



ТЕХНИЧЕСКИ УНИВЕРСИТЕТ – СОФИЯ

Факултет по приложна математика и информатика

Катедра Информатика

Маг. физ. Росица Андреева Павлова

КОМПЮТЪРНО МОДЕЛИРАНЕ НА КАПАЦИТИВНИ РАЗРЯДИ

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

на дисертация за придобиване на образователна и научна степен

"ДОКТОР"

Област: 4. Природни науки, математика и информатика

Професионално направление: 4.6 Информатика и компютърни науки

СОФИЯ, 2020 г.

Дисертационният труд е обсъден и насочен за защита от Катедрения съвет на катедра „Информатика“ към ФПМИ на ТУ-София на редовно заседание, проведено на 30.01.2020 г.

Публичната защита на дисертационния труд ще се състои на 14.04.2020 г. от 15,00 часа в Конферентната зала на БИЦ на Технически университет – София на открито заседание на научното жури, определено със заповед № ОЖ-4.6-02 / 14.02.2020 г. на Ректора на ТУ-София в състав:

1. доц. д-р Десислава Иванова
2. проф. д.т.н. Сашка Александрова
3. проф. д-р Стефка Фиданова
4. доц. д-р Милен Петров
5. доц. д-р Станислав Колев

Рецензенти:

1. доц. д-р Десислава Иванова
2. доц. д-р Станислав Колев

Материалите по защитата са на разположение на интересуващите се в канцеларията на ФПМИ на ТУ-София, блок № 2, кабинет № 2228А.

Дисертантът е докторант на самостоятелна подготовка към катедра „Информатика“ на ФПМИ. Изследванията по дисертационната разработка са направени от автора.

Автор: маг. физ. Росица Павлова

Заглавие: Компютърно моделиране на капацитивни разряди

Тираж: 30 броя

Отпечатано в ИПК на Технически университет – София

I. ОБЩА ХАРАКТЕРИСТИКА НА ДИСЕРТАЦИОННИЯ ТРУД

Актуалност на проблема

Капацитивните разряди са един от основните типове газови разряди, използвани в съвременните плазмени технологии. Те са обект на интензивни изследвания както във връзка с практическото им приложение, така и по отношение на фундаментални въпроси за механизмите за поддържане на разряда.

Разбирането и контролирането на процесите в разряда е мощен стимул за развитие на методите на моделиране в тази област. Моделирането в областта на плазмата е комплексна задача, обхващаща механика, термодинамика, електродинамика, оптика и квантова физика.

Както и много други области на науката, в последните години компютърните симулации се утвърдиха като трети основен метод на научно изследване наред с експеримента и (аналитичната) теория. Основният метод за моделиране, използван в дисертацията, е “Частичка в клетка с Монте Карло удари”. Понастоящем това е най-модерният и бързо развиващ се метод в областта на моделирането на плазмата и газовите разряди.

Цел на дисертационния труд, основни задачи и методи за изследване

Целта на дисертацията е изследване и оптимизация на модели в областта на физиката на плазмата и по-специално на капацитивни разряди с компютърни симулации. Във връзка с тази цел, в дисертацията са решени следните основни задачи:

1. Разработена е модификация на Монте Карло метода за моделиране на ударите в плазмата, като е направено валидиране на модела чрез сравнение с известни аналитични резултати.
2. Направена е модификация на метода “Частичка в клетка с Монте Карло удари”, която позволява при определени условия свеждането на тримерни модели на капацитивни разряди към едномерни.
3. За пръв път методът “Частичка в клетка с Монте Карло удари” е приложен за моделиране на капацитивни разряди с голямо разстояние между електродите.
4. Разработена е програмна система за изследване на трептения в трептящ кръг с нелинеен капацитет, като тук има възможност и за педагогически приложения.

Научна новост

Направени са подобрения и модификации на съществуващи модели. Моделите са приложени в нови условия. Изследван е нов плазмен източник.

Практическа приложимост

Разработена е програмна система с приложение в обучението на студенти.

Апробация

Резултатите от изследванията в дисертацията са представени в два доклада на International Conference Applications of Mathematics in Engineering and Economics и два доклада на конференцията Дни на физиката.

Публикации

Броят на публикациите по дисертацията е 5, от които 1 статия в списание с импакт фактор, 2 публикации с SJR и 2 доклада в нереферирани списания с научно рецензиране. Една от публикациите е самостоятелна.

Структура и обем на дисертационния труд

Дисертационният труд е в обем от **147** страници, като включва увод, 3 глави за решаване на формулираните основни задачи, списък на основните приноси, списък на публикациите по дисертацията и използвана литература. Цитирани са общо **114** литературни източници, като **97** са на латиница и **12** на кирилица, а останалите са интернет адреси. Работата включва общо **94** фигури и **3** таблици. Номерата на фигурите, формулите и таблиците в автореферата съответстват на тези в дисертационния труд.

II. СЪДЪРЖАНИЕ НА ДИСЕРТАЦИОННИЯ ТРУД

Глава 1. Литературен обзор

Литературният обзор се състои от четири части, в които са разгледани основите на метода за моделиране „Частица в клетка“, основни въпроси за капацитивните разряди и за определяне на функцията на разпределение. В четвъртата част са разгледани някои специфични въпроси, свързани с използваните алгоритми, числени методи и програмно осигуряване.

1.1. Моделиране на газови разряди по метода „Частица в клетка с Монте-Карло удари“

Основните методи за моделиране на газови разряди и плазма са три: модели на отделни частици, кинетични модели и флуидни модели. В Глави 2 и 3 на дисертацията са приложени модели на отделни частици, а именно „Частица в клетка“, като ударите на електроните с атоми са отчетени с Монте Карло метод.

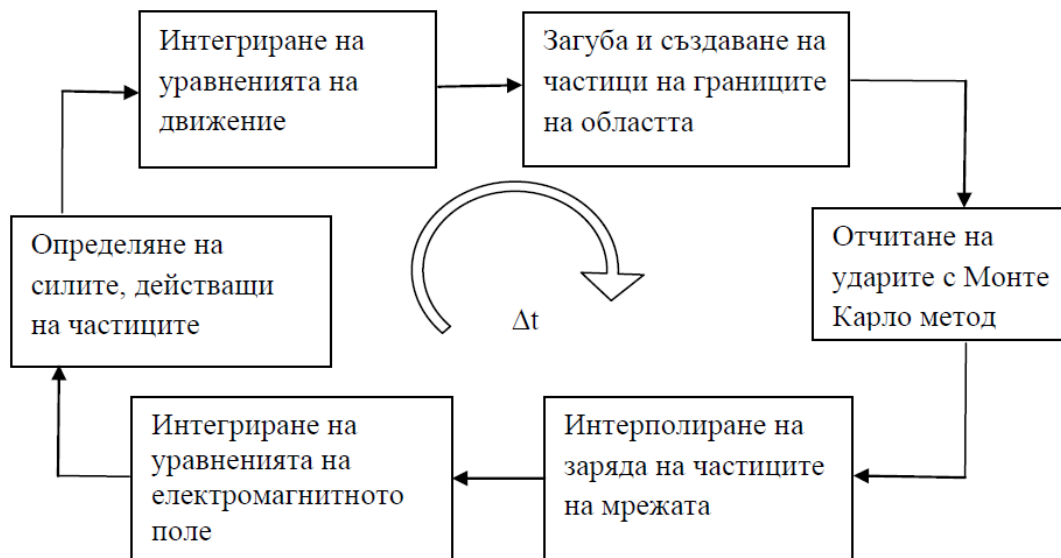
1.1.1. Обща схема

Общата схема на моделите „Частица в клетка“ (Particle in cell, (PIC)) е представена на фигура 1.1. Основната идея е, областта на моделиране да се раздели на голям брой клетки и на ъглите на тези клетки да се разпредели зарядът на намиращите се в клетката частици. След това, знаейки обемната плътност на заряда, се решават уравненията на електромагнитното поле при зададените гранични условия и се пресмятат силите, действащи на всяка заредена частица. Решават се уравненията за движение на частиците в рамките на една стъпка във времето Δt . Отчита се загубата на частиците, напуснали областта на моделиране. Изчисляват се промените на скоростта и енергията на частиците в резултат на удари с други частици, както и създаването им в резултат на йонизация.

Тъй като броят на частиците в плазмата е много голям, в PIC моделите обикновено се изследват само стотици хиляди до милион частици. Те се наричат макрочастици, като се приема, че една макрочастица е представител на голям брой реални частици.

1.1.2. Монте Карло метод за описание на ударите

В тази част е описан Монте-Карло методът за отчитане на ударите електрон-атом и йон-атом в PIC моделите.



Фигура 1.1. Блок схема на PIC модел [1].

Когато частица с енергия w се движи през газ с плътност на атомите n_a , вероятността частицата да се удари за интервал от време Δt е

$$P = 1 - \exp[-\Delta t \nu(w)]$$

където $\nu(w) = \nu \sigma_{sc}(w) n_a$ е общата честота за всички възможни удари за дадена енергия на частицата, σ_{sc} е общото сечение на възможните удари, $\nu = (2w/m)^{1/2}$ е скоростта на частицата, и m е масата на частицата. В симулацията прост начин за опишем дали частицата се удря за интервал от време Δt е да сравним вероятността за удар P със случайно число R ($0 < R < 1$) (удар възниква ако $R < P$). В случай, че частицата може да участва в няколко различни типа удари (еластични, за възбуждане, йонизация), с помощта на случайно число се определя вида на удара, отчитайки сеченията на различните удари за дадената енергия на частицата.

Следващата стъпка в Монте Карло модела е да пресметнем големината и посоката на скоростта на електрона след удара. Промяната в посоката на скоростта на електрона е описана чрез азимутален ъгъл φ и чрез полярен ъгъл θ . Приемаме, че вероятността за отклонение на даден азимутален ъгъл е равномерно разпределена в интервала $[0, 2\pi]$

$$\varphi = 2\pi R_3 \quad (1.5)$$

където R_3 е ново равномерно разпределено случайно число между 0 и 1. Обикновено се приема, че всички електронни разсейвания са изотропни независимо от природата на удара и полярният ъгъл θ може да бъде определен просто от

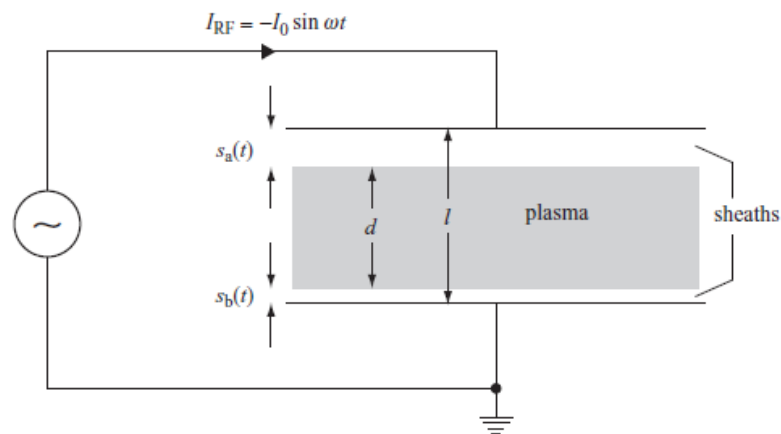
$$\theta = \arccos(1 - 2R_4). \quad (1.6)$$

Освен посоката на скоростта на електрона, ударът променя и неговата енергия.

1.2. Капацитивни разряди

1.2.1. Устройство, хомогенен модел, приложение

Капацитивните разряди се състоят от два успоредни електрода, свързани към радиочестотно (RF) захранване (генератор), обикновено работещ при честота 13.56 MHz (фигура 1.4).

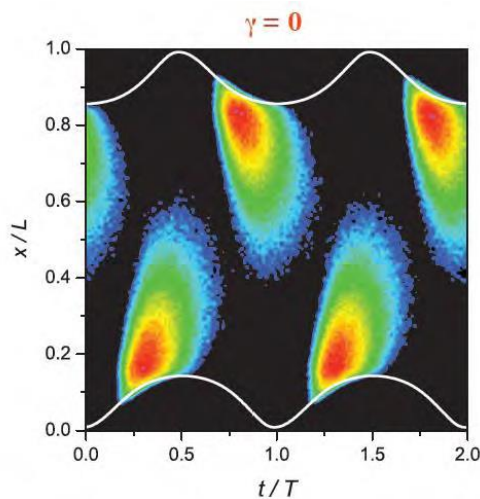


Фигура 1.4. Схема на капацитивен разряд [2].

Във вътрешността на областта между електродите се образува електронеутрална плазма, т.е. концентрацията на положително и отрицателно заредените частици е равна. В близост до електродите има обемно заредени слоеве, дебелината на които варира с честотата на генератора. В аргоновите разряди, разглеждани в дисертацията, зарядът на слоевете е положителен и концентрацията на положителните йони е по-голяма от тази на електроните. Поради голямата си маса, движението на йоните се определя от осредненото електрично поле, докато електроните осцилират с честотата на външното радиочестотно поле.

1.2.2. Механизми за нагряване на плазмата

В литературата се разглеждат два основни механизма за нагряване на плазмата в капацитивните разряди. При умерени налягания доминира обичайното джаулово (омово) нагряване. Разстоянието, изминато от електрона между два удара с атоми е много малко и електричното поле почти не се изменя по траекторията на електрона.



Фигура 1.8. Електронни снопове в кондензаторен разряд. Резултати от PIC модел [3] за два периода на RF полето. Белите линии дават индикация за границите на слоя.

Плътноста на тока в дадена точка е пропорционална на интензитета на електричното поле в тази точка. В този случай се говори за локално или ударно нагряване. При ниско налягане електроните изминават значително разстояние между два удара и електричното поле се изменя по траекторията им. Плътноста на тока в дадена точка зависи от интензитета на електричното поле по цялата траектория на електрона. Нагряването в този случай е нелокално (използват се и термините безударно и стохастично). Възможно е двата начина на нагряване да действат едновременно – безударно в слоя и джаулово в обема на плазмата.

1.3. Определяне на функцията на разпределение в газови разряди

При кинетичните модели функцията на разпределение на електроните по скорости f_e (Electron velocity distribution function, EVDF) се определя, като се решава уравнението на Болцман

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_e + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_e = \left. \frac{\partial f_e}{\partial t} \right|_c \quad (1.28)$$

Ако може да се предположи, че електроните са близо до термодинамично равновесие решението на уравнението на Болцман е Максвелово разпределение.

Едно широко използвано и много полезно опростяване е апроксимацията с два члена, в която развиваме функцията на разпределение на електрони в ред до член от първа степен в отклонението от изотропността, като се разглежда цилиндрична симетрия по продължение на посоката на анизотропията.

$$f_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \approx f_{e0}(\mathbf{r}, v, t) + \frac{\mathbf{v}}{v} \cdot \mathbf{f}_{e1}(\mathbf{r}, v, t) \quad (1.31)$$

Тук f_e е разложена на сума от изотропна част f_{e0} , зависеща само от големината на скоростта и малка анизотропна част f_{e1} , като $f_{e1} \ll f_{e0}$.

От апроксимацията с два члена в случай на еднородна плазма с еднородно постоянно електрично поле за анизотропната и изотропната част се получават два важни резултата. За постоянна честота на еластичните удари, $\nu_m(\nu) = const$, се получава Максвелово разпределение. За постоянно сечение на ударите (модел на твърда сфера), $\sigma_m = const$ (постоянен среден свободен пробег) резултатът е известен като разпределение на Дрювестейн.

Освен функцията на разпределение на електроните по скорости се използва и функцията на разпределение на електроните по енергия E (Electron energy distribution function или EEDF). Видът на тази функция за случая съответно на разпределения на Максвел и Дрювестейн е даден в уравнения (1.35) и (1.36). Индексът M се отнася за Максвелово разпределение, а D за разпределение на Дрювестейн. A_M и A_D са нормировъчни константи, а D е константа, зависеща от интензитета на полето и сечението.

$$f_M(E) = A_M \sqrt{E} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (1.35) \quad f_D(E) = A_D \sqrt{E} \exp\left(-\frac{E^2}{D}\right) \quad (1.36)$$

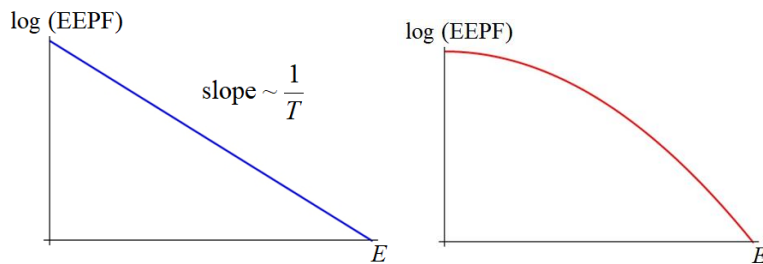
Обикновено е трудно да се определи, доколко близко до Максвелово разпределение е едно разпределение, получено в експеримент или модел. Поради това се въвежда вероятностна функция (Electron energy probability function (EEDF)), дефинирана от:

$$EEDF = \frac{EEDF}{\sqrt{E}} \quad (1.37)$$

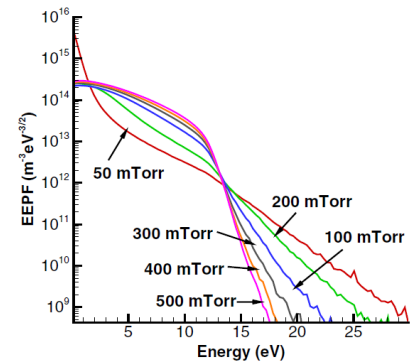
и съответно за разпределение на Максвел и Дрювестейн

$$EEDF = A_M \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (1.38) \quad EEDF = A_D \exp\left(-\frac{E^2}{C}\right) \quad (1.39)$$

Предимството на това представяне е, че в полулогаритмичен мащаб графиката за Масуелово разпределение е права, с наклон определен от температурата (фигура 1.20).



Фигура 1.20. Схематично представяне на EEDF в полулогаритмичен мащаб за разпределение на Максвел (ляво) и Дрювестейн (дясно).



Фигура 1.23. EEDF, получена от PIC-MCC модел на кондензивен разряд [4].

Типичен резултат за EEPF за случая на капацитивен разряд е показан на фигура 1.23. При ниско налягане EEPF е би-Максуелова (bi-Maxwellian), като се състои от два прави участъка, което дава индикации за наличие на електрони с две различни температури. С увеличаване на налягането формата на EEPF става близка до Дрювестейн.

1.4. Алгоритми, числени методи и програмно осигуряване

1.4.1. Генератори на случайни числа

В трета глава на дисертацията е използван генераторът на случайни числа, препоръчан в [5]. В дисертацията е направен кратък преглед на генераторите на случайни числа, следвайки този литературен източник.

1.4.2. Алгоритми за придвижване на частиците

В симулациите на газови разряди и плазма, обикновено за придвижване на частиците се използва методът leapfrog (превеждан на български като „жабешки подскок“ или „прескочи - кобила“). Друг възможен метод е алгоритъма на Верлет (Verlet) [6]. Разликите в двата метода са обсъдени например в моделите представени в [7].

Методът leapfrog пресмята скоростите $\vec{v}$ и положенията $\vec{x}$ на частиците с отместване във време от $\Delta t/2$, т.е., половината от времевата стъпка Δt съгласно

$$\vec{v}_{k+1/2} = \vec{v}_{k-1/2} + \vec{a}_k \Delta t \quad (1.45)$$

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \vec{v}_{k+1/2} \Delta t \quad (1.46)$$

Тук $\vec{v}_j$ са скоростите в момент $t_j = t_0 + j\Delta t$ (като $j = k - 1/2, k+1/2$) и положенията $\vec{x}_j$ (като $j = k, k+1$) с начално време t_0 , съответно $\vec{a}_k = q\vec{E}_k/m$ е ускорението на частицата със заряд q , маса m , а с $\vec{E}_k$ е означено електричното поле, действащо на частицата в момент t_k .

При метода на Verlet скоростта и положението се пресмятат в един и същ момент t_{k+1} съгласно

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \vec{v}_k \Delta t + \frac{1}{2} \vec{a}_k \Delta t^2 \quad (1.47)$$

$$\vec{v}_{k+1} = \vec{v}_k + \frac{1}{2} (\vec{a}_k + \vec{a}_{k+1}) \Delta t \quad (1.48)$$

където първо се определя положението и после скоростта.

1.4.3. Примери за програмна реализация

В тази част са разгледани някои въпроси, свързани с реализацията на разгледаните по-горе алгоритми за PIC/MonteCarlo в код на C++ [8].

Глава 2. PIC/Монте Карло алгоритъм за моделиране на капацитивни разряди

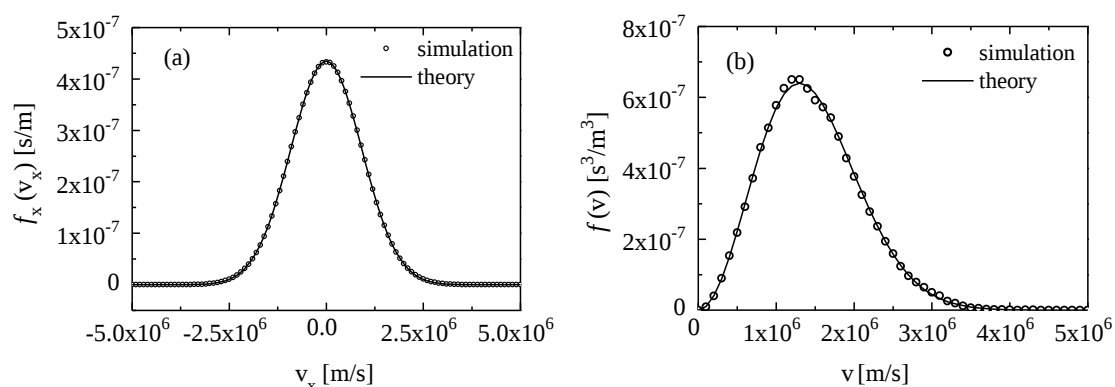
В тази глава е разгледано приложението на общата схема на PIC/Монте Карло метода за моделиране на газови разряди от Глава 1 в конкретните задачи, решавани в дисертацията. Обърнато е внимание на направените модификации на традиционните алгоритми.

2.1. Монте Карло алгоритъм за определяне на функцията на разпределение с изследване на движението на един електрон

Разработена е модификация на Монте Карло метода за моделиране на ударите в плазмата, като се изследва движението на един електрон достатъчно дълго време и функцията на разпределение се определя от данните при всеки удар. При традиционния подход се изследва движението на голям брой електрони и функцията на разпределение на електроните по скорости се определя в даден момент. В модела електричното поле се счита за дадено, т.е. ролята на обемния заряд, свързан с движението и разположението на частиците в плазмата се пренебрегва.

Целта е да се докаже приложимостта на метода чрез сравнение със случаи, за които има аналитично решение на уравнението на Болцман. Работата е публикувана в [A4].

Валидирането на модела е направено чрез сравняване с резултати от кинетичната теория при решаване на уравнението на Болцман при постоянна честота ($\nu = \text{const.}$) и постоянно сечение ($\sigma = \text{const.}$) на еластичните удари електрон-атом.



Фигура 2.4. Функции на разпределение по една от компонентите на скоростта (a) и по големината на скоростта (b), получени от кинетичната теория (линия) и от числените симулации (символи) при постоянна честота на ударите.

На фигура 2.4 се вижда много доброто съвпадение на резултатите от аналитичното

решение с компютърната симулация. Подобно добро съвпадение се наблюдава и в другия тестов случай на постоянно сечение на ударите. Правени са тестове и с използване на реални сечения за аргон, където също се получават очакваните резултати.

В заключение, резултатите в тази част доказват приложимостта на метода за получаване на функцията на разпределение. Натрупан е опит за оптималните стойности на задаваните в симулацията параметри. Предимство на метода е по-малкото време, необходимо за преходния период в сравнение със симулациите с много електрони.

2.2. PIC/Монте Карло алгоритъм за модел на капацитивен разряд

В случаите, когато обемният заряд играе важна роля, само Монте Карло модел не е достатъчен. Затова, за отчитане на обемния заряд тук е приложен PIC модел.

Типично, моделите на капацитивни разряди са едномерни, като се пренебрегва радиалното движение на частиците. В тази глава целта ни е разработване на модел на капацитивен разряд с малък радиус, при който е необходимо да се отчитат и радиалните загуби на частици. Стриктният подход към решаването на тази задача изисква 3D модел, който обаче поставя много високи изисквания към използваната компютърна техника. Затова в дисертацията е направена модификация на метода: радиалните загуби на частици се третират подобно на удари и моделът е сведен до едномерен. Основните идеи са следните: 1) Работим с радиално осреднена стойност на концентрацията на частици; 2) Оценяват се радиалните загуби при предположение за Беселов радиален профил и амбиполарна дифузия за една стъпка във времето; 3) На случаен принцип от симулацията се премахват съответния брой частици.

Разработеният модел е едномерен в пространството и тримерен в пространството на скоростите, т.е. само x -координатите на заредените частици са пресметнати. Правилното описание на кинетичната енергия на частиците изисква пресмятане на трите компоненти на скоростта, защото кинетичната енергия е споделена между всички степени на свобода.

Блок-схемата на симулацията (в нейния паралелен вариант) е показана в следващата секция на фигура 2.16.

Симулацията започва с относително малък брой на суперчастиците с Максвелово разпределение по скорости с температура 2 eV за електроните и 300 K за йоните. Броят на суперчастиците в симулацията е няколко хиляди. След достигане на квази-стационарно решение зарядът и масата на всяка суперчастица се разделя на 2. Следващото изпълнение на програмата започва с приблизително удвоен брой на суперчастиците със скорости и пространствено разпределение, получени при предишното изпълнение. Процедурата се повтаря докато плазмените параметри престанат да зависят от броя на суперчастиците.

Стъпката във времето в нашата симулация е $1/1000$ от периода на полето и едно типично изпълнение на кода има от 200 000 до 1 000 000 стъпки, т.е. от 200 до 1000 периода.

След достигане на крайното решение, кодът се изпълнява за още 10 периода и осреднените по периода резултати са представени в следващия глава.

2.3. Паралелизация на кода

Времето, необходимо за получаване на резултатите, може да бъде съкратено значително при паралелизиране на кода, чрез изчисления с използване на паралелен програмен модел, изпълнен върху високопроизводителна компютърна платформа със споделена памет.

Необходимостта от паралелни изчисления възниква, когато е необходимо [9]:

- *Ускоряване на изпълнението*: проблем с даден размер да се решава N пъти по-бързо от N процесора;
- *Мащабиране*: при N -кратно увеличаване на проблема времето за решаването му от N процесора да остава същото.

2.3.1. Паралелно програмиране

Съществуват три модела за паралелно програмиране: 1) паралелно програмиране с обща памет OpenMP. 2) Паралелно програмиране с обмен на съобщения MPI. 3) Хибридни модели.

В дисертацията е използван моделът паралелно програмиране с обща памет. Моделът с обща памет представлява абстракция на централизиран симетричен мултипроцесор (SMP). Апаратните ресурси се разглеждат като множество процесори, всеки от които има еднакъв достъп до общата памет. Процесорите си взаимодействат и се синхронизират чрез обща памет.

2.3.2. Паралелен програмен модел за PIC/Монте Карло симулация

За PIC/Монте Карло симулация е предложен паралелен програмен модел за високопроизводителна компютърна система с обща памет. Използвани са специфични средства за имплементиране на паралелизмите: компилатори, компилаторни директиви, библиотечни функции, приложни интерфейси [9]. Използван е DevC++, като IDE за MinGW [10], библиотечни функции [11], приложен програмен интерфейс OpenMP [11].

Блок: начални положения и скорости на частиците: Тук е направена паралелизация на ниво участъци. Двата цикъла (за електроните и йоните) се изпълняват от две паралелни секции.



Фигура 2.16. Блок-схема на паралелен програмен модел за PIC/Монте Карло симулацията в дисертацията.

Блок: интегриране уравненията на движение: В този паралелен блок се използва прагма `#pragma omp for` с планирано използване на нишките, тип на планиране – динамичен с размер на дяла за планиране 1. Това се налага, тъй като на следващата стъпка във времето от главния цикъл не се знае какъв брой частици са останали в областта на моделиране. В паралелния участък се използва също и *private* клауза. Паралелизирани са два цикъла, в които се интегрират уравненията на движение на електроните и йоните.

Блок: пресмятане на средна кинетична енергия на частиците В края на главния цикъл има два цикъла по брой частици, в които се изчисляват скоростите, повдигнати на квадрат на всички електрони в единия цикъл и на всички йони в другия цикъл. Изчисляването е на базата на компонентите на скоростта, които се променят на всяка стъпка във времето. Тук също се използват `#pragma omp for` със същия тип планиране и размер на дяла, като в предния блок. Използва се също и *private* клауза за брояча и *reduction* клауза за операция събиране в обща променлива. С тази стойност на променливата след края на паралелния участък се изчислява средната кинетична енергия на електроните, съответно йоните на всяка стъпка във времето.

2.3.3. Експериментални резултати

Ускорение. Ускорението е параметър, който показва относителните предимства на паралелното решаване на даден проблем. Ускорението при n – процесорна система се определя като отношение на времето за последователно изпълнение T_s към времето за паралелното изпълнение T_{par} на един и същ проблем.

$$S_n = \frac{T_s}{T_{par}}$$

Ефективност. Ефективността на паралелната обработка се определя като отношение на ускорението към броя на процесорите, участващи в паралелното решаване на проблема:

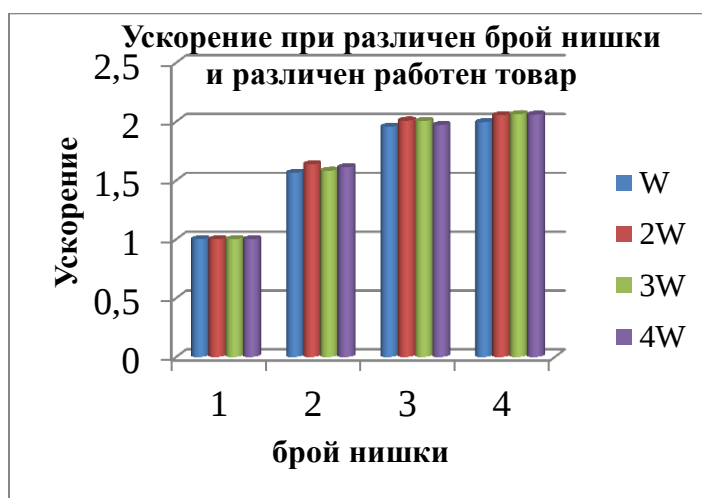
$$E_n = \frac{S_n}{n}$$

Ефективността представлява мярка за полезното време, изразходвано от процесорите за изчисления.

За експериментална оценка на създадения приложен програмен модел е използвана компютърна архитектура с 4 процесора intel без hyperthreading (HT) многонишкова технология, така че броя на процесорите е равен на броя на нишките. Представените резултати са за ускорението при различен брой процесори и различен работен товар, за ефективността при различен брой процесори и различен работен товар и за мащабиране.

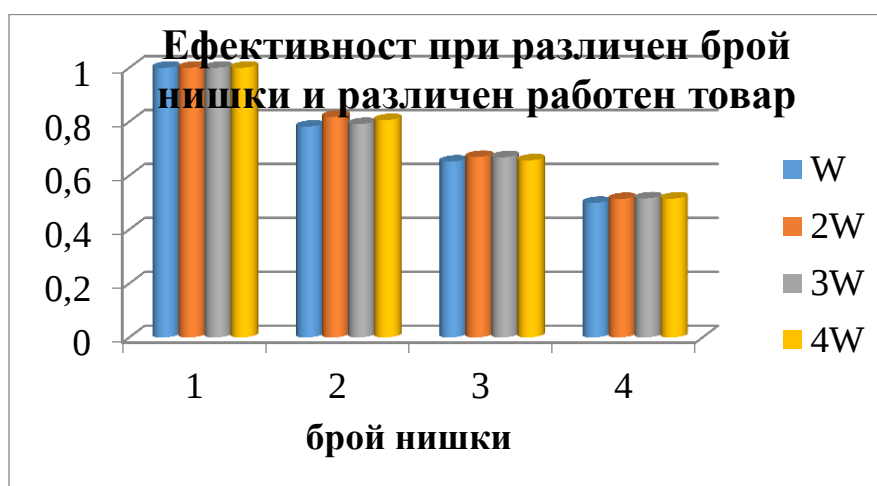
При даден брой нишки времето за изпълнение е пропорционално на работния товар. Това означава, че скоростта на изчисленията е еднаква при дадения брой нишки, ускорението също. При даден работен товар времето за паралелно изпълнение зависи от ефективността при дадения брой нишки. Например при 4 нишки времето намалява двойно спрямо времето за последователно изпълнение – 1 нишка. Това означава, че скоростта е различна при даден работен товар, ускорението също.

Ако приемем, че броя на частиците не се изменя значително за 12 000 стъпки, можем да увеличаваме работния товар чрез увеличаване на стъпките. Опитът показва, че времето нараства линейно. Ако се увеличат броя на частиците два пъти и броя на стъпките на главния цикъл два пъти, то времето за изпълнение нараства 4 пъти.



Фигура 2.17. Ускорение в зависимост от броя на нишките и работния товар.

Вижда се, че ускорението е приблизително еднакво при различен товар и даден брой нишки.



Фигура 2.18. Ефективност в зависимост от броя на нишките.

Ефективността е приблизително еднаква при различен работен товар и даден брой нишки и намалява линейно с увеличаване на броя на нишките.

Глава 3. Моделиране на капацитивни разряди с голямо разстояние между електродите

Една нова тенденция в разработването на плазмени източници е създаването на матрични източници, състоящи се от голям брой разряди с малък радиус [12]. При тях разстоянието между електродите може да бъде значително по-голямо от диаметъра на електрода. При експерименталното изследване на единичен елемент на такъв матричен плазмен източник са наблюдавани някои нови ефекти, свързани с нагряването в обема на плазмата [13]. Мотивацията за изследването в Глава 3 е обясняване на тези експериментални резултати. Изследването обаче надхвърля тази рамка и е насочено и към по-фундаменталния въпрос за механизмите за нагряване на плазмата в капацитивни разряди.

3.1. Резултати за случай на безкраен радиус на разряда

3.1.1. Зависимост от налягането при малко разстояние между електродите.

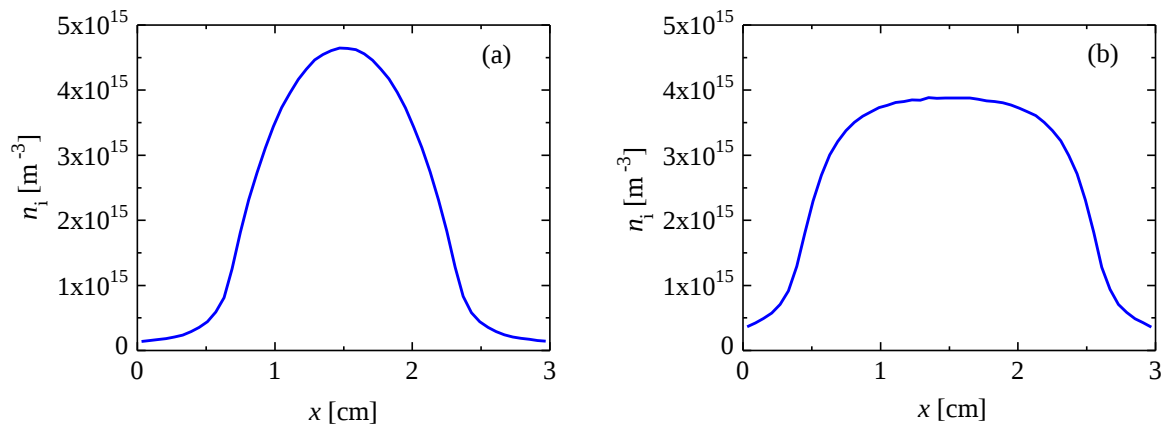
В този раздел са представени резултати за две стойности на налягането на неутралния газ и фиксирани стойности на другите параметри. Разстоянието между електродите е $L = 3$ cm, т.е. тук е разгледан случай на малко разстояние между електродите, като получените резултати дават база за сравнение с резултатите в следващите раздели. Изборът на налягания – 10 Pa и 40 Pa – позволява да се разграничат два различни типа на поведение на разряда.

На фигура 3.1 са показани резултати за изменението на йонната концентрация по оста на разряда. Ясно се разграничават областта на вътрешността на плазмата и слоевете до стените, които заемат около 0.6 cm от всяка стена. С нарастване на налягането профилът на концентрацията във вътрешността на плазмата се изменя от синусов тип до плосък профил.

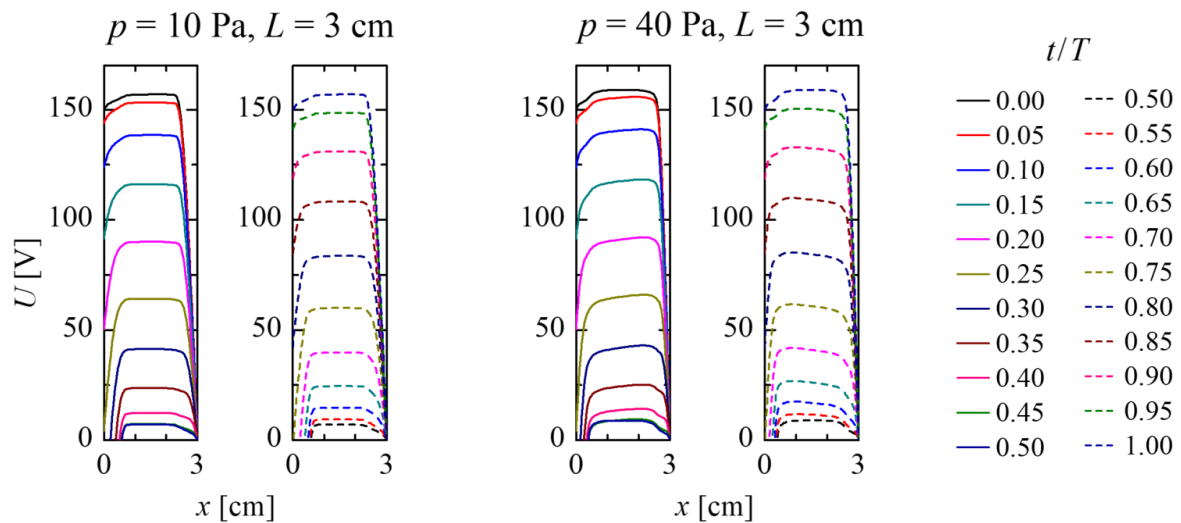
Допълнителна информация за процесите в плазмата е предоставена от динамиката на потенциала на фигура 3.2. Напрежението на левия електрод се променя по закона $U = U_0 \cos \omega t$, като $U_0 = 150$ V и $\omega = 2\pi / T$ е кръговата честота и това определя поведението на потенциала в плазмата. Представянето е ограничено само до положителните стойности на потенциала.

В случая при $p = 10$ Pa, $L = 3$ cm потенциалът в обема на плазмата е почти постоянен, т.е. електричното поле $E \approx 0$. Според основните свойства на капацитивните разряди, скоростта на електроните в обема на плазмата се променя по посока с промяната на

поляритета на напрежението на активния електрод, за да компенсира външното електрично поле. Потокът на електрони обаче се създава от различни механизми в двата случая на фигура 3.2. При ниско налягане и малко разстояние между електродите, средният свободен пробег на заредените частици е голям и електроните, ускорени в разширяващите се слоеве, пресичат целия обем на плазмата, т.е. те се движат в централната част на разряда с определена скорост дори при нулево локално електрично поле.



Фигура 3.1. Концентрация на йоните за разстояние между електродите 3 cm и налягане 10 Pa (a) и 40 Pa (b).



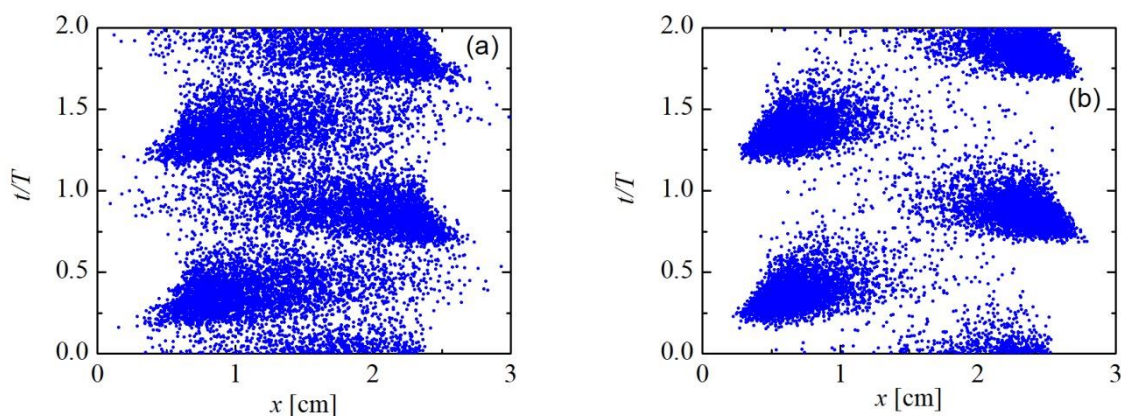
Фигура 3.2. Профили на потенциала за налягания и разстояния между електродите, както са дадени на фигурата. Интервалът между профилите на фигурата е $T/20$. Лявата фигура от всяка двойка съответства на първия полупериод, когато напрежението на левия електрод намалява. Десните фигури са за втория полупериод, когато напрежението нараства.

Плазмената проводимост в този случай е нелокална: токът при дадено положение зависи от електричното поле не само при тази позиция, но и от полето по продължение на целите траектории на електроните между два удара. При по-високото налягане средният

свободен пробег намалява и електроните от слоевете не могат да навлязат навътре в обема на плазмата. Дрейфовата скорост там е резултат от локалното електрично поле.

Важна роля играе също съпротивлението в обема на плазмата, което за единица напречно сечение може да се даде в опростена форма като $R = l / \sigma$ (l е разстоянието между слоевете и σ е проводимостта на плазмата). При ниско налягане и малка дължина на разряда, проводимостта на плазмата σ е висока заради ниската честота на ударите електрони-неутрали и високата концентрация на електрони. Дължината на обема на плазмата е малка и съпротивлението ѝ също е малко. При по-високо налягане честотата на ударите електрони-неутрали нараства, което води до по-ниска σ и високо съпротивление. В резултат на това падът на потенциала в обема на плазмата нараства, а оттам нараства и електричното поле.

Електричното поле в обема на плазмата е важно за процесите на пренос, но високоенергетичните електрони се формират главно в разширяващите се слоеве. Възникващите при това електронни снопове се виждат ясно с по-голямата плътност от точки, представляващи актове на йонизация (Фигура 3.8). Дължината на сноповете е около 2.5 cm при 10 Pa и около 1.5 cm при 40 Pa, определена не само от налягането на неутралния газ, но също и от напрежението. Отново се вижда, че при $p = 10$ Pa сноповете пресичат цялото плазмено ядро, докато при $p = 40$ Pa енергията на електроните е разсеяна близо до пристенните слоеве и в централната част на разряда йонизацията е много по-слаба.

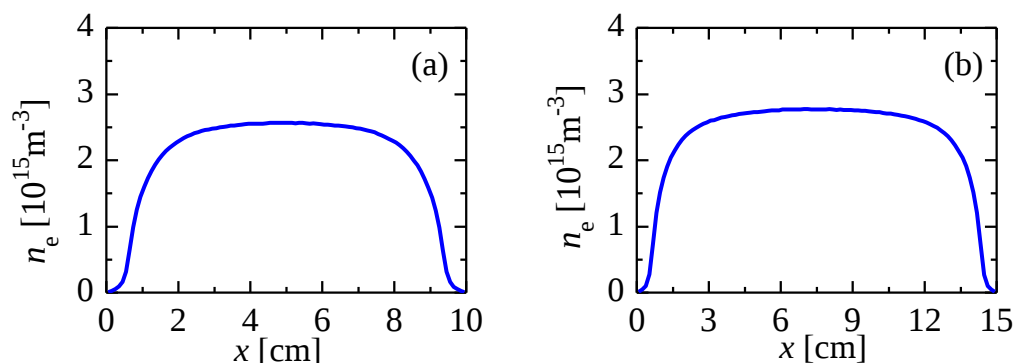


Фигура 3.8. Пространствено – времеви графики на актовете на йонизация за разстояние между електродите 3 cm и налягане 10 Pa (a) и 40 Pa (b) за два периода T на ВЧ поле.

3.1.2. Роля на разстоянието между електродите

При увеличаване на разстоянието между електродите, профилът на плазмената плътност става по-плосък (фигура 3.10).

Резултатите за потенциала също показват градиент в обема на плазмата и следователно различно от нула електрично поле. При ниско налягане и голяма дължина на разряда средният свободен пробег на заредените частици е голям, но недостатъчен за навлизане на електроните от слоевете в центъра на разряда. В този случай движението на електроните във вътрешността на плазмата, подобно на случая с по-високото налягане, се дължи на електричното поле в тази област.

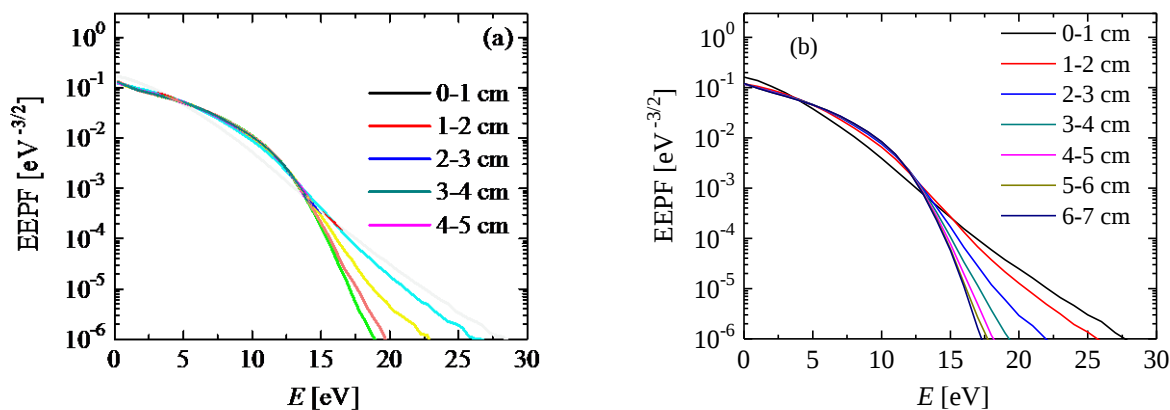


Фигура 3.10. Профили на концентрацията на електрони за $p = 10$ Pa и разстояние 10 cm (a) и 15 cm (b).

Разсъждавайки в термините на съпротивление на разряда, при дълъг разряд и ниско налягане σ е висока, но l също е голямо и съпротивлението нараства.

Увеличаването на разстоянието между електродите влияе и на резултатите за EEPF. Промяната на EEPF по оста на разряда започва от Максвелово близо до електродите, до Дрювестейн в центъра на разряда (фигура 3.13). В този случай, центърът на разряда е достатъчно далеч от електродите и електроните, ускорени в слоевете не могат да го достигнат. Функцията EEPF се формира главно от локалното електрично поле. Изменението на EEPF по оста на капацитивни разряди е експериментално наблюдавано от Zhu и колектив в [14], показано на фигура 1.28 в Глава 1 на дисертацията.

По-ниската концентрация на високоенергетични електрони в централната част на разряда води до много по-ниска йонизация там. Дължината на сноповете е голяма, но заради по-голямото разстояние между електродите, високоенергетичните електрони не могат да достигнат централната част на разряда.

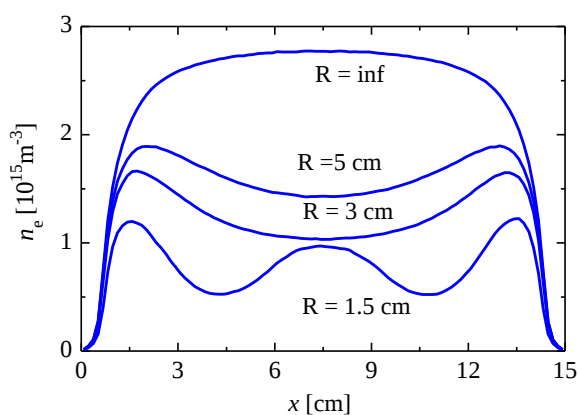


Фигура 3.13. Изменение на EEPF по дължината на разряда при налягане на газа 10 Pa и разстояние между електродите 10 cm (a) и 15 cm (b).

3.2. Роля на радиуса на разряда

В този раздел се отчитат и радиалните загуби на частици. Представените резултати са за налягане $p = 10$ Pa. В дисертацията първо е представен прост анализ, основан на уравнението на непрекъснатост.

В случая на краен радиус, увеличената загуба на частици (дължаща се на радиалната амбиполарна дифузия в модела) води до по-ниска концентрация на електрони (фигура 3.17). За $R = 5$ cm и $R = 3$ cm в близост до границата плазма – слой йонизацията е доминантен процес. В основната част на обема на плазмата преобладават радиалните



Фигура 3.17. Профили на осреднени за един ВЧ период концентрации на електрони за $p = 10$ Pa и различен радиус на разряда.

загуби. Това означава, че новосъздадените заредени частици в обема на плазмата не могат да компенсират радиалните загуби и се появява минимум на концентрацията на електрони в центъра на разряда. Разрядът там се поддържа главно от надлъжни потоци от границата плазма – слой.

Ново поведение се наблюдава при много малък радиус ($R = 1.5$ cm на фигура 3.17). Заради ниската

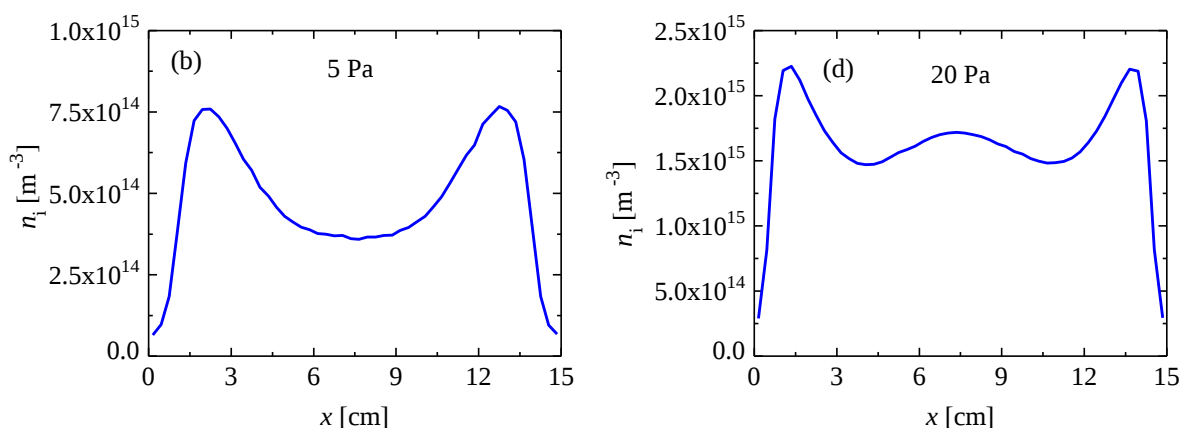
концентрация на електрони, причинена от големите радиални загуби, проводимостта на плазмата намалява, съпротивлението в обема на плазмата и падът на напрежението през него нарастват и електрично поле в центъра на разряда нараства. При $R = 1.5$ cm полето е

достатъчно силно за да причини значителна йонизация, която е по-голяма от радиалните загуби и в центъра на разряда се появява локален максимум.

3.3. Роля на налягането

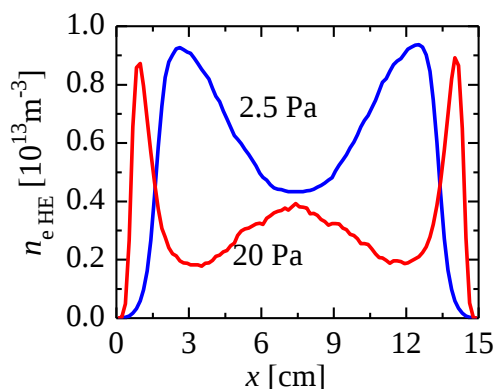
Както бе показано в предната част, плътността на плазмата в разряд с краен радиус е по-ниска поради допълнителни загуби на заредени частици на страничната стена. С увеличаване на налягането концентрацията на заредените частици в газовите разряди обикновено нараства. По-високото налягане води до по-нисък коефициент на амбиполярна дифузия и по-ниски загуби на страничната стена. Повишаването на концентрацията на заредени частици с увеличаване на налягането се вижда добре на фигура 3.20.

Двата вида профили на концентрацията на електрони, които бяха обсъдени в предишния раздел се наблюдават и тук. При по-ниски налягания и ниска честота на ударите електрони-неутрали проводимостта на плазмата е висока и електричното поле в обема на плазмата е ниско. Радиалните загуби на частици са високи и йонизацията не може да ги компенсира. Формира се минимум в центъра на разряда. При по-високо налягане проводимостта на плазмата намалява, което води до увеличаване на пада на напрежение в обема на плазмата и на електричното поле там. Йонизацията в обема на плазмата заедно с намалените радиални загуби причиняват локален максимум в центъра на разряда.

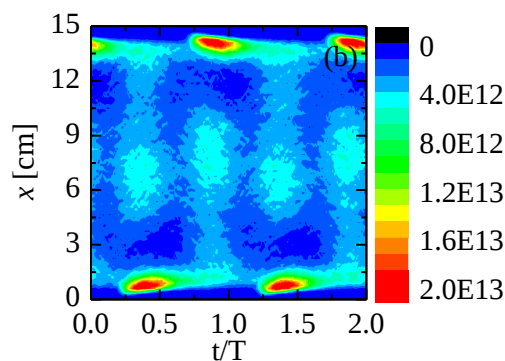


Фигура 3.20. Профили на йонната концентрация за радиус 2 cm и налягане 5 Pa(b) и 20 Pa(d).

С увеличаване на налягането подвижността на електроните намалява и електронните снопове, ускорени в разширяващите се слоеве не проникват толкова навътре в плазмата. Това добре се вижда от резултатите на фигура 3.23 и 3.24 за концентрацията на високоенергетични електрони. Скоростта на сноповете също намалява с налягането.



Фигура 3.23. Профили на осреднената по време концентрация на високо-енергетични електрони при две наляганията.



Фигура 3.24. Пространствено – времеви графики за концентрацията на високо-енергетичните електрони при $p = 20$ Pa.

Резултатите на фигури 3.23 и 3.24 са потвърдени и от експериментални резултати (които не са част от работата по дисертацията).

Типичните за капацитивни разряди при ниско налягане електронни снопове, ускорени в разширяващите се слоеве веднъж на ВЧ период от всеки електрод са получени в модела. При по-високо налягане сноповете все още съществуват, но като добавка там има втори механизъм на нагряване в централната част на разряда. Тъй като промяната на електричното поле в разряда е от вид $E \sim \cos \omega t$ енергията на електроните се изменя като $W \sim \cos^2 \omega t$ и в пространствено – времевите графики трябва да се виждат два максимума за период. Следователно, максимумите в централната част на разряда на фигура 3.24 (b) е резултат от електричното поле в обема на плазмата.

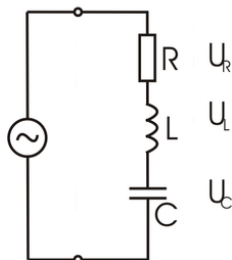
В заключение, в тази Глава за пръв път PIC/Монте Карло модел е приложен за изследване на капацитивни разряди с голямо разстояние между електродите. На качествено ниво резултатите от модела се потвърждават от резултати от експеримент, което доказва валидността на направените модификации в алгоритъма. За пръв път в модел е изследвано изменението на функцията на разпределение по дължината на капацитивен разряд.

По отношение на физичните механизми за поддържане на капацитивни разряди за пръв път е установено, че в дълъг разряд действат едновременно два механизма за нагряване на плазмата: стохастично до електродите и джаулово в обема.

Резултатите от Глава 3 са публикувани в два доклада на AMEE'2018 и една статия в списанието с импакт фактор Journal of Plasma Physics.

Глава 4. Изследване на електромагнитни трептения във верига с нелинеен капацитет

Цялата електрическа верига на капацитивен разряд може да се представи като трептящ кръг с нелинейни елементи. Във връзка с това в Глава 4 се поставят две цели:



Фигура 4.1.

Принудени трептения в последователен трептящ кръг.

Разработване на програмна система за изследване на трептения в трептящ кръг с нелинейни елементи и разработване на програмна система за обучение по физика за лабораторно упражнение с електрически трептящ кръг.

4.1. Програмна система за изследване на трептения в трептящ кръг с нелинейни елементи

4.1.1. Основни уравнения

В разработения модел се приема, че зависимостта на напрежението върху кондензатора U_C от заряда е от типа

$$U_C(q) = \frac{q}{C_0} (1 + \gamma_0 q^2) \quad (4.2)$$

като γ_0 характеризира степента на нелинейност. Такъв тип нелинейна зависимост е предложена в [15].

Прилагаме закона на Кирхоф, сведен до система от диференциални уравнения:

$$\frac{dI}{dt} = -\frac{q}{LC_0} (1 + \gamma_0 q^2) - \frac{IR}{L} + U_m \cos(\omega t) \quad \frac{dq}{dt} = I \quad (4.3)$$

която се решава числено при следните начални условия: начален ток I равен на нула, начален заряд q нула. Системата се решава за интервала време от $t_1=0$ до t_2 .

4.1.2. Програмна реализация

Средата за разработка Matlab GUIDE, която автоматично генерира .m файл, осигуряващ код за инициализиране на графичния интерфейс (GUI) и съдържа форма.

В процеса на разработване на приложението се използват и двата файла .m и .fig. След изработване на приложението и тестването му, може да се получи изпълним файл с компилатора на MATLAB.

Функционалност на средата

Компоненти

Във формата са добавени няколко обекта, някои от които са: Slider , Edit Text, RadioButton, Pop-up menu, Axes. Свързването на данни към графиката става чрез handle - идентификатор на обекта.

Събития Create function, Callback function, SelectionChangeFunction и други

Диалогови прозорци errordlg, warndlg и други.

Класове

Matlab поддържа два вида класове: по стойност и handle. Конструкторът на value class връща обект, на който се създават копия при предефиниране. Конструкторът на handle клас връща handle обект, който е препратка към създадения обект, без да се създава копие на обекта. Поведението за връзка на handles дава възможност на класове да поддържат черти като събития, динамични свойства дори когато функцията не е в обхвата на кода.

Тук handle е използван за обновяване на формата след всяко натискане на бутон, за индиректно извикване на функции, за подаване на входни параметри на функцията, с която се решава диференциалното уравнение, за изчертаване на графики след всяка промяна.

Вградени функции – embedded functions

Математически функции

Системата от уравнения (4.3) има аналитично решение само в линейния случай, т.е. при $y_0 = 0$. В общия случай е възможно получаването само на числено решение. Затова е използвана функцията ode45, която по метода на Рунге-Кута [16] интегрира системата от диференциални уравнения при начални условия $y_0(1)$, $y_0(2)$ [17].

С получените стойности за t , q , I от численото решение на системата се построяват графики $q(t)$, $I(t)$. Изчислява се $U_L = L \frac{dI}{dt}$ и се построява графиката $U_L(t)$. Входни параметри в системата са параметрите на трептящия кръг (индуктивност L , капацитет C и съпротивление R), амплитудата и честотата на генератора се задават с графичен обект slider bar, в който се задава диапазон от стойности. Първоначално се избира вида на задачата. Като пример за нелинейност е изследван случай, в който напрежението на кондензатора зависи не само от първата, но и от третата степен на заряда му. Получените резултати се представят графично в обект axes. При всяка промяна на параметри формата се обновява.

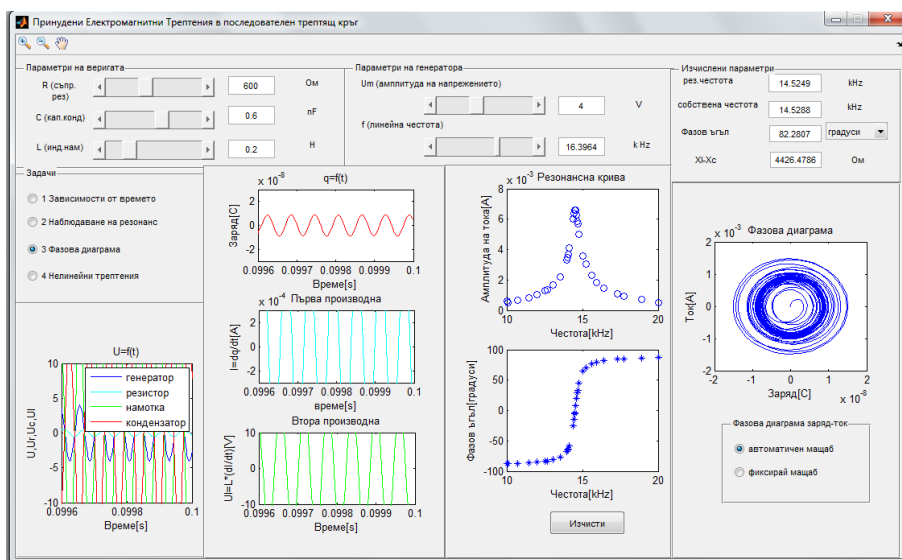
Приложението може да изпълнява следните задачи:

За линейни трептения: Вариране на параметрите на веригата и генератора; Изчертаване времеви графики; Изчертаване на резонансни криви; Изчертаване на фазови диаграми.

За нелинейните трептения: Вариране на параметрите на веригата и генератора; Изчертаване на $U_C=f(t)$ в линеен и нелинеен случай; Изчертаване на фазова диаграма.

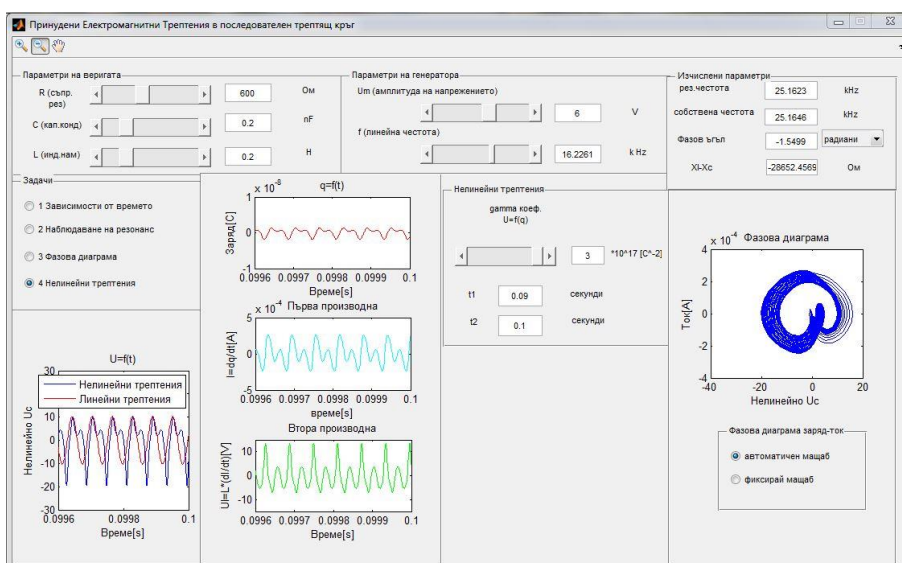
4.1.3. Примерни резултати

На фигура 4.5 е показан графичният интерфейс на програмата за симулации на принудени трептения. Решават се 4 типа задачи: **Задача 1.** Зависимости от времето; **Задача 2.** Наблюдаване на резонанс; **Задача 3.** Фазова диаграма.



Фигура 4.5. Линеини трептения.

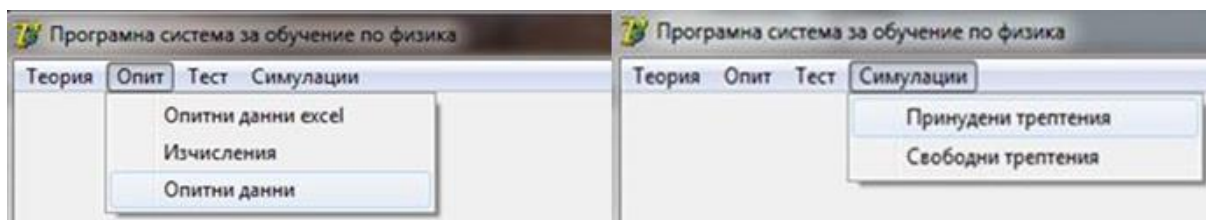
Задача 4. Нелинейни трептения Задава се параметърът, характеризиращ нелинейността γ , който може да се променя в граници $(0 - 3)10^{17} [1/C^2]$. Изменението на стойността на γ става със слайдер. Забелязва се отклонението от синусоидалната форма на напрежението на кондензатора за нелинеен случай в сравнение с линеен случай ($\gamma = 0$).



Фигура 4.6. Графичен интерфейс на програмата за изследване на принудени нелинейни електромагнитни трептения в последователен електричен трептящ кръг.

4.2. Програмна система за обучение по физика

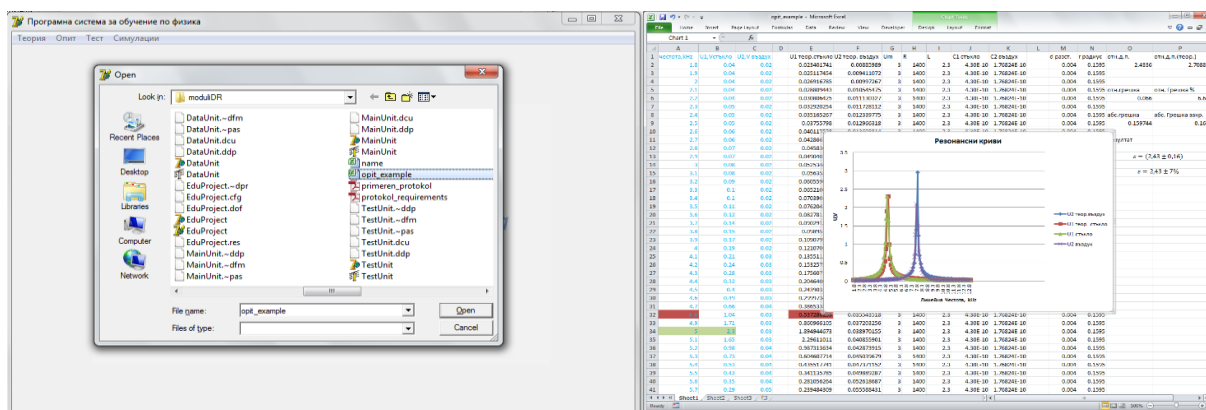
По втората цел с насоченост към обучението по физика, е разработена система за подпомагане на студентите при изработване на лабораторно упражнение с електрически трептящ кръг. Програмата е реализирана на Delphi7.



Фигура 4.8. Начално меню.

Модул MainUnit.pas Първоначално трябва да се отвори подменю Опитни данни Excel. Студентите могат да се запознаят с примерни опитни данни (в синьо), които са снети предварително и резултати, които се получават за относителната диелектрична проникваемост. Във файла са показани и изчислени по формула данни за напрежението върху резистора, което дава възможност за сравнение с резултатите от експеримента. Използвани компоненти Image, OpenFileDialog.

Задачите, които трябва да изпълнява приложението са няколко: 1) Подготовка за упражнението и запознаване с теорията **модул TheoryUnit.pas**; 2) Възможност за въвеждане на опитни данни, графично представяне на данните и записването им **модул DataUnit.pas**; 3) Извършване на изчисления и записването им **Модул ComputationUnit.pas**; 4) Тест за самопроверка **Модул TestUnit.pas**



Фигура 4.9. Примерни опитни данни.

Използвани са стандартни компоненти, добавени са библиотека с компоненти TeeChart за Delphi (VCL TeeChart). Използвана е технология OLE (Object Linking and Embedding „Свързване и вграждане на обекти“), разработена от Майкрософт, която позволява вмъкването и свързването на документи и други обекти, създадени

първоначално с друго приложение [18]. С помощта на процедури и функции е реализирана следната функционалност:

За модул Теория: Влагане на pdf файл в компонент AcroPdf; Записване на текст от компонент Мемо във WordFile.docx по параграфи. Използвани компоненти Мемо, AcroPdf.

За модул изчисления: Въвеждане на опитни данни от преки измервания; Възможност за валидиране на данните; Проверка дали всички данни се въведени; Изчисления, закръгляване и записване на необходимите данни в Excel файл (.xlsx). Използвани компоненти RadioGroup, MaskEdit, Image, Button, Edit и други

За модул опитни данни: Визуализиране на предварително измерени опитни данни в широк диапазон (таблица AdoTable) с примерни данни и графика, които не могат да се коригират. Данните се намират в .mdb; Графично представяне на началните данни; Прехвърляне на данните в StringGrid , откъдето да могат да бъдат редактирани, съобразно опитните данни на студента – необходима е корекция само на част от данните; Запис на данните в XlsFile.xlsx; Експорт на графиката – опитни данни. Графиката се експортира до работна директория като .bmp или в клипборда. Някои използвани компоненти са StringGrid, DataSource, ADOTable, Series, Label, DBChart

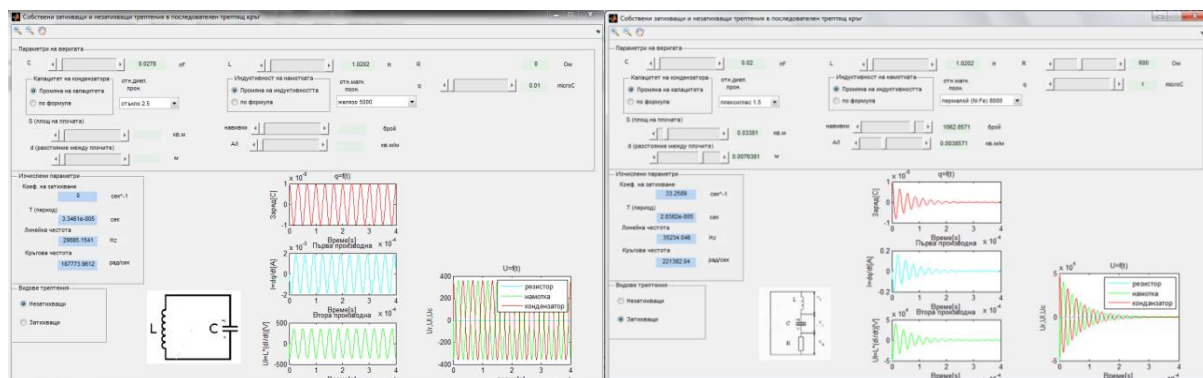
За модул Тест: Влагане на тест 1.pdf в компонент във формата; Възможност за въвеждане на отговори на теста , чрез натискане на клавиш 1; Забрана за въвеждане на други символи, или повече от един символ в стрингово поле; Възможност за корекция на вече даден отговор; Проверка дали са въведени отговори на всички въпроси; Оценка на теста; Избор на друг тест за самопроверка на случаен принцип и изчистване на формата.

Използвани компоненти StringGrid, AcroPDF, Label, Button

Симулация на свободни затихващи и незатихващи трептения

Този модул е реализиран на Matlab, подобно на модул Принудени трептения. Уравненията, решавани в 4.1.1, са модифицирани, като е премахната нелинейната зависимост на напрежението на кондензатора от заряда.

Модулът реализира следната функционалност: Вариране на параметри на веригата при зареден кондензатор; Вариране на параметри, от които по формула се изчисляват капацитета на кондензатора и индуктивността (показване на зависимости); Зависимост между величините период и честота, честота и кръгова честота и др.



Фигура 4.17. Графики на незатихващи (ляво) и затихващи (дясно) трептения.

По всяко време може да се превключи видът на трептенията (затихващи или незатихващи), което позволява сравнение при еднакви параметри. При всяко едно натискане на слайдери и др. формата се обновява.

В заключение, разработената програма дава възможност за онегледяване на резултатите от трептения в трептящ кръг с нелинейни елементи. Използвайки направеното в тази насока е разработена система за обучение по физика, подпомагаща изработването на лабораторни упражнения от студентите.

НАУЧНО-ПРИЛОЖНИ И ПРИЛОЖНИ ПРИНОСИ

Научно-приложни:

1. Разработена е модификация на Монте Карло метод и е доказана приложимостта ѝ за определяне на функцията на разпределение в газови разрези.
2. Разработена е модификация на PIC/Монте Карло метода, която позволява свеждането на тримерен модел на капацитивен разряд към едномерен.
3. За пръв път PIC/Монте Карло метод е приложен за изследване на капацитивни разрези с голямо разстояние между електродите. Установено е, че в дълъг капацитивен разряд действат едновременно два механизма за нагряване на плазмата: стохастично до електродите и джаулово в обема.
4. За пръв път в модел е изследвано изменението на функцията на разпределение по дължината на капацитивен разряд.

Приложни:

5. Разработени са компютърни симулации на изследваните методи, включително с паралелизация на програмния модел, както и програмна система с възможности за приложение и в обучението на студенти.

СПИСЪК НА ПУБЛИКАЦИИТЕ ПО ДИСЕРТАЦИОННИЯ ТРУД

- A1. Kh. Tarnev and R. Pavlova
“Simultaneous existence of stochastic and ohmic heating in capacitive discharges”
J. Plasma Phys., **85**, 905850201, (2019), IF 2.312
- A2. Rositsa Pavlova, Bogdan Gilev and Khristo Tarnev
“Axial evolution of the electron energy distribution in capacitive discharges”
AIP Conference Proceedings, **2048**, 030007 (2018), SJR 0.182
- A3. Khristo Tarnev and Rositsa Pavlova
“Small radius capacitive discharges”
AIP Conference Proceedings, **2048**, 030008 (2018), SJR 0.182
- A4. Росица Павлова и Христо Търнев
“Числени симулации за определяне на функцията на разпределение по скорости на електрони в плазма”
Дни на физиката '2013, Сборник доклади, редактори Е. Халова и С. Александрова, с. 79, ISSN 1313-9576, Издателство на Технически Университет - София (2013)
- A5. Росица Павлова
“Числени симулации на електромагнитни трептения”,
Дни на физиката '2018, Сборник доклади, редактори Е.Халова, С. Александрова и Н. Кожухарова, том 10, с. 51, ISSN 1313-9576, Издателство на Технически Университет - София (2018)

Литература

1. J. P. Verboncoeur, Particle simulation of plasmas: review and advances, *Plasma Phys. Control. Fusion* **47**, A231 (2005)
2. P. Chabert, N. Braithwaite, *Physics of radio-frequency plasmas*, Cambridge University Press, Cambridge (2011)
3. Z. Donkó, *Progress on simulations of multiple-frequency capacitively coupled discharges*, GEC & ICRP (2010)
4. Seok Won Hwang, Ho-Jun Lee, Hae June Lee, Effect of electron Monte Carlo collisions on a hybrid simulation of a low-pressure capacitively coupled plasma, *Plasma Sources Sci. Technol.* **23**, 065040 (2014)
5. W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T.Vetterling, B.P.Flannery, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, Cambridge (1992)
6. L. Verlet, Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules, *Phys. Rev.* **159**, 98 (1967)
7. A. Sun, M. M. Becker, D. Loffhagen, PIC/MCC simulation of capacitively coupled discharges: Effect of particle management and integration, *Computer Physics Communications* **206**, 35 (2016)
8. W. Brok, дисертация *Modelling of Transient Phenomena in Gas Discharges*, Eindhoven (2005)

9. П. Боровска, М. Лазарова, *Паралелна информационна обработка Системни архитектури, паралелни алгоритми, паралелно програмиране*, Сиела, София (2007)
10. MinGW-w64 - for 32 and 64 bit Windows <https://sourceforge.net/projects/mingw/>
11. OpenMP Reference Guide <https://www.openmp.org/resources/refguides/>
12. St. Lishev, Ts. Paunska, A. Shivarova and Kh. Tarnev, Matrix of small-radius radio-frequency discharges as a volume-production based source of negative hydrogen ions, *Rev. Sci. Instrum.*, **83**, 02A702 (2012)
13. Kh. Tarnev, I. Koleva, St. Lishev, Ts. Paunska, S. Iordanova, A. Shivarova, "Mode transition in a small-radius planar-coil inductively-driven discharge" 21st ESCAMPIG (Viana do Castelo, Portugal, 2012)
14. Xi-Ming Zhu, Wen-Cong Chen, Jiang Li, Zhi-Wen Cheng and Yi-Kang Pu, Spatial evolution of the electron energy distribution function in a low-pressure capacitively coupled plasma containing argon and krypton, *Plasma Sources Sci. Technol.* **21**, 045009 (2012)
15. И. Желязков, *Трептения и вълни*, Университетско издателство "Св.Климент Охридски", София (2000)
16. S. Chapra, *Applied numerical methods with MATLAB for engineers and scientists*, third edition, McGraw-Hill (2012)
17. MATLAB Product Help <https://www.mathworks.com/help/matlab/>
18. Ф. Елер, *Delphi 6*, ИнфоДАР, София (2002)

БЛАГОДАРНОСТИ

Благодарна съм на проф. д-р Георги Венков за съветите и подкрепата като декан на Факултета по приложна математика и информатика при започването на докторантурата.

Благодарна съм на настоящия декан на ФПМИ доц. д-р Десислава Иванова за подкрепата по въпросите от административен и научен характер.

Изказвам благодарност на доц. д-р А. Розева, в качеството ѝ на ръководител катедра Информатика и членовете на катедрата за предоставената ми възможност да бъда зачислена като докторант в катедрата, за насоките във връзка с подобряване на програмата, както и за доброто отношение към мен.

Благодарна съм на ръководството на катедра Приложна физика за оказаната ми подкрепа и предоставените ми условия за работа по дисертацията.

Благодаря на доц. д.м.н. Христо Търнев, от когото съм научила много, за съвместната ни работа, за неговия професионализъм, за научните му стремежи и за времето, което ми отдели. Благодаря му също за неговите човешки качества като грижа, отговорност, всеотдайност и за вярата му в доброто.

Благодарна съм на проф. д-р Милена Лазарова за съветите и съдействието, което ми оказа при представяне на резултатите от паралелизацията.

SUMMARY

Rositsa Pavlova

COMPUTER MODELLING OF CAPACITIVE DISCHARGES

The thesis consists of four chapters. Chapter 1 Literature review consists of four parts that discuss the basics of the modelling method “Particle in cell”, basic questions about capacitive discharges and determining the distribution function. Some specific issues related to the algorithms used, numerical methods and software are reviewed in the fourth part.

Chapter 2 discusses the application of the general scheme of the PIC/Monte Carlo gas discharge modeling method from Chapter 1 in the specific problems solved in the thesis. The stress is on to the modifications made to the traditional algorithms. Also a parallel programming model is proposed.

A new trend in the development of plasma sources is the construction of matrix sources consisting of a large number of small radius discharges. In this case, the distance between the electrodes can be much larger than the diameter of the electrode. In the experimental study of a single element of such a matrix plasma source some new effects related to the heating in the plasma bulk were observed. The motivation for the study in Chapter 3 is to explain these experimental results. However, the study goes beyond this frame and also addresses the more fundamental question of the mechanisms for plasma heating in capacitive discharges.

The entire capacitive discharge circuit can be represented as an electrical oscillating circuit with nonlinear elements. In this regard Chapter 4 sets out two objectives: Developing a software system for the study of oscillations in an oscillating circuit with nonlinear elements and the development of a software system for training in physics for laboratory exercise with an electrical oscillating circuit.



TECHNICAL UNIVERSITY – SOFIA
Faculty of Applied Mathematics and Informatics
Department of Informatics

MSc. physicist Rositsa Andreeva Pavlova

COMPUTER MODELLING OF CAPACITIVE DISCHARGES

SUMMARY

of dissertation for educational and scientific degree
"DOCTOR"

FIELD: 4. Natural sciences, mathematics and informatics

Professional specialty: 4.6 Informatics and computer sciences

SOFIA, 2020

The dissertation was discussed and admitted to defense at a meeting of Departments council at the department „Informatics“ of FAMI at TU-Sofia on 30.01.2020.

The defense will take place on 14.04.2020 at 3 pm at the LIC Conference Room of Technical University – Sofia at an open meeting of the Scientific Jury, appointed by order № ОЖ-4.6-02 / 14.02.2020 of the Rector of TU-Sofia:

1. Assoc. Prof. Dr. Desislava Ivanova
2. Prof. Dr. Sashka Alexandrova, DSc
3. Prof. Dr. Stefka Fidanova
4. Assoc. Prof. Dr. Milen Petrov
5. Assoc. Prof. Dr. Stanimir Kolev

Reviewers:

1. Assoc. Prof. Dr. Desislava Ivanova
2. Assoc. Prof. Dr. Stanimir Kolev

The materials for the defense are available to those who are interested in the office of FAMI at TU-Sofia, block № 2, room № 2228A.

Rositsa Pavlova is a PhD student in self-study at department „Informatics“ at FAMI. The researches on the dissertation are made by the author.

Author: MSc. phys. Rositsa Pavlova
Title: Computer modelling of capacitive discharges
Number of printed copies: 30
Printed in PPC of Technical University – Sofia

I. GENERAL CHARACTERISTICS OF THE THESIS

Actuality of the problem

The capacitive discharges are one of the main types of gas discharges, used in modern plasma technologies. They are the subject of intense research, both in connection with their practical application, and with respect to fundamental questions about the mechanisms for sustaining the discharge.

Understanding and controlling the processes in the discharge is a powerful stimulus for the development of modeling methods in this field. Plasma modeling is a complex task, covering mechanics, thermodynamics, electrodynamics, optics and quantum physics.

Like in many other fields of the science, computer simulations have been established in recent years as the third major method of scientific study along with experiment and (analytical) theory. The main modeling method used in the dissertation is "Particle in a cell with Monte Carlo collisions". It is currently the most modern and fast-developing method in the field of plasma and gas discharge modeling.

Purpose of the thesis, basic tasks and research methods

The purpose of the dissertation is research and optimization of models in the field of plasma physics, and in particular of capacitive discharges with computer simulations. The following main tasks are solved in the dissertation in relation to this purpose:

5. A modification of the Monte Carlo method for modeling plasma collisions has been developed, and validation of the model was made by comparison with known analytical results.
6. A modification of the "Particle in a cell with Monte Carlo collisions" method is made, which allows under certain conditions the reduction of three-dimensional models of capacitive discharges to one-dimensional ones.
7. The Monte Carlo Particle Cell Collision Method was applied for modelling of capacitive discharges with a large gap for the first time.
8. A software system for the study of oscillations in the oscillating circuit with nonlinear capacity has been developed, with available pedagogically applications.

Scientific innovation

Improvements and modifications to existing models have been made. The models have been implemented in new conditions. A new plasma source has been investigated.

Practical applicability

A software system has been developed with application in student education.

Testing

The results of the research in the thesis are presented in two conference proceedings in International Conference Applications of Mathematics in Engineering and Economics and two conference proceedings in Physics Days.

Publications

The number of dissertation publications is 5, of which 1 paper in a journal with an impact factor, 2 publications with SJR and 2 papers in non-indexed conference proceedings with scientific review. One of the publications is standalone.

Structure and volume of the dissertation

The dissertation is in volume from **147** pages, including an introduction, 3 chapters for solving the main tasks formulated, a list of major contributions, list of publications and references. The references consists of **114** literature sources in total, **97** of them are in Latin and **12** in Cyrillic, and the rest are Internet addresses. The work involves a total **94** figures and **3** tables. The figure numbers, formulas and tables in the summary correspond to those in the dissertation.

II. CONTENTS OF THE THESIS

Chapter 1. Literature review

The literature review consists of four parts that discuss the basics of the modelling method “Particle in cell”, basic questions about capacitive discharges and determining the distribution function. Some specific issues related to the algorithms used, numerical methods and software are reviewed in the fourth part.

1.1. Modeling gas discharges using the Particle in Cell Method with Monte Carlo

Collisions

There are three basic methods for gas discharges and plasma modelling: single particle models, kinetic models, and fluid models. Single particles models namely, "Particle in a cell" are applied in chapters 2 and 3 of the thesis and the collisions of the electrons with is taken into account using a Monte Carlo method.

1.1.1. General scheme

The general scheme of the models “Particle in cell”, (PIC) is represented in figure 1.1. The basic idea is to divide the modeling domain into a large number of cells and to distribute the charge contained in the cell to its corners. Then, knowing the density of the charge, the equations of the electromagnetic field are solved under the given boundary conditions and the forces acting on each charged particle are calculated. Particle motion equations are solved in one time step Δt . The loss of particles leaving the modeling domain is taken into account. The changes in the velocity and energy of the particles due to collisions with other particles are calculated, as well as their formation due to ionization. Since the number of the particles in the plasma is very large, only hundreds of thousands to million of particles are normally studied in PIC models. They are called macroparticles, assuming that a macroparticle is a representative of a large number of real particles.

1.1.2. Monte Carlo method for describing the collisions

This section describes the Monte Carlo method for description of the electron-atom and ion-atom collisions in PIC models.

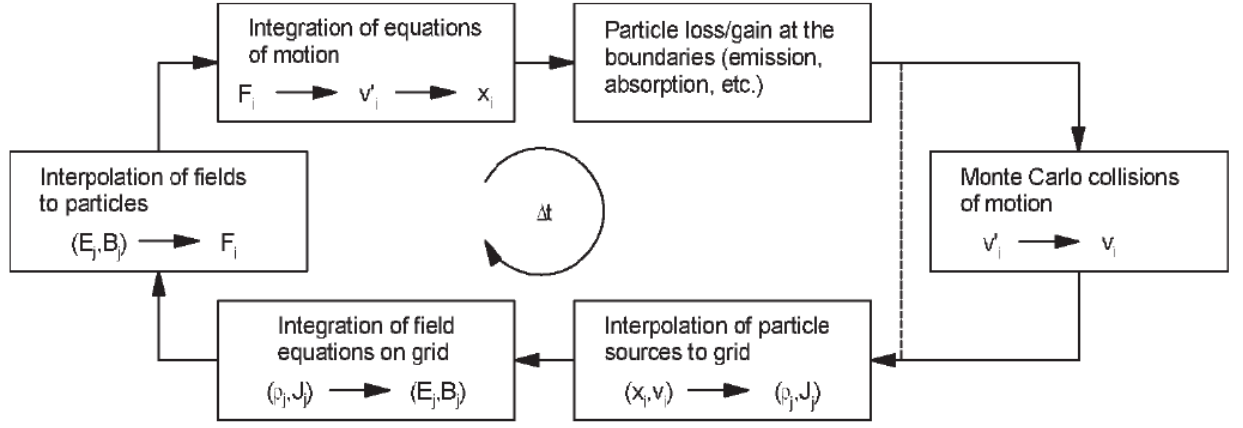


Figure 1.1 PIC model flowchart [1].

When a particle with energy w moves through a set of scatterers with density n_a , the probability that the particle collides during a time interval Δt is

$$P = 1 - \exp[-\Delta t \nu(w)]$$

where $\nu(w) = \nu \sigma_{sc}(w) n_a$ is the total frequency of all collisions possible for a given particle energy, σ_{sc} is the total cross section of possible collisions, $v = (2w/m)^{1/2}$ is the particle velocity, and m is the particle mass. In simulation, the straightforward way to determine whether a particle collides during the interval Δt is to compare the probability of collision P with a random number R ($0 < R < 1$) (the collision occurs if $R < P$). Since a particle can participate in several different types of collisions (elastic, excitation, ionization) a random number is used to determine the type of the collision taking into account the cross sections of different collisions for a given energy of the particle.

The next step in the Monte Carlo model is to calculate the magnitude and direction of the electron velocity after the collision. The change in the direction of the electron velocity is described by an azimuthal angle φ and a polar angle θ . We assume that the azimuthal angle is uniformly distributed over the interval $[0, 2\pi]$

$$\varphi = 2\pi R_3 \quad (1.5)$$

where R_3 is a new uniformly distributed random number between 0 and 1. Usually it is generally accepted that the electron scattering is isotropic regardless of the nature of the collision and the polar angle θ can be determined simply by

$$\theta = \arccos(1 - 2R_4). \quad (1.6)$$

In addition to the velocity of the electron, the collision also changes its energy.

1.2. Capacitively Coupled Plasmas

1.2.1. Design, homogeneous model and application

CCPs (Capacitively Coupled Plasmas) consist of two parallel electrodes, biased by a radio-frequency power supply (generator), typically operating at 13.56 MHz (figure 1.4).

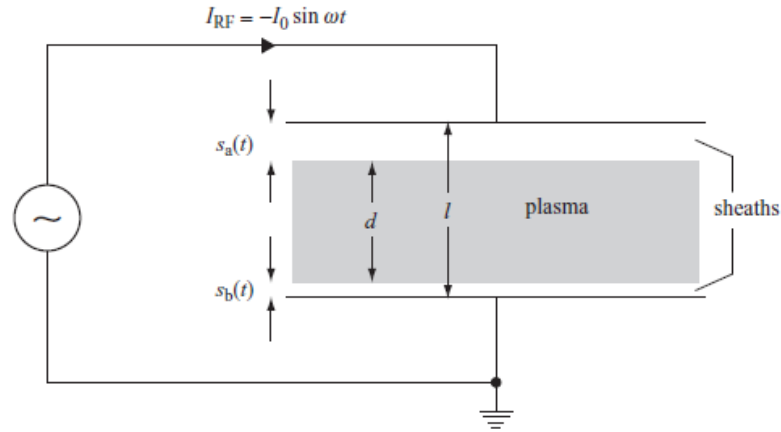


Figure 1.4. Scheme of CCP [2].

An electroneutral plasma is formed between the electrodes, i.e. the concentration of positively and negatively charged particles is equal. Close to the electrodes there are space charged sheaths, the thickness of which varies with the frequency of the generator (at the excitation frequency). In the argon discharges discussed in the thesis, the charge of the sheaths is positive and the concentration of positive ions is higher than that of the. The motion of the ions, due to their large mass, is determined by the averaged electric field, while the electrons oscillate with the frequency of the external RF field.

1.2.2. Plasma heating mechanisms

There are two basic mechanisms for plasma heating in capacitive discharges considered in the literature. The usual Joule (ohm) heating dominates at moderate pressures. Along the electron trajectory between two collisions with atoms the electric field is almost unchanged.

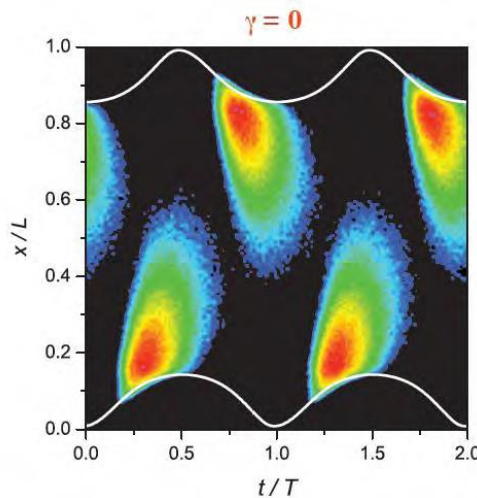


Figure 1.8. Electron beams in capacitive discharges. PIC model results [3] for two RF field periods. The white lines indicate the boundaries of the sheaths.

The current density at a given point is proportional to the intensity of the electric field at that point. In this case, the heating is called local or collisional. At low pressure the distance between two collisions of the electron with atoms is significant and the electric field changes along the electrons' trajectory. The current density at a given point depends on the intensity of the electric field along the entire electron trajectory. In this case, the heating is nonlocal (the terms collisionless and stochastic are also used). It is possible for both heating modes to act simultaneously - collisionless in the sheath and joule in the plasma bulk.

1.3. Determination of the distribution function in gas discharges

In kinetic models, the electron velocity distribution function f_e (Electron velocity distribution function, EVDF) is determined by solving the Boltzmann equation

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_e + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_e = \left. \frac{\partial f_e}{\partial t} \right|_c \quad (1.28)$$

If the electrons are close to thermal equilibrium, the solution of the Boltzmann equation is Maxwellian distribution.

A common and very useful simplification is the two-term approximation, in which the electron distribution function is expanded to first order in the deviation from isotropy, which we take to be cylindrically symmetric along the direction of anisotropy

$$f_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \approx f_{e0}(\mathbf{r}, v, t) + \frac{\mathbf{v}}{v} \cdot \mathbf{f}_{e1}(\mathbf{r}, v, t) \quad (1.31)$$

Here f_e is decomposed into the sum of an isotropic velocity part f_{e0} , depending on the speed only, and a small anisotropic part f_{e1} , with $f_{e1} \ll f_{e0}$.

The two-term approximation in the case of homogeneous plasma with a uniform constant electric field yields two important results for the anisotropic and isotropic parts. For a constant collision frequency of the elastic collisions, $\mathbf{v}_m(v) = \text{const}$, the result is a Maxwellian distribution. For a constant cross section collisions (hard sphere) $\sigma_m = \text{const}$ (constant mean free path), the result is known as the Druyvesteyn distribution.

In addition to the electron velocity distribution function, the electron energy distribution function is also used (Electron energy distribution function EEDF). The type of this function for the cases of Maxwell and Druyvesteyn distributions is given in equations (1.35) and (1.36). The index M refers to the Maxwell distribution and D to the Druyvesteyn distribution. A_M and A_D are normalization constants, while D is a constant, depending on the electric field and the collision cross section.

$$f_M(E) = A_M \sqrt{E} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (1.35)$$

$$f_D(E) = A_D \sqrt{E} \exp\left(-\frac{E^2}{D}\right) \quad (1.36)$$

It is usually difficult to determine how close to a Maxwell distribution is a distribution obtained in an experiment or in a model. Therefore, a probability function is introduced (Electron energy probability function (EEDF)), defined by:

$$EEPF = \frac{EEDF}{\sqrt{E}} \quad (1.37)$$

and respectively for the distribution of Maxwell and Druyvesteyn

$$EEPF = A_M \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (1.38) \quad EEPF = A_D \exp\left(-\frac{E^2}{C}\right) \quad (1.39)$$

The advantage of this representation is that, on a semi-logarithmic scale, the Maxwell distribution graph is straight line, with a slope determined by the temperature. (figure 1.20).

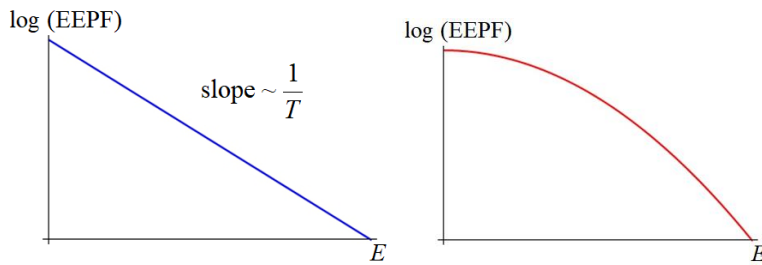


Figure 1.20. Schematic representation of EEPF on a semi-logarithmic scale for the distribution of Maxwell (left) and Druyvestein (right).

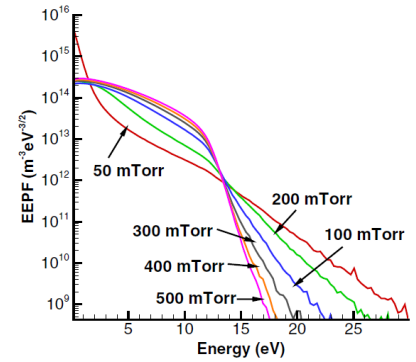


Figure 1.23. EEPF, obtained from PIC-MCC model of a capacitive discharge [4].

A typical EEPF result for the case of capacitive discharge is shown in the figure 1.23. At low pressure EEPF is bi-Maxwellian, consisting of two straight line sections, which gives an indication of the presence of electrons at two different temperatures. With pressure increasing, the shape of the EEPF becomes closer to that of Druyvestein.

1.4. Algorithms, numerical methods and software

1.4.1. Random number generators

The third chapter of the thesis uses the random number generator recommended in [5]. In the thesis a brief overview of the random number generators following this literature source is given.

1.4.2. Integration of equation of motion algorithms

In the simulations of gas discharge plasmas the explicit leapfrog scheme has commonly been used. An alternative particle integration method is the velocity Verlet algorithm [6]. The differences between the two methods are discussed, for example, in the models presented in [7].

The leapfrog scheme calculates the velocities $\vec{v}$ and the positions $\vec{x}$ of the particles with an offset in time by $\Delta t/2$, i.e., half the time step Δt , according to

$$\vec{v}_{k+1/2} = \vec{v}_{k-1/2} + \vec{a}_k \Delta t \quad (1.45)$$

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \vec{v}_{k+1/2} \Delta t \quad (1.46)$$

Here $\vec{v}_j$ are the velocities at the moment $t_j = t_0 + j\Delta t$ (with $j = k - 1/2, k+1/2$) and the positions $\vec{x}_j$ (with $j = k, k+1$), with the initial time t_0 , respectively $\vec{a}_k = q\vec{E}_k/m$ is the acceleration of the particle with charge q , and mass m , and $\vec{E}_k$ denotes the electric field, acting on the particle at t_k .

The velocity Verlet scheme is quite similar to the leapfrog integration method, except that the velocity and position are calculated at the same time t_{k+1} according to

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \vec{v}_k \Delta t + \frac{1}{2} \vec{a}_k \Delta t^2 \quad (1.47)$$

$$\vec{v}_{k+1} = \vec{v}_k + \frac{1}{2} (\vec{a}_k + \vec{a}_{k+1}) \Delta t \quad (1.48)$$

where at first the position and then the velocity is determined.

1.4.3. Programming examples

This section addresses some issues related to the implementation of the above PIC / MonteCarlo algorithms in C ++ code [8].

Chapter 2. PIC/Monte Carlo algorithm for modelling of capacitive discharges

In this chapter is discussed the application of the general scheme of the PIC/Monte Carlo gas discharge modeling method from Chapter 1 in the specific problems solved in the thesis. The stress is on to the modifications made to the traditional algorithms. Also a parallel programming model is proposed.

2.1. Monte Carlo algorithm for determining the distribution function by studying the motion of an electron

A modification of the Monte Carlo method for modeling of collisions in plasma has been developed, by following the motion of an electron for a long enough time and the distribution function is determined by the data at each collision. In the traditional approach the motion of a large number of electrons is investigated and the electron velocity distribution function is

determined at a given moment. The electric field is considered to be given in the model, i.e. the role of the space charge associated with the motion and position of particles in the plasma is neglected.

The purpose of the study is to prove the applicability of the method by comparison with cases for which there is an analytical solution of the Boltzmann equation. The work was published in [A4].

The validation of the model is done by comparing with the results of kinetic. The Boltzmann equation is solved at constant frequency ($\nu = \text{const.}$) and constant cross section ($\sigma = \text{const.}$) of the elastic electron-atom collisions.

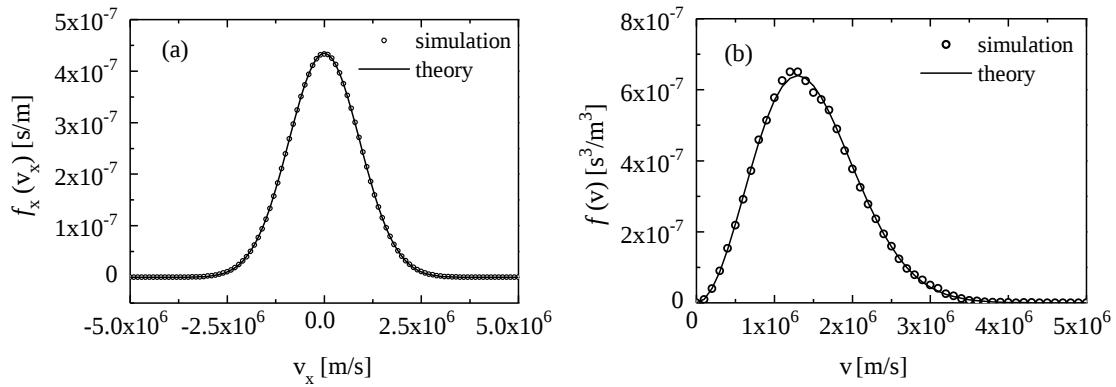


Figure 2.4. Distribution functions for one of the velocity components (a) and for the magnitude of the velocity (b), obtained from the kinetic theory (line) and from the numerical simulations (symbols) at a constant collision frequency.

Figure 2.4 shows a very good agreement between the results of the analytical solution and the computer simulation. A similar coincidence is also observed in the other test case of a constant cross-section of the collisions. Tests were also made using real argon cross-sections, where the expected results are also obtained.

In conclusion, the results in this section prove the applicability of the method for obtaining the distribution function. Experience is gained for the optimal values of the parameters set in the simulation. The advantage of the method is the less time required for the transition period compared to simulations with many electrons.

2.2. PIC/Monte Carlo capacitive discharge model algorithm

In cases where the space charge plays an important role, only Monte Carlo model is not enough. Therefore, here is applied PIC model for accounting of the space charge.

Typically, the capacitive discharge models are one-dimensional, ignoring the radial motion of the particles. In this chapter, our goal is to develop a small-radius capacitive discharge model, in which radial particle losses should also be taken into account. A rigorous approach requires a

3D model, which, however, is very demanding to the computer equipment used. Therefore, a modification of the method was made in the dissertation: radial particle losses are treated similarly to collisions and the model is reduced to one-dimensional. The basic ideas are as follows: 1) We work with a radially averaged particle concentration value; 2) Radial losses in one time step are estimated assuming a Bessel radial profile and ambipolar diffusion; 3) The corresponding number of particles is removed from the simulation randomly. The model developed is one-dimensional in space and three-dimensional in velocity space, i.e. only the x -coordinates of the charged particles are calculated. The proper description of the kinetic energy of the particles requires the calculation of the three velocity components, because the kinetic energy is shared between all degrees of freedom.

The flowchart of the simulation (in its parallel version) is shown in the next section in figure 2.16.

The simulation begins with a relatively small number of superparticles with Maxwellian velocity distribution with temperature 2 eV for the electrons and 300 K for the ions. The number of superparticles in the simulation is several thousand. After reaching a quasi-stationary solution, the charge and mass of each superparticle is divided by 2. The next run of the program begins with approximately doubled number of superparticles with velocities and spatial distribution obtained in the previous run. The procedure is repeated until the plasma parameters no longer depend on the number of the superparticles. The time step in our simulation is 1/1000 of the rf field period and a typical code implementation has from 200 000 to 1 000 000 steps, i.e. from 200 to 1000 periods.

After reaching the final solution, the code is running for more 10 periods and the results averaged over the rf period are presented in the next chapter.

2.3. Code parallelization

The time required to obtain the results can be significantly reduced by code parallelization, by calculations using a parallel programming model, built on a high-performance shared memory computer platform.

The need for parallel calculations arises when is necessary [9]:

- *Speed-up implementation*: a problem with a given size is solved N times faster by N processors;
- *Scaling*: at an N – times increase in the problem the time to resolve it by the N processors remains the same.

2.3.1. Parallel programming

There are three models for parallel programming: 1) OpenMP (Open Multi-Processing). 2) MPI (Message Passing Interface). 3) Hybrid models.

In the thesis is used the model of parallel programming with shared memory. The shared memory model is an abstraction of a centralized symmetric multiprocessor (SMP). Hardware resources are considered as multiple processors, each of which has equal access to the shared memory. The processors interact and synchronize through shared memory.

2.3.2. Parallel programming model for PIC / Monte Carlo simulation

A parallel programming model is proposed for PIC / Monte Carlo simulation for a high performance shared memory computer system. Specific means are used to implement parallelisms: compilers, compiler directives, library functions, application interfaces [9]. DevC++ was used as IDE for MinGW [10], library functions [11], application programming interface OpenMP [11].

Block: initial positions and velocities of the particles: here is applied a parallelization at section level. The two cycles (for electrons and ions) are performed by two parallel sections.

Block: integration of the equations of motion: A `pragma omp for` is used in this parallel block with planned use of the threads, planning type - dynamic with planning partition size 1. This is required because it is not known how many particles are left in the modelling domain for the next step in time of the main cycle. A `private` clause is also used in the parallel section. Two cycles, in which the equations of motion of the electrons and ions are integrated, are parallelized.

Block: calculation of the average kinetic energy of the particles. There are two cycles at the end of the main cycle in which the velocities of all electrons and of all ions are squared. The calculation is based on the velocity components, that changes on every time step. `#Pragma omp for` is also used here with the same type of planning and partition size as in the previous block. A `private` clause for the counter and a reduction clause for the collection operation (+) in a common variable are also used. With this value of the variable after the end of the parallel section the average kinetic energy of the electrons is calculated, respectively of the ions at each time-step.

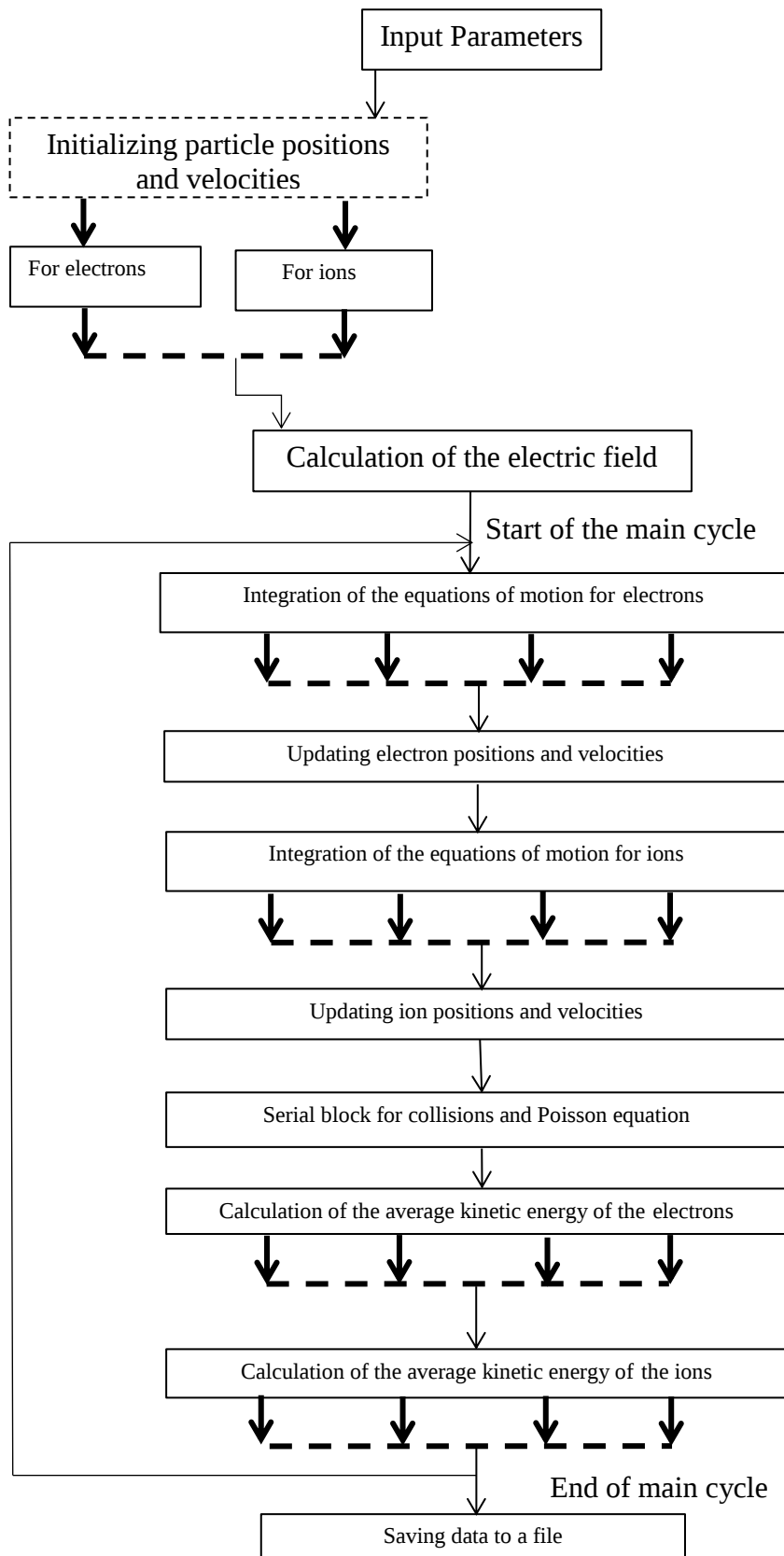


Figure 2.16. Flowchart of a parallel programming model for the PIC/Monte Carlo simulation in the thesis.

2.3.3. Experimental results

Speed-up. The speed-up is a parameter that shows the relative advantages of a parallel problem solving. The speed-up for n - processor system is defined as the ratio of the serial execution time T_s to the parallel execution time T_{par} of the same problem.

$$S_n = \frac{T_s}{T_{par}}$$

Efficiency. Parallel processing efficiency is defined as the ratio of the speed-up to the number of processors involved in solving the problem in parallel

$$E_n = \frac{S_n}{n}$$

Efficiency is a measure of the useful time expended by the processors for computings.

Computer architecture with 4 processors intel without hyperthreading (HT) technology was used for experimental evaluation of the created program model, so the number of processors is equal to the number of threads. The results presented here are for the speed-up with different number of threads and different work loads, for the efficiency at different number of threads and different workloads (W, 2W, 3W, 4W) and for scaling.

For a given number of threads, the execution time is proportional to the workload. This means that the speed of the calculations is the same for a given number of threads and the speed-up too. For a given workload (denoted as W), the parallel execution time depends on the efficiency of the given number of threads. For example, at 4 threads, the time decreases doubled compared to the sequential execution time - 1 thread. This means that speed is different for a given workload, the speed-up too.

Assuming that the number of particles does not change significantly for 12 000 steps, we can increase the workload by increasing the steps. Experience has shown that time is increasing linearly. If the number of particles is doubled and the number of steps of the main cycle is also doubled, the execution time increases 4 times.

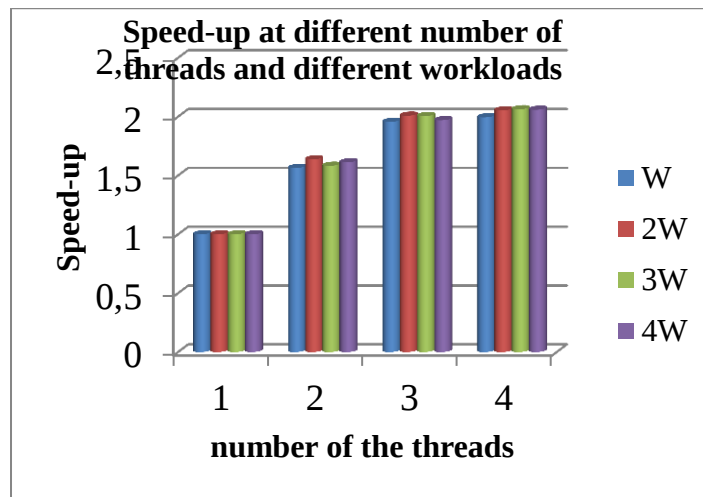


Figure 2.17. Speed-up depending on the number of threads and the work load.

It can be seen that the speed-up is approximately the same with different loads and different number of threads.

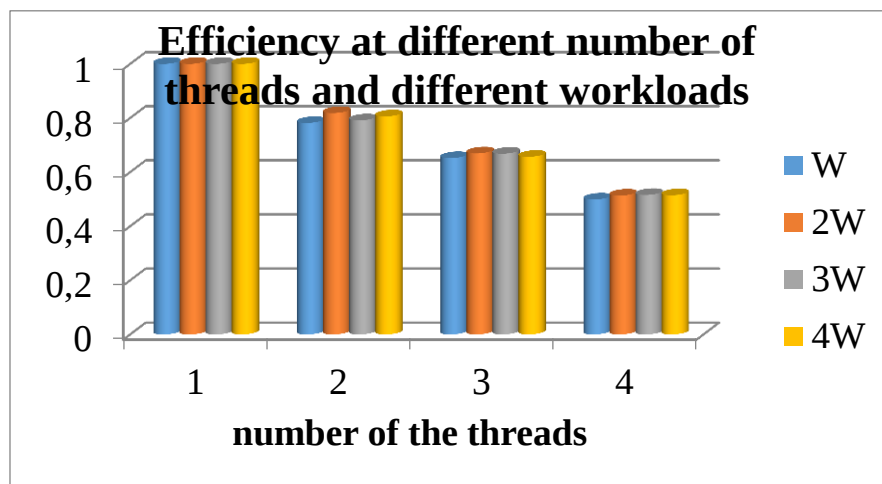


Figure 2.18. Efficiency depending on the number of threads.

The efficiency is approximately the same with different workloads and a given number of threads and decreases linearly as the number of threads increases.

Chapter 3. Modelling of capacitive discharges with a large discharge gap

A new trend in the development of plasma sources is the construction of matrix sources consisting of a large number of small radius discharges [12]. In this case, the distance between the electrodes can be much larger than the diameter of the electrode. In the experimental study of a single element of such a matrix plasma source some new effects related to the heating in the plasma bulk were observed [13]. The motivation for the study in Chapter 3 is to explain these experimental results. However, the study goes beyond this frame and also addresses the more fundamental question of the mechanisms for plasma heating in capacitive discharges.

3.1. Results for the case of infinite discharge radius

3.1.1. Dependence on pressure at a small distance between the electrodes.

This section presents results for two pressure values of neutral gas and fixed values of the other parameters. The distance between the electrodes is $L = 3$ cm, i.e. here is a case of short distance between the electrodes; the results obtained provide a basis for comparison with the results in the following sections. The choice of pressures – 10 Pa and 40 Pa – allows us to distinguish between two different types of discharge behavior. Figure 3.1 shows the results for the variation of the ionic concentration along the discharge axis. The areas of the plasma bulk and the sheaths (with thickness about 0.6 cm from each wall) are clearly distinguished. With the pressure increase the profile of the electron concentration in the plasma bulk varies from sine type to flat profile.

Additional information for the processes in the plasma is provided by the dynamics of the plasma potential in figure 3.2. The voltage on the left electrode changes as $U = U_0 \cos \omega t$, with $U_0 = 150$ V and $\omega = 2\pi / T$ being the angular frequency and this determines the behavior of the potential in the plasma. The presentation is limited to the positive potential values only. In the case of $p = 10$ Pa, $L = 3$ cm the potential in the plasma bulk is almost constant, i.e. electric field $E \approx 0$. According to the general properties of the capacitive discharges the electron velocity in the plasma bulk changes its direction with the changes of the polarity of the voltage on the powered electrode to compensate the external electric field. However, the flow of the electrons is created by different mechanisms in the two cases in the figure 3.2. At low pressure and small discharge gap, the mean free path of the charged particles is large and the electrons accelerated in the expanding sheaths cross the entire plasma bulk, i.e. they move in the central part of the discharge at a certain speed even at zero local electric field.

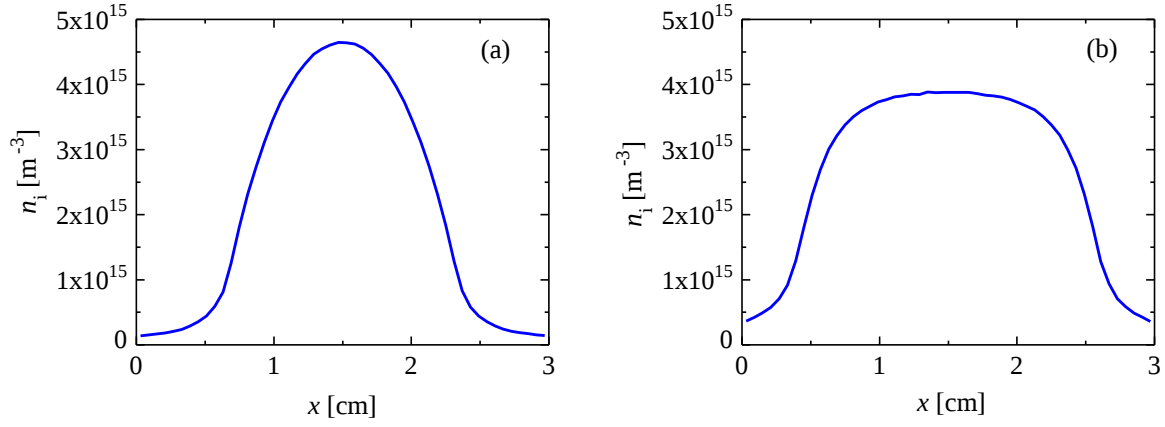


Figure 3.1. Concentration of the ions for the distance between the electrodes 3 cm and pressure 10 Pa (a) and 40 Pa (b).

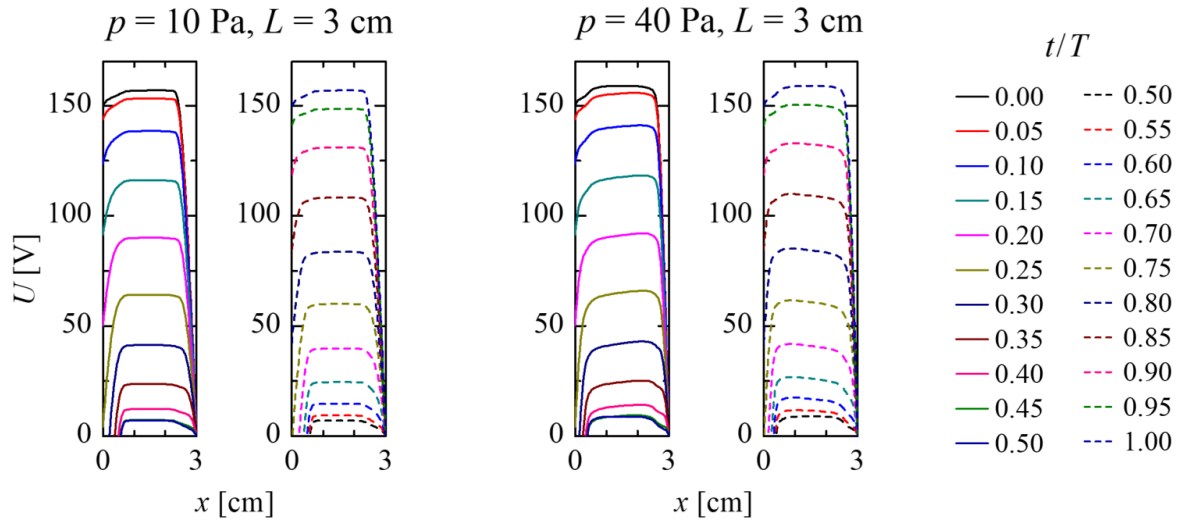


Figure 3.2. Profiles of the potential for pressures and discharge gaps as given in the figure. The interval between the profiles in the figures is $T/20$. The left figure of each pair (solid lines) corresponds to the first half-period when the voltage on the left electrode decreases from +150 V to -150 V. The right figures (dashed lines) are for the second half-cycle when the voltage increases.

The plasma conductivity in this case is non-local: the current at a given position depends on the electric field not only at this position but on the field along the entire trajectories of the electrons between two collisions. At higher pressure the mean free path decreases and the electrons from the sheaths cannot penetrate deep into the plasma bulk. The drift velocity there is a result of the local electric field.

Plasma bulk resistance can also play an important role. It can be given in a simplified form per unit cross section as $R = l / \sigma$ (l is the distance between the sheaths and σ is the plasma conductivity). At low pressure and small gap, plasma conductivity σ is high because of the low frequency of the electron-neutral collisions and the high concentration of electrons. The length of plasma bulk is small and its resistance is small too. At higher pressure the electron-neutral

collision frequency increase which leads to a lower σ and higher resistance. As a result, the potential drop in the plasma bulk increases and hence the electric field increases.

The electric field in the plasma bulk is important for the transport processes, but high-energy electrons are formed mainly in the expanding sheaths. The resulting electron beams are clearly visible with a greater density of dots, representing ionization acts (Figure 3.8). The length of the beams is about 2.5 cm at 10 Pa and about 1.5 cm at 40 Pa, determined not only by the neutral gas pressure but also by the voltage.

It is visible again that the beams cross the entire plasma bulk at $p = 10$ Pa while at $p = 40$ Pa the energy of the electrons is dissipated close to the wall sheaths and in the central part of the discharge the ionization is much weaker.

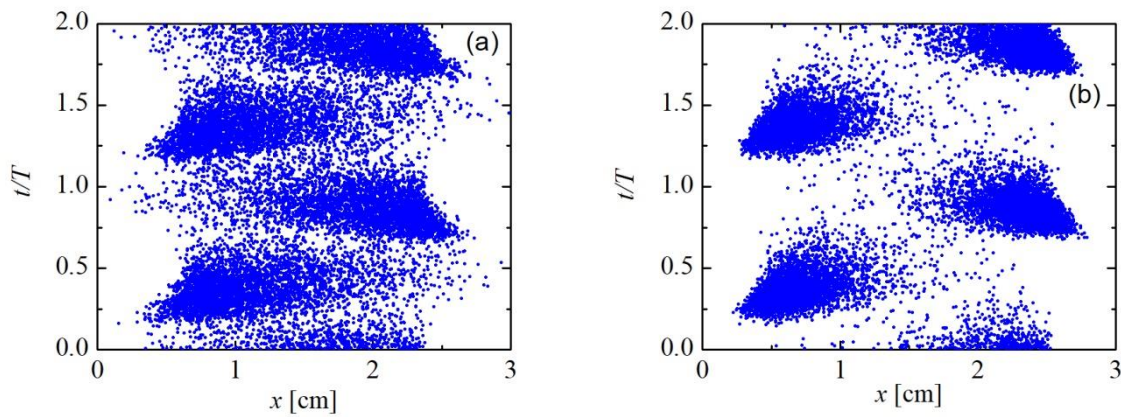


Figure 3.8. Spatio-temporal graphs of ionization acts for gap of 3 cm and pressure 10 Pa (a) and 40 Pa (b) for two periods T of the RF field.

3.1.2. The role of the distance between the electrodes

As the distance between the electrodes increases, the plasma density profile becomes flatter (figure 3.10).

The potential results also show a gradient in plasma bulk and therefore a non-zero electric field. At low pressure and large discharge gap the mean free path of charged particles is large but not sufficient for electrons to penetrate from the sheaths into the center of the discharge. In this case, like the case of the higher pressure, the motion of the electrons inside the plasma bulk is due to the electric field in this region.

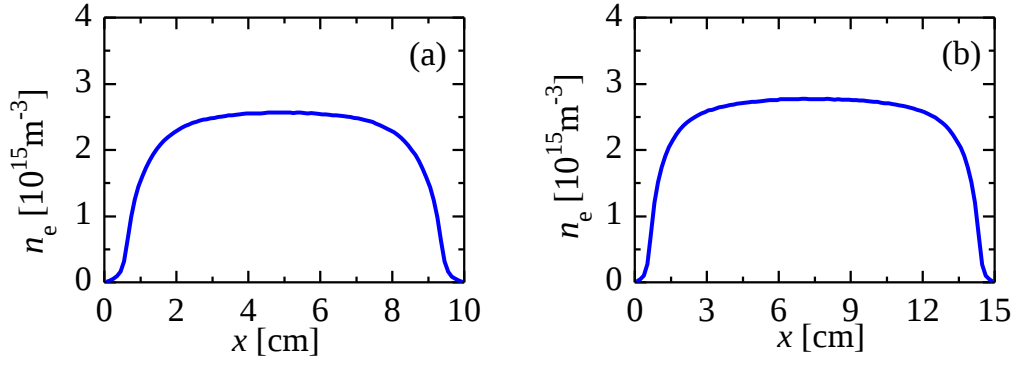


Figure 3.10. Electron concentration profiles for $p = 10$ Pa and gap of 10 cm (a) and 15 cm (b).

At long discharge and low pressure σ is high, but l is high too and the resistance increases.

Increasing the distance between the electrodes also affects the results for the EEPF. The change of the EEPF along the discharge axis starts from Maxwellian close the electrodes, to Druyvesteyn in the center of the discharge (figure 3.13). In this case, the center of the discharge is far enough from the electrodes and the electrons accelerated in the sheaths cannot reach it. The function EEPF is formed mainly by the local electric field. The variation of the EEPF along the axis of capacitive discharges has been experimentally observed by Zhu *et al* [14], shown in figure 1.28 in Chapter 1 of the thesis. The lower concentration of high-energy electrons in the central part of the discharge results in much lower ionization there. The length of the beams is large, but because of the greater distance between the electrodes, the high-energy electrons cannot reach the central part of the discharge.

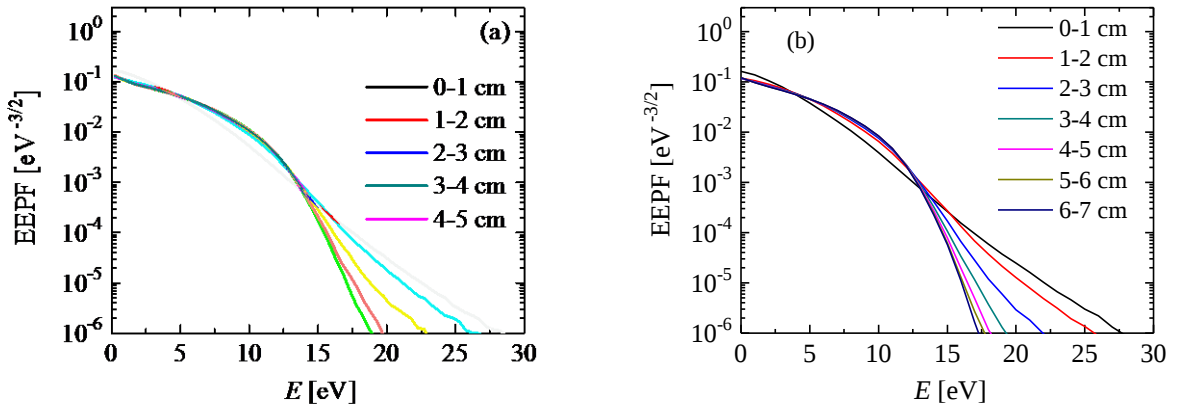


Figure 3.13. Variation of the EEPF along the discharge length at a gas pressure of 10 Pa and gap of 10 cm (a) and 15 cm (b).

3.2. Role of discharge radius

This section also takes into account the radial particle losses. The results presented are for pressure $p = 10$ Pa. First, a simple analysis based on the continuity equation is presented.

In the case of a finite radius, the increased particle losses (due to radial ambipolar diffusion in the model) results in a lower electron concentration. (figure 3.17). For $R = 5$ cm and $R = 3$ cm

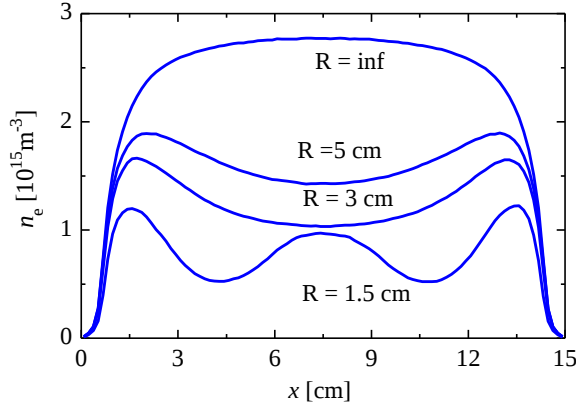


Figure 3.17. Profiles of the electron concentration averaged over the RF period for $p = 10$ Pa and different discharge radii as indicated in the figure.

close to the plasma-sheath boundary, the ionization is the dominant process. Radial losses predominate in the plasma bulk. This means that newly created charged particles in the plasma bulk cannot compensate the radial losses and a minimum of electron concentration at the center of the discharge appears. The discharge there is maintained mainly by longitudinal flows from the plasma-sheath boundary. New behavior is observed at a very small radius ($R = 1.5$ cm in the figure 3.17). Because of the low electron concentration caused by the large

radial losses, the conductivity of the plasma decreases, the resistance in the plasma volume and the voltage drop across it increase and the electric field at the center of the discharge increases. At $R = 1.5$ cm, the field is strong enough to cause significant ionization, which is greater than the radial losses and a local maximum appears in the center of the discharge.

3.3. Role of the pressure

As shown above, the density of the plasma in the discharge with a finite radius is lower due to the additional losses of charged particles on the side wall. As the pressure increases, the concentration of charged particles in the gas discharges usually increases. Higher pressure leads to a lower coefficient of ambipolar diffusion and lower side wall losses. An increase in the concentration of charged particles with increasing pressure is clearly shown in the figure 3.20.

The two types of electron concentration profiles discussed in the previous section are also observed here. At lower pressures and low electron-neutrals collision frequency, the conductivity of the plasma is high and the electric field in the plasma bulk is low. Radial particle losses are high and ionization cannot compensate for them. It forms a minimum in the center of the discharge. At higher pressure, the conductivity of the plasma decreases, leading to an increase in the voltage drop in the plasma bulk and the electric field there. Plasma bulk

ionization together with reduced radial losses cause a local maximum at the center of the discharge.

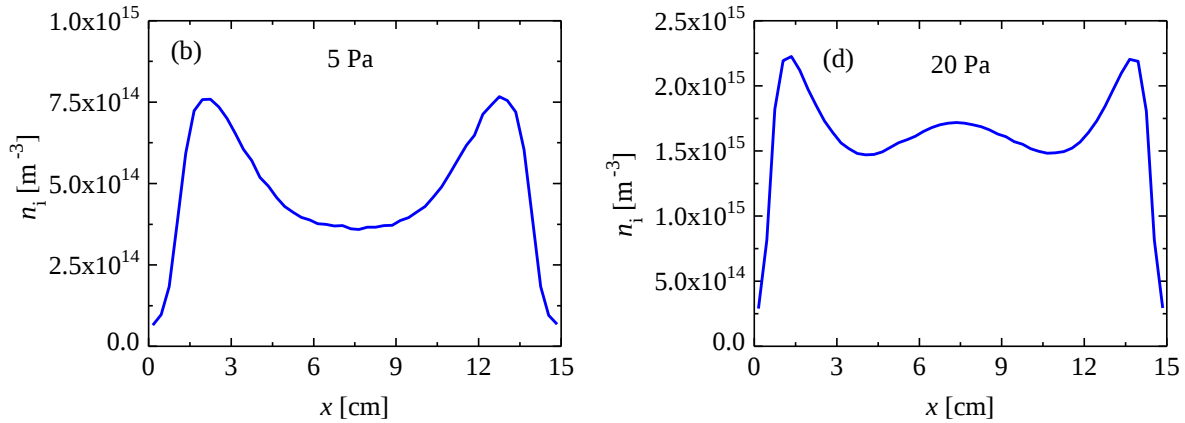


Figure 3.20. Profile of the ion concentration for tube radius 2 cm and 5 Pa (b), and 20 Pa (d). Note that the scale in (d) is different.

As the pressure increases, the electron mobility decreases, and electron beams accelerated into expanding sheaths do not penetrate so much into the plasma. This is clearly evident from the results in the figure 3.23 and 3.24 for the concentration of high-energy electrons. The speed of the beams also decreases with the pressure.

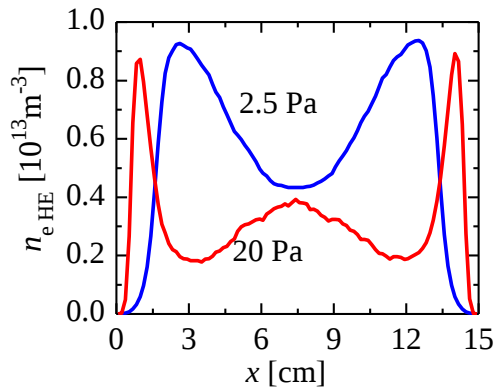


Figure 3.23. Profiles of the time averaged electron concentration of the high-energy electrons at two pressures.

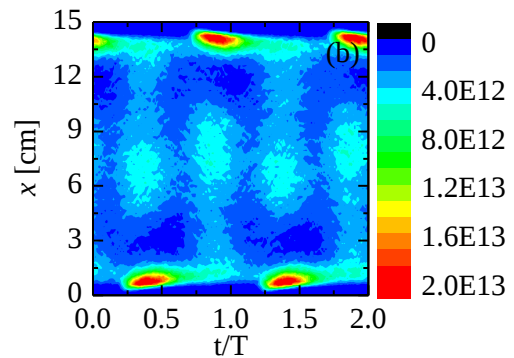


Figure 3.24. Spatio-temporal plot for the concentration (in m^{-3}) of the high-energy electrons at $p = 20$ Pa.

The results in Figures 3.23 and 3.24 are also confirmed by experimental results (which are not part of the thesis).

Typical electron beams for low-pressure capacitive discharges, accelerated in expanding sheaths once per RF period from each electrode were obtained in the model. At higher pressure, the beams still exist, but in addition there is a second heating mechanism in the central part of the discharge. Because the variation of the electric field in the discharge is of the type $E \sim \cos \omega t$ the energy of the electrons changes as $W \sim \cos^2 \omega t$ and in spatio-temporal graphs

two maxima for the period should be seen. Therefore, the maxima in the central part of the discharge in figure 3.24 (b) are the result of the electric field in the plasma bulk.

Finally, in this chapter, for the first time, a PIC / Monte Carlo model is applied to study, capacitive discharges with a large gap. At a qualitative level, the results of the model are confirmed by the results of an experiment, which proves the validity of the modifications made to the algorithm. The variation of the distribution function along the capacitive discharge length is investigated for the first time in a model.

With respect to the physical mechanisms for sustaining capacitive discharges, it is established for the first time that two plasma heating mechanisms act simultaneously over a long discharge: stochastic heating close to the electrodes and joules heating in the plasma bulk.

The results of Chapter 3 have been published in two AMEE'2018 papers and one article in Journal of Plasma Physics.

Chapter 4. Investigation of electromagnetic oscillations in a nonlinear capacitance circuit

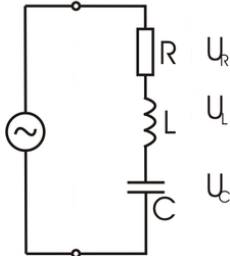


Figure 4.1. Forced oscillations in serial oscillating circuit.

The entire capacitive discharge circuit can be represented as an electrical oscillating circuit with nonlinear elements. In this regard Chapter 4 sets out two objectives: Developing a software system for the study of oscillations in an oscillating circuit with nonlinear elements and the development of a software system for training in physics for laboratory exercise with an electrical oscillating circuit.

4.1. Software system for the study of oscillations in an oscillating circuit with nonlinear elements

4.1.1. Basic equations

The model developed assumes that the dependence of the capacitor voltage on the charge is of the type

$$U_C(q) = \frac{q}{C_0} (1 + \gamma_0 q^2) \quad (4.2)$$

with γ_0 characterizes the degree of nonlinearity. This type of nonlinear dependence is proposed in [15].

Kirchoff's law leads to a system of differential equations:

$$\frac{dI}{dt} = -\frac{q}{LC_0} (1 + \gamma_0 q^2) - \frac{IR}{L} + U_m \cos(\omega t) \quad \frac{dq}{dt} = I \quad (4.3)$$

which is solved numerically under the following initial conditions: initial current I is zero, initial charge q is zero. The system is solved for the time interval from $t_1 = 0$ to t_2 .

4.1.2. Software implementation

Development environment Matlab GUIDE, which automatically generates .m file, providing a code to initialize the Graphic User Interface (GUI) and contains form.

Both files are used in the application development process .m and .fig. After the application is developed and tested, an executable file with the MATLAB compiler may be obtained.

Functionality of the environment

Components

Several objects have been added to the form, some of which are: Slider, Edit Text, RadioButton, Pop-up menu, Axes. The data is linked to the graph by a handle which is object identifier.

Events Create function, Callback function, SelectionChangeFunction and others.

Dialogs errordlg, warndlg and others.

Classes

MATLAB support two kinds of classes — handle classes and value classes. A value class constructor returns an instance that is associated with the variable to which it is assigned. When reassign this variable, MATLAB creates a copy of the original object A handle class constructor returns a handle object that is a references to the object created without making a copy of the original object The reference behavior of handles enables these classes to support features like events and dynamic properties, even when the feature is not within the scope of the code.

Here, the handle is used to refresh the form after each button is pressed, calling a function indirectly, pass function handles in calls to other functions e.g function ode45 by which the differential equation is solved, to draw graphs after each parameter change.

Embedded functions

Mathematical functions

The system of equations (4.3) has an analytic solution only in the linear case, i.e. at $\gamma_0 = 0$. In general, only a numerical solution is possible. Therefore, the function used is ode45, which by the Runge-Kuta method [16] integrates the system of differential equations under initial conditions $y_0(1)$, $y_0(2)$ [17].

Using the values obtained for t , q , I from the numerical solution of the system, the following graphs are built $q(t)$, $I(t)$. It is calculated $U_L = L \frac{dI}{dt}$ and the graph $U_L(t)$ is plotted. The input parameters to the system are the parameters of the oscillating circuit (inductance L , capacity C and resistance R), the amplitude and frequency of the generator are set with a graphical object

slider bar, which specifies a range of values. The type of task is initially selected. As an example of nonlinearity, a case in which the voltage of the capacitor depends not only on the first but also on the third degree of its charge is investigated. The results obtained are presented graphically in an object axes. The form is updated with each parameter change.

The application can execute the following tasks:

For linear oscillations: Variation of circuit and generator parameters; Drawing timelines; Drawing resonance curves; Drawing of phase diagrams.

For non-linear oscillations: Variation of circuit and generator parameters; Drawing of $U_C=f(t)$ in a linear and non-linear case; Drawing of phase diagrams.

4.1.3. Sample results

Figure 4.5 shows the GUI of the forced oscillations simulation program. There are 4 types of tasks to be solved: **Task 1. Time dependencies**; **Task 2. Observing of resonance phenomena**; **Task 3. Phase diagram**.

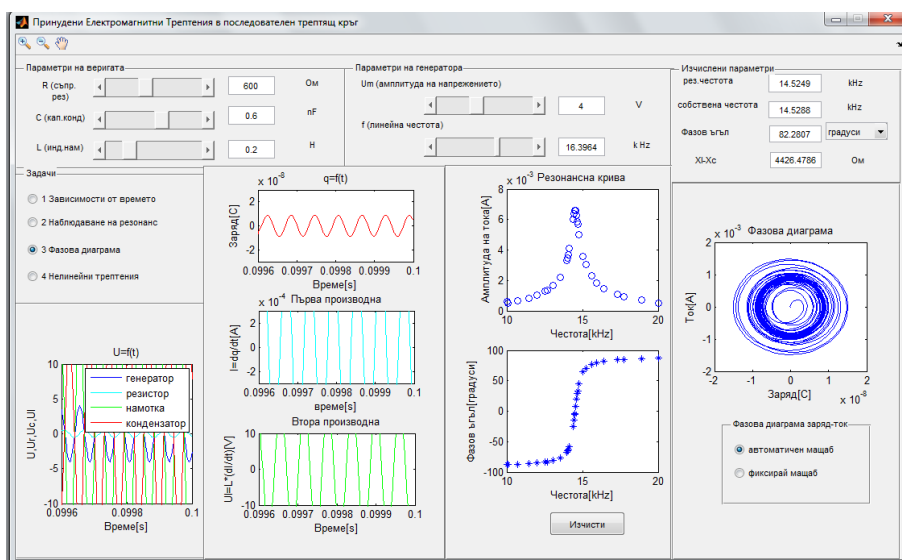


Figure 4.5. Linear oscillations.

Task 4. Non-linear oscillations The parameter characterizing the nonlinearity γ which can vary within limits $(0 - 3) \cdot 10^{17} [1/C^2]$ is set. The change in the value of γ is done with a slider. The deviation from the sine waveform of the capacitor voltage is observed for the nonlinear case compared to the linear case ($\gamma = 0$).

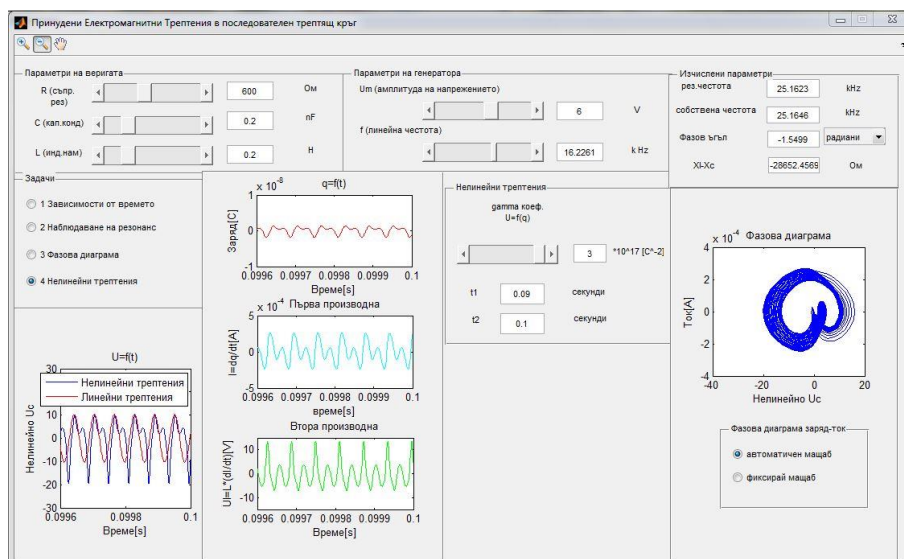


Figure 4.6. Graphic interface of the program for study of forced nonlinear electromagnetic oscillations in a serial electric oscillating circuit.

4.2. Physics training system software

For the second purpose, with a focus on the physics training, a system has been developed to assist students in laboratory work on exercise with an electrical oscillating circuit. The program was implemented on Delphi7.

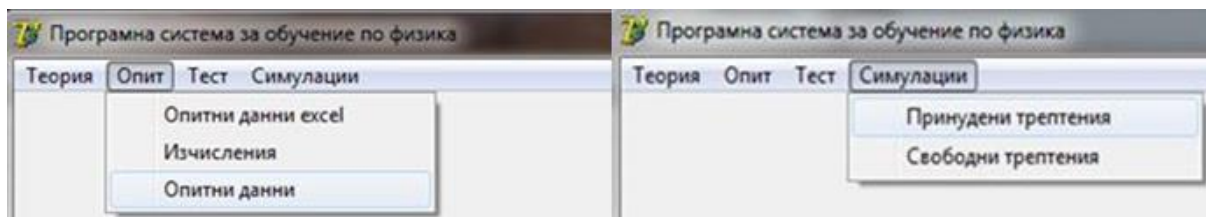


Figure 4.8. Start menu

Модул MainUnit.pas Initially, the Test Data Excel submenu must be opened. The students can get acquainted with sample test data (in blue) that was taken in advance and the results obtained for the relative permittivity. The file shows also calculated by the formula data on the voltage across the resistor, which allows comparison with the results of the experiment. The components used are Image, OpenFileDialog.

There are several tasks that the application must execute: 1) Preparing for the exercise and getting acquainted with the theory **module TheoryUnit.pas**; 2) Ability to enter experimental data, graphically present the data and record it **module DataUnit.pas**; 3) Perform calculations and saving them **module ComputationUnit.pas**; 4) Self-test (self-assessment) **module TestUnit.pas**

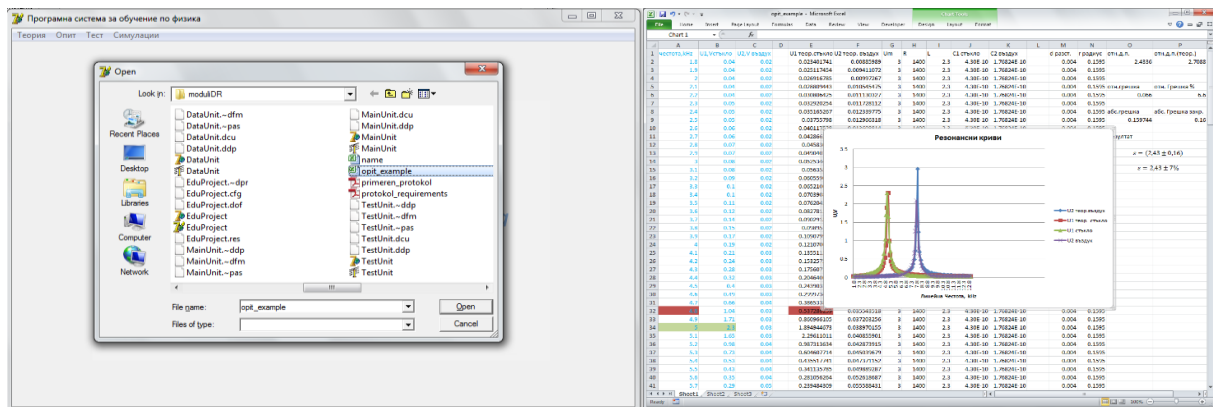


Figure 4.9. Sample test data.

Standart components are used, a component library TeeChart for Delphi has been added (VCL TeeChart). OLE technology is used (Object Linking and Embedding), developed by Microsoft that allows the insertion and linking of documents and other objects originally created with another application [18]. The following functionality is implemented with by means of of procedures and functions: **For module Theory:** Embedded a pdf file into a component AcroPdf; Saving (a) text from a component Memo into WordFile.docx according to the paragraphs. The components used are Memo, AcroPdf.

For moduule calculations: Input of experimental data from direct measurements; Data validation capability (possibility, opportunity); Checking whether all data is entered; Calculations, rounding and recording of necessary data in Excel file (.xlsx). The components used are RadioGroup, MaskEdit, Image, Button, Edit and others.

For module experimental data: Previewing measured in advance test data across a wide range (table AdoTable) with sample data and graphics that cannot be adjusted. The data is (located) in .mdb file; Graphic representation of the initial data; Transferring data to StringGrid , where they can be edited according to the student's experienced data – it is nessesary only part of the data to be corrected; Saving data into XlsFile.xlsx; Export chart - test data. The graphic is exported to a working directory as .bmp or on the clipboard. Some of the components used are StringGrid, DataSource, ADOTable, Series, Label, DBChart

For module Test: Embedding 1.pdf test into a form component; Ability to enter the answers to the test by pressing key 1; Prohibition of entering other characters or more than one character in a string field; Possibility to correct already given answer; Checking whether all the questions have been answered; Assessment of the test; Selecting another random self-test (self-assessment) and forma cleanup. The components used are StringGrid, AcroPDF, Label,Button

Simulation of free damping and non-damping oscillations

This module is implemented in Matlab, similar to the Forced oscillation module. The equations solved in 4.1.1 have been modified by eliminating the nonlinear charge dependence of the capacitor voltage. The module implements the following functionality: Variation of circuit parameters at (with) charged capacitor; Variation of parameters from which the capacitor capacity and inductance are calculated by the formula (showing dependencies); Relations between the period and the frequency, frequency and circular frequency etc.

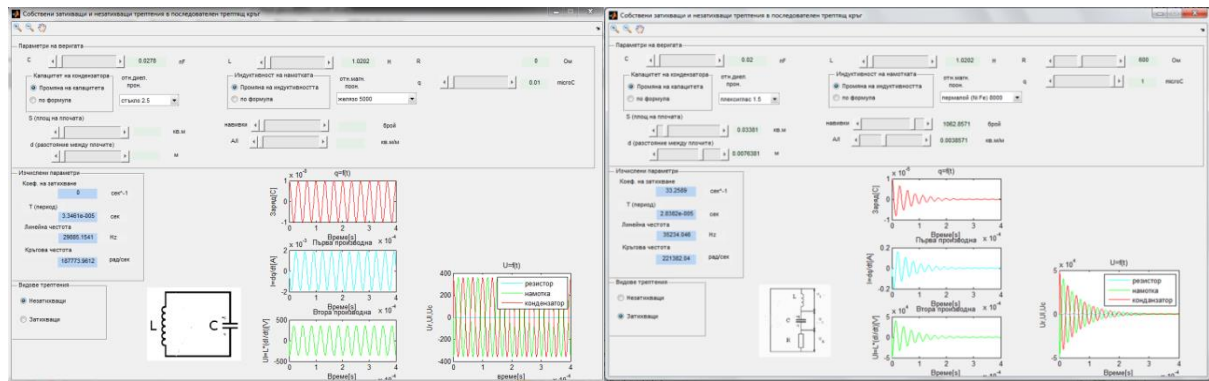


Figure 4.17. Graphs of undamped (left) and damped (right) oscillations

The type of oscillation can be switched at any time (damped and undamped), which allows comparison at the same parameters. Each time when clicking on sliders the form is updated. In conclusion, the developed program allows to visualize the results of oscillations in a oscillating circuit with nonlinear elements. Using this, a physics training system has been developed to assist students in the development of laboratory exercises.

SCIENTIFIC AND APPLIED CONTRIBUTIONS

Scientific and Applied:

6. A modification of the Monte Carlo method is developed and its applicability for determining the distribution function in gas discharges is proved.
7. A modification of the PIC / Monte Carlo method has been developed that allows the reduction of a three-dimensional capacitive discharge model to a one-dimensional.
8. For a first time, the PIC / Monte Carlo method was applied to investigate capacitive discharges with a large gap. It has been found that in a long capacitive discharge two plasma heating mechanisms acts simultaneously: stochastic heating close to the electrodes and joules heating in the plasma bulk
9. The variation of the distribution function along the capacitive discharge is studied for a first time in a model.

Applied:

10. Computer simulations of the studied methods have been developed, including parallelization of the program model, as well as a program system with capabilities for its application in training of the students.

LIST OF PUBLICATIONS

- A1. Kh. Tarnev and R. Pavlova
“Simultaneous existence of stochastic and ohmic heating in capacitive discharges”
J. Plasma Phys., **85**, 905850201, (2019), IF 2.312
- A2. Rositsa Pavlova, Bogdan Gilev and Khristo Tarnev
“Axial evolution of the electron energy distribution in capacitive discharges”
AIP Conference Proceedings, **2048**, 030007 (2018), SJR 0.182
- A3. Khristo Tarnev and Rositsa Pavlova
“Small radius capacitive discharges”
AIP Conference Proceedings, **2048**, 030008 (2018), SJR 0.182
- A4. Rositsa Pavlova and Khristo Tarnev
“Numerical simulations for determining the electron velocity distribution function in plasma” (in Bulgarian),
Дни на физиката '2013, Сборник доклади, редактори Е. Халова и С. Александрова, с. 79, ISSN 1313-9576, Издателство на Технически Университет - София (2013)
- A5. Rositsa Pavlova
“ Numerical simulations of electromagnetic oscillations ” (in Bulgarian),
Дни на физиката '2018, Сборник доклади, редактори Е.Халова, С. Александрова и Н. Кожухарова, том 10, с. 51, ISSN 1313-9576, Издателство на Технически Университет - София (2018)

References

1. J. P. Verboncoeur, Particle simulation of plasmas: review and advances, *Plasma Phys. Control. Fusion* **47**, A231 (2005)
2. P. Chabert, N. Braithwaite, *Physics of radio-frequency plasmas*, Cambridge University Press, Cambridge (2011)
3. Z. Donkó, *Progress on simulations of multiple-frequency capacitively coupled discharges*, GEC & ICRP (2010)
4. Seok Won Hwang, Ho-Jun Lee, Hae June Lee, Effect of electron Monte Carlo collisions on a hybrid simulation of a low-pressure capacitively coupled plasma, *Plasma Sources Sci. Technol.* **23**, 065040 (2014)
5. W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T.Vetterling, B.P.Flannery, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, Cambridge (1992)
6. L. Verlet, Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules, *Phys. Rev.* **159**, 98 (1967)
7. A. Sun, M. M. Becker, D. Loffhagen, PIC/MCC simulation of capacitively coupled discharges: Effect of particle management and integration, *Computer Physics Communications* **206**, 35 (2016)
8. W. Brok, thesis *Modelling of Transient Phenomena in Gas Discharges*, Eindhoven (2005)
9. П. Боровска, М. Лазарова, *Паралелна информационна обработка Системни архитектури, паралелни алгоритми, паралелно програмиране*, Сиела, София (2007)

10. MinGW-w64 - for 32 and 64 bit Windows <https://sourceforge.net/projects/mingw/>
11. OpenMP Reference Guide <https://www.openmp.org/resources/refguides/>
12. St. Lishev, Ts. Paunska, A. Shivarova and Kh. Tarnev, Matrix of small-radius radio-frequency discharges as a volume-production based source of negative hydrogen ions, *Rev. Sci. Instrum.*, **83**, 02A702 (2012)
13. Kh. Tarnev, I. Koleva, St. Lishev, Ts. Paunska, S. Iordanova, A. Shivarova, "Mode transition in a small-radius planar-coil inductively-driven discharge" 21st ESCAMPIG (Viana do Castelo, Portugal, 2012)
14. Xi-Ming Zhu, Wen-Cong Chen, Jiang Li, Zhi-Wen Cheng and Yi-Kang Pu, Spatial evolution of the electron energy distribution function in a low-pressure capacitively coupled plasma containing argon and krypton, *Plasma Sources Sci. Technol.* **21**, 045009 (2012)
15. И. Желязков, *Трептения и вълни*, Университетско издателство "Св.Климент Охридски", София (2000)
16. S. Chapra, *Applied numerical methods with MATLAB for engineers and scientists*, third edition, McGraw-Hill (2012)
17. MATLAB Product Help <https://www.mathworks.com/help/matlab/>
18. Ф. Елер, *Delphi 6*, ИнфоДАР, София (2002)

ACKNOWLEDGMENTS

I am grateful to Prof. Dr. Georgi Venkov for his advices and support as Dean of the Faculty of Applied Mathematics and Informatics at the beginning of my PhD.

I am grateful to the current Dean of the Faculty of Applied Mathematics and Informatics Assoc. Prof. Dr. Desislava Ivanova for the support on administrative and scientific issues.

I am grateful to Assoc. Prof. Dr. A. Rozeva, as Head of Department of Informatics and to the members of the department for the opportunity to be enrolled as a PhD student in the department, for guidance on how to improve the program, as well as for the good attitude towards me.

I am grateful to the Department of Applied Physics for the support and for the ensured conditions to work on my dissertation.

Thanks to Assoc. Prof. Khristo Tarnev, DSc, from whom I have learned a lot, about working together, about his professionalism, about his scientific motivation and for the time given to me. I also thank to him for his human qualities such as care, responsibility, dedication and his belief in goodness.

I am grateful to Prof. Dr. Milena Lazarova for the advices and help in presenting the results of the parallelization.

SUMMARY

Rositsa Pavlova

COMPUTER MODELLING OF CAPACITIVE DISCHARGES

The thesis consists of four chapters. Chapter 1 Literature review consists of four parts that discuss the basics of the modelling method “Particle in cell”, basic questions about capacitive discharges and determining the distribution function. Some specific issues related to the algorithms used, numerical methods and software are reviewed in the fourth part.

Chapter 2 discusses the application of the general scheme of the PIC/Monte Carlo gas discharge modeling method from Chapter 1 in the specific problems solved in the thesis. The stress is on to the modifications made to the traditional algorithms. Also a parallel programming model is proposed.

A new trend in the development of plasma sources is the construction of matrix sources consisting of a large number of small radius discharges. In this case, the distance between the electrodes can be much larger than the diameter of the electrode. In the experimental study of a single element of such a matrix plasma source some new effects related to the heating in the plasma bulk were observed. The motivation for the study in Chapter 3 is to explain these experimental results. However, the study goes beyond this frame and also addresses the more fundamental question of the mechanisms for plasma heating in capacitive discharges.

The entire capacitive discharge circuit can be represented as an electrical oscillating circuit with nonlinear elements. In this regard Chapter 4 sets out two objectives: Developing a software system for the study of oscillations in an oscillating circuit with nonlinear elements and the development of a software system for training in physics for laboratory exercise with an electrical oscillating circuit.