



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

**FAKULTA ELEKTROTECHNIKY
A KOMUNIKAČNÍCH TECHNOLOGIÍ**
FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING AND COMMUNICATION

ÚSTAV ELEKTROTECHNOLOGIE
DEPARTMENT OF ELECTRICAL AND ELECTRONIC TECHNOLOGY

**NUMERICKÉ MODELOVÁNÍ
(NE)KONVENČNÍCH ÚLOH
V ELEKTROTECHNOLOGII**
NUMERICAL MODELING OF (UN)CONVENTIONAL TASKS IN
ELECTROTECHNOLOGY

HABILITAČNÍ PRÁCE
HABILITATION THESIS

AUTOR PRÁCE
AUTHOR

Ing. Petr Vyroubal, Ph.D.

BRNO, 2019

Abstrakt

Předkládaná habilitační práce se zabývá problematikou nekonvenčních numerických simulací z oblastí, které jsou typické pro elektrotechnologii.

Cílem této práce je popsat danou problematiku a implementovat pokročilejší matematické funkce a modely do výpočetního programu, na jejichž základě je dále možné řešit mnohem robustnější sdružené úlohy.

Vybrané aplikace spadají do problematiky, která je aktuálně řešena Ústavem elektrotechnologie samostatně nebo ve spolupráci s AV ČR případně externí firmou. Jsou to oblasti modelování elektrochemických článků na úrovni elektrochemických reakcí, modelování proudění s nabitými částicemi pro hmotový spektrometr a modelování proudění plynu v elektronovém mikroskopu.

V práci jsou detailně popsány a vysvětleny stávající stavy přístupu k dané problematice a je prezentováno vlastní řešení, na kterém je demonstrována a ověřena funkčnost vytvořeného modelu. Těmito poznatky jsou doplněny i výukové materiály, jelikož v tuzemské literatuře je absence publikací s touto problematikou.

Klíčová slova

Numerické modelování, model, simulace, reakce, elektrochemie, proudění, nabitá částice, komora, clona, elektronový mikroskop.

Abstract

Presented habilitation thesis deals with problems of unconventional numerical simulations from areas typical for electro-technology.

The aim of this work is a description of the given problem and implementation of advanced mathematical functions and models into the program. This makes it possible to solve much more robust coupled-field tasks.

The selected applications belong to the issue, which is currently solved by the department of Electrical and electronic technology alone or in cooperation with the Academy of Sciences of the Czech Republic or external company.

It is a modeling of electrochemical cells at the level of electrochemical reactions, the flow of charged particles in mass spectrometers and gas flow in the electron microscope.

The thesis explains in detail the current states of approach to the issue and presents the own solution, that demonstrates the functionality of the created model.

The teaching materials are supplemented by this knowledge, as there is no publications on this topic in the domestic literature.

Keywords

Numerical modeling, model, simulation, reaction, electrochemistry, flow, charged particle, chamber, aperture, electron microscope.

Bibliografická citace

VYROUBAL, P., Numerické modelování (ne)konvenčních úloh v elektrotechnologii. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, 2019. 85 s.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svou habilitační práci na téma „Numerické modelování (ne)konvenčních úloh v elektrotechnologii,“ vypracoval samostatně a s použitím literatury, kterou jsem uvedl v seznamu literatury.

V Brně, dne 19. 9. 2019.

.....

Ing. Petr Vyroubal, Ph.D.

Poděkování

Na tomto místě bych rád poděkoval vedoucímu UETE, doc. Ing. Petru Bačovi, Ph.D., a celému pracovnímu kolektivu, který vytvořil, a stále tvoří, příjemné prostředí.

Děkuji svému doktorandovi Ing. Martinu Mačákovi, který se mnou realizoval spousty experimentů a mých myšlenek.

Dále děkuji svému kolegovi a především příteli, doc. Ing. Jiřímu Maxovi, Ph.D., se kterým spolupracuji již od magisterského studia, a který dokáže poradit a povzbudit ve chvílích kdy dochází síla a myšlenky.

V neposlední řadě patří díky mým rodičům, mé nastávající manželce a její rodině za vstřícnost, trpělivost a morální podporu v průběhu realizace této habilitační práce.

Zvláštní poděkování pak patří mému „habilitačnímu kamarádovi“ prof. Ing. Jiřímu Kazelle, CSc., kterého si velice vážím a děkuji mu za cenné rady, připomínky a veškerou pomoc při realizaci celého habilitačního řízení.

Petr Vyroubal

Obsah

Předmluva	9
1 Úvod	11
2 Výpočetní modely, chyby modelování, analogie a podobnosti.....	13
2.1 Chyby modelování	14
2.2 Analogie a typy úloh v závislosti na čase	14
2.3 Analytické a numerické řešení úlohy	17
2.4 Modelování interakce fyzikálních polí.....	21
3 Cíle a přínosy habilitační práce	23
4 Základní popis FLUENTu	24
4.1 Popis výpočetních formulací.....	24
4.2 UDF – uživatelem definované funkce.....	26
4.2.1 Příklad definice parabolického profilu proudění v ANSYS FLUENT.....	28
4.3 UDS - uživatelem definovaný skalár	29
5 Modelování reakcí na úrovni elektrochemického článku.....	31
5.1 Základní popis elektrochemického modelu	32
5.2 Metody výpočtu výsledného elektrického proudu	33
5.2.1 Primární metoda – Primary Current Distribution	33
5.2.2 Sekundární metoda – Secondary Current Distribution	34
5.2.3 Terciální metoda – Tertiary Current Distribution.....	35
5.3 Přístup FLUENTu k řešení.....	35
5.4 Proudění přes „porézní média“	37
5.5 Upravený model a jeho implementace do FLUENTu.....	38
5.6 Praktický příklad použitelnosti modelu	40
5.6.1 Modelování cyklické voltametrie	40
5.7 Shrnutí	43
6 Modelování proudění nabitých částic.....	45
6.1 Elektro/magneto-hydrodynamika.....	45
6.2 Popis pohybu náboje	46
6.2.1 Pohyb v homogenním elektrickém poli	46

6.2.2	Pohyb ve stacionárním magnetickém poli	47
6.2.3	Pohyb v homogenním elektrickém a stacionárním magnetickém poli	48
6.3	Metody výpočtu elektrických a magnetických polí	48
6.3.1	Metoda elektrického potenciálu - Electric Potential Method	49
6.3.2	Metoda magnetické indukce - Magnetic Induction Method	49
6.4	Propojení polí	49
6.5	Praktická aplikace - Hmotnostní spektrometr	50
6.5.1	Hmotnostní spektrometrie	50
6.6	Shrnutí	56
7	Modelování proudění ve vakuových komorách elektronového mikroskopu	58
7.1	Proudění plynu elektronovým mikroskopem	58
7.2	Možnosti výpočtového modelování	61
7.2.1	Stochastické CFD - Metoda Monte Carlo	61
7.2.2	Deterministické CFD	62
7.3	Porovnání deterministické CFD vs. DSMC na modelu diferenciálně čerpané komory	64
7.4	Srovnání s experimentálním měřením	70
7.5	Shrnutí	73
8	Závěr	74
	Bibliografie	76
	Seznam symbolů a veličin	81
	Seznam obrázků	83
	Seznam tabulek	85

Předmluva

Předkládaná habilitační práce shrnuje výsledky vědecko-výzkumné činnosti autora, dosažené v období od roku 2013 do roku 2019 (včetně), a to z oblasti matematického modelování fyzikálních úloh pomocí finitních numerických metod.

V rámci působení v Centru výzkumu a využití obnovitelných zdrojů energie (CVVOZE) - CZ.1.05/2.1.00/01.0014 a navazujícím projektu Energie v podmínkách udržitelného rozvoje (EPUR) - LO1210, jehož řešitelem byl prof. RNDr. Vladimír Aubrecht, CSc., se autor této habilitační práce věnuje problematice matematického modelování v oblastech elektrochemických zdrojů proudu, modelování proudění nabitých částic a proudění plynu ve vakuových komorách elektronového mikroskopu. Numerickému modelování se věnoval i jako spoluřešitel v grantech Materiály a technologie pro elektrotechniku II a III (FEKT-S-14-2293 a FEKT-S-17-4595).

Společně se svým doktorandem se autor věnuje problematice modelování elektrochemických reakcí v elementárních bateriových článcích. V této části je hlavním přínosem implementace modifikovaného matematického modelu do simulačního prostředí FLUENT, jenž po modifikaci umožňuje korektně modelovat elektrické dvojvrstvy a cyklickou voltametrii.

Dále se věnuje možnosti modelování pohybu nabitých částic a demonstruje implementovaný model na zjednodušeném modelu hmotového spektrometru. Na tomto modelu spolupracoval se svým doktorandem a diplomanty. Přínosem v této části je implementace matematického modelu umožňujícímu korektně simulovat proudění s nabitými částicemi. Zde se předpokládá budoucí doplnění modelu o relativistický popis a jeho následná kombinace s modely proudění plynu v elektronové mikroskopii.

V poslední části se společně s doc. Ing. Jiřím Maxou, Ph.D. z Ústavu elektrotechnologie a Ing. et. Ing. Vilémem Nedělou, Ph.D. z Ústavu přístrojové techniky AV ČR, autor věnuje výzkumu a vývoji v oblasti čerpání vakuových komor environmentálních rastrovacích elektronových mikroskopů. Hlavním přínosem této části je možnost nahrazení stochastické metody Monte Carlo, použité pro výpočet hydrodynamických parametrů v těchto komorách, standardní CFD metodou.

Hlavním pojátkem celé práce je studium numerických metod a implementace matematických modelů, které umožňují nekonvenční řešení úloh z uvedených oblastí.

Z výše uvedené vědecko-výzkumné činnosti vzniklo několik impaktovaných publikací a recenzovaných článků v databázích Scopus a Web of Science.

Mimo jiné, v oblasti smluvního výzkumu autor aktivně spolupracuje s tuzemskými firmami (např. ABB, Tescan, IMI, aj.) na simulacích a optimalizacích jejich výrobků.

Dále autor aktivně spolupracuje na pozici externího pracovníka ve firmě SolidVision, s.r.o., kde se věnuje testování a vývoji návrhového systému pro desky plošných spojů.

Autor se snažil celou práci koncipovat tak, aby mohla posloužit jako pomocný materiál pro studenty a případné zájemce o danou problematiku matematického modelování.

1 Úvod

Od počátku vývoje a historie technicky zaměřených vědních disciplín je prvotním záměrem konstruktérů najít systém, na jehož základě by bylo možné popsat, navrhnout a ověřit chování a charakteristiky konstruovaného technického zařízení. Velmi široké množství takovýchto úloh lze v teoretické rovině popsat soustavou diferenciálních rovnic.

Problematika řešení diferenciálních rovnic je však velice složitá. Analytická řešení diferenciálních rovnic nejsou vždy dostupná, a pokud existují, bývá cesta k nim složitá a pro inženýra, který v dané situaci hledá rychlé a efektivní řešení, problematičtější.

Příkladem může být soustava Navier-Stokesových rovnic, které se v praxi používají pro řešení proudění tekutin. Tato soustava je analyticky řešitelná jen v několika málo případech jednoduchých toků. Ve složitějších případech je nutno rovnici řešit numericky¹.

Matematický aparát pro numerické řešení, který se jeví jako nejvhodnější, jsou finitní metody a to zejména metoda konečných objemů.

Výhoda numerického řešení je v tom, že je v zásadě dostupné pro každou matematicky popsanou úlohu, jakékoliv geometrie a jakkoliv komplikovanou, toto je však omezeno kapacitou dostupného hardware a časovými nároky na výpočet. Nevýhodou oproti analytickému řešení je to, že výsledky numerického řešení se vztahují jen ke konkrétní úloze a jakékoliv úpravy a optimalizace vyžadují opakování celého procesu tvorby a řešení modelu v iteračním procesu.

Základy numerických metod byly postaveny již v roce 1910, kdy bylo použito poprvé metody konečných diferencí (MKD), kterou považujeme za zřejmě nejstarší způsob řešení parciálních diferenciálních rovnic (PDR). Dále pak datujeme metodu konečných prvků (MKP) do roku 1943 (poprvé použita Courantem), tato metoda se po modifikaci používá dodnes. S výhodou je nasazována na problematiku řešení elektromagnetických polí a mechaniku tuhých těles. Její hlavní výhodou je, že přináší velmi přesné výsledky i na hrubé výpočetní síti, ale nehodí se pro výpočet proudění tekutiny, zejména turbulentního.

Od r. 1952 se masově začaly rozvíjet numerické metody pro výpočet proudění. Základy byly položeny v Národní laboratoři v Los Alamos (vznik v rámci projektu Manhattan a vývoj vodíkové bomby), kde vznikla potřeba řešit dynamiku tekutin CFD (Computational Fluid Dynamics). V roce 1968 byla vyvinuta metoda konečných objemů (MKO), která se po modifikaci používá dodnes pro řešení proudového a talkového pole tekutiny a turbulencí.

¹ Nadace Clayova matematického institutu zařadila vyřešení Navier-Stokesových rovnic na seznam sedmi nejdůležitějších matematických problémů (takzvaných Problémů tisíciletí). Na každý z nich je vypsána odměna milion dolarů.

I přesto že jsou v dnešní době numerické metody rozšířené téměř do všech vědních disciplín, je tvorba globálního modelu nadále velmi náročná a stává se z několika částí.

Modelování geometrických oblastí a jejich rozdělení na konečný počet prvků/objemů a uzlů sítě se nazývá geometrický model, sestavení diferenciálních rovnic s definicemi vlastností funkcí na rozhraní je modelem fyzikálním. Řešení funkcionálu diferenciálních rovnic a převedení diferenciálních rovnic na soustavu algebraických rovnic je modelem matematickým.

Jsou používány přímé a nepřímé metody řešení. Nepřímá metoda spočívá v definici společné veličiny, díky které jsou vyjádřeny vazby mezi PDR, a řešení je prováděno v několika krocích. Naopak přímá metoda tkví v tom, že za pomoci společné veličiny jsou sestaveny vazební rovnice a řešení je provedeno v jednom kroku.

S rostoucími požadavky na náročnost a komplexnost moderních elektronických zařízení a s nástupem Průmyslu 4.0 a sním spojené digitalizace a virtualizace, je dnes již nezbytně nutné pro návrh výrobků využívat numerické simulace.

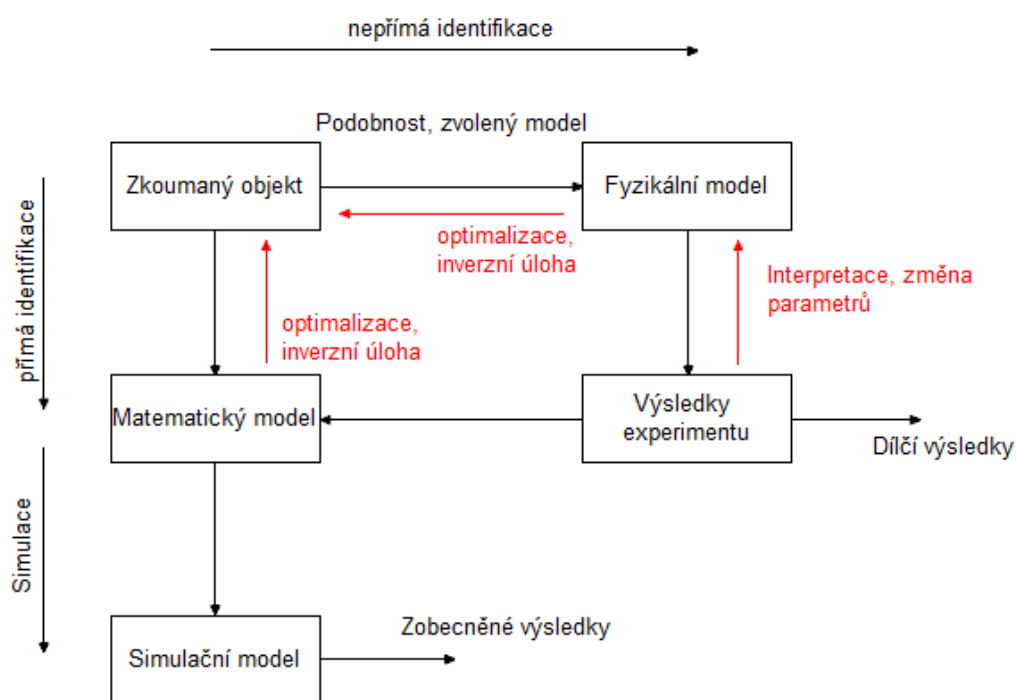
2 Výpočetní modely, chyby modelování, analogie a podobnosti

V technické praxi se setkáváme v zásadě se dvěma typy přístupů při řešení problému, a to přímá a nepřímá identifikace řešení.

Přímá identifikace spočívá v tom, že formulovaný problém je řešen zvoleným postupem, ten může být: odhad, intuice, cit, zkušenost, a tento buď vede, nebo nevede k cíli, tedy k řešení. Nevede-li daný postup k cíli, začneme řešit jinou metodou. Jedná se vlastně o metodu pokus - omyl.

Nepřímá identifikace spočívá v tom, že místo formulovaného problému se řeší jiný problém, který je snadněji zvládnutelný. Prostřednictvím jeho řešení je získáno řešení primárně formulovaného problému. Je to tedy řešení „oklikou“ - tj. řešení, při němž řešitel využívá svých schopností přemýšlet, hodnotit, posuzovat a srovnávat různé varianty a především jednat účelově, snažit se dosáhnou cíle s minimálním úsilím.

Schéma postupu při přímé a nepřímé identifikaci a tvorbě modelu je základním krokem v orientaci a volbě nástrojů modelování (viz Obrázek 2.1).



Obrázek 2.1: Postup při přímé a nepřímé identifikaci problému.

Modelování neboli simulace představuje experimentální proces, při němž se zkoumanému objektu (originálu, modelovému systému) jednoznačně dle určitých kritérií, přiřazuje model matematický (modelovaný objekt). Modelem může být:

- Fyzický model
- Abstraktní model
- Kombinovaný model

Fyzický model umožňuje provádět experimenty s modelem a zkoumat tak vlastnosti originálu (na modelu) pomocí dějů stejné fyzikální podstaty. Příkladem může být zkoumání obtékání vzduchu kolem modelu auta v aerodynamickém tunelu. Základním rysem experimentu je jeho opakovatelnost za srovnatelných podmínek.

Kromě fyzického modelu můžeme originálu přiřadit model abstraktní. Ten je výsledkem některé obecné vědy. Tento model již neumožňuje provádět experimenty stejné fyzikální podstaty. Umožňuje zkoumat jevy probíhající na originálu pomocí matematického popisu jejich průběhů (výpočtové modely).

Kombinovaný model je takový, kdy část modelu je fyzická a část abstraktní [1].

2.1 Chyby modelování

Chyba je realita, se kterou musí každý výpočtář počítat. Chyby při numerickém modelování můžeme rozdělit do několika kategorií.

Nejzávažnější chyba je tzv. chyba kvalitativní, kdy daný model neobsahuje všechny důležité vlastnosti, podstatné z hlediska řešení daného problému. Takováto chyba je těžko odhalitelná. Model se chová správně, ale neřeší námi hledaný problém.

Opakem předchozí chyby je chyba složitosti, kdy model obsahuje kromě podstatných vlastností i vlastnosti nepodstatné. V lepším případě se jen prodlouží doba řešení problému, v horším případě nemusíme získat řešení úlohy vůbec.

Dalším typem chyby je chyba kvantitativní, kdy model obsahuje všechny podstatné vlastnosti z hlediska řešení problému, ale jejich kvantitativní vyjádření je na dané rozlišovací úrovni pro řešení problému nedostatečné.

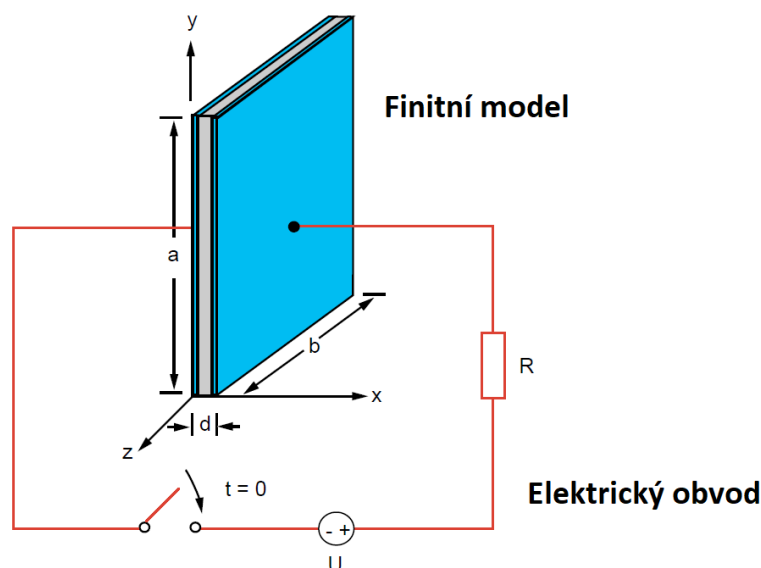
Jednou z nejčastějších chyb, která se vyskytuje při numerickém řešení, je chyba konkretizační. Model je vytvořen správně, obsahuje všechny podstatné vlastnosti, ale při jeho vlastním řešení vznikne chyba, např. chybné zadání vstupních údajů, chyba v nevhodné volbě použitého programu, aj. Tento typ chyb je snadno odhalitelný kontrolou získaných výsledků.

2.2 Analogie a typy úloh v závislosti na čase

Numerické modelování v elektrotechnice můžeme v zásadě rozdělit na modely obvodové, kdy řešíme například odezvu určitého obvodu na vstupní signál a sledujeme přechodový děj (například RC článek a odezva na jednotkový skok). Typickými zástupci jsou programy na bázi SPICE modelů (behaviorální modelování).

Dále pak modely finitní, kdy řešíme například magnetické pole kolem cívky, nebo rozložení elektrostatického pole v dielektriku.

Modely kombinované pak mohou zahrnovat na jedné straně obvodový model, který „budí“ model finitní. Tento případ ilustruje Obrázek 2.2, na kterém je znázorněn kombinovaný model pro časovou analýzu kondenzátoru se ztrátovým dielektrikem. Rezistor R reprezentuje ztráty dielektrika a po sepnutí spínače dojde k přechodovému ději. Finitním modelem je deskový kondenzátor a obvodové členy jsou s ním spojeny na konkrétním uzlu výpočetní sítě.



Obrázek 2.2: Ukázka propojení finitního a obvodového modelu – analýza přechodového děje v kondenzátoru se ztrátovým dielektrikem [2].

Různé typy modelování mají různé formy analogií a podobností. Podobnost lze brát jako vzájemné přiřazení mezi různými systémy v jejich struktuře, vlastnostech a chování.

Fyzikální podobnost zachycuje podobnost procesů se stejnou fyzikální podstatou (podobnost parametrů, geometrie, aj.). Podobnost systémů a procesů se stejným matematickým popisem nazýváme matematickou. Dva fyzikálně odlišné systémy mohou být matematicky podobné, tyto systémy pak nazýváme analogické.

Vezměme si pro příklad Maxwellovy rovnice pro řešení elektrických a magnetických polí, které popisují divergenci a gradient veličin charakterizujících dané zkoumané pole. Pro úplný popis zkoumané úlohy je nutné tyto rovnice doplnit i o popis chování zkoumaných veličin na rozhraní dvou různých materiálů, což je nutné pro nalezení absolutního řešení, které dostatečně přesně charakterizuje děje ve zkoumané oblasti i vzhledem k okolí. Maxwellovy rovnice potom společně rovnicemi popisujícími kontinuitu (spojitost) polí dávají úplný popis o průběhu hledané veličiny v dané oblasti.

Podobně je pak možné řešit úlohy tepelné, mechanické, úlohy toku kapalin aj., využívá se výše zmíněných analogií polí. Nejznámějšími analogiemi jsou elektro-tepelné analogie, kdy se využívá převodu úloh sdílení tepla na analýzu elektrických obvodů. Některé typy analogií uvádí Tabulka 2.1.

Tabulka 2.1: Analogie některých typů fyzikálních polí.

veličina	elektrostatické pole	proudové pole	magnetické pole	teplotní pole	gravitační pole ²
potenciál	potenciál	potenciál	potenciál	teplota	Newtonův potenciál
gradient potenciálu	intenzita elektrického pole	intenzita elektrického pole	intenzita magnetického pole	gradient teploty	gravitační síla
vlastnost	permitivita	elektrická vodivost	permeabilita	tepelná vodivost	gravitační zrychlení
hustota pole	elektrická indukce	proudová hustota	magnetická indukce	hustota tepelného toku	specifická hmotnost

Podle předcházející tabulky je pak možné řešení nalezené pro některý typ úlohy přímo aplikovat na ekvivalentní veličiny [3].

Důležitým aspektem je také závislost dané úlohy na čase. Podle tohoto kritéria můžeme rozdělit úlohy do dvou kategorií, a to:

- Stacionární
- Nestacionární

Řada systémů se chová tak, že při změně okolních podmínek proběhne přechodový děj, během kterého se stavové parametry systému mění v čase. Po určité době dojde k ustálení stavu, kdy je časová změna parametrů systému nulová.

Systém se tedy dostal do stacionárního stavu. Stacionární analýza řeší právě tento výsledný stav, aniž by byl brán v úvahu přechodový děj. Řešení je nezávislé na čase.

Naproti tomu cílem nestacionární analýzy je získat stavové parametry systému jako funkce času. Volba typu analýzy souvisí s cílem řešení a rozhoduje o něm řešitel problému.

Pojmy statická a dynamická analýza jsou zavedeny v oblasti mechaniky a kinematiky. Rozlišují se případy, kdy jsou a nejsou uvažovány setrvačné síly ve výpočtu. Někdy jsou pojmy statický a stacionární zaměňovány. Obdobně tak nestacionární s pojmem dynamická. Ve většině případu to platí, ne však vždy.

V případě elektrického a magnetického pole pak můžeme hovořit i o stavu takzvaném kvazi-stacionárním. Z makroskopického hlediska se tím rozumí nestacionární pole v přiblížení, kdy časové změny prostorového rozložení nábojů jsou vždy natolik pomalé, že elektrické proudy, které jsou zdrojem pole, lze stále považovat za časově neměnné.

Matematicky to znamená, že zanedbáváme člen s časovou derivací v rovnici pro kontinuitu elektrického proudu. Touto metodou lze pak řešit například indukci vířivých proudů v magnetickém obvodu, aj.

² Tato analogie platí pouze za určitých a předem stanovených podmínek.

Z hlediska klasifikace matematických modelů pak můžeme dále hovořit i o následujícím rozčlenění:

- **Lineární a nelineární modely**

Pokud jsou funkce (podmínky) a omezení reprezentovány lineárními rovnicemi, model označujeme jako lineární. Pokud je alespoň jedna z podmínek nebo omezení reprezentováno nelineární rovnicí, model označujeme jako nelineární.

- **Stochastické a deterministické (pravděpodobnostní) modely**

Deterministický model vykazuje po opakování pokusu za stejných počátečních podmínek stejné chování, zatímco při stochastickém modelu je přítomna náhoda, i když jsou počáteční podmínky stejné.

- **Statické a dynamické modely**

Statický model neuvažuje vliv času, zatímco dynamický model ano. Dynamické modely jsou obvykle reprezentovány rekurentními nebo diferenciálními rovnicemi.

- **Modely se soustřednými a rozloženými parametry**

Pokud je model homogenní (v konzistentním stavu v každé části systému), parametry jsou soustředěny. Pokud je systém heterogenní (rozdílný stav v různých částech systému), jsou parametry rozloženy. Rozložené parametry jsou obvykle reprezentovány parciálními diferenciálními rovnicemi.

2.3 Analytické a numerické řešení úlohy

Numerické metody nacházejí své uplatnění především v situacích, kdy analytické řešení nedokážeme najít. Při analytickém řešení hledáme výsledek ve tvaru spojitých funkcí. Výhodou tohoto, historicky staršího postupu je, že v případě nalezení analytického řešení v uzavřeném tvaru máme k dispozici obecnou funkční závislost mezi vstupními veličinami (proměnnými) a výstupními veličinami řešeného problému. S takto získaným předpisem pak lze jednoduše pracovat a je použitelný pro obdobný typ problémů. Základním problémem však je, že nalezení analytického řešení v uzavřeném tvaru je možné pouze pro velmi omezenou škálu úloh. Zpravidla se jedná o úlohy s jednoduchou geometrií a při odvození je použito mnoho zjednodušení [4].

Řešení numerické je řešení přibližné. Při tomto postupu se převádí problém hledání spojitých funkcí na problém hledání konečného počtu neznámých parametrů, pomocí nichž se hledané funkce přibližně aproximují. Tento přechod se označuje jako diskretizace spojitého problému.

Diskretizovaný problém je řešen algebraickými prostředky v konečném počtu kroků. Bez použití výpočetní techniky je tento proces velice obtížně zvládnutelný a to je hlavním důvodem, proč se numerické metody začaly bouřlivě rozvíjet až v druhé polovině dvacátého století.

V následujícím textu bude řešen jednoduchý problém elektrostatické úlohy, na kterém bude ukázáno získání analytického řešení a získaný výsledek bude srovnán s řešením numerickým.

Podívejme se nyní na řešení problému analýzy elektrostatického pole. Zdrojem elektrostatického pole v přírodě je elektrický náboj, jenž ve svém okolí budí elektrostatické pole.

V technických aplikacích je buzení elektrických polí realizováno objemovou, plošnou nebo liniovou hustotou náboje, v praxi je pak nejčastějším případem buzení plošnými volnými náboji na povrchu kovových elektrod (typicky kondenzátor).

Elektrostatické pole je pak v řešené oblasti Ω s nábojovou hustotou ρ_0 popsáno Poissonovou diferenciální rovnicí:

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} \varphi = -\frac{\rho_0}{\varepsilon} \quad (2.1)$$

V případě nehomogenního dielektrika s permitivitou $\varepsilon = \varepsilon(x, y, z)$ a volným nábojem s objemovou hustotou ρ_0 je pak vhodné psát rovnici ve tvaru:

$$\operatorname{div} (\varepsilon \operatorname{grad} \varphi) = -\rho_0 \quad (2.2)$$

Rozepsáno v kartézských souřadnicích:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) = -\rho_0 \quad (2.3)$$

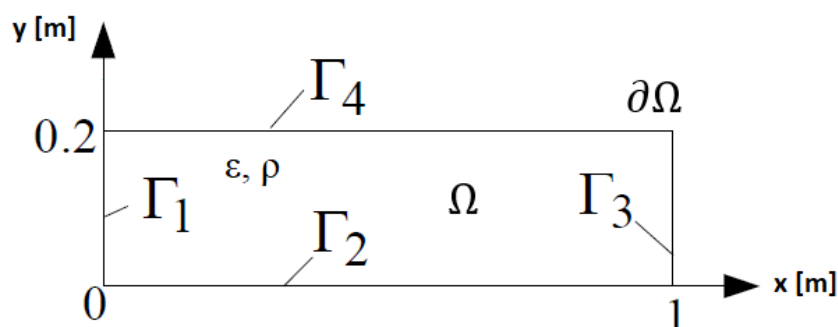
a v případě ortotropního dielektrika je permitivita ε symetrickým tenzorem $\varepsilon = \varepsilon(\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z)$. Složky tohoto tenzoru je pak možno vyjádřit ve směru hlavních os:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) = -\rho_0 \quad (2.4)$$

Při řešení diferenciálních rovnic, je funkcí, jenž jim vyhovují v řešené oblasti Ω nekonečně mnoho. V našem případě hledáme taková řešení, jenž současně vyhovují předepsaným podmínkám pro φ na hranici $\partial\Omega$ této oblasti.

Úplný matematický model je dán diferenciální rovnicí, fyzikálními parametry, geometrickým tvarem uvažované oblasti a rovnicemi pro počáteční a okrajové podmínky (Dirichletovy a Neumannovy). Tyto 4 parametry pak jasně definují podmínky jednoznačnosti řešení [5].

Nyní tedy přejdeme k praktickému řešení, kdy máme nalézt rozložení elektrického potenciálu v dielektriku, tedy hledáme funkci $\varphi(x)$ vyhovující Poissonově rovnici. Jde tedy o analogii k elektrostatické úloze. Úlohu reprezentuje Obrázek 2.3.



Obrázek 2.3: Grafická formulace úlohy.

Pro jednoduchost bude úloha formulována jako 2D na oblasti Ω o rozměrech $0,2 \times 1$ m, pro x z intervalu $(0, 1)$. Parametry permitivity a nábojové hustoty zvolme za jednotkové, tedy $\epsilon, \rho_0 = 1$. Dirichletova okrajová podmínka je ve tvaru $\varphi|_{x=0} = 0$ na Γ_1 a $\varphi|_{x=1} = 1$ na Γ_3 . Neumannova podmínka ve tvaru $\partial\varphi/\partial n = 0$ na Γ_2 a Γ_4 , tato podmínka je splněna explicitně ve většině dostupných řešičů.

Využitím pravidel pro vlastnosti součinu diferenciálních operací v kartézském systému získáme z rovnice (2.2) diferenciální rovnici druhého řádu:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\frac{\rho_0}{\epsilon} \quad (2.5)$$

Nejprve je nutné zbavit se derivací na levé straně, rovnici tedy integrujeme:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\rho_0}{\epsilon} x + C_1 \quad (2.6)$$

a poté ještě jednou:

$$\varphi = -\frac{\rho_0 x^2}{\epsilon} + C_1 x + C_2 \quad (2.7)$$

Dosazením zadaných hodnot ϵ a ρ_0 pak získáme tvar:

$$\varphi = -\frac{x^2}{2} + C_1 x + C_2 \quad (2.8)$$

Integrační konstanty C_1 a C_2 určíme z okrajových podmínek pro $\varphi|_{x=0} = 0$ a $\varphi|_{x=1} = 1$:

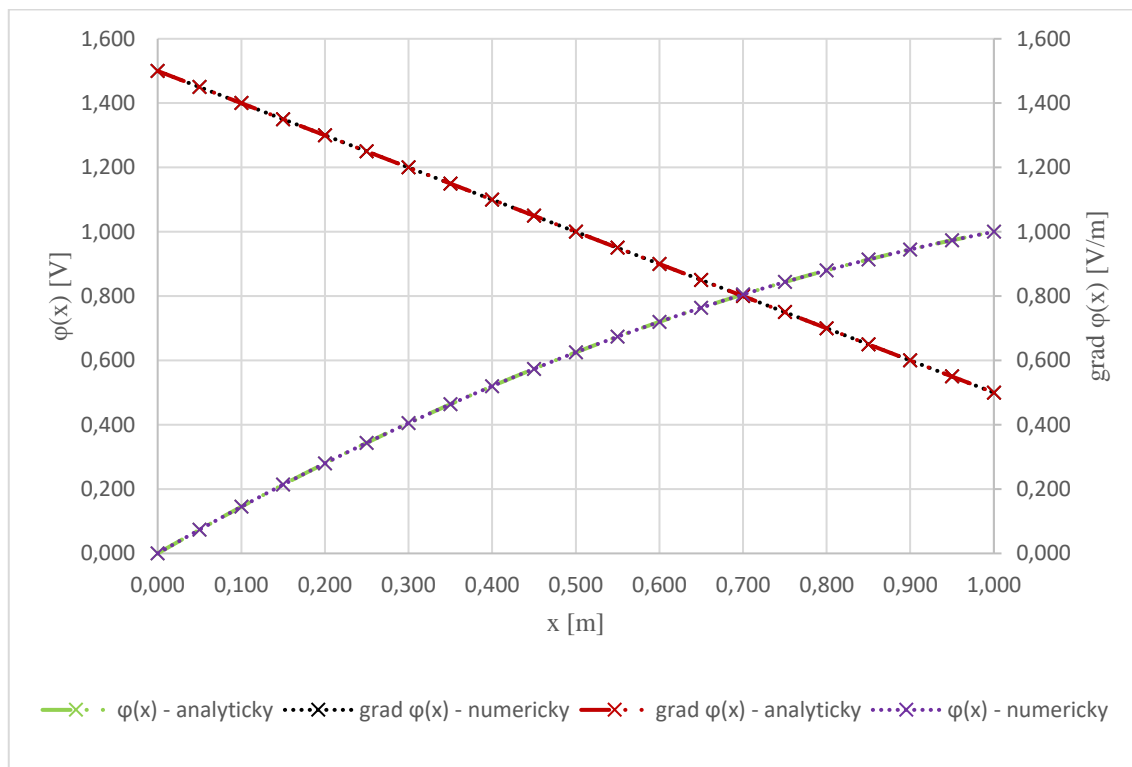
$$0 = -\frac{0^2}{2} + C_1 \cdot 0 + C_2 \rightarrow C_2 = 0 \quad (2.9)$$

$$1 = -\frac{1^2}{2} + C_1 \cdot 1 + 0 \rightarrow C_1 = \frac{3}{2} \quad (2.10)$$

$$\boxed{\varphi = -\frac{x^2}{2} + \frac{3}{2}x} \quad (2.11)$$

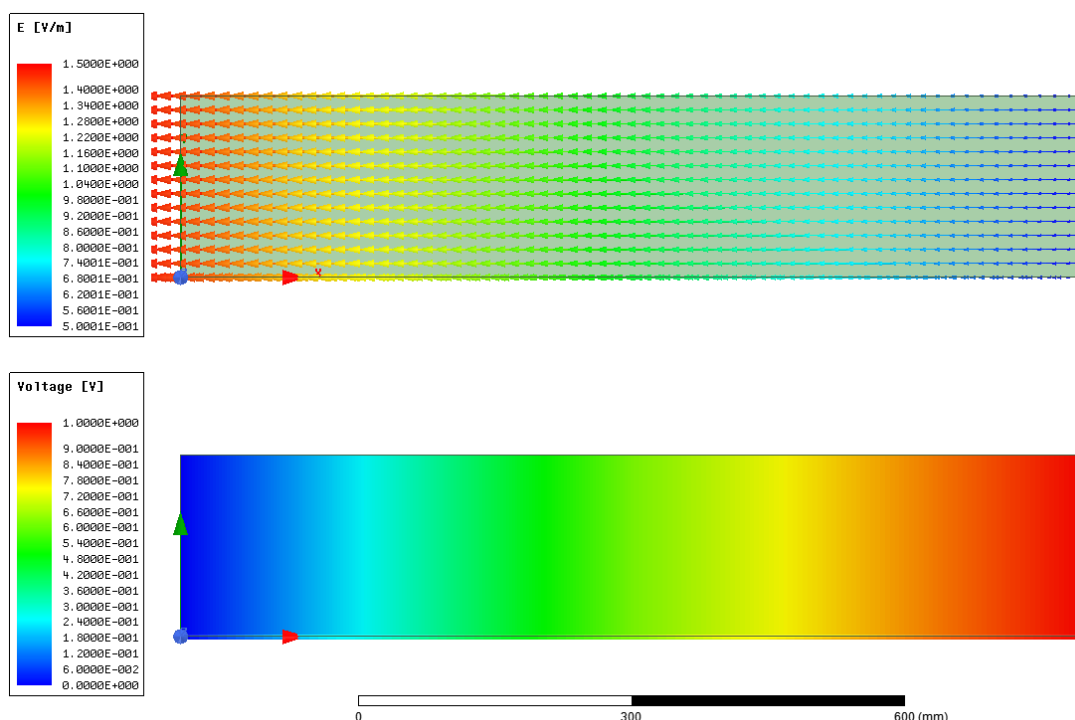
$$\text{grad } \varphi = -x + \frac{3}{2} \quad (2.12)$$

Získali jsme tedy analytické řešení Poissonovy rovnice pro předepsané okrajové podmínky. Dosazením za x z intervalu $\langle 0, 1 \rangle$ získáme pro průběh potenciálu a jeho gradientu, tuto závislost ilustruje Obrázek 2.4. Na tomto obrázku je vyneseno i řešení numerické, které bylo získáno za pomoci konečně-prvkového systému ANSYS Maxwell. Je patrné, řešení jsou identická.



Obrázek 2.4: Analytické a numerické řešení Poissonovy rovnice.

Na následujícím obrázku je možné vidět mapované výsledky na konečné prvky v modelu.



Obrázek 2.5: Mapované výsledky potenciálu a intenzity elektrického pole na řešené geometrii.

2.4 Modelování interakce fyzikálních polí

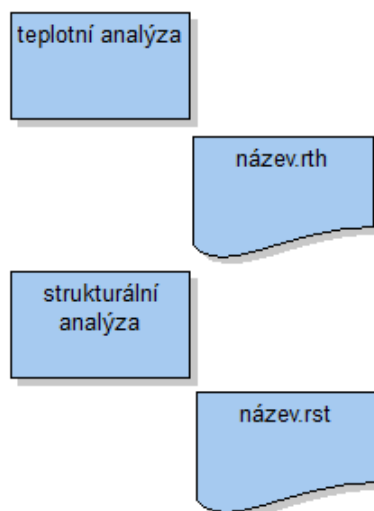
O takzvané sdružené úloze hovoříme tehdy, když numerický model zasahuje do vícera odvětví inženýrské praxe. Tedy výsledky jedné analýzy slouží jako okrajové podmínky pro analýzu jinou, typickým příkladem jsou takzvané FSI (z angl. Fluid – Structure Interaction) analýzy, kdy na jedné straně modelujeme deformačně napěťovou analýzu tuhého tělesa a na straně druhé sledujeme, jak se mění proudové pole tekutiny, aj..

Při analýze sdružených polí, rozlišujeme dva základní přístupy a to sekvenční a přímý postup. Při sekvenčním řešení dvou nebo více analýz je postup takový, že se izolovaně, řeší problematika každého pole separátně a výsledky jednotlivých analýz slouží jako vstupní počáteční a okrajové podmínky pro úlohu následující. Příkladem může být řešení teplotního pole v tělese, kdy výsledkem je teplota v jednotlivých uzlech výpočetní sítě a do mechanické analýzy, pro výpočet pnutí v tělese, je na model aplikováno zatížení objemovou silou [6].

U přímé metody je v modelu využito společného prvku, který obsahuje všechny dané stupně volnosti (hledané neznámé) a výpočet interakce polí se provádí naráz.

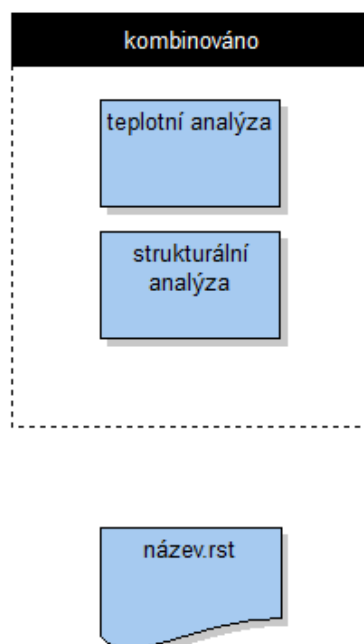
Sekvenční metodu s výhodou použijeme tehdy, pokud se jedná o úlohy, které nevykazují vysoký stupeň nelinearity. Sekvenční metoda je v tomto případě efektivnější a flexibilnější, jelikož můžeme nezávisle na sobě provádět dvě a více různých analýz. Typicky můžeme provést nelineární analýzu přestupu tepla následovanou lineární analýzou statického zatížení tělesa. Potom můžeme využít teplotu v uzlu z libovolného

časového nebo zatěžovacího kroku v tepelné analýze a použít ji pro analýzu mechanického napětí. Schéma sekvenčního postupu řešení ilustruje Obrázek 2.6.



Obrázek 2.6: Schéma postupu při sekvenční analýze.

Přímá metoda je výhodná tehdy, vykazuje-li vázaný systém vysokou nelinearitu. V takovém případě jsou v jednom zatěžovacím nebo časovém kroku řešeny všechny hledané veličiny. Typicky se jedná o přenos tepla v proudící tekutině nebo analýzy z oblasti piezoelektriny (publikováno v [7]). Schéma přímého postupu řešení ilustruje Obrázek 2.7.



Obrázek 2.7: Schéma postupu při přímé analýze.

3 Cíle a přínosy habilitační práce

Cílem habilitační práce je rozvinout problematiku numerického modelování v úlohách, jejichž řešení není možné získat standardní cestou. Jedná se o úlohy, které jsou nelineární, s rozloženými parametry a vyznačují se značným stupněm složitosti.

Konkrétně se jedná o problematiku:

- Modelování reakcí v elektrochemických člancích
- Proudění nabitých částic v hmotovém spektrometru
- Proudění plynu ve vakuových komorách elektronového mikroskopu

Tyto oblasti byly zvoleny záměrně, z důvodu řešení těchto úloh na Ústavu elektrotechnologie. Prezentované analýzy v současné době slouží jako alternativa k reálným experimentům, které jsou náročné na realizaci, nebo je není možné vůbec uskutečnit.

Vědecká část práce si klade za cíl:

- Hlubší studium a popis prezentované problematiky na úrovni matematických modelů, které v dané oblasti slouží k jejímu numerickému řešení.
- V případě modelování reakcí v elektrochemických člancích (kapitola 5) a proudění nabitých částic (kapitola 6), je cílem implementace a ověření robustnějších matematických modelů do prostředí FLUENT prostřednictvím vlastních definovaných funkcí.
- V případě modelování proudění plynu ve vakuových komorách elektronového mikroskopu (kapitola 7), je cílem ověřit možnost modelování hydrodynamických jevů pomocí standardní metody CFD namísto stochastické metody Monte Carlo.

Kapitoly 5, 6 a 7 zároveň přinášejí původní výsledky v oblasti výzkumu a vývoje v prezentované oblasti přičemž základy, na kterých tyto kapitoly staví, byly autorem průběžně publikovány v odborných vědeckých časopisech.

Z pedagogického hlediska je možné, aby práce posloužila čtenáři jako prostředek pro získání teoretické základny a metodiky, kterou je přistupováno v dané problematice při tvorbě vlastního numerického modelu pomocí uživatelem definovaných funkcí. Prezentovanou tematikou jsou aktualizována témata ve výukových materiálech pro přednášky a počítačová cvičení předmětů věnovaných problematice počítačové simulace. Jedná se především o předměty *Třírozměrné modelování a simulace*, *Projektování a simulace výroby*, *Řízení a správa dat* a *Návrh a konstrukce elektrotechnických zařízení*.

4 Základní popis FLUENTu

Při nekonvenčním numerickém řešení úloh je nezbytně nutné, aby vybraný simulační program umožnil uživateli zasáhnout do výpočtu a to v podobě možnosti definice vlastních funkcí. Je totiž logické, že standardní rozhraní není nikdy naprogramováno tak, aby pokrylo všechny uživatelské potřeby, například v podobě doplnění nebo úpravy vestavěných rovnic.

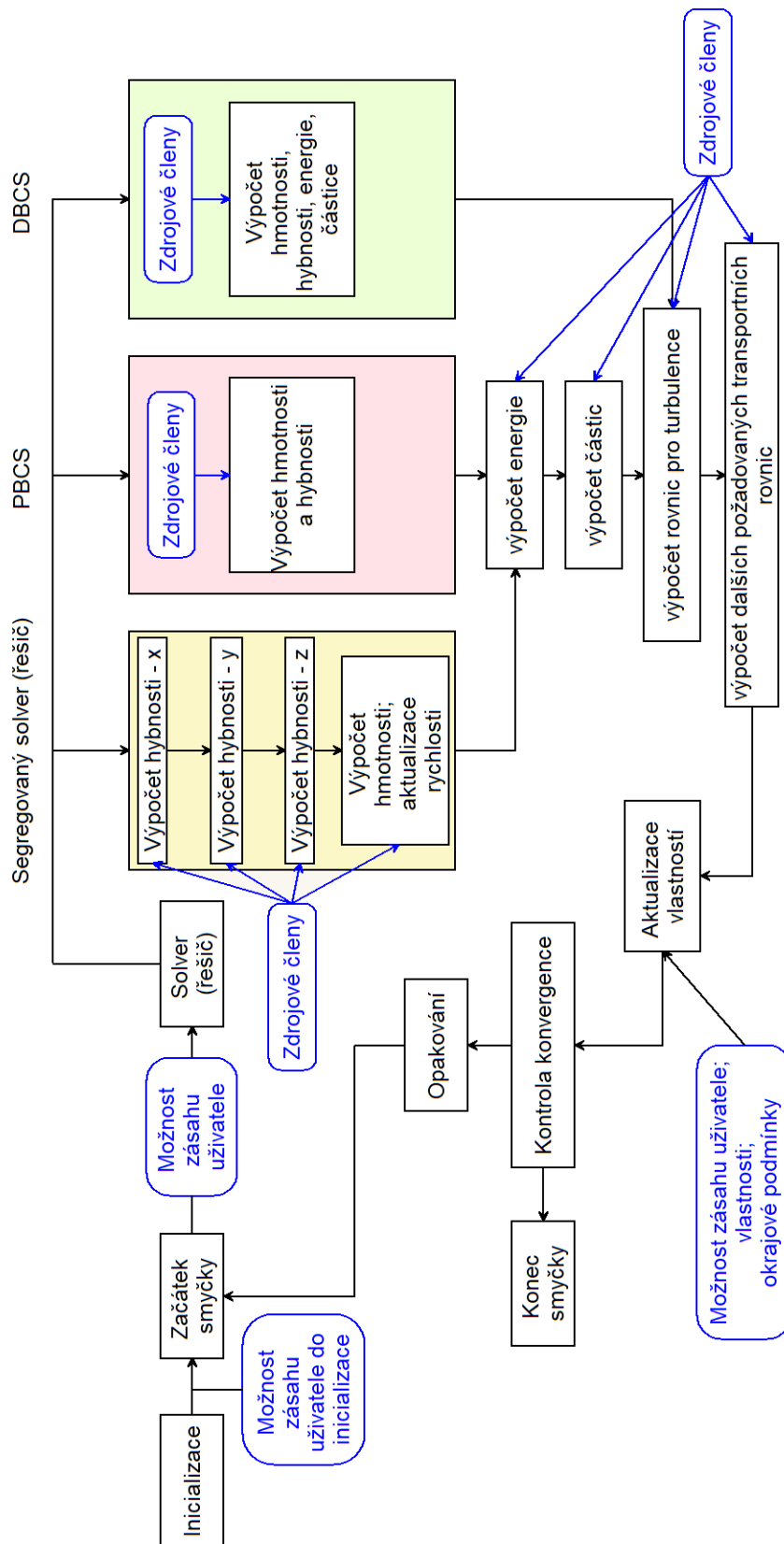
Z hlediska flexibility a zaměření úloh, které budou prezentovány v kapitolách 5, 6 a 7, byl vybrán systém ANSYS FLUENT. Důvodem výběru je možnost zásahu uživatele do matematických modelů, které jsou již implementovány, což většina komerčních programů vůbec nedovoluje.

4.1 Popis výpočetních formulací

Obrázek 4.1 ukazuje, principiální schéma postupu řešení v programu FLUENT. Políčka, která jsou modře, ukazují místa, kam má uživatel možnost zasáhnout. Zdrojovým členem rozumíme zdroj v dané rovnici, například zdroj tepla v energetické rovnici, aj..

Z obrázku je dále patrné, že FLUENT používá 3 typy formulace pro výpočetní řešič:

- Segregovaná formulace
- PBCS – Pressure Based Coupled Solver
- DBCS – Density Based Coupled Solver



Obrázek 4.1: Principiální schéma FLUENTu a místa, kde může uživatel zasáhnout.

Obecně platí, že všechny formulace jsou schopny dosáhnout vysoce přesných výsledků pro širokou škálu úloh. Nicméně v některých případech může jedna konkrétní formulace dosáhnout výsledků lepších. Segregovaná formulace se od sdružených (Coupled) formulací liší ve způsobu, jakým je řešena rovnice hmotnosti, hybnosti, kontinuity a energie. Při segregované formulaci jsou všechny rovnice řešeny separátně a postupně, naopak u sdružených formulací jsou řešeny rovnice hmotnosti a hybnosti (i energie v případě DBCS) naráz.

Segregovaná formulace se obvykle používá pro nestlačitelné nebo velmi pomalu proudící stlačitelné tekutiny do rychlosti 0,3 Machu, tedy meze, po kterou se v tekutině stlačitelnost neprojevuje. Sdružené formulace byly původně navrženy pro výpočty vysokorychlostních stlačitelných proudění tekutin.

V obou metodách, PBCS a DBCS je rychlostní pole vypočítáno z rovnice hybnosti. U DBCS je tlakové pole získáno z rovnice stavu. U PBCS je tlakové pole extrahováno z rovnic kontinuity a hybnosti.

Pro PBCS platí, že je možné jej použít do rychlosti 3 Machy, nad tuto hodnotu je pak vhodné použít řešič DBCS.

V praxi ale rozhodujícím kritériem pro volbu typu sdružených algoritmů PBCS nebo DBCS není ani tak hodnota rychlosti, ale spíše zohlednění setrvačných účinků proudícího média. Pokud z těchto účinků vyplývají silné nelinearity mezi rovnicemi hybnosti a energie, mají tyto nelinearity vliv na výsledné chování modelu.

V tom případě je třeba vzít v úvahu, že u PBCS dochází k potlačení vlivu setrvačných účinků a tedy případná nelineární vazba mezi rovnicemi hybnosti a energie je zkreslena. Typickým případem je vznik rázové vlny (viz kapitola 7).

Ve všech případech je však nutné použít daný řešič ve spojení s diskretizací minimálně druhého řádu, který je schopen zvládat velké gradienty daných veličin.

4.2 UDF – uživatelem definované funkce

S pojmem uživatelem definovaná funkce (UDF, z angl. User Defined Function) se setkáme převážně v oblasti programování. Tento pojem představuje funkci, kterou si uživatel programu nebo programovacího prostředí může sám definovat. UDF se zpravidla používají při tzv. strukturovaném programování, kdy se pro vlastní řešení úloh pomocí vestavěných funkcí používají i funkce uživatelem definované.

UDF v tomto případě rozšiřují výpočtové možnosti FLUENTU a uživatel je schopen upravit [8]:

- Okrajové podmínky řešení – různé profily vstupní nebo výstupní veličiny
- Definice funkčních vlastností materiálů
- Povrchové a objemové reakční rychlosti (v oblasti chemie)
- Vestavěné transportní rovnice
- Vylepšit stávající vestavěné modely
- Inicializaci řešení

- Nastavit funkce tak, aby byly prováděny například každou výpočtovou iteraci
- Spouštět funkce na vyžádání, aj..

V případě FLUENTu je s ním UDF dynamicky spojena. Funkce jsou psány v jazyce C, v libovolném editoru a jsou uloženy jako soubory s příponou .c. Zdrojový kód poté obvykle obsahuje jednu UDF funkci, ale není to pravidlem, funkce se dají zřetězit. Aby FLUENT s tímto kódem dokázal pracovat je nutné ho v něm buď takzvaně kompilovat, nebo interpretovat. U interpretovaných UDF jsou zdrojové soubory načteny přímo za běhu programu v jednom kroku. U kompilovaných UDF zahrnuje proces dva samostatné kroky, a to:

- Vytvoření knihovny objektového kódu (převod na vyšší úroveň jazyka C)
- Vlastní, dynamické, načtení knihovny do FLUENTu

Po interpretaci nebo kompilaci se UDF automaticky stanou viditelnými v panelech s nabídkami a je možné je po inicializaci připojit k řešení úlohy [8].

Pokud se máme rozhodnout pro to, jak budeme UDF vytvářet (interpretované/kompilované), je nutné vzít na zřetel následující vlastnosti, které shrnuje Tabulka 4.1.

Tabulka 4.1: Rozdíly mezi interpretovanými a kompilovanými funkcemi.

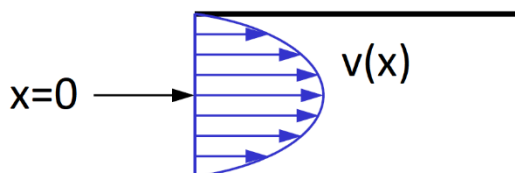
Interpretované UDF	Kompilované UDF
○ Jsou přenosné na jiné platformy	○ Jsou zpracovávány rychleji než interpretované UDF
○ Všechny lze zároveň spustit jako kompilované	○ Nejsou omezeny jazykem C
○ Nevyžadují kompilátor jazyka C	○ Pokud bychom je spouštěli jako interpretované UDF, nemusí je FLUENT rozeznat, jelikož mohou obsahovat určité prvky jazyka C, které FLUENT nezná
○ Jsou zpracovávány pomaleji než kompilované UDF	○ Vyžadují kompilátor, ale lze je kompilovat jakýmkoliv ANSI-kompatibilním kompilátorem C
○ Nelze je propojit s kompilovanými nebo systémovými knihovnami	○ Mohou volat libovolné funkce psané v jiném programovacím jazyce
○ Mohou přistupovat k datům uloženým ve FLUENTu pouze pomocí předdefinovaných maker	

Z toho vyplývá, že pro jednodušší, přímo definované, funkce je vhodné použít interpretované UDF. Pro komplexní funkce, které mají speciální požadavky, jako je volání UDF pro každou buňku výpočetní sítě a vyžadují přístup ke sdíleným knihovnám, použijeme kompilované UDF.

4.2.1 Příklad definice parabolického profilu proudění v ANSYS FLUENT

Pro názornost si předvedeme jednoduchý příklad provedení parabolického rychlostního profilu proudění pomocí UDF ve FLUENTu.

Mějme 2D model, který ilustruje Obrázek 4.2., jedná se o typický vyvinutý rychlostní profil proudění v přímé trubici³.



Obrázek 4.2: 2D ilustrace parabolického profilu v přímé trubici.

Na vstup geometrie je aplikována rovnice ve tvaru:

$$v(x) = 20 \left[1 - \left(\frac{x}{0,07} \right)^2 \right] \quad (4.1)$$

Makro, které předepíše tuto okrajovou podmínku na vstup, vypadá následovně:

```
#include "udf.h"
DEFINE_PROFILE(vstup_rychlost_x, thread, pozice)
{
    real x[ND_ND];
    real y;
    face_t f;

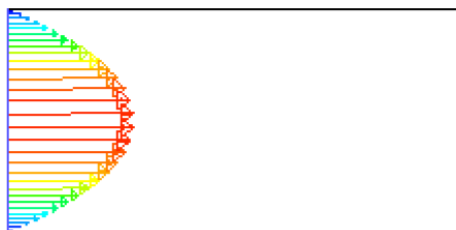
    begin_f_loop(f, thread)
    {
        F_CENTROID(x, f, thread);
        y = x[1];
        F_PROFILE(f, thread, pozice) = 20.*(1-y*y/(.07*.07));
    }
    end_f_loop(f, thread)
}
```

Po definici hlavičky (#include "udf.h") začíná deklarace vlastního makra (DEFINE_PROFILE), kde jsou definovány proměnné, a je definováno, kam je okrajová podmínka aplikována (face_t f). Funkce F_CENTROID obsahuje polohový vektor, poté

³ V praxi je nutné uvažovat na vstupu buď parabolický rychlostní profil daný funkcí, nebo vstupní část geometrie prodloužit alespoň na šestnásobek průměru, aby se proudění dostatečně vyvinulo, jinak by byl profil proudění zkreslen okrajovou podmínkou a připomínal by spíše pístový profil.

je definována vlastní rovnice a makro je ukončeno. Celý kód je pak uložen v souboru vstup.c a může být kompilován nebo interpretován do FLUENTu.

Po inicializaci a spuštění vypadá vstupní profil v dané geometrii tak, jak ukazuje Obrázek 4.3.



Obrázek 4.3: Model parabolického profilu po aplikaci makra ve FLUENTu.

Důležitým faktem je, že pokud do UDF vkládáme hodnoty fyzikálních veličin, musí být tyto veličiny specifikovány v jednotkách SI.

Podobným způsobem jsou pak řešeny téměř všechny funkce v kapitolách 5 a 6, nicméně situace je komplikovanější, jelikož jsou mnohdy zřetězeny a jsou spouštěny na vyžádání.

4.3 UDS - uživatelem definovaný skalár

FLUENT dále nabízí možnost výpočtu transportní rovnice pro další, uživatelem definované, skaláry⁴ (včetně vestavěných, jako například hmotnostní zlomek látky, aj.). Příkladem mohou být různé aplikace, kde probíhá výpočet spalín, modelování povrchových reakcí nebo elektro/magneto-hydrodynamických dějů (EMHD).

Každý UDS je definován obecnou transportní rovnicí ve tvaru:

$$\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \Phi) - \nabla \cdot (\rho D \nabla \Phi) = Q_{\Phi} \quad (4.2)$$

kde $\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t}$ popisuje časovou změnu, $\nabla \cdot (\rho v \Phi)$ je konvektivní člen, $\nabla \cdot (\rho D \nabla \Phi)$ je difuzní člen a Q_{Φ} je člen vyjadřující další možné vlivy (další zdroje), v je rychlost, ρ je hustota, D je difuzní koeficient a Φ je všeobecná skalární veličina.

Jednotlivé členy této rovnice je pak možné dále upravovat a specifikovat pomocí UDF. Kromě toho, člen popisující časovou změnu a konvektivní člen, mohou být dle aktuální potřeby ve FLUENTU aktivovány nebo deaktivovány.

Jelikož bude s touto rovnicí v dalších kapitolách pracováno, pojďme se nyní blíže podívat na jednotlivé členy, z hlediska programování, blíže.

Difuzní koeficient

Difuzní koeficient je v základu definován jako konstanta, pomocí makra DEFINE_DIFFUSIVITY je možné tento koeficient definovat jako izotropní proměnnou.

⁴ Všeobecně jsou ve FLUENTu všechny veličiny počítány jako skaláry.

Pro anizotropní vlastnosti difuzního koeficientu je nutné použít makro `DEFINE_ANISOTROPIC_DIFFUSIVITY`.

Konvektivní člen

Tento člen je možné měnit pomocí makra `DEFINE_UDS_FLUX`. Při definici tohoto členu je nutné dávat pozor, aby tato UDF splňovala rovnici kontinuity (nulová divergence). V opačném případě nebude Φ zachována a hodnoty v buňkách výpočetní sítě budou nesprávné.

Časový člen

Časový člen může být upraven pomocí makra `DEFINE_UDS_UNSTEADY`. FLUENT automaticky předpokládá, že bude tento rozdělen na 2 složky (*apu* a *su*) a diskretizován bude podle [9]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} \xrightarrow{\text{integrace}} - \int \frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} dV &\approx - \left[\frac{(\rho \Phi)^n - (\rho \Phi)^{n-1}}{\Delta t} \right] \Delta V \\ &= - \frac{\rho \Delta V}{\Delta t} \Phi^n + \frac{\rho \Delta V}{\Delta t} \Phi^{n-1} \end{aligned} \quad (4.3)$$

Uživatel tedy musí zadat jednotlivé členy ve tvaru:

$$apu = - \frac{\rho \Delta V}{\Delta t} \Phi^n \quad (4.4)$$

a

$$su = \frac{\rho \Delta V}{\Delta t} \Phi^{n-1} \quad (4.5)$$

Další zdroj (Source Term)

Další vlivy (například objemová reakce, migrace iontů, působení elektromagnetického pole, aj.) v transportní rovnici je možné definovat pomocí makra `DEFINE_SOURCE`. Základem je linearizace a rozdělení tohoto členu na explicitní (*A*) a implicitní (*BΦ*) část [10]:

$$Q_\Phi = A + B\Phi \quad (4.6)$$

5 Modelování reakcí na úrovni elektrochemického článku

Motivace

Na studium elektrochemických zdrojů proudu je v současné době ve světě kladen velký důraz. V moderní energetice hrají obecně úložiště energie velký význam, zejména díky přechodu k obnovitelným zdrojům a elektromobilitě.

Všechny bateriové systémy mají společný rys a tím je jejich základní struktura. Elementární částí baterie je jeden článek, jenž se skládá z kladné a záporné elektrody, mezi nimiž je elektrolyt, který může být kapalný nebo pevný.

Ústav elektrotechnologie se věnuje výzkumu elektrochemických článků a baterií již řadu let a numerické modelování se stalo jeho součástí.

Modely baterií jako celku, mají své uplatnění při zkoumání teplotních polí, která jsou generována při jejich činnosti (vybíjení, nabíjení nebo porucha). Takovéto modely jsou založeny na homogenizaci celé baterie, kdy baterii modelujeme jako homogenní kontinuum a její parametry, tedy to jak se baterie chová po elektrické stránce, jsou do ní fitovány za pomoci reálných experimentů.

Reálná měření mohou obsahovat pouze měření nabíjecích a vybíjecích křivek (publikováno v [11], [12]) nebo to mohou být sofistikovaná měření, kdy baterii fitujeme na elektrický obvod pomocí impedanční spektroskopie (publikováno v [13]). V případě poruchy (zkratu nebo průrazu), jsou testy poměrně nákladné a nebezpečné a zde počítačové modely nachází opět své uplatnění (publikováno v [14]).

Modelování elektrochemických článků na úrovni reakcí má svůj význam při výběru a testování základních materiálů (publikováno např. v [15]). Jedná se o metodu, kdy v řešiči definujeme reaktanty a reakce, které mají probíhat. Nicméně tyto modely jsou stále na poměrně základní úrovni. Je to z důvodu, že komerční řešiče jsou omezeny na určité typy aplikací. Jedná se především o komplexní úlohy (publikováno v [16], kde je možné zanedbat některé jevy, které na elementární úrovni hrají podstatnou roli. Tím pádem jsou v nich implementovány jednodušší matematické modely, což přináší výhodu v tom, že výpočet je méně náročný a tedy rychlejší.

Nevýhodou však je to, že při různé koncentraci iontů v elektrolytu má průběh potenciálu v článku lineární průběh (tzn. nemožnost modelování dvojvrstvy), výpočet je nestabilní při nízkých koncentracích reaktantů (je nutné uvažovat koncentrované a dobře promíchané elektrolyty) a velkou část výpočtů je nutné realizovat jako tranzientní (časové proměnné).

Přínosem této části práce je implementace robustnějšího matematického modelu do řešiče FLUENT a demonstrace jeho funkčnosti.

5.1 Základní popis elektrochemického modelu

Při elektrochemických reakcích dochází k přenosu náboje mezi látkami. Tyto reakce probíhají na fázovém rozhraní mezi elektrodami a elektrolytem.

V obecné rovnici pro elektrochemické reakce jsou přímo započítané generované nebo absorbované elektrony. Jejich množství je vypočítáno podle rozdílu stechiometrických koeficientů produktů a reaktantů a tento rozdíl je pak vynásoben mocenstvím a elementárním nábojem [17].

$$\sum_{k=1}^N v'_{k,r} M_k^{z_k} \leftrightarrow \sum_{k=1}^N v''_{k,r} M_k^{z_k} + \left(\sum_{k=1}^N (v'_{k,r} - v''_{k,r}) z_k \right) e^- \quad (5.1)$$

kde N je celkový počet látek, $M_k^{z_k}$ představuje obecně látku, $v'_{k,r}$ a $v''_{k,r}$ jsou stechiometrické koeficienty k -té látky jako reaktantu a produktu v r -té reakci, z_k je mocenství k -té látky a e^- je elementární náboj.

Pohyb iontů v roztoku je definován pomocí Poisson-Nernst-Planckových rovnic, kde Nernst-Planckova rovnice popisuje zachování látky s definicí vlivů koncentračního gradientu iontů a elektrického pole a Poissonova rovnice popisuje vliv iontů na rozložení elektrického pole (řešení Poissonovi rovnice bylo ukázáno v kapitole 2.3).

Základní rovnice zachování hmotnosti má tvar:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + v \nabla c_i + \nabla \cdot N_i = 0 \quad (5.2)$$

Pro přesnější popis toku N_i koncentrovaných roztoků je nutné použít například Stefan-Maxwellovy rovnice nebo Groot-Mazurovy rovnice [18]. Všeobecně se ale tyto rovnice v elektrochemických simulacích nevyužívají z důvodu jejich komplexnosti a taky z důvodu, že elektrolyty bývají obvykle dostatečně zředěné nebo jejich pohyb je pomalý. Pro výsledný popis toku iontů platí:

$$N_i = -D_i \nabla c_i + z m_i c_i F \nabla \varphi \quad (5.3)$$

Dosazením rovnice (5.3) do (5.2) získáme Nernst-Planckovu rovnici, která je definována jako:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + v \nabla c_i + \nabla \cdot (-D_i \nabla c_i + z m_i c_i F \nabla \varphi) \quad (5.4)$$

Z této rovnice lze snadno určit příčiny pohybu iontů v elektrolytu. $v \nabla c_i$ popisuje konvektivní složku. Tento člen je dobře definován pro zředěné roztoky, kde je definován jako rychlost proudění roztoku. Avšak v koncentrovanějších roztocích je rozdíl mezi tokem iontů a prouděním roztoku nejasný. $(D_i \nabla c_i)$ popisuje difuzní složku a $(z m_i c_i F \nabla \varphi)$ popisuje migrační složku. c_i je molární koncentrace, v je rychlost, D_i je difuzní koeficient, z je mocenství prvku, m_i je pohyblivost, F je Faradayova konstanta a φ je elektrický potenciál.

Pro výpočet pohybu iontů je nutné kromě Nernst-Planckovy rovnice definovat i rozložení potenciálu (Nernst-Planckova rovnice se skládá z i rovnic ale obsahuje $i + 1$ neznámých veličin). Poissonova rovnice, která popisuje rozložení potenciálu má tvar:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla \varphi) &= \rho_0 \\ \rho_0 &= \sum Fz_c \end{aligned} \quad (5.5)$$

kde ε_r je relativní permitivita, ε_0 je permitivita vakua a ρ_0 je hustota náboje, která je určena sumou náboje jednotlivých látek. Výsledná soustava rovnic je pak:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_i}{\partial t} + v \nabla c_i + \nabla \cdot (-D_i \nabla c_i + z m_i c_i F \nabla \varphi) &= Q_R \\ \nabla \cdot (\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla \varphi) &= -\rho_0 \end{aligned} \quad (5.6)$$

V koncentrovaných elektrolytech je nutné koncentraci nahradit aktivitou, toho se ale často nevyužívá, jelikož není jednoduché určit aktivity jednotlivých látek.

5.2 Metody výpočtu výsledného elektrického proudu

Z Nernst-Planckovy rovnice vyplývá, že výsledný elektrický proud vznikne jako součet jednotlivých příspěvků konvekce, difuze a migrace, tedy:

$$i = F \sum zN = F \left(- \sum zD \nabla c + v \sum zc - \nabla \varphi \sum z m F c \right) \quad (5.7)$$

Tato rovnice je ale často příliš komplikovaná a pro určité případy ji lze zjednodušit zavedením určitých předpokladů a zanedbáním některých jevů, což bude popsáno v následujících podkapitolách [19].

5.2.1 Primární metoda – Primary Current Distribution

Primární metoda uvažuje jen ztráty způsobené elektrickým odporem roztoku. Je zde zanedbána kinetika elektrod a vliv různých koncentrací látek v jejich blízkosti. Za předpokladu, že elektrolyt je elektroneutrální (z rovnice vypadne konvektivní složka), je homogenní (odstraní se rozdíly ve složení elektrolytu a vypadne difuzní složka), je možné uvažovat, že přesun náboje je popsán čistě Ohmovým zákonem [20].

Na rozhraní elektrolytu a elektrody probíhá elektrochemická reakce takovou rychlostí, že lze zanedbat kinetiku reakce což znamená, že potenciálový rozdíl na rozhraní se neliší od rovnovážné hodnoty. Z tohoto vyplývá, že primární metoda závisí jen na geometrii anody a katody.

Výsledná rovnice pro proudovou hustotu má tvar:

$$\mathbf{i} = -\sigma \nabla \varphi \quad (5.8)$$

kde $\sigma = F^2 \cdot z \cdot m \cdot c$

Tuto aproximaci lze využít pro procesy s relativně rychlými reakcemi jako například oxidace chloridových iontů v chlor-alkalických procesech. Podmínkou je, že elektrochemické reakce musí být dostatečně rychlé, aby byla zajištěna nízká rezistivita

související s reakcemi, v porovnání s velikostí ohmických ztrát, které závisejí na vodivosti/rezistivitě elektrolytu.

Při tomto rozložení se jako okrajové podmínky využívají rovnovážné potenciály reakcí.

5.2.2 Sekundární metoda – Secondary Current Distribution

Sekundární metoda, kromě rezistivity elektrolytu, uvažuje i kinetiku probíhající reakce. Předpoklady o složení elektrolytu a jeho vlastností jsou stejné jako v případě primární metody, z čehož také vyplývá Ohmův zákon. Hlavní rozdíl mezi primární a sekundární metodou spočívá v popisu elektrochemické reakce na rozhraní elektrody a elektrolytu.

Popis kinetiky reakce má vliv na potenciálový rozdíl na rozhraní, kde se elektrický potenciál může lišit od své rovnovážné hodnoty. Tento rozdíl je způsoben konečnou rychlostí reakce. Rozdíl mezi rovnovážným a skutečným potenciálem se nazývá aktivační předpětí. Proudová hustota způsobena elektrochemickou reakcí je popsána jako funkce předpětí. Tato závislost je popsána Butler-Volmerovou (nebo Tafelovou, která je zjednodušením Butler-Volmerovy rovnice) rovnicí [21].

Butler-Volmerova rovnice (není uvažována limitace transportem látky) má tvar:

$$i = i_0 \left[e^{\left(\frac{\alpha_a z F \eta}{RT}\right)} - e^{\left(-\frac{\alpha_c z F \eta}{RT}\right)} \right] \quad (5.9)$$

kde první člen rovnice popisuje oxidaci a druhý člen redukci. η je aktivační předpětí a lze ho vypočítat jako $\eta = \varphi - \varphi_{eq}$.

Butler-Volmerovu rovnici není třeba vždy řešit v plném tvaru. Při větších hodnotách předpětí lze jeden ze členů zanedbat (v případech, kdy bude výrazně převyšovat oxidace nebo redukce). Druhé zjednodušení lze najít v oblasti nízkého předpětí, kdy vykazuje lineární závislost. Rovnice má pak tvar:

$$i = i_0 \frac{zF}{RT} (\varphi - \varphi_{eq}) \quad (5.10)$$

Tafelovy křivky jsou dalším zjednodušením Butler-Volmerovy rovnice. Lze je použít v oblasti vysokého předpětí. Popisují logaritmickou závislost proudu a napětí.

Pro předpětí větší než nula (oxidační reakce), má rovnice tvar:

$$\log_{10} i = \log_{10} i_0 + \frac{\alpha F}{2.3RT} \eta \quad (5.11)$$

Pro předpětí menší než nula (redukční reakce), má rovnice tvar:

$$\log_{10} |i| = \log_{10} |i_0| + \frac{(1 - \alpha)F}{2.3RT} \eta \quad (5.12)$$

kde α je koeficient Tafelova sklonu.

Sekundární metoda je nejčastěji využívána pro modelování v průmyslových aplikacích. Může být využita pro modelování elektrochemických článků, kde lze

zanedbat přepětí způsobné rozdílnou koncentrací, ale nelze zanedbat ztráty způsobené kinetikou reakce (tyto ztráty nejsou zanedbatelné proti ohmickým ztrátám).

5.2.3 Terciální metoda – Tertiary Current Distribution

Terciální metoda výpočtu uvažuje efekty rozdílného složení, odporu elektrolytu, tak i kinetiku reakcí. Tento přístup je založen na Nernst-Planckově rovnici, která popisuje pohyb látky způsoben difuzí, migrací a konvekcí. Popis kinetiky reakce počítá jak s aktivačním tak i s koncentračním předpětím. To znamená, že rychlost reakce může být limitována transportem látky – vyčerpáním reaktantu na rozhraní elektrody a elektrolytu. Z toho také vyplývá, že všechny ionty a elektro-aktivní látky musí být v modelu uvažovány.

Na rozdíl od primární a sekundární metody, v tomto případě již není proudová hustota popsána Ohmovým zákonem. Při uvažování elektroneutrality lze stále zanedbat konvektivní příspěvek, ale již není možné zanedbat rozdíly koncentrací a tím pádem i difuzní složku.

Na rozhraní elektrody a elektrolytu je proudová hustota definována jako funkce předpětí i koncentrace látek. Tato závislost je popsána Butler-Volmerovou rovnicí doplněnou o koncentrační závislost.

$$i = i_0 \left(\frac{c}{c_{\text{ref}}} \right)^{\gamma} \left[e^{\left(\frac{\alpha_a z F \eta}{RT} \right)} - e^{\left(-\frac{\alpha_c z F \eta}{RT} \right)} \right] \quad (5.13)$$

Tato rovnice se při rovnováze řídí termodynamickou Nernstovou rovnicí. Použití tohoto popisu lze uplatnit pro modelování článků s nízkou koncentrací elektrolytu, tak že složení elektrolytu se výrazně mění napříč článkem a rezistivní ztráty nemohou být popsány Ohmovým zákonem. Výpočet Nernst-Planckovy rovnice pro všechny látky a výpočet proudu terciální metodou je však výpočetně velice náročné [22].

Poznámka

V některých případech může být proudová hustota limitována transportem látky, ale složení elektrolytu zůstává téměř konstantní. Není tedy nutné uvažovat celou terciální metodu, namísto toho lze uvažovat, že proudová hustota se řídí Ohmovým zákonem, a tedy lze využít metodu sekundární, ale s tím že rychlost reakce bude záviset na koncentraci reaktantů. Tohoto je dosaženo spojením transportního modelu pro chemické látky, který počítá difuzi (případně migraci a konvekci).

5.3 Přístup FLUENTu k řešení

ANSYS FLUENT obsahuje vstavený model „species transport“, který je schopen modelovat pohyb jednotlivých látek v roztoku nebo směsi. Součástí tohoto modelu je možnost simulovat různé typy reakcí – objemové, povrchové, reakce s pevnými částicemi nebo reakce elektrochemické [23].

Základní transportní model pro popis elektrochemických reakcí (jakožto i klasických chemických reakcí) využívá jako hlavní proměnnou hmotnostní zlomek. Použitá transportní rovnice má tvar:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v Y_i) = -\nabla \cdot J_i + R_i + Q_i \quad (5.14)$$

kde Y_i je hmotnostní zlomek, R_i je člen popisující vznik anebo zánik látky během reakce, Q_i je zdroj tepla a J_i popisuje difuzní tok, který je definován jako:

$$J_i = \rho D_{i,m} \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (5.15)$$

Výhodou použití hmotnostního zlomku je, že se jeho hodnoty pohybují v intervalu od 0 do 1, a dále je zaručeno, že součet hmotnostních zlomků jednotlivých látek je vždy roven 1.

Nevýhodou je obtížnější nastavení okrajových a počátečních podmínek řešení, jelikož se v praxi využívá molární koncentrace pro definici množství látky, a tedy tyto hodnoty je třeba na tyto hmotnostní zlomky přepočítat.

Při výpočtu elektrochemických reakcí jsou rovnice „species transport“ modelu propojeny s „electric potential“ modelem, který počítá elektrický potenciál na základě Laplaceovy rovnice:

$$\nabla \cdot (-\sigma \nabla \varphi) = 0 \quad (5.16)$$

a dále uvažuje kontinuitu proudu:

$$\nabla \cdot \mathbf{i} = 0 \quad (5.17)$$

V tuhé fázi je proudová hustota vypočítána z Ohmova zákona:

$$\mathbf{i} = -\sigma \nabla \varphi \quad (5.18)$$

Naproti tomu v elektrolytu je proudová hustota rovna součtu jednotlivých příspěvků (difuze, konvekce a migrace):

$$\mathbf{i} = F \sum z_N = F \left(-\sum z_D \nabla c + v \sum z_C - \nabla \varphi \sum z_M F_C \right) \quad (5.19)$$

Tato rovnice je ale ve FLUENTu výrazně zjednodušena. Podobné předpoklady, které byly uvažovány v popisu proudových rozložení (viz kapitola 5.2), byly aplikovány i zde.

První zjednodušení spočívá v zavedení podmínky elektro-neutrality, čímž z rovnice (5.19) vypadne konvektivní člen. Dále FLUENT uvažuje, že použitý elektrolyt bude vždy dobře rozmíchán nebo bude mít vysokou koncentraci. Tím vypadne i difuzní člen z rovnice, a zůstane jen člen, který reprezentuje migraci. Výsledná rovnice zachování proudu v elektrolytu má tedy stejný tvar jako rovnice zachování proudu v tuhé fázi:

$$\mathbf{i} = -\sigma \nabla \varphi \quad (5.20)$$

Z této rovnice tedy vyplývá, že není vůbec uvažován náboj jednotlivých iontů a tedy jejich rozdílná koncentrace nemá žádný vliv na výsledné elektrické pole.

Vliv elektrického pole na pohyb iontů (migrace) je aplikován do následující rovnice ve tvaru:

$$Q_{\text{migrace}} = \nabla D_i \frac{z_i F}{RT} \rho Y_i \nabla \varphi \quad (5.21)$$

V průběhu elektrochemické reakce také vzniká teplo a to:

Joulovo teplo, které je způsobeno pohybem iontů

$$Q_{\text{Joule}} = -\sigma |\nabla \varphi|^2 \quad (5.22)$$

Teplo, jehož zdroj je samotná reakce na rozhraní

$$Q_{\text{Farradaic}} = \sum_r |i_{F,r} \eta_r| \quad (5.23)$$

Krom popsaných zjednodušení, mezi hlavní nevýhody vestavěného elektrochemického modelu je divergence výpočtu při nulovém zastoupení reaktantu na elektrodě v případě, že v Butler-Volmerově rovnici vystupuje koncentrační závislost. Z tohoto důvodu lze tyto simulace uskutečnit pouze jako transientní (časově závislé), jelikož v ustáleném stavu dochází k nereálním výsledkům.

5.4 Proudění přes „porézní média“

Elektrochemické články obsahují ve své konstrukci porézní materiály (elektrody, separátory). Proudění v takových materiálech je však odlišné od volného proudění (například v přímé trubici), z tohoto důvodu je jeho matematický popis důležitý pro přesné numerické simulace.

V porézním médiu je pohyb tekutiny prostřednictvím smykového napětí obvykle zanedbatelný, jelikož stěny pórů zabraňují pohybu tekutiny v pórech. Obvykle není možné přesně popsat každý pór, z důvodu jejich malé velikosti oproti rozměru výpočetní oblasti Ω , z toho by vyplývala vysoká výpočetní náročnost (kvůli zasítování). Základem je tedy homogenizace porézního a tekutého media do jednoho prostředí. Spojením rovnice kontinuity, stavové rovnice a Darcyho zákona je získán popis proudění v porézních médiích, kde hlavní působící silou je gradient tlaku [24].

Darcyho zákon popisuje rychlost tekutiny v porézním médiu jako:

$$\mathbf{v} = -\frac{k_p}{\eta} \nabla p \quad (5.24)$$

kde ∇p je gradient tlaku, k_p je propustnost porézního média a η je dynamická viskozita.

Brinkmanovy rovnice popisují proudění v porézním médiu, kde pohyb tekutiny prostřednictvím smykového napětí nelze zanedbat. Jedná se o rozšíření Darcyho zákona, aby transportní rovnice obsahovala člen popisující viskózní pohyb.

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot \eta (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) - \left(\frac{\eta}{k_p} \mathbf{v} + \nabla p - \mathbf{Q} \right) = 0 \quad (5.25)$$

Krom klasického 2D/3D porézního média obsahuje FLUENT zjednodušení, které vede na 1D model, nazývané jako „porous jump.“ Toho lze využít pro modelování tenkých membrán se známými rychlostními/tlakovými křivkami. Model porézních médií ve FLUENTu využívá formulaci povrchové rychlosti, kde povrchová rychlost dané fáze nebo směsi je určena na základě objemového toku v dané porézní oblasti. Základem modelu jsou další zdroj hybnosti, který se skládá ze dvou částí, kde první je Darcyho zákon a druhou je popis setrvačnosti (inertial loss).

$$Q_i = - \left(\sum_{j=1}^3 D_{ij} \eta v_j + \sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{1}{2} \rho |v| v_j \right) \quad (5.26)$$

kde Q_i je zdroj pro i -tou (x , y nebo z) rovnici hybnosti, $|v|$ je velikost rychlosti, D_{ij} a C_{ij} jsou předepsané matice.

V případě jednoduchého porézního média lze tuto rovnici upravit na:

$$Q_i = - \left(\frac{\eta}{k_p} v_i + C_2 \frac{1}{2} \rho |v| v_i \right) \quad (5.27)$$

kde C_2 je faktor setrvačného odporu (inertial loss factor).

Krom klasické definice FLUENT nabízí možnost tyto zdroje definovat pomocí tzv. „power law“:

$$Q_i = -C_0 |v|^{C_1} = -C_0 |v|^{(C_1-1)} v_i \quad (5.28)$$

kde C_0 a C_1 jsou uživatelem zjištěné empirické konstanty.

5.5 Upravený model a jeho implementace do FLUENTu

Elektrochemický model, který bude prezentován v této kapitole, byl založen na metodách Current Distribution, které byly popsány ve výše uvedených kapitolách. Jejich základem je definice potenciálu elektrody a potenciálu elektrolytu. Reakce jsou poté popsány pomocí Butler-Volmerovy rovnice. Do řešiče FLUENT bude implementována metoda sekundární společně s transportem chemických látek.

Tento popis byl vybrán z důvodu, že primární popis se pro tento případ v podstatě vůbec nehodí (bylo zmíněno výše) a terciální metoda je příliš nepraktická a složitá na implementaci do FLUENTu.

Popis elektrického potenciálu a pohyb iontů by mohl být numericky realizován pomocí Poisson-Nerns-Planckových rovnic, ale v tomto případě je poměrně složité do modelu přidat elektrochemické reakce (je těžké získat hodnotu rozdílu potenciálu na rozhraní, kde probíhá reakce).

Dalším problémem, z hlediska numerické nestability, je Poissonova rovnice, protože v blízkém okolí elektrody vzniká prudká změna koncentrace iontů (rozměry jsou řádově v nanometrech) a v případě, že geometrie bude větších rozměrů (např. milimetry), je těžké postihnout všechny probíhající jevy.

Základní rovnice tohoto modelu:

Potenciál elektrody:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (-\sigma_S \nabla \varphi_S) &= 0 \\ \mathbf{i}_S &= -\sigma_S \nabla \varphi_S\end{aligned}\quad (5.29)$$

Potenciál elektrolytu:

Proudová hustota v elektrolytu má plný tvar:

$$\mathbf{i} = F \left(c_i \mathbf{v} - D_i \nabla c_i - \frac{z_i F D_i}{RT} c_i \nabla \varphi \right) \quad (5.30)$$

Tato definice je ale pro většinu případů komplikovaná a proto bývá zjednodušena. Při uvažování podmínky elektroneutality, vypadne z rovnice konvektivní člen. Při dostatečně zředěných (nebo dobře rozmíchaných) roztocích, je difuzní efekt zanedbatelný. Výsledná rovnice má poté tedy tvar:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\sigma_L \nabla \varphi_L) &= 0 \\ \mathbf{i}_L &= -\sigma_L \nabla \varphi_L\end{aligned}\quad (5.31)$$

Butler-Volmerova rovnice:

$$i_{\text{far}} = i_0 \left(\frac{c}{c_{\text{ref}}} \right)^{\gamma} \left[e^{\left(\frac{\alpha_a z F \eta}{RT} \right)} - e^{\left(-\frac{\alpha_c z F \eta}{RT} \right)} \right] \quad (5.32)$$

kde předpětí $\eta = \varphi_S - \varphi_L - \varphi_{\text{eq}}$.

Transport látky (vyjádřený pomocí molární koncentrace):

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{N}_i) &= 0 \\ \mathbf{N}_i &= c_i \mathbf{v} - D_i \nabla c_i - \frac{z_i F D_i}{RT} c_i \nabla \varphi\end{aligned}\quad (5.33)$$

kde celkový tok látky je roven součtu konvektivní (proudící), difuzní (koncentrační rozdíl) a migrační (dané rozdílem potenciálů) složky [25].

Model okrajových podmínek:

Rovnice (5.29) využívá jako okrajovou podmínku přímo definici potenciálu nebo proudové hustoty, kterou je elektrochemický článek nabíjen nebo vybíjen.

Pro rovnici (5.31) je okrajovou podmínkou proudová hustota definovaná z Butler-Volmerovy rovnice. Vznik a zánik látky na stěně, na které probíhá reakce je definován jako:

$$Q_i = \frac{s}{n \cdot F} i_{\text{far}} \quad (5.34)$$

kde s je stechiometrický koeficient, n je počet elektronů vyměněných při reakci, F je Faradayova konstanta.

Model je do FLUENTu implementován pomocí jako UDS (viz kapitola 4.3), který popisuje potenciál elektrody, elektrolytu a molární koncentraci chemických látek. Následně, pak pomocí UDF (viz kapitola 4.2), byly implementovány okrajové podmínky,

zdroje v transportních rovnicích (migrace iontů) a jiné podobné funkce, jako například limitace hodnot skalárních veličin na kladné, aj.

Při definici UDS, FLUENT počítá následující transportní rovnici:

$$\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \Phi) - \nabla \cdot (\rho D \nabla \Phi) = Q_{\Phi} \quad (5.35)$$

kde Φ je všeobecná skalární veličina, ρ je hustota, D difuzní koeficient a Q_{Φ} představuje další zdroje [26].

Pro popis elektrického potenciálu nebyl uvažován časově závislý člen, konvektivní člen a difuzní koeficient představuje v tomto případě elektrická vodivost.

V případě transportu látky byl časový člen uvažován a jeho popis byl realizován pomocí hmotnostního zlomku (toto využívá i FLUENT, což je výhoda, kvůli tomu, že součet jednotlivých látek je vždy roven 1). Dále je možné ještě využít popisu pomocí molární koncentrace, což je v praxi běžnější.

5.6 Praktický příklad použitelnosti modelu

Model byl ověřen na příkladu modelování cyklické voltametrie (CV) pro obecnou jedno-elektrodovou, reverzibilní reakci.

5.6.1 Modelování cyklické voltametrie

Cyklická voltametrie (CV) patří do skupiny potenciodynamických experimentálních metod, díky které lze získat poměrně rychle získat základní charakteristiky studovaného systému, především s ohledem na mechanismus elektrodového děje a jeho kinetické parametry. Cyklická voltametrie je charakterizována plynulým nárůstem potenciálu pracovní elektrody z jedné mezní hodnoty do druhé a zpět do výchozího bodu. Z toho vyplývá, že základními nastavitelnými parametry experimentu jsou meze a rychlost posuvu potenciálu. Ovlivňovat lze rovněž vlastnosti elektrolytu, především koncentraci elektro-aktivní látky a teplotu. Odezvou systému je tzv. polarizační křivka neboli závislost proudu protékajícího elektrodou na jejím potenciálu. Existují obecně dva mezní případy studovaných systémů, a to elektrodové děje vratné a nevratné. Dále se budeme zabývat vratnými (reverzibilními) ději [27].

Díky vysoké koncentraci elektrolytu je možné zanedbat rozdíly potenciálu v něm, to znamená, že ionty se pohybují jen vlivem difuze (je zanedbána migrace) a taktéž je v elektrolytu konstantní nulový potenciál, tím pádem je předpětí určené jen přivedeným napětím na elektrodě.

Výsledné rovnice popisující voltametrii jsou:

Elektrodový potenciál:

$$\nabla \cdot (-\sigma_S \nabla \varphi_S) = 0 \quad (5.36)$$

Jelikož potenciál v elektrolytu je nulový, není potřeba ho ani počítat, čímž se výrazně sníží složitost úlohy.

Rychlost sledované elektrochemické reakce je definovaná pomocí upravené Butler-Volmerovy rovnice jako:

$$j_{\text{far}} = j_0 \left[c_A \exp\left(\frac{\alpha_A}{RT} \eta\right) - c_B \exp\left(\frac{\alpha_B}{RT} \eta\right) \right] \quad (5.37)$$

kde předpětí je definováno jako rozdíl potenciálu elektrody a rovnovážného potenciálu:

$$\eta = \varphi - \varphi_{\text{eq}} \quad (5.38)$$

Transportní rovnice molární koncentrace iontů má tvar:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (D_i \nabla n_i) = R_i \quad (5.39)$$

kde člen R_i vyjadřuje míru vzniku nebo zániku iontů způsobený reakcí. Tato rovnice je pak do FLUENTu dodána ve formě hmotnostního zlomku [28].

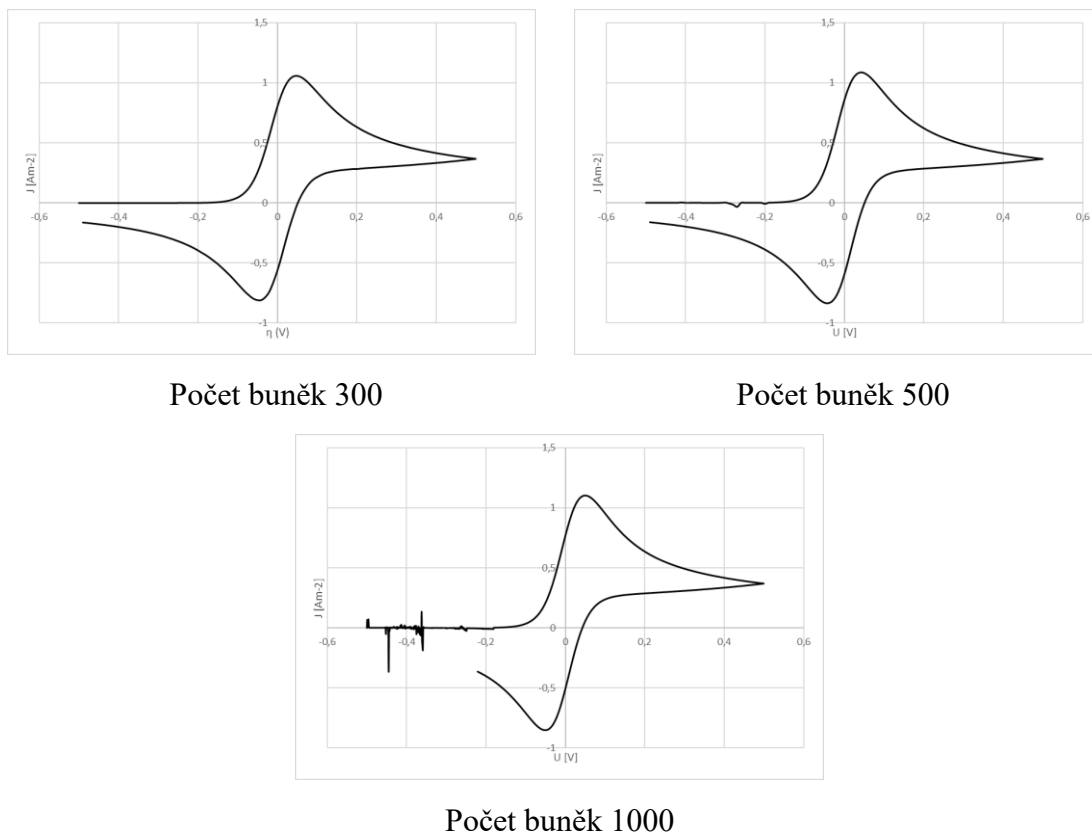
Úloha je v tomto případě řešena jako transientní (časově proměnná) a je tedy nutné uvažovat rozložení časového členu podle rovnice (4.3).

Jako geometrie úlohy byly použity rovinné elektrody a tedy úloha je uvažovaná jako 1D (resp. 2D, kde na výšku je použita 1 buňka). Jedinou podmínkou je dodržet hodnotu minimální délky, která musí přesahovat:

$$l = 6\sqrt{Dt_{\text{max}}} \quad (5.40)$$

což je nutné k zachycení celé difuzní vrstvy. Geometrie měla na délku 2 mm a na výšku $1 \cdot 10^{-5}$ mm.

Jemnost výpočetní sítě v tomto případě nehraje velkou roli, naopak při velmi vysoké hustotě sítě v oblasti elektrody je výpočet nestabilní, zejména v oblasti vysokého předpětí, tato nestabilita se pak projevuje při nízkých hodnotách proudové hustoty záškvy a oscilacemi v charakteristice (viz Obrázek 5.1).



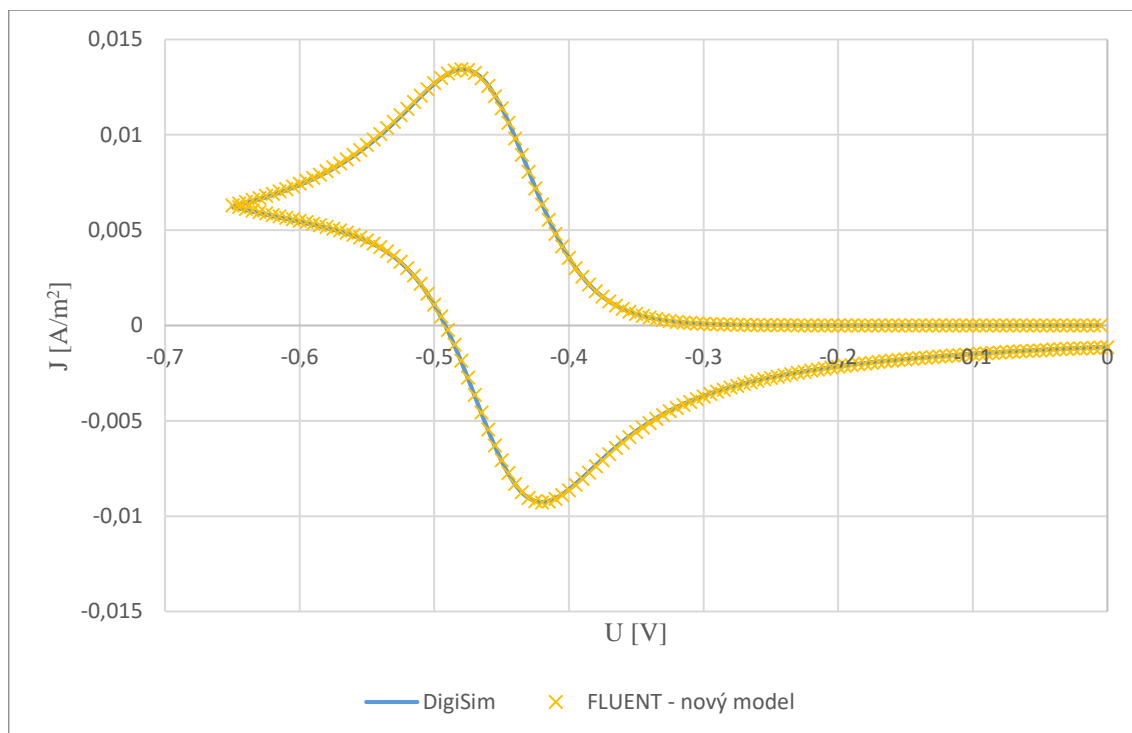
Obrázek 5.1: Všeobecný příklad CV obecné jedno-elektrodové, reverzibilní reakce a její závislost na jemnosti výpočtové sítě.

Pro příklad byla definovaná jedno-elektrodová, reverzibilní reakce s rovnovážným potenciálem $E_{eq} = -0,45$ V a výměnnou proudovou hustotou 10 A/m^2 . Difuzní koeficienty reaktantu a produktu byly nastaveny na $1 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, což představuje standardní hodnoty koeficientů ve vodních roztocích. Počáteční koncentrace reaktantu byla stanovena na 1 mmol/l a pro produkt 0 mmol/l .

Jako budící signál na pracovní elektrodě byl zvolen signál s trojúhelníkovým průběhem od 0 V do $-0,65 \text{ V}$ a zpět s rychlostí 25 mV/s .

V případě simulace není nutné pracovat s referenční elektrodou, tak jako je tomu u reálného měření.

Pro porovnání výsledků tohoto modelu bylo využito i programu DigiSim, který se v elektrochemii používá pro simulaci CV charakteristik. Výsledky z obou programů ilustruje Obrázek 5.2.



Obrázek 5.2: Porovnání výsledků z nově implementovaného modelu do FLUENTu a výsledků ze softwaru DigiSim.

Na začátku, v oblasti vysokého potenciálu, neprobíhá oxidační reakce. Jak se hodnota potenciálu přibližuje k hodnotě rovnovážného potenciálu reakce, začíná probíhat oxidace, zvyšuje se proudová hustota a reaktant je spotřebováván. V okamžiku, kdy reakce spotřebuje veškerý reaktant na elektrodě, je proudová hustota limitována difúzí reaktantu k elektrodě a tedy klesá bez závislosti na potenciálu. Stejný případ nastává při snímání v opačném směru, kde převládá redukční reakce. Při jedno-elektrodové reakci by měla být vzdálenost minima a maxima 59 mV, čemuž odpovídá i výsledek simulace, kde je vzdálenost 60 mV. Ve skutečnosti se však tato vzdálenost může měnit, kvůli závislosti na výměnné proudové hustotě a rychlosti snímání.

5.7 Shrnutí

Ve FLUENTu (v jeho vestavěném modulu) není možné uskutečnit simulaci voltametrie z několika důvodů. Prvním problémem je numerická nestabilita v oblasti nízké koncentrace reaktantů. V případě, že se koncentrace reaktantu blíží nule a rychlost reakce je na něm závislá, výpočet diverguje a není v něm možné dále pokračovat.

Druhým problémem je fakt, že FLUENT vždy počítá potenciál elektrolytu, což pro simulaci voltametrie není vhodné. Protože tento potenciál je určen též Ohmovým zákonem a přítomnost „podpůrného“ elektrolytu, a tedy i vysoká elektrická vodivost vede k nereálně vysoké proudové hustotě, která zabraňuje ve výpočtu.

Tyto nevýhody byly odstraněny implementací nového modelu, který nyní CV simulovat umožňuje. Model byl otestován na obecném případě jedno-elektrodové

reverzibilní reakce a porovnán se stejnou reakcí v programu DigiSim. Výsledky jsou v podstatě totožné.

Při testování modelu bylo zjištěno, že výpočet je nejvíce stabilní v případě, kde se výška geometrie rovná velikosti jedné buňky výpočetní sítě, při jemnějších sítích výpočet chvílemi osciluje, zvláště při nízkých hodnotách proudové hustoty. U hrubších sítí, je výpočet stabilní, ale ne tak přesný.

6 Modelování proudění nabitých částic

Motivace

Studium pohybu elektricky nabitých částic za pomoci numerického modelování má velmi široké technologické uplatnění. Například v elektronové mikroskopii pro analýzu vlastností elektrostatických a elektromagnetických (kondenzorových) čoček, v hmotové spektroskopii pro analýzu vlastností filtrů, simulace plazmy a plazmových výbojů v silové elektronice, aj.

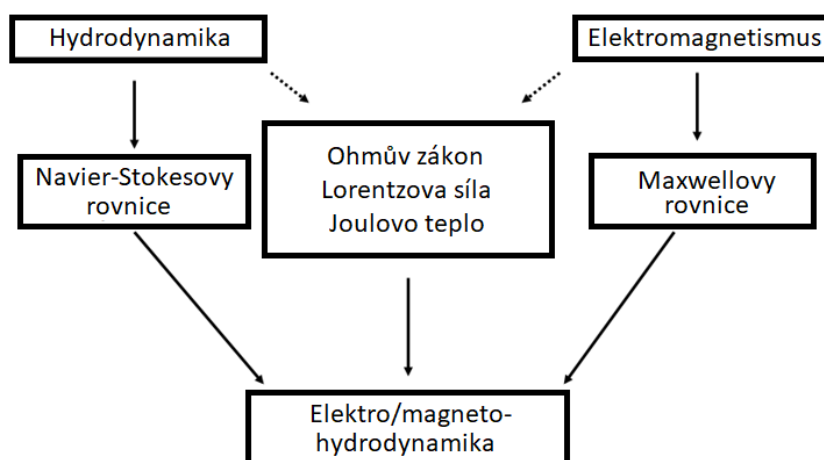
Zřejmě nejzajímavější je aplikace v lékařství, kde je možné simulovat a analyzovat pohyb „magnetických“ léčiv, které jsou směřovány pomocí magnetů, takže jejich účinek je cílený přímo do problémové oblasti v organismu.

Mechanika kapalin (hydrodynamika) se až do nedávna omezovala na problémy, kde se neuplatňovalo elektrické ani magnetické pole. Existence kapalin, u nichž se projevuje interakce s elektrickým nebo magnetickým, polem, dala impuls pro vývoj nových aplikací a do budoucna lze očekávat nárůst jejich využití i pro průmysl.

6.1 Elektro/magneto-hydrodynamika

Elektro-hydrodynamika (EHD) zkoumá silové interakce mezi elektrickým polem a elektricky polarizovatelnou kapalinou, naproti tomu magneto-hydrodynamika (MHD) zkoumá silové (Lorentzovské) interakce mezi magnetickým polem a kapalinou, kterou prochází elektrický proud. Posledním zástupcem je fero-hydrodynamika (FHD), která pak zkoumá interakci mezi magnetickým polem a magneticky polarizovatelnou, elektricky nevodivou kapalinou [29].

Obrázek 6.1 ilustruje problematiku zahrnující elektro/magneto-hydrodynamika.



Obrázek 6.1: Vazby mezi jednotlivými odvětvími, které pokrývá elektro/magneto-hydrodynamika.

6.2 Popis pohybu náboje

V následující kapitole bude popsán matematický model pohybu nabitých částic za přítomnosti elektrického a magnetického pole jako funkce času a prostoru. Kvůli zjednodušení bude uvažováno, že pohybující částice, nebudou tato pole ovlivňovat.

Rovnice pohybu částice s nábojem q při působení elektrického pole \mathbf{E} a magnetického pole \mathbf{B} je popsána jako:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6.1)$$

Tato rovnice je relativisticky správně, pokud budeme uvažovat, že vektor hybnosti \mathbf{p} je roven:

$$\mathbf{p} = \gamma_L m_0 \mathbf{v} \quad (6.2)$$

Lorentzův faktor γ_L je definován jako:

$$\gamma_L = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\mathbf{v}^2}{c^2}}} \quad (6.3)$$

Potom relativistická rovnice je definována jako:

$$\gamma_L m \frac{d\mathbf{v}}{dt} + q \left(\frac{\mathbf{v}^2}{c^2} \right) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}) = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6.4)$$

Nicméně ve většině praktických aplikací je člen (\mathbf{v}^2/c^2) zanedbatelný. V případě, že $(\mathbf{v}^2/c^2) \ll 1$ je $\gamma_L \cong 1$ a hmotnost m může být považována za konstantní. Předcházející rovnice by se zjednodušila na tvar:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6.5)$$

6.2.1 Pohyb v homogenním elektrickém poli

V homogenním elektrickém poli (bez působení magnetické indukce) je pak vektorový součin $\mathbf{v} \times \mathbf{B} = 0$ a rovnice se zjednoduší na:

$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q\mathbf{E} \quad (6.6)$$

Integrací této rovnice získáme rovnici pro hybnost:

$$\mathbf{p}(t) = q\mathbf{E}t + \mathbf{p}_0 \quad (6.7)$$

kde \mathbf{p}_0 je počáteční hybnost částice. Pokud využijeme nerelativistický tvar rovnice a následně ji integrujeme, získáme rovnici pro polohu částice \mathbf{r} závisující na čase [30]:

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= m\mathbf{v} = m \frac{d\mathbf{r}}{dt} \\ \mathbf{r}(t) &= \frac{1}{2} \left(\frac{q\mathbf{E}}{m} \right) t^2 + \mathbf{v}_0 t + \mathbf{r}_0 \end{aligned} \quad (6.8)$$

Z toho vyplývá, že se částice pohybuje s konstantním zrychlením $q\mathbf{E}/m$ ve směru elektrického pole pokud je velikost náboje $q > 0$. Pokud je $q < 0$, pohybuje se ve směru opačném. Ve směru kolmém na elektrické pole zrychlení nevzniká a pohyb částice se nemění. [30]

6.2.2 Pohyb ve stacionárním magnetickém poli

Naopak v homogenním magnetickém poli (bez působení pole elektrického) $\mathbf{E} = 0$ je rovnice ve tvaru:

$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6.9)$$

Z této rovnice vyplývá, že částice, která bude v klidu, nebude magnetickým polem ovlivněna. Stejný případ nastane v případě pohybu částice podél indukčních čar. Pokud bude ale směr rychlosti částice kolmý na směr magnetického pole \mathbf{B} , potom toto pole bude urychlovat částici ve směru na oba vektory \mathbf{v} a \mathbf{B} . Dostředivé zrychlení způsobí, že se částice začne pohybovat po kružnici, s poloměrem R_k [30].

Velikost dostředivé síly se dá vypočítat jako:

$$\mathbf{F} = m \frac{\mathbf{v}^2}{R_k} \quad (6.10)$$

Velikost magnetické síly je možné spočítat jako:

$$\mathbf{F}_{\text{mag}} = q\mathbf{v}\mathbf{B} \quad (6.11)$$

Spojením předcházejících rovnic a vyjádřením R_k , získáme vztah pro poloměr kružnice:

$$R_k = \frac{mv}{qB} \quad (6.12)$$

Z toho vyplývá, že poloměr je přímo úměrný rychlosti a hmotnosti částice a nepřímo úměrný velikosti magnetické indukce.

Úhlová frekvence oběhu částice po kružnici ω_k je dána:

$$\omega_k = \frac{v}{R_k} = \frac{q}{m} B \quad (6.13)$$

Pokud má částice v magnetickém poli počáteční rychlost \mathbf{v}_0 , která není kolmá na \mathbf{B} , je možno ji rozložit na složku v_k (kolmá na indukční čáru) a v_b (podélná s indukční čárou). Ve směru indukčních čar se částice bude pohybovat rovnoměrně a v příčném směru se bude částice pohybovat po kružnici. Z toho vyplývá, že složením těchto pohybů vzniká šroubovice s poloměrem daným podle:

$$R_k = \frac{mv_k}{qB} \quad (6.14)$$

a konstantním stoupáním s daným rovnicí:

$$s = v_b T = 2\pi \frac{v_b}{\omega_c} = 2\pi \frac{mv_b}{qB} \quad (6.15)$$

Se zvyšující se magnetickou indukcí \mathbf{B} se poloměr šroubovice zmenšuje. Magnetické pole má na pohybující se částice kompresní účinek.

6.2.3 Pohyb v homogenním elektrickém a stacionárním magnetickém poli

V homogenním elektrickém a stacionárním magnetickém poli je síla, která působí na částici definována jako:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6.16)$$

Tato síla bývá označována jako Lorentzova.

Pro tento případ je vhodné rozdělit vektor intenzity elektrického pole na příčnou a podélnou složku. V momentě kdy nebude působit příčná složka intenzity elektrického pole, bude výsledný pohyb částice popsán jako pohyb po kružnici a rovnoměrně zrychlený přímočarý pohyb v příčném směru. Výsledkem tedy bude šroubovice s proměnným stoupáním. Pokud budou elektrická a magnetická pole zkřížená a budou svírat pravý úhel, bude možné pozorovat driftový pohyb kolmý na směr magnetického pole, který je způsoben polem elektrickým [31].

Rovnici (6.16) je možné rozložit na složky, kde magnetické pole má směr v ose z , počáteční rychlost $\mathbf{v}_0 = 0$ m/s a počáteční polohový vektor \mathbf{r}_0 má nulové souřadnice.

$$\begin{aligned} m \frac{dv_x}{dt} &= qv_y B_z + qE \\ m \frac{dv_y}{dt} &= -qv_x B_z \end{aligned} \quad (6.17)$$

Výslednou dráhou je tzv. cykloid popsáný rovnicí:

$$\left(x - \frac{mE}{qB^2}\right)^2 + \left(y + \frac{E}{B} \cdot t\right)^2 = \left(\frac{mE}{qB^2}\right)^2 \quad (6.18)$$

kde člen E/B je driftová rychlost, x a y jsou souřadnice v prostoru.

6.3 Metody výpočtu elektrických a magnetických polí

Při studiu interakce proudící tekutiny s magnetickým polem, je důležité vyjádřit velikost proudové hustoty \mathbf{J} . Ve FLUENTu je možné použít dva postupy pro výpočet proudové hustoty, a to:

- Metodu elektrického potenciálu
- Metodu magnetické indukce

6.3.1 Metoda elektrického potenciálu - Electric Potential Method

Prvním způsobem, jak je možné vypočítat proudovou hustotu z Ohmova zákona je vypočítat rovnici elektrického potenciálu [32]. Obecně je možné vypočítat intenzitu elektrického pole \mathbf{E} jako:

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (6.19)$$

kde \mathbf{A} je magnetický vektorový potenciál (plyne z Maxwellových rovnic – každá změna pole elektrického vede ke změně pole magnetického a naopak). Pro statické pole může být Ohmův zákon přepsán:

$$\mathbf{J} = \sigma(-\nabla\varphi + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})) \quad (6.20)$$

Pro dostatečně vodivé médium platí zákon kontinuity elektrického proudu, který je definovaný jako:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (6.21)$$

Potom rovnice elektrického potenciálu je ve tvaru:

$$\nabla^2\varphi = \nabla(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6.22)$$

6.3.2 Metoda magnetické indukce - Magnetic Induction Method

Ve druhém případě je rovnice magnetické indukce odvozena z Ohmova zákona a Maxwellových rovnic. Taty rovnice vytváří propojení proudového pole tekutiny a pole magnetického [32]. K proudové hustotě se dostaneme následující relací:

Všeobecný tvar Ohmova zákona v diferenciálním tvaru je:

$$\mathbf{J} = \sigma\mathbf{E} \quad (6.23)$$

Při pohybu tekutiny v magnetickém poli je rovnice upravena na tvar:

$$\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6.24)$$

Z Ohmova zákona a Maxwellových rovnic je rovnice indukce přepsána do tvaru:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{B} = \frac{1}{\mu\sigma} \nabla^2\mathbf{B} + (\mathbf{B}\nabla)\mathbf{v} \quad (6.25)$$

Z vypočítané magnetické indukce je poté možno vypočítat proudovou hustotu jako:

$$\mathbf{J} = \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{B} \quad (6.26)$$

6.4 Propojení polí

Působení elektromagnetických polí na tekutiny je vyjádřeno pomocí Lorentzovy síly \mathbf{F} a Joulova tepla \mathbf{Q} , jež jsou zdrojovými členy v rovnici hybnosti a energie.

Rovnice hybnosti:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \mathbf{F} + \frac{\eta}{\rho}\nabla^2\mathbf{v} \quad (6.27)$$

kde η je dynamická viskozita, ρ je hustota látky, p je tlak a $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$.

Rovnice energie:

$$\rho \left(\frac{\partial E_{kT}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla E_{kT} \right) - \nabla \cdot (k\nabla T) + p\nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{Q} = 0 \quad (6.28)$$

kde E_{kT} je termodynamická vnitřní energie, k je součinitel tepelné vodivosti a $\mathbf{Q} = \mathbf{J}^2/\sigma$.

Tímto způsobem je vytvořeno matematické propojení mezi Maxwellovými rovnicemi a Navier-Stokesovými rovnicemi.

Na druhé straně vstupuje proudění do elektromagnetismu přítomností vektoru rychlosti do rovnice pro výpočet proudové hustoty.

$$\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6.29)$$

Tímto způsobem je vytvořeno zpětné propojení mezi Navier-Stokesovými a Maxwellovými rovnicemi (publikováno v [33]).

6.5 Praktická aplikace - Hmotnostní spektrometr

Pro modelování pohybu elektricky nabitých částic v hmotnostním spektrometru byl opět využitý řešič FLUENT, který disponuje modulem Discrete Phase, jenž umožňuje zobrazování trajektorií částic. A dále jako takový obsahuje speciální nastavbu Magnetohydrodynamics, díky které je možné simulovat interakci elektrických a magnetických polí s tekutinou, tento model je však neúplný, jelikož pracuje buď pouze s elektrickými, nebo magnetickými poli.

Obecně jsou při těchto typech analýz částice uvažovány jako hmotné body, které jsou ovlivňovány vnějšími elektromagnetickými poli, ale sami zdroji těchto polí nejsou.

Všeobecně není možné ve FLUENTu pozorovat pohyb částic bez proudění tekutiny, zároveň v tomto případě není funkční vestavěná rovnice Lorentzovy síly v magnetohydrodynamickém modulu. Proto bylo nutné vytvořit novou rovnici Lorentzovy síly a musely být upraveny vlastnosti interakce částice s okolní tekutinou.

Pro simulaci pohybu nabitých částic bylo též nutné nastavit správné parametry plynu a tření, které působí na částici [32].

Vzhledem ke komplexnosti studované problematiky bylo nutné vytvořit nový matematický model. Přes UDS (User Defined Scalar) byla řešena transportní rovnice a přes UDF (User Defined Functions) bylo realizováno propojení působení elektrického a magnetického pole.

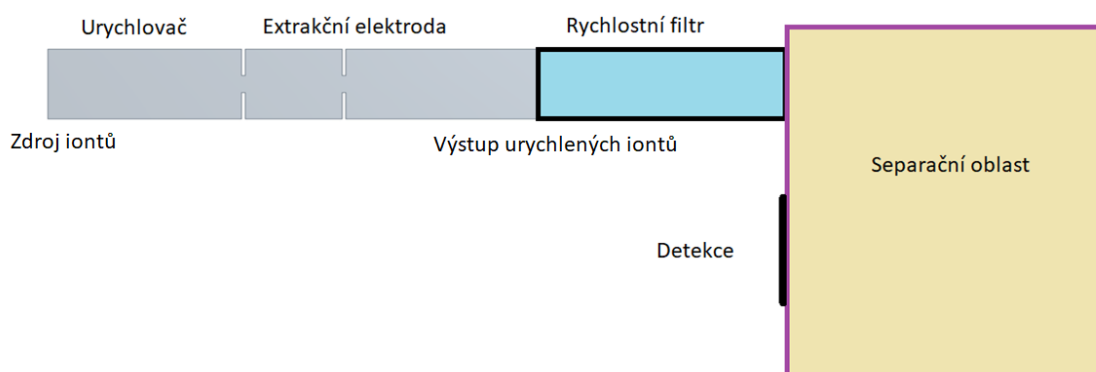
6.5.1 Hmotnostní spektrometrie

Jedná se o metodu, kterou je možné využít pro určení hmotnosti atomů a molekul. Založena je na pohybu nabitých částic v elektrickém a magnetickém poli. Tento pohyb je pak závislý na poměru hmotnosti a náboje (m/q).

V hmotnostním spektrometru můžeme rozlišit 4 základní děje::

- Urychlení iontů na definovanou rychlost
- Průchod iontů přes rychlostní filtr
- Separace iontů
- Detekce iontů

Takto byla koncipována i geometrie (Obrázek 6.2), která byla zjednodušena tak, aby bylo možné jasně sledovat pohyb iontů. Pro demonstraci funkčnosti byly definovány 3 typy částic, a to ionty: hliníku, mědi a zlata, které měly náboj $q = +1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$.



Obrázek 6.2: Principiální uspořádání hmotnostního spektrometru.

Pro urychlení iontů prostřednictvím elektrického pole o konstantní intenzitě byla na levou čelní stěnu geometrie urychlovače aplikována okrajová podmínka 100 V a na extrakční elektrodu byla aplikována podmínka 0 V. Vzdálenost zdroje a extrakční elektrody je 25 mm. Zdroj iontů byl umístěn na čelní stěnu a počáteční rychlost iontů byla 0 m/s. Průměr otvoru clonek je 5 mm, průměr zdroje je 20 mm a jeho délka je 50 mm.

Jako první bylo nutné ověřit, zda urychlení iontů pomocí napětí funguje korektně. Ionty mají na začátku nulovou rychlost a maximální potenciální energii, postupně se pak jejich urychlením potenciální energie mění v kinetickou, která lze vyjádřit jako:

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 = qU \quad (6.30)$$

$$\mathbf{v} = \sqrt{\frac{2qU}{m}} \quad (6.31)$$

Rychlost částice na dané vzdálenosti je možné vypočítat jako:

$$s = \mathbf{v}_0 t + \frac{1}{2} a t^2 \quad (6.32)$$

Jelikož je počáteční rychlost iontů nulová, můžeme první člen zanedbat a zrychlení v elektrickém poli lze definovat jako:

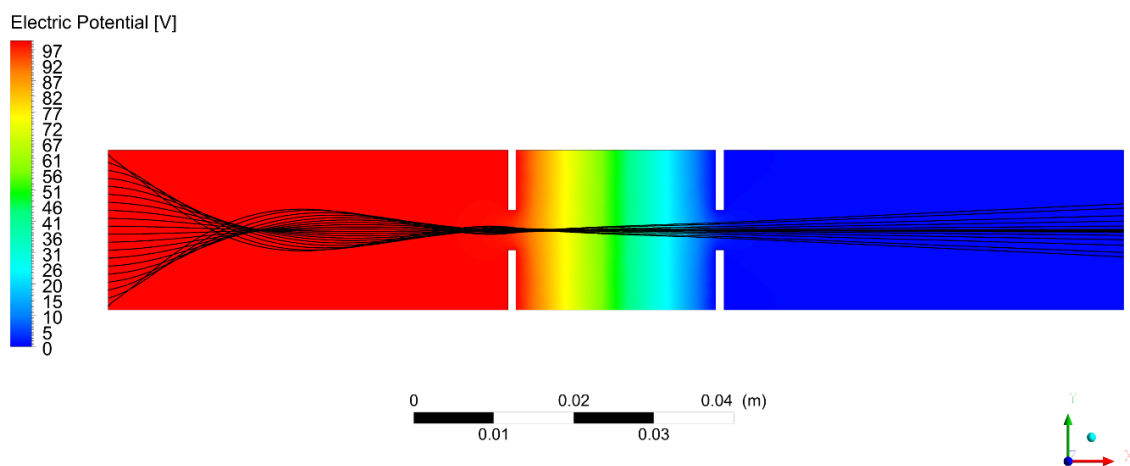
$$\mathbf{a} = \frac{q\mathbf{E}}{m} \quad (6.33)$$

Z toho pak rychlost:

$$\mathbf{v} = \mathbf{a} \cdot t = \frac{q\mathbf{E}}{m} t \quad (6.34)$$

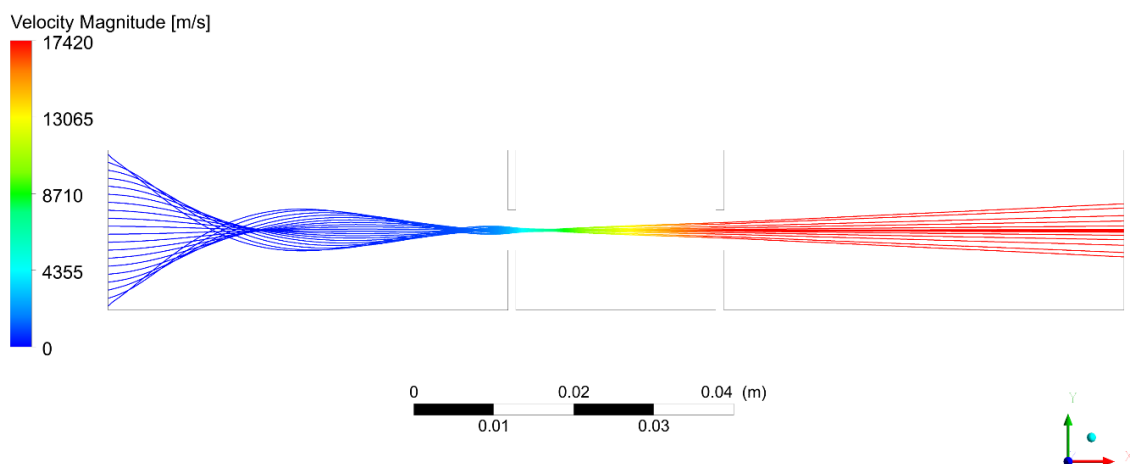
$$\mathbf{v} = \frac{q\mathbf{E}}{m} \sqrt{\frac{2s}{\frac{q\mathbf{E}}{m}}} \quad (6.35)$$

Pro ověření byla podle výše uvedených okrajových podmínek a vztahu (6.35) spočítána empiricky hodnota rychlosti dané částice a poté byla porovnána s hodnotou, kterou vypočítal numerický model. Rozložení potenciálu ilustruje Obrázek 6.3.



Obrázek 6.3: Rozložení elektrického potenciálu a dráhy částic.

Profil rychlosti popisuje Obrázek 6.4.



Obrázek 6.4: Rozložení rychlosti iontů mědi.

Tabulka 6.1 ukazuje srovnání teoretické rychlosti vypočítané na základě rovnice (6.35) a rychlosti získané z numerického modelu.

Tabulka 6.1: Porovnání vypočítané a simulované hodnoty poloměru jednotlivých iontů.

Materiál	Teoretická rychlost [m/s]	Vypočítaná rychlost [m/s]	Relativní chyba [%]
Hliník	26736,90	26733,70	-0,01
Měď	17418,64	17419,93	-0,01
Zlato	9895,50	9920,54	0,25

Aby bylo možné rozlišit ionty na základě jejich hmotnosti, musí do separační oblasti vstoupit stejnou rychlostí, za tímto účelem je jako další stupeň do geometrie zařazen rychlostní filtr. Rychlostní filtr je v podstatě tvořen elektrickým polem a na něj kolmým konstantním magnetickým polem.

Pokud částice vstoupí do filtru, budou na ni působit síly elektrického a magnetického pole. K tomu, aby částice filtrem prošla beze změny směru pohybu, musí být elektrická a magnetická síla v rovnováze:

$$q\mathbf{E} = q\mathbf{v}\mathbf{B} \quad (6.36)$$

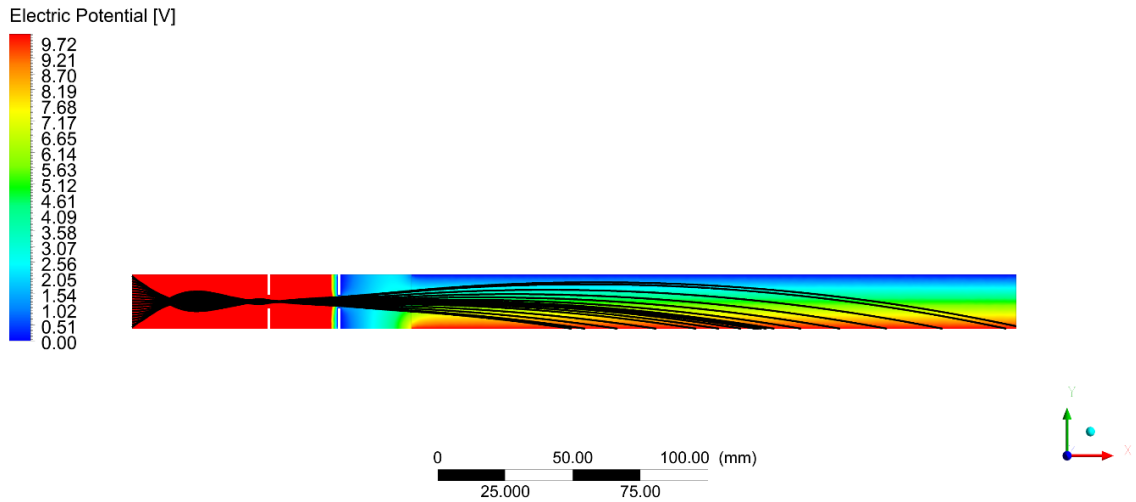
$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{E}}{\mathbf{B}} \quad (6.37)$$

Pomalejší částice budou odkloněny ve směru elektrické síly a naopak rychlejší částice budou odkloněny ve směru magnetické síly.

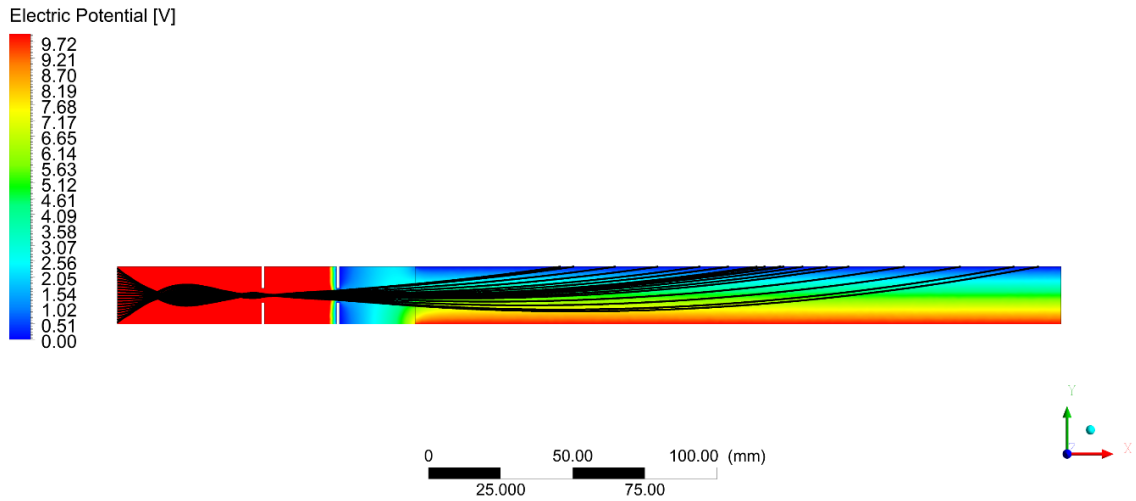
Pro ověření funkčnosti numerického modelu byly okrajové podmínky nastaveny tak, aby filtrem prošli pouze ionty mědi, ionty hliníku a zlata byly odkloněny.

Na spodní elektrodu byl nastaven potenciál 10 V a na horní 0 V. Hodnota magnetické indukce byla vypočítána z rovnice (6.37) $B = 0,02$ T. V tomto případě jsou kladné částice tlačeny elektrickým polem nahoru a magnetickým dolů. Celková délka rychlostního filtru je 200 mm.

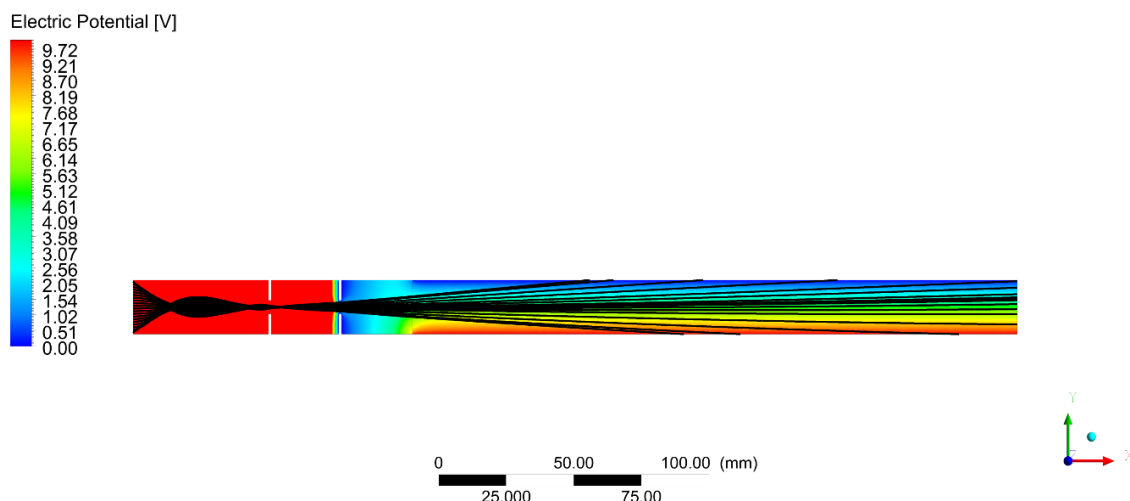
V případě hliníku, díky jeho vysoké rychlosti, převažuje magnetická síla nad elektrickou a částice jsou tlačeny dolů (Obrázek 6.5), u zlata, díky malé rychlosti, převažuje elektrická síla nad magnetickou a částice jsou odkláněny nahoru (Obrázek 6.6). Částice mědi splňují předepsanou podmínku, a proto prochází beze změny dráhy (Obrázek 6.7).



Obrázek 6.5: Zobrazení dráhy iontů hliníku.



Obrázek 6.6: Zobrazení dráhy iontů zlata.

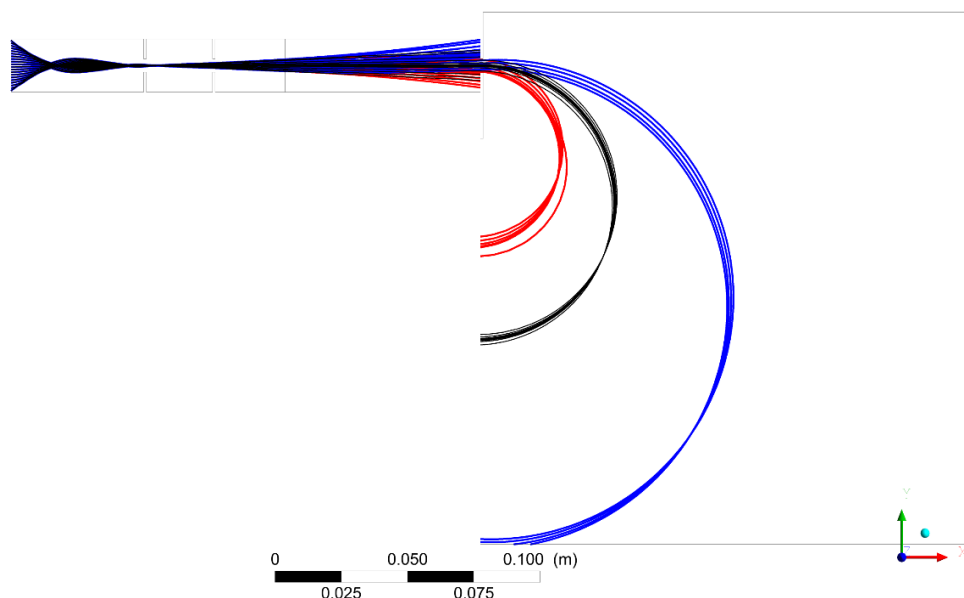


Obrázek 6.7: Zobrazení dráhy iontů mědi.

Poslední oblast, do které ionty vstupují, je oblast separace. Rozměry separační oblasti jsou 200×200 mm. Ta je tvořena konstantním magnetickým polem, které je kolmé na směr rychlosti částic. Na částice začne působit síla, která je nutí pohybovat se po kruhové dráze, jejíž poloměr je podle rovnice:

$$R_k = \frac{mv}{qB} \quad (6.38)$$

V případě vypnutého rychlostního filtru se všechny částice dostávají do separační oblasti (Obrázek 6.8).



Obrázek 6.8: Zobrazení dráhy jednotlivých typů iontů bez zapnutého rychlostního filtru, hliník (červeně), zlato (modře) a měď (černě).

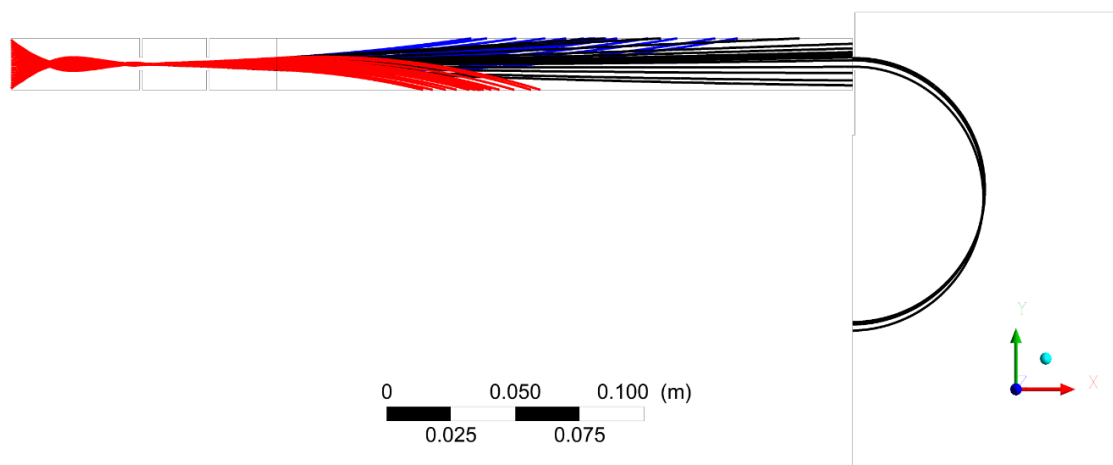
Pro ověření teoretických předpokladů bylo realizováno porovnání empiricky vypočítaných hodnot poloměrů a poloměrů získaných z nově implementovaného modelu ve FLUENTu (Tabulka 6.2).

Tabulka 6.2: Porovnání vypočítané a simulované hodnoty poloměru jednotlivých iontů.

Materiál	Teoretická hodnota [mm]	Vypočítaná hodnota [mm]	Relativní chyba [%]
Hliník	34,53	33,48	-3,01
Měď	50,50	51,24	1,46
Zlato	89,89	89,00	-0,99

Hodnoty empiricky vypočtených poloměrů korespondují s hodnotami z numerického modelu. Odchytky jsou způsobeny hlavně rozptylem iontů.

Po zapnutí rychlostního filtru jsou částice hliníku a zlata odchýleny mimo separační oblast (Obrázek 6.9).



Obrázek 6.9: Zobrazení dráhy iontů hliníku (červeně), zlata (modře) a mědi (černě).

6.6 Shrnutí

V této části práce byly prezentovány výsledky z oblasti modelování proudění nabitých částic. Obecnou nevýhodou komerčních řešičů je to, že nedokáží simulovat interakci magnetického pole s nabitými částicemi v nevodivém prostředí.

Dále nedokáží současně počítat elektrické a magnetické pole a indukci magnetického pole působením elektrického proudu. Řešením by bylo použít například řešič Maxwell a tato pole spočítat externě a poté je do FLUENTu importovat, což je však nepraktické z hlediska exportu dat z Maxwellu, kde dochází často k chybám ve formátování exportovaných dat.

Jako další je možné použít prezentované řešení a implementovat do FLUENTu chybějící interakce.

Jako demonstrační příklad, na kterém byly ověřeny teoretické podklady shrnuté v celé kapitole 6 a otestována funkčnost implementovaného matematického modelu, byl zvolen zjednodušený model hmotnostního spektrometru.

Postupně byly „oživovány“ jednotlivé části spektrometru s důrazem na popis jevů, které se v dané části odehrávají.

V kompletní analýze byl sledován pohyb iontů hliníku, zlata a mědi, s tím, že parametry spektrometru byly nastaveny pro ionty mědi.

Bylo provedeno srovnání empiricky vypočítaných poloměrů zakřivení jednotlivých iontů s numerickým modelem při dosažení velmi upokojivé shody modelu s analytickým výpočtem. Díky nízké hmotnosti a tedy vysoké rychlosti měly ionty hliníku nejmenší poloměr. Naopak ionty zlata měly díky malé rychlosti a vysoké hmotnosti poloměr největší. Ionty mědi prošli filtrem beze změny.

Použitelnost prezentovaného řešení lze dále uplatnit například v různých typech elektrostatických čoček pro usměrňování iontů, v elektronové mikroskopii, aj.

7 Modelování proudění ve vakuových komorách elektronového mikroskopu

Motivace

Ústav elektrotechnologie udržuje letitou spolupráci s Ústavem přístrojové techniky AVČR, kde se v podobě numerických simulací účastní výzkumu v oblasti čerpaní vakuových komor environmentálních rastrovacích elektronových mikroskopů (dále jen EREM).

EREM umožňuje pozorování vlhkých vzorků a izolantů, které není nutno nijak speciálně upravovat (pokovením, aj.). To znamená, že na rozdíl od konvenčních REM, které pracují ve vakuu, můžeme zkoumat prakticky jakékoli vzorky za jakýchkoli plynných podmínek.

To je umožněno díky oddělení prostoru komory vzorku a tubusu systémem diferenciálního čerpání. Obdobného řešení je pak využito i u scintilačního detektoru, který slouží k detekci sekundárních elektronů, kdy je komora se vzorkem a oblast se scintilátorem též tímto systémem oddělena (publikováno např. v [34], [35]).

Čerpání vakuových komor EREM má specifikum, v oddělení oblastí s velmi vysokými tlakovými gradienty, systémem tlak-omezujících clonek s velmi malými otvory, což způsobuje takzvané kritické proudění vznikající v clonkách a poté neřízenou expanzi plynu za nimi.

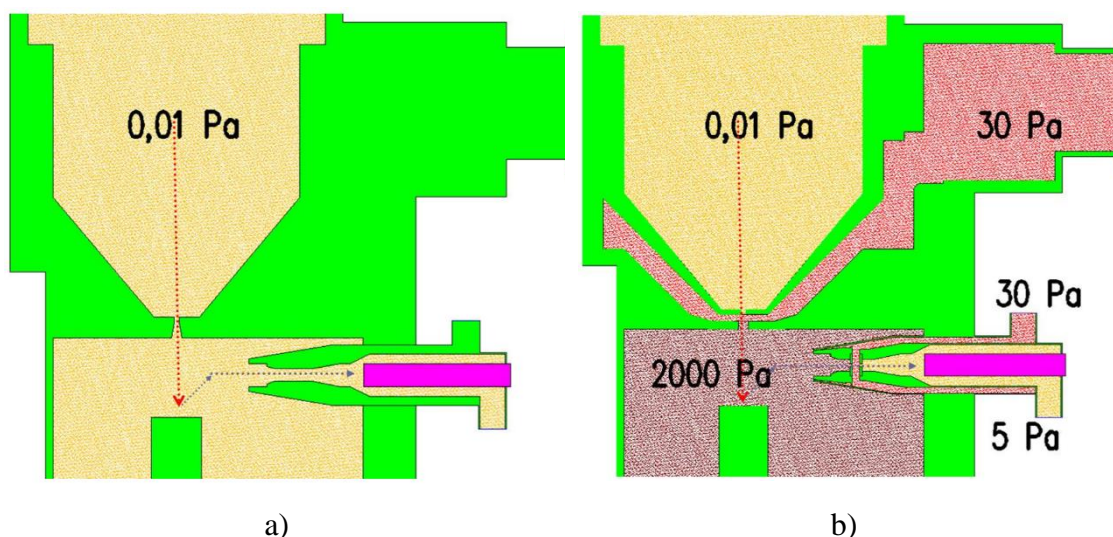
V této části práce bude pozornost věnována numerickému modelování proudění v systému diferenciálního čerpání mezi tubusem a komorou vzorku. Důraz bude kladen zejména na porovnání možnosti výpočtu deterministickou metodou mechaniky kontinua oproti stochastické metodě, která bývá řešena algoritmem Monte Carlo.

7.1 Proudění plynu elektronovým mikroskopem

Principiální rozdíl mezi REM a EREM ilustruje Obrázek 7.1a a Obrázek 7.1b. Představme si principiálně EREM, tak jak ukazuje Obrázek 7.1b a zaměříme se na tubus a komoru se vzorkem.

Ve spodní části se nachází komora se vzorkem, kde může být připuštěn tlak plynu až 2000 Pa. V horní části je tubus, kde se nachází zdroj elektronů a elektronová optika, v této oblasti musí být prostředí blízké vakuu, jinak by vysoké napětí, které je na zdroji elektronů způsobovalo výboje v plynu.

Přechod mezi těmito dvěma oblastmi, s takto vysokým gradientem tlaku, by byl nemožný, pokud by mezi nimi nebyl mezistupeň ve formě diferenciálně čerpané komory a soustavy clonek, které tuto komoru ohraničují.



Obrázek 7.1: Principiální rozdíl mezi konstrukcí a) REM a b) EREM.

Clonky mají ve svém středu velice malý otvor (někdy i tvarovaný, pak hovoříme o dýze), kterým prochází primární elektronový svazek a zároveň v nich dochází k proudění plynu, kterému říkáme kritické, a má jistá specifika.

Rychlost proudění ve clonce vzrůstá úměrně rozdílu tlaků na obou stranách clonky, ovšem jen do chvíle, než rychlost proudění dosáhne hodnoty 1 Mach. V tento moment dochází k tzv. kritickému proudění, kdy rychlost proudění ve clonce již nepřesáhne hodnoty větší než 1 Mach a to ani při dalším zvyšování rozdílu tlaků na obou stranách clonky.

Stejně tak platí, že není možné, aby clonkou prošlo větší množství plynu za jednotku času, než je množství, které clonkou prochází v momentě, kdy se rychlost plynu v ní rovná hodnotě 1 Mach.

Za clonkou pak vzniká nadzvukové proudění, ovšem s jistou oblastí sníženého tlaku, která vzniká právě z důvodu, že clonkou nemůže projít větší množství plynu, než jaké clonkou projde při rychlosti odpovídající rychlosti zvuku.

V oblasti za clonkou, kde rychlost proudícího plynu náhle klesne pod hodnotu rychlosti zvuku, vzniká rázová vlna. Jedná se o oblast, ve které je zvýšená hustota plynu, což může pro primární elektronový svazek, který rastruje vzorek, představovat bariéru (publikováno v [36]).

O tom, zda je proudění nadzvukové nebo podzvukové rozhoduje Machovo číslo:

$$M_a = \frac{v}{c} \quad (7.1)$$

kde v je rychlost proudění a c je rychlost šíření zvuku v daném prostředí. Vztah mezi Machovým číslem a průtočným průřezem clonky definuje Hugoniotův teorém:

$$\frac{dA}{A} + \frac{dc}{c}(1 - M_a^2) = 0 \quad (7.2)$$

kde A je průtočný průřez. Tento zákon ukazuje, že změna rychlosti proudění a průtočného průřezu závisí na Machově čísle následovně:

$M_a < 1$ – podzvukové proudění

Při zvětšování průtočného průřezu dochází k poklesu rychlosti proudění a tedy i k nárůstu tlaku.

$M_a = 1$ – proudění na hranici rychlosti zvuku

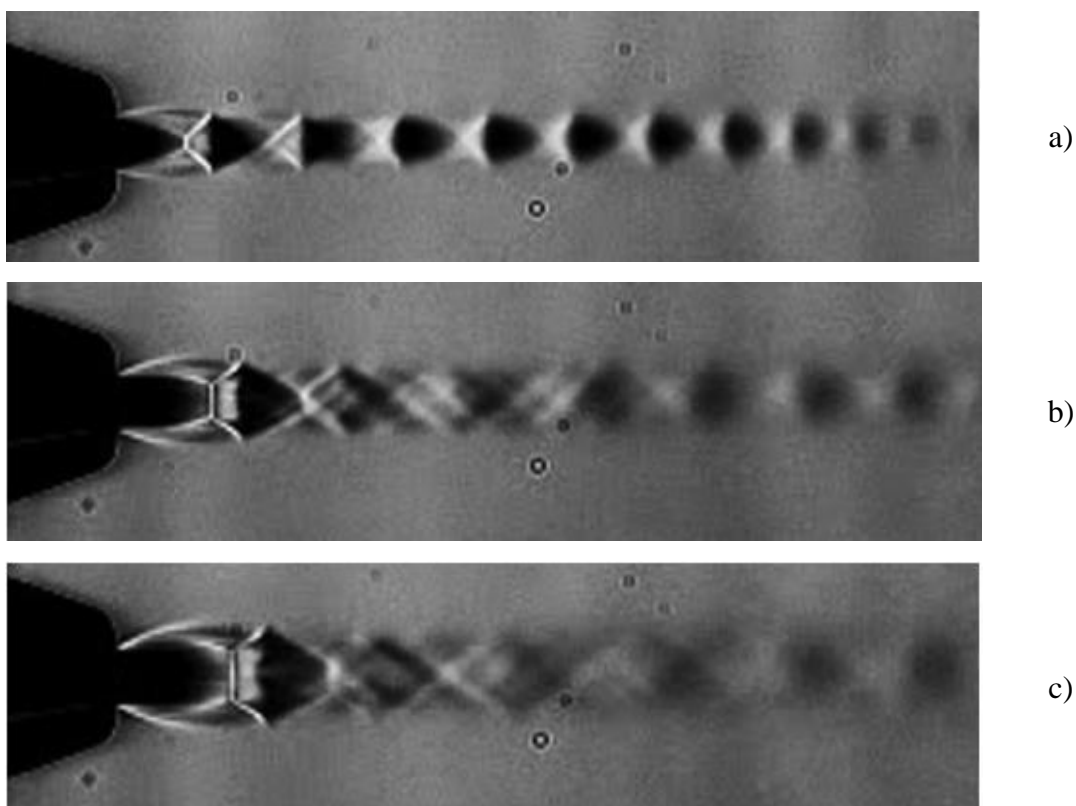
Pokud derivace změny průřezu $dA/A = 0$, pak místo, kde proudění dosáhne rychlosti zvuku, je extrémem funkce změny průřezu otvoru. Z těchto úvah plyne, že proudění dosáhne rychlosti zvuku pouze zmenšováním průtočného průřezu.

$M_a > 1$ – nadzvukové proudění

Při zmenšování průtočného průřezu roste rychlost proudění a klesá tlak [37].

Uvedeného jevu je využíváno v konstrukcích diferenciallyně čerpaných komor elektronových mikroskopů.

Obrázek 7.2 ukazuje Schlierenovy obrázky získané metodou optického lomu, na kterých lze vidět, že za clonou vzniká oblast nadzvukového proudění se sníženým tlakem – znázorněná světlejší barvou, která končí v místě, kde dochází k rázové vlně. Ta je zobrazena tmavou oblastí vyšší hustoty plynu. Jedná se o obrázky proudícího média z osově symetrické, zužující se trysky.



Obrázek 7.2: Schlierenovy obrázky proudícího toku z osově symetrické kuželové trysky při stoupajícím tlaku a) 4 bary b) 7 barů c) 10 barů [38].

Problémem bývá, že v klasických clonkách s kruhovým otvorem, dochází za clonkou k neřízené expanzi plynu, proto bývá často snahou modifikovat tvar otvorů ve clonkách, například užití tvaru Lavalovy dýzy, síťky, aj. (publikováno např. v [39]).

7.2 Možnosti výpočtového modelování

Jak bylo uvedeno v kapitole 2.2, jedním z možných rozdělení simulací je na deterministické a stochastické. V případě stochastického přístupu v CFD simulacích, nejsou vztahy a chování systému vyjádřeny exaktně, naproti tomu deterministické modely daný systém exaktně popisují. Níže bude popsán základní aplikační rozdíl mezi stochastickým a deterministickým přístupem v CFD modelování [40].

7.2.1 Stochastické CFD - Metoda Monte Carlo

Monte Carlo⁵ je numerická metoda založená na vztahu mezi pravděpodobnostmi různých náhodných procesů a proměnných, které jsou řešením dané úlohy. Základní myšlenkou této metody je určit střední hodnotu veličiny, která je výsledkem náhodného děje. Vytvoří se počítačový model tohoto děje a po proběhnutí dostatečného množství simulací se mohou data zpracovat klasickými statistickými metodami. Přesnost a efektivnost celého výpočtu metodou Monte Carlo pomocí výpočetní techniky je ovlivněna kvalitou generovaných náhodných čísel, výběrem racionálního algoritmu výpočtu a kontrolou přesnosti získaného výpočtu.

Statistická metoda Monte Carlo neklade základní požadavek na spojitost výpočetního prostoru, proto může popisovat efekty, které není možné popsat spojitou funkcí, ale naopak může vracet špatné výsledky právě proto, že nepočítá se spojitostí prostoru. Metoda Monte Carlo je vhodná pro výpočet pohybu osamocených molekul, tedy tam, kde již neplatí Navier-Stokesovy rovnice.

Nejčastější postup metody Monte Carlo je modelování takové náhodné veličiny X , že její střední hodnota $E(X)$ je rovna hledané hodnotě a . Přesněji řečeno: abychom mohli přibližně vypočítat skalární veličinu a , musíme najít takovou náhodnou veličinu X , že platí [41]:

$$E(X) = a \quad (7.3)$$

Pakliže vypočteme n nezávislých realizací X_1, X_2, \dots, X_n náhodné veličiny X , můžeme odhadnout a pomocí aritmetického průměru:

$$a \doteq \frac{1}{n} (X_1 + X_2 + \dots + X_n) \quad (7.4)$$

V převážné většině metod Monte Carlo se postupuje tak, že se nejdříve generují hodnoty náhodné veličiny Y rovnoměrně rozdělené na intervalu $(0, 1)$ a ty se pak transformují transformací:

⁵ Při těchto simulacích hovoříme o takzvané přímé simulaci Monte Carlo, označované jako DSMC (Direct Simulation Monte Carlo)

$$x_i = f(y_i, y_{i-1}, \dots) \quad (7.5)$$

kde f je vhodně zvolená funkce pro hledané hodnoty X_1, X_1, \dots . Výpočet hodnot x_i nemusí být zadán přímo funkční závislostí, ale může být proveden pomocí vhodného algoritmu.

Obecné schéma výpočtu metodou Monte Carlo je tedy následující:

1. Generují se náhodná čísla y_i s rovnoměrným rozdělením na intervalu $(0,1)$.
2. Náhodná čísla y_i jsou transformována na náhodná čísla z_i se složitějším rozdělením.
3. pomocí náhodných čísel z_i se buď přímo počítají odhady charakteristik náhodné veličiny X (v tomto případě $z_i = x_i$) nebo se počítají pomocí vhodného algoritmu hodnoty x_i a odhady charakteristik náhodné veličiny.
4. Získané výsledky se statisticky zpracují.

7.2.2 Deterministické CFD

Využití Navier-Stokesových rovnic je naopak jednoznačnou výhodou tam, kde se jedná o spojité prostředí. Je to díky přesnému popsání spojitosti, neboť Navier-Stokesovy rovnice se odvozují od sil, které působí na jednotlivé části tekutiny, kterými jsou gravitace, tlak, tření o sousední části tekutiny a turbulence.

Stav tekutiny můžeme popsat její rychlostí a tlakem ve všech bodech, ve kterých se tekutina nachází. V kontinuu působí na každý element tekutiny dvě síly, objemová a plošná, jejichž původci jsou sousední elementy. Plošná síla je navíc složena ze dvou částí: první souvisí s tlakem a druhá se připisuje viskozitě.

Tím, že Navier-Stokesovy rovnice neřeší na rozdíl od metody Monte Carlo problém statisticky, ale přesným popisem chování kapaliny, dokáží velice dobře bilancovat složitý proces ve spojitěm prostoru.

Navier-Stokesovy rovnice, doplněné o rovnici kontinuity, popisují okamžité stavy proudového pole nestlačitelné kapaliny [42]:

Rovnice stavu ideálního plynu:

$$pV = nRT \quad (7.6)$$

Rovnice hybnosti

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{F} + \frac{\eta}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} \quad (7.7)$$

Rovnice energie:

$$\rho \left(\frac{\partial E_{\text{kin}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla E_{\text{kin}} \right) - \nabla \cdot (k \nabla T) + p \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (7.8)$$

Rovnice kontinuity:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (7.9)$$

Zkoumaná oblast diferenciálně čerpaných komor se týká následujících oblastí, které shrnuje Tabulka 7.1.

Tabulka 7.1: Shrnutí současných používaných metod pro výpočet proudění v elektronových mikroskopech.

Zmapovaná oblast běžného použití deterministické metody CFD	101 325 Pa a vyšší ↓ 2000 Pa	Výpočty probíhají pomocí deterministické CFD metody
Velice úzce zmapovaná oblast použití deterministické metody CFD	2000 Pa ↓ cca 0,1 Pa	Oblast kdy se ještě dá použít deterministické CFD, ale již se projevuje vliv nízkých setrvačných sil
Zmapovaná oblast využití stochastických metod	cca 0,1 Pa ↓ 0,0001 Pa	Výpočty probíhají za pomoci stochastických metod

Pro tyto úvahy je nutné vzít do úvahy takzvané Knudsenovo číslo, které obvykle bývá kritériem pro rozhodnutí o výběru statistické mechaniky (např. DSMC) nebo její kontinuální formulaci (deterministické CFD).

Na rozdíl od pevných látek jsou totiž plyny tvořeny jednotlivými molekulami, které zabírají pouze malou část objemu tvořenou plynem. Pokud bychom uvažovali proudění na molekulární úrovni, bude se proudové pole plynu skládat z velkého množství srážek mezi molekulami plynu a pevným povrchem stěny, který proudění ohraničuje. V běžných aplikacích je ale tato diskrétní podstata plynů zanedbávána a proudové pole je považováno za spojitě [42].

Obecně platí, že předpoklad nasazení deterministické nebo statistické CFD mechaniky, závisí na konkrétní aplikaci a na hustotě plynu. Aby byl předpoklad pro nasazení deterministické formulace CFD platný, musí být tzv. střední volná dráha mnohem větší než délka rozsahu celé aplikace. Střední volnou dráhu označujeme jako \bar{l} a jedná se o průměrnou dráhu, kterou částice uletí mezi dvěma srážkami.

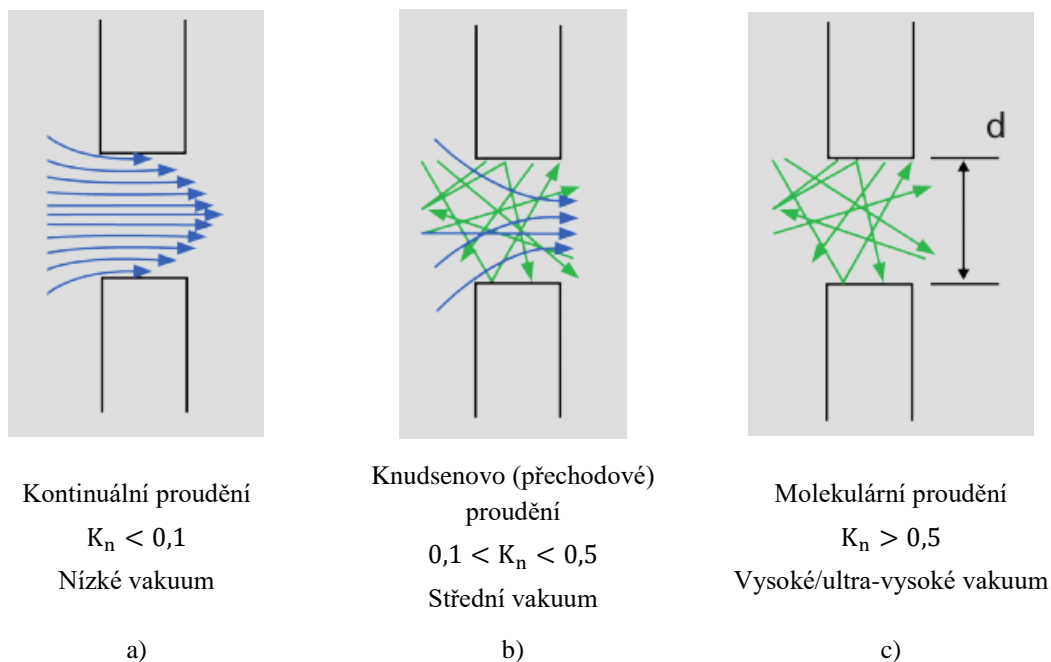
$$\bar{l} = \frac{kT}{\pi\sqrt{2}d_m} \quad (7.10)$$

kde k je Boltzmannova konstanta, T je termodynamická teplota, d_m je průměr molekuly a π je Ludolfovo číslo.

Knudsenovo číslo pak vyjadřuje poměr mezi střední volnou dráhou molekul a charakteristickým rozměrem soustavy (nejmenším měřítkem) d [42]:

$$K_n = \frac{\bar{l}}{d} \quad (7.11)$$

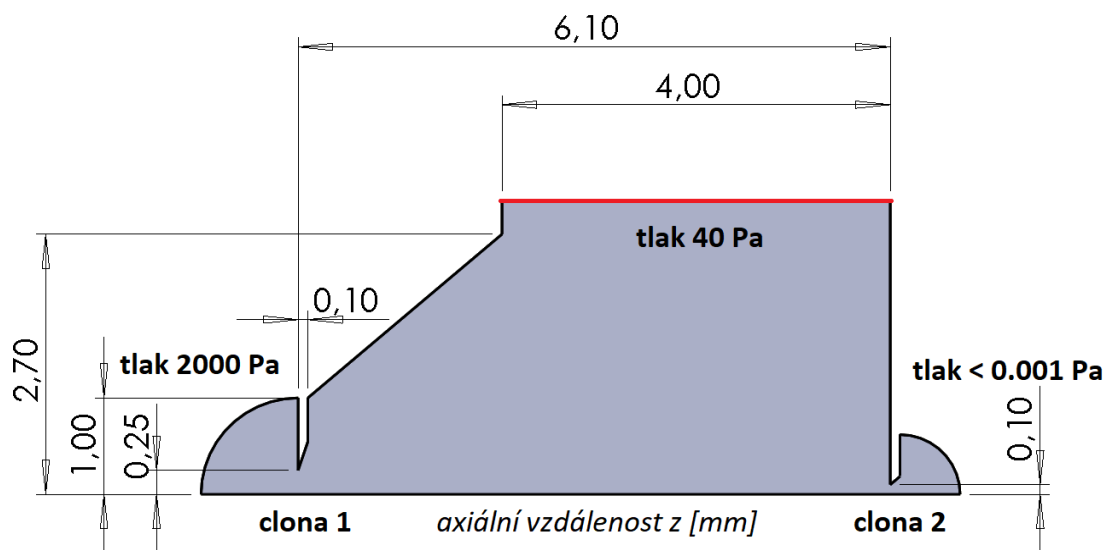
Jestliže $K_n < 0,1$ jedná se o spojitě (kontinuální) proudění, je-li $0,1 < K_n < 0,5$ jedná se o Knudsenovo (přechodové) proudění a v případě že $K_n > 0,5$ jde o molekulární proudění. Celou situaci shrnuje a názorně ilustruje Obrázek 7.3.



Obrázek 7.3: Rozdělení proudění podle Knudsenova čísla.

7.3 Porovnání deterministické CFD vs. DSMC na modelu diferenciálně čerpané komory

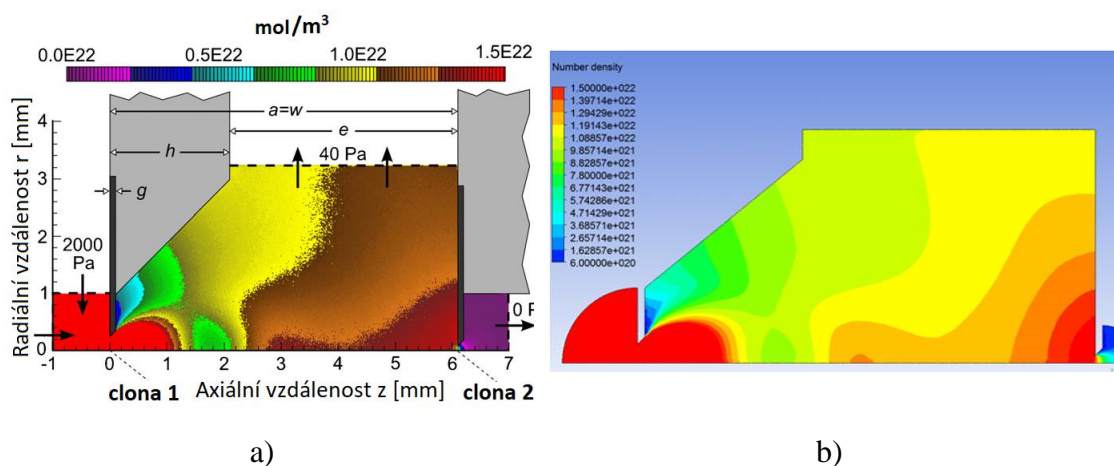
Pro ověření možnosti simulace proudění plynu v diferenciálně čerpané komoře metodou deterministické CFD formulace, byla pro referenční model zvolena studie [43], kde byla pro studium proudění plynu použita metoda DSMC. Geometrický model vycházel z této studie a byl vytvořen jako 2D rotačně symetrická úloha. V komoře byl jako plynné médium nastaven dusík pod tlakem 2000 Pa a termodynamickou teplotou 293,15 K. Z těchto údajů vyplývá, že hustota částic v komoře je $4,94 \cdot 10^{23}$ částic/m³ (viz rovnice (7.12)). Vzdálenost clonek 1 a 2 je 6 mm, šířka kanálu, kterým je odváděn plyn mezi clonkami, je označen jako $e = 4$ mm. Průměr clony 1 je 0,5 mm a průměr clony 2 je 0,2 mm. Celou situaci ilustruje Obrázek 7.4.



Obrázek 7.4: Axiálně symetrický 2D model profilu diferenciální komory.

V ideálním případě by byl mezi clonkami 1 a 2 vyčerpán veškerý plyn, který by stál v cestě primárnímu elektronovému svazku. V praxi však tohoto stavu dosáhnout nelze a v prostoru mezi clonkami je určitý tlak plynu, v praxi tato hodnota bývá okolo 40 Pa a tato hodnota je zároveň předepsána jako okrajová podmínka.

Výsledky byly exportovány z FLUENTu a vyhodnoceny v post-procesoru ANSYS CFX. Obrázek 7.5 graficky porovnává průběh hodnoty koncentrace částic na jednotku objemu.



Obrázek 7.5: Grafické porovnání výsledků metody DSMC (a) a deterministické CFD (b).

Tato veličina bývá nazývána jako „number density.“ Lze ji považovat za počet částic, které jsou přítomny v určitém objemu. Protože toto číslo může být velmi velké, obvykle je tato hodnota myšlena jako počet molů (konečný počet částic) v daném objemu.

Počet atomů nebo molekul n ve hmotě m čistého materiálu dané atomové nebo molekulární hmotnosti M za použití Avogadrovy konstanty N_A je určen rovnicí:

$$n = \frac{mN_A}{M} \quad (7.12)$$

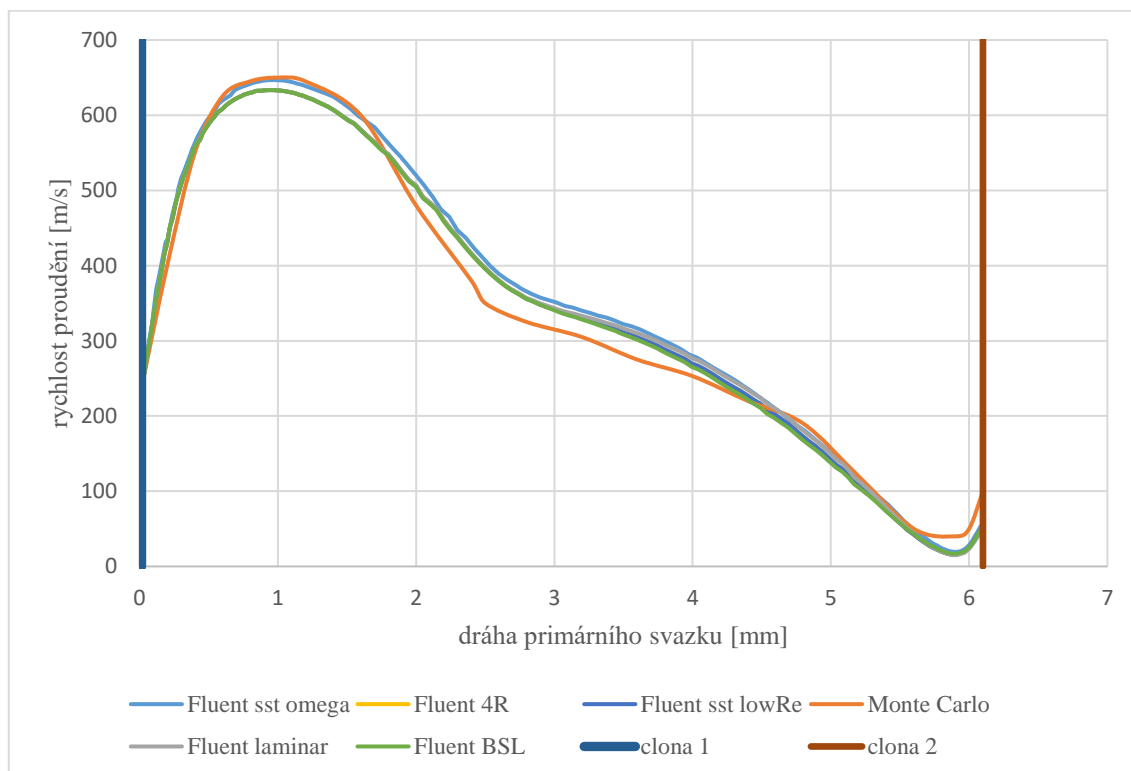
Hodnota „number density“ N , se pak vypočítá jako:

$$N = \frac{n}{V} = \frac{\rho N_A}{M} \quad (7.13)$$

Na předchozím obrázku byly tedy srovnány varianty DSMC a deterministické formulace CFD. Na axiální ose z , byly sledovány veličiny rychlosti a teploty. Tato osa je zároveň i osou primárního svazku elektronů, který prochází diferenciálně čerpanou komorou ohraničenou clonami 1 a 2. Na obrázku je tato dráha v rozmezí od 0 do 6 mm.

Při srovnání hodnoty průběhu rychlosti proudění na dráze primárního elektronového svazku (Obrázek 7.6), je patrná shoda výsledků včetně oblasti rázové vlny, kdy rychlost proudění klesne pod rychlost zvuku.

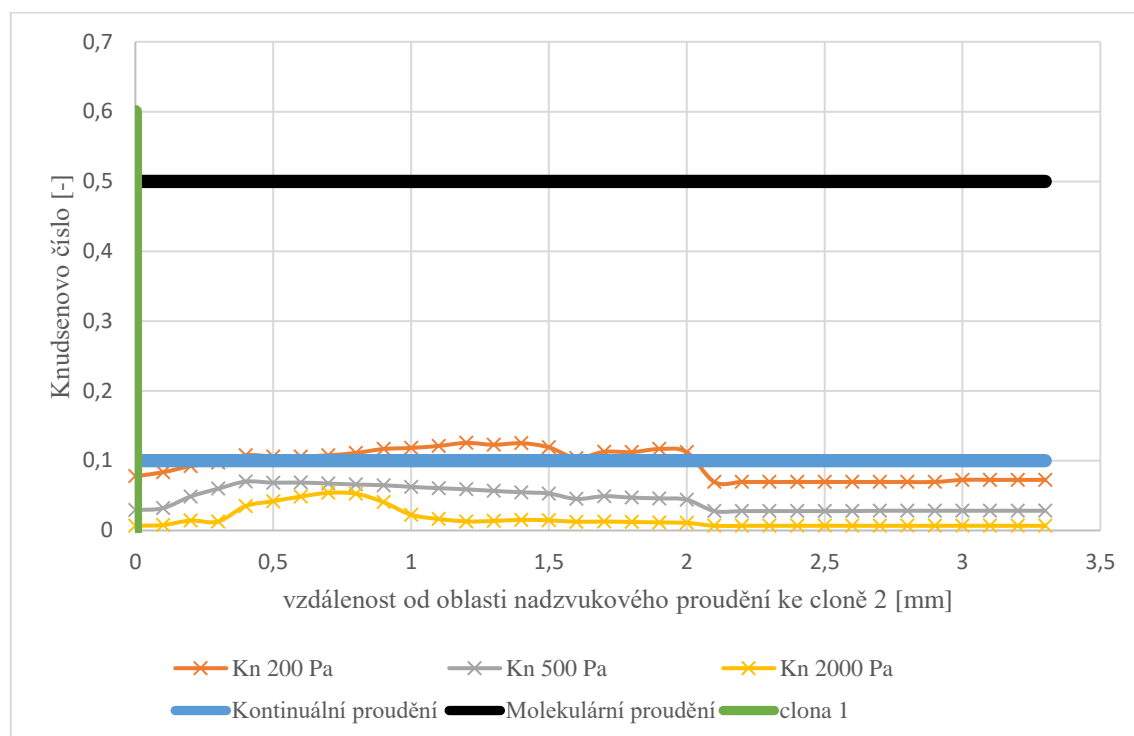
V tomto případě byl pro zajímavost výpočet realizován několikrát a to s různými turbulentními modely. V praxi se ukázalo, že volba turbulentního modelu v daném případě má mizivý vliv, neboť z důvodu nízkého tlaku v ose primárního svazku, převládá laminární proudění.



Obrázek 7.6: Průběh rychlosti proudění na dráze primárního elektronového svazku.

V dalším kroku byl ověřen průběh hodnoty Knudsenova čísla v modelu. Vyhodnocená dráha byla brána od konce první clony do oblasti, kde končí nadzvukové

proudění, což je délka přibližně 3,3 mm. Tuto situaci ilustruje Obrázek 7.7, kde byla navíc měněna hodnota tlaku, který je připuštěn do komory se vzorkem, byly brány hodnoty 200, 500 a 2000 Pa.



Obrázek 7.7: Průběh Knudsenova čísla ve směru od clony 1 do konce oblasti s nadzvukovým prouděním.

Z průběhů je patrné, že při simulaci pro tlaky 500 a 2000 Pa se pohybujeme v oblasti kontinuálního proudění. Pro tlak 200 Pa se začínáme nepatrně pohybovat v oblasti přechodového proudění, nicméně stále je možné použít deterministický přístup řešení. Dále můžeme předpokládat, že pokud se budeme pohybovat v ještě nižších tlacích v komoře, bude hodnota Knudsenova čísla nadále růst. Nicméně jedná se o environmentální mikroskop, kde se předpokládá práce v tlaku. Abychom eliminovali nabíjení nevodivých vzorků, je dokázáno, že hodnota tlaku v komoře by měla být minimálně v rozmezí 150 – 300 Pa.

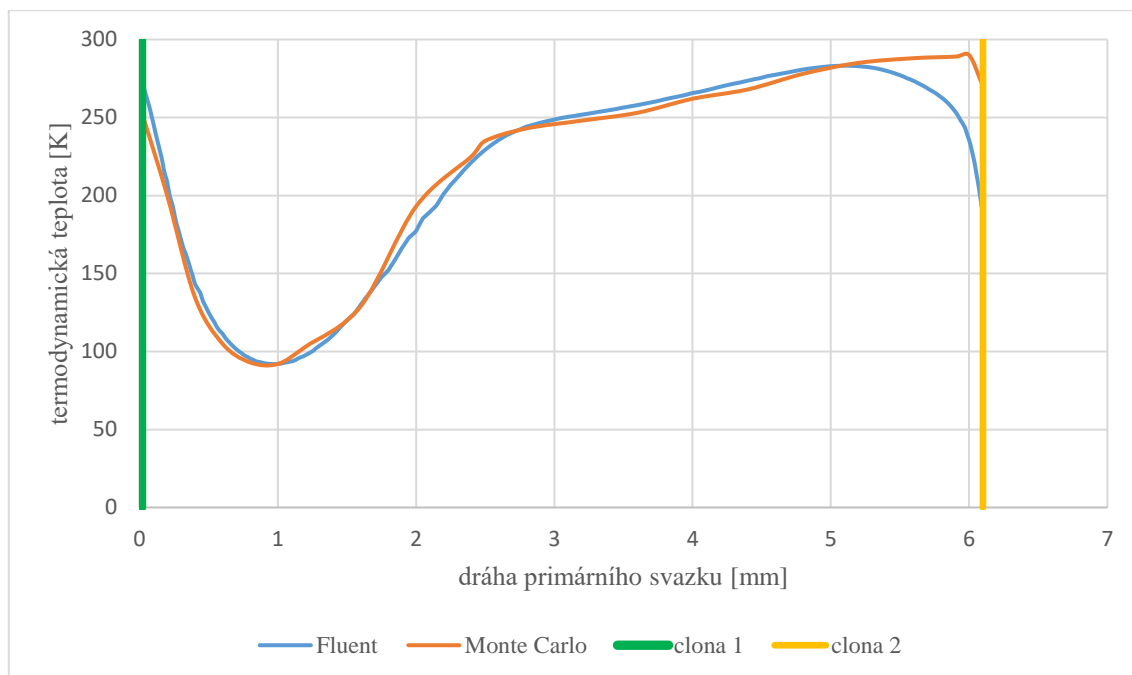
Vzhledem k tomu, že v oblasti nadzvukového proudění se silně mění teplota a dosahuje kryogenních hodnot, je třeba použít Sutherlandův vztah, který popisuje závislost dynamické viskozity na teplotě:

$$\eta(T) = C_1 \frac{\sqrt{T}}{1 + \frac{C_2}{T}} \quad (7.14)$$

kde $\eta(T)$ je dynamická viskozita a C_1 a C_2 jsou Sutherlandovi koeficienty [44].

Podobně je patrná shoda výsledků v oblasti průběhu teploty na dané dráze, kterou ukazuje Obrázek 7.8. Rozdíl je jen v oblasti vstupu plynu do clony 2, kde deterministická

CFD metoda ukazuje pozvolný pokles teploty, což odpovídá v praxi nárůstu tlaku před clonou vycházející z rovnice celkového tlaku.

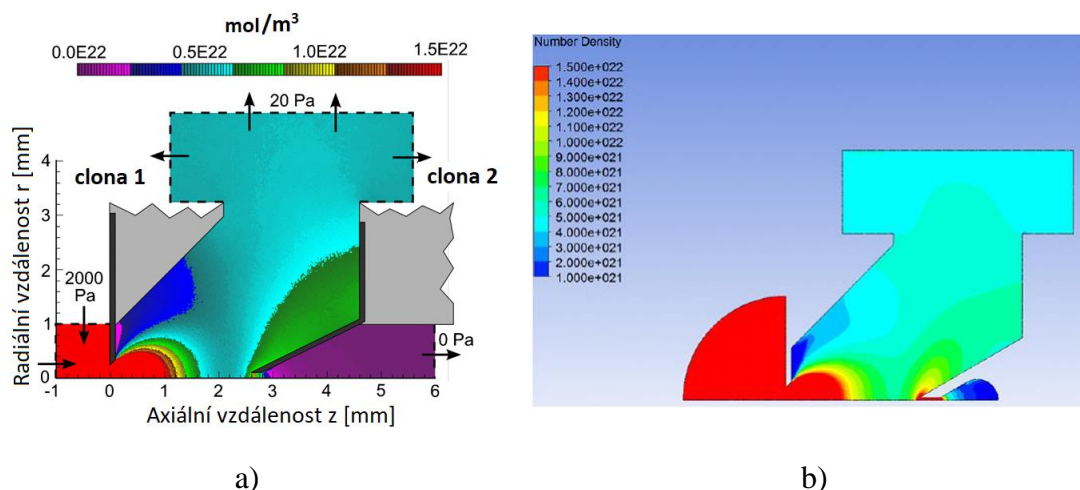


Obrázek 7.8: Průběh teploty v dráze primární elektronového svazku.

Tento jev je z fyzikálního důvodu pravděpodobnější než prudký zlom vycházející z výsledků Monte Carlo.

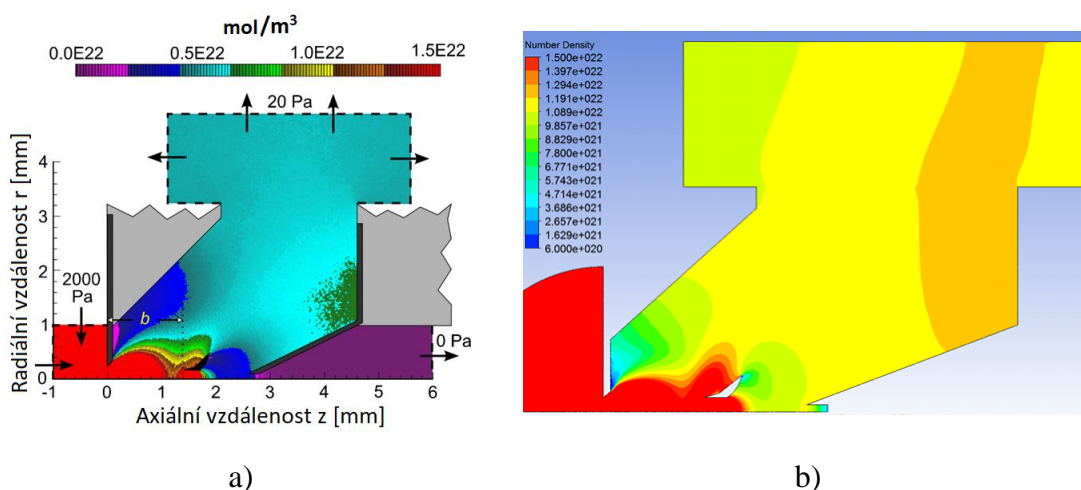
Podobné shody bylo dosaženo i v dalších variantách výpočtů publikovaných v [43], kde byl do dráhy primárního svazku přidán usměrňovač (deflektor) k ovlivnění vzniku rázových vln a ejektor (EADP).

V Případě deflektoru (Obrázek 7.9) se jedná o upravenou clonku 2, která je v tomto případě kuželovitého tvaru. Tento tvar clony pak brání vniku kompresních vln a narušení středu toku, které vzniká u klasické clonky.



Obrázek 7.9: Grafické porovnání metody DSMC (a) a CFD (b) varianta s usměrňovačem rázových vln.

Ve třetím případě byla ještě přidána mezi clonky přepážka ve vzdálenosti $b = 1,4$ mm (ukazuje Obrázek 7.10)



Obrázek 7.10: Grafické porovnání metody DSMC (a) a CFD (b) varianta s překážkou mezi clonami.

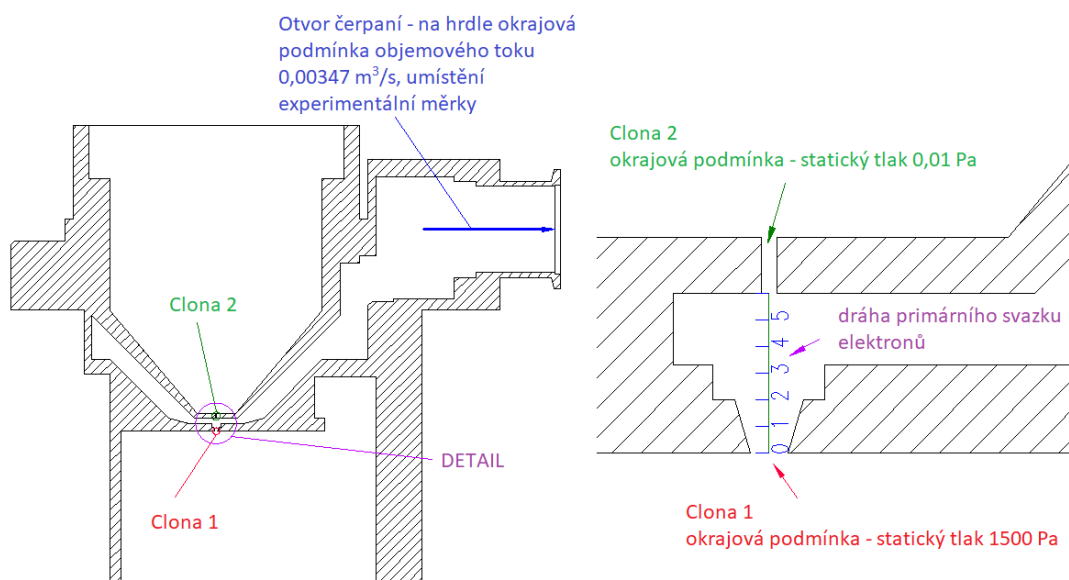
Tato přepážka bývá v anglické literatuře nazývána jako „ejektor“ (z angl. EADP – Ejector Assisted Differential Pumping). Horní část clonky 1 vytváří oblast s nízkým tlakem, což působí jako difuzní čerpadlo a unáší tak molekuly z přilehlé oblasti. Přesměrováním proudění pomocí přepážky před vchodem do druhé clonky je možné vytvořit oblast s nižší hustotou částic a zabránit tak dalšímu nežádoucímu ovlivnění primárního elektronového svazku.

7.4 Srovnání s experimentálním měřením

Kontrola výsledků při použití systému FLUENT pro simulaci proudění plynu v diferenciálně čerpané komoře, byla ověřena i experimentálně na EREM mikroskopu AQUASEM II. Toto měření proběhlo pod vedením Ing. et Ing. Viléma Neděli, Ph.D. na UPT AVČR.

Z hlediska konstrukce a funkčnosti mikroskopu nebyla jiná možnost umístění snímače tlaku, než jeho zabudování na konec hrdla, kde se nachází vývěva pro čerpání plynu mezi clonkami 1 a 2 (bude diskutováno později).

Obrázek 7.11 ilustruje umístění okrajových podmínek a experimentální měřky v modelu elektronového mikroskopu. Průměr clony 1 byl 0,05 mm a průměr clony 2 byl 0,5 mm, čerpání bylo realizováno objemovým tokem $0,00347 \text{ m}^3/\text{s}$.



Obrázek 7.11: Umístění clonek a okrajových podmínek v EREM mikroskopu AQUASEM II.

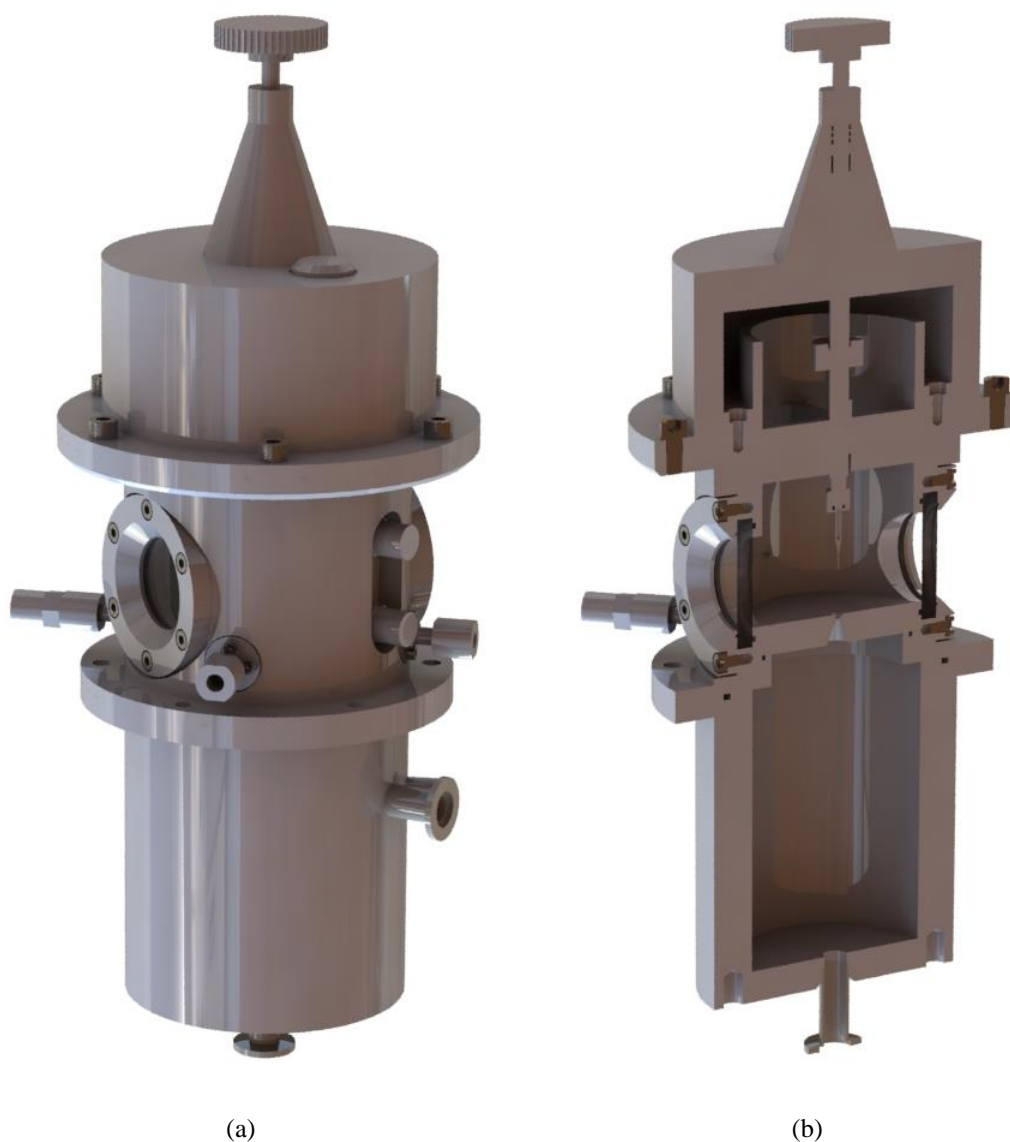
Pro experimentální měření tlaku v diferenciálně čerpané komoře byla použita kapacitní měřka zn. Pfeiffer typ CMR 263 s rozsahem měření do 100 Pa (ve skutečnost zobrazuje až do 110 Pa) s přesností 0,2 % ze zobrazené hodnoty. Tabulka 7.2 ukazuje porovnání měření se simulací.

Tabulka 7.2: Porovnání vypočítané a simulované hodnoty tlaků na hrdle čerpání.

	Tlak u hrdla čerpání pomocí měřky	Tlak u hrdla čerpání pomocí FLUENTu	Relativní chyba [%]
Hodnota tlaku [Pa]	11,70	10,90	-6,83

Z výsledku je patrná poměrně dobrá shoda s experimentálním měřením. Díky tomu je následně možné z modelu vyhodnotit i ta místa v diferenciálně čerpané komoře, která neumožňují umístění snímačů, přesto jsou ale hodnoty tlaků v nich pro konstrukční účely nezbytné.

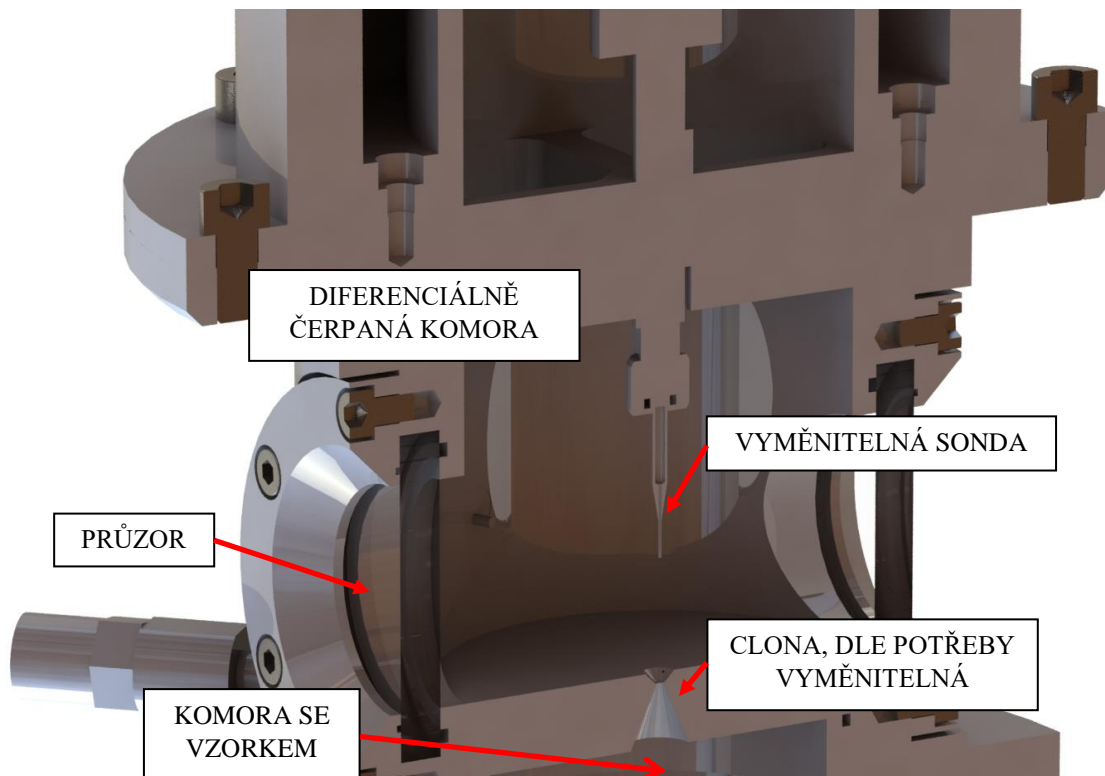
Protože se jedná o velmi specifické podmínky proudění, na Ústavu elektrotechnologie FEKT VUT Brno a UPT AVČR ve spolupráci s UNOB Brno a Ústavem termomechaniky AV ČR probíhá výzkum v oblasti nadzvukového proudění v nízkých tlacích. V současné době byly dokončeny analýzy experimentální komory, jejíž konstrukce je v současné době navržena a jsou generována data pro výrobu. Model této komory ilustruje Obrázek 7.12.



Obrázek 7.12: Model experimentální měřící komory a) celý model b) řez modelem.

Účel dané komory je zmapovat proudění a tepelné podmínky plynu na pomezí kontinua pro verifikaci numerického modelu. Bude vyhodnoceno, nakolik dané proudění ovlivňuje změna poměru setrvačných a vazkých sil z důvodu nízkých tlaků.

Detailnější pohled do komory ukazuje Obrázek 7.13.



Obrázek 7.13: Model experimentální měřící komory – detailní pohled.

Základními stavebními prvky experimentální komory jsou dvě oblasti s rozdílnými tlaky:

- První simuluje diferenciálně čerpanou komoru v mikroskopu
- Druhá simuluje komoru vzorku

Tyto komory odděluje díl s clonou, který je výměnný pro možnost experimentálně vyhodnocovat různé průměry a tvary dýzy včetně vložených usměrňovačů proudění (viz Obrázek 7.10).

Nad clonou je umístěno posuvné upínací zařízení, které umožňuje uchytit a posouvat:

- Sondu celkového a statického tlaku – pro měření rychlosti Pitotovou trubicí snímáním celkového a statického tlaku
- Snímač teploty pro snímání teploty v nadzvukovém proudu

Dále komora disponuje možností upnout vzorek materiálu zahřátý na zvolenou teplotu a snímat čas chlazení pro stanovení tepelné vodivosti plynu v nízkém tlaku.

Komora je dále opatřena dvěma průzory, které umožní opticky zaznamenat rázové vlny pomocí Schlierenovy optické metody [45], případně umístění termokamery.

7.5 Shrnutí

Poslední část této práce byla zaměřena na studii numerické modelovací techniky pro aplikaci v elektronové mikroskopii. Bylo diskutováno použití CFD metody využívající deterministickou formulaci mechaniky kontinua. Byly položeny teoretické předpoklady použití této metody a na modelu diferenciálně čerpané komory byla ověřena správnost těchto předpokladů. Výsledky byly porovnány se stejným modelem, který byl řešen stochastickou formulací mechaniky kontinua. Jako referenční byla použita studie [43].

Výstupem této části práce je návrh experimentální komory, která umožní zmapovat proudění a tepelné podmínky plynu na pomezí kontinua.

Zmapování tlakových poměrů v komoře je nezbytně nutné pro konečný návrh konstrukčních částí elektronového mikroskopu, jako jsou zejména tlak-omezující clonky, jejich umístění a tvary dýz uvnitř těchto clon.

Zmapování teplotních podmínek je důležité z důvodu, že v environmentálním mikroskopu jsou sledovány vlhké vzorky a tedy sdílení tepla je klíčovou oblastí pro zajištění správného temperování komory při pozorování vzorků v nízkých tlacích.

Výsledky získané z těchto experimentů budou použity pro verifikaci numerického modelu.

Dalším plánovaným krokem, je propojení modifikovaného EHD modelu (viz kapitola 6) s prouděním plynu v mikroskopu. Měl by tak vzniknout komplexní, sdružený model, který bude schopen na jedné straně zachytit proudové pole plynu a na straně druhé průchod primárního svazku diferenciální komorou a jeho ovlivnění rázovými vlnami, které vznikají neřízenou expanzí plynu za první clonou.

8 Závěr

Předkládaná habilitační práce se věnuje numerickému modelování (ne)konvenčních elektrotechnologických úloh.

Konvenčními úlohami, jsou myšleny úlohy, se kterými je možné se na poli elektrotechnologie běžně setkat. Nekonvenčním, je v tomto případě myšlen samotný postup tvorby globálního modelu, který nezahrnuje konvenčně dané postupy, ale vyžaduje zásadní zásah uživatele v podobě definování vlastních uživatelských funkcí a jejich implementaci do výpočetního programu.

Pro účely této práce byly vybrány následující úlohy:

- Modelování elektrochemických dějů na úrovni elektrického článku.
- Tvorba modelu proudění nabitých částic v hmotovém spektrometru.
- Řešení úlohy proudění plynu v diferenciálně čerpané komoře elektronového mikroskopu.

Prezentované modely vyžadovaly složité definice uživatelských funkcí, modifikace transportní rovnice, programování v jazyce Visual Studio a mezikroky, které běžný výpočtář v praxi nedělá.

To je také jeden z důvodů, proč si současné simulační programy s takto zadanými úlohami nedokáží poradit a řeší prezentované modely velice povrchně a stroze. Na druhou stranu je však pochopitelné, že žádný program není nikdy naprogramován tak, aby pokryl všechny uživatelské potřeby. Proto je nezbytně nutné, aby námi vybraný program disponoval možnostmi uživatelského zásahu.

V našem případě, byl z hlediska zaměření prezentovaných úloh a jejich řešení, vybrán fluidní řešič – ANSYS FLUENT.

Cílem práce bylo vytvořit a implementovat vlastní modely, které by rozšiřovali výpočetní možnosti programu FLUENT pro použití v úzce specializovaných elektrotechnologických aplikacích jako je elektrochemie a proudění nabitých částic. V případě diferenciálně čerpané komory elektronového mikroskopu bylo nutné ověřit, že „klasický“ deterministický přístup k řešení, je vyhovující.

Úvodní kapitoly této práce jsou zaměřeny na stručný popis toho, co můžeme chápat pod pojmem numerické modelování a jeho základní rozčlenění. Součástí je i praktický příklad, na které je názorně vidět postup při analytickém řešení úlohy a jeho porovnání s řešením numerickým.

Následující kapitola je věnována základnímu popisu programu FLUENT a zejména pak možnosti tvorby vlastních funkcí – UDF a modifikace transportní rovnice – UDS. Tato část je důležitá z důvodu její následné aplikace při řešení prezentovaných úloh.

Vlastní vědecká část práce se pak věnuje řešení úloh, které byly výše jmenovány. Jedná se o úzce specializované nelineární úlohy s rozloženými parametry, které se vyznačují značným stupněm složitosti. Každá z úloh je začleněna do vlastní kapitoly, která má samostatnou teoretickou základnu, je prezentováno řešení dané problematiky a numerický model, na kterém je ověřena funkčnost.

Výsledky, které přináší stěžejní kapitoly 5, 6 a 7 jsou nové a ve vědeckém prostředí nachází své uplatnění v oblasti primárního výzkumu. Příkladem může být experimentování s novými materiály pro elektrody a elektrolyty v elektrochemii, kdy jsme schopni modelovat elektrický článek na úrovni elektrochemické reakce a získat tak například koncentrační profil v článku, průběh nabíjecí a vybíjecí křivky doprovázený teplotním polem nebo chování článku při cyklické voltametii.

Další využití prezentovaných modelů můžeme nalézt při konstrukci elektronového mikroskopu, kdy doplněním o proudění nabitých částic a použitím modelu pro výpočty diferenciálně čerpaných komor, získáme komplexní globální model, který bude sloužit pro optimalizaci tvarů dílčích částí mikroskopu (například tvar clonek). Mimo jiné prezentovaný návrh experimentální komory, který byl podroben simulaci, přinese výsledky, které zatím v praxi nejsou experimentálně ověřeny.

Základy, na kterých tyto stěžejní kapitoly staví, byly průběžně publikovány v uznávaných vědeckých časopisech.

Závěrem lze říci, že cokoliv, co jsme schopni matematicky popsat, je možné zároveň simulovat. Procesem popsání je myšleno rozložení komplexního jevu na jeho elementární prvky (podstaty), kterým můžeme přiřadit určité hodnoty a pravidla, podle kterých se tyto prvky navzájem řídí.

Je nutné však počítat s tím, že model (simulovaná realita) je jen ideálním obrazem skutečnosti, a nese sebou určitá zjednodušení a zanedbání. Obecně je pojem modelování naprosto přirozenou metodou práce, ve vědeckém zkoumání však není hlavním cílem, ale prostředkem k dosažení určitého stupně poznání. Zároveň však není jediným prostředkem, ale zpravidla doplňuje další formy poznání jako je teorie a experiment.

Síla numerického modelu je v možnosti nahradit zkoumaný systém jeho vlastním modelem. V praxi to znamená významné snížení nákladů na vývoj prototypů nebo realizaci experimentů, které by byly finančně náročné nebo by byly jen velice obtížně realizovatelné.

Model je zpravidla sestaven na základě nashromážděných informací a měl by ověřit správnost známých faktů, provádět předpovědi chování daného systému při změně určitého parametru (citlivostní a optimalizační analýzy) a měl by umožnit verifikaci těchto předpovědí.

Bibliografie

- [1] MADENCI, Erdogan a Ibrahim GUVEN. *The finite element method and applications in engineering using ANSYS*. New York: Springer, 2006. ISBN 978-038-7282-893.
- [2] *Low-Frequency Electromagnetic Analysis Guide*. Canonsburg, PA 15317: ANSYS, Inc., 2019, 324 s.
- [3] MAGA, Dušan a René HARTÁNSKÝ. *Numerická řešení*. 1. Brno: Univerzita obrany, 2006, 174 s. ISBN 80-7231-130-1.
- [4] MAJIC, Matt. A surface integral approach to Poisson's equation and analytic expressions for the gravitational field of toroidal mass distributions. *Applied Numerical Mathematics*. 2019. DOI: 10.1016/j.apnum.2019.08.013. ISSN 01689274. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0168927419302156>
- [5] *Maxwell 2D - user's guide*. Canonsburg, PA 15317: ANSYS Inc., 2018, 628 s.
- [6] *Coupled-Field Analysis Guide*. Canonsburg, PA 15317: ANSYS, Inc., 2019, 310 s.
- [7] GABLECH, Imrich, Jan PEKÁREK, Jaroslav KLEMPA, Petr VYROUBAL, Vojtěch SVATOŠ a and NEUŽIL. A New Method for 2D Materials Properties Modulation by Controlled Induced Mechanical Strain. *Proceedings*. 2018, **2**(13), 5. DOI: 10.3390/proceedings2131513. ISSN 2504-3900. Dostupné také z: <http://www.mdpi.com/2504-3900/2/13/1513>
- [8] *ANSYS Fluent Customization Manual*. Canonsburg, PA 15317: ANSYS, Inc., 2019, 718 s.
- [9] ZHANG, Christophe. *Finite-time internal stabilization of a linear 1-D transport equation*. 2019, **133**. DOI: 10.1016/j.sysconle.2019.104529. ISSN 01676911. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167691119301392>
- [10] SMITH, G. *Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods*. 3rd ed. New York: Oxford University Press, 1985. ISBN 01-985-9641-3.
- [11] VYROUBAL, Petr a Tomáš KAZDA. Numerical methods in advanced power sources. *Journal of Energy Storage*. 2017, **14**, 399-404. DOI: 10.1016/j.est.2017.03.020. ISSN 2352152X. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2352152X17300324>

-
- [12] VYROUBAL, Petr a Tomáš KAZDA. Determining the Parameters of the Numerical Model of Lithium Ion Battery Using EIS. *ECS Transactions*. 2017, **81**(1), 23-31. DOI: 10.1149/08101.0023ecst. ISSN 1938-6737. Dostupné také z: <http://ecst.ecsdl.org/lookup/doi/10.1149/08101.0023ecst>
- [13] VYROUBAL, Petr a Tomáš KAZDA. Equivalent circuit model parameters extraction for lithium ion batteries using electrochemical impedance spectroscopy. *Journal of Energy Storage*. 2018, **15**, 23-31. DOI: 10.1016/j.est.2017.10.019. ISSN 2352152X. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2352152X17303493>
- [14] VYROUBAL, Petr a Tomáš KAZDA. Finite element model of nail penetration into lithium ion battery. *Journal of Energy Storage*. 2018, **20**, 451-458. DOI: 10.1016/j.est.2018.10.008. ISSN 2352152X. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2352152X18304298>
- [15] KAZDA, T., J. VONDRÁK, V. DI NOTO, A. STRAKOVÁ FEDORKOVÁ, M. SEDLAŘÍKOVÁ, P. ČUDEK a P. VYROUBAL. The influence of used precursors on the properties of high-voltage cathode materials. *Journal of Solid State Electrochemistry*. 2015, **19**(3), 647-653. DOI: 10.1007/s10008-014-2633-6. ISSN 1432-8488. Dostupné také z: <http://link.springer.com/10.1007/s10008-014-2633-6>
- [16] VYROUBAL, Petr a Tomáš KAZDA. Electric Hybrid Vehicle – Coupled Field Model of Motor Vibration. *ECS Transactions*. 2017, **81**(1), 241-247. DOI: 10.1149/08101.0241ecst. ISSN 1938-6737. Dostupné také z: <http://ecst.ecsdl.org/lookup/doi/10.1149/08101.0241ecst>
- [17] HøjGAARD OLESEN, Laurits, Martin BAZANT a Henrik BRUUS. Strongly nonlinear dynamics of electrolytes in large ac voltages. *Physical Review E*. 2010, **82**(1). DOI: 10.1103/PhysRevE.82.011501. ISSN 1539-3755. Dostupné také z: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.82.011501>
- [18] DAROWICKI, K. Corrosion rate measurements by non-linear electrochemical impedance spectroscopy. *Corrosion Science*. 1995, **37**(6), 913-925. DOI: 10.1016/0010-938X(95)00004-4. ISSN 0010938X. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0010938X95000044>
- [19] KARIMI-SIBAKI, E., A. KHARICHA, M. WU, A. LUDWIG a J. BOHACEK. Contribution of an Electro-Vortex Flow to Primary, Secondary, and Tertiary Electric Current Distribution in an Electrolyte. *Journal of The Electrochemical Society*. 2018, **165**(11), 604-615. DOI: 10.1149/2.1201811jes. ISSN 0013-4651. Dostupné také z: <http://jes.ecsdl.org/lookup/doi/10.1149/2.1201811jes>
- [20] KARIMI-SIBAKI, E., A. KHARICHA, M. WU, A. LUDWIG a J. BOHACEK. Confrontation of the Ohmic approach with the ionic transport approach for modeling the electrical behavior of an electrolyte. *Ionics*. 2018, **24**(7), 2157-2165.
-

DOI: 10.1007/s11581-018-2460-3. ISSN 0947-7047. Dostupné také z:
<http://link.springer.com/10.1007/s11581-018-2460-3>

- [21] BARBERIS, P., M. SKOCIC, D. KACZOROWSKI, D. PERCHE, Y. WOUTERS a K. NOWOTKA. Shadow corrosion: Experiments and modeling. *Journal of Nuclear Materials*. 2019, **523**, 310-319. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2019.06.001. ISSN 00223115. Dostupné také z:
<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022311519302715>
- [22] VYROUBAL, Petr, Tomáš KAZDA, Jiří MAXA, Jiří VONDRÁK, Marie SEDLAŘÍKOVÁ, Jiří TICHÝ a Radoslav CIPÍN. 3D modelling and study of electrochemical characteristics and thermal stability of commercial accumulator by simulation methods. *International Journal of Electrochemical Science*. Electrochemical Science Group, 2016, **11**(3), 1938-1950. ISSN 14523981.
- [23] VYROUBAL, Petr, Tomáš KAZDA a Martin MAČÁK. Finite Methods for Lithium Ion Battery Simulation. *ECS Transactions*. 2018, **87**(1), 389-395. DOI: 10.1149/08701.0389ecst. ISSN 1938-6737. Dostupné také z:
<http://ecst.ecsdl.org/lookup/doi/10.1149/08701.0389ecst>
- [24] CLIMENT, V. a J.M. FELIU. Cyclic Voltammetry. *Encyclopedia of Interfacial Chemistry*. Elsevier, 2018, , 48-74. DOI: 10.1016/B978-0-12-409547-2.10764-4. ISBN 9780128098943. Dostupné také z:
<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780124095472107644>
- [25] MAYUR, Manik, Steven DECALUWE, Benjamin KEE a Wolfgang BESSLER. Modeling and simulation of the thermodynamics of lithium-ion battery intercalation materials in an open-source software. *Electrochimica Acta*. 2019. DOI: 10.1016/j.electacta.2019.134797. ISSN 00134686. Dostupné také z:
<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0013468619316688>
- [26] DRÁBEK, Pavel a Gabriela HOLUBOVÁ. *Parciální diferenciální rovnice: úvod do klasické teorie*. Plzeň: Západočeská univerzita, 2001. ISBN 80-708-2766-1.
- [27] PÉREZ-BROKATE, Cristian, Dung DI CAPRIO, Éric MAHÉ, Damien FÉRON a Jacques DE LAMARE. Cyclic voltammetry simulations with cellular automata. *Journal of Computational Science*. 2015, **11**, 269-278. DOI: 10.1016/j.jocs.2015.08.005. ISSN 18777503. Dostupné také z:
<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1877750315300107>
- [28] PALAGONIA, Maria, Collins ERINMWINGBOVO, Doriano BROGIOLI a Fabio LA MANTIA. Comparison between cyclic voltammetry and differential charge plots from galvanostatic cycling. *Journal of Electroanalytical Chemistry*. 2019, **847**. DOI: 10.1016/j.jelechem.2019.05.052. ISSN 15726657. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1572665719304072>
- [29] FOGERTY, Erica, Baowei LIU, Adam FRANK, Jonathan CARROLL-NELLENBACK a Sergey LEBEDEV. Hydrodynamic and magnetohydrodynamic

- simulations of wire turbulence. *High Energy Density Physics*. 2019, **33**. DOI: 10.1016/j.hedp.2019.100699. ISSN 15741818. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1574181819300229>
- [30] STRATTON, Julius. *Electromagnetic theory*. Hoboken: John Wiley and Sons, 2007, xxiii, 615 s. ISBN 04-701-3153-5.
- [31] WOODS, M., W. SAILOR a M. HOLMES. Numerical solution of the electron transport equation in the upper atmosphere. *Journal of Computational Physics*. 2019, **376**, 129-144. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.09.028. ISSN 00219991. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999118306302>
- [32] *ANSYS Fluent Theory Guide*. Canonsburg, PA 15317: ANSYS, Inc., 2019, 964 s.
- [33] VYROUBAL, , MAXA, KAZDA a MAČÁK. Finite Element Approach of Interior Permanent Magnet Motor Acoustics Noise. *Advances in Military Technology*. 2018, **13**(2). DOI: 10.3849/aimt.01195. ISSN 18022308. Dostupné také z: <https://apl.unob.cz/dam/957>
- [34] HLAVATA, , MAXA, BILEK, VYROUBAL a BAYER. Influence of Critical Flow in the Differentially Pumped Chamber AQUASEM. *Advances in Military Technology*. 2017, **12**(2). DOI: 10.3849/aimt.01201. ISSN 18022308. Dostupné také z: <https://apl.unob.cz/dam/119>
- [35] BILEK, M., P. VYROUBAL a P. HLAVATA. Analysis of the Gas Flow in the Specimen Chamber of the Environmental Scanning Electron Microscope. *ECS Transactions*. 2016, **74**(1), 267-273. DOI: 10.1149/07401.0267ecst. ISSN 1938-6737. Dostupné také z: <http://ecst.ecsdl.org/cgi/doi/10.1149/07401.0267ecst>
- [36] BAYER, Robert a Petr VYROUBAL. Using Optical Methods to Image Shockwaves in Low-Pressure Areas in Order to Increase Accuracy of Simulations of Gas Flows within Low-Pressure Areas. *ECS Transactions*. 2017, **81**(1), 305-310. DOI: 10.1149/08101.0305ecst. ISSN 1938-6737. Dostupné také z: <http://ecst.ecsdl.org/lookup/doi/10.1149/08101.0305ecst>
- [37] AVGERINOS, Stavros, Florian BERNARD, Angelo IOLLO a Giovanni RUSSO. Linearly implicit all Mach number shock capturing schemes for the Euler equations. *Journal of Computational Physics*. 2019, **393**, 278-312. DOI: 10.1016/j.jcp.2019.04.020. ISSN 00219991. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999119302530>
- [38] ZHANG, Chi, Peng WEN, Zhaohui YAO, Yueming YUAN a Xuejun FAN. Visualization of flow separation inside cut kerf during laser cutting of thick sections. *Journal of Laser Applications*. 2016, **28**(2). DOI: 10.2351/1.4943997. ISSN 1042-346X. Dostupné také z: <http://lia.scitation.org/doi/10.2351/1.4943997>
- [39] VYROUBAL, Petr a Jiří MAXA. The Aperture with Laval Nozzle in Secondary Electron Detector for Environmental Scanning Electron Microscopy. *Computer*

Software and Hardware Applications. 1. Vsetín: Silhavy sro (Scientific Press), 2012, s. 87-95. 1. ISBN 978-80-904741-2-3.

- [40] ZHANG, Lixin a Quanlin DONG. Analytical analysis and simulation on fringe field effect of deflector plates applied in ultrafast electron microscopy. *Micron*. 2019. DOI: 10.1016/j.micron.2019.102751. ISSN 09684328. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0968432819302136>
- [41] DŘÍMAL, Jiří a David TRUNEC. *Úvod do metody Monte-Carlo*. Brno: Masarykova univerzita, 1989. ISBN 80-210-0022-8.
- [42] URUBA, Václav. *Turbulence*. 2., přeprac. vyd. V Praze: České vysoké učení technické, 2014. ISBN 978-80-0105-600-4.
- [43] DANILATOS, Gerasimos. Velocity and ejector-jet assisted differential pumping: Novel design stages for environmental SEM. *Micron*. 2012, **43**(5), 600-611. DOI: 10.1016/j.micron.2011.10.023. ISSN 09684328. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0968432811002083>
- [44] THONGHIN, Nopnithi, Vasileios KARGAS, Jack CLEWS a Robert FORD. Cryo-electron microscopy of membrane proteins. *Methods*. 2018, **147**, 176-186. DOI: 10.1016/j.ymeth.2018.04.018. ISSN 10462023. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1046202317303742>
- [45] MARIANI, R., B. ZANG, H.D. LIM, U.S. VEVEK, T.H. NEW a Y.D. CUI. A comparative study on the use of calibrated and rainbow schlieren techniques in axisymmetric supersonic jets. *Flow Measurement and Instrumentation*. 2019, **66**, 218-228. DOI: 10.1016/j.flowmeasinst.2019.01.007. ISSN 09555986. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0955598618301559>

Seznam symbolů a veličin

ρ_0	Nábojová hustota	C/m ³
$\epsilon, \epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z$	Permitivita	F/m
ϵ_0	Permitivita vakua	F/m
ϵ_r	Relativní permitivita	-
η	Aktivační předpětí	V
x, y, z	Prostorové souřadnice	m
α	Koeficient Tafelova sklonu	-
M_k^{zk}	Obecná látka	-
$v'_{k,r}, v''_{k,r}$	Stechiometrické koeficienty	-
e^-	Elementární náboj elektronu	C
z_k	Mocenství k-té látky	-
c_i	Molární koncentrace látky	mol/m ³
m_i	Pohyblivost iontů	m ² /(V·s)
N_i	Celkový počet látek	-
\mathbf{v}	Vektor rychlosti	m/s
t	Čas	s
F	Faradayova konstanta	C/mol
φ	Elektrický potenciál	V
k	Součinitel tepelné vodivosti	W/(m·K)
i	Elektrický proud	A
σ	Měrná elektrická vodivost	S/m
ν	Kinematická viskozita	m ² /s
R	Plynová konstanta	J/(K·mol)
Y_i	Hmotnostní zlomek	-
\mathbf{J}	Vektor proudové hustoty	A/m ²
T	Termodynamická teplota	K
k_p	Propustnost porézního média	-
p	Tlak	Pa
η	Dynamická viskozita	Pa·s
D	Difuzní koeficient	m ² /s
Φ	Všeobecná skalární veličina	-
\mathbf{p}	Vektor hybnosti	kg·(m/s)
l	Délka	m
q	Elektrický náboj	C
\mathbf{E}	Vektor intenzity elektrického pole	V/m
\mathbf{B}	Vektor magnetické indukce	T
c	Rychlost světla	m/s

m	Hmotnost látky	kg
R_k	Poloměr	m
\mathbf{F}_{mag}	Vektor magnetické síly	N
ω_k	Úhlová frekvence	rad/s
\mathbf{A}	Magnetický vektorový potenciál	Wb/m
E_{kin}	Kinetická energie systému	J
ρ	Hustota materiálu	kg/m ³
k	Boltzmannova konstanta	J/K
Q_i	Obecný zdroj	-
U	Elektrické napětí	V
\mathbf{a}	Vektor zrychlení	m/s ²
A	Průtočný průřez	m ²
M_a	Machovo číslo	-
f	Obecná funkce	-
$E(X)$	Střední hodnota náhodné veličiny X	-
\mathbf{F}	Vektor objemových sil	N
$\bar{\lambda}$	Střední volná dráha	m
π	Ludolfovo číslo	-
K_n	Knudsenovo číslo	-
n	Počet atomů nebo molekul ve hmotě	-
C_1, C_2	Integrační konstanty	-
N	Celkový počet látek	-
$\mathbf{r}(t)$	Polohový vektor	m
μ, μ_x, μ_y, μ_z	permeabilita	H/m
μ_0	Permeabilita vakua	H/m
μ_r	Relativní permeabilita	-
\mathbf{b}	Vektor indukovaného magnetického pole	T
d	Průměr	m

Seznam obrázků

Obrázek 2.1: Postup při přímé a nepřímé identifikaci problému.....	13
Obrázek 2.2: Ukázka propojení finitního a obvodového modelu – analýza přechodového děje v kondenzátoru se ztrátovým dielektrikem [2].....	15
Obrázek 2.3: Grafická formulace úlohy.	19
Obrázek 2.4: Analytické a numerické řešení Poissonovy rovnice.....	20
Obrázek 2.5: Mapované výsledky potenciálu a intenzity elektrického pole na řešené geometrii.	21
Obrázek 2.6: Schéma postupu při sekvenční analýze.....	22
Obrázek 2.7: Schéma postupu při přímé analýze.	22
Obrázek 4.1: Principiální schéma FLUENTu a místa, kde může uživatel zasáhnout. ...	25
Obrázek 4.2: 2D ilustrace parabolického profilu v přímé trubici.	28
Obrázek 4.3: Model parabolického profilu po aplikaci makra ve FLUENTu.	29
Obrázek 5.1: Všeobecný příklad CV obecné jedno-elektrodové, reverzibilní reakce a její závislost na jemnosti výpočtové sítě.....	42
Obrázek 5.2: Porovnání výsledků z nově implementovaného modelu do FLUENTu a výsledků ze softwaru DigiSim.	43
Obrázek 6.1: Vazby mezi jednotlivými odvětvími, které pokrývá elektro/magneto-hydrodynamika.	45
Obrázek 6.2: Principiální uspořádání hmotnostního spektrometru.	51
Obrázek 6.3: Rozložení elektrického potenciálu a dráhy částic.	52
Obrázek 6.4: Rozložení rychlosti iontů mědi.	52
Obrázek 6.5: Zobrazení dráhy iontů hliníku.....	54
Obrázek 6.6: Zobrazení dráhy iontů zlata.....	54
Obrázek 6.7: Zobrazení dráhy iontů mědi.	55
Obrázek 6.8: Zobrazení dráhy jednotlivých typů iontů bez zapnutého rychlostního filtru, hliník (červeně), zlato (modře) a měď (černě).....	55
Obrázek 6.9: Zobrazení dráhy iontů hliníku (červeně), zlata (modře) a mědi (černě). ..	56
Obrázek 7.1: Principiální rozdíl mezi konstrukcí a) REM a b) EREM.	59
Obrázek 7.2: Schlierenovy obrázky proudícího toku z osově symetrické kuželové trysky při stoupajícím tlaku a) 4 bary b) 7 barů c) 10 barů [38].....	60
Obrázek 7.3: Rozdělení proudění podle Knudsenova čísla.	64
Obrázek 7.4: Axiálně symetrický 2D model profilu diferenciální komory.....	65
Obrázek 7.5: Grafické porovnání výsledků metody DSMC (a) a deterministické CFD (b).....	65
Obrázek 7.6: Průběh rychlosti proudění na dráze primární elektronového svazku.	66
Obrázek 7.7: Průběh Knudsenova čísla ve směru od clony 1 do konce oblasti s nadzvukovým prouděním.	67
Obrázek 7.8: Průběh teploty v dráze primární elektronového svazku.	68

Obrázek 7.9: Grafické porovnání metody DSMC (a) a CFD (b) varianta s usměřovačem rázových vln.	69
Obrázek 7.10: Grafické porovnání metody DSMC (a) a CFD (b) varianta s překážkou mezi clonami.	69
Obrázek 7.11: Umístění clonek a okrajových podmínek v EREM mikroskopu AQUASEM II.	70
Obrázek 7.12: Model experimentální měřicí komory a) celý model b) řez modelem. ...	71
Obrázek 7.13: Model experimentální měřicí komory – detailní pohled.	72

Seznam tabulek

Tabulka 2.1: Analogie některých typů fyzikálních polí.	16
Tabulka 4.1: Rozdíly mezi interpretovanými a kompilovanými funkcemi.	27
Tabulka 6.1: Porovnání vypočítané a simulované hodnoty poloměru jednotlivých iontů.	53
Tabulka 6.2: Porovnání vypočítané a simulované hodnoty poloměru jednotlivých iontů.	56
Tabulka 7.1: Shrnutí současných používaných metod pro výpočet proudění v elektronových mikroskopech.	63
Tabulka 7.2: Porovnání vypočítané a simulované hodnoty tlaků na hrdle čerpání.	70