

**České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta strojní**



**Numerické řešení rozličných modelů elektrického  
výboje metodou konečných objemů**

**Disertační práce**

Autor: **Ing. David Trdlička**

Obor: **Matematické a fyzikální inženýrství**

Školitel: **Prof. Ing. Jaroslav Fořt, CSc.**

Rok: **2019**

## **Prohlášení**

Prohlašuji, že předkládanou disertační práci jsem vypracoval samostatně a použil pouze uvedené prameny a literaturu. Současně dávám svolení k tomu, aby tato práce byla umístěna ve vysokoškolské knihovně ČVUT a byla používána ke studijním účelům.

V Praze dne: 15. května 2019  
David Trdlička

## **Poděkování**

Rád bych na tomto místě poděkoval vedoucímu práce panu Prof. Ing. Jaroslavu Fořtovi, Csc. za odborné vedení, cenné rady a připomínky a konzultantu panu Ing. Janu Karlovi, Ph.D. za rady a podnětné připomínky, při vzniku této práce.

## Abstrakt

Předkládaná práce se zabývá numerickou simulací elektrického výboje v dielektrických plynech nebo v kapalinách, které vyplňují mezeru mezi dvěma různě tvarovanými elektrodami s vysokým napětím. Je zde navázáno na výsledky pana Ing. Jana Karla, Ph.D., který se zabýval vývojem metody pro nejjednodušší, tzv. minimální model elektrického výboje. V této práci byl minimální model rozšířen na více různých typů víceroznicových (tzn. vícečásticových) modelů, které popisují nejen šíření elektrického výboje, ale také interakci částic mezi sebou, případně základní chemické reakce mezi částicemi. Dále se práce věnuje užitím okrajových podmínek, které jsou z fyzikálního hlediska vhodné pro simulaci elektrických výbojů mezi vodivými elektrodami. Všechny zde užití modely výbojů jsou popsány soustavou rovnic konvekce-difuze-reakce vyjadřující zákony zachování pro hustoty jednotlivých částic (elektronů, iontů, molekul). A Poissonovou rovnicí pro výpočet rozložení elektrického potenciálu.

Parciální diferenciální rovnice jednotlivých modelů jsou řešeny metodou konečných objemů na nestrukturovaných dynamicky adaptovaných sítích. Konvektivní a disipativní toky jsou diskretizovány pomocí protiproudého, popř. diamantového schématu. Druhého řádu přesnosti metody v prostoru je docíleno pomocí lineární rekonstrukce hodnot v kombinaci s Barthovým - Jespersenovým limiterem. A druhý řád metody v čase je zajištěn pomocí tříkrokové Rungeho - Kuttovy metody. Diskretizace Poissonovy rovnice je provedena opět pomocí diamantového schématu a vzniklá soustava lineárních rovnic je pak řešena pomocí LU rozkladu.

Ve výsledcích je uvedena numerická studie vlastností této metody pro nejjednodušší model elektrického výboje. Numerické experimenty s rozštěpením výboje na více vláken, případně se změnou směru šíření výboje. Testy rozšířeného modelu včetně fyzikálních okrajových podmínek ve formě pohybu radiofrekvenčního plasmatu a pohybu výboje v obdélníkové oblasti. Vzájemné porovnání výsledků získaných řešením tříčásticového a jedenáctičásticového modelu, včetně vlivu fyzikálních okrajových podmínek. Dále jsou prezentovány výsledky pohybu elektrického výboje v tekutém argonu a numerické zjištění vlivu hodnoty rekombinačního koeficientu na šíření výboje. Jako poslední je uvedeno porovnání výsledků (benchmark) řešení tříčásticového modelu prezentovanou metodou s výsledky uvedenými v literatuře, které byly napočítány odlišnou numerickou metodou.

Tyto modely v kombinaci s vyvíjenou implicitní metodou umožní v budoucnu efektivně simulovat reálné procesy jako jsou např. relaxační fáze výboje, opakující se pulzní výboje, výboje v dlouhých mezerách mezi elektrodami nebo kontakt výboje s dielektrickými materiály apod.

## Abstract

### **The numerical solution of various electric discharge models using the finite volume method**

Presented work is focused on the numerical simulation of the electric discharge propagation. Which is ignited in the dielectric gaseous or liquid gap between two variously shaped high voltage electrodes. This thesis continues to the work of Ing. Jan Karel, Ph.D. who dealt with the developing of the numerical method for the simplest (so-called minimal) model of the electric discharge. The minimal model was extended to the various types of the multi-equation models (i.e. models with more particles) in this work. Such models describe not only the discharge propagation but also the mutual interaction of the particles or the essential chemical reactions between particles. Next the thesis is focused on utilization of the boundary conditions which are appropriate from physical point of view for simulation of the electric discharge between conductive electrodes. All used models are described by the system of convection-diffusion-reaction equations expressing the conservative law for the particle densities (electrons, ions, molecules). And the Poisson equation for computation of the electric potential distribution.

The partial differential equations of each models are solved by finite volume method on the dynamically adapted unstructured grids. The convective and the dissipative fluxes are discretized by the upwind and the diamond scheme respectively. The method is second order in space using linear reconstruction of values together with Bart-Jespersen limiter. And second order of accuracy in time was achieved by the three step Runge-Kutta method. The Poisson equation was also discretized by the diamond scheme. The obtained system of linear equations is solved by LU decomposition.

The results present the numerical study of method properties for the minimal model of electric discharge. The numerical experiments of discharge splitting to the more filaments or variation of discharge propagation direction. The tests of enlarged model including physically pertinent boundary conditions on the movement of plasma with radiofrequency and on the propagation of the discharge in rectangular domain. The mutual comparison of the results obtained by solving the three and eleven-species models including the influence of the physically pertinent boundary conditions. Next the results of the discharge propagation in liquid argon and numerical study of influence of the recombination coefficient to the discharge propagation are presented. The last is comparison of the results from three-species model solved by

presented method with the results published in the literature computed by different numerical method (benchmark).

These models solved by the developing implicit method will allow to effectively simulate the real processes as e.g. discharge relaxation phase, repetitively pulsed discharges, discharges in long gaps or contact of the discharge with dielectric materials etc. in the future.

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>Literární rešerše</b>	<b>16</b>
<b>3</b>	<b>Cíle práce</b>	<b>25</b>
<b>4</b>	<b>Matematický model</b>	<b>27</b>
4.1	Obecný model . . . . .	27
4.1.1	Dvoučásticový model . . . . .	29
4.1.2	Tříčásticový model . . . . .	30
4.1.3	Model s jedenácti částicemi (zahrnující základní chemické reakce) . . . . .	31
4.1.4	Model výboje v tekutém argonu . . . . .	35
<b>5</b>	<b>Formulace úlohy</b>	<b>37</b>
5.1	Okrajové podmínky na umělých hranicích . . . . .	38
5.2	Okrajové podmínky pro vodivé elektrody . . . . .	38
5.3	Okrajové podmínky modelu fotoionizace . . . . .	41
5.4	Počáteční podmínky . . . . .	41
<b>6</b>	<b>Numerická metoda</b>	<b>43</b>
6.1	Diskretizace rovnice konvekce-difuze . . . . .	43
6.1.1	Aproximace konvektivního toku . . . . .	45
6.1.2	Aproximace disipativního toku . . . . .	45
6.1.3	Aproximace zdrojového členu . . . . .	46
6.2	Diskretizace Poissonovy rovnice . . . . .	47
6.3	Diskretizace rovnice intenzity elektrického pole . . . . .	51
6.4	Diskretizace koeficientů (interpolace tabulkových hodnot) . . . . .	51
6.4.1	Monotonní kubická spline křivka . . . . .	52
6.4.2	Test interpolace hodnot pomocí spline křivky . . . . .	53
6.5	Diskretizace rovnic modelu fotoionizace . . . . .	54

---

6.6	Diskretizace okrajových podmínek (OP) . . . . .	55
6.6.1	Diskretizace OP pro částice . . . . .	56
6.6.2	Diskretizace OP pro elektrický potenciál . . . . .	57
6.6.3	Diskretizace OP modelu fotoionizace . . . . .	57
6.7	Dynamická adaptace sítě . . . . .	57
<b>7</b>	<b>Výsledky</b>	<b>60</b>
7.1	Numerické konvergenční testy metody . . . . .	60
7.1.1	Závislost výsledků na šířce výpočetní oblasti . . . . .	60
7.1.2	Závislost výsledků na počtu úrovní zjemnění . . . . .	64
7.2	Rozvětvení ve 2D . . . . .	68
7.2.1	Tvarování katody . . . . .	68
7.2.2	Náhlá změna tvaru hranice . . . . .	72
7.2.3	Přidání jednoho ionizačního zdrojového členu . . . . .	75
7.2.4	Přidání dvou ionizačních zdrojových členů . . . . .	76
7.2.5	Přidání jednoho jádra . . . . .	77
7.3	RF plasma modelované dvoučásticovým modelem . . . . .	78
7.3.1	Bez vlivu lokálního elektrického pole . . . . .	79
7.3.2	S vlivem lokálního elektrického pole . . . . .	82
7.4	Simulace pohybu elektrického výboje popsaného dvoučásti- covým modelem s fyzikálními OP . . . . .	83
7.4.1	Dvoučásticový model bez fotoionizačního členu . . . . .	83
7.4.2	Dvoučásticový model včetně fotoionizačního členu . . . . .	85
7.5	Porovnání výsledků tříčásticového a jedenáctičásticového mod- elu . . . . .	89
7.5.1	Porovnání společných veličin v obou modelech . . . . .	90
7.5.2	Vliv okrajových podmínek na elektrodách . . . . .	95
7.5.3	Rozložení neutrálních částic jedenáctičásticového modelu . . . . .	96
7.6	Šíření elektrického výboje v tekutém argonu . . . . .	98
7.7	Benchmark tříčásticového modelu . . . . .	101
<b>8</b>	<b>Závěr</b>	<b>106</b>
<b>9</b>	<b>Příloha</b>	<b>113</b>
9.1	Aproximace metodou nejmenších čtverců . . . . .	113



# Seznam obrázků

2.1	(a) Schématické uspořádání komory pro radiofrekvenční plasma, (b) Průběh hustot nabitých částic mezi deskovými elektrodami pro homogenní model (obrázek převzat z [21]) . . . . .	19
2.2	Průběh hustot nabitých částic $n_e, n_i$ v obalu elektrod $s(t)$ (mezi plas- matem a deskovými elektrodami) pro nehomogenní model (obrázek převzat z [21]) . . . . .	20
4.1	Závislost difuzních koeficientů ( $D_{i1} - D_{i3}$ ) pro ionty v suchém vz- duchu jako funkce redukované intenzity elektrického pole ( $E/N$ ), data byla převzata z [30]. . . . .	34
4.2	Závislost redukované mobility ( $K_{i1} - K_{i3}$ ) pro ionty v suchém vz- duchu jako funkce redukované intenzity elektrického pole ( $E/N$ ), data byla převzata z [30]. . . . .	34
4.3	Koeficienty míry reakcí ( $k_{R1} - k_{R9}$ ) jako funkce redukované inten- zity elektrického pole ( $E/N$ ) pro reakce (4.22)-(4.30), data byla převzata z [8]. . . . .	35
5.1	Výpočetní oblast pro simulaci elektrického výboje ve 2D mezi rovnoběžnými deskovými elektrodami (vč. označení hranic oblasti a polohy středu počátečního mraku částic). . . . .	37
6.1	Konečný objem $i$ s pomocnou buňkou (tzv. diamond cell). . . . .	48
6.2	Interpolace tabulkových hodnot se skokovou změnou (MKS označuje monotónní kubický spline, KS kubický spline a TH jsou tabulkové hodnoty). . . . .	53
6.3	Interpolace rostoucích a klesajících tabulkových hodnot (MKS oz- načuje monotónní kubický spline a TH jsou tabulkové hodnoty). . . . .	54
6.4	Schéma rozdělení trojúhelníkové buňky se dvěma úrovněmi adap- tace. Vlevo čtyři buňky původní sítě s čísly označujícími úrovně adaptace v jednotlivých buňkách, uprostřed buňky po prvním dělení, vpravo konečné rozdělení buněk včetně konformity sítě. . . . .	58

7.1	<i>Osové řezy hustotou elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] v čase <math>t = 5.25 \cdot 10^{-8}</math> s a jejich závislost na šířce oblasti, 1. řád (nahore) a 2. řád přesnosti (dole).</i>	61
7.2	<i>Osové řezy hustotou elektrického náboje [<math>\text{V} \cdot \text{cm}^{-2}</math>] v čase <math>t = 5.25 \cdot 10^{-8}</math> s a jejich závislost na šířce oblasti, 1. řád (nahore) a 2. řád přesnosti (dole).</i>	63
7.3	<i>Osové řezy hustotou elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] v čase <math>t = 5.25 \cdot 10^{-8}</math> s a jejich závislost na počtu úrovní zjemnění, 1. řád (nahore) a 2. řád přesnosti (dole).</i>	64
7.4	<i>Osové řezy hustotou elektrického náboje [<math>\text{V} \cdot \text{cm}^{-2}</math>] v čase <math>t = 5.25 \cdot 10^{-8}</math> s a jejich závislost na počtu úrovní zjemnění, 1. řád (nahore) a 2. řád přesnosti (dole).</i>	66
7.5	<i>Osové řezy hustotou elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] v čase <math>t = 5.25 \cdot 10^{-8}</math> s počítané prvím (černá) a druhým řádem přesnosti (červená).</i>	67
7.6	<i>Rozvětvení výboje pomocí tvarování katody. Kontury hustoty elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] v čase <math>t = 4.86 \cdot 10^{-8}</math> s v oblasti s katodou ve tvaru písmene V.</i>	69
7.7	<i>Rozvětvení výboje pomocí tvarování katody. Symetrická dynamicky adaptovaná síť na konci výpočtu (<math>t = 4.86 \cdot 10^{-8}</math> s) v oblasti s katodou ve tvaru písmene V.</i>	70
7.8	<i>Rozvětvení výboje pomocí tvarování katody. Kontury velikosti intenzity elektrického pole [<math>\text{V} \cdot \text{cm}^{-1}</math>] v čase <math>t = 4.86 \cdot 10^{-8}</math> s v oblasti s katodou ve tvaru písmene V.</i>	71
7.9	<i>Rozvětvení výboje pomocí tvarování katody. Kontury hustoty lokálního elektrického náboje [<math>\text{V} \cdot \text{cm}^{-2}</math>] v čase <math>t = 4.86 \cdot 10^{-8}</math> s v oblasti s katodou ve tvaru písmene V.</i>	72
7.10	<i>Rozvětvení výboje při změně tvaru hranice. Kontury hustoty elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] v čase <math>t = 4.2768 \cdot 10^{-8}</math> s, v okamžiku, kdy je tvar původní symetrické oblasti zdeformován.</i>	73
7.11	<i>Rozvětvení výboje při změně tvaru hranice. Kontury hustoty elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] v čase <math>t = 4.86 \cdot 10^{-8}</math> s po odstranění nesymetrie v oblasti.</i>	74
7.12	<i>Rozvětvení výboje při změně tvaru hranice. Kontury velikosti intenzity elektrického pole [<math>\text{V} \cdot \text{cm}^{-1}</math>] v čase <math>t = 4.86 \cdot 10^{-8}</math> s po odstranění nesymetrie v oblasti.</i>	75
7.13	<i>Rozvětvení výboje přidáním zdrojového členu. Kontury hustoty elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] po rozdělení elektrického výboje pomocí přidání jednoho zdrojového členu elektronové impaktní ionizace.</i>	76
7.14	<i>Rozvětvení výboje přidáním dvou zdrojových členů. Kontury hustoty elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] výboje rozděleného pomocí dvou zdrojových členů umístěných symetricky podle roviny <math>y = 0.25</math>.</i>	77

7.15	<i>Rozvětvení výboje přidáním jednoho jádra. Kontury hustoty elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] výboje rozděleného pomocí jednoho elektricky neutrálního jádra.</i>	78
7.16	<i>RF plasma modelované bez vlivu lokálního elektrického pole. Axonometrický pohled na elektronovou hustotu [<math>\text{cm}^{-3}</math>] s vlivem fyzikálních okrajových podmínek. Vlevo nahoře: mrak elektronů při pohybu směrem doprava, vpravo nahoře: mrak elektronů při pohybu směrem doleva, dole: mrak elektronů při pohybu uprostřed oblasti.</i>	80
7.17	<i>RF plasma modelované bez vlivu lokálního elektrického pole. Řez hustotou elektronů a pozitivních iontů (pomocí roviny <math>y = 0.25 \text{ cm}</math>) radiofrekvenčního plasmatu s využitím fyzikálních okrajových podmínek.</i>	81
7.18	<i>RF plasma modelované včetně vlivu lokálního elektrického pole. Řez hustotou elektronů a pozitivních iontů (pomocí roviny <math>y = 0.25 \text{ cm}</math>) radiofrekvenčního plasmatu s využitím fyzikálních okrajových podmínek.</i>	82
7.19	<i>Šíření elektrického výboje popsaného dvoučásticovým modelem bez fotoionizace a s uvažováním fyzikálních OP na elektrodách. Kontury hustoty elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] (nahore: před opuštěním elektronového mraku, dole: po opuštění elektronového mraku).</i>	84
7.20	<i>Šíření elektrického výboje popsaného dvoučásticovým modelem s fotoionizací a s uvažováním fyzikálních OP na elektrodách. Hustota elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] (nahore: 2D kontury, dole: axonometrický pohled na kontury).</i>	86
7.21	<i>Šíření elektrického výboje popsaného dvoučásticovým modelem s fotoionizací a s uvažováním fyzikálních OP na elektrodách. Řezy hustotami pomocí roviny <math>y = 0.25 \text{ cm}</math> (nahore: hustoty elektronů a kationtů [<math>\text{cm}^{-3}</math>], dole: hustota elektrického náboje [<math>\text{V} \cdot \text{cm}^{-2}</math>]).</i>	88
7.22	<i>Porovnání modelů. 2D kontury hustoty elektronů [<math>\text{cm}^{-3}</math>] počítané s FOP na vodivých elektrodách. Výsledky jsou vykresleny pro stejnou polohu hlavy výboje (nahore: tříčásticový model, dole: jedenáctičásticový model).</i>	90
7.23	<i>Porovnání modelů. Osové řezy (pomocí roviny <math>y = 0.25 \text{ cm}</math>) hustotami elektronů napočítaných tříčásticovým (3.s.m.) a jedenáctičásticovým (11.s.m.) modelem s Neumannovými homogenními (NBC) a fyzikálními (PBC) okrajovými podmínkami.</i>	91
7.24	<i>Porovnání modelů. Výřez pravé dolní části (čelo výboje v blízkosti katody) obrázku 7.23.</i>	91
7.25	<i>Porovnání modelů. 2D izočáry hustoty elektrického náboje [<math>\text{V} \cdot \text{cm}^{-2}</math>] (nahore: tříčásticový model, dole: jedenáctičásticový model).</i>	92

7.26	Porovnání modelů. 2D izočáry hustoty elektrického náboje [ $V \cdot \text{cm}^{-2}$ ] počítané s Neumannovými homogenními okrajovými podmínkami (nahore: tříčásticový model, dole jedenáctičásticový model). . . . .	93
7.27	Porovnání modelů. Osové řezy (pomocí roviny $y = 0.25 \text{ cm}$ ) hustotami lokálního elektrického náboje počítané tříčásticovým (3.s.m.) a jedenáctičásticovým (11.s.m.) modelem. . . . .	94
7.28	Porovnání modelů. Osové řezy (pomocí roviny $y = 0.25 \text{ cm}$ ) velikostmi intenzit elektrického pole počítané tříčásticovým (3.s.m.) a jedenáctičásticovým (11.s.m.) modelem. . . . .	95
7.29	Porovnání modelů. Osový řez hustotami neutrálních částic [ $\text{cm}^{-3}$ ] (pomocí roviny $y = 0.25 \text{ cm}$ ) - jedenáctičásticový model. . . . .	96
7.30	Porovnání modelů. 2D kontury nově vzniklých neutrálních částic dusíku [ $\text{cm}^{-3}$ ] (shora: $N_2^*$ , $N_2^{**}$ , $N$ ). . . . .	97
7.31	Porovnání modelů. 2D kontury nově vzniklých neutrálních částic kyslíku [ $\text{cm}^{-3}$ ] (shora: $O$ , $O^*$ ). . . . .	98
7.32	Testování nezávislosti výsledků na hustotě výpočetní sítě: axiální řez (pomocí roviny $y = 0.25 \text{ cm}$ ) hustotami elektronů počítaných na sítích s různými počty buněk a v konečném fyzikálním čase $2.8^{-9} \text{ s}$ . . . . .	99
7.33	Testování závislosti šíření výboje na rekombinačním koeficientu: axiální řezy (pomocí roviny $y = 0.25 \text{ cm}$ ) hustotami elektronů počítaných na síti se 110000 buňkami v konečném fyzikálním čase $2.8^{-9} \text{ s}$ a rekombinační koeficient $\xi$ byl variován od 0.1 do 0.4. . . . .	100
7.34	2D kontury hustoty elektronů ( $\log_{10}(n_e)$ ) [ $\text{cm}^{-3}$ ] ze simulace elektrického výboje v tekutém argonu ( $t_{\text{end}} = 2.8^{-9} \text{ s}$ , $\xi = 0.1$ ). . . . .	101
7.35	Benchmark tříčásticového modelu. 2D kontury hustoty elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] v konfiguraci hyperbolická anoda a rovinná katoda z článku [19] (shora: $t = 1, 2.5, 5, 7.5 \text{ ns}$ ). . . . .	102
7.36	Benchmark tříčásticového modelu. 2D kontury hustoty elektronů ( $\log_{10}(n_e)$ ) [ $\text{cm}^{-3}$ ] (zleva: $t = 5, 11, 17, 23 \text{ ns}$ ). Převzato ze článku [19]. . . . .	103
7.37	Benchmark tříčásticového modelu. Osové řezy časového vývoje hustoty elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ]. Vlevo: testovaný model, vpravo: výsledky z [19]. . . . .	104
7.38	Benchmark tříčásticového modelu. Výřez horní levé části průběhu hustoty elektronů z obr. 7.37 testovaného modelu. . . . .	105

# Seznam tabulek

4.1	<i>Koeficienty <math>SP_3</math> aproximace modelu fotoionizace pro různé vlnové délky (<math>l = 1, 2, 3</math>).</i> . . . . .	29
4.2	<i>Fyzikální konstanty a členy modelu fotoionizace.</i> . . . . .	29
7.1	<i>Závislost výpočetní náročnosti na počtu úrovní adaptace.</i> . . . . .	68

## Seznam symbolů

Zn.	Jed.	Název veličiny
$t$	[s], [1]	Časová souřadnice, param. Hermitových báz. funkcí
$x$	[cm]	Prostorová, axiální souřadnice
$y$	[cm]	Prostorová souřadnice
$r$	[cm]	Prostorová souřadnice v radiálním směru
$x_0$	[cm]	Souřadnice x počátečního mraku částic
$y_0$	[cm]	Souřadnice y počátečního mraku částic
$r_0$	[cm]	Souřadnice r počátečního mraku částic
$l$	[cm]	Vzdálenost elektrod, délka stěny pomocné buňky
$d$	[cm]	Šířka elektronového mraku
$L$	[cm]	Délka stěny buňky
$s(t)$	[cm]	Tloušťka obalu elektrody
$I_{rf}(t)$	[A]	Elektrický proud radiofrekvenčního zdroje
$p$	[Torr], [1]	Tlak, difuzní koeficient
$V$	[V]	Potenciál elektrického pole
$\vec{E}$	[Vcm <sup>-1</sup> ]	Intenzita elektrického pole
$\vec{W}$	[cm <sup>-3</sup> ]	Vektor hustot částic
$\vec{f}_c$	[cm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	Konvektivní tok
$\vec{f}_d$	[cm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	Difuzní tok
$m$	[1]	Počet neznámých
$n$	[1]	Počet prostorových dimenzí
$i$	[1]	Index buňky
$j$	[1]	Index sousední buňky
$k$	[1]	Index časové vrstvy, označení specifické částice
$A$		Matice soustavy
$A_l$	[cm <sup>-1</sup> Torr <sup>-1</sup> ]	Parametr třískupinového modelu fotoionizace

$q, e$	$[C]$	Náboj elektronu
$N$	$[cm^{-3}]$	Hustota částic v neutrálním plynu
$\vec{b}$		Vektor pravé strany
$\vec{N}$	$[cm]$	Jednotkový vnější normálový vektor
$\vec{n}$	$[cm]$	Jednotkový vnější normálový vektor
$n_e$	$[cm^{-3}]$	Hustota elektronů ( $e^-$ )
$n_p$	$[cm^{-3}]$	Hustota kationtů
$n_n$	$[cm^{-3}]$	Hustota aniontů
$n_{i1}$	$[cm^{-3}]$	Hustota kationtů ( $N_2^+$ )
$n_{i2}$	$[cm^{-3}]$	Hustota kationtů ( $O_2^+$ )
$n_{i3}$	$[cm^{-3}]$	Hustota aniontů ( $O^-$ )
$n_{s1}$	$[cm^{-3}]$	Hustota neutrálních částic ( $N_2$ )
$n_{s2}$	$[cm^{-3}]$	Hustota neutrálních částic ( $O_2$ )
$n_{s3}$	$[cm^{-3}]$	Hustota neutrálních částic ( $N_2^*$ )
$n_{s4}$	$[cm^{-3}]$	Hustota neutrálních částic ( $N_2^{**}$ )
$n_{s5}$	$[cm^{-3}]$	Hustota neutrálních částic ( $N$ )
$n_{s6}$	$[cm^{-3}]$	Hustota neutrálních částic ( $O$ )
$n_{s7}$	$[cm^{-3}]$	Hustota neutrálních částic ( $O^*$ )
$D_e$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. elektronů
$D_p$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. kationtů
$D_n$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. aniontů
$D_{i1}$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. kationtů ( $N_2^+$ )
$D_{i2}$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. kationtů ( $O_2^+$ )
$D_{i3}$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. aniontů ( $O^-$ )
$D_{s1}$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. neutrálních částic ( $N_2$ )
$D_{s2}$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. neutrálních částic ( $O_2$ )
$D_{s3}$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. neutrálních částic ( $N_2^*$ )
$D_{s4}$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. neutrálních částic ( $N_2^{**}$ )
$D_{s5}$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. neutrálních částic ( $N$ )
$D_{s6}$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. neutrálních částic ( $O$ )
$D_{s7}$	$[cm^2 s^{-1}]$	Difuzní koef. neutrálních částic ( $O^*$ )
$T_e$	$[K], [eV], [V]$	Teplota elektronů
$T_p$	$[K], [eV], [V]$	Teplota kationtů
$T_n$	$[K], [eV], [V]$	Teplota aniontů
$K_e$	$[cm^2 V^{-1} s^{-1}]$	Mobilita elektronů
$K_p$	$[cm^2 V^{-1} s^{-1}]$	Mobilita kationtů

$K_n$	$[cm^2V^{-1}s^{-1}]$	Mobilita aniontů
$K_{i1}$	$[cm^2V^{-1}s^{-1}]$	Mobilita kationtů ( $N_2^+$ )
$K_{i2}$	$[cm^2V^{-1}s^{-1}]$	Mobilita kationtů ( $O_2^+$ )
$K_{i3}$	$[cm^2V^{-1}s^{-1}]$	Mobilita aniontů ( $O^-$ )
$\tilde{T}_e$	$[J]$	Energie elektronu
$\vec{v}_e$	$[cms^{-1}]$	Driftová rychlost elektronů
$\vec{v}_p$	$[cms^{-1}]$	Driftová rychlost kationtů
$\vec{v}_n$	$[cms^{-1}]$	Driftová rychlost aniontů
$\vec{v}_{i1}$	$[cms^{-1}]$	Driftová rychlost kationtů ( $N_2^+$ )
$\vec{v}_{i2}$	$[cms^{-1}]$	Driftová rychlost kationtů ( $O_2^+$ )
$\vec{v}_{i3}$	$[cms^{-1}]$	Driftová rychlost aniontů ( $O^-$ )
$S_e$	$[cm^{-3}s^{-1}]$	Ionizační zdrojový člen
$S_{att}$	$[cm^{-3}s^{-1}]$	Vznik aniontů z elektronů a neutr. atomů
$S_{det}$	$[cm^{-3}s^{-1}]$	Přeměna aniontů na neutrální atomy
$S_{ep}$	$[cm^{-3}s^{-1}]$	Rekombinace elektronů na kationty
$S_{np}$	$[cm^{-3}s^{-1}]$	Rekombinace aniontů na kationty
$S_{ph}$	$[cm^{-3}s^{-1}]$	Fotoionizační zdrojový člen
$k_{R1}$	$[cm^3s^{-1}]$	Koef. míry chem. reakce R1
$k_{R2}$	$[cm^3s^{-1}]$	Koef. míry chem. reakce R2
$k_{R3}$	$[cm^3s^{-1}]$	Koef. míry chem. reakce R3
$k_{R4}$	$[cm^3s^{-1}]$	Koef. míry chem. reakce R4
$k_{R5}$	$[cm^3s^{-1}]$	Koef. míry chem. reakce R5
$k_{R6}$	$[cm^3s^{-1}]$	Koef. míry chem. reakce R6
$k_{R7}$	$[cm^3s^{-1}]$	Koef. míry chem. reakce R7
$k_{R8}$	$[cm^3s^{-1}]$	Koef. míry chem. reakce R8
$k_{R9}$	$[cm^3s^{-1}]$	Koef. míry chem. reakce R9
$p_{O2}$	[Torr]	Parciální tlak kyslíku
$p_q$	[Torr]	"Quenching pressure"
$c$	$[cms^{-1}]$ , [1]	Rychlost světla, kritérium zjemnění
$N_g$	[1]	Počet vlnových délek
$  \vec{E}  /N$	$[Td]$ , $[V \cdot cm^2]$	Redukovaná intenzita elektrického pole
$P_e$	[1]	Pécletovo číslo pro elektrony
$P_p$	[1]	Pécletovo číslo pro kationty
$P_n$	[1]	Pécletovo číslo pro anionty
$k_B$	$[cm^2gs^{-2}K^{-1}]$	Boltzmannova konstanta
$m_e$	$[g]$	Hmotnost elektronu
$m_p$	$[g]$	Hmotnost kationtu



$m_n$	[g]	Hmotnost aniontu
$h_{00}$		Hermitova bázová funkce
$h_{10}$		Hermitova bázová funkce
$h_{01}$		Hermitova bázová funkce
$h_{11}$		Hermitova bázová funkce
$m_k$	[1]	Průměrná hodnota směrnic sousedních sečen
$v_e^*$	[ $cms^{-1}$ ]	Termální elektronová rychlost
$v_p^*$	[ $cms^{-1}$ ]	Termální rychlost pozitivních iontů
$v_n^*$	[ $cms^{-1}$ ]	Termální rychlost negativních iontů
$\vec{r}$	[1]	Vektor o složkách $(\alpha_k, \beta_k)$
$\Delta t$	[s]	Časový krok
$\Delta x$	[cm]	Prostorový krok
$\Delta s$	[cm]	Délka stěny buňky
$\rho$	[ $Vcm^{-2}$ ]	Hustota elektrického náboje
$\alpha_\rho(W)$	[ $cm^{-3}$ ]	Hustota kladně mínus záporně nabitých částic
$\alpha$	[ $cm^{-1}$ ]	Koeficient elektronové impaktní ionizace
$\eta_2$	[ $cm^{-1}$ ]	Dvoutělesové spojování (two-body attachment)
$\eta_3$	[ $cm^{-1}$ ]	Třítělesové spojování (three-body attachment)
$\beta_{ep}$	[ $cm^3s^{-1}$ ]	Koeficient rekombinace elektronů na kationty
$\beta_{np}$	[ $cm^3s^{-1}$ ]	Koeficient rekombinace aniontů na kationty
$\beta$	[ $cm^3s^{-1}$ ]	Koeficient rekombinace elektronů
$\gamma$	[ $s^{-1}$ ]	Koeficient odtržení elektronů.
$\Omega$		Výpočetní oblast
$\Omega_i$		Buňka sítě
$\omega_i$		Pomocná buňka
$\partial\Omega$		Hranice oblasti
$\partial\Omega_a$		Umělé hranice oblasti
$\partial\Omega_e$		Část hranice nahrazující elektrody
$\partial\omega$		Hranice pomocné buňky
$ \Omega_i $	[ $cm^2$ ]	Plocha buňky
$ \omega_i $	[ $cm^2$ ]	Plocha pomocné buňky
$\varphi$	[rad]	Rotace kolem axiální osy
$\pi$	[1]	Ludolfovo číslo
$\sigma$	[cm]	Poloměr Gaussova pulsu
$\alpha_1$	[1]	Koef. Larsenových okrajových podmínek
$\alpha_2$	[1]	Koef. Larsenových okrajových podmínek
$\beta_1$	[1]	Koef. Larsenových okrajových podmínek
$\beta_2$	[1]	Koef. Larsenových okrajových podmínek

$\gamma_{sec}$	[1]	Koef. sekundární emise elektronů
$\phi_{1,l}$		1. distribuční funkce z SP3 aproximace
$\phi_{2,l}$		2. distribuční funkce z SP3 aproximace
$\kappa_1$	[1]	1. koef. SP3 aproximace
$\kappa_2$	[1]	2. koef. SP3 aproximace
$\gamma_1$	[1]	1. distribuční koef.
$\gamma_2$	[1]	2. distribuční koef.
$\nu_i$	$[s^{-1}]$	Ionizační koef.
$\nu_u$	[1]	Koef. efektivity excitace
$\Phi(x)$		Distribuční funkce fotonů
$\lambda_l$	[1]	Koef. absorpce
$\xi$	[1]	Koef. efektivity fotoionizace
$\delta_k$	[1]	Směrnice sečny (ze 2 sousedních bodů)
$\alpha_k$	[1]	Parametr spline křivky
$\beta_k$	[1]	Parametr spline křivky
$\tau_k$	[1]	Parametr spline křivky
$\vec{\nabla}$		Operátor nabra
$div$		Operátor divergence
$\Delta$		Laplaceův operátor
$\partial$		Znak parciální derivace
TH		Tabulkové hodnoty
KS		Kubický spline
MKS		Monotónní kubický spline
MKO		Metoda konečných objemů
MNČ		Metoda nejmenších čtverců
RF		Radiofrekvence
NDL		Podélný difuzní koeficient
PP		Počáteční podmínka
OP		Okrajová podmínka
NOP		Neumannova homogenní okrajová podmínka
FOP		Fyzikálně relevantní okrajová podmínka
LXCAT		Databáze materiálových vlastností pro plasma
SP <sub>3</sub>		Vícegrupová aproximace (multigroup approximation)

**Seznam použitých konstant**

Zn.	Hodnota	Jed.	Název veličiny
$m_e$	$9.31 \cdot 10^{-28}$	$[g]$	Hmotnost elektronu
$e$	$1.602 \cdot 10^{-19}$	$[C]$	Abs. hodnota náboje elektronu
$\tilde{e}$	$-1.602 \cdot 10^{-19}$	$[C]$	Náboj elektronu
$m_{p,n}$	$4.786 \cdot 10^{-23}$	$[g]$	Hmotnost iontu
$T_{p,n}$	300	$[K]$	Teplota iontů
$k_B$	$1.38065 \cdot 10^{-16}$	$[\frac{cm^2 g}{s^2 K}]$	Boltzmannova konstanta
$\gamma_{sec}$	0.1	[1]	Koef. sekundární emise elektronů
$\epsilon_0$	$8.854188 \cdot 10^{-12}$	$[Fm^{-1}]$	Permitivita vakua

**Seznam použitých konstant pro vzduch**

Zn.	Hodnota	Jed.	Název veličiny
$N$	$2.5 \cdot 10^{19}$	$[cm^{-3}]$	Hustota částic v neutrálním plynu
$\epsilon_r$	1.00059	[1]	Relativní permitivita

**Seznam použitých konstant pro tekutý argon**

Zn.	Hodnota	Jed.	Název veličiny
$N$	$2.1 \cdot 10^{22}$	$[cm^{-3}]$	Hustota částic v neutrálním plynu
$\epsilon_r$	1.504	[1]	Relativní permitivita

**Převodní vztahy jednotek**

- Teplota elektronů ([21] strana: XXV):  
 $T_e = 1eV \sim T_e = 11604.3K \sim \tilde{T}_e = 1.602 \cdot 10^{-19} J$
- Redukovaná intenzita elektrického pole (Townsend):  
 $1Td = 1 \cdot 10^{-21} V \cdot m^2 = 1 \cdot 10^{-17} V \cdot cm^2$
- Podélný difuzní koeficient (NDL - longitudinal diffusion coefficient):  
 $\frac{NDL}{N} = \frac{[cm^{-1}s^{-1}]}{[cm^{-3}]} = [cm^2s^{-1}] \approx D_i$

# Kapitola 1

## Úvod

Předkládaná práce se zabývá numerickými simulacemi elektrických výbojů v dielektrických plynech a kapalinách. Takové jevy jsou popsány tzv. hydrodynamickými modely, které jsou tvořeny soustavou rovnic konvekce-difuze-reakce pro hustoty částic s elektrickým nábojem a Poissonovou rovnicí pro rozložení elektrického potenciálu. Celý systém rovnic je doplněn vztahem pro výpočet intenzity elektrického pole.

Jednotlivé modely se od sebe liší množstvím uvažovaných částic (tzn. počtem rovnic), použitými zdrojovými členy, které vyjadřují vzájemnou interakci mezi částicemi (jejich vznik nebo zánik) nebo materiálovými konstantami. V dnešní době je pravděpodobně nejpoužívanější tříčásticový (tzv. standardní) model viz např. [13], [14], [15], [19]. Nejčastěji v kombinaci s jednoduchými Neumannovými okrajovými podmínkami [7] a řešený v krátkých časových měřítcích, což je tzv. výbojová fáze, tedy šíření samotného výboje. Zdrojové členy mohou popisovat i chemické reakce probíhající ve výbojích. Vícečásticové modely s chemickými reakcemi a s fyzikálně vhodnými okrajovými podmínkami nacházejí své uplatnění při simulacích reálných technických nebo technologických procesů, které se v posledních dekádách objevují stále častěji. Může to být například relaxační fáze výboje (výboj po odstranění napětí z elektrod), pulzní výboje, kontakt s vodivým nebo dielektrickým materiálem a mnoho dalšího.

Vyvíjená metoda by měla v dlouhodobém horizontu sloužit k simulacím zmínovaných reálných dějů, včetně chemických reakcí a dlouhých časových měřítek. K tomu je zaprvé potřeba použití komplikovaných modelů s využitím nejnovějších databází materiálových konstant, včetně implementace fyzikálně vhodných okrajových podmínek pro vodivé elektrody. Takový model se skládá z rovnic kontinuity nejen pro nabitě částice (elektrony, pozitivní a negativní ionty), ale zahrnuje i nové neutrální částice vznikající ve výboji díky chemickým reakcím. Uvažované okrajové podmínky musí správně popi-

sovat toky částic z nebo do vodivé elektrody (pohlcování nebo extrahování částic). Zadruhé je nutné minimalizovat výpočetní čas těchto poměrně velkých úloh. Proto je v plánu pro řešení modelu použít implicitní schéma, v ideálním případě v paralelní verzi.

Problém šíření elektrického výboje v plynech byl od počátku řešen ve spolupráci s Univerzitou Paříž 13. V rámci této spolupráce vyvinul Ing. Jan Karel, Ph.D. základní platformu pro řešení minimálního modelu elektrického výboje. Tento model pracuje s dusíkem a s jednoduchými, ale dostatečnými okrajovými podmínkami. Jedná se o metodu ve 3D řešící daný problém na dynamicky adaptovaných nestrukturovaných sítích [7], [18]. Program je celý napsán pomocí objektově orientovaného jazyka C++ s užitím externích knihoven pro řešení velkých soustav lineárních algebraických rovnic. Takový kód je dostatečný pro nejjednodušší simulace a testování metody, ale plná 3D simulace je velice časově náročná. Navíc nelze pomocí tohoto modelu simulovat technické aplikace elektrických výbojů.

Tato práce je organizována následujícím způsobem. Nejprve je pozornost věnována vysvětlení jevu, terminologii a rešerši dostupných publikací, které se zabývají zde vytyčenou problematikou. Následuje formulace cílů a popis uvažovaných matematických modelů počínaje minimálním až po komplikovaný model zahrnující chemické reakce. Další kapitola se zabývá formulací úlohy, pak následuje vysvětlení použité numerické metody a odvození diskrétních vztahů pro numerické řešení uvažovaného matematického modelu. Předposlední kapitolu tvoří získané výsledky, včetně jejich popisu. Jako poslední je uveden závěr samotné práce obsahující zhodnocení dosažených výsledků a plánovaný budoucí rozvoj této metody.

# Kapitola 2

## Literární řešení

Tato práce se zabývá numerickým řešením pohybu elektrického výboje, jehož tělo je tvořeno tzv. studeným plasmatem.

**Elektrický výboj - studené plasma.** Plasma je směsí volných nabitých částic pohybujících se náhodnými směry a celkově se zvenčí jeví jako elektricky neutrální. Slabě ionizovaným plasmatem je rozuměno takové, které má následující vlastnosti [21]: je řízené elektricky, srážky mezi nabitými a neutrálními částicemi jsou nezanedbatelné, důležitá je i interakce s hranicemi, elektrony nemají stejnou teplotu jako ionty a ionizace neutrálních částic napomáhá vzniku nebo udržuje plasma v ustáleném stavu.

Pod pojmem elektricky řízené plasma je rozuměn výboj v tekutém prostředí (nejčastěji v plynném), které se nachází mezi dvěma elektrodami (s určitým geometrickým tvarem). Na jednu z nich je přivedeno vysoké kladné napětí, jeho velikost je závislá na vzdálenosti mezi elektrodami a na druhu tekutiny (zpravidla to bývají desetitisíce voltů na 1 cm vzdálenosti mezi elektrodami) a druhá elektroda je uzemněna (0 V). V okamžiku přivedení napětí na elektrodu začíná docházet k ionizaci tekutiny. Vytržené elektrony se začnou, díky značně nízké hmotnosti, velmi rychle pohybovat směrem ke kladné elektrodě a jsou přitahovány do místa, kde se nachází lokální maximum v rozložení elektrického pole. Toho může být docíleno například hrotovou elektrodou (nebo počátečním jádrem). Ve zmíněném místě začne narůstat hustota elektronů a ta se pak začne lavinovitě šířit směrem k záporné elektrodě a vytvoří tak elektrický výboj. Naopak rychlost pohybu iontů je v porovnání s rychlostí elektronů zanedbatelná. Během krátkého času, po který dochází k pohybu výboje, se ionty téměř nepohnou ze svého původního místa a proto se často pohyb iontů vůbec neuvažuje.

Studené neboli netermické plasma se vyznačuje tím, že je v termické nerovno-

váze. To znamená, že zatímco elektrony se díky nízké hmotnosti velmi rychle ohřejí na vysokou teplotu (tisíce až desetitisíce kelvinů), tak těžké ionty svou teplotu nemění a udává se, že zůstává přibližně stejná jako je teplota okolí (to bývá zpravidla pokojová teplota, tedy přibližně 300K). Tento rozdíl v teplotách je způsoben tím, že je plasma řízeno elektricky a plyn je navíc pouze slabě ionizován. Proto použité napájení ohřívá hlavně pohyblivé elektrony, kdežto těžké ionty si poměrně efektivně předávají energii srážkami se zbylým neionizovaným plynem (pak je  $T_e \gg T_i$ , kde index  $e$  označuje elektrony a index  $i$  ionty).

Dále budou uvažovány zejména nízkotlaké výboje, pro které jsou charakteristické následující hodnoty. Teplota elektronů bývá přibližně  $T_e = 1 - 10$  V (a  $T_e \gg T_i$ ), jejich hustota je v rozmezí  $n_e = 10^8 - 10^{13} \text{cm}^{-3}$  a tlak  $p = 1 \cdot 10^{-3} - 1$  Torr. Tyto výboje se používají zejména pro jejich schopnost vyvolávat chemické reakce (v plynech, substrátech a na elektrodách). Kdy plasma rozloží použitý plyn na elektrony, ionty, neutrální částice a chemicky vysoce reaktivní volné radikály. Ty pak fyzikálně nebo chemicky reagují se substráty na povrchu materiálů (a to buď formou bombardování substrátu těžkými ionty nebo tokem chemické energie do substrátu) nebo s jinými látkami rozptýlenými přímo v plynu.

Protože uvnitř výboje je teplota elektronů mnohonásobně vyšší než teplota iontů jsou to právě elektrony, které způsobují štěpení molekul plynu na volné (vysoce reaktivní) radikály, způsobují depozici původních molekul a interagují s atomy. Tyto děje jsou nepostradatelné pro chemické reakce se substráty, s plyny, s částicemi znečištění a pod. Dále elektrony ionizují plyn a vznikají tak kladné ionty, které pak mohou tzv. bombardovat substráty na povrchu nějakého materiálu. Tento proces může výrazně zvýšit míru chemických reakcí na zmíněném povrchu. Může také docházet k implementování určitých iontů do povrchu materiálu. Na základě zmíněných principů vzniku požadovaných iontů nebo použitím specifických substrátů lze modifikovat povrchové vlastnosti materiálů (např. nesmáčivost skel, vlastnosti povrchů strojních součástí, vlastnosti papíru, textilií apod.), provádět dezinfekci chirurgických nástrojů, čištění tekutin od znečišťujících látek nebo částic (např. voda, výfukové plyny) a jejich uplatnění se nachází i v mnoha dalších aplikacích.

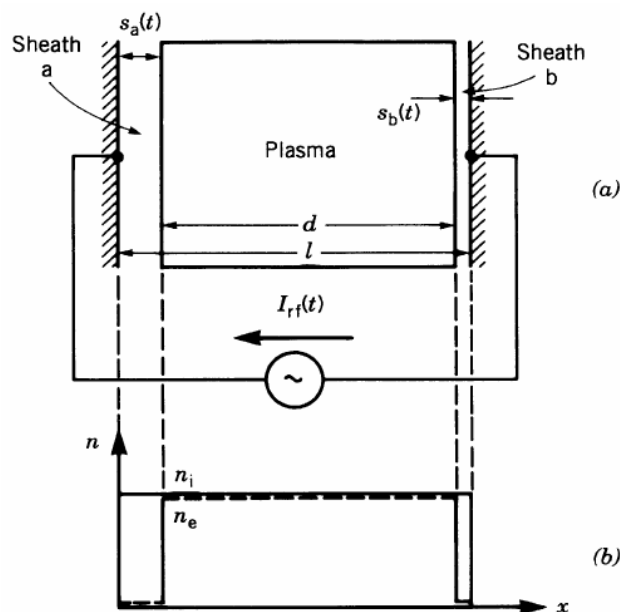
**Matematický model elektrického výboje.** Chování elektrických výbojů je popsáno tzv. hydrodynamickým modelem (v angličtině fluid model), který se stává z rovnic kontinuity pro nabitě částice svázaných s Poissonovou rovnicí pro elektrický potenciál. Celý model je navíc doplněn rovnicí pro výpočet intenzity elektrického pole. Existuje velké množství různých modelů lišících

se zejména počtem uvažovaných částic a použitými koeficienty. Počet částic (elektronů, iontů, popř. dalších částic) přímo odpovídá počtu rovnic kontinuity. Ty se od sebe liší uvažováním nebo zanedbáním konvektivních případně difuzivních členů a použitými zdrojovými členy pro jednotlivé částice. Podle počtu elektricky nabitých částic je nutné upravit definici hustoty lokálního elektrického náboje (ta je v angličtině často označována jako netcharge density) na pravé straně Poissonovy rovnice. Modely se často liší použitými fyzikálními koeficienty nejen podle použitého plynu, ale pro jeden plyn je možné nalézt v různé literatuře odlišné průběhy stejného koeficientu. Tyto koeficienty jsou udávány buď formou funkcí a nebo formou tabulek v závislosti na intenzitě elektrického pole. Takové modely se následně řeší v různém počtu prostorových dimenzí v kartézském souřadném systému, popř. v cylindrickém souřadném systému s využitím osové symetrie.

**Minimální model.** Nejjednodušší model, který je schopný popsat chování elektrického výboje je tzv. minimální model. Uvažuje pouze dvě rovnice kontinuity pro elektrony a nepohyblivé pozitivní ionty (tzn. bez konvektivního a disipativního členu). Na pravé straně obou rovnic konvekce-difuze-reakce má pouze jeden zdrojový člen vyjadřující impaktní ionizaci, popř. zde může být ještě druhý zdrojový člen popisující fotoionizaci. A dále uvažuje Poissonovu rovnici pro výpočet elektrického potenciálu. Tento model je výhodný, protože obsahuje nejmenší možný počet fyzikálních konstant, hodí se tak k různým numerickým testům metody (a samozřejmě k simulacím výbojů v plynech, ve kterých nevznikají negativní ionty, jako je např. dusík). Více viz např. [7], [18].

**RF dioda.** V materiálovém inženýrství je dnes běžně používán radiofrekvenční výboj řízený pomocí kapacity, který se často nazývá jako radiofrekvenční dioda (RF dioda). Zpravidla vzniká mezi dvěma deskovými elektrodami ve vakuové komoře (viz obr. 2.1), ke kterým je připojen radiofrekvenční zdroj vysokého napětí. Z komory je možné odsát vzduch (nebo jiný plyn), pak je možné komoru naplnit jedním určitým plynem nebo požadovanou směsí plynů a substrát se kterým se pracuje je umístěn na jednu z elektrod (v tomto případě slouží substrát jako zdroj prvků určených pro implementaci do povrchových vrstev materiálu). Na elektrodách bývá nejčastěji použito napětí 100 – 1000V a vzdálenost elektrod je řádově v jednotkách centimetrů. Pro napájení se využívá frekvence 13.56MHz a hustoty nabitých částic bývají relativně nízké  $10^9 - 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ .





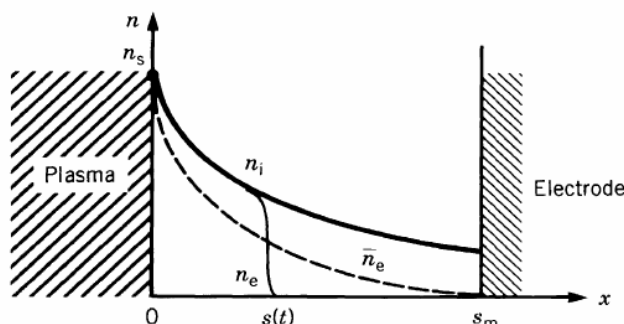
Obrázek 2.1: (a) Schématické uspořádání komory pro radiofrekvenční plasma, (b) Průběh hustot nabitých částic mezi deskovými elektrodami pro homogenní model (obrázek převzat z [21])

Periodické změny napětí na elektrodách způsobí, že se elektrony (díky své nízké hmotnosti rychle reagují na změny napětí) pohybují střídavě doleva a doprava. Naopak těžké ionty reagují pouze na časově průměrnou hodnotu (rozložení) elektrického pole. Pak oscilace elektronového mraku vytvoří v okolí elektrod obal (označen písmeny *a* a *b* na obr. 2.1), který má kladnou hustotu elektrického náboje. Kationty neustále bombardují elektrodu v průběhu celé jedné části cyklu, na rozdíl od elektronů, které jsou pohlcovány elektrodou pouze v případě, kdy se elektronový mrak velmi těsně přiblíží k elektrodě. Pro RF diody popsané homogenním modelem (pravá strana Poissonovy rovnice je nulová) jsou typické následující vlastnosti [21]:

1. Tloušťka obalu elektrody je mnohem menší než vzdálenost mezi elektrodami ( $s(t) \ll l$ ).
2. Ionty reagují pouze na průměrnou hodnotu potenciálu v čase.
3. Elektrony reagují na změnu napětí okamžitě (jsou také nosiči elektrického proudu).
4. Hustota elektronů se v oblastech obalu elektrod blíží k nule.

5. Hustota iontů je konstantní a rovnoměrná v průběhu času (včetně oblastí obalu elektrod) (viz obrázek 2.1 (b))

RF diody popsané nehomogenním modelem (pravá strana Poissonovy rovnice je rovna hustotě lokálního elektrického náboje), který je realističtější, mají nehomogenní hustotu obalu elektrod (i samotného plasmatu – těla výboje). Hustota iontů v obalu klesá vždy směrem k elektrodě (obr. 2.2).



Obrázek 2.2: Průběh hustot nabitých částic  $n_e, n_i$  v obalu elektrod  $s(t)$  (mezi plasmatem a deskovými elektrodami) pro nehomogenní model (obrázek převzat z [21])

Průběh hustot nabitých částic v obalu způsobuje pokles hustoty elektrického náboje a to způsobuje pokles celkové elektrické kapacity obalu. Šířka obalu elektrod  $s(t)$  je větší než u homogenního modelu. Vlastnosti (1-4) jsou totožné s homogenním modelem.

**Deviace směru šíření výboje.** Deviací směru šíření výboje je myšleno buď vychýlení pohybu výboje z jeho původního přímého směru, jeho rozštěpení (rozvětvení) na více vláken, případně kombinace těchto jevů nebo jejich opakování. Zmíněné jevy se vyskytují zcela běžně v přírodě (např. u atmosferických blesků), ale běžné jsou i v případě laboratorních experimentů. Vznikají zejména díky nehomogenitám v prostředí nebo nerovnostem povrchů elektrod. Přesto mechanismus jejich vzniku není stále zcela objasněn, a proto se v posledních letech tyto jevy dostávají do popředí zájmu mnoha vědeckých týmů. Při numerických simulacích se musí nehomogenity v elektrickém poli vytvořit uměle. V publikované literatuře lze nalézt několik způsobů, kterými toho lze dosáhnout. Prvním z nich je například přidání zvýšené hustoty nabitých částic. To může být realizováno např. formou nového počátečního jádra s poměrně malým průměrem a vysokou hustotou částic, které má celkově neutrální náboj (podobně jako u počátečního jádra). Působením vnějšího

elektrického pole dojde k vzájemnému posunu nabitých částic v jádru a tím i ke vzniku lokálního elektrického náboje, který ovlivní tvar vnějšího elektrického pole. Problematické je vhodné nastavení všech parametrů pro přidání zvýšené hustoty částic. Protože je nutné správně nastavit nejen čas a místo přidavného pulsu, ale také jeho intenzitu a rozměr (průměr). Každý z těchto parametrů ovlivňuje chování šířícího se výboje různým způsobem. Je logické, že puls, který má nízkou intenzitu, je umístěn příliš daleko od osy nebo je přidán příliš brzy (pozdě) neovlivní původní vlákno zamýšleným způsobem a naopak. Druhým používaným způsobem, jak ovlivnit směr šířícího se výboje, je přidání ionizačního zdrojového členu (ten je v anglické literatuře často nazýván jako "plasma spot"). Podobně lze používat i nehomogenitu v podobě místa s nízkým tlakem (pokud to umožňuje model). Princip, ale i komplikace s tím spojené jsou podobné jako v prvním případě. Další možností je, že k rozvětvení dojde spontánně. Někteří autoři uvádějí, že při určitém nastavení fyzikálních parametrů a to zejména tlaku, pozorovali při simulacích samovolné rozvětvení elektrických výbojů.

Simulacemi rozvětvení se zabývá například publikace [25], kde autoři řeší metodou konečných objemů minimální model streameru (výboje). Používají explicitní metodu na dynamicky adaptované čtyřúhelníkové síti a model řeší jako osově-symetrický. Výsledky ukazují spontánní rozštěpení jednoho vlákna na dvě. Ale vzhledem k osově symetrii problému je otázkou, zda je skutečně možné výsledek považovat za rozvětvení (neboť vznikne dutý kužel).

Autoři Liu a Pasco v publikaci [24] používají již tříčásticový model v cylindrických souřadnicích. Na základě sady testů pro různé tlaky plynu (odpovídajících různým nadmořským výškám) uvádějí, že ke spontánnímu rozvětvení dochází pouze pro určitou hodnotu tlaku a ta má vliv i na rychlost šíření a tvar výboje. Kvůli osově symetrii zde dochází opět k problému s "dutým kuzelem".

Článek [27] se zabývá rozvětvením i vyosením elektrických výbojů. Je zde řešen tříčásticový model včetně fotoionizace ve 3D na předem zjemněné síti. Výpočetní oblast má válcový tvar, síť je zjemněna po vrstvách směrem k ose a v místě předpokládaného rozvětvení. Jako impuls pro rozvětvení/vyosení používají buď nízkotlakou nehomogenitu nebo tzv. plasmaspot, což, jak již bylo zmíněno, je přidavný zdrojový člen v rovnicích kontinuity, který je na krátký časový úsek přidán do určitého místa výpočetní oblasti. Z jejich výsledků je patrné, že je výboj na nízkotlakou nehomogenitu méně citlivý, než na plasmaspot. A ve všech prezentovaných výsledcích dochází k oddělení jedné větve od hlavního vlákna, obě vlákna se určitý úsek pohybují samostatně a po určité době dojde k jejich spojení do jednoho vlákna. V této publikaci také autoři zdůrazňují, že jevy jako je rozvětvení, vliv tvaru elektrod (které nejsou osově symetrické), vzájemná interakce mezi výboji nebo vliv nehomo-

genních povrchů nelze simulovat pomocí osově symetrického modelu, protože tyto jevy mají prostorový charakter.

Vícenásobné rozvětvení řeší v komerčním programu ANSYS Akyutz a kolektiv a výsledky publikují v článku [5]. V této práci se nejprve zabývají zjištěním nejvhodnější pozice volných elektronů pro ovlivnění směru výboje. Ve druhé části své práce přidávají postupně před čelo výboje, v poměrně krátkých vzdálenostech, jeden nebo dva volné elektrony a tím modifikují trajektorii popř. rozvětvují vlákno výboje.

Chanrion a Neubert simulují negativní streamer pomocí Lagrangeovského přístupu (simulují pohyb jednotlivých částic) a získané výsledky prezentují v publikaci [17]. Tento přístup umožňuje simulovat i vysokoenergetické elektrony, které vylétávají z čela výboje, prolétávají neionizovaným plynem a zanechávají v něm za sebou ionizační cesty. Ty modifikují dynamiku hlavy výboje a způsobují tím rozvětvení, které má velmi realistické trajektorie. I v tomto případě využívají autoři osově symetrického modelu.

Problematikou rozvětvení elektrického výboje se ve své dizertační práci [18] zabýval také pan Jan Karel. V této práci používá minimální model ve 3D, který řeší na nestrukturovaných dynamicky adaptovaných sítích. Pro rozvětvení používá přídatný zdrojový člen (plasmaspot) nebo místo s vysokou hustotou nabitých částic o neutrálním elektrickém náboji. Prezentuje zde různé varianty umístění a časů přidání zmíněných nehomogenit. Na rozdíl od ostatních publikací se zde podařilo docílit rozvětvení bez opětovného spojení v jedno vlákno, navíc se jedná o plnou 3D simulaci. Nevýhodou je však explicitní 3D metoda a tedy vysoká výpočetní náročnost a použití pouze minimálního modelu.

**Simulace pohybu výbojů popsaných rozšířenými modely.** Nejpoužívanějším modelem pro numerické simulace šíření elektrického výboje je v dnešní době tzv. standardní model, který popisuje chování třech částic - elektronů, pozitivních iontů a negativních iontů (více např. [13], [14], [15], [19]). Tento model je složen ze třech rovnic kontinuity pro nabitě částice se zdrojovými členy, které popisují impaktní ionizaci, rekombinaci, spojování nebo odtrhávání částic a fotoionizaci. A dále z Poissonovy rovnice pro elektrický potenciál. Model je doplněn rovnicí pro intenzitu elektrického pole.

Pro simulace reálných výbojů, které své uplatnění nacházejí v nejrůznějších odvětvích lidské činnosti, jsou velmi podstatné chemické reakce. Ty probíhají uvnitř výboje (popř. při jeho kontaktu s přidávanými substráty a povrchem různých materiálů) mezi nabitými a neutrálními částicemi. Modely popisující šíření elektrických výbojů jsou rozšířeny o určitý počet částic, které vznikají právě díky chemickým reakcím. Tím narůstá i počet rovnic kontinuity (jedna

rovnice odpovídá koncentraci jedné částice) a také počet zdrojových členů na pravých stranách rovnic kontinuity (více viz např. [9], [32]).

Vyvíjená metoda by měla v budoucnu sloužit k simulacím tzv. relaxační fáze (post-streamer). Tedy k simulacím výbojů v mnohem delším čase po odstranění napětí z elektrod. Při těchto simulacích dochází k přiblížení výboje k vodivým elektrodám a také k mnoha chemickým reakcím, které mají rozdílnou intenzitu, rychlost a jsou také různě důležité z pohledu praktického využití. Proto je nutné použít model, který je schopný popsat alespoň tyto nejdůležitější reakce a také použít vhodné okrajové podmínky pro vodivé elektrody. Pak bude možné provádět simulace složené z krátkého časového úseku, kdy bude přiveden pulz napětí na elektrodu a dojde k elektrickému výboji. A dále z řádově 1000x delšího časového úseku, kdy bude simulována relaxační doba, ve které probíhají důležité chemické reakce. Relaxační část je zajímavá zejména pro využití v technických, biologických a mnoha dalších aplikacích. Tento rozšířený model se skládá z určitého množství rovnic kontinuity nejen pro elektricky nabitě částice, ale i pro tzv. dceřiné a neutrální částice, které vznikají právě díky chemickým reakcím. A dále, stejně jako u ostatních modelů, z Poissonovy rovnice pro elektrický potenciál. Model je doplněn rovnicí pro intenzitu elektrického pole.

Publikací s 3D numerickými simulacemi elektrického výboje v kartézském souřadném systému není dosud mnoho. Problémem je stále vysoká výpočetní náročnost kvůli potřebě velmi jemných sítí pro zachycení strmých gradientů a ostrých špiček v neznámých veličinách více viz např. [18], [20], [27].

**Simulace pohybu výboje v kapalném prostředí.** K elektrickým výbojům může docházet i v kapalném dielektrickém prostředí. Tyto výboje jsou velice rychlé a je o ně enormní zájem kvůli jejich aplikacím u vysokonapěťových izolantů. Protože se kapaliny vyznačují vysokou mobilitou nabitých částic jsou v nich elektrické výboje velmi krátké a doba jejich trvání je v sub-nanosekundových měřících. Mechanismus vzniku výboje je zde podobný jako u plynů. Je způsoben elektronovou impaktní ionizací částic kapaliny. Od výbojů v plynech se naopak liší tím, že rekombinace elektronů na ionty je podél těla výboje velmi významná. Díky použitému vysokému napětí na elektrodách se tyto výboje vyznačují extrémně vysokým elektrickým polem na špičce výboje. Kvůli velké rychlosti tohoto jevu nestihne dojít k expanzi odpařené kapaliny a proto se výboj formuje v podstatě přímo v kapalině [6]. Proto je možné v případě dielektrické kapaliny využít pro simulace výbojů tzv. "dense gas model", který se běžně používá pro modelování výbojů v plynech [6] a je popsán dále v textu.

**Benchmark.** Správnou funkčnost a implementaci standardního modelu lze ověřit zopakováním výpočtu, který se obecně považuje za správný. Jedním z problémů, který bývá opakovaně řešen (viz např. [12], [31]) byl jako první publikován Kulikovským v článku [19]. Jedná se o osově symetrický případ elektrického výboje v plynu mezi kladnou hrotovou elektrodou ve tvaru hyperboly a rovinnou elektrodou s nulovým napětím. Výsledky jsou vykresleny jako 2D kontury hustoty elektronů a intenzity elektrického pole v různých časech. Proto lze poměrně snadno získané výsledky porovnat s výsledky publikovanými ve zmíněném článku a ověřit tak jejich správnost.

# Kapitola 3

## Cíle práce

Tato práce je řešena v rámci česko-francouzské spolupráce a navazuje na výsledky pana Ing. J. Karla, PhD, který se zabýval řešením 2D i 3D úloh pro minimální model elektrického výboje. Jejím hlavním cílem je rozvoj stávající metody tak, aby umožňovala řešení reálných problémů. K tomu je zapotřebí splnit následující body:

1. Analyzovat vlastnosti stávající numerické metody pro případ jednoduchého (tzv. minimálního) modelu elektrického výboje. To je nezbytný krok pro další vývoj, který umožní porozumět vlivům jednotlivých parametrů složitějšího algoritmu na řešení tzv. 'coupled' problému.

Využít minimální model pro simulace různých druhů deviací šíření elektrického výboje ve 2D.

2. Numericky řešit pohyb elektrického výboje popsaného standardním neboli tříčásticovým modelem.

Dále numericky řešit komplexní jedenáctičásticový model, který zahrnuje i základní chemické reakce mezi částicemi.

Implementovat fyzikálně relevantní okrajové podmínky pro pohyb výboje v oblasti s vodivými elektrodami.

3. Ověřit správnost implementace rozšířených modelů porovnáním získaných výsledků s publikovanými výsledky, které byly napočítány jinou metodou (tento tzv. benchmark je dostupný pouze pro standardní - tříčásticový model).

Vzájemně porovnat výsledky získané řešením komplexních modelů včetně různých okrajových podmínek.

Využít rozšířenou metodu pro simulaci pohybu ultrarychlého elektrického výboje v tekutém prostředí a analyzovat vlastnosti tohoto modelu.

Nedílnou součástí procesu rozšíření modelu je využití moderních databází materiálových vlastností a interpolace v těchto tabulkách, použití fyzikálních okrajových podmínek pro vodivé elektrody, zahrnutí komplexních zdrojových členů do modelu apod.

Pro výše zformulované cíle se tato práce omezuje pouze na 2D kartézské, případně 2D osově-symetrické úlohy a to z důvodu velké výpočetní náročnosti 3D úloh. Vzhledem k tomu, že původní metoda byla schopna řešit i 3D úlohy, bude tato metoda také relativně snadno rozšiřitelná pro řešení trojrozměrných úloh. Toto rozšíření je v současné době pozastaveno, protože se stále pracuje na vývoji paralelní metody, která by měla výrazně zkrátit potřebný výpočetní čas.

Uvedené cíle práce byly zvoleny tímto způsobem proto, že dlouhodobým záměrem je využití této metody pro simulace studeného plasmatu ve vědeckých, technických i průmyslových aplikacích, kde se využívá iontů nebo vysoce reaktivních radikálů v rámci různých technologických procesů. Pro takové aplikace jsou vhodné zmíněné vícečásticové modely s chemickými reakcemi včetně fyzikálně relevantních okrajových podmínek.



# Kapitola 4

## Matematický model

### 4.1 Obecný model

Model popisující šíření a základní vlastnosti elektrického výboje se skládá ze soustavy rovnic (zákonů zachování) pro hustoty částic <sup>1</sup> (4.1) svázaných s rovnicí popisující rozložení elektrického pole (4.2):

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t} + \vec{\nabla}(\vec{f}_c(\vec{W}) + \vec{f}_d(\vec{W})) = \vec{S}(\vec{W}). \quad (4.1)$$

Vektor neznámých, který je označen symbolem  $\vec{W}(x, t)$ , udává hustoty částic v místě  $x$  [cm] a v čase  $t$  [s]. Vektor neznámých (o velikosti  $m \in \mathbb{N}$  odpovídající počtu uvažovaných částic) je definován na časo-prostorové oblasti  $\Omega \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^+$ , kde  $n \in \mathbb{N}$  udává dimenzi prostoru a symbol  $+$  označuje nezáporná čísla. Konvektivní složka toku pro částici  $m$  je označena jako  $f_{c_m}(W_m) = \vec{v}_m W_m$  a difuzivní pak  $f_{d_m}(W_m) = D_m \vec{\nabla} W_m$ , kde  $\vec{v}_m$  a  $D_m$  jsou driftová rychlost a difuzní koeficient částice  $m$ .  $\vec{S}(\vec{W})$  je vektor zdrojových členů. Funkce  $\vec{f}(\vec{W})$  a  $\vec{S}(\vec{W})$  jsou definovány jako zobrazení  $\vec{f}(\vec{W}) : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^{m,n}$  resp.  $\vec{S}(\vec{W}) : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ .

Poissonova rovnice pro potenciál elektrického pole  $V$  [V] (kombinující první Maxwellovu rovnici a rovnici pro intenzitu elektrického pole 4.3) je definována jako:

$$\Delta V = -\frac{q}{\epsilon} \alpha_\rho(W), \quad (4.2)$$

kde  $q = 1.60218 \cdot 10^{-19}$  C je absolutní hodnota náboje elektronu,  $\epsilon = 8.85419 \cdot 10^{-14}$  Fcm<sup>-1</sup> je permitivita vakua. Pravá strana Poissonovy rovnice vyjadřuje

---

<sup>1</sup>Termín částice bude v tomto textu používán pro označení elektronů, iontů, neutrálních popř. excitovaných atomů a molekul.

hustotu elektrického náboje (tzv. net-charge density) a je lineární funkcí hustoty částic (dále bude značena symbolem  $\rho$  [ $\text{Vcm}^{-2}$ ]). Driftové rychlosti, difuzní koeficienty a koeficienty použité pro definici zdrojových členů v rovnicích (4.1) jsou funkcemi redukované intenzity elektrického pole  $\|\vec{E}\|/N$ , kde  $N$  [ $\text{cm}^{-3}$ ] je hustota neutrálního plynu za standardních podmínek a intenzita elektrického pole je definována jako:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}V. \quad (4.3)$$

Důležitou součástí je model fotoionizace, který se projeví ve formě zdrojového členu na pravé straně rovnic konvekce-difuze (4.1) pro hustotu elektronů a pozitivních iontů. Tento model se skládá ze třech rovnic monochromatického radiačního přenosu:

$$\vec{\Omega} \cdot \frac{\partial \Psi_l(\vec{x}, \vec{\Omega})}{\partial x} + \lambda_l p_{O_2} \Psi_l(\vec{x}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \frac{p_q}{p + p_q} \left( \xi \frac{\nu_u}{\nu_i} \right) \left( \frac{\nu_i n_e}{c\xi} \right), \quad (4.4)$$

kde  $l = 1, \dots, N_g$  jsou jednotlivé vlnové délky ( $N_g = 3$ ),  $\Psi_l(\vec{x}, \vec{\Omega})$  je distribuční funkce fotonů v místě  $\vec{x}$  a ve směru  $\vec{\Omega}$ ,  $\lambda_l$  je koeficient absorpce, parciální tlak kyslíku je označen jako  $p_{O_2}$ ,  $p$  je celkový tlak, tzv. "quenching pressure" je označen jako  $p_q$ ,  $\xi$  je koeficient efektivity fotoionizace,  $\nu_u$  je koeficient efektivity excitace, ionizační koeficient je  $\nu_i = \alpha \|\vec{v}_e\|$  (viz rovnice (4.12)),  $n_e$  je hustota elektronů a  $c$  je rychlost světla. Hodnoty koeficientů jsou uvedeny v tabulce (4.2).

$SP_3$  aproximace (více např. [10], [15]) rovnice (4.4) vede na následující soustavu rovnic pro neznámé funkce  $\phi_{1,l}(\vec{x})$  a  $\phi_{2,l}(\vec{x})$ :

$$\frac{\partial^2 \phi_{1,l}(\vec{x})}{\partial x^2} - \frac{\lambda_l^2 p_{O_2}^2}{\kappa_1^2} \phi_{1,l}(\vec{x}) = -\frac{\lambda_l p_{O_2}}{\kappa_1^2} \frac{p_q}{p + p_q} \left( \xi \frac{\nu_u}{\nu_i} \right) \left( \frac{\nu_i n_e}{c\xi} \right), \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial^2 \phi_{2,l}(\vec{x})}{\partial x^2} - \frac{\lambda_l^2 p_{O_2}^2}{\kappa_2^2} \phi_{2,l}(\vec{x}) = -\frac{\lambda_l p_{O_2}}{\kappa_2^2} \frac{p_q}{p + p_q} \left( \xi \frac{\nu_u}{\nu_i} \right) \left( \frac{\nu_i n_e}{c\xi} \right). \quad (4.6)$$

Tyto rovnice jsou spolu svázány pomocí tzv. Larsenových okrajových podmínek (5.11). Distribuční funkce fotonů  $\Psi_l(\vec{x})$  závisející pouze na poloze je dána vztahem:

$$\Psi_l(\vec{x}) = \frac{\gamma_2 \phi_{1,l}(\vec{x}) - \gamma_1 \phi_{2,l}(\vec{x})}{\gamma_2 - \gamma_1}. \quad (4.7)$$

Nakonec je ionizační zdrojový člen vyjádřen jako součet přes všechny vlnové délky užitím vztahu:

$$S_{ph} = \sum_{l=1}^{N_g} A_l \xi p_{O_2} c \Psi_l(\vec{x}), \quad (4.8)$$

kde koeficient  $A_l$  a koeficient absorpce  $\lambda_l$  závisejí na vlnové délce jak je uvedeno v tabulce (4.1).

1	$A_l [cm^{-1}Torr^{-1}]$	$\lambda_l [cm^{-1}Torr^{-1}]$
1	0.0067	0.0447
2	0.0346	0.1121
3	0.3059	0.5994

Tabulka 4.1: Koeficienty  $SP_3$  aproximace modelu fotoionizace pro různé vlnové délky ( $l = 1, 2, 3$ ).

Veličina	Hodnota
$N_g$	3
$p_{O_2}$	150 Torr
$p_q/(p + p_q)$	1 / 28.5
$\xi$	0.1
$\xi \nu_u/\nu_i$	0.1
$c$	$3 \cdot 10^{10} \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$

Tabulka 4.2: Fyzikální konstanty a členy modelu fotoionizace.

### 4.1.1 Dvoučasticový model

Implementace komplikovanějších okrajových podmínek vyžaduje rozšířit tzv. minimální model o konvekci a také o difuzi kationtů. (Minimální model je nejjednodušší model pohybu elektrického výboje, kde je uvažován pouze pohyb elektronů, kationty se nepohybují a vznikají jen v místech s vysokou impakto-ovou ionizací. Tento model je podrobněji popsán např. v [2], [7], [11] nebo [18].)

Vektor neznámých v rovnici 4.1 dvoučasticového modelu je ve tvaru:

$$\vec{W} = (W_e, W_p)^T = (n_e, n_p)^T, \quad (4.9)$$

kde  $n_e$  je hustota elektronů a  $n_p$  je hustota pozitivních iontů. Vektory driftových rychlostí, difuzních koeficientů a zdrojových členů jsou definovány jako (4.10)-(4.12).

$$\vec{v} = (\vec{v}_e, \vec{v}_p)^T, \quad (4.10)$$

$$\vec{D} = (D_e, D_p)^T, \quad (4.11)$$

$$\vec{S} = (S_e, S_p)^T, \quad (4.12)$$

kde zdrojové členy elektronů a pozitivních iontů mají stejnou velikost a jsou definovány jako  $S_e = S_p = \alpha \|\vec{v}_e\| n_e + S_{ph}$ , kde symbol  $\alpha$  reprezentuje koeficient impaktní ionizace a  $S_{ph}$  je fotoionizační zdrojový člen. Všechny koeficienty včetně driftových rychlostí závisí na redukované intenzitě elektrického pole ( $\|\vec{E}\|/N$ ). Hodnoty koeficientů vztahujících se k elektronům jsou převzaty z [26] a ostatní z databáze LXCAT [8]. Funkce  $\alpha_\rho$  v rovnici (4.2) je definována jako:

$$\alpha_\rho = (n_p - n_e). \quad (4.13)$$

### 4.1.2 Tříčásticový model

Nejpoužívanějším modelem pro simulace elektrických výbojů ve vzduchu je tříčásticový model. Tento model je navíc (v porovnání s minimálním modelem) schopen popsat i základní interakce mezi jednotlivými částicemi. Formulován je pro tři neznámé hustoty částic (hustotu elektronů  $n_e$ , pozitivních iontů  $n_p$  a negativních iontů  $n_n$ ). Vektor neznámých má tedy následující tvar:

$$\vec{W} = (n_e, n_p, n_n)^T. \quad (4.14)$$

Tento model pracuje s konvekcí i difuzí pro všechny uvažované částice, pak jsou vektory rychlostí a difuzních koeficientů definovány jako:

$$\vec{v} = (\vec{v}_e, \vec{v}_p, \vec{v}_n)^T, \quad (4.15)$$

$$\vec{D} = (D_e, D_p, D_n)^T. \quad (4.16)$$

Zdrojové členy popisují interakci (přeměny) částic a jsou definovány následujícími vztahy:

$$\vec{S} = (S_e, S_p, S_n)^T, \quad (4.17)$$

$$S_e = \alpha \|\vec{v}_e\| n_e - (\eta_2 + \eta_3) \|\vec{v}_e\| n_e - \beta_{ep} n_p n_e + \gamma n_n + S_{ph}, \quad (4.18)$$

$$S_p = \alpha \|\vec{v}_e\| n_e - \beta_{ep} n_p n_e - \beta_{np} n_p n_n + S_{ph}, \quad (4.19)$$

$$S_n = (\eta_2 + \eta_3) \|\vec{v}_e\| n_e - \beta_{np} n_p n_n - \gamma n_n, \quad (4.20)$$

kde koeficienty  $\eta_2$  a  $\eta_3$  jsou dvoutělesové a třítělesové spojování (tzv. two-body a three-body attachment),  $\beta_{ep}$  je koeficient rekombinace elektronů na pozitivní ionty,  $\beta_{np}$  je koeficient rekombinace negativních iontů na pozitivní, koeficient odtržení elektronů je označen jako  $\gamma$  (hodnoty převzaty z [28]) a fotoionizační zdrojový člen je označen jako  $S_{ph}$ . Všechny výše zmíněné koeficienty jsou opět funkcemi redukovaného elektrického pole a jsou převzaty z databáze LXCAT [8] a [30] pro plyn (idealizovaný vzduch) smíšený z 80%  $N_2$  a 20%  $O_2$ .

Koeficient  $\alpha_\rho$  na pravé straně rovnice (4.2) je počítán jako:

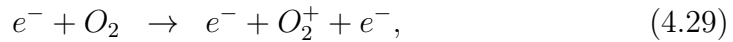
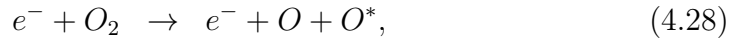
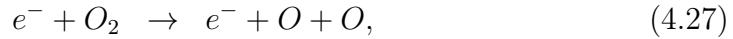
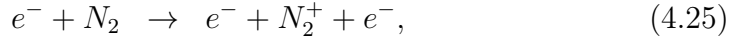
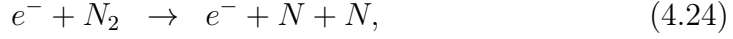
$$\alpha_\rho = (n_p - n_e - n_n). \quad (4.21)$$

Další informace o tomto modelu je možné nalézt např. v [4], [13], [15] apod.

### 4.1.3 Model s jedenácti částicemi (zahrnující základní chemické reakce)

Tento model (viz např. [4]) je schopný popsat, kromě šíření výboje a interakce částic mezi sebou, také základní chemické reakce mezi částicemi a s tím související vznik nových částic. Stejně jako u tříčásticového modelu je i zde použita směs plynu složená z 80%  $N_2$  a z 20%  $O_2$ .

Předpokládá se, že vlivem impaktní ionizace a fotoionizace dochází k jevům jako je disociativní připojování elektronů, disociativní rekombinace částic atd. Původní neutrální molekuly uvažovaného plynu (složeného opět z 80%  $N_2$  a z 20%  $O_2$ ) se díky těmto pochodům přeměňují na devět odvozených částic ( $e^-$ ,  $N_2^+$ ,  $O_2^+$ ,  $O^-$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2^*$ ,  $N_2^{**}$ ,  $N$ ,  $O$ ,  $O^*$ ). Mezi elektrony a neutrálními molekulami jsou nejzásadnější následující reakce



Tento model pracuje s jedenácti neznámými hustotami částic ( $n_e(e^-)$  označuje hustotu elektronů, hustoty kationtů jsou označeny jako  $n_{i1}(N_2^+)$  a  $n_{i2}(O_2^+)$ , hustota aniontů je  $n_{i3}(O^-)$  a sedm hustot neutrálních částic označených  $n_{s1}(N_2)$ ,  $n_{s2}(O_2)$ ,  $n_{s3}(N_2^*)$ ,  $n_{s4}(N_2^{**})$ ,  $n_{s5}(N)$ ,  $n_{s6}(O)$ ,  $n_{s7}(O^*)$ ):

$$\vec{W} = (n_e, n_{i1}, n_{i2}, n_{i3}, n_{s1}, n_{s2}, n_{s3}, n_{s4}, n_{s5}, n_{s6}, n_{s7})^T. \quad (4.31)$$

Zatímco konvekce je brána v úvahu pouze pro elektricky nabitě částice (driftové rychlosti jsou počítány z mobilit jednotlivých částic, viz obr. 4.2), tak disipace je uvažována pro všechny částice:

$$\vec{v} = (\vec{v}_e, \vec{v}_{i1}, \vec{v}_{i2}, \vec{v}_{i3}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T, \quad (4.32)$$

$$\vec{D} = (D_e, D_{i1}, D_{i2}, D_{i3}, D_{s1}, D_{s2}, D_{s3}, D_{s4}, D_{s5}, D_{s6}, D_{s7})^T, \quad (4.33)$$

kde  $D_{i1}$ ,  $D_{i2}$  a  $D_{i3}$  jsou funkcemi redukované intenzity elektrického pole (viz obr. 4.1) a zbývající difuzní koeficienty jsou brány jako konstanty:

$$\begin{aligned} D_{s1} &= 0.208459 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \\ D_{s2} &= 0.208535 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \\ D_{s3} &= 0.208459 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \\ D_{s4} &= 0.208459 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \\ D_{s5} &= 0.291776 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \\ D_{s6} &= 0.325089 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \\ D_{s7} &= 0.325089 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}. \end{aligned}$$

Vektor zdrojových členů má tvar 4.34 a definice jednotlivých složek tohoto vektoru je následující:

$$\vec{S} = (S_e, S_{i1}, S_{i2}, S_{i3}, S_{s1}, S_{s2}, S_{s3}, S_{s4}, S_{s5}, S_{s6}, S_{s7})^T, \quad (4.34)$$

$$S_e = k_{R4}n_en_{s1} + k_{R8}n_en_{s2} - k_{R9}n_en_{s2} + S_{ph}, \quad (4.35)$$

$$S_{i1} = k_{R4}n_en_{s1} + S_{ph}, \quad (4.36)$$

$$S_{i2} = k_{R8}n_en_{s2}, \quad (4.37)$$

$$S_{i3} = k_{R9}n_en_{s2}, \quad (4.38)$$

$$S_{s1} = - \sum_{j=1}^4 k_{Rj}n_en_{s1}, \quad (4.39)$$

$$S_{s2} = - \sum_{j=5}^9 k_{Rj}n_en_{s2}, \quad (4.40)$$

$$S_{s3} = k_{R1}n_en_{s1}, \quad (4.41)$$

$$S_{s4} = k_{R2}n_en_{s1}, \quad (4.42)$$

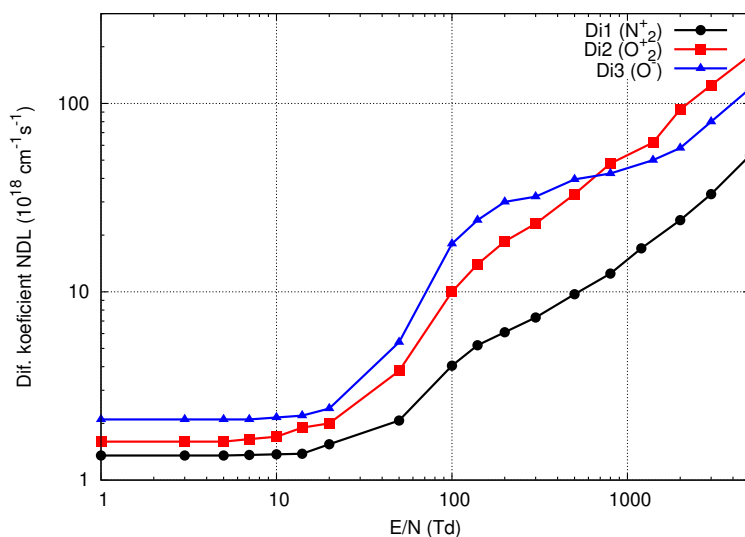
$$S_{s5} = 2k_{R3}n_en_{s1}, \quad (4.43)$$

$$S_{s6} = 2k_{R6}n_en_{s2} + k_{R7}n_en_{s2} + k_{R9}n_en_{s2}, \quad (4.44)$$

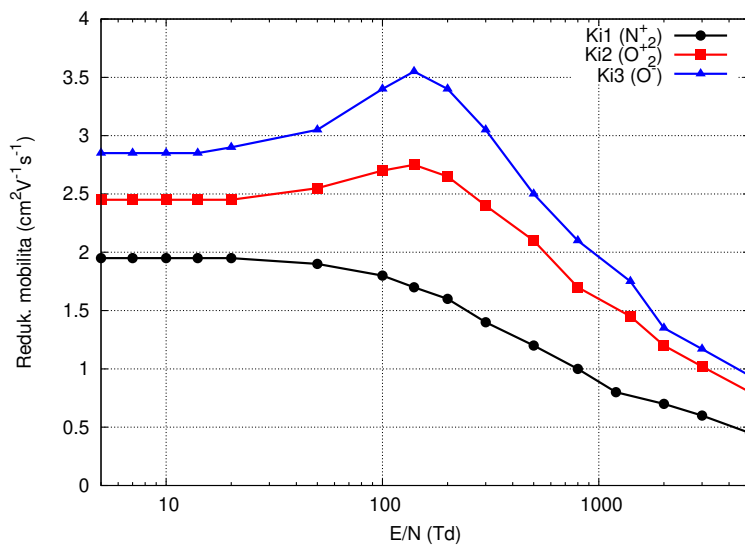
$$S_{s7} = k_{R7}n_en_{s2}, \quad (4.45)$$

kde koeficienty rychlostí reakcí  $k_{R1} - k_{R9}$  jsou funkcemi redukované intenzity elektrického pole (viz obr. 4.3). A koeficient  $\alpha_\rho$  na pravé straně Poissonovy rovnice je předepsán jako:

$$\alpha_\rho = (n_{i1} + n_{i2} - n_e - n_{i3}). \quad (4.46)$$

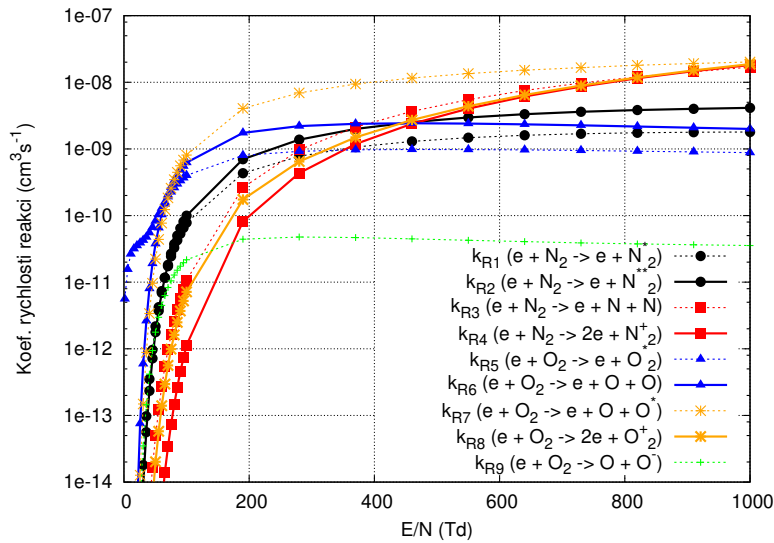


Obrázek 4.1: Závislost difuzních koeficientů ( $D_{i1}$  -  $D_{i3}$ ) pro ionty v suchém vzduchu jako funkce redukované intenzity elektrického pole ( $E/N$ ), data byla převzata z [30].



Obrázek 4.2: Závislost redukované mobility ( $K_{i1}$  -  $K_{i3}$ ) pro ionty v suchém vzduchu jako funkce redukované intenzity elektrického pole ( $E/N$ ), data byla převzata z [30].





Obrázek 4.3: Koeficienty míry reakcí ( $k_{R1}$  -  $k_{R9}$ ) jako funkce redukované intenzity elektrického pole ( $E/N$ ) pro reakce (4.22)-(4.30), data byla převzata z [8].

#### 4.1.4 Model výboje v tekutém argonu

Pohyb elektrického výboje v kapalinách je popsán systémem dvou rovnic kontinuity pro neznámé hustoty elektronů a pozitivních iontů:

$$\vec{W} = (n_e, n_p)^T. \quad (4.47)$$

Model připouští pouze konvekci částic, difuze je pro obě částice zanedbána (kvůli vysoké rychlosti šíření výboje). Vektory rychlostí a difuzních koeficientů mají proto následující tvar:

$$\vec{v} = (\vec{v}_e, \vec{v}_p)^T, \quad (4.48)$$

$$\vec{D} = (0, 0)^T. \quad (4.49)$$

Vektor zdrojových členů je definován následujícím způsobem:

$$\vec{S} = (S_e, S_p)^T, \quad (4.50)$$

kde zdrojový člen pro elektrony je stejný jako zdroj č. pro pozitivní ionty a vypočítají se jako:

$$S_e = S_p = \alpha \|\vec{v}_e\| n_e - \beta n_e n_p, \quad (4.51)$$

kde  $\alpha$  je koeficient ionizace (viz. [tab]) a  $\beta$  je koeficient rekombinace elektronů na pozitivní ionty předepsaný vztahem (4.52):

$$\beta = \xi \frac{\vec{v}_e}{\epsilon \|\vec{E}\|}. \quad (4.52)$$

Koeficient ionizace  $\beta$  je škálovaný bezrozměrným parametrem  $\xi$ , který slouží ke zjištění závislosti propagace výboje na rekombinaci elektronů.

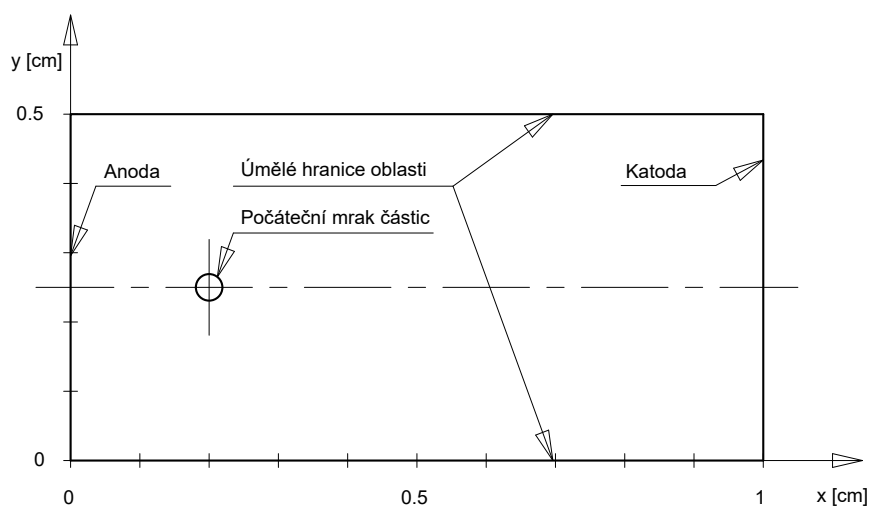
Koeficient  $\alpha_\rho$  je pro model elektrického výboje v tekutém argonu definován jako:

$$\alpha_\rho = (n_p - n_e). \quad (4.53)$$

# Kapitola 5

## Formulace úlohy

Pohyb rovinného výboje byl simulován v obdélníkové oblasti o délce 1 cm ve směru souřadnice  $x$  a šířce 0.5 cm ve směru souřadnice  $y$ . Levá hranice (přímka  $x = 0$  cm) reprezentuje deskovou kladnou elektrodu (anodu) a pravá hranice (přímka  $x = 1$  cm) pak zápornou deskovou elektrodu (katodu). Horní (přímka  $y = 0.5$  cm) a dolní (přímka  $y = 0$  cm) hranice jsou umělé a činí oblast konečnou a zejména s dostatečně malou plochou (z pohledu výpočetní náročnosti).



Obrázek 5.1: Výpočetní oblast pro simulaci elektrického výboje ve 2D mezi rovnoběžnými deskovými elektrodami (vč. označení hranic oblasti a polohy středu počátečního mraku částic).

## 5.1 Okrajové podmínky na umělých hranicích

Na těchto myšlených hranicích ( $\partial\Omega_a$ ) jsou předepsány homogenní Neumannovy okrajové podmínky pro všechny neznámé ve tvaru:

$$\left. \frac{\partial V}{\partial \vec{n}}(x, y, t) \right|_{\partial\Omega_a} = \left. \frac{\partial W_k}{\partial \vec{n}}(x, y, t) \right|_{\partial\Omega_a} = 0, \quad (5.1)$$

kde  $\vec{n}$  je vnější jednotkový normálový vektor ke hranici oblasti,  $\partial\Omega_a$  označuje umělé hranice výpočetní oblasti  $\Omega$  a index  $k = 1, 2, \dots, m$  označuje specifickou částici.

## 5.2 Okrajové podmínky pro vodivé elektrody

Fyzikálně relevantní okrajové podmínky (viz např. [4]) vyjadřují rovnováhu mezi tokem nabitých částic a mírou jejich produkce (nebo zaniknutí) na hranicích simulující vodivé elektrody ( $\partial\Omega_e$ ). V případě, že by byl uvažován obecný tok na hranici (tzn. konvekce a difuze, popř. i vliv zdrojových členů) byly by vztahy definující tyto okrajové podmínky velice komplikované (byly by to silně nelineární funkce driftových rychlostí a teploty-energie částic). Tyto komplikované vztahy mohou být značně zjednodušeny zavedením Péclétova čísla na hranici:

$$P_k = \frac{W_k \|v_k\|}{D_k \|\vec{\nabla} W_k\|},$$

kde index  $k = e, p, n$  označuje typ částice a  $P_e, P_p, P_n$  jsou Péclétova čísla pro elektrony, kladné a záporné ionty. Pro velká Péclétova čísla (zpravidla  $|P_k| > 2$ ) je na hranici dominantní konvekce, proto se difuze neuvažuje. Naopak pro malá Péclétova čísla ( $|P_k| \leq 2$ ) se stává difuze podstatnou a uvažuje se na hranici jak konvekce tak i difuze částic. Formulace okrajových podmínek závisí také na orientaci elektrického pole  $\vec{E}$  (vzhledem k vnější normále  $\vec{n}$  k hranici). Pak lze pro hranice simulující vodivé elektrody předepsat následující podmínky:

1. **Elektrické pole je orientováno směrem od elektrody  $\vec{E} \cdot \vec{n} < 0$**

- (a) Pro **velká Péclétova čísla**  $|P_{e,p,n}| > 2$  se předpokládá pouze přitahování elektronů směrem k elektrodě, kde jsou zcela absorbovány. To je ekvivalentní s podmínkou pro nulový gradient hustoty elektronů na hranici. Platí tedy Neumannova homogenní podmínka ve tvaru:

$$\left. \frac{\partial n_e}{\partial \vec{n}} \right|_{\partial\Omega_e} = 0. \quad (5.2)$$

Od negativních iontů jsou v tomto případě odtrženy elektrony, což vede k produkci elektronů a neutrálních částic. Předpokládá se, že všechny elektrony vzniklé neutralizací negativních iontů jsou absorbovány povrchem elektrody. Proto je pro negativní ionty také předepsána podmínka pro nulový gradient jejich hustoty:

$$\left. \frac{\partial n_n}{\partial \vec{n}} \right|_{\partial \Omega_e} = 0. \quad (5.3)$$

Díky orientaci elektrického pole jsou v tomto případě kladné ionty odpuzovány od elektrody. Zjednodušujícím předpokladem je, že nemůže docházet k jejich extrakci z povrchu elektrody. Proto je zde předepsána Dirichletova okrajová podmínka s nulovou hodnotou hustoty pro pozitivní ionty:

$$n_p \Big|_{\partial \Omega_e} = 0. \quad (5.4)$$

- (b) V případě *malých Péceletových čísel*  $|P_{e,p,n}| \leq 2$  musí pro elektrony platit rovnováha mezi tokem (kdy je zahrnuta konvekce i difuze) a produkcí popř. zánikem částic na povrchu elektrody, které jsou způsobené jejich vzájemnou interakcí. V případě iontů se na hranici předpokládá úplná rekombinace nebo odtržení elektronů. Pro všechny nabitě částice lze předepsat okrajovou podmínku stejně:

$$\vec{\nabla} n_{e,p,n} \cdot \vec{n} \Big|_{\partial \Omega_e} = \frac{1}{D_{e,p,n}} \left( n_{e,p,n} \vec{v}_{e,p,n} \cdot \vec{n} - n_{e,p,n} \frac{v_{e,p,n}^*}{4} \right). \quad (5.5)$$

V případě iontů dává tato rovnice pouze první přiblížení jejich hustoty na hranici. Toto přiblížení je fyzikálně akceptovatelné pouze v případě, že tok iontů směřuje do elektrody. To nemusí být splněno pro hustotu pozitivních iontů a pak je pro ně nutné místo této podmínky použít Neumannovu homogenní okrajovou podmínku.

## 2. Elektrické pole je orientováno směrem k elektrodě $\vec{E} \cdot \vec{n} > 0$

- (a) V případě *velkého Péceletova čísla*  $|P_{e,p,n}| > 2$  dochází k sekundární emisi elektronů z povrchu elektrody a okrajovou podmínku pro jejich hustotu je možné zapsat ve tvaru:

$$n_e \Big|_{\partial \Omega_e} = -\gamma_{sec} \frac{\vec{v}_p \cdot \vec{n}}{\vec{v}_e \cdot \vec{n}} n_p. \quad (5.6)$$

pozitivní ionty jsou přitahovány směrem k elektrodě a na jejím povrchu se předpokládá jejich úplná rekombinace na neutrální částice a elektrony. Proto je předepsána Neumannova homogenní podmínka pro hustotu pozitivních iontů ve tvaru:

$$\left. \frac{\partial n_p}{\partial \vec{n}} \right|_{\partial \Omega_e} = 0. \quad (5.7)$$

Předpokládá se, že k emisi negativních iontů z povrchu elektrody nedochází vůbec a proto se předepisuje jejich hustota na elektrodě rovna nule:

$$n_n \Big|_{\partial \Omega_e} = 0. \quad (5.8)$$

- (b) Pro případ *malých Péceletových čísel*  $|P_{e,p,n}| \leq 2$  vyjadřuje okrajová podmínka pro elektrony rovnováhu mezi mrakem elektronů opouštějícího elektrodu, difuzí elektronů a množstvím elektronů absorbovaných povrchem elektrody. Tato podmínka lze předepsat i pro negativní ionty a je vyjádřena následujícím vztahem:

$$\vec{\nabla} n_{e,n} \cdot \vec{n} \Big|_{\partial \Omega_e} = \frac{1}{D_{e,n}} \left( n_{e,n} \vec{v}_{e,n} \cdot \vec{n} - n_{e,n} \frac{v_{e,n}^*}{4} + \gamma_{sec} n_p \vec{v}_p \cdot \vec{n} \right). \quad (5.9)$$

Pro hustotu pozitivních iontů na elektrodě přibližně platí:

$$\vec{\nabla} n_p \cdot \vec{n} \Big|_{\partial \Omega_e} = \frac{1}{D_p} \left( n_p \vec{v}_p \cdot \vec{n} - n_p \frac{v_p^*}{4} \right). \quad (5.10)$$

V definicích okrajových podmínek jsou použity následující konstanty a funkce. Koefficient rychlosti sekundární emise elektronů  $\gamma_{sec} = 0.1$ , termální rychlost částice  $k$  je definována jako:

$$v_k^* = \sqrt{\frac{8k_B T_k}{\pi m_k}},$$

kde  $k_B = 1.38065 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ g s}^{-2} \text{ K}^{-1}$  je Boltzmannova konstanta,  $T_k [K]$  je teplota částice  $k$  a  $m_k [g]$  její hmotnost. V elektrickém výboji vzniká pouze netermické (tzv. studené) plasma, proto je teplota iontů brána jako konstantní  $T_p = T_n = 300K$ . Naopak teplota (energie) elektronů  $T_e [J]$  závisí na redukované intenzitě elektrického pole a je možné ji určit ze vztahu pro mobilitu elektronů  $K_e [\text{cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}]$  jako:

$$K_e = \frac{-qD_e}{T_e}.$$

Pro všechny neutrální částice jsou předepsány Neumannovy homogenní okrajové podmínky. Pro elektrický potenciál jsou na obou elektrodách předepsány Dirichletovy okrajové podmínky. Napětí na anodě je 25 kV (v případě dvoučásticového modelu) a 48 kV (pro vícečásticové modely), na katodě je pak předepsáno 0 V pro všechny modely.

### 5.3 Okrajové podmínky modelu fotoionizace

Soustavy rovnic (4.5) a (4.6) jsou spolu svázány pomocí tzv. Larsenových okrajových podmínek [15], [10]. Ty neuvažují odrazivost ani emisi částic z okraje oblasti a jsou definovány následujícími rovnicemi:

$$\vec{\nabla} \phi_{1,l} \cdot \vec{n} \Big|_{\partial\Omega} = -\lambda_l p_{O_2} \alpha_1 \phi_{1,l} - \lambda_l p_{O_2} \beta_2 \phi_{2,l}, \quad (5.11)$$

$$\vec{\nabla} \phi_{2,l} \cdot \vec{n} \Big|_{\partial\Omega} = -\lambda_l p_{O_2} \alpha_2 \phi_{2,l} - \lambda_l p_{O_2} \beta_1 \phi_{1,l}, \quad (5.12)$$

kde  $\vec{n}$  je jednotkový vektor vnější normály k hranici oblasti  $\partial\Omega$  a hodnoty koeficientů jsou následující:  $\alpha_{1,2} = (5/96)(34 \pm 11\sqrt{6/5})$  a  $\beta_{1,2} = (5/96)(2 \pm 11\sqrt{6/5})$ .

### 5.4 Počáteční podmínky

Elektrický výboj ve formě vlákna nemůže vzniknout v homogenním elektrickém poli. Proto je nutné toto pole narušit buď lokálním zvýšením hustoty částic - počátečním mrakem částic (působením vnějšího elektrického pole dojde k vzájemnému posunu částic a tím dojde ke vzniku lokálního elektrického pole) nebo např. použitím hrotových elektrod. V této práci bylo pro numerické simulace využito obou možností.

V případě využití počátečního mraku je hustota elektronů na počátku výpočtu rozložena ve tvaru Gaussova pulsu:

$$n_e(x, y, t_0) = 10^{14} \cdot e^{-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{\sigma^2}} [\text{cm}^{-3}], \quad (5.13)$$

kde  $[x_0, y_0] = [0.2, 0.25]$  jsou souřadnice vrcholu pulsu a jeho šířka je řízena koeficientem  $\sigma = 0.1$ . Hustota pozitivních iontů je inicializována pomocí stejného pulsu sníženého v poměru, ve kterém je odpovídající neutrální částice zastoupena v neionizovaném plynu:

$$n_{i1}(x, y, t_0) = 0.8 \cdot n_e(x, y, t_0), \quad (5.14)$$

$$n_{i2}(x, y, t_0) = 0.2 \cdot n_e(x, y, t_0). \quad (5.15)$$

Počáteční hustoty původních neutrálních částic  $N_2$  a  $O_2$  jsou konstantní s hodnotami:

$$n_{s1}(x, y, t_0) = 0.8 \cdot N, \quad (5.16)$$

$$n_{s2}(x, y, t_0) = 0.2 \cdot N. \quad (5.17)$$

Ostatní částice mají na počátku nulovou hustotu. Počáteční podmínka pro hustotu elektronů a hustotu pozitivních iontů je v případě dvou a tříčásticového modelu následující:

$$W_m = 10^{14} \cdot e^{-\frac{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2}{\sigma^2}} [\text{cm}^{-3}]. \quad (5.18)$$

Pokud model zahrnuje i negativní ionty je jejich počáteční hustota rovna nule v celé výpočetní oblasti.



# Kapitola 6

## Numerická metoda

Elektrické výboje se zpravidla pohybují mezi hrotovými elektrodami nebo mezi hrotovou a deskovou elektrodou, případně jednu z elektrod může tvořit tvarově složitý objekt (např. strojní součást) jehož určité vlastnosti se dají pomocí studeného plasmatu ovlivnit. To pro numerickou simulaci těchto reálných případů pohybu elektrických výbojů znamená, že řešení výše uvedeného systému rovnic musí probíhat v oblastech s geometricky komplikovanou hranicí. Proto je nutné předpokládat rozdělení výpočetní oblasti pomocí obecně nestrukturované sítě s trojúhelníkovými, čtyřúhelníkovými nebo kombinací obou typů buněk. Použitá numerická metoda musí umožňovat řešení výše uvedených modelů na zmíněných sítích.

Za těchto předpokladů může být pro diskretizaci systému rovnic (4.1)-(4.2) vhodná např. metoda konečných objemů (MKO). V následujících odstavcích je proto popsáno použití MKO pro diskretizaci jednotlivých rovnic modelu elektrického výboje, dále použití vhodných schémat pro numerické toky a odvození konečné diskrétní náhrady rovnic pro jejich numerické řešení. Řešení je hledáno v omezené oblasti  $\Omega$ , která je rozdělena na konečné objemy (buňky)  $\Omega_i$ . Předpokladem je, že konečný počet buněk pokrývá celou oblast  $\Omega = \overline{\cup_i \Omega_i}$  a buňky jsou navzájem disjunktní.

### 6.1 Diskretizace rovnice konvekce-difuze

Nyní bude pomocí MKO odvozeno explicitní schéma rovnice (4.1) pro částici  $m$  ve dvou prostorových dimenzích. Tato rovnice je nejprve integrována přes plochu buňky  $\Omega_i$ , tím je získán její integrální tvar:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega_i} \frac{\partial W_m}{\partial t} d\Omega_i + \iint_{\Omega_i} \vec{\nabla} \cdot \vec{f}_c(W_m) d\Omega_i - \\ \iint_{\Omega_i} \vec{\nabla} \cdot \vec{f}_d(W_m) d\Omega_i = \iint_{\Omega_i} S_m d\Omega_i. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Použitím Greenovy věty při integraci divergencí a následně věty o střední hodnotě integrálu pro integraci časové derivace hustoty a zdrojového členu je obdržena rovnice ve tvaru:

$$|\Omega_i| \frac{\partial W_m}{\partial t} + \oint_{\partial\Omega_i} \vec{f}_c(W_m) \vec{N} dL - \oint_{\partial\Omega_i} \vec{f}_d(W_m) \vec{N} dL = |\Omega_i| S_m, \quad (6.2)$$

kde  $\vec{N}$  je vnější jednotkový normálový vektor k hranici buňky  $i$ , symbolem  $\partial\Omega_i$  je označena hranice dané buňky, její objem je pojmenován jako  $|\Omega_i|$  a  $dL$  je element hranice buňky. Následuje vydělení rovnice (6.2) objemem buňky a nahrazení časové derivace hustoty pomocí Eulerovy dopředné diference:

$$\begin{aligned} \frac{W_{m,i}^{k+1} - W_{m,i}^k}{\Delta t} + \frac{1}{|\Omega_i|} \oint_{\partial\Omega_i} \vec{f}_c(W_m^k) \vec{N} dL - \\ \frac{1}{|\Omega_i|} \oint_{\partial\Omega_i} \vec{f}_d(W_m^k) \vec{N} dL = S_m, \end{aligned} \quad (6.3)$$

kde index  $k \in \mathbb{N}$  označuje časovou vrstvu a symbol  $\Delta t$  reprezentuje časový krok. V rovnici (6.3) jsou dále nahrazeny integrály toků přes hranici buňky sumami numerických toků a následně je vyjádřena hodnota hustoty částice v  $k + 1$  časové vrstvě, čímž je získáno schéma ve tvaru:

$$\begin{aligned} W_{m,i}^{k+1} = W_{m,i}^k - \frac{\Delta t}{|\Omega_i|} \sum_{j=1}^{n_s} \left[ \vec{f}_{c,ij}(W_m^k) \vec{N}_{ij} |L_{ij}| - \right. \\ \left. \vec{f}_{d,ij}(W_m^k) \vec{N}_{ij} |L_{ij}| \right] + \Delta t S_{m,i}^k. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Celočíselná hodnota označená jako  $n_s$  udává počet stěn buňky  $i$ ,  $\vec{N}_{ij}$  je vnější jednotkový normálový vektor na společné stěně uvažované buňky  $i$  a sousední buňky  $j$ , délka této stěny je označena jako  $|L_{ij}|$ . Dále bude popsána aproximace konvektivního  $\vec{f}_{c,ij}(W_m^k)$  a disipativního  $\vec{f}_{d,ij}(W_m^k)$  numerického toku.

### 6.1.1 Aproximace konvektivního toku

Aproximace prvního z toků v rovnici (6.4) je provedena pomocí protiproudového schématu (upwind), které pro výpočet používá hodnotu hustoty částic buď z buňky  $i$  nebo ze sousední buňky  $j$ . Výběr se provádí podle směru rychlosti částic vzhledem k vnější normále stěny  $ij$  uvažované buňky. Tok je pak počítán jako:

$$\vec{f}_{c,ij}(W_m^k) = \begin{cases} W_{m,i}^k \cdot \vec{v}_{m,ij}^k & \text{když } \vec{v}_{m,ij}^k \cdot \vec{n}_{ij} \geq 0 \\ W_{m,j}^k \cdot \vec{v}_{m,ij}^k & \text{jinak.} \end{cases} \quad (6.5)$$

### 6.1.2 Aproximace disipativního toku

Disipativní tok na stěně  $L_{ij}$  mezi buňkami  $i$  a  $j$  je definován jako:

$$\vec{f}_{d,ij}(W_m^k) = \left( D_m^k \vec{\nabla} W_m^k \right)_{ij}, \quad (6.6)$$

kde je nutné diskretizovat gradient hustoty  $\vec{\nabla} W_m^k|_{ij}$  uprostřed stěny  $L_{ij}$ . K tomu je využita pomocná buňka – tzv. diamond cell  $\omega_{ij}$  (viz obr. 6.1) se čtyřmi vrcholy (v koncových bodech stěny  $L_{ij}$  a ve středech buněk  $i$  a  $j$ ). Gradient se integruje po složkách stejným způsobem jako při integraci rovnice (6.1):

$$\iint_{\omega_{ij}} \frac{\partial W_m^k}{\partial x} \Big|_{ij} d\omega_{ij} = \iint_{\omega_{ij}} \operatorname{div}(W_m^k, 0) d\omega_{ij}. \quad (6.7)$$

Na pravé straně je plošný integrál převeden pomocí Greenovy věty na křivkový integrál přes hranici pomocné buňky  $\partial\omega_{ij}$ :

$$\iint_{\omega_{ij}} \frac{\partial W_m^k}{\partial x} \Big|_{ij} d\omega_{ij} = \oint_{\partial\omega_{ij}} (W_m^k, 0) \vec{n} dl, \quad (6.8)$$

kde  $\vec{n}$  je vnější jednotkový normálový vektor k hranici pomocné buňky  $\partial\omega_{ij}$ . Výraz na levé straně rovnice (6.8) je integrován jako konstanta, křivkový integrál přes hranici pomocné buňky je aproximován pomocí sumy přes všechny její stěny a následně je rovnice vydělena objemem pomocné buňky  $|\omega_{ij}|$ . Tím je obdržěn vztah pro diskrétní výpočet  $x$ -ové složky gradientu hustoty na stěně  $L_{ij}$  původní buňky  $i$  ve tvaru:

$$\left. \frac{\partial W_m^k}{\partial x} \right|_{ij} \approx \frac{1}{|\omega_{ij}|} \sum_n^4 (W_{m,n}^k, 0) \vec{n}_n |l_n|, \quad (6.9)$$

kde  $W_{m,n}^k$  je hodnota hustoty částice  $m$  uprostřed stěny  $n$  pomocné buňky,  $\vec{n}_n$  je vnější jednotková normála ke stěně  $n$  pomocné buňky a  $|l_n|$  je délka této stěny. Druhá složka gradientu hustoty se aproximuje stejným způsobem:

$$\left. \frac{\partial W_m^k}{\partial y} \right|_{ij} \approx \frac{1}{|\omega_{ij}|} \sum_n^4 (0, W_{m,n}^k) \vec{n}_n |l_n|. \quad (6.10)$$

Aproximace obou složek gradientu hustoty na stěně  $L_{ij}$  je pak:

$$\vec{\nabla} W_m^k \Big|_{ij} \approx \frac{1}{|\omega_{ij}|} \sum_n^4 W_{m,n}^k \vec{n}_n |l_n|, \quad (6.11)$$

kde hodnoty hustot částic ve středech stěn pomocné buňky  $W_{m,n}^k$  se spočítají jako aritmetické průměry hodnot v počátečních  $p$  a koncových bodech  $k$  jednotlivých stěn jako:

$$W_{m,n}^k = \frac{1}{2} (W_{m,np}^k + W_{m,nk}^k). \quad (6.12)$$

Hodnoty v koncových bodech stěny  $L_{ij}$  se spočítají metodou nejmenších čtverců z hodnot ze středů buněk obklopujících uvažovaný bod (počáteční nebo koncový bod stěny  $L_{ij}$  je jedním z vrcholů těchto buněk). Více viz příloha.

### 6.1.3 Aproximace zdrojového členu

Zdrojový člen v rovnici (6.4) je počítán ve středu buňky jako hodnota funkce:

$$S_{m,i}^k = S_{m,i}^k \left( \vec{W}_i^k, \|\vec{E}_i^k\|/N \right), \quad (6.13)$$

která závisí na hustotě částic a redukované intenzitě elektrického pole v buňce  $i$ . Tvar těchto funkcí je specifikován v kapitole zabývající se popisem matematických modelů.

## 6.2 Diskretizace Poissonovy rovnice

Aproximace rovnice (4.2) je provedena podobně jako u difuzního členu v rovnici (4.1). Laplaceův operátor je nejprve nahrazen součinem operátoru divergence a gradientu elektrického potenciálu následujícím způsobem:

$$\operatorname{div}(\vec{\nabla}V) = \frac{q}{\epsilon}\alpha_\rho(\vec{W}). \quad (6.14)$$

Tato rovnice je integrována přes plochu buňky  $\Omega_i$ , tím je získán její integrální tvar:

$$\iint_{\Omega_i} \operatorname{div}(\vec{\nabla}V) d\Omega_i = \iint_{\Omega_i} \frac{q}{\epsilon}\alpha_\rho(\vec{W}) d\Omega_i. \quad (6.15)$$

Plošný integrál přes plochu buňky  $\Omega_i$  na levé straně rovnice (6.15) se převede pomocí Greenovy věty na křivkový integrál přes hranici  $\partial\Omega_i$  uvažované buňky. A pravá strana se integruje s využitím věty o střední hodnotě integrálu. Tím je získán následující tvar:

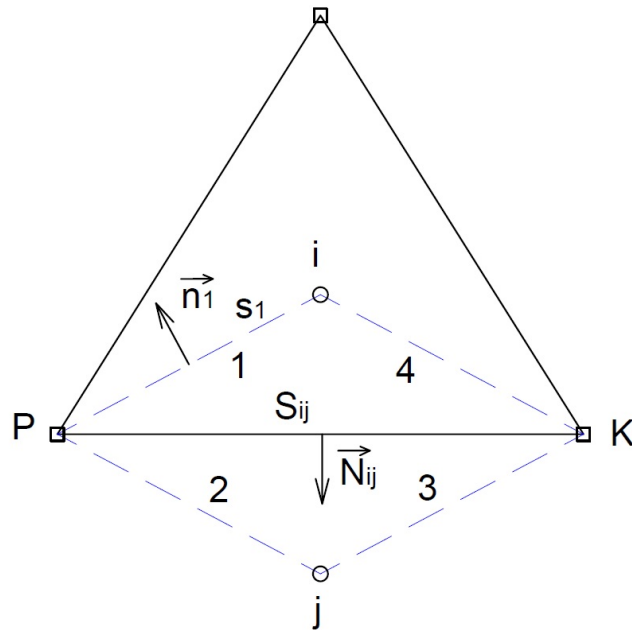
$$\oint_{\partial\Omega_i} \vec{\nabla}V \vec{N} dL = |\Omega_i| \frac{q}{\epsilon}\alpha_\rho(\vec{W}), \quad (6.16)$$

kde  $\vec{N}$  označuje vnější jednotkový normálový vektor k hranici buňky  $i$  a  $|\Omega_i|$  je plocha zmiňované buňky. Dále je křivkový integrál nahrazen sumou přes všechny stěny  $n_s$  uvažované buňky:

$$\sum_j^{n_s} \vec{\nabla}V \Big|_{ij} \vec{N}_{ij} |L_{ij}| = |\Omega_i| \frac{q}{\epsilon}\alpha_{\rho,i}(\vec{W}). \quad (6.17)$$

Délka strany společné objemům  $i$  a  $j$  je označena  $|L_{ij}|$  (viz obr. 6.1), dvojice indexů  $ij$  označuje pozici uprostřed stěny  $L_{ij}$ .

Následně je potřeba aproximovat gradient  $\vec{\nabla}V$  uprostřed stěn  $L_{ij}$ . K tomu je použita pomocná buňka (tzv. ghost cell) stejně jako v případě diskretizace disipativního členu v rovnici konvekce-difuze-reakce (viz obr. 6.1).



Obrázek 6.1: Konečný objem  $i$  s pomocnou buňkou (tzv. diamond cell).

Gradient se aproximuje po složkách. Nejprve integrace x-ové složky gradientu přes plochu pomocné buňky  $\omega_{ij}$  na stěně mezi buňkami  $i$  a  $j$ :

$$\iint_{\omega_{ij}} \frac{\partial V}{\partial x} \Big|_{ij} d\omega_{ij} = \iint_{\omega_{ij}} \operatorname{div} (V, 0) d\omega_{ij}, \quad (6.18)$$

dále je na pravou stranu této rovnice použita Greenova věta a plošný integrál přes plochu pomocné buňky je nahrazen křivkovým integrálem přes její hranici  $\partial\omega_{ij}$ .

$$\iint_{\omega_{ij}} \frac{\partial V}{\partial x} \Big|_{ij} d\omega_{ij} = \oint_{\partial\omega_{ij}} (V, 0) \vec{n} dl, \quad (6.19)$$

kde  $\vec{n}$  je jednotková vnější normála k hranici pomocné buňky. Křivkový integrál v rovnici (6.19) je aproximován pomocí sumy přes všechny stěny pomocné buňky. Čímž je získána aproximace první složky gradientu elektrického potenciálu  $V$ :

$$\frac{\partial V}{\partial x} \Big|_{ij} \approx \frac{1}{|\omega_{ij}|} \sum_n^4 (V_n, 0) \vec{n}_n |l_n|, \quad (6.20)$$

kde  $V_n$  je hodnota elektrického potenciálu uprostřed stěny  $n$  pomocné buňky  $\omega_{ij}$ ,  $\vec{n}_n$  je jednotková normála zmíněné stěny a  $|l_n|$  je její délka. Aproximace druhé složky gradientu je analogická:

$$\frac{\partial V}{\partial y} \Big|_{ij} \approx \frac{1}{|\omega_{ij}|} \sum_n^4 (0, V_n) \vec{n}_n |l_n|. \quad (6.21)$$

Pak lze aproximaci obou složek gradientu elektrického potenciálu uprostřed stěny  $L_{ij}$  zapsat ve tvaru:

$$\vec{\nabla} V \Big|_{ij} \approx \frac{1}{|\omega_{ij}|} \sum_n^4 V_n \vec{n}_n |l_n|. \quad (6.22)$$

Hodnoty v počátečním  $V_p$  a v koncovém bodě  $V_k$  stěny  $|L_{ij}|$  mezi buňkami  $i$  a  $j$  se aproximují pomocí metody nejmenších čtverců z hodnot ve středech buněk obklopujících daný počáteční nebo koncový bod (viz příloha). Hodnoty ve zbývajících vrcholech pomocného objemu  $V_i$  a  $V_j$  jsou vzaty ze středů buněk  $i$  a  $j$ . S pomocí těchto hodnot se spočítají hodnoty uprostřed jednotlivých stěn pomocného objemu jako střední hodnoty z koncových bodů, stejně jako v rovnici (6.12).

Rovnice (6.17) je vydělena objemem buňky  $i$  a gradient elektrického potenciálu na levé straně rovnice je aproximován pomocí vztahu (6.22):

$$\frac{1}{|\Omega_i| |\omega_{ij}|} \sum_j^{n_s} \left( \sum_n^4 V_n \vec{n}_n |l_n| \right) \vec{N}_{ij} |L_{ij}| = \frac{q}{\epsilon} \alpha_{\rho,i} (\vec{W}). \quad (6.23)$$

Rovnice (6.23) odpovídá jednomu řádku soustavy lineárních rovnic, získané aproximací Poissonovy rovnice (4.2) metodou konečných objemů.

Normálové vektory stěn pomocné buňky  $\vec{n}_n$  násobené délkami příslušných stěn  $l_n$  jsou definovány následujícím způsobem:

$$\begin{aligned} \vec{n}_1 |l_1| &= (y_k - y_j; -(x_k - x_j)), \\ \vec{n}_2 |l_2| &= (y_i - y_k; -(x_i - x_k)), \\ \vec{n}_3 |l_3| &= (y_p - y_i; -(x_p - x_i)), \\ \vec{n}_4 |l_4| &= (y_j - y_p; -(x_j - x_p)), \end{aligned} \quad (6.24)$$

kde  $[x_p; y_p]$  a  $[x_k; y_k]$  jsou souřadnice počátečního a koncového bodu stěny  $L_{ij}$ . Body  $[x_i; y_i]$  a  $[x_j; y_j]$  udávají souřadnice středů buněk  $i$ , popř.  $j$ . Takto

definované normálové vektory a hodnoty elektrického potenciálu uprostřed stěn pomocné buňky se dosadí do rovnice (6.23):

$$\frac{1}{2|\Omega_i||\omega_{ij}|} \sum_j^{n_s} \left[ \begin{aligned} &(V_j + V_k) (y_k - y_j; x_j - x_k) + \\ &(V_k + V_i) (y_i - y_k; x_k - x_i) + \\ &(V_i + V_p) (y_p - y_i; x_i - x_p) + \\ &(V_p + V_j) (y_j - y_p; x_p - x_j) \end{aligned} \right] \vec{N}_{ij}|L_{ij}| = \frac{q}{\epsilon} \alpha_{\rho,i} (\vec{W}). \quad (6.25)$$

Sečtením souřadnic násobených stejnými hodnotami elektrického potenciálu se rovnice (6.25) upraví do tvaru:

$$\frac{1}{2|\Omega_i||\omega_{ij}|} \sum_j^{n_s} \left[ \begin{aligned} &(y_k - y_p) V_j + (y_i - y_j) V_k + \\ &(y_p - y_k) V_i + (y_j - y_i) V_p; \\ &(x_p - x_k) V_j + (x_j - x_i) V_k + \\ &(x_k - x_p) V_i + (x_i - x_j) V_p \end{aligned} \right] \vec{N}_{ij}|L_{ij}| = \frac{q}{\epsilon} \alpha_{\rho,i} (\vec{W}). \quad (6.26)$$

Normálový vektor  $\vec{N}_{ij}$  stěny  $L_{ij}$  násobený její délkou je definován následujícím způsobem:

$$\vec{N}_{ij}|L_{ij}| = (y_k - y_p; -(x_p - x_k)) \quad (6.27)$$

a poté je dosazen do rovnice (6.26). Tím je získána  $i$ -tá rovnice do soustavy lineárních algebraických rovnic:

$$\frac{1}{2|\Omega_i||\omega_{ij}|} \sum_j^{n_s} \left[ \begin{aligned} &[(y_k - y_p) (y_k - y_p) + (x_p - x_k) (x_p - x_k)] V_j + \\ &[(y_i - y_j) (y_k - y_p) + (x_j - x_i) (x_p - x_k)] V_k + \\ &[(y_p - y_k) (y_k - y_p) + (x_k - x_p) (x_p - x_k)] V_i + \\ &[(y_j - y_i) (y_k - y_p) + (x_i - x_j) (x_p - x_k)] V_p \end{aligned} \right] = \frac{q}{\epsilon} \alpha_{\rho,i} (\vec{W}), \quad (6.28)$$

kde jsou hodnoty elektrického potenciálu v počátečním a koncovém bodě počítány z hodnot ve středech buněk obklopujících daný bod pomocí MNČ



(viz příloha). Sestavením rovnic (6.28) pro všechny buňky v oblasti  $\Omega$  je získána soustava lineárních rovnic ve tvaru:

$$A\vec{V} = \vec{b}, \quad (6.29)$$

kde  $A$  je matice koeficientů závislá pouze na topologii sítě, složky vektoru neznámých  $\vec{V}$  jsou tvořeny hodnotami elektrického potenciálu ve středech buněk a vektor pravé strany je tvořen známými hodnotami z pravé strany rovnice (6.28) a hodnotami z levé strany této rovnice, které jsou známé díky okrajové podmínce. Protože matice soustavy je tzv. řídká ukládají se z ní pouze nenulové koeficienty a indexy příslušného řádku a sloupce v matici. Pro řešení této soustavy může být využit například LU rozklad.

### 6.3 Diskretizace rovnice intenzity elektrického pole

Gradient elektrického potenciálu v rovnici pro intenzitu elektrického pole (4.3) je diskretizován stejným způsobem jako gradient v odstavci 6.2 zabývající se diskretizací Poissonovy rovnice. Opět je použita pomocná buňka zkonstruovaná s pomocí jedné stěny  $L_{ij}$  buňky sítě  $i$  a sousední buňky  $j$ . Diskretizace gradientu elektrického potenciálu je popsána pomocí vztahů (6.18)-(6.22). Jednotkové normálové vektory násobené příslušnou délkou stěny pomocné buňky jsou dány rovnicemi (6.24), jejich dosazením do rovnice (6.22) je získán diskrétní tvar rovnice pro intenzitu elektrického pole. Její hodnoty jsou pak vypočítávány přímo uprostřed jednotlivých stěn buněk sítě.

### 6.4 Diskretizace koeficientů (interpolace tabulkových hodnot)

Koeficienty modelu elektrického výboje (4.1)-(4.4) jsou dostupné převážně ve formě tabulek jako funkce intenzity redukovaného elektrického pole. Pro zjištění správné hodnoty koeficientu pro danou hodnotu intenzity elektrického pole je nutné v těchto tabulkách interpolovat. Tabulkové hodnoty (body) budou nazvány definičními body a množina všech definičních bodů bude nazvána definičním polynomem. Interpolací bude rozuměna konstrukce matematického modelu křivky, která musí definičními body procházet a její tvar mezi definičními body musí vyhovovat určitým požadavkům (tzn. aplikaci pro kterou je určena) [23]. Interpolovaný bod pak bude funkční hodnota spline křivky pro libovolnou hodnotu z jejího definičního oboru.

### 6.4.1 Monotonní kubická spline křivka

Po vykreslení průběhů všech koeficientů se jako nejvhodnější jeví použití interpolace pomocí kubické monotonní spline křivky [23]. Její rovnice je přepsána jako lineární kombinace bázevých funkcí (polynomů) ve tvaru:

$$y(x) = h_{00}y_k + h_{10}m_k(x_{k+1} - x_k) + h_{01}y_{k+1} + h_{11}m_{k+1}(x_{k+1} - x_k), \quad (6.30)$$

kde  $y(x)$  je interpolovaná hodnota v místě  $x \in \langle x_k, x_{k+1} \rangle$ ,  $h_{00}$ - $h_{11}$  jsou Hermitovy bázevých polynomy,  $m_k$  je střední hodnota směrnice definičního polynomu na intervalu  $\langle x_{k-1}, x_{k+1} \rangle$ ,  $y_k$  je hodnota definičního polynomu v bodě  $k$ . Směrnice v krajních bodech jednotlivých intervalů se vypočítávají vždy jako aritmetické průměry směrnic na sousedních intervalech daného bodu:

$$m_k = \frac{1}{2}(\delta_{k-1} + \delta_k), \quad (6.31)$$

kde derivace definičního polynomu na intervalu  $\langle x_k, x_{k+1} \rangle$  lze aproximovat pomocí zpětné diference jako:

$$\delta_k = \frac{y_{k+1} - y_k}{x_{k+1} - x_k}. \quad (6.32)$$

Monotonie křivky je zajištěna například pokud jsou splněny následující podmínky (více viz [22] a [16]):

$$|\vec{r}| \leq 3, \quad (6.33)$$

$$\alpha_k \geq 0 \wedge \beta_k \geq 0, \quad (6.34)$$

kde  $\alpha_k = \frac{m_k}{\delta_k}$ ,  $\beta_k = \frac{m_{k+1}}{\delta_k}$  a vektor  $\vec{r} = (\alpha_k, \beta_k)$ . Pokud definiční polynom nesplňuje tyto podmínky na některém intervalu je nutné upravit příslušné směrnice pro spline následujícím způsobem.

1. Pokud  $|\vec{r}| > 3$ , pak  $m_k = \tau_k \alpha_k \delta_k$  a  $m_{k+1} = \tau_k \beta_k \delta_k$ , kde  $\tau_k = \frac{3}{|\vec{r}|}$ .
2. Pokud  $\alpha_k < 0 \vee \beta_k < 0$ , pak  $m_k = 0$  a  $m_{k+1} = 0$ .

Parametrizace křivky a současné normování intervalu  $\langle x_k, x_{k+1} \rangle$  na interval  $\langle 0, 1 \rangle$  je provedeno pomocí parametru  $t$  zvoleného jako:

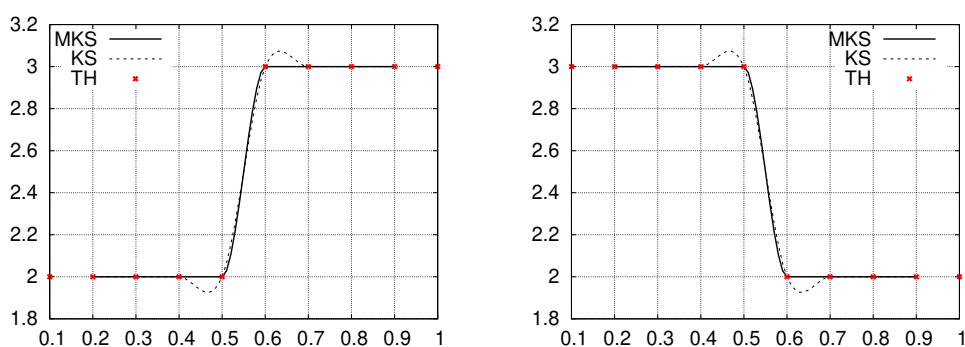
$$t = \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k}, \quad (6.35)$$

kde souřadnice  $x \in \langle x_k, x_{k+1} \rangle$ . Pak lze Hermitovy báze polynomy [23] zapsat ve tvaru:

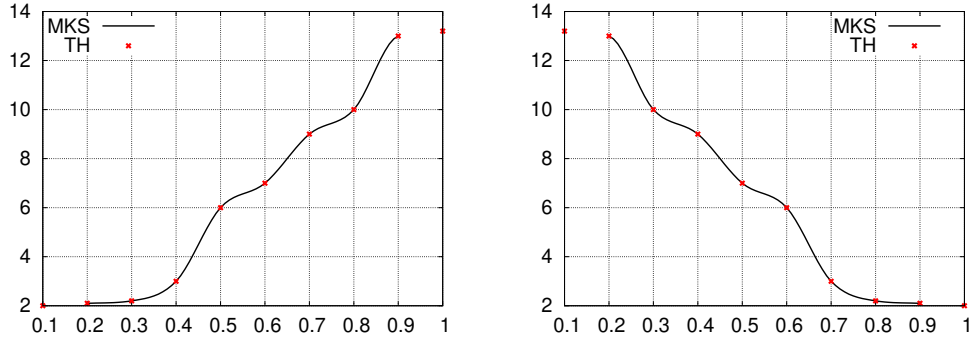
$$\begin{aligned} h_{00}(t) &= 2t^3 - 3t^2 + 1, \\ h_{10}(t) &= t^3 - 2t^2 + t, \\ h_{01}(t) &= -2t^3 + 3t^2, \\ h_{11}(t) &= t^3 - t^2. \end{aligned} \quad (6.36)$$

### 6.4.2 Test interpolace hodnot pomocí spline křivky

Interpolace pomocí kubické monotónní spline křivky byla otestována nejprve na tabulce hodnot, která obsahuje náhlý skok z určité konstantní hodnoty na vyšší popř. nižší hodnotu (oba průběhy jsou monotónní). Tyto tabulkové hodnoty (TH) jsou zobrazeny červenými křížky na obr. 6.2. Monotónní kubický spline (MKS) interpolující tabulkové hodnoty je zobrazen plnou černou čarou. Je vidět, že MKS prochází všemi vnitřními body a při náhlé změně funkční hodnoty (s velkým gradientem) v tabulce nevytváří v tomto místě překmit. Pro ilustraci je do stejného grafu vynesena interpolace pomocí kubického spline (KS), bez ošetření monotonie, černou přerušovanou čarou. Tato interpolace způsobuje výrazné překmity v místech, kde se skokově mění funkční hodnoty bodů v tabulce.



Obrázek 6.2: Interpolace tabulkových hodnot se skokovou změnou (MKS označuje monotónní kubický spline, KS kubický spline a TH jsou tabulkové hodnoty).



Obrázek 6.3: Interpolace rostoucích a klesajících tabulkových hodnot (MKS označuje monotónní kubický spline a TH jsou tabulkové hodnoty).

Grafy na obrázku 6.3 zobrazují interpolaci tabulkových hodnot (červené křížky) s obecnějším ryze monotónním průběhem (rostoucím vlevo a klesajícím vpravo) pomocí MKS zobrazeného plnou černou čarou. Spline opět prochází všemi vnitřními body bez překmitů a oscilací, tak jak je požadováno pro vhodnou interpolaci tabelovaných koeficientů.

## 6.5 Diskretizace rovnic modelu fotoionizace

Odvození diskrétního tvaru soustavy rovnic (4.5)-(4.6) bude popsáno pouze pro jednu rovnici této soustavy. Nejprve je vhodné přepsat Laplaceův operátor v této jedné rovnici pomocí operátoru divergence a gradientu. Pak je celá rovnice integrována přes plochu  $\Omega_i$  buňky  $i$ . Tím vznikne integrální tvar:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega_i} \operatorname{div} (\vec{\nabla} \phi_{1,l}) d\Omega_i - \iint_{\Omega_i} \frac{\lambda_l^2 p_{O_2}^2}{\kappa_1^2} \phi_{1,l} d\Omega_i = \\ = - \iint_{\Omega_i} \frac{\lambda_l p_{O_2}}{\kappa_1^2} \frac{p_q}{p + p_q} \left( \xi \frac{\nu_u}{\nu_i} \right) \left( \frac{\nu_i n_e}{c \xi} \right) d\Omega_i. \end{aligned} \quad (6.37)$$

Použitím Greenovy věty je plošný integrál z divergence přes plochu buňky  $i$  převeden na křivkový integrál po její hranici  $\partial\Omega_i$ . Při integraci ostatních členů v rovnici (6.37) je využita věta o střední hodnotě integrálu a následně je celá rovnice vydělena objemem buňky  $|\Omega_i|$ :

$$\frac{1}{|\Omega_i|} \oint_{\partial\Omega_i} \vec{\nabla} \phi_{1,l} \vec{N} dL - \frac{\lambda_l^2 p_{O_2}^2}{\kappa_1^2} \phi_{1,l} = - \frac{\lambda_l p_{O_2}}{\kappa_1^2} \frac{p_q}{p + p_q} \left( \xi \frac{\nu_u}{\nu_i} \right) \left( \frac{\nu_i n_e}{c \xi} \right). \quad (6.38)$$

Křivkový integrál přes hranici buňky je pak nahrazen součtem přes jednotlivé stěny  $L_{ij}$  buňky  $i$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\Omega_i|} \sum_j^{n_s} \vec{\nabla} \phi_{1,l} \Big|_{ij} \vec{N}_{ij} |L_{ij}| - \frac{\lambda_l^2 p_{O_2}^2}{\kappa_1^2} \phi_{1,l} \Big|_i &= \\ &= - \frac{\lambda_l p_{O_2}}{\kappa_1^2} \frac{p_q}{p + p_q} \left( \xi \frac{\nu_u}{\nu_i} \right) \left( \frac{\nu_i n_e}{c \xi} \right) \Big|_i. \end{aligned} \quad (6.39)$$

Při aproximaci gradientu radiačního přenosu je postupováno zcela stejně jako v odstavci 6.2, který popisuje diskretizaci Poissonovy rovnice pro elektrický potenciál použitím pomocné buňky. Konečný tvar aproximace rovnice radiačního přenosu (4.5) pro buňku  $i$  je následující:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2|\Omega_i| |\omega_{ij}|} \sum_j^{n_s} \left[ \begin{aligned} &[(y_k - y_p)(y_k - y_p) + (x_p - x_k)(x_p - x_k)] \phi_{1,l_j} + \\ &[(y_i - y_j)(y_k - y_p) + (x_j - x_i)(x_p - x_k)] \phi_{1,l_k} + \\ &[(y_p - y_k)(y_k - y_p) + (x_k - x_p)(x_p - x_k)] \phi_{1,l_i} + \\ &[(y_j - y_i)(y_k - y_p) + (x_i - x_j)(x_p - x_k)] \phi_{1,l_p} \end{aligned} \right] \\ - \frac{\lambda_l^2 p_{O_2}^2}{\kappa_1^2} \phi_{1,l_i} &= - \frac{\lambda_l p_{O_2}}{\kappa_1^2} \frac{p_q}{p + p_q} \left( \xi \frac{\nu_u}{\nu_i} \right) \left( \frac{\nu_i n_e}{c \xi} \right). \end{aligned} \quad (6.40)$$

Získaná rovnice (6.40) odpovídá  $i$ -tému řádku v soustavě lineárních algebraických rovnic ve tvaru:

$$A \vec{\phi}_{1,l} = \vec{b}, \quad (6.41)$$

kde  $A$  je matice koeficientů závisící pouze na topologii sítě, na parciálním tlaku kyslíku  $p_{O_2}$  a na koeficientu absorpce  $\lambda_l$ ,  $\vec{\phi}_{1,l}$  je vektor neznámých a  $\vec{b}$  je známý vektor pravé strany ve kterém se objeví jak koeficienty z pravé strany rovnice (6.40), tak i členy z levé strany, odpovídající známým hodnotám z okrajových podmínek. Jedná se opět o soustavu s řídkou maticí, proto je vhodné matici ukládat v úsporném formátu dvou indexů a hodnoty. Řešení lineární soustavy je také v tomto případě realizováno pomocí LU rozkladu. Diskretizace zbylých pěti rovnic systému je analogická.

## 6.6 Diskretizace okrajových podmínek (OP)

Derivace hustoty částice  $k$  ve směru normály je diskretizována pomocí centrální diference:

$$\left. \frac{\partial W_k}{\partial \vec{n}} \right|_{\partial \Omega} \approx \frac{W_k^R - W_k^L}{\Delta x}. \quad (6.42)$$

Hodnota  $W_k^L$  je brána ze středu buňky (uvnitř oblasti  $\Omega$ ), která má na hranici oblasti  $\partial \Omega$  jednu stěnu, hodnota  $W_k^R$  se nachází ve středu odpovídající pomocné (tzv. ghost) buňky a vzdálenost středů těchto buněk (kolmá na hranici) je  $\Delta x$ .

### 6.6.1 Diskretizace OP pro částice

Levá strana Neumannovy homogenní podmínky (5.2), (5.3) a (5.7) se diskretizuje pomocí vztahu (6.42). Po úpravě je její diskrétní tvar následující:

$$W_k^R = W_k^L. \quad (6.43)$$

Diskrétní tvar Dirichletovy homogenní okrajové podmínky (5.4) a (5.8) lze zapsat následujícím způsobem:

$$W_k^R = -W_k^L. \quad (6.44)$$

Derivace ve směru normály na levé straně okrajových podmínek (5.5) a (5.10) je diskretizována opět pomocí vztahu (6.42). Po úpravách je získán následující tvar:

$$W_k^R = \frac{\vec{v}_k \cdot \vec{n} - \frac{v_k^*}{4} + \frac{D_k}{\Delta x}}{\frac{D_k}{\Delta x}} W_k^L. \quad (6.45)$$

Nehomogenní Dirichletova podmínka ve tvaru (5.6) je diskretizována jako:

$$W_k^R = -\gamma_{sec} \frac{\vec{v}_p \cdot \vec{n}}{\vec{v}_k \cdot \vec{n}} n_p. \quad (6.46)$$

Okrajové podmínky (5.9) jsou diskretizovány stejným způsobem jako např. podmínka (5.5). Po jednoduchých úpravách je výsledný diskrétní tvar:

$$W_k^R = \frac{\left( \vec{v}_k \cdot \vec{n} - \frac{v_k^*}{4} + \frac{D_k}{\Delta x} \right) W_k^L + \gamma_{sec} n_p \vec{v}_p \cdot \vec{n}}{\frac{D_k}{\Delta x}}. \quad (6.47)$$

### 6.6.2 Diskretizace OP pro elektrický potenciál

Diskrétní tvar Neumannovy okrajové podmínky pro elektrický potenciál odpovídá rovnici (6.43) a diskrétní tvary Dirichletovy homogenní případně nehomogenní okrajové podmínky jsou analogické rovnicím (6.44) případně (6.46).

### 6.6.3 Diskretizace OP modelu fotoionizace

Levá strana Larsenových okrajových podmínek (5.11) je rovněž aproximována pomocí vztahu (6.42), pak je diskrétní tvar těchto podmínek následující:

$$\frac{\phi_{1,l}^R - \phi_{1,l}^L}{\Delta x} = -\lambda_l p_{O_2} \alpha_1 \phi_{1,l}^L - \lambda_l p_{O_2} \beta_2 \phi_{2,l}^L, \quad (6.48)$$

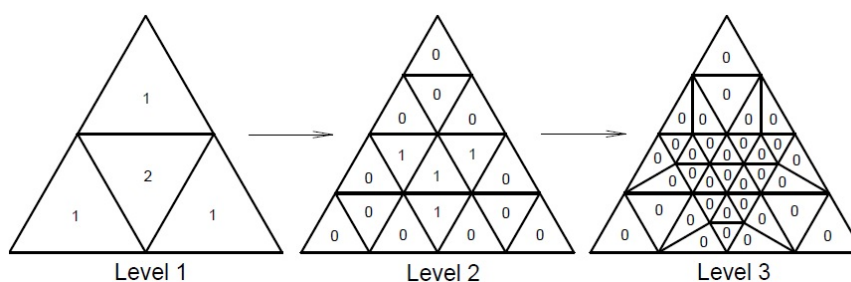
$$\frac{\phi_{2,l}^R - \phi_{2,l}^L}{\Delta x} = -\lambda_l p_{O_2} \alpha_2 \phi_{2,l}^L - \lambda_l p_{O_2} \beta_1 \phi_{1,l}^L. \quad (6.49)$$

## 6.7 Dynamická adaptace sítě

Výsledky řešení systému rovnic (4.1)-(4.3) obsahují velmi ostré špičky a strmé gradienty v neznámých (počítaných) veličinách. K dostatečně přesnému zachycení těchto jevů je nutné používat velmi jemné výpočetní síť. Je-li síť jemná v celé výpočetní oblasti, pak tomu odpovídá i vysoký počet konečných objemů-buněk. To znamená vysoký počet bodů ve kterých je nutné řešit diskretizované rovnice a tedy i vysokou výpočetní náročnost. Tuto výpočetní náročnost lze snížit tzv. adaptací neboli zjemněním výpočetní sítě pouze v místech, kde je to potřebné (tj. v místech velkých gradientů nebo ostrých špiček). Ve zbytku oblasti, kde nedochází ke zmíněným jevům, zůstává síť hrubá. Tímto procesem dojde k výraznému snížení počtu výpočetních bodů při zachování dostatečné přesnosti výpočtu (přesnosti zachycení špiček a gradientů). Tato adaptace musí být navíc dynamická a to z důvodu simulace nestacionárního jevu. Dynamická adaptace spočívá v pohybu zjemněné oblasti spolu se změnou polohy místa s ostrou špičkou nebo místa se strmým gradientem, popř. v rozšiřování/zmenšování této zjemněné oblasti.

Algoritmus zjemňování sítě musí být řízen nějakým kritériem. Ze zkušeností se jeví jako vhodné kritérium velikost gradientu hustoty elektronů (popř. iontů) a velikost zdrojového členu impaktivní ionizace.

V následující části bude popsán algoritmus dynamické adaptace sítě. Tento algoritmus pracuje s nestrukturovanou trojúhelníkovou, čtyřúhelníkovou nebo



Obrázek 6.4: Schéma rozdělení trojúhelníkové buňky se dvěma úrovněmi adaptace. Vlevo čtyři buňky původní sítě s čísly označujícími úroveň adaptace v jednotlivých buňkách, uprostřed buňky po prvním dělení, vpravo konečné rozdělení buněk včetně konformity sítě.

kombinovanou sítí. Sít' získaná z nějakého síťového generátoru, která má rovnoměrnou velikost všech buněk, je nazývána jako základní nebo také referenční sít'. Buňky referenční sítě jsou příliš velké pro zachycení ostrých špiček a strmých gradientů, ale jejich velikost je naopak dostatečná pro popis řešení v místech, kde nedochází k velkým změnám (nejčastěji v blízkosti hranic, zejména u těch umělých). Navíc je referenční sít' konformní, znamená to, že uzlové body nemohou být uprostřed stěn buňky (tyto body bývají nazývány jako visící), ale pouze ve vrcholech geometrického tvaru buňky. Z toho plyne, že např. trojúhelníková buňka musí mít právě tři uzlové body ve svých vrcholech.

Prvním krokem je výpočet obou kritérií ve všech buňkách referenční sítě, tím jsou pro každou buňku uložena dvě čísla. Pak se vyhledá maximum obou kritérií, které se použije pro jejich normování na interval  $\langle 0; 1 \rangle$ . Následně je nutné eliminovat případné velké "skoky" nebo naopak zacelit "díry" v kritériích pomocí vyhlazovacího algoritmu. Ten spočívá v řešení difuzní rovnice (6.50), kdy se jako počáteční podmínka použijí hodnoty kritéria v jednotlivých buňkách sítě.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = p \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad (6.50)$$

kde  $c$  je neznámá veličina (kritérium),  $p$  je koeficient difuze,  $t$  je myšlená časová proměnná a  $x$  je prostorová proměnná. K vyhlazení hodnot dochází velmi rychle a proto je dostačující provést pouze několik časových kroků pomocí explicitního schématu (6.51). To je získáno diskretizací rovnice (6.50) pomocí MKO a následného použití Greenovy věty, podobně jako u difuzního členu rovnice (4.1):



$$c_i^{k+1} = c_i^k + \frac{p\Delta t}{|\Omega_i|} \sum_{j=0}^n \left( \frac{c_j^k - c_i^k}{s_{ij}} \right), \quad (6.51)$$

kde indexy  $i, j, k$  a  $n$  označují postupně index aktuální buňky, index sousední buňky, myšlenou časovou vrstvu a počet stěn buňky  $i$ ,  $\Delta t$  je myšlený časový krok,  $|\Omega_i|$  je plocha buňky  $i$  a  $s_{ij}$  je vzdálenost středů buněk  $i$  a  $j$ . Protože je difuzní rovnice použita pouze pro vyhlazení kritéria a není potřeba nalézt její přesné řešení, je použito následujícího zjednodušení:

$$\frac{p\Delta t}{|\Omega_i|s_{ij}} = 0.25. \quad (6.52)$$

Pak má použitá náhrada rovnice (6.50) tento tvar:

$$c_i^{k+1} = c_i^k + 0.25 \sum_{j=0}^n (c_j^k - c_i^k). \quad (6.53)$$

Po výpočtu několika časových kroků difuzní rovnice je nutné vyhlazené hodnoty opět normovat na interval  $\langle 0; 1 \rangle$ . Pak je vybráno maximum z obou kritérií v každé buňce. Nyní je možné rozdělit interval  $\langle 0; 1 \rangle$  na podintervaly odpovídající jednotlivým úrovním adaptace. Například interval  $\langle 0; 0.08 \rangle$  bude odpovídat nulté úrovni adaptace (tedy bez dělení buněk), interval  $\langle 0.08; 0.16 \rangle$  první úrovni atd. Dále musí být provedena kontrola zda se úroveň adaptace v sousedních buňkách liší maximálně o jednu úroveň, jak je vidět na obrázku 6.4. Nyní obsahuje každá buňka referenční síť informací (číslo) o tom kolikrát se má daná buňka rozdělit. Pak může následovat samotné dělení, které se provede spojením středů stran buňky  $i$ , čímž vzniknou stěny nových buněk. V případě trojúhelníkové sítě následuje ošetření konformity, tedy spojení visících uzlových bodů s protilehlými vrcholy nezjemněných trojúhelníků. Následně je vygenerována nová síť a dojde ke konzervativní interpolaci hodnot neznámých z předchozí sítě na novou. V případě, že došlo ke zjemnění buňky, je hodnota neznámé ze středu velké buňky přímo přenesena do středů získaných buněk. V opačném případě, že došlo ke spojení buněk (úroveň zjemnění se sníží), pak se spočítá střední hodnota ze středů buněk před jejich sloučením a tato hodnota se přenesa do nové (sloučené) buňky.

Další informace o použité numerické metodě lze nalézt např. v [1], [2], [3] nebo [4].

# Kapitola 7

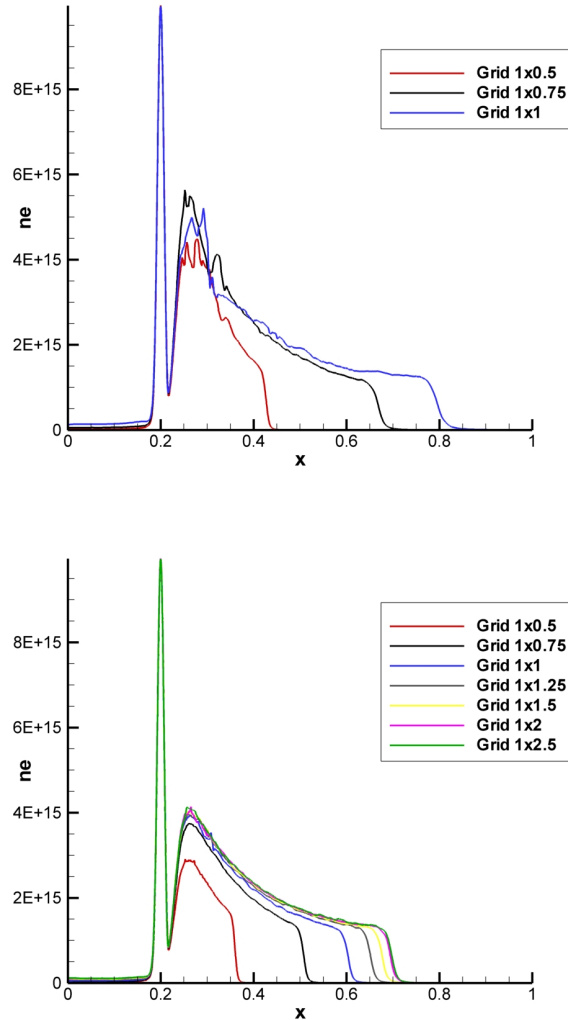
## Výsledky

### 7.1 Numerické konvergenční testy metody

Výsledky konvergenčních testů numerické metody pro řešení modelu elektrického výboje byly publikovány v [2].

#### 7.1.1 Závislost výsledků na šířce výpočetní oblasti

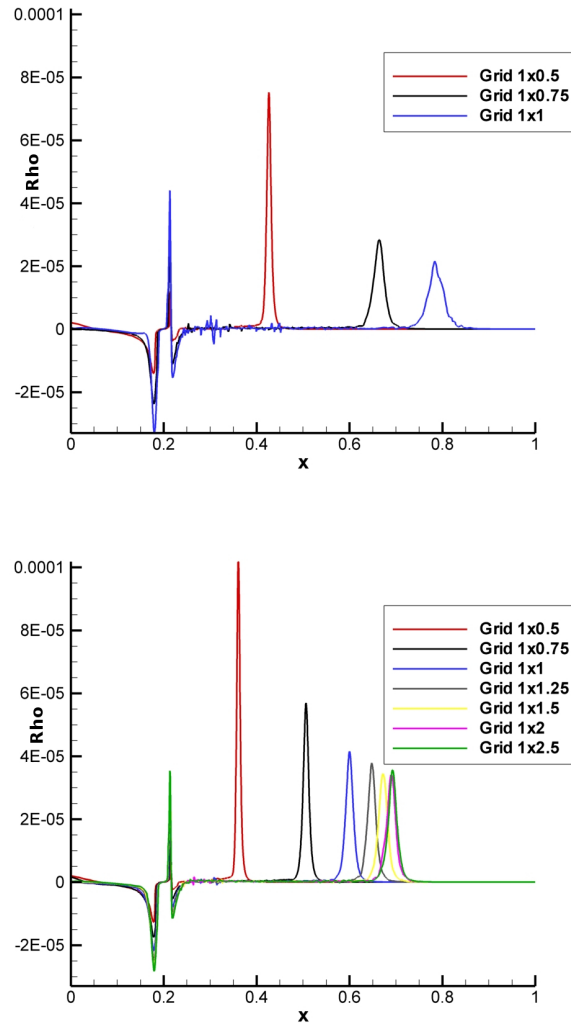
Zkušenosti se simulacemi elektrických výbojů ukazují, že výsledky zásadním způsobem ovlivňuje (kromě jiného) šířka výpočetní oblasti. Základní otázkou tedy je, zda lze tuto závislost nalézt a vhodným způsobem ji kvantifikovat. Princip tohoto testu je velmi jednoduchý a to simulovat pohyb výboje v oblastech lišících se pouze jejich šířkou a výpočet ukončit vždy ve stejném fyzikálním čase.



Obrázek 7.1: *Osové řezy hustotou elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] v čase  $t = 5.25 \cdot 10^{-8}$  s a jejich závislost na šířce oblasti, 1. řád (nahore) a 2. řád přesnosti (dole).*

Grafy na obr. 7.1 znázorňují osové řezy hustotou elektronů výbojů (pomocí roviny  $y = 0.25$  cm) ve fyzikálním čase  $t = 5.25 \cdot 10^{-8}$  s v závislosti na zvětšující se šířce výpočetní oblasti. První část obrázku je výsledkem výpočtu s prvním řádem přesnosti, který byl počítaný na třech oblastech se šířkou 0.5, 0.75 a 1 cm. Na tomto obrázku je možné vidět počáteční pulz s pozicí  $x = 0.2$  cm, pak následuje prudký nárůst hustoty elektronů, které tvoří tělo výboje. V něm hustota postupně klesá a nakonec následuje prudký skok na nulovou hustotu (nebo na hustotu preionizace). Toto místo se často nazývá jako čelo

nebo hlava výboje. Z tohoto obrázku je jasně viditelný vliv zvyšující se šířky oblasti. A to takový, že čím je její šířka větší tím je rychlost výboje také vyšší. Vyšší rychlost výboje je zobrazena větší vzdáleností jeho čela od počátečního pulzu na vodorovné ose. Důležité je zmínit, že nárůst rychlosti je větší při zvětšení šířky oblasti z 0.5 na 0.75 cm než při jejím zvětšení z 0.75 na 1 cm. Druhá část obrázku 7.1 zobrazuje výsledky počítané druhým řádem přesnosti. V tomto případě byly provedeny výpočty pro více šířek oblasti. A to proto, že se simulace výbojů běžně provádějí druhým řádem nejen pro přesnost, ale i pro znatelné omezení oscilací (které je možné vidět na prvním obrázku). Zde je vidět stejné chování jako v předchozím případě. Navíc je možné, díky většímu počtu použitých výpočetních sítí, potvrdit trend postupně se snižující závislosti rychlosti výboje na šířce oblasti. Polohy čela výbojů spočítaných na oblastech o šířkách 2 a 2.5 cm se již prakticky neliší. Proto je možné prohlásit, že je simulace elektrického výboje nezávislá na šířce výpočetní oblasti, která je alespoň 2.5 krát větší než je její délka.

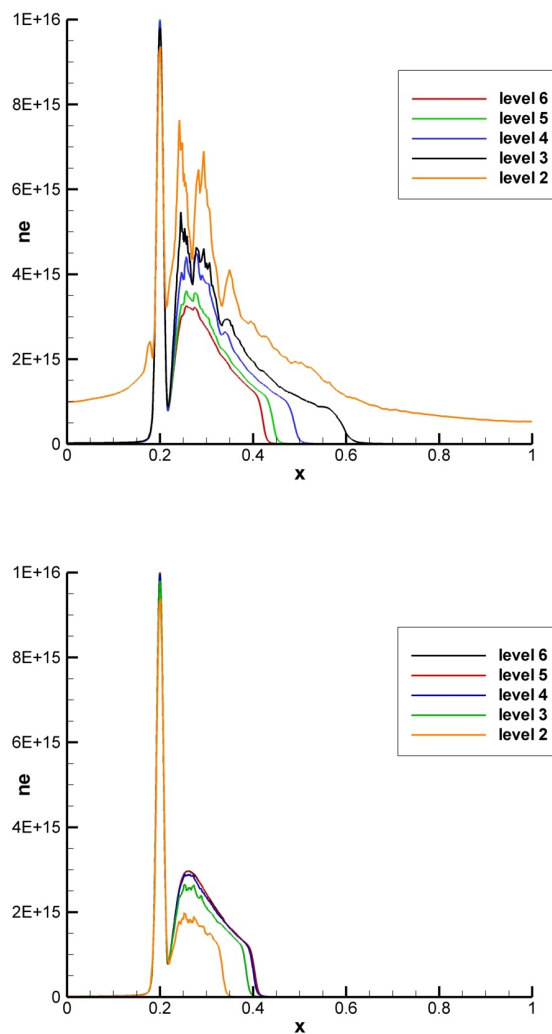


Obrázek 7.2: *Osové řezy hustotou elektrického náboje* [ $V \cdot \text{cm}^{-2}$ ] *v čase*  $t = 5.25 \cdot 10^{-8}$  *s a jejich závislost na šířce oblasti, 1. řád (nahore) a 2. řád přesnosti (dole).*

Zmíněné chování je ještě zřetelnější na obr. 7.2, které znázorňují osové řezy hustotou elektrického náboje (neboli pravou stranu Poissonovy rovnice). Čelo výboje je jasně identifikovatelné jako špička v hustotě elektrického náboje. První obrázek opět znázorňuje výsledky získané prvním řádem přesnosti, druhý pak druhým řádem přesnosti. Zajímavé je zmínit, že kromě stejného chování, které bylo popsáno u hustoty elektronů, je zde možné pozorovat i klesající hustotu elektrického náboje na čele výboje. Ta odpovídá klesající hustotě elektronů s narůstající vzdáleností od počátečního pulzu.

### 7.1.2 Závislost výsledků na počtu úrovní zjemnění

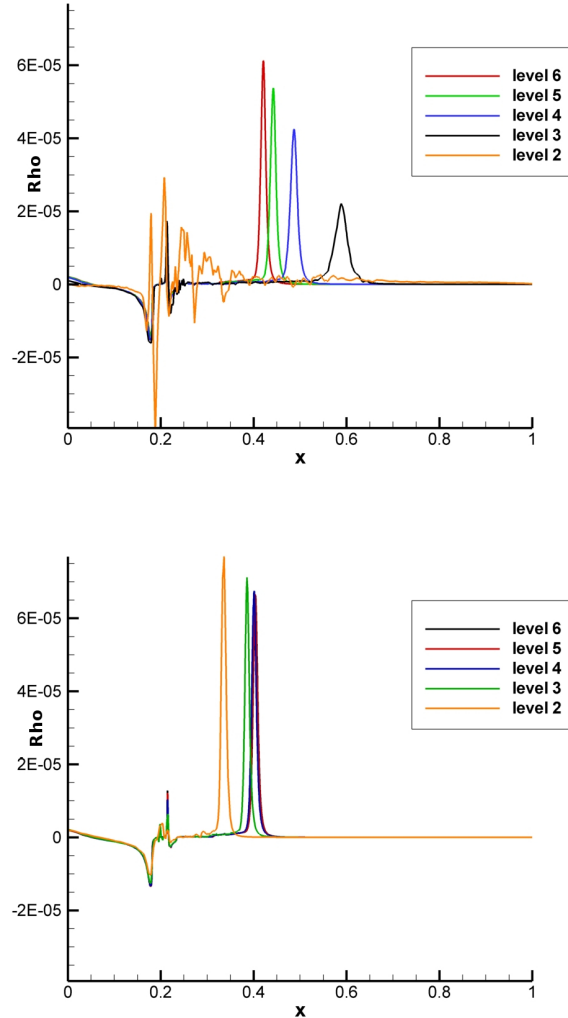
Použitá metoda pro numerické řešení modelu (4.1)-(4.3) využívá pro urychlení výpočtu dynamickou adaptaci sítě. Otázkou je kolikrát je nutné rozdělit buňky v místě výboje tak, aby byla zachována dostatečná přesnost řešení a zároveň byl výpočet dostatečně rychlý. Proto byla provedena série výpočtů na jedné referenční síti s konečným fyzikálním časem  $t = 5.25 \cdot 10^{-8}$  s, ale s různým počtem úrovní adaptace.



Obrázek 7.3: Osové řezy hustotou elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] v čase  $t = 5.25 \cdot 10^{-8}$  s a jejich závislost na počtu úrovní zjemnění, 1. řád (nahore) a 2. řád přesnosti (dole).

První část obrázku (7.3) představuje osově řezy hustotou elektronů (pomocí roviny  $y = 0.25 \text{ cm}$ ) pro úrovně adaptace 2-6 počítané prvním řádem přesnosti. Je vidět, že řešení počítané pouze se dvěma úrovněmi adaptace (oranžová čára) je značně zakmitané a není vidět čelo výboje. To znamená, že výboj proletěl skrz hranici ven z výpočetní oblasti. To je možné díky použitým Neumannovým homogenním okrajovým podmínkám. S narůstajícími úrovněmi zjemnění dochází ke zpomalování rychlosti šíření výboje (zpomalování je možné pozorovat jako zmenšující se vzdálenost polohy čela výboje od počátečního pulzu) a také ke snižování oscilací na těle výboje. Důležité je zdůraznit, že úbytek rychlosti se postupně snižuje a rychlost pohybu výboje se blíží k nějaké pevné hodnotě.

Druhá část stejného obrázku obsahuje také osově řezy hustotou elektronů, ale počítané druhým řádem přesnosti. Zde je vidět opačný trend než na předchozím grafu. Výsledek počítaný pouze s dvěma úrovněmi adaptace má nejnižší rychlost, ale je také nejvíce oscilující. Řešení počítaná s vyššími úrovněmi adaptace mají vyšší rychlost. Rozdíly v rychlostech se, ale postupně snižují a pro úrovně adaptace 4-6 jsou už minimální. Opět je vidět, že se rychlosti jednotlivých řešení blíží nějaké pevné rychlosti šíření elektrického výboje, ale z druhé strany, než je tomu v případě výpočtu prvním řádem přesnosti.

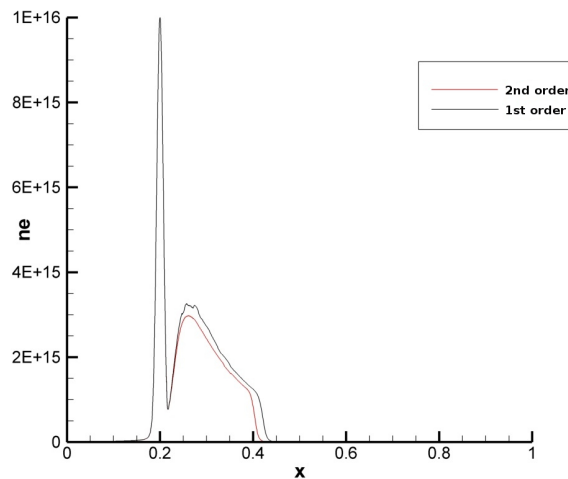


Obrázek 7.4: Osově řezy hustotou elektrického náboje [ $V \cdot \text{cm}^{-2}$ ] v čase  $t = 5.25 \cdot 10^{-8} \text{ s}$  a jejich závislost na počtu úrovní zjemnění, 1. řád (nahore) a 2. řád přesnosti (dole).

Stejně chování dokumentuje i obr. 7.4, kde je vidět poloha čela výboje v osových řezech hustotami elektrického náboje. První část odpovídá prvnímu řádu přesnosti a špičky v hustotě elektrického náboje detekují polohu čela výbojů. Trend postupného zpomalování a také nárůst hustoty elektrického náboje je zřetelný. Druhá část stejného obrázku je získaná z výsledků počítaných s druhým řádem přesnosti. Zde je vidět, že pouze výsledek s druhou a třetí úrovní adaptace se výrazněji liší od zbývajících.



Při detailnějším prozkoumání chování výsledků s prvním a druhým řádem přesnosti je možné si všimnout, že 'první' a 'druhý řád' se k sobě přibližují. Proto byly výsledky (osové řezy hustotami elektronů) s šesti úrovněmi adaptace počítané oběma řády přesnosti vyneseny k porovnání do jednoho grafu (obr. 7.5).



Obrázek 7.5: Osové řezy hustotou elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] v čase  $t = 5.25 \cdot 10^{-8} \text{ s}$  počítané prvním (černá) a druhým řádem přesnosti (červená).

Na tomto obrázku je vidět pouze velmi malý rozdíl v hodnotě hustoty elektronů podél těla výboje a malá diference v poloze čela (a tedy v rychlosti jeho šíření). Tento rozdíl je pravděpodobně způsoben tím, že šest úrovní adaptace pro výpočet prvním řádem přesnosti ještě nezaručuje úplné potlačení vlivu počtu úrovní adaptace (viz například první část obr. 7.4, kde je vidět, že výsledky na pěti a šesti úrovních adaptace se od sebe ještě poměrně liší). Je tedy možné prohlásit, že oba výsledky se blíží k nějakému teoreticky přesnému řešení, ale z protilehlých stran.

Tabulka 7.1 udává výpočetní náročnost v závislosti na počtu úrovní adaptace pro výpočet druhým řádem přesnosti. V tabulce je také uveden počet buněk na konci výpočtu a potřebný počet časových kroků. Výpočetní čas (CPU) je normovaný vzhledem k času potřebnému pro výpočet se čtyřmi úrovněmi zjemnění (fyzikální čas je stále stejný a to  $t = 5.25 \cdot 10^{-8} \text{ s}$ ).

Z této tabulky (a z předchozích grafů) jasně vyplývá, že čtyři úrovně zjemnění se jeví jako nejlepší kompromis mezi přesností výsledků a rychlostí výpočtu. Druhá a třetí úroveň dávají poměrně nepřesné výsledky i když více než desetkrát, popř. sto krát rychleji spočítané. Naopak pátá a šestá úroveň dává

Tabulka 7.1: *Závislost výpočetní náročnosti na počtu úrovní adaptace.*

Úroveň	Počet buněk	Počet časových kroků	Výpočetní čas (CPU)
2	5024	2395	0.0099
3	10592	10607	0.0896
4	41082	24552	1
5	62392	56629	3.840
6	186802	153090	31.800

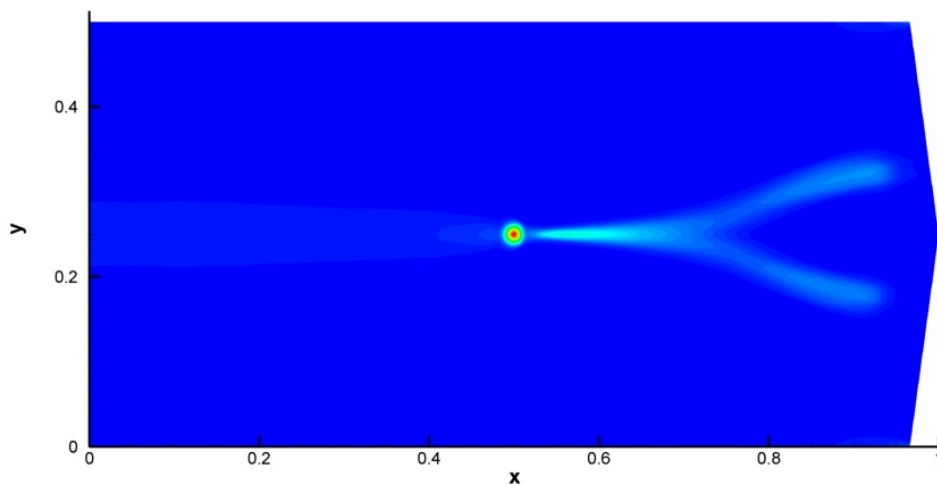
výsledky velmi podobné čtvrté úrovni, ale téměř čtyři krát respektive dvaatřicetkrát pomaleji spočítané.

## 7.2 Rozvětvení ve 2D

V následujících odstavcích budou prezentovány výsledky simulací třech odlišných způsobů vzniku deviace směru pohybu elektrického výboje a jeho rozdělení na více vláken (tvarováním katody, přidáním zdrojového členu nebo přidáním počátečního mraku).

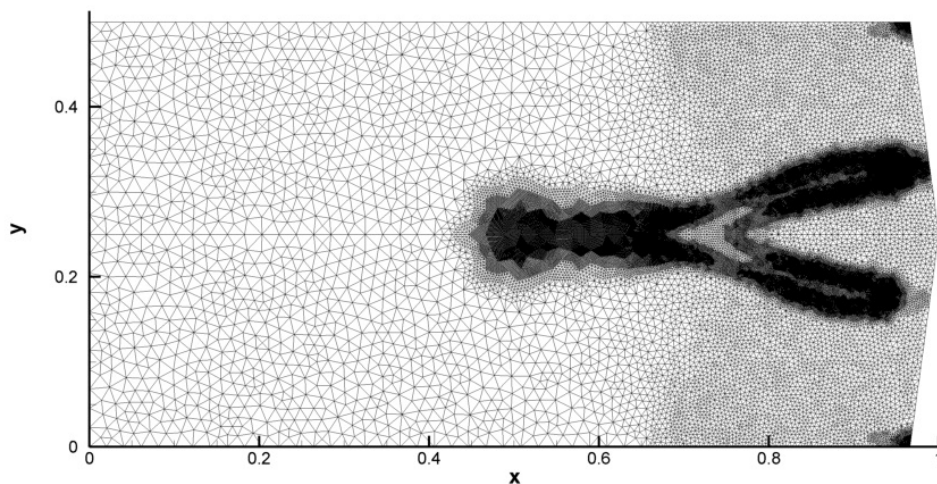
### 7.2.1 Tvarováním katody

Tento test vznikl z myšlenky simulace výboje pohybujícího se směrem k nerovnému povrchu elektrody. Takový povrch odpovídá mnohem více realitě vzhledem k tomu, že ve skutečnosti není žádný povrch zcela hladký. U původní obdélníkové oblasti s rozměry  $1 \times 0.5$  cm byla upravena pravá hranice (katoda) do tvaru písmene V. Vrchol v polovině katody má souřadnice  $[1, 0.25]$  cm a koncové body katody byly posunuty do pozic  $[0.97, 0]$ , popř.  $[0.97, 0.5]$  cm. Tyto body byly následně spojeny přímkami. Pak byla v této oblasti vygenerována nestrukturovaná trojúhelníková síť, která má buňky tvarově symetrické podle roviny  $y = 0.25$  cm a je navíc předem zjemněná do vzdálenosti 0.3 cm od katody. Počáteční mrak částic byl, pro zkrácení výpočetního času, posunut do bodu  $[0.5, 0.25]$  cm.



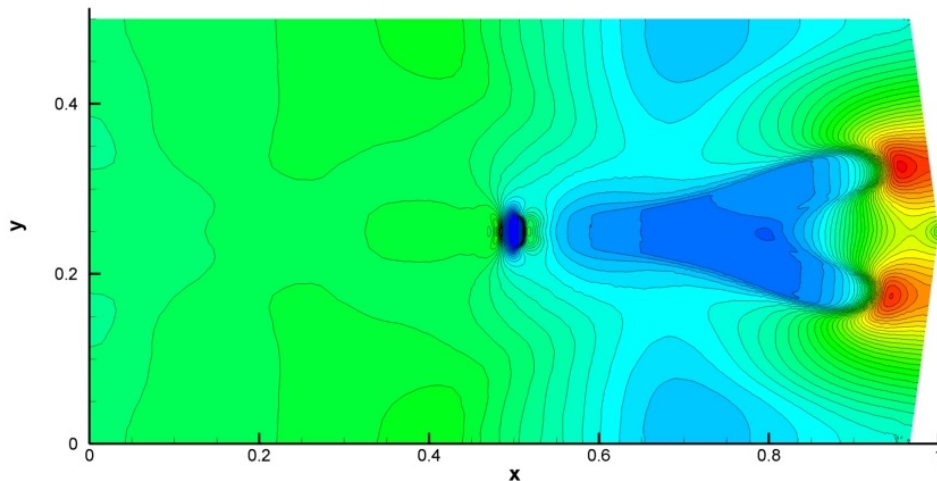
Obrázek 7.6: Rozvětvení výboje pomocí tvarování katody. Kontury hustoty elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] v čase  $t = 4.86 \cdot 10^{-8} \text{s}$  v oblasti s katodou ve tvaru písmene V.

Na obrázku 7.6 jsou vidět kontury hustoty elektronů. Od počátečního mraku zobrazeného jako kruh v centru oblasti se směrem doprava začne šířit jedno přímé vlákno (negativního) elektrického výboje. Když jeho čelo dorazí přibližně na souřadnici  $x = 0.7 \text{ cm}$  začne se dělit na dvě samostatná vlákna pohybující se přibližně v kolmém směru na příslušné přímkové části katody.



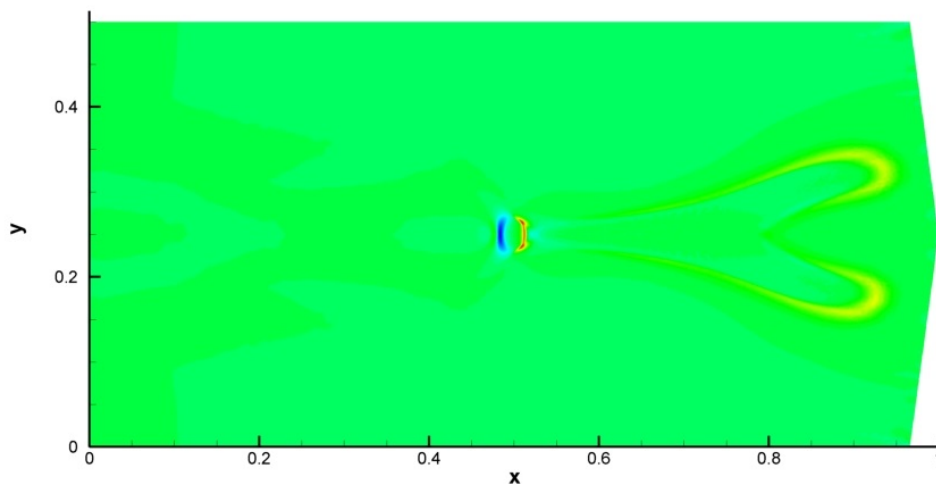
Obrázek 7.7: Rozvětvení výboje pomocí tvarování katody. Symetrická dynamicky adaptovaná síť na konci výpočtu ( $t = 4.86 \cdot 10^{-8}$  s) v oblasti s katodou ve tvaru písmene V.

Obrázek 7.7 znázorňuje dynamicky adaptovanou výpočetní síť na konci výpočtu. Na tomto obrázku je zřetelně viditelná předem zjemněná oblast poblíž katody a také rovina symetrie buněk sítě ( $y = 0.25$  cm). V místě počátečního pulzu je viditelná největší zjemněná plocha. Od tohoto místa pak zjemnění kopíruje pohyb výboje směrem ke katodě. V místě, kde došlo k rozdělení výboje a nejsou tedy tak velké gradienty v hustotě, došlo naopak ke zředění sítě.



Obrázek 7.8: Rozvětvení výboje pomocí tvarování katody. Kontury velikosti intenzity elektrického pole [ $V \cdot \text{cm}^{-1}$ ] v čase  $t = 4.86 \cdot 10^{-8}$  s v oblasti s katodou ve tvaru písmene V.

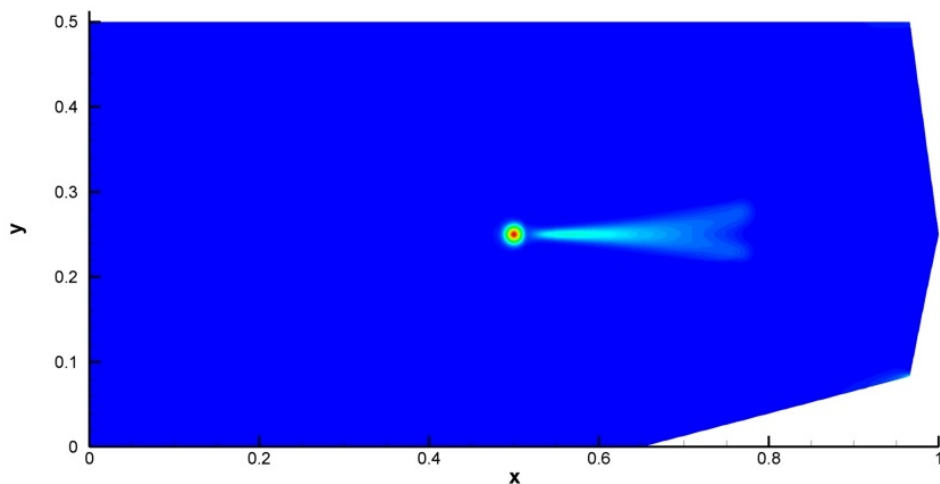
Kontury intenzity elektrického pole jsou znázorněny na obr. 7.8 a rozložení hustoty elektrického náboje na obr. 7.9. Na prvním obrázku je vidět, že největší intenzita elektrického pole je na čelech obou větví výboje. Bod ve kterém se katoda láme způsobuje lokální nárůst intenzity (koncentrátor napětí) a tím přispívá k rozvětvení výboje. Druhý obrázek vizualizuje místa s největším lokálním elektrickým nábojem. Podle očekávání se nachází v místech počátečního mraku a na čelech obou vláken výboje.



Obrázek 7.9: Rozvětvení výboje pomocí tvarování katody. Kontury hustoty lokálního elektrického náboje [ $V \cdot \text{cm}^{-2}$ ] v čase  $t = 4.86 \cdot 10^{-8}$  s v oblasti s katodou ve tvaru písmene V.

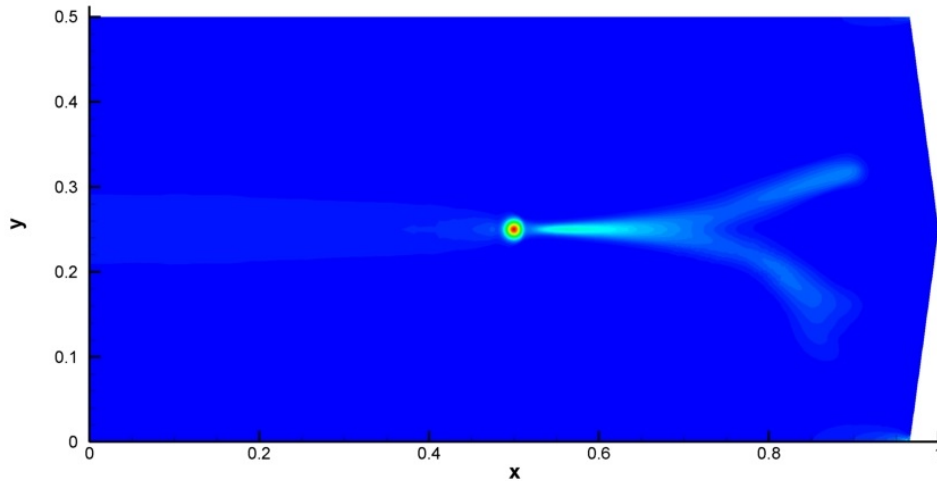
## 7.2.2 Náhlá změna tvaru hranice

Cílem této simulace je namodelovat rozdělení elektrického výboje podobně jako v odstavci 7.2.1 na samostatná, ale tentokrát nesymetricky se pohybující vlákna, jejichž tvar a pohyb by více odpovídal realitě. Základní myšlenka vychází ze znalosti toho, že tvar hranice výpočetní oblasti značně ovlivňuje pohyb i tvar výboje. Proto byla v průběhu výpočtu, na relativně krátký okamžik zdeformována hranice oblasti tak, aby byla nesymetrická. Tato změna tvaru výpočetní oblasti byla udělána tak, že vybrané uzlové body sítě byly posunuty určitým směrem, aby bylo docíleno tvaru, který je vidět na obrázku 7.10. Hodnoty neznámých pak byly přímo přeneseny do odpovídajících si buněk (stěn/vrcholů). Tento tvar výpočetní oblasti byl ponechán po určitý počet časových kroků tak, aby tato změna tvaru dostatečně ovlivnila směr pohybu výboje i jeho tvar. Po této době byly hodnoty opět přeneseny na původní síť, na které byl výpočet dopočítán až do koncového času.



Obrázek 7.10: Rozvětvení výboje při změně tvaru hranice. Kontury hustoty elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] v čase  $t = 4.2768 \cdot 10^{-8}$  s, v okamžiku, kdy je tvar původní symetrické oblasti zdeformován.

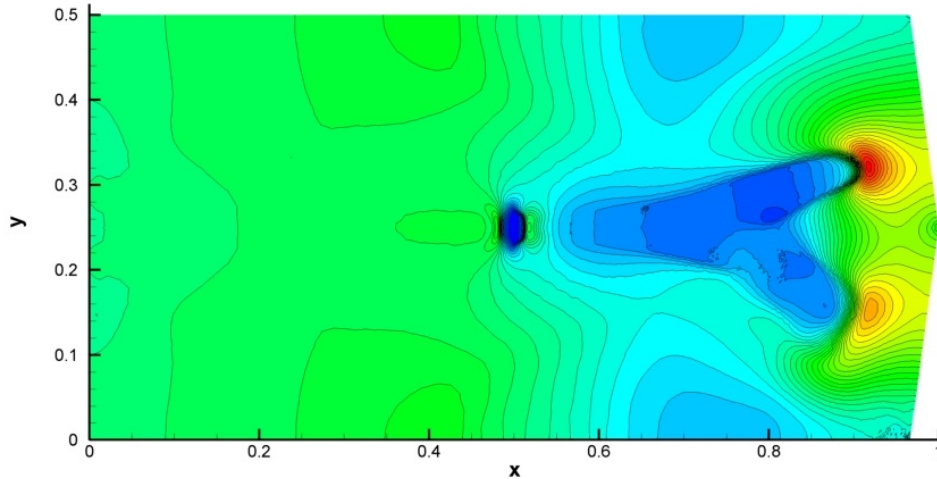
Na obrázku 7.10 je zachycen první okamžik po zdeformování hranice výpočetní oblasti. Na konturách hustoty elektronů je vidět, že se výboj pohyboval v symetrické oblasti (ve stejné jako v odstavci 7.2.1) s tvarovanou katodou. Po rozdělení na dvě vlákna došlo ke skokové změně tvaru oblasti.



Obrázek 7.11: Rozvětvení výboje při změně tvaru hranice. Kontury hustoty elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] v čase  $t = 4.86 \cdot 10^{-8}$  s po odstranění nesymetrie v oblasti.

Obrázek 7.11 představuje rozložení izočar hustoty elektronů na konci výpočtu. Vlákno výboje vzdálenější od zdeformované (spodní) části hranice se pohybuje přibližně stejným směrem jako v předchozím případě (viz odstavec 7.2.1). Naopak vlákno, které je této části hranice blíže nejen, že změnilo směr (nyní směřuje přibližně pod úhlem  $-45^\circ$  dolů), ale také tvar a navíc se začíná dále rozdělovat na další dvě samostatná vlákna.





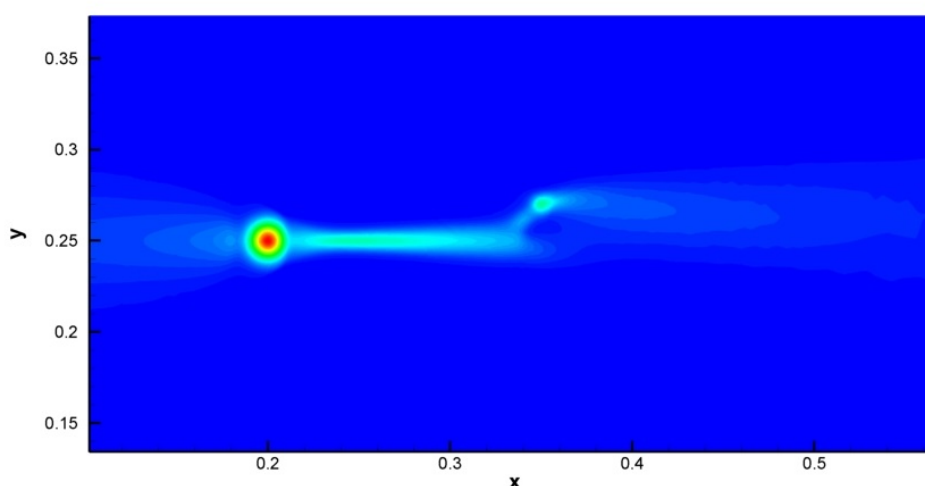
Obrázek 7.12: Rozvětvení výboje při změně tvaru hranice. Kontury velikosti intenzity elektrického pole [ $V \cdot \text{cm}^{-1}$ ] v čase  $t = 4.86 \cdot 10^{-8}$  s po odstranění nesymetrie v oblasti.

Na obrázku 7.12 jsou vidět kontury velikosti intenzity elektrického pole. U elektrických výbojů je intenzita nejvyšší vždy na jejich čele. Z obrázku je zřejmé, že u horního vlákna je intenzita elektrického pole na jeho čele velmi vysoká, ale v případě spodního vlákna je tato intenzita mnohem nižší a má navíc mírně protáhlý tvar podél čela (ve směru kolmém na směr šíření vlákna), to pravděpodobně naznačuje začínající rozdělení tohoto výboje na další dvě nová vlákna.

### 7.2.3 Přidání jednoho ionizačního zdrojového členu

Reálné plyny tvoří pro elektrický výboj nehomogenní prostředí. V některých místech v prostoru, který vyplňují, mohou mít vyšší nebo naopak nižší hustotu, teplotu, vlhkost, koncentraci jiných částic atd. Simulace této nehomogenity prostředí je možná pomocí umělého přidání míst s rozdílnými vlastnostmi do výpočetní oblasti. První možností je přidání zdrojového členu - pravé strany rovnice zachování (4.1) v případě minimálního modelu. Simulace tedy probíhá opět v obdélníkové oblasti, výboj je inicializován počátečním mrakem částic ve tvaru Gaussova pulzu. Od něj se začne výboj pohybovat po přímé dráze kolmo ke katodě. V určitém čase je přidán další zdrojový člen tak, jak je vidět na obrázku 7.13. Proces přičtení zdrojového členu je závislý na mnoha parametrech (čas přidání, jeho x-ová a y-ová pozice, průměr

a jeho magnituda). Výsledek na zmíněném obrázku byl získán díky značné sérii testů v závislosti na uvedených parametrech.

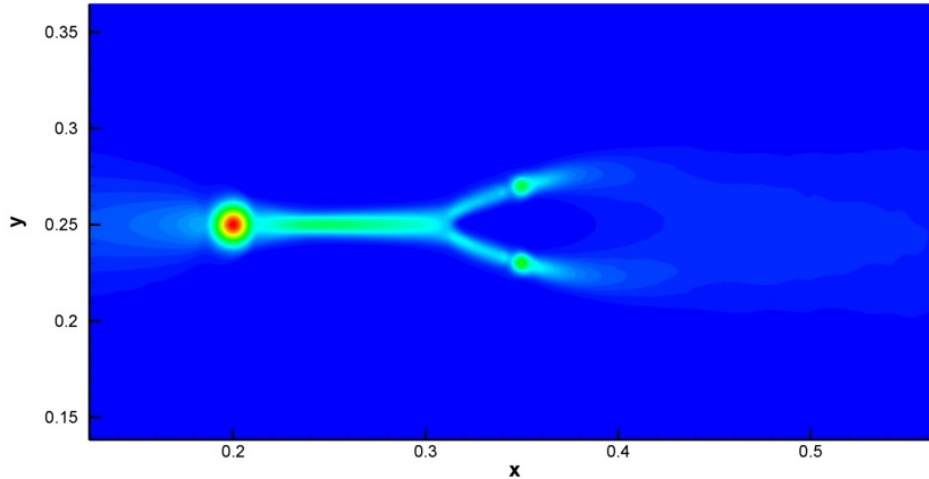


Obrázek 7.13: Rozvětvení výboje přidáním zdrojového členu. Kontury hustoty elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] po rozdělení elektrického výboje pomocí přidání jednoho zdrojového členu elektronové impaktní ionizace.

Na konturách hustoty elektronů je vidět, že od původního přímého výboje se oddělilo jedno vlákno přibližně pod úhlem  $45^\circ$  směrem nahoru k přidávanému zdrojovému členu. Od tohoto zdroje se pak začalo šířit nové vlákno, které nemá zcela přímý směr. Po rozdělení původní přímý výboj značně zeslábl (snížil svou hustotu částic) a po krátké samostatné dráze začal interagovat s novým vláknem (šířícím se od zdrojového členu). Nakonec se obě vlákna spojila v jedno, které má díky interakci mírně zakřivený tvar a výrazně nižší intenzitu.

#### 7.2.4 Přidání dvou ionizačních zdrojových členů

Další otázkou bylo jak bude výboj reagovat na více přidávaných zdrojových členů. Proto byl do oblasti přidán ve stejný čas ještě jeden stejný zdroj umístěný symetricky podle roviny  $y = 0.25$  cm. Na obrázku 7.14 jsou zobrazeny

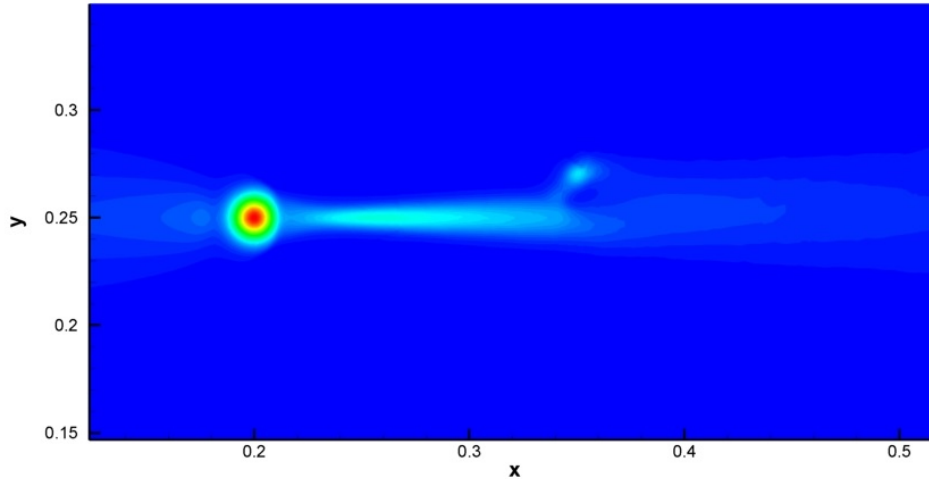


Obrázek 7.14: Rozvětvení výboje přidáním dvou zdrojových členů. Kontury hustoty elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] výboje rozděleného pomocí dvou zdrojových členů umístěných symetricky podle roviny  $y = 0.25$ .

izočáry hustoty elektronů na konci výpočtu. Je zřejmé, že původní přímý výboj (šířící se od počátečního mraku částic směrem ke katodě) po rozdělení na dvě vlákna zastavil svůj pohyb. Dále se pohybuje každé vlákno zvlášť, ale po určité době spolu začínají interagovat a nakonec se spojí v jeden široký a poměrně málo intenzivní výboj.

### 7.2.5 Přidání jednoho jádra

Další možností jak přimět přímý výboj ke změně směru pohybu nebo k jeho rozdělení může být přidání dalšího mraku částic do určitého místa ve výpočetní oblasti. Tato zvýšená hustota částic na velmi malé ploše se často nazývá jádrem. Jádro obsahuje stejnou hustotu elektronů jako kationtů, z vnějšku se tak jeví jako neutrální (je obdobou počátečního mraku pro inicializaci přímého výboje). Podobně jako v předchozím případě, kdy byl do výpočetní oblasti přidáván zdrojový člen, tak i zde to, jak bude přímý výboj přidáním jádrem ovlivněn, závisí na mnoha parametrech. Těmi hlavními parametry jsou hustota částic, rozměry (průměr) jádra, čas a pozice jeho umístění.



Obrázek 7.15: *Rozvětvení výboje přidáním jednoho jádra. Kontury hustoty elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] výboje rozděleného pomocí jednoho elektricky neutrálního jádra.*

Na obrázku 7.15 znázorňují kontury rozložení hustoty elektronů. V bodě  $[0.2, 0.25]$  cm byl umístěn počáteční mrak částic a od něj se směrem doprava začal šířit rovnoběžně s osou  $x$  přímý výboj. Pak bylo do bodu  $[0.35, 0.275]$  cm přidáno elektricky neutrální jádro s vysokou hustotou částic, v takovém čase, kdy spojnice čela výboje a jádra svírala s osou  $x$  přibližně  $45^\circ$ . Pak došlo k rozdělení výboje. Směr pohybu hlavního vlákna se mírně stočil k ose  $x$  a také jeho intenzita výrazně zeslábla. Oddělené vlákno vytvořilo výboj pouze s velmi malou hustotou. Obě vlákna spolu začala velmi brzy interagovat a opět se spojila v jedno, poměrně široké vlákno, ale s malou hustotou částic.

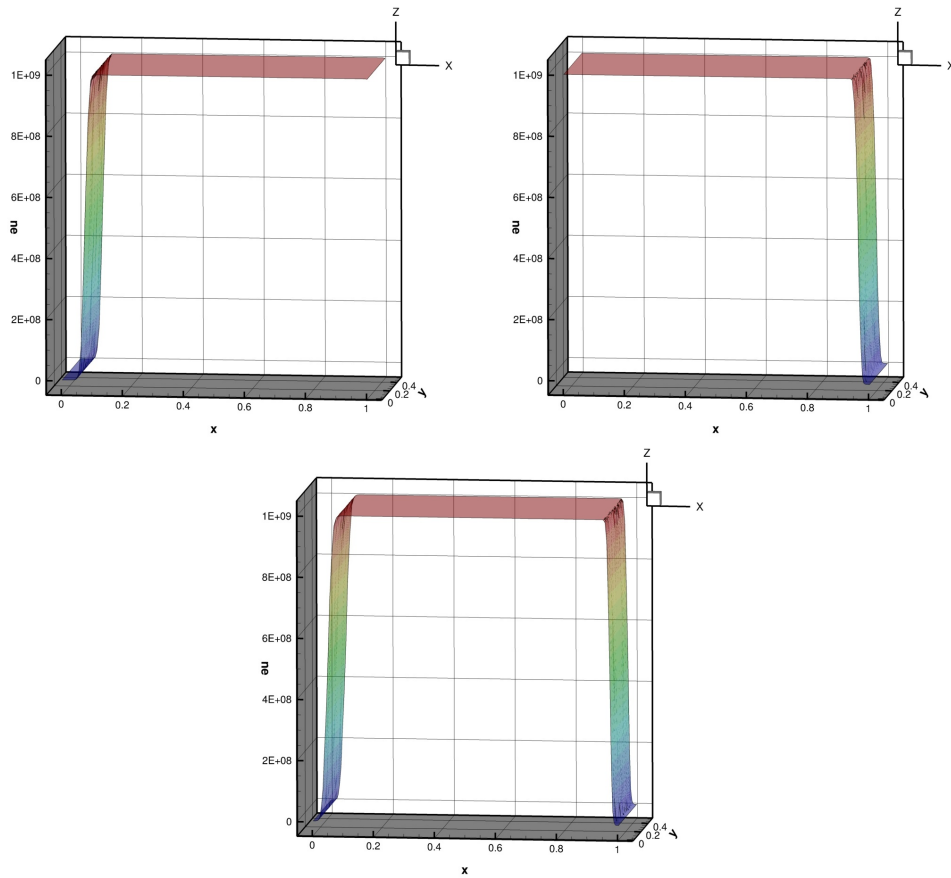
### 7.3 RF plasma modelované dvoučásticovým modelem

Jednou z možností jak otestovat správné fungování okrajových podmínek (OP), které jsou z fyzikálního pohledu vhodné pro modelování elektrických výbojů (popisují absorbování a extrakci částic z povrchu elektricky vodivých elektrod), je pomocí simulace radiofrekvenčního (RF) plasmatu (někdy nazývaného jako RF-dioda). A to buď pomocí zjednodušeného modelu, který má nulovou pravou stranu v rovnici pro elektrický potenciál nebo s plným modelem elektrického výboje. V obou případech byl použit dvoučásticový model (popsaný v odstavci 4.1.1), konstantní počáteční podmínka  $10^9 \text{cm}^{-3}$  pro

nabité částice, pro ně také tzv. fyzikální okrajové podmínky na elektrodách a periodicky se měnící napětí (kosinový průběh s amplitudou 500 V a frekvencí 13.56 MHz) na levé rovinné elektrodě, pravá rovinná elektroda měla nulové napětí.

### 7.3.1 Bez vlivu lokálního elektrického pole

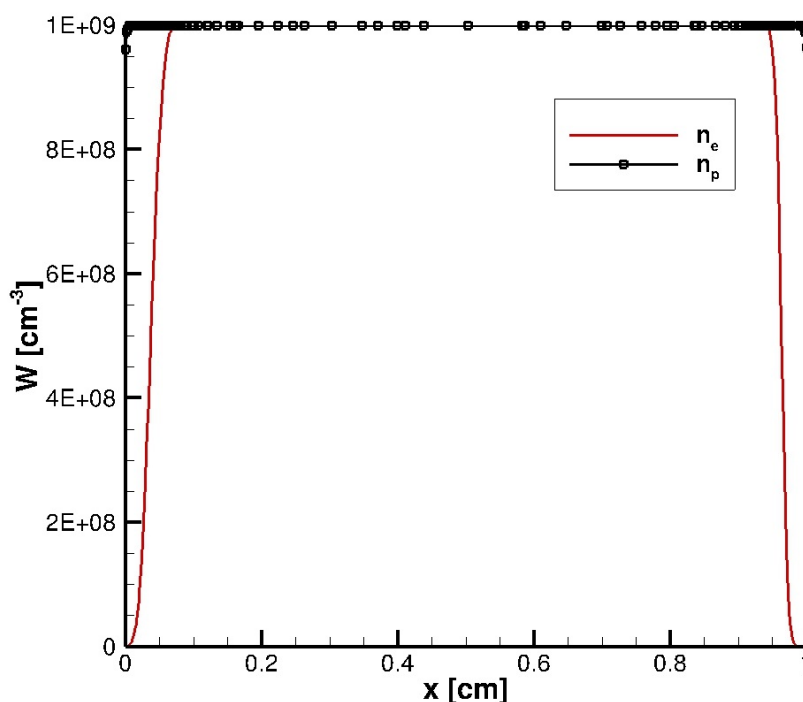
Na obrázku 7.16 je vykreslena hustota elektronů při modelování radiofrekvenčního plasmatu pomocí zjednodušeného modelu bez vlivu lokálního elektrického pole (kdy pravá strana Laplaceovy rovnice (4.2) je rovna nule). Jsou zde zobrazeny tři rozdílné polohy elektronového mraku v závislosti na orientaci elektrického pole.



Obrázek 7.16: *RF plasma modelované bez vlivu lokálního elektrického pole. Axonometrický pohled na elektronovou hustotu [ $\text{cm}^{-3}$ ] s vlivem fyzikálních okrajových podmínek. Vlevo nahoře: mrak elektronů při pohybu směrem doprava, vpravo nahoře: mrak elektronů při pohybu směrem doleva, dole: mrak elektronů při pohybu uprostřed oblasti.*

V levé horní části obrázku je vidět elektronový mrak pohybující se směrem doprava a na této straně dochází k absorbování elektronů vodivou elektrodou. Naopak z protilehlé elektrody dochází pouze k velmi malému oddělování elektronů, to se projevuje poklesem hustoty elektronů v okolí levé elektrody téměř na nulu a mrak se tedy oddálí od této elektrody. Při opačné orientaci elektrického pole dojde k pohybu elektronů směrem doleva, levá elektroda začne elektrony pohlcovat a pravá naopak (ve velmi malé míře) extrahovat. Dochází tedy k přesně opačnému chování, než na obrázku vlevo. Třetí, dolní část obrázku 7.16, zachycuje elektronový mrak v poloze přibližně uprostřed vzdálenosti mezi elektrodami. Všechny tyto tři části obrázku 7.16 dokazují, že okrajové podmínky na vodivých elektrodách pracují podle očekávání. Axono-

metrický pohled pro zobrazení byl zvolen proto, aby bylo možné zkontrolovat chování výsledků v kritických místech tj. v koutových bodech oblasti a také v místě náhlého poklesu hustoty (popř. jejího nárůstu) v blízkosti elektrod.

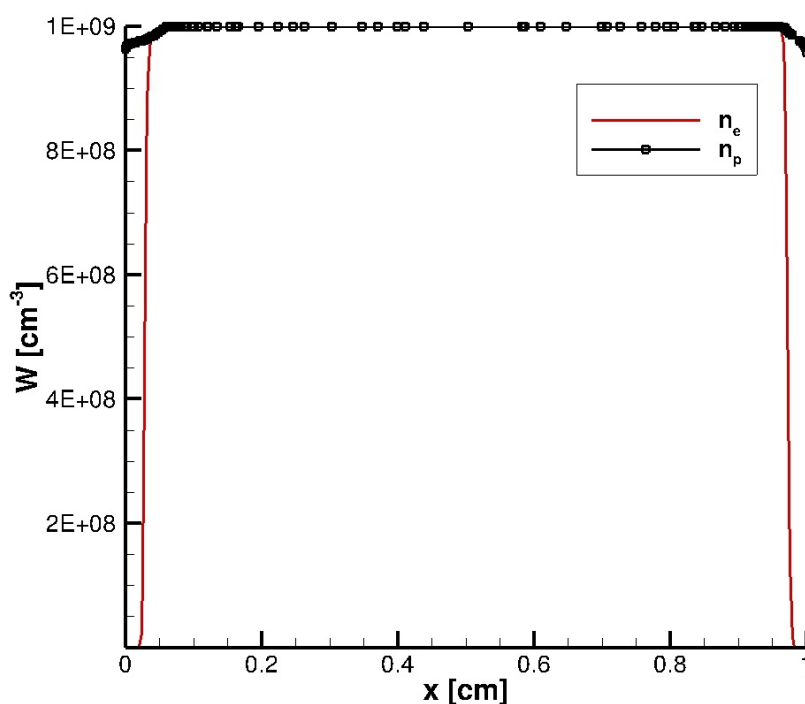


Obrázek 7.17: *RF plasma modelované bez vlivu lokálního elektrického pole. Řez hustotou elektronů a pozitivních iontů (pomocí roviny  $y = 0.25$  cm) radiofrekvenčního plasmatu s využitím fyzikálních okrajových podmínek.*

Řezy na obrázku 7.17 jsou získány pomocí roviny  $y = 0.25$  cm v okamžiku, kdy je elektronový mrak přibližně uprostřed výpočetní oblasti. Kromě řezu hustotou elektronů je zde zobrazen i řez hustotou kationtů. Z obrázku je patrné, že ionty nereagují na rychlé změny směru elektrického pole pohybem. Pouze v místě kontaktu s vodivými elektrodami se velmi mírně mění (klesá) jejich hustota (díky použitým okrajovým podmínkám). Na těchto řezech jsou také velmi dobře vidět oblasti v bezprostřední blízkosti obou elektrod s kladným lokálním elektrickým nábojem, který obaluje elektrody. V tomto obalu zcela převažuje koncentrace iontů nad elektrony a toho je možné využít při úpravách povrchových vlastností různých materiálů a součástí, jak bylo popsáno v úvodu.

### 7.3.2 S vlivem lokálního elektrického pole

Podobný test tomu, který byl prezentován v odstavci 7.3.1, je možné provést i s plným modelem výboje (tedy včetně pravé strany Poissonovy rovnice). Obrázek 7.18 představuje opět řezy hustotami nabitých částic pomocí roviny  $y = 0.25$  cm v čase, kdy je elektronový mrak přibližně uprostřed oblasti. Průběh hustoty elektronů se liší nepatrně, hlavní rozdíly od předchozího výsledku jsou ve strmějším poklesu hustoty elektronů v blízkosti elektrod a k tomuto poklesu nedochází přímo, ale nejprve dojde k mírnému poklesu hodnot a až poté ke strmému poklesu na téměř nulovou hustotu (průběh obsahuje mírné zvlnění).



Obrázek 7.18: RF plasma modelované včetně vlivu lokálního elektrického pole. Řez hustotou elektronů a pozitivních iontů (pomocí roviny  $y = 0.25$  cm) radiofrekvenčního plasmatu s využitím fyzikálních okrajových podmínek.

Analogické zvlnění je vidět i na průběhu hustoty pozitivních iontů, po něm však následuje pouze nepatrný pokles hodnot, který odpovídá poklesu hustoty iontů na obrázku 7.17 v předchozím odstavci. Tato zvlnění jsou pro obě hustoty důsledkem vlivu lokálního elektrického pole, které se díky Poissonově



rovnici (4.2) promítne do elektrického pole (4.3) a následně do koeficientů v rovnicích zachování pro hustoty nabitých částic (4.1) a tím i do samotné hustoty částic.

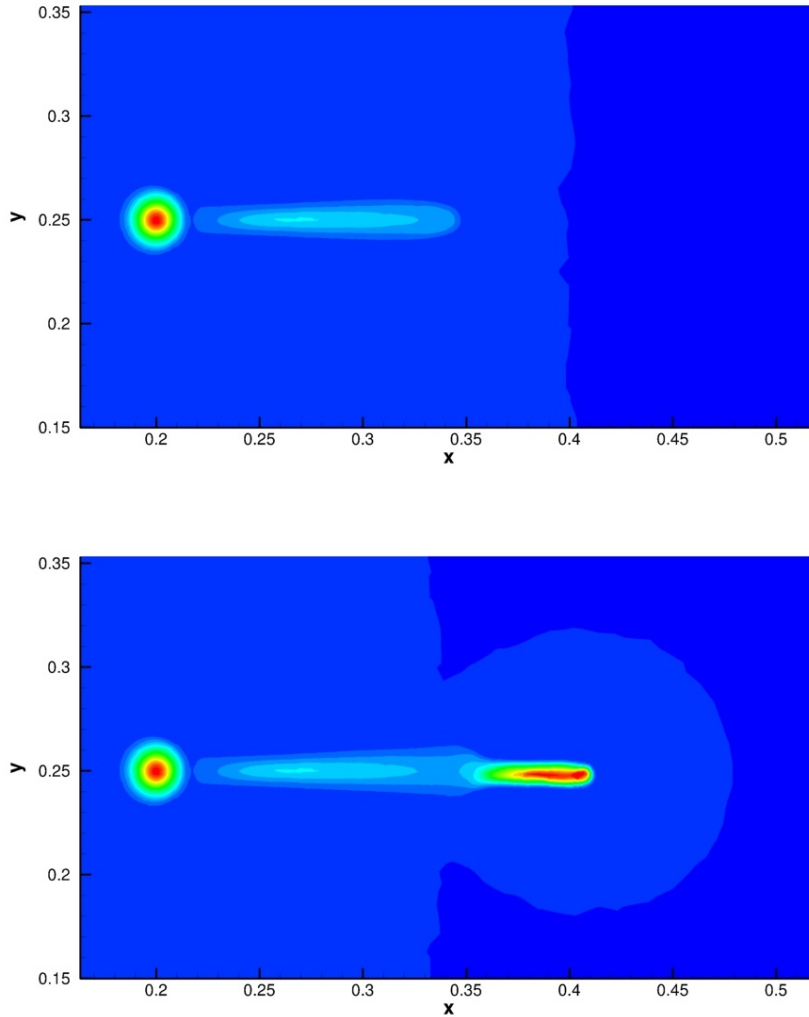
## 7.4 Simulace pohybu elektrického výboje popsaného dvoučásticovým modelem s fyzikálními OP

Chování elektrických výbojů je v dostatečné blízkosti vodivých elektrod silně ovlivněno jejich fyzikálními vlastnostmi. V následujících odstavcích budou prezentovány výsledky numerických simulací pohybu výbojů popsaných dvoučásticovým modelem s použitím fyzikálních okrajových podmínek (popsaných v kapitole 5), včetně diskuse výsledků.

### 7.4.1 Dvoučásticový model bez fotoionizačního členu

Okrajové podmínky pro vodivé elektrody byly nejprve implementovány do numerického kódu pro řešení dvoučásticového modelu. Pro tento model bylo tedy vhodné otestovat šíření výboje a jeho chování při použití fyzikálních OP. Pro simulaci bylo použito napětí 25 kV na anodě a 0 V na katodě, magnituda hustoty částic v počátečním mraku měla hodnotou  $1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  a preionizace s hodnotou  $1 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$ .

Preionizační hustota způsobí, že na pozadí ve výpočetní oblasti vznikne elektronový mrak, který je přitahován ke kladné elektrodě (podobně jako v odstavci 7.3 věnovaném modelování radiofrekvenčního plasmatu) a pohybuje se tedy proti směru pohybu elektrického výboje. To je možné vidět v horní části obrázku 7.19, kde je vidět rozhraní mezi hodnotou preionizace a téměř nulovou hodnotou hustoty elektronů přibližně v místě  $x = 0.4 \text{ cm}$ .

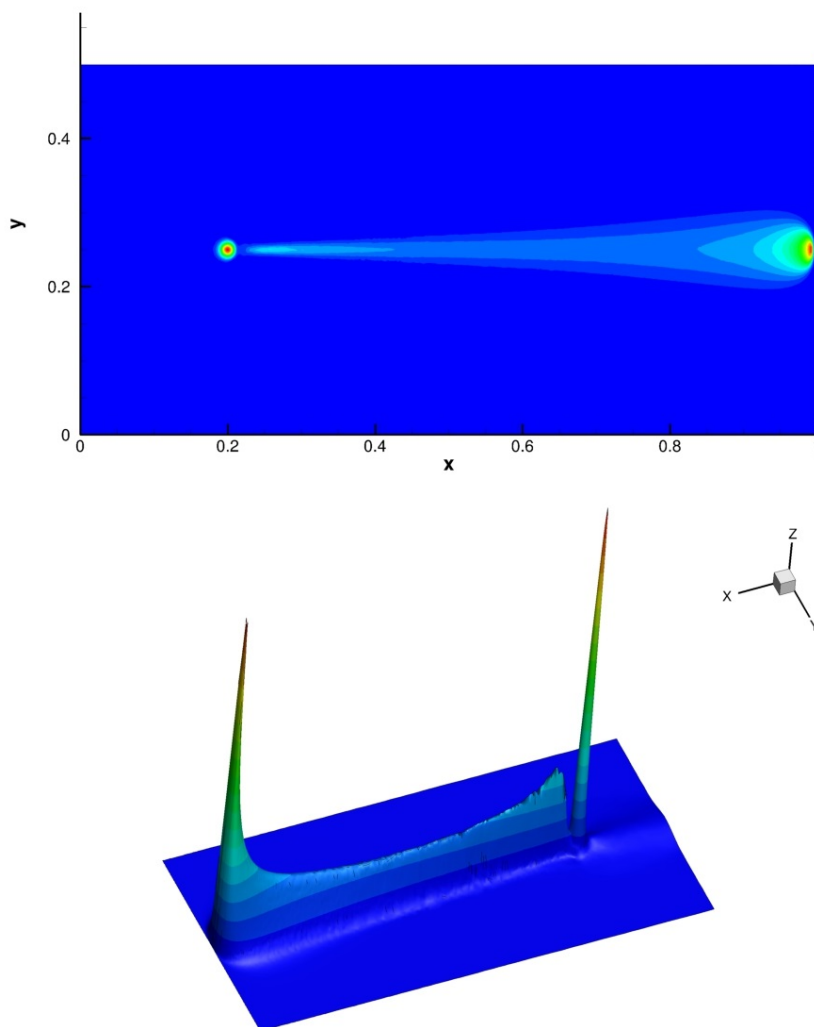


Obrázek 7.19: Šíření elektrického výboje popsaného dvoučásticovým modelem bez fotoionizace a s uvažováním fyzikálních OP na elektrodách. Kontury hustoty elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] (nahore: před opuštěním elektronového mraku, dole: po opuštění elektronového mraku).

V určitém místě (přibližně  $x = 0.36$  cm) dojde k jejich srážce (viz dolní část obrázku 7.19). Tato srážka způsobí velmi výrazný přechod na těle výboje v místě srážky. Výboj pak opustí oblast s preionizací, dojde k výraznému nárůstu hustoty elektronů a dále k ovlivnění mechanismu jeho pohybu. Z těchto obrázků je jasné, že pro reálné výpočty nelze kombinovat model výboje bez fotoionizace a fyzikální okrajové podmínky na elektrodách.

### 7.4.2 Dvoučásticový model včetně fotoionizačního členu

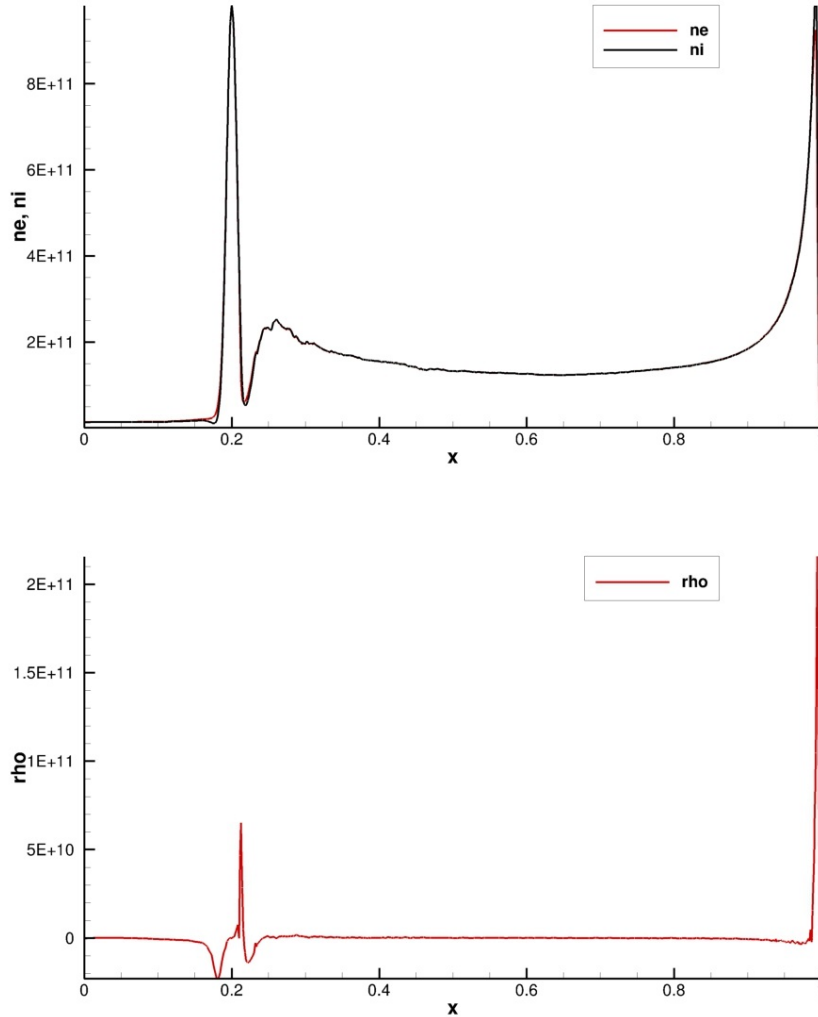
V tomto odstavci jsou uvedeny výsledky stejného testu jako v odstavci 7.4.1 pouze s tím rozdílem, že zde byl do modelu zahrnut fotoionizační zdrojový člen. Na horní části obrázku 7.20 jsou zobrazeny 2D kontury hustoty elektronů výboje počítané dvoučásticovým modelem s fotoionizací. Díky zahrnutí fotoionizace není nutné v počáteční podmínce používat preionizaci (určitou hustotu elektronů a iontů na pozadí), proto zde nedochází k pohybu elektro nového mraku a interakci jeho čela s hlavním výbojem.



Obrázek 7.20: Šíření elektrického výboje popsaného dvoučásticovým modelem s fotoionizací a s uvažováním fyzikálních OP na elektrodách. Hustota elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] (nahore: 2D kontury, dole: axonometrický pohled na kontury).

Na výsledcích uvedených na obr. 7.20 nahoře je vidět výboj šířící se od počátečního pulzu (s pozicí  $[x, y] = [0.2, 0.25]$  cm) směrem doprava, ke katodě. Výboj postupně ztrácí na intenzitě (snižuje se hustota elektronů na jeho těle) a současně se rozšiřuje. Přibližně v místě  $[x, y] = [0.83, 0.25]$  cm začne naopak nabírat na intenzitě i přes své pokračující rozšiřování. Velmi blízko elektrody se utvoří ostrá špička v hustotě a pohyb se vlivem okrajové podmínky zastaví. Dále už dochází pouze k nárůstu hustoty od přitahovaných elektronů

do místa s velkou hustotou lokálního elektrického náboje. Pozn.: Tento model není schopen fyzikálně správně simulovat interakci elektrického výboje s vodivou elektrodou, protože nárůst hustoty částic v její blízkosti není nijak omezený a s přibývajícím časem roste nad všechny meze. Na dolní části obrázku 7.20 je vykreslen axonometrický pohled na kontury hustoty elektronů vykreslené ve 3D (z-ová souřadnice odpovídá hustotě elektronů). Vlevo je vidět vznikající špička poblíž katody. V tomto pohledu je velmi dobře vidět, že hustota elektronů mezi zmiňovanou špičkou a elektrodou klesá opět k nule a to na velmi malé vzdálenosti (menší než 0.01 cm).



Obrázek 7.21: Šíření elektrického výboje popsaného dvoučásticovým modelem s fotoionizací a s uvažováním fyzikálních OP na elektrodách. Řezy hustotami pomocí roviny  $y = 0.25$  cm (nahore: hustoty elektronů a kationtů [ $\text{cm}^{-3}$ ], dole: hustota elektrického náboje [ $\text{V} \cdot \text{cm}^{-2}$ ]).

Pro lepší ilustraci průběhu hustoty elektronů i pozitivních iontů ve výboji jsou v horní části obrázku 7.21 zobrazeny řezy (pomocí roviny  $y = 0.25$  cm) oběma hustotami. V pravé části je vidět nárůst (špička) a okamžitý pokles k přibližně nulové hustotě v bezprostřední blízkosti elektrody. Špička hustoty elektronů je přibližně o  $1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$  nižší než špička kationtů (na čele výboje). Tento rozdíl má za následek poměrně velké kladné hodnoty hustoty lokálního

elektrického náboje. Její průběh, v podobě řezu rovinou  $y = 0.25$  cm, je možné vidět na obrázku 7.21.

## 7.5 Porovnání výsledků tříčasticového a jedenáctičasticového modelu

Tato část je zaměřena na zjištění rozdílů popř. shod mezi výsledky získanými řešením dvou různých modelů elektrického výboje ve vzduchu. Jedná se o porovnání modelů se třemi a jedenácti částicemi, u obou včetně dvou druhů okrajových podmínek (Neumannových homogenních - NOP a fyzikálních okrajových podmínek - FOP). Pro porovnání výsledků bylo nezbytné zopakovat numerickou simulaci stejného děje pomocí řešení zmíněných modelů. Tento požadavek byl zajištěn tím, že byla vždy použita stejná výpočetní oblast (sít), počáteční i okrajové podmínky pro nabitě částice. Místo pohybu výboje ve vzduchu s reálným složením, byl uvažován pohyb v plynu složeného z 80% dusíku a z 20% kyslíku, mezi rovinnými elektrodami. Délka vzduchové mezery byla 1 cm, napětí na anodě (vlevo) 48 kV a na katodě (vpravo) 0 V. Koeficienty pro tříčasticový model byly převzaty z databáze [8] pro plyn nahrazující vzduch, jak již bylo zmíněno v odstavci 4.1.2.

V případě jedenáctičasticového modelu byly koeficienty, u kterých to bylo možné, vzaty stejné jako u tříčasticového modelu. Fotoionizační zdrojový člen je pro oba modely počítán také naprosto shodně. I přes tato opatření není možné zcela zaručit, že oba modely popisují chování shodného jevu. A to z toho důvodu, že zdrojové členy v rovnicích konvekce-difuze jsou pro oba modely (4.17), (4.34) definovány velmi odlišně. Proto se nepodařilo nalézt vhodný způsob jak zjistit zda si vzájemně odpovídají.

Pro účely porovnání modelů nebyla použita simulace pulzujícího výboje, která se využívá v mnoha praktických aplikacích, ale pouze simulace s konstantním napětím. Opakované pulzy napětí na elektrodách by ještě více komplikovaly porovnání výsledků numerických simulací tohoto nestacionárního děje.

Proto mohly být výsledky relativně snadno porovnány pro stejnou polohu čela výboje (v tomto porovnání byla jeho poloha na souřadnici  $x \approx 0.8$  cm). Nalezení čela výboje odpovídá hledání maxima hustoty lokálního elektrického náboje.

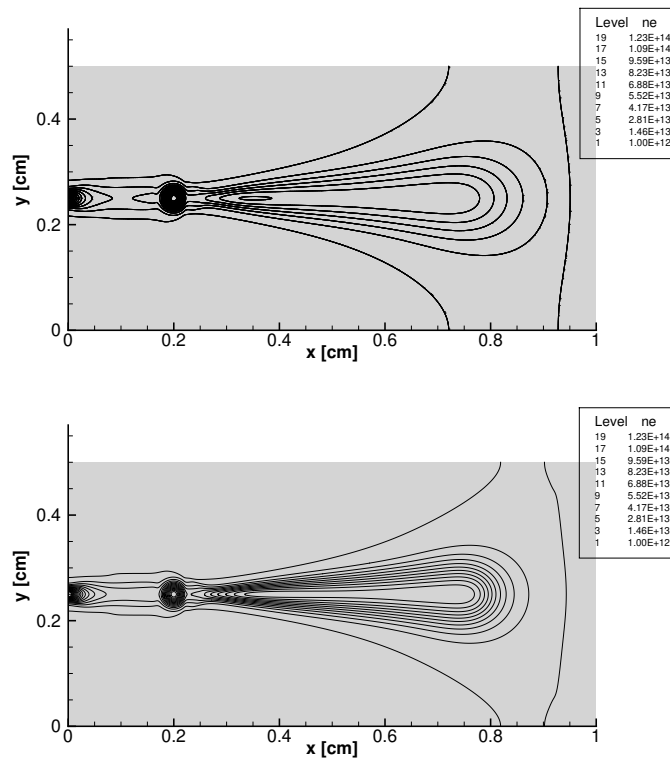
Uvedené výsledky jsou ve formě 2D kontur, případně jako řezy z 3D kontur danou veličinou pomocí roviny  $y = 0.25$  cm. Všechny uvedené výsledky jsou napočítány s fyzikálními okrajovými podmínkami, kromě těch na obr. 7.23, 7.24 a 7.26, které graficky znázorňují rozdíly ve výsledcích napočítaných s

různými okrajovými podmínkami.

Výsledky uvedené v této kapitole byly publikovány ve formě impaktovaného článku [4].

### 7.5.1 Porovnání společných veličin v obou modelech

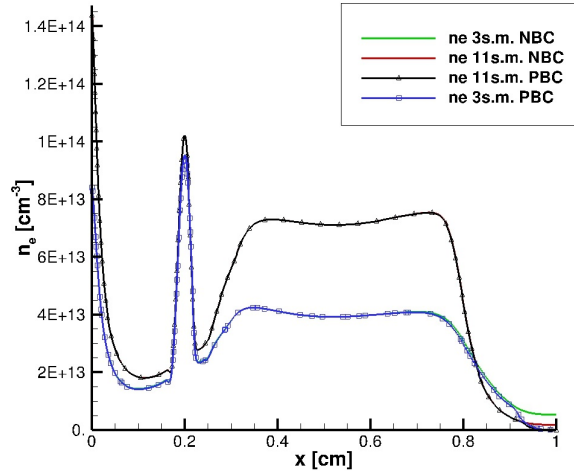
**Hustota elektronů.** Na obr. 7.22 je vidět, že rozložení izočar hustoty elektronů je pro oba modely velmi podobné. V dolní části obrázku, která představuje výsledky z jedenáctičástečového modelu, je vidět větší hustota izočar neboli větší gradient hustoty elektronů  $n_e$ .



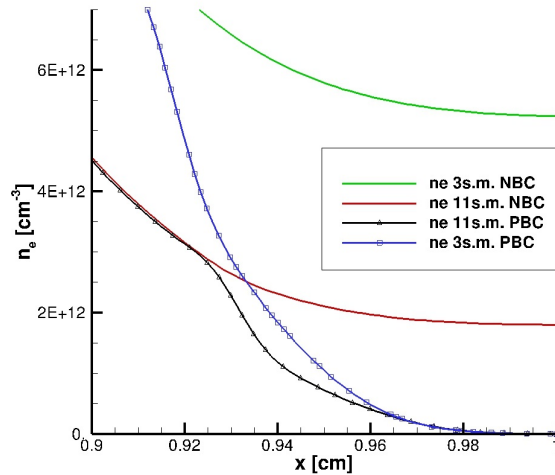
Obrázek 7.22: Porovnání modelů. 2D kontury hustoty elektronů  $[\text{cm}^{-3}]$  počítané s FOP na vodivých elektrodách. Výsledky jsou vykresleny pro stejnou polohu hlavy výboje (nahore: tříčástečový model, dole: jedenáctičástečový model).

Jedenáctičástečový model má také vyšší hustotu částic v těle výboje, která je zobrazena jako graf pomocí osového řezu na obr. 7.23. Pozn.: Průběh hustoty pozitivních iontů je velmi podobný průběhu hustoty elektronů, naopak hustota negativních iontů je pro tříčástečový model mnohem nižší, proto zde nejsou vykresleny.





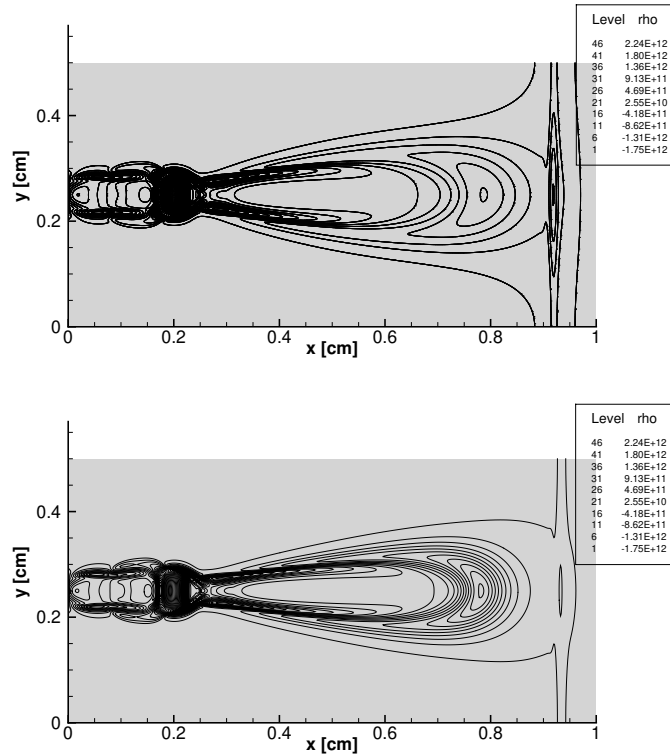
Obrázek 7.23: Porovnání modelů. Osové řezy (pomocí roviny  $y = 0.25$  cm) hustotami elektronů napočítaných tříčásticovým (3.s.m.) a jedenáctičásticovým (11.s.m.) modelem s Neumannovými homogenními (NBC) a fyzikálními (PBC) okrajovými podmínkami.



Obrázek 7.24: Porovnání modelů. Výřez pravé dolní části (čelo výboje v blízkosti katody) obrázku 7.23.

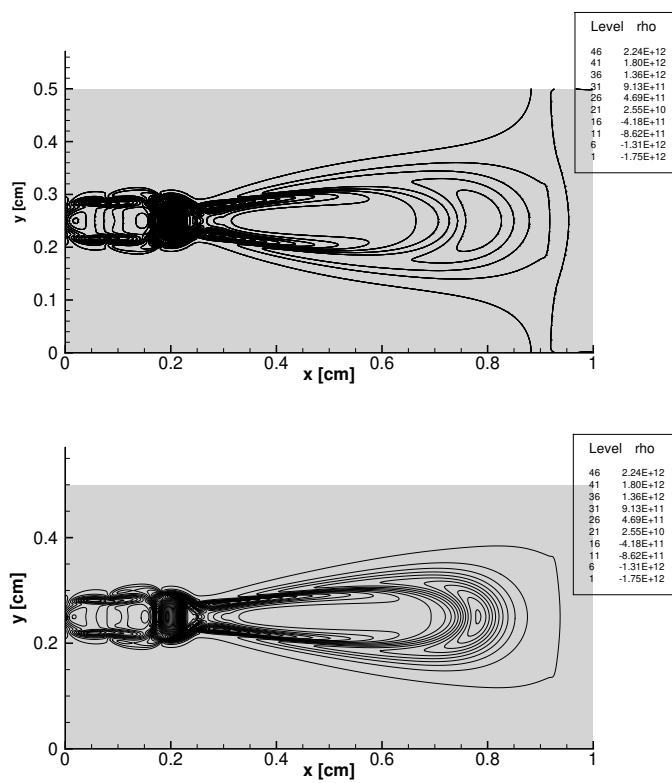
**Hustota lokálního elektrického náboje.** Rozložení a tvar izochar hustoty elektrického náboje na obr. 7.25 je pro oba modely také velmi podobné. Na

čele výboje jsou vidět dvě ostré špičky.

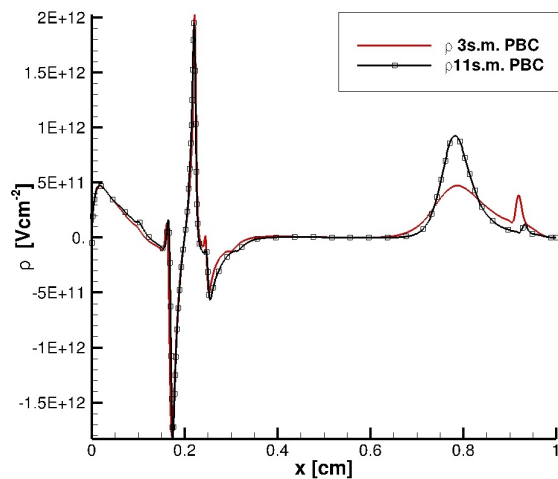


Obrázek 7.25: Porovnání modelů. 2D izočáry hustoty elektrického náboje [ $\text{V} \cdot \text{cm}^{-2}$ ] (nahore: tříčásticový model, dole jedenáctičásticový model).

Rozložení hustoty lokálního náboje podél osy výboje je vykresleno na obr. 7.27. Hodnota hustoty náboje je podél těla výboje stejná pro oba modely, na rozdíl od hodnoty hustoty elektronů (viz obr. 7.27 a 7.23). Dále jsou na tomto obrázku vidět lokální maxima hustoty náboje. První z nich jsou v místě  $x \approx 0.8$  cm a reprezentují polohu čela výboje. Jedenáctičásticový model má v tomto místě téměř dvojnásobnou hustotu lokálního náboje než tříčásticový model, což také může přispívat k rozdílné rychlosti propagace obou modelů. Také gradient stoupání/klesání hustoty v okolí zmíněného vrcholu je v případě jedenáctičásticového modelu vyšší. Druhá maxima jsou v místě  $x \approx 0.92$  cm a jsou způsobena začínajícím vlivem FOP v blízkosti elektrod.

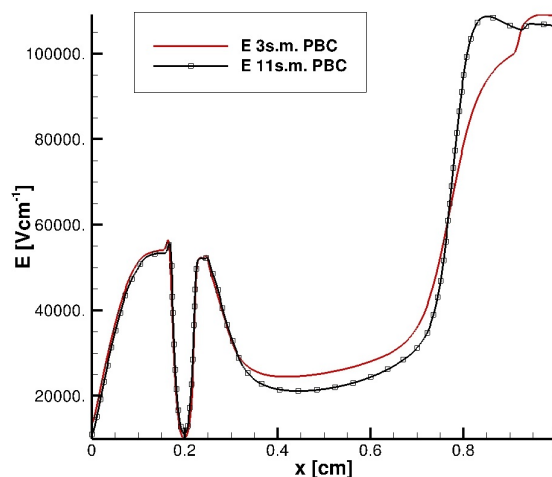


Obrázek 7.26: Porovnání modelů. 2D izočáry hustoty elektrického náboje  $[\text{V} \cdot \text{cm}^{-2}]$  počítané s Neumannovými homogenními okrajovými podmínkami (na-  
hoře: tříčásticový model, dole jedenáctičásticový model).



Obrázek 7.27: Porovnání modelů. Osově řezy (pomocí roviny  $y = 0.25$  cm) hustotami lokálního elektrického náboje počítané tříčásticovým (3.s.m.) a jedenáctičásticovým (11.s.m.) modelem.

**Intenzita elektrického pole.** Rozložení velikosti intenzity elektrického pole  $|\vec{E}|$  podél osy výboje je ukázáno na obr. 7.28. Tříčásticový model vykazuje vyšší hodnoty intenzity elektrického pole podél těla výboje a naopak mnohem nižší hodnoty na čele výboje než jedenáctičásticový model. Gradient intenzity v blízkosti čela výboje je také pro tříčásticový model nižší.



Obrázek 7.28: Porovnání modelů. Osově řezy (pomocí roviny  $y = 0.25$  cm) velikostmi intenzit elektrického pole počítané tříčásticovým (3.s.m.) a jedenáctičásticovým (11.s.m.) modelem.

### 7.5.2 Vliv okrajových podmínek na elektrodách

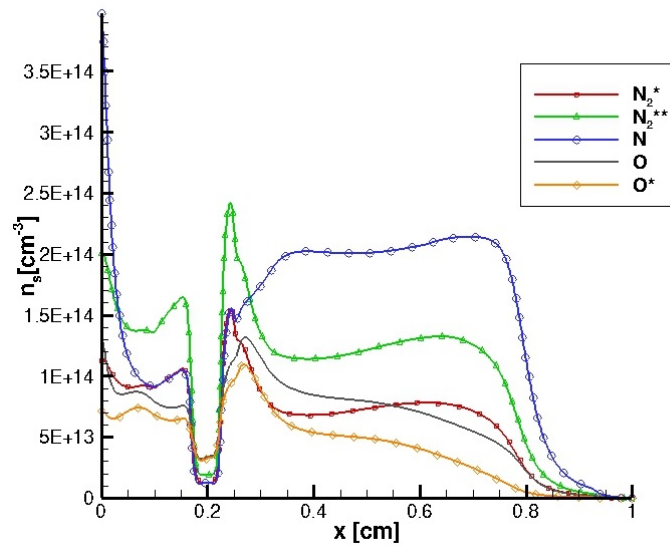
Druhé maximum hustoty lokálního elektrického náboje na obr. 7.27, které se nachází v místě  $x \approx 0.92$  cm, je zapříčiněno vlivem fyzikální okrajové podmínky. Na obr. 7.26 jsou vidět výsledky (2D kontury hustoty lokálního elektrického náboje) napočítané pomocí obou modelů s Neumannovými homogenními okrajovými podmínkami na elektrodách. Čela výbojů jsou i v tomto případě ve stejné poloze. Levé části izochar na daném obrázku ( $x \leq 0.8$  cm) jsou identické s výsledky napočítanými s fyzikálními OP (viz obr. 7.25). Ale pravá část obrázků se liší tím, že výsledky napočítané s Neumannovými OP nemají druhé lokální maximum.

Výřez pravé dolní části obr. 7.23, znázorňující pouze čelo výboje v blízkosti katody, je vidět na obr. 7.24. Zde je detailně vidět průběh hustoty elektronů před čelem výboje, která je již ovlivněna vlastnostmi elektrody. Horní (zelená) a prostřední (červená) čára znázorňují průběhy hustot obou modelů s Neumannovými OP. Kromě rozdílné absolutní hodnoty mají obě křivky identický tvar a také jsou obě kolmé k pravé hranici (katodě), jak je předpokládáno. Zbývající čáry (označené symboly) jsou hustoty elektronů napočítané s fyzikálními OP. Je vidět, že průběh těchto hustot (čar označených symboly) je stejný jako průběh hustot napočítaných s NOP až do polohy  $x \approx 0.905$  cm (popř.  $x \approx 0.925$  cm). Pak se ale průběh výrazně změní for-

mou skoku až na téměř nulovou hustotu elektronů a to v případě výsledků počítaných s FOP. Oblast tohoto poklesu hustoty elektronů je známa jako deprese elektronů (tzv. depletion of electrons) katodou a je charakterizována Debyeho délkou  $\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 T_e}{qn_e}}$ .

### 7.5.3 Rozložení neutrálních částic jedenáctičástečového modelu

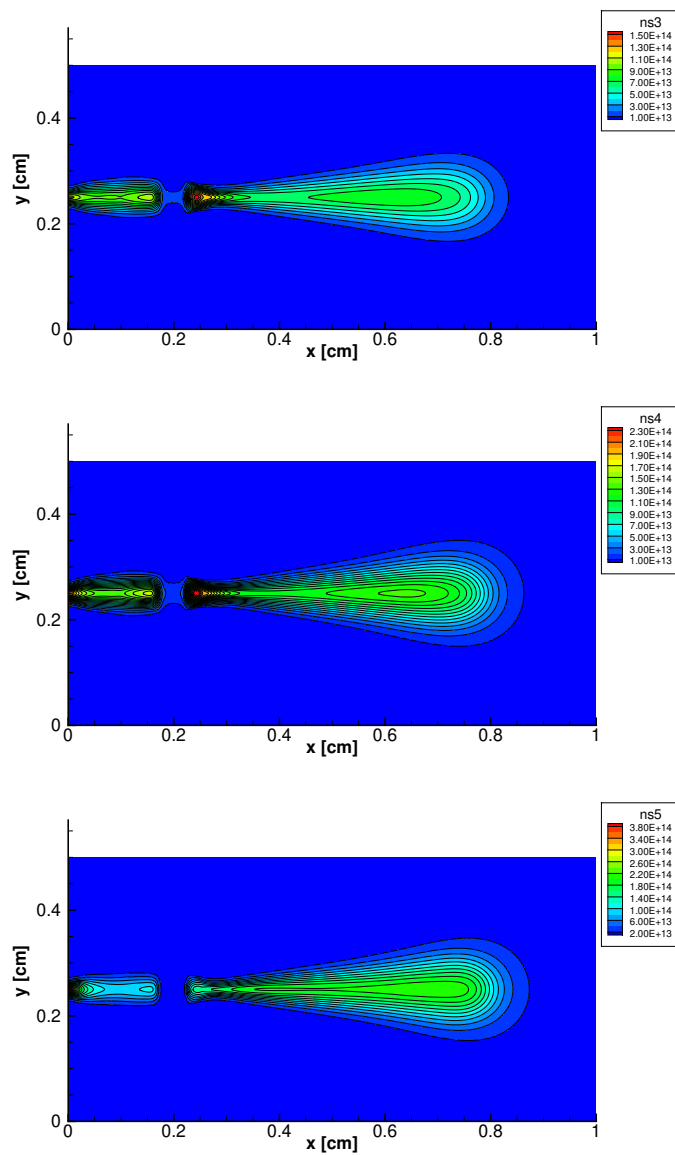
Pro doplnění jsou přiloženy také 2D kontury hustot neutrálních částic pro jedenáctičástečový model na obrázcích 7.29 – 7.31. Jejich rozložení podél osy výboje ve formě řezu rovinou  $y = 0.25$  cm je uvedeno na obr. 7.29. Zde je vidět lokální maximum hustot všech neutrálních částic v okolí počátečního mraku a následný různý nárůst nebo pokles hustot podél těla výboje.



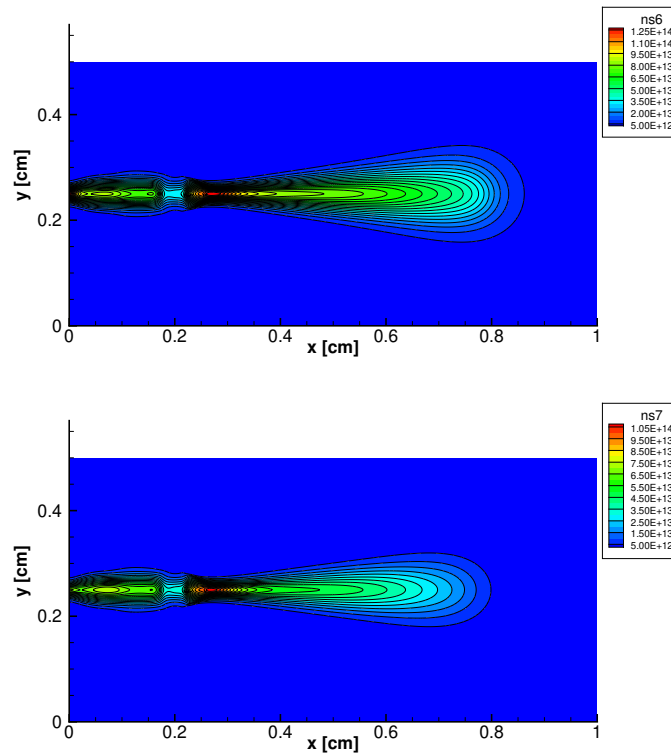
Obrázek 7.29: Porovnání modelů. Osový řez hustotami neutrálních částic [ $\text{cm}^{-3}$ ] (pomocí roviny  $y = 0.25$  cm) - jedenáctičástečový model.

Izočáry nově vzniklých částic z dusíku jsou na obr. 7.30 a částic vzniklých z kyslíku jsou na obr. 7.31. Z těchto obrázků je zřejmé, že oblast zvýšených hustot těchto nových částic odpovídá oblasti ve které se elektrický výboj pohyboval. To je předpokládané chování, protože fáze propagace elektrického výboje je velmi krátká a proto se disipativní procesy nemohou výrazněji projevit. Vliv těchto procesů začne být důležitý při simulacích relaxační fáze.

K té dochází po odstranění napětí z elektrod a doba jejího trvání je zhruba 1000x delší, než je tomu u propagační fáze.



Obrázek 7.30: Porovnání modelů. 2D kontury nově vzniklých neutrálních částic dusíku [ $\text{cm}^{-3}$ ] (shora:  $N_2^*$ ,  $N_2^{**}$ ,  $N$ ).

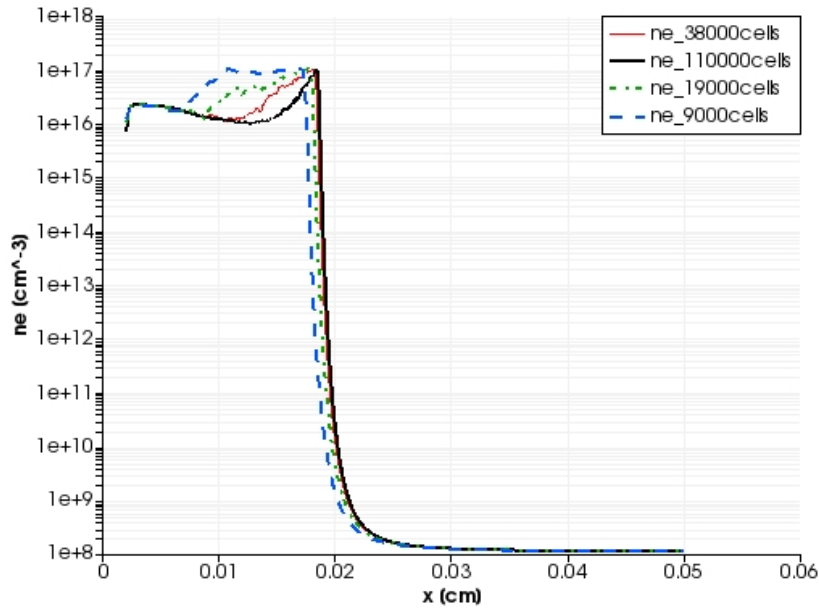


Obrázek 7.31: Porovnání modelů. 2D kontury nově vzniklých neutrálních částic kyslíku [ $\text{cm}^{-3}$ ] (shora:  $O$ ,  $O^*$ ).

## 7.6 Šíření elektrického výboje v tekutém argonu

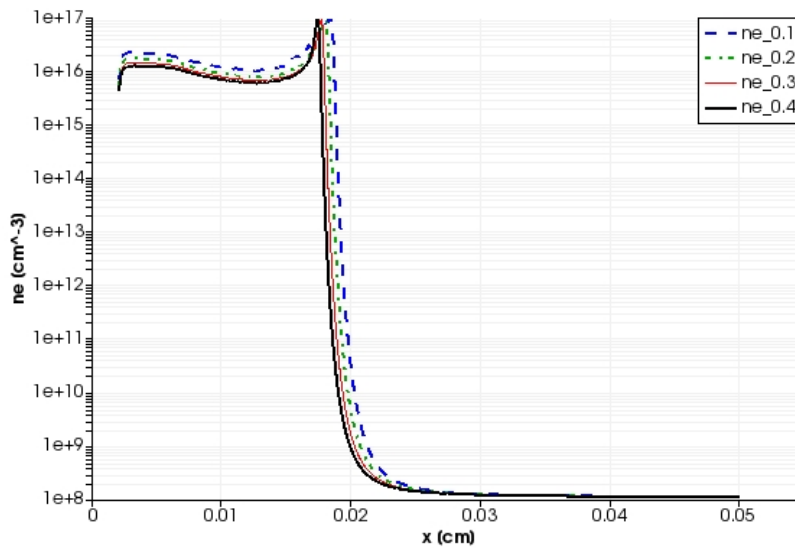
Tento odstavec se zabývá numerickým testováním vlivu rekombinačního koeficientu na šíření elektrického výboje v tekutém argonu. K tomu byl použit model popsáný v odstavci 4.1.4 v cylindrických souřadnicích. Více o osověsymetrickém modelu viz např. [29]. Pohyb byl simulován mezi kulovou anodou (o poloměru 0.002 cm) s napětím 3 kV a rovinnou katodou s 0 V. Délka výpočetní oblasti byla 1 cm a její šířka 5 cm. Jako počáteční podmínka byla použita konstantní hodnota preionizace  $1 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ . Na všech okrajích výpočetní oblasti byly použity Neumannovy homogenní okrajové podmínky. Výsledky uvedené v této kapitole byly publikovány v [3].





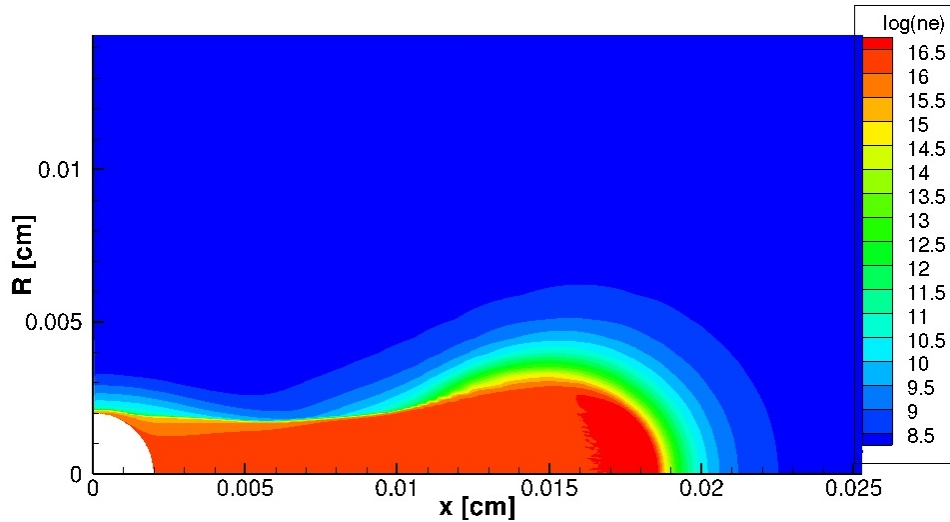
Obrázek 7.32: Testování nezávislosti výsledků na hustotě výpočetní sítě: axiální řez (pomocí roviny  $y = 0.25$  cm) hustotami elektronů počítaných na sítích s různými počty buněk a v konečném fyzikálním čase  $2.8^{-9}$  s.

Obrázek 7.32 znázorňuje řezy (podél osy šíření) hustotou elektronů počítané na sítích s různou hustotou (s 9000, 19000, 38000 a 110000 buňkami) v čase  $2.8^{-9}$  s. Je vidět, že výsledky získané na dvou nejhustších sítích si jsou tvarově již poměrně podobné, proto je pro další výpočty používána síť se 110000 buňkami. Ale zcela jistě by bylo vhodné použít ještě hustší síť, výpočet by však byl pro současnou metodu velmi časově náročný.



Obrázek 7.33: Testování závislosti šíření výboje na rekombinačním koeficientu: axiální řezy (pomocí roviny  $y = 0.25$  cm) hustotami elektronů počítaných na síti se 110000 buňkami v konečném fyzikálním čase  $2.8^{-9}$  s a rekombinační koeficient  $\xi$  byl variován od 0.1 do 0.4.

Ke zjištění vlivu rekombinace nabitých částic na šíření elektrického výboje v tekutém argonu byla provedena série simulací pro různé hodnoty koeficientu  $\xi$  (od 0.1 do 0.4) z rovnice 4.52. Obrázek 7.33 ukazuje opět osové řezy hustotami elektronů počítané na síti se 110000 buňkami v konečném fyzikálním čase  $2.8^{-9}$  s. Na obrázku je jasně vidět, že míra rekombinace ovlivňuje výboj dvěma hlavními směry. Prvním je, že se zvyšující se hodnotou rekombinačního koeficientu se výrazně snižuje hustota elektronů na těle (v kanále) výboje. A druhým efektem je značné zpomalování šíření výboje.



Obrázek 7.34: 2D kontury hustoty elektronů ( $\log_{10}(n_e)$ ) [ $\text{cm}^{-3}$ ] ze simulace elektrického výboje v tekutém argonu ( $t_{\text{end}} = 2.8 \cdot 10^{-9}$  s,  $\xi = 0.1$ ).

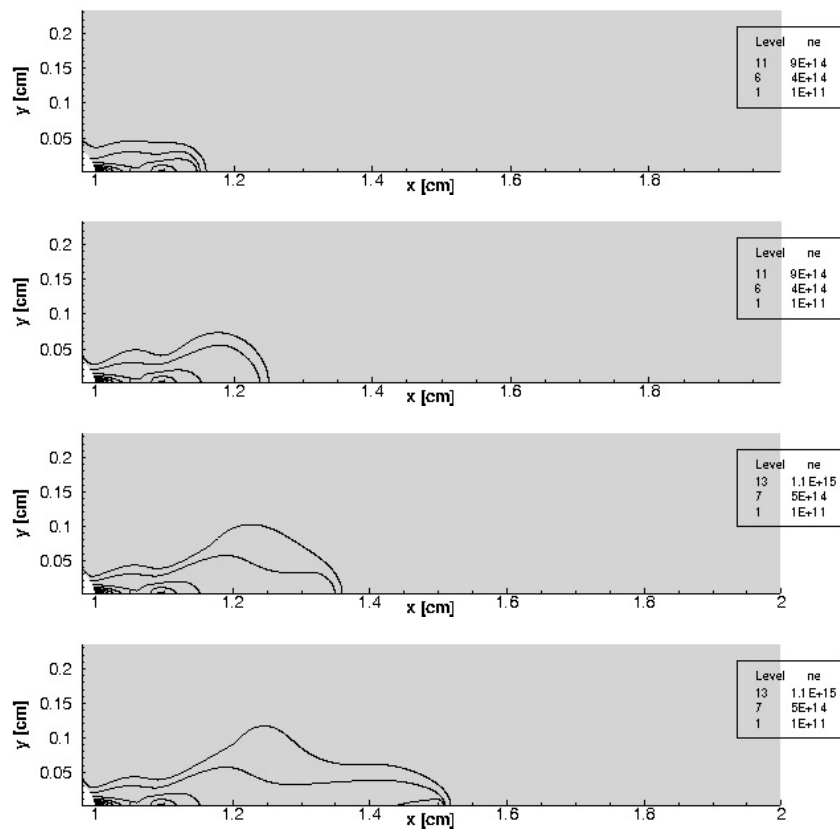
Rozložení kontur hustoty elektronů (ve 2D) pro výboj v tekutém argonu je ukázáno na obrázku 7.34 (koeficient  $\xi$  z rovnice 4.52 je roven 0.1). Zde je vidět, že hustota elektronů má své maximum ihned za čelem výboje. Naopak je možné pozorovat téměř konstantní hodnotu hustoty elektronů podél celého zbytku těla výboje, což je výsledkem elektron-iontové rekombinace.

## 7.7 Benchmark tříčasticového modelu

Následující část je zaměřena na otestování náležitě implementace tříčasticového modelu a ověření funkčnosti numerické metody, kterou je následně model řešen. Obdržené výsledky budou porovnány s výsledky publikovanými v [19].

Jedná se o řešení pohybu elektrického výboje ve vzduchové mezeře mezi hrotovou anodou a deskovou katodou. Anoda má tvar hyperboly (viz [19]) a je na ni přivedeno napětí  $13\text{kV}$ . Špička anody je umístěna do bodu o souřadnicích  $[1, 0]\text{cm}$ , katoda leží v rovině  $x = 2\text{cm}$ . Šířka oblasti (ve směru kolmém na osu) musí být dostatečná tak, aby se minimalizoval vliv okrajové podmínky na volné hranici (více například viz [2]). Z tohoto důvodu je šířka oblasti  $10\text{cm}$  a celkově je oblast dlouhá  $2\text{cm}$ . K urychlení formování výboje přispívá počáteční mrak částic (jádro) se středem v bodu  $[1.025, 0]\text{cm}$  a maximální hodnotou hustoty částic  $1 \cdot 10^{14}\text{cm}^{-3}$ . Počáteční mrak má v půdorysu

tvar elipsy s délkou hlavní poloosy (ve směru souřadnice  $x$ )  $0.025\text{cm}$  a délka vedlejší poloosy je  $0.01\text{cm}$ . Tato úloha je řešena pomocí osově-symetrického tříčásticového modelu s fotoionizací. Modelové konstanty jsou uvažovány pro vzduch ( $N_2 : O_2 = 80 : 20\%$ ) a jsou získány z databáze LXCAT [8]. Výpočet byl proveden bez dynamické adaptace sítě. Proto byla použita předem dostatečně zjemněná síť v blízkém okolí osy (v místě předpokládaného pohybu výboje) a naopak velikost buněk v radiálním směru se výrazně zvětšuje tak, aby měla síť co možná nejmenší počet buněk.

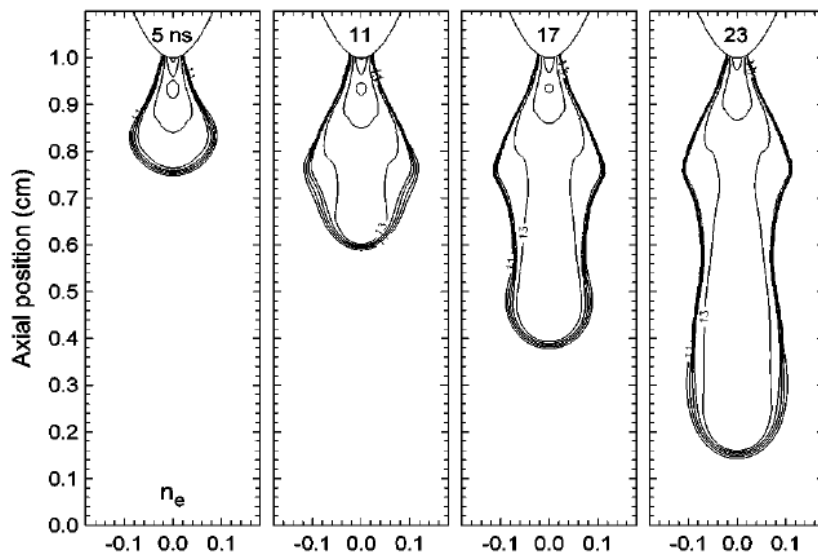


Obrázek 7.35: *Benchmark tříčásticového modelu. 2D kontury hustoty elektronů [ $\text{cm}^{-3}$ ] v konfiguraci hyperbolická anoda a rovinná katoda z článku [19] (shora:  $t = 1, 2.5, 5, 7.5\text{ ns}$ ).*

Obrázek 7.35 znázorňuje izočáry časového vývoje hustoty elektronů. V levém dolním rohu se nachází hrot hyperbolické anody od kterého se šíří výboj směrem doprava ke katodě. První obrázek shora představuje hustotu elektronů v počátcích formování výboje (v čase 1 ns). Na druhém obrázku je rozložení hustoty elektronů v čase 2.5 ns, kde je již možné vidět zvlnění těla výboje a

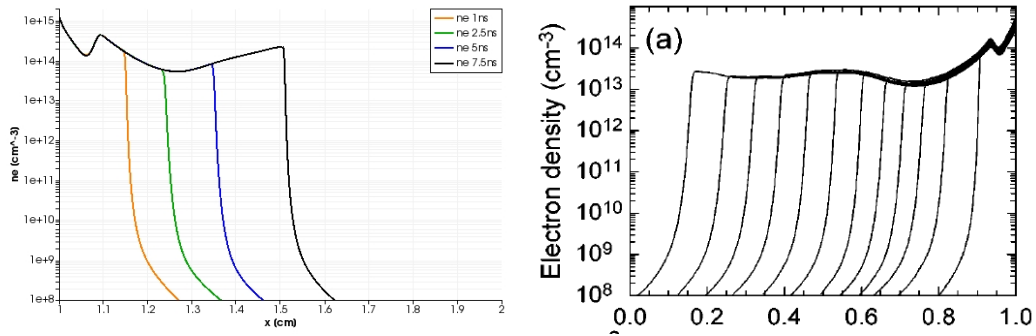
dvě výrazná maxima. První představuje počáteční puls a druhé se souřadnicemi přibližně  $[1.1, 0]$  cm, které vzniká při formování výboje. Poslední dva obrázky znázorňují rozšíření výboje v čase 5 ns a následný pohyb užší osové části směrem ke katodě v čase 7.5 ns.

Obrázek 7.36 je převzat z článku [19] a znázorňuje také časový vývoj kontur hustoty elektronů. Je vidět, že tvar výboje je velmi podobný. Rozdíl je možné nalézt ve výraznějším zvlnění výboje na obrázku 7.35 a také v jeho přibližně dvojnásobné rychlosti. Tyto rozdíly ve výsledcích je možné vysvětlit použitím různých koeficientů ve zdrojových členech, difuzi a konvekci a také při výpočtu fotoionizačního členu, jejichž volba není ve článku [19] jasně popsána.



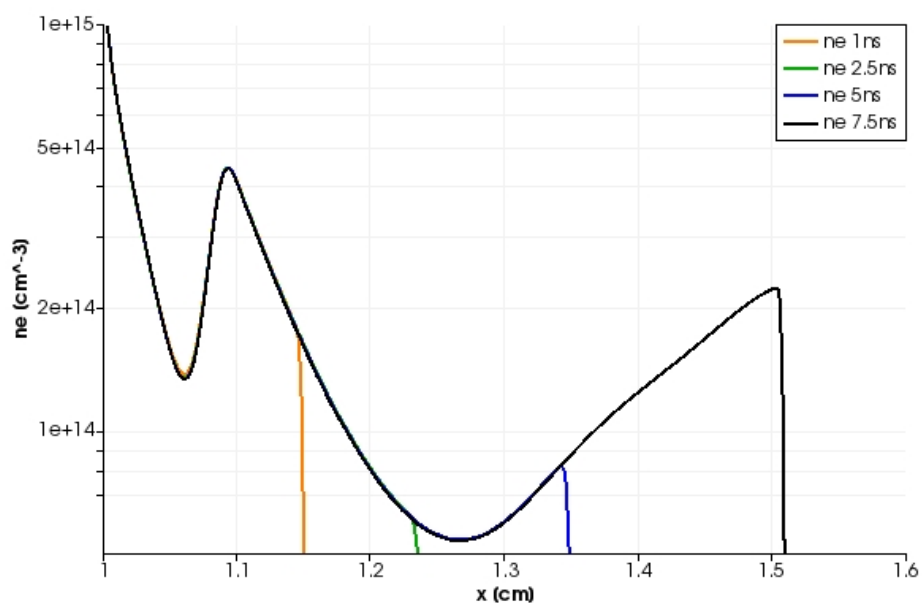
Obrázek 7.36: *Benchmark tříčásticového modelu. 2D kontury hustoty elektronů ( $\log_{10}(n_e)$ ) [ $\text{cm}^{-3}$ ] (zleva:  $t = 5, 11, 17, 23$  ns). Převzato ze článku [19].*

Levá část obrázku 7.37 znázorňuje osový řez hustotou elektronů v různých časech (odpovídající obrázku 7.35). Na těchto řezech je vidět první lokální maximum hustoty elektronů v místě  $x = 1\text{cm}$ , které vzniká v místě počátečního mraku. Od něj se výboj šíří směrem doprava a v místě  $x \approx 1.1\text{cm}$  dochází opět k výraznému nárůstu hustoty elektronů a k vytvoření druhé špičky. Poté hustota pozvolna klesá až do místa  $x \approx 1.26\text{cm}$  a při dalším vývoji začíná opět pomalu narůstat.



Obrázek 7.37: *Benchmark tříčásticového modelu. Osově řezy časového vývoje hustoty elektronů  $[cm^{-3}]$ . Vlevo: testovaný model, vpravo: výsledky z [19].*

Pravá část obrázku 7.37 je převzata opět z publikace [19]. V tomto případě se výboj pohybuje opačným směrem (zprava doleva). Je vidět, že křivky vyjadřující hustotu elektronů v ose výboje mají shodný tvar. Rozdíly nastávají pouze v hodnotách hustoty a ve snižování hustoty elektronů s přibývajícím časem. Toto snižování je dobře viditelné na pravém obrázku, kdy počáteční hodnota hustoty je snižována díky záporným zdrojovým členům (spojování a rekombinace) a také díky difuzi. V případě levého obrázku je toto snižování méně viditelné a proto je na obrázku 7.38 vykreslen zvětšený výřez. Zde je již postupné snižování hustoty elektronů v ose výboje dobře viditelné.



Obrázek 7.38: Benchmark tříčásticového modelu. Výřez horní levé části průběhu hustoty elektronů z obr. 7.37 testovaného modelu.

Jak již bylo zmíněno, k těmto rozdílům dochází pravděpodobně kvůli použití různých koeficientů modelu výboje a fotoionizace. Ale popis důležitých vlastností pohybu elektrického výboje zůstává zachován (zejména tvar a průběhy hustot částic).

# Kapitola 8

## Závěr

Závěr se bude nejprve věnovat splnění cílů formulovaných v úvodu této práce. Jako první byly uvedeny výsledky numerických testů popsané metody pro řešení minimálního modelu pohybu elektrického výboje na nestrukturované, dynamicky adaptované síti. Pomocí série výpočtů v oblastech s různou šířkou byla zjištěna silná závislost rychlosti šíření výboje na šířce oblasti. Z opakování stejného výpočtu na síti s různými úrovněmi adaptace plyne opět silná závislost rychlosti šíření výboje na počtu úrovní adaptace sítě.

Dále byla provedena série numerických simulací ve kterých pomocí různých přístupů docházelo k rozdělení elektrického výboje na dvě nebo více vláken případně k ovlivnění směru šíření výboje.

Správné chování standardního modelu elektrického výboje v cylindrických souřadnicích (jehož implementace je komentována níže v závěru) bylo ověřeno pomocí široce uznávaného benchmarku. Tedy porovnáním získaných výsledků pevně formulovaného problému s publikovanými výsledky, které byly dosaženy jinou numerickou metodou.

V následující části byl model rozšířen o konvekci a difuzi pozitivních iontů a byly implementovány fyzikálně relevantní okrajové podmínky pro elektrody. Správná funkčnost okrajových podmínek byla otestována na pohybu radiofrekvenčního plasmatu.

Dále byl otestován pohyb elektrického výboje popsaného dvoučásticovým modelem s použitím fyzikálně relevantních okrajových podmínek na elektrodách. Na výsledcích je vidět šíření výboje podle předpokladů a v blízkosti katody silné ovlivnění chování výboje - jeho zastavení a prudký nárůst hustoty částic. Tento jev (tzv. interakce výboje s vodivou elektrodou) však není možné s uvedeným modelem korektně simulovat, protože dochází k nefyzikálnímu (neomezenému) nárůstu hustot částic poblíž elektrody. Pro správnou simulaci tohoto jevu by bylo nutné prezentovaný model dále modifikovat.

Metoda byla rozšířena o standardní tříčásticový model (otestován pomocí



benchmarku) a o jedenáctičástečový model se základními chemickými reakcemi včetně fyzikálních okrajových podmínek. Chování těchto modelů bylo vzájemně porovnáno pomocí výsledků numerických simulací obou modelů pro pohyb výboje mezi rovinnými elektrodami s různými okrajovými podmínkami.

Upravený osově-symetrický model byl použit pro simulaci pohybu elektrického výboje v tekutém argonu. Účelem bylo zjištění závislosti propagace výboje na hodnotě rekombinačního koeficientu. Nejprve byla jednoduchým konvergenčním testem zjištěna dostatečná hustota výpočetní sítě. A následně byla provedena série výpočtů pro různé hodnoty zmíněného koeficientu.

V této práci bylo zjištěno následující: Pro metodu řešící minimální model platí, že čím je širší výpočetní oblast, tím vyšší je rychlost propagace výboje. Pokud je šířka oblasti alespoň 2.5x větší než je její délka, pak je již nárůst rychlosti zanedbatelný. Tento závěr platí stejně pro metodu prvního i druhého řádu přesnosti. V případě výpočtu prvním řádem přesnosti dochází k postupnému zpomalování výboje s narůstajícím počtem úrovní adaptace, ale výsledky napočítané s druhým řádem přesnosti vykazují přesně opačné chování (rychlost se zvyšuje). Šest úrovní zjemnění umožňuje napočítat výsledky metodou prvního i druhého řádu přesnosti, které jsou téměř totožné. Navíc pro druhý řád vyplývá, že čtyři úrovně zjemnění jsou nejlepším kompromisem mezi přesností výsledků a výpočetní náročností.

Dále bylo pomocí výsledků numerických simulací minimálního modelu dokázáno, že lze elektrický výboj rozdělit na dvě nebo na více vláken pomocí vhodného tvarování katody, pomocí jednoho nebo několika vhodně umístěných zdrojových členů impaktivní ionizace nebo pomocí různého počtu počátečních jader (mraků).

Z testů implementace standardního modelu je vidět, že obdržené výsledky svým chováním i tvarem odpovídají dostupné literatuře - benchmarku. Pouze rychlost šíření se výrazněji liší, což je pravděpodobně způsobeno jinými použitými materiálovými konstantami.

Výsledky získané numerickým řešením homogenního i plného modelu radiofrekvenčního plasmatu, pro otestování správné funkčnosti fyzikálních okrajových podmínek, se dobře shodují s literaturou.

Výboj popsáný dvoučástečovým modelem s použitím fyzikálních okrajových podmínek se pohybuje podle předpokladů. Důležitým poznatkem z tohoto testu je, že pro simulaci jeho pohybu je nutné do modelu zahrnout fotoionizaci.

Výsledky obdržené pomocí standardního i jedenáctičástečového modelu jsou v souladu s fyzikálně správným chováním. Velmi dobrá shoda mezi oběma modely byla prokázána v případě hustoty lokálního elektrického náboje i in-

tenzity elektrického pole. Průběh hustoty elektronů v čase je opět podobný, pouze absolutní hodnota je pro jedenáctičástečkový model vyšší. Nové neutrální částice (v případě jedenáctičástečkového modelu) vznikají pouze v oblasti výbojového kanálu (těla) a jejich rozložení není rovnoměrné, což opět odpovídá očekávanému chování.

Při simulaci ultrarychlého pohybu výboje v tekutém argonu bylo zjištěno, že čím vyšší je hodnota rekombinačního koeficientu, tím se výboj pohybuje pomaleji a má nižší hustotu částic podél těla. Tímto byly splněny všechny vytyčené cíle předkládané práce.

Jako další rozvoj v budoucnu bude následovat modifikace adaptačního algoritmu pro sítě se čtyřúhelníkovými buňkami, případně s kombinací trojúhelníkových a čtyřúhelníkových buněk. Poté implementace implicitní metody, paralelizace kódu a vzápětí rozšíření metody do třech dimenzí. Po těchto změnách bude možné metodu využívat pro simulace technicky zajímavých aplikací jako jsou např. pulzně opakující se výboje, relaxační fáze výboje, kontakt výboje s dielektrickými nebo jinými povrchy materiálů, plasmové trysky apod.

# Literatura

## Publikace autora

- [1] Benkhaldoun, F., Fořt, J., Hassouni, K., Karel, J., Scarella, G., Trdlička, D., A Full 3-D Dynamically Adaptive Unstructured Grid Finite-Volume Approach to Simulate Multiple Branching in Streamer Propagation, *IEEE Transactions on plasma science*, vol. 42, no. 10, 2420 - 2421 (2014)
- [2] Benkhaldoun, F., Fořt, J., Hassouni, K., Karel, J., Trdlička, D., A numerical study of planar discharge motion, *Applied and Computational Mechanics*, 8, 25–34 (2014)
- [3] Benkhaldoun, F., Fořt, J., Hassouni, K., Karel, J., Trdlička, D., Modelling of streamer propagation in dielectric liquids using a dense gas model, *EPS Conference on Plasma Physics*, 45, (2018)
- [4] Fořt, J., Karel, J., Trdlička, D., Benkhaldoun, F., Kissami, I., Montavon, J.-B., Hassouni, K., Mezei, J. Zs., Finite volume methods for numerical simulation of the discharge motion described by different physical models, *Advances in Computational Mathematics*, Springer, (2019), <https://doi.org/10.1007/s10444-019-09706-9>

## Publikace ostatních autorů

- [5] Akyuza, M., Larssonb, A., Cooraya, V., Strandberg, G., 3D simulations of streamer branching in air, *Journal of Electrostatics*, 59, 115–141 (2003)
- [6] Babaeva, N. Yu., Naidis, G. V., Modeling of positive streamers in liquid argon, *Technical Physics letters*, 25/2 (1999)
- [7] Benkhaldoun, F., Fořt, J., Hassouni, K., Karel, J., Simulation of planar ionization wave front propagation on an unstructured adaptive grid, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 236, 4623-4634 (2012)

- 
- [8] Biagi-v7.1 database, [www.lxcat.net](http://www.lxcat.net), retrieved on October 2, 2018.
- [9] Bogaerts, A., Effects of oxygen addition to argon glow discharges: A hybrid Monte Carlo-fluid modeling investigation, *Spectrochimica Acta Part B*, 64, 1266-1279 (2009)
- [10] Bourdon, A., Pasko, V.P., Liu, N.Y., Celestin, S., Ségur, P., Marode, E., Efficient models for photoionization produced by non-thermal gas discharges in air based on radiative transfer and the Helmholtz equations, *Plasma Sources Sci. Technol.*, 16 (3), 656 - 678 (2007).
- [11] Bressieres, D., Paillol, J., Bourdon, A., Segur, E., Marco, E., A new one-dimensional moving mesh method applied to the simulation of streamer discharges, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 40, 6559 - 6570 (2007)
- [12] Celestin, S., Bonaventura, Z., Zeghondy, B., Bourdon, A., Segur, P., The use of the ghost fluid method for Poisson's equation to simulate streamer propagation in point-to-plane and point-to-point geometries, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 42, (2009)
- [13] Celestin, S., Study of the dynamics of streamers in air at atmospheric pressure, *laboratoire d'Energétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion (EM2C) du CNRS et de l'ECP*, (2008)
- [14] Celestin, S., Bonaventura, Z., Zeghondy, B., Bourdon, A., Segur, P., The use of the ghost fluid method for Poisson's equation to simulate streamer propagation in point-to-plane and point-to-point geometries, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 42, (2009)
- [15] Durante, M., Bonaventura, Z., Massot, M., Bourdon, A., A numerical strategy to discretize and solve the poisson equation on dynamically adapted multiresolution grids for time-dependent streamer discharge simulations, *Journal of Computational Physics*, 289, 129-148 (2015)
- [16] Hung, T., H., Accurate monotone cubic interpolation, *NASA Technical memorandum*, 103789 (1991)
- [17] Chanrion, O., Neubert, T., A PIC-MCC code for simulation of streamer propagation in air, *Journal of Computational Physics*, 227, 7222-7245 (2008)
- [18] Karel, J., Numerical simulation of streamer propagation on unstructured dynamically adapted grids, *Disertační práce, Fakulta strojní ČVUT v Praze*, (2013)

- 
- [19] Kulikovskiy, A. A., Positive streamer between parallel plate electrodes in atmospheric pressure air, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 30, 441 - 450 (1997)
- [20] Li, Ch., Ebert, U., Hundsdorfer, W., Spatially hybrid computations for streamer discharges : II. Fully 3D simulations, *Journal of Computational Physics*, 231, 1020-1050 (2012)
- [21] Lieberman, M. A., Lichtenberg, A. J., Principles of plasma discharges and materials processing, A Wiley-Interscience Publication, New York, USA (1994)
- [22] Linkeova, I., Manufacturing an artificial human head, *Journal of geometry and graphics*, 7 (1), 89-99 (2003)
- [23] Linkeova, I., Základy počítačového modelování křivek a ploch, Vydavatelství ČVUT (2008)
- [24] Liu, N., Pasco, V. P., Effects of photoionization on similarity properties of streamers at various pressures in air, *Journal of Physics D: Appl. Physics*, 39, 327-334 (2006)
- [25] Montijn, C., Hundsdorfer, W., Ebert, U., An adaptive grid refinement strategy for the simulation of negative streamers, *J. Comput. Phys.*, 219 (2), 801 - 835 (2006)
- [26] Morrow, R., Lowke, J.J., Streamer propagation in air, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 30, 614 - 627 (1997)
- [27] Papageorgiou, L., Metaxas, A. C., Georghiou, G. E., Three-dimensional numerical modelling of gas discharges at atmospheric pressure incorporating photoionization phenomena, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 44, (2011)
- [28] Ponomarev, A. A., Aleksandrov, N. L., Monte Carlo simulation of electron detachment properties for  $O_2^-$  ions in oxygen and oxygen:nitrogen mixtures, *Plasma Sources Sci. Technol.*, 24, (2015)
- [29] Trdlička, D., Použití metody konečných objemů pro řešení výboje pasmatu Diplomová práce, Fakulta strojní ČVUT v Praze, (2012)
- [30] Yousfi, M. et al, Ion swarm data for electrical discharge modeling in air and flue gas mixtures, *J. Appl. Phys.*, 94, 96 - 103 (2003)

- 
- [31] Zeghondy, B., Celestin, S., Bourdon, A., Segur, P., Bessieres, D., Paillol, J. H., An immersed boundary method to simulate positive streamer propagation in point-to-plane geometry in air, ICPIG, 28, (2007)
- [32] Zheng, S., Zhang, L., Liu, Y., Wang, W., Wang, X., Modeling of the production of OH and O radicals in a positive pulsed corona discharge plasma, Vacuum, 83, 238-243 (2009)

# Kapitola 9

## Příloha

### 9.1 Aproximace metodou nejmenších čtverců

K výpočtu hodnoty neznámé veličiny (např.  $W_m$ ) ve specifickém uzlu sítě  $V$  je použita metoda nejmenších čtverců (MŇČ). Hodnoty ve středech okolních buněk (jedná se o buňky, které spolu sousedí přes uvažovaný vrchol  $V$ ) se aproximují pomocí roviny. Díky zavedení lokálního souřadného systému s počátkem v bodě  $V$  lze hodnotu neznámé veličiny  $W_{m,V}$  v daném bodě vyjádřit jako

$$W_{m,V} = \sum_{i=1}^n \alpha_i W_{m,i}, \quad (9.1)$$

kde  $n$  je celkový počet buněk sdílejících vrchol  $V$  a  $W_{m,i}$  je hodnota ve středu okolní buňky  $i$ . Váhový koeficient se vypočítá podle vztahu

$$\alpha_i = \frac{1 + \lambda_x(x_i - x_V) + \lambda_y(y_i - y_V)}{n + \lambda_x R_x + \lambda_y R_y}, \quad (9.2)$$

kde  $x_i, y_i$  jsou souřadnice středu sousední buňky  $i$ ,  $x_V, y_V$  jsou souřadnice vrcholu  $V$  a hodnoty  $\lambda_x$  a  $\lambda_y$  jsou počítány jako

$$\lambda_x = \frac{I_{xx}R_y - I_{yy}R_x}{I_{xx}I_{yy} - I_{xy}^2}, \quad \lambda_y = \frac{I_{xy}R_x - I_{xx}R_y}{I_{xx}I_{yy} - I_{xy}^2}. \quad (9.3)$$

Součty jednotlivých odchylek vzdáleností a jejich kvadráty se spočítají jako

$$\begin{aligned}R_x &= \sum_{i=1}^n (x_i - x_V), & R_y &= \sum_{i=1}^n (y_i - y_V), \\I_{xx} &= \sum_{i=1}^n (x_i - x_V)^2, & I_{yy} &= \sum_{i=1}^n (y_i - y_V)^2, \\I_{xy} &= \sum_{i=1}^n (x_i - x_V)(y_i - y_V).\end{aligned}\tag{9.4}$$