte Carlo do modelu sice zpomalíme výpočet, ale v konečném důsledku nám klesne počet částic, čímž tento nedostatek kompenzujeme, viz. obrázek 5.1 – pravá část.



Obrázek 5.1: Částicový model plazmatu – přístup molekulární dynamiky (vlevo), přístup hybridního modelování (vpravo) [1, 10].

Jak již bylo uvedeno hybridních modelů máme celou řadu a v současnosti patří mezi nejdůležitější a nejvíce používané ve fyzice plazmatu. V následujících podkapitolách se podíváme na nejpoužívanější hybridní modely. Pro nás nejcennější poznatky budou při zkoumání časové složitosti a efektivnosti jednotlivých modelů.

5.1 Energetický model

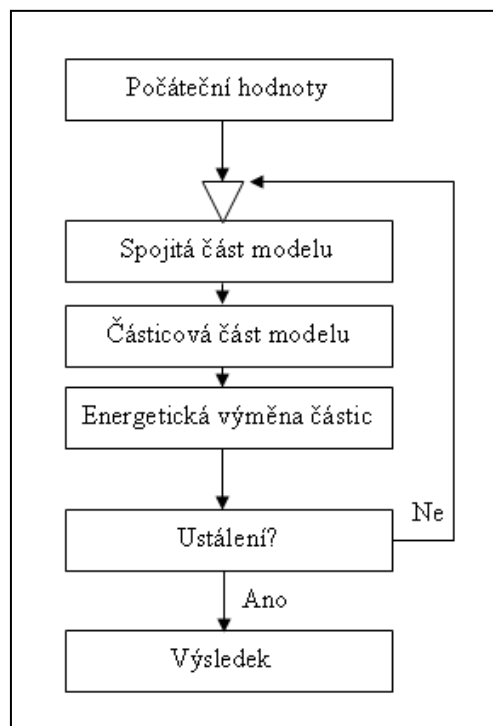
V této kapitole se budeme zabývat tzv. energetickým modelem [19, 24]. Jedná se o modelování vyšší úrovně, které využívá předností částicového i spojitého modelu. Hranice mezi nimi je dána hodnotou energie elektronu. Ionizační energie argonu je 15,8 eV. Například v pozitivním sloupci doutnavého výboje v argonu je to nejnižší energie elektronu potřebná k excitaci, její hodnota je 11,5 eV.

Elektrony s vyšší energií, než je tato prahová energie, jsou schopny podstoupit nepružné excitační a ionizační srážky a to vede v konečném důsledku k narušení elektronové rozdělovací funkce, kterou lze pro nižší energie považovat za maxwellovskou. Elektrony rozdělíme podle energie: na „pomalé“ a „rychlé“. Výhodnost této metody spočívá v tom, že je potřeba částicově modelovat relativně malý počet částic. Nedostatkem této metody je, že je potřeba předpokládat například maxwellovskou rozdělovací funkci pro pomalé elektrony. Tento předpoklad nebývá zpravidla v blízkosti sondy či jiných pevných povrchů v plazmatu splněn, jelikož

elektrony při svém pohybu v elektrickém poli zvyšují (respektive snižují) svou energii, tím je ovlivněna rozdělovací funkce.

Dále je třeba uvažovat dva procesy. Klesne-li energie „rychlého“ elektronu pod hodnotu prahové energie, přesuneme ji do spojitě části modelu. Reálně dochází i k opačnému procesu. „Pomalé“ elektrony mohou zvýšit svou energii nad prahovou energii, pak je potřeba elektron zařadit do částicové části modelu. Nejvíce záleží na velikosti elektrického pole, které způsobuje urychlování elektronů. Potom určíme počet elektronů, které přejdou do částicového modelu, jejichž konkrétní hodnoty nastavíme metodou Monte Carlo. Ve spojitě části modelu neznáme parametry jednotlivých elektronů, a proto využijeme pravděpodobnostního přístupu.

Ve výpočtovém schématu energetického modelu (obrázek 5.2) střídáme použití částicového a spojitěho modelu. V každém kroku provedeme uvedenou výměnu částic mezi modely podle jejich energie. Jelikož je spojitě model výrazně pomalejší, budeme postupovat následujícím způsobem. Na jeden krok spojitěho modelu případně několik kroků v částicovém modelu.

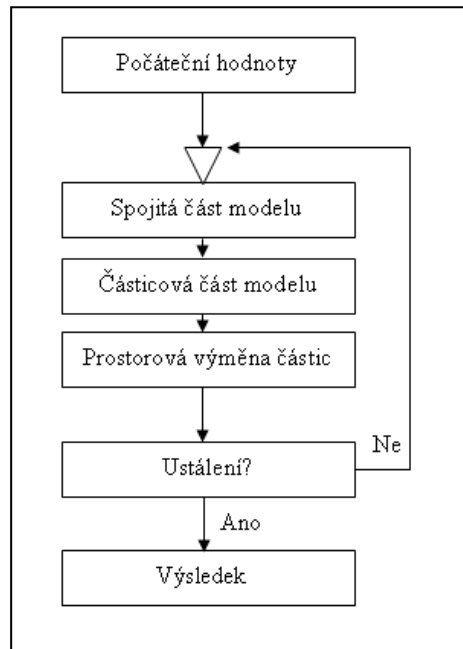


Obrázek 5.2: Schéma energetického modelu, upraveno z [18].

5.2 Prostorový model

Reálně se ukazuje, že jen malá část zkoumané oblasti vyžaduje výpočet částicovým modelem. Rozdělíme proto pracovní oblast na dvě části. Tam, kde požadujeme přesnější výpočet, použijeme částicový model a zbytek oblasti popíšeme spojitým modelem. Zajistíme, aby částicový model byl použit na co nejmenší pracovní oblasti, celý výpočet se tím urychlí díky simulaci menšího počtu částic. Největším nedostatkem tohoto přístupu je stabilita výpočtu, kterou je zapotřebí zajistit vhodným zvolením hranice mezi spojitým a částicovým modelem. Popis tohoto typu modelu lze nalézt v [18].

Na obrázku 5.3 je schematicky uveden postup výpočtu prostorového modelu, který je převzat z [18, 19]. Po načtení vstupních hodnot v každém časovém kroku provedeme spojitý i částicový výpočet v odpovídajících oblastech a případně zajistíme výměnu částic mezi oblastmi. Při porovnání časové náročnosti spojitě a částicové části modelu dojdeme k různým časovým výsledkům. Spojitá část bývá zpravidla rychlejší, zatímco částicová část je přesnější.



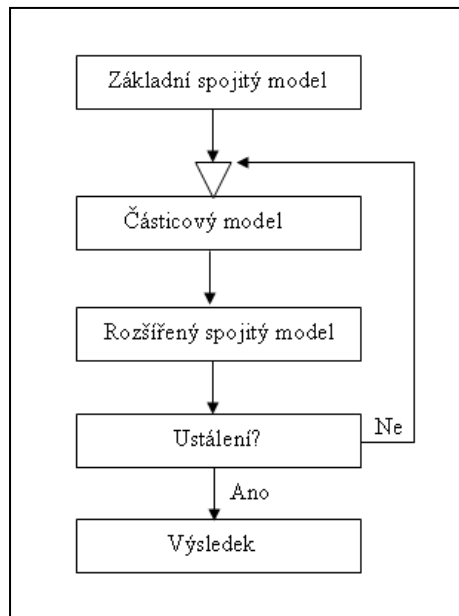
Obrázek 5.3: Schéma prostorového modelu, upraveno z [18].

5.3 Iterační model

Základní schéma běhu iteračního modelu si prohlédněme na obrázku 5.4 [2, 18]. Nejprve provedeme jednoduchý výpočet pomocí spojitého modelu, ve kterém je maxwellovské rozdělení energie elektronů. Z tohoto modelu získáme rozložení intenzity elektrického pole v prostoru a následně ho použijeme k výpočtu silového působení na částice v částicovém modelu. Další informace například o koncentraci částic a hustotě energie elektronové tekutiny využijeme při řešení soustavy diferenciálních rovnic v závěrečné fázi.

Výsledné prostorové rozdělení potenciálu elektrického pole převezmeme do neselfkonzistentního částicového modelu, kde necháme částice (např. elektrony, ionty, ...) volně pohybovat v pevně daném elektrickém poli. Protože se jedná o neselfkonzistentní výpočet, je čas k provedení simulace poměrně krátký. Získáme rozdělovací funkce, které nám umožní výpočet reakčních koeficientů a ty můžeme dále zpětně využít ve spojitém modelu. Pracovní oblast přitom zpravidla vhodně rozdělíme na několik dílčích částí. Upřesněné koeficienty následně vstupují do spojitého modelu. Proces několikrát opakujeme, až dospějeme do ustáleného stavu.

Metoda je nevhodná pro řešení problémů s výraznými změnami v čase. 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. Snažíme se výpočet maximálně urychlit, proto používáme získané závislosti jako nové vstupní podmínky závěrečné fáze výpočtu.



Obrázek 5.4: Schéma iteračního modelu, upraveno z [18].

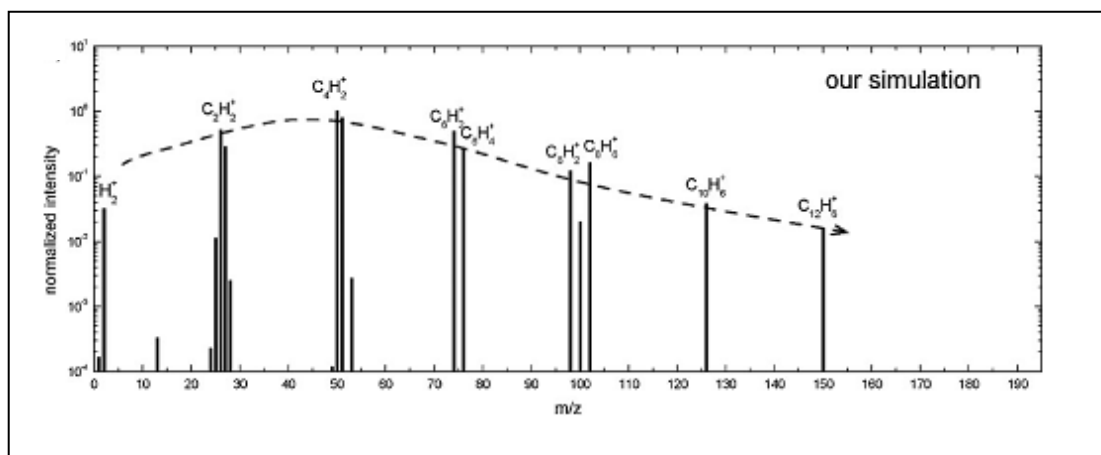
Při porovnání efektivity jednotlivých metod se ukazuje například práce [2], že nejnáročnější na výpočetní čas je neselfkonzistentní částicový model. Jeho časová náročnost tvoří převážnou část z celého iteračního modelu a je to zcela pochopitelné, protože zde řešíme problémy výše popsané. Nejméně náročný na výpočtový čas je spojitý model.

6 Porovnání jednotlivých modelů v praxi

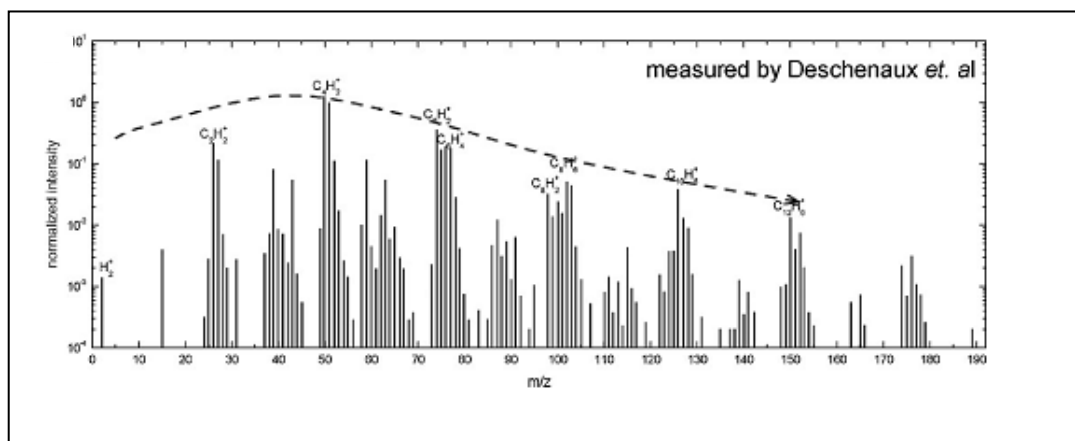
V této kapitole porovnáme jednotlivé modely dle jejich výkonnosti a shrneme jejich výhody a nedostatky. Dále rovněž porovnáme jejich současné možnosti, výsledky a efektivitu.

6.1 Tekutinový model

Tekutinové modelování je založeno na řešení rovnice kontinuity pro různé druhy plazmatu v kombinaci s Poissonovou rovnicí, za účelem získání rozdělení elektrického pole. Tento přístup je zvláště vhodný pro detailní popis plazmatu, v němž probíhají chemické procesy. Jako ukázkou lze uvést práci [21], v níž jsou simulovány procesy v plynu C_2H_2 o tlaku 27 Pa. Pro tento plyn lze uvažovat 78 různých druhů částic, přičemž pro tyto částice existuje přibližně 400 srážkových procesů. Výhodou tohoto modelu je, že ani přes různorodost částic, nebude výsledný model časově náročný.



Obrázek 6.1: Ukázka výstupu - simulované hodnoty kladných iontů použitím tekutinového modelování pro radiofrekvenční výboje, které působí v acetylenu o 27 Pa, frekvenci 13,56 MHz a výkonu 40 W [21].



Obrázek 6.2: Naměřené hodnoty hmotnostního spektrum kladných iontů při použití radiofrekvenčního výboje v acetylenu při tlaku 27 Pa, frekvenci 13,56 MHz a výkonu 40 W [21].

Porovnáme-li počet srážek v našem modelu s reálně provedeným experimentem (viz obrázky 6.1 a 6.2), zjistíme, že výsledky simulace modelu obsahují daleko méně vypočítaných intenzit, než je v reálném experimentu. V reálných situacích se vyskytuje daleko více vrcholů (píků) simulovaného spektra. To ukazuje, že v reálném plazmatu dochází k celé řadě dalších srážkových procesů.

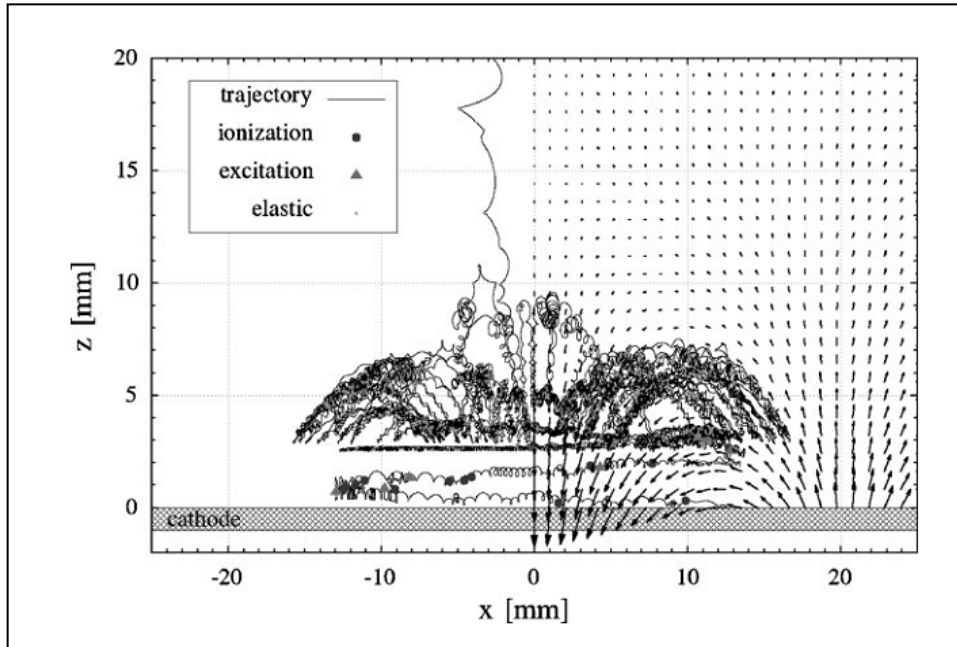
Pomocí tekutinového modelování dobře simulujeme reálné procesy, a to nejen ve fyzice plazmatu. Model u většiny případů reálně odpovídá experimentálním hodnotám, a to díky tomu, že kladné částice, které nejvíce ovlivňují chování plazmatu, jsou v obou dvou případech dominantní, a proto nedochází ke zkreslení výsledných křivek. Pro záporné ionty jsou výsledky simulace horší než u kladných iontů, přesto jsou tyto výsledky použitelné pro další modelování.

Nevýhodou tohoto modelu je, že nezobrazuje dostatečně přesně ostatní vlivy, proto je vhodné tento model upravit. Úprava byla provedena v publikaci [7]. Dalším slabým místem tekutinových modelů je předpoklad, že získaná energie částic díky elektrickému poli je v rovnováze s energií, jež ztratí částice v důsledku srážek v plazmě. Elektronů obvykle získávají energii již před srážkami, především pak při nízkých tlacích. Energií elektronové tekutiny zpravidla odhadneme v tekutinových modelech pomocí energetické bilanční rovnice. Přesnější odhad získáme užitím metody Monte Carlo.

6.2 Monte Carlo simulace

Výhody a nevýhody simulací pomocí metody Monte Carlo si předvedeme na výsledcích práce [21]. V této práci je simulován proces výboje v čistém argonovém plazmatu.

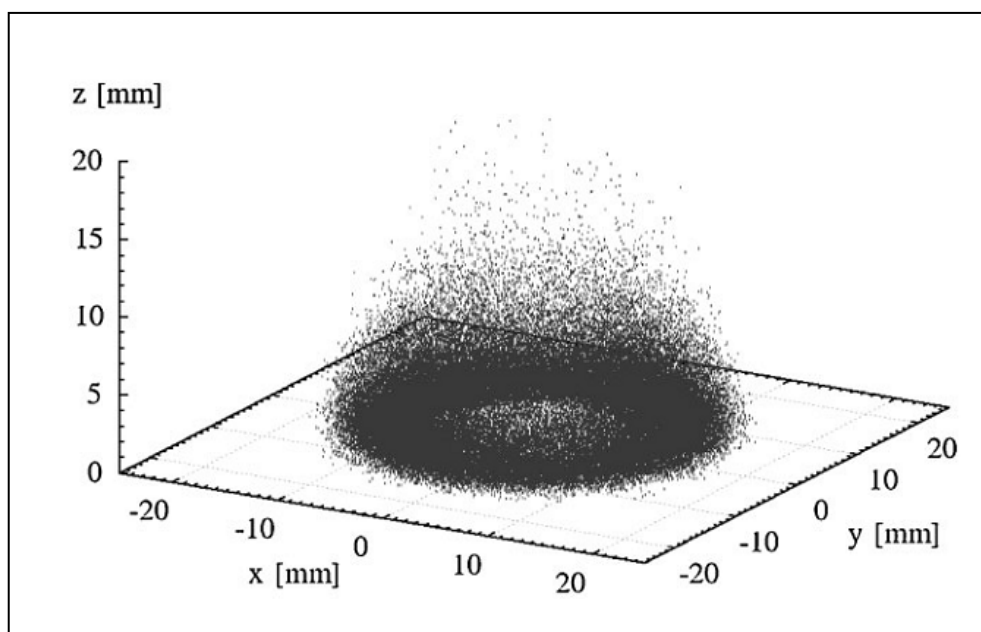
Jelikož se jedná o jednoduchý problém, kdy sledujeme především elektrony, můžeme využít simulaci pomocí metody Monte Carlo. Díky jednoduchosti problému si dokonce můžeme dovolit modelovat v plném 3D prostoru. Ta nám umožní stanovit přesnou trajektorii pohybu jednotlivých elektronů. Jelikož je tato trajektorie ovlivněna přítomností elektrického a magnetického pole využijeme Newtonových zákonů. Ze všech srážkových procesů, které máme k dispozici, vybereme ty, nejčastěji nastávající (tj. výskyt kolize, druh kolize, atp.). Výstup z modelu je zobrazený na obrázku 6.3. Můžeme pozorovat trajektorii elektronu vypuštěného z magnetronu, přičemž okamžiky a místa srážek jsou znázorněny plnými kroužky, nebo pomocí trojúhelníků. V pravé části obrázku 6.3 pozorujeme magnetické siločáry vypočtené pomocí softwaru GetDP, kde byla použita numerická metoda pro řešení konečných prvků.



Obrázek 6.3: Vypočtená dráha elektronu, který je emitován z katody magnetronu a nacházející se v argonu o tlaku 10 Pa, při bočním pohledu [21].

Uvedené výsledky byly získány pro argon při tlaku 10 Pa. Hodnota tlaku je výrazně vyšší než ve standardních magnetronových zařízeních a bereme zde v úvahu pouze vliv elektronové ionizace, excitace a elastické srážky s atomy Ar. Elektron v takovém případě urazil svou dráhu počínaje emitací z katody do výstupu za 1,63 ms a vyvolal 13 ionizací, 7 excitací atomů argonu a podstoupil celkem 884 srážek [21, 25].

Pro reálné tlaky dostáváme mnohem větší počet srážek viz obrázek 6.4, kde byl reálný tlak 0,8 Pa.



Obrázek 6.4: Rozložení srážek pro 50 000 elektronů, vypouštěné magnetronem do argonu plynu při tlaku 0,8 Pa [21].

Abychom zkrátili výpočetní čas řádově na hodiny, sledujeme pouze elektrony, jejichž celková energie (součet potenciální a kinetické energie) klesne pod 11,5 eV. Pouze 5% simulovaných elektronů indukuje srážky a přispívá k ionizaci plazmatu.

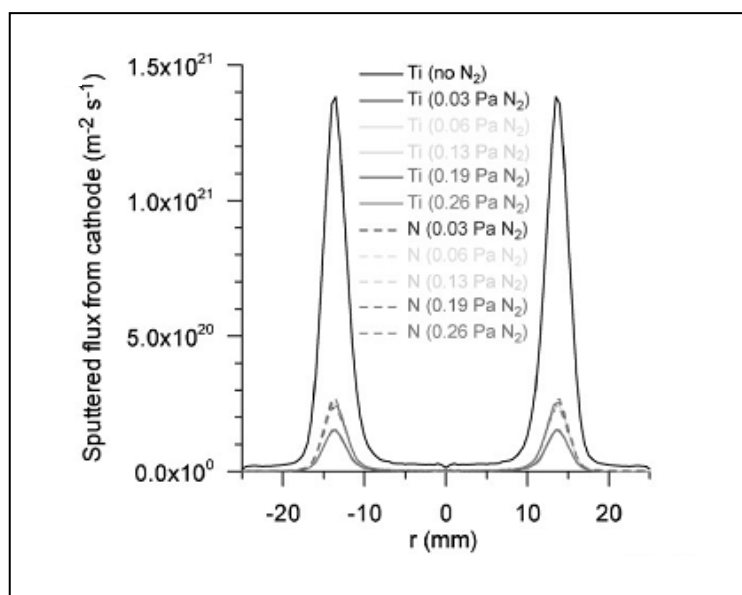
Příklad ukazuje možnosti metody Monte Carlo – metoda je ideální pro detailní popis chování jednotlivých částic. Časová náročnost je relativně malá (delší než u spojitých technik), a to se ukazuje v porovnání s jinými metodami jako velmi rozumné (metoda PIC-MCC). Bohužel metoda neumožňuje určit přímo rozložení elektrického pole, které je ovlivňováno hustotou náboje.

6.3 Particle-in-Cell-Monte Carlo Collisions (PIC-MCC) simulace

Simulace je založena na stejném principu jako metoda Monte Carlo s tím, že pohyb stanovíme pomocí Newtonových pohybových zákonů a srážky simulujeme pomocí náhodných čísel. PIC-MCC simulace umožňuje zahrnout elektrické pole.

Při simulaci PIC-MCC je vhodné částice uspořádat do sítě, abychom mohli určit hustotu náboje pomocí Poissonovy rovnice. Tento krok zapříčiní zvýšení časové náročnosti této simulace. Za účelem snížení výpočetního času reálné částice (elektrony a ionty) nahradíme super-částicí s hmotností odpovídající počtu reálných částic. Délku výpočtu ovlivní především to, jaké předpoklady do modelu zahrneme. Promítneme-li do něho například poznatky z plazmové chemie, celý model se nám výrazně zkomplikuje a důsledkem bude zvýšení časové náročnosti až na několik týdnů.

Jako ukázkou použití metody PIC-MCC ukážeme výsledky práce prezentované v [23]. Zde je simulován výboj ve směsi Ar/N₂ s titanovou katodou v planárním dc magnetronu. V tomto případě musíme kromě elektronů simulovat i několik dalších druhů iontů (Ar⁺, N₂⁺, N⁺, Ti⁺) a rychlých atomů (Ar, Ti, N). Rychlé Ar atomy v důsledku srážek zionizují na ionty Ar⁺. Neutrální atomy Ti a N sledujeme, dokud jejich teplota nepřekročí určitou mez. Jejich další chování pak popíšeme pomocí difúzní rovnice, kterou najdeme v [23].



Obrázek 6.5: Vypočtené toky částic z katody [21].

Dosažené výsledky (vypočtené toky částic z katody) jsou zobrazeny na obrázku 6.5.

6.4 Hybridní model Monte Carlo spojený s tekutinovým modelováním

Při této simulaci použijeme druh hybridního modelu, kdy spojíme částicovou techniku Monte Carlo a spojitou modelovací techniku. Použití modelu Monte Carlo je výhodnější než použití modelu PIC-MCC, protože je na výpočetní čas méně náročný. Použitím této metody získáme podrobný obraz plazmatu v rozumném výpočetním čase. Schopnosti modelování tohoto přístupu jsou ilustrovány na modelech doutnavého výboje.

Částice	Použitý model
Ar atomy	Nepoužíváme model
Rychlé elektrony	Monte Carlo
Pomalé elektrony	Tekutinový
Ar ⁺ ionty	Tekutinový Monte Carlo

Tabulka 1: Přehled metod používaných pro simulaci daného druhu částic, upraveno z [21].

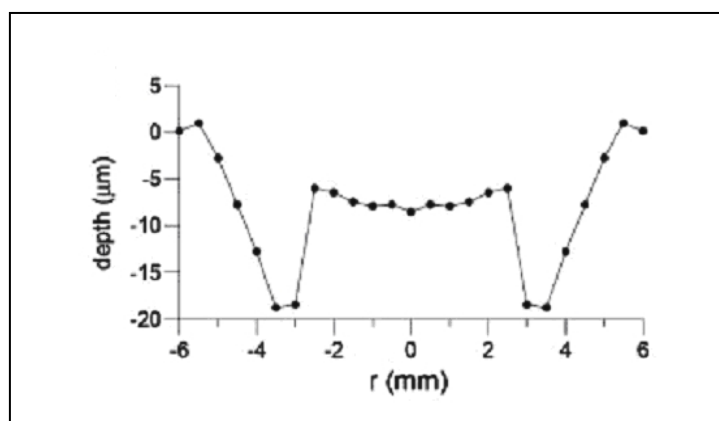
V plazmatu se vyskytuje velké množství různorodých částic, které musíme do modelu zahrnout. Tabulka 1 podává přehled o základních druzích částic a také o tom, jaký druh modelu bude použit na popsání chování konkrétního druhu částic. U atomů Ar předpokládáme jednotnou teplotní hodnotu, případně vše řešíme pomocí plynových rovnic vedení tepla, podrobnosti nalezneme v [26].

Elektrony rozdělíme do dvou skupin: takzvané rychlé elektrony s velkou energií. Ty řešíme pomocí metody Monte Carlo. Pomalé elektrony popíšeme pomocí tekutinového modelu. Role pomalých elektronů v plazmatu není tak významná, protože se neúčastní nepružných srážek. Jejich hlavní rolí v plazmatu je vést elektrický proud, jehož chování dobře popisuje tekutinový model.

Ionty Ar⁺ nejprve zařadíme také do tekutinového modelu a vše řešíme pomocí rovnice kontinuity a Poissonovy rovnice za účelem rozdělení elektrického pole. Bohužel

parametry iontové tekutiny nejsou přesně známé a jejich chování značně ovlivňuje intenzita elektrického pole. Bude-li intenzita značná, popisujeme ionty Ar^+ pomocí modelu Monte Carlo.

V tomto hybridním přístupu nás nejvíce zajímají změny energií (dopad elektronu, excitace, ionizace, rekombinace), protože se jedná o nejčastější procesy a ty zjistíme díky vzájemné interakci, která probíhá mezi různými druhy částic a řešíme jí iterativně do doby, než bude dosaženo ustáleného stavu. Náročnost tohoto hybridního modelu je několik dní, a to je výrazně kratší, než kdybychom použili ryze částicový model založený na technice PIC-MCC. Model dále můžeme jednoduše rozšířit i o další částice (v našem případě nečistoty). Standardní výsledky výpočtu zahrnují: elektrický charakter (tj. poměr elektrického proudu, elektrického napětí a tlaku, elektrické pole), hustoty a energie z různých druhů plazmatu a informace o srážkách v plazmatu.



Obrázek 6.6: Nasimulovaný profil kráteru pro doutnavý výboj po 1 h při napětí 1 000 V, tlaku 75 Pa a proudu 3 mA [21].

Výsledky jsou podrobně popsány v [21, 25]. Z nichž vytvoříme krátké shrnutí o možnostech využití hybridní metody. Obrázek 6.6 ilustruje profil kráteru pro doutnavý výboj po 1 h při napětí 1 000 V, tlaku 75 Pa a proudu 3 mA. Je nutno poznamenat, že je třeba udělat analýzu doutnavého výboje pomocí hloubkového profilování (tj. měření koncentrace nečistot ve vzorku). Musíme mít přehled o tom, co se v kráteru děje. V určité hloubce jsou vzorky odebrány ve stejném časovém okamžiku. Vypočtený profil kráteru (obrázek 6.6) není zdaleka ideální pro hloubkovou analýzu. Reálně je tento kráter po obou stranách mnohem hlubší, než ve středu.

6.5 Shrnutí jednotlivých používaných metod

Shrňme si poznatky, které se uplatňují v dnešní době při modelování plazmatu. Porovnejme náročnost a využitelnost jednotlivých používaných modelů a ohodnoťme jejich silné a slabé stránky, k čemuž nám poslouží tabulka 2. Tekutinový model, založený na řešení rovnice kontinuity pro jednotlivé druhy plazmatu, je zvláště vhodný pro detailní popis modelované situace. Ve výsledném modelu existuje velké množství různých druhů částic a model počítá i s chemickými reakcemi, které zahrneme do modelu, aniž by nás to stálo mnoho výpočetního času.

Spojením rovnice kontinuity s Poissonovou rovnicí získáme prostředek pro výpočet intenzity elektrického pole. Ukazuje se, že tento přístup však není vhodný pro detailní popis chování elektronu, neboť získáme pouze hodnoty průměrné energie elektronu, a to vypočítáme z rovnice energetické rovnováhy.

Podrobné chování elektronu poměrně přesně simulujeme použitím metody Monte Carlo, která nám pomocí generátorů náhodných čísel nasimuluje srážky elektronů. Poté použijeme diferenciální algoritmy na řešení Newtonových pohybových rovnic pro dráhu elektronu. Chceme-li dále zvýšit přesnost nahradíme metodu Monte Carlo metodou PIC-MCC, kde popis dráhy v plazmatu připojíme k řešení Poissonovy rovnice, za účelem získání selfkonzistentního rozložení elektrického pole. Hlavní nevýhodou tohoto přístupu je dlouhá doba výpočtu.

Jako nejvhodnější se ukazuje použití hybridních technik, kde využíváme modelování různých přístupů, čímž dostaneme úplný detailní obraz chování plazmatu, včetně povrchových procesů v atomovém měřítku. Bohužel hybridní techniky vedou k prodloužení výpočetního času.

Model	Stručný popis	Silné stránky	Omezení
Tekutivový	Rovnice kontinuity Poissonova rovnice pro elektrické pole	Rychlý Selfkonzistentní	Problém elektronové rovnováhy
Monte Carlo	Newtonovy pohybové zákony pro pohyb jednotlivých elektronů	Velmi vhodný pro zkoumání jednotlivých skupin částic (např. elektronů)	Není selfkonzistentní
PIC-MCC	Podobně jako metoda Monte Carlo + rovnice pro elektrické pole	Vhodné pro zkoumání elektronového chování Selfkonzistentní	Dlouhý výpočetní čas
Hybridní	Kombinace tekutinového modelu s modelem Monte Carlo	Vhodné pro zkoumání energetické rovnováhy Lepší výpočetní čas než v metodě PIC-MCC	Velmi dlouhý výpočetní čas

Tabulka 2: Shrnutí různých modelů pro popis plazmatu a shrnutí jejich silných stránek a omezení.

Závěr

Cílem diplomové práce bylo vytvoření přehledu základních poznatků v oblasti vývoje počítačové fyziky a možnost jejího dalšího využití při řešení, či modelování reálných problémů ve fyzice plazmatu.

V první části práce jsme si vymezili pojem plazma a provedli jsme jeho stručnou charakteristiku a možnosti jakým ho diagnostikovat. Zmapovali jsme si možnosti využití počítačové fyziky při simulacích plazmatu za přítomnosti magnetického pole založených na magnetohydrodynamickém popisu plazmatu, zkoumání slunečního maxima, meziplanetární prostředí a projekt ITER.

Druhá část stručně shrnuje historický vývoj výpočetní techniky a v návaznosti na to první krůčky počítačové fyziky. Nastínili jsme hardwarovou koncepci podle Johna von Neumanna, která se používá do dnešní doby a uvedli jsme v současnosti používaných operačních systémů, včetně jejich výhod a nedostatků. Dále v práci následuje výčet programovacích jazyků a základní schémata částicového, spojitého a hybridního modelu.

V další části práce jsme se zabývali jednotlivými přístupy pro simulace, jednotlivými postupy při modelování plazmatu, uvedli jsme si jejich výhody a nedostatky.

V závěrečné kapitole jsme si uvedli ukázky využití těchto modelů v praxi. Tyto ukázky jsme ilustrovali graficky. Na závěr je uvedena tabulka metod.

Myslím, že v této diplomové práci se podařilo nastínit a shrnout základní poznatky z oblasti počítačového modelování ve fyzice plazmatu.

Literatura

- [1] Hrach, R.: Počítačová fyzika I, Univerzita J. E. Purkyně, Ústí nad Labem, 2005.
- [2] Bartoš, P.: Hybridní modelování ve fyzice plazmatu, MFF UK v Praze, Praha, 2007.
- [3] Švanda, M.: Slunce jako velbloud, Instatntní astronomické noviny, 2002 [cit. 22.10.2009], on-line přístupné na http://www.ian.cz/detart_fr.php?id=702&nadpis=Slunce.
- [4] Solar Physics at Stanford University, 2007 [cit. 25.10.2009], on-line přístupné na <http://quake.stanford.edu/~wso/gifs/HCS.html>.
- [5] Chen, F.: Fyzika plazmatu, Academia, Praha, 1984.
- [6] Kulhánek P.: Jevy v plazmatu, ALDEBARAN GROUP FOR ASTROPHYSICS, 2008 [cit. 29.10.2009], on-line přístupné na http://www.aldebaran.cz/astrofyzika/plazma/pheno_mena.html#drifty.
- [7] Hockney, R. W., Eastwood, J. W.: Computer Simulation Using Particles, Adam Hilger, 1988.
- [8] 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.
- [9] Šimek, J.: Dizertační práce: Rozvoj metod počítačové fyziky pro fyziku plazmatu a fyziku tenkých vrstev, MFF UK, Praha, 2006.
- [10] Hrubý V.: Bakalářská práce: Studium interakce plazma - pevná látka postupy počítačové fyziky, MFF UK, Praha, 2007.
- [11] Horváth, M.: Studium interakce plazmatu s povrchy jiných látek metodami počítačové fyziky. Dizertační práce, Univerzita Karlova, Praha, 2002.
- [12] Davydov A. S.: Kvantová mechanika. SPN, Praha, 1978.
- [13] Miura H.: MHD simulation of a Fusion Plasma, SOKENDAI Asian Winter School, 2005.

- [14] A. Jeffrey: MAGNETOHYDRODYNAMICS. University Mathematical Texts. Oliver&-Boyd, Edinburgh and London 1966.
- [15] Kulhánek P.: Co je to plazma, ALDEBARAN GROUP FOR ASTROPHYSICS, 2008 [cit. 11.11.2009], on-line přístupné na <http://www.aldebaran.cz/astrofyzika/plazma/basics.html>.
- [16] Schmiedt L., Jílek M.: Diagnostika plazmatu, 2006 [cit. 11.11.2009], on-line přístupné na <http://physics.mff.cuni.cz/to/kevf/s4r/plazma/?p=2#vf>.
- [17] Bittnar, Z., Šejnoha, J., Numerické metody mechaniky 1 a 2, vydavatelství ČVUT 1992, Žitkova 4, Praha 6.
- [18] Hrubý, V.: Studium interakce plazma-pevná látka pomocí hybridního modelování . Diplomová práce, Univerzita Karlova, Praha, 2009.
- [19] Fraňa, K.: Přenosové jevy v technice prostředí, KEZ, 2007, [cit. 25.9.2009], on-line přístupné na <http://orion.kez.tul.cz/frana//ladmin/soubory/frana/File/prednasky/PJAM-5-6-MHD.pdf>.
- [20] Kracík, J., Šesták, B., Aubrecht, L. Základy klasické a kvantové fyziky plazmatu, Academica, Praha, 1974.
- [21] Bogaerts A., Bultinck E., Eckert M., Georgieva M., Mao M., Neyts E., Schwaederl L.: Computer Modeling of Plasmas and Plasma-Surface Interactions, Plasma Process and Polymers, 2009, 295-307, 200800207.
- [22] Dular P., Geuzaine Ch.: GetDP: a General Enviroment for the Treatment of Discrete Problems, University of Liege, 2006 [cit. 19.11.2009], on-line přístupné na <http://www.geuz.org/getdp/>.
- [23] Bultinck E., Bogaerts A., Mahieu A., Depla D.: New. J. Phys, 2009, 11, 023039.
- [24] Jelínek, P.: Dizertační práce: Pokročilé techniky počítačového modelování ve fyzice plazmatu, MFF UK v Praze, Praha, 2007.
- [25] Mao M., Benedikt J., Consoli A., Bogaerts A., J. Phys. D: Appl.Phys. 2008, 41, 225201.
- [26] Bogaerts A., Gijbels R., Serikov V. V.: Appl. Phys. 2000, 87, 8334.
- [27] Smetana M.: ITER – TOKAMAK nové generace, ALDEBARAN BULLETIN, 2009 [cit. 25.11.2009], on-line přístupné na http://ec.europa.eu/commission_barroso/potocnik/dossier/iter_sl.htm.